

CONTRACTS DOCTORAUX 2025

Titre du projet de thèse : Étude théorique de la photodésorption de glaces mixtes d'intérêt interstellaire

Directeurs de thèse : M. Monnerville (PhLAM) / A. Rivero-Santamaria (PhLAM)

Résumé du projet de thèse (en 20 lignes maximum) :

L'abondance anormale de la phase gazeuse dans les régions froides et denses du milieu interstellaire peut être expliquée par le processus de photodésorption des glaces interstellaires dû aux rayons VUV. En effet, lors de ce processus, un photon est absorbé par une molécule de la glace, puis par conversion interne, son énergie électronique est redistribuée dans la glace sous forme d'énergie interne et translationnelle. Si le transfert d'énergie se propage jusqu'à la surface, il peut alors conduire à la désorption d'une molécule qui va alors enrichir la phase gazeuse. Afin de consolider cette hypothèse, une collaboration entre des groupes de recherche de l'Université de Lille (PCMT/PhLAM) et de l'Université de la Sorbonne (LERMA), a permis, en utilisant une approche expérimentale et théorique combinée basée sur des expériences laser VUV et des simulations de Dynamique Moléculaire *Ab Initio*, de réaliser une avancée significative en identifiant et en caractérisant le mécanisme mis en jeu lors de la photodésorption de glaces pures de monoxyde de carbone (CO)[1, 2]. L'accord remarquable obtenu entre la théorie et l'expérience [1, 2] permet d'affirmer que ce résultat est une première étape vers une meilleure compréhension de l'impact de la photochimie des glaces moléculaires sur la physicochimie du milieu interstellaire.

Nous envisageons dans le travail de thèse proposé ici, d'aller plus loin et de nous intéresser à la simulation de la photodésorption de glaces mixtes d'intérêt interstellaire comme des glaces CO/N₂ ou encore CO/NO. Nous proposons de combiner les avantages de la Dynamique Moléculaire *Ab Initio* (AIMD) [3,4] avec la puissance et la flexibilité des surfaces d'énergie potentielle de haute dimension (NN-SEP) [5-8], obtenues à partir de méthodes d'intelligence artificielle (réseaux de neurones atomiques), afin de simuler le processus de photodésorption. L'objectif est de déterminer les probabilités de désorption ainsi que les distributions d'énergie des molécules désorbées. Les résultats de cette étude théorique seront directement comparés aux expériences, réalisées par l'équipe du LERMA de la Sorbonne.

Références

- [1] S. Del Fré, A. Rivero Santamaría, D. Duflot, R. Basalgète, G. Féraud, M. Bertin, J.-H. Fillion, and M. Monnerville : *Physical Review Letters*, 131, 238001, (2023.) Sélectionnée comme « *Editor suggestion* » et « *Phycis Magazine* » de PRL.
- [2] Antoine B. Hacquard, Romain Basalgète, Samuel Del Fré, Jozef Rakovský, Alejandro Rivero Santamaría, Ferdinand Benoit, Xavier Michaut, Géraldine Féraud, Mathieu Bertin, Maurice Monnerville, Jean-Hugues Fillion, *J. Chem. Phys.* 161, 184306, (2024)
- [3] G. Kresse and J. Furthmüller, *Comput. Mater. Sci.* 6, 15 (1996).
- [4] G. Kresse and J. Furthmüller, *Physical Review B* 54, 11169 (1996)
- [5] J. Behler and M. Parrinello, *Physical Review Letters*, 98, 146401 (2007).
- [6] A. M. Miksch, T. Morawietz, J. Kästner, A. Urban and N. Artrith : *Mach. Learn. : Sci. Technol.*, 2, 031001, (2021).
- [7] A. Rivero-Santamaría, M. Ramos, M. Alducin, H. F. Busnengo, R. Díez Muiño, and J. Iñaki Juaristi. *J. Phys. Chem. A*, 125, 12, 2588–2600 (2021).
- [8] A. M. Tokita and J. Behler, *J. Chem. Phys.*, 159, 121501 (2023)

Date de recrutement envisagée : 01/09/2025

Contact (adresse e-mail) : maurice.monnerville@univ-lille.fr

Remarques/commentaires supplémentaires : Étroite collaboration avec une équipe d'expérimentateurs de la Sorbonne (MONARIS)