

CONTRACTS DOCTORAUX 2025

Titre du projet de thèse : Simulations TDDFT de processus multi-photon pour systèmes d'éléments lourds

Directeurs de thèse : A. Severo Pereira Gomes (PhLAM) / V. Vallet (PhLAM)

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

L'interaction entre la lumière et la matière est la base des méthodes de spectroscopie, qui sont des outils précieux pour comprendre une gamme de processus physico-chimiques au niveau moléculaire. Alors que les techniques sondant l'interaction d'un photon unique (1P) avec des molécules pour différents régimes énergétiques (par exemple les longueurs d'onde optiques pour les processus de valence, ou les rayons X pour les processus de cœur) correspondent à la majeure partie des applications, l'interaction avec deux ou plusieurs photons (nP) peut être particulièrement utile en raison de leurs règles de sélection différentes par rapport à 1P. Dans le cas des spectroscopies de rayons X, les processus nP sont devenus plus accessibles avec l'avènement de nouvelles sources de lumière telles que le rayonnement synchrotron ou les lasers à électrons libres à rayons X. En raison de la complexité des processus physiques qui se déroulent en général et en particulier des spectroscopies nap, les modèles théoriques sont indispensables pour aider les expérimentateurs à interpréter leurs résultats. Dans le cas des systèmes d'éléments lourds, il devient nécessaire de prendre en compte les effets relativistes, en plus de décrire la corrélation électronique. Cependant, contrairement à ce qui se passe pour les éléments légers, les techniques théoriques permettant de décrire les processus nP, y compris les effets relativistes pour les grands systèmes qui intéressent généralement les expérimentateurs, sont soit inexistantes, soit limitées dans leur portée, ou encore, lorsqu'elles sont disponibles, ont à peine été appliquées. Le but de cette thèse de doctorat est donc de combler cette double lacune, en explorant d'abord l'application des approches existantes de l'implémentation de la DFT dépendante du temps (TDDFT) dans le code DIRAC aux systèmes d'actinides et de blocs 6p dans la simulation des processus 2P, et ensuite en l'étendant pour décrire les processus 2P et 3P généraux.

Date de recrutement envisagée : 01/09/2025

Contact (adresse e-mail) : andre.gomes@univ-lille.fr

Remarques/commentaires supplémentaires :