

CONTRACTS DOCTORAUX 2025

Titre du projet de thèse : Theoretical approaches for the simulation of electronic resonances in molecular systems for heavy elements

Directeurs de thèse : A. Severo Pereira Gomes (PhLAM) / T. Jagau (KU Leuven)

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

Les résonances électroniques sont des états instables par rapport à la perte d'électrons. La compréhension des processus physiques impliquant des résonances est cruciale dans de nombreux domaines scientifiques, tels que la dégradation de l'ADN par les électrons lents, la chimie des plasmas, la spectroscopie à rayons X ultrarapides et la spectroscopie d'ionisation par résonance. En raison de la complexité des processus physiques en jeu, des modèles théoriques précis sont indispensables pour aider à interpréter les expériences. Comme les méthodes classiques de la théorie de la structure électronique ne peuvent pas décrire les résonances en raison du fait que leurs fonctions d'onde divergent dans l'espace, dans les dernières décennies des méthodes basées sur la mécanique quantique non hermitienne ont été développées. Combinées aux méthodes couplé cluster, ces approches ont été utilisées pour modéliser divers types de résonances électroniques tels que les anions temporaires, les états de Rydberg et les états de coeur, ainsi que différentes spectroscopies (Auger, photodétachement, perte d'énergie électronique), mais ne sont actuellement pas applicables aux situations dans lesquelles les effets relativistes sont importants, comme pour les propriétés de valence des molécules contenant des éléments lourds ou pour les spectroscopies de noyau impliquant des éléments au-delà de la deuxième ligne du tableau périodique. L'objectif de ce projet de thèse est donc de combler cette lacune et de combiner la mécanique quantique non-hermitienne et les méthodes électroniques relativistes corrélées, telles que couplé cluster. Ces nouvelles approches théoriques seront utilisées pour simuler les résonances pour les espèces contenant des actinides et des halogènes lourds tels que l'iode, qui sont pertinentes à la fois dans le contexte de la radioprotection, des spectroscopies de rayons X et de la physique chimique atmosphérique.

Date de recrutement envisagée : 01/09/2025

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

Remarques/commentaires supplémentaires :