

## Proposition de stage de Master M2 année 2018-2019

### Impact de l'attachement d'un électron sur un système moléculaire

#### Interaction électron-molécule et réactivité induite

##### Laboratoire : Institut Lumière Matière (UMR5306 CNRS / Univ Lyon 1)

Domaine scientifique de la Doua  
Université Claude Bernard Lyon 1 (Bât. Kastler)  
10 rue Ada Byron  
69622 Villeurbanne Cedex

**Contact** : Franck Rabilloud  
**Mail** : [franck.rabilloud@univ-lyon1.fr](mailto:franck.rabilloud@univ-lyon1.fr)  
**Tel** : 04 72 43 29 31

L'impact d'un électron de faible énergie sur une molécule peut induire des phénomènes physicochimiques variés : dissociation, ionisation, isomérisation, réactivité, etc. La corrélation entre l'électron projectile et les électrons de la molécule cible peut créer des processus d'échange et d'attachement conduisant à la formation d'un ion négatif transitoire. Ce dernier peut ensuite évoluer vers un état dissociatif selon des processus sélectifs. Comprendre l'interaction entre l'électron projectile et la molécule cible est un sujet de recherche fondamentale qui présente aussi des perspectives dans de nombreux domaines applicatifs comme la réactivité chimique, la nanochimie, la nanolithographie, la physique des radiations, etc.

Le projet sera réalisé en collaboration avec une équipe expérimentale de Lyon en charge de monter un dispositif pompe(laser)-sonde(électron) original qui permettra la sélection d'un état électronique initial pour la molécule, et la détection des fragments neutres et chargés en fonction de l'énergie de l'électron incident. Les calculs théoriques menés en partenariat à l'ILM et au Laboratoire de Physique Théorique de Toulouse porteront d'une part sur la dynamique électronique au temps court et d'autre part sur les scénarios possibles de fragmentation, et permettront d'identifier les mécanismes à l'origine des observations expérimentales.

L'objectif du stage est d'interpréter la fragmentation de petites molécules ou agrégats induite par l'attachement d'un électron. L'étudiant calculera l'état électronique fondamental et les états excités de systèmes moléculaires neutres ou chargés, et proposera un scénario pour interpréter ou prédire les résultats expérimentaux. L'étude théorique se fera essentiellement dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT et Time-Dependent DFT).

Ce stage pourra faire l'objet d'une suite en thèse avec un financement de l'Agence Nationale de la Recherche (ANR).