

INTERACTION ÉLECTRON-MOLÉCULE ET RÉACTIVITÉ INDUITE

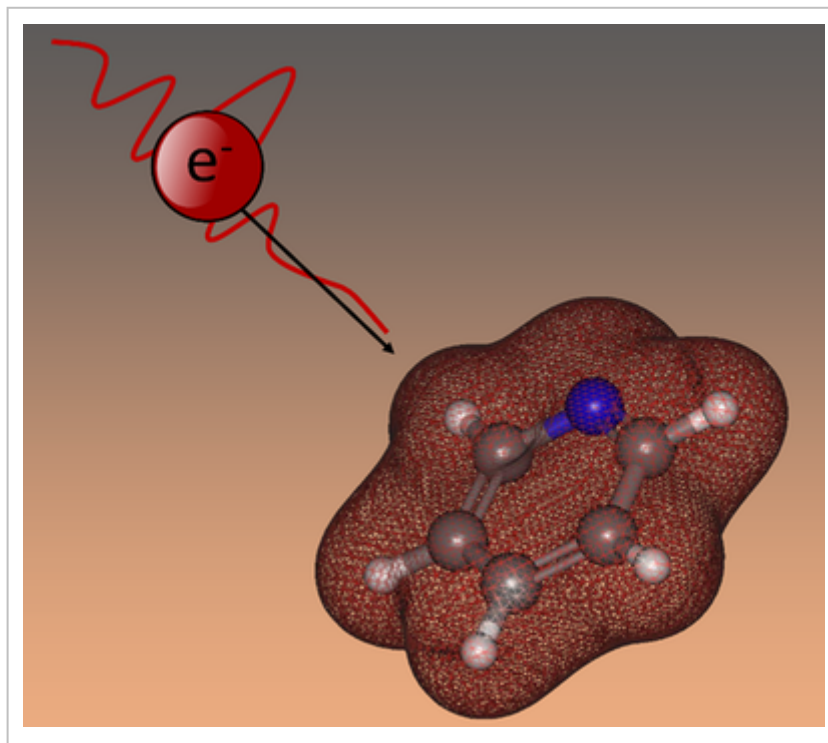
LABORATORY : Institut Lumière Matière
LEVEL : M2
TEAM(S) : THEOCHEM
CONTACT(S) : RABILLOUD Franck
CONTACT(S) DETAILS: franck.rabilloud[at]univ-lyon1.fr / Tel. 0472432931
KEYWORD(S) : physique moléculaire / réaction chimique / modélisation

SCIENTIFIC CONTEXT :

Comprendre l'interaction entre un électron projectile et une 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 physique des radiations, etc.

La collision d'un électron avec une molécule peut induire des phénomènes physicochimiques variés : dissociation, ionisation, isomérisation, réactivité, etc. Nous étudions les processus complexes conduisant à l'attachement de l'électron via la formation d'un anion transitoire, puis l'évolution vers un état

dissociatif selon des processus sélectifs. L'objectif visé est de déclencher des réactions chimiques par irradiation avec des électrons de faible énergie (quelques eV).



MISSIONS :

L'équipe d'accueil vient de développer une nouvelle méthodologie pour calculer les énergies d'attachement d'un électron, qu'il faudra étendre avec le calcul des durées de vie de l'état excité et des sections efficaces. L'étude théorique se fera essentiellement dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (TD)-DFT ou dans le formalisme des fonctions de Green (GW/BSE).

L'étude sera faite dans le cadre de collaborations avec des partenaires lyonnais et toulousains. Un goût pour les simulations et les calculs sur ordinateur, ainsi que des connaissances en physique atomique/moléculaire et physique quantique sont souhaitables.

OUTLOOKS :

Possibility to apply for PhD funding through the PHAST doctoral school.

BIBLIOGRAPHY :

https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03418629/file/manuscript_Methodo_Thiam2021-merge.pdf
<https://sites.google.com/site/franckrabilloud/Home/publications>
<https://sites.google.com/site/franckrabilloud/>