INTERACTION ÉLECTRON - ZWITTERION

LABORATORY : Institut Lumière Matière

LEVEL : M1
TEAM(S) : THEOCHEM

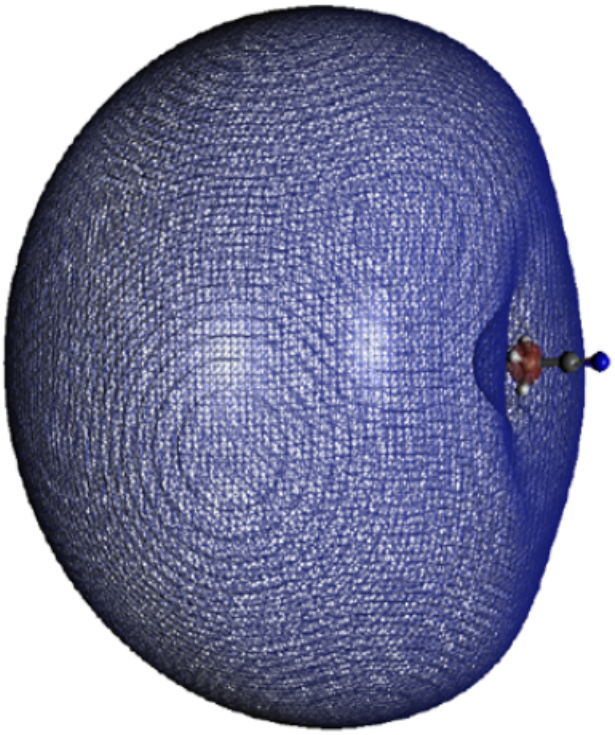
CONTACT(S) : GIACOMO Elisa
RABILLOUD Franck

CONTACT(S) DETAILS: elisa.giacomo[at]univ-lyon1.fr /
franck.rabilloud[at]univ-lyon1.fr / Tel. 0472432931

KEYWORD(S) :

SCIENTIFIC CONTEXT :

Comprendre l'interaction entre un électron projectile de faible énergie (0-10 eV) et une molécule cible est un sujet de recherche fondamentale qui présente aussi des perspectives dans de nombreux domaines applicatifs comme la physique des radiations, la réactivité ou l'astrochimie.



L'attachement d'un électron en excès sur une molécule peut induire des phénomènes variés incluant la fragmentation de la molécule. À ce jour, la description théorique de l'attachement électronique d'une part et de la dynamique de dissociation d'autre part reste un challenge pour les physiciens du fait de la complexité des processus.

Ces dernières années, l'équipe TheoChem a développé des méthodologies de calcul (approches quantiques) qui ont permis de décrire l'attachement d'un électron de faible énergie sur une molécule. L'objet du stage est de tester ces approches sur des zwitterions. Les zwitterions sont des systèmes moléculaires électriquement neutres qui possède toutefois une charge positive et une charge négative sur des sites distincts. Ils ont donc un important moment dipolaire. Un électron pourrait se lier à un zwitterion via des interactions à longue porté de type charge – dipôle, le système formant alors un anion stable, ou métastable, où l'électron excédentaire occupe une orbitale lointaine, très éloignée de la molécule.

MISSIONS :

- étude bibliographie sur le sujet et sur les méthodes de calcul,
- prise en main des programmes de simulation numérique,
- évaluation de la capacité des calculs DFT à décrire un zwitterion,
- calculs des énergies d'attachement d'un électron sur un zwitterion via des processus résonants,
- étude des chemins réactionnels.

Un goût pour les simulations et les calculs sur ordinateur ainsi que des connaissances en physique atomique/ moléculaire et physique quantique sont souhaitables. La connaissance d'un langage de programmation (C++, python, autre) serait un atout.

OUTLOOKS :

Apprentissage de méthodes de calcul pour problème de physique quantique. Calcul sur supercalculateur

BIBLIOGRAPHY :

https://hal.science/hal-03418629v1
https://hal.science/hal-04156373v1

published on 09/10/2026