

PROPOSITION DE PROJET DOCTORAL POUR LA RENTREE 2013

1

Renseignements et résumé du projet

Unité : UMR 7614	Directeur : A. Dubois
Etablissement de tutelle de l'unité : Université Pierre et Marie Curie	

Titre du projet : Etude des processus électroniques induits par impact d'ions sur des molécules tricentriques : développements et application à H₂O.

Mots clefs: modélisation - collision – transfert d'électrons

Directeur de thèse: Alain Dubois (PU)

E-mail : alain.dubois@upmc.fr

Téléphone : 0144276631

Télécopie : 0144276226

3 publications du directeur de thèse en rapport avec le sujet :

A. Dubois, S. Carniato, P.D. Fainstein and A. Dubois, Phys. Rev. A **84**, 012708 (2011).
 N. Sisourat, I. Pilskog and A. Dubois, Phys. Rev. A **84**, 052722 (2011).
 J. Caillat, N. Sisourat, A. Dubois, I. Sundvor, and J. P. Hansen, Phys. Rev. A **73**, 014701 (2006).

Résumé du projet :

La compréhension des processus électroniques ayant lieu au cours de collisions atomiques et moléculaires présente un intérêt déterminant pour la modélisation des nombreux phénomènes observés dans des systèmes complexes tels que les milieux atmosphériques, astrophysiques et biologiques. La modélisation des processus électroniques induits par impact d'ions sur des molécules complexes reste un défi majeur en raison du caractère multicentrique de la cible, du nombre d'électrons impliqués et de la diversité des voies de réaction ouvertes, même pour des cibles moléculaires aussi simples que H₂O.

Le projet de thèse se situe dans ce contexte et porte spécifiquement sur la modélisation des processus ionisants au cours de collisions A^{Z+}-H₂O dans le domaine d'énergie du keV/u. Le projet consistera au développement d'une nouvelle méthodologie non perturbative et l'extension à ce type de cibles de codes informatiques écrits dans le groupe. Les résultats et leurs interprétations devraient représenter des benchmarks pour tester la validité des modèles (monoélectronique, électrons indépendants, quasi-atomique, ...) actuellement utilisés dans la communauté.

Aspect collaboratif ou interdisciplinaire :

Co-encadrant : Jérémie CAILLAT

Des collaborations existent sur ces sujets et les développements méthodologiques : Jan-Petter Hansen (Bergen, Norvège) et Pablo Fainstein (Bariloche, Argentine).