

Proposition de financement doctorale
Paris Science et Lettres
pour la rentrée 2020 - 2021

Titre de la thèse :

Descripteurs basés sur la densité électronique dédiés à la simulation des dynamiques électroniques induites par irradiation en Real Time DFT.

Directrice de thèse : Ilaria CIOFINI

Laboratoire d'accueil : i-CLeHS - FRE 2027

Le but de cette thèse est de développer une approche basée sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité dépendant du temps (TD-DFT) permettant de décrire de manière fiable l'évolution de la densité électronique de systèmes complexes après irradiation en couplant des descripteurs basés sur la densité électronique à des simulations de type Real-Time TD-DFT.

Au niveau des systèmes, nous considérerons des molécules d'intérêt biologique connues pour donner lieu à des états à transfert/séparation de charge dont nous étudierons la dynamique du système électronique à l'état excité c.à.d. l'évolution de la paire électron-trou ou après collisions par des noyaux d'atomes de haute énergie. La thèse comportera une partie de développement et programmation pour permettre l'évaluation des descripteurs à partir de simulations RT-TD-DFT.

Mots clés : dynamique électronique, descripteurs basés sur la densité; développements théoriques, RT-TD-DFT