

# Spécialité de Master « Optique, Matière, Plasmas »

## Proposition de stage de recherche pour l'année 2010-2011 Stage de 4 mois minimum à partir du 1<sup>er</sup> Mars 2011

### Responsable du stage :

Nom : Dubois / Caillat Prénom : Alain / Jérémie  
Tél : 01 44 27 66 31 / 66 05 Fax : 01 44 27 62 26  
Courriel : alain.dubois@upmc.fr / jeremie.caillat@upmc.fr

### Nom du Laboratoire : Laboratoire de Chimie Physique - Matière et Rayonnement

Code d'identification : UMR 7614 Organisme : UPMC, Paris 6 - CNRS  
Site Internet : <http://www.lcpmr.upmc.fr>  
Adresse : 11 rue Pierre et Marie Curie 75005 Paris  
Lieu du stage : LCP-MR, 11 rue Pierre et Marie Curie 75005 Paris

### Titre du stage :

Modélisation de processus mono- et bi-électroniques au cours de collisions atomiques.

Le stage proposé constitue une introduction aux méthodes théoriques utilisées pour l'étude de processus électroniques ayant lieu au cours de collisions atomiques et moléculaires. Tout particulièrement, les approches non perturbatives dépendantes du temps, avec utilisation de bases d'orbitales atomiques et moléculaires, seront examinées et feront l'objet d'applications au travers de calculs numériques. L'accent sera mis sur la description des processus mono- et bi-électroniques (respectivement transfert électronique et transfert excitation) survenant au cours de collisions  $H^+$ -He à des énergies de l'ordre du keV/u. En effet, ce système de collision, relativement simple dans sa structure puisque constitué de deux électrons (sans électrons de cœur qui ne pourraient pas être pris en compte de la modélisation) est l'un des systèmes benchmark pour l'étude des corrélations et des processus mono- et bi-électroniques au cours de collisions pour lesquelles la perturbation liée au projectile est de même importance que l'interaction inter-électronique. Il a fait l'objet de nombreux travaux théoriques et expérimentaux dans les dernières années, cf. par exemple [1-3], sans que ceux-ci parviennent à converger dans l'évaluation des sections efficaces et dans l'interprétation des résultats.

Notre équipe a développé un code informatique pour décrire de tels systèmes de collision dans une large gamme d'énergies d'impact ( $E > 100$  eV/u). Le stage se placera dans ce contexte : les calculs effectués au cours du stage devraient permettre de valider notre approche vis-à-vis de résultats expérimentaux et des prédictions théoriques récentes, ces dernières étant basées sur un traitement approché de la répulsion inter-électronique au cours de la collision. Le stage impliquera le développement et l'utilisation de programmes informatiques originaux, ainsi que l'analyse et l'interprétation des résultats de simulations.

[1] I. Mancev and N. Milojevic, Phys. Rev. A **81**, 022710 (2010).

[2] M. Zapukhlyak and T. Kirchner, Phys. Rev. A **80**, 062705 (2009).

[3] M.S. Schoeffler et al, Phys. Rev. A **79**, 064701 (2009).

**Compétences requises :** mécanique quantique ; attrait pour la programmation et le calcul scientifique

**Type de recherche :** théorie / modélisation

**Financement de thèse envisagé :** oui (UPMC)

Laser et Matière	<input type="checkbox"/>	Physique des Plasmas	<input type="checkbox"/>
Opto-électronique	<input type="checkbox"/>	Physique des Atomes et des Molécules	<input checked="" type="checkbox"/>
Optique et Photonique	<input type="checkbox"/>	Structure et Réactivité Moléculaires	<input checked="" type="checkbox"/>