SORBONNE UNIVERSITÉ

χ Physique
χ Analytique
Paris Centre
ED 388
http://www.ed388.upmc.fr

Proposition de financement doctorale pour la rentrée 2020 - 2021

Titre de la thèse :

Effets quantiques des noyaux pour l'étude de la réactivité ionmolécule par dynamique moléculaire.

Directeur de thèse : Ricardo SPEZIA

Laboratoire d'accueil : LCT – UMR 7616

Le but du projet est d'inclure certains effets quantiques des noyaux dans les dynamiques moléculaires Born-Oppenheimer utilisées pour étudier la réactivité chimique. En particulier, nous envisageons d'implémenter les méthodes Quantum Thermal Bath (QTB) et Ring Polymer Molecular Dynamics (RPMD) dans le code de dynamique réactionnelle Venus et de comprendre leur applicabilité à la réactivité chimique en phase gazeuse. Nous viserons en particulier les phénomènes suivants : (i) fragmentations unimoléculaires avec problèmes de fuite d'énergie de point zéro ; (ii) effet tunnel dans le transfert de proton. Ces simulations pourront modéliser la synthèse de molécules organiques complexes en phase gazeuse induite par laser infra-rouge et à l'interface vide/solide.

Mots clés : Dynamique réactionnelle, dynamique quantique, constant cinétique, réactivité induite par laser IR

Ecole doctorale Chimie Physique & Chimie Analytique de Paris Centre – ED 388
4 place Jussieu - CC 63
Tour 32 – 1ère étage – Couloir 32 – 42 – Pièce 114
75252 Paris Cedex 05 France
Tel : 33 (0)1 44 27 32 07
Courriel : secretariat-ed388@upmc.fr