

Proposition de financement doctorale pour la rentrée 2020 - 2021

Titre de la thèse :

X-ray and Auger spectroscopies in liquids

Directeur de thèse : Stéphane CARNIATO

Laboratoire d'accueil : LCPMR – UMR 7614

Le but de la thèse est d'ouvrir nos champs de recherches sur les spectroscopies X (XAS : X-ray Absorption Spectroscopy, DCH : Double Core-Hole spectroscopy, etc.) et Auger à la phase liquide. A ce jour, nos codes d'interaction de configurations (CI) pour le calcul des énergies et intensités des états (simplement et doublement) excités de cœur et Fano-CI pour le calcul de temps de vies Auger ont été développés pour les systèmes en phase gazeuse. Il faudra adapter nos méthodes et sûrement optimiser nos codes pour aborder le traitement des interactions moléculaires en milieu liquide. Si nécessaire, nous développerons de nouvelles approches théoriques. Avec ces nouveaux outils, nous étudierons en premier lieu des cations métalliques (Na⁺, K⁺, etc.) micro-hydratés qui présentent un grand intérêt en radiochimie et en radiobiologie et qui peuvent être étudiés expérimentalement par des équipes du laboratoire et de SOLEIL. Cette thèse permettra à notre équipe de démarrer un nouvel axe de recherche.

Mots clés : Spectroscopie, modélisation, liquide, solvatation