

Modélisation ab initio de l'absorption à l'état excité

**Poste de doctorant en chimie théorique (36 mois)
A partir d'octobre 2023 - Financement : EUR LUMOMAT**

Localisation

France – Nantes and Rennes*

- CEISAM, Nantes Université (France), Equipe ModES
- ISCR, Université de Rennes (France), Equipe CTI

* Au moins 12 mois seront passés dans chaque équipe de recherche.

Contacts

Dr. Boris Le Guennic (Tel : +33 (0)2 23 23 35 21, boris.leguennic@univ-rennes1.fr)

Pr. Denis Jacquemin (Tel : +33 (0)2 51 12 55 64, Denis.Jacquemin@univ-nantes.fr)

Contexte et programme de recherche

Le projet de doctorat se concentre sur la modélisation précise de l'absorption à l'état excité (ASE) de molécules organiques π -conjuguées. L'ASE, comme son nom l'indique, a lieu lorsqu'un photon est absorbé à partir d'un état électronique excité de basse énergie, ce qui induit la promotion du système moléculaire vers un état excité plus élevé. L'ASE va donc au-delà de l'optique linéaire classique (absorption et fluorescence) et joue un rôle clé dans plusieurs phénomènes expérimentaux, notamment *i*) la spectroscopie transitoire dans laquelle la position, l'intensité et la forme des bandes ASE sont couramment utilisées pour identifier la nature et les énergies relatives des états électroniques, et donc pour comprendre les événements photophysiques clés qui se produisent dans les matériaux photoactifs utilisés dans les cellules solaires, les OLED, etc. *ii*) les dispositifs de limitation optique dans lesquels l'ASE est généralement combinée à l'absorption multiphotonique pour obtenir une section efficace d'absorption qui augmente supralinéairement avec l'intensité de la lumière entrante. D'un point de vue théorique, bien que les forces d'oscillateur (probabilités de transition) correspondant à l'ESA puissent être obtenues par diverses approches, y compris la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps sous sa forme de réponse quadratique (QR-TD-DFT), l'ESA a été beaucoup moins explorée que les phénomènes linéaires, et sa modélisation présente des défis spécifiques. Pour combler cette lacune, le projet de doctorat a plusieurs objectifs principaux : *i*) fournir des valeurs de référence fiables pour les probabilités de transition ESA à l'aide de théories de la fonction d'onde et définir un protocole pragmatique (TD-DFT) fournissant des énergies de transition ESA et des forces d'oscillateur précises ; *ii*) développer un modèle de solvant adapté pour quantifier les effets environnementaux sur l'ESA ; *iii*) concevoir des colorants optimisés, par exemple des composés dans lesquels le *gap* S_1-S_2 est exactement la moitié de l'écart S_0-S_1 , tandis que la force d'oscillateur ESA est très importante, car de tels composés seraient idéaux pour les dispositifs de limitation optique. A la fin de la thèse, les résultats obtenus devraient permettre : *i*) de fournir à la communauté théorique une série d'outils permettant de modéliser l'absorption à l'état excité avec la même facilité que l'absorption à un photon pour n'importe quel colorant organique ; *ii*) de modéliser

l'ESA dans des composés expérimentalement pertinents, et de fournir aux chimistes de synthèse quelques règles intuitives pour optimiser l'ESA.

Le doctorant travaillera dans un environnement scientifique stimulant au sein des équipes de chimie théorique de Rennes et de Nantes, avec des séminaires d'équipe et des discussions scientifiques fréquentes. Il/elle sera co-supervisé(e) par Denis Jacquemin (CEISAM) et Boris Le Guennic (ISCR) et fera partie de l'Académie LUMOMAT et d'un réseau actif d'étudiants.

Candidatures

Le/la candidat/e doit être titulaire d'un master en physique/chimie ou en chimie computationnelle/théorique. Une expérience avérée en chimie quantique et des connaissances en informatique scientifique ou en programmation (Python) seraient très appréciées. Le/la candidat/e doit avoir un intérêt marqué pour les interactions lumière-matière, les spectroscopies et les méthodologies. D'excellentes compétences en communication orale et écrite sont nécessaires. Les candidatures doivent être adressées à boris.leguennic@univ-rennes1.fr et Denis.Jacquemin@univ-nantes.fr avec un CV, une lettre de motivation décrivant leurs intérêts de recherche, et les noms de deux personnes de référence.