Proposition de stage M2 "Physique de la Matière"

Spectroscopie de rayons X et la relativité

Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques - UMR5626 (Directeur : Fernand Spiegelman)
Site web : http ://www.lcpq.ups-tlse.fr/
Groupe Méthodes et outils de la Chimie Quantique
Responsable de stage : Trond Saue
Tél : 05 61 55 60 31. Courriel : trond.saue@irsamc.ups-tlse.fr. Site web : http ://dirac.ups-tlse.fr/saue

---

La spectroscopie de rayons X sonde les orbitales de cœur des atomes et hérite ainsi de leur nature locale. La grande séparation des énergies des orbitales de cœur permet de sélectionner des éléments chimiques par des excitations par rayons X et même leur distinguer dans des environnements locaux différents. Actuellement, la spectroscopie par rayons X suscite beaucoup d'attention à cause du développement du laser à électrons libres (FEL) qui permet une extension considérable de leur champ d'application.

Nous proposons de simuler la spectroscopie d'absorption de rayons X par des calculs de la mécanique quantique moléculaire relativiste. La relativité entre en jeu parce qu'au voisinage des atomes lourds les électrons atteignent des vitesses proches de celle de la lumière. Dans ce stage, nous allons étudier, en collaboration avec le groupe spectroscopique de Tonya Vitova à Karlsruhe [2] et le groupe théorique de Patrick Norman à Linköping, des molécules contenant des éléments *f*, tel que l'uranium, d'intérêt pour la séparation des déchets nucléaires. Les calculs se basent sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) relativiste, notamment par la théorie de *réponse complexe* [1], qui inclut de façon automatique l'élargissement des raies et permet la simulation des spectres par survol de la fourchette des fréquences désirées.

Références

[1] Sebastien Villaume, Trond Saue, and Patrick Norman. Linear complex polarization propagator in a four-component Kohn–Sham framework. *J. Chem. Phys.*, 133 :064105, 2010.

[2] T. Vitova, K. O. Kvashnina, G. Nocton, G. Sukharina, M. A. Denecke, S. M. Butorin, M. Mazzanti, R. Caciuffo, A. Soldatov, T. Behrends, and H. Geckeis. High energy resolution x-ray absorption spectroscopy study of uranium in varying valence states. *Phys. Rev. B*, 82 :235118, 2010.