

Conférence - CEISAM - UMR CNRS 6230

Lundi 6 Juin 2016
14h00 - Amphi Pasteur

Dr Trond SAUE

Directeur de recherche CNRS -
Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques, UMR CNRS 5626, Université Paul
Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex

“ Simulation de la spectroscopie rayons X pour éléments lourds ”

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 de les 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. Dans mon séminaire, je vais présenter une étude méthodologique de l'ionisation et l'excitation des électrons 2p de l'uranium dans des actinyles et expliquer les acronymes REW-TDDFT, STEX et CPP. Je vais également discuter l'informatique chimique apportée par cette spectroscopie.

Référence:

Christopher South, Avijit Shee, Debashis Mukherjee, Angela Wilson and Trond Saue, PCCP (2016), <http://dx.doi.org/10.1039/C6CP00262E>

4-component relativistic calculations of L3 ionization and excitations for the isoelectronic species UO₂²⁺, OUN⁺ and UN₂