

Intitulé du Sujet de Thèse : Contrôle de la photochimie théorique par des champs électriques et/ou magnétiques

Laboratoire : Institut de Chimie Radicalaire

Equipe : Chimie théorique

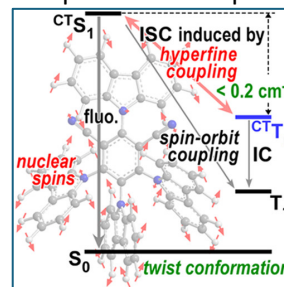
Directeur de thèse HDR (50%) : Nicolas Ferré

Codirecteur HDR (50%) : Miquel Huix-Rotllant

Email : nicolas.ferre@univ-amu.fr, miquel.huix-rotllant@cnrs.fr

Nous recherchons des candidat.e.s pour un projet de recherche doctorale, financé par un contrat doctoral d'Aix Marseille Université, sous réserve de la réussite du.de la candidat.e à l'examen de sélection organisé par [l'école doctorale des Sciences Chimiques](#).

Contexte : La possibilité de contrôler la photochimie par l'application de champs électriques et magnétiques ouvre des perspectives nouvelles en chimie moléculaire et en chimie de spin. Des exemples de contrôle ont été démontrés récemment dans des systèmes moléculaires jusqu'à des systèmes biologiques [1,2]. Toutefois, les mécanismes dynamiques microscopiques responsables de cette modulation restent méconnus. Les surfaces d'énergie potentielle des états excités à transfert de charge présentent une forte sensibilité aux champs électriques via l'effet Stark. Les états de spin triplets, et leurs populations, peuvent être modifiés sous champ magnétique par effet Zeeman [3]. Dans les deux cas, ces perturbations influencent directement la sélectivité des chemins photo-réactionnels et leurs rendements quantiques.



Projet : Ce projet doctoral a pour premier objectif de développer de nouvelles méthodologies de chimie quantique en présence de champs électriques et magnétiques, afin d'étudier la dynamique non-adiabatique des états excités singulets et triplets de chromophores isolés et en interaction avec des environnements moléculaires complexes (solvants, hôtes supramoléculaires, macromolécules biologiques). L'approche reposera sur des méthodes hybrides multi-échelles [4] combinant une description précise de la structure électronique d'un chromophore, la modélisation atomistique explicite de l'environnement, la prise en compte des termes de couplage Stark et Zeeman dans l'Hamiltonien électronique ainsi que la dynamique nucléaire et les processus non adiabatiques. Le second objectif est d'identifier des principes généraux de contrôle des voies photochimiques sous champ externe et d'établir un cadre théorique prédictif applicable à une large classe de systèmes photoactifs.

Profil recherché : Le.la candidat.e devra avoir obtenu (ou être en voie d'obtenir) un diplôme de Master (ou équivalent), avec un bon dossier académique en chimie théorique. Fortement motivée par le développement méthodologique et/ou la mise en place de protocoles de calcul multi-échelles, il.elle devra faire preuve de rigueur, d'autonomie et d'initiative. Intégré dans une équipe comprenant de nombreux personnels non francophones, il.elle maîtrise la communication scientifique en anglais. Le processus de sélection pour ce contrat doctoral reposant en grande partie sur la qualité de présentation orale, il.elle présente de bonnes dispositions pour mettre en valeur ses expériences en laboratoire et sa motivation pour le projet doctoral. Merci d'envoyer avant le 10 avril 2026 à Nicolas Ferré et Miquel Huix-Rotllant un CV détaillé, les relevés de notes de M1 et M2, une lettre de motivation spécifique au projet proposé, ainsi que les coordonnées d'une personne encadrant ou ayant encadré vos travaux scientifiques.

Références Bibliographiques

- [1] [Abrahams et al, Nature 649 \(2026\) 1172](#)
- [2] [Yang, Guo, Zhang, Guo, Chem. Rev. 125 \(2024\) 223](#)
- [3] [Ogiwara, Wakikawa, Ikoma, J. Phys. Chem. A 119 \(2015\) 3415](#)
- [4] [Fay, Huix-Rotllant, Ferré, J. Chem. Theory Comput. 21 \(2025\) 8773](#)

PhD project title : Controlling the theoretical photochemistry using electric and/or magnetic fields

Research unit : Institut de Chimie Radicalaire

Team : Chimie théorique

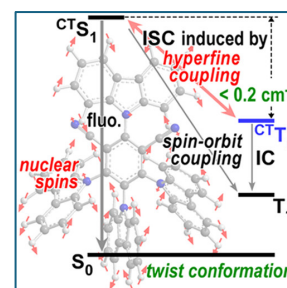
PhD supervisor, HDR (50%) : Nicolas Ferré

PhD Co-supervisor HDR (50%) : Miquel Huix-Rotllant

Email : nicolas.ferre@univ-amu.fr, miquel.huix-rotllant@cnr.fr

We are seeking candidates for a PhD research project, funded by a doctoral contract from Aix Marseille University, subject to the candidate passing the selection exam organized by the [doctoral school of Chemical Sciences](#).

Context: The possibility of controlling photochemistry by applying electric and magnetic fields opens new perspectives in molecular and spin chemistry. Examples of such control have recently been demonstrated in systems ranging from molecules to biological systems [1,2]. However, the microscopic dynamic mechanisms responsible for this modulation remain largely unknown. Potential energy surfaces of charge transfer excited states exhibit strong sensitivity to electric fields via the Stark effect. Triplet spin state energies and populations can be modified under magnetic fields by the Zeeman effect [3]. In both cases, these perturbations directly influence the selectivity of photoreaction pathways and their quantum yields.



Project: This doctoral project aims to develop, validate, and apply new quantum chemistry methodologies in the presence of electric and magnetic fields, to study the non-adiabatic dynamics of excited singlet and triplet states of isolated chromophores and their interaction with complex molecular environments (solvents, supramolecular hosts, biological macromolecules). The approach will rely on multi-scale hybrid methods [4] combining a precise description of the electronic structure of a chromophore, explicit atomistic modeling of the environment, consideration of Stark and Zeeman coupling terms in the electronic Hamiltonian, as well as nuclear dynamics and non-adiabatic processes. These developments will enable spin dynamics simulations to study the effect of a field on the modulation of photochemical properties (quantum yields, singlet-triplet populations). The objective is to identify general principles of control of photochemical pathways under external field and to establish a predictive theoretical framework applicable to a wide class of photoactive systems.

Profile: The candidate must have obtained (or be in the process of obtaining) a Master's degree (or equivalent), with a strong academic record in theoretical or physical chemistry. Highly motivated by methodological development and/or the implementation of multi-scale calculation protocols, they must demonstrate rigor, autonomy, and initiative. As they will be part of a team with many non-French speakers, they must be proficient in scientific communication in English (minimum B2 level). Since the selection process for this doctoral contract relies heavily on the quality of oral presentation, the candidate should be able to effectively highlight their laboratory experience and their motivation for the doctoral project. Please send to Nicolas Ferré and Miquel Huix-Rotllant before April 10, 2026: a detailed CV, transcripts from the first and second years of the Master's program, a cover letter specific to the proposed project, and contact information for a supervisor or former supervisor of your master research project.

Références Bibliographiques

- [1] [Abrahams et al, Nature 649 \(2026\) 1172](#)
- [2] [Yang, Guo, Zhang, Guo, Chem. Rev. 125 \(2024\) 223](#)
- [3] [Ogiwara, Wakikawa, Ikoma, J. Phys. Chem. A 119 \(2015\) 3415](#)
- [4] [Fay, Huix-Rotllant, Ferré, J. Chem. Theory Comput. 21 \(2025\) 8773](#)