

Spécialité de Master « Optique, Matière, Plasmas »

Stage de recherche (4 mois minimum, à partir de début mars)

Proposition de stage

Date de la proposition : 01/10/2012

Responsable du stage / internship supervisor:			
Nom / name:	Dubois / Caillat	Prénom/ first name:	Alain / Jérémie
Tél:	01 44 27 66 31 / 7 66 05	Fax:	
Courriel / mail:	alain.dubois@upmc.fr / jeremie.caillat@upmc.fr		
Nom du Laboratoire / laboratory name: Laboratoire de Chimie Physique - Matière et Rayonnement			
Code d'identification: UMR 7614		Organisme: UPMC et CNRS	
Site Internet / web site: http://www.lcpmr.upmc.fr/themes-C.php			
Adresse / address: 11, rue Pierre et Marie Curie 75231 Paris cedex 05			
Lieu du stage / internship place: LCPMR			

Titre du stage / internship title: <i>Modélisation de processus électroniques au cours de collisions moléculaires</i>	
Résumé / summary	
<p>Le stage proposé constitue une introduction aux méthodes théoriques utilisées pour l'étude de processus électroniques ayant lieu au cours de collisions atomiques et moléculaires. Tout particulièrement, les approches non perturbatives dépendantes du temps, avec utilisation de bases d'orbitales atomiques et moléculaires <i>had oc</i>, seront examinées et feront l'objet d'applications au travers de calculs numériques. L'accent sera mis sur la description des processus survenant au cours de collisions ion-molécule.</p> <p>Notre équipe a développé un code informatique pour décrire les processus mono- et bi-électroniques au cours de collisions entre atomes et molécules diatomiques, dans une large gamme d'énergies d'impact ($E > 100$ eV/u). L'objectif du stage proposé est de tester les bases standard de la chimie quantique dans le contexte des collisions, dans l'idée d'étendre notre approche aux processus poly-électroniques au cours de collisions impliquant des molécules polyatomiques ($H_2O \dots$).</p> <p>L'objet du stage porte tant sur la méthodologie (modélisation de processus électroniques non perturbatifs) et la programmation (implémentation des équations à résoudre) que sur l'analyse critique des résultats :</p> <ul style="list-style-type: none">- résolution numérique des équations de Schrödinger indépendante et dépendante du temps ;- élaboration et utilisation de programmes originaux (FORTRAN90) ;- visualisation et analyse des résultats à l'aide de logiciels dédiés (Matlab, Kaleidagraph ...). <p>Les résultats des simulations effectuées permettront de déterminer dans quelle mesure les bases d'orbitales usuelles de la chimie quantique, optimisées pour l'étude de l'état fondamental et de quelques états excités des molécules, permettent de décrire correctement la dynamique non perturbative du nuage électronique au cours de collisions rapides. Cette étude devrait permettre d'étendre notre programme de collision, actuellement restreint aux systèmes « simples », au traitement systématique des collisions induisant des processus polyélectroniques dans des molécules polyatomiques.</p>	

Ce stage pourra-t-il se prolonger en thèse ? Possibility of a PhD ? : oui	
Si oui, financement de thèse envisagé/ financial support for the PhD : Contrat doctoral (ED)	

Lasers et matière		Lumière, Matière : Mesures Extrêmes	x
Optique de la science à la technologie		Plasmas : de l'espace au laboratoire	x