

Spécialité de Master « Optique, Matière, Plasmas »

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

Proposition de stage

Date de la proposition : 28/10/2014

Responsable du stage / internship supervisor:			
Nom / name:	Falvo	Prénom/ first name :	Cyril
Tél :	+33 1 69 15 75 52	Fax :	
Courriel / mail:	cyril.falvo@u-psud.fr		
Nom du Laboratoire / laboratory name: Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay			
Code d'identification :	UMR 8214	Organisme :	CNRS/Université Paris Sud
Site Internet / web site:	http://www.ismo.u-psud.fr		
Adresse / address:	ISMO, Bât. 210, Université Paris Sud		
Lieu du stage / internship place:	ISMO, Bât. 210, Université Paris Sud		

Titre du stage / internship title: Dynamique et spectroscopie IR de petits hydrocarbures piégés dans des clathrates hydrates
Résumé / summary
<p>Les clathrates hydrates sont des structures cristallines de type glace d'eau poreuse, au sein desquelles des molécules de gaz sont piégées. En raison de leur présence possible dans le permafrost, les clathrates d'hydrocarbures et notamment de méthane font l'objet de nombreuses études car ils pourraient représenter une source très importante d'énergie [1]. Ils représentent également un intérêt astrophysique, puisque leur présence a été proposée dans les comètes et les atmosphères planétaires [2,3].</p> <p>Des études récentes de spectroscopie IR menées par E. Dartois (IAS) ont permis de caractériser les signatures spectrales de plusieurs clathrates hydrates contenant de petits hydrocarbures alcanes et alcènes [4,5]. Ces informations importantes nécessitent cependant une analyse théorique pour caractériser de manière quantitative les interactions entre les molécules hôtes et la structure cristalline, en fonction des conditions du milieu extérieur (température et pression).</p> <p>Au cours de ce stage, une étude théorique sera menée pour caractériser les interactions entre les hydrocarbures piégés et la structure de glace poreuse, et simuler leur dynamique et leur signature spectrale. En particulier, des approches de dynamique moléculaire reposant sur des surfaces d'énergie potentielle combinant liaisons fortes pour les hydrocarbures [6] et champs de forces pour l'eau et les interactions intermoléculaires seront utilisées.</p> <p>[1] Kvenvolden, K. A., & Lorenson, T. D. 2001, A Global Inventory of Natural Gas Hydrate Occurrence, Geophysical monograph (Washington, DC, USA: American Geophysical Union editors), 124, 3 [2] Delsemme, A. H., & Swings, P. 1952, Ann. Astrophys., 15, 1 [3] Miller, S. L. 1961, Proc. Natl. Acad. Sci., USA, 47, 1798 [4] Dartois, E., & Schmitt B. 2009, Astron. Astrophys., 504, 869 [5] Dartois, E., Deboffle D., & Bouzit M. 2010, Astron. Astrophys. 514, A49 [6] Van-Oanh, N.-T., Parneix, P., & Bréchignac Ph. 2002, J. Phys. Chem. A, 106, 1014</p>
Toutes les rubriques ci-dessous doivent obligatoirement être remplies

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: allocation de thèse EDOM			
Lasers, Optique, Matière		Lumière, Matière, Interactions	X
Plasmas : de l'espace au laboratoire			

Fiche à transmettre (fichier pdf **obligatoirement**) sur le site <http://stages.master-omp.fr>