

Spécialité de Master «Optique, Matière, Paris»

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

Proposition de stage (**ne pas dépasser 1 page**)

Date de la proposition :

Responsable du stage / internship supervisor:			
Nom / name:	Hervé du Penhoat	Prénom/ first name :	Marie-Anne
Tél :	01 44 27 72 05	Fax :	
Courriel / mail:	marie-anne.herve_du_penhoat@upmc.fr		
Nom du Laboratoire / laboratory name: Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie (IMPMC)			
Code d'identification :	UMR 7590	Organisme :	UPMC – CNRS – IRD – MNHN
Site Internet / web site:	http://www.imPMC.upmc.fr		
Adresse / address:	IMPMC, 4 place Jussieu, 75005 Paris		
Lieu du stage / internship place:	IMPMC, 4 place Jussieu, 75005		

Titre du stage / internship title: Processus de fragmentation de molécules ionisées et immergées dans l'eau liquide	
Résumé / summary	
<p>L'effet des rayonnements ionisants est étudié depuis plus de cent ans, à la fois pour ce qui concerne la dégradation de la matière biologique dans le contexte d'une radiothérapie ou d'une exposition accidentelle, mais aussi pour ses nombreuses implications dans le domaine de l'industrie nucléaire. Les effets des ionisations en couche externe, impliquant des électrons jouant un rôle dans les liaisons chimiques, sont bien connus. Ces dépôts d'énergie de quelques dizaines d'électronvolts peuvent en particulier induire la cassure des liaisons OH et CH au sein des molécules organiques. Mais les effets des événements les plus énergétiques que l'on puisse envisager - les ionisations en couche interne, impliquant des électrons conservant un caractère atomique et ne jouant pas de rôle dans les liaisons chimiques- sont encore mal compris en phase condensée. Ce processus mène à des dépôts d'énergie de plusieurs centaines d'électronvolts à l'échelle d'un atome et peuvent entraîner une explosion de la molécule ionisée. Certes, ces événements demeurent rares lorsqu'un milieu est exposé à des particules de haute énergie, mais pourtant, leurs effets sur les biomolécules, les protéines et l'ADN, pourraient être très significatifs [1] et en particulier être le facteur limitant les études structurales, de microscopie X et sur les lasers à électron libre de haute énergie (XFEL) [2,3].</p> <p>Le ou la stagiaire modélisera les processus de fragmentation ultra-rapides de molécules ionisées en couche interne et immergées dans l'eau liquide à l'aide de méthodologies [4] développées par Marie-Anne Hervé du Penhoat (IMPMC, UPMC, Paris), en collaboration avec Rodolphe Vuilleumier (ENS, Paris) et Marie-Françoise Politis et Marie-Pierre Gageot (LAMBE, UEVE). Le ou la stagiaire participera aux expériences que ces simulations visent à interpréter. Les expériences sont menées auprès du synchrotron SOLEIL, en collaboration avec Jean-Philippe Renault (CEA Saclay) et Christophe Nicolas, (synchrotron SOLEIL).</p>	
[1] Boissière <i>et al.</i> , <i>Radiat. Res.</i> 167 , 493 (2007). [2] Neutze <i>et al.</i> , <i>Nature</i> 406 , 752 (2000). [3] Gianoncelli <i>et al.</i> , <i>Scientific Reports</i> 5 , 10250 (2015). [4] Lopez-Tarifa <i>et al.</i> , <i>Angew. Chem.-Int. Edit.</i> 52 , 3160 (2013).	
Technique utilisées :	
- dynamiques moléculaires ab initio - irradiation de solutions par des rayons X-mous (0,2-2 keV)	
Qualités du candidat requises : intérêt pour ma modélisation et les expériences sur grand instruments.	
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: école doctorale, ANR HIGHENECH (coll. Jean-Philippe Renault, CEA Saclay, et Christophe Nicolas, synchrotron SOLEIL)			
Lumière, Matière, Interactions	oui	Lasers, Optique, Matière	oui

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