Propositions de stages et mémoires au Service de Chimie Quantique et Photophysique Année académique 2015-2016

ATMOSPHERIC CHEMISTRY AND REMOTE-SENSING

P. Coheur (pfcoheur@ulb.ac.be), C. Clerbaux (cclerbaux@ulb.ac.be), L. Clarisse (lclariss@ulb.ac.be)

Les instruments embarqués sur satellites fournissent des observations essentielles pour étudier la composition des atmosphères terrestres et planétaires.

L'instrument IASI qui vole à bord du satellite MetOp depuis 2006 et sonde l'atmosphère terrestre dans l'infrarouge, a déjà fourni 10 années de données globales dont l'analyse permet de déterminer les concentrations de nombreux gaz et aérosols. Pour analyser les spectres atmosphériques de IASI, des simulations numériques du transfert radiatif atmosphériques sont nécessaires, ainsi qu'une bonne connaissance des propriétés optiques des aérosols et molécules présentes dans l'atmosphère. Des sujets de mémoire peuvent être proposés sur ces aspects fondamentaux de la physico-chimie. Des travaux de recherche en lien avec le forçage du climat, l'étude de pollutions locales, les rétroactions de la chimie sur le climat sont également possibles. Finalement, des sujets de mémoire sont aussi proposés pour la détermination, avec les mêmes outils de transfert radiatif, de la composition de l'atmosphère martienne. Ces recherches seront réalisées à l'aide des mesures de l'instrument PFS et serviront à préparer les algorithmes pour les sondeurs embarqués sur le satellite ExoMars, qui atteindra la planète en 2017.

Les recherches menées dans le groupe sont de nature pluridisciplinaires et conviennent aux étudiants des Masters en Sciences avec un background en chimie, physique ou en environnement.

EXPERIMENTAL HIGH RESOLUTION MOLECULAR SPECTROSCOPY

J. Vander Auwera (jauwera@ulb.ac.be)

La caractérisation des molécules présentes dans les atmosphères planétaires et dans l'espace interstellaire implique nécessairement l'analyse de la lumière qu'elles absorbent et émettent. Les spectres résultants sont de véritables empreintes digitales dont l'exploitation requiert un travail de référence au laboratoire, de nature qualitative (caractérisation des spectres moléculaires) et quantitative (mesure de paramètres caractérisant le profil des raies spectrales). Notre approche passe par la spectroscopie à haute résolution théorique et expérimentale, cette dernière utilisant des techniques interférométriques et laser dans le domaine de l'infrarouge, couplées à des cellules thermostatées. Les molécules sélectionnées, d'intérêt pour la planétologie (incluant l'atmosphère terrestre), sont notamment des composés organiques et inorganiques (HNO₂, H₂CO, HCOOH, OCS...) et des hydrocarbures (CH₄, C₂H₂, C₂H₆...).

Les travaux proposés s'intégreront dans les thèmes de recherche expérimentaux, théoriques et technologiques, fonction des recherches en cours dans l'équipe.

COMPUTATIONAL ATOMIC AND MOLECULAR STRUCTURES AND DYNAMICS

M. Godefroid (mrgodef@ulb.ac.be) et N. Vaeck (nvaeck@ulb.ac.be),

En physique atomique et moléculaire, les sujets proposés touchent au calcul de structures électroniques au sens large du terme. Nous étudions actuellement le développement du calcul relativiste de polarisabilités de systèmes polyélectroniques et de déplacements isotopiques de raies spectrales, le contrôle laser de population moléculaire ou de nanostructures, les réactions aux surfaces et la dynamique quantique de petits systèmes. Différents sujets peuvent être envisagés: le calcul ab initio de polarisabilités atomiques, de probabilités de transitions bi-photoniques ou de déplacements isotopiques de raies spectrales, le contrôle laser de l'isomérisation acétylène/vinylidène dans le domaine du contrôle quantique, le calcul quantique sur un réseau d'ions piégés dans un piège à électrode de surface, la modélisation des sections efficaces de photodésorption aux surfaces des glaces, ou la modélisation du nuage de poussière de la comète 67P/Churyumov-Gerasimenko.