

Proposition de sujet de stage pour les étudiants en Master 2
Année 2015-2016

Nom du Laboratoire : Institut Lumière Matière (iLUM), Université Lyon 1 & CNRS

Responsable du Laboratoire : Marie-France JOUBERT

Equipe : Physico-Chimie Théorique

Responsables de stage : Abdul-Rahman Allouche et Isabelle Compagnon

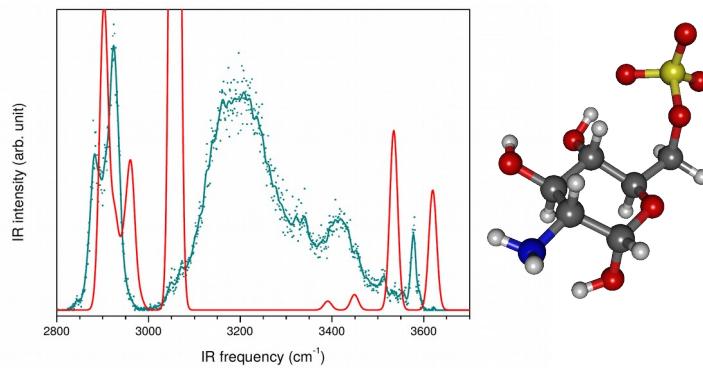
E-mail : abdul-rahman.allouche@univ-lyon1.fr , isabelle.compagnon@univ-lyon1.fr

Intitulé du stage : Évaluation des méthodes de la chimie quantique pour le calcul des spectres infrarouges des anions

Résumé du travail demandé :

Le stage, purement théorique, s'intègre dans une approche originale^[1,2] qui a été mise en place dans le cadre d'une collaboration entre expérimentateurs et théoriciens de l'ILM. Cette approche alliant spectrométrie de masse, spectroscopie vibrationnelle et calcul théorique a été élaborée afin d'analyser des molécules d'intérêt biologique. Ces molécules sont souvent de grande taille et la méthode DFT (Density Functional Theory) est la méthode de prédilection dans ce cas. En effet, cette méthode a l'avantage d'offrir le meilleur compromis entre le temps de calcul et la précision. Les molécules étudiées dans ce projet sont chargées (cations ou anions). Nos études ont montré que la DFT donne de bons résultats pour les cations mais elle a des difficultés à reproduire certains modes de vibrations pour les anions (voir figure ci-dessus).

Le(La) stagiaire devra évaluer la qualité des résultats que l'on peut attendre des méthodes les plus élaborées de la chimie quantique: DFT , MP2, B2PLYP^[3] et DLPNO-CCSD(T)^[4]. L'évaluation se fera en comparant les spectres IR calculés par ces méthodes à ceux expérimentaux pour des anions de petite taille (disponibles dans la littérature) ainsi qu'aux spectres expérimentaux obtenus récemment à l'ILM pour des molécules chargées négativement d'intérêt en biologie.



La maîtrise d'un langage de programmation est souhaitable pour ce stage.

Ce stage pourra être poursuivi par une thèse.

Type de financement envisagé : Bourse ministère

1) L Barnes, B. Schindler, A-R Allouche, D. Simon, S. Chambert, J. Oomens, I. Compagnon PCCP, 17, 25705 (2015)
2) B. Schindler, J. Joshi, AR Allouche, D. Simon, S. Chambert, V. Brites, MP. Gaigeot, I. Compagnon PCCP, 16, 22131 (2014).

3) S. Grimme, J. Chem. Phys., 124, 034108 (2006).

4) C. Riplinger and FJ Neese, J. Chem Phys. 034106 (2013).