



MASTER DE CHIMIE DE PARIS CENTRE - M2S2
Proposition de stage 2018-2019
Internship Proposal 2018-2019

Spécialité(s) / Specialty(ies) :

■ Chimie Théorique / *Theoretical Chemistry*

Laboratoire d'accueil / Host Institution

Intitulés / *Name* : Laboratoire de Chimie Théorique

Adresse / *Address* : 4, place Jussieu 75005 Paris

Directeur / *Director (legal representative)* : Parisel Olivier

Tél / *Tel* : 01 44 27 40 53

E-mail : parisel@lct.jussieu.fr

Equipe d'accueil / Hosting Team :

Adresse / *Address* : Laboratoire de Chimie Théorique

Site Web / *Web site* : www.lct.jussieu.fr

Responsable du stage (encadrant) / *Direct Supervisor* : Pilmé Julien

Fonction / *Position* : *Mdc HDR*

Tél / *Tel* : 0144279660

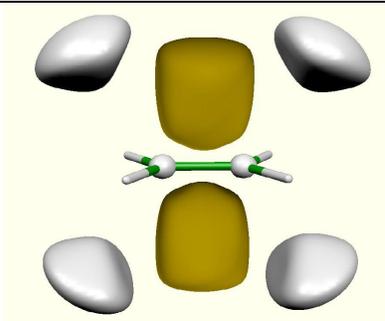
E-mail : pilme@lct.jussieu.fr

Période de stage / *Internship period* : **05/02/2018 – 06/07/2018**

Prédiction de processus réactifs par l'analyse topologique de la fonction ELF_x

Projet scientifique (1 page maximum) / *Scientific Project (maximum 1 page):*

Le chimiste sait reconnaître les sites électrophiles et nucléophiles d'une molécule et va naturellement interpréter et prédire qualitativement la réactivité chimique. Il existe plusieurs descripteurs électroniques (fonctions de Fukui, potentiel électrostatique, fonctions de la DFT conceptuelle, etc..) capable d'identifier les sites électrophiles et nucléophiles d'une molécule. Cependant, l'analyse des propriétés de ces descripteurs est généralement basée sur une approche « visuelle » et ne permet donc qu'une description qualitative et partielle de la réactivité. Récemment, une formulation modifiée de la fonction de localisation ELF a montré qu'une quantification précise des sites réactifs d'une molécule est possible dans le contexte des approches topologiques de la liaison chimique [1, 2]. Bien qu'une étude préliminaire de l'addition de CCl_2 sur l'éthylène a confirmé que la fonction peut être utilisée comme coordonnée de réaction, des études impliquant des mécanismes complexes doivent être entreprises pour évaluer la robustesse de la fonction. Aussi, l'objectif principal du stage, qui intéressera naturellement une très large audience en chimie, sera d'évaluer précisément les capacités prédictives de la fonction dans le cas de mécanismes complexes, ce qui permettrait d'en faire un outil prédictif très puissant pour rationaliser et prédire les mécanismes réactionnels.



Domaines de localisation de la fonction ELF_x pour la molécule d'éthylène. En jaune, régions nucléophiles et en blanc, régions de cœurs et électrophiles.

Ces analyses seront réalisées avec le code TopChem [3] développé au laboratoire de chimie théorique, une connaissance du langage Fortran 90/95 serait donc appréciée pour permettre à l'étudiant(e) de modifier lui(elle)-même et d'améliorer le code au cours de son stage.

Ces travaux s'effectueront en collaboration avec une équipe de l'université de Dijon (Pr .P. Fleurat-Lessard).

Résultats attendus

Etude des propriétés de la fonction de localisation ELF_x pour rationaliser et prédire les processus réactifs complexes en phase gazeuse, dans un solvant ou dans un solide. Le choix des processus réactifs s'effectuera avec l'étudiant(e) en concertation avec nos collaborateurs de l'université de Dijon. Un objectif de ces travaux est de proposer un descripteur topologique de la réactivité aux performances au moins similaires aux descripteurs utilisés en DFT conceptuelle tel que le Dual-Descriptor. [4]

Techniques utilisées :

L'étudiant(e) devra utiliser des programmes standards de la chimie quantique (GAUSSIAN) pour réaliser des calculs ab initio et de la fonctionnelle de la densité (DFT). Il/elle devra aussi utiliser les programmes d'analyses topologiques développés au laboratoire. Ce stage permettra également de nouveaux acquis informatiques par l'utilisation et l'exploitation des supercalculateurs présents au laboratoire (systèmes d'exploitation Linux). Des implémentations (Fortran 90/95) de quelques routines nécessaires aux analyses topologiques pourraient être envisagées.

Références

- 1) "Electron Localization Function From Density Components"
J. Pilmé, *J. Comput Chem.*, Vol 38, pp. 204-210, **2017**
- 2) "Classification of chemical bonds based on topological analysis of electron localization functions"
B. Silvi, A. Savin *Nature*, 371, pp. 683, **1994**
- 3) "New Insights in Quantum Chemical Topology Studies Using Numerical Grid-based Analyses"
D. Kozłowski and J. Pilmé, *J. Comput. Chem.* Vol. 32(15), pp. 3207–3217, **2011**
- 4) "New Dual Descriptor for Chemical Reactivity"
C. Morell, A. Grand and A. Toro-Labbé, *J. Phy. Chem. A*. Vol. 109(1), pp. 205-212, **2005**