

**Proposition de Stage en Laboratoire
Spécialité Chimie Physique et Théorique**

STAGE MAGISTERE de Physico-Chimie Moléculaire 2017/2018

FICHE DE PROPOSITION DE STAGE

- PROPOSITION SE DESTINANT A UN ETUDIANT DE :
X Magistère 1 (parcours L3) X Magistère 2 (parcours M1)

- DUREE DU STAGE ENVISAGEE :
Pour les Mag 1 (durée min. 6 sem.): 6 semaines
Pour les Mag. 2 : X Stage 4 mois minimum

- DATES DU STAGE ENVISAGEES :
 - Mag1 : début juin-mi-juillet
 - Mag 2 : avril-juillet

- GRATIFICATION DU STAGE SUR FONDS PROPRES : X oui non
(Rappel : les stages de durée supérieure à 44 jours sont légalement soumis en France à une gratification statutaire, sauf élèves normaliens)

- LABORATOIRE D'ACCUEIL : Laboratoire de Chimie Théorique, Université Paris 6

- RESPONSABLE DE STAGE :
Nom : Spezia
Prénom : Riccardo
Coordonnées électroniques : riccardo.spezia@upmc.fr
Coordonnées téléphoniques : 01 44 27 70 87

- SUJET DE STAGE PROPOSE :
Titre : *Etude théorique de la synthèse du formiate de méthyle, de l'acide acétique et du glycolaldéhyde : trois isomères prébiotiques observés dans l'espace.*

Résumé

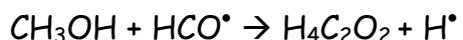
Plusieurs molécules organiques complexes ont déjà été détectées dans l'espace. Parmi elles, les trois isomères de formule brute $H_4C_2O_2$ (formiate de méthyle, acide acétique et glycolaldéhyde) ont été observés, par exemple, dans le nuage

moléculaire Sgr B2(N), qui est riche en molécules organiques. Leur présence et la connaissance des mécanismes qui sont responsables de leur formation est d'un intérêt crucial en astrobiologie. En particulier, le glycolaldéhyde pourrait être impliqué dans la formation de l'ARN. Il est donc important d'étudier la chimie des molécules organiques présentes dans l'espace dans l'hypothèse de l'origine de la vie basée sur la panspermie et en particulier les chemins réactionnelles qui peuvent être à la base de leur synthèse dans les conditions astrophysiques.

Notamment, ces trois isomères sont présents avec des abondances relatives (formiate de méthyle : glycolaldéhyde : acide acétique ~ 26 :4 :1) qui ne reflètent pas leurs différences énergétiques (acide acétique < formiate de méthyle < glycolaldéhyde). Se pose donc la question de comprendre les mécanismes qui sont à l'origine de leur formation. Pour cela il est nécessaire d'imaginer différentes voies de synthèse et de caractériser la surface d'énergie potentielle correspondante. Cette étude est un préalable indispensable aux simulations de dynamique moléculaire qui seront effectuées par la suite.

Nous envisagerons des réactions à la fois entre une molécule neutre et un radical, entre deux radicaux, et entre un ion et une molécule. Récemment notre étude sur la formation de l'urée a montré que l'une des réactions peut se produire sans énergie d'activation et qu'elle est donc a priori possible dans l'espace, où les faibles températures rendent presque impossible le passage des barrières.

Par exemple dans la littérature sont proposées les réactions suivantes :



Le but du stage est de déterminer le bilan énergétique de ces réactions (seules seront prises en compte celles ayant des énergies et des énergies libres négatives), ainsi que d'établir les chemins réactionnels correspondants (intermédiaires de réaction, états de transition). D'autres processus que ceux proposés pourront aussi être envisagés. Ces calculs sont faits en collaboration avec l'équipe expérimentale de D. Scuderi au Laboratoire de Chimie Physique (Université Paris Sud) qui feront les expériences de chimie des ions sur les réactions qui seront considérées les plus probables à partir des considérations énergétiques.

L'étudiant(e) utilisera les méthodes de modélisation quantique de la matière *ab initio* au niveau de « l'état de l'art » (MP2 et/ou CCSD(T)). Il (elle) emploiera le logiciel de chimie computationnelle Gaussian, sur les grappes de serveurs de calculs du laboratoire, sous environnement linux. D'autre part, des informations sur certains processus cinétiques à prendre en compte seront obtenues avec des logiciels développés au laboratoire.

Références

Woods et al., *Astrophys. J.* 750, 19 (2012)

Spezia et al., *Astrophys. J.* 826, 107 (2016)

Siro Brigiano et al., *Astron. Astrophys.* Sous presse. ArXiv : 1711.03457v1

Rawlings et al., *Faraday Discuss.* 168, 369 (2014)

Karton and Talbi, *Chem. Phys.* 436-437, 22 (2014)

▪ DOMAINE(S) CONCERNE(S) :

- Théorie
- Expérience
- Chimie organique
- Chimie inorganique
- Chimie physique
- Biophysique
- Matériaux
- Polymères
- Autre

▪ CONFIDENTIALITE DU STAGE :

- Non Oui