



MASTER DE CHIMIE DE PARIS CENTRE - M2S2
Proposition de stage 2019-2020
Internship Proposal 2019-2020

Parcours / Specialty(ies) :

- Chimie Analytique, Physique et Théorique / *Analytical, Physical and Theoretical Chemistry* :
 Chimie Moléculaire / *Molecular Chemistry* :
 Matériaux / *Materials* :
 Ingénierie Chimique / *Chemical Engineering* :

Laboratoire d'accueil / Host Institution

Intitulés / *Name* : Laboratoire de Chimie Théorique (LCT), UMR 7616
Adresse / *Address* : Sorbonne université, 4 place Jussieu, barre 12-13 4^e étage, 75252 Paris Cedex 05
Directeur / *Director (legal representative)* : Jean-Philip Piquemal
Tél / *Tel* : 01 44 27 40 53
E-mail : jean-philipp.piquemal@sorbonne-universite.fr

Equipe d'accueil / Hosting Team : Chimies de l'espace : du milieu interstellaire à la planète Terre

Adresse / *Address* : LCT, SU, campus Pierre et Marie Curie, couloir 12-13, 4^{ème} étage
Responsable équipe / *Team leader* : Alexis Markovits
Site Web / *Web site* : <http://www.lct.jussieu.fr>
Responsable du stage (encadrant) / *Direct Supervisor* : **Isabelle Fourré**
Fonction / *Position* : Maîtresse de Conférences
Tél / *Tel* : 01 44 27 96 59
E-mail : isabelle.fourre@sorbonne-universite.fr

Période de stage / *Internship period* * : 13/01/2020 – 30/06/2020

Etude, par des méthodes de chimie quantique, de la formation du glycolonitrile, une importante molécule pré-biotique récemment découverte dans le milieu interstellaire.

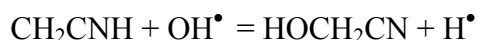
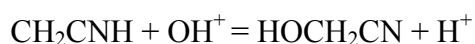
Projet scientifique (1 page maximum) / Scientific Project (maximum 1 page):

1. Projet / Project

A ce jour, environ 200 molécules distinctes (sans compter les isotopologues) ont été détectées dans le milieu interstellaire (MIS) de notre galaxie¹. Parmi elles, 30% sont des « iCOMS » (« interstellar complex organic molecules ») c'est-à-dire des molécules organiques comprenant plus de six atomes. Or, l'étude de la complexification moléculaire dans le MIS suscite un intérêt croissant en astrochimie, en particulier dans le contexte des recherches sur l'origine de la vie : plusieurs iCOMS prébiotiques sont déjà répertoriées comme la cyano-méthanimine, l'oxyde de propylène, ou le glycolaldéhyde. Le glycolonitrile, HOCH₂CN, un des précurseurs clé de l'adénine, a quant à lui été découvert en 2019 dans le cœur chaud et l'enveloppe froide d'une proto-étoile, grâce aux données fournies par le télescope ALMA². Les auteurs de l'article reportant cette détection ne sont cependant parvenus à reproduire les abondances mesurées de cette molécule dans aucune des deux régions. Ils incriminent le modèle cinétique utilisé, qui ne contient que des réactions sur des grains interstellaires. Le but de ce stage est donc d'étudier, par une approche théorique, les mécanismes de formation du glycolonitrile en phase gazeuse dans le MIS.

* 5 mois à partir du 13 janv 2020 / 5 months not earlier than January, 13th 2020.

On considérera des réactions du type ion+neutre ou neutre+neutre (impliquant soit une espèce radicalaire soit deux radicaux) susceptibles de former respectivement le glycolonitrile cationique (ou protonné) ou directement le glycolonitrile, comme cela a été fait récemment pour la formation du glycolaldéhyde et de ses isomères³. Par exemple, on pourra dans un premier temps envisager les réactions



Le bilan énergétique devra être déterminé, et s'il est favorable, le chemin réactionnel complet, (intermédiaires de réaction et états de transition) sera recherché. D'autres processus que ceux proposés devront être imaginés.

Les constantes cinétiques associées aux réactions étudiées pourront ensuite être déterminées à l'aide d'un modèle de capture du type Langevin et de la théorie Rice–Ramsperger–Kassel–Marcus (RRKM), mise en œuvre à partir des énergies de réactions et des fréquences des états stationnaires précédemment calculées⁴.

2. Techniques ou méthodes utilisées / Specific techniques or methods

Afin de localiser et caractériser les points stationnaires des surfaces d'énergies potentielles d'intérêt, l'étudiant(e) utilisera différentes méthodes de chimie quantique : dans un premier temps celles basées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), puis à un niveau post Hartree-Fock tel CCSD(T) pour obtenir des énergies de réactions et des barrières d'activation à un plus haut degré de précision. Il (elle) emploiera le logiciel de chimie computationnelle Gaussian ainsi que le logiciel RRKM développé au laboratoire. Les calculs seront effectués sur les grappes de serveurs de calculs du laboratoire, sous environnement linux.

3. Références / References

- (1) Woon, D. E. *Interstellar & Circumstellar Species: A Bibliography*
http://www.astrochymist.org/astrochymist_ism.html (accessed Oct 11, 2019).
- (2) Zeng, S.; Quénard, D.; Jiménez-Serra, I.; Martín-Pintado, J.; Rivilla, V. M.; Testi, L.; Martín-Doménech, R. First Detection of the Pre-Biotic Molecule Glycolonitrile (HOCH₂CN) in the Interstellar Medium. *Mon. Not. R. Astron. Soc. Lett.* **2019**, *484* (1), L43–L48.
<https://doi.org/10.1093/mnrasl/slz002>.
- (3) Riot, A.; Fourré, I.; Spezia, R. Formation of Glycolaldéhyde and Its Isomers Methyl Formate and Acetic Acid in Gas Phase : A Theoretical Approach. *En Préparation*.
- (4) Jeanvoine, Y.; Spezia, R. The Formation of Urea in Space. II. MP2 versus PM6 Dynamics in Determining Bimolecular Reaction Products. *Theor. Chem. Acc.* **2019**, *138* (1).
<https://doi.org/10.1007/s00214-018-2385-y>.