

Master de Chimie et Procédés - UFR de Chimie

Sujet de stage proposé

Laboratoire : Institut de Biologie Structurale – Jean-Pierre Ebel

Directeur : Eva Pebay-Peyroula

Intitulé de l'équipe : Laboratoire de Dynamique Moléculaire

Nom et Qualité du Responsable du Stage : Martin Field

Adresse : 41 Rue Jules Horowitz, 38027 Grenoble Cedex 1

Tél : 04 38 78 95 94

Responsable : Martin Field

HDR : Oui

Email : martin.field@ibs.fr

Spécialité MASTER : Physique et Chimie

Titre du sujet :

Modélisation et Simulation des Catalyseurs Biomimétiques Pour la Production de l'Hydrogène

Objectifs visés du stage (5 lignes max) :

Le but du projet est la simulation et la conception des complexes moléculaires artificiels qui produisent l'hydrogène moléculaire à partir des protons et des électrons. Pour la plupart ces complexes sont inspirés des hydrogénases qui sont des enzymes qui catalysent la même réaction.

Intérêts pédagogiques et compétences visées (5 lignes max) :

Apprentissage dans la recherche, la chimie quantique, la modélisation moléculaire et la simulation numérique.

Résumé :

La recherche de sources d'énergie alternatives est l'un des défis majeurs pour la société du 21^{ème} siècle. L'utilisation de l'hydrogène moléculaire comme carburant est une solution possible à ce problème tant que des méthodes bon marché et efficaces peuvent être trouvées pour sa production. Les hydrogénases sont des enzymes qui catalysent l'interconversion du dihydrogène en protons et électrons, mais leur utilisation directe n'est pas très commode. Pourtant, elles ont inspiré le développement de composés biomimétiques, y compris les complexes organométalliques et les enzymes artificielles. Ce projet a deux buts: (i) le développement de techniques de modélisation permettant d'acquérir des informations qualitatives ou semi-quantitatives sur les cycles catalytiques de ces systèmes. Tous ces développements seront intégrés dans le logiciel, pDynamo (<http://www.pdynamo.org>); (ii) l'utilisation de ces techniques, ainsi que d'autres méthodes de la simulation moléculaire, pour comprendre le comportement des catalyseurs biomimétiques existants et pour concevoir des complexes novateurs.

Approches & matériels utilisés (5 lignes max) :

Les techniques de la modélisation moléculaire et de la simulation numérique, tels que la chimie quantique, la dynamique moléculaire et les potentiels hybrides. Ce travail sera effectué en étroite collaboration avec les groupes expérimentaux à Grenoble (par exemple, à l'IBS et à l'iRSTV) et ailleurs.

Domaines de compétences souhaitées du candidat (3 lignes max):

Un intérêt dans la modélisation et l'informatique appliquées aux problèmes en chimie et biochimie.

Dates du stage : 01 ou 02/2011 à 06/2011