

Spécialité de Master « Optique, Matière, Paris »

Stage de recherche (4 mois minimum, à partir de début mars)

Proposition de stage (ne pas dépasser 1 page)

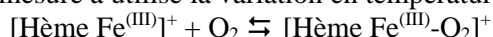
Date de la proposition : Octobre 2015

Responsable du stage / internship supervisor:			
Nom / name:	Shafizadeh	Prénom/ first name :	Niloufar
Tél :	0169157876	Fax :	
Courriel / mail:	Niloufar.shafizadeh@u-psud.fr		
Nom du Laboratoire / laboratory name: ISMO			
Code d'identification :	UMR 8214	Organisme :	Univ Paris-Sud ; CNRS
Site Internet / web site:	http://www.ismo.u-psud.fr/		
Adresse / address:	Batiment 210 Université Paris-Sud 91405 Orsay		
Lieu du stage / :	Université Paris-Sud et CEA Saclay		

Comprendre le mécanisme d'attachement du dioxygène à l'Hème du sang au niveau moléculaire, par des expériences de physicochimie

L'oxygène respiré par les êtres vivants, est transporté dans le sang par une hémoprotéine, puis relâché auprès des muscles. Le mécanisme de ce processus qui est équivalent à une association puis une dissociation d'un ligand sur le site actif de l'hémoglobine, l'Hème, n'a pas été élucidé du point de vue microscopique. La nature de la liaison Fer-dioxygène dans l'hème est un sujet de débat depuis Pauling (1936) et seulement récemment, la chimie quantique a pu répondre de façon plus nette à cette question : quelle sont les structures électroniques en jeu. Ainsi, la liaison $\text{Fe}^{\text{II}}-\text{O}_2$ trouve son origine dans un transfert de charge entre l'atome de fer et l'oxygène qui réorganise la configuration électronique de l'atome de fer et crée le couple en interaction $\text{Fe}^{\text{III}+} - \text{O}_2^-$. Une donnée expérimentale essentielle manque pour valider cette approche, l'énergie de liaison fer-Oxygène et ceci ne peut être réalisé simplement qu'en phase gazeuse, sur le site actif isolé de son environnement. Ceci permet d'accéder séquentiellement aux propriétés intrinsèques de chacun des partenaires de cette réaction, la liaison Fer-dioxygène et son environnement.

Notre but est d'étudier les différents aspects de cette réaction sur des espèces modèles simples. Ainsi le but que nous poursuivons est de séparer les différents paramètres jouant sur cette liaison $\text{Fe}-\text{O}_2$ et en particulier la configuration électronique du Fer. Jusqu' à présent, on supposait que la molécule de dioxygène ne se liait pas à l'hème contenant un fer oxydé, $\text{Fe}^{\text{III}+}$, l'atome de Fer ne pouvant fournir un électron au dioxygène. Nos travaux ont cependant montré la formation du complexe avec le fer oxydé [Hème $\text{Fe}^{\text{III}}-\text{O}_2$]⁺ avec une énergie de liaison de 0.1 eV, à basse température et dans un piège à ions (CLUPS). La mesure a utilisé la variation en température de l'équilibre de la réaction :



Ceci est une première étape et, pour comprendre les transferts de charge dans cette réaction, il faut faire varier -a) le degré d'oxydation du fer (Fe^{III} , Fe^{II}), b) changer le ligand (O_2) pour modifier sa nature de donneur-accepteur d'électrons. Ainsi la diminution de la charge positive sur le Fer doit permettre d'augmenter l'énergie de la liaison $\text{Fe}-\text{O}_2$.

L'objectif du stage sera de poursuivre cette étude en changeant le ligand (NO , CO , H_2S ou bien D_2O , pyridine, méthylimidazole) et le degré d'oxydation du fer. On mènera en parallèle l'étude énergétique et la dynamique temporelle de ces espèces. Les expériences seront effectuées au Centre Laser de l'Université de Paris-Sud et sur le serveur laser femto seconde LUCA du CEA Saclay. Le stage pourra se poursuivre par une Thèse et donner lieu à une modélisation théorique.

Ce stage pourra-t-il se prolonger en thèse ? Possibility of a PhD ? : oui

Si oui, financement de thèse envisagé/ financial support for the PhD: Bourse de l'Ecole Doctorale

Lumière, Matière, Interactions	X	Lasers, Optique, Matière	X
--------------------------------	---	--------------------------	---

Fiche à transmettre (fichier pdf **obligatoirement**) sur le site <http://stages.master-omp.fr>