

Spécialité de Master « Optique, Matière, Paris »

Stage de recherche

Proposition de stage

Date de la proposition : Nov 2018

Responsable du stage / internship supervisor:			
Nom / name:	MONS	Prénom/ first name :	Michel
Tél :	01 69 08 2001	Fax :	01 69 08 1213
Courriel / mail:	michel.mons@cea.fr	personal page	
Nom du Laboratoire / laboratory name: LIDYL			
Code d'identification : UMR 9222		Organisme : CEA / CNRS	
Site Internet / web site: Structures BioMoléculaires			
Adresse / address: CEA Saclay bât 522 91191 Gif-sur-Yvette Cedex			
Lieu du stage / internship place: CEA Saclay			

Titre du stage / internship title: Repliement moléculaire assisté par un hétéroatome soufre : Caractérisation des interactions intramoléculaires de foldamères par modélisation à l'échelle atomique Molecular folding assisted by a sulfur heteroatom : characterisation of intramolecular interactions in foldamers using atomic scale modelling
--

Résumé / summary <p>Le groupe « Structures BioMoléculaires du LIDYL est impliqué dans une action, financée par l'ANR (Projet TUNIFOLDS), visant à optimiser la conception de foldamères, c'est-à-dire, de polymères adoptant des structures secondaires variées, comme des hélices ou des rubans. La démarche s'articule selon trois niveaux, chacun d'eux comportant : i) une modélisation théorique caractérisant les systèmes, ii) leur synthèse et iii) leur caractérisation par spectroscopie laser, notamment.</p> <p>Le premier niveau traitera des briques élémentaires de ces foldamères et des liaisons Hydrogène qui les stabilisent. Le second traitera des dimères de ces briques élémentaires, notamment pour documenter leur flexibilité et comprendre comment les liaisons H internes aux briques élémentaires la contrôlent. Enfin, dans un troisième temps des oligomères de plus grande taille seront considérés.</p> <p>L'objectif du stage se concentrera sur le second niveau et visera à caractériser les liaisons H internes à une série de dimères de briques élémentaires de foldamères, toutes contenant un hétéroatome S. Pour chacune d'elles, le paysage conformationnel sera exploré avec une description énergétique réalisé par les méthodes de champs de force, puis raffiné au niveau chimie quantique. Le spectre infrarouge de chacune des conformations moléculaires importantes sera obtenu par chimie quantique, en vue de la confrontation avec des spectres des molécules isolées en détente supersonique, actuellement en cours d'enregistrement au laboratoire par un post-doctorant présent pendant le stage et assurant un lien entre expérience et théorie.</p> <p><i>The group " BioMolecular Structures" at LIDYL" is involved in an ANR-funded research project (Project TUNIFOLDS), aiming to optimize the design of foldamers, i.e., polymers adopting various secondary structures, such as helices or ribbons. The approach is articulated according to three levels, each of them comprising: i) a theoretical modeling characterizing the systems, ii) their organic synthesis and iii) their characterization by laser spectroscopy. The first level deals with elementary bricks of these foldamers and the hydrogen bonds that stabilize them. The second will deal with the dimers of these elementary bricks, with a focus onto their flexibility and the intramolecular H bonds that control their structure. Finally, in a third time oligomers of larger size will be considered. The objective of the internship will focus on the second level and will aim to characterize the internal H bonds to a series of elementary bricks dimers of foldamers, all containing a heteroatom S. For each of them, the conformational landscape will be explored with a description energy generated by force field methods, then refined at the level of quantum chemistry. The infrared spectrum of each of the important molecular conformations will be obtained by quantum chemistry. The experimental spectra of the isolated molecules in a supersonic expansion will be recorded in the laboratory by a post-doctoral fellow during the internship, which will ensure a fruitful synergy between experiment and theory.</i></p>
--

Ce stage pourra-t-il se prolonger en thèse ? Possibility of a PhD ? : Non			
Si oui, financement de thèse envisagé/ financial support for the PhD: -			
Lumière, Matière, Interactions	X	Lasers, Optique, Matière	