

Proposition de sujet d'alternance 1A

2025-26

| | | |
|--------------------------|--|--|
| Laboratoire: | ISm2 - Campus St. Jérôme | |
| Titre du sujet : | Une stratégie computationnelle pour l'étude de molécules chirales | |
| Candidat : | | |
| Encadrant(s) : | Premier tuteur | Second tuteur |
| Nom : | NAVA | CARISSAN |
| Prénom : | Paola | Yannick |
| Qualité : | MCF | Prof. |
| Localisation : | Campus St-Jérôme | Campus St-Jérôme |
| Coordonnées (e-mail/tel) | (33) +4.13.94.56.89 | |

Descriptif du sujet et de la mission :

Certaines molécules, appelées **molécules chirales**, peuvent exister sous deux formes différentes qu'on appelle **énanthiomères**. Ces deux formes sont comme une main gauche et une main droite : elles se ressemblent beaucoup, mais ne sont pas superposables. Même si elles ont presque les mêmes propriétés, elles se comportent différemment quand on les éclaire avec de la lumière polarisée ou quand elles interagissent avec des récepteurs chiraux. Pour étudier ces molécules, les scientifiques utilisent différentes techniques. On peut les séparer et analyser leur spectre grâce à une méthode appelée **dichroïsme circulaire électronique (ECD)**. Mais cette méthode seule ne suffit pas toujours pour savoir exactement de quelle forme (énanthiomère) il s'agit. S'il n'est pas possible de cristalliser la molécule, on peut utiliser des calculs sur ordinateur pour faire des prédictions.

L'objectif de cette recherche est de constituer une **base de données** pour mieux comprendre et prédire le spectre ECD de nouvelles molécules chirales. Dans un second temps, cette base de données pourra alimenter un ensemble d'entraînement d'une IA. Des calculs seront réalisés sur des molécules de plus en plus grandes, avec différentes méthodes. L'étude portera ensuite sur des cages moléculaires chirales, qui peuvent exister sous plusieurs formes en solution et même changer de propriétés selon les conditions, comme le type de solvant. Cette base de données servira de référence pour aider les chercheurs à mieux analyser et identifier les molécules chirales à l'avenir.

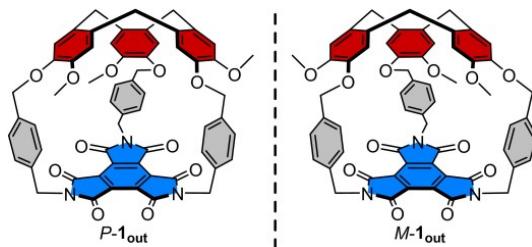


Figure 1: Exemple de molécule chirale

Ce projet s'inscrit pleinement dans le domaine de la chimie théorique et computationnelle. L'ensemble du travail repose sur la mise en œuvre de méthodes de modélisation et de simulation moléculaire, réalisées à l'aide de logiciels spécialisés exécutés sur des supercalculateurs (infrastructures de calcul haute performance). L'alternant développera ainsi des compétences en modélisation numérique, analyse de données et utilisation d'architectures de calcul intensif, sans exposition aux risques liés aux manipulations expérimentales classiques.

Validation pour mise en ligne ECM :