

## **Chim 502n : Projet de recherche**

Le projet de recherche se compose d'un stage de recherche en laboratoire associé à un projet de détermination de structure par RMN et un projet de modélisation moléculaire, tous deux en rapport avec le sujet de stage de laboratoire.

### **Stage de recherche en laboratoire :**

Le travail de l'étudiant, pendant le stage est essentiellement une initiation à la recherche en Chimie Organique et à ses méthodes, notamment aux grandes méthodes de synthèse et aux méthodes de détermination des structures. Cette formation pratique à la recherche implique le choix par l'étudiant d'un sujet de stage dans un laboratoire de recherche situé dans l'un des nombreux centres de recherche de Chimie Organique de l'Université de Paris-Sud et du Sud de Paris affilié au M2R:

- Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay (Orsay)
- ENS (Cachan)
- Institut de Chimie des Substances Naturelles (Gif sur Yvette)
- Institut Curie (Orsay)
- Laboratoires du C.E.A. (Saclay et Hôpital d'Orsay).
- Ecole Polytechnique (Palaiseau)

Mi novembre, une présentation des différents sujets de stage proposés est effectuée par les responsables de laboratoire ou les encadrants concernés. A l'issue de cette présentation, chaque étudiant du M2 pourra présenter sa candidature dans les laboratoires proposant les sujets correspondant le plus à ses aspirations. En fonction de l'organisme dont le laboratoire dépend, une attention toute particulière devra être apportée à respecter les délais permettant un début de stage mi-janvier après la semaine de formation à l'analyse des composés organiques par RMN et leur modélisation par Modélisation Moléculaire (voir ci dessous).

Fin juin, l'étudiant doit rendre un rapport sur ses travaux de recherche. Des détails sur la rédaction de ce rapport lui sont donnés en cours d'année. Une soutenance orale du rapport de stage est organisée fin juin.

### **Stage d'une semaine de formation à "l'analyse par RMN et modélisation des molécules organiques » - (2<sup>ème</sup> semaine de janvier) et projets "RMN" et "Modélisation Moléculaire"**

*Par C. Aroulanda, Maître de Conférences, Université Paris-Sud 11, ICMMO.*

Applications des méthodes de la RMN 2D aux problèmes d'analyse de la structure chimique et tridimensionnelle de molécules organiques ou bio-organiques en solution. Relations entre mouvements moléculaires et relaxation : introduction à la relaxation en RMN, applications à la mise en évidence par RMN 2D de l'effet Overhauser Nucléaire et approche de la dynamique. L'enseignement est divisé en deux parties complémentaires : une première partie en promotion entière comprenant les bases théoriques de la RMN 2D ainsi que des exercices d'applications, et une introduction à la relaxation RMN permettant d'étudier la dynamique des molécules ; une seconde partie dédiée à un enseignement expérimental se déroulera en groupes d'étudiants n'excédant pas 6 à 8 personnes et permettra à chaque

étudiant d'appliquer sur un spectromètre RMN les concepts et techniques vus précédemment.

*Par I. Demachy, Professeur, Université Paris-Sud 11, LCP et B. Vauzeilles, CR CNRS, ICMMO, Orsay.*

Applications des méthodes de modélisation moléculaire à la détermination de structures de molécules organiques ou bio-organiques. Présentation des principes et mise en pratique des approches théoriques en chimie quantique et modélisation moléculaire, basées sur des exemples adaptés à la chimie organique. Les enseignements se dérouleront par demi-groupes d'étudiants en salle multimédia.

L'évaluation des connaissances acquises au cours de cette semaine de stage se fera au travers de projets en relation avec le sujet du stage de recherche.

*Projet "Détermination structurale par analyse RMN multidimensionnelle"*

Chaque étudiant du M2 fera valider, par les enseignants de RMN Multidimensionnelle, un projet d'étude sur une molécule en lien avec son stage de recherche. Une séance de TD en présence des enseignants lui permettra préliminairement de discuter des techniques nécessaires à la réalisation de son projet, et qui pourront être appliquées par la suite par l'étudiant.

*Projet de modélisation moléculaire*

Chaque étudiant du M2 fera valider, par les enseignants de modélisation moléculaire, un projet de modélisation en lien avec son sujet de stage de recherche. Une séance de TD en présence des enseignants lui permettra de démarrer, dans des conditions optimales, les calculs nécessaires à la réalisation de son projet avant de les compléter par lui même pour finaliser le projet.

Pour chaque projet, une soutenance orale de 10 minutes sera organisée, en présence des enseignants concernés, pour évaluer les connaissances acquises par l'étudiant dans le domaine ainsi que son travail effectué sur son projet.