

La géométrie des molécules

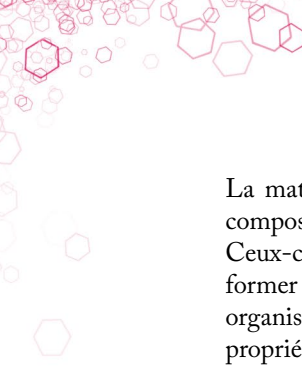
+ CHIMIE EXPÉRIMENTALE ET INFORMATIQUE



Guilhem JAVIERRE Je suis jeune chercheur de l'université d'Aix-Marseille en chimie au sein de l'iSm2*. Ce laboratoire étudie l'impact de la structure des molécules sur leurs propriétés. Les chercheurs y élaborent également des molécules de synthèse qui présentent une géométrie particulière. Dans cette optique, j'étudie le changement de géométrie de certaines molécules au cours de réactions. Pour cela, je réalise des expériences et des simulations pour analyser et comprendre le comportement des molécules dans différentes conditions.

* Institut des sciences moléculaires de Marseille

« Analyser le comportement de la matière et l'expliquer au plus près de l'atome est ce qui m'a motivé à faire de la recherche. »



La matière tout autour de nous est composée de différents atomes. Ceux-ci peuvent s'assembler pour former des molécules qui, selon leur organisation structurale, auront des propriétés différentes. La structure de certaines molécules leur permet d'exister sous plusieurs formes malgré une même composition atomique. Deux configurations d'une même molécule auront de nombreuses propriétés en commun, mais pourront aussi être très différentes d'une configuration à une autre. Par exemple, il existe une molécule qui est un médicament lorsqu'elle est dans une certaine configuration mais s'avère être un poison mortel dans une autre. Il est donc important de comprendre comment on peut synthétiser la configuration désirée et la conserver une fois formée.

Pour comprendre quels facteurs agissent sur la stabilité d'une configuration, j'effectue des expériences pour observer le

comportement des molécules dans différentes conditions. Je peux par exemple faire varier la température, les diluer dans un solvant, etc. Cela me permet d'émettre des hypothèses sur chaque facteur et son impact. À partir de ces observations, j'effectue des simulations sur ordinateur pour tenter de reproduire le phénomène et d'observer le comportement des molécules à l'échelle atomique. Les résultats des expériences sont ensuite comparés à ceux des simulations afin de vérifier mes hypothèses.

À l'issue de mes recherches, j'espère pouvoir déterminer les facteurs qui influencent la formation d'une configuration plutôt qu'une autre et comprendre leur rôle. Ainsi, il sera possible de former une molécule dans la configuration voulue et la conserver. Cela permettra d'améliorer les synthèses de produits structurellement purs comme les médicaments.

Les objectifs

- + Comprendre quels facteurs influencent le choix de la molécule pour une configuration plutôt qu'une autre
- + Améliorer et faciliter la synthèse de molécules structurellement pures et savoir les conserver