IRAMIS : Institut Rayonnement Matlère de Saclay

Saclay

NIMBE/LSDRM

Simulation ab initio d’un nouveau catalyseur pour la chimie verte

Spécialité CHIMIE

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil NIMBE/LSDRM

Candidature avant le 20/04/2023

Durée 6 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact POLLET Rodolphe
+33 1 69 08 37 13
rodolphe.pollet@cea.fr

Résumé

Ce projet du domaine de la chimie verte se propose de simuler à l'échelle atomique le mécanisme d'hydratation du benzonitrile en phase aqueuse à 80 °C en présence d'un catalyseur non toxique. L'approche théorique retenue couple dynamique moléculaire ab initio et métadynamique.

Sujet détaillé

La catalyse est l’un des enjeux majeurs de la chimie verte. Par exemple, la conversion d’un nitrile vers un amide, qui donne lieu à de nombreuses applications industrielles, par hydratation nécessite un catalyseur efficace en raison de sa lente cinétique. L’utilisation d’un catalyseur sans métal de transition, ayant un impact réduit sur l’environnement (non toxique) et disponible à un coût modeste, est fortement recommandée dans le cadre de la chimie verte.

En collaboration avec l’équipe du professeur Biswal en Inde, à l’origine de l’utilisation de l’hydroxyde de choline (ChOH) pour catalyser cette réaction d’hydratation1, ce projet consistera à modéliser les différentes étapes du mécanisme réactionnel dans le cas du benzonitrile dans l’eau à 80 °C et de vérifier l’hypothèse du rôle crucial des liaisons hydrogène. L’approche théorique retenue est la simulation par dynamique moléculaire ab initio couplée à une méthode qui permet de reconstruire le paysage d’énergie libre de la réaction, la métadynamique. Cette approche a déjà été utilisée avec succès au sein de notre laboratoire pour décrire d’autres réactions chimiques en phase aqueuse2-4.

1 S. Choudhury, S. Mahapatra, Biswal, Himansu, Green Chemistry. 24 4981 (2022)
2 R. Pollet, W. Chin, J. Phys. Chem. B 125 2942 (2021)
3 R. Pollet, C. S. Bonnet, P. Retailleau, P. Durand, E. Toth, Inorg. Chem. 56 4317 (2017)
4 R. Pollet, N. Nair, D. Marx, Inorg. Chem. 50 4791 (2011)

Mots clés

Chimie verte, chimie théorique

Compétences

Simulations par dynamique moléculaire ab initio

Logiciels

Code CPMD

Ab initio simulation of a new catalyst for green chemistry

Summary

This project in the field of green chemistry proposes to simulate at the atomic scale the hydration mechanism of benzonitrile in aqueous phase at 80 °C in the presence of a non toxic catalyst. The theoretical approach chosen couples ab initio molecular dynamics and metadynamics.

Full description

Catalysis is one of the major challenges of green chemistry. For example, the conversion of a nitrile to an amide, which gives rise to many industrial applications, by hydration requires an efficient catalyst because of its slow kinetics. The use of a transition metal-free catalyst, having a reduced impact on the environment (non-toxic) and available at a modest cost, is strongly recommended in the context of green chemistry.

In collaboration with Professor Biswal's team in India, who initiated the use of choline hydroxide (ChOH) to catalyze this hydration reaction1, this project will consist in modeling the different steps of the reaction mechanism in the case of benzonitrile in water at 80 °C and to verify the hypothesis of the central role of hydrogen bonds. The theoretical approach chosen is the ab initio molecular dynamics simulation coupled with a method that allows the reconstruction of the free energy landscape of the reaction, the metadynamics. This approach has already been successfully used in our laboratory to describe other chemical reactions in aqueous phase2-4.

1 S. Choudhury, S. Mahapatra, Biswal, Himansu, Green Chemistry. 24 4981 (2022)
2 R. Pollet, W. Chin, J. Phys. Chem. B 125 2942 (2021)
3 R. Pollet, C. S. Bonnet, P. Retailleau, P. Durand, E. Toth, Inorg. Chem. 56 4317 (2017)
4 R. Pollet, N. Nair, D. Marx, Inorg. Chem. 50 4791 (2011)

Keywords

Skills

Ab initio molecular dynamics simulations

Softwares

Code CPMD