

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2020/2021



A envoyer à Mme Pr Camproux

anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise :

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité : CNRS

Adresse précise du Laboratoire :

IPVF

18 boulevard Thomas Gobert

91120 PALAISEAU

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Mme SCHNEIDER Nathanaëlle

E-mail : : n.schneider@cnrs.fr

Nom du Responsable du stage : Mme SCHNEIDER Nathanaëlle

Téléphone : +33 (0)1 69 86 59 56

E-mail : n.schneider@cnrs.fr

HDR : non

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : Méthodes structure-activité (QSAR/QSPR), Programmation Python, Programmation R, Développement WEB, Linux, Machine Learning, Chimie générale.

Titre du stage :

Développement d'un outil de prédiction de la volatilité de composés organométalliques

Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : ~~Oui~~ - Non

Description du sujet (quelques lignes) :

L'IPVF utilise de nombreuses techniques de dépôts de couches minces, en solutions ou sous vide. Elle élabore de nouveaux procédés de synthèse originaux, dont certains sont basés sur l'utilisation de molécules organométalliques, qui doivent répondre notamment à des critères de volatilité.

L'IPVF possède un programme commun transverse où sont développés ces outils d'apport de la simulation et de la modélisation aux projets de recherche

Le but de ce stage est de contribuer au développement d'un outil de simulation des propriétés thermogravimétriques de molécules organométalliques.

MISSIONS PRINCIPALES :

- Procéder à une évaluation critique de l'outil existant
- Participer au développement de la base de données de molécules
- Comprendre, modifier et faire évoluer les scripts existants
- Evaluer l'outil final et participer à sa valorisation
- Développer un outil accessible à la communauté scientifique

Retour par e-mail : anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr