

## **Etude théorique *ab initio* de la réactivité de polluants atmosphériques**

Ce travail se propose d'utiliser les outils de chimie théorique afin de contribuer à une meilleure compréhension de la réactivité de systèmes réactionnels d'intérêt atmosphérique.

Le but est de préciser tous les facteurs influençant les vitesses de réaction. Il est donc important de connaître les mécanismes des voies élémentaires et l'influence de différents paramètres (température, pression) sur les constantes de vitesse déterminées théoriquement. L'objectif de ce stage est de fournir des données structurales, énergétiques et cinétiques pour des réactions élémentaires. Ces données seront calculées grâce aux outils de la chimie quantique, de la thermodynamique statistique et des théories cinétiques et seront comparées aux données disponibles dans la littérature.

Le stagiaire sera tout d'abord initié à l'utilisation de logiciels de chimie quantique. Les systèmes étudiés seront choisis en fonction des thématiques de recherche conduites au sein de notre Laboratoire.

### Techniques utilisées :

Méthodes théoriques de chimie quantique –utilisation des logiciels Gaussian 03 et VASP  
Méthodes d'estimation de paramètres cinétiques et de grandeurs thermodynamiques

### Domaines de compétence :

Chimie quantique, cinétique, thermodynamique

### Lieu du stage :

UMR CNRS 8522 "Physicochimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère (PC2A)"  
Bât. C11, Université des Sciences et Technologies de Lille 59655 Villeneuve d'Ascq

### Responsables du stage :

Florent LOUIS, Tél. : 03-20-33-63-32 ; Mail : [florent.louis@univ-lille1.fr](mailto:florent.louis@univ-lille1.fr)

Sébastien CANNEAUX, Tél : 03-20-43-49-85 ; Mail : [sebastien.canneaux@univ-lille1.fr](mailto:sebastien.canneaux@univ-lille1.fr)