



Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:

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

IPVF – Institut du Photovoltaïque d'Ile-de France

Adresse précise du Laboratoire :
IRDEP-UMR7174 (EDF/CNRS/ENSCP)
IPVF
30 RD128 - 91120 Palaiseau, France

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Jean-Baptiste PUEL
E-mail : jean-baptiste.puel@edf.fr

Nom du Responsable du stage :

Téléphone : 01 69 86 59 56
E-mail : n.schneider@chimie-paristech.fr
HDR : non

Ecole doctorale de rattachement : ED 397 - Physique et chimie des matériaux

Spécialité du stage : Recherche X Professionnel X

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet :

Cheminformatique, méthodes structure-activité (QSAR/QSPR)

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 : 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.

Sous la responsabilité de Nathanaelle SCHNEIDER (Chargée de recherche CNRS) et Jean-Baptiste PUEL (Ingénieur-Chercheur EDF) le stagiaire sera amené à : (i) Procéder à une évaluation critique de l'outil existant, (ii) Participer au développement de la base de données de molécules, (iii) Comprendre, modifier et faire évoluer les scripts existants, (iv) Evaluer l'outil final et participer à sa valorisation.