Laboratoire d'Archéologie Moléculaire et Structurale - UMR 8220

Stage de Master 2 (5 – 6 mois)

Modélisation de pigments utilisés en science du patrimoine

Responsable de stage : Romain Berraud-Pache
Contact : romain.berraud-pache@sorbonne-universite.fr *http://www.umr-lams.fr/berraud-pache*
Laboratoire d'accueil : LAMS, Laboratoire d'Archéologie Moléculaire et Structurale, Sorbonne-Université, Paris

Projet scientifique du stage:

Dans les œuvres du patrimoine, les peintures sont obtenues à partir d'un mélange de pigments et de liants comme de l'huile ou de l'œuf. On recense aujourd'hui une considérable variété de pigments aussi bien en termes de couleur que de composition chimique. Les caractériser et les étudier permet de mieux comprendre leur rôle et interaction dans l'œuvre mais aussi de les préserver. C'est dans ces problématiques que le LAMS possède une forte expérience, aussi bien dans l'analyse non-destructive des œuvres du patrimoine que dans la reproduction des recettes des pigments et de teintures afin d'élucider les problèmes de conservation.

L'objectif de ce stage est d'utiliser la chimie computationnelle pour modéliser la structure et les propriétés physico-chimiques de pigments utilisés dans les sciences du patrimoine. Classiquement, les pigments correspondent à des structures cristallines périodiques constituées de différents métaux, ligands et organisation structurales. Parmi les systèmes d'intérêt on peut citer le blanc de plomb (carbonate de plomb), le rouge vermillon (sulfure de mercure) ou le bleu azurite (carbonate de cuivre). Deux approches de modélisation seront étudiées et comparées. La 1ère, dite «périodique»[1] s'intéresse à modéliser une maille caractéristique du cristal avant de calculer ses propriétés. La 2nde plus récente et moins développée, dite «cluster»[2], cherche à modéliser précisément un petit ensemble d'atomes (cluster) du système, le reste étant traitée de façon approchée. Cette approche permet ainsi de calculer plus précisément les propriétés locales du système.

Le stage consistera à mettre en œuvre ces deux approches sur plusieurs pigments étudiés au laboratoire, puis à comparer leurs résultats. Pour cela on calculera certaines propriétés spectroscopiques d'intérêt comme les spectres UV-Vis, IR et RMN ainsi que leur couleur. Selon l'avancée du stage, on pourra également s'intéresser aux phénomènes de dégradation et de perte de couleur des pigments, souvent liés à une réorganisation électronique ou structurale de la maille cristalline. Ce stage se traduit majoritairement par une approche computationnelle mais pourra être accompagnée par des mesures expérimentales et spectroscopiques au laboratoire.

Connaissances et compétences requises pour les candidats:

Master en physique chimie, compétences de base en informatique, intérêt pour la chimie computationnelle. Un bon niveau en anglais est également demandé.

Candidature : Merci d'envoyer un CV et lettre de motivation à romain.berraud-pache@sorbonne-universite.fr

Références :

(1) Errandonea, D.; Muñoz, A.; Rodríguez-Hernández, P.; Proctor, J. E.; Sapiña, F.; Bettinelli, M. Theoretical and Experimental Study of the Crystal Structures, Lattice Vibrations, and Band Structures of Monazite-Type PbCrO4, PbSeO4, SrCrO4, and SrSeO4. Inorganic Chemistry 2015, 54 (15), 7524-7535. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.5b01135.
(2) Dittmer, A.; Izsak, R.; Neese, F.; Maganas, D. Accurate Band Gap Predictions of Semiconductors in the Framework of the Similarity Transformed Equation of Motion Coupled Cluster Theory. Inorg Chem 2019, 58 (14), 9303-9315. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b00994.