

**MASTER DE CHIMIE DE PARIS CENTRE - M2S2**  
**Proposition de stage 2015-2016**  
**Internship Proposal 2015-2016**

**Spécialité(s) / Specialty(ies) :**

Chimie Analytique, Physique, et Théorique / *Analytical, Physical and Theoretical Chemistry* :

**Laboratoire d'accueil / Host Institution**

Intitulés / *Name* : Laboratoire PHysicochimie des Electrolytes et Nanosystèmes Interfaciaux

Adresse / *Address* : 4 Place Jussieu, 75005 Paris

Directeur / *Director (legal representative)* : Pierre LEVITZ

Tél / *Tel* : 01 44 27 31 66

E-mail : pierre.levitz@upmc.fr

**Equipe d'accueil / Hosting Team :**

Adresse / *Address* : Modélisations et Expériences Multi-échelles

Responsable équipe / *Team leader* : Marie JARDAT

Site Web / *Web site* : <http://www.phenix.cnrs.fr/>

Responsable du stage (encadrant) / *Direct Supervisor* : Virginie MARRY

Fonction / *Position* : Professeur

Tél / *Tel* : 01 44 27 22 03

E-mail : virginie.marry@upmc.fr

Période de stage / *Internship period* \* : février-juin 2015

***Modélisation de l'adsorption de nucléotides sur les argiles***

**Projet scientifique (1 page maximum) / Scientific Project (maximum 1 page):**

1. *Projet / Project*

Les mécanismes à l'origine du développement de molécules biotiques à partir de molécules organiques restent encore largement incompris à l'heure actuelle. L'une des questions posées concerne le rôle des surfaces minérales qui auraient pu participer à la condensation et à la polymérisation des nucléotides et des acides aminés pour former les premiers biopolymères (protéines et acides nucléiques). On se propose ici d'étudier, en lien avec des expérimentateurs impliqués dans le projet PREBIOM financé par l'Agence Nationale de la Recherche, l'adsorption de certains nucléotides sur des surfaces argileuses par dynamique moléculaire classique. Des mesures d'adsorption ont en effet montré que les surfaces d'argile ne présentaient pas les mêmes propriétés selon leur charge (négative ou neutre), et qu'un ribonucléotide, ne se différenciant de son désoxyribonucléotide que par la présence d'un hydroxyle supplémentaire sur son cycle pentose, pouvait présenter des propriétés d'adsorption très différentes de ce dernier [1]. Des simulations à l'échelle atomique du système argile/eau/nucléotide devraient permettre d'élucider en partie les mécanismes à l'origine de ces différences et donc d'aider à l'interprétation des expériences. Le stagiaire bénéficiera de l'expertise de longue date des membres modélisateurs et expérimentateurs de l'équipe MEM dans l'étude des systèmes argileux [1-3].

2. *Techniques ou méthodes utilisées / Specific techniques or methods*

\* 5 mois à partir du 18 janv 2016 / 5 months not earlier than January, 18th 2016.

La dynamique moléculaire classique sera employée (code lammps). Des techniques d'intégration thermodynamique seront utilisées pour calculer les profils d'énergie libre lors de l'adsorption de nucléotides sur les surfaces d'argile.

### 3. Références / *References*

- [1] Feuillie,C., Daniel,I., Michot,L. and Pedreira-Segade,U., 2013, Adsorption of ribonucleotides to Fe-Mg-Al rich swelling clays, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **120**, 97-108
- [2] Marry,V., Dubois,E., Malikova,N., Breu,J., Haussler,W. 2013, Anisotropy of water dynamics in clays : Insights form molecular simulations for experimental QENS analysis, *Journal of Physical Chemistry C*, **117**, 15106-15115.
- [3] Rotenber,B., Marry,V., Vuilleumier,R., Malikova,N. Simon,C., Turq,P., 2007, Water and ions in clays : Unraveling the interlayer/microcopore exchange using molecular dynamics, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **71**, 5089-5101.