

## Molecular Dynamics Simulations of lipidic membranes adsorbed on smooth and rough solid substrates

**Laboratory :** Institut Lumière Matière (UMR5306 CNRS / UCBL)

**Team :** Theoretical Physical Chemistry

Domaine Scientifique de la Doua,  
Université Claude Bernard Lyon 1 (Bât. A. Kastler)  
43, bd du 11 Novembre 1918  
69622 Villeurbanne cedex

**Contact** : Claire LOISON  
**email** : claire.loison@univ-lyon1.fr  
**phone** : 04 72 43 12 57

**Key words :** soft matter, numerical simulations, biomimetic lipidic membranes.

**Motivations** Lipidic bilayers are commonly used in laboratories as model for biological membranes (cellular plasma membranes for example). Since there are very thin, and fluid, it can be more handy to investigate or use them adsorbed on a solid substrate like glass [1]. The interaction of the membrane with the support may impact the physico-chemical properties of these membranes (stability, elasticity, dynamics,...). Molecular dynamics simulations permit to describe such lipidic bilayers in various environments, and to investigate their properties at the nanoscale [2].

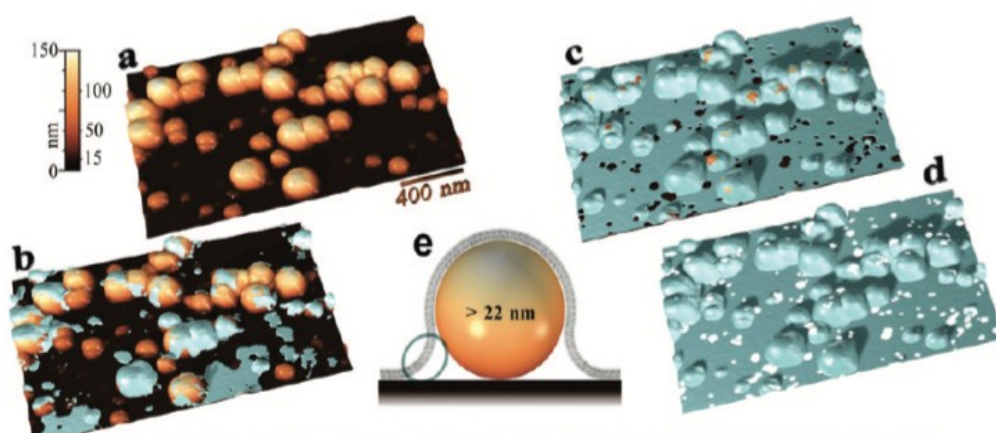


Figure extracted from Roiter et al. *Interaction of Lipid Membrane with Nanostructured Surfaces*. *Langmuir*. 2009;25(11):6287-6299. Experimental study with atomic force microscopy images of solids supports decorated with nanoparticles of different sizes (yellow), on which lipid bilayers adsorb. Depending on the size of the particle, the lipidic bilayer covers the particle, or forms a pore.

**Objectives** A former student developed a protocol to simulate lipidic membrane adsorbed on a smooth solid using a coarse-grain molecular model. The objective of this internship is to generalize this work to lipidic bilayers adsorbed on rough surfaces. The results from the work will permit to describe in more details the differences between free and adsorbed surfaces, and rationalize the structure of adsorbed membranes.

**Candidate** The student should feel a strong interest for soft matter and biological matter, have some basics knowledge of statistical mechanics. She/he should appreciate to work with computers and to program (linux, python, ...).

**References** [1] Munteanu B., Harb F., Rieu J.P., Berthier Y., Tinland B., Trunfio-Sfarghiu A.M., *European Physical Journal E*, vol. 37, p. 72 (2014) [2] Falk K., Fillot N., Sfarghiu A.M., Berthier Y., Loison C. *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 16, p. 2154-2166 (2014).

## Simulations par dynamique moléculaires de membranes lipidiques adsorbées sur des substrats plans et rugueux

**Laboratoire:** Institut Lumière Matière (UMR5306 CNRS / UCBL)

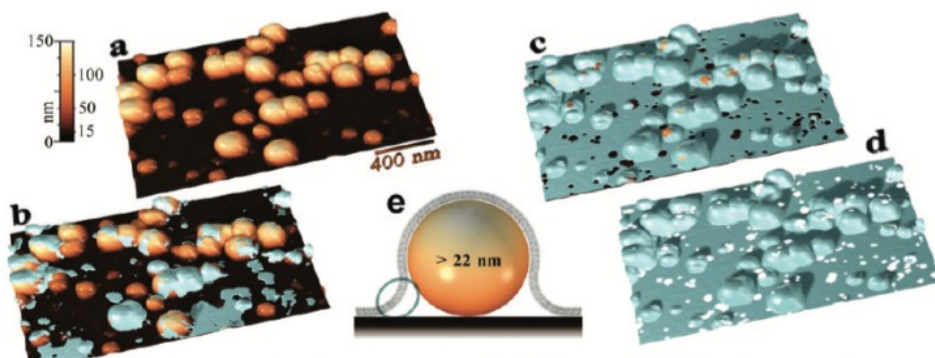
**Team :** Physico-Chimie Théorique

Domaine Scientifique de la Doua,  
Université Claude Bernard Lyon 1 (Bât. A. Kastler)  
43, bd du 11 Novembre 1918  
69622 Villeurbanne cedex

**Contacts** : Claire LOISON  
**email** : claire.loison@univ-lyon1.fr  
**tel** : 04 72 43 12 57

**Mots clé:** matière molle, simulations numériques, membranes biomimétiques.

**Motivations** Les bicouches phospholipidiques sont utilisées communément en laboratoire de recherche comme modèles de membranes biologiques (des membranes cellulaires par exemple). Comme elles sont fluides, très fines et molles, il peut être favorable de les déposer sur un substrat solide, par exemple des plaques de verre [1]. Les interactions des membranes avec le solvant et avec le substrat peuvent cependant influencer les propriétés physico-chimiques des membranes (stabilité, élasticité, etc). Les simulations par dynamique moléculaire permettent de décrire à l'échelle moléculaire des bicouches lipidiques dans différents environnements, en particulier l'impact de l'environnement sur leur structure et leur dynamique à l'échelle du nanomètre [2].



*Etude expérimentale par microscopie à force atomique (AFM) de surfaces de silicium couvertes de nanoparticules de différentes tailles, sur lesquelles une biouche lipidique vient se former. En fonction de la taille des particules, la membrane va les recouvrir ou bien former des pores. Extrait de Roiter et al. Interaction of Lipid Membrane with Nanostructured Surfaces. Langmuir. 2009;25(11):6287-6299.*

**Objectifs** Un précédent étudiant a développé un protocole pour simuler des membranes lipidiques sur un substrat quasiment plan avec une modélisation moléculaire dite à "gros grain". Le but du stage est d'étendre ces résultats à des situations plus variées, en particulier à voir l'effet de la rugosité ou d'un défaut du substrat. Les résultats du travail permettront de mieux comprendre les différences entre des membranes adsorbées et des membranes libres, et de rationaliser les mécanismes intervenant dans la préparation de membranes supportées.

**Candidat** L'étudiant devra avoir un fort intérêt pour la matière molle ou biologique, des connaissances de physique statistique, et être motivé par la modélisation sur ordinateur (linux, python,...).

**Ouverture vers un sujet de thèse :** Le stage pourra se poursuivre en thèse.

Type de financement envisagé : Ecole doctorale

**Références** [1] Munteanu B., Harb F., Rieu J.P., Berthier Y., Tinland B., Trunfio-Sfarghiu A.M., European Physical Journal E, vol. 37, p. 72 (2014) [2] Falk K., Fillot N., Sfarghiu A.M., Berthier Y., Loison C. Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 16, p. 2154-2166 (2014).