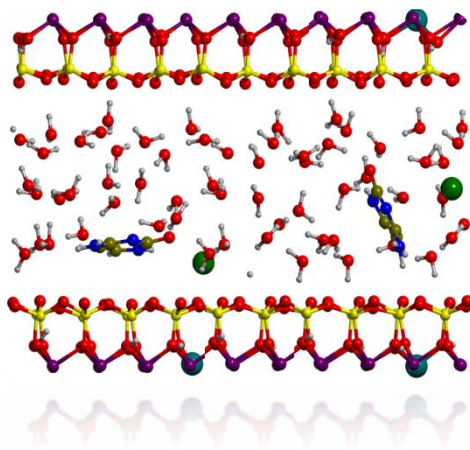


## Etude théorique des processus d'adsorption de nucléotides sur des surfaces minérales argileuses.



**Superviseur :** Mignon Pierre  
**Contact :** [pierre.mignon@univ-lyon1.fr](mailto:pierre.mignon@univ-lyon1.fr)  
**Laboratoire :** Institut Lumière Matière  
**Responsable du laboratoire :** Philippe Dugourd  
**Equipe :** Physico-chimie théorique

Dans le cadre de l'apparition des premiers oligomères d'ARN sur terre, les propriétés physico-chimiques favorisant l'adsorption et la polymérisation de nucléotides sur les argiles restent une question ouverte. Des isothermes d'adsorption de Langmuir et des données de diffraction des rayons X récents ont permis de mettre en évidence différents processus d'adsorption en fonction des conditions (surface minérale, température, pression, pH, sel). Il est supposé que le mode principal d'adsorption soit réalisé par échange de ligand avec le groupement phosphate sur les bordures des feuillets d'argiles. Une deuxième possibilité implique les cations en solutions permettant un pontage avec la surface basale de l'argile.

Le but du stage est de modéliser par simulation atomistiques les processus d'adsorption de nucléotides sur les surfaces de l'argile. Pour cela des simulations multi-échelles faisant intervenir des calculs quantiques *ab-initio* et des calculs de mécanique moléculaire seront mis en œuvre. Différents processus d'adsorption seront explorés par dynamique moléculaire sur différentes échelles de temps et de taille du modèle afin d'évaluer les modes et les énergies libres d'adsorption et les interactions mises en jeu. Aussi différentes conditions (pH, variation des types d'argiles et des sels en solutions, ...) seront considérées et les grandeurs obtenues seront comparées avec les valeurs expérimentales. Etant donné le champs d'utilisation/action des argiles cette étude amènera aussi des éléments de réponses à différents types d'investigations tels que le drug-delivery, la pollution des sols, le confinement de déchets nucléaires, ...

Un financement de 4 mois minimum est prévu pour ce stage pour l'année 2019. Merci de contacter Mr. Mignon.