

## **Intitulé de la thèse : Etude et comparaison de moteurs moléculaires artificiels et biologiques par simulation numérique.**

**Contact :** [Victor.Teboul@univ-angers.fr](mailto:Victor.Teboul@univ-angers.fr)

Mots clefs: Moteurs moléculaires\*\* dans les liquides, nanotechnologies, nano-biomimétisme.

Objectifs: Concevoir des moteurs moléculaires efficaces pour des mouvements à l'intérieur de liquides et au voisinage d'interfaces.

La conception de moteurs moléculaires simples est un enjeu majeur en nanotechnologie [1]. Les moteurs moléculaires ont également une importance considérable en biologie (myosine, kinésine, dynéine, etc...). Concevoir de nouveaux moteurs moléculaires se heurte cependant à la difficulté de se mouvoir aux échelles nanométriques du fait de la présence du mouvement Brownien, ainsi que de l'accroissement de l'importance des effets de surface à ces échelles. Nous avons un savoir faire important en modélisation numérique des milieux hors d'équilibre [2,3] ainsi que dans la modélisation de moteurs moléculaires [4]. Nous comptons utiliser ce savoir faire pour étudier la possibilité de créer des moteurs en utilisant le nano-biomimétisme. Parallèlement nous rechercherons les tailles limites permettant de diminuer suffisamment l'effet du mouvement Brownien lorsque la statistique mésoscopique se rapproche d'une statistique macroscopique. Dans notre cas le biomimétisme correspondra au mouvement du moteur sur une surface, de manière similaire aux moteurs biologiques sur des structures tubulaires, en présence d'un potentiel extérieur anisotrope. Parallèlement, la recherche des tailles limites consistera à augmenter la taille du moteur ou diminuer la taille des molécules du milieu. Des résultats préliminaires montrent des effets significatifs dans cette direction de recherche.

Programme prévisionnel: Notre recherche se divisera en les deux axes discutés précédemment. Elle commencera par une recherche bibliographique par l'étudiant, suivie d'une modélisation analytique simplifiée et de simulations numériques. Nous étudierons dans un premier temps l'effet de la taille du moteur sur son mouvement dans le liquide, puis dans un deuxième temps nous étudierons les interactions avec une surface libre, permettant de garder le moteur au voisinage de la surface tout en laissant la possibilité du mouvement.

### Résultats et valorisation attendus:

Ce travail est principalement un travail de recherche fondamentale, très en amont des applications pouvant en résulter. Cependant il donnera lieu à des publications dans des revues internationales ainsi que des communications dans des congrès internationaux. Nous attendons de cette recherche, une meilleure compréhension des mécanismes utilisés par les moteurs biologiques ainsi qu'une meilleure compréhension des mécanismes pouvant être utilisés pour créer des moteurs moléculaires efficaces et simples. Nous espérons avoir également des retombées en terme de visibilité internationale, notamment du fait des collaborations pouvant être initiées par le projet.

Le doctorant participera à des événements ou opérations de diffusion de la culture scientifique (*Ma Thèse en 180s, Nuit des chercheurs, Fête de la science, ...*)

(\*\*) Moteurs moléculaires: Nous utilisons ici la définition élargie d'une ou plusieurs molécules pouvant se mouvoir à l'intérieur du milieu sur des échelles microscopiques ou mésoscopiques.

#### Références:

[1] Molecular devices and machines, V. Balzani et al., Wiley, Weinheim (2008)

[2] Modélisation:

Time versus temperature rescaling for coarse grain molecular dynamics simulations, J.B. Accary, V. Teboul, Journal of Chemical Physics, **136**, 094502 (2012)

A toy model mimicking cage effect, structural fluctuations and kinetic constraints in supercooled liquids, V. Teboul, Journal of Chemical Physics, **141**, 194501 (2014)

[3] Milieus hors d'équilibres:

Induced cooperative motions in a medium driven at the nanoscale: Searching for an optimum excitation period, V. Teboul, J.B. Accary, Physical Review E, **89**, 012303 (2014); V. Teboul, M. Saiddine, J.M. Nunzi, J.B. Accary, Journal of Chemical Physics, **134**, 114517 (2011)

[4] Moteurs moléculaires:

How does the motion of the surrounding molecules depend on the shape of a folding molecular motor ? S. Ciobotarescu, N. Hurduc, V. Teboul, Physical Chemistry Chemical Physics, **18**, 14654 (2016) ; V. Teboul, Journal of Physical Chemistry B, **119**, 3854 (2015); V. Teboul, R. Barille, et al., Soft Matter, **11**, 6444 (2015); V. Teboul, M. Saiddine, J.M. Nunzi, Physical Review Letters, **103**, 265701 (2009); M. Saiddine, V. Teboul, J.M. Nunzi, Journal of Chemical Physics, **133**, 044902 (2010); V. Teboul, J.B. Accary, Journal of Physical Chemistry B, **116**, 12621 (2012); V. Teboul, J.B. Accary, M. Chrysos, Physical Review E, **87**, 032309 (2013); J.B. Accary, V. Teboul, Journal of Chemical Physics, **139**, 034501 (2013)