

When natural proteins prevent water from freezing...

Keywords : ice, clathrate, proteins, molecular simulation

Some living organisms produce specific proteins that allow them to survive in extremely cold environments by inhibiting the formation or growth of ice. These proteins, called AFP (Antifreeze Proteins) thus prevent cell death by freezing.

Although known for a long time, this antifreeze phenomenon remains poorly characterized and many studies are still therefore devoted to it, in particular at the molecular level. In this context, experimental approaches become complex, expensive, requiring sophisticated technologies. Numerical computer simulations, involving stochastic methods such as molecular dynamics or Monte Carlo techniques, then represent powerful alternatives for understanding all the mechanisms involved in this particularity of the living world. Indeed, these methods allow the full characterization of both the interactions between AFPs and ice and of the growth kinetics of ice in the presence of AFPs. In a completely different context, the antifreeze properties of AFPs are used to prevent the growth of clathrates, other crystalline forms of solid water, the formation of which causing significant industrial damage, in particular for petroleum activities (pipeline clogging). Here again, simulations at the molecular scale can provide a better understanding, and therefore better control, of the corresponding phenomena.

The first part of the internship will be devoted to an in-depth bibliographic study which will allow this problem of antifreeze proteins to be placed in its scientific context, both in the field of living organisms and in that of industrial implications. At the same time, it will be necessary to become familiar with the principles of simulations by molecular dynamics and Monte Carlo, in order to understand how these techniques make it possible to model envisaged systems.

Then, the numerical part of the project will consist in using these numerical methods to simulate a simplified system, characterizing the inhibition of the growth process of hexagonal ice, then of a clathrate, by adsorption of a small molecule, under typical conditions of the environments considered. The results obtained will be analyzed by the usual methods of statistical physics.

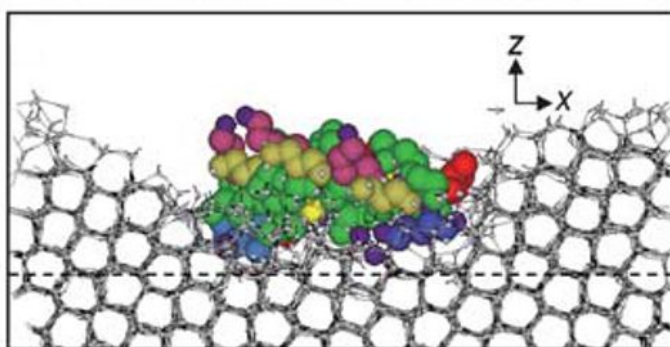


Illustration : snapshot taken from molecular dynamics simulations, showing the ice surface perturbation by the interaction with an AFP molecule [Nada and Furukawa, Polymer Journal, 2012].

Contact : Sylvain Picaud – 03 81 66 64 78 – sylvain.picaud@univ-fcomte.fr

Institut UTINAM, Bâtiment C, 3^{ème} étage, UFR Sciences et Techniques.

Quand les protéines naturelles empêchent l'eau de geler...

Mots clés : glace, clathrate, protéines, simulation moléculaire

Certains organismes vivants produisent des protéines spécifiques qui leur permettent de subsister dans des environnements extrêmement froids en perturbant la formation ou la croissance de la glace. Ces protéines, appelées AFP (Antifreeze Proteins) évitent ainsi la mort cellulaire par congélation.

Bien que connu depuis longtemps, ce phénomène antigel demeure mal caractérisé et de nombreuses études lui sont donc encore consacrées, en particulier à l'échelle moléculaire. Dans ce cadre, les approches expérimentales deviennent complexes, coûteuses, nécessitant des technologies sophistiquées. Les simulations numériques sur ordinateur, mettant en jeu des méthodes stochastiques telles que la dynamique moléculaire ou les techniques de Monte Carlo, représentent alors des alternatives puissantes pour comprendre l'ensemble des mécanismes impliqués dans cette particularité du monde vivant. En effet, ces méthodes permettent de caractériser complètement l'interaction entre les AFP et la glace ainsi que la cinétique de croissance de la glace en présence d'AFP. Dans un tout autre contexte, les propriétés antigel des AFP sont utilisées pour empêcher la croissance de clathrates, autres formes cristallines d'eau solide, dont la formation peut provoquer des dégâts industriels importants, en particulier pour les activités pétrolières (blocage des pipelines). Là encore, les simulations à l'échelle moléculaire peuvent permettre de mieux comprendre, et donc mieux contrôler, les phénomènes correspondants.

La première partie du stage sera consacrée à une étude bibliographique approfondie qui permettra de placer cette problématique des protéines antigel dans son contexte scientifique, aussi bien dans le domaine du vivant que dans celui des implications industrielles. Dans le même temps, il sera nécessaire de se familiariser avec les principes des simulations par dynamique moléculaire et Monte Carlo, afin de comprendre comment ces techniques permettent de modéliser des systèmes envisagés.

Puis, la partie « projet numérique » consistera à utiliser ces méthodes numériques pour simuler un système simplifié, caractérisant l'inhibition du processus de croissance de la glace hexagonale, puis d'un clathrate par adsorption d'une petite molécule, dans les conditions typiques des milieux étudiés. Les résultats obtenus feront l'objet d'analyses par les méthodes usuelles de la physique statistique.

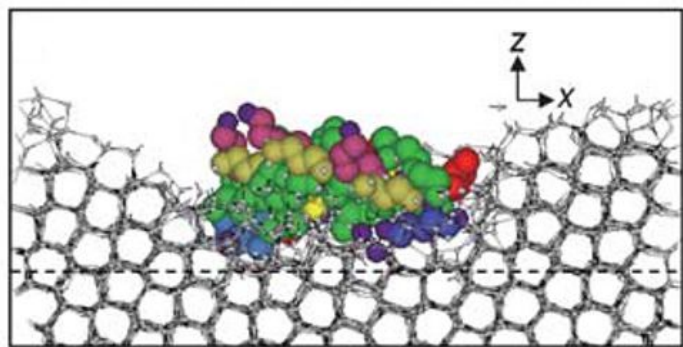


Illustration : Image extraite d'une simulation par dynamique moléculaire, montrant la perturbation de la surface de glace par l'interaction avec une protéine AFP. [d'après Nada and Furukawa, Polymer Journal, 2012]

Contact : Sylvain Picaud – 03 81 66 64 78 – sylvain.picaud@univ-fcomte.fr

Institut UTINAM, Bâtiment C, 3^{ème} étage, UFR Sciences et Techniques.