Université de Monastir
Faculté des Sciences
Département de Physique

stage de Master de Recherche en Physique
Parcours:
MNS, PQ

sujet: Modélisation de l'interaction entre une nucléobase et quelques ions métalliques

Proposé par: Chedli Ghanmi
Contact(email): ghanmigfsm@gmail.com
Structure de recherche: Laboratoire des Interfaces et des Matériaux avancées

Directeur de la structure de recherche: Mostafa Majdoub
Le sujet sera suivi par une thèse: Oui

Résumé:
Les rétrovirus, les adénovirus et tout le reigne vivant est codé par les cinq bases principales, ou canoniques, l'adénine, la cytosine, la guanine, la thymine et l'uracile, respectivement symbolisées par A, C, G, T et U. Parmi ces cinq bases, A, C, G et T sont les quatre bases de l'ADN, tandis qu'A, C, G et U sont les quatre bases de l'ARN. L'interaction des nucléobases avec des composés chimiques permet à terme de comprendre l'avènement de certaines maladies, ainsi que le développement de quelques médicaments.
Pour étudier l'interaction d'une nucléobase avec quelques ions alcalins, nous allons utiliser des méthodes de simulation numérique basées sur un formalisme de mécanique quantique.

Les travaux demandés lors de ce stage de master s'effectuent selon les étapes suivantes :
1. Faire une généralité sur les méthodes de calcul de la chimie quantique ; DFT, ab-initio, méthodes semi-empiriques …
2. Faire une généralité sur les interactions existant au sein d'un assemblage atomique et/ou moléculaire ; liaison de Van Der Walls, liaison hydrogène, …
3. Étudier les propriétés structurales, spectroscopiques et topologiques de la nucléobase en interaction avec les ions métalliques misent en jeux.
4. Étudier la stabilité et la géométrie de la nucléobase en interaction avec les ions métalliques,
5. Étudier les effets des interactions sur les propriétés structurales, électroniques et vibrationnelles de la nucléobase.

Références: