

Avis de Soutenance

Liang LI

Soutiendra publiquement ses travaux de thèse intitulés

Modélisation gros grain de macromolécules végétales : champ de force paramétré par dynamique moléculaire et application à des assemblages cellulose-xylane.

Soutenance prévue le **vendredi 20 décembre 2013** à 10h30
AgroParisTech 14 rue Girardet 54000 Nancy salle salle Jacamon 1

Composition du jury proposé

M. Patrick PERRÉ	Ecole centrale Paris	Examineur
M. Xavier FRANK	IATE, INRA, CIRAD, Montpellier SupAgro, Université Montpellier 2	Examineur
M. Jean-Yves DELENNE	IATE, INRA, CIRAD, Montpellier SupAgro, Université Montpellier 2	Rapporteur
M. Karim MAZEAU	CERMAV-CNRS Université Joseph Fourier	Examineur
M. Bernard KUREK	FARE, INRA, URCA	Rapporteur
M. André MERLIN	LERMAB Faculté des Sciences et Techniques	Examineur
M. Olivier VITRAC	INRA Massy	Examineur

Mots-clés Dynamique moléculaire, gros grain, cellulose, xylane, inversion de Boltzmann, Force-matching,

Résumé :

La compréhension de la relation structure-propriétés des parois des cellules végétales s'appuie de plus en plus sur l'utilisation d'approches de modélisation moléculaire en général et de dynamique moléculaire en particulier. A ce jour, le poids numérique que représente une telle démarche à l'échelle de l'atome est la plupart du temps incompatible avec les puissances de calcul disponibles. C'est pourquoi des méthodes d'approximation sont indispensables pour pouvoir mettre en œuvre des simulations numériques à l'échelle de systèmes supramoléculaires réalistes. Dans le cadre de cette thèse, un modèle de dynamique moléculaire, dit « gros grain » a été mis au point à l'échelle du monomère de macromolécules pariétales. Les paramètres de ce modèle ont été calibrés à l'aide de simulations de dynamique moléculaire à l'échelle de l'atome. Ce modèle a fait l'objet de quatre applications : adsorption d'une chaîne de xylane sur une surface de cellulose cristalline, arrachement d'une chaîne de xylane adsorbée sur une surface de cellulose cristalline par une pointe AFM, adsorption d'une phase amorphe de xylane sur une surface de cellulose cristalline et adsorption d'une phase amorphe de xylane sur un monocristal de cellulose exposant trois surfaces différentes. Des effets de structuration au voisinage de la cellulose sont observés.