

« PROPOSITION DE STAGE ET/OU DE THESE »

Laboratoire : Laboratoire Jean Perrin (LJP)

Adresse : 4 place Jussieu, T32-33, 4^e, Sorbonne Université CNRS UMR 8237, 75252 PARIS cedex 05

Directeur du laboratoire : Georges DEBRÉGEAS

Équipe de recherche (si pertinent) : Modélisation Mésoscopique des Biopolymères

Responsable de l'équipe : Jean COGNET

Responsable de stage : Jean COGNET

Adresse électronique : jean.cognet@sorbonne-universite.fr Site : <http://www.labos.upmc.fr/ljp/?article12>

N° et intitulé de l'Ecole Doctorale de rattachement : ED 564, « Physique en Île-de-France »

Profil recherché : étudiant de Master de Physique ou d'Ingénierie, un élève ingénieur, souhaitant explorer un sujet à l'interface de la mécanique et de la biophysique

Possibilité de poursuite en thèse : OUI

Si oui financement envisagé : ED 564

Titre du stage de M2 : **Construction pratique d'une description générale multi-échelle des biopolymères**

Résumé :

Contexte : Notre objectif général est de développer une nouvelle approche générale multi-échelles de modélisation et de simulation interactives des biopolymères (protéines et Acides Nucléiques ADN et ARN).

Une première approche très efficace consiste à décrire leurs conformations comme une tige élastique en flexion et en torsion, figurée par un ruban, au moyen de la théorie d'élasticité non-linéaire [Santini *et al.* 2009, Baouendi *et al.* 2012]. Nous disposons maintenant d'un système analytique interactif robuste capable de générer toutes les solutions du problème de repliement des poutres flexibles [Ameline *et al.* 2017, 2018].

Une autre approche consiste à décrire leurs conformations comme les trajectoires de chaînes articulées infinies. Nous avons montré que ces deux descriptions infinies, continue (tige), et discrète (chaîne de biopolymère), ont les mêmes paramètres géométriques, ce qui donne un moyen d'équivalence entre elles.

Objectif du stage : La première étape consiste à finaliser les correspondances entre ces deux descriptions. Puis, il s'agit de les appliquer de façon universelle pour décrire les principaux éléments constitutifs des protéines : les différents feuillets β , les différentes hélices α , les principales boucles en s'appuyant sur une banque de données de boucles de protéines (établie par J. Chomilier, IMPMC - SU), et plus généralement ceux des alphabets structuraux de protéines. Ces nouvelles descriptions pourraient mieux rendre compte de certaines protéines du ribosome qui sont considérées comme déstructurées [Hountondji *et al.* 2017]. Il s'agit aussi de les appliquer à deux boucles d'acides nucléiques très bien résolues [Santini *et al.* 2009, Baouendi *et al.* 2012] pour les caractériser mécaniquement (Cf. références téléchargeables sur site ci-dessus).

Ces approches de modélisation ouvrent sur de nouvelles perspectives et sont pertinentes pour décrire les biopolymères à différentes échelles, les rabouter, les assembler, et les manipuler interactivement par la virtualisation moléculaire avec retour haptique.

Techniques utilisées : Modélisation sur ordinateur avec *Mathematica*, et plateformes de modélisation moléculaire (Chimera, VMD, ...).