




PROPOSITION DE SUJET DE STAGE DE MASTER M2 2019-2020

Laboratoires :	Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique UMR 7222 (ISIR) T55-65 Pyramide,	Laboratoire Jean Perrin UMR 8237 (LJP) T32-33 4^e http://www.labos.upmc.fr/ljp/?article12
		
	UFR 919 (Ingénierie)	UFR 925 (Physique)
	Sorbonne Université et CNRS, 4 place Jussieu, 75005 PARIS	
Directeurs	Guillaume MOREL	Georges DEBRÉGEAS
Responsables :	Sinan HALIYO (ISIR) 01.44.27.63.84	Jean COGNET (LJP) 01.44.27.47.12
e-mail	sinan.haliyo@sorbonne-universite.fr	jean.cognet@sorbonne-universite.fr

Construction pratique d'une description générale multi-échelle des biopolymères

Projet scientifique :

Contexte : Notre objectif général est de développer une nouvelle approche 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 cinématiques (ou 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 : Après avoir finalisé les correspondances entre ces deux descriptions, il s'agit de les appliquer 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 de force haptique.

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

Qualités du candidat requises : 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.

Rémunération éventuelle du stage : **Oui**
Possibilité de poursuivre en thèse ? **Oui**