

Master « Sciences, Technologie, Santé »
Mention « In Silico Drug Design »
1ère année

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2011 – 2012

A envoyer à Mme Pr Camproux :
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: Malcolm BUCKLE

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,...) et Numéro d'affiliation de l'unité : Laboratoire de biologie et pharmacologie appliquée (LBPA), UMR 8113, CNRS / ENS de Cachan

Adresse précise du Laboratoire :
61, avenue du Président Wilson
94235 Cachan cedex

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Olivier MAUFFRET
E-mail : olivier.mauffret@lbpa.ens-cachan.fr

Nom du Responsable du stage : Brigitte HARTMANN et David PERAHIA

Numéro de Téléphone : 01 47 40 74 21 et 01 47 40
Numéro de Télécopie : 01 47 40 76 71
E-mail : bhartman@ens-cachan.fr david.perahia@gmail.com

Titre du stage :

Analyse des structures du nucléosome

Description du sujet (quelques lignes):

Ce sujet s'inscrit dans le cadre d'une thématique interdisciplinaire fédérant plusieurs équipes de l'UMR 8113 autour des problématiques posées par le nucléosome, l'unité élémentaire de la compaction de l'ADN, constitué par un ADN de 145 à 147 paires de bases enroulé autour d'un octamère d'histones.

Pour développer ce projet nous utilisons une large gamme de méthodes, dont des simulations du nucléosome. Le sujet du stage consiste à préparer les points de départ des simulations à partir des structures cristallographiques haute résolution de cette nano-particule biologique. Dans le cadre de notre projet, nous avons identifié cinq structures intéressantes qui diffèrent par la séquence des ADN et leur longueur. Il faudra ajouter les hydrogènes, identifier les encombrements stériques, ajuster les rotations des groupements fonctionnels des histones, et calculer les états de protonation des histidines avant de relaxer ces structures par de courtes dynamiques moléculaires en solvant explicite. Les structures ainsi traitées seront ensuite utilisées pour des analyses en modes normaux avec le but d'observer les mouvements collectifs de l'ADN au sein du nucléosome.

Retour par e-mail : anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr