



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



PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2014 – 2015

A envoyer à Mr O. Taboureau :
olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: Giuseppe Baldacci

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,...) et Numéro d'affiliation de l'unité : CNRS UMR 7592

Adresse précise du Laboratoire : 15, rue Hélène Brion, 75013 Paris. Bureaux 144B

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Cathy Jackson et Jean-Marc Verbavatz

E-mail : jackson@ijm.univ-paris-diderot.fr et verbavatz.jean-marc@ijm.univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du stage : Bâcle Amélie

Numéro de Téléphone 0157278006

Numéro de Télécopie

E-mail : amelie.bacle@gmail.com

Titre du stage : Développement d'outils pour analyser des trajectoires de dynamiques moléculaires de gouttelettes lipidiques.

Description du sujet (quelques lignes):

Les gouttelettes lipidiques (GL) sont des organites intracellulaires, elles jouent un rôle central dans le métabolisme des lipides et sont impliquées dans de nombreuses maladies telles que l'obésité ou le diabète. Les GL ont une architecture unique : une monocouche de phospholipides qui entoure un cœur de lipides neutres majoritairement composé de triglycérides et d'esters de cholestérol. La liaison de protéine aux GLs permet d'en réguler leur taille suivant les besoins de la cellule. Afin de comprendre la spécificité de liaison, nous étudions les propriétés de surface de ces gouttelettes par modélisation moléculaire. Nous avons pour cela établi un modèle simplifié de GL que nous étudions par dynamique moléculaire. Le modèle est constitué d'un cœur de lipides neutres (ester de cholestérol et triglycérides) entouré par deux monocouches de phospholipides. Des trajectoires tout-atome ont ainsi été simulées révélant les propriétés microscopiques de surface des GLs.

Le stagiaire sera chargé de développer des outils en Python pour analyser ces données de simulation. Il s'intéressera particulièrement aux insertions de lipides neutres dans les monocouches de phospholipides, phénomène qui pourrait être à l'origine de la liaison de protéines périphériques. Il pourra ensuite corrélérer ces insertions avec d'autres évènements comme le passage de molécules d'eau à travers les monocouches ou encore avec le degré de « packing » des phospholipides (capacité des phospholipides à se serrer les uns contre les autres, analyse qui déjà été menée et qui ne fait pas l'objet du stage).

Le stagiaire devra utiliser le langage Python ainsi que des modules externes tels que MDTraj ou MDAnalysis. Il sera demandé de documenter clairement le code produit et de bien vérifier les résultats obtenus sur des exemples simples avant de l'appliquer aux données finales.

Retour par e-mail : olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr