

## Interfaces pour le vivant

Title of the research project: **Alphabet mécanique » pour la modélisation moléculaire interactive de biopolymères à différentes échelles**

Thesis supervisor: **COGNET Jean**

Email address of the thesis supervisor: [jean.cognet@sorbonne-universite.fr](mailto:jean.cognet@sorbonne-universite.fr)

Doctoral School: ED564

### Subject description:

Ce sujet vise à résoudre un problème fondamental et à développer un outil de modélisation et de simulation interactif des biopolymères à l'interface de la physique et de la biologie (équipe 1) à l'aide d'approches de mécanique et de robotique (équipe 2). Nous avons observé, avec l'approche de modélisation moléculaire Biopolymer Chain Elasticity (BCE), que la chaîne sucre-phosphate des Acides Nucléiques (AN) se comporte aux échelles mésoscopiques (plusieurs nucléotides, résidus) comme une tige flexible continue. Puis, entre 2014-18, nous avons montré que : (i) trois paramètres physiques suffisent pour décrire et classer toutes les déformations statiquement admissibles des tiges infinies, comme les boucles et les hélices, et que toute déformée s'inscrit dans un tube hélicoïdal paramétrable, (ii) les chaînes cinématiques infinies, comme celles issues de biopolymères, possèdent les mêmes caractéristiques géométriques. Notre objectif est de formaliser ce langage paramétré avec des formes élémentaires et de construire un alphabet mécanique. Ce sont en effet des objets géométriques et mécaniques précis qui minimisent l'énergie. Nous identifierons ces formes dans les protéines, afin de faire apparaître cet alphabet. Pour les AN, cette approche doit donner pour la première fois un moyen de quantifier à une échelle mésoscopique les forces et les énergies mécaniques dans les conformations des deux boucles d'ADN de référence très bien résolues. Nous utiliserons cette approche pour comprendre la protéine ribosomale, eL42, classée comme une Protéine Intrinsèquement Désordonnée (PID), qui a pourtant un rôle catalytique vital pour la synthèse de toutes les protéines. Un outil général de simulation fondé sur cet alphabet mécanique pour la résolution des biopolymères est alors envisageable, car les biopolymères pourront être soumis à des interactions à la disposition des utilisateurs pour toutes les questions de modélisations de toutes tailles : reconnaissance, interaction, docking.