

SOUTENANCE de THESE

Benjamin BOYER

« Heligeom : A multiscale approach to studying biomolecular helical assemblies with an application to RecA filaments". »

Vendredi 20 juin 2014 à 14h30
BIBLIOTHEQUE

Les récentes avancées des méthodes de détermination structurale à basse résolution (microscopie électronique, dispersion de neutrons ou de rayons X aux petits angles) et de l'imagerie cellulaire révèlent l'importance des assemblages supramoléculaires dans le fonctionnement de la cellule. Ces structures sont actuellement hors de portée des méthodes classiques de la modélisation moléculaire, limitées à l'étude des assemblages moléculaires de taille moyenne.

Nous proposons une approche multi-échelle appelée Heligeom, basée sur les mouvements de vissage, permettant de relier l'échelle atomique à l'échelle des gros assemblages moléculaires. Cette approche exploite la propriété des assemblages moléculaires de grande taille de s'auto-organiser en une grande variété de motifs géométriques tels que les hélices, les anneaux ou les filaments linéaires. Couplée à l'exploration des modes d'assemblage protéine-protéine au moyen de simulations d'amarrage ou d'échantillonnage par Monte Carlo, cette approche permet l'exploration et la combinaison de ces motifs.

L'application d'Heligeom à l'étude du filament de RecA, une protéine membre de la famille des recombinases, a pu apporter un nouvel éclairage sur les modes d'auto-association de RecA et la diversité des géométries correspondantes, ainsi que sur les conséquences structurales de l'introduction d'irrégularités dans ces oligomères.

La suite logicielle Heligeom est disponible dans la bibliothèque libre PTools.