

**PROPOSITION DE STAGE**  
**Année Universitaire 2013 – 2014**  
A envoyer à Mme Pr Camproux :  
[anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr](mailto:anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr)

**Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:**

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,...) et Numéro d'affiliation de l'unité : CNRS UMR 7654

Adresse précise du Laboratoire :  
École Polytechnique  
Laboratoire de Biochimie (BIOC)  
Biology Department  
Route de Saclay,  
91128 Palaiseau, France

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Pr. Thomas Simonson  
E-mail : [thomas.simonson@polytechnique.fr](mailto:thomas.simonson@polytechnique.fr)

---

**Nom du Responsable du stage : Pr. Thomas Simonson**

Téléphone : 0169333881 Fax : 0169333013  
E-mail : [thomas.simonson@polytechnique.fr](mailto:thomas.simonson@polytechnique.fr)  
HDR : oui ou non

Ecole doctorale de rattachement :

Spécialité du stage : Recherche  Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet :

*computational protein design*, extension du code génétique, librairie de rotamères, simulations

---

**Titre du stage :**

**Dessein computationnel des interactions protéine-ligand**

Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : Oui - Non

---

**Description du sujet (quelques lignes):**

On réalisera une ingénierie (in silico) de la tyrosyl-ARNt synthétase, avec le but d'obtenir une activité envers des acides aminés non-naturels, et éventuellement d'introduire ces acides aminés dans le code génétique.

On utilisera une méthode générale de « dessein computationnel de protéines », ou « CPD ». La méthode et le logiciel ont été développés au laboratoire et ont permis très récemment d'introduire dans l'enzyme de nouvelles activités envers la méthyl-tyrosine et la D-tyrosine. Plus généralement, ces méthodes ont de nombreuses applications fondamentales et technologiques.

Le stage inclura un travail d'amélioration des outils et un travail d'application; les prédictions pourront être testées par les collègues expérimentalistes du laboratoire.