NOM: SIMONSON

Prénom : Thomas

Adresse Professionnelle : Groupe de Bioinformatique structurale, Laboratoire de Biochimie (CNRS), Ecole Polytechnique, Palaiseau

HDR : oui

Ecole doctorale de rattachement : Ecole doctorale de l'Ecole Polytechnique

Appartenance Unité, nom et code: Laboratoire de Biochimie, UMR CNRS/Polytechnique 7654

Tel: 01 69 33 48 60 Fax: 01 69 33 49 09 Courriel: thomas.simonson@polytechnique.fr

Titre du stage: **Ingénierie des interactions protéine-ligand**

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

Description du sujet:

On s'intéressera à l'ingénierie (in silico) de l'asparaginyI-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 plusieurs techniques de modélisation et de simulation, dont une méthode générale de « dessin computationnel de protéines », développée au laboratoire. Cette méthode a permis très récemment d'introduire dans une autre synthétase une nouvelle activité envers 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 seront testées par les collègues expérimentalistes du laboratoire. Financement de thèse envisageable (à travers l'Ecole Doctorale de Polytechnique, largement ouverte aux étudiants extérieurs). Voir aussi biology.polytechnique.fr/biocomputing.