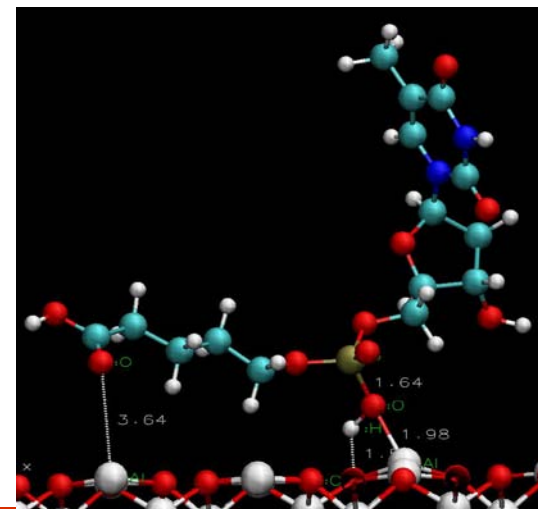
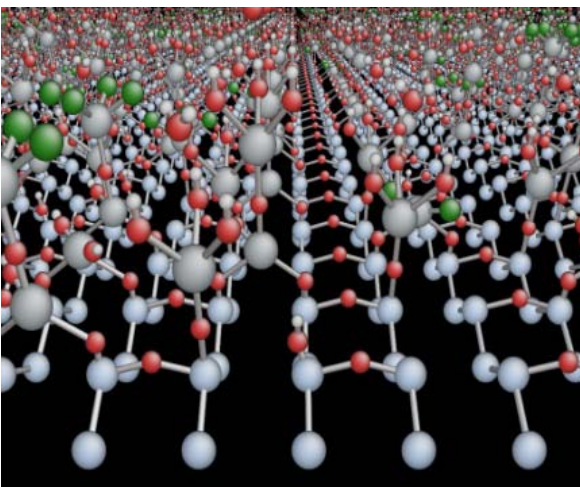


Modélisation et Simulation à l'Echelle Atomique pour la nano-ingénierie des technologies bio-hybrides

**A. Estève, M. Brut, A. Hemeryck, M. Djafari Rouhani, G. Landa,
C. Rossi, A. Bancaud, D. Estève,
C. Mastail, C. Lanthony, X. Durand, F. Mouelhi, I. Soussi**



Contexte des technologies avancées: relation inorganique – organique – biologique

Un problème générique:

persistance ou pilotage conformationnel d'une biomolécule mise en présence d'un nano-objet, modifiée chimiquement, immobilisée sur une surface

Biopuce, lab on chip, ..., matériaux avancés

LAAS - assemblage dirigé de nanoparticules

LAAS – filière capteurs à base d'aptamères

=> Complexité accrue des Technologies d'élaboration des dispositifs

=> Méthodes et outils / Multi-niveaux (multi-échelle, multi-modèles) pour anticiper et résoudre la complexité.

Expertise

Combinaison de méthodes

Quantique, Dynamique Moléculaire classique, Monte Carlo Cinétique, et ...

Modes Statiques : calcul de la relation entre excitation externe et champ de déformation induit

Propre à répondre aux exigences liées à la manipulation de biomolécules

Universalité de la méthode :

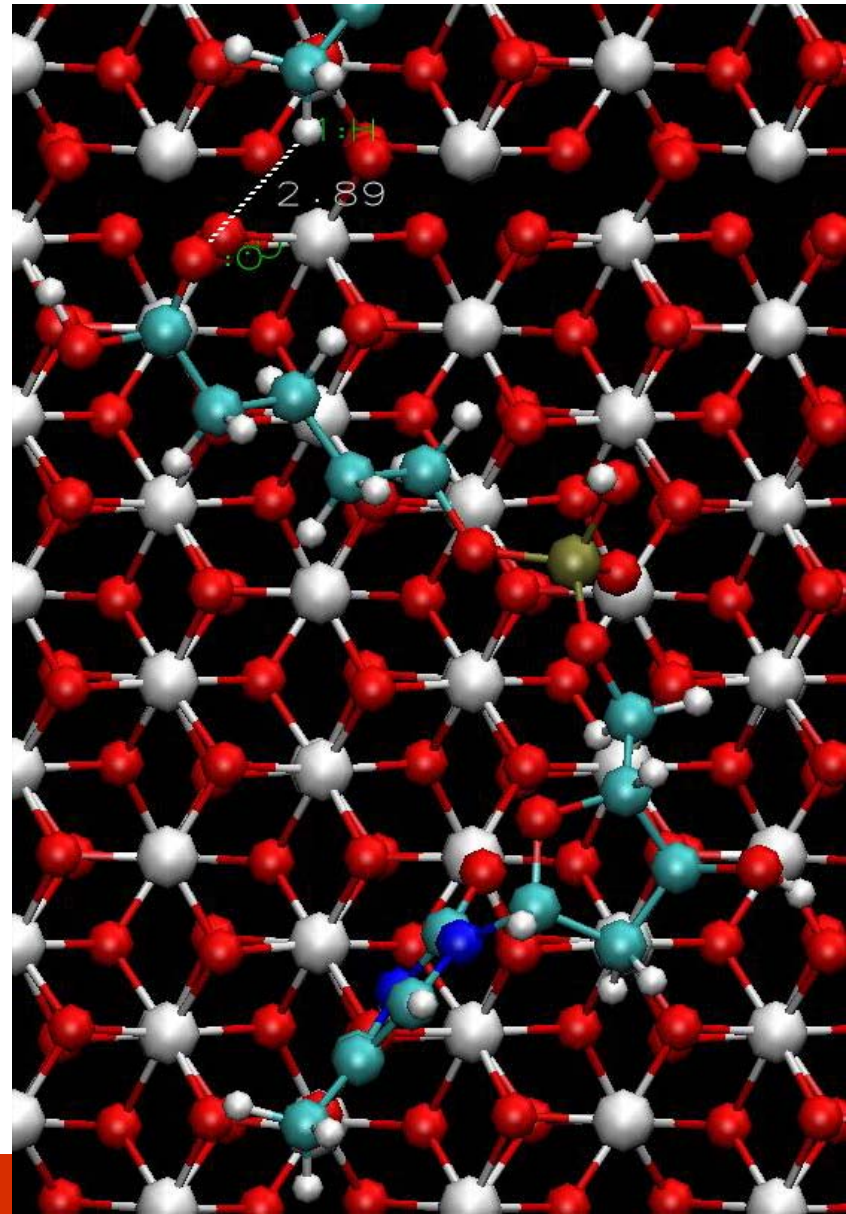
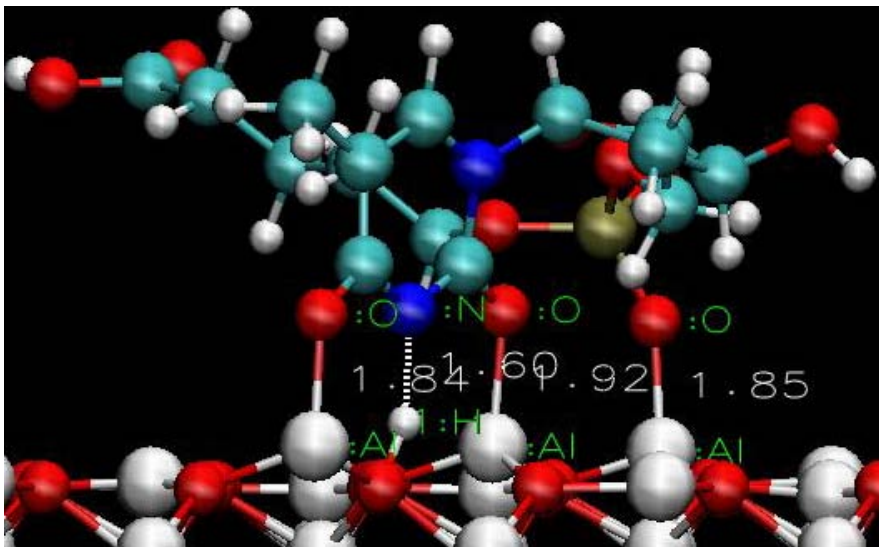
DHFR/ HIV-1/*DNA/LNA*

Aptamer

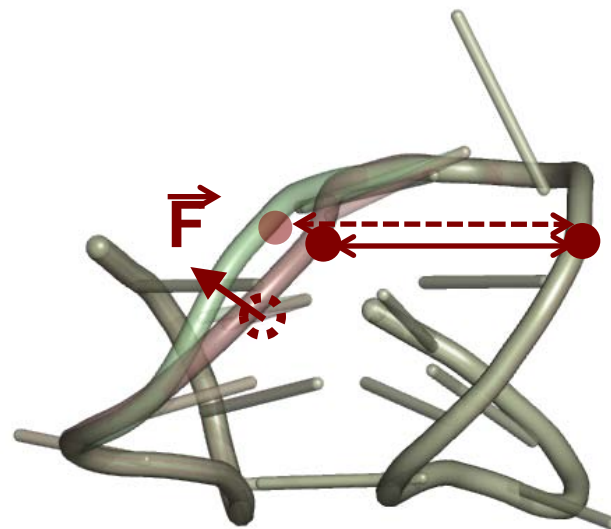
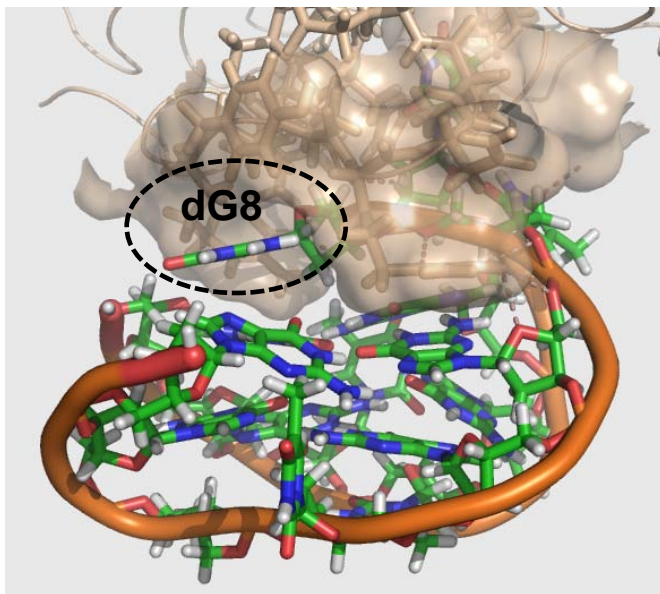
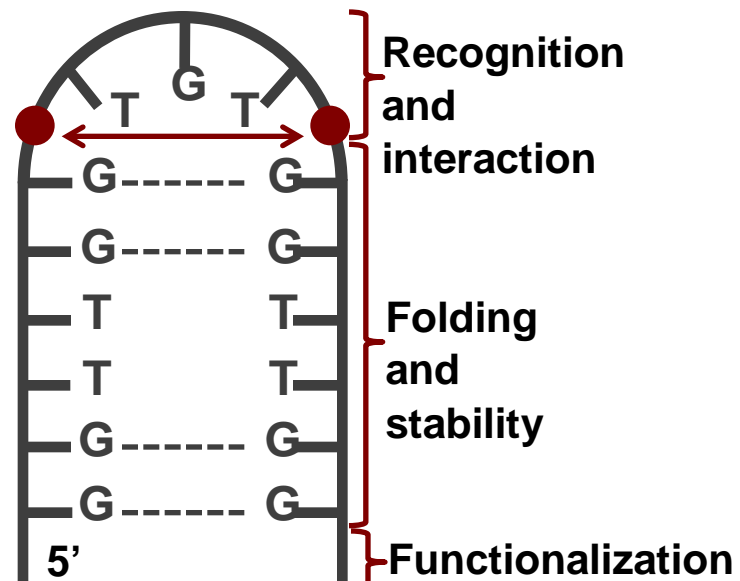
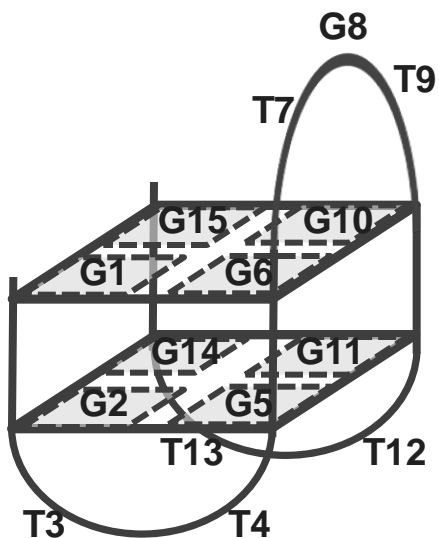
Sonde ionique sur β Amiloide...

Exemple

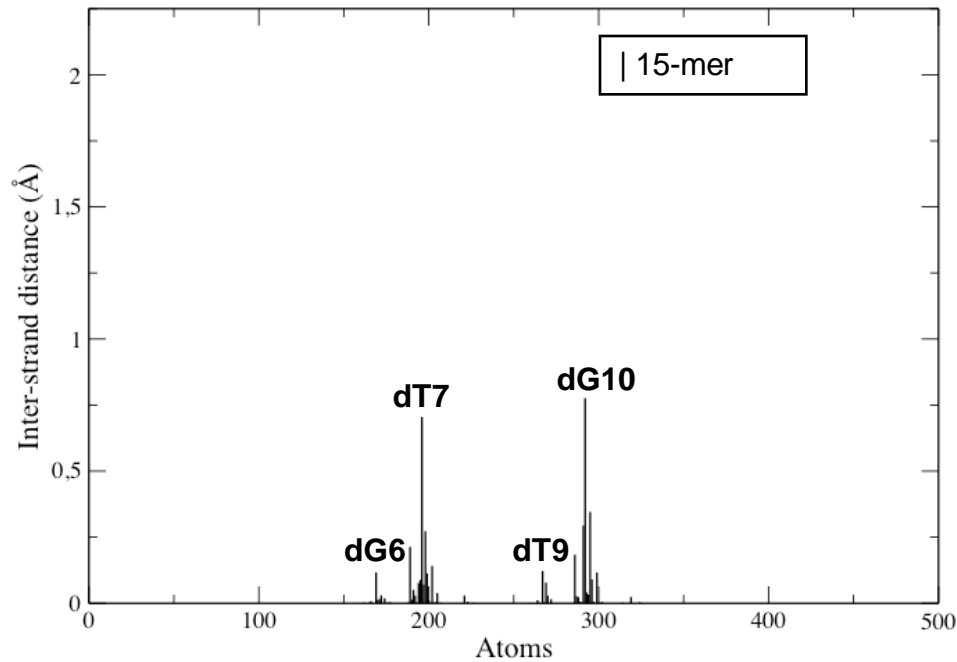
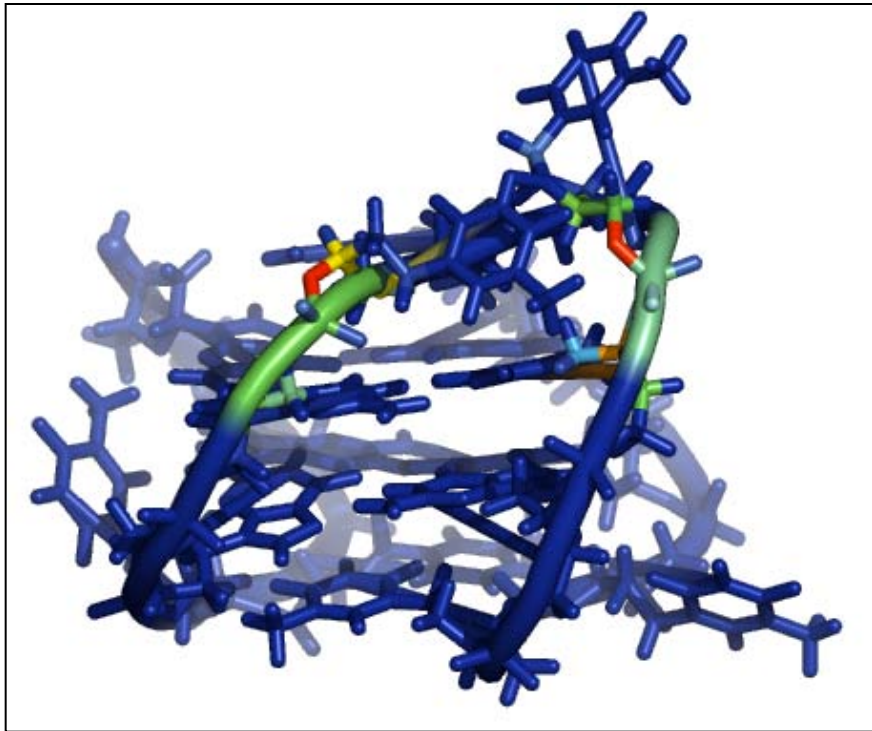
Calcul DFT:
Interaction forte entre une T – Al₂O₃
E=-4 eV



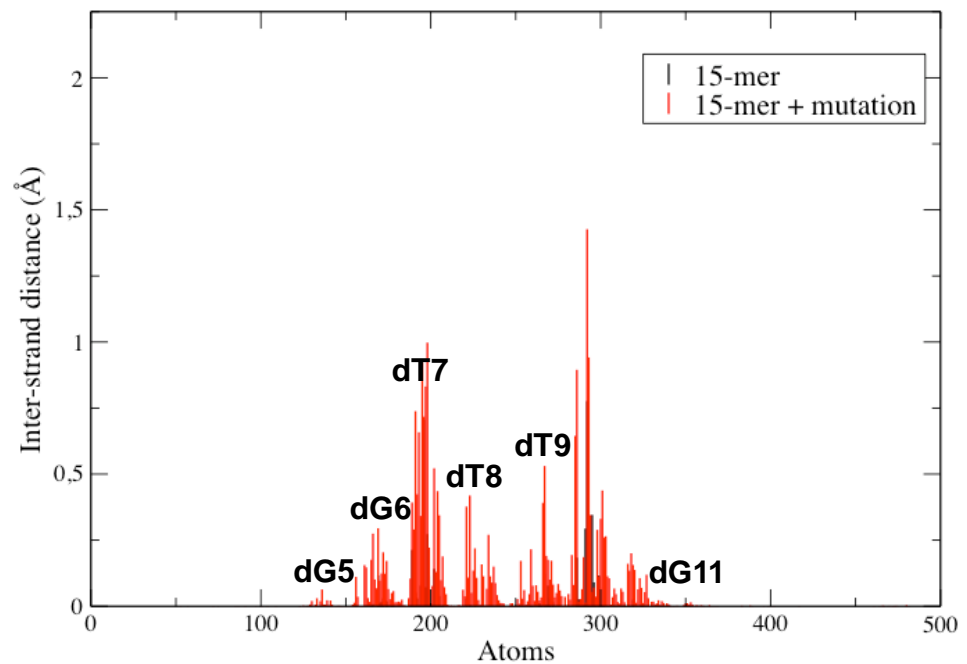
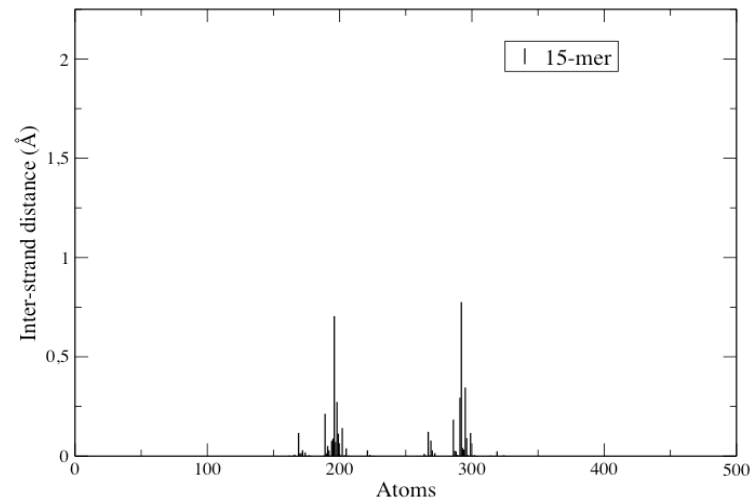
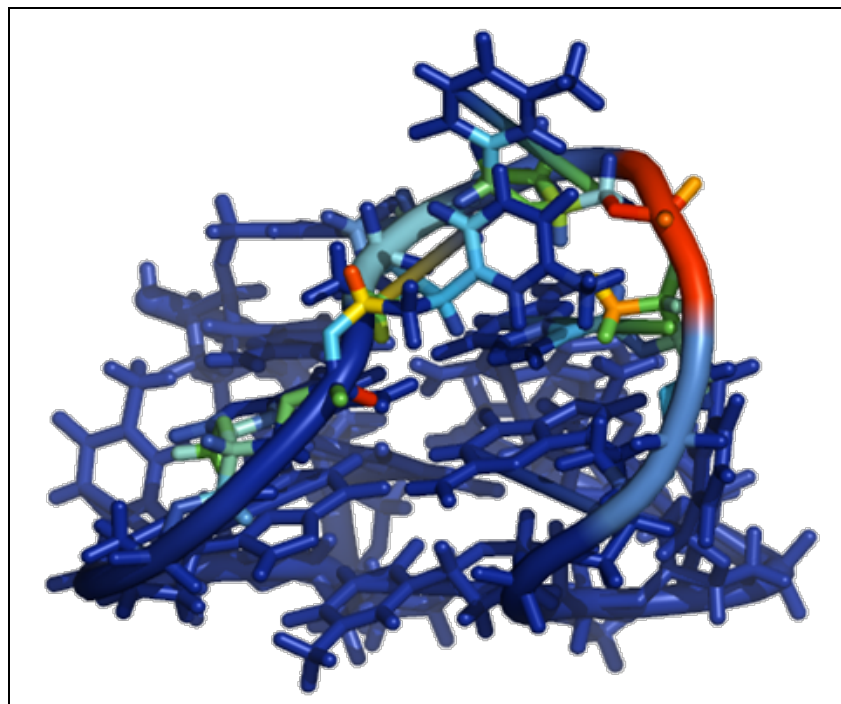
Aptamère / Thrombine



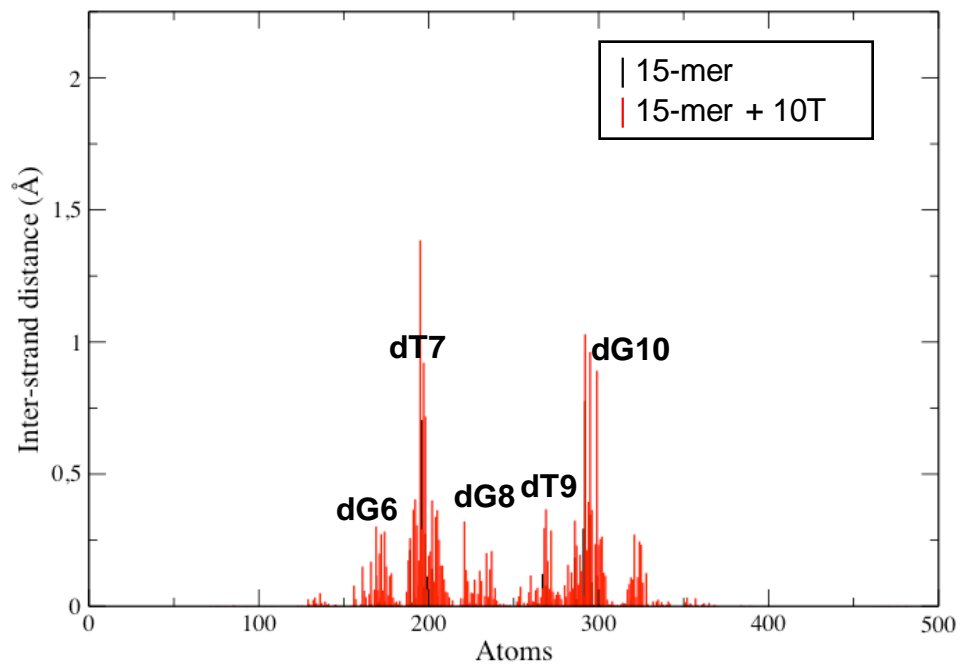
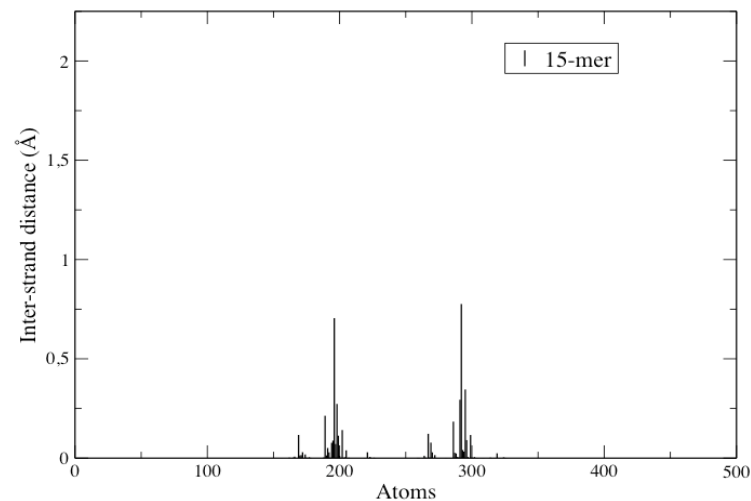
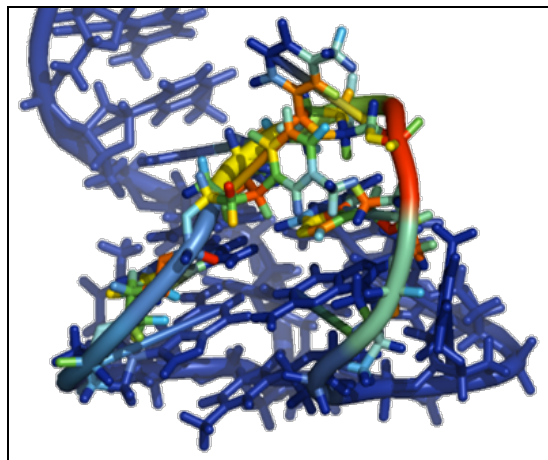
Aptamère non modifié de référence



Aptamer flexibility after mutation (dG8 -> dT8)



Aptamer flexibility with 10 T termination



Eventail de possibilités offertes par notre équipe

Mise à disposition d'une compétence en calcul multi-échelle

Valorisation d'une nouvelle méthodologie, les Modes Statiques:

- s'appuie sur une structure 3D de départ (sourcePDB)
- rigoureusement pas de limitation de taille (du micro au meso)
- possibilité de travailler sur la base de n'importe quel type de potentiel d'interaction
- possibilité d'étudier le rôle du solvant

Températures de fusion de LNA et impact des modifications sur les configurations du sucre

Effets de contraintes de cisaillement sur la stabilité de l'ADN

Chimie des interactions pour le greffage ADN / Au, Al, Cu et leurs oxydes

Impact des espaceurs chimiques sur la flexibilité des aptamères

Apports et Attente vis-à-vis de l'action du GDR

Elargir le champ des compétences

Susciter l'ouverture et l'intérêt interdisciplinaire

Participer à un effort « calcul »

Intérêt pour les questions scientifiques propres aux communautés
de l'ADN

Fonder de nouvelles collaborations dans ce sens