

## Master 2: *International Centre for Fundamental Physics*

### **INTERNSHIPS PROPOSAL**

Laboratory name: Laboratoire Jean Perrin (LJP) T32-33 4e  
CNRS identification code: UMR 8237  
Internship director's surname: Jean COGNET et Sinan HALIYO  
e-mail: [jean.cognet@sorbonne-universite.fr](mailto:jean.cognet@sorbonne-universite.fr) et Phone number: 01 44 27 47 12  
Web page: <http://www.labos.upmc.fr/ljp/?article12>  
Internship location: T32-33 4e, Sorbonne Université CNRS, 4 place Jussieu, 75005 PARIS

Thesis possibility after internship: YES  
Funding: YES If YES, which type of funding: Concours EDPIF

### **Chaining for molecular modeling of proteins and nucleic acids**

**Background:** The folding and the motions of proteins and nucleic acids are at the heart of life's machinery and are of paramount importance to cellular functions. Current molecular modeling physics-based representation and knowledge-based methods are very effective. However, there is no detailed knowledge of how to chain together fragments of biopolymers (proteins or nucleic acids) and of how to design the assembly link, except in the specialized context of structural alphabets.

We propose a radically new view, by describing them as elastic rods (more precisely, as inextensible rods elastic in bending and in torsion, see webpage and downloadable references). Thus, large deformations can be achieved while preserving the local geometry. Another approach is to describe their conformations by infinite kinematic chain (articulated rigid bars). These two systems, continuous (rod), and discrete (biopolymer chain), are described by the same geometric parameters, which establish new mathematical and physical relationships to chain the different fragments of biopolymer chains.

**Objectives of the internships:** We offer two types of internships. The first aims to complete the analytical exploration of the beautiful geometry and mechanics of elastic rods. The second aims to establish the symbolic computation of the new geometrical parameters of infinite kinematic chains. As these objectives will be attained, the detailed correspondence between these two descriptions will be completed progressively.

At each step, we will test and validate the developed model by describing all known fragments in the Protein Data Bank (more precisely, all letters of a complete structural alphabet).

In this way, we will build « true and interactive splines ». These geometrical objects, widely used in modeling and in biology, will also become precise physical and mechanical objects that can be modified interactively for: recognition, interaction, docking.

These modeling approaches also open up new perspectives for interactive manipulation of biopolymers by molecular virtualization with haptic feedback.

**Techniques used:** Mathematical and mechanical modeling on computer with *Mathematica*.

**Qualifications of the candidate:** Master student in Physics, an engineer student, wishing to explore a theoretical subject at the interface of mechanics and biophysics.

**Co-director :** Sinan Haliyo, Institute of Intelligent Systems and Robotics, **ISIR**. Multiscale interactions, (haptic and robotic interface, virtual reality in interactive molecular modeling)

Please, indicate which speciality(ies) seem(s) to be more adapted to the subject:

Condensed Matter Physics: NO	Soft Matter and Biological Physics: YES
Quantum Physics: NO	Theoretical Physics: YES

**Contexte** : Le repliement et la dynamique des protéines et des acides nucléiques sont au cœur de la machinerie de la vie et sont d'une importance primordiale pour les fonctions cellulaires. La modélisation moléculaire actuelle fondée sur la physique ou la bioinformatique sont très efficaces. Cependant, il n'existe aucune connaissance détaillée pour enchaîner les segments de biopolymères (protéines ou acides nucléiques) et pour concevoir le lien d'assemblage, sauf dans le contexte spécialisé des alphabets structuraux.

Nous proposons une vue radicalement nouvelle, en les décrivant comme des tiges élastiques (plus précisément, comme des tiges inextensibles élastiques en flexion et en torsion, voir page web et références téléchargeables). Ainsi, de grandes déformations peuvent être réalisées tout en préservant la géométrie locale. Une autre approche consiste à décrire leurs conformations par une chaîne cinématique infinie (barres rigides articulées). Ces deux systèmes, continu (tige), et discret (chaîne de biopolymère), sont décrits par les mêmes paramètres géométriques, qui établissent de nouvelles relations mathématiques et physiques pour enchaîner les différents fragments de chaînes de biopolymères.

**Objectifs des stages** : Nous proposons deux types de stages. Le premier vise à compléter l'exploration analytique des belle géométrie et mécanique des tiges élastiques. Le second vise à établir le calcul symbolique des nouveaux paramètres géométriques des chaînes cinématiques infinies. À chaque étape, nous testerons et validerons le modèle développé en décrivant tous les fragments connus dans la Banque de données sur les protéines (plus précisément, toutes les lettres d'un alphabet structural complet).

De cette façon, nous construirons des « vraies cannelures interactives ». Ces objets géométriques, largement utilisés en modélisation et en biologie, deviendront également des objets physiques et mécaniques précis pouvant être modifiés interactivement pour : la reconnaissance, l'interaction, l'arrimage.

Ces approches de modélisation ouvrent également de nouvelles perspectives pour la manipulation interactive des biopolymères par virtualisation moléculaire avec rétroaction haptique.

**Techniques utilisées** : Modélisation mathématique et mécanique sur ordinateur avec *Mathematica* et sur plateformes de modélisation moléculaire (Chimera, VMD, ...).

**Qualités du candidat requises** : étudiant de Master de Physique ou d'Ingénierie, un élève ingénieur, souhaitant explorer un sujet à l'interface de la mécanique et de la biophysique.

**Co-encadrant** : Sinan Haliyo, Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique, ISIR. Interactions multi-échelles, (interface haptique et robotique, réalité virtuelle pour la modélisation moléculaire interactive)