

ABSTRACT HDR

Nom – Prénom	DEHEZ François
Laboratoire de rattachement	Laboratoire de Physique et Chimie Théorique
Intitulé du diplôme HDR	Chimie
Titre de l'HDR	Décryptage de la dynamique de systèmes biomoléculaires par simulations numériques

Abstract (français)

Depuis plusieurs années, les approches théoriques sont devenues incontournables pour étudier le fonctionnement des systèmes biomoléculaires. La maturité des champs de force associée aux algorithmes de dynamique moléculaire et d'échantillonnage d'évènements rares permettent aujourd'hui d'étudier au niveau moléculaire la structure et la dynamique de protéines dans des environnement complexes comme les membranes biologiques. Dans ce manuscrit, je présente plusieurs aspects de mes travaux de recherche dans le domaine. Une première partie est dédiée au développement de potentiels intermoléculaires et aux calculs d'énergie libre. Je décris ensuite mes travaux concernant les membranes et les protéines membranaires, centrés en particulier sur les transporteurs mitochondriaux, les canaux pentamériques et les processus de vectorisation transmembranaire. La dernière partie traite des études que je mène sur le thème lésion-réparation des acides nucléiques.

Abstract (anglais)

For several years, theoretical approaches have proven essential for studying the function of biomolecular systems. The maturity of force fields associated with molecular-dynamics simulations and rare-event sampling algorithms allow to study at the molecular level the structure and the dynamics of proteins in complex environments such as biological membranes. In this manuscript, I present several aspects of my research in the field. A first part is dedicated to the development of intermolecular potentials and to free-energy calculations. I then describe my work related with membranes and membrane proteins, focusing on mitochondrial carriers, pentameric channels and transmembrane vectorization processes. The last part exposes some of my work devoted to the study of the structure and the dynamics of nucleic acid damage and repair.