

**Laboratoire de Biochimie Théorique**  
**Institut de Biologie Physico-Chimique**  
13, rue Pierre et Marie Curie  
75005 PARIS

**SEMINAIRE**

**Florent Barbault**

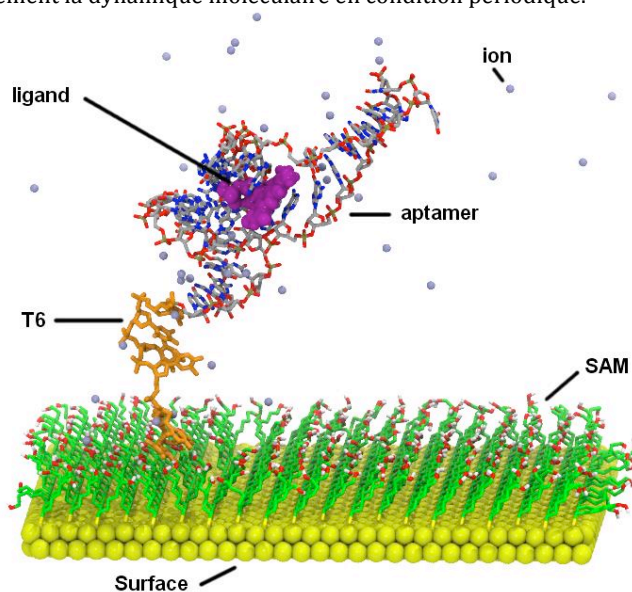
M. Ruan, M. Seydou, V. Noel, B. Piro, F. Maurel and F. Barbault\*

(1) Univ Paris Diderot, USPC, ITODYS, UMR CNRS 7086, 15 rue J-A. de Baïf, 75013, Paris, France.

(\*) Contact: email: [florent.barbault@univ-paris-diderot.fr](mailto:florent.barbault@univ-paris-diderot.fr)

**«Dynamique moléculaire de la reconnaissance Ligand/Aptamère dans un biocapteur»**

Dans un biocapteur, l'immobilisation de la biomolécule entraîne généralement une diminution de son affinité vis-à-vis de l'analyte. La compréhension de ce phénomène nécessite une vision à l'échelle atomique, ce que permet la modélisation moléculaire et plus particulièrement la dynamique moléculaire en condition périodique.



*Schéma du biocapteur ARN à la flavine mononucléotide isolé sur une surface d'or auto-assemblée (Pour des raisons de clarté les molécules d'eaux ne sont pas représentées).*

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à un aptamère ARN à la flavine mononucléotide dont l'immobilisation entraîne une augmentation notable de sa constante de dissociation [1]. Plusieurs trajectoires ont été engagées sur ce système (cf. schéma) ainsi que sur l'aptamère en solution. Les analyses structurales, énergétiques et statistiques démontrent que lorsque l'aptamère est immobilisé sur la surface d'or la différence de distribution des cations entraîne des variations structurales sensibles autour de la flavine expliquant la baisse d'affinité. Les informations déduites de ces analyses pourront certainement être extrapolées pour de futur design.

Référence :

- 1- A.L. Chang, M. McKeague, J.C. Liang, C.D. Smolke, "Kinetic and Equilibrium Binding Characterization of Aptamers to Small Molecules using a Label-Free, Sensitive, and Scalable Platform", *Analytical Chemistry*, 2014, 86, 3273-8

**Jeudi 14 décembre 2017**

**14h30**

**SALLE DE CONFERENCE**