



DUPONT Nathalie
Maître de Conférences HDR
Laboratoire CSPBAT UMR 7244 -
Equipe SBMB
UFR SMBH

.....
Tel : 0148387774

Enseignante à l'IUT de Saint Denis -
Département Mesures Physiques

Mise en évidence des relations
structures - liaisons faibles - propriétés.

Mail : nathalie.dupont@univ-paris 13 .fr
Equipe SBMB

Biographie

Après l'obtention d'un diplôme d'ingénieur en Chimie des Matériaux et d'un DEA en Sciences des Matériaux à l'Université Pierre et Marie Curie Paris 6, Nathalie Dupont a poursuivi en thèse au sein du laboratoire de Cristallographie du Solide à l'université Paris 6 sous la direction du Professeur Ariel de Kozak. En juillet 1999, elle obtient son doctorat avec les félicitations écrites du jury sur la mise en évidence et l'étude des relations structures-propriétés dans des fluorures complexes de cuivre (II). A la rentrée 1999, elle a intégré l'université Paris 13 en obtenant un poste d'enseignant chercheur au sein du département Mesures Physiques de l'IUT de Saint Denis. Après quelques années au sein de l'équipe Photocatalyse du LIMHP (UPR CNRS) à travailler sur la mise au point et l'optimisation d'un réacteur de dégradation par photocatalyse hétérogène des polluants organiques volatils, Nathalie Dupont a rejoint en 2005 le laboratoire qui est devenu à présent le CSPBAT pour se recentrer tout d'abord sur des thématiques structurales et sur l'analyse cristallographique des petites molécules, puis sur la modélisation *in silico* des systèmes étudiés. En Janvier 2012, Nathalie Dupont a obtenu son Habilitation à Diriger des Recherches. Son domaine d'expertise recouvre l'analyse structurale par diffraction des rayons X, la modélisation moléculaire des méthodes *ab-initio* aux techniques de « drug design » en passant par la mécanique moléculaire dans le but de mettre en évidence les relations entre la structure des molécules, leur arrangement à l'état solide, les réseaux d'interactions non covalentes et leurs propriétés.

Thèmes de recherche

Mise en évidence des relations structures - liaisons faibles - propriétés.

- Etude structurale et par modélisation *in silico* de complexes supramoléculaires avec des polluants de l'eau environnementale.

Ce nouveau sujet de recherches , développé en lien direct avec les membres de l'équipe SBMB par extension du projet ANR REMANTAS, est l'objet de la thèse de Shivalika Tanwar sous la direction de Nathalie Dupont qui a débuté en Mars 2015.

- Développement assisté par ordinateur de peptidomimétiques de coudes β et γ

Ce sujet de recherches, en collaboration avec le Dr Joelle PERARD (CR HDR) de l'UMR 8638 COMETE de l'Université Paris Descartes a été initié dans le cadre de l'ANR FERRIMAGE. Il portait initialement sur la synthèse de peptidomimétiques par l'équipe de Paris Descartes après l'optimisation in silico de leur squelette par l'équipe de Paris 13. L'application diagnostique initialement envisagée portait sur la conception d'inhibiteurs de certaines intégrines impliquées dans l'angiogenèse. Cependant, les coudes β et γ font partie de la structure secondaire des protéines. Ils participent à la stabilité de la structure tertiaire et sont très souvent impliqués dans la reconnaissance intermoléculaire (peptide / récepteur, hormone / récepteur, antigène / anticorps, enzyme / substrat). Une nouvelle application impliquant leur incorporation dans des peptides antimicrobiens est actuellement envisagée.

- Etude structurale et in silico de complexes supramoléculaires impliquant des calixarènes substitués.

Ce projet, dont la partie étude structurale par diffraction des rayons X en collaboration avec le Dr A.W.Coleman (DR CNRS) de l'Université Lyon 1, a donné lieu à de nombreuses publications communes fait l'objet de nouveaux développements sous un angle différent. En effet, en raison du désordre existant dans certaines structures cristallographiques, de nombreuses inconnues subsistent sur l'organisation supramoléculaire de certains complexes étudiés. En collaboration avec le Dr Nohad Gresh du Laboratoire de Chimie Théorique, UMR 7616, de l'Université Paris 6, l'application du champ de forces polarisable SIBFA à la structure de ces complexes devrait permettre de compléter leur description.

En parallèle à ces thèmes de recherches, Carole Barbey et Nathalie Dupont assurent sur le site de Bobigny en routine un service d'analyse par diffraction des rayons X des composés issus de la synthèse organique en collaboration avec des laboratoires étrangers (Algérie notamment).

Publications avec le style suivant svp

Investigation of aromatic hydrocarbon inclusion into cyclodextrins by Raman spectroscopy and thermal analysis.

I.Tijunelyte, N.Dupont, I.Milosevic, C.Barbey, E.Rinnert, N.Lidgi-Guigui, E. Guenin, M. Lamy de la Chapelle

Environ Sci Pollut Res Int., 2015 (Published online Mar 29)

In silico studies, synthesis and binding evaluation of substituted 2-pyrrolidinones as peptidomimetics of RGD tripeptide sequence.

V. Toun, J. Bolley, **Y. Lalatonne, C. Barbey, L. Motte, M. Lecouvey, J.Royer, N. Dupont, J. Pérard-Viret,**

Eur. J. Med. Chem., 2015, 93, 360-372

Synthesis and antibacterial activity of sulfonamides. SAR and DFT studies.
W. Boufas, **N. Dupont**, M. Berredjem, K. Berrezag, I. Bechecker, H. Berredjem,
N.E. Aouf,
J. Mol. Struct., 2014, 1074, 180-185.

Raman spectroscopy evaluation of subsurface hydrothermal degradation of zirconia
C. Wulfman C, **N. Djaker**, **N. Dupont**, M. Sadoun, **M. Lamy de la Chapelle**
J. Am. Cer. Soc., 2012, 95, 2347-2351.

Solid state structures of the complexes between the antiseptic chlorhexidine and
three anionic derivatives of calix[4]arene
N. Dupont, A.N. Lazar, F. Perret, O. Danylyuk, K. Suwinska, A. Navaza, A.W.
Coleman
CrystEngComm, 2008, 10, 975-977.

Brevet

Enseignement

Département Mesures Physiques (IUT de Saint Denis) : CM, TD et TP en Chimie
des solutions, Thermochimie, Cinétique, Matériaux, Electrochimie.

Ponctuellement enseignements de Chimie Générale lors de la création du
département de Génie Biologique à l'IUT de Bobigny et en Chimie de coordination
en L3 à l'UFR SMBH.

Responsable de la Licence professionnelle Gestion de la Production Industrielle de
2004 à 2010 à l'IUT de Saint Denis (3 mentions différentes, environ 60 apprentis)

Porteuse du projet puis responsable de la licence Transformations Industrielles à
l'IUT de Saint Denis entre 2008 et 2011.

Responsable de l'option Métiers de la Mesure de l'Instrumentation et du Contrôle de
la licence professionnelle Gestion de la Production Industrielle en 2013-2014.

Techniques

Résolution et analyse des structures des petites molécules.
Modélisation : Ab Initio, DFT, mécanique moléculaire .
Drug design : Docking, approche pharmacophore.

Site web

NathalieDupont-Paris13.blogspot.com