Sabine BOUGUET-BONNET

Université Henri Poincaré (UHP), Nancy 1
Faculté des Sciences et Techniques
FR CNRS 2843, UMR UHP-CNRS 7565
Equipe de Méthodologie RMN
B.P. 239
54506 Vandœuvre-lès-Nancy Cedex, FRANCE
Tel : 03.83.68.43.52
Email :Sabine.Bonnet@rmn.uhp-nancy.fr

30 ans
née le 23/05/77
mariée, sans enfant

Spécialiste en **Résonance Magnétique Nucléaire**

Situation actuelle : *Maitre de conférences (recherches scientifiques dans l'équipe de méthodologie RMN de l'UMR UHP-CNRS 7565, et activités d'enseignement à l'IUT Nancy-Brabois, département de Génie Chimique et Génie des Procédés, et département de Génie Biologique Agro-Alimentaire, Nancy, France).*

FORMATION

2004 Université Henri Poincaré, Nancy, France
Doctorat de l'Université Nancy I, Mention très honorable, félicitations du jury

2000 Université Henri Poincaré, Nancy, France
DEA de Chimie et Physico-chimie Moléculaires, Mention Bien, class. 2eme
Magistère de Génie Moléculaire, Matériaux et Procédés, Mention Bien, major

1999 Université Henri Poincaré, Nancy, France
Maîtrise de Chimie physique, Mention Assez Bien

1998 Université Henri Poincaré, Nancy, France
Licence de Chimie physique

1997 Université Henri Poincaré, Nancy, France
DEUG en Sciences de la Matière, Mention Bien

Formation complémentaire :
- Ecole doctorale SESAMES (chimie et physique moléculaires)
- CIES de Lorraine (monitorat 2000-2003)
- Doctoriales de Lorraine (2002)

LANGUES ETRANGERES

Anglais lu, écrit, parlé

COMPETENCES INFORMATIQUES

Langages: notions avancées en Turbo Pascal et Java
Logiciels: familière avec Microsoft office, Matlab 6
Logiciels RMN: familière avec XWINNMR de Bruker, nmrPipe, nmrView

EXPERIENCE PROFESSIONNELLE

sept 2006- **maître de conférences** à l'Université H.Poincaré, Nancy
recherches scientifiques dans l'équipe de méthodologie RMN de l'UMR UHP-CNRS 7565, et activités d'enseignement à l'IUT Nancy-Brabois, département de Génie Chimique et Génie des Procédés, et département de Génie Biologique Agro-Alimentaire.

mars-sept 06 CDD sur **contrat européen** (NEST n°5032) dans l'équipe de Méthodologie RMN, FR CNRS 2843, UMR UHP-CNRS 7565 (université Henri Poincaré, Nancy, France)

oct 04- fev 06 stage **post-doctoral** dans le département de physiologie et biophysique (équipe de M.Buck, Case Western Reserve University, Cleveland, Ohio, USA)
Sujet: *étude de la petite GTPase Rac1 dans sa forme active, et de son interaction avec le domaine cytoplasmique de la plexin-B1*.

2003-2004 **attachée Temporaire à l'Enseignement et à la Recherche** au laboratoire de Méthodologie RMN, FRE-CNRS 2415 (université Henri Poincaré, Nancy, France)

2000-2004 **doctorante** au laboratoire de Méthodologie RMN, FRE-CNRS 2415 (université Henri Poincaré, Nancy, France)
Sujet: *corrélation croisée entre mécanisme dipolaire et anisotropie de déplacement chimique. Dynamique des protéines en solution*.

2000- 2003 **moniteur de l'enseignement supérieur** au CIES de Lorraine (université Henri Poincaré, Nancy, France)

sept 99-juin 2000 **stage de DEA** au laboratoire de Méthodologie RMN, FRE-CNRS 2415 (université Henri Poincaré, Nancy, France)
Sujet: *étude de l'effet Overhauser nucléaire : édification de l'aimantation nucléaire par relaxation croisée* ^{1}H-^{15}N *dans les protéines*.

avril-juin 1999 **stage en laboratoire industriel** de recherche (Rhône-Poulenc Industrialisation, Lyon, France)
Sujet: *couplage HPLC-RMN.*

juillet 1998 **stage de magistère** au laboratoire de Méthodologie RMN et au laboratoire de Chimie Théorique (université Henri Poincaré, Nancy, France)
Sujet: *Mesure des déplacements chimiques de différents noyaux par RMN et comparaison avec le calcul théorique*.

ACTIVITES PEDAGOGIQUES

2006- **Université H.Poincaré, Nancy,** Maître de conférences
Enseignements à l'IUT Nancy-Brabois, département de Génie Chimique et Génie des Procédés (chimie analytique, informatique, mathématiques, chimie physique), et département de Génie Biologique Agro-Alimentaire (informatique, physique)
Volume horaire : +192h eq. TD/an

2003-2004 **Université H.Poincaré, Nancy,** ATER

Enseignements de chimie physique (premier cycle Sciences de la Vie et Sciences de la Matière), RMN (de la seconde année à la maîtrise), spectrométrie de masse (seconde année Sciences de la Vie), thermodynamique chimique (première année Sciences de la Vie)

Volume horaire : 96h eq. TD/an

2001-2003 **Université H.Poincaré, Nancy,** Moniteur de l'enseignement supérieur

Enseignements de chimie physique (premier cycle Sciences de la Vie et Sciences de la Matière), RMN (de la seconde année à la maîtrise),

Volume horaire : 64h eq. TD/an

2000-2001 **Ecole Nationale Supérieure des Industries Chimiques (ENSIC), Nancy,** Moniteur de l'enseignement supérieur

Travaux pratiques de chimie physique

Volume horaire : 64h eq. TD/an

1997-2000 **Université Henri Poincaré, Nancy,** Tutorat auprès des étudiants de 1ere année

Enseignements de physique

Volume horaire : 60h/an

Durant ma 1ère année à l'IUT Nancy-Brabois, je suis intervenue au sein de deux départements : Génie Biologique Agro-Alimentaire (GB2A) et Génie Chimique/Génie des Procédés (GCGP). J'ai ainsi assuré prés de 215 heures d'enseignement (heures équivalent TD).
Dans le cadre du département GB2A, je suis intervenue en travaux pratiques d'informatique (bureautique) et travaux pratiques de physique appliquée. Ces enseignements, qui font partie du tronc commun assuré au 1er semestre constituent la formation de base des étudiants qui s'orientent dans le domaine du génie biologique.
Au sein du département GCGP, je suis intervenue en chimie (analytique et physique), ce qui correspond plus à ma formation initiale, mais aussi en informatique (bureautique) et mathématiques. Mes enseignements ont alors été assurés aussi bien sous la forme de travaux dirigés que de travaux pratiques, et aussi bien en 1ère année qu'en 2ème année. J'ai également eu l'opportunité d'intervenir dans le cadre de formations CNAM (en chimie analytique) assurées par le département.
Dans l'un comme l'autre de ces départements, la préparation et le suivi (comptes-rendus de travaux pratiques, évaluation continue des étudiants sous forme de tests…) a été assez prenante, mais je pense devenir plus efficace (car plus rodée au fonctionnement de l'IUT) dans les années futures, et j'espère donc devenir plus à même à la mise en place des enseignements (montage de nouveaux équipements pédagogiques, participation à la mise en place ou à l'évolution d'une filière, à l'organisation d'un cursus, …). D'autre part, je pense être très disponible pour les étudiants malgré mes fonctions partagées sur deux départements, et mes activités de recherche qui ont lieu sur un autre site (faculté des Sciences).

ACTIVITES DE RECHERCHE

Mes activités de recherches ont tout d'abord été menées au laboratoire de Méthodologie RMN, dirigé par le professeur Daniel Canet. L'objectif principal de ma thèse a été l'élaboration de nouvelles méthodologies en Résonance Magnétique Nucléaire. Durant quatre ans, j'ai développé plus particulièrement des méthodes utilisant la relaxation de spin avec l'objectif de caractériser la dynamique des macromolécules en solution. J'ai ensuite complété cette formation par un stage post-doctoral dans l'équipe du professeur Matthias Buck du département de physiologie et biophysique de l'université de Case à Cleveland (Ohio). La thématique de recherche concernait l'étude de l'interaction entre le domaine cytoplasmique de la plexin-B1 et des GTPases par RMN. Je travaille maintenant dans le cadre d'un contrat européen sur les différents modes de transfert de l'hyperpolarisation du parahydrogène et son utilisation dans l'interprétation des phénomènes qui surviennent à la suite de réactions d'hydrogénation, avec comme objectif d'augmenter considérablement la sensibilité d'une expérience de RMN ou d'imagerie par

résonance magnétique. Durant cette année de stage, je me suis également intéressée à l'étude de fluides en écoulement par IRM. Des expériences ont ainsi été mises en place sur l'imageur du laboratoire afin de cartographier les vitesses d'écoulement de l'eau dans un tube capillaire. L'objectif est ensuite d'étendre cette méthodologie à d'autres situations : dispersion dans une fracture isolée, dispersion en milieu poreux... J'ai également entamé une collaboration avec le laboratoire d'Imagerie Adaptative Diagnostique et Interventionnelle du CHU de Nancy-Brabois afin d'étudier les phénomènes de diffusion translationnelle par RMN et IRM. Nous nous intéressons ainsi à l'imagerie de diffusion (coefficient de diffusion apparent et tenseur de diffusion) avec l'objectif de pouvoir mettre en évidence des phénomènes particuliers dans le domaine clinique par comparaison avec les expériences réalisées sur l'imageur du laboratoire de méthodologie RMN.

Aspect thématique

MéthodologieRMN - Mesures de relaxation de spin dans des protéines

D'une manière générale, la connaissance de paramètres physico-chimiques relatifs à certains édifices moléculaires en solution permet d'obtenir de précieuses informations d'ordre dynamique ou structural. Dans cette optique, la Résonance Magnétique Nucléaire constitue un moyen d'investigation intéressant à plus d'un titre, et ceci à travers la relaxation de spins nucléaires. La relaxation de spin est mon thème principal de recherche. J'essaye de mettre au point ou d'améliorer des méthodes permettant la mesure précise et sélective des paramètres de relaxation hétéronucléaire dans des protéines marquées, ma thèse porte ainsi pour moitié sur cette thématique. Nous avons mis au point un nouveau bloc d'impulsions qui agit sélectivement sur un état de spin. A l'aide de ce nouvel outil nous mesurons de manière précise et contrôlée des paramètres de corrélation croisée (interaction entre deux mécanismes de relaxation, ici mécanisme dipolaire et mécanisme par anisotropie de déplacement chimique). Ces paramètres ajoutés aux termes d'autorelaxation classique (relaxation longitudinale T_1, relaxation transverse T_2 et relaxation croisée σ) permettent de mieux caractériser la dynamique des protéines et l'anisotropie de déplacement chimique du noyau azote-15 de chaque résidu.

J'ai également pu appliquer cette approche au domaine des petites molécules. Nous avons ainsi conçu de nouvelles séquences d'impulsions permettant de visualiser les termes de corrélation croisée entre mécanisme dipolaire et mécanisme par anisotropie de déplacement chimique à l'aide d'une simple expérience à deux dimensions.

Méthodologie RMN - Etude de la dynamique des protéines en solution, anisotropie de déplacement chimique et contributions d'échange

L'autre moitié de ma thèse porte sur l'exploitation des paramètres de relaxation du noyau azote-15 mesurés sur des protéines enrichies. L'analyse des résultats expérimentaux permet en premier lieu de décrire la dynamique des macromolécules. Les noyaux azote sont uniformément repartis le long de la chaîne protéique et constituent donc des sondes idéales pour l'étude de la dynamique de ces objets. La stratégie repose sur une analyse au niveau de chaque résidu des paramètres de relaxation obtenus à plusieurs valeurs du champ magnétique statique. La méthode nous permet d'accéder aux propriétés dynamiques de la protéine, mais également d'examiner les propriétés structurales telles que l'anisotropie de déplacement chimique de l'azote-15 ou les contributions d'échange (chimique ou conformationel). De plus, la méthode s'avère compatible avec l'évaluation de l'anisotropie de la réorientation globale des protéines.

Caractérisation et identification de substances naturelles par RMN

Durant ma thèse, j'ai également pu collaborer avec le professeur Max Henri de la faculté de Pharmacie de Nancy, notre objectif étant l'identification de nouveaux triterpènes. Outre les difficultés inhérentes aux substances naturelles (pureté, faible quantité), les molécules à identifier comportent un nombre inconnu de sucres (dont la nature est également inconnue). Certaines possèdent au moins une dizaine de sucres et l'utilisation de techniques RMN à deux dimensions ne permet pas de séparer toutes les réponses spectrales. Nous avons donc élaboré de nouvelles méthodes basées sur la polarisation croisée en phase liquide. Elles permettent l'édition de sous-spectres à une et deux dimensions dont l'interprétation est alors possible et non ambiguë.

Etude de l'interaction entre le domaine cytoplasmique de la plexin-B1 et des GTPases
Après ce travail dans le domaine de la physico-chimie des protéines et substances naturelles, j'ai décidé de poursuivre mes recherches par un stage post-doctoral dans un laboratoire de biologie moléculaire. Pendant les quatre années de ma thèse, j'ai développé des méthodes RMN expérimentales pour caractériser le mouvement des macromolécules en solution, et j'ai ensuite voulu comprendre non seulement comment surgissent ces mouvements, mais aussi comment ils déterminent la fonction de protéine. À cette fin j'ai choisi le domaine des interactions entre protéines, mon projet concernant l'étude de petites GTPases de la famille Ras et de leur interaction avec la Plexin-B1. Mon approche a bien sur fait appel à la résonance magnétique nucléaire, mais cette expérience m'a permis de mieux me familiariser avec l'aspect biologique de mes recherches (expression et purification de protéines, préparation des échantillons RMN, raisonnements d'un point de vue plus biologiques), et donc de faciliter les contacts avec les personnes de ce domaine pour mener d'éventuels projets pluridisciplinaires, à l'interface chimie physique/biologie.

Méthodologie RMN – transfert de l'hyperpolarisation du parahydrogène
La RMN est une technique réputée pour être peu sensible, la raison principale étant la faible différence de population entre les niveaux d'énergie magnétique. Il est possible d'hyperpolariser certains atomes ou molécules et donc d'augmenter par des facteurs importants la sensibilité des mesures de RMN ou d'IRM. L'existence d'isomères de spin comme le para-hydrogène (caractérisé par l'opposition des spins nucléaires des deux atomes d'hydrogène) ou la para-eau permettent ainsi de penser qu'il est possible d'atteindre des gains en sensibilité de l'ordre de 10^4 à 10^5. L'équipe de méthodologie RMN de Nancy est engagée dans un contrat européen dont l'objectif est à la fois de mieux comprendre la physicochimie des molécules dans un état « para » mais aussi de mettre au point des procédures expérimentales pour transférer l'hyperpolarisation à d'autres molécules. Les applications sont nombreuses, et étant donné le rôle central de l'eau dans les domaines biologiques, l'étude de la para-eau promet de très nombreuses applications, allant de la médecine, les sciences de la vie, la chimie, aux sciences de la terre, etc… et donc le développement de méthodes dans un domaine de recherche nouveau et interdisciplinaire. Mes recherches actuelles s'insèrent, pour une partie, dans ce cadre nouveau pour l'équipe de méthodologie RMN, et correspondent plus précisément au développement de nouvelles techniques pour optimiser les transferts d'hyperpolarisation, techniques qui font intervenir la relaxation de spin. Nous avons ainsi pu étudier la manière dont se passaient les transferts d'hyperpolarisation au sein d'un système à 3 spins, et comment cette hyperpolarisation allait ensuite être affectée par les différents mécanismes de relaxation inhérents à la RMN. Ce travail a résulté en la publication d'un article dans le *Journal of the American Chemical Society*.

Méthodologie RMN – étude de fluides en écoulement par IRM
La RMN s'avère être une technique très puissante pour voir dans l'opaque. L'application la plus connue est l'Imagerie par Résonance Magnétique (IRM) médicale, mais la technique est dorénavant appliquée dans d'autres disciplines, notamment dans le domaine des sciences des matériaux. Par exemple, les mesures de diffusion au moyen de gradients de champ pulsés sont couramment utilisées pour étudier les mouvements des molécules dans les liquides et les solides. L'IRM permet également de suivre des fluides en écoulement, et même de cartographier leurs vitesses au sein de canaux, vaisseaux, ou milieux poreux.
Le travail a consisté en la mise au point de ces mesures dans le cas simple d'un écoulement dans un tube capillaire (écoulement de Poiseuille – dispersion de Taylor). Anne-Sophie Febvre, étudiante en L3 Sciences de la Matière à la faculté des Sciences, a permis de mener à bien les premières mesures dans le cadre d'un projet tutoré (environ 36h au laboratoire). Ainsi, le dispositif a été calibré afin de pouvoir quantifier les vitesses des fluides, et des images en deux dimensions nous ont permis de visualiser leur dispersion au sein d'un tube. L'objectif est ensuite d'étendre cette méthodologie à des situations plus délicates pour lesquelles le résultat n'est pas connu : dispersion dans une fracture isolée, dispersion en milieu poreux.

Méthodologie RMN – mesures de diffusion en RMN et IRM
Durant cette première année, je me suis également intéressée aux mesures de diffusion. Nous avons ainsi débuté une collaboration avec le laboratoire d'Imagerie Adaptative Diagnostique et Interventionnelle du CHU de Nancy-Brabois et dirigé par Monsieur le Professeur Jacques Felblinger. Le but de cette

collaboration est d'étendre les mesures de diffusion faites au laboratoire de méthodologie RMN à des appareils médicaux disponibles au CHU, ceci afin de mieux appréhender les images de diffusion obtenues à un niveau médical et de mieux comprendre les phénomènes visibles dans le vivant (diffusion restreinte par exemple). Nous encadrons conjointement un stagiaire de M2P (Sébastien Monnier, M2P en Méthodes Avancées d'Analyses Physico-chimiques et d'Imageries) afin de mener à bien ce projet.
L'imagerie de diffusion est une imagerie de contraste basée sur les différences de diffusion des molécules (molécules d'eau dans le cerveau par exemple dans le milieu médical). Ainsi, la diffusion intra-cérébrale dépend de plusieurs facteurs : type de molécule (eau), température, micro-structure…. Elle est importante dans l'eau libre comme le liquide céphalo-rachidien et réduite dans les tissus (espaces intra- et extra-cellulaires) du fait des contraintes spatiales. Les mesures du coefficient apparent de diffusion permettent de caractériser précisément ces différents tissus. Un autre objectif est l'évaluation de tenseurs de diffusion. En effet, la diffusion est rarement isotrope; par exemple, dans la substance blanche cérébrale, elle est facilitée le long des fibres et restreinte perpendiculairement à celles-ci : la diffusion est alors dite anisotrope. L'analyse du tenseur de diffusion translationnelle donne accès à l'orientation des fibres dans la matière blanche, et sa détermination quantitative devrait permettre de mieux comprendre ces phénomènes.

Co-encadrement de chercheurs

2003 Mathieu Cornillac, **stage de 1ère année de magistère de génie moléculaire, matériaux et procédés**
« Acquisition et attribution de spectres RMN »

2004 Jérôme Bedet, **DEA de chimie et physico-chimie moléculaires**
« Etude de la sélectivité du transfert de polarisation par couplage scalaire en RMN du liquide »

2007 Anne-Sophie Febvre, **projet tutoré L3 Sciences de la Matière**
« Etude par IRM de fluides en écoulement »

2007 Sébastien Monnier, **M2P en Méthodes Avancées d'Analyses Physico-chimiques et d'Imageries**
« Développement des mesures de diffusion par imagerie »

Collaborations scientifiques

Professeur Max Henry, faculté de pharmacie, Nancy, France.
Identification et attribution de triterpènes.

Professeur Christian Roumestand, centre de biochimie structurale, faculté de pharmacie, Montpellier, France.
Dynamique de protéines, étude des protéines p8 et p13.

Professeur Jacques Felblinger, laboratoire d'Imagerie Adaptative Diagnostique et Interventionnelle (UHP-INSERM ERI13), CHU de Nancy-Brabois, France.
Mesures de diffusion par IRM.

THESE

Corrélation croisée entre mécanisme dipolaire et anisotropie de déplacement chimique. Dynamique des protéines en solution.

Thèse de l'université de Nancy 1. 26 mai 2004.

Directeur de thèse: M Pierre Mutzenhardt, professeur université H.Poincaré, Nancy I.

Jury :

Président :	M. Daniel CANET	Professeur, Université Henri Poincaré, Nancy I
Rapporteurs :	M. Eric GUITTET	Directeur de recherche CNRS, ICSN Gif sur Yvette
	M. Bruno KIEFFER	Professeur, Université Louis Pasteur, Strasbourg I
Examinateurs :	M. Christian ROUMESTAND	Professeur, Université de Montpellier I
	M. Pierre MUTZENHARDT	Professeur, Université Henri Poincaré, Nancy I

Résumé :

Les travaux présentés dans ce mémoire concernent la détermination et l'exploitation des paramètres de relaxation de l'isotope-15 de l'azote dans des protéines enrichies.

La première partie introduit de manière générale les mécanismes de relaxation de spin. Le deuxième chapitre est consacré à la description des méthodes de mesure des paramètres de relaxation dans les protéines. De nouvelles méthodes permettant la mesure du terme de corrélation croisée provenant de l'interférence entre le mécanisme dipolaire (NH) et l'anisotropie de déplacement chimique (csa) de l'azote-15 sont exposées. Le troisième chapitre traite de la manière d'extraire des paramètres de relaxation des informations structurales et dynamiques. L'approche est basée sur une analyse résidu par résidu de la relaxation mesurée à plusieurs valeurs du champ magnétique statique, et s'avère compatible avec la détermination de l'anisotropie globale de réorientation des molécules. L'intérêt d'inclure les paramètres de corrélation croisée est également exposé pour la détermination simultanée du csa et de l'échange chimique.

PUBLICATIONS, COMMUNICATIONS ORALES, AFFICHES

Publications dans des périodiques avec comité de lecture.

13 articles

1. S.BOUGUET-BONNET, M.ROCHD, P.MUTZENHARDT, M.HENRY
Total assignment of ^{1}H and ^{13}C NMR spectra of three triterpene saponins from roots of Silene vulgaris (Moench) Garcke.
Magn. Reson. Chem., 2002, 40, 618-621

2. S.LECLERC, S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, J.BRONDEAU, D.CANET
Simulation of radio-frequency field inhomogeneity effects. Application to pulse trains aimed at the determination of csa-dipolar interference terms.
Magn. Reson. Chem., 2003, 41, 769-775

3. D.CANET, S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT
On the Calculation of Cross-Correlation Spectral Density Functions Within the Model-Free Approach
Concepts Magn. Reson. A, 2003, 19, 65-70

4. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, D.CANET
An alternative spin-state-selective pulse sequence element
Magn. Reson. Chem., 2003, 41, 1030-1033

5. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, D.CANET
Measurement of ^{15}N csa/dipolar cross-correlation rates by means of Spin State Selective experiments.
J. Biomol. NMR, 2004, 30, 133-142

6. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, C.ROUMESTAND, D.CANET
The concept of effective correlation times for describing backbone motions in proteins. Part. 1: A residue-per-residue self-consistent analysis of multifield ^{15}N relaxation parameters.
Concepts Magn. Reson., 2005, 24A, 1-9

7. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, C.ROUMESTAND, D.CANET
The concept of effective correlation times for describing backbone motions in proteins. Part. 2: Tentative interpretation of the residue-specific correlation time in terms of overall rotation-diffusion.
Concepts Magn. Reson., 2005, 24A, 10-16

8. S.BOUGUET-BONNET, S.LECLERC, P.MUTZENHARDT, D.CANET
HMBC-like experiment based on longitudinal csa/dipolar cross-correlation.
J.Magn.Reson., 2005, 173, 29-33

9. M.BUCK, S.BOUGUET-BONNET, R.W.PASTOR, A.D.MACKERELL
Importance of the CMAP correction to the CHARMM22 Protein Force Field: dynamics of hen lysozyme.
Biophys. J., 2006, 90, 36-38

10. S.BOUGUET-BONNET, M.BUCK
^{1}H, ^{15}N, ^{13}C assignments for the activated form of the small Rho-GTPase Rac1; comparison with the inactive GDP-bound state.
J. Biomol. NMR, 2006, 36 (supplément 5), 51

11. V.ROPARS, S.BOUGUET-BONNET, D.AUGUIN, P.BARTHE, D.CANET, C.ROUMESTAND
Unraveling Protein Dynamics through Fast Spectral Density Mapping.
J. Biomol. NMR, 2007, 37(3), 159-177

12. N.COUDEVYLLE, M.ANTOINE, S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, S.BOSCHI-MULLER, G.BRANLANT, M.-T.CUNG
Solution structure and backbone dynamic of the reduced form and an oxidized form of E. coli Methionine Sulfoxide Reductase A (MsrA): structural insight of the MsrA catalytic cycle.
J. Mol. Biol., 2007, 366, 193-206

13. D.CANET, S.BOUGUET-BONNET, C.AROULANDA, F.REINERI
About long-lived nuclear spin states involved in parahydrogenated molecules.
J. Am. Chem. Soc., 2007, 129, 1445-1449

Publications en cours

- S.BOUGUET-BONNET, M.BUCK
Complex formation between the Rac1/Rnd1 binding ubiquitin-like domain of human plexin-B1 and small GTPase Rac1.GMPPNP results in localized and compensatory changes in ps-ns mainchain dynamics.

- Y.TONG, S.BOUGUET-BONNET, R.S.ALVIANI, M. LI, M.BUCK
Plexins have a Central Effector Domain for Rac1/Rnd1 GTPases and Interact through a Novel Motif that Overlaps a Dimerization Interface: A Model for Plexin Activation.

Communications orales.

10 présentations orales (4 nationales, 6 internationales):
(le conférencier est souligné)

1. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, C.ROUMESTAND, D.CANET
Relaxation de l'azote-15 et dynamique de réorientation des protéines
Journée scientifique organisée par l'école doctorale SESAMES (univ. H.Poincaré, Nancy), Avril 2001

2. P.MUTZENHARDT, O.WALKER, S.BOUGUET-BONNET, P.TEKELY, D.CANET
Determination of chemical shielding tensor from multifield relaxation measurements
Conference invitée, "Common aspects of NMR spectroscopy in liquid and solid phase", Lodz (Pologne), Sept 2002

3. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, D.CANET
A new Spin State Selective Excitation/Inversion building block. Application to ^{15}N-^{1}H/^{15}N CSA cross-correlation measurements in proteins
Journée scientifique organisée par l'école doctorale SESAMES (univ. H.Poincaré, Nancy), Sept 2002

4. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, D.CANET
^{15}N-^{1}H dipolar / ^{15}N csa cross correlation measurements in proteins. Direct and simultaneous determination of exchange and csa contributions.
Physiology & Biophysics Department, Case Western Reserve University (Cleveland, Ohio), Mai 2004

5. P.MUTZENHARDT, S.BOUGUET-BONNET, O.WALKER, D.CANET
Novel (and less novel) experimental approaches for accessing to chemical shift anisotropy - dipolar interference terms. From small molecules to proteins.
Conférence invitée, 17th EENC, Lille (France), Sept 2004

6. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, C.ROUMESTAND, D.CANET
^{15}N relaxation and protein dynamics. The concept of effective correlation times for describing backbone motions in proteins.
Physiology & Biophysics Department, Case Western Reserve University (Cleveland, Ohio), Nov 2004

7. P.MUTZENHARDT, S.BOUGUET-BONNET, D.CANET, C.ROUMESTAND
The concept of effective correlation times for describing motions in proteins.
Conférence invitée, EuroConference on Structural Genomics: structure, dynamics and interactions of biomolecules, European Science Foundation, Backagarden, Höör (Suede) Aout 2005

8. P.MUTZENHARDT, S.BOUGUET-BONNET, D.CANET, C.ROUMESTAND
A residue-per-residue self-consistent analysis of multifield ^{15}N relaxation parameters.
Conférence invitée, "NMR: a tool for biology VII", Institut Pasteur, Paris (France) Janvier 2006

9. S.BOUGUET-BONNET
Développements méthodologiques en RMN: relaxation de spin et phénomènes dynamiques dans les protéines.
Laboratoire de Chimie Inorganique et Matériaux Moléculaires, UMR CNRS 7071, Université Pierre et Marie Curie, Jussieu (France) Mai 2006

10. M.BUCK, Y.TONG, S.BOUGUET-BONNET
NMR studies of a plexin domain with/without Rac1 GTPase.
NMR symposium "frontiers of NMR spectroscopy", Cleveland center for structural biology (Ohio, USA) Mai 2006

Affiches.

9 présentations de posters (3 nationales, 6 internationales):
(le présentateur du poster est souligné)

1. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, C.ROUMESTAND, D.CANET
Nitrogen-15 spin relaxation and protein dynamics
Journée scientifique organisée par l'école doctorale SESAMES (univ. H.Poincaré, Nancy), Sept 2001

2./3. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, D.CANET
A new Spin State Selective Excitation/Inversion building block. Application to ^{15}N-^{1}H/^{15}N CSA cross-correlation measurements in proteins
Journée scientifique organisée par l'école doctorale SESAMES (univ. H.Poincaré, Nancy), Avril 2002
16th EENC, Prague (République Tchèque), Juin 2002

4. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, D.CANET
Longitudinal and Transverse Cross-Correlation rates by means of Spin State Selective Measurements.
10th Chianti Workshop, San Miniato (Italie), Mai 2003

5. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT
Direct and Simultaneous evaluation of ^{15}N Chemical Shift Anisotropy and Exchange Contributions in Proteins.
17th EENC, Lille (France), Sept 2004

6. S.BOUGUET-BONNET, P.MUTZENHARDT, C.ROUMESTAND, D.CANET
The concept of effective correlation times for describing backbone motions in proteins: a residue-per-residue self-consistent analysis of multifield 15N relaxation parameters, and interpretation in terms of overall rotation-diffusion
46th ENC, Providence (Rhode Island), Avril 2005

7. P.MUTZENHARDT, S.BOUGUET-BONNET, S.LECLERC, D.CANET
HMBC-like experiment based on longitudinal csa/dipolar cross-correlation
46th ENC, Providence (Rhode Island), Avril 2005

8. S.BOUGUET-BONNET, Y.TONG, M.BUCK
Using Relaxation, Chemical Shift and Cross-saturation Measurements to probe the Interaction between the small GTPase Rac1 and a cytosplasmic domain of Plexin-B1
22th ICMRBS, Göttingen (Allemagne), Août 2006

9. S.BOUGUET-BONNET, C.AROULANDA, F.REINERI, D.CANET
About hyperpolarization transfers occurring in para-hydrogenated molecules
20th GERM, Alénya (France), Mars 2007