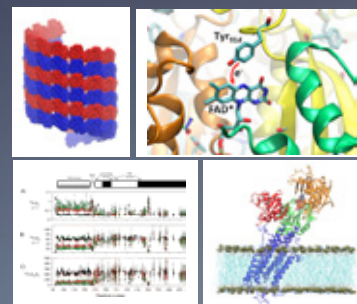


[ Jeudi 27 avril 2017 ]

Laboratoire de Chimie Physique (LCP)  
salle Magat, bât. 349, Orsay ]



## 5<sup>e</sup> WORKSHOP [ AMMIB ]

Atelier de Modélisation des Molécules d'Intérêt Biologique (AMMIB) de Paris-Saclay

### PROGRAMME

- 9h00** Accueil autour de croissants, café et thé
- 9h30-9h40** Introduction
- 9h40-9h55** **TRKA collective motions deletion driven by NGF mutation**  
*Pedro Túlio de Resende Lara*
- 9h55-10h10** **Structural and dynamics studies of a potassium channel and disease-associated mutants**  
*Charline Fagnen*
- 10h10-10h40** **Nouveaux aspects de l'interface ADN-histone du nucléosome en solution**  
*Romain Retureau*
- 10h40-11h10** **Dissociation of amyloid fibrils using IR laser pulses : a non-equilibrium molecular dynamics study**  
*Van Oanh Nguyen Thi*
- Pause**
- 11h30-12h00** **Simulations REMD de la Thymidylate synthase X**  
*Jean-Christophe Lambry*
- 12h00-12h30** **Un nouveau paradigme: Le projet MDFT**  
*Cédric Gageat*
- Déjeuner**
- 14h00-14h40** **Computational protein design of protein: peptide recognition**  
*David Mignon, Nicolas Panel*
- 14h40-15h10** **Criblage virtuel et docking : fiabilité, stratégie et dépassement des problèmes**  
*Liliane Mouawad*
- 15h10-15h40** **Vkorc1 et résistance aux anti-vitamines k : Etude par modélisation moléculaire**  
*Nolan Chatron*
- Pause**
- 16h00-16h30** **Modélisation gros-grain d'un nanopore protéique : Effets des charges du pore sur le flux ionique**  
*Delphine Dessaux*
- 16h30-17h00** **Molecular dynamics simulations and SAXS of the norovirus major capsid protein: From dimer to capsid**  
*Thibault Tubiana*
- 16h00-17h30** **Acheminement des nucléotides arrivants vers le site actif de la polymérase du virus de l'hépatite C**  
*Kaouther Ben Ouirane*

Organisateurs :

Liliane Mouawad (Institut Curie, Orsay)

Eve Ranvier (LCP, Paris-Sud)

Aurélien de la Lande (LCP, Paris-Sud)

