**Projets de Bioinformatique Structurale**

L’objectif de ces projets est de vous familiariser avec les différentes méthodes et outils de Bioinformatique et de Modélisation Moléculaire.

Différentes séquences ont été sélectionnées et elles n’ont pas pour l’instant de structures 3D disponibles.

Vous choisirez chacun une séquence parmi la liste fournie.

Pour chacune de ces séquences, vous devrez :

* ***Partie Génération Modèles***

1. Construire un modèle 3D, en utilisant différents outils dont vous pourrez comparer les résultats (Modeller, RaptorX,SwissModel,I-Tasser,Rosetta etc…)

Attention, il peut s’agir d’une protéine membranaire, vous devrez donc au préalable vous aider d’outils dédiés.

1. Affiner les régions de boucles (SuperLooper,FALC-Loop,GalaxyRefine ou GalaxyRefine Web etc..) et chaînes latérales (Scwrl4,SidePro,Rasp ) avec des outils dédiés de votre choix.
2. Comparer les résultats et discuter
3. Evaluer votre modèle. **TRES IMPORTANT**

* ***Partie Etude de la conformation***

Pour chacun des modèles construits.

1. Etudiez les modes normaux sur la base d’un réseau élastique et déduire ceux susceptibles de participer aux changements conformationnels.
2. Réaliser une simulation gros-grain en utilisant le champ de force Martini.
3. Analyser les différents mouvements avec des mesures et outils adaptés.

L’ensemble des résultats devra faire l’objet d’un rapport d’environ 20 pages dans lequel vous présenterez les propriétés biologiques, la question traitée, les outils et méthodes utilisées et bien sur les résultats obtenus en faisant preuve d’esprit critique. Le rapport pourra être en anglais (recommandé).

Nous serons très sensibles à la pertinence de la démarche et à son argumentation.

Prenez soin de bien lire la bibliographie et de la fournir.

N’hésitez à passer une journée sur cet aspect qui pourra vous aider grandement par la suite.

**Liste des protéines**.

**Ne pas prendre les séquences pour lesquelles la structure 3D a été résolue bien sur.**

|  |
| --- |
| UniProtKB - A0A2G9RHE5 (A0A2G9RHE5\_LITCT) |
| UniProtKB - D6WKK0 (D6WKK0\_TRICA) |
| UniProtKB - F0XXY9 (F0XXY9\_AURAN) |
| UniProtKB - W0K4U9 (W0K4U9\_9EURY) |
| UniProtKB - E1ZG21 (E1ZG21\_CHLVA) |
| UniProtKB - X0K9N7 (X0K9N7\_FUSOX) |
| UniProtKB - M7T4C5 (M7T4C5\_EUTLA) |
| UniProtKB - W5MNK1 (W5MNK1\_LEPOC) |
| UniProtKB - W7X0N2 (W7X0N2\_9BURK) |
| UniProtKB - A0A1K1M4I5 (A0A1K1M4I5\_9BACT) |
| UniProtKB - W7IKS8 (W7IKS8\_9PSEU) |
| UniProtKB - X6IVT1 (X6IVT1\_9RHIZ) |
| UniProtKB - A0A0W7VPD0 |
| UniProtKB - G7J6M8 (G7J6M8\_MEDTR) |