

TP Modélisation moléculaire (M2 V. Tran)

Finalité pédagogique :

- approche 3D (en prolongement de la bioinformatique)
- suite et approfondissement (méthodologiques) du TP de l'année dernière

Objectifs scientifiques et techniques

Utilisation de bases bibliographiques

Utilisations de bases structurales

Manipulation de structures 3D:

- visualisations, superpositions globales,
- Classification globale des repliements
- **caractérisation d'éléments structuraux et fonctionnels,**
- **identification des forces de cohésion des repliements**
- **identification des sites actifs et des acides aminés d'intérêt qui les composent.**

Projet

Sur le schéma l'année dernière, vous allez utiliser la même approche méthodologique pour initier une étude de modélisation sur la thématique suivante :

Structures /interactions moléculaires / application dans le drug design

Les niveaux d'intervention possibles :

Interactions protéines-ligands
Interactions protéines-sucre
Interactions lectines-sucre
Galectines-sucre
Galectine 3 et(ou) 7

a/ il faudra d'abord établir les relations entre tous ces niveaux,

b/ vous choisirez un thème spécifique à un niveau particulier et le traiterez en modélisation moléculaire (et bioinformatique) dans une optique de drug design.

Votre projet sera rendu sous la forme d'un rapport à remettre à la fin des 5 séances. Les critères de notation seront notamment :

- la pertinence et l'originalité de votre projet,
- la réflexion méthodologique associée à la réalisation des objectifs assignés,
- la quantité et la qualité du travail décrit en relation avec les critères structuraux mentionnés
- la qualité et la pertinence des illustrations de graphisme moléculaire
- la clarté et la qualité de la présentation