

Collaboration haptique étroitement couplée pour la déformation moléculaire interactive

Jean SIMARD

Université de PARIS-Sud

CNRS-LIMSI

12 mars 2012



Sommaire

1 Introduction

Définition

Docking moléculaire

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.

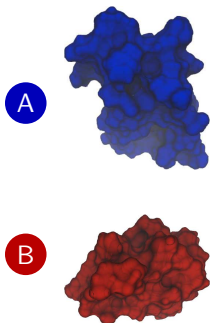


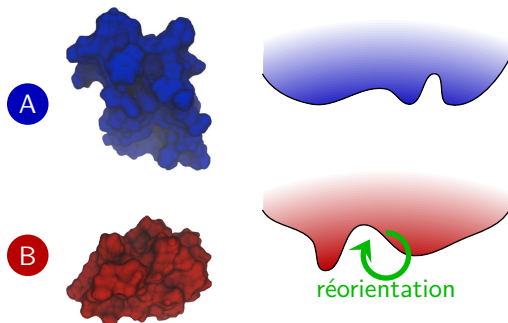
Figure: *Docking* moléculaire

Facteurs de complexité

Définition

Docking moléculaire

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.



Facteurs de complexité

- Nombreux atomes

Figure: *Docking* moléculaire

Définition

Docking moléculaire

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.

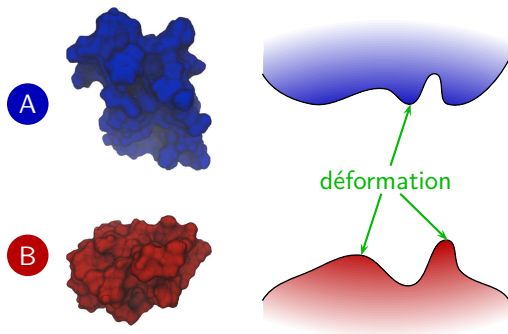


Figure: *Docking* moléculaire

Facteurs de complexité

- Nombreux atomes
- Orientation

Définition

Docking moléculaire

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.

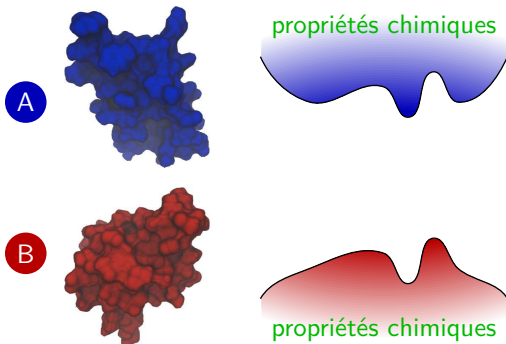


Figure: *Docking* moléculaire

Facteurs de complexité

- Nombreux atomes
- Orientation
- Flexibilité

Définition

Docking moléculaire

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.

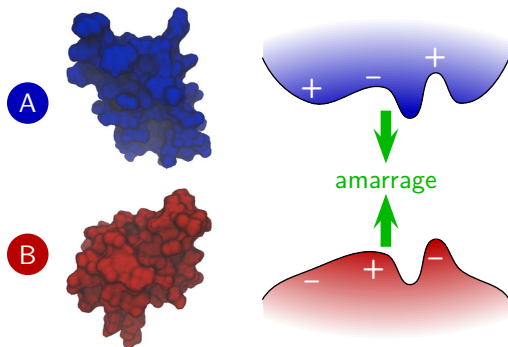


Figure: *Docking* moléculaire

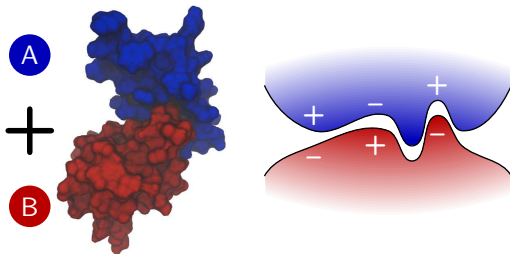
Facteurs de complexité

- Nombreux atomes
- Orientation
- Flexibilité
- Facteurs chimiques

Définition

Docking moléculaire

ou *amarrage moléculaire*, consiste à trouver l'orientation et la conformation optimale permettant d'assembler 2 molécules.



Facteurs de complexité

- Nombreux atomes
- Orientation
- Flexibilité
- Facteurs chimiques
- Complémentarité
 - géométrique
 - électrostatique

Figure: *Docking* moléculaire