

Modélisation et dynamique moléculaire (3 crédits) [Duneau J-P., Coutinho P.]

Code: SBBCU5L

Objectif(s): Connaitre la diversité des approches de modélisation moléculaire utilisées pour comprendre les relations entre la fonction des macromolécules biologiques leur structure et leur dynamique. S'initier aux méthodes théoriques qui permettent d'accéder aux mouvements de ces molécules.

Volume horaire: 20h de CM - 10h de TD - 0h de TP

Description

Modélisation Moléculaires: les approches de mécanique moléculaires, incluant la notion de champs de forces ainsi que les techniques de minimisation d'énergie et de Montecarlo seront abordées. Relation Structure-Dynamique-Fonction: à partir d'exemples tirés de la littérature nous montrerons pourquoi la connaissance d'une structure figée ne suffit généralement pas à comprendre la fonction des protéines et des acides nucléiques. L'importance des mouvements moléculaires sera montrée dans le cas des réactions enzymatiques, du transport de l'oxygène, de la reconnaissance moléculaire et de la formation de complexes. La modélisation et la simulation des mouvements moléculaires: la simulation informatique des mouvements moléculaires repose sur des principes physiques très simples et relativement rigoureux mais qui ont pendant très longtemps manqué de possibilités de confrontation aux données expérimentales. Des clés seront données pour comprendre les protocoles, mettre en œuvre les logiciels et comparer les résultats aux données expérimentales.

Prérequis

Langue étrangère: Anglais.