

## ECOLE DOCTORALE SCIENCES DE LA VIE ET DE LA SANTE

### FORMATION : Découverte de la modélisation moléculaire de protéines

**Public** : Doctorants de l'ED.

**Nombre de participants** : limité à 8 (salle de réunion avec machine de l'IPMC).

**Intervenants** : Romain Gautier (Polytech'Nice, IPMC), Dominique Douguet (INSERM, IPMC)

**Pré-requis** : Biochimie structurale, connaissance d'outils de recherche et d'analyse de séquences protéiques (Blast, alignement de séquences, banque de données Uniprot, Swissprot).

**Durée** : 1.5 jours avec une partie cours et une partie TD/TP sur machines.

**Contenu** : Rappel de biochimie structurale, détermination de structures (RX, RMN), Calcul d'énergie, Bases de données de structures et de repliements (PDB, CATH, SCOP), outils de visualisation moléculaire (outil Pymol). Recherche de structures similaires dans les bases de données à partir de la séquence, Principe de la modélisation par homologie avec un cas concret, exemples de modélisation avec des serveurs on-line (Swiss-Model, Geno3D, @tome\_v2), découverte de chemo-informatique.