

Modélisations in silico & in vivo



Niveau d'étude
BAC +4



ECTS
3 crédits



Composante
École
d'ingénieur
Denis Diderot



Période de
l'année
Semestre 2

En bref

- **Langue(s) d'enseignement:** Français
- **Méthode d'enseignement:** En présence
- **Forme d'enseignement :** Cours magistral, Travaux dirigés & Travaux pratiques
- **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

OBJECTIFS

Savoir utiliser un logiciel de docking et de dynamique moléculaire classique. Savoir sélectionner un modèle pour simuler le comportement d'un système donné. Savoir analyser les trajectoires obtenues et relier ces analyses aux observables.

SYLLABUS

Comprendre à l'aide d'approches expérimentales et computationnelles le comportement des interactions ligands/protéines ou ligands/ADN au cours du temps.

Du point de vue de la modélisation in silico, il s'agira de choisir le bon modèle pour simuler le comportement de ces systèmes, d'appréhender les limites des différentes

méthodes, d'analyser les trajectoires obtenues et de relier ces analyses aux observables.

En ce qui concerne le suivi de molécules in vivo, il s'agira de comprendre les différents types d'expériences permettant d'obtenir les trajectoires moléculaires et quels paramètres peuvent être extraits de celles-ci pour en tirer des informations sur la biologie de ces molécules.

I. Modélisation in silico

- Méthode de docking moléculaire
- Présentation des méthodes de calcul de l'énergie

Mécanique moléculaire (MM) classique : représentation empirique de l'énergie potentielle d'un système et méthodes de champ de force. Présentation des champs de force utilisés pour les applications aux systèmes biologiques. Paramétrisation : introduction aux méthodes quantiques (QM)

- Dynamique moléculaire classique : Équations classiques du mouvement et leur intégration, Techniques numériques de dynamique moléculaire et analyse des trajectoires.

Applications (TP) : étude d'une protéine dans l'eau, et étude d'un système ligand-récepteur

II. Modélisation in vivo

Pour en savoir plus, rendez-vous sur > u-paris.fr/choisir-sa-formation

a) Les différentes techniques de suivi de molécules dans une cellule vivante en temps réel. Introductions théoriques aux techniques de FRAP, Slow Single Particule Tracking, Fast Single Particule Tracking.

b) Étude détaillée du suivi de trajectoires d'un facteur de transcription

En bref

LIEU(X)

> Campus des Grands Moulins

Pour en savoir plus, rendez-vous sur > u-paris.fr/choisir-sa-formation