



## Master : Sciences du Médicament

### Parcours : Biologie Structurale et Conception Rationnelle de Molécules Bioactives

UE – Bioinformatique Structurale											
Positionnement	<b>Master 2 - Semestre 1</b>										
Crédits	<b>2 ECTS</b>										
Responsable	Stefano Trapani <a href="mailto:Stefano.trapani@univ-montp2.fr">Stefano.trapani@univ-montp2.fr</a>										
Intervenants	<b>Enseignants :</b> <i>S. Trapani, J.-F. Guichou</i> <b>Conférenciers :</b> à déterminer										
Objectifs	<p>Apprendre les méthodes et outils pour :</p> <ul style="list-style-type: none"><li><input type="checkbox"/> l'analyse comparative de séquences et structures 3D des macromolécules biomolécules</li><li><input type="checkbox"/> la prédiction de leur structure tertiaire.</li></ul> <p>La connaissance de la structure 3D de bio-molécules isolées ou en complexe avec d'autres partenaires moléculaires (substrats, inhibiteurs, cofacteurs, récepteurs...) est une source précieuse d'informations pour l'élucidation des mécanismes du vivant au niveau moléculaire. Ce type d'information (qu'on peut obtenir par des techniques expérimentales telles que la cristallographie ou la RMN) peut être utilement analysé par des moyens informatiques. Elle est couramment exploitée, par exemple, dans l'industrie pharmaceutique pour guider la conception de nouveaux composés à but thérapeutique (modélisation de ligands assistée par ordinateur). De même, l'analyse comparative du grand nombre de structures et séquences actuellement disponibles dans les bases de données publiques permet de réaliser avec de plus en plus de fiabilité des prédictions statistiques sur des biomolécules pour lesquelles l'information expérimentale sur leurs structures n'est pas disponible.</p>										
Description (10h CM + 15h TP)	<ul style="list-style-type: none"><li>- Initiation au système UNIX</li><li>- Bio-Informatique Structurale</li><li>- Alignement de séquences</li><li>- Prédiction de structures</li><li>- Interface Bio-Informatique / Biologie Structurale</li><li>- Mécanique, Dynamique et Modélisation Moléculaire</li><li>- Criblage « in silico »</li><li>- Protéomique Fonctionnelle</li></ul>										
Mots clés	Bioinformatique – Prédiction de Structure – Dynamique Moléculaire – Criblage in silico										
Modalités de contrôle des connaissances	<table border="1"><tbody><tr><td>1<sup>ère</sup> session</td><td><i>Ecrit</i></td><td><i>Oral</i></td><td><i>Rapport</i></td><td><i>CC</i></td></tr><tr><td></td><td><i>3h</i></td><td><i>Non</i></td><td><i>Non</i></td><td><i>Non</i></td></tr></tbody></table> <p>2<sup>ème</sup> session: mêmes modalités</p>	1 <sup>ère</sup> session	<i>Ecrit</i>	<i>Oral</i>	<i>Rapport</i>	<i>CC</i>		<i>3h</i>	<i>Non</i>	<i>Non</i>	<i>Non</i>
1 <sup>ère</sup> session	<i>Ecrit</i>	<i>Oral</i>	<i>Rapport</i>	<i>CC</i>							
	<i>3h</i>	<i>Non</i>	<i>Non</i>	<i>Non</i>							