



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

<b>UE – Bioinformatique Structurale</b>	
Positionnement	<b>Master 2 - Semestre 1</b>
Crédits	<b>2,5 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>- l'analyse comparative de séquences et structures 3D des macromolécules biomolécules</li><li>- 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 (25h TP/TD)	<ul style="list-style-type: none"><li>• Alignements de séquences et structures.</li><li>• Modélisation moléculaire. Principes de la modélisation par homologie des structures protéiques.</li><li>• Criblage de ligands <i>in silico</i>.</li></ul>
Mots clés	Bioinformatique – Prédiction et analyse de structure – Criblage <i>in silico</i>