

## Modélisation de la structure 3D des protéines

*Formation Inter-régions – Présentiel*

<b>Dates et Horaire</b>	<b>16 mai 2024</b> – 09h00 – 17h00
<b>Lieu</b>	Délégation Régionale Paris IDF Centre-Nord – Paris 13e
<b>Public visé</b>	Toute personne souhaitant comprendre l'intérêt de la modélisation moléculaire et dans quel contexte l'utiliser
<b>Objectif</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Analyser la structure 3D de biomolécules</li> <li>• Modéliser de petites comme de grosses macromolécules protéiques,</li> <li>• Appréhender la qualité de structures 3D de protéines et modifier la structure 3D de protéines : muter certains résidus, reconstruire ou enlever certains domaines protéiques</li> </ul>
<b>Métiers</b>	Techniciens, Ingénieurs, Chercheurs scientifiques
<b>Programme</b>	<p><b>Notions de bases sur la modélisation moléculaire</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• La modélisation via AlphaFold</li> <li>• La modélisation par homologie</li> <li>• Les prérequis nécessaires et les conditions pour une bonne modélisation</li> <li>• Présentation et prise en main du webiciel Colabfold AlphaFold</li> <li>• Présentation et prise en main du logiciel YASARA</li> <li>• Exercice d'application permettant de réaliser son 1er modèle de protéine</li> </ul> <p><b>Notions sur le choix d'une bonne empreinte pour la modélisation</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Importance de l'alignement entre la séquence à modéliser et la séquence de l'empreinte</li> <li>• Insertion de mutations dans la séquence du modèle si besoin</li> <li>• Exercices d'application permettant de réaliser une modélisation en imposant une empreinte et/ou un alignement de séquence modèle/empreinte</li> </ul> <p><b>Analyse du modèle obtenu</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Vue d'ensemble des critères et logiciels permettant de déterminer la qualité du modèle construit (RMSD, énergie...)</li> <li>• Construction manuelle de boucles</li> <li>• Exercices d'application permettant de reprendre les acquis de la journée et de réaliser et analyser une modélisation complète, d'ajouter des boucles manquantes, d'ajouter un ligand</li> </ul>
<b>Effectif</b>	9 maximum
<b>Formateur</b>	Emmanuel BETTLER - BioSciences
<b>Inscriptions</b>	Sur <a href="https://www.sirene.inserm.fr/jetspeed/">https://www.sirene.inserm.fr/jetspeed/</a> Date limite d'inscription : <b>11 avril 2024</b>
<b>Contacts</b>	Assistante Formation : <a href="mailto:catherine.rogers@inserm.fr">catherine.rogers@inserm.fr</a> Chargée de Formation : <a href="mailto:valeria.florez@inserm.fr">valeria.florez@inserm.fr</a>