CPFI
Cabinet Professionnel de Formation Industrielle



Dynamique moléculaire des protéines : de la structure 3D aux mécanismes biologiques en mouvement

Lien : https://cpfi-formation.com/formation/dynamique-moleculaire-des-proteines-de-la-structure-3d-aux-mecanismes-biologiques-en-mouvement

DURÉE
5 jours (35h)

RÉFÉRENCE
CSM13

CATÉGORIE
Biotechnologie

CPFI Formation

OBJECTIFS DE LA FORMATION

À l'issue de cette formation, vous serez capable de :

- Comprendre les principes physiques et mathématiques qui gouvernent la dynamique moléculaire des protéines
- Maîtriser les étapes de préparation, de simulation et d'analyse d'un système biomoléculaire
- Utiliser les principaux logiciels de simulation moléculaire pour étudier des protéines
- Interpréter les trajectoires moléculaires à l'aide d'outils statistiques et bioinformatiques
- Identifier les mécanismes structuraux et fonctionnels révélés par les simulations
- Appliquer la dynamique moléculaire à des problématiques de microbiologie et de biologie structurale

POUR QUI ?

- Chercheurs en biologie moléculaire, biochimie ou microbiologie souhaitant intégrer la modélisation moléculaire
- Ingénieurs et spécialistes en bioinformatique ou biostatistiques travaillant sur l’analyse structurale des protéines
- Doctorants et étudiants de master en biophysique, bioinformatique ou biologie structurale
- Professionnels de la recherche pharmaceutique impliqués dans la conception de médicaments
- Scientifiques souhaitant utiliser la simulation moléculaire pour comprendre les mécanismes fonctionnels des protéines

CPFI Formation

CPFI
Cabinet Professionnel de Formation Industrielle



Programme détaillé

1 / Fondements de la dynamique moléculaire appliquée aux protéines

- Comprendre les principes physiques gouvernant la dynamique moléculaire : mécanique classique, forces interatomiques et champs de force
- Identifier les différences entre structure statique issue de cristallographie ou cryo-EM et comportement dynamique des macromolécules
- Analyser les contributions historiques des méthodes développées par Karplus, Levitt et Warshel pour la simulation de systèmes biomoléculaires

2 / Structures protéiques et préparation des modèles

- Importer et analyser une structure protéique issue de bases de données structurales comme la Protein Data Bank (PDB)
- Corriger les structures : ajout d'atomes manquants, protonation, préparation des résidus et vérification de la cohérence chimique
- Préparer un modèle initial optimisé pour simulation à l'aide d'outils de bioinformatique structurale

3 / Champs de force et modélisation des interactions moléculaires

- Comprendre les champs de force biomoléculaires tels que AMBER, CHARMM et OPLS
- Paramétrer les interactions covalentes et non covalentes dans un système protéique
- Évaluer l'impact du choix du champ de force sur la stabilité et la dynamique du système simulé

4 / Préparation du système de simulation

- Construire un environnement de simulation comprenant solvant explicite, ions et conditions physiologiques

CPFI Formation

- Définir les paramètres thermodynamiques tels que température, pression et conditions périodiques
- Effectuer les étapes de minimisation d'énergie pour stabiliser la structure initiale

5 / Mise en œuvre d'une simulation de dynamique moléculaire

- Configurer et lancer une simulation avec des logiciels tels que GROMACS, AMBER, NAMD ou CHARMM
- Ajuster les paramètres de simulation : pas de temps, contraintes de liaisons et algorithmes d'intégration
- Superviser l'exécution des simulations sur stations de calcul ou clusters haute performance

6 / Équilibration et validation du système simulé

- Réaliser les phases d'équilibration thermique et de pression pour stabiliser le système
- Vérifier les paramètres énergétiques, température et densité pendant l'équilibration
- Identifier les anomalies structurelles ou instabilités dans les premières phases de simulation

7 / Analyse des trajectoires moléculaires

- Calculer les indicateurs de stabilité structurale tels que RMSD et RMSF
- Étudier les fluctuations des résidus et les mouvements collectifs de la protéine
- Extraire et visualiser les trajectoires moléculaires à l'aide d'outils d'analyse structurale

8 / Approches statistiques appliquées aux simulations

- Appliquer des méthodes statistiques pour analyser la convergence et la reproductibilité des simulations
- Réaliser des analyses de corrélation et de clustering sur les conformations protéiques
- Identifier les états conformationnels dominants au cours de la simulation

9 / Étude fonctionnelle et dynamique des protéines

- Identifier les changements conformationnels liés à la fonction biologique d'une protéine
- Étudier les interactions protéine-ligand ou protéine-protéine dans un contexte dynamique
- Interpréter les résultats de simulation pour comprendre les mécanismes moléculaires

CPFI Formation

10 / Applications avancées et perspectives de recherche

- Utiliser la dynamique moléculaire pour l’ingénierie des protéines et la conception de médicaments
- Combiner simulations moléculaires et données expérimentales pour affiner les modèles structuraux
- Concevoir un protocole complet de simulation pour un projet de recherche en bioinformatique structurale

Approche pédagogique

- Support Ecrit et Projection
- Exposés Interactifs, Podcasts et Vidéos
- Brainstorming et Jeux de Rôle
- Mises en Situation pour faciliter l'assimilation
- Cas Pratiques et Labs inclus pour leur impact opérationnel
- Test de Validation des Acquis des Connaissances

Prochaines dates programmées

15 au 19 Fév. 2027	Présentiel - Casablanca
12 au 16 Avr. 2027	Présentiel - Casablanca
07 au 11 Juin 2027	Présentiel - Casablanca
02 au 06 Août 2027	Présentiel - Casablanca
27 Sep. au 01 Oct. 2027	Présentiel - Casablanca

Autres dates possibles sur demande. Contactez-nous pour organiser une session intra-entreprise.

CPFI Formation

Réservation & Renseignements

Téléphone : +212 522 247 210
Email : contact@cpfi-formation.com
Web : https//www.cpfi-formation.com

CPFI Formation — Tous droits réservés

CPFI Formation