

Quelques applications de la mécanique moléculaire à l'étude de peptides/protéines d'intérêt biologique

Dr. **Nicolas FLOQUET**, C.R. CNRS

Institut des Biomolécules Max Mousseron (IBMM), UMR 5247 CNRS-UM1-UM2,
Faculté de Pharmacie, 15 rue Charles Flahault, B.P. 14491, 34093 Montpellier Cedex 5
Courriel : nicolas.floquet@univ-montpl.fr – tél : 04 67 54 85 50

Les méthodes théoriques d'étude des biomolécules viennent compléter les résultats d'études expérimentales. Elles permettent d'étudier à l'échelle de l'atome le comportement dynamique de petites molécules ou de macromolécules, ainsi que la dynamique de leurs interactions.

Outre un descriptif sommaire des méthodes de mécanique moléculaire les plus classiques (Dynamique Moléculaire, Analyse de Modes Normaux, Docking), je présenterai plusieurs applications de ces méthodes à l'étude de peptides et protéines d'intérêt biologique.

Je montrerai en premier lieu comment des études de dynamique moléculaire de courts peptides dérivés de collagène ont aboutit à la synthèse d'un cyclopeptide anti-tumoral actif *in vivo*.

Je présenterai ensuite les résultats d'études théoriques menées sur la Glucosamine-6P Synthase, une grosse protéine dimérique et cible d'intérêt contre le diabète de type II.

Pour finir, je discuterai des méthodes en cours de développement permettant de mettre en évidence à la fois les mouvements de larges et de plus faibles amplitudes des protéines (Thrombospondine, Métalloprotéinases par exemple) et l'intérêt de celles-ci dans la conception de drogues assistée par ordinateur.