

Programme

Lundi 30 mai

- 11h00 Accueil des participants
12h00 Déjeuner
- 14h00 Mot de bienvenue
14h15 **Monica Zoppè** – *conférence plénière*
Adapting the Instrument of Computer Graphics for an integrated visualization of Biological Phenomena
- 15h00 **Julien Maupetit**
The RPBS Platform - in silico functional analysis and prediction of protein structures
- 15h20 **Tim Meyer**
Exploring protein dynamics space : The dynasome as the missing link between structure and function
- 15h40 ☉ **Flash posters A** : M. Chavent, A. Tek, B. Laurent, N. Férey, S. Fiorucci, M. Piuzzi, T. Gaillard, T. Cragolini, O. Delalande
- 15h50 ☕ Pause café
- 16h20 **David Rinaldo**
Methodological advancements to improve the accuracy of induced-fit docking
- 16h40 **Laurent Hoffer**
Sampling, Docking & Fragment-based Drug Design
- 17h00 **Ludovic Chaput**
Étude par modélisation moléculaire de l'énantiosélectivité de la lipase b de *Candida antarctica*
- 17h20 ☉ **Flash posters B** : V. Monjardet, V. Beswick, S. Bourg, E. Coulaud, L. Colliandre, N. Tarrat, N. Floquet, T. Dreyfus, A. Cotte
- 17h30 ☕ Pause café
- 17h55 **Paul Emsley** – *conférence plénière*
Model-building with Coot
- 18h40 **Nathalie Colloc'h**
Règles pour prédire l'affinité du xénon et du protoxyde d'azote pour leur site de liaison dans les protéines
- 19h00 **Yoann Cote**
Nonexponential decay of internal correlation functions of native proteins and NMR relaxation data
- 19h20 ☉ **Flash posters C** : N. Malod-Dognin, S. Barbe, I. André, L. Charlier, C. Grauffel, L. Vamparys, D. Horvath, C. Cézard, B. Bouvier
- 19h30 Dîner
- 21h00 présentations par affiches

Mardi 31 mai

- 09h00 **Mark SP Sansom** – *conférence plénière*
Membrane Proteins and Lipid Bilayers : Multiscale MD Simulations
- 09h50 **Maxime Louet**
Les protéines G hétéro-trimériques : un mécanisme concerté pour l'ouverture du site GDP
- 10h10 **Manuel Simoes**
The Gating Mechanism in Nicotinic Acetylcholine Receptors :
A Normal-mode based Study
- 10h30 ☉ **Flash posters D** : M. Baaden, E. Selwa, C. Jardin, M. Guérault, Z. Marton, A. Saladin, A. Dhouib, G. Moroy, F. André
- 10h40 ☕ Pause café
- 11h10 **David Ritchie**
Using Graphics Processors to Accelerate Protein Docking Calculations
- 11h30 **Raphaël Bourgeas**
An example of challenging chemical space : Protein-Protein Interfaces (PPI's)
- 11h50 **Lucie Delemotte**
On the function and modulation of the Kv1.2 voltage-gated ion channel :
Insights from large-scale all-atom molecular dynamics simulations
- 12h10 ☉ **Flash posters E** : A. Taly, J. Esque, V. Hamon, B. Boyer, D. Stratmann, C. Colas, T. Bitard Feildel, G. Surpateanu, P.R. Batista
- 12h20 Déjeuner

Mardi 31 juin (suite)

- 13h50 ☉ **Flash posters F** : L. Chaloin, F. Mareuil, J. Sopkova-de Oliveira Santos, R. Arora, I. Chauvot de Beauchene, M. Cecchini, L. Zhihan, I. Amal, G. Launay
- 14h00 **Odile Eisenstein**
La structure et la réactivité de complexes de métaux de transition.
Quantique/non Quantique ?
- 14h50 **Robin Chaudret**
Localiser les liaisons hydrogènes à basse barrière d'activation
dans les systèmes biologiques
- 15h10 **Claire Coiffier**
Analyse des conformations préférentielles de C-furanosides : une étude quantique
- 15h30 **Gabriella Jonasson**
Dynamique nanoseconde d'une protéine à l'état excité :
extinction de fluorescence dans la GFP
- 15h50 ☹ Pause café
- 16h20 **Chantal Barberot**
Analyse des conformations préférentielles de C-furanosides : une étude quantique
- 16h40 **Samia Aci-Sèche**
Molecular dynamics study of ligand entry pathways into the ligand binding domain
of PPAR-gamma
- 17h00 **Yasmine Chebaro**
Elucidation of allosteric regulation by phosphorylation in nuclear receptor proteins :
study of the Retinoic Acid Receptor alpha
- 17h20 ☉ **Flash posters G** : C. Prévost, Y. Shen, D. E. Barreto Gomes, A. Bessadok, M. Marchi,
N. Belloy, S. Grosdidier, T. Haschka
- 17h30 présentations par affiches
- 19h00 animation
- 20h30 dîner de Gala

Mercredi 1^{er} juin

- 09h00 **Anne Imberty** – *conférence plénière*
La forme des sucres : modélisation et docking en série glucidique
- 09h50 **Delphine Flatters**
Relation séquence / structure du domaine alpha-cristallin des petites protéines de choc thermique
- 10h10 **Stéphanie Pérot**
Analyse structurale des appariements poche-ligand
- 10h30 *Prix du meilleur poster, offert par la société Tripos*
- 10h40 ☕ Pause café
- 11h10 *Prix du GGMM*
- 11h20 **Elodie Laine**
Rôle de la Mutation D816V dans la Dérégulation du Récepteur KIT : Aspects Structuraux, Dynamiques et Thermodynamiques
- 11h45 **Mickaël Lelimosin**
Modélisation moléculaire des mécanismes de photoactivation de protéines fluorescentes
- 12h10 Assemblée générale du GGMM
- 13h10 Clôture du congrès