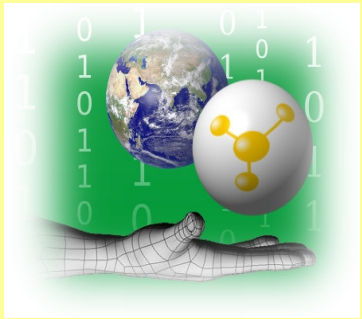

Journée Modélisation Moléculaire
22 octobre 2007 à Reims

http://www.romeo2.fr

http://www.crihan.fr

Les centres de calculs « **CRIHAN** » et « **ROMEO** », organisent une journée qui réunit leurs utilisateurs, et les acteurs de la **modélisation moléculaire** des régions **Normandie et Champagne-Ardenne**. La journée sera consacrée à la présentation croisée des thèmes de recherche, des savoir-faire, des méthodologies et des outils employés par nos deux communautés, agrémentée par des illustrations ponctuelles de résultats. Elle permettra à chacun de prendre connaissance des **expertises disponibles en modélisation moléculaire**, aussi bien dans les domaines de recherche concernés, que dans la mise en oeuvre des **techniques de modélisation**.

PROGRAMME

- **9h30 – 10h : Accueil**

- **10h - 10h50 :** Présentations orales *1, 2*

  F. Bohr, DTI (Dynamique des Transferts aux Interfaces), Reims, «Modélisation de la cinétique de réactions en phase gazeuse. Perspectives pour le modélisation de mécanismes électrochimiques »

  L. Guilhaudis, CNRS UMR 6014 (Equipe de Chimie Organique et Biologie Structurale), Rouen, «Etude structurale de polypeptides par RMN et modélisation moléculaire sous contraintes RMN»

- **10h50 – 11h30 :** Visite du centre de calcul régional Champagne-Ardenne

- **11h30 – 12h45 :** Présentations orales *3, 4, 5*

  Ch. Lambert, AstraZeneca, Centre de Recherches, Reims, « La modélisation Moléculaire, une aide à la conception de nouveaux médicaments »

  P. Bruneau, AstraZeneca, Centre de Recherches, Reims, « Modélisation des propriétés ADME »

  R. Bureau, CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie) UPRES EA3915, Université de Caen, «Analyse in silico et validations expérimentales»

- **12h45 – 14h30 :** Pause déjeuner

- **14h30 – 16h10 :** Présentations orales *6, 7, 8, 9*

  N. Colloc'h, Université de Caen, CNRS UMR 6185, Caen, «Interactions protéine - gaz anesthésique étudiées par cristallographie des rayons X, modélisation et dynamique moléculaire»

  G. Dupas, ECOFH (Equipe de Chimie Organique Fine et Hétérocyclique), Rouen, «Modélisation Moléculaire appliquée à des problèmes de structure et de réactivité en Chimie Organique»

  N. Mofaddel, LASOC (Laboratoire d'Analyses des Systèmes Organiques Complexes), Evreux, «La modélisation moléculaire appliquée à la rationalisation des phénomènes observés en Électrophorèse capillaire»

  M. Dauchez, MERC (Matrice Extracellulaire et Régulations Cellulaires), Reims, « Modélisation moléculaire de protéines de la matrice extracellulaire »

- **Clôture** de la journée prévue vers **17h**

Contacts :
CRIHAN: Béatrice Charton, bc@crihan.fr, 02 32 91 42 91
ROMEO: Eric Henon, eric.henon@univ-reims.fr, 03 26 91 84 97

UFR Sciences - Salle Lucien Bernard (bat.6)
Moulin de la Housse – 51687 Reims