

Modélisation moléculaire – AGROPT30

19-23 novembre 2018

| | lundi | mardi | mercredi | jeudi | vendredi |
|-------|---|---|---|--|---|
| 08:00 | 08:30 Introduction | 08:30 Mécanique moléculaire : fondements | 08:30 Dynamique moléculaire : calcul de propriétés Gromacs | 08:30 Méthode Monte-Carlo : calcul de propriétés GOMC | 08:30 Projets : phase finale |
| 09:00 | 10:00 Salle i12 | 10:00 Salle i12 | 10:00 Salle i12 | 10:00 Salle i12 | 10:00 Salle i12 |
| 10:00 | 10:15 Codage des molécules Marvin et Open Babel | 10:15 Mécanique moléculaire : protéine dans l'eau Gromacs | 10:15 Dynamique moléculaire : calcul de propriétés Gromacs | 10:15 Méthode Monte-Carlo : calcul de propriétés GOMC | 10:15 Projets : phase finale |
| 11:00 | 12:00 Salle i12 | 12:00 Salle i12 | 12:00 Salle i12 | 12:00 Salle i12 | 12:00 Salle i12 |
| 12:00 | | | | | |
| 13:00 | 13:30 Visualisation VMD | 13:30 Docking Autodock Vina | 13:30 Projets : présentation | 13:30 Optionnel : projets | 13:30 Projets : mise en commun |
| 14:00 | 15:00 Salle i12 | 15:00 Salle i12 | 15:00 Salle i12 | 15:00 Salle i12 | 15:00 Salle i12 |
| 15:00 | 15:15 chimie quantique utilisation d'ORCA | 15:15 Docking Autodock Vina | 15:15 Projets : démarrage | 15:15 Optionnel : projets | 15:15 Projets : mise en commun |
| 16:00 | 17:00 Salle i12 | 17:00 Salle i12 | 17:00 Salle i12 | 17:00 Salle i12 | 17:00 Salle i12 |

Tous les cours ont lieu à AgroParisTech : 16 rue Claude-Bernard 75005 PARIS,
salle i12 : pas la plus facile à trouver...

Durée inscrite à l'emploi du temps : 29 heures et 15 minutes.

Jeudi après-midi, la salle est réservée aux étudiants qui souhaitent approfondir leur projet. L'encadrement est possible jusqu'à 15 heures 30.

Les possesseurs de portables (rapides...) peuvent les apporter; merci de prévenir pour la préparation du terrain. Tous les logiciels utilisés sont disponibles sous Linux et, dans une moindre mesure Windows, voire macOS.

Luc Eveleigh eveleigh@agroparistech.fr