



Plateau de Modélisation  
Moléculaire Multiéchelle

Plateforme  
Modélisation  
Moléculaire  
Multi-échelle

*P3M*

## ■ DONNEES / DATA

### NUMERIQUE / DIGITAL

- Analyse de donnée / Data analysis
- Traitement de données / Data modeling
- Modélisation / Modelisation

## ■ CARACTERISATION / CHARACTERISATION

### ANALYSE DES PROPRIÉTÉS BIOLOGIQUES / ANALYSIS OF BIOLOGICAL PROPERTIES

- Analyse d'interaction/ Interaction analysis

### IMAGERIE / IMAGING

- Spectroscopie / Spectroscopy

## ■ PRODUCTION PREPARATION / PRODUCTION PREPARATION

### BIOLOGIE / BIOLOGY

- Préparation d'échantillons / Sample preparation
- Conception de protocole expérimental /  
Experimental protocol design

Modélisation  
moléculaire de  
l'atome au solide  
en passant par les  
biomolécules

----  
Molecular  
modeling from  
atoms to solids,  
including  
biomolecules

Prestation  
Partenariat  
Formation

----  
Service  
Partnership  
Training





Thermophorèse

## ANALYSE D'INTERACTION / INTERACTION ANALYSIS

✓ Analyse de constante de liaison / *Binding constant analysis*

### Equipements / Equipments

- Thermophorèse à micro-échelle / *Microscale thermophoresis (MST)* - Monolith NT.115 Pico-Red/Nano BLUE, Nanotemper



Spectromètre Raman

## SPECTROSCOPIE / SPECTROSCOPY

✓ Analyse moléculaire quantitative et qualitative par spectroscopie Raman / *Quantitative and qualitative molecular analysis by Raman spectroscopy*

✓ Analyse spectrale qualitative dans l'infrarouge (IR) / *Qualitative spectral analysis in the infrared (IR)*

✓ Analyse chiroptique de molécules chirales / *Chiroptical analysis of chiral molecules*

### Equipements / Equipments

- Spectromètre Raman / *Raman spectrometer* - LabRAM HR Evo, Horiba
- Spectromètre Dichroïsme Circulaire / *Circular Dichroism (CD) Spectrometer* - J-810, Jasco
- Spectromètre Dichroïsme Circulaire Vibrational IR / *IR Vibrational Circular Dichroism (VCD) Spectrometer*



Observation d'une lame sur Spectromètre Raman



Spectromètre Dichroïsme circulaire

## MODELISATION / MODELING

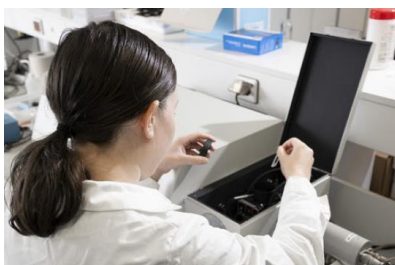
✓ Analyse moléculaire structurale, mécanique et dynamique & analyse chimique quantique de l'atome au solide en passant par les biomolécules / *Molecular structural, mechanics and dynamics analysis and quantum chemistry analysis from atoms to solids, including biomolecules*

✓ Mise à disposition de Logiciels (Suite Schrödinger, NAMD, CHARMM, GROMOS, AMBER, Autodock, Vinadock, Hex, VMD, PyMol, ImageJ, Amira ...) / *Software provision (Schrödinger Suite, NAMD, CHARMM, GROMOS, AMBER, Autodock, Vinadock, Hex, VMD, PyMol, ImageJ, Amira ...)*

✓ Accès à diverses bases de données structurales (PDB, CCSD, ZINC...) / *Access to various structural databases (PDB, CCSD, ZINC, etc.)*

### Equipements / Equipments

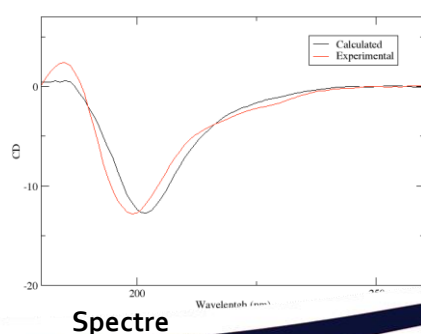
- Lames de calcul adossées au Centre de Calcul ROMEO / *Computing blades attached to the ROMEO Computing Center*
- Salle informatique équipée de 13 postes / *Computer room equipped with 13 workstations*



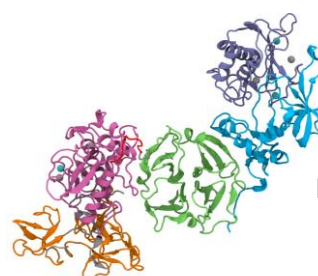
Peptide en solution pour Spectromètre Dichroïsme



Spectromètre Dichroïsme circulaire vibrationnel



Spectre



Molécule modélisée