

MODÉLISATION MOLÉCULAIRE ET SUPPORT LINUX

Logiciels de modélisation moléculaire

Les logiciels suivants sont disponibles au laboratoire suite à l'acquisition d'une licence de groupe ou institutionnelle. Certains logiciels sont gratuits. Les noms entre parenthèses indiquent les personnes ressources pour ces logiciels. Ces logiciels sont disponibles pour utilisation par les membres de PROTEO.

Dynamique moléculaire: MOE (licence PROTEO, Xavier Barbeau), charmm (Richard Daigle, Olivier Fisette, Sébastien Légaré).

Docking moléculaire: MOE, Autodock (gratuit, Xavier Barbeau).

Visualisation: MOE (Xavier Barbeau), Pymol (gratuit) (la plupart des membres du labo).

Accès à des stations de modélisation et de visualisation

Tous les membres de PROTEO, incluant les étudiants, peuvent avoir accès aux stations de travail UNIX du laboratoire Lague:

- Une station Linux est disponible pour la visualisation 3D.
- Une station Linux ayant 4 coeurs est disponible pour des calculs de quelques heures avec les logiciels mentionnés plus haut. Cette station est aussi disponible pour la visualisation 2D.

Les comptes d'utilisateur sont créés sur demande. Envoyez vos demandes par courrier électronique à Olivier Fisette (olivier.fisette.1@ulaval.ca) avec copie conforme à Patrick Lague (Patrick.Lague@bcm.ulaval.ca)

Expertise pour le système d'exploitation Linux

Personnes ressources: Olivier Fisette (olivier.fisette.1@ulaval.ca)

Wiki Lague

Une collection de trucs et de guides pour les logiciels énumérés ci-dessus et préparés par le laboratoire Lague: http://pelican.rsvs.ulaval.ca/mediawiki/index.php/Main_Page

Hébergement de licences réseau pour logiciels

Nous avons actuellement un ordinateur qui héberge quelques licences réseaux de logiciels. Les licences sont accessibles au campus de l'Université Laval seulement. Cet ordinateur est disponible aux membres de PROTEO pour héberger de telles licences.