

Master « Sciences, Technologie, Santé »
Mention « In Silico Drug Design »
1ère année



PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2010 – 2011

A envoyer à Mme Pr Camproux :

anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire : Bruno Villoutreix

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,...) et Numéro d'affiliation de l'unité : INSERM-Paris7, UMR-S 973

Adresse précise du Laboratoire : Bât Lamarck 5^{ème} 35 rue Helene Brion, 75205 Paris Cedex 13, France.

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) :

E-mail :

Nom du Responsable du stage : Michel Petitjean (CNRS, HDR)
(autres membres de l'équipe d'accueil: A. Badel et A. Vanet)

Numéro de Téléphone : 01 5727 8434

Numéro de Télécopie : 01 5727 8372

E-mail: petitjean.chiral@gmail.com (preferred), michel.petitjean@univ-paris-diderot.fr

<http://petitjeanmichel.free.fr/itoweb.petitjean.freeware.html>

Titre du stage : Etude de variabilité de quelques descripteurs géométriques de l'HIV protéase.

Description du sujet (quelques lignes):

L'HIV protéase intervient dans le cycle de réplication du HIV, virus du SIDA, en coupant les protéines de l'hôte pour créer le matériel protéique du virion infectieux.

Inhiber l'HIV protéase rend par conséquent le virion non infectieux.

Plusieurs couples de positions sur la chaîne de l'HIV protéase (Synthetic Lethals) ont été proposés comme cibles potentielles de composés médicamenteux (S. Brouillet et al. Biology Direct 2010, 5:40).

Après une petite étude bibliographique, il sera demandé d'établir quelques caractéristiques géométriques des poches ou cavités correspondantes aux SL, ainsi que leur variabilité, à l'aide d'outils statistiques (utilisation de "R"), sur la base des données structurales disponibles dans la banque PDB.

Divers outils de calcul (RMS, volumes, surfaces, enveloppes, etc.) sont fournis. Les résultats seront comparés avec ceux obtenus par d'autres approches développées au MTi

(descripteurs de druggabilité: S. Perot et A.C. Camproux; logiciel Fpocket: P. Tuffery).

Des connaissances de base en programmation seraient utiles: unix, R, et éventuellement C.

Retour par e-mail : anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr