

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 :

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,...) et Numéro d'affiliation de l'unité :

INSERM-Paris 7, UMR-S 973

Adresse précise du Laboratoire :

Adresse précise du Laboratoire:

35 rue Helene Brion, 75205 Paris Cedex 13, France.

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

E-mail :

Nom du Responsable du stage :

Frédéric Guyon (IR, HDR), 01 5727 8376, frederic.guyon@univ-paris-diderot.fr

et Michel Petitjean (CNRS, HDR), 01 5727 8434, michel.petitjean@univ-paris-diderot.fr

Titre du stage :

Analyse multivariée de descripteurs du réseau de canaux de divers cytochromes P450.

Description du sujet (quelques lignes):

Le cytochrome P450 3A4 est une enzyme du foie humain impliquée dans la métabolisation

de nombreux composés, et notamment des médicaments.

Le site actif (hème ferrique), est enfoui à l'intérieur du cytochrome.

L'accès à ce site se fait via un réseau de canaux, dont les caractéristiques (notamment géométriques) dépendent du ligand considéré (forme, taille, flexibilité).

Il en est de même pour tous les cytochromes P450.

Ces canaux sont encore peu connus.

Ils peuvent être décrits à partir du logiciel CCCP, développé récemment au MTi.

Après une petite étude bibliographique, il sera demandé de caractériser les réseaux de canaux des principaux P450 présents dans la banque PDB, et d'effectuer diverses statistiques sur les descripteurs de ces réseaux (utilisation de "R").

Les résultats seront comparés avec ceux obtenus par d'autres approches développées au MTi (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