

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2013 – 2014
A envoyer à Mme Pr Camproux :
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: B. Villoutreix

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

Adresse précise du Laboratoire : Université Paris Diderot - Inserm UMR-S 973, Bâtiment Lamarck A, 35
Rue Hélène Brion, 75205 PARIS CEDEX 13.

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : P. Tufféry
E-mail : pierre.tuffery@univ-paris-diderot.fr

Nom des Responsables du stage : I. Rasolohery, F. Guyon & G. Moroy

Numéro de Téléphone : 01.57.27.83.85
Numéro de Télécopie : 01.57.27.83.72
E-mail :
ines.rasolohery@univ-paris-diderot.fr ; frederic.guyon@univ-paris-diderot.fr ; gautier.moroy@univ-paris-diderot.fr

Titre du stage : Elaboration d'un jeu de données pour tester l'outil PatchSearch

Description du sujet (quelques lignes) :

La plupart des molécules thérapeutiques ont pour but de restaurer des conditions cellulaires normales en interagissant de manière spécifique avec la protéine à l'origine de la pathologie. La spécificité du médicament pour sa protéine-cible est donc essentielle pour éviter de provoquer des effets secondaires indésirables pour le patient.

Pour prédire d'éventuelles interactions non désirées, nous avons développé l'outil PatchSearch qui permet de rechercher si un patch d'interaction d'un ligand d'intérêt (molécule chimique ou peptide) est présent sur une protéine inappropriée. Cet outil permet donc de tester la spécificité de l'interaction d'un ligand donné pour une protéine donnée.

Pour ce faire, PatchSearch s'appuie sur la reconnaissance du patch d'interaction d'un point de vue géométrique et physicochimique. Il est maintenant nécessaire de le tester sur un jeu de données pertinent.

Le but du stage est donc de mettre en place ce jeu de données composé de complexes protéine/ligand (banque de Kahraman) et de complexes protéine/peptide (mis en place dans notre équipe), puis de l'enrichir afin de tester la robustesse de PatchSearch. Une analyse structurale et une caractérisation du site d'interaction seront également nécessaires pour chacune des familles de complexes considérées. A partir des résultats de PatchSearch sur le jeu de données, il serait possible d'optimiser les paramètres de reconnaissance de patch.