

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2014 – 2015
A envoyer à Mme Pr Camproux :
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: DR Bruno Villoutreix

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

Adresse précise du Laboratoire : Université Paris Diderot – Inserm UMR-S 973
Bat Lamarck A, 4^e étage, Courrier 7113. 75205 Paris Cedex 13.

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Pr. Anne-Claude Camproux et Pr. Olivier Taboureau
E-mail : anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du stage : Pr. Olivier Taboureau

Téléphone : 01 57 27 82 79 Fax : 01 57 27 83 72
E-mail : olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr
HDR : oui

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet :

Titre du stage : Etude polypharmacologique d'une librairie de petites molécules chimiques.

Description du sujet (quelques lignes):

L'objectif de ce stage est d'étudier à l'aide d'outils informatiques et de manière systématique les activités biologiques potentiellement associées à un ensemble de petites molécules chimiques récemment synthétisées et disponibles dans le commerce.

La librairie contient 3200 molécules diverses fournies par la compagnie Bioascent dont la seule information est sa structure chimique. Des descripteurs physicochimiques seront calculés sur l'ensemble de ce jeu de données qui permettra de fournir une empreinte structurale à chaque composé. Ces empreintes seront ensuite comparées à d'autres empreintes de molécules chimiques dont leur activité biologique est connue. Nous utiliserons une base de données interne pour cela (ChemProt). Finalement, supposant que plus deux molécules sont similaires plus ils ont de chance d'avoir une activité biologique proche, nous établirons une liste de protéines potentiellement ciblées par l'ensemble des 3200 molécules.

Retour par e-mail : olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr