

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2012 – 2013
A envoyer à Mme Pr Camproux :
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: Max MALACRIA

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,...) et Numéro d'affiliation de l'unité : CNRS UPR 2301

Adresse précise du Laboratoire : 1 avenue de la Terrasse, Bât. 27, 91198 Gif-sur-Yvette, France

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

E-mail : bogdan.iorga@icsn.cnrs-gif.fr

Nom du Responsable du stage : Bogdan IORGA

Téléphone : 01 69 82 30 94 Fax : 01 69 07 72 47

E-mail : bogdan.iorga@icsn.cnrs-gif.fr

HDR : oui

Ecole doctorale de rattachement : ED470

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : modélisation moléculaire, conception de molécules actives (drug design), librairies virtuelles de ligands, docking, produits naturels

Titre du stage :

Développement d'une librairie virtuelle de produits naturels et son utilisation dans le criblage virtuel sur des cibles d'intérêt thérapeutique

Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : Oui (sous réserve de trouver un financement)

Description du sujet (quelques lignes):

Une librairie virtuelle de produits naturels sera construite à partir des données de la littérature. Cette librairie sera ensuite utilisée pour le criblage virtuel sur des cibles d'intérêt thérapeutique, et plus particulièrement sur des cibles étudiées actuellement par notre équipe dans le cadre du Labex LERMIT : phosphodiesterase 2A, carbapénémases de type KPC-2, OXA-48, NDM-1, etc. Une analyse chimioinformatique de cette librairie de produits naturels sera également réalisée afin d'évaluer la chemodiversité, qui sera comparée avec une librairie représentative de produits non-naturels utilisée habituellement dans des études de criblage virtuel.

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