

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2016/2017
A envoyer à Mme Pr Camproux
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: HIBERT, Marcel

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité: **UMR7200**

CNRS-Université de Strasbourg

Adresse précise du Laboratoire : **Laboratoire d'Innovation Thérapeutique, 74 route du Rhin, 67400 ILLKIRCH**

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : **ROGNAN, Didier**
E-mail : **rognan@unistra.fr**

Nom du Responsable du stage : ROGNAN Didier

Téléphone : 0368854235 Fax : 0368854310
E-mail : rognan@unistra.fr
HDR : oui (x) ou non

Ecole doctorale de rattachement : ED 222 – Sciences Chimiques

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : modélisation moléculaire, chiminformatique, drug design

Titre du stage : Conception et validation d'un outil de criblage virtuel basé sur des pharmacophores directement déduits de la structure 3D de sites de liaisons droguables

Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : Oui (x) - Non

Description du sujet (quelques lignes): Le sujet vise à finaliser la conception et la validation d'un nouvel algorithme visant à définir des pharmacophores simples et exploitables à partir de la seule structure 3D de cavités droguables. Dans un premier temps, Le (la) candidat(e) devra modifier l'outil existant (IChem-VolSite) afin de l'adapter à la définition de pharmacophores lisibles par le logiciel LigandScout. Dans un second temps, divers types d'alignement (sphères rigides, Gaussiennes, pattern de reconnaissance) ligand-pharmacophore seront testés sur des jeux de données existants (Astex, sc-PDB, DUD-E) à la fois en prédiction de pose et en criblage virtuel; puis comparés à des outils existants (docking, pharmacophore).

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