Master « In Silico Drug Design »

2ème année

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: Marc Delarue
Affiliation administrative (CNRS, INSERM, …) et Numéro d'affiliation de l'unité :
Institut Pasteur / UMR CNRS 3528
Adresse précise du Laboratoire : 25 rue du Dr Roux 750151 Paris

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Michael Nilges
E-mail : bernard.delmas@pasteur.fr

Nom du Responsable du stage : Olivier Sperandio
Téléphone : 01 40 38 93 17 Fax :
E-mail : olivier.sperandio@pasteur.fr
HDR : oui
Ecole doctorale de rattachement : CDV
Spécialité du stage : Recherche ☒ Professionnel ☐
Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet :
Base de données, chemoinformatique, espace chimique, interactions protéine-protéine

Titre du stage :

Approches chemoinformatiques et bioinformatiques structurales pour la mise à jour et l'analyse de données chimiques et structurales des modulateurs d'interactions protéine-protéine et de leur cibles.
Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : Non

Description du sujet (quelques lignes):

Ce projet est centré sur la base de données iPPI-DB[1,2] http://www.ippidb.cdithem.fr/, qui contient la structure chimique, les principales caractéristiques physico-chimiques, les données pharmacologiques et le profil des cibles thérapeutiques de plusieurs centaines de modulateurs d'interactions protéine-protéine (PPI). IPPI-DB est accessible via une application web. Dans le cadre de son imminente mise à jour, nous avons besoin d'intégrer et d'analyser de nouvelles données dans la base avec pour la première fois des données structurales sur leur cibles (les interactions elles-mêmes). La mission du stage sera donc d'analyser les nouvelles données de la littérature, et de les intégrer à l'aide d'un outil web nouvellement développé facilitant leur intégration. Le(a) candidat(e) devra aussi suggérer des voies d'optimisation des processus d'intégration dans la mesure ou l'outil a vocation à devenir un outil communautaire. Les nouvelles données seront par ailleurs analysées par chemoinformatique et bioinformatique de manière à les localiser dans l'espace chimique. Les résultats de cette mise à jour et de cette étude feront l'objet d'une publication une fois la mise à jour et l'analyse des données terminées, soumission qui doit impérativement intervenir d'ici la fin du stage. Nous recherchons des candidat(e)s motivé(e)s souhaitant conforter une expertise en chemoinformatique ou bioinformatique structurale et analyses de données.

1. Labbe, C. M. *et al*. iPPI-DB: an online database of modulators of protein-protein interactions. *Nucleic Acids Res*. (2015). doi:10.1093/nar/gkv982
2. Labbe, C. M., Laconde, G., Kuenemann, M. A., Villoutreix, B. O. & Sperandio, O. iPPI-DB: a manually curated and interactive database of small non-peptide inhibitors of protein-protein interactions. *Drug Discov. Today* **18,** 958–68 (2013).

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