

**PROPOSITION DE STAGE  
Année Universitaire 2018/2019**

A envoyer à Mme Pr Camproux  
[anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr](mailto:anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr)



**Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:**

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

973

Adresse précise du Laboratoire : Molécules Thérapeutiques in silico (MTi)  
35 Rue Hélène Brion  
75205 PARIS CEDEX 13

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

**Nom du Responsable du stage : Samuel Murail**

Téléphone : 01 57 27 83 90  
E-mail : [samuel.murail@univ-paris-diderot.fr](mailto:samuel.murail@univ-paris-diderot.fr)  
HDR : Non (en cours)

Ecole doctorale de rattachement : MTCI

Spécialité du stage : Recherche  Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : simulation de dynamique moléculaire, interactions peptide-protéine, analyse de données, programmation python

**Titre du stage :**

**Simulation de DM et approche "fragment based" pour la prédiction de la structure de complexes protéine-peptide**

Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : **Oui**

**Description du sujet (quelques lignes):**

La conception rationnelle d'inhibiteurs peptidique est une stratégie permettant la modulation des interactions protéine-protéine. La prédiction numérique des modes de liaison et de l'affinité d'un peptide sur une protéine présente de nombreuses difficultés. Le projet de recherche proposé se base sur l'utilisation intensive de simulations de DM (>µs) de protéine en présence de peptides de petites tailles. Ces simulations permettront d'échantillonner de façon exhaustive les différents sites de liaison et par ce biais de cartographier l'ensemble des sites de liaison pour différentes espèces chimiques.

En utilisant une approche physique de haute précision, nous entendons (i) identifier les sites de liaison des peptides, en particulier les hotspots (ii), pour chaque site de liaison, caractériser leur spécificité de séquence et affinité (iii) replier un peptide cible dans les sites de liaison les mieux classés et finalement (iv) optimiser la séquence ou prédire de novo sa composition peptidique optimale.

