

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2018/2019

A envoyer à Mme Pr Camproux

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 :

Adresse précise du Laboratoire : University of New England College of Pharmacy
716 Stevens Ave Portland, ME 04103, USA

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Olgun Guvench, M.D., Ph.D. Associate Professor
and Chair Department of Pharmaceutical Sciences

E-mail : oguvench@une.edu

Nom du Responsable du stage : Cássia Mizuno , Olgun Guvench

Téléphone : 207-221-4171

E-mail : cmizuno@une.edu , oguvench@une.edu

HDR : oui ou non

Ecole doctorale de rattachement :

Spécialité du stage : Recherche ☒ Professionnel ☐

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : structure-based drug design; in silico screening

Titre du stage : Green-tea extract derivatives as kinase modulators

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

Description du sujet (quelques lignes) :

Computational structure-based drug design tools will be used to develop and improve green-tea extract compounds for use as kinase modulators.

Develop ligand-receptor models of a kinase with green-tea extract derivatives. Use rDock and/or AutoDock to generate poses for the compounds in complex with the receptors, Pose refinement with molecular dynamics simulations(CHARMM, AMBER), propose structure activity relationships, and suggest new compounds for synthesis based on your modeling.

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

Some reading:

-Tea catechins inhibit hepatocyte growth factor receptor (MET kinase) activity in human colon cancer cells: kinetic and molecular docking studies. Larsen CA1, Bisson WH, Dashwood RH. J Med Chem. 2009 Nov 12;52(21):6543-5. doi: 10.1021/jm901330e.

-Discovery of 4-azaindoles as novel inhibitors of c-Met kinase. Porter J1, Lumb S, Franklin RJ, Gascon-Simorte JM, Calmiano M, Riche KL, Lallemand B, Keyaerts J, Edwards H, Maloney A, Delgado J, King L, Foley A, Lecomte F, Reuberson J, Meier C, Batchelor M. Bioorg Med Chem Lett. 2009 May 15;19(10):2780-4. doi: 10.1016/j.bmcl.2009.03.110. Epub 2009 Mar 27.

-Tea catechins as inhibitors of receptor tyrosine kinases: mechanistic insights and human relevance. Larsen CA1, Dashwood RH, Bisson WH. Pharmacol Res. 2010 Dec;62(6):457-64. doi: 10.1016/j.phrs.2010.07.010. Epub 2010 Aug 4.