

**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 :

CNRS UMR5048, INSERM U1054, Univ. Montpellier

Adresse précise du Laboratoire : 29 rue de Navacelles
34090 Montpellier

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Gilles Labesse

E-mail : labesse@cbs.cnrs.fr

Nom du Responsable du stage : G. Labesse

Téléphone : 04 67 41 77 12

E-mail : labesse@cbs.cnrs.fr

HDR : oui

Ecole doctorale de rattachement : CBS2

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet :

Analyse statistique des similarités conformationnelles des ligands amarrés après criblage virtuel

A l'aide d'outils chemoinformatiques. Construction d'un pipeline (potentiellement).

Titre du stage : Analyse conformationnelle des ligands amarrés pour l'Optimisation du cribage virtuel

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

Description du sujet (quelques lignes):

A l'issue des criblages de petits ligands contre une cible thérapeutique, les différentes poses prédites sont rarement comparées de manière systématique. Il s'agit ici de mettre en place les outils de comparaisons de similarités chimiques et conformationnelles pour des amarrages prédits sur un large panel de protéines kinases humaines. Les composés chimiques correspondent à des médicaments ou candidats médicaments testés systématiquement contre ces kinases. Une analyse statistique des scores de similarité et des qualités de poses sera envisagée.

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