

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 :

Criblage de petites chimiothèques et construction de nouveaux ligands à partir des touches expérimentales issues du criblage par cristallographie de cibles thérapeutiques étudiées au laboratoire. Utilisation d'outils chemoinformatiques.

Titre du stage : Cribage virtuel de nouvelles cibles thérapeutiques et optimisation de touches primaires.

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

Description du sujet (quelques lignes):

Régulièrement l'équipe initie le criblage expérimental de nouvelles cibles pour identifier des touches et guider ainsi la conception de nouveaux ligands affins. Le projet consiste à prédire les poses de fragments en amont du criblage expérimental ou de molécules similaires aux premières touches pour aider la sélection d'analogues à valider ensuite. La recherche dans des bases de données de composés à cribler sera initiée sur la base de sous-structures des touches. Les criblages virtuels seront effectués sur les cibles et certains homologues pour tenter de prédire le profil d'activité à l'aide du serveur développé au laboratoire @TOME-2.

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