

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2016/2017

A envoyer à Mr Pr Taboureau
olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité : Molécules
Thérapeutiques in silico (MTi)

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) :

E-mail :

Nom du Responsable du stage : Gautier Moroy

Numéro de Téléphone 01 57 27 83 85

Numéro de Télécopie

E-mail : gautier.moroy@univ-paris-diderot.fr

Titre du stage :

Application du programme Patch sur une banque de protéine off-target

Description du sujet (quelques lignes):

La conception de molécules thérapeutiques est un processus long et coûteux, qui souvent échoue à obtenir une autorisation de mise sur le marché en tant que médicament à cause d'effets secondaires trop importants, souvent détectés tardivement. Une partie de ces effets secondaires est due à une spécificité trop faible pour la protéine ciblée par la molécule thérapeutique, entraînant des interactions non désirées avec d'autres protéines, appelées protéines off-targets. Réussir à prédire ces interactions serait donc particulièrement intéressant pour prévenir d'éventuels effets secondaires.

PatchSearch est un programme développé au sein de notre équipe afin de rechercher des similitudes de zones d'interaction, ou patches, à la surface de protéine. On recherche ainsi des protéines possédant la capacité de se lier au même ligand (petite

molécule chimique ou peptide). PatchSearch a déjà été utilisé et validé dans le cas de petites molécules chimiques, mais nous voudrions le tester sur une plus grande banque de données. De plus, PatchSearch nécessite de connaître la structure du complexe protéine-ligand, donc nous voudrions tester si générer les complexes par docking moléculaire permet d'augmenter la qualité de la prédiction des protéines off-target.

Retour par e-mail : olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr