Master « Sciences, Technologie, Santé »
Mention « In Silico Drug Design »
2ème année

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2011 – 2012
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 : VU University Amsterdam

Adresse précise du Laboratoire : Medicinal Chemistry Division (VU University Amsterdam)
De Boelelaan 1083
1081 HV Amsterdam
The Netherlands

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Prof. Dr. R. Leurs (proffessor Medicinal Chemistry)
E-mail : r.leurs@vu.nl

Nom du Responsable du stage : Dr. C. DE GRAAF

Téléphone : +31 20 5987553 Fax : +31 20 5987610
E-mail : c.de.graaf@vu.nl
HDR : oui ou non

Ecole doctorale de rattachement : Pharmaceutical Sciences (Drug Discovery and Safety Master VU University Amsterdam)

Spécialité du stage : Recherche ☐ Professionnel ☐

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

Molecular (interaction) fingerprints, ligand- and structure-based virtual screening, molecular docking

---

Titre du stage : *Linking hot spots in molecular interaction space: Relating ligand descriptors to ligand-protein binding modes*

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

---

Description du sujet (quelques lignes):

Chemogenomics methods aim to find all possible ligands for all possible protein targets. While protein-based virtual screening requires knowledge of the ligand binding pocket of the target, ligand-based virtual screening searches are based on chemical similarity to known reference ligands.

The current project aims to link molecular fingerprints with structure-based in silico methods to elucidate the structural details of protein-ligand interaction features.

The project will be divided in three stages: 1) The implementation of a stand-alone version of our in-house molecular similarity search tool EDprints. The student will expand programming skills, obtain insights into the use of descriptors in molecular fingerprint methods, and learn how to perform retrospective virtual screening validation studies. 2) The application of EDprints to identify interaction hotspots in ligands. The student will learn how to use data mining techniques and develop knowledge-based virtual screening protocols; 3) Linking ligand hotspots to protein structure and ligand-protein binding modes. The student will transfer structural knowledge on protein-ligand interactions into virtual screening post-processing protocols, and set up prospective virtual screening studies.

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