

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2016/2017

A envoyer à Mme Pr Camproux
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: Marco Cecchini

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité : UMR 7006

Adresse précise du Laboratoire:

Laboratoire d'Ingénierie des Fonctions Moléculaires
ISIS --8, allée Gaspard Monge
F - 67000 Strasbourg

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : **Marco Cecchini**

E-mail: mcecchini@unistra.fr

Nom du Responsable du stage : Marco Cecchini

Téléphone : +33 (0)3 68 85 51 25

Fax : + 33 (0)3 68 85 51 24

E-mail : mcecchini@unistra.fr

HDR : oui ou non

Ecole doctorale de rattachement :

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

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

free-energy calculations, protein-ligand binding, binding affinity, rational drug design

Titre du stage:

Benchmarking different computational approaches for the calculation of the ligand binding free energy with applications both to host-guest and protein-ligand systems.

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

Description du sujet (quelques lignes):

The first step of this project will be to collect data on the performances of the various methods relative to experiments (i.e. accuracy versus efficiency of the calculations) and come up with a rigorous classification of ligand-binding problems, which would guide the choice of the best method.

This project will provide a student with a deep understanding of state-of-art free energy methods commonly used in industry and academia, teach how to model complexes from scratch and perform binding free-energy calculations on them, and give the opportunity to learn things in a collaborative environment.

References

[1] Computational Approaches to the Chemical Equilibrium Constant in Protein-ligand Binding, Joel Jose Montalvo-Acosta , Marco Cecchini.