

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: Gayle Brazeau

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

Adresse précise du Laboratoire : 716 STEVENS AVENUE, PORTLAND ME, 04103 USA

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : GUVENCH OLGUN

E-mail : oguvench@une.edu

Nom du Responsable du stage : GUVENCH OLGUN

Téléphone : 207-221-4171

Fax : NA

E-mail : oguvench@une.edu

HDR : NA

Ecole doctorale de rattachement : NA

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : Dynamique moléculaire, Conception de médicament assister par ordinateur, conception in silico d'inhibiteurs, docking.

Titre du stage :

Developing specific inhibitors of the enzyme ALDH1A2

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

Description du sujet (quelques lignes):

Le sujet du stage sera le développement d'inhibiteurs spécifiques à l'enzyme ALDH1A2. Il se déroulera en deux parties, une première partie consistera à déterminer la conformation la plus probable du complexe enzyme-substrat d'ALDH1A2(Retinaldehyde) en même temps que celles de 2 autres enzymes de la même famille(ALDH). Ensuite une deuxième partie consistera en la recherche et l'amarrage d'inhibiteurs de l'enzyme à l'aide du logiciel AutoDockTools Vina.

Les logiciels utilisés inclueront MOE, VMD, NAMD, CHARMM,ADT vina (entre autres).
