

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2020/2021

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 : **Laboratoire GBCM, EA7528**

Adresse précise du Laboratoire : **Conservatoire National des Arts et Métiers, 2 rue Conté, 75003, Paris**

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : **Matthieu Montes**

E-mail : **matthieu.montes@cnam.fr**

Nom du Responsable du stage : Nathalie Lagarde

Téléphone : **06-32-55-57-84**

E-mail : **nathalie.lagarde@lecnam.net**

HDR : oui ou non **non**

Ecole doctorale de rattachement : **Ecole doctorale 432, "Sciences des Métiers de l'Ingénieur"**

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

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

Bioinformatique structurale, docking, flexibilité

Titre du stage : Influence de la prise en compte de la flexibilité de la protéine sur les performances des études de docking

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

Description du sujet (quelques lignes):

La prise en compte de la flexibilité de la protéine, longtemps ignorée du fait des temps de calculs prohibitifs associés, est maintenant de plus en plus intégrée aux méthodes de docking. Différentes méthodes de prise en compte de cette flexibilité sont possibles. Les méthodes de dynamique moléculaire permettent la prise en compte de cette flexibilité de la manière la plus exhaustive mais restent trop coûteuses en temps de calcul lorsqu'un grand nombre de complexes protéine-ligand sont considérés. D'autres méthodes, plus accessibles en termes de capacités computationnelles, peuvent alors être utilisées. C'est le cas des méthodes de docking d'ensemble de structures de la protéine ou des logiciels permettant de choisir des résidus qui seront considérés comme flexible pendant le docking.

Le but du stage est de réaliser un état de l'art de l'ensemble des méthodes actuellement disponibles pour prendre en compte cette flexibilité de la protéine et d'évaluer l'influence de chaque grande classe de méthodes sur les performances de docking. Cette étude sera réalisée sur un jeu de données disponible au laboratoire rassemblant des ligands expérimentalement identifiés comme étant capable de se lier ou non au récepteur aux androgènes (AR).

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