

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 : University of Helsinki, Faculty of Pharmacy

Adresse précise du Laboratoire : Viikinkaari 5 E (P.O.Box 56)
00014 University of Helsinki
tel. +358 (0) 2941 911 (Switchboard)

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Henri Xhaard
E-mail : henri.xhaard@helsinki.fi

Nom du Responsable du stage : Henri Xhaard

Téléphone : +358504480878
E-mail : henri.xhaard@helsinki.fi
HDR : oui ou non

Ecole doctorale de rattachement :

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : Prédiction, Modélisation, Programmation, Structure

Titre du stage : Stage : optimisation du positionnement de molécules d'eau dans une interface récepteur ligand

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

Description du sujet (quelques lignes):

Ce stage consiste principalement en de la programmation. Les deux objectifs principaux sont :

- Reprendre et améliorer un code permettant de prédire et visualiser le positionnement de molécules d'eau sur un complexe ligand récepteur.
- Coder un programme de clustering en fonction de similarité de structure, à partir d'un code comparant des structures de protéines.