

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:

Pierre COOREMANS,
SIRET 80863444800027
Code NAF 7219Z

Adresse précise du Laboratoire :

Evotec (France) SAS. Computational Drug Discovery, Campus Curie. 195 Route d'Espagne. 31036
Toulouse Cedex, France.

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

Constantino Diaz Gonzalez

E-mail : Constantino.Diaz@evotec.com

Nom du Responsable du stage :

Obdulia Rabal Gracia

Téléphone : 33(0)534.63.22

E-mail : Obdulia.RabalGracia@evotec.com

HDR : non

Ecole doctorale de rattachement : non

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

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

Cheminformatics, covalent docking, library preparation, gold

Titre du stage :

Cheminformatics: Integrated workflow for covalent docking with Knime

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

Description du sujet (quelques lignes):

Responsible for the development of an integrated workflow for structure-based virtual screening of covalent drugs. Particularly, specific tasks will involve:

1. Compilation of a dataset of covalent warheads
2. Workflow development for integration with existing docking program
3. Retrospective validation with publicly available covalent study cases
4. Present work results at group and department meetings.
5. Keep up-to-date with relevant literature in this topic.