

**MASTER « In Silico Drug Design »  
2ème année**

**PROPOSITION DE STAGE  
Année Universitaire 2021 / 2022**



A envoyer à Mme Pr Camproux  
[anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr](mailto:anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr)

**ETUDIANTE : N'GUESSAN Name Fiona**

**Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: Pascal Dumy**

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité : Institut des Biomolécules Max Mousseron, CNRS UMR5247

Adresse précise du Laboratoire : IBMM, 1919 route de Mende, campus CNRS, 34000 Montpellier

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Jean-Louis Banères  
E-mail : [jean-louis.baneres@umontpellier.fr](mailto:jean-louis.baneres@umontpellier.fr)

---

**Nom du Responsable du stage : Maxime Louet**

Téléphone : 0683020822  
E-mail : [maxime.louet@umontpellier.fr](mailto:maxime.louet@umontpellier.fr)  
HDR : non

Ecole doctorale de rattachement : Ecole Doctorale Sciences Chimiques Balard, ED459

Spécialité du stage : Recherche

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : Modélisation Moléculaire ; docking moléculaire ; criblage virtuelle ; dynamique moléculaire ; analyse structurale de protéine

---

**Titre du stage : Développement d'inhibiteur de la sérine-protéase Kallikrein-6 pour le traitement de la sclérose en plaque**

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

---

**Description du sujet (quelques lignes):**

Au sein de l'équipe de pharmacologie cellulaire de l'Institut des Biomolécules Max Mousseron (IBMM) à Montpellier, dirigée par Jean-Louis Banères, le projet de stage sur 6 mois à partir de janvier 2022, portera sur l'identification et le développement de nouveaux inhibiteurs de la sérine-protéase Kallikrein-6 (KLK6) par modélisation moléculaire. KLK6 joue un rôle clé dans le processus de démyélinisation/remyélinisation des axones. Son implication a été démontrée dans la sclérose en plaque et en font une cible de choix pour son traitement. Le développement d'inhibiteur de KLK6 s'inscrit dans un projet plus large financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) incluant le développement *in silico* de candidats médicaments, leurs synthèses ainsi que leurs tests *in vitro* et *in vivo*. Une stratégie d'optimisation d'inhibiteurs récemment identifiés sera conduite par le/la stagiaire, en parallèle d'un criblage virtuel à partir de bibliothèques de composés pour identifier de nouvelles molécules capables d'inhiber

spécifiquement KLK6. Ces deux objectifs seront menés à bien à l'aide de méthodes de docking moléculaire et de dynamique moléculaire, deux méthodes très largement maîtrisées au laboratoire. Les composés proposés au cours de ce projet seront synthétisés par notre laboratoire et testés par nos partenaires sur différentes isoforme de l'enzyme. L'étudiant(e) rejoindra le sous-groupe de modélisation moléculaire animé par Nicolas Floquet et Maxime Louet. Le/la stagiaire(e) disposera d'une station de calcul GPU haute performance neuve et d'un accès à des supercalculateurs pour mener à bien ce projet.

---

<sup>1</sup> Aït Amiri S *et al.* Identification of First-in-Class Inhibitors of Kallikrein-Related Peptidase 6 That Promote Oligodendrocyte Differentiation. *J Med Chem.* 2021 64(9):5667-5688.

---

Retour par e-mail : [anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr](mailto:anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr)