



## Société Française de Chémoinformatique

11 juin 2015

### ACTUALITE

Les inscriptions sont ouvertes pour les prochaines journées de la SFCi le 8 et 9 octobre 2015 à Nice. Le programme est en ligne. La date limite pour les communications orales est fixée le 31 août 2015. La date limite pour l'inscription et les posters est fixée au 15 septembre 2015. [Plus informations](#)

La scFCi a un groupe de discussion dans LinkedIn. [N'hésitez pas à y adhérer.](#)

### MANIFESTATION, CONGRES ET ECOLES

#### **1er SYMPOSIUM ICOA (Institut de Chimie Organique et Analytique)**

“Le devenir des petites molécules dans l'innovation thérapeutique”

Le 23 juin 2015

Orléans

(date limite d'inscription: demain 12 juin 2015)

[Lire les informations](#)

#### **JDEV2015**

(Journées nationales du DEVeloppement logiciel de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche)

Du 30 juin au 3 juillet 2015

Bordeaux (IPB - ENSEIRB-MATMECA)

[Lire les informations](#)

#### **ECOLE D'ÉTÉ EN CHÉMOINFORMATIQUE À KAZAN (RUSSIE)**

Du 6 juin 2015 au 9 JUILLET 2015

Kazan, Russie

(il est toujours possible de s'y inscrire!)

[Lire les informations](#)

#### **eCheminfo Drug Discovery Euro workshops**

Du 20 au 24 juillet 2015

Université de Milan, Italie

date limite d'inscription : 15 juin

[Lire les informations](#)

## Evénements déjà annoncés

### **GORDON CONFERENCE RESEARCH — Computer Aided Drug Design 2015**

Du 19 au 24 juillet 2015

West Dover, USA

[Lire les informations](#)

### **7<sup>e</sup> JOURNEE DE LA SCFI**

Les 8 et 9 octobre 2015

Nice, France.

[Lire les informations](#)

### **CHEMOINFORMATICS SUMMER SCHOOL IN STRASBOURG**

Du 27 juin au 1 juillet 2016

Strasbourg, France

Informations à venir

## OFFRE DE THESES, POSTDOC

### **Offre de thèse en Bioinformatique Structurale et Chémoinformatique**

Établissement d'accueil : Institut de Chimie Organique et Analytique (ICOA) - UMR CNRS 7311 - Université d'Orléans

Lieu de travail : Orléans - France

Financement : Public/Privé. Cofinancement par la Région Centre et la société Johnson & Johnson

Niveau de salaire : Identique au contrat doctoral

Début de parution : 08/06/2015

Date limite de candidature : 30/07/2015

#### Personnes à contacter

Pr Pascal Bonnet, [pascal.bonnet@univ-orleans.fr](mailto:pascal.bonnet@univ-orleans.fr)

Dr Christophe Meyer, [cmeyer2@its.inj.com](mailto:cmeyer2@its.inj.com)

*Sujet de thèse : Développement d'une approche protéo-chimométrique tridimensionnelle pour la compréhension et la prédiction des interactions des complexes protéine-ligand.*

Les protéines kinases sont impliquées dans de nombreux processus cellulaires et en particulier dans les mécanismes de signalisation. Il a été démontré que le dérèglement de certaines kinases est associé au développement de plusieurs pathologies incluant le cancer ce qui en fait des cibles attractives pour la conception de nouveaux inhibiteurs. Idéalement, un inhibiteur devra être suffisamment spécifique pour limiter la survenue d'effets secondaires. En raison de la forte homologie structurale existant entre les kinases, le design d'inhibiteurs spécifiques est souvent problématique et reste limité à une progression par tâtonnements.

Nous proposons ici le développement d'une nouvelle approche protéo-chimométrique tridimensionnelle dont l'objectif consiste à prendre en compte l'ensemble de l'information structurale des protéines, des ligands et des

complexes protéine-ligand pour prédire l'activité inhibitrice de ligands divers et/ou établir le profil d'inhibition d'un ligand donné versus une famille de protéines. Ce projet de recherche s'appuie sur des résultats antérieurs obtenus par un doctorant. Le projet portera initialement sur les inhibiteurs de protéines kinases mais pourra être généralisé à toutes familles de protéines apparentées. Dans un premier temps, le thésard assigné à ce projet développera de nouveaux descripteurs structuraux des acides aminés des protéines kinases en considérant l'environnement tridimensionnel de chaque résidu. Dans un deuxième temps, il concevra des modèles statistiques spécifiques des protéines kinases. Ces modèles s'appuieront sur l'information expérimentale disponible sur les nombreuses structures cristallographiques des complexes kinase-ligand et mettront en relation les nouveaux descripteurs de protéines ainsi que les interactions moléculaires des complexes kinase-ligand avec l'activité des inhibiteurs. Finalement, le thésard analysera les meilleures méthodes statistiques applicables à cette approche protéo-chimométrique afin de prédire l'activité de nouveaux inhibiteurs de kinases sur des protéines kinases connues mais aussi de prédire si de nouvelles protéines kinases peuvent être inhibées par des molécules virtuelles afin de les prioriser avant leur synthèse chimique.

#### Profil du candidat :

Compétences souhaitées : Connaissances en chimoinformatique, modélisation moléculaire des protéines, programmation.  
Bon niveau d'anglais exigé.

### **Offre de thèse en Bioinformatique Structurale et Chimoinformatique**

Établissement d'accueil : Laboratoire d'Innovation Thérapeutique, UMR 7200 - Université de Strasbourg

Lieu de travail : Illkirch - France

Financement : Public

Niveau de salaire : 1370 euros net/mois (contrat doctoral standard)

Début de contrat: Octobre 2015

#### Personnes à contacter

Merci d'envoyer une lettre de motivation et les coordonnées d'un référent à:

Dr Didier Rognan, rognan@unistra.fr

Sujet de thèse : *Conception rationnelle d'inhibiteurs d'homo et d'hétérodimères de récepteurs d'intérêt thérapeutique*

De nombreux récepteurs d'intérêt thérapeutique (récepteurs tyrosine kinase, récepteurs couplés aux protéines G) fonctionnent sous forme d'homo et/ou d'hétérodimères dont l'inhibition sélective devient un enjeu majeur en drug discovery. Ce projet vise à identifier des inhibiteurs de faible poids moléculaire de deux dimères d'intérêt (une tyrosine kinase, un récepteur couplé aux protéines G) en couplant données expérimentales (mutagenèse dirigée, FRET, BRET) et méthodes chem et bio-informatiques.

#### Profil du candidat :

Le (la) candidat(e) devra posséder un master (ou diplôme équivalent) dans une des disciplines suivantes: chimoinformatique, bioinformatique, chimie théorique, interface chimie-biologie. Une expérience préliminaire (ex: stage de M2) en modélisation de protéine (modélisation par homologie, dynamique moléculaire) et/ou drug design rationnel (recherche de ligands par similarité 2D ou 3D, recherche pharmacophorique, docking, criblage virtuel) est absolument nécessaire. Des compétences en programmation (C++, python) seront également considérées comme un atout.

## Chémo-informaticien(ne) à l'Oréal

Cette offre s'adresse à un/une ingénieur Chemo-Informaticien ou Bio-Informaticien avec une expérience significative en Chémo-Informatique/modélisation moléculaire ou BioInformatique Structurale.

[Plus d'informations](#)

### **Vous avez une annonce à faire passer :**

*Vous l'envoyez à : [ekellen@unistra.fr](mailto:ekellen@unistra.fr)*

*Merci d'envoyer un message simple avec :*

*Le nom de la conférence, La date et le lieu*

*Ou*

*Le type de poste, Le Laboratoire d'accueil, ville, pays*

*Et de joindre l'adresse d'un site WEB ou un document pdf*