

Analyse à grande échelle de collections chimiques mondiales pour la recherche d'inhibiteurs de peroxyrédoxines humaines à visée thérapeutique

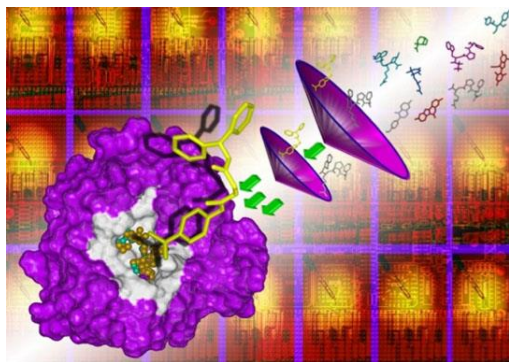
Directeur de thèse : Pr. Jean-Marc Lancelin - Institut des Sciences Analytiques - UMR5280 CNRS/Université Claude Bernard Lyon 1, 5 rue de la Doua, 69100 Villeurbanne
Mail : jean-marc.lancelin@univ-lyon1.fr

Co-encadrement: Dr. Florence Guillière – Institut des Sciences Analytiques – UMR5280 CNRS/Université Claude Bernard Lyon1, 5 rue de la Doua, 69100 Villeurbanne

La recherche de thérapies pharmacologiques novatrices évolue profondément et très rapidement sous l'influence convergente de l'accès public à de très grandes collections virtuelles et physiques mondiales de millions de composés organiques d'origines naturelles ou synthétiques.

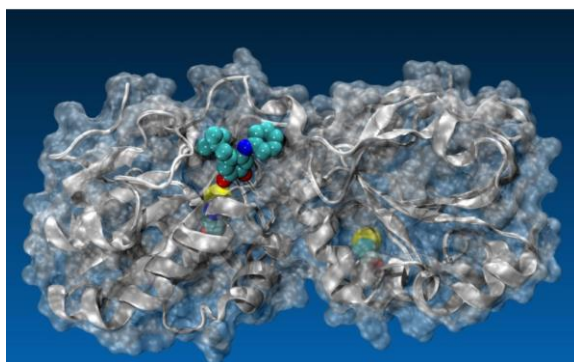
A l'ISA sont développées des recherches en chimie analytique pour coupler l'analyse des interactions moléculaires à grande échelle (million de composés) sous ses aspects théoriques à l'aspect expérimental. Le sujet de thèse porte sur la recherche de molécules susceptibles de moduler l'activité des peroxyrédoxines humaines dans leurs actions sur les phénomènes inflammatoires et le cancer. En collaboration avec l'Université de Louvain-la-Neuve en Belgique, le sujet sera développé sur la recherche de molécules inhibitrices à visée thérapeutique issues de processus de criblages virtuels selon une chaîne d'analyse de bases de données moléculaires à grande échelle (million de composés) et l'étude de leur mode d'action. Les molécules prédites pour être les plus actives seront sourcées physiquement voir synthétisées et testées au laboratoire selon des méthodes basées sur la RMN liquide haute résolution et des mesures d'activité enzymatique par suivi spectrophotométrique.

Les profils adaptés seront issus de Masters Chimie, Physique-chimie, Biochimie avec une motivation pour les approches intégrant les molécules organiques, les macromolécules biologiques, la modélisation et l'analyse spectroscopique et enzymologique.



Criblage virtuel

Source : INSERM



Dimère de peroxyrédoxine 5 humaine avec un ligand

Large-Scale Analysis of Global Chemical Collections for Research on the Therapeutic Inhibition of Human Peroxyredoxins

Supervisor: Pr. Jean-Marc Lancelin - Institut des Sciences Analytiques - UMR5280 CNRS/Université Claude Bernard Lyon 1, 5 rue de la Doua, 69100 Villeurbanne

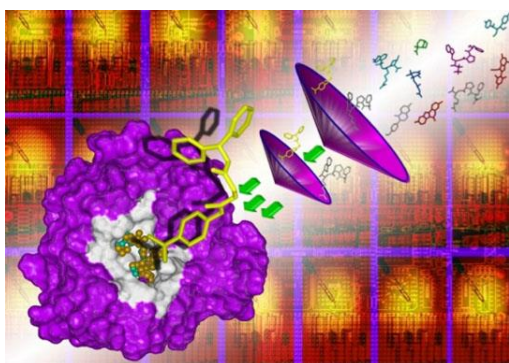
Mail : jean-marc.lancelin@univ-lyon1.fr

Co-management: Dr. Florence Guillière – Institut des Sciences Analytiques – UMR5280 CNRS/Université Claude Bernard Lyon1, 5 rue de la Doua, 69100 Villeurbanne

The search for innovative pharmacological therapies is evolving profoundly and very rapidly under the converging influence of public access to very large virtual and global physical collections of millions of organic compounds of natural or synthetic origin.

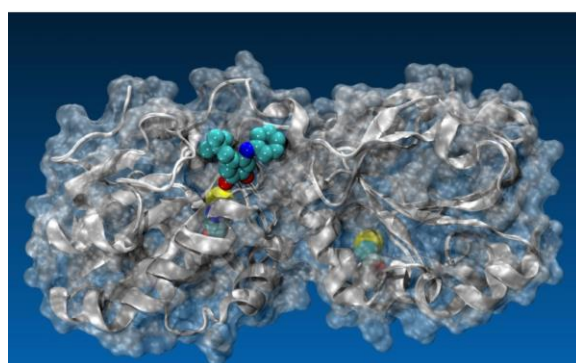
At ISA are developed researches in analytical chemistry to couple the analysis of large-scale molecular interactions (million of compounds) in its theoretical aspects to the experimental aspects. The subject of the thesis is the search for molecules likely to modulate the activity of human peroxyredoxins in their actions on inflammatory phenomena and cancer. In collaboration with the University of Louvain-la-Neuve in Belgium, the subject will be developed on the research of the research of therapeutic inhibitory molecules resulting from virtual screening processes according to an analysis chain of molecular databases of compounds at large scale. The molecules predicted to be the most active will be physically sourced, see synthesized and tested in the laboratory using methods based on high-resolution liquid NMR and enzymatic activity measurements by spectrophotometric monitoring.

The adapted profiles will come from Master of Chemistry, PhysicalChemistry, Biochemistry, with a special motivation for approaches integrating organic molecules, biological macromolecules, molecular modeling and spectroscopic and enzymological analysis.



Virtual screening

Source : INSERM



Dimer of human peroxyredoxin 5 with a ligand