

Bernard Maigret

DR CNRS

bernard.maigret@loria.fr

Alexandre Beautrait

doctorant

alexandre.beautrait@loria.fr

Mathieu Chavent

doctorant

mathieu.chavent@loria.fr

Leo Ghemtio

ingénieur

leo.ghemtio@loria.fr

Vincent Leroux

post-doc

vincent.leroux@loria.fr

Thèmes principaux de l'équipe :

Screening virtuel, reconnaissance moléculaire, assemblages protéines-protéines

Systemes étudiés :

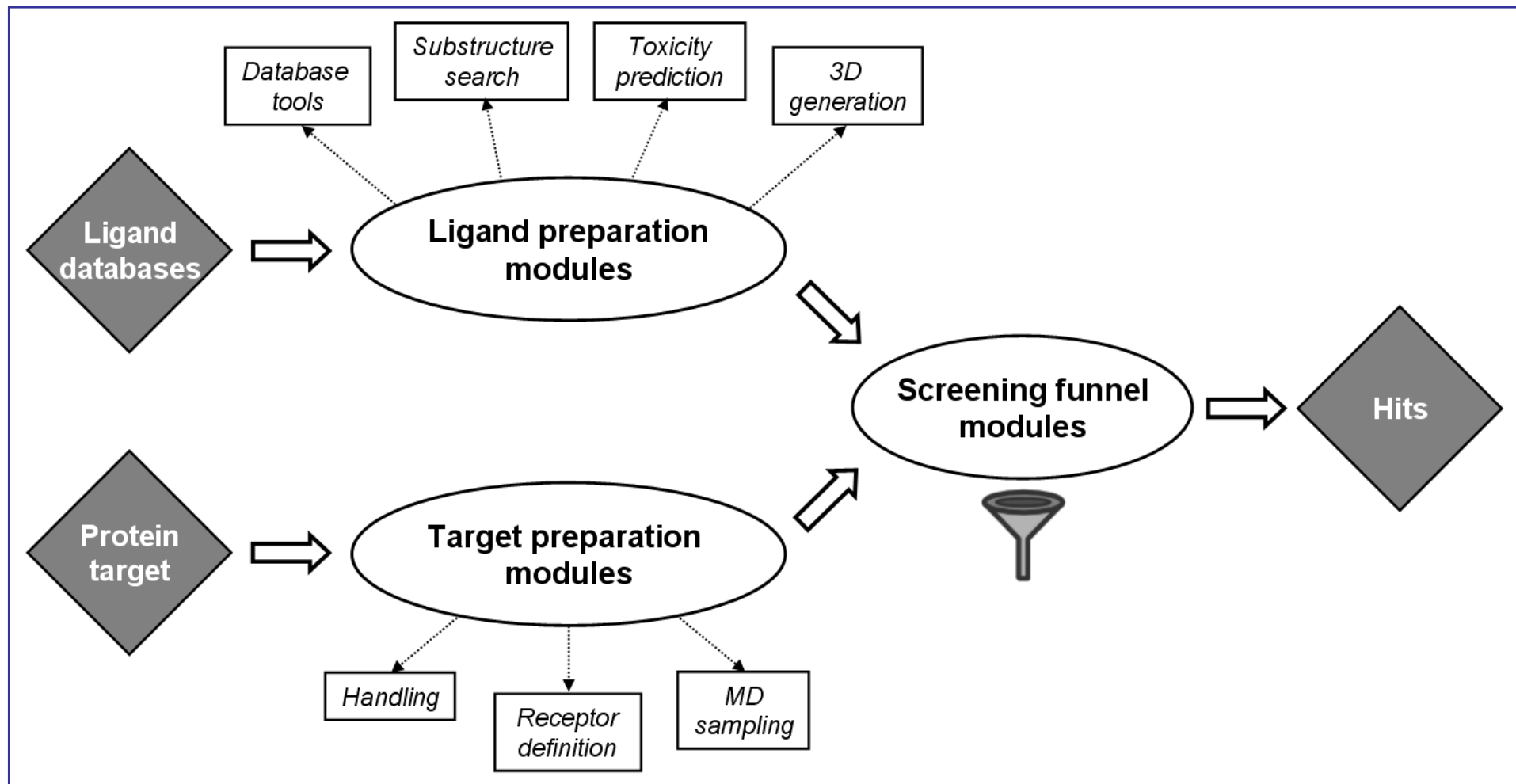
RCPGs, kinases, récepteurs membranaires et nucléaires

Développements méthodologiques :

visualisation moléculaire, docking, bases de données, calculs sur grille



The VSM-G project : Virtual Screening Manager for Grids



Main achievements :

- preparation of input ligand databases
- multiple-step virtual screening strategy
- distribution of calculations on Grid'5000
- MD analysis tools

Work in progress :

- geometrical docking matching
- automatic use of MD as a docking tool
- ligand-based drug design modules
- clustering of results / error handling