

# Synthèse bibliographique avec une analyse critique décrivant les potentialités, limites et perspectives de l'utilisation de la modélisation QSAR pour prédire les effets des mélanges chimiques

**Date de publication :** 18/02/2021

**Référence de l'offre :**

**Lieu :** Verneuil-en-Halatte / Poste basé à 60 km au nord de Paris, navettes gratuites assurées de la gare de Creil (le stage pourra être effectué en télétravail)

**Type de contrat :** stage

**Contact :** [enrico.mombelli@ineris.fr](mailto:enrico.mombelli@ineris.fr)

***Ce poste est ouvert aux personnes en situation de handicap***

## Descriptif

Le danger toxicologique associé aux substances chimiques peut être prédit in silico grâce aux Relations Quantitatives entre Structure chimique et Activité biologique (« Quantitative Structure-Activity Relationships », modélisation QSAR). En effet, cette forme de modélisation moléculaire permet de prédire l'effet des substances chimiques sur les organismes vivants en fonction de variables (descripteurs moléculaires) capables de quantifier les propriétés physicochimiques des molécules.

Cependant, la grande majorité des modèles QSAR décrits en littérature scientifique ne prend pas en compte une exposition à un mélange de substances chimiques. Pour combler ce manque, plusieurs efforts ont vu le jour au cours de la dernière décennie afin de permettre l'intégration de l'interaction entre substances chimiques au sein des modèles QSAR. Ces efforts de modélisation QSAR autour de cette thématique, ont permis le développement d'approches computationnelles spécifiquement dédiées à la description moléculaire d'un échantillon composé par plusieurs substances chimiques.

L'objectif de ce stage sera de rédiger un état de l'art sur la modélisation Structure-Activité de la toxicité des mélanges chimiques afin d'identifier les potentialités, limites et perspectives d'une utilisation de modèles QSAR pour les effets cocktail.

## Profil

Master M1 Toxicologie et éco-toxicologie ou santé environnement. Très bonne compréhension de l'anglais écrit.

## Divers

Durée du stage : 2 à 3 mois