Master « Sciences, Technologie, Santé »
Mention « In Silico Drug Design »
2ème année

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2013 – 2014
A envoyer à Mme Pr Camproux :
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,…) et Numéro d'affiliation de l'unité : University of Helsinki

Adresse précise du Laboratoire :
CENTRE FOR DRUG RESEARCH
Faculty of pharmarcy
PO Box 56 (Viikinkaari 5 E)
FI-00014 University of Helsnki

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Henri Xhaard. Ph.D
E-mail : henri.xhaard@helsinki.fi

Nom du Responsable du stage : M.Sc. Alexandre Borrel

Téléphone : Fax :
E-mail :
HDR : oui ou non

Ecole doctorale de rattachement :

Spécialité du stage : Recherche ☐ Professionnel ☐

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet :

Titre du stage :

Optimizing the hydrogen-bond network in GPCR models.

Equipe : 1 investigateur principal (PI), 1 postdocs, 7 doctorants

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

---

Description du sujet (quelques lignes):

To our experience, (1) molecular modeling softwares (even commercial) optimize very poorly - or simply do not optimize at all - the network of hydrogen bond formed by side-chains (and water molecules) when homology models are built and (2) virtual screening experiments perform less well in molecular models presenting a poor hydrogen bonding network. The aim of this training period is to continue developing the code generated by the previous ISDD internship to write a software that run an optimization protocol, optimizing the hydrogen bond network for the side-chains that face the binding pocket in GPCRs.

that may be used (eg genetic, ant-colony, random forest, monte carlo). As much as possible the search space will be divided so that
parallelized GRID computing can be used (collaboration with Finnish Center for Scientific computing).

Performance will be compared to existing software (eg Schrödinger, Modeller 9v2, Swissmodeller, Tripos/Sybyl,
Accelrys/Discovery studio) based on retrospective reconstruction of known Xray structures.
Data already available: object-oriented code that allow many geometrical definitions (helices, blocks of amino
acids) and their transformations, code for parsing PDB files.

Retour par e-mail : laurence.muller-wurtz@univ-paris-diderot.fr anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr