

**PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2018/2019**

A envoyer à Mme Pr Camproux
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr



Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise: SANOFI

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité : on

Adresse précise du Laboratoire : 1, avenue PIERRE BROSSOLETTE 91385 CHILLY-MAZARIN

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : **Hervé MINOUX**

E-mail : herve.minoux@sanofi.com

Nom du Responsable du stage : Bruno CORNET

Téléphone : 01 60 49 68 20

E-mail : bruno.cornet@sanofi.com

HDR : **non**

Ecole doctorale de rattachement : **non**

Spécialité du stage : Recherche

Professionnel

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

Dynamique moléculaire, Analyse en Composantes Principales

Titre du stage :

Définition d'un Espace conformationnel commun aux GPCR de classe A par Dynamique Moléculaire

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

Description du sujet (quelques lignes):

En prenant la suite du travail précédent, il faudra :

-
- Prolonger les dynamiques de 1µs de ADRB2, CCR2 et CXCR4
 - Produire de nouvelles trajectoires en variant les vitesses initiales et les structures cristallographiques de départ
 - Explorer l'espace conformationnel de nouvelles GPCRs
 - Utiliser la dynamique biaisée pour finir l'exploration de l'espace conformationnel
 - Sur la technique actuelle d'Analyse en Composantes Principales qui permet la cartographie de l'espace conformationnel, trier les 22k descripteurs en fonction de leur importance (variance) et de leur pertinence (Gini index)
 - Éventuellement explorer d'autres techniques de classification et d'autres descripteurs
-

Références :

Bio3d: an R package for the comparative analysis of protein structures, Barry J. Grant et al, 2006, *bioinformatics*

G Protein Coupled Receptor Structure and Activation, Kobilka, BK., 2007, *Biochim. Biophys. Acta*

Diversity and Modularity of G Protein –Coupled Receptor Structures, Katrich et al., 2012, *Trends Pharmacol. Sci.*

Retour par e-mail :

anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr