

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2012 – 2013

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 :

Adresse précise du Laboratoire :
Division Medicinal Chemistry
Faculty of Sciences
Amsterdam Institute of Molecules, Medicines and Systems (AIMMS)
VU University Amsterdam
Doe Boelelaan 1083
1081 HV Amsterdam
The Netherlands

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Dr. Chris de Graaf (www.few.vu.nl/~cdgraaf)
E-mail : c.de.graaf@vu.nl

Nom du Responsable du stage : Dr. Chris de Graaf

Téléphone : +31 20 598 7553 Fax : +31 20 598 7610
E-mail : c.de.graaf@vu.nl
HDR : oui ou non

Ecole doctorale de rattachement : Drug Discovery and Safety (Master program of Department of Pharmaceutical Sciences, VU University Amsterdam)

Spécialité du stage : Recherche Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet :
virtual screening, molecular docking, protein modeling, molecular modeling, chemoinformatics

Titre du stage : *In silico* prediction of GPCR-ligand interactions

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

Description du sujet (quelques lignes):

The project will focus on the construction and validation of customized ligand- and structure-based virtual screening models for the identification of small molecule modulators of G Protein Coupled Receptors (GPCRs). These versatile membrane bound switch nodes of cell function are a very important class of proteins, both from a scientific (illustrated by the 2012 Nobel Prize for Chemistry) and a pharmaceutical (GPCRs are currently the most important drug target) perspective. The increasing number GPCR crystal structures the past few years has on one hand opened up new possibilities for structure-based discovery of novel GPCR ligands, but on the other hand identified several challenges in the computational prediction of

GPCR-ligand interactions. The aim of the current project is to develop and validate new computer-aided drug design approaches to address some of these challenges in GPCR modeling.

R

etour par e-mail : anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr