

**PROPOSITION DE STAGE  
Année Universitaire 2016/2017**

A envoyer à Mme Pr Camproux  
[anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr](mailto: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 : x

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

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

E-mail : [herv.minoux@sanofi.com](mailto:herv.minoux@sanofi.com)

---

**Nom du Responsable du stage : Bruno CORNET**

Téléphone : 01 60 49 68 20

Fax : 0160 49 74 97

E-mail : [bruno.cornet@sanofi.com](mailto:bruno.cornet@sanofi.com)

HDR : non

Ecole doctorale de rattachement : x

Spécialité du stage : Recherche  Professionnel

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

---

**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):**

Étape (1) : construire/préparer les structures cristallographique de A-GPCRs de la PDB en respectant le plus possible cette structure (garder les molécules de lipides, d'eau, les ions, les ligands, les mutations, les insertions)

Étape (2) : insérer les modèles dans une membrane, ajouter l'eau

Étape (3) : dynamique moléculaire

Étape (4) : comparer les trajectoires, identifier les conformations → établir un espace conformationnel « type »

Étape (5) : sur une ou deux GPCRs représentatives, reprendre les simulations en modifiant un élément à la fois de la structure cristallographique : retirer les ligands, les ions, les lipides ; modifier les artéfacts de cristallisations tels que résidus mutés ou insertion de protéines exogènes, ajouter des boucles manquantes → comparer les trajectoires

Étape (6) : pour une GPCR de structure cristallographique connue, faire des modèles par homologie à partir de différents points de départ → comparer les trajectoires

---