

Né le 15/10/1974 à Bron (69)  
Nationalité française, marié

108B rue Jean Jaurès  
93130 Noisy-le-Sec

### SITUATION, ETABLISSEMENT D'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET LABORATOIRE D'ACCUEIL

**Enseignant-Chercheur 85 MCF 0343**  
**Echelon 5**  
**Biophysique Pharmaceutique**  
**et Structurale**

UFR des Sciences Pharmaceutiques  
Bd Becquerel - F-14032 CAEN CEDEX  
Tel. +33.(0)2.31.56.60.09  
e.mail : nicolas.saettel@unicaen.fr  
<http://www.unicaen.fr/pharmacie>

*chercheur invité dans le laboratoire depuis 2007*

**CMIB - Chimie, modélisation**  
**et imagerie pour la biologie**

Institut Curie / CNRS UMR9187 / INSERM U1196  
Centre Universitaire, Bât 110 - F-91405 ORSAY  
Tel. +33.(0)1.69.86.30.81  
e.mail : nicolas.saettel@curie.fr  
<http://cmib.curie.fr>

### QUALIFICATIONS DANS LE CORPS DES PROFESSEURS DES UNIVERSITÉS

*Section 31* Chimie théorique, physique, analytique

*Section 64* Biochimie et biologie moléculaire

### TITRES UNIVERSITAIRES

2011 **Habilitation à diriger les recherches**, Université Paris-Sud

2002 **Ph.D.**, University of Notre Dame, Notre Dame (Indiana), U.S.A.

1999 **Diplôme d'ingénieur**, Chimie Physique Electronique Lyon, *option chimie organique*

### PARCOURS

2004- **Maître de Conférences**, Université de Caen Basse-Normandie

2010 Accueil en délégation CNRS à l'UMR 176 pour 1 an renouvelé 6 mois

2009 Congé de recherche et conversion thématique pour 6 mois

2002-2004 **Post-Doc**, UPR 285, Collège de France

1997-2002 **Etudiant en thèse** ("Ph.D. Candidate"), University of Notre Dame

### ACTIVITÉS D'ENSEIGNEMENTS

2004-2009 & 2012- **Maître de Conférences** *UFR des Sciences Pharmaceutiques, Caen, France*  
Modélisation Moléculaire, Biophysique et Informatique

**Enseignement en Modélisation Moléculaire** : Analyse de séquence et structure 3D de protéine, mécanique moléculaire, conception de pharmacophore, docking (60h)

**Enseignement de Biophysique** en deuxième année des études pharmaceutiques: optique géométrique, acoustique, vision, polarimétrie, physico-chimie des solutions et colloïdes. Travaux Pratiques (135h) et Travaux Dirigés (36h).

**Enseignement d'Informatique**: utilisation de Windows/Linux, Bases de Données, HTML, recherche documentaire, suite Open/LibreOffice ou Microsoft Office – tableur et tableaux croisés dynamiques, traitement de texte avec bibliographie et présentation (90h de TPs en L2, mise en place du C2i niveau 1, 20h en 5<sup>e</sup> année option industrie)

HTML/PHP/Javascript/JSP en Master 1 Recherche, UES "Informatique dans le cadre de la recherche pharmaceutique/médicale et technologie de communication" (8h de TDs)

**Mise en place d'une plate-forme d'apprentissage en ligne** <http://physcaen.free.fr> et **animateur de la plate-forme institutionnelle** <http://foad.unicaen.fr>

1997-1998 **Teaching Assistant (Moniteur)** *University of Notre Dame, IN, U.S.A.*  
CHEM 223-24L "Elementary Organic Chemistry Laboratory I and II"

**Encadrement de TPs et TDs de chimie organique** en deuxième année de Bachelor of Science. Techniques de laboratoire et théorie: points de fusion, d'ébullition, recristallisation, distillation. Synthèses multi-étapes représentatives des réactions classiques étudiées en cours: Diels-Alder, estérification, réduction... Caractérisations UV, IR, RMN et théorie. Permanence de soutien et correction des examens bi-semestriels des cours et des TPs (360h).

**ACTIVITÉS LIÉES À L'ADMINISTRATION**

**Webmestre** du site web de la **Société Française de Chémoinformatique**  
<http://www.chemoinformatique.fr> et **gestionnaire** de la liste de diffusion

Participation aux **Journées Nationales en Chémoinformatique 2007, 2009-2013**

**Membre actif des ateliers de la Chimiothèque Nationale** "Criblage Virtuel" et "Chimiothèque Départementale". Aide à la traduction du site en anglais <http://chimiotheque-nationale.enscm.fr/>

Participation aux **Journées de la Chimiothèque Nationale** de 2005 à 2013

**Webmestre** du site web du **GDR 3049 PHOTOMED** (Médicaments Photoactivables – Photochimiothérapie) <http://www.gdr-photomed.cict.fr>

Participation aux Manifestations du GDR depuis 2008

**Correspondant informatique** de l'UMR 176, à l'Institut Curie et à l'Université de Paris-Sud 11

**Webmestre** du site institutionnel <http://umr176.curie.fr>

**ACTIVITÉS LIÉES À LA RECHERCHE**

## Formations Complémentaires

2011 **2<sup>nd</sup> ENSC-Schrödinger Meeting/Workshop**, Cachan

2010 **2<sup>nd</sup> Strasbourg Summer School on Chemoinformatics**, Obernai

**Tripos Workshop**, Paris

"Trends and New Technologies for Lead Optimization and in silico Drug Design"

2009 **Chemaxon User Group Meeting**, Budapest, Hongrie

2008 **Strasbourg Summer School on Chemoinformatics**, Obernai

**French-Japanese Workshop on Computational Methods in Chemistry**, Strasbourg

**Chemaxon User Group Meeting**, Budapest, Hongrie

2007 **Chemaxon User Group Meeting**, Budapest, Hongrie

2006 **Chemaxon User Group Meeting**, Budapest, Hongrie

**École Thématique CNRS**, Bischoffsheim

"Criblage de molécules : retombées scientifiques et innovations"

**Workshop** "Chemoinformatics in Europe: Research and Teaching", Obernai

## Prix

Attribution du **Prix Hélène Starck** par l'ARC à la journée rencontre boursiers 2003

Attribution de la "**Young Investigator Award**" au VII<sup>th</sup> International Workshop on Radiation Damage to DNA (2001)

Attribution de la **Reilly Fellowship** (années 1999-2000 et 2000-2001) pour accomplissements scolaires et de recherche par le Département de Chimie et Biochimie (Notre Dame)

## Participation à l'organisation de Colloques

**Congrès Photomed** 2011, 9-10 Septembre 2010

**8èmes journées de la Chimiothèque Nationale**, 23-24 Juin 2011

## Collaborations

Shozeb Haider (Centre for Cancer Research and Cell Biology, Queen's University Belfast) pour la modélisation moléculaire de ligands à la jonction ADN Quadruplexe-Duplexe

John O. Trent (Molecular Modeling Core Facility, James Graham Brown Cancer Center, Louisville) concernant la découverte de ligands de structures quadruplexes d'ADN

Jacques Ghysdael & Frédéric Saudou (UMR146 CNRS / Institut Curie) visant la recherche de nouveaux inhibiteurs de la calcineurine

Janet Hall (U612 INSERM / Institut Curie) sur l'inhibition de PARP pour contrôler le cancer hépatocellulaire

Mounira Amor-Gu ret (UMR3348 CNRS / Institut Curie) sur l'inhibition de RAD51 (Projet exploratoires pluridisciplinaires inter-instituts INSB – INC)

Fran ois Amblard (UMR168 CNRS / Institut Curie) sur le design d'inhibiteurs photo-activables de GSK3. Mise en place et co-encadrement d'un M2

Isabelle Janoueix-Lerosey (U830 INSERM / Institut Curie) sur l'inhibition de la tyrosine kinase ALK mut e dans le traitement du neuroblastome

#### Projets Nationaux

Participation (50%)   l' quipe partenaire Legraverend dans le projet de Recherche Translationnelle soutenu par l'INCA (2011-2013) "Le r cepteur   activit  tyrosine kinase TYRO3, une nouvelle cible th rapeutique dans les cancers" coordonn  par Fran ois Radvanyi (UMR144 CNRS / Institut Curie)

Participation (30%)   l' quipe partenaire Teulade-Fichou dans le projet soutenu par un ANR blanc (2009-2012) " G4-TOOLBOX: Nouveaux outils pour l'analyse des quadruplexes d'acides nucl iques" coordonn  par Jean-Louis Mergny (U869)

#### Administration li e   la recherche

**Gestion Informatique de la Chimioth que** CERMN (2004-2007) et Curie-CNRS (depuis 2007). D veloppement d'une interface web   l'usage des chimistes pour l'interrogation de chimioth ques locales et commerciales, r elles ou virtuelles, bas e sur la sous-structure, la similarit , des descripteurs topologiques et physico-chimiques. Rassemblement et croisement des r sultats sur les cibles biologiques en vue de leur exploitation.

**D veloppement de la Photochimioth que** (photosensibilisateurs d'int r t th rapeutique) et de son exploitation dans le cadre du GDR 3049 PHOTOMED

**Beta-testeur** du logiciel Tripos SYBYL-X

### ENCADREMENT

Th�ses		taux d'encadrement
2009-2012	Blaise Dumat "Optimisation de triarylamine pour la microscopie biphotonique" 1 publication Directeur de th�se : M.P. Teulade-Fichou	30%
2008-2012	Fran�iane Chevot "Conception et synth�se d'inhibiteurs de TYRO3" Directeur de th�se : M. Legraverend	30%
2008-2011	Eric Largy "Ciblage d'acides nucl�iques G-quadruplexes : synth�se et d�veloppement de m�thode pour l'analyse et le criblage de ligands s�lectifs multimodaux" 1 publication accept�e Directeur de th�se : M.P. Teulade-Fichou	30%
2007-2008	H�l�ne Bertrand "H�t�rocycles aromatiques �tendus : variations structurales pour l'auto-assemblage bi-dimensionnel et la reconnaissance d'ADN G-quadruplexe" 1 publication Directeur de th�se : M.P. Teulade-Fichou	30%
2005-2007	Thibaut Varin "Development, evaluation and use of data mining methods for virtual screening. Application to 5-HT ligands" Directeur de th�se : R. Bureau	30%
2004-2005	Alban Lepailleur "Applications de m�thodes chemo-informatiques et 3D-(Q)SAR dans le cadre de la d�couverte de nouveaux ligands" Directeur de th�se : R. Bureau	30%
DEA/Masters		taux d'encadrement
2012	Alexandre Masson	30%
2003-2004	Elsa de Lemos	30%
2002-2003	Cl�mence Jacquelin / DEA (2002-2003)	1 publication, 50%
Autres		taux d'encadrement
2004	Beno�t Legras / Ing�nieur ESCOM	100%
2003-2004	Isabelle Blanc et Antoine Pagnon / BTS de l'ENCPB de Paris	100%

## PUBLICATIONS

H-INDEX : 13\*

Articles dans des revues internationales avec comité de lecture

- Chaput, L.; Martinez-Sanz, J.; Quiniou, E.; Rigolet, P.; Saettel, N.; Mouawad, L. "vSDC: a method to improve early recognition in virtual screening when limited experimental resources are available" *J. Cheminform.* **2016**, *8*,1. IMPACT FACTOR : **4,547**
- Dumat, B.; Faurel-Paul, E.; Fornarelli, P.; Saettel, N.; Metge, G.; Fiorini-Debuisschert, C.; Charra, F.; Mahuteau-Betzer, F.; Teulade-Fichou, M.-P. "Influence of the oxazole ring connection on the fluorescence of oxazolyl-triphenylamine biphotonic DNA probes." *Org. Biomol. Chem.* **2016**, *14*(1), 358-370. IMPACT FACTOR : **3,562**
- Traoré, T.; Cavagnino, A.; Saettel, N.; Radvanyi, F.; Piguel, S.; Bernard-Pierrot, I.; Stoven, V.; Legraverend, M. "New aminopyrimidine derivatives as inhibitors of the TAM family." *Eur. J. Med. Chem.* **2013**, *70*, 789-801. IMPACT FACTOR : **3,447**
- Dumat, B.; Bordeau, G.; Faurel-Paul, E.; Mahuteau-Betzer, F.; Saettel, N.; Metge, G.; Fiorini-Debuisschert, C.; Charra, F.; Teulade-Fichou, M.-P. "DNA Switches on the Two-Photon Efficiency of an Ultrabright Triphenylamine Fluorescent Probe Specific of AT Regions" *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, *135*, 12697-12706. IMPACT FACTOR : **12,113**
- Suarez, R. M.; Chevot, F.; Cavagnino, A.; Saettel, N.; Radvanyi, F.; Piguel, S.; Bernard-Pierrot, I.; Stoven, V.; Legraverend, M. "Inhibitors of the TAM subfamily of tyrosine kinases: Synthesis and biological evaluation." *Eur. J. Med. Chem.* **2013**, *61*, 2-25. IMPACT FACTOR : **3,447**
- Largy, E. ; Saettel, N. ; Hamon, F. ; Dubruille, S. ; Teulade-Fichou, M.-P. "Screening of a Chemical Library by HT-G4-FID for Discovery of Selective G-quadruplex Binders" *Curr. Pharm. Des.* **2012**, *18*(14),1992-2001. IMPACT FACTOR : **3,452**
- Dumat, B.; Bordeau, G.; Faurel-Paul, E.; Mahuteau-Betzer, F.; Saettel, N.; Bombled, M.; Metgé, G.; Charra, F.; Fiorini-Debuisschert, C.; Teulade-Fichou, M. P. "N-phenyl-carbazole-based two-photon fluorescent probes: Strong sequence dependence of the duplex vs quadruplex selectivity" *Biochimie* **2011**, *93*, 1209-1218. IMPACT FACTOR : **2,963**
- Bertrand, H.; Granzhan, A.; Monchaud, D.; Saettel, N.; Guillot, R.; Clifford, S.; Guédin, A.; Mergny, J. L.; Teulade-Fichou, M.-P. "Recognition of G-quadruplex DNA by triangular star-shaped compounds: With or without side chains?" *Chem. Eur. J.* **2011**, *17*, 4529-4539. IMPACT FACTOR : **5.731**
- Achelle, S.; Saettel, N.; Baldeck, P.; Teulade-Fichou, M.-P., Maillard, P. "Bisporphyrin connected by pyrimidine: synthesis and photophysical properties" *J. Porphyrins Phthalocyanines* **2010**, *14*, 877-884. IMPACT FACTOR : **1.397**
- Monchaud, D.; Granzhan, A.; Saettel, N.; Guédin, A.; Mergny, J.-L.; Teulade-Fichou, M.-P. "One Ring to Bind Them All" — Part I: The Efficiency of the Macrocyclic Scaffold for G-Quadruplex DNA Recognition" *J. Nucleic Acids*, **2010**, Article ID 525862, 19 pages.
- Granzhan, A.; Monchaud, D.; Saettel, N.; Guédin, A.; Mergny, J.-L.; Teulade-Fichou, M.-P. "One Ring to Bind Them All" — Part II: Identification of Promising G-Quadruplex Ligands by Screening of Cyclophane-Type Macrocycles" *J. Nucleic Acids*, **2010**, Article ID 460561, 11 pages.
- Granzhan, A.; Largy, E.; Saettel, N.; Teulade-Fichou, M.-P. "Macrocyclic DNA-Mismatch-Binding Ligands: Structural Determinants of Selectivity" *Chem. Eur. J.* **2010**, *16*, 878-889. IMPACT FACTOR : **5.731**
- Varin, T.; Saettel, N.; Villain, J.; Lesnard, A.; Dauphin, F.; Bureau, R.; Rault, S. "3D Pharmacophore, Hierarchical Methods, and 5-HT4 Receptor Binding Data" *J. Enzym. Inhib. & Med. Chem.* **2008**, *23*, 593-603. IMPACT FACTOR : **2.332**
- Hounsou, C.; Guittat, L.; Monchaud, D.; Jourdan, M.; Saettel, N.; Mergny, J.-L.; Teulade-Fichou, M.-P. "G-Quadruplex Recognition by Quinacridines: a SAR, NMR and Biological Study" *Chem. Med. Chem.* **2007**, *2*, 655-666. IMPACT FACTOR : **2.968**
- Saettel, N.J.; Wiest, O. "Explicit and implicit solvation of radical ions: the cycloreversion of CPD dimers." *Tetrahedron* **2006**, *62*, 6490-6500. IMPACT FACTOR : **2.641**
- Saettel, N.; Katsonis, N.; Marchenko, A.; Teulade-Fichou, M.P.; Fichou, D. "Triazatrinaphthylene, a three-fold symmetry planar conjugated system with two-dimensional self-assembly properties." *J. Mater. Chem.* **2005**, *15*, 3175-3180. IMPACT FACTOR : **6.626**
- Lepailleur, A.; Bureau, R.; Paillet-Loilier, M.; Fabis, F.; Saettel, N.; Lemaitre, S.; Dauphin, F.; Lesnard, A.; Lancelot, J.C.; Rault, S. "Molecular modeling studies focused on 5-HT7 versus 5-HT1A selectivity. Discovery of novel phenylpyrrole derivatives with high affinity for 5-HT7 receptors." *J. Chem Inf. Model.* **2005**, *45*, 1075-1081. IMPACT FACTOR : **3.738**
- Jacquelin, C.; Saettel, N.; Hounsou, C.; Teulade-Fichou, M.P. "Palladium versus copper-catalyzed N-arylation towards an efficient access to polysubstituted dibenzophenanthrolines and carbazoles." *Tetrahedron Lett.* **2005**, *46*, 2589-2592. IMPACT FACTOR : **2.379**

\* Fonction 'Create Citation Report' du portail Web of Knowledge en utilisant tous les résultats de la requête author=(saettel n\*)

19. Wiest, O.; Harrison, C.B.; Saettel, N.J.; Cibulka, R.; Sax, M.; Konig, B. "Design, Synthesis, and Evaluation of a Biomimetic Artificial Photolyase." *J. Org. Chem.* **2004**, *69*, 8183-8185.  
IMPACT FACTOR : **4.721**
20. Saettel, N. J.; Wiest, O. "Sterically Crowded Bicyclo[1.1.0]butanes Radical Cations." *J. Org. Chem.* **2003**, *68*, 4549-4552.  
IMPACT FACTOR : **4.721**
21. Saettel, N. J.; Wiest, O.; Singleton, D. A.; Meyer, M. P. "Isotope Effects and the Mechanism of an Electron-Transfer Catalyzed Diels-Alder Reaction." *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 11552-11559.  
IMPACT FACTOR : **12,113**
22. Saettel, N. J.; Wiest, O. "DFT Study of the [2 + 2] Cycloreversion of Uracil Dimer Anion Radical: Waters Matter." *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 2693-2694.  
IMPACT FACTOR : **12,113**
23. Saettel, N. J.; Wiest, O. "Ab Initio Studies of [1,5]-H Shifts: Pentadiene and Beyond." *J. Org. Chem.* **2000**, *65*, 2331-2336.  
IMPACT FACTOR : **4.721**

#### Revue et Chapitres d'ouvrage

24. Saettel, N. J.; Oxgaard, J.; Wiest, O. "Pericyclic Reactions of Radical Cations." *Eur. J. Org. Chem.* **2001**, *8*, 1429-1439.  
IMPACT FACTOR : **3.065**
25. Wiest, O.; Oxgaard, J.; Saettel, N. J. "Structure and Reactivity of Hydrocarbon Radical Cations" In *Advances in Physical Organic Chemistry, Vol 38*, **2003**; 87-109.  
IMPACT FACTOR : **2.167**

#### COMMUNICATIONS DANS DES CONFÉRENCES INTERNATIONALES OU NATIONALES

##### Communications orales

- Saettel, N. "Chimiothèques, criblage et criblage virtuel" Journées Scientifiques Médicales, Institut Curie, Février **2012**.
- Saettel, N. J.; Wiest, O.; Sax, M.; Burkhard, K. "DNA Photolyase: Mechanism and Mimics." *VII<sup>th</sup> International Workshop - Radiation Damage to DNA*, Orléans, France, September **2001**.
- Saettel, N. J.; Wiest, O.; Sax, M.; Burkhard, K. "DNA Photolyase: Mechanism and Mimics." *222<sup>nd</sup> National Meeting of the American Chemical Society*, Chicago, IL, August **2001**, ORGN-586.
- Saettel, N. J.; Wiest, O.; Singleton, D. A.; Meyer, M. P. "Computational and Experimental Isotope Effects of an Electron Transfer Catalyzed Cycloaddition." *222<sup>nd</sup> National Meeting of the American Chemical Society*, Chicago, IL, August **2001**, ORGN-646.
- Saettel, N. J.; Wiest, O.; "[1,5]-Shift: Pentadiene and beyond." *219<sup>th</sup> National Meeting of the American Chemical Society*, San Francisco, CA, March **2000**, ORGN-500.

##### Posters

- Varin, T.; Saettel, N.; Villain, J.; Lesnard, A.; Dauphin, F.; Bureau, R.; Rault, S. "Clustering Studies on 5-HT<sub>4</sub> Ligands" *ChemAxon User Group Meeting*, Budapest, Hungary, 13-14 June **2007**.
- Saettel, N.; Lesnard, A.; Bureau, R.; Rault, S. "Analyse et Gestion de la Chimiothèque du CERMN basée sur des outils de Chemoinformatique" *3<sup>èmes</sup> Journées Scientifiques de la Chimiothèque Nationale*, 28 June **2006**.
- Saettel, N.; Teulade-Fichou, M.-P.; Lehn, J.-M. "Recherche de nouveaux principes actifs inhibiteur de la télomérase" *Journée rencontre boursiers ARC*, Paris, France, 14 October **2003**.
- Saettel, N.; Wiest, O. "Hydrogen Bonding and Solvation Effects on the Cycloreversion of Pyrimidine Dimers: a DFT Study." *Modelling Chemical Reactivity: from gas-phase to solution and enzymes (Satellite meeting of the XI<sup>th</sup> ICQC)*, Nancy, France, 16-18 July **2003**.
- Saettel, N.; Teulade-Fichou, M.-P.; Lehn, J.-M. "Modelling of Quadruplex DNA Intercalants." *Modelling Chemical Reactivity: from gas-phase to solution and enzymes (Satellite meeting of the XI<sup>th</sup> ICQC)*, Nancy, France, 16-18 July **2003**.
- Saettel, N. "La réparation anionique des dimères de pyrimidines; de l'intérêt des liaisons hydrogènes" *Réunion Intergroupe de Modélisation Moléculaire*, Paris, France, 14 November **2002**.
- Saettel, N. J.; Wiest, O.; Sax, M.; Burkhard, K. "DNA Photolyase: Mechanism and Mimics." *Gordon Research Conference on Free Radical Reactions*, Holderness School, Plymouth, NH, July **2001**.
- Saettel, N. J.; Wiest, O.; "Ab Initio Calculations of Strained Bicyclo[1.1.0]butane radical cations." *28<sup>th</sup> Reaction Mechanisms Conference*, Madison, WI, June **2000**.
- Wiest, O.; Saettel, N. J.; "Ab Initio Calculations of Strained Bicyclo[1.1.0]butane radical cations." *219<sup>th</sup> National Meeting of the American Chemical Society*, San Francisco, CA, March **2000**, ORGN-342.
- Oxgaard, J.; Saettel, N. J.; Wiest, O.; "A Theoretical Study of Highly Substituted Butadiene and Cyclobutane Radical Cations." *32<sup>nd</sup> Midwest Theoretical Chemistry Conference*, ND, IN, May **1999**.

11. Saettel, N. J.; Wiest, O.; "[1,5]-H Shifts: Pentadiene and Beyond." *32<sup>nd</sup> Midwest Theoretical Chemistry Conference*, Notre Dame, IN, May **1999**.