



PROPOSITION DE STAGE

Titre : Développement d'une technique de scoring dans un contexte de docking inverse.

Cadre du stage :

Greenpharma S.A.S.
3 allée du Titane
45100 Orléans

Notre société est spécialisée dans la valorisation des produits naturels. Greenpharma travaille pour l'industrie pharmaceutique, cosmétique et nutraceutique. Nous fournissons à nos clients des produits et des services de R&D. Nous les accompagnons dans la recherche de nouveaux principes actifs grâce à nos chimiothèques de produits naturels ou de nos extraithèques de plantes. Nos services vont de la phytochimie, la chimie médicinale et la modélisation moléculaire afin de trouver des activités biologiques intéressantes. Nous disposons d'une base de données interne rassemblant des informations sur des molécules, des organismes qui les synthétisent, des utilisations traditionnelles des plantes et des activités biologiques. Pour valoriser ces connaissances, nous avons développé des outils de prédiction des activités biologiques eg Selnergy à partir de la structure des molécules, en utilisant en particulier le docking inverse.

Objectif :

Nous voulons améliorer le pouvoir prédictif de Selnergy, un outil interne de docking inverse. Jusqu'à présent une supervision humaine est nécessaire. Le but est de réduire l'intervention humaine en développant des outils de scoring basés sur les informations structurales eg protéines avec ligands co-cristallisés,... Actuellement nous disposons d'une base de données de 10.000 structures 3D.

Les tâches à réaliser seront :

- recenser les bases de données publiques pouvant servir au projet ;
- programmer l'outil de scoring et l'interfacer à un logiciel comme Knime ;
- explorer d'autres méthodes pour renforcer des prédictions de Selnergy eg « ligand-based »...

Compétence :

Bonne connaissance des approches « protein-based » eg criblage virtuel.

Les données seront en anglais : une maîtrise de l'anglais scientifique sera un plus.

La connaissance d'outils de pipelining ou de langages de programmation sera également appréciée (shell, perl, python,...)

Rémunération et durée du stage :

436,05 Euros/mois pour 35h/semaine pendant 6 mois

Encadrement :

La personne travaillera avec le responsable chemoinformatique.

Personne à contacter :

M. Quoc Tuan DO

quoctuan.do@greenpharma.com