

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2012 – 2013
A envoyer à Mme Pr Camproux :
anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr
colette.geneix@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:

Technologie Servier - Département modélisation bioinformatique

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

Adresse précise du Laboratoire : 25/27 rue Eugene Vignat BP11749
45007 ORLEANS Cedex 01

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Philippe Vayer
E-mail : philippe.vayer@fr.netgrs.com

Nom du Responsable du stage : Alban Arrault

Numéro de Téléphone 0 238 238 275
Numéro de Télécopie 0 238 238 177
E-mail : alban.arrault@fr.netgrs.com

Titre du stage :

Application de la chemoinformatique l'exploitation des voies métaboliques

Description du sujet (quelques lignes):

Un des processus de développement d'un médicament consiste à identifier ses métabolites. Il peut alors être difficile d'établir le graphe reliant le médicament et chacun de ses métabolites, qui peuvent d'une part être nombreux et d'autre part dériver les uns des autres. Le profil métabolique du médicament ne pourra alors être interprété qu'à l'issue d'un long travail de représentation graphique.

Le stage consiste à réaliser une standardisation (automatisation) de ce processus complexe. La première partie de ce travail consistera à identifier les parties structurales non communes entre le médicament et chacun de ses métabolites. En parallèle, une base de réactions métaboliques de type I (uniquement les réactions n'impliquant pas de conjugaison) sera constituée en s'appuyant sur des données de la littérature. La seconde partie du stage comprendra l'identification de chaque couple médicament-métabolite, si la partie non commune peut être expliquée par une des réactions de la base de réactions. Tout ceci devra permettre de déterminer le graphe caractéristique du métabolisme d'un produit.

Le/la candidat(e) devra posséder une réelle aptitude à travailler en équipe à l'interface chimie/biochimie-informatique. Un profil chemoinformatique avec de solides connaissances en programmation java est souhaité.