

EMPLOIS PROPOSES AU RECRUTEMENT
ATTACHES TEMPORAIRE D'ENSEIGNEMENT ET DE RECHERCHE
ANNEE 2021/2022

Institution / Composante / Laboratoire : **Université Paris-Saclay / UFR de Pharmacie / BioCIS**

Section CNU : **86**

Quotité de recrutement : **Temps complet**

Date de prise de fonction : **01/09/2021**

Profil du poste : Conception *in silico* de molécules thérapeutiques

Enseignement

L'ATER sera amené.e à encadrer les travaux pratiques (TP) de modélisation moléculaire, principalement en 3^e année de pharmacie (premier semestre) mais aussi en L3 interface Biologie-Chimie (second semestre). Ces TP sont effectués sur des stations de travail sous Linux et comprennent des analyses structurales de complexes protéine-ligand, des calculs de docking moléculaire, et des criblages virtuels *ligand-based* et *structure-based*.

Recherche

L'ATER rejoindra le groupe de modélisation moléculaire dirigé par Tâp Ha-Duong et rattaché à l'équipe FLUOPEPIT du laboratoire BioCIS – UMR 8076. Les travaux de recherche consisteront à étudier et caractériser par des simulations de dynamique moléculaire le passage de membranes lipidiques par des peptides d'intérêt thérapeutiques. Il s'agira plus particulièrement de mettre en œuvre des techniques avancées d'échantillonnage pour estimer l'énergie libre de passage des barrières membranaires de différents peptides en fonction de leur composition en acides aminés, de leur structure, et de leur flexibilité.

Publications récentes du groupe de modélisation moléculaire

- [1] Molza AE, Gao P, Jakpou J, Nicolas J, Tsapis N, Ha-Duong T, Simulations of the Upper Critical Solution Temperature Behavior of Poly(ornithine-co-citrulline)s Using MARTINI-Based Coarse-Grained Force Fields. *J. Chem. Theory Comput.* **2021**, 10.1021/acs.jctc.1c00140
- [2] Laxio-Arenas J, Xu Y, Milcent M, van Heijenoort C, Giraud F, Ha-Duong T, Crousse B, Ongeri S, Fluorinated Triazole Foldamers: Folded or Extended Conformational Preferences, *ChemPlusChem* **2021**, 10.1002/cplu.202000791
- [3] Chan-Yao-Ching M, Marsin S, Quevillon-Cheruel S, Durand D, Ha-Duong T, Structural ensemble and biological activity of DciA intrinsically disordered region, *J. Struct Biol.* **2020**, 212: 107573
- [4] Chan-Yao-Ching M, Déville C, Pinet L, van Heijenoort C, Durand D, Ha-Duong T, Structural Characterization of N-WASP Domain V Using MD Simulations with NMR and SAXS Data, *Biophys. J.* **2019**, 116: 1216-1227
- [5] Tran L, Kaffy J, Ongeri S, Ha-Duong T, Binding Modes of a Glycopeptidomimetic Molecule on A β Protofibrils: Implication for Its Inhibition Mechanism, *ACS Chem. Neurosci.* **2018**, 9: 2859

Compétence requises

Avoir effectué une thèse de doctorat avec une forte composante de modélisation moléculaire dans l'un des domaines suivants : *in silico* drug design, biophysique moléculaire, biologie structurale, chimie computationnelle.

Personnes à contacter dès que possible en envoyant un CV (Attention : candidature à effectuer sur le portail GALAXY avant le 15 juillet)

Pr Tâp HA-DUONG : tap.ha-duong@universite-paris-saclay.fr / 01 46 83 57 38.

Pr Sandrine ONGERI : sandrine.ongeri@universite-paris-saclay.fr / 01 46 83 57 37.