

CONTRAT

Type de contrat :	Stage – 4 à 6 mois en 2023
Localisation :	Poste basé à Vandœuvre-lès-Nancy – Faculté des Sciences et Technologies
Statut :	Stage
Salaire :	Montant minimum de la gratification

POSTE ET MISSIONS

SAYENS, Société d'accélération du transfert de Technologies Grand Est a pour mission d'accélérer le transfert des résultats de la recherche académique vers le monde socio-économique.

Dans le cadre d'un partenariat avec le laboratoire CRM2 de Vandœuvre-lès-Nancy, SAYENS recrute un stagiaire, pour un stage de 4-6 mois.

Le laboratoire CRM2 développe des descripteurs, dérivés de la densité électronique, pour évaluer la qualité de la complémentarité électrostatique d'un ancrage moléculaire dans les complexes protéine/ligand. En effet, un logiciel de docking produit typiquement pour un ligand donné plusieurs « poses » possibles dans le site de la protéine hôte. Le positionnement correct du ligand reste cependant incertain. Ce descripteur innovant, pour lequel un brevet a été déposé en collaboration avec la SATT Sayens, permet d'éliminer certaines des positions déterminées (faux positifs). Le descripteur peut jouer le rôle de filtre dans le cadre d'un criblage virtuel sur une bibliothèque de composés chimiques et peut être combiné avec le score fourni par le logiciel de docking. La version actuelle du descripteur de notation est implémentée dans un code C++ dédié développé dans le laboratoire CRM2. Les résultats des descripteurs de notation peuvent être visualisés dans le logiciel développé au laboratoire MoProViewer de visualisation des molécules, également développé en C++ (utilisant le framework Qt et les bibliothèques OpenGL/OpenMesh).

Vous serez plus précisément en charge des missions suivantes :

L'étudiant sera impliqué dans des développements méthodologiques complémentaires de ce descripteur. Il sera chargé de mener une étude de benchmark en appliquant la méthodologie sur une banque de complexes protéine/ligand dont les structures expérimentales sont connues. La bibliothèque contiendra les poses natives ainsi que celles générées par plusieurs logiciels d'amarrage (GOLD, GLIDE, AutoDock_Vina) afin de quantifier l'amélioration de la prédiction des poses correctes. Ces travaux seront menés dans le cadre de collaborations avec des laboratoires spécialisés dans les fonctions d'amarrage moléculaire et de scoring.

Au cours du stage, l'étudiant pourra être ponctuellement impliqué dans des développements MoProViewer liés à la fonction de scoring étudiée.

PROFIL

Formation : Ecole d'ingénieur ou cursus universitaire M2 en bio-informatique, chimio-informatique, physique ou biologie structurale.

Compétences demandées :

- Compétences en programmation en C++ et/ou Python

Qualités personnelles :

Doté(e) d'une réelle aisance relationnelle pour travailler en équipe et échanger avec des interlocuteurs de profils variés, vous êtes dynamique, rigoureux, organisé et faites preuve d'autonomie.

CONTACT

Le poste est à pourvoir rapidement à Vandœuvre-lès-Nancy, en stage pour une durée de 4-6 mois. Merci d'envoyer CV et lettre de motivation à l'adresse suivante : inga.girardin@sayens.fr