

N° emploi : 86MCF718

**Modélisation biomoléculaire et chimie thérapeutique**  
**Biomolecular modeling and medicinal chemistry**

**ARGUMENTAIRES**

**Enseignement**

**Filières de formation concernées :**

3<sup>e</sup>, 4<sup>e</sup>, et 5<sup>e</sup> année de Pharmacie (DFGSP3, DFASP1, DFASP2) ; Licence L3 interface Biologie-Chimie (UFR Sciences), M1 et M2 « Sciences du médicament et autres produits de santé », M2 international « *Development of Drugs and Health Products* » (D2HP)

**Objectifs pédagogiques et besoin d'encadrement :**

Dans le cadre de la stratégie nationale dite « Santé Numérique » visant à l'introduction du numérique dans les études de santé, l'objectif du recrutement est d'apporter aux étudiants en sciences pharmaceutiques des formations sur les méthodes de biophysique computationnelle (*docking*, dynamique moléculaire) et techniques d'intelligence artificielle (*machine learning*, AlphaFold) utilisées dans les recherches académiques et industrielles en *drug discovery* et *drug development*.

**Méthodes pédagogiques innovantes :**

Travaux pratiques de modélisation moléculaire et de conception de principes actifs *in silico* ; Projets de recherche et mises en situation.

**Animation des équipes et participation à la vie de l'établissement :**

Le ou la MCF sera rattaché.e à la discipline « Chimie Thérapeutique » de la faculté de pharmacie. Il ou elle contribuera à intégrer les enseignements de modélisation moléculaire et de *machine learning* à ceux de chimie thérapeutique. Il ou elle sera également amené.e à proposer de nouveaux enseignements autour de l'intelligence artificielle et les sciences du médicaments dans les formations de la *Graduate school Health and Drug Sciences* (HEADS).

**Recherche**

Projet de recherche dans le(s) laboratoire(s) d'accueil : Le ou la MCF viendra renforcer le groupe de modélisation moléculaire dirigé par le Professeur Tâp Ha-Duong et rattaché à l'équipe FLUOPEPIT (dirigée par le Professeur Sandrine Onger et le Docteur Benoit Crousse) de l'UMR BioCIS (dirigé par le Docteur Mouad Alami). Il ou elle aura pour mission d'intégrer les concepts de l'apprentissage automatique aux techniques de simulation moléculaire pour la conception *in silico* de nouvelles molécules d'intérêt thérapeutique. Notamment, il ou elle devra développer et mettre en œuvre des outils computationnels pour concevoir des molécules peptidiques ciblant les interactions protéine-protéine tout en présentant des propriétés pharmacocinétiques optimales.

Objectifs de recherche en relation avec la stratégie de l'université : L'utilisation de l'intelligence artificielle, et plus généralement des outils numériques, est devenue incontournable dans les activités de recherche et d'innovation. Dans le domaine pharmaceutique, en particulier, ces approches computationnelles permettent de réduire le temps entre la découverte d'un nouveau médicament et sa mise sur le marché. Le ou la MCF aura pour mission de développer ces méthodes numériques au bénéfice des projets de recherche et d'innovation de la faculté de pharmacie de l'université Paris-Saclay.

Responsabilité en animation de la recherche : Le ou la MCF aura la charge de rédiger des projets de recherche et de l'encadrement de stages et travaux de thèses en sciences pharmaceutiques qui développeront ou utiliseront des techniques de biophysique computationnelle et d'intelligence artificielle.

## JOB DESCRIPTION

### Teaching

Training courses concerned: 3rd, 4th, and 5th year of Pharmacy; L3 Biology-Chemistry interface, M1 and M2 Pharmaceutical Sciences; M2 Development of Drugs and Health Products (D2HP), Graduate school Health and Drug Sciences (HEADS).

Pedagogical objectives and supervisory requirements: As part of the national "Digital Health" strategy aimed at introducing digital technology into health studies, the aim of the recruitment is to provide students in pharmaceutical sciences with training in computational biophysics methods (docking, molecular dynamics) and artificial intelligence techniques (machine learning, AlphaFold) used in academic or industrial drug discovery and drug development projects.

Innovative teaching methods: Practical work on molecular modeling and *in silico* design of active compounds; Research projects and case studies.

Team leadership and participation in institutional life: The MCF will be attached to the "Medicinal Chemistry" discipline in the Faculty of Pharmacy. He or she will participate in integrating the teaching of molecular modeling and machine learning with that of medicinal chemistry. He/she will also propose new courses in artificial intelligence and drug sciences for the Graduate School Health and Drug Sciences (HEADS).

### Research activities

Research project in host laboratory: The MCF will strengthen the molecular modeling group headed by Prof. Tâp Ha-Duong and attached to the FLUOPEPIT team (headed by Prof. Sandrine Onger and Dr. Benoit Crousse) at the UMR BioCIS (headed by Dr. Mouad Alami). His or her mission will be to combine machine learning concepts and molecular simulation techniques for the *in silico* design of new molecules of therapeutic interest. In particular, he or she will develop and implement computational tools to design peptide molecules targeting protein-protein interactions with optimal pharmacokinetic properties.

Research objectives in line with the university's strategy: The use of artificial intelligence, and more generally of digital tools, has become essential in research and innovation activities. Particularly, in the pharmaceutical field, these computational approaches are helping to shorten the time between the discovery of a new drug and its launch on the market. The MCF will have the task of developing these numerical methods for the benefit of the research and innovation projects of the Faculty of Pharmacy at the University of Paris-Saclay.

Responsibility for coordinating research: The MCF will be responsible for writing research proposals and supervising internships and thesis works in pharmaceutical sciences developing or using computational biophysics and artificial intelligence techniques.

Laboratoire(s) d'accueil : (sigle et intitulé détaillé ) **Biomolécules: Conception, Isolement et Synthèse (BIOCIS CNRS UMR 8076)**

Label (UMR, EA, ...)	N°	Nbre de chercheurs	Nbre d'enseignants-chercheurs
UMR CNRS	8076	7	41

### CONTACTS

**Enseignement** : Pr Sandrine Onger ([sandrine.onger@universite-paris-saclay.fr](mailto:sandrine.onger@universite-paris-saclay.fr))

**Recherche** : Pr Tâp Ha-Duong ([tap.ha-duong@universite-paris-saclay.fr](mailto:tap.ha-duong@universite-paris-saclay.fr))

*Née fin 2019 de la volonté conjugée d'universités et de grandes écoles, l'Université Paris-Saclay compte parmi les grandes universités européennes et mondiales.*

*Avec 16 500 personnels académiques, techniques et administratifs et 48 000 étudiants, elle constitue un pôle dense, actif, couvrant les secteurs des Sciences et Ingénierie, des Sciences de la vie et Santé et des Sciences Humaines et Sociales.*

*Sa politique scientifique associe étroitement recherche et innovation et s'exprime à la fois en sciences fondamentales et en sciences appliquées pour répondre aux grands enjeux sociétaux.*

*Du premier cycle au doctorat, en passant par des licences, des B.U.T., des masters et des programmes de grandes écoles, l'Université Paris-Saclay déploie une offre de formation sur un large spectre de disciplines, au service de la réussite et de l'insertion professionnelle. Au-delà, elle prépare les étudiants à une société en pleine mutation, où l'esprit critique, l'agilité et la capacité à renouveler ses compétences sont clés. L'Université Paris-Saclay propose également un riche programme de formations tout au long de la vie.*

*Située au sud de Paris, sur un vaste territoire regroupant une vingtaine de campus répartis sur 15 communes franciliennes, l'Université Paris-Saclay bénéficie d'une position géographique et socio-économique favorisant à la fois sa visibilité internationale et des liens étroits avec ses partenaires - grands groupes industriels, PME, start-up, collectivités territoriales -.*

Site web : [www.universite-paris-saclay.fr/fr](http://www.universite-paris-saclay.fr/fr)

*Établissement handi-accueillant et attaché à la mixité et à la diversité*

### **Welcome Research Package**

Dans le cadre de sa politique d'attractivité, l'Université Paris-Saclay accueille les nouveaux recrutés juniors, maîtres et maîtresses de conférences, chargés et chargées de recherche et ingénieurs-chercheurs junior, dans l'ensemble de ses établissements, en leur offrant un lot de bienvenue, dénommé « *Welcome Research Package* » (WRP).

Ce lot, d'un montant de 5000 €, leur prodigue un premier environnement financier destiné à faciliter le lancement de leur programme de recherche : dépenses liées à leur projet, missions et participation à des colloques, gratifications de stage, acquisition de petits équipements. Le lot est attribué l'année civile suivant le recrutement, il est notifié au laboratoire d'accueil et les dépenses peuvent être réalisées sur deux ans.

Ce lot commun pour les recrutés maîtres et maîtresses de conférences est complété par un lot de bienvenue de 5000€ au périmètre employeur, au titre du budget de recherche de l'établissement. Ce second lot est également notifié au laboratoire mais il est à dépenser dans l'année

**Candidature via l'application GALAXIE :**

<https://galaxie.enseignementsup-recherche.gouv.fr/antares/can/astree/index.jsp>