



Proposition de sujet Master 2 ou de fin d'Etude Ingénieur

Type de contrat : Convention et gratification statutaire

Entreprises : GREMI Université d'Orléans et CNRS, 14 rue d'Issoudun, 45067 Orléans cedex 2
MS4ALL, Lab'O, 1 avenue du champ de Mars, 45100 ORLEANS

Titre du stage : Simulations moléculaires de la biodégradabilité de polymères

Description du projet : Ce stage sera consacré à l'étude de la biodégradabilité de polymères modèles (PEG, PET, PS, etc.) par des enzymes. La simulation moléculaire privilégiée est la dynamique moléculaire réactive classique. Le premier objectif est de déterminer les taux de dégradation en fonction des enzymes choisies, et également les produits de dégradation. La méthodologie est en place et sera adaptée pour le sujet. Elle utilise des potentiels d'interaction de type reaxFF et les calculs seront menés avec le logiciel LAMMPS. Dans un second temps, il s'agira avec les données obtenues de construire un modèle d'apprentissage pour prédire la biodégradabilité d'autres polymères avec d'autres enzymes. Une part de ce travail nécessitera d'établir les descripteurs appropriés, de définir la base d'apprentissage à partir des résultats obtenus mais aussi des résultats de la littérature. Une comparaison avec les modèles QSAR pourra être envisagée.

Descriptif du poste :

Le/la Candidat.e aura la charge de la mise en place des codes de simulations de la biodégradation des molécules et le post-traitement associé. Il/Elle utilisera la méthodologie de simulations à haut-débit en place au GREMI et à MS4ALL, permettant de traiter simultanément de nombreuses molécules polluantes.

Il/elle aura une formation M2 ou école d'ingénieur Physico-chimiste avec de fortes compétences en chimie théorique et un goût prononcé pour les simulations numériques. Des connaissances en Python sont nécessaires ou à acquérir très vite, pour les workflows et le post-traitement. Les données obtenues seront rassemblées dans une base de données interopérable et utilisable pour des méthodes d'apprentissage destinées à des prédictions ultérieures du comportement de nouveaux composés.

Le/la candidate aura un goût prononcé pour la programmation.

Le/la candidat.e devra être organisé.e, autonome, rigoureux.se.

Il/elle parle et lit l'anglais scientifique.

Le/la candidat.e sera hébergé.e par la startup DeepTech MS4ALL (Orléans, 7 personnes, <https://www.ms4all.eu>), et sera amené.e à effectuer des visites au laboratoire GREMI (Orléans, 70 personnes, <https://www.univ-orleans.fr/gremi>). Le candidat aura accès aux moyens de calculs adaptés au projet (stations multicoeurs, calculateurs HPC LETO de la fédération CaSciModOT).

Responsables de stage : Pascal Brault, GREMI Université d'Orléans, pascal.brault@univ-orleans.fr
Nicolas Froloff nicolas.froloff@ms4all.eu

Date du début su stage : à partir du 3 mars 2025 jusqu'au 31 juillet 2025. Adaptable selon la formation.

Modalité de candidature : CV et lettre de motivation à envoyer à pascal.brault@univ-orleans.fr