

Valbonne, le 07 Octobre 2022

Bruno Antonny,
Directeur de recherche et chef d'équipe
antonny@ipmc.cnrs.fr
04 93 95 77 75

Objet : Lettre de soutien à Mario Moser pour le laboratoire ChemoSim Lab de l'ICN

Mario Moser a fait son stage de Master dans notre équipe pendant 6 mois en 2021 sous la direction de Romain Gautier, maître de conférence, HDR et spécialiste de simulations de dynamique moléculaire.

Notre objectif était de mieux comprendre la dynamique structurale de la protéine SBSN. Cette protéine de la peau, très peu étudiée mais surexprimée dans certains cancers, a une séquence singulière formée de répétition de 18 acides aminés. Expérimentalement, nous avons montré que la protéine est intrinsèquement non structurée en solution mais peut acquérir une conformation en hélice alpha face à une membrane ou en présence du solvant TFE (trifluoro-éthanol). Pour analyser cette transition random-coil $\leftrightarrow$ hélice, Mario Moser a réalisé des simulations tout atome de séquences de 36 à 54 acides aminés, c'est-à-dire de deux ou trois répétitions du motif. En solution, les simulations de M Moser montrent clairement que ces séquences ne sont pas stables en hélice alpha et se déstructurent facilement. Par contre, en présence de TFE, les structures en hélices restent stables. C'est un très beau résultat qui conforte nos connaissances sur cette protéine.

La grande difficulté de cette étude fut de créer un système eau/TFE en tout atome qui respecte les données expérimentales et notamment la parfaite miscibilité des deux solvants mais pour lequel peu de simulations de référence existaient. Il a fallu, pour cela, tester différentes topologies et sélectionner celle qui reproduisait les résultats les plus proches de l'observation.

Le travail de Mario Moser fut considérable et soigné. L'étudiant était très impliqué dans son travail et face aux difficultés savait rechercher par lui-même les solutions aux problèmes rencontrés. Il a montré une grande capacité de concentration et de persistance. Il a plusieurs fois présenté ses résultats en réunion de laboratoire et savait bien s'exprimer en anglais. Chimiste au sein d'un laboratoire de biologie, la tâche n'était pas facile ce qui fait que ses présentations étaient parfois trop détachées des résultats expérimentaux obtenus par d'autres alors qu'elles étaient au contraire très pertinentes. Après son stage, Mario Moser a continué à s'intéresser au sujet de la SBSN en conduisant des simulations pour rendre compte d'une autre propriété de la SBSN, à savoir se lier aux métaux de transition.

En conclusion Mario Moser est un étudiant très sérieux et compétent dans son domaine. Son expertise sera plus adaptée à un laboratoire où simulations et chimie sont au cœur du projet d'une équipe de recherche.

