

PROPOSITION DE STAGE
Année Universitaire 2016/2017

A envoyer à Mr Pr Taboureau
olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr

Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise : Nicolas Leulliot

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité : Laboratoire de Cristallographie et RMN Biologiques, UMR 8015 - CNRS

Adresse précise du Laboratoire : **Université Paris Descartes, Faculté des sciences pharmaceutiques et biologiques**, 4 Avenue de l'Observatoire, 75006 Paris

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : **Nicolas Leulliot**

E-mail : nicolas.leulliot@parisdescartes.fr

Nom du Responsable du stage : Samuela Pasquali

Numéro de Téléphone : +33 1 53 73 98 36

Numéro de Télécopie : -

E-mail : [samuela.pasquali@ibpc.fr](mailto:samuella.pasquali@ibpc.fr)

Titre du stage : Intégration de données SAXS dans un outil de simulation interactive.

Description du sujet (quelques lignes):

-
- Prise en main du code pour le calcul d'un spectre SAXS à partir d'une structure et extension aux modèles gros-grains OPEP et Martini.
 - Implémentation de l'utilisation d'une enveloppe SAXS pour arriver rapidement et interactivement à un premier modèle compatible avec des données SAXS.
 - Tests avec des jeux de données réels.
-

Retour par e-mail : olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr