

**PROPOSITION DE STAGE**  
**Année Universitaire 2012 – 2013**  
A envoyer à Mme Pr Camproux :  
[anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr](mailto:anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr)

**Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:**

Affiliation administrative (CNRS, INSERM,...) et Numéro d'affiliation de l'unité : Université de Namur (Belgique)

Adresse précise du Laboratoire : Laboratoire de Physico-Chimie Informatique  
Rue de Bruxelles 61, B -5000 Namur, Belgique

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Professeur Daniel P. Vercauteren  
E-mail : [daniel.vercauteren@fundp.ac.be](mailto:daniel.vercauteren@fundp.ac.be)

**Nom du Responsable du stage : Professeur Daniel P. Vercauteren et Dr. Laurence Leherte**

Téléphone : +32 (0) 81 72 45 34 Fax : +32 (0) 81 72 54 66

E-mail : [daniel.vercauteren@fundp.ac.be](mailto:daniel.vercauteren@fundp.ac.be)

HDR : oui ou non (non requis en Belgique. Les responsables du stage ont déjà encadrés 14 thèses de doctorat et 31 mémoires de 2<sup>ème</sup> cycle en chimie)

Ecole doctorale de rattachement :

Spécialité du stage : Physico-Chimie Informatique Recherche  Professionnel

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : dynamique moléculaire, interactions supramoléculaires, protéine membranaire

**Titre du stage :**

Simulation par DM, tout-atome ou gros-grains, de biomolécules en milieu membranaire

Ce sujet constitue-t-il un premier pas vers un travail de thèse : Oui - Non

**Description du sujet (quelques lignes):**

Le sujet du stage consisterait à simuler, par dynamique moléculaire, tout-atome et/ou gros-grains, les propriétés énergétiques, structurales et dynamiques, d'une (de) protéine(s) en interaction avec un milieu lipidique (soit à considérer la triade protéine/lipide/solvant). Les programmes disponibles pour réaliser ces travaux sont, notamment, Gromacs, NAMD et d'autres codes développés en interne. Ces programmes sont déjà opérationnels sur le centre de calcul (iSCF) de l'Université de Namur. La(les) protéine(s) d'intérêt sera(ront) choisie(s) en accord avec le stagiaire.