

**PROPOSITION DE STAGE**  
**Année Universitaire 2018/2019**

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 :

Adresse précise du Laboratoire : University of New England College of Pharmacy  
716 Stevens Ave Portland, ME 04103, USA

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Olgun Guvench, M.D., Ph.D. Associate Professor  
and Chair Department of Pharmaceutical Sciences

E-mail : [oguvench@une.edu](mailto:oguvench@une.edu)

---

**Nom du Responsable du stage : Olgun Guvench**

Téléphone : 207-221-4171

E-mail : [oguvench@une.edu](mailto:oguvench@une.edu)

HDR : oui ou non

Ecole doctorale de rattachement :

Spécialité du stage : Recherche ☒ Professionnel ☐

Indiquez par quelques mots clés, l'orientation scientifique du sujet : proteoglycan; atomic-resolution structure; conformational thermodynamics; all-atom explicit-solvent molecular dynamics

---

**Titre du stage : Molecular modeling and molecular dynamics simulations of proteoglycans.**

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

---

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

Molecular modeling and molecular dynamics simulations will be used to develop atomic-resolution structural models of proteoglycans.

All-atom explicit-solvent molecular dynamics simulations on proteoglycans.

CHARMM and NAMD programs to build proteoglycan systems, solvate them, and run molecular dynamics simulations using GPU-accelerated high-performance computing. Analysis will be done using CHARMM, VMD, and Python.

---

Retour par e-mail : [anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr](mailto:anne-claude.camproux@univ-paris-diderot.fr)