

Simulation moléculaire et diffusion de neutrons

Gerald R. Kneller

Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS
Rue Charles Sadron, 45071 Orléans Cedex 02
et

Laboratoire Léon Brillouin, CEA Saclay
91191 Gif-sur-Yvette

Email : kneller@cnrs-orleans.fr ; kneller@llb.saclay.cea.fr

Le cours explique les concepts de la simulation moléculaire et son utilisation pour l'interprétation des expériences de diffusion de neutrons sur des macromolécules biologiques. La complémentarité des deux techniques permet de comprendre des détails de la dynamique d'un système moléculaire complexe qui sont inaccessibles aux expériences seules. On peut ainsi mieux interpréter les données expérimentales et également développer des modèles physiques qui donnent une vue cohérente des observations. Ce dernier point est illustré par une étude du lysozyme en solution qui montre que la dynamique interne de cette protéine est bien décrite par le modèle de la dynamique brownienne fractionnaire. Ce modèle décrit des mouvements aléatoires sous l'influence d'une mémoire longue de la dynamique du système dans le passé. Ce comportement est caractéristique pour des systèmes dynamiques avec un spectre très large de temps de relaxation.