

SEMINAIRE

*IPBS , salle de conférence n° 1 , niveau 2
205 route de Narbonne TOULOUSE CEDEX 4*

Jeudi 8 novembre 2007 à 11 h.

Dr Xavier PERIOLE (Institute of Molecular Assemblies,
City University of New York ; Molecular Dynamics-Group, University
of Groningen)

***" Simulation de dynamique moléculaire à "Gros-
Grain" : Application aux protéines de membrane "***

Les simulations de dynamique moléculaire à "Gros-Grain" sont une alternative aux techniques de simulation classique. Elles doivent leur récent succès au fait qu'elles permettent de simuler des systèmes de taille bien plus importante et pour des durées bien plus longues que les simulations classique dite "tout atome". Dans cette technique, les atomes sont groupés par entité chimique pour former des sites d'interaction.

Après une introduction de la méthode dans le but de montrer l'efficacité et la qualité de la méthode, je présenterai son application au problème des interactions protéine/membrane. En particulier l'effet des propriétés de la membrane sur l'agrégation du GPCR rhodopsine sera présenté.

Contact : Laurence Salomé
