



« MODELISATION ET DYNAMIQUE MOLECULAIRE : QUEL IMPACT EN SCIENCES DE LA VIE? »

Conférence débat organisée par **Philippe SAUTET** et **Jean-Pierre SAUVAGE**, Membres de l'Académie des sciences

Mardi 27 mai 2014 de 14h30 à 17h30

Académie des sciences – Grande salle des séances
23 quai de Conti, Paris 6^e

La modélisation et la simulation à l'échelle moléculaire occupent une place de plus en plus importante à l'interface des Sciences de la Vie et de la Chimie et sont aujourd'hui un partenaire clef de l'expérimentation. Cela a été illustré par l'attribution du **prix Nobel 2013** à Martin Karplus, Michael Levitt et Arieh Warshel « *pour le développement de modèles multi-échelle pour les systèmes chimiques complexes* ». L'objectif de cette conférence débat est d'analyser l'impact de la simulation moléculaire en Sciences de la Vie, en particulier sur les questions reliées à la dynamique des molécules biologiques.

14h30 Introduction

Philippe SAUTET, *membre de l'Académie des sciences, directeur de recherche au CNRS, Université de Lyon, CNRS, Ecole Normale Supérieure de Lyon*

14h35 Le mouvement : la caractéristique de la vie. Des marsupiaux aux molécules

Motion: Hallmark of Life. From Marsupials to Molecules

Martin KARPLUS, *prix Nobel de chimie 2013, professeur à l'université de Harvard et directeur du Laboratoire de chimie biophysique, CNRS, université de Strasbourg*

15h30 Questions

15h40 La simulation des systèmes biologiques : au-delà de « l'expérimentalement visible »

Richard LAVERY, *directeur de recherche au CNRS, université Lyon 1*

16h05 Questions

16h10 Dynamique fonctionnelle multi-échelle du vivant

Jean-Louis MARTIN, *directeur de recherche à l'Inserm et professeur à l'Ecole Polytechnique, Laboratoire d'Optique et Biosciences (LOB), Palaiseau*

16h35 Questions

16h40 Discussion

17h00 Conclusion



Motion : Hallmark of Life. From Marsupials to Molecules

Le mouvement : la caractéristique de la vie. Des marsupiaux aux molécules

Martin KARPLUS, *professeur à l'université de Harvard et directeur du Laboratoire de chimie biophysique, CNRS, université de Strasbourg*

The lecture will present an intellectual path from the role of motion in animals to the molecules that make the motion possible. Motion is usually a way of distinguishing live animals from those that are not, but not always. Just as for the whole animal, motion is an essential part of the function of the cellular components. What about the molecules themselves? Does motion distinguish animate from inanimate molecules? For animals to move, they require energy, which is obtained primarily by using oxygen. So how are whales and dolphins able to use their muscles to dive to great depths, where oxygen is not available?

The immediate energy source for muscle function is the molecule ATP. Nature, by evolution, has developed a marvelous rotary nanomotor for the generation of this molecule. Experiments and simulations, particularly those with supercomputers, are now revealing the mechanism of this nanomotor and other cellular machines.

La simulation des systèmes biologiques : au-delà de « l'expérimentalement visible »

Richard LAVERY, *directeur de recherche au CNRS, université Lyon 1*

La dynamique moléculaire offre la possibilité de simuler numériquement le comportement des macromolécules biologiques dans leur environnement naturel. Malgré la taille de ces molécules, la faiblesse des interactions mises en jeu et l'importance de multiples échelles de temps, la simulation permet de construire un système moléculaire parfaitement défini, de contrôler des paramètres physico-chimiques, de moduler la nature des interactions prises en considération et, ainsi, de décortiquer tous les éléments responsables pour l'évolution du système.

Grâce à l'amélioration de la représentation des interactions moléculaires, au perfectionnement des algorithmes de simulation et à la puissance croissante des ordinateurs, il devient possible d'analyser des systèmes biologiques de plus en plus réalistes. La simulation devient ainsi un outil important pour interpréter des observations expérimentales et pour guider de futures expériences. Je donnerai des exemples impliquant des protéines, des acides nucléiques et leurs assemblages qui illustrent les possibilités croissantes de ce domaine.



Dynamique fonctionnelle multi-échelle du vivant

Jean-Louis MARTIN, *directeur de recherche à l'Inserm et professeur à l'École Polytechnique, Laboratoire d'Optique et Biosciences (LOB), Palaiseau*

En combinant des approches expérimentales fondées sur la technologie des lasers impulsionnels dans les temps ultra-courts et les simulations numériques, il est possible d'identifier et de visualiser la dynamique d'évènements moléculaires ou cellulaires essentiels à la vie. Les mouvements moléculaires et cellulaires sous-jacents s'expriment sur des échelles de temps s'étendant sur plus de 15 unités logarithmiques.

A titre d'exemple, seront présentés les évènements ultra-rapides intra-protéiques associés au transport et à l'utilisation de l'oxygène par l'organisme ainsi que l'identification et la visualisation *in situ* et *in vivo* des mouvements cellulaires lors des phases précoces de l'embryogénèse.