

SEMINAIRE ISMO

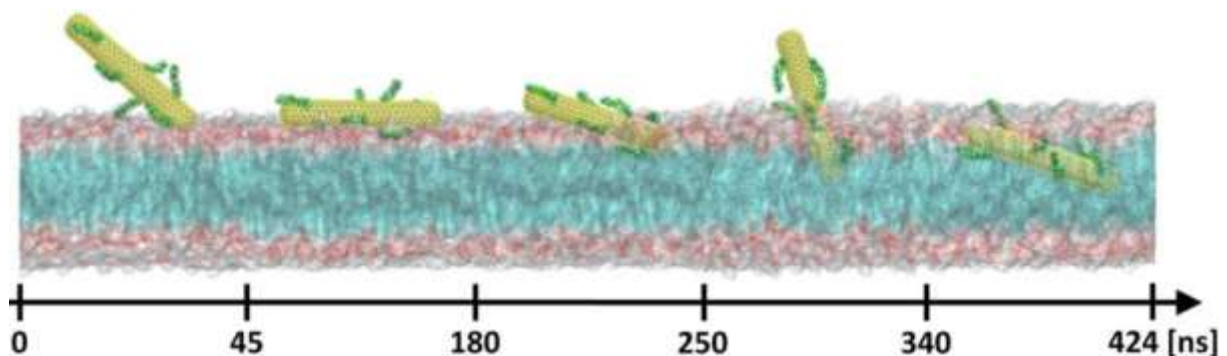
Christophe RAMSEYER

Laboratoire de Nanomédecine

Université de Franche-Comté & CHU Besançon - France

Calculs haute performance en dynamique moléculaire : De la compréhension des phénomènes biologiques à l'échelle moléculaire aux applications bio-inspirées

Depuis 5 ans, les centres de calcul et les codes de dynamique moléculaire ont fait des progrès notables. On peut maintenant envisager des systèmes de taille très importante évoluant sur des temps très longs. Peu à peu, le monde des simulations numériques se rapproche des expériences *in-vitro* et on parle volontiers maintenant d'expériences "*in silico*". Ce séminaire est dédié à une présentation de nos recherches sur la vectorisation de médicaments à l'aide de nanotubes de carbone ou encore de fullerènes fonctionnalisés. Je montrerai également comment l'analyse de systèmes biologiques à l'échelle moléculaire permet de réaliser divers systèmes bio-inspirés.



Insertion de nanotubes de carbone fonctionnalisés dans une membrane lipidique. Le mécanisme d'insertion peut être divisé en trois étapes: 1) adsorption et diffusion sur la membrane (jusqu'à 180 ns), 2) piqure de la membrane (jusqu'à 340 ns), et 3) absorption dans la membrane.

Mardi 4 juin 2013 à 11h
Bât 351 – 2^{ème} étage (Bibliothèque)
Université Paris-Sud, 91405 ORSAY Cedex