

Séminaire SOLEIL

Transition Paths in Protein Folding

Henri ORLAND

(Institut de Physique Théorique, CEA, IPhT CNRS, Gif-sur-Yvette, France)

Invité par J. DAILLANT

Lundi 10 juin à 14h00
Grand Amphi SOLEIL

Protein folding can be described in terms of Langevin dynamics. This dynamics can be represented by a path integral (analogous to a Feynmann path integral in quantum mechanics), which is a weighted sum over all paths joining the denatured state to the native state of the protein. We first show how one can compute the dominant paths (paths with largest weight) and how one can calculate dynamical quantities (such as rates or transition path times) from these paths. The method and its limitations are illustrated on some simple examples. We then show how the Langevin dynamics can be modified to obtain a stochastic equation which samples directly and efficiently the transition paths. This new method is illustrated on some simple examples.



Ce séminaire sera suivi d'une pause-café



Formalités d'entrée : accès libre dans l'amphi du Pavillon d'Accueil. Si la manifestation a lieu dans le Grand Amphi SOLEIL du Bâtiment Central, merci de vous munir d'une pièce d'identité (à échanger à l'accueil contre un badge d'accès).

SYNCHROTRON SOLEIL

Division Expériences - L'Orme des merisiers - Saint-Aubin - BP 48 - 91192 GIF SUR YVETTE Cedex

<http://www.synchrotron-soleil.fr/portal/page/portal/Soleil/ToutesActualites>

Secrétariat Division Expériences : sandrine.vasseur@synchrotron-soleil.fr