

Résumé

Titre Dynamique non-linéaire de la molécule d'ADN : modélisation de sa dénaturation

Auteur Pierre SACRÉ

Section Ingénieur civil électro-mécanicien (orientation aérospatiale)

Promoteur Professeur Gaëtan KERSCHEN

Année académique 2007–2008

L'ADN est une molécule fabuleuse et essentielle dont la structure et la fonction sont en étroite relation. Elle est un centre d'intérêt important à la fois pour les biologistes, les chimistes et les physiciens.

Ce travail s'intéresse à la dynamique non-linéaire de la molécule d'ADN et en particulier à l'étude de sa dénaturation. La modélisation a pour but de compléter les résultats expérimentaux pour mieux comprendre les mécanismes sous-jacents.

Après une revue des propriétés biologiques de la molécule et des différents modèles proposés dans la littérature scientifiques, nous présentons le modèle de Peyrard-Bishop-Dauxois qui s'intéresse à la dynamique d'étirement transversal des paires de bases. Ce modèle donne comme solutions des excitations non-linéaires localisées, breathers, qui décrivent les ouvertures fluctuantes observées pendant le processus de transcription mais aussi dans l'ADN au repos. Nous nous intéressons à leur propagation et aux mécanismes d'interactions avec des inhomogénéités dans la chaîne à la base de leur croissance. Nous analysons la dénaturation thermique en utilisant des outils de physique statistique standard et des simulations numériques de dynamique moléculaire.

Le modèle simple est cependant extrêmement riche du point de vue physique car il exhibe un comportement non-linéaire complexe. Il est également très pertinent pour décrire les mouvements de respiration interne de l'ADN et les mécanismes de leur formation et de leur croissance.

L'importance de l'ADN et de ses fonctions demande encore de nombreuses investigations. Les directions les plus prometteuses sont l'étude de modèles non-linéaires inhomogènes et des interactions entre l'ADN et son environnement dans le but de faire un pont entre la physique non-linéaire de l'ADN et la médecine.