ab initio (calcul) **:** calcul effectué à partir de données théoriques, sans modèles simplificateurs recalés sur l'expérience, et censé être totalement prédictif

acides aminés : molécules organiques de construction des **protéines** contenant un groupement amine (NH_2) et un groupement carboxylique (COOH)

acides nucléiques : l'acide désoxyribonucléique (ADN) et l'acide ribonucléique (ARN). L'**ADN** est le support moléculaire de l'information génétique (les **gènes**). L'**ARN** intervient dans la réplication de l'information de l'ADN. L'ARN messager, en particulier, spécifie la **séquence** d'**acides aminés** d'une **protéine**

actinides : radioéléments naturels ou artificiels de numéro atomique (nombre de **protons** du noyau) compris entre 89 (actinium) et 103 (lawrencium)

activation : processus par lequel un **nucléide** stable est transformé en nucléide **radioactif**

activation (d'un gène) **:** activation de l'**expression** de ce **gène**

activité : nombre de transitions nucléaires spontanées qui se produisent dans une quantité donnée de **radionucléides** pendant un intervalle de temps suffisamment petit, divisé par cet intervalle de temps. L'unité d'activité est le **becquerel** (Bq) qui correspond à une transition par seconde

algorithme : enchaînement des opérations logico-mathématiques nécessaires à l'accomplissement d'une tâche de calcul

amorce (d'un engin thermonucléaire) **:** charge nucléaire à **fission**, mise en conditions par un explosif chimique, destinée à fournir l'énergie nécessaire à la **fusion** des atomes (éléments légers) de l'étage thermonucléaire

amorphisation : perte totale de périodicité de la structure **cristalline** dans les trois dimensions. L'ordre à grande distance de l'empilement atomique est perdu

antibiotique : substance, habituellement produite par un micro-organisme ou une plante, toxique pour certains micro-organismes

assemblage (combustible) **:** ensemble formé d'éléments **combustibles** et chargé d'un seul tenant dans un réacteur nucléaire (constitué par exemple de 264 crayons combustibles dans le cas d'un **réacteur à eau sous pression**)

bandes d'énergie : plages d'énergie disponibles pour les électrons dans la matière

bases : en biologie moléculaire, terme utilisé pour désigner les **purines** (l'adénine et la guanine sont des exemples de bases puriques) et les **pyrimidines** (la thymine et la cytosine sont des bases pyrimidiques) dans l'**ADN** et l'**ARN**

biomimétique : qui reproduit des conceptions ou des procédés inspirés de la nature

biosphère : ensemble des écosystèmes de la planète, comprenant tous les êtres vivants et les milieux où ils vivent

CAO : conception assistée par ordinateur

capture (neutronique) **:** absorption d'un **neutron** libre (par un noyau) ne conduisant pas à une **fission**

catalyser : accélérer une réaction chimique sans que la substance accélératrice (**enzyme** en biologie) subisse elle-même de modification

combustible (nucléaire) **:** matière contenant des **nucléides** dont la consommation par **fission** dans un réacteur nucléaire permet d'y entretenir une réaction en chaîne

complexation : formation d'un édifice (ou **complexe**) neutre ou chargé, constitué par des ions et des molécules (organiques ou minérales), plus rarement des atomes, liés par covalence (liaison chimique produite par la mise en commun d'une ou de plusieurs paires d'électrons) à un ion métallique

convection : mouvement d'un fluide avec transport de chaleur, sous l'influence de différences de température

cristal : assemblage d'atomes, d'ions ou de molécules régulièrement répartis selon les trois directions de l'espace

cristallographie (aux rayons X) **:** méthode d'observation de la structure de la matière consistant à placer un échantillon, généralement un **cristal**, dans un faisceau de **rayons X** et à enregistrer un diagramme de diffraction sur un détecteur

déterministe (méthode numérique) **:** méthode dont le concept consiste à remplacer l'inconnue initiale par une inconnue approchée qui ne dépend que d'un nombre fini de paramètres

deutérium : isotope de l'hydrogène (masse atomique 2)

diagrammes de phases : déduits des lois générales de la thermodynamique, ils permettent de connaître la composition des différentes phases en présence dans un alliage donné, en fonction de la température et des concentrations en éléments constitutifs

dislocation (dans un solide) **:** défaut linéaire dont le déplacement propage le glissement d'une partie du solide par rapport à l'autre. Une ligne de dislocation peut se refermer sur elle-même en formant une *boucle*

électronvolt : unité d'énergie définie comme l'énergie acquise par un électron accéléré par une différence de potentiel de 1 volt (1 **eV** = $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ joule). Principaux multiples : le kiloélectronvolt (**keV**), le mégaélectronvolt (**MeV**) et le gigaélectronvolt (**GeV**)

électrostatique : basé sur des charges électriques en équilibre, ne se déplaçant pas (champ électrique invariant)

empirisme : méthode qui s'appuie sur la seule expérience

enrichissement : processus par lequel est accrue la teneur d'un élément chimique en un de ses **isotopes**. Ce processus conduit à la séparation du produit en deux parties dites respectivement enrichie et appauvrie en l'isotope recherché. Exemple : enrichissement de l'uranium en isotope 235

enzyme : protéine qui **catalyse** une réaction chimique spécifique

équation d'état : relation entre la pression, le volume et la température d'un corps

équation de Schrödinger : équation fondamentale de la **mécanique quantique** dont la résolution permet de déterminer l'énergie d'un système ainsi qu'une fonction, la fonction d'onde, à partir de laquelle toutes les propriétés de ce système peuvent être déduites. Elle a été proposée par Erwin Schrödinger en 1926

expression (du génome) **:** production par un **gène** d'un **phénotype** observable, habituellement par la synthèse d'une **protéine**

fatigue : déformation ou changement d'état subi par un matériau ou une pièce mécanique sous l'effet d'efforts excessifs

feuillet β : structure d'une molécule biologique formée par le repliement en accordéon d'une chaîne polypeptidique sur elle-même, la rigidité de la structure étant maintenue par des liaisons hydrogène avec les liaisons peptidiques de chaînes voisines

fission : scission d'un noyau lourd en deux morceaux, accompagnée d'émission de **neutrons**, de rayonnements et d'un important dégagement de chaleur

flops : abréviation de *FLoating-point OPeration per Second*, nombre d'opérations en virgule flottante par seconde ; unité de puissance de calcul d'un ordinateur dans le domaine scientifique. Sont plus utilisés les multiples : le **gigaflops** (1 Gflops = 1 milliard d'opérations par seconde) et le **téraflops** (1 Tflops = 1 000 milliards d'opérations par seconde)

fusion (thermonucléaire) **:** réaction entre deux noyaux légers aboutissant à la production d'un noyau plus lourd que l'un ou l'autre des noyaux initiaux, s'accompagnant généralement de l'émission de particules et dégageant une grande quantité d'énergie

gène : séquence d'**ADN** sur un chromosome constituant une unité d'information héréditaire qui permet la réalisation d'un caractère **phénotypique** *via* la production d'une (ou plusieurs) **protéine**. Il comprend la séquence codant pour cette protéine et des séquences qui en permettent et régulent l'**expression**

génome : ensemble des **gènes** d'un organisme

génomique (structurale) **:** science des **génomes** regroupant un ensemble d'analyses qui vont de la cartographie du génome à l'identification de nouveaux **gènes**, en passant par l'étude de leurs fonctions et le **séquençage** des molécules d'**ADN**

géosphère : partie de la Terre qui sert de support à l'ensemble des êtres vivants, comprenant la couche externe de la lithosphère, l'hydrosphère et l'atmosphère

gigaflops : voir **flops**

hélice α : structure d'une molécule biologique engendrée par la rotation régulière d'une chaîne polypeptidique sur elle-même pour former un cylindre dans lequel chaque liaison peptidique est reliée par liaison hydrogène à d'autres liaisons peptidiques

hydrodynamique : partie de la mécanique des fluides s'intéressant aux écoulements de fluides incompressibles ou peu compressibles, aux forces et aux pressions qui s'appliquent lors de ces écoulements ainsi qu'à la **turbulence**

implicite (méthode) **:** méthode de résolution numérique pour laquelle *l'ensemble des variables* du modèle sont supposées inconnues à l'instant *t*. Ce type de méthode nécessite des calculs plus complexes qu'une méthode **semi-implicite**, mais reste stable même pour des intervalles de temps importants

in silico ("dans le silicium") **:** définit des méthodes de recherche utilisant les ordinateurs comme outils expérimentaux, par analogie avec les méthodes *in vivo* ou *in vitro*

isotopes : formes d'un même élément dont les noyaux possèdent un nombre de **protons** identique et un nombre de **neutrons** différent. Par exemple, les isotopes 235 et 238 de l'uranium possèdent le même nombre de protons (92), mais 143 neutrons pour l'isotope 235 et 146 pour l'uranium 238

itération : en mathématiques, méthode de résolution d'une équation par approximations successives

joint de grains : surface d'accolement entre les **cristaux** élémentaires (grains) dont un matériau est formé

levure : champignon microscopique unicellulaire

ligand : molécule ou ion lié à l'atome central d'un **complexe**

logiciel de calcul : rassemblement dans un logiciel informatique, souvent appelé *code*, car sous forme d'expressions mathématiques codées, de la représentation simplifiée (*modélisation*) d'un système ou d'un processus afin de le simuler

lois ou **relations de fermeture :** dans un **logiciel de calcul**, modèles physiques élaborés à partir de l'analyse d'expériences qui expriment les différents transferts de masse, d'impulsion et d'énergie et qui constituent les termes sources des équations aux dérivées partielles résolues par le logiciel

macromolécule : molécule dont la masse dépasse les milliers de daltons (le dalton est approximativement égal à la masse d'un atome d'hydrogène, soit $1{,}66 \cdot 10^{-27}$ kg). C'est le cas des **protéines** et des **acides nucléiques**

mécanique de Newton : fondement de la mécanique classique, elle comporte trois lois : 1. aucun changement d'état de mouvement ne se produit sans l'intervention d'une *force* ; 2. la force s'exerçant sur un corps est égale à la *masse* du corps multipliée par son *accélération* ; 3. à toute *action* est associée une *réaction* égale et opposée

mécanique quantique : voir **quantique**

métabolisme : ensemble des processus chimiques qui se produisent dans les cellules vivantes

métabolites : substances organiques formées au cours des processus (synthèse ou dégradation) du **métabolisme** ou qui y participent

métabolomique : analyse comparative simultanée d'un grand nombre de **métabolites** cellulaires (petites molécules organiques) préalablement séparés

mutation : altération transmissible du message génétique par modification d'une **séquence** de **nucléotides** de l'**ADN**

nanométrique : dont les dimensions sont de l'ordre du **nanomètre** (10^{-9} m), comme certaines **nanostructures** (par exemple les **nanofils**)

neutron : particule fondamentale électriquement neutre, de masse $1{,}675 \cdot 10^{-27}$ kg. La nature de ce **nucléon** a été découverte en 1932 par le physicien britannique James Chadwick. Les neutrons entrent, avec les **protons**, dans la composition des noyaux des atomes

neutronique : étude du cheminement des **neutrons** dans les milieux **fissiles** et non fissiles et des réactions qu'ils induisent dans la matière, en particulier dans les réacteurs nucléaires

noyau ou **matière fissile :** noyau (ou matière) pouvant subir la **fission** par absorption de **neutrons**. En toute rigueur, ce n'est pas le noyau appelé fissile qui subit la fission mais le *noyau composé* formé suite à la **capture** d'un neutron

nucléide : espèce nucléaire caractérisée par son nombre de **protons** Z, son nombre de **neutrons** N et par son nombre de masse A, égal à la somme du nombre de protons et de neutrons ($A = Z + N$)

nucléons : particules constitutives du noyau atomique, c'est-à-dire les **protons** et les **neutrons**, liées entre elles par une *interaction forte* qui assure la cohésion du noyau

nucléotide : composé constitué d'une **base** (purique ou pyrimidique), d'un sucre et d'un groupement phosphate. Les **purines** (adénine et guanine) et les **pyrimidines** (cytosine et thymine) sont deux catégories de composés cycliques contenant de l'azote

octet : unité de stockage de données informatiques correspondant à 8 bits et permettant de stocker 1/8 de nombre flottant ou un caractère. Sont plus utilisés les multiples : le **kilo-octet** (qui correspond à 2^{10} octets, soit 1 024 octets), le **mégaoctet** (1 Mo = 2^{20} octets ou 1 024 Ko), le **gigaoctet** (1 Go = 2^{30} octets, soit 1 024 Mo) et le **téraoctet** (1 To = 2^{40} octets, soit 1 024 Go)

onde de choc : discontinuité de l'état de la matière (pression, température, densité) qui se propage dans l'échantillon. Elle résulte généralement d'une perturbation

phénotype : ensemble des caractères observables d'un individu

plasma : milieu constitué d'atomes plus ou moins ionisés, d'électrons libres et de photons

polymère : macromolécule répétant un même motif structural appelé monomère

potentiel empirique : expression analytique de l'énergie potentielle d'une assemblée d'atomes, en fonction de leurs positions, dépendant d'un certain nombre de paramètres ajustés de manière à reproduire des propriétés physiques mesurées

ppm : partie par million (ppb = partie par milliard)

précipité : phase se formant dans une solution, avec une concentration ou une structure cristalline distincte de celle de la solution, lorsque la concentration dépasse la limite de solubilité

protéine : macromolécule en forme de longue chaîne constituée d'une suite d'**acides aminés**

protéomique : discipline liée à la traduction, dans des conditions données, des **gènes** en **protéines** à partir de la transcription des **ARN** messagers

proton : découvert en 1911 par le physicien britannique Ernest Rutherford, ce **nucléon** porte une charge électrique positive exactement égale et opposée à celle de l'électron. Sa masse vaut $1{,}673 \cdot 10^{-27}$ kg

purines ; pyrimidines : voir **bases**

quantique : qui relève de la théorie développée à partir du principe des quanta de Planck (les échanges d'énergie entre rayonnement et matière ne peuvent s'effectuer que par paquets discontinus) et du principe d'incertitude d'Heisenberg, selon lequel il n'est pas possible de déterminer avec précision à la fois la position et la vitesse d'une particule

radioactivité : propriété que possèdent certains éléments naturels ou artificiels d'émettre spontanément des particules *alpha* (noyaux d'hélium), *bêta* (positons [émission bêta +] ou électrons [émission bêta –]) ou un rayonnement *gamma* (photons de haute énergie). Est plus généralement désignée sous ce terme l'émission de rayonnements accompagnant la désintégration d'un élément instable ou la **fission**

radioélément : élément dont tous les **isotopes** sont **radioactifs**

radionucléide : isotope radioactif, appelé aussi parfois radio-isotope, d'un élément

rayons X : ondes électromagnétiques dont la longueur d'onde, entre l'ultraviolet et le rayonnement *gamma*, est comparable aux distances interatomiques

réacteur "rapide" : réacteur nucléaire dans lequel on limite la présence de matières pouvant ralentir les **neutrons** afin que les **fissions** soient produites principalement par des neutrons rapides

réactivité : dans un milieu multiplicateur de **neutrons**, écart relatif, par rapport à 1, du *facteur de multiplication effectif* qui est le rapport, pour un intervalle de temps donné et dans un milieu de composition et de géométrie données, du nombre de neutrons produits par **fission** au nombre de neutrons disparus

REB (réacteur à eau bouillante) : une des deux grandes familles (l'autre étant celle des **REP**) de réacteurs nucléaires à eau ordinaire (légère). Un REB est modéré et refroidi par de l'eau portée à ébullition dans le cœur dans les conditions normales de fonctionnement

relations de fermeture : voir **lois de fermeture**

relaxation : retour d'un système d'un état d'énergie élevée (dit excité) vers un état d'énergie plus basse

REP (réacteur à eau sous pression) : principale famille de réacteurs nucléaires à eau ordinaire (légère). Réacteur modéré et refroidi par de l'eau maintenue liquide dans le cœur grâce à une pression appropriée dans les conditions normales de fonctionnement

répression (d'un *gène*) **:** action d'une **protéine** qui se lie à une région spécifique de l'**ADN** pour empêcher la transcription d'un **gène** adjacent

résidu : en biochimie, portion d'un sucre, d'un **acide aminé** ou d'un **nucléotide** retenue comme partie de la chaîne d'un **polymère** pendant le processus de polymérisation

résolution (d'un modèle) **:** taille de maille, dans l'espace et dans le temps, d'une *modélisation*

RMN (résonance magnétique nucléaire) : son principe est basé sur les propriétés que certains noyaux d'atomes acquièrent lorsqu'ils sont placés dans un champ magnétique intense. Ils peuvent alors interagir avec des ondes radio pour émettre des signaux (spectres ou images) qui permettent d'identifier la structure des composés présents

semi-implicite (méthode) **:** méthode de résolution numérique pour laquelle *certaines variables* du modèle sont supposées inconnues à l'instant *t*, les autres étant supposées connues (valeurs à l'instant précédent) pendant la recherche de la solution à l'instant *t*. Ce type de méthode demande moins de calculs qu'une méthode **implicite**, mais ne reste stable que si les intervalles de temps sont suffisamment petits

séquence : ordre des **nucléotides** dans les **polymères** biologiques (**ADN**, **ARN**, **protéines**). Le **séquençage** est la détermination de cet ordre

site : séquence d'un **polymère** présentant des propriétés particulières ; le **site actif** d'une **protéine enzymatique** conditionne ainsi sa fonction

site de complexation : site où se formera un **complexe**

solvant : substance capable de dissoudre un corps

stochastique : qui comporte la présence d'une ou de plusieurs variables aléatoires

téraflops : voir **flops**

thermohydraulique : branche de la physique consacrée aux transferts de chaleur et à la mécanique des fluides

transmutation : transformation, par réaction nucléaire provoquée ou spontanée, d'un noyau atomique en un autre. Il peut en résulter soit un changement d'élément chimique, soit un simple changement d'**isotopie** de l'élément initial

tritium : isotope très lourd de l'hydrogène (hydrogène 3)

turbulence : mode d'écoulement d'un fluide dans lequel se superpose au mouvement moyen un mouvement d'agitation aléatoire

valence : nombre de liaisons qu'un atome peut former

vibration atomique (période de) **:** inverse de la fréquence de vibration d'un atome autour de sa position moyenne. Elle est de l'ordre de 100 femtosecondes (1 fs = 10^{-15} s) et dépend de la direction, de la polarisation et de la longueur de l'onde de vibration