



SEMINAIRE ISMO

Damien Laage

Département de chimie de l'ENS Paris

L'eau autour des protéines : dynamique et fonction biochimique

L'eau est largement considérée comme indispensable à la vie. Afin de comprendre le rôle joué par l'eau dans la fonction biologique à l'échelle moléculaire, nous avons d'abord déterminé la perturbation induite par des protéines sur la dynamique des molécules d'eau dans leur voisinage. Alors que toutes les observations s'accordent sur le fait que la dynamique de l'eau est ralentie par rapport au bulk, l'amplitude et l'origine moléculaire de ce retard restent confus.

En combinant des simulations numériques et des modèles théoriques validés dans des études antérieures sur des petits solutés, nous présentons une description moléculaire de la dynamique d'hydratation des protéines et nous mettons en évidence quelles caractéristiques des protéines gouvernent ce ralentissement.

Dans une étude complémentaire, nous nous intéressons à l'effet de l'eau sur le fonctionnement d'une enzyme. L'eau est souvent décrite comme un lubrifiant qui facilite les transitions conformationnelles se produisant durant la catalyse enzymatique. A travers l'étude d'une enzyme dans un solvant non-aqueux, nous évaluons la validité moléculaire de cette description.

Mardi 19 mai 2015 à 11h
Bât 210 – Amphi 1 (2^{ème} étage)
Université Paris-Sud - 91405 ORSAY Cedex