Paris, le 16 mars 2015 - Dans le cadre d'études menées sur l'**activité des protéines**, une équipe internationale de recherche impliquant l'
**IBS1**
(CEA/CNRS/UJF) et l'Institut
**Laue-Langevin**
, vient de mettre en évidence le
**rôle de l'eau à l'échelle moléculaire**
. Les chercheurs ont ainsi découvert l'implication du
**mouvement des molécules d'eau à la surface des protéines**
afin de les rendre dynamiques et donc fonctionnelles. Ces résultats font l'objet d'une publication dans Nature Communications le 16/03/2015.

Des études préalables avaient déjà permis de découvrir l'importance de l'eau, dite d'hydratation, dans la dynamique et le bon fonctionnement biologique des protéines, mais elles ne portaient pas sur des observations à l'échelle moléculaire. Cette fois, les chercheurs ont pu observer le mouvement des molécules d'eau à la surface des protéines et mettre en évidence la corrélation avec la dynamique des protéines, essentielle pour l'activité biologique de celles-ci. La température s'est révélée être un paramètre central puisque le mouvement des molécules d'eau et donc l'activité des protéines en dépendent.

Au cours de cette étude, les chercheurs ont pu « visualiser » le mouvement des molécules d'eau à la surface des protéines et constater qu'à une température inférieure à - 30°C elles possèdent un mouvement de rotation sur elles-mêmes. En dessous de cette température, les protéines ne sont pas actives. Lorsque la température est supérieure à - 30°C, température qui correspond à un début d'activité des protéines, les molécules d'eau tournent toujours sur elles-mêmes mais commencent à exercer une diffusion translationnelle. C'est donc la capacité de l'eau à « danser » à la surface des protéines qui les rend suffisamment dynamiques pour être fonctionnelles.

Pour mener à bien cette étude, les chercheurs ont utilisé la technologie de diffusion de neutrons combinée à des simulations de dynamique moléculaire. Le très haut flux de neutrons de l'ILL et la précision de détection de ses instruments ont permis d'obtenir des informations fines sur l'arrangement local et les mouvements des atomes et des molécules qui constituent la matière. Afin de masquer le signal des protéines et ne garder que celui des molécules d'eau à leur

surface, les chercheurs ont eu recours à la production de protéines deutérées, dans lesquelles les atomes d'hydrogène sont remplacés par des atomes de son isotope le deutérium.

Ces résultats permettent de mieux comprendre les conditions nécessaires à l'activité biologique des protéines. Des applications peuvent être envisagées, par exemple, pour contrôler la stabilité de protéines thérapeutiques à l'état solide, tel que l'insuline qui est utilisée comme traitement du diabète.
Références

Translational diffusion of hydration water correlates with functional motions in folded and intrinsically disordered proteins, Nature Communications 16/03/2015
Ont également participé à cette étude : UC Irvine, MLZ Garching, ANSTO Australie, Max Planck Institut Mülheim et Univ. Perugia

1 Institut de Biologie Structurale, à Grenoble