

# Diffusion Incohérente des Neutrons : Modèles Analytiques pour la Dynamique Interne des Protéines



D. J. Bicoût<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institut Laue – Langevin, Theory Group,  
6 rue Jules Horowitz, B. P. 156, 38042 Grenoble Cedex 9*



Les biomolécules sont des systèmes dynamiques dont la stabilité, la fonction et l'activité sont régulées de manière cruciale par leur dynamique interne. Ces mouvements conformationnels des biomolécules jouent un rôle important dans la plupart des réactions biochimiques comme la catalyse des enzymes, la liaison de récepteur–ligand, et dans d'autres aspects de l'activité biologique tels le repliement des protéines, le transfert de charges au travers des membranes protéiques. Les techniques de diffusion des neutrons permettent d'étudier ces mouvements thermiques des biomolécules. D'amplitudes de l'ordre de l'angström, ces fluctuations thermiques se manifestent au niveau de la structure tertiaire et quaternaire de la protéine sur des échelles de temps allant de la pico à la nanoseconde.

Considérant que la réalité de la dynamique intramoléculaire des protéines peut être accessible par la théorie et l'expérience, notre objectif dans ces notes est de discuter des modèles qui permettent (1) – de reconsidérer notre manière d'analyser les données expérimentales et l'interprétation des paramètres déterminés, et (2) – d'améliorer notre compréhension des phénomènes étudiés et d'identifier les paramètres importants du problème.

Pour ce faire, nous présenterons une revue critique des différents modèles théoriques couramment rencontrés dans la littérature pour l'analyse des mouvements internes des protéines. En particulier, nous traiterons des modèles classiques de diffusion dans une sphère et de saut entre deux sites non équivalents. Des extensions de ces modèles pour rendre compte des dynamiques combinées et le modèle en couche pour l'hétérogénéité dynamique seront également abordées. Nous discuterons ensuite de la notion et des modèles simples de description de la transition dynamique. Enfin, les effets de l'environnement (solvant) sur la dynamique de la protéine et le problème du repliement des protéines, ou plus généralement, de l'étude d'une réaction biochimique par le prisme de la diffusion des neutrons seront posés en guise de perspectives.