

Étude de la Dynamique des Macromolécules en Solution par Résonance Magnétique Nucléaire.

Pau Bernado, Guillaume Bouvignies et Martin Blackledge

Laboratoire de Résonance Magnétique Nucléaire, Institut de Biologie Structurale, 41 Rue Jules Horowitz, Grenoble 38027.

L'activité d'une protéine est liée non seulement à sa structure, mais également à sa dynamique, et il est important de connaître la nature de ses mouvements pour comprendre sa fonction biologique. La résonance magnétique nucléaire est particulièrement utile pour étudier la dynamique d'une molécule en solution sur une gamme de temps de corrélation très large. En particulier, la relaxation des spins ^{15}N ou ^{13}C donne accès aux mouvements moléculaires avec les temps caractéristiques entre les dizaines de picosecondes et le temps de corrélation rotationnelle de la molécule (autour de 10ns pour une protéine monomérique de 20kD à 300K). Les vitesses de relaxation dépendent de la flexibilité de chaque site, et peuvent être caractérisé en termes d'amplitude et de temps caractéristique locale. La précision de ces paramètres et sa compréhension en termes de fonction exigent que la réorientation globale de la molécule soit correctement prise en compte. Ces méthodes expérimentales, qui seront présentées ici brièvement, font maintenant partie de la panoplie d'expériences appliquées dans l'étude de la relation structure-dynamique d'une protéine et ses partenaires. Néanmoins les mouvements plus lents, entre la nano et la milliseconde, sont plus difficiles à étudier, et très peu d'information est disponible sur la nature de la dynamique de la chaîne peptidique dans cette gamme de temps par RMN. Très récemment de nouvelles méthodologies ont été proposées, basées sur l'alignement préférentiel d'une protéine par rapport au champ magnétique, induit par dissolution de la molécule dans un liquide cristal très dilué. Dans ces conditions les changements conformationnelles d'un temps caractéristique plus lents (jusqu'au millisecondes) peuvent être étudiés. Nous présenterons cette technique, et quelques résultats, comparant la dynamique rapide (ps-ns), et plus lents la longue de la chaîne peptidique de quatre protéines.