
Dynamique des transferts de proton dans les protéines.

Jeremy Verdier^{*1}

¹Laboratoire de Chimie Physique D'Orsay (LCPO) – CNRS : UMR8000, Université Paris XI - Paris Sud – Bâtiments 349/350 avenue Georges CLEMENCEAU 91405 ORSAY CEDEX, France

Résumé

On cherche à déterminer la probabilité d'un transfert de proton dans les liaisons hydrogène de type R-OH RO en fonction de l'environnement. On a étudié le processus dans la protéine fluorescente PADRON.

On trouve que le transfert est défavorisé (augmentation de la barrière) dans le cas où RO est impliqué dans une liaison hydrogène avec une molécule d'eau. Au contraire, le transfert est favorisé par une liaison hydrogène de R-OH avec une molécule d'eau. On se propose par la suite de quantifier la probabilité d'observer le transfert en fonction des positions relatives de R-OH, RO et des molécules d'eau concernées.

Mots-Clés: transfert de proton, liaison hydrogène, dynamique moléculaire

*Intervenant