

---

# Exploration des sites métalliques d'une métalloprotéine dans l'IR lointain

Dorothee Berthomieu\*<sup>1</sup>, Hugo Petitjean, Catherine Berthomieu, and Jean-Pierre Flament

<sup>1</sup>Institut Charles Gerhardt (umr 5253) – CNRS - ENSCM - UM1 - UM2 – 8 rue de l'Ecole normale - Montpellier, France

## Résumé

La caractérisation des sites métalliques des métalloprotéines est cruciale pour accéder à leur structure et comprendre leur rôle dans les processus catalytiques. C'est un véritable défi pour la chimie bio-inorganique. Pour contrôler spécifiquement les changements qui peuvent avoir lieu au niveau du site actif de la Cu,Zn- superoxide dismutase (Cu,Zn-SOD) une nouvelle expérience couplant l'électrochimie à la FTIR a été conçue. Cette nouvelle expérience permet de sonder les changements structuraux liés à un processus d'oxydo-réduction au sein de la protéine en milieu aqueux dans le domaine (1000-50 cm<sup>-1</sup>, i.e. 10-200 μm). [1][2]

Nous montrerons comment le calcul théorique des fréquences couplé à celui des modes est nécessaire à l'attribution des signaux obtenus dans ces régions de l'IR à ce jour peu explorées. [3]

Références :

1/ C. Berthomieu, L. Marboutin, F. Dupeyrat, et P. Bouyer *Biopolymers* 2006, 82(4), 363-367

2/ F. Dupeyrat, C. Vidaud, A. Lorphelin, et C. Berthomieu *J. Biol. Chem.* 2004, 279, 48091-48101 ; Nicolas Vita, Jean-Blaise Brubach, Rainer Hienerwadel, Nicolas Bremond, Dorothee Berthomieu, Pascale Roy and Catherine Berthomieu, *Anal. Chem.* 2013, 85, 28912898

3/ Marboutin, L., H. Petitjean, B. Xerri, N. Vita, F. Dupeyrat, J.-P. Flament, D. Berthomieu and C. Berthomieu, *Angewandte Chemie-International Edition*, 2011. 50(35): p. 8062-8066.

**Mots-Clés:** spectroscopie vibrationnelle, métalloprotéine, terahertz, DFT

---

\*Intervenant