
Modélisation des propriétés structurales et spectrales d'une nouvelle classe de protéine fluorescente originale et prometteuse

Adèle Laurent*¹

¹Chimie Et Interdisciplinarité : Synthèse, Analyse, Modélisation (CEISAM) – CNRS : UMR6230,
Université de Nantes – UFR des Sciences et des Techniques - 2 rue de la Houssinière BP 92208 - 44322
NANTES Cedex 3, France

Résumé

Il y a tout juste un an, une nouvelle classe de protéines fluorescentes a été découverte par une équipe japonaise.

Il s'agit, pour la première fois, d'une protéine se trouvant dans un organisme vertébré et, plus précisément, dans les fibres musculaires de l'anguille Unagi.[1] Cette protéine dont la fluorescence est induite par la diffusion d'un ligand en son sein est appelée UnaG. Elle émet une couleur verte brillante et très intense. Cette découverte pourrait être une révolution dans le domaine médical et clinique, d'une part, car le ligand, la bilirubine, est un produit de dégradation de l'hémoglobine et, d'autre part, car la bilirubine est toxique si elle est présente en excès dans le corps. Par conséquent, UnaG est un capteur de la fonction hépatique, de la jaunisse et de l'hémolyse.[2]

Cette présentation aura pour but de caractériser les propriétés spectrales de cette nouvelle protéine fluorescente très prometteuse à l'aide d'une approche théorique combinant la dynamique moléculaire ainsi que les méthodes hybrides alliant la mécanique quantique et la mécanique moléculaire (QM/MM). Cette approche QM/MM//MD permet, en effet, une rationalisation fine des effets de l'environnement sur les propriétés optiques ainsi que la discrimination des résidus cruciaux,[3] et donne des pistes solides pour effectuer des mutations de la protéine afin d'élargir son champ d'application.

A. Kumagai, R. Ando, H. Miyatake, P. Greimel, T. Kobayashi, Y. Hirabayashi, T. Shimogori and A. Miyawaki *Cell* 153, 1602-1611 (2013).

R. P. Wennberg, C.E. Ahlfors, V. K. Bhutani, L.H. Johnson and S.M. Shapiro *Pediatrics* 117, 474-485 (2006).

A. D. Laurent, V. A. Mironov, P. P. Champagain, A. V. Nemukhin and A. I. Krylov *J. Phys. Chem. B* 116, 12426-12440 (2012).

Mots-Clés: spectre UV/Visible, QM/MM, MD, Protéine fluorescente, bilirubine

*Intervenant