

O25- Évolution de la dynamique moléculaire chez des enzymes d'une même famille

David Bernard*, Donald Gagné* et Nicolas Doucet*

*Institut Armand-Frappier, Institut National de la Recherche Scientifique, Laval, Québec, Canada

Problématique : L'utilisation d'enzymes en industrie et en pharmaceutique gagne en popularité comme alternative plus verte et efficace aux catalyseurs fonctionnant en solvants organiques. L'ingénierie de nouvelles réactions enzymatiques demeure difficile et inefficace dû à la difficulté de prédire les conséquences de l'ingénierie sur la structure, la fonction et la dynamique des protéines. Selon des articles récents, des mouvements moléculaires concertés favoriseraient la catalyse chez plusieurs enzymes, mais les mécanismes sous-jacents à cette flexibilité atomique restent nébuleux. Nous ignorons toujours si la séquence, la structure et/ou la fonction d'une protéine sont reliées à sa dynamique. La compréhension des phénomènes sous-jacents à la dynamique moléculaire pourrait faciliter l'ingénierie des protéines.

Hypothèse : La dynamique d'une protéine est encodée par sa structure tertiaire et influence sa fonction. Des protéines ayant une structure et une fonction similaires devraient donc avoir une dynamique similaire.

Méthodologie : Nous avons utilisé la RMN pour caractériser la dynamique moléculaire à l'échelle de la micro/milliseconde de protéines homologues appartenant à la même sous-famille de la superfamille des ribonucléases A, soit les RNases 3 des grands singes *Pongo pygmaeus*, *Macaca fascicularis* et l'humain.

Résultats et conclusions : La dynamique moléculaire en l'absence de ligand des RNases 3 de *P. pygmaeus* et de *M. fascicularis* est très similaire à celle de l'humain. Ceci va dans le sens de notre hypothèse et nous laisse entrevoir l'effet de la séquence et de la distance phylogénique sur la dynamique. Des expériences supplémentaires seront nécessaires pour déterminer la fonction biologique exacte des protéines étudiées.
