

l'eau». En revanche, l'eau se lie très peu avec les molécules non polaires, telles les graisses, ce qui explique que l'eau et l'huile ne se mélangent pas à l'équilibre (les molécules non polaires sont hydrophobes, étymologiquement «qui n'aiment pas l'eau»).

Certaines molécules biologiques, par exemple les protéines et l'ADN, contiennent à la fois des parties hydrophiles et des parties hydrophobes, organisées en longues chaînes. La structure tridimensionnelle de ces molécules résulte du repliement des chaînes sur elles-mêmes, de sorte que les groupes hydrophiles sont en surface, où ils interagissent parfois avec l'eau, et les groupes hydrophobes sont enfouis à l'intérieur de la molécule, à l'abri de l'eau. Dès 1959, Walter Kauzmann indiqua que cet effet hydrophobe détermine le repliement de la protéine ; il est aujourd'hui encore très étudié (voir *Les mécanismes du repliement des protéines*, par Frederic Richards, *Pour la Science*, mars 1991).

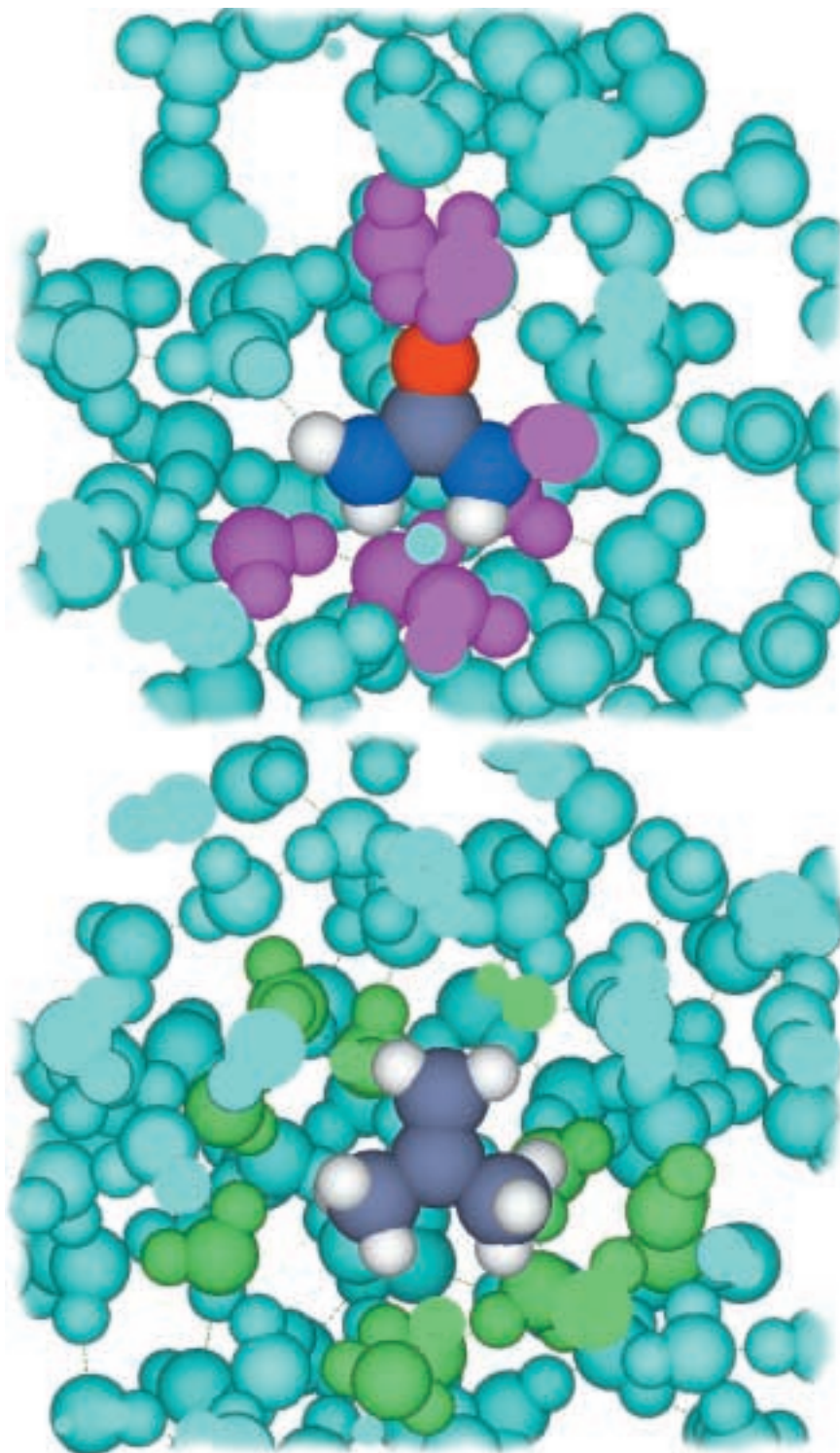
Les modélisations distinguent trois types d'eau : l'eau «ordonnée», qui entoure les molécules biologiques, interagissant fortement avec elles, l'eau «de masse», qui est au-delà et les molécules d'eau, qui sont enfouies dans les molécules biologiques. Une seule cellule contient des milliards de molécules d'eau, qui emplissent tous les espaces non occupés par des molécules biologiques. Au total, le corps humain contient environ 60 pour cent d'eau.

Comment modéliser les interactions des trois types d'eau avec les atomes d'une molécule biologique ? Nous spécifions tout d'abord les interactions élémentaires de tous les atomes, puis nous laissons le système évoluer selon les lois de la physique newtonienne. Une telle simulation requiert deux ingrédients fondamentaux : d'une part, la définition des interactions inter- et intramoléculaires de l'eau et des molécules biologiques ; d'autre part, la planification de leurs mouvements au cours du temps, c'est-à-dire la dynamique moléculaire.

Au cours de l'évolution d'un volume d'eau qui contient des molécules biologiques, chaque atome bouge. Sa position à chaque instant se détermine par rapport à sa position à l'instant précédent : on ajoute la distance parcourue entre les deux instants considérés. Quand aucune force n'agit sur l'atome, la distance qu'il parcourt est le produit du temps d'évolution par sa vitesse à la position précédente. Toutefois, les

forces exercées par les autres atomes ont généralement une résultante qui accélère l'atome. Quand les forces sont constantes pendant le laps de temps, nous calculons la nouvelle vitesse par l'application des lois de Newton (la

variation de la vitesse est proportionnelle à la force). Puis nous utilisons cette vitesse actualisée pour calculer la nouvelle position de l'atome. Les interactions, nombreuses dans un liquide, empêchent les atomes de se déplacer



5. DES MOLÉCULES aux formes semblables réagissent différemment avec l'eau selon qu'elles sont polaires ou non, c'est-à-dire selon qu'elles ont ou non une charge électrique partielle sur certains de leurs atomes. L'urée, une molécule polaire présente dans l'urine, forme des liaisons hydrogène avec les molécules d'eau (sphères violettes, en haut). En revanche, l'isobutène, apolaire, ne forme pas de telles liaisons ; les molécules d'eau créent des liaisons hydrogène entre elles et produisent une structure en forme de cage (sphères vertes, en bas).