

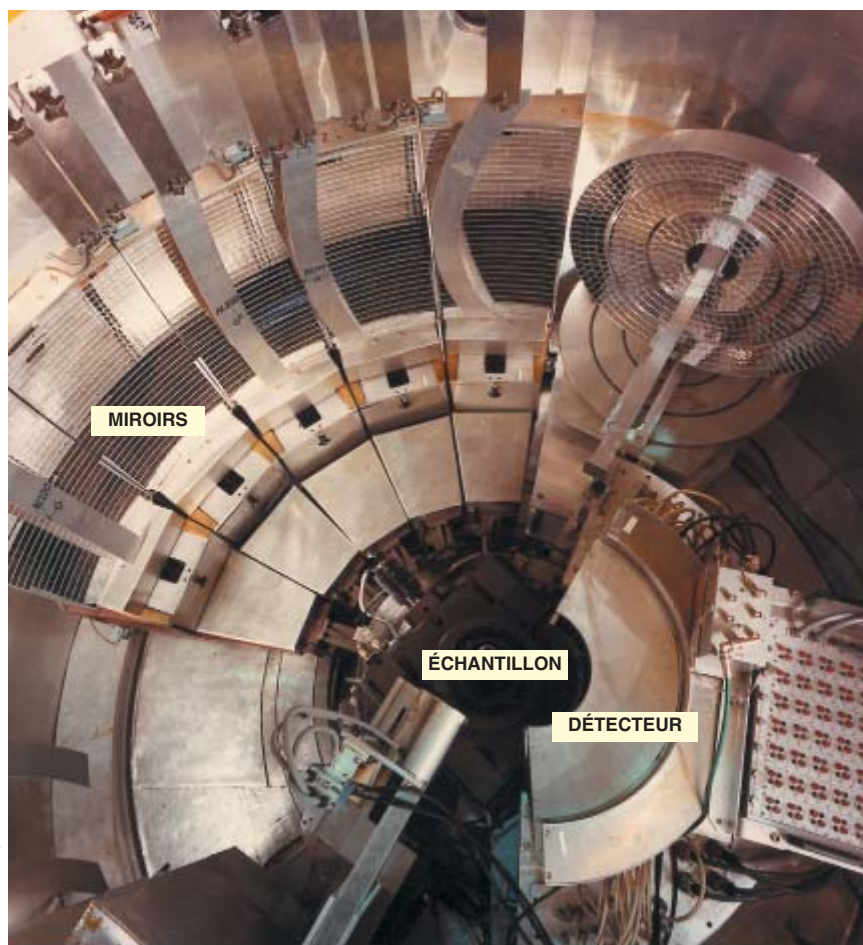
connues avec exactitude. De surcroît, les forces de Coulomb agissent à longue distance (plus de un nanomètre), donc les erreurs sur l'évaluation des charges s'accumulent. La méthode de calcul par un champ de forces dépend de trop de paramètres approximatifs, et les sondes à effet tunnel en ont révélé les limites.

## Accord avec l'expérience

Nous avons cherché une autre méthode pour évaluer les interactions entre les atomes de l'aspirine, et pour établir une carte énergétique plus correcte. Au lieu de considérer les interactions intramoléculaires comme des ressorts plus ou moins rigides, nous avons tenu compte des nuages d'électrons entre les atomes, et nous avons fondé une partie de nos calculs sur les équations de la mécanique quantique. Nous avons ainsi dessiné les nouvelles vallées et les nouvelles collines sur la carte en relief. Après avoir fait tourner virtuellement le groupe méthyle dans ce nouveau paysage, nous avons comparé la valeur de l'effet tunnel calculée avec celle mesurée, pour l'ensemble des molécules étudiées. La concordance entre les résultats de l'expérience et ceux du calcul était ainsi améliorée.

Enfin, nous avons utilisé une dernière méthode, dite de la fonctionnelle de densité, élaborée dans les années 1960 par Walter Kohn et John Pople, qui ont reçu le prix Nobel de chimie en 1998, pour dresser la carte du relief énergétique de l'aspirine, ainsi que de 15 autres cristaux. Pour ce faire, on subdivise le cristal en petits volumes nommés mailles et l'on calcule la densité électronique par maille, et non par molécule. L'écart entre l'énergie de l'effet tunnel ainsi calculée et l'énergie déterminée expérimentalement est inférieur à cinq pour cent pour l'aspirine, ainsi que pour les 15 autres molécules que nous avons étudiées avec cette méthode et qui ont un groupe méthyle.

Grâce à l'effet tunnel des protons dans les groupes méthyle, nous avons validé les expressions des interactions faibles. Nous disposons ainsi de descriptions précises de ces interactions dans 15 molécules organiques simples, qu'un champ de forces bien affiné pourrait reproduire. Ces descriptions des interactions constituent des références fiables pour l'étude des protéines. Les



**6. LA MESURE DE L'EFFET TUNNEL** est fondée sur la diffusion des neutrons (ici, un spectromètre de rétrodiffusion à l'Institut Laue Langevin). L'échantillon, placé au centre de l'enceinte d'environ trois mètres de diamètre, est entouré de miroirs où se réfléchissent les neutrons avant d'être captés par le détecteur.

biologistes vont bientôt les extrapoler à des molécules plus complexes et valider ou améliorer le champ de forces utilisé dans leurs simulations. Ces expressions des interactions faibles sont en effet indispensables aux simulations des protéines, car les méthodes calculatoires qui déterminent explicitement la distribution électronique sont

trop lentes pour être appliquées à la simulation des grandes biomolécules, et les biologistes doivent donc – à ce jour – se contenter de la méthode classique du champ de forces. La simulation des structures des protéines et de leur dynamique pourrait ainsi gagner en précision, améliorant la compréhension du repliement des protéines.

Mark JOHNSON dirige le service de calcul scientifique de l'Institut Laue Langevin, à Grenoble. Gordon KEARLEY, professeur de physique des neutrons, est responsable des instruments à la source IRI (Interfaculty Reactor Institute) de Delft ; il a travaillé 20 ans à l'Institut Laue Langevin.

M. JOHNSON, M. PRAGER, H. GRIMM, M. NEUMANN, G. KEARLEY et C. WILSON, *Methyl group dynamics in paracetamol and acetanilide : probing the static properties of intermolecular hydrogen bonds formed by peptide groups*, in *Chem. Phys.*, 244, pp. 49-66, 1999.

M. JOHNSON, M. NEUMANN, B. NICOLAI, P. SMITH et G. KEARLEY, *The origin and temperature dependence of the single particle, methyl group rotational potential in acetic acid* in *Chem. Phys.*, 215, 343, 1997.

M. NEUMANN et M. JOHNSON, *Methyl group tunnelling-A quantitative probe of atom-atom potentials* in *J. Chem. Phys.*, 107, 1725, 1997.

M. JOHNSON et G. KEARLEY, *Quantitative atom-atom potentials from rotational tunnelling ; their extraction and their use*, in *Annual Review of Physical Chemistry*, 51, pp. 297-321, 2000.

# Les animaux transparents

SÖNKE JOHNSEN

*Grâce à d'ingénieuses adaptations physiologiques, de nombreux animaux marins sont devenus transparents.*

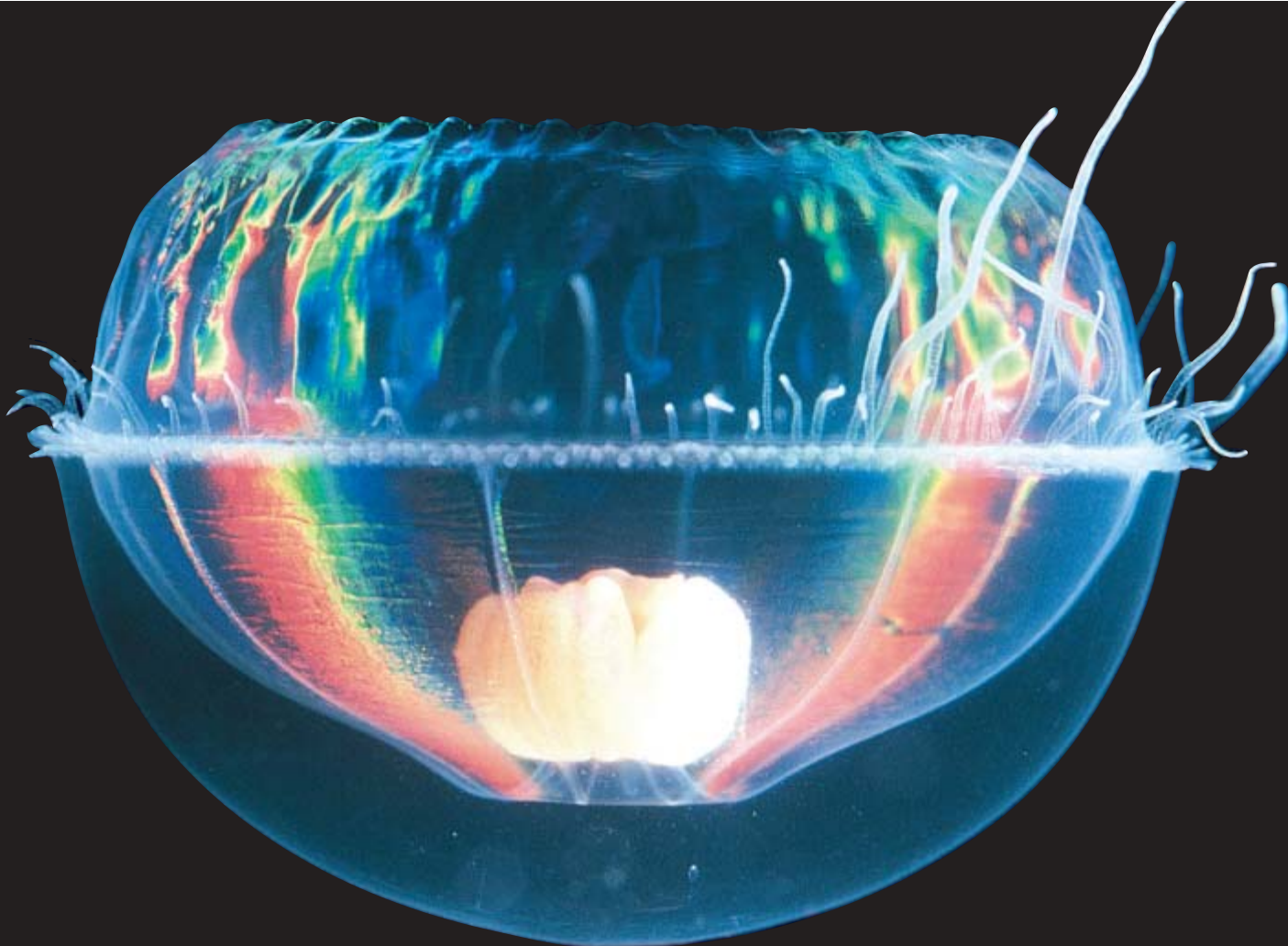
G. Richard Harbison (M. Pinctella) ; Edith A. Wooter (Physalia et Cuming)



À mesure que nous descendons, l'eau s'assombrit. À des centaines de kilomètres de la côte, nous ne plongeons pas sur un récif fourmillant de vie ou sur une épave légendaire, mais simplement en haute mer. Sous nous s'ouvrent les abysses, à plus de 3 000 mètres de profondeur. Dans ce monde uniforme, seuls de subtils dégradés de couleurs et de lumières signalent des changements de temps ou de lieu. À 18 mètres de profondeur, nous arrêtons de descendre. Reliés à une ligne de sécurité qui pend du bateau, nous entamons nos recherches. À mesure que nos yeux s'habituent, nous découvrons, autour de nous, des dizaines d'animaux transparents aux mouvements lents. Au milieu de cette étrange ménagerie de cristal, on distingue quelques méduses, mais nous ne reconnaissons pas la plupart des créatures. Ces animaux mesurent de quelques centimètres à une trentaine de centimètres. Alors que l'on en détecte certains grâce à la nourriture qui se trouve dans leur estomac, ou par des taches de couleur, ou des éclats irisés, d'autres sont si transparents qu'ils restent invisibles, même à quelques centimètres de nous. Nous sortons des bocaux de nos sacs et commençons la récolte.



L'estomac de la méduse *Punctata* (à gauche), une espèce du genre *Nausithoe*, est la zone à quatre sommets. On voit les huit gonades rouges de l'animal. *Phronima* (ci-dessus) aurait inspiré le monstre du film *Alien*. Il s'agit en fait d'une créature inoffensive, longue de deux à trois centimètres. On capture très rarement l'hydroméduse *Cunina* (au centre).



Laurence P. Madin (Whoi (arctapodema)) ; G. Richard Harrison (Pterosoma, Ctenophora et Vitreledonella richardi) ; Edith A. Widder (Cystosoma)

## La ménagerie de verre

L'hydroméduse du genre *Arctapodema* (en haut, à gauche) se pare de couleurs irisées quand la lumière du flash du photographe se reflète sur les fines striations musculaires de l'animal. La rétine allongée du gastéropode transparent *Pterosoma* (en bas, au centre) capte les images ligne par ligne, comme une caméra de télévision. L'amphipode (en haut, à droite), connu sous le nom de *Cystosoma*, ressemble à un cafard en cristal de cinq centimètres de longueur. Sa carapace contient surtout de l'eau et un minuscule intestin en forme d'aiguille (invisible sur ce cliché). Rarement capturée, la pieuvre transparente *Vitreledonella richardi* (à gauche) est mal connue. Plus encore, l'animal (en bas à droite) n'a pas de nom, car il n'a été découvert que très récemment.