

MASTER BIBS

PROGRAMMATION PYTHON

Septembre 2015

APPLICATION :

- fonctions
- dictionnaires
- gestion arguments
- modules (import, création)

Dans cet exercice on se propose de créer un programme permettant d'extraire les résidus de l'interface d'un complexe protéique. Le programme prendra en entrée un fichier PDB contenant la structure du complexe. En sortie, le programme créera un nouveau fichier PDB dans lequel les résidus de l'interface seront étiquetés (au niveau de la colonne du 'temperature factors' – voir [format ATOM](#)) de façon à ce qu'on puisse les identifier et les colorer sous pymol (voir figure 1). La distance seuil sera paramétrable et renseignée par l'utilisateur avec une valeur par défaut. Le programme créera aussi un fichier texte contenant la liste des résidus appartenant à l'interface, le nombre de résidus, chargés, polaires et hydrophobes ainsi que le nombre de contacts hydrophobes-hydrophiles, polaires-polaires, chargés-chargés.

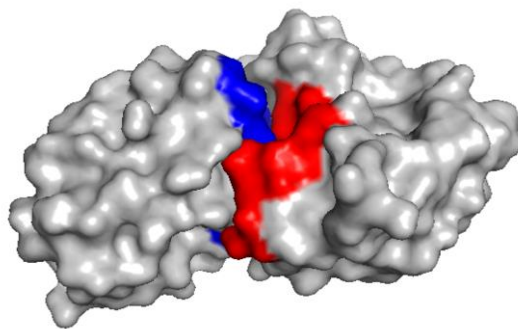


Figure 1 : les résidus participant à l'interface sont colorés en rouge et en bleu