

Yoann Missolo

Rapport Projet python
Master 2 BIB

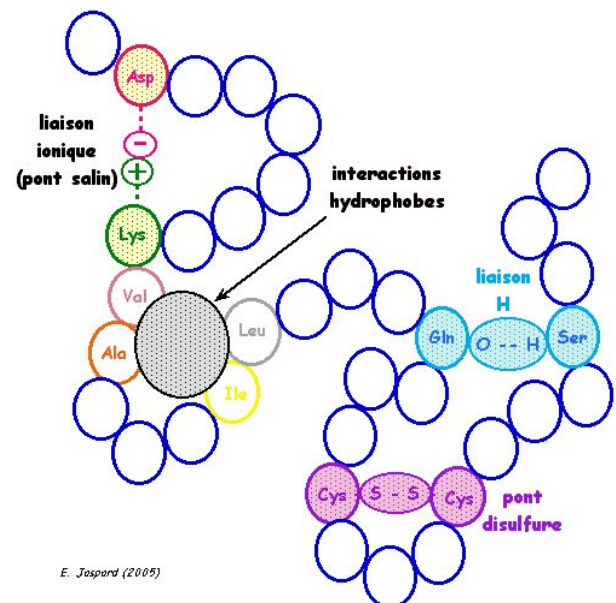
Introduction

Connaître la structure d'une protéine, c'est rassembler un lot d'informations qui nous mènent tout droit vers sa fonction. Par exemple, la présence d'un site catalytique, d'une région hydrophobe ou d'un repliement particulier peuvent nous permettre de mieux comprendre comment la protéine interagit avec son environnement.

Cette structure est rendu possible par un ensemble de différents types d'interactions entre les atomes des acides aminés qui composent la protéine. Certaines des ces interactions sont très stables (Ponts disulfures), d'autres un peu moins, mais plus abondantes (Liaisons hydrogènes) et d'autres encore, nécessitent des acides aminés spécifiques (Interactions hydrophobes, ioniques ou aromatiques).

Figure 1

PIC (Protein Interaction Calculator) est un outils en ligne qui permet de calculer ces interactions. A partir d'un fichier pdb, l'ensemble du travail que j'ai effectué consistait donc à reproduire les résultats que l'on obtient avec PIC.



I. Matériels et méthodes

Paramètres utilisés pour caractériser les interactions:

PDB testés:

1hcl.pdb et 1zni.pdb

Interactions hydrophobes:

Présence de deux Carbones Alpha (CA) de deux résidus hydrophobes à moins de 5.3 Å°.

Ponts disulfures:

Présence de 2 atomes de soufre de cystéine à moins de 2.2 Å°.

Liaisons hydrogènes:

Présence d'un atome donneur de LH et d'un atome accepteur à moins de 3Å° (3.5Å°, si l'accepteur est un atome de soufre).

Interactions ioniques:

Présence de 2 CA de résidu chargés à moins de 6Å°

II. Résultats et Discussion

Interactions hydrophobes:

J'obtiens les mêmes résultats que PIC à quelques résidus près. En effet, PIC prend en compte le fait qu'un résidu peut avoir plusieurs interactions hydrophobe en même temps. De plus, étant donné que le CA n'est pas le groupement hydrophobe, il est possible que les atomes du groupement hydrophobe soient plus éloignés à cause des possibles rotations sur la chaîne latérale de l'acide aminé. J'ai donc rajouté 0.3Å de marge pour pouvoir mieux approximer les résultats de PIC.

Ponts disulfures:

Pour cette interactions, je trouve exactement les mêmes résultats que PIC. Mieux, je trouve aussi certains ponts disulfure que PIC a omit, mais qui sont inscrites dans l'entête du pdb.

Liaisons hydrogènes:

Au niveau des LH, je n'ai pas pu modéliser le calcul de l'angle Donneur-H[^]H-Accepteur. J'ai donc diminué de 0.5Å° le critère de distance entre Donneur et Accepteur. J'obtiens près de 100 LH de plus que PIC. (Les pdb qui ont été utilisés ne contiennent les coordonnées des atomes d'hydrogène).

Interactions ioniques:

J n'obtiens pas de Liaisons ionique, comme PIC. Cependant, sur d'autres pdb, PIC en trouve et pas moi.

ANNEXE

PIC : Protein Interaction Calculator

CRITERIA FOR RECOGNIZING VARIOUS TYPES OF INTERACTIONS

1. HYDROPHOBIC INTERACTIONS:

The following residues are considered to participate in interactions if they fall within 5Å range.

ALA, VAL, LEU, ILE, MET, PHE, TRP, PRO, TYR.

Reference: Kyte and Doolittle.

2. DISULPHIDE BRIDGES:

Pairs of cysteines (sulphur atoms) within 2.2 Å are considered as disulphide bridges.

3. HYDROGEN BOND :

Criteria for hydrogen bond definition :-

donor-acceptor distance cutoff (oxygen and nitrogen) = 3.50

donor-acceptor distance cutoff (sulphur) = 4.00

Reference: J. Overington, et al. *Proc. Roy. Soc. Biol Sci.* 1990, pg.132-145

4. IONIC INTERACTIONS:

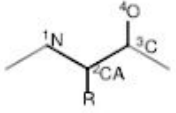

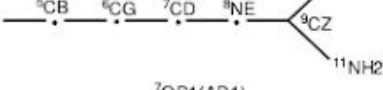
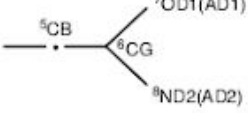
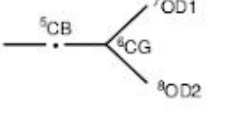
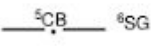
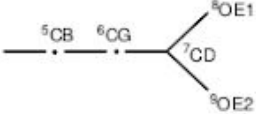
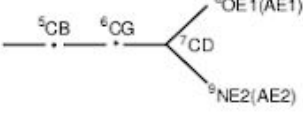
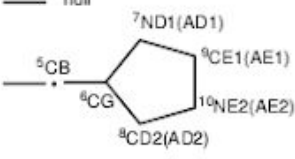
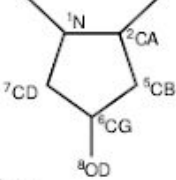
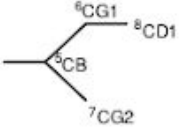
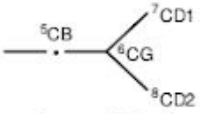
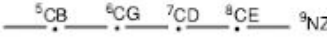
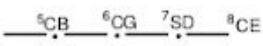
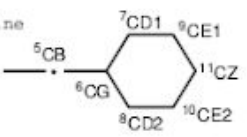
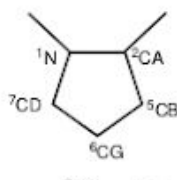
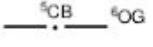
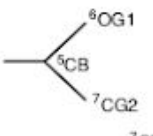
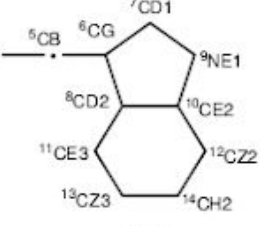
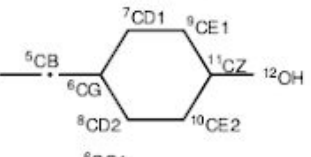
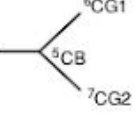
Ionic residue(ARG,LYS,HIS,ASP,GLU) pairs falling with 6Å (default) contribute to ionic interactions.

5. AROMATIC-AROMATIC INTERACTIONS:

Pairs of phenyl ring centroids that are separated by a preferential distance of between 4.5 to 7 Å account for aromatic interactions.

Reference: S.K.Burley, G.A.Petsko, *Science*, 1985, Vol 299, pg.23-28.

Nomenclature des atomes des acides aminés dans un fichier pdb

<u>backbone</u>	
	
<u>Name</u>	<u>Side Chain</u>
Alanine	
Arginine	
Asparagine	
Aspartic Acid	
Cysteine/ Cystine	
Glutamic Acid	
Glutamine	
Glycine	— null
Histidine	
Hydroxyproline	
Isoleucine	
<u>Name</u>	<u>Side Chain</u>
Leucine	
Lysine	
Methionine	
Phenylalanine	
Proline	
Serine	
Threonine	
Tryptophan	
Tyrosine	
Valine	

ATOM NAMES, REMOTENESS CODES, AND ORDER INDICATORS
FOR THE COMMON AMINO ACIDS.