**Rapport Projet Transverse**

L’algorithme DSSP nous permet d’identifier des structures secondaires à partir des coordonnées d’une molécule. On se réfère la publication de Kabsch et Sander (1983).

*Identification des liaisons hydrogènes*

Pour repérer les liaisons hydrogènes, l’algorithme consiste à parcourir l’ensemble des résidus et voir si une liaison hydrogène est énergétiquement possible entre le résidu i et i+n avec n plus grand que 3.

Pour savoir s’il y a une liaison hydrogène entre deux résidus i et j = i. On applique trois critères successivement :

1. La distance entre carbones alphas de i et j est inférieur à 9.2 A.
2. L’énergie de liaison est plus petite que – 0.5 kcal/mol
3. L’énergie de liaison entre i et j est le minimum des énergies entre i et k qui répondent aux critères **1** et **2**.

En **2**, on calcule l’énergie de liaison entre le résidu i et j avec :

Où :

* r(AB) est la distance entre l’atome A du résidu i et l’atome B de j
* q1 = 0,42e, e étant la charge élémentaire
* q2 = 0,2e
* f = 332