

RAPPORT PIC : PROTEIN INTERACTION CALCULATOR

INTRODUCTION :

Les protéines sont essentielles à la composition des cellules, elles-mêmes essentielles à chaque organisme de la biodiversité. Elles sont essentielles dans le maintien et le renouvellement des tissus, et remplissent de nombreuses fonctions au niveau des cellules : structure, fonctionnement, défense...

La diversité des protéines est extrêmement riche. Synthétisées à partir de l'ARN, elles peuvent en effet être composées d'une pluralité d'acides aminés, lesquels leur confèrent des attributs de formes variées et de ce fait des interactions multiples.

La compréhension de la structure de ces dernières semble donc essentielle afin de pouvoir mieux comprendre les interactions en son sein ou entre protéines et d'appréhender au mieux leur mode de fonctionnement ou au contraire leur malfonctionnement.

MATERIEL ET METHODES :

Dans ce cas précis, nous nous sommes inspirés du Protein Interaction Calculator afin de pouvoir développer un algorithme détectant des interactions spécifiques au sein de la protéine.

Celui-ci se base sur des critères assez peu détaillés, qu'il me semble important d'approfondir :

1. INTERACTIONS HYDROPHOBES :

Il y a interaction si la distance des résidus suivant est inférieure à 5Å :

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

On considère que les interactions ne se font que sur les atomes des chaînes latérales et les atomes ne doivent pas se suivre.

2. PONTS DISULFURES:

Un pont est formé si la distance entre deux paires de cysteines est inférieure à 2.2 Å .

On considère que les interactions ne se font que sur les atomes de soufre des chaînes latérales et les atomes ne doivent pas se suivre

3. LAISONS HYDROGENES:

Lorsque la distance donneur-accepteur est inférieure à 3.50 Å ou 4.0 Å s'il s'agit de souffres .

Elles peuvent être de plusieurs types :

« Main-main » entre deux atomes de la chaîne principale

« Side-side » entre deux atomes de chaînes latérales

« Side-Main » entre un atome de chaîne latérale et un atome de chaîne principale.

On a également ces informations concernant les acides aminés :

Table 2
*Hydrogen bond properties of amino acid side-chains
 at neutral pH*

Residue	Atom	Property
Arg	N ^ε	Donor
	N ^{η1}	Donor
	N ^{η2}	Donor
Asn	O ^δ	Acceptor
	N ^δ	Donor
Asp	O ^{δ1}	Acceptor
	O ^{δ2}	Acceptor
Cys	S ^γ	Acceptor/donor
Gln	O ^ε	Acceptor
Glu	N ^ε	Donor
	O ^{ε1}	Acceptor
	O ^{ε2}	Acceptor
His	N ^δ	Acceptor/donor
	N ^ε	Acceptor/donor
Lys	N ^ε	Donor
Met	S ^δ	Acceptor
Ser	O ^γ	Acceptor/donor
Thr	O ^γ	Acceptor/donor
Trp	N ^ε	Donor
Tyr	O ^γ	Acceptor/donor

4. INTERACTIONS IONIQUES:

On considère les résidus : ARG, LYS, HIS, ASP, GLU avec une distance inférieure à 6Å contribuant à des interactions ioniques.

Les résidus ARG, LYS et HIS se chargent positivement tandis que ASP et GLU se chargent négativement.

5. INTERACTIONS AROMATIQUES AROMATIQUES:

Une paire de cycle phényles séparés par une distance de 4.5 à 7 Å contribuent à ces interactions.

6. INTERACTIONS SULFURES :

Il y a interaction entre deux atomes de soufres des résidus cysteines et methionines et des cycles aromatiques des résidus phenylalanine et tryptophane si la distance séparant ces derniers est de maximum 5.3 Å

7. INTERACTIONS CATION-PI :

Lorsque la distance séparant une chaine cationique latérales (Lys or Arg) d'une chaine latérale aromatique (Phe, Tyr, or Trp) est de maximum 6 Å.

OUADAH Lilia

https://github.com/lilolilia/pic_project

RESULTATS :

Je n'ai pas eu le temps de tester l'ensemble des variables malheureusement et ne me suis exercée que sur un seul fichier pdb donc je n'ai testé que les interactions intra-protéiques.

J'ai donc pu obtenir des outputs similaires pour les ponts disulfures, les interactions hydrophobes, les liaisons hydrogènes main_main, et les interactions ioniques.

Je m'excuse pour le manque de résultats d'avance mais j'ai eu beaucoup de mal à anticiper les arguments supplémentaires nécessaires au bon fonctionnement de l'algorithme.