

ASSIGNATION ET DÉTECTION DES PARTIES TRANSMEMBRANAIRES D'UNE PROTÉINE

AMMICHE Naïma
2023-2024

Introduction

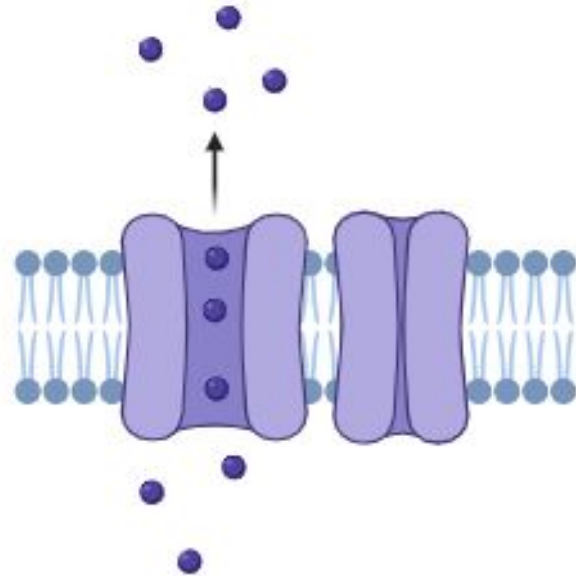
Protéine transmembranaire

Structure : hydrophobe, hydrophile

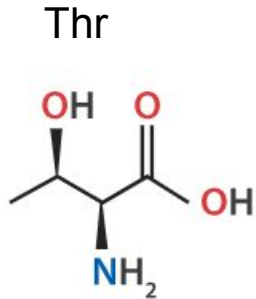
Localisation : membrane plasmique

Rôle : signalisation cellulaire

Cible : développement pharmaceutique



Fichier au format PDB



ATOM	1	N	THR	A	1	97.331	32.217	31.789	1.00155.76	N
ATOM	2	CA	THR	A	1	97.157	30.852	31.202	1.00155.75	C
ATOM	3	C	THR	A	1	95.718	30.350	31.429	1.00156.41	C
ATOM	4	O	THR	A	1	95.503	29.155	31.654	1.00157.12	O
ATOM	5	CB	THR	A	1	98.164	29.847	31.844	1.00154.78	C
ATOM	6	OG1	THR	A	1	99.441	30.481	31.998	1.00152.38	O
ATOM	7	CG2	THR	A	1	98.340	28.611	30.963	1.00151.91	C
ATOM	8	N	ALA	A	2	94.743	31.263	31.367	1.00154.81	N
ATOM	9	CA	ALA	A	2	93.322	30.934	31.571	1.00150.80	C
ATOM	10	C	ALA	A	2	92.501	31.082	30.273	1.00148.26	C
ATOM	11	O	ALA	A	2	92.767	31.971	29.463	1.00151.45	O
ATOM	12	CB	ALA	A	2	92.734	31.821	32.685	1.00148.38	C
ATOM	13	N	ALA	A	3	91.498	30.218	30.095	1.00142.85	N
ATOM	14	CA	ALA	A	3	90.699	30.205	28.864	1.00134.32	C
ATOM	15	C	ALA	A	3	89.423	31.055	28.813	1.00128.21	C
ATOM	16	O	ALA	A	3	88.671	31.175	29.787	1.00124.04	O
ATOM	17	CB	ALA	A	3	90.370	28.754	28.469	1.00130.07	C
ATOM	18	N	VAL	A	4	89.198	31.636	27.636	1.00124.11	N
ATOM	19	CA	VAL	A	4	88.044	32.478	27.359	1.00120.61	C
ATOM	20	C	VAL	A	4	86.845	31.622	26.970	1.00120.00	C
ATOM	21	O	VAL	A	4	86.993	30.470	26.557	1.00118.97	O
ATOM	22	CB	VAL	A	4	88.323	33.442	26.199	1.00120.45	C
ATOM	23	CG1	VAL	A	4	89.534	34.294	26.518	1.00122.80	C
ATOM	24	CG2	VAL	A	4	88.529	32.652	24.905	1.00113.83	C
ATOM	25	N	GLY	A	5	85.658	32.206	27.074	1.00117.41	N
ATOM	26	CA	GLY	A	5	84.449	31.482	26.745	1.00111.24	C
ATOM	27	C	GLY	A	5	83.700	31.226	28.031	1.00108.47	C
ATOM	28	O	GLY	A	5	83.811	31.998	28.983	1.00107.74	O

Fichier au format PDB



Acide aminé Thr

Le carbone alpha de coordonnées :
(x, y, z) = (97.331, 32.217, 31.789)

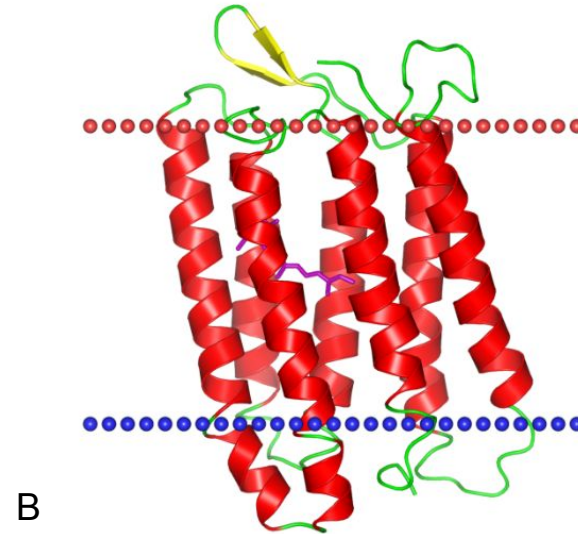
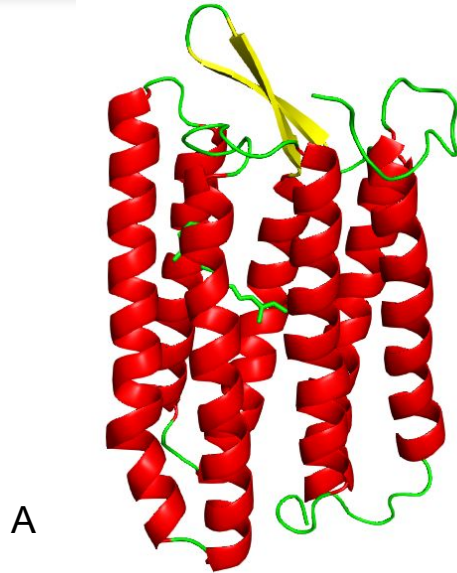
ATOM	1	N	THR	A	1	97.331	32.217	31.789	1.00155.76	N
ATOM	2	CA	THR	A	1	97.157	30.852	31.202	1.00155.75	C
ATOM	3	C	THR	A	1	95.718	30.350	31.429	1.00156.41	C
ATOM	4	O	THR	A	1	95.503	29.155	31.654	1.00157.12	O
ATOM	5	CB	THR	A	1	98.164	29.847	31.844	1.00154.78	C
ATOM	6	OG1	THR	A	1	99.441	30.481	31.998	1.00152.38	O
ATOM	7	CG2	THR	A	1	98.340	28.611	30.963	1.00151.91	C
ATOM	8	N	ALA	A	2	94.743	31.263	31.367	1.00154.81	N
ATOM	9	CA	ALA	A	2	93.322	30.934	31.571	1.00150.80	C
ATOM	10	C	ALA	A	2	92.501	31.082	30.273	1.00148.26	C
ATOM	11	O	ALA	A	2	92.767	31.971	29.463	1.00151.45	O
ATOM	12	CB	ALA	A	2	92.734	31.821	32.685	1.00148.38	C
ATOM	13	N	ALA	A	3	91.498	30.218	30.095	1.00142.85	N
ATOM	14	CA	ALA	A	3	90.699	30.205	28.864	1.00134.32	C
ATOM	15	C	ALA	A	3	89.423	31.055	28.813	1.00128.21	C
ATOM	16	O	ALA	A	3	88.671	31.175	29.787	1.00124.04	O
ATOM	17	CB	ALA	A	3	90.370	28.754	28.469	1.00130.07	C
ATOM	18	N	VAL	A	4	89.198	31.636	27.636	1.00124.11	N
ATOM	19	CA	VAL	A	4	88.044	32.478	27.359	1.00120.61	C
ATOM	20	C	VAL	A	4	86.845	31.622	26.970	1.00120.00	C
ATOM	21	O	VAL	A	4	86.993	30.470	26.557	1.00118.97	O
ATOM	22	CB	VAL	A	4	88.323	33.442	26.199	1.00120.45	C
ATOM	23	CG1	VAL	A	4	89.534	34.294	26.518	1.00122.80	C
ATOM	24	CG2	VAL	A	4	88.529	32.652	24.905	1.00113.83	C
ATOM	25	N	GLY	A	5	85.658	32.206	27.074	1.00117.41	N
ATOM	26	CA	GLY	A	5	84.449	31.482	26.745	1.00111.24	C
ATOM	27	C	GLY	A	5	83.700	31.226	28.031	1.00108.47	C
ATOM	28	O	GLY	A	5	83.811	31.998	28.983	1.00107.74	O



**Comment assigner et détecter des parties transmembranaire
d'une protéine à partir d'un fichier PDB ne contenant pas
d'informations directes sur la position de la membrane ?**

Matériels et méthodes

Objectif : Déterminer la position de la membrane plasmique et l'ajouter au fichier PDB



Titre : A) Représentation tridimensionnelle de la chaîne A de la structure crystal structure of archaerhodopsin-1 (1uaz) sur pymol avec les hélices (en rouge), brins bêta (en jaune) et boucle (en vert) B) avec la membrane plasmique représentée en points rouge et bleu sur Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database.

Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database



Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database



pymol



Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database



pymol



Bibliothèques

- biopython
- numpy
- pymol
- dssp

Programme python pour l'assignation de la membrane à une protéine

Fichier au format PDB

```
ATOM      1  N   THR A   1      97.331  32.217  31.789  1.00155.76      N
ATOM      2  CA  THR A   1      97.157  30.852  31.202  1.00155.75      C
ATOM      3  C   THR A   1      95.718  30.350  31.429  1.00156.41      C
ATOM      4  O   THR A   1      95.503  29.155  31.654  1.00157.12      O
ATOM      5  CB  THR A   1      98.164  29.847  31.844  1.00154.78      C
ATOM      6  OG1 THR A   1      99.441  30.481  31.998  1.00152.38      O
ATOM      7  CG2 THR A   1      98.340  28.611  30.963  1.00151.91      C
ATOM      8  N   ALA A   2      94.743  31.263  31.367  1.00154.81      N
ATOM      9  CA  ALA A   2      93.322  30.934  31.571  1.00150.80      C
ATOM     10  C   ALA A   2      92.501  31.082  30.273  1.00148.26      C
ATOM     11  O   ALA A   2      92.767  31.971  29.463  1.00151.45      O
ATOM     12  CB  ALA A   2      92.734  31.821  32.685  1.00148.38      C
ATOM     13  N   ALA A   3      91.498  30.218  30.095  1.00142.85      N
ATOM     14  CA  ALA A   3      90.699  30.205  28.864  1.00134.32      C
ATOM     15  C   ALA A   3      89.423  31.055  28.813  1.00128.21      C
ATOM     16  O   ALA A   3      88.671  31.175  29.787  1.00124.04      O
ATOM     17  CB  ALA A   3      90.370  28.754  28.469  1.00130.07      C
ATOM     18  N   VAL A   4      89.198  31.636  27.636  1.00124.11      N
ATOM     19  CA  VAL A   4      88.844  32.478  27.359  1.00120.61      C
```

Programme python pour l'assignation de la membrane à une protéine

Fichier au format PDB

ATOM	1	N	THR	A	1	97.331	32.217	31.789	1.00155.76	N
ATOM	2	CA	THR	A	1	97.157	30.852	31.202	1.00155.75	C
ATOM	3	C	THR	A	1	95.718	30.350	31.429	1.00156.41	C
ATOM	4	O	THR	A	1	95.503	29.155	31.654	1.00157.12	O
ATOM	5	CB	THR	A	1	98.164	29.847	31.844	1.00154.78	C
ATOM	6	OG1	THR	A	1	99.441	30.481	31.998	1.00152.38	O
ATOM	7	CG2	THR	A	1	98.340	28.611	30.963	1.00151.91	C
ATOM	8	N	ALA	A	2	94.743	31.263	31.367	1.00154.81	N
ATOM	9	CA	ALA	A	2	93.322	30.934	31.571	1.00150.80	C
ATOM	10	C	ALA	A	2	92.501	31.082	30.273	1.00148.26	C
ATOM	11	O	ALA	A	2	92.767	31.971	29.463	1.00151.45	O
ATOM	12	CB	ALA	A	2	92.734	31.821	32.685	1.00148.38	C
ATOM	13	N	ALA	A	3	91.498	30.218	30.095	1.00142.85	N
ATOM	14	CA	ALA	A	3	90.699	30.205	28.864	1.00134.32	C
ATOM	15	C	ALA	A	3	89.423	31.055	28.813	1.00128.21	C
ATOM	16	O	ALA	A	3	88.671	31.175	29.787	1.00124.04	O
ATOM	17	CB	ALA	A	3	90.370	28.754	28.469	1.00130.07	C
ATOM	18	N	VAL	A	4	89.198	31.636	27.636	1.00124.11	N
ATOM	19	CA	VAL	A	4	88.844	32.478	27.359	1.00120.61	C

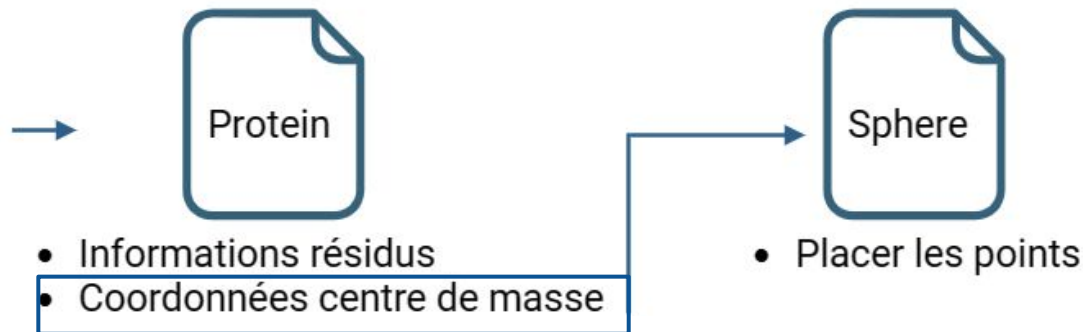


- Informations résidus
- Coordonnées centre de masse

Programme python pour l'assignation de la membrane à une protéine

Fichier au format PDB

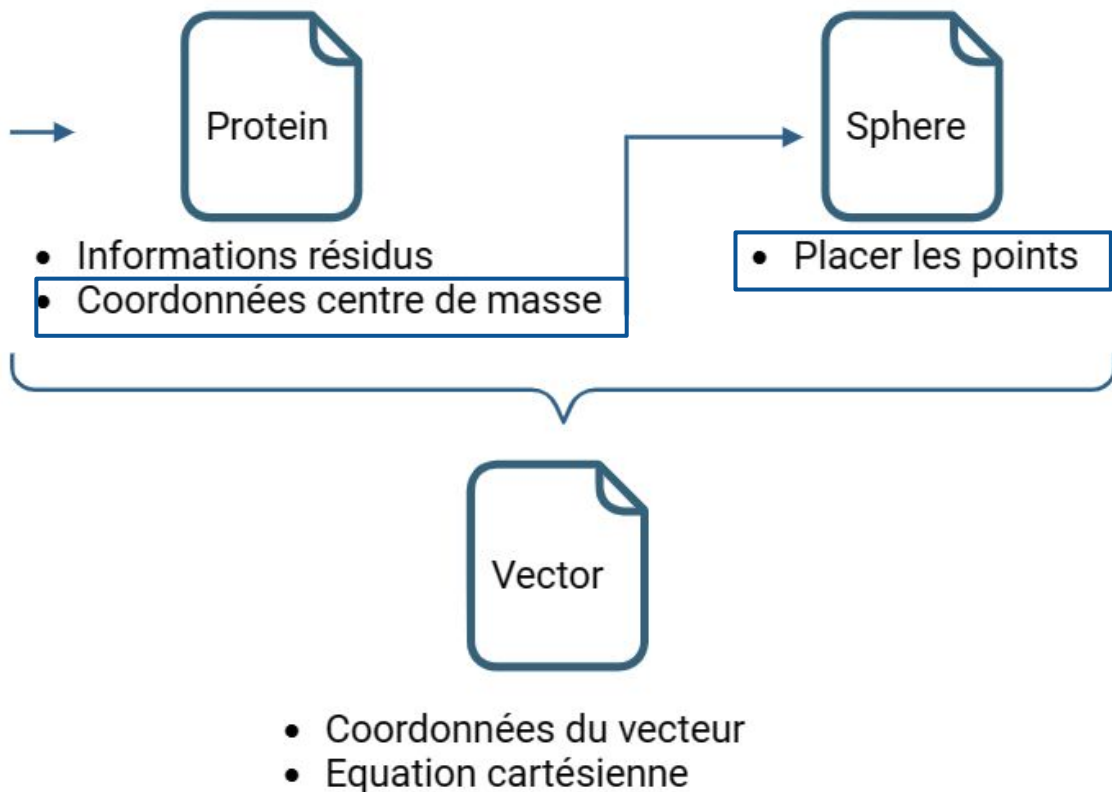
ATOM	1	N	THR	A	1	97.331	32.217	31.789	1.00155.76	N
ATOM	2	CA	THR	A	1	97.157	30.852	31.202	1.00155.75	C
ATOM	3	C	THR	A	1	95.718	30.350	31.429	1.00156.41	C
ATOM	4	O	THR	A	1	95.503	29.155	31.654	1.00157.12	O
ATOM	5	CB	THR	A	1	98.164	29.847	31.844	1.00154.78	C
ATOM	6	OG1	THR	A	1	99.441	30.481	31.998	1.00152.38	O
ATOM	7	CG2	THR	A	1	98.340	28.611	30.963	1.00151.91	C
ATOM	8	N	ALA	A	2	94.743	31.263	31.367	1.00154.81	N
ATOM	9	CA	ALA	A	2	93.322	30.934	31.571	1.00150.80	C
ATOM	10	C	ALA	A	2	92.501	31.082	30.273	1.00148.26	C
ATOM	11	O	ALA	A	2	92.767	31.971	29.463	1.00151.45	O
ATOM	12	CB	ALA	A	2	92.734	31.821	32.685	1.00148.38	C
ATOM	13	N	ALA	A	3	91.498	30.218	30.095	1.00142.85	N
ATOM	14	CA	ALA	A	3	90.699	30.205	28.864	1.00134.32	C
ATOM	15	C	ALA	A	3	89.423	31.055	28.813	1.00128.21	C
ATOM	16	O	ALA	A	3	88.671	31.175	29.787	1.00124.04	O
ATOM	17	CB	ALA	A	3	90.370	28.754	28.469	1.00130.07	C
ATOM	18	N	VAL	A	4	89.198	31.636	27.636	1.00124.11	N
ATOM	19	CA	VAL	A	4	88.844	32.478	27.359	1.00120.61	C



Programme python pour l'assignation de la membrane à une protéine

Fichier au format PDB

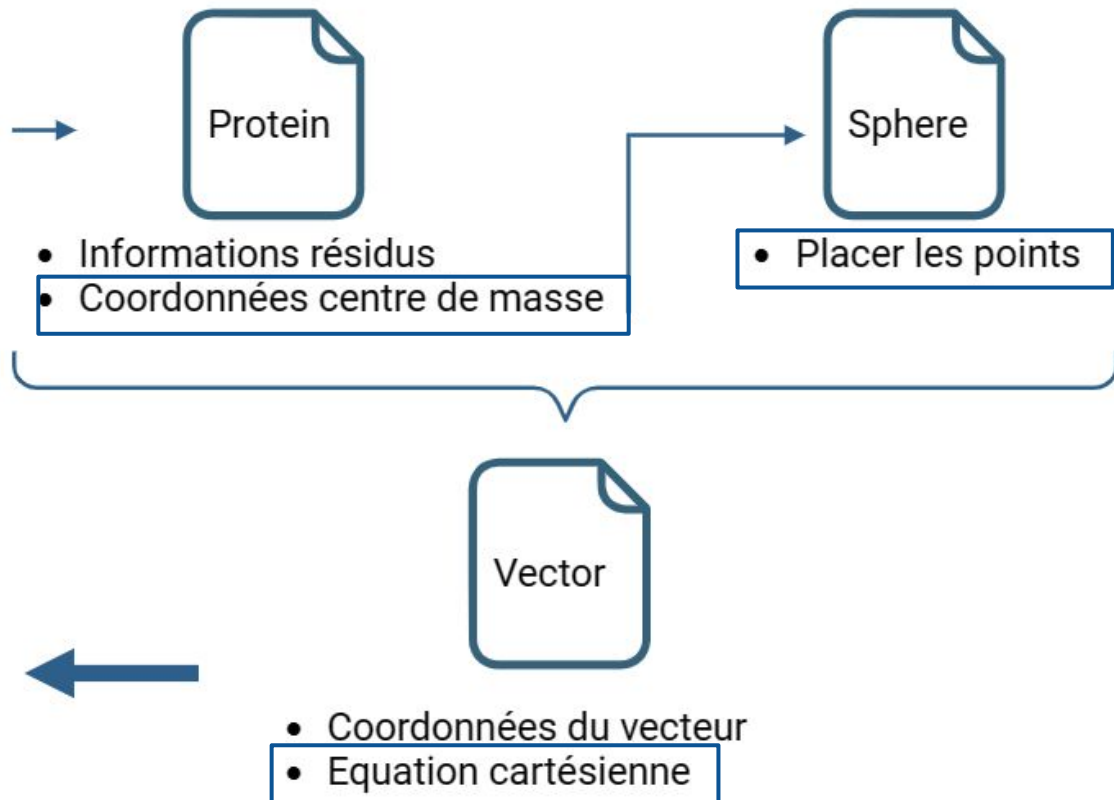
ATOM	1	N	THR	A	1	97.331	32.217	31.789	1.00155.76	N
ATOM	2	CA	THR	A	1	97.157	30.852	31.202	1.00155.75	C
ATOM	3	C	THR	A	1	95.718	30.350	31.429	1.00156.41	C
ATOM	4	O	THR	A	1	95.503	29.155	31.654	1.00157.12	O
ATOM	5	CB	THR	A	1	98.164	29.847	31.844	1.00154.78	C
ATOM	6	OG1	THR	A	1	99.441	30.481	31.998	1.00152.38	O
ATOM	7	CG2	THR	A	1	98.340	28.611	30.963	1.00151.91	C
ATOM	8	N	ALA	A	2	94.743	31.263	31.367	1.00154.81	N
ATOM	9	CA	ALA	A	2	93.322	30.934	31.571	1.00150.80	C
ATOM	10	C	ALA	A	2	92.501	31.082	30.273	1.00148.26	C
ATOM	11	O	ALA	A	2	92.767	31.971	29.463	1.00151.45	O
ATOM	12	CB	ALA	A	2	92.734	31.821	32.685	1.00148.38	C
ATOM	13	N	ALA	A	3	91.498	30.218	30.095	1.00142.85	N
ATOM	14	CA	ALA	A	3	90.699	30.205	28.864	1.00134.32	C
ATOM	15	C	ALA	A	3	89.423	31.055	28.813	1.00128.21	C
ATOM	16	O	ALA	A	3	88.671	31.175	29.787	1.00124.04	O
ATOM	17	CB	ALA	A	3	90.370	28.754	28.469	1.00130.07	C
ATOM	18	N	VAL	A	4	89.198	31.636	27.636	1.00124.11	N
ATOM	19	CA	VAL	A	4	88.844	32.478	27.359	1.00120.61	C



Programme python pour l'assignation de la membrane à une protéine

Fichier au format PDB

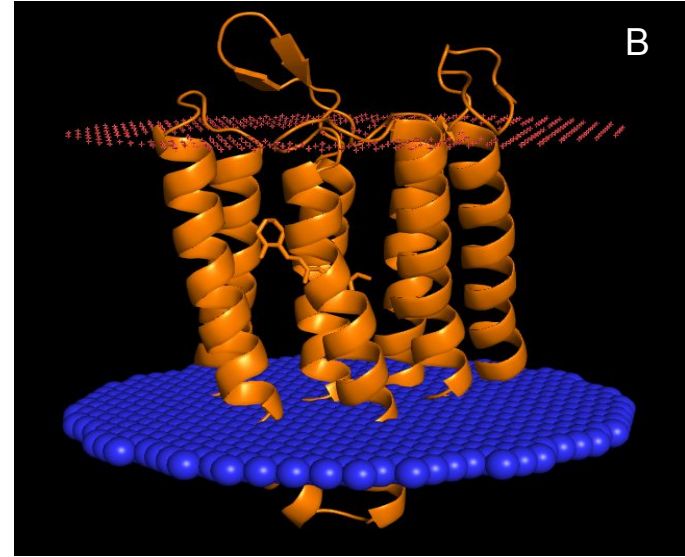
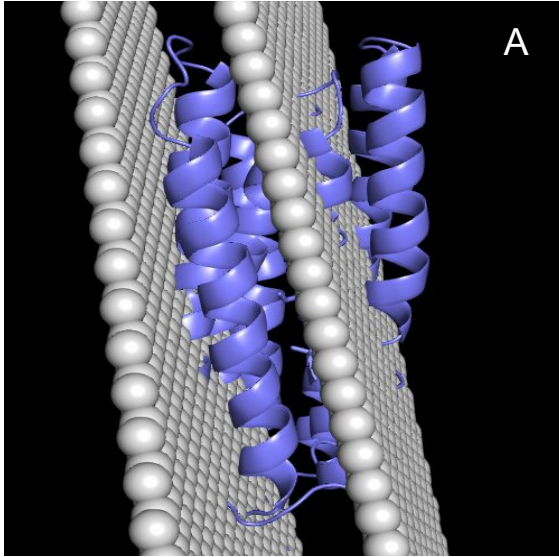
ATOM	1	N	THR	A	1	97.331	32.217	31.789	1.00155.76	N
ATOM	2	CA	THR	A	1	97.157	30.852	31.202	1.00155.75	C
ATOM	3	C	THR	A	1	95.718	30.350	31.429	1.00156.41	C
ATOM	4	O	THR	A	1	95.503	29.155	31.654	1.00157.12	O
ATOM	5	CB	THR	A	1	98.164	29.847	31.844	1.00154.78	C
ATOM	6	OG1	THR	A	1	99.441	30.481	31.998	1.00152.38	O
ATOM	7	CG2	THR	A	1	98.340	28.611	30.963	1.00151.91	C
ATOM	8	N	ALA	A	2	94.743	31.263	31.367	1.00154.81	N
ATOM	9	CA	ALA	A	2	93.322	30.934	31.571	1.00150.80	C
ATOM	10	C	ALA	A	2	92.501	31.082	30.273	1.00148.26	C
ATOM	11	O	ALA	A	2	92.767	31.971	29.463	1.00151.45	O
ATOM	12	CB	ALA	A	2	92.734	31.821	32.685	1.00148.38	C
ATOM	13	N	ALA	A	3	91.498	30.218	30.095	1.00142.85	N
ATOM	14	CA	ALA	A	3	90.699	30.205	28.864	1.00134.32	C
ATOM	15	C	ALA	A	3	89.423	31.055	28.813	1.00128.21	C
ATOM	16	O	ALA	A	3	88.671	31.175	29.787	1.00124.04	O
ATOM	17	CB	ALA	A	3	90.370	28.754	28.469	1.00130.07	C
ATOM	18	N	VAL	A	4	89.198	31.636	27.636	1.00124.11	N
ATOM	19	CA	VAL	A	4	88.844	32.478	27.359	1.00120.61	C



- Meilleure hydrophobicité
- Ajout au fichier PDB

Résultats

Comparaison des résultats



Titre : A) Représentation tridimensionnelle de la chaîne A de la structure structure crystal structure of archaerhodopsin-1 (en violet) avec la membrane plasmique (en blanc) B) Représentation attendu avec la protéine (en orange) et la membrane plasmique (en rouge et bleu) sur pymol.

Conclusion

Assignment et la détection de la membrane à partir d'un fichier PDB

Position de la membrane pas optimal

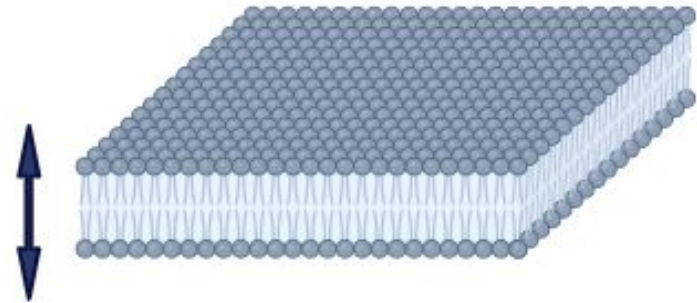
Assignment et la détection de la membrane à partir d'un fichier PDB

Position de la membrane pas optimal

Amélioration possible :

Epaisseur de la membrane

Equations cartésiennes



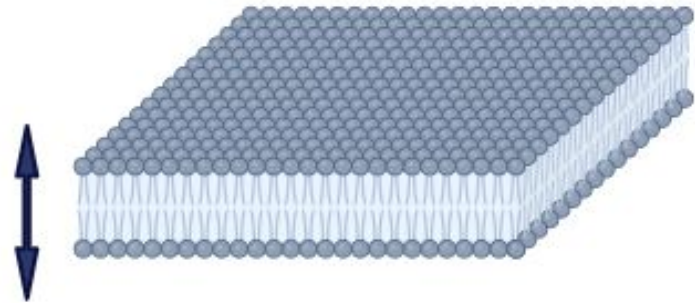
Assignment et la détection de la membrane à partir d'un fichier PDB

Position de la membrane pas optimal

Amélioration possible :

Epaisseur de la membrane

Equations cartésiennes



Déterminer les résidus de la protéine présent dans la membrane

Merci pour votre attention