

Sujet : *Protein Interactions Calculator* implémentation.

Objectif: *Protein Interactions Calculator* (PIC; <http://pic.mbu.iisc.ernet.in>) est un serveur web particulièrement intéressant qui permet le calcul des différents types d'interactions importantes pour la structure protéique : les liaisons disulfure, les interactions hydrophobes, les interactions ioniques, les liaisons hydrogènes, les interactions aromatiques-aromatiques, les interactions aromatiques-soufre et les interactions cation- π (Tina *et al*, *Nucleic Acid Res*, 2007). Il a aussi d'autres propriétés mais cela est en dehors de ce projet.

Le projet est de ré-implémenter ces calculs à partir d'une structure correcte (pas de problème spécifique à gérer), et générer une sortie similaire (et utilisable localement) mettant en avant les interactions entre atomes / résidus.

Contacts : Alexandre de Brevern (alexandre.debrevern@univ-paris-diderot.fr),

Aline Floch (aline.floch@efs.sante.fr) &

Jean-Christophe Gelly (jean-christophe.gelly@univ-paris-diderot.fr).

Référence: □K. G. Tina, R. Bhadra and N. Srinivasan, PIC: Protein Interactions Calculator, *Nucleic Acids Research*, 2007, Vol. 35, Web Server issue W473–W476.