

**Sujet: Calcul de la surface accessible au solvant d'une protéine**

Objectif : Réalisez un programme permettant de calculer la surface accessible au solvant (absolue et relative) à partir des coordonnées d'une protéine issue d'un fichier PDB.

Etapes :

- Extraction des coordonnées de chaque atome
- A partir de chaque atome contenu caractérisant la protéine, créez un nuage de points uniformément sur la surface d'une sphère centrée sur l'atome. La sphère aura pour valeur de rayon le rayon de Van der Waals de l'atome + rayon de la sonde (solvant = rayon d'un atome d'oxygène) (l'algorithme de Saff et Kuijlaars pourra être utilisé).
- A partir de chaque point de la sphère recherchez s'il existe un point appartenant à une autre sphère à une distance inférieure au rayon de la sonde
- A partir des points sans contact, calculez la surface accessible totale en terme de points puis la convertir en  $\text{\AA}^2$  de chaque résidu de la protéine. Calculez ensuite la surface accessible relative, et enfin le pourcentage d'accessibilité au solvant.
- Comparez et évaluez la méthode par rapport à NACCESS

Shrake, A; Rupley, JA. (1973). "Environment and exposure to solvent of protein atoms. Lysozyme and insulin". *J Mol Biol* **79** (2): 351–71. doi: [10.1016/0022-2836\(73\)90011-9](https://doi.org/10.1016/0022-2836(73)90011-9).

Contacts :

Tatiana Galochkina ([tatiana.galochkina@u-paris.fr](mailto:tatiana.galochkina@u-paris.fr))

Jean-Christophe Gelly ([jean-christophe.gelly@u-paris.fr](mailto:jean-christophe.gelly@u-paris.fr))

)