

**Identification de l'expérience**

date début-fin 14-15 septembre 2002

n° proposition **30-01-556**nom du laboratoire ou nom du responsable du projet **BAG-L.E.B.S.**

nom des utilisateurs présents

Sylvie Nessler, Vincent Chaptal, Herman Van Tilbeurgh, LEBS-CNRS, 1 Av. de la Terrasse, Gif sur Yvette, France

nom du local contact **Jean-Luc Ferrer****Temps de faisceau**

mode / intensité

temps alloué 3 shift

temps utilisé 3 shift

**Statistique d'utilisation**MAD oui [X] seuil: non [ x ]  $\lambda = 0,97981$ 

cryo oui [ x ] non [ ]

**Rapport d'expérience et commentaires**

Vincent Chaptal, Sylvie Nessler (1 shift): **Etude structurale d'un complexe entre l'HPr kinase et sa protéine substrat en présence d'un effecteur allostérique, le fructose 1, 6-bisphosphate (FBP)**

En 2001 nous avons résolu la structure d'une Ser/Thr kinase bactérienne d'un nouveau type : l'HPr kinase (Fieulaine et al., EMBO J., vol. 20, pp. 3917-3927). Elle appartient à la famille structurale des protéines à boucle phosphate, ou P-loop. En 2002 nous avons résolu la structure du complexe entre la kinase et sa protéine substrat HPr (Fieulaine et al., PNAS, vol. 99, pp. 13437-13441). Ceci nous a permis de proposer un mécanisme catalytique.

Lors de cette dernière expérience, nous avons enregistré deux nouveaux jeux de données à 3.8Å et 3.4Å de résolution respectivement sur des cristaux de complexe entre HPr kinase et sa protéine substrat en présence d'un effecteur allostérique, le fructose 1, 6-bisphosphate (FBP). Les cristaux appartiennent au groupe d'espace C2221, avec des paramètres de maille a=166 Å, b=274 Å, c=150Å, et l'unité asymétrique contient 3 trimères de complexe, soit 18 chaînes

polypeptidiques. Une solution a été obtenue par remplacement moléculaire et le modèle est en cours d'affinement. Suite à la fixation du FBP, on observe un réarrangement de la structure quaternaire de l'enzyme. Nous espérons donc pouvoir publier ces résultats sur le site de fixation et le mode d'action de cet effecteur allostérique.

#### Herman Van Tilbeurgh (2 shifts): **Yeast structural genomics project**

We have used 2 shifts on FIP on 14-15<sup>th</sup> September 2002 and 6 shifts on 8-10<sup>th</sup> November 2002 for collecting MAD data sets on different yeast structural genomics projects (Sophie Quevillon-Cheruel et al. A structural-genomics initiative on yeast proteins. *Accepted in J of Synchr radiation*) and few native data sets on other projects. More details on every orf of yeast structural genomics projects can be found on <http://genomics.eu.org/targets.html>. All the statistics from data collection, reduction and scaling for the use of FIP beam time are grouped together in the next experimental report of the 8-12<sup>th</sup> November 2002.