



Titre de l'expérience :

Résolution de la structure 3D de la sous-unité α de la sulfite reductase de *E coli*

Numéro de l'expérience :
LS-766

Beamline:

BM2 / D2AM

Date de l'expérience:

du :09 septembre 97

au : 10 septembre 97

Date du rapport:

09/10/97

Shifts:

3

Local contact(s):

Jean-Luc Ferrer

Rep par le CRG D2AM:

20120157

Nom et adresse du responsable de projet : **FERRER Jean-luc**

Institut de Biologie Structurale Jean Pierre Ebel

Laboratoire de Cristallographie et Cristallogénèse des Protéines Phone: 76-88-59- 10

4 1, avenue des martyrs

Fax: 76-88-5 1-22

38027 **GRENOBLE Cedex 1**

email: ferrer@lccp.ibs.fr

Noms et adresses des utilisateurs :

Fontecilla-Camps Juan-Carlos

Phone: 76-88-59-20 email juan@lccp.ibs.fr

Pignol David

Phone: 76-88-59-04 email: david@lccp.ibs.fr

Gruez Arnaud

Phone: 76-88-96-01 email: arnaud@lccp.ibs.fr

1- contexte scientifique du projet:

La white reductase (SIR) de *E. coli* est une enzyme soluble polymérique complexe de structure $\alpha_8\beta_4$ (780 kDa. de masse moléculaire) qui participe à la chaîne de réactions nécessaire à l'assimilation du sulfate par la cellule. Nous nous intéressons plus particulièrement à l'étude de SIR-FP (sous-unité α) fixant à la fois un FMN et un FAD. SiR-FP est une protéine octamérique de haut poids moléculaire. Pour l'étude cristallographique un monomère a été produit par biologie moléculaire, ainsi que le monomère séléné (7 sélénométhionines par monomère).

2- enregistrements de données sur D2AM

Une collecte mad à 3\AA de résolution a été enregistrée à température cryogénique au seuil du sélénium à 4 longueurs d'onde: ($\lambda_1=0,980957, \lambda_2=0,979764, \lambda_3=0,979671, \lambda_4=0,977498$). La protéine cristallise dans le groupe d'espace P222 ou P2221, avec $a=98,8, b=125,4, c=172,8$.

	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
complétude (%)	71,7	72,1	72,0	72,1
Rsym (%)	8,1	7,5	8,1	7,9
Rano (%)	6,3	7,5	8,0	7,3
multiplicité (%)	2,6	2,6	2,6	2,6
I/σI	7,2	7,6	7,3	7,4

Les équations Mad ont été résolues avec le programme nYn. Le jeu de Fa a ensuite été utilisé dans le calcul de la fonction de Patterson. La déconvolution de la fonction de Patterson (programme SHELX) a permis de localiser les 21 sites potentiels correspondant aux atomes de sélénium dans l'unité asymétrique. La position des sélénium a été affinée et un premier jeu de phase a été obtenu ($\langle FOM \rangle \sim 0.4$). À ce stade, les cartes de densité électronique ne sont pas interprétables.