

TP n °3. bio-informatique structurale Proteine data bank (PDB).

1-L'intérêt de Bioinformatique:

- Modélisation des activités biologique
- Formaliser des problèmes de biologie moléculaire;
- Concevoir des solutions computationnelles à la portée des machines,
- Développer et valider des outils;
- Analyser, structurer, comparer, traiter les information biologiques
- Stocker, accéder, filtrer ces informations. Prédire des résultats biologiques; etc.

2- Base de données PDB:

Le format PDB (Protein Data Bank) est une norme pour les fichiers contenant des **coordonnées atomiques**. Les structures déposées dans la Protein Data Bank du RCSB (Research Collaboratory for Structural Bioinformatics) sont écrites dans ce format standardisé. La spécification complète du fichier PDB fournit une multitude d'informations, notamment les auteurs, les références bibliographiques et l'identification des sous-structures telles que les ponts disulfure, les hélices et **les sites actifs**.

2- Notions de base en biologie

Les enzymes :

Les enzymes sont des protéines dont le rôle est de catalyser les réactions chimiques du vivant

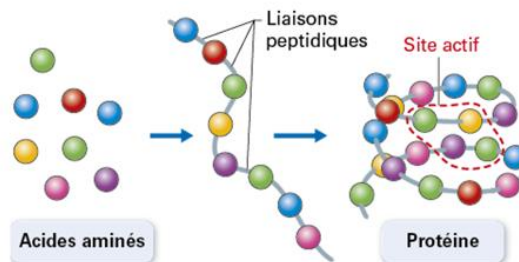


Fig.1. Formation du protéine

Les protéines :

Elles sont formées d'une ou de plusieurs chaînes polypeptidiques. Chacune de ces chaînes est constituée de l'enchaînement de résidus d'acides aminés liés entre eux par des liaisons peptidiques.

Le substrat :

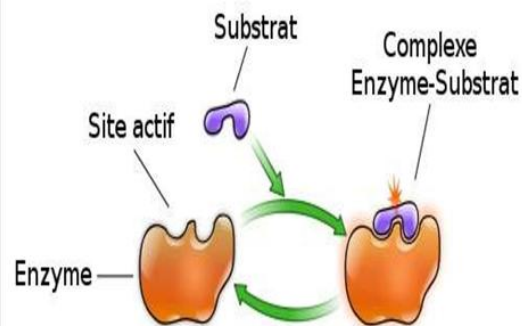
La molécule ou famille de molécules subissant spécifiquement la catalyse enzymatique par fixation dans le site actif .

Le site actif :

Désigne en catalyse la partie du catalyseur qui va interagir avec le(s) substrat(s) pour former le(s) produit(s). Cette notion concerne tous les types de catalyseurs, mais on l'associe généralement aux enzymes.

Le site de fixation ;

composé des acides aminés qui vont capté le substrat pour le faire entrer dans le site catalytique ou la réaction va se dérouler



3- Le But :

Le but de TP est l'étude de la structure de macromolécules biologiques, identifier le site actif, Utilisation de logiciel de visualisation.

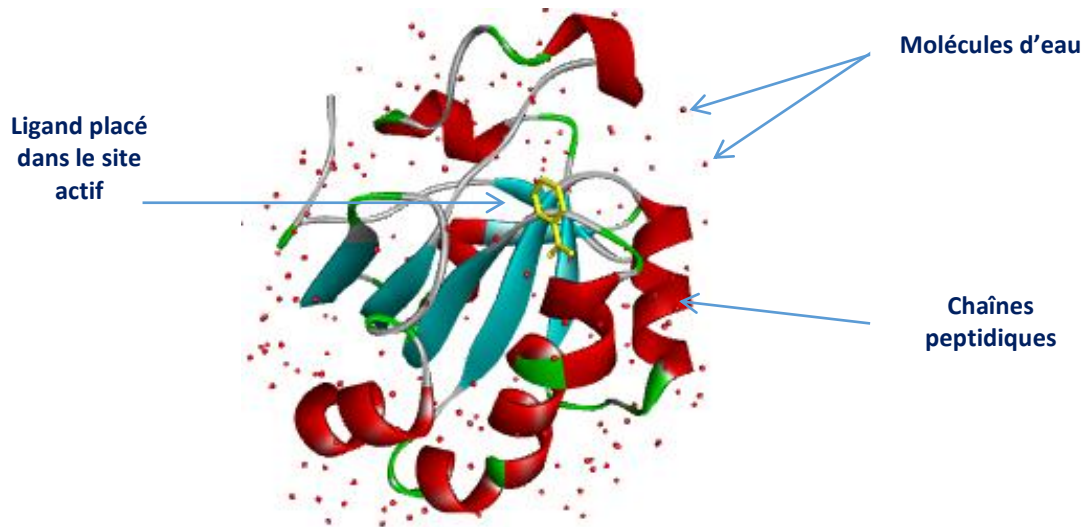
4-Application:

Allez sur le site de la PDB <https://www.rcsb.org/> . Lors de la recherche de votre protéine, privilégiez une protéine complexée avec un ligand, exemple **PDB ID: 1HD2**.

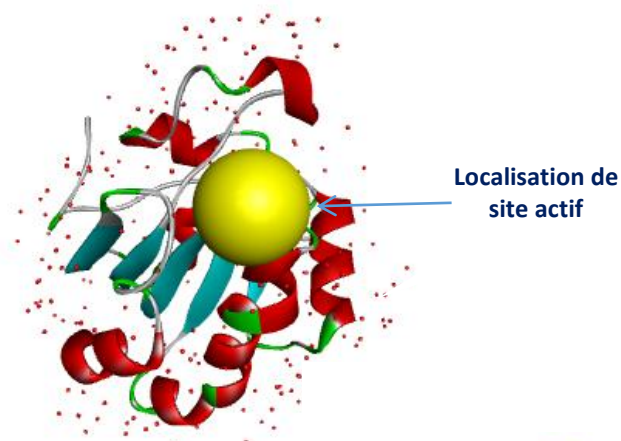
1- Comment cette structure a -t-elle été résolue?

2- Donner la référence et les paramètres liée a cet protéine?

- Télécharger la structure en format PDB. Lancez Biovia discovery et ouvrir le fichier.



- A partir de la protéine visualisée, vous pouvez cibler le site actif où ce ligand est positionné.



3- Quel sont les coordonnées (x,y,z) du site actif?

4- Visualiser les interactions de protéine avec le ligand et mettez dans un tableau les acides aminés inclus et le type d'interactions.

