

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République algérienne démocratique et populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
جامعة عين تموشنت بلحاج بوشعيب
Université –Ain Temouchent- Belhadj Bouchaib
Faculté des Sciences et de la technologie
Département de sciences de la Matière



Projet de Fin d'Etudes
Pour l'obtention du diplôme de Master
Filière : Chimie
Spécialité : Chimie Macromoléculaire

ANALYSE DE L'INTERACTION RIBONUCLÉASE- ANTIIBIOTIQUES PAR MODÉLISATION MOLÉCULAIRE

Présenté Par :

1/ BOUACHA IMADEDINE
2/ DJILALI BELOUFA REDA

M2 Nom du département
Sciences de la Matière

Devant le jury composé de :

Mme Z.BAILICHE	MCA	U.Ain Témouchent	Présidente
Mme A.BERRICHI	MCA	U.Ain Témouchent	Examinatrice
Mr H.AYACHI	MCB	U.Ain Témouchent	Encadrant

Année Universitaire 2022/2023

Résumé

La connaissance des enzymes est capitale, car ce sont elles qui catalysent la plupart des réactions chimiques des organismes vivants. L'altération des enzymes par des inhibiteurs spécifiques permet de bloquer les voies biochimiques, Seul un site particulier de la protéine enzymatique entre en contact avec son substrat : c'est le site actif, celui-ci est encore divisible en deux régions particulières. Le site de fixation permet à l'enzyme de « s'accrocher » à la molécule, et de positionner cette dernière de façon optimale, tandis que le site catalytique déclenche le processus réactionnel.

Notre travail consiste à une étude d'interaction moléculaire entre la 2BNH et les substrats, Les différents outils de la modélisation moléculaire sont utilisés pour mener à bien ce travail (mécanique moléculaire, dynamique moléculaire et docking moléculaire) ou le docking permet de prévoir comment une petite molécule (drogue) peut se lier à un récepteur (protéine) dont la structure 3D est connue.

Mots clés : interaction E-S, conformations, modélisation moléculaire.

Abstract

The knowledge of the enzymes is capital, because it is catalyze the majority of the chemical reactions of the living organisms. The deterioration of the enzymes by specific inhibitors makes it possible to block the biochemical ways, only a particular site of enzymatic protein comes into contact with its substrate: it is the active site; this one is still divisible in two particular areas. The site can fixing; it possible the enzyme "to cling" to the molecule, and to position the latter in an optimal way, while the catalytic site starts the reactional process.

Our work consists with a study of molecular interaction between 2BNH and the substrates, the various molecular numerical models are used to conclude this work (mechanical molecular, dynamic molecular and docking molecular) or the docking makes it possible to envisage how a small molecule (drug) can bind to a receiver (protein) of which the structure 3D is know

Keywords : interaction (enzyme-substrate), conformations, molecular modeling

ملخص:

إن المعرفة المعمقة للإنزيمات مهمة لأنها المسؤولة عن تحفيز أغلب التفاعلات الكيميائية في الأنظمة الحية. تثبيط هذه الإنزيمات بواسطة مثبطات خاصة تسمح بكبح وعرقلة المسارات بيوكيميائية، فقط جزء خاص من البروتين يدخل في الاتصال مع المادة المعرقللة (جزء نشيط) في هذا العمل نهتم بدراسة التفاعل الجزيئي بين أنزيم ريبونوكليز وبعض الكواح باستعمال وسائل النمذجة الجزيئية (الميكانيكا الجزيئية، و الديناميك الجزيئية والالتحام الجزيئي)

كلمات مفتاحية : التفاعل الجزيئي، بنية، النمذجة الجزيئي.