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 de Ain Temouchent Belhadj Bouchaib
Faculté des Sciences et de Technologie
Département de Biologie

Projet de Fin d'Etudes
Pour l'obtention du diplôme de Master en: Biochimie
Domaine : Sciences de la Nature et de la Vie
Filière : Sciences Biologiques
Spécialité : Biochimie
Thème

Analyse *in silico* de Kappa-carraghénase de *Clostridium puniceum*

Présenté Par :
1) Mlle.ACHIR Safaa
2) Mlle.BEKHALED Roumayssa

Devant le jury composé de :
Dr.BENHABIB Ouassila MCA UAT.B.B (Ain Temouchent) Président
Dr.ABI-AYAD Meryem MCB UAT .B.B (Ain Temouchent) Examinateur
Dr.BAKLI Mahfoud MCA UAT.B.B (Ain Temouchent) Encadrant

Année Universitaire 2022/2023

Résumé

Les κ-carraghénases (EC 3.2.1.83) sont des membres de la famille des glycosides hydrolases 16 (GH16), qui peuvent produire des galactanes sulfatés appelées κ-carraghénanes par hydrolysivité sélective du κ-carraghénane, une macromolécule largement utilisée dans diverses industries. Ces enzymes ne sont produites que par des espèces bactériennes marines et sont utilisées dans diverses applications à savoir les domaines biomédicales et physiologique, l'industrie textile…etc. Dans cette étude, des analyses physico-chimiques, une analyse de la structure secondaire, des propriétés structuraless, y compris la modélisation par l'homologie, le raffinement et la validation de la qualité du modèle, ainsi que les analyses fonctionnelles de la kappa-carraghénase de *Clostridium puniceum* ont été effectuées à l'aide de divers outils de bioinformatique. La κ-carraghénase a été trouvée thermostable et de nature acide. La prédiction des interactions protéine-protéine a identifié deux partenaires fonctionnels potentiels. Cette analyse *in silico* fournit pour la première fois des informations sur les propriétés fondamentales de la kappa-carraghénase prédite de *C. puniceum*, ce qui pourrait être utile dans l'explication de ses applications ainsi que dans les études d'expression et de caractérisation ultérieures.

Mots clés : κ-carraghénane, glycosides hydrolases, κ-carraghénase, *Clostridium puniceum*, analyse *in silico.*

Abstract

The κ-carrageenans (EC 3.2.1.83) are members of the family of glycosides hydrolases 16 (GH16), which can produce sulphated galactans called κ-carrageenans by selective hydrolysis of κ-carrageenan, a macromolecule widely used in various industries. These enzymes are produced only by marine bacterial species and are used in a variety of applications including biomedical and physiological fields, the textile industry… etc. In this study, physico-chemical analyses, analysis of secondary structure, structural properties, including homology modelling, refinement and validation of model quality, and functional analyses of kappa-carrageenase from *Clostridium puniceum* were carried out using various bioinformatic tools. The K-carrageenase was found to be thermostable and acidic in nature. The prediction of protein-protein interactions identified two potential functional partners.. This *in silico* analysis provides for the first time information on the fundamental properties of the predicted kappa-carrageenase of *C. puniceum*, what might be useful in explaining its applications as well as in subsequent expression and characterization studies.

Keywords : κ-carrageenans, glycosides hydrolases, κ-carrageenanse, *Clostridium puniceum, in silico* analysis.

ملخص:

كابا-كاراجيناز (EC 3.2.1.83) هم أعضاء في عائلة الهيدرولاز غليكوسيدات 16 (GH16)، والتي يمكن أن تنتج الجلاكتان الكبريتي المسمى كابا-كاراجينان عن طريق التحلل المائي الانتقائي لـ كابا-كاراجينان، وهو جزيء كبير يستخدم على نطاق واسع في صناعات مختلفة. يتم إنتاج هذه الإنزيمات فقط من قبل الأنواع البكتيرية البحرية وتستخدم في مجموعة متنوعة من التطبيقات بما في ذلك المجالات الطبية الحيوية والفيزيولوجية، وصناعة النسيج... وما إلى ذلك. في هذه الدراسة، تم إجراء التحليلات الفيزيائية-الكيميائية، وتحليل البنية الثانوية، والخصائص الهيكلية، بما في ذلك النمذجة المتماثلة، وصقل جودة النموذج والتحقق من صحتها، والتحليلات الوظيفية لـكابا-كاراجيناز من البكتيريا*Clostridium puniceum* باستخدام أدوات معلوماتية حيوية مختلفة .الكابا-كارجيناز وجدت أنها مستقرة حراريا وحمضية في طبيعتها. حدد التنبؤ بتفاعلات البروتين والبروتين شريكين وظيفيين محتملين. يوفر هذا في تحليل*in silico* لأول مرة معلومات عن الخصائص الأساسية لـكابا-كاراجيناز المتوقعة لـ*C. puniceum*، وما قد يكون مفيدًا في شرح تطبيقاته وكذلك في دراسات التعبير والتوصيف اللاحقة.

الكلمات المفتاحية : كابا-كاراجينان ، الهيدرولاز غليكوسيدات، كا با-كارجيناز ، *Clostridium puniceum*، تحليل *in silico* .