

TP 2 : Alignement et initiation à la modélisation moléculaire

1) Blast comme outils d'alignement des séquences :

BLAST (acronyme de basic local alignment search tool) est une méthode de recherche utilisée en bioinformatique. Il permet de trouver les régions similaires entre deux ou plusieurs séquences de nucléotides ou d'acides aminés, et de réaliser un alignement de ces régions homologues.

Étant donné une séquence introduite par l'utilisateur, BLAST permet de retrouver rapidement dans des bases de données, les séquences répertoriées ayant des zones de similitude avec la séquence d'entrée¹. Cette méthode est utilisée pour trouver des relations fonctionnelles ou évolutives entre les séquences et peut aider à identifier les membres d'une même famille de gènes.

Il existe 5 types de BLAST (blastn, blastp, blastx, tblastn, tblastx) Pour comparer la séquence nucléotidique avec les séquences nucléotidiques de la base de données genbank on utilise le Blastn (Nucleotide BLAST)

2) Initiation à la modélisation moléculaire :

La modélisation moléculaire consiste à construire des modèles des molécules ou d'ensemble de molécules, dans le but de mieux en comprendre la structure et les autres propriétés physico-chimiques. Du point de vue du chimiste, une molécule est un assemblage d'atomes liés entre eux par les liaisons chimiques.

Activité 1 :

- Lancer une recherche de BLAST sur le moteur de recherche Google, cliquer sur le premier résultat c'est-à-dire le lien vers le site web de Blast.
- Choisir le Nucléotide Blast.
- Entrer la séquence requête ou query (l'enzyme tyrosinase) dans la case appropriée et cliquer sur le bouton BLAST et attendre le résultat de recherche.

- Qu'observez-vous dans la page du résultat de la comparaison (les détails de l'alignement) ? C'est quoi la E-value ? et le graphic summary ?
- Faire l'alignement de la protéine insuline, à partir de sa séquence sur Swissprot et en utilisant BLAST P, Quelles étapes devez-vous suivre et quel est le résultat obtenu ?

Activité 2:

- Ouvrir le logiciel Chemdraw (Ou chemsketch)
- Puis, en explorant les outils proposés par son interface, dessiner les molécules suivantes : le phénol, hydroxyquinol et l'acide salicylique.
- Quelles sont les applications de la modélisation moléculaire dans le domaine de la bioinformatique ?

NB : La **E-value** est une valeur comprise entre 0 et 1 qui nous renseigne si la similitude est due au hasard ou non ; sachant qu'une E-value proche de 0 est synonyme d'un alignement de bonne qualité. On distingue :

- ✓ E-value ≈ 0 ; quand le score est élevé.
- ✓ E-value ≈ 1 ; quand le score est bas.