Protocole « coup de pouce »

C'est un protocole possible mais d'autres sont envisageables et judicieux !

Penser à prendre des captures d'écran judicieuses au fur et à mesure de votre travail !

- 1. Ouvrir Libmol, puis cliquer sur le nuage dans *« Charger un fichier local »* pour ouvrir le fichier correspondant au **récepteur CB1 avec anandamide**
- Dans la fenêtre « Séquence » sélectionner uniquement la chaîne X qui correspond au récepteur CB1 et l'afficher en « boules et bâtonnets » et en bleu.
- 3. Toujours dans la fenêtre *« Séquence »* sélectionner uniquement la chaîne Y qui correspond au ligand et l'afficher en « sphères » et en vert.
- Faire pivoter la molécule et éventuellement obtenir une vue en coupe en utilisant la commande *« Position du plan de coupe avant »* disponible dans la commande *« Réglages »* en haut à droite de l'écran.
- 5. Dans la fenêtre « Séquence » sélectionner la chaîne X puis la masquer avec la commande « Masquer/montrer ». Dans la fenêtre « Interactions » sélectionner la chaîne X dans le premier menu déroulant puis la chaîne Y dans le second puis cliquer sur « Créer une nouvelle représentation » pour afficher uniquement les acides aminés du récepteur en contact avec le ligand (et les liaisons impliquées).
- 6. Le menu « Réglages » qui apparaît en bas à coté de « Interactions avec la chaîne X » dans Liste des représentations, vous permet de représenter / colorer différemment les acides aminés du site de liaison (la cible) et de choisir la quantité d'acides aminés à afficher en fonction de la distance au ligand (distance à la cible)
- 7. En cliquant sur *« Interactions avec la chaîne X »* en bas dans Liste des représentations vous pouvez obtenir le nom des acides aminés en contact hydrophobe ou établissant une liaison hydrogène avec le ligand. Les noter.
- 8. Ouvrir un nouvel onglet Libmol et procéder de même avec le fichier correspondant au **récepteur CB1 avec THC**
- Identifier les 3 acides aminés du site de liaison qui établissent des contacts avec les <u>deux</u> ligands pour les afficher/colorer différemment dans les deux molécules.

Attention il faut au préalable démasquer la chaîne correspondant au récepteur (dans la fenêtre **« Séquences »**.

Puis rechercher et sélectionner les acides aminés communs dans la fenêtre *« Séquences »*OU utiliser la fonction recherche de la fenêtre *« Commandes »* (la loupe à côté de Sélectionner) et taper le numéro de l'acide aminé suivi de son code à trois lettres (ex : *76LYS*). Les afficher/colorer différemment. Bien repérer leur nom en les survolant avec la souris pour pouvoir les légender.