

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**, Dans la fenêtre de recherche LibMol, taper « AchBP » et ouvrir le fichier suivant:

- *2XZ5 Complexe entre l'acétylcholine et un récepteur à acétylcholine : l'AchBP mutée*
2. Dans la fenêtre « **Commandes** », Colorer par « **Chaînes** » pour observer les 5 chaînes du récepteur
3. Dans la fenêtre « **Séquence** », rechercher tout en bas de la séquence de chaque chaîne les 2 résidus apparaissant en rouge et nommés **ACH**, ils correspondent au ligand : l'acétylcholine. Les sélectionner, puis les colorer /afficher différemment.
4. Pour observer l'interaction entre le ligand et le récepteur vous pouvez utiliser comme précédemment la fonctionnalité « **Plan de coupe** » dans le menu « **Réglages** » en haut à droite de l'écran et /ou la fonctionnalité « **Créer une nouvelle représentation** » dans la fenêtre « **Interactions** »

Pour mesurer la distance entre les atomes **d'oxygène du tryptophane 145** et le **soufre de la cystéine 188** du site de liaison, en présence du ligand endogène, il faut d'abord repérer les deux acides aminés impliqués. Les rechercher et les sélectionner dans la fenêtre « **Séquences** » puis repérer les atomes en survolant l'image avec la souris. Il est conseillé de masquer la totalité de la molécule sauf les acides aminés impliqués.

5. Enfin, utiliser la commande « **Mesures** » en haut à gauche de l'écran, puis l'onglet « Distances », activer la mesure de distances et cliquer sur les 2 atomes concernés. La mesure de distance s'affiche sur l'écran et dans la fenêtre mesure en nm. Vous pouvez réaliser la mesure sur plusieurs des 5 chaînes du récepteur pour plus de fiabilité.
6. Procéder de même avec le fichier : *Complexe entre un curare (d-tubo-curarine) et un récepteur à acétylcholine : l'AchBP mutée*