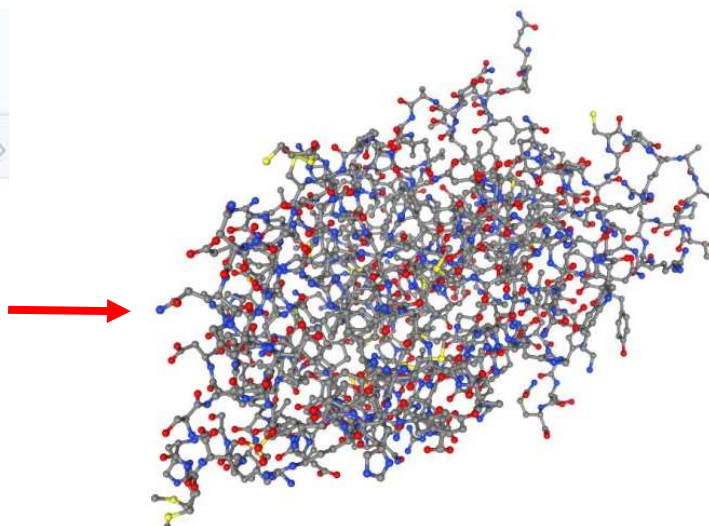
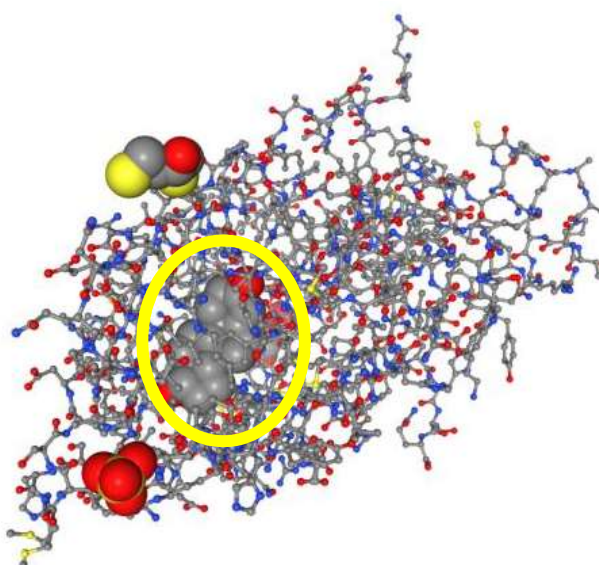
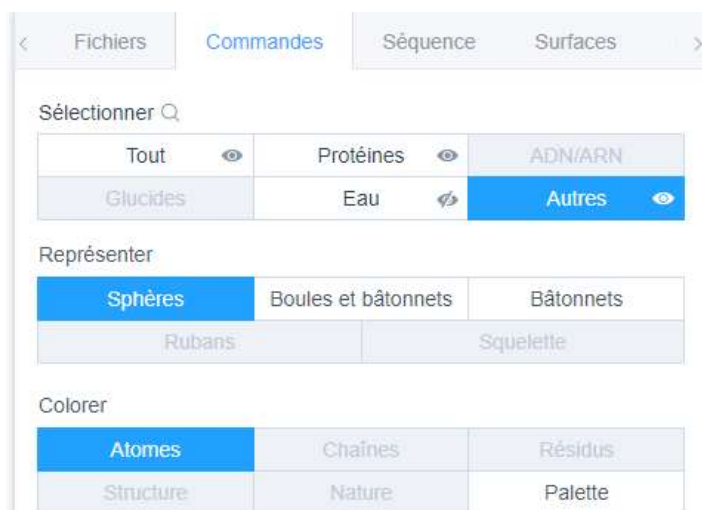


Tuto Libmol Récepteur testostérone (2am9)

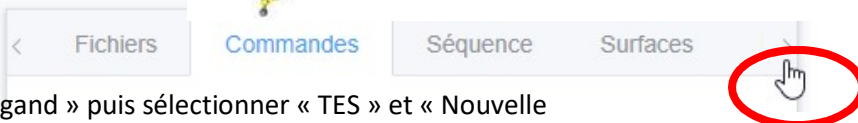
Ouvrir le fichier 2am9 dans Libmol dans le champ de recherche « Protein Data Bank ».



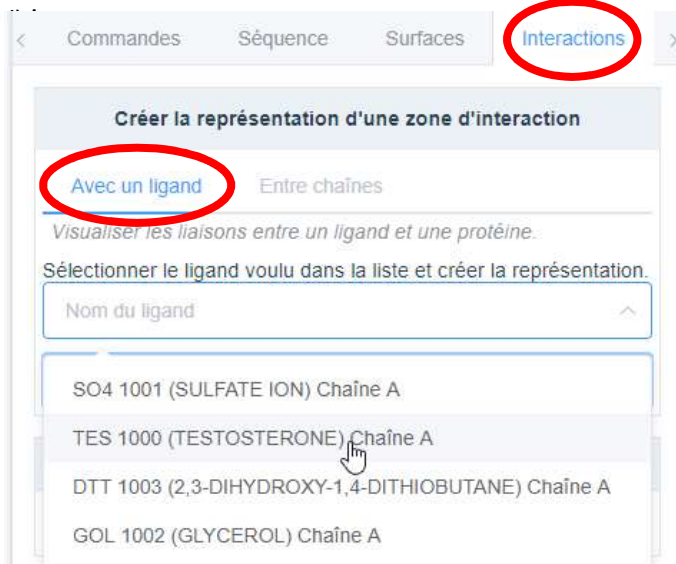
Dans l'onglet « Commandes », sélectionner les « autres » molécules que le récepteur (protéine) pour isoler la testostérone, cliquer sur « Sphère ». Elle apparaît avec d'autres molécules que l'on va rendre plus discrètes par la suite pour plus de clarté.



Déplier les autres onglets sur le côté :



Cliquer sur « Interactions » « avec un ligand » puis sélectionner « TES » et « Nouvelle représentation »



Commandes Séquence Surfaces Interactions

Créer la représentation d'une zone d'interaction

Avec un ligand Entre chaînes

Visualiser les liaisons entre un ligand et une protéine.

Sélectionner le ligand voulu dans la liste et créer la représentation.

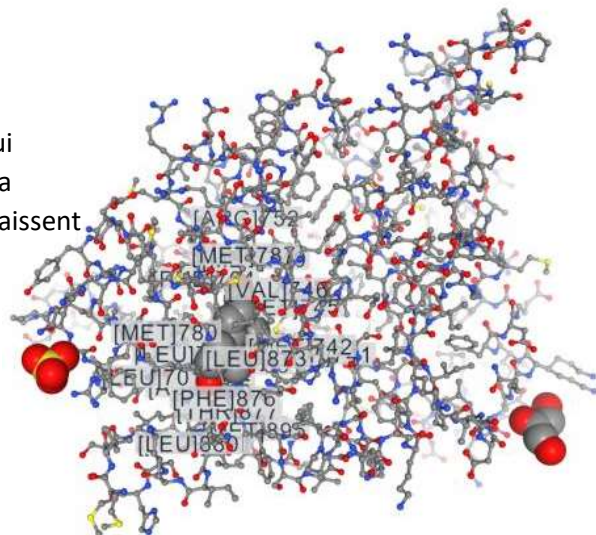
TES 1000 (TESTOSTERONE) Chaîne A

Créer une nouvelle représentation

Liste des représentations

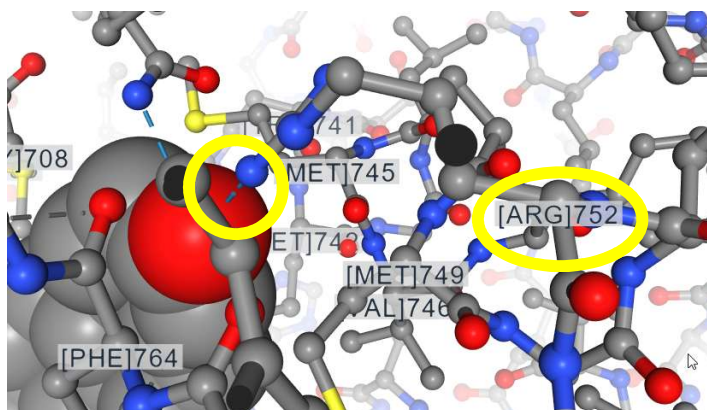
Interactions avec TES 1000 Chaîne A

Les noms des AA qui interagissent avec la testostérone apparaissent



En zoomant on peut voir les interactions entre certains AA avec la testostérone, notamment ici **ARG 752** qui fait une liaison H avec elle.

On s'intéressera aussi à **ASN 705** et **GLN 711**.



Dans l'onglet « Séquence », rechercher les 4 « autres » molécules SO4, TES, DTT, GOL qui sont en surbrillance. Désélectionner TES et cliquer sur « Boules et bâtonnets » pour que les autres molécules apparaissent comme le reste du récepteur.

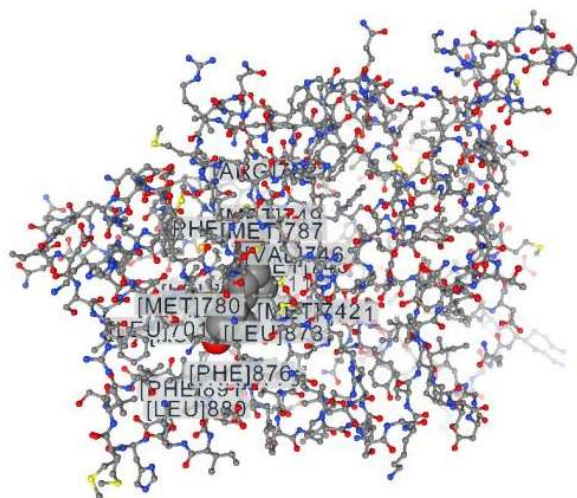
Commandes Séquence Surfaces Interactions

Sélectionner à partir des séquences des différentes chaînes

A
SER
GLY
LYS
VAL
LYS
PRO
ILE
TYR
PHE
HIS
THR
GLN
SO4
TES
DTT
GOL
HOH
HOH
HOH
HOH
HOH
HOH
HOH
HOH

Tout Aucun Inverser

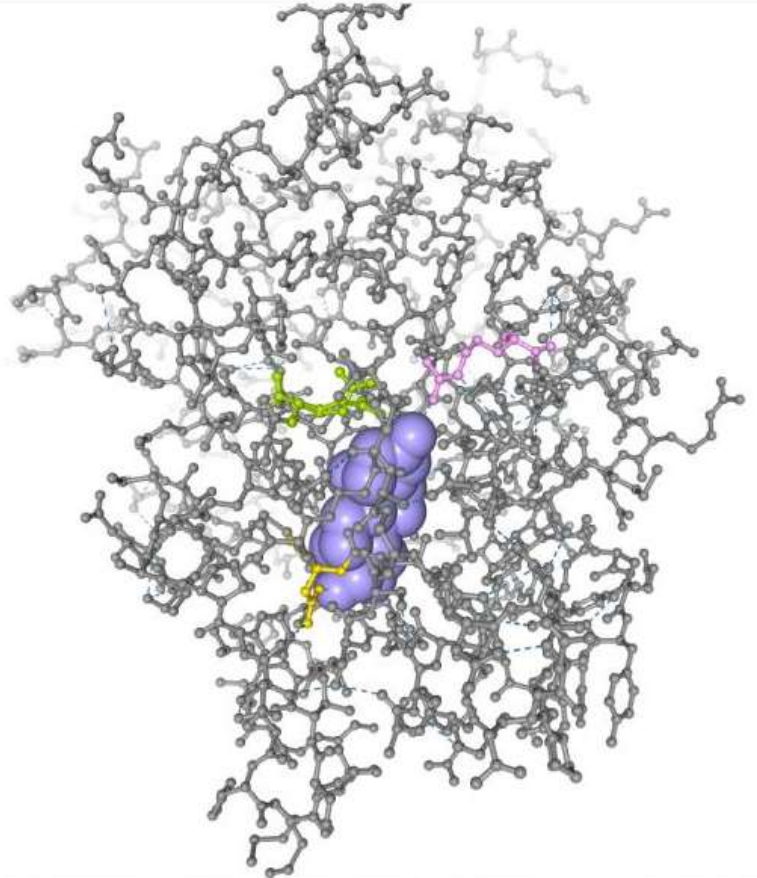
Sphères **Boules et bâtonnets** Masquer/Montrer



Cliquer sur « Tout » et colorer en gris.

Il ne reste plus qu'à colorer la testostérone et les 3 AA remarquables en les sélectionnant tour à tour.

LibMol



Liaison de la testostérone avec les AA Asn 705 en jaune, Gln 711 en vert et Arg 752 en rose

On peut procéder aux mêmes manipulations avec le récepteur et la Cyprotérone : 2OZ7 mais seuls les AA ARG 752 et ASN 705 ont des interactions avec lui. Il occupe le même site de fixation, d'où son rôle d'antagoniste.

Molécules seules : TES et CA4.