

# FM : Mise en évidence d'interaction moléculaires avec RASTOP.

Situation : **Vous devez montrer qu'une molécule interagit avec certaines parties identifiées d'une autre molécule.**

Exemple:

On vous donne les numéros des acides aminés de la molécules (enzyme) COX qui interagissent avec l'acide arachidonique :

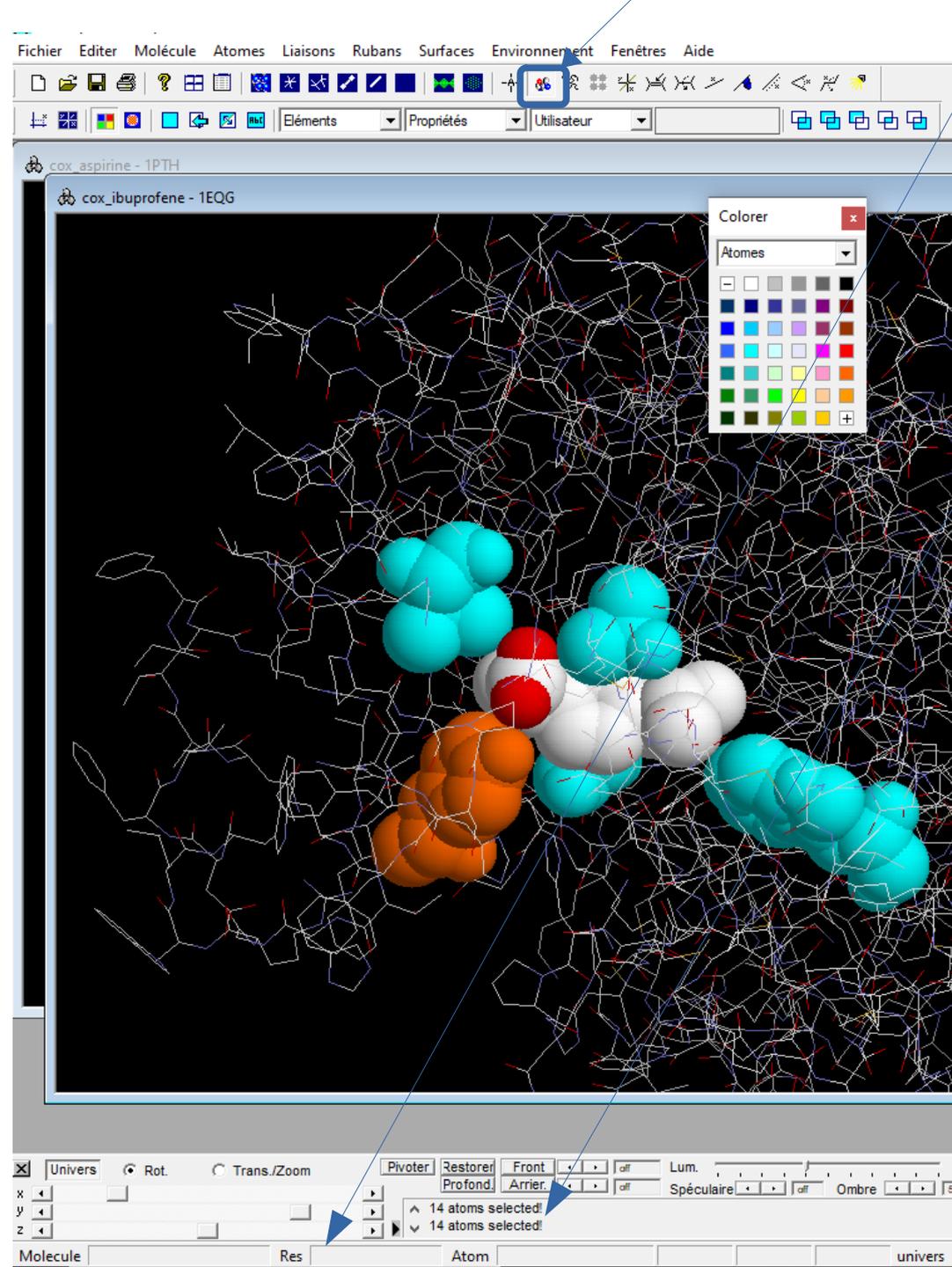
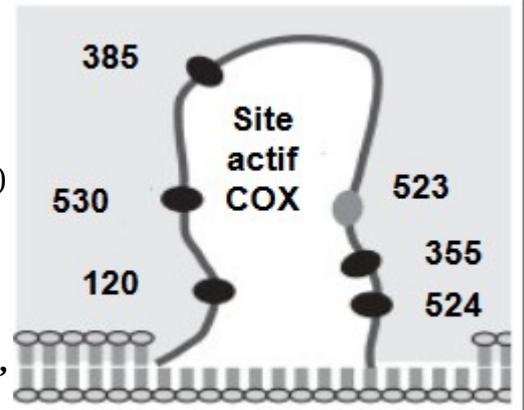
*(les numéros sont associés dans le fichier molécule et son toujours les mêmes quel que soit le fichier)*

**Vous devez montrer que l'ibuprofène agit sur cox au niveau des mêmes sites(au moins en partie) que le substrat naturel de l'enzyme, l'empêchant ainsi de s'y fixer.**

Stratégie :

1- ouvrir un fichier montrant l'enzyme COX et l'ibuprofène nommé IBP

2- Trouver l'IBP , le sélectionner avec l'option **sélectionner l'élément**(IBP en est un)



3-vérifier la sélection ici et là).

4- Leur donner une forme bien identifiable (et une couleur si vous voulez!)

5- Repérer dans COX les acides aminés au contact de IBP, les sélectionner et leur donner une forme identifiable.

Exemple : j'ai ici fait une partie du travail :

- j'ai laissé IBP en couleur normale
- en bleu clair les acides aminés en contact mais qui ne sont pas commun avec ceux qui interagissent avec l'acide arachidonique.
- en orange celui qui est en commun.

6- On peut aussi sélectionner avec l'éditeur de commande **ABC** mais il faut connaître le nom donné :

- exemple :
- ASP pour l'acide aminé asparagine
- IBP pour ibuprofene
- SAL pour Aspirine