

Les benzodiazépines sont des agonistes du GABA : ces molécules de synthèse se fixent sur les récepteurs GABA_A des neurones du système nerveux central et les activent.

► On cherche à savoir si les benzodiazépines se lient au récepteur GABA_A sur le même site que le GABA.

Étape 1

Ouvrir le fichier *6hup.pdb* dans l'application **LibMol**

Ce fichier présente la structure d'un récepteur GABA_A lié à plusieurs autres molécules.

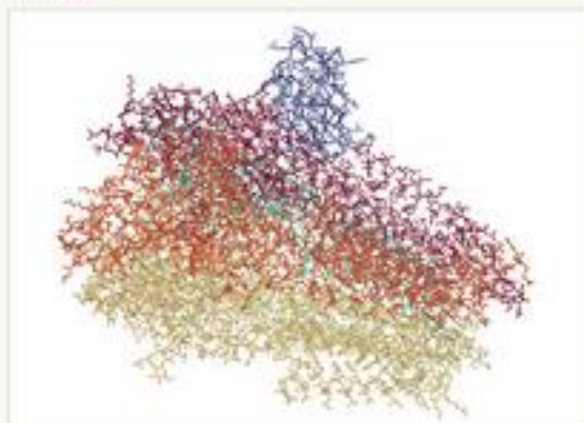
Le fichier *6hup.pdb* est téléchargeable sur la banque de données moléculaire RCSB depuis : <http://www.rcsb.org/structure/4MS3>.

L'application **libmol** est accessible en ligne : <https://libmol.org> ou téléchargeable.

Afficher la molécule en chargeant le fichier dans **LibMol**. La molette de la souris permet de zoomer sur les structures moléculaires.

Utiliser l'onglet « séquences » pour sélectionner et masquer la chaîne G correspondant à une séquence protéique de reconnaissance qui n'appartient pas au récepteur du GABA.

→ corrigé



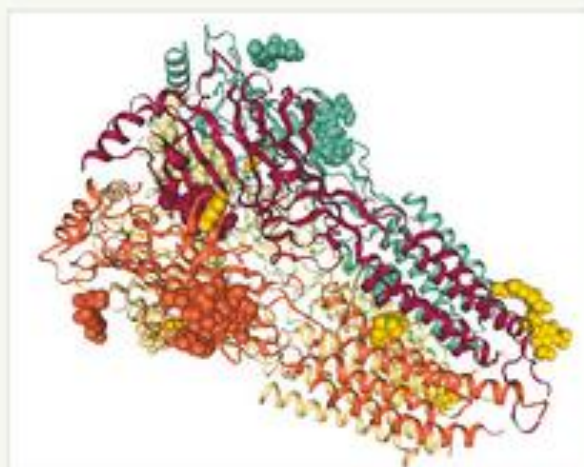
Visualisation de la structure moléculaire en boules et bâtonnets après coloration par chaîne avec la chaîne G.

Étape 2

Visualiser les différentes structures du complexe moléculaire

Dans l'onglet « commandes », on peut colorer les différentes parties du complexe moléculaire en utilisant « colorer par chaînes/ par nature » et les identifier grâce au pointeur de la souris.

On peut également modifier la représentation de la molécule (ruban, boules et bâtonnets...).



Visualisation de la structure moléculaire en rubans après avoir masqué la chaîne G, coloré par chaînes et coloré en jaune les ligands.

Étape 3

Visualiser les interactions entre le récepteur et ses ligands GABA et benzodiazépine

L'onglet interactions permet de sélectionner le ligand et de visualiser la zone d'interaction et la nature des liaisons.



Affichage de l'interaction du GABA et de la benzodiazépine avec le récepteur GABA_A.