

**Etape 2 : Mettre en œuvre un protocole de résolution pour obtenir des résultats exploitables**

**Mettre en œuvre le protocole** fourni pour **traiter** des modèles moléculaires se trouvant dans le dossier rastopvf et contenus dans le dossier médicaments anti inflammatoires afin de **montrer** que l'ibuprofène a une action équivalente à celle de l'aspirine pour empêcher la transformation de l'acide arachidonique en prostaglandine par l'enzyme COX.

**Appeler le professeur pour vérifier les résultats et éventuellement obtenir une aide.**

**Etape 3 : Présenter les résultats pour les communiquer**

Sous la forme de votre choix, **traiter** les **données obtenues** pour les **communiquer**.  
**appeler le professeur pour vérification de votre production.**

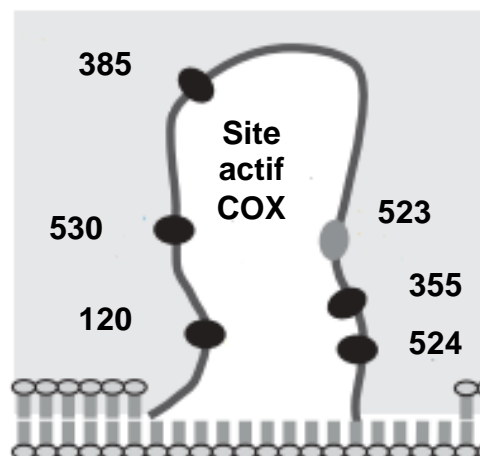
**Etape 4 : Exploiter les résultats obtenus pour répondre au problème**

**Exploiter les résultats pour montrer** que l'ibuprofène a une action équivalente à celle de l'aspirine pour empêcher la transformation de l'acide arachidonique en prostaglandine par l'enzyme COX.

## Matériel disponible et protocole d'utilisation du matériel

### Document :

#### Représentation schématique du site actif de l'enzyme COX et des acides aminés assurant une liaison temporaire avec le substrat spécifique.



- fichiers de modélisation moléculaires des complexes :

- « enzyme COX- acide\_arachidonique » : fichier « cox\_acide\_arachidonique.pdb »
- « enzyme COX-ibuprofène » : fichier « cox\_ibuprofene.pdb »
- « enzyme COX-aspirine » : fichier « cox\_aspirine.pdb »

- logiciel de modélisation moléculaire et sa fiche technique

### Protocole :

- **Traiter** les modèles moléculaires afin :
  - d'identifier les molécules de chaque complexe
  - de localiser les acides aminés assurant une liaison temporaire entre l'enzyme et son substrat

**Appeler le professeur pour vérification**

Fiche procédure détaillée – Aide majeure

1. **Ouvrir** avec RASTOP les fichiers « cox\_ibuprofene.pdb », « cox\_aspirine.pdb » et « cox\_acide\_arachidonique.pdb », pour obtenir à l'écran l'affichage des modèles de l'enzyme COX liée à un fragment soit de l'acide arachidonique, soit de l'aspirine soit de l'ibuprofène.
2. **Colorer** les différentes chaînes composant les molécules de chacun des fichiers proposés : atomes/ colorer par / chaîne
3. **Sélectionner les numéros** des acides aminés appartenant au site actif au sein de chaque modèle de l'enzyme COX dans les trois complexes « cox\_ibuprofene.pdb », « cox\_aspirine.pdb » et « cox\_acide\_arachidonique.pdb » et les **colorer ou changer l'affichage** : dans la fenêtre de l'icône « expression », taper \*A and le numéro d'un acide aminé appartenant au site actif. Choisissez la couleur et la représentation par sphère.
4. **Sélectionner les** molécules ACD (acide arachidonique) : taper acd dans la fenêtre de l'icône « expression », IBP (ibuprofène) et SAL (aspirine) dans chacun des trois complexes « cox\_acide\_arachidonique.pdb », « cox\_ibuprofene.pdb » et « cox\_aspirine.pdb » puis **colorer ou changer l'affichage** de ces molécules. (coloration jaune et représentation en boules et bâtonnets)