

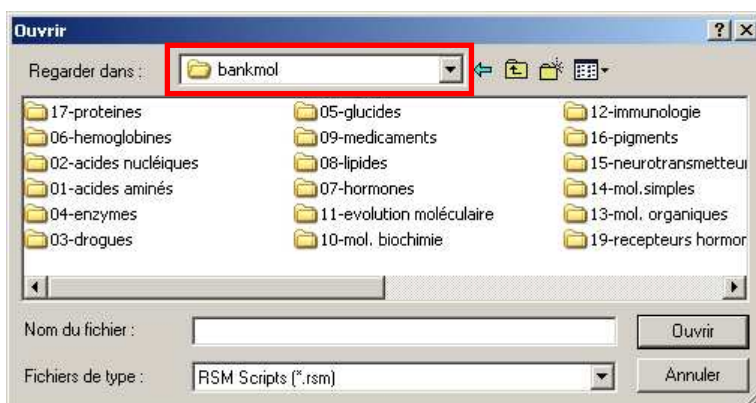
## Fiche technique : utilisation de Rastop (logiciel de visualisation de molécules).

### Objectifs de la fiche :

1. Ouvrir un fichier de molécule (ADN, ARN, protéine, hormone...)
2. Obtenir des informations relatives à cette molécule.
3. Zoomer / dézoomer, tourner, déplacer la molécule.
4. Modifier l'affichage de la molécule.
5. Connaître le nom d'un atome pointé de la molécule.
6. Sélectionner une partie de la molécule pour la mettre en évidence.
7. Colorer la molécule.
8. Colorer une sélection de la molécule, des liaisons entre chaînes, le fond...
9. Mesurer la taille, un angle dans la molécule.

### Objectif 1 : ouvrir un fichier de molécule (ADN, ARN, protéine, hormone...)

Cliquer sur « Fichier », « Ouvrir », ce qui permet d'accéder au dossier « bankmol » qui comporte toutes les molécules classées dans des dossiers spécifiques.



### Objectif 2 : obtenir des informations relatives à cette molécule.

**Molécule** Atomes Liaison

Effacer la molécule

Information

**Séquence**

Fichier de molécule

Symétrie

Angles Phi Psi

Ramachandran

Cacher/Montrer

Structure

Moniteurs

Axes et limites

Centrer

Rotation

**Données moléculaires**

Outil de visualisation graphique de molécules

Enregistrer OK

# Molécule: 1J47

Nom de la molécule ou de la structure

# Séquence

Chaîne A:  
MQDRVKRPIN AFIVWSRDQR RKMALENPRM RNSEISKQLG YQWKMLTEAE  
KWPFQEAQK LQAMHREKYP NYKYRPRRKA KMLPK

Chaîne B:  
CCTGCACAAA CACC

Chaîne C:  
GGTGTGTTGTG CAGG

Séquence de la molécule et / ou des différentes chaînes.

Chaque acide aminé est indiqué par une lettre majuscule selon le code international (voir tableau à la fin)

Chaque nucléotide est indiqué par une lettre majuscule :

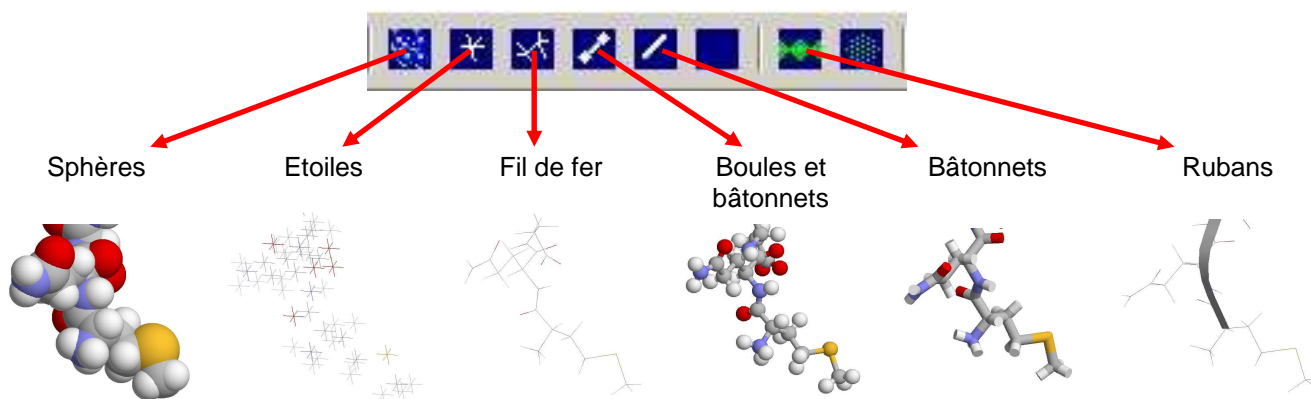
- A** pour nucléotide à adénine
- G** pour nucléotide à guanine
- C** pour nucléotide à cytosine
- T** pour nucléotide à thymine
- U** pour nucléotide à uracile

### Objectif 3 : zoomer / dézoomer, tourner, déplacer la molécule.

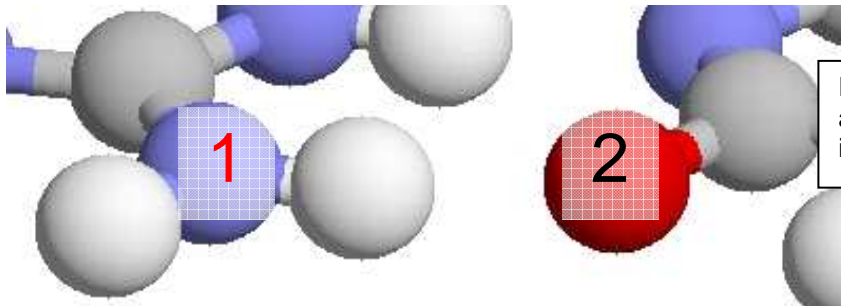
Actions visées :	Opérations à effectuer :
Zoomer	Maintenir la touche « shift » maintenue, en même temps maintenir le clic gauche de la souris et monter la souris.
Dézoomer	Maintenir la touche « shift » maintenue, en même temps maintenir le clic gauche de la souris et descendre la souris.
Faire tourner la molécule	Maintenir le clic gauche de la souris et en même temps bouger la souris selon le sens désiré.
Déplacer la molécule	Maintenir le clic droit de la souris et en même temps bouger la souris selon le sens désiré.

### Objectif 4 : modifier l'affichage de la molécule.

Les différentes icônes suivantes vous permettent de modifier l'affichage de la molécule.



**Objectif 5 : connaître le nom d'un atome pointé de la molécule.**



Pour illustrer cet exemple, l'opérateur a cliqué sur 2 atomes qu'il souhaite identifier en 1 et 2.



La première ligne correspond au premier atome cliqué, il s'agit de :

- « Atome N2 » = atome d'azote
- « 1968 » = numéro dans le fichier
- « groupe G115 chaîne C » = appartient au nucléotide à guanine numéro 115 de la chaîne C.

*Conclusion : c'est l'atome d'azote du nucléotide à guanine numéro 115 de la chaîne C.*

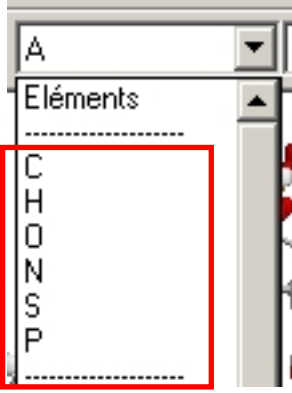
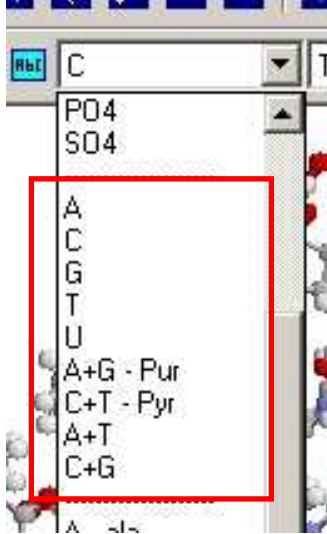
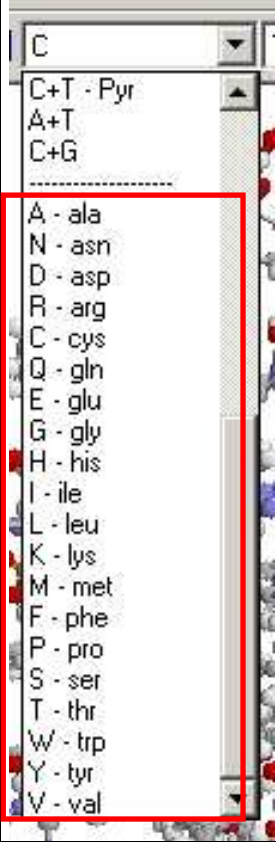
La seconde ligne correspond au second atome cliqué, il s'agit de :

- « Atome O2 » = atome d'oxygène
- « 1933 » = numéro dans le fichier
- « groupe C114 chaîne B » = appartient au nucléotide à cytosine numéro 114 de la chaîne B.

*Conclusion : c'est l'atome d'oxygène du nucléotide à cytosine numéro 114 de la chaîne B.*

**Objectif 6 : sélectionner une partie de la molécule pour la mettre en évidence.**

**Méthode 1, via la sélection d'éléments :**

		
<p>Vous pouvez avec cette commande sélectionner un élément chimique précis (carbone, hydrogène, oxygène...)</p>	<p>Vous pouvez avec cette commande sélectionner un nucléotide précis ou un couple de nucléotides.</p>	<p>Vous pouvez avec cette commande sélectionner un acide aminé précis.</p>



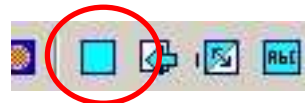
Pour valider votre sélection, il faut **IMPÉRATIVEMENT** cliquer ensuite sur l'icône



Vous pouvez alors modifier la couleur ou l'affichage de la sélection que vous venez de réaliser.



Pour sélectionner à nouveau l'ensemble de la molécule, cliquer sur



☞ **Méthode 2, via la sélection de propriétés :**



Vous pouvez avec cette commande sélectionner une partie précise (protéine, ADN, ARN...) de la molécule affichée.

☞ Pour valider votre sélection, il faut **IMPÉRATIVEMENT** cliquer ensuite sur l'icône



☞ Vous pouvez alors modifier la couleur ou l'affichage de la sélection que vous venez de réaliser.

☞ Pour à nouveau sélectionner l'ensemble de la molécule, cliquer sur



**Méthode 3, via l'écriture d'une ligne de commande :**

Cliquer sur l'icône « Expression » qui permet d'écrire une ligne de commande  
Dans la fenêtre qui apparaît, vous devez taper votre sélection.



Pour sélectionner :	Taper :
Un nucléotide (adénine, guanine...)	La lettre correspondante : « A, G, T, C, U »
Un acide amine (alanine, cystéine...)	Les 3 lettres correspondant à l'acide aminé : « ala »
Une chaîne entière	« *A » : commencer par étoile suivie par la lettre de la chaîne
Une partie seulement d'une chaîne	« *A and 1-20 » : commencer par étoile suivie par la lettre de la chaîne puis après indiquer les numéros désirés.

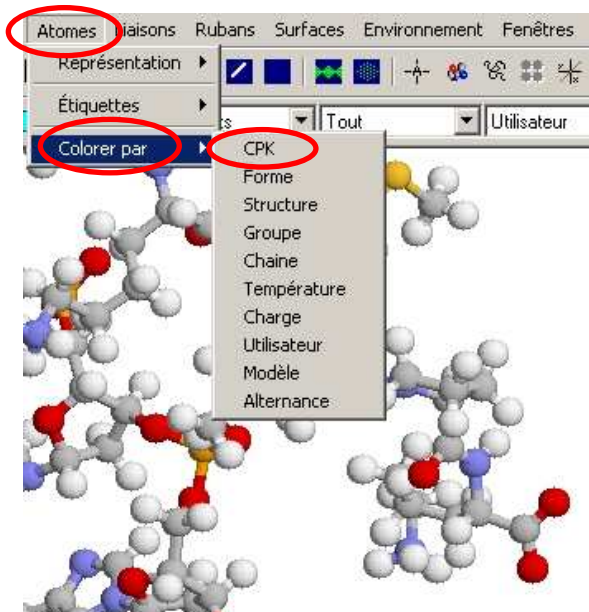
☞ Vous pouvez alors modifier la couleur ou l'affichage de la sélection que vous venez de réaliser.

☞ Pour à nouveau sélectionner l'ensemble de la molécule, cliquer sur



## Objectif 7 : colorer la molécule.

Le mode de coloration à utiliser au départ est le « mode CPK » qui permet de colorer chaque atome selon sa couleur conventionnelle.



### Code couleur CPK :

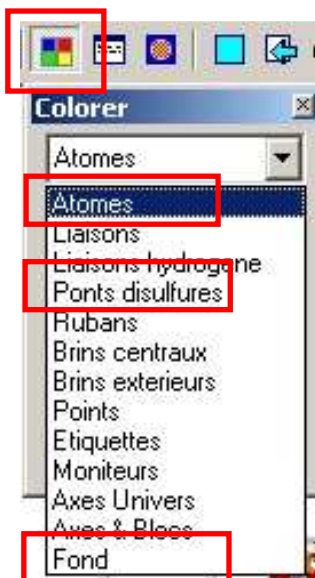
Gris = carbone  
Blanc = hydrogène  
Rouge = oxygène  
Violet = azote  
Orange = phosphore  
Jaune = soufre



Les autres modes de coloration peuvent servir, en particulier le mode « **chaîne** » pour les mettre en évidence.

## Objectif 8 : colorer une sélection de la molécule, des liaisons entre chaînes, le fond...

Pour colorer de manière spécifique une sélection d'atomes, des liaisons entre chaînes, le fond, il faut se servir de l'outil palette.



« **atome** » = cette option vous permet de colorer les atomes que vous avez déjà sélectionnés.

« **ponts disulfures** » = cette option vous permet de colorer les liaisons qui peuvent exister entre 2 chaînes.

« **fond** » = cette option vous permet de colorer l'arrière plan

## Objectif 9 : mesurer la taille, un angle dans la molécule



Cliquer sur l'icône « distances » ou « angles » avant de cliquer directement sur les atomes désirés de la molécule.

## ANNEXE 1 : CODIFICATION DES ACIDES AMINES

### acides aminés, codes de trois lettres et codes d'une lettre

Ala A Alanine	Leu L Leucine
Arg R aRginine	Lys K lIkisine (lysine)
Asn N asparagiNe	Met M Methionine
Asp D asparDic acid (asparitc)	Phe F Fenylalanine (phenylalanine)
Cys C Cystein	Pro P Proline
Glu E gluEtamic acid (glutamic )	Ser S Serine
Gln Q Quetamine (glutamine)	Thr T Threonine
Gly G Glycine	Trp W tWyptophan (tryptophan)
His H Histidine	Tyr Y Yrosine
Ile I Isoleucine	Val V Valine

> LES 20 ACIDES AMINES