

TFiche technique : Utilisation de Rastop (logiciel de visualisation de molécules).

Objectifs de la fiche :

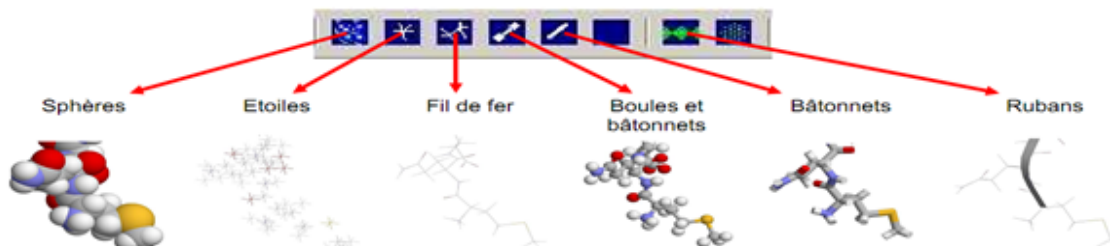
1. Ouvrir un fichier de molécule (ADN, ARN, protéine, hormone...)
2. Obtenir des informations relatives à cette molécule.
3. Zoomer / dézoomer, tourner, déplacer la molécule.
4. Modifier l'affichage de la molécule.
5. Connaître le nom d'un atome pointé de la molécule.
6. Sélectionner une partie de la 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 : 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 : modifier l'affichage de la molécule.

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

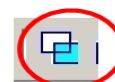


Méthode 1, via la sélection d'éléments :

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



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



Méthode2: 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.

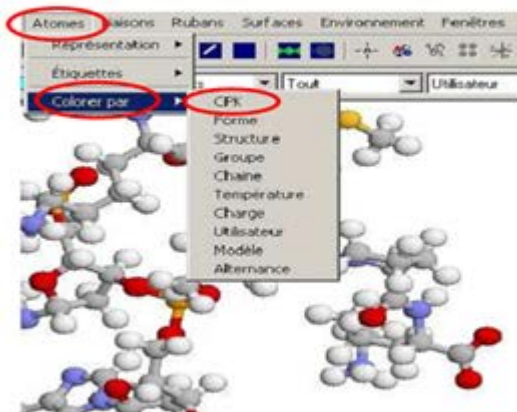
Vous pouvez alors modifier la couleur ou l'affichage de la sélection que vous venez de réaliser.

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



Objectif : 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.



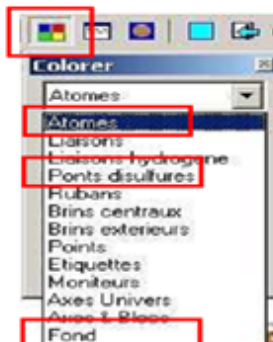
Code couleur CPK :

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 : 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

TP2

Objectif : 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.

Barre de sélection

	Change la référence des coordonnées. (molécule environnement absolu écran)		Sélectionne tous les atomes	L'expression sélectionnée ou la sélection prédéfinie peut ensuite :	
	Affiche les axes de l'univers		Retour à la sélection précédente		Etre prise comme nouvelle sélection
	Affiche la palette des couleurs (1)		Inverse la sélection		Etre ajoutée à la sélection (+)
	Met en évidence les atomes sélectionnés		Sélectionne une expression (2)		Etre retirée de la sélection multiple (-)
Boîtes de sélections prédéfinies Eléments Propriétés Utilisateur					Etre extraite de la sélection courante (ET)
					Ne pas prendre en compte la sélection courante (SAUF)

(1) Palette des couleurs

Fenêtre de l'élément à modifier (Atomes, liaisons, fond etc.) **A vérifier !**

Choix de la couleur.

+ plus de couleurs

- couleurs CPK

(2) Fenêtre d'expression à sélectionner

Sélection d'atomes

Taper une expression

OK Annuler



Panneau de commande

		Déplacement ou rotation de la (des) molécule(s) selon les axes x, y et z "Univers" : permet de manipuler une ou toutes les molécules de la fenêtre. "Rot." ou "Trans./Zoom" : choix de rotation ou de translation (x, y) et de zoom (z)	
	Pivoter lentement la molécule Restore la position initiale de la molécule		Affiche et définit les plans de coupe avant et arrière de la molécule.
		Caractéristiques de l'éclairage	
Atom: CG 1979 Group: GLU 360 Chain: A		Informations sur l'atome sélectionné, les messages des scripts. (Ancienne fenêtre Command Line)	

Molécule 3CRO Chain: B Res G 16 Atom C5* 683 x:12.981 y:7.245 z:6.216 univers

Barre d'état

Affiche les informations sur la molécule, la chaîne, le groupe, l'atome et les coordonnées correspondant à l'élément cliqué.