

# L'ESSENTIEL A RETENIR SUR LES LOGICIELS RASTOP ET LIBMOL

## QU'EST-CE QUE C'EST ? A QUOI ÇA SERT ?

**RASTOP** et **LIBMOL** sont des logiciels libres de visualisation et de traitement de modèles moléculaires en 3D.

**RASTOP** peut être considéré comme un logiciel classique car il est régulièrement utilisé dans les situations d'évaluation de l'examen des compétences expérimentales. Pour qu'il permette une véritable démarche d'investigation, peu guidée, l'élève doit avoir réalisé une bonne prise main car les commandes sont peu intuitives. Le modèle exploré doit être présenté avec des indications précises sur son organisation (code des différentes parties représentées dans le modèle par exemple).

**LIBMOL** est une alternative plus récente dont l'interface est plus ergonomique et intuitive. Elle permet d'envisager plus rapidement une exploration autonome du modèle par l'élève. Cet aspect est particulièrement vrai lorsque les modèles moléculaires explorés proviennent de la base de données « Protein Data Bank ».

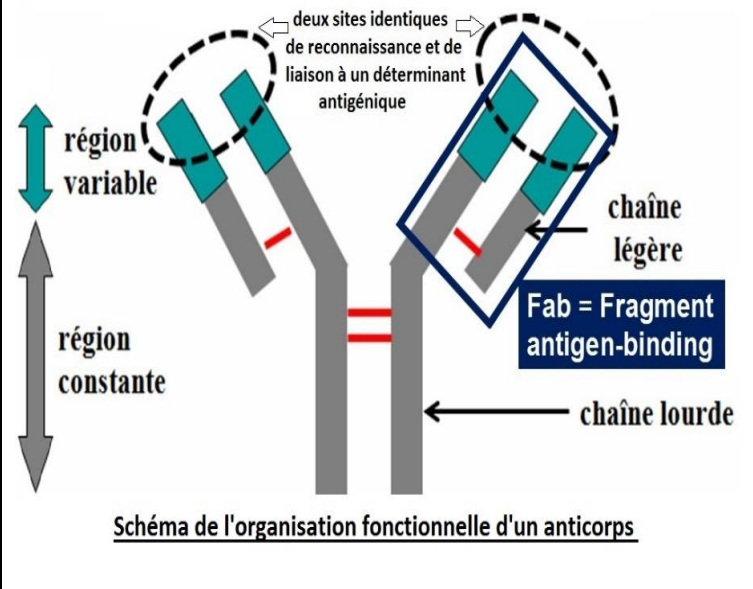
## PRENDRE EN MAIN LES LOGICIEL RASTOP ET LIBMOL

### OBJECTIFS DE L'EXEMPLE D'ACTIVITE

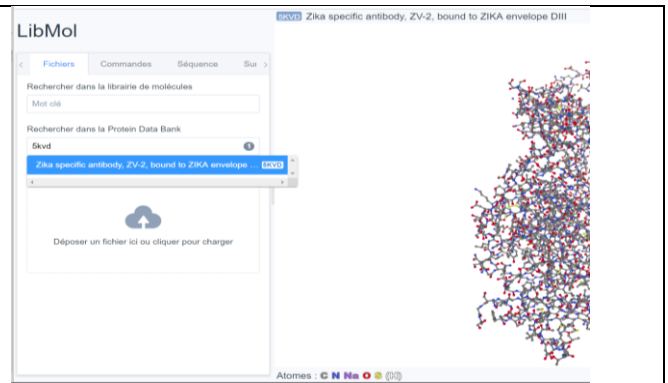
L'élève doit à partir des informations de sa fiche technique et des informations présentant le modèle :

- traiter la molécule pour mettre en évidence la complémentarité du site de fixation d'un anticorps avec l'antigène.
- Comparer deux molécules traitées pour montrer que les sites de fixations sont différents d'un anticorps à l'autre

### DONNEES

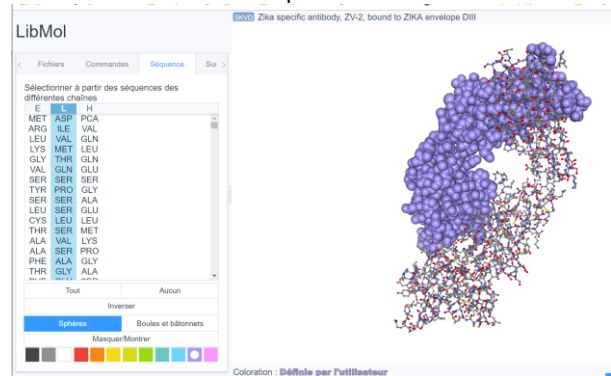
<i>Qu'est-ce qu'un fragment Fab ?</i>	<i>Modèle 5KVD.pdb</i>	<i>Modèle 2VIS.pdb</i>
 <p><b>Schéma de l'organisation fonctionnelle d'un anticorps</b></p>	<p><b>Modèle moléculaire montrant un fragment Fab associé à un antigène du virus ZIKA.</b></p> <p>Dans ce modèle :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- La <b>chaîne A</b> est la chaîne légère du fragment Fab de l'anticorps anti-zika</li> <li>- La <b>chaîne H</b> est la chaîne lourde du fragment Fab de l'anticorps anti-zika</li> <li>- La <b>chaîne E</b> est la protéine d'enveloppe du virus ZIKA (=antigène)</li> </ul> <p style="text-align: right;"><small>Source</small></p>	<p><b>Modèle moléculaire montrant un fragment Fab associé à un antigène du virus de la grippe A (H3N2).</b></p> <p>Dans ce modèle :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Les <b>chaînes A et B</b> sont la chaîne légère et le fragment de chaîne lourde du fragment Fab de l'anticorps anti-grippe</li> <li>- La <b>chaîne A</b> est une des protéines d'enveloppe du virus (hémagglutinine) de la grippe (=antigène)</li> </ul> <p style="text-align: right;"><small>Source</small></p>

1. Accéder au service en ligne : <https://libmol.org/>
2. Choisir l'onglet « Fichier »
3. Chercher dans la base de données « protein Data bank » le modèle moléculaire : 5KVD (capture 1)
4. Cliquer sur le modèle sélectionné.
5. Utiliser la souris puis les ascenseurs du panneau de commande pour observer l'organisation du modèle



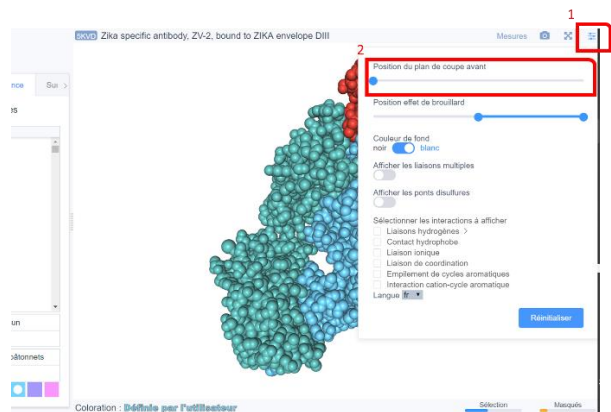
Capture 1

6. Dans l'onglet « Séquence », changer les affichages afin de mettre en évidence les trois chaînes présentes dans le modèle.
7. Suivre les indications des bulles infos et attribuer une couleur différente à chaque chaîne.
8. Afficher toute la molécule en sphère



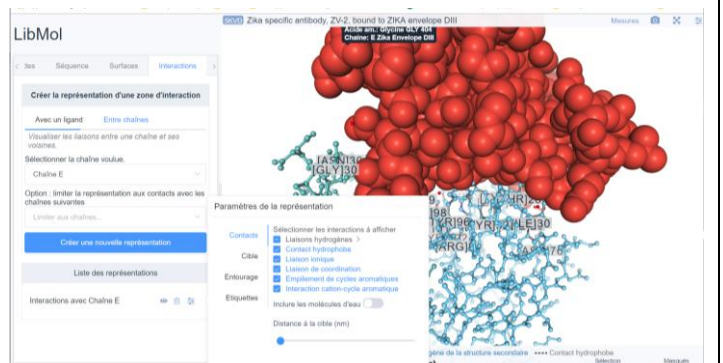
Capture 2

9. Réalisez une coupe de la molécule pour montrer les caractéristiques de la zone de contact entre les chaînes de l'anticorps et la protéine d'enveloppe du ZIKA
10. Ouvrir le menu réglage en haut à droite
11. Régler la position du plan de coupe avant et ajuster la position de la molécule.
12. Fermer le menu réglage en re cliquant sur le bouton en haut à droite
13. Faire une capture d'écran et la coller dans votre document.




Capture 3

14. Observer les acides aminés du fragment Fab de l'anticorps qui interagissent avec l'antigène du ZIKA
15. Dans menu réglage (bouton en haut à droite), réinitialiser la molécule
16. Afficher les deux chaînes du fragment Fab en bâtonnet
17. Dans le menu « interaction », sélectionner la chaîne E puis cliquer sur « créer une nouvelle représentation »
18. Diminuer la distance au maximum
19. Réaliser une capture d'écran




1. Démarrer le logiciel RASTOP
2. Fichier/ouvrir/ → ouvrir le fichier 2VIS.pdb depuis son répertoire.
3. Utiliser la souris puis les ascenseurs du panneau de commande pour observer l'organisation du modèle
4. Tester les différents affichages

5. Mettre en évidence les 3 chaînes d'acides aminés présentes dans le modèle

-  a) Dans la barre d'outils du haut, cliquer sur le bouton expression
- b) Dans la nouvelle fenêtre, taper « \*A » puis appuyer sur le bouton « nouvelle sélection (voir capture 2 → )
- c) Cliquer sur la palette puis dans la nouvelle fenêtre sélectionner une couleur pour la chaîne A
- d) Recommencer les étapes a) à c) pour la chaîne B puis pour la chaîne C

6. Changer l'affichage pour mettre toute la molécule en sphère

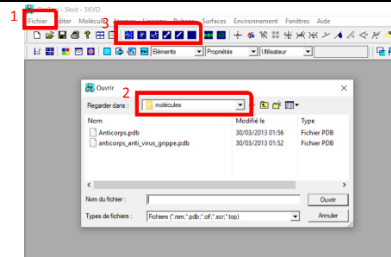
-  Cliquer sur tout sélectionner  
Cliquer sur le bouton affichage en sphères

7. Réalisez une coupe de la molécule pour montrer les caractéristiques de la zone de contact entre les chaînes de l'anticorps et la protéine d'enveloppe du virus de la Grippe (capture 4)

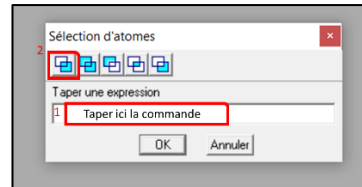
- Dans le panneau de commande en bas, cliquer sur front\$
- Maintenir enfoncée, le bouton avec une flèche indiquant votre droite.
- Ajuster le plan de coupe et la position de la molécule
- Ajuster les caractéristiques de l'affichage en jouant sur les commandes des fonctions « spéculaire » et « ombre » dans le panneau de commande

8. Observer les acides aminés du fragment Fab de l'anticorps qui interagissent avec l'antigène de la Grippe

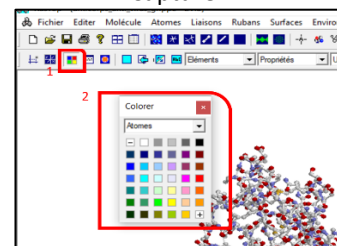
- Cliquer sur le bouton expression, indiquer \*C, puis appuyer sur nouvelle sélection
- Dans la barre d'outils du haut cliquer sur « éditer/
- Dans le menu « interaction », sélectionner la chaîne E puis cliquer sur « créer une nouvelle représentation »
- Diminuer la distance au maximum
- Réaliser une capture d'écran



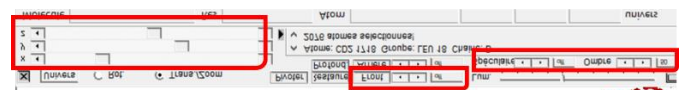
Capture 1



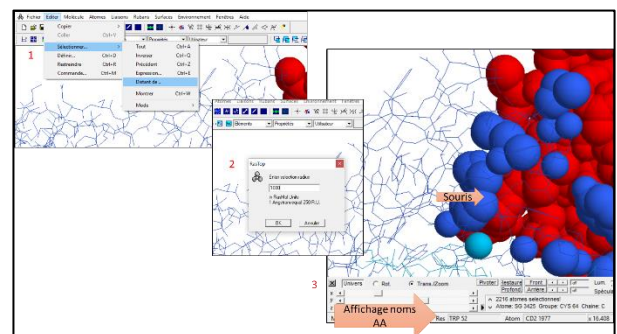
Capture 2



Capture 3



capture 4



Capture 5