

## Fiche technique RASTOP

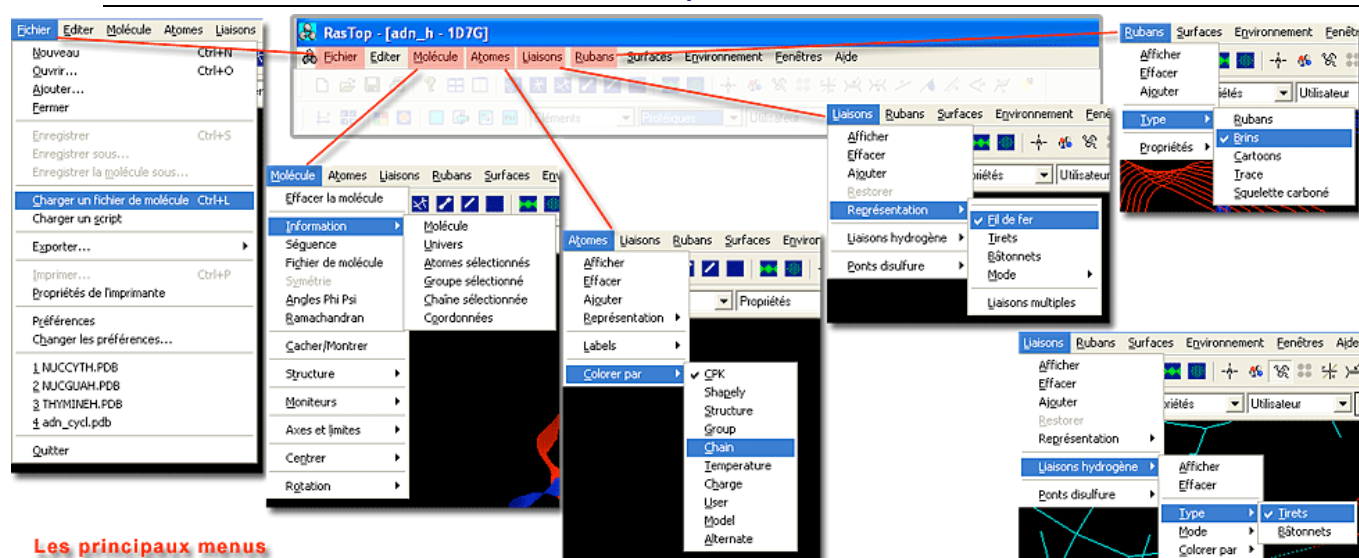
Logiciel de visualisation moléculaire en 3D

Logiciel de visualisation moléculaire en 3D sur PC et Linux. Les fichiers de molécule sont au format pdb (*Protein Date Bank*).

### Adresses importantes

- Télécharger le logiciel
  - Rastop 2.03 en français : <http://www.inrp.fr/Acces/biotic/rastop/html/telechar.htm>
  - Rastop 2.1 en anglais (quelques améliorations concernant les scripts et la fonction plan de coupe) : <http://www.geneinfinity.org/rastop/>
- Aide complète sur le site de l'INRP : <http://www.inrp.fr/Acces/biotic/rastop/accueil.htm>
- Télécharger les fichiers de molécules
  - sur des sites français de l'éducation (suffisant pour les besoins du programme au lycée) : <http://www.inrp.fr/Acces/biotic/rastop/html/3D-DB.htm> et <http://www.ac-orleans-tours.fr/svt/mol3d/librairie/pcindex.htm>
  - sur PBB de RCSB : <http://www.rcsb.org/pdb/>
  - sur la banque de données de l'université de Massachusetts (utile en TPE par exemple). Nombreux liens - Des scripts pour convertir certains fichiers et les rendre compatibles avec Rastop : <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/whereget.htm>
- Convertir un fichier de molécule au format .pdf en fichier exploitable par Anagene : [http://www2.ac-lyon.fr/enseigne/biologie/ress/logiciel/ana\\_ras/sequences.html](http://www2.ac-lyon.fr/enseigne/biologie/ress/logiciel/ana_ras/sequences.html)

### A. Présentation des menus déroulants les plus utilisés



Les principaux menus

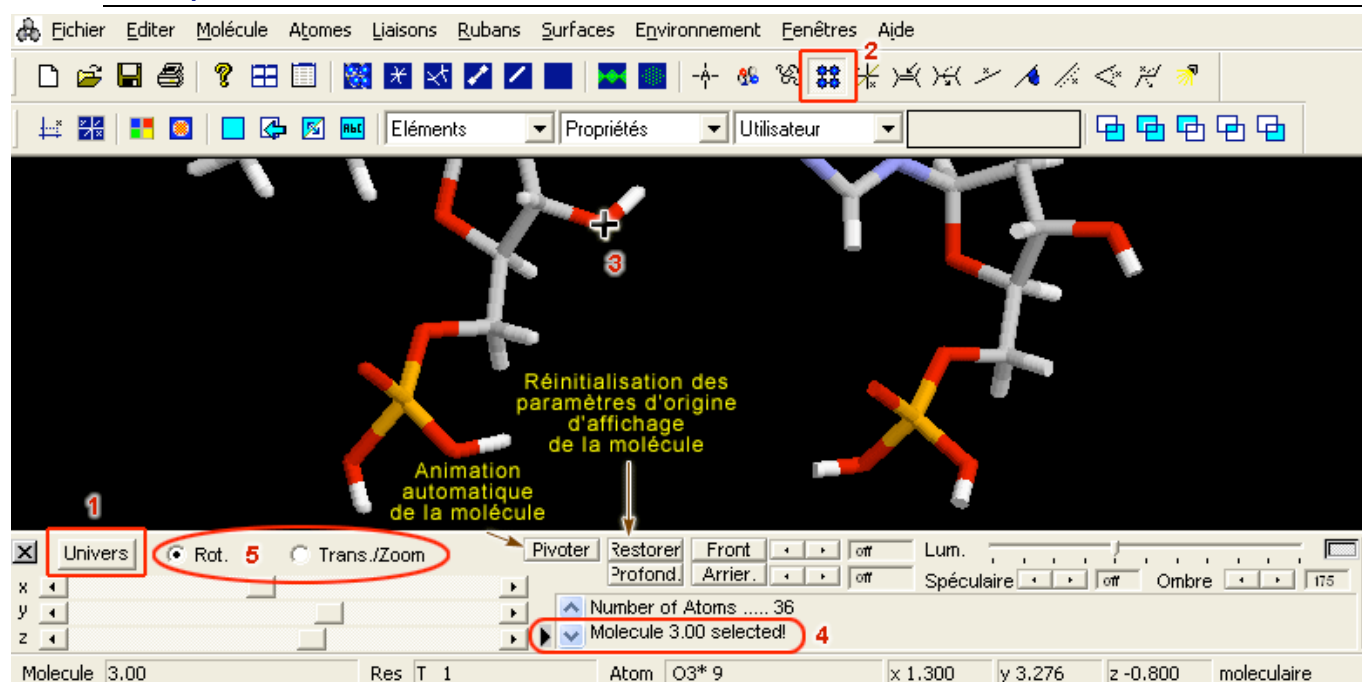
Fichier	Molécule	Atomes	Liaisons	Rubans
<p><b>Nouveau</b> ouvre une nouvelle fenêtre.</p> <p><b>Ouvrir</b> ouvre un fichier dans une nouvelle fenêtre.</p> <p><b>Ajouter</b> ajoute une molécule dans une fenêtre contenant déjà une molécule.</p> <p><b>Charger un fichier de molécule</b> ouvre une molécule dans une fenêtre existante.</p> <p><b>Exporter</b> permet d'enregistrer la molécule mise en forme sous un format image</p>	<p><b>Information</b></p> <p><b>Séquence</b></p> <p><b>Fichier molécule</b> renseigne sur le nom de la molécule, les chaînes, la liste et le nombre des acides aminés, des atomes, etc.</p>	<p><b>Colorer par</b> permet de différencier différentes parties de la molécule (couleurs par défaut modifiables ensuite avec la palette colorer).</p>	<p><b>Représentation</b> reprend les options disponibles à l'aide des icônes.</p> <p><b>Liaisons hydrogène</b> permet de les afficher et de choisir le mode de représentation et le couleur (ex. lors de l'affichage d'une molécule d'ADN).</p> <p><b>Ponts disulfure</b> permet de les afficher et d'en définir le mode de représentation (ex. lors de l'affichage d'un anticorps)</p>	<p><b>Afficher</b> reprend la commande à l'aide de l'icône.</p> <p><b>Type et Propriétés</b> définissent un mode de représentation.</p>

## B. Présentation des icônes spécifiques les plus utilisées et des menus de sélection

Les fonctionnalités de toutes les icônes apparaissent en les survolant lentement.

Colorer	Menus déroulants de sélection
<p><b>La palette</b> permet de choisir les couleurs de l'élément sélectionné à l'aide de la souris, via les menus de sélection ou à l'aide du menu déroulant de la palette.</p> <p><b>Le menu déroulant de la palette</b> permet de choisir les éléments à colorer. Penser par exemple à choisir un fond blanc et à modifier certaines couleurs trop claires, avant d'imprimer.</p> <p><b>La touche -</b> annule les couleurs et permet de revenir aux couleurs par défaut</p> <p><b>La touche +</b> ouvre une fenêtre permettant de choisir de nouvelles couleurs.</p>	<p><b>Éléments</b> permet de choisir l'élément à sélectionner (un atome, un groupement d'atomes, une portion de la molécule d'ADN, un acide aminé).</p> <p><b>Propriétés</b> permet de choisir une molécule, une famille de molécule ou une propriété chimique.</p> <p><b>Valider est indispensable</b> : plusieurs validations sont proposées : nouvelle sélection, ajouter à la sélection, etc.</p>

## C. Déplacement des molécules - Mise en lumière - Informations



### Manipuler 2 molécules dans une même fenêtre

Charger les 2 fichiers dans la même fenêtre (avec la commande Ajouter par exemple)

1. Libérer le bouton Univers.
2. Cliquer l'icône sélectionner la molécule.
3. Cliquer sur la molécule à sélectionner.
4. Le nom de la molécule apparaît dans le menu inférieur.
5. Déplacer la molécule par rotation ou translation / Zoom.

**Front** permet l'observation de la molécule en son centre, c'est un plan de coupe de la molécule. Avec la flèche de droite, ce plan se déplace en profondeur et efface les atomes de surface.

**Arrier.** a l'effet inverse, il remonte le plan de coupe et efface les atomes profonds.

*Libérer le bouton réaffiche la molécule entière.*

*Très utile par exemple pour visualiser le contact entre l'enzyme et le substrat, l'anticorps et l'épitope en mode sphères.*

**Lum. - Spéculaire - Ombre** règlent l'intensité lumineuse et le contraste de la molécule.

### Déplacer la molécule sélectionnée selon les 3 axes (x, y, z) à l'aide des curseurs (5) situés dans la barre d'outils inférieure

- **Rot.** pour rotations.
- **Trans/Zoom** pour droite - gauche, haut bas et Zoom.

*Les raccourcis clavier indiqués ci-dessous permettent des visites rapides de la molécule, mais lors des déplacements précis justifiés par une comparaison entre deux molécules, les curseurs s'avèrent être très utiles.*

### Déplacer la molécule à l'aide de raccourcis clavier et de la souris

- Rotation de la molécule : clic gauche maintenu + déplacement de la souris
- Déplacement de la molécule gauche-droite / haut-bas : clic droit maintenu + déplacement de la souris
- Zoom avant/arrière : clic gauche maintenu + touche maj. + mouvement vers le haut ou vers le bas
- \* Déplacement du plan de coupe avant - arrière : clic droit enfoncé + touche maj. + mouvement vers le haut ou vers le bas

**Les petites fenêtres de la ligne inférieure** affichent des informations comme le type et le numéro de l'atome sélectionné, ainsi que le nom de la molécule ou de la chaîne, le nom de l'acide aminé et son numéro (pour les protéines); les coordonnées tridimensionnelles.