

# UTILISER LES FONCTIONS DE BASE DE RASTOP EN LYCEE

François CORDELLIER, Professeur de SVT au lycée Jean Perrin de Rezé

Le logiciel rastop distribué sur le serveur de l'INRP remplace avantageusement Rasmol qui présentait des limitations et quelques défauts de stabilité. On retrouvera toutes les propriétés de Rasmol et des fonctionnalités nouvelles comme la possibilité de charger plusieurs molécules sur le même écran. Sans vouloir faire le tour des possibilités du logiciel, nous présentons trois manipulations classiques dans les lycées : La visualisation d'un petit morceau d'ADN en Seconde, l'étude du complexe enzyme-substrat en Première S et l'étude de la similitude entre les myoglobines en Terminale S. Pour une documentation complète consultez la documentation disponible sur le [site de l'INRP](#).

### Acquérir et installer le logiciel et les données

[Afficher une première molécule](#)

[Modifier l'affichage](#)

[Colorer par chaîne](#)

[Utiliser le zoom et les curseurs](#)

[Utiliser le pointeur](#)

[Sélectionner un nucléotide et le colorer](#)

[Afficher une enzyme et son substrat](#)

[Pratiquer une coupe](#)

[Afficher le squelette carboné](#)

[Utiliser la ligne de commande pour mettre en évidence un hétéroatome](#)

[Utiliser le multifenêtrage pour afficher plusieurs molécules à la fois](#)

[Mettre en évidence les similitudes](#)

[Téléchargement](#)

### Acquérir et installer le logiciel et les données

Le logiciel Rastop est téléchargeable sur le site de l'INRP. La seule condition est de s'enregistrer auprès du serveur et d'avoir une connexion assez rapide.

<http://www.inrp.fr/Acces/biotech/rastop/accueil.htm>



Décompactez le fichier directement sur l'unité disque C, par exemple. Un répertoire rastopv est créé automatiquement mais il n'y a pas de procédure d'installation proprement dite. Il suffit donc de créer un raccourci sur le bureau pour le programme "Rastop.exe"

Rastop utilise des fichiers au format .pdb (protein data bank)

Pour les données de base, le plus simple est d'utiliser les données de Rasmol mais il est aussi possible d'utiliser les fichiers mis à disposition par l'INRP ou les serveurs de données .pdb.

<http://www.inrp.fr/Acces/Biogeomode3d/data3d.htm>

<http://www.inrp.fr/Acces/biotech/rastop/html/3D-DB.htm>

Dans ce cas, le plus simple est de faire la requête <nom de la molécule> + .pdb dans le moteur de recherche de votre choix

Ouverte depuis novembre 2005, la librairie de molécules a pour but d'améliorer le transfert des connaissances de la recherche vers l'enseignement. Elle propose des modèles moléculaires sélectionnés à partir des banques de données des chercheurs par des enseignants pour les enseignants. Tout utilisateur peut contribuer à l'enrichissement de la librairie en proposant de nouveaux modèles et de nouvelles applications pédagogiques" Pour plus d'informations vous pouvez consulter la page d'accueil de la librairie : <http://librairiedemolecules.education.fr/aide.php?sujeat=apropos>

L'adresse de la librairie est : <http://www.librairiedemolecules.education.fr/> ou <http://librairiedemolecules.education.fr/>

[Retour](#)

### Afficher une première molécule

Après l'ouverture du logiciel, activez la commande "Fichier" / "Ouvrir"

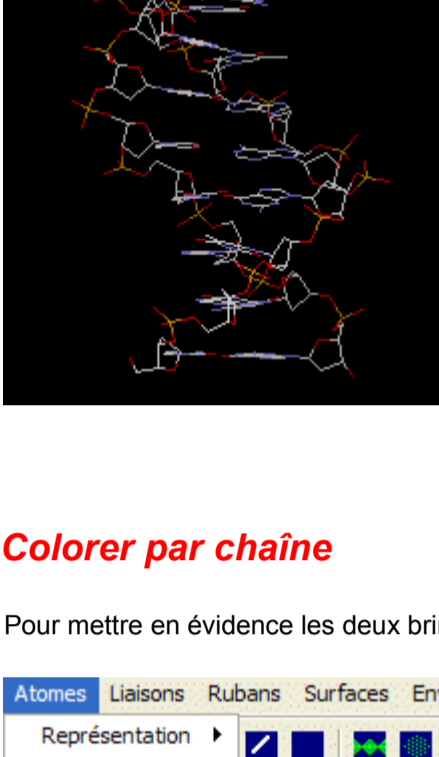


Il faut ensuite choisir le fichier portant l'extension .pdb avec l'explorateur.



[Retour](#)

### Modifier l'affichage

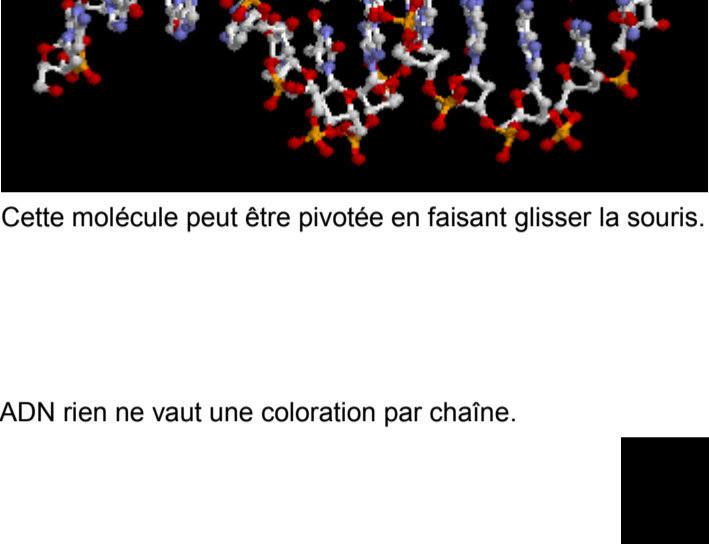


Par défaut l'affichage se fait sous forme de liaisons.

Les boutons suivants permettent de modifier l'affichage de toute la molécule ou de la sélection en cours



Pour le cas qui nous occupe c'est l'affichage "boules et bâtonnets" qui est le plus approprié

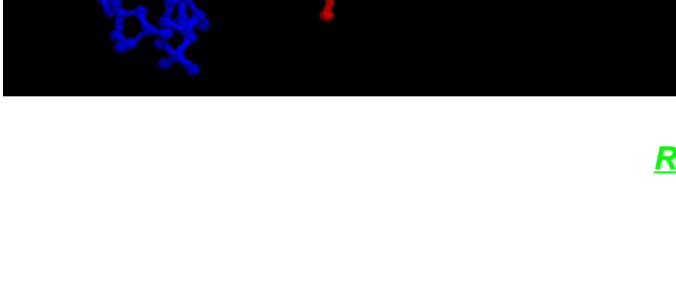
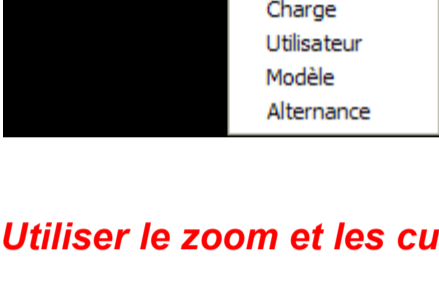


Cette molécule peut être pivotée en faisant glisser la souris.

[Retour](#)

### Colorer par chaîne

Pour mettre en évidence les deux brins de l'ADN rien ne vaut une coloration par chaîne.



[Retour](#)

### Utiliser le zoom et les curseurs

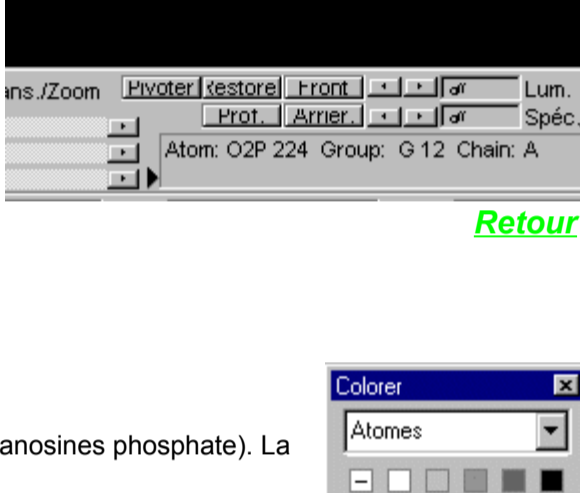
La découverte de la molécule passe aussi par l'utilisation du zoom. Choisir "Trans/Zoom" puis actionner le curseur Z pour modifier la taille de l'affichage. Les curseurs X et Y permettent les déplacements horizontaux et verticaux.



[Retour](#)

### Utiliser le pointeur

Un clic de souris sur un atome provoque l'affichage des caractéristiques de l'atome. Ici il s'agit de l'atome d'oxygène n° 224 lié au phosphate de la guanine N° 12 dans la chaîne A.



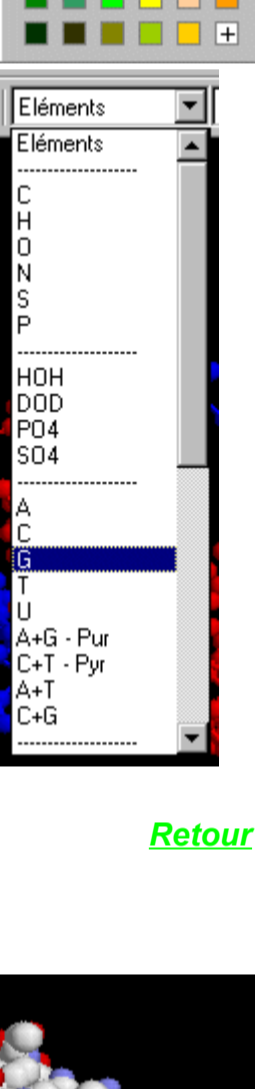
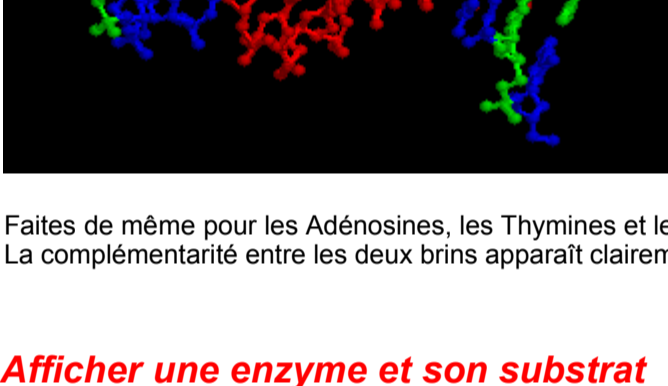
[Retour](#)

### Sélectionner un nucléotide et le colorer

Ces notations symboliques étant difficilement abordables, nous allons colorer toutes les guanines (en fait les guanosines phosphate). La première manœuvre consiste à afficher la palette de coloration en cliquant sur le bouton spécifique.

Il faut ensuite choisir l'élément à afficher dans la liste déroulante de la barre d'outils.

Cette sélection ne devient opérationnelle qu'après un clic sur ce bouton :

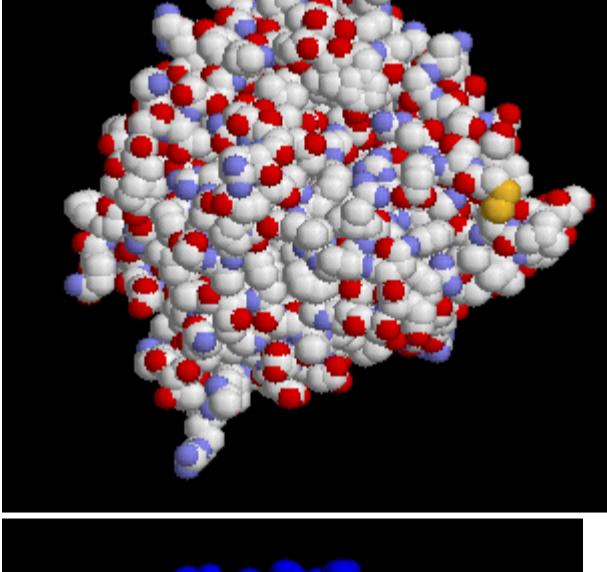


Faites de même pour les Adénosines, les Thymines et les Cytosines en respectant toutes les étapes de la sélection puis de la coloration. La complémentarité entre les deux brins apparaît clairement.

[Retour](#)

### Afficher une enzyme et son substrat

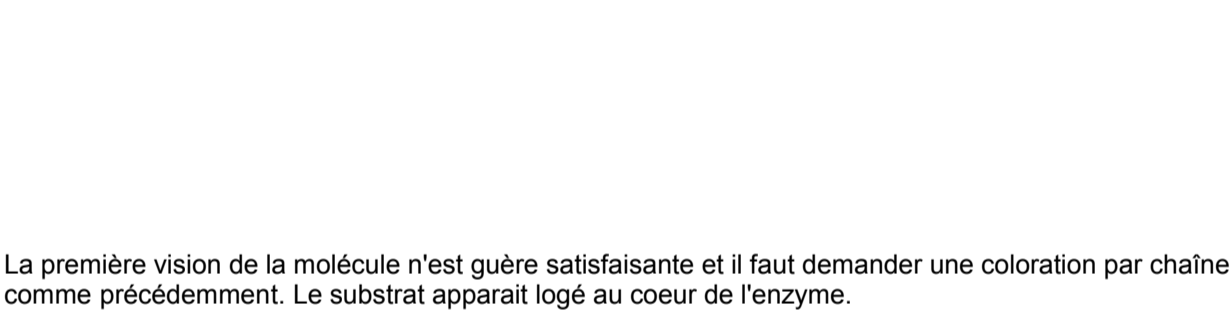
Dans le cadre du programme de Première S il est intéressant de travailler sur la complémentarité "enzyme-substrat". Pour ce nouvel exercice, cliquez sur "Fichier" / "Fermer". Sauf exception, ne sauvegardez pas les modifications apportées au fichier.



Pour obtenir un nouvel affichage il faut cliquer sur : "Fichier" / "Nouveau" puis "Fichier" / "ouvrir"

Le fichier à choisir est "cpa-sub". Il contient la carboxypeptidase et son substrat : un dipeptide.

On affichera la molécule en "Sphères VDW" ce qui correspond aux sphères de rayon de Van der Waals



[Retour](#)

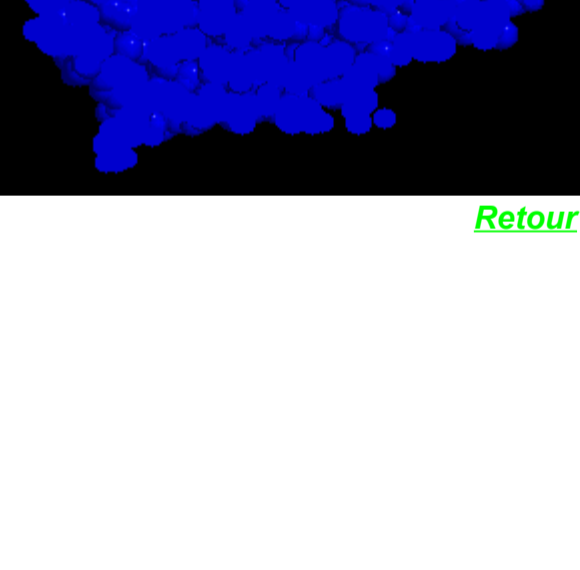
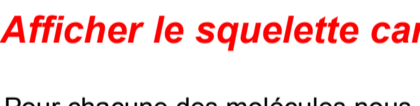
La première vision de la molécule n'est guère satisfaisante et il faut demander une coloration par chaîne comme précédemment. Le substrat apparaît logé au coeur de l'enzyme.

### Pratiquer une coupe

La meilleure façon de percevoir la complémentarité est de faire une coupe virtuelle dans la molécule.

Le panneau de contrôle inférieur permet de régler la profondeur de coupe.


Placez l'enzyme et son substrat en bonne position et enfoncez le bouton "Front". Les deux flèches immédiatement droite vont régler la profondeur de la coupe. Observez le résultat qui s'affiche en même temps pour obtenir la meilleure coupe possible.

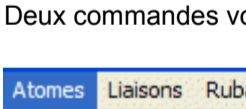


[Retour](#)

### Afficher le squelette carboné

Pour chacune des molécules nous allons sélectionner uniquement l'enzyme et modifier l'affichage pour voir uniquement le squelette carboné. La molécule affichée ayant deux chaînes, la chaîne du substrat est identifiée par la lettre S alors que l'autre ne l'est pas.

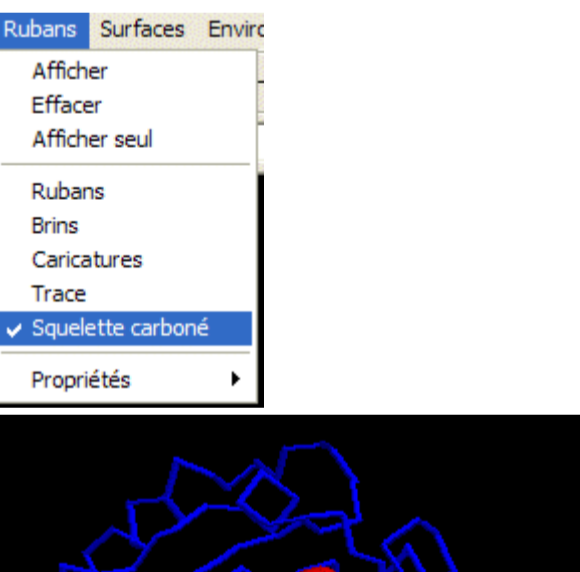
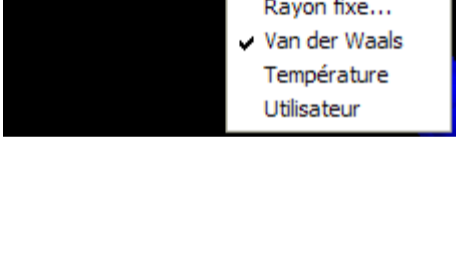
En utilisant le bouton expressif , il est possible d'ouvrir une fenêtre où l'on écrit les caractéristiques des atomes à sélectionner. Ici, il s'agit de tous les atomes qui appartiennent au substrat. L'expression "S" est écrite dans la fenêtre puis validée.



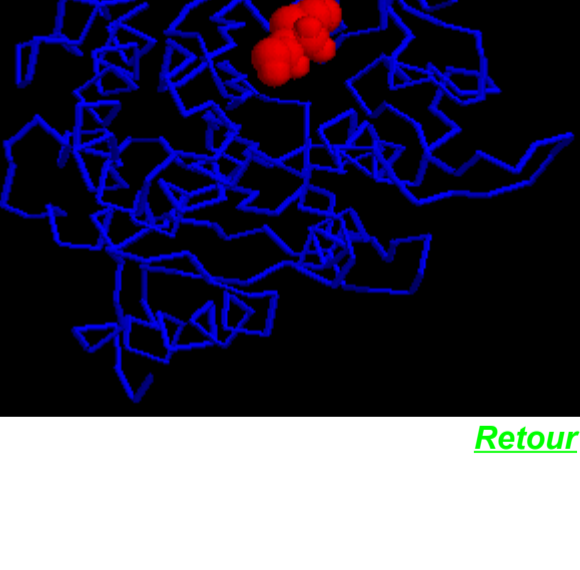
Le nombre d'atome sélectionné s'affiche.

Pour sélectionner maintenant la chaîne de l'enzyme, il suffit d'utiliser le bouton "Inverser la sélection"

Deux commandes vont modifier l'aspect de cette chaîne :



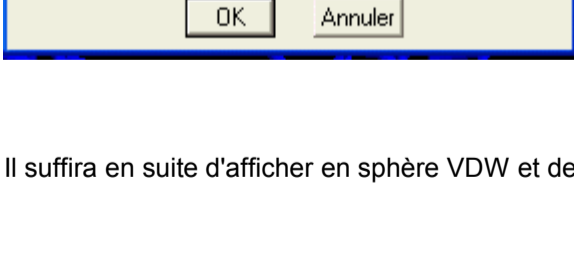
Le résultats est très clair : le substrat affiché en sphères VDW apparaît au milieu du squelette carboné.



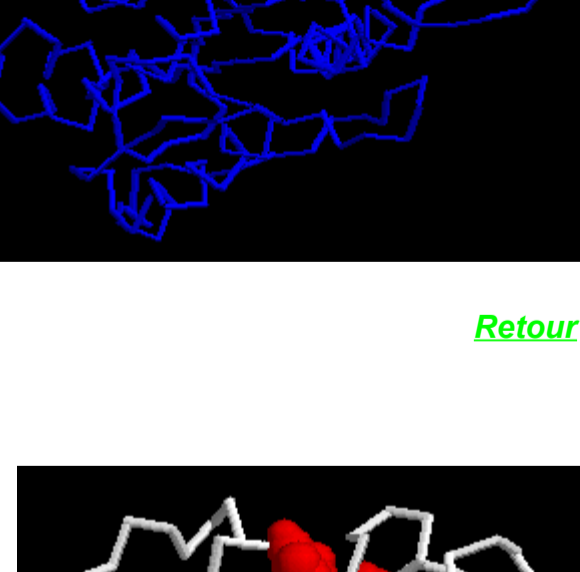
[Retour](#)

### Utiliser la ligne de commande pour mettre en évidence un hétéroatome

Il peut être intéressant de montrer que la chaîne de l'enzyme sélectionnée contient un atome de Zinc responsable de la catalyse. Après avoir sélectionné la chaîne de l'enzyme sélectionnez "Zn"



Il suffira en suite d'afficher en sphère VDW et de colorer l'atome sélectionné.

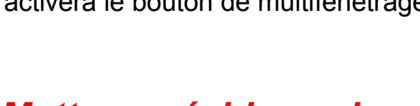


[Retour](#)

### Utiliser le multifenêtrage pour afficher plusieurs molécules à la fois

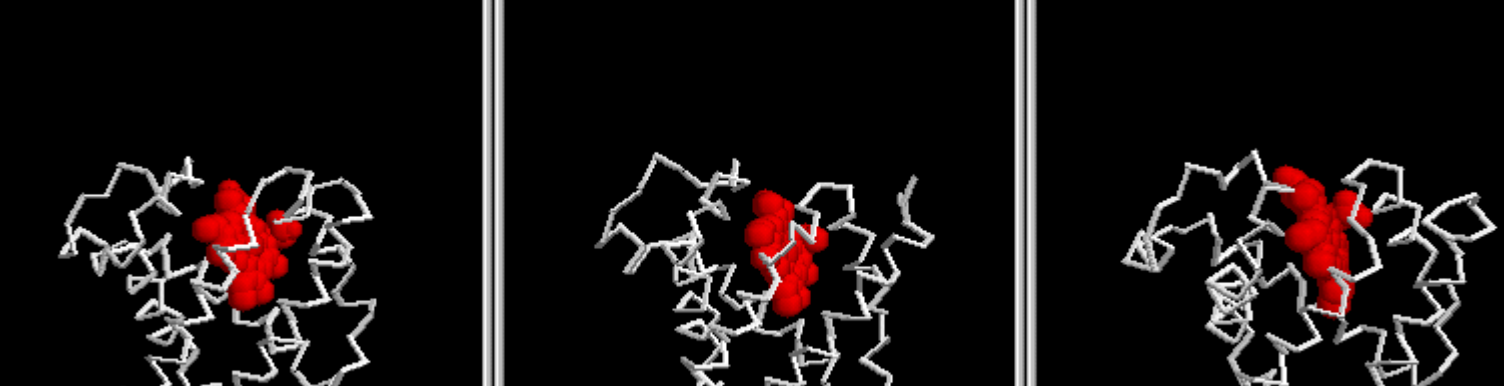
L'objectif de cette manipulation est de montrer la grande similitude entre les myoglobines de trois Mammifères très différents : le Porc, le Cachalot et le Phoque.

Pour chacune des molécules on affichera la chaîne protéique en squelette carboné et on sélectionnera le ligand (ici l'hème) pour l'afficher en sphères VDW avec une couleur différente de celle de la protéine.



[Retour](#)

### Mettre en évidence les similitudes



Les formes générales des molécules sont très similaires. L'utilisation du pointeur permet de se rendre compte que les quatre acides aminés qui assurent le maintien de l'hème dans son site sont identiques pour ces trois myoglobines. Les autres acides aminés des séquences sont beaucoup moins constants. On pourra donc aborder les notions de similitude globale et de contrainte fonctionnelle.

[Retour](#)

### Téléchargement

Ce site est constitué d'une seule page html, il est donc possible d'utiliser la fonction "Enregistrer sous" de votre navigateur pour l'enregistrer sur votre disque dur. Vous pouvez aussi télécharger un fichier compressé ou un fichier pdf qui vous donnera la totalité du dossier avec la feuille de style et tous les fichiers d'images.