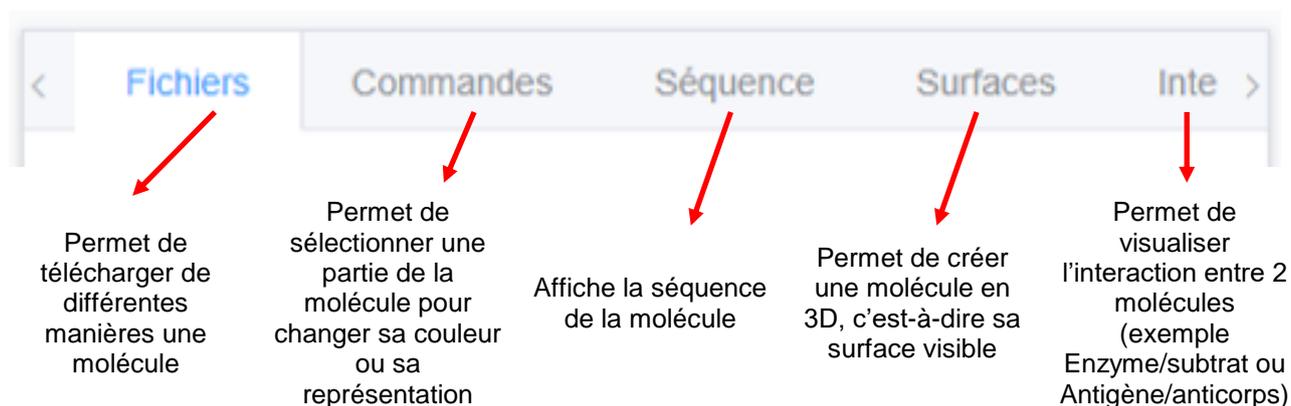
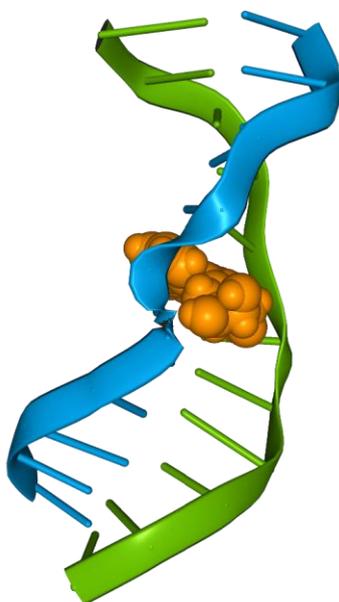


Fiche technique : utilisation de Libmol (logiciel de visualisation de molécules)



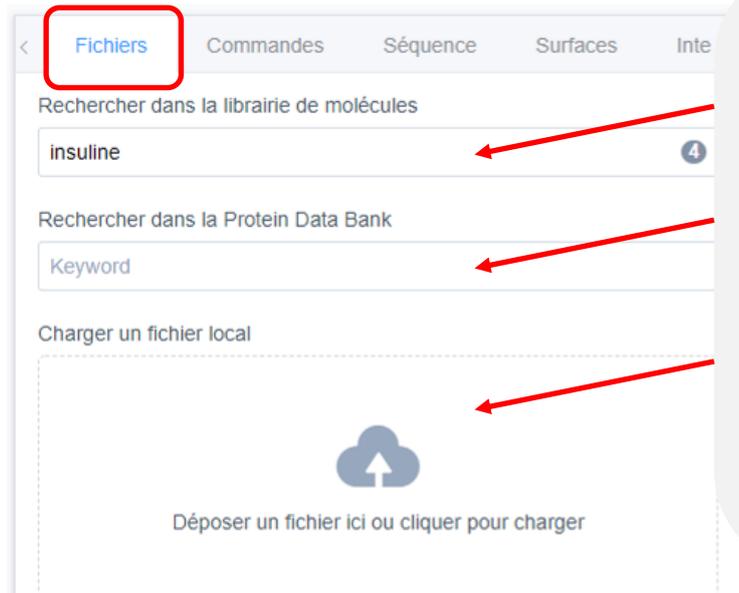
Objectifs de la fiche :

1. Ouvrir un fichier de molécule
2. **Sélectionner, représenter, colorer la molécule (le plus important 😊)**
3. Zoomer / dé zoomer, tourner, déplacer la molécule
4. Information sur la séquence de la molécule (et sélection)
5. Représentation en 3D (vue en surface) de la molécule
6. Afficher la complémentarité entre 2 molécules (= visualisation clé serrure)
7. Afficher les liaisons au sein de la molécule (liaisons disulfures, hydrogènes, etc.)
8. Mesurer la taille de la molécule, un angle dans la molécule
9. Importer une molécule à partir de la base PDB (Protein Data Bank)



Représentation d'un ADN muté par un hydrocarbure polycyclique aromatique de la fumée de cigarette (en orange)

Objectif 1 - Ouvrir un fichier de molécule



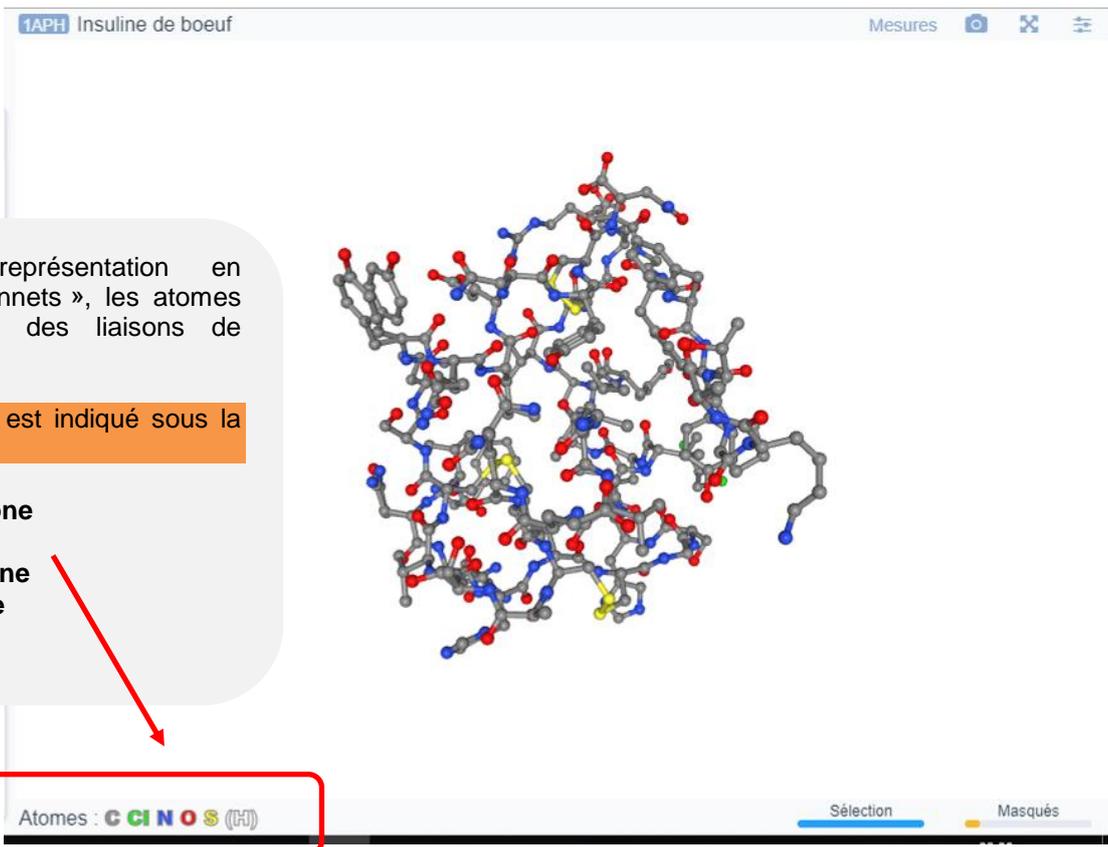
Dans le menu « fichier », 3 méthodes pour télécharger votre molécule en ligne :

Taper son nom dans la librairie de molécule

Taper son code dans la base de PDB

Placer le fichier avec une extension .pdb dans cet espace

Dans les 3 cas, la fenêtre s'ouvre avec la molécule affichée selon un mode classique.

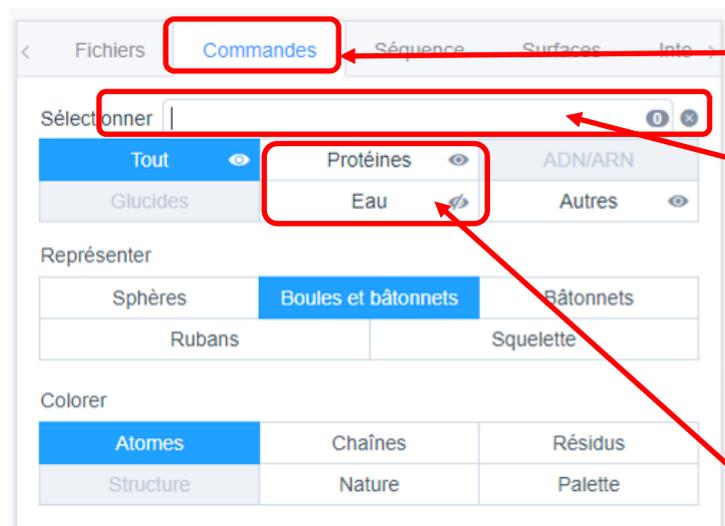


Dans cette représentation en « boules et bâtonnets », les atomes sont reliés par des liaisons de covalence.

Le code couleur est indiqué sous la molécule, ici :

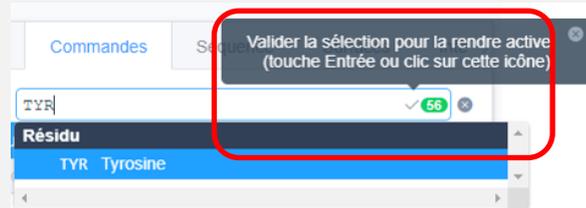
Gris = carbone
Violet = azote
Rouge = oxygène
Jaune = soufre

Objectif 2 - Sélectionner, représenter, colorer la molécule



Dans le menu « Commandes », vous pouvez sélectionner la partie de la molécule qui vous intéresse.

Méthode 1 - en tapant le nom du nucléotide (ex : guanine) ou de l'acide aminé (ex : tyrosine). Attention à bien valider votre sélection



Méthode 2 – en choisissant une des options proposés, mais le choix est restreint ;(

En fait cet outil « sélectionner » va vous permettre de sélectionner pour afficher ce que vous voulez dans une molécule : par exemple uniquement les guanines, ou uniquement les acides aminés 33 à 44 de la chaîne B, etc. A vous d'écrire dans cette case, la notation adéquate en utilisant le vocabulaire suivant :

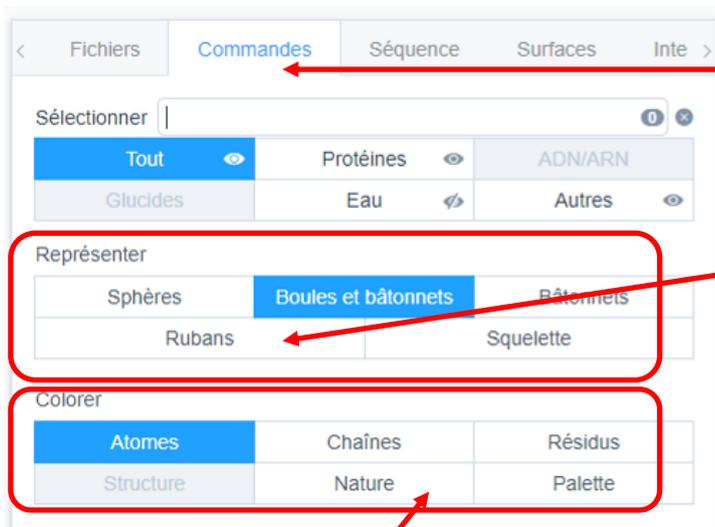
Commande	Sélection correspondante
val	toutes les valines
val and 10	toutes les valines en position 10 dans les chaînes
:B	chaîne B (Attention à la majuscule)
10:B	l'acide aminé (ou le nucléotide) en position 10 dans la chaîne B
_C	tous les atomes de carbone
ala and .ca and not 10	tous les carbones alpha des alanines sauf dans l'acide aminé en position 10
protein and not (:C,:B)	tous les atomes appartenant à des protéines mais pas aux chaînes C et B

Mot clé	Signification
all	tous les atomes
protein	protéines et acides aminés
nucleic	ADN, ARN et nucléotides
dna	ADN
rna	ARN
hetero	Hétéroatomes
saccharide	Glucides
ion	Ions

Mot clé	Signification
water	Eau
polymer	Protéine, ADN ou ARN
backbone	Squelette d'une protéine ou d'un acide nucléique
sidechain	Chaîne latérale (acide aminé) ou base nucléique
helix	Hélices
sheet	Feuillets
turn	Structure secondaire ni en hélice, ni en feuillet
Voir la suite des mots clés dans la documentation de NGL	

Expression	Signification
1,2,3	Sélection des résidus par leur numéro
1-10	Sélection d'une suite de résidus (ici, de 1 à 10)
:A	Sélection d'une chaîne à partir de son identifiant
#H,#C,#O	Sélection des atomes par leur symbole chimique
.CA,.N3	Sélection des atomes par leur nom dans le fichier PDB
ALA,HEM	Sélection des résidus par leurs noms
[032],[CT1]	Sélection des résidus dont les noms contiennent des chiffres
Se référer à la documentation de NGL pour des exemples plus avancés	

Les expressions et les mots clés peuvent être combinés entre eux par des opérateurs logiques (AND, OR, NOT). Des parenthèses peuvent être utilisées pour grouper les expressions.



Dans le menu « Commandes », vous pouvez changer le mode de représentation.

L'option 'boules et bâtonnets' est adaptée pour les petites molécules.

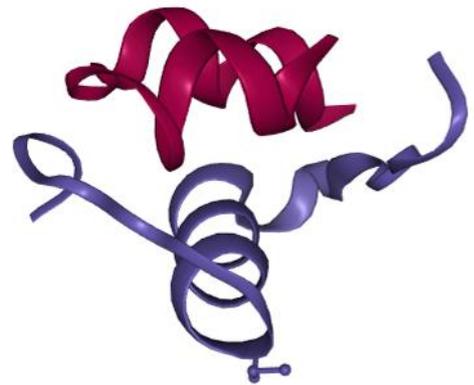
L'option 'Rubans' est adaptée pour les grosses molécules (ADN, protéine) car il simplifie énormément la vue.

Dans le menu « Commandes », vous pouvez changer la couleur de la représentation.

L'option « Chaînes » permet de distinguer facilement plusieurs chaînes.

L'option « Atomes » permet d'afficher les atomes suivant le code classique des chimistes.

L'option « Palette » permet de choisir ses propres couleurs.

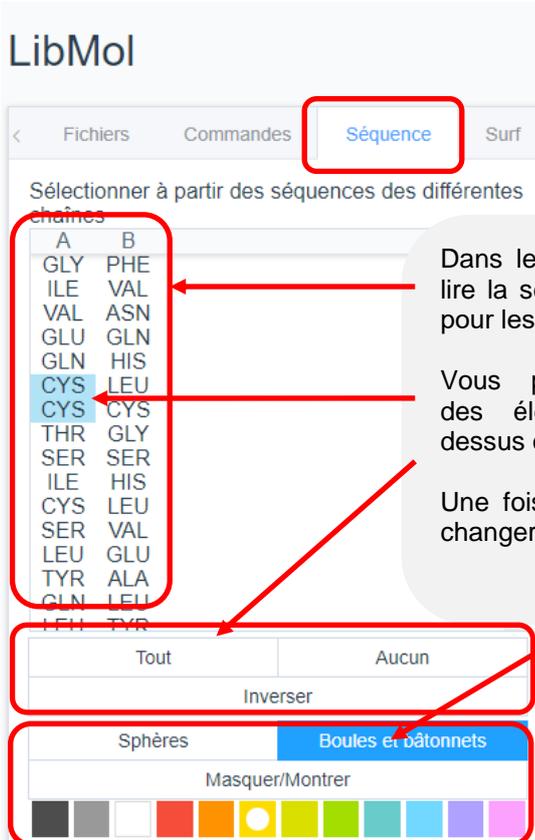


Représentation en rubans et en chaînes de la molécule d'insuline (protéine à 2 chaînes)

Objectif 3 - Zoomer / dé zoomer, 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 – Information sur la séquence de la molécule (et sélection)

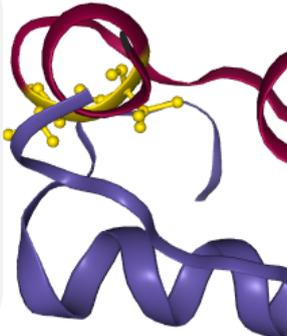


The screenshot shows the LibMol interface for 'Insuline humaine' (313Z). The 'Séquence' menu is open, displaying a list of amino acids in two columns (A and B). The amino acids listed are: A: GLY, ILE, VAL, GLU, GLN, CYS, THR, SER, ILE, CYS, SER, LEU, GLN, LEU, LEU; B: PHE, VAL, ASN, GLN, HIS, LEU, CYS, GLY, SER, HIS, LEU, VAL, GLU, ALA, LEU, TYR. The 'Séquence' menu is highlighted with a red box. The amino acid list is also highlighted with a red box. Below the list, there are buttons for 'Tout', 'Aucun', and 'Inverser'. At the bottom, there are representation options: 'Sphères' and 'Boules et bâtonnets' (which is selected and highlighted with a red box). A color palette for 'Masquer/Montrer' is also visible.

Dans le menu « Séquence », vous pouvez lire la séquence de la molécule étudiée (ici pour les 2 chaînes de l'insuline).

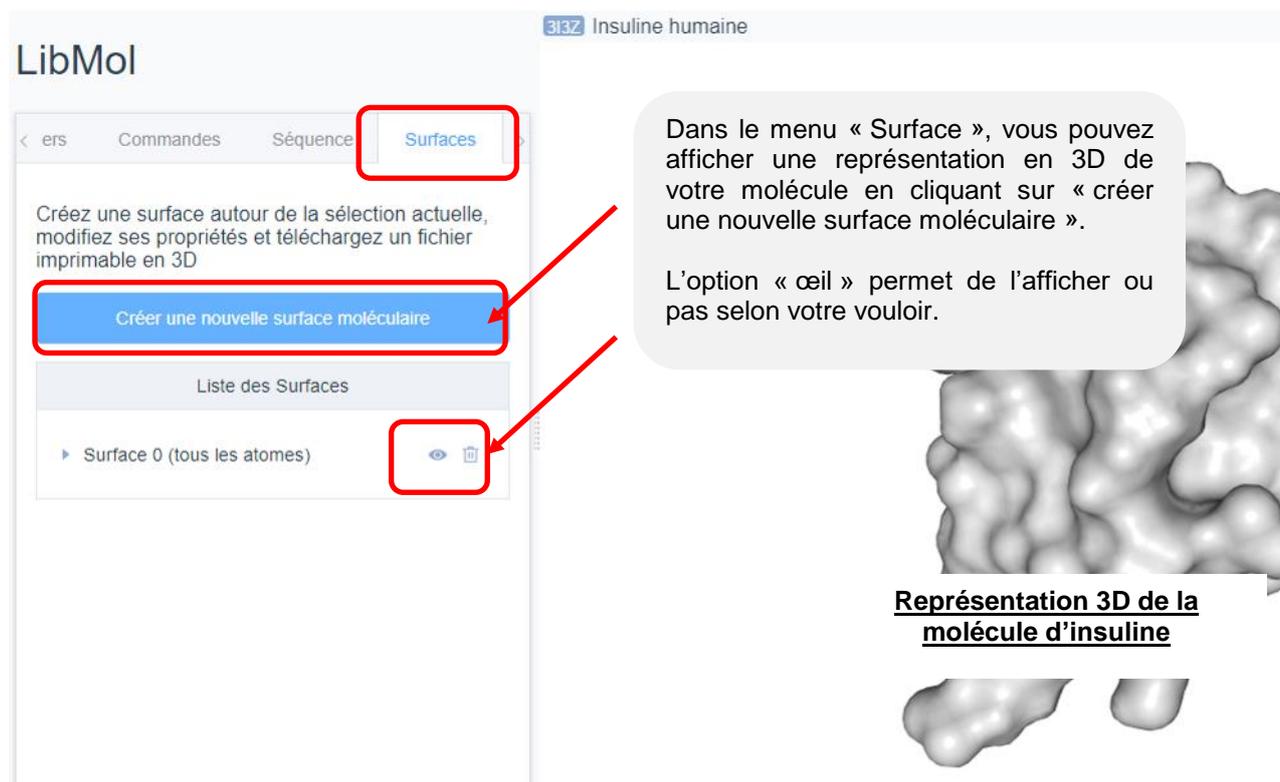
Vous pouvez sélectionner/désélectionner des éléments en cliquant directement dessus ou via les options.

Une fois la sélection opérée, vous pouvez changer la représentation et/ou la couleur



Représentation en rubans et en chaînes de la molécule d'insuline avec 2 cystéines mises en évidence

Objectif 5 : afficher une représentation en 3D (vue en surface) de la molécule



The screenshot shows the LibMol web interface for the protein '3132 Insuline humaine'. The 'Surfaces' menu is highlighted with a red box. Below it, the instruction 'Créer une surface autour de la sélection actuelle, modifiez ses propriétés et téléchargez un fichier imprimable en 3D' is visible. A blue button labeled 'Créer une nouvelle surface moléculaire' is also highlighted with a red box. Below this, a table titled 'Liste des Surfaces' contains one entry: 'Surface 0 (tous les atomes)'. The 'œil' (eye) icon next to this entry is highlighted with a red box. A callout box explains that clicking 'Créer une nouvelle surface moléculaire' displays a 3D surface representation, and the 'œil' icon allows toggling its visibility. To the right, a 3D surface representation of the insulin molecule is shown.

Dans le menu « Surface », vous pouvez afficher une représentation en 3D de votre molécule en cliquant sur « créer une nouvelle surface moléculaire ».

L'option « œil » permet de l'afficher ou pas selon votre vouloir.

Représentation 3D de la molécule d'insuline

Objectif 6 : afficher la complémentarité entre 2 molécules (= visualisation clé serrure)



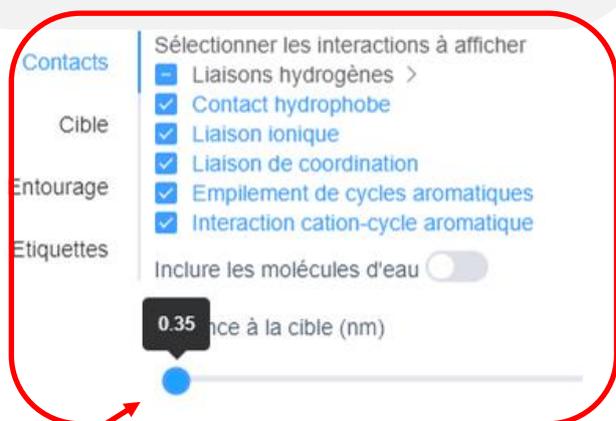
Dans le menu « Interaction ».

Au choix : option « avec ligand » si vous étudiez une enzyme fixée avec son substrat ou l'option « entre chaînes » si vous étudiez par exemple un anticorps avec son antigène.

Sélectionner la chaîne que vous souhaitez étudier.

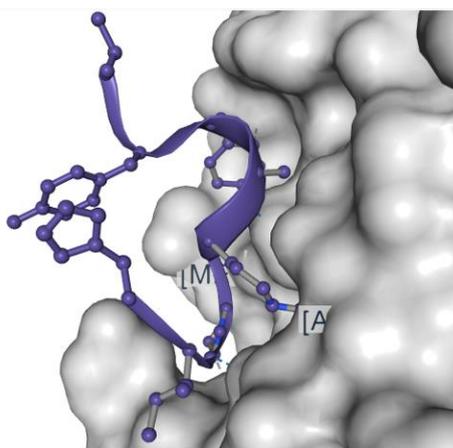
Si nécessaire, restreindre la zone de contact avec un nombre limité de chaînes en les sélectionnant.

Créer l'image en cliquant

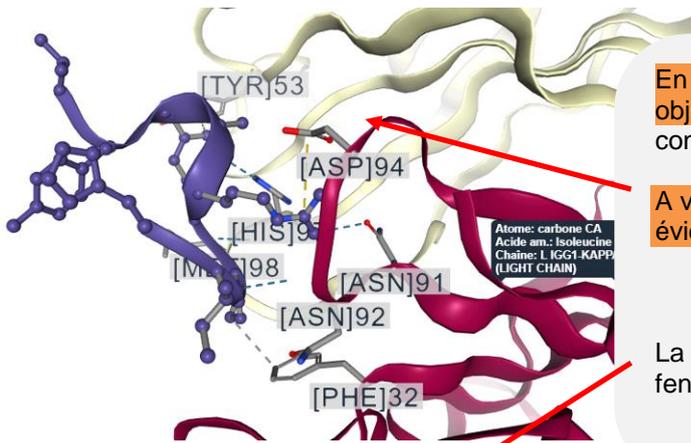


Activer l'option réglage, elle ouvre une nouvelle fenêtre dans laquelle vous pouvez adapter l'affichage.

Ex : vous pouvez diminuer au minimum la distance entre la cible et les chaînes



Représentation 3D d'un antigène fixé par son anticorps spécifique



En faisant disparaître la molécule en surface (voir objectif 5), vous voyez clairement les zones de contact entre les molécules (= système clé/serrure).

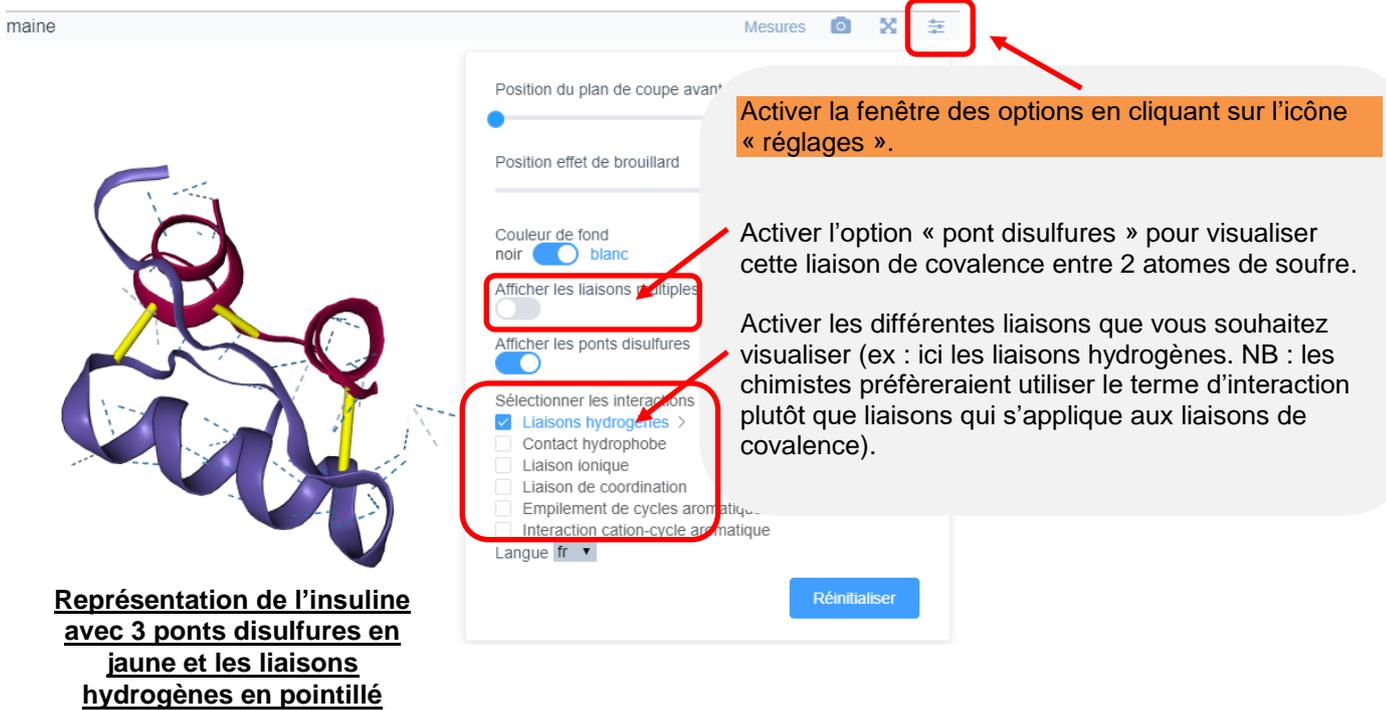
A vous de noter le numéro des éléments mis en évidence (ex : tyrosine n° 53, asparagine 94).

La nature des liaisons est même indiquée sous la fenêtre graphique

--- Liaison ionique
 --- Liaison hydrogène
 --- Liaison hydrogène de la structure secondaire
 --- Contact hydrophobe
 Chaînes : L H P

Sélection

Objectif 7 : afficher les liaisons au sein de la molécule (liaisons disulfures, hydrogènes, etc.)



maine Mesures

Position du plan de coupe avant

Position effet de brouillard

Couleur de fond noir blanc

Afficher les liaisons multiples

Afficher les ponts disulfures

Sélectionner les interactions

- Liaisons hydrogènes >
- Contact hydrophobe
- Liaison ionique
- Liaison de coordination
- Empilement de cycles aromatique...
- Interaction cation-cycle aromatique

Langue |fr

Réinitialiser

Activer la fenêtre des options en cliquant sur l'icône « réglages ».

Activer l'option « pont disulfures » pour visualiser cette liaison de covalence entre 2 atomes de soufre.

Activer les différentes liaisons que vous souhaitez visualiser (ex : ici les liaisons hydrogènes. NB : les chimistes préféreraient utiliser le terme d'interaction plutôt que liaisons qui s'applique aux liaisons de covalence).

Représentation de l'insuline avec 3 ponts disulfures en jaune et les liaisons hydrogènes en pointillé

Objectif 8 : Mesurer la taille de la molécule, un angle dans la molécule



maine Mesures

Distance Angle

Activer la mesure de distances off on

	Atome 1	Atome 2	Distance
	CA 816 ALA30	CA 315 PHE1	2.35 nm

Activer la fenêtre en cliquant sur l'icône « Mesures ».

Au choix : mesure d'une distance ou d'un angle

Cliquer directement les 2 points (2 atomes) dont vous souhaitez connaître la distance les séparant.

La distance est donnée en nm (10^{-9} mètres), ici 2,35 nm. Effectivement, au niveau moléculaire les tailles sont nanoscopiques !

Objectif 9 : Importer une molécule à partir de la base PDB (Protein Data Bank)

Rechercher dans la base de PDB, votre protéine ; Sélectionner dans le menu à droite « cross reference » et une longue liste apparaît : il vous suffit alors de sélectionner l'une des molécules au choix : c'est toujours une référence en 4 chiffres/lettres.

Select the link destinations:	PDB entry	Method	Resolution (Å)	Chain
<input checked="" type="radio"/> PDBe ⁱ	1A7F	NMR	-	A
<input type="radio"/> RCSB PDB ⁱ				B
<input type="radio"/> PDBj ⁱ	1A10	NMR	-	A/C/E/G/I/K

Dans la nouvelle fenêtre qui apparaît, télécharger alors la molécule via « PDB file », il est alors enregistré dans le dossier téléchargement

PDBe > 1a7f

INSULIN MUTANT B16 GLU, B24 GLY, DES-B30, NMR, 20 STRUCTURES
Source organism: *Homo sapiens*
Primary publication:
[A structural switch in a mutant insulin exposes key residues for receptor binding.](#)
Ludvigsen S, Olsen HB, Kaarsholm NC
J. Mol. Biol. **279** 1-7 (1998)
PMID: 9636695

Released: 15 Jul 1998
DOI: [10.2210/pdb1a7f/pdb](https://doi.org/10.2210/pdb1a7f/pdb)

Function and Biology
Biochemical function: hormone activity
Biological process: not assigned
Cellular component: extracellular region

Ligands and Environments
No bound ligands
No modified residues

Downloads
Archive mmCIF file
Updated mmCIF file
PDB file
PDB structure
PDB file (gz)
PDBML

Ouvrir ensuite l'application LibMol, puis dans la case « charger un fichier local » ou via la référence 4 chiffres/lettres votre molécule :

LibMol

Fichiers | Commandes | Séquence | Sur

Rechercher dans la librairie de molécules
Mot clé

Rechercher dans la Protein Data Bank
Keyword

Charger un fichier local

↑
Déposer un fichier ici ou cliquer pour charger