

Utilisation du logiciel Raswin

Télécharger le logiciel en français : <http://www.inrp.fr/Acces/Biogeo/html/rasmol.htm>

Télécharger un fichier de molécule sur le site de la protein data bank : <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

Ouvrir le fichier de molécule (extension pdb) avec raswin.

Exemple de l'hexokinase, référence « 1BDG » : <http://www.rcsb.org/pdb/explore/explore.do?structureId=1BDG>

3 fenêtres s'ouvrent, la représentation de la molécule, le menu et les lignes de commande :

RasMol - Menu Principal

Fichier Editer Afficher Colorer Exporter Options Aide

Nom de la molécule: HEXOKINASE;
Atomes Sélectionnés: 3482/3482
Atome repéré: None
RasMol>

RasMol Command Line

RasMol Molecular Renderer
Roger Sayle, August 1995
Version 2.6

Molecule name HEXOKINASE;
Classification HEXOKINASE
Secondary Structure . PDB Data Records
Brookhaven Code 1BDG
Number of Chains 2
Number of Groups 444 (108)
Number of Atoms 3351 (131)
Number of Bonds 25
Number of Helices ... 19
Number of Strands ... 12
Number of Turns 0
Number of Bonds 3433

RasMol>

Note : le fichier pdb peut être ouvert dans Wordpad (clic droit, ouvrir avec, Wordpad), il contient toutes les données relatives à la molécule, références, bibliographie, technique employée pour la résolution de la structure, coordonnées des atomes...

- Clic gauche + mouvement de la souris permet de faire tourner la molécule
- Clic droit + mouvement de la souris permet de déplacer la molécule
- Maj + clic gauche + mouvement de la souris permet de zoomer

Un **manuel utilisateur** est disponible dans le menu « Aide », il contient notamment les lignes de commande disponibles pour

sélectionner la molécule entière (**select all**), ou seulement certains groupes d'atomes comme les acides aminés (**select + code à 3 lettres**), les sucres (**select glc** pour le glucose, **select nag** pour la N-acétyl glucosamine...) ou les bases azotées (**select A** ou **T** ou **G** ou **C**). Il devient alors possible de modifier la représentation et les couleurs de

Hexokinase.pdb - WordPad

Echier Edition Affichage Insertion Format ?

```
load pdb inline
exit
HEADER          HEXOKINASE                      08-MAY-98  1BDG
TITLE           HEXOKINASE FROM SCHISTOSOMA MANSONI COMPLEXED WITH GLUCOSE
COMPND          MOL_ID: 1;
COMPND          2 MOLECULE: HEXOKINASE;
COMPND          3 CHAIN: NULL;
COMPND          4 SYNONYM: ATP/D-HEXOSE-6-PHOSPHOTRANSFERASE;
COMPND          5 EC: 2.7.1.1;
COMPND          6 ENGINEERED: YES;
COMPND          7 BIOLOGICAL_UNIT: MONOMER
SOURCE          MOL_ID: 1;
SOURCE          2 ORGANISM_SCIENTIFIC: SCHISTOSOMA MANSONI;
SOURCE          3 ORGANISM_COMMON: BLOOD FLUKE;
SOURCE          4 EXPRESSION_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI
KEYWDS          HEXOKINASE, PHOSPHOTRANSFERASE
EXPDTA         X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR         A.M.MULICHAK,R.H.GARAVITO
REVDAT         1 11-MAY-98 1BDG 0
REMARK         1
REMARK         1 REFERENCE 1
REMARK         1 AUTH  A.M.MULICHAK, J. E. WILSON, K. PADMANABHAN, R. M. GARAVITO
REMARK         1 TITL  THE STRUCTURE OF MAMMALIAN HEXOKINASE-1
REMARK         1 REF  NAT.STRUCT.BIOL. V. 5 555 1998
REMARK         1 REFN  ASTM NSBIEW US ISSN 1072-8368 2024
REMARK         2
REMARK         2 RESOLUTION. 2.6 ANGSTROMS.
REMARK         3
REMARK         3 REFINEMENT.
REMARK         3 PROGRAM : X-PLOR 3.1
REMARK         3 AUTHORS  : BRUNGER
REMARK         3
REMARK         3 DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK         3 RESOLUTION RANGE HIGH (ANGSTROMS) : 2.6
REMARK         3 RESOLUTION RANGE LOW (ANGSTROMS) : 20.0
REMARK         3 DATA CUTOFF (SIGMA(F)) : 2
REMARK         3 DATA CUTOFF HIGH (ABS(F)) : NULL
```

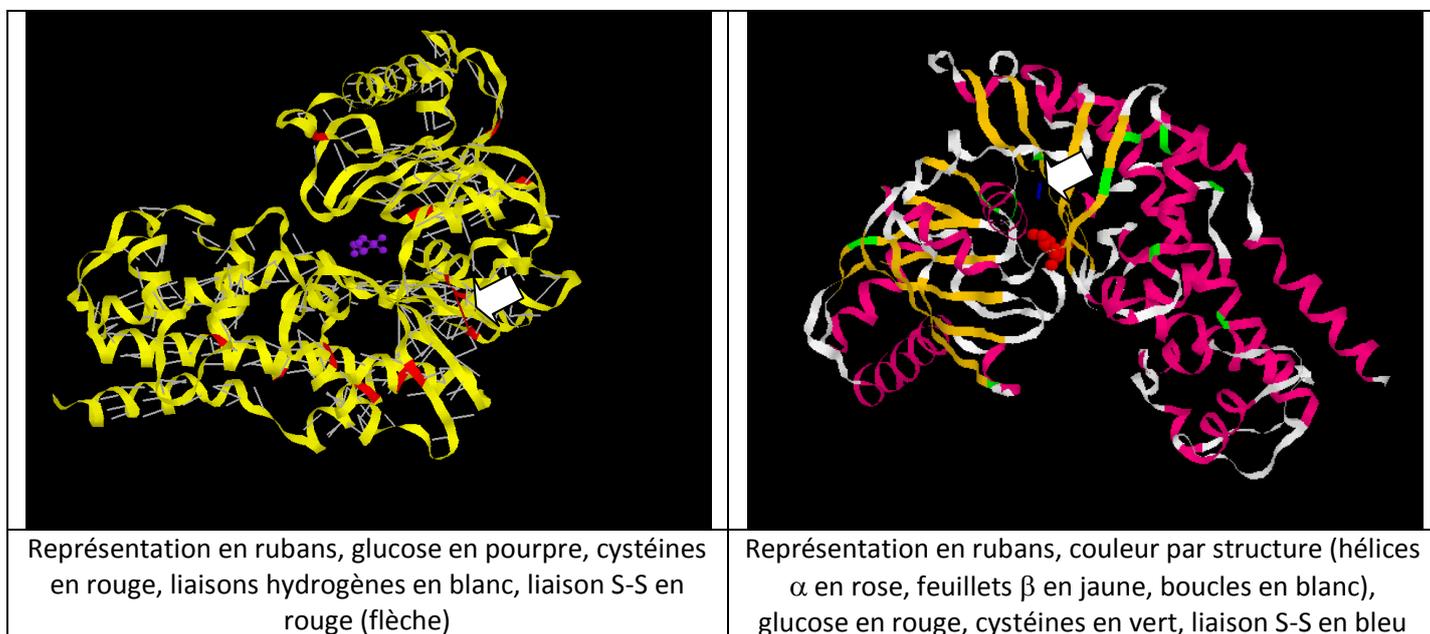
Appuyez sur F1 pour obtenir de l'aide

chaque groupe d'atomes (par l'intermédiaire du menu ou des lignes de commande (**color red** ou **colour blue**), pour mettre en évidence les bases complémentaires de l'ADN, les cystéines pour les ponts disulfures, le substrat (glucose dans l'exemple présent).

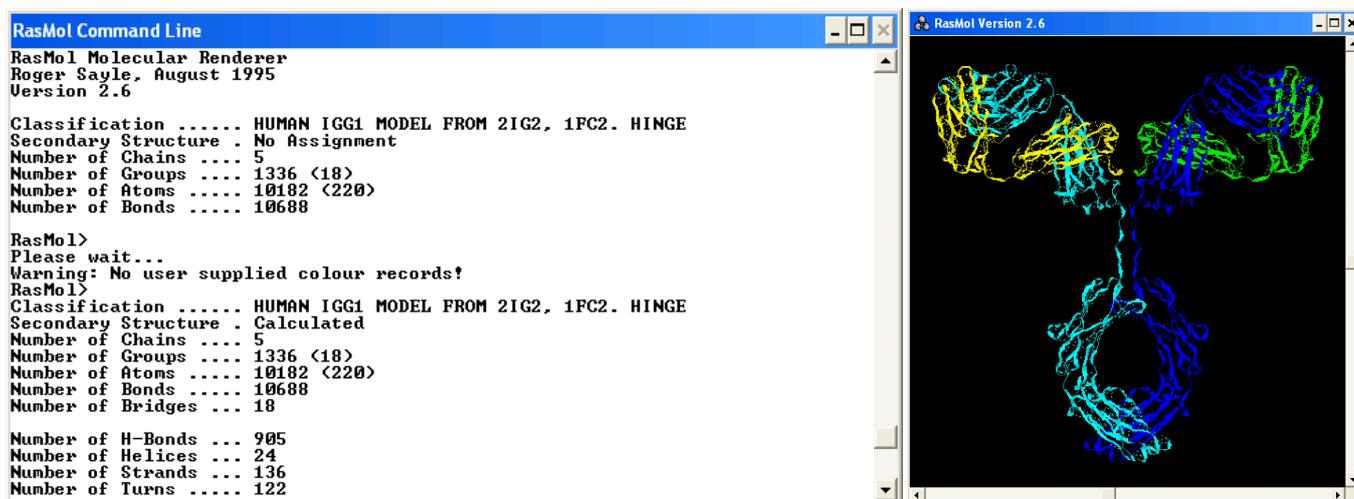
Note : une fois un groupe d'atomes sélectionné, il faut utiliser la commande **select all** pour retravailler la molécule entière ou sélectionner un autre groupe d'atomes ou des liaisons.

Les liaisons hydrogènes (**hbond**) et les ponts disulfures (**ssbond**) peuvent apparaître par l'intermédiaire du menu et des lignes de commande.

Exemple de représentations :



Une IgG :



Autres liens :

- <http://cat.middlebury.edu/~chem/chemistry/pdb/>
- [http://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=education discussion/molecule of the month/alphabetical list.html](http://www.rcsb.org/pdb/static.do?p=education+discussion/molecule+of+the+month/alphabetical+list.html)
- [http://www.rasmol.org/software/RasMol Latest Manual.html#background](http://www.rasmol.org/software/RasMol+Latest+Manual.html#background)

Sélection de commandes pour Rasmol

	Commandes de base	Explication	Commandes avancées	Explication	
S'informer...> show					
Sur la molécule affichée	Show information			Présente dans command line quelques informations sur la molécule.	
Sur la séquence de la molécule	Show sequence			Présente la séquence d'une molécule : séquence de nucléotides pour un acide nucléique, séquence d'acides aminés pour un protéine. Si la molécule contient plusieurs chaînes ou molécules distinctes, la séquence est détaillée par chaîne.	
Sur l'atome, l'acide aminé, la chaîne...	Cliquer sur l'atome et lire la réponse dans le module Command line				
Sélectionner ...> select					
Toute la molécule	select all				
Une partie de la molécule, par exemple autour du site actif (ligand = nag)	On demande au logiciel de sélectionner les atomes dans un rayon de 6,5 Å autour du substrat. On tape dans la ligne de commande, l'instruction suivante : select within (6.5,nag) , ou restrict within (6.5,nag) , on valide et on choisit une autre forme de représentation que celle en cours, par exemple, " spacefills " : la zone sélectionnée apparaît seule sous cette forme				
des atomes par leur catégorie	carbone	select carbon	sélection de tous les atomes de carbone	select *.C? select *.C??	sélection des carbones notés CA, CB, sélection des carbones notés C5M...
	oxygène	select oxygen	sélection de tous les atomes d'oxygène	select *.O? select *.O??	sélection des oxygènes notés O1, O2... sélection des oxygènes notés O5*, O2P
	azote	select nitrogen	sélection de tous les atomes d'azote	select *.N?	sélection des azotes notés N2, N4
	soufre	select sulfur		select *.s	sélection de tous les atomes de soufre
	fer	select iron		select *.fe	sélection de tous les atomes de fer
	phosphore	select phosphorus		select *.P	sélection de tous les atomes de phosphore
par leur numéro	select atomno=120			Sélection de l'atome 120. Ce numéro d'atome est fourni dans commande line quand un clic est fait sur un atome. Ex: O4* 108 = atome d'oxygène numéro 108	
des nucléotides de l'ADN	adénine	select a			Sélection des nucléotides à adénine
	thymine	select t			Sélection des nucléotides à thymine
	guanine	select g			Sélection des nucléotides à guanine
	cytosine	select c			Sélection des nucléotides à cytosine
	couple AT	select at			Sélection des couples Adénine Thymine
	couple cg	select cg			Sélection des couples Cytosine-Guanine
des acides aminés d'une protéine	par leur numéro	select 1			Sélection de l'acide aminé numéro 1. Si la molécule possède plusieurs chaînes, tous les acides aminés 1 sont sélectionnés.
		select 1-5			Sélection des acides aminés 1 à 5
		select 1,4			Sélection des acides aminés 1, 4 et 10
	par le type d'acide aminé	select cys			Sélection de toutes les cystéines
	un acide aminé précis	select pro10			Sélection de la proline 10 Commande utile pour réaliser un sélection sur une molécule à plusieurs chaînes.
	par leurs propriétés	select polar			Sélection des acides aminés qui portent une charge électrique
		select hydrophobic			Sélection des acides aminés qui sont hydrophobes
select not hydrophobic				Sélection des acides aminés qui sont hydrophiles	
la composante protéique d'une molécule	select protein			Ces commandes sont utiles pour une molécule montrant plusieurs chaînes comme une ribonucléase avec son substrat.	
la composante nucléique d'une molécule	select nucleic				

une chaîne	<code>select *A</code>		Sélection de la chaîne A de la molécule. Faire un show séquence pour connaître les chaînes présentes
l'hème d'une globine	<code>select hem</code>		Sélection de tous les atomes de l'hème.
Sélectionner à l'aide d'opérateurs			
et	<code>and</code>		<code>select carbon and oxygen</code> Sélectionne tous les atomes de carbone et d'oxygène
non	<code>not</code>		<code>select not nitrogen</code> Élimine les atomes d'azote de la sélection courante
et ne pas	<code>and not</code>		<code>select carbon and not *.C?</code> Sélectionne les atomes de carbone puis élimine les carbones notés CA, CB...
Colorer ...> color ou colour			
Couleurs	<code>color</code>	green blue greenblue cyan violet orange red redorange black white purple magenta	Cette commande colore les éléments sélectionnés avec la commande select. Exemple : sélectionner toute la molécule et la colorier en blanc. <code>select all</code> <code>color White</code> Sélectionner l'acide aminé 10 et le colorer en bleu <code>select 10</code> <code>color blue</code>
Couleur par défaut	<code>color</code>	CPK	Carbone : gris Oxygène : rouge Hydrogène : blanc Azote : bleu-gris Soufre : jaune Phosphore : orange Chlore : vert Sodium : bleu Fer : pourpre Calcium, métaux : gris foncé
Modifier l'affichage à l'écran			
zoom	<code>zoom 100</code>		Le zoom 100 correspond à la taille par défaut. Pour agrandir : mettre un nombre > 100 Pour diminuer : mettre un nombre < 100
Masquer des chaînes	<code>restrict *A</code>		La chaîne A est masquée. L'autre ou les autres chaînes restent affichées. Pour afficher les chaînes masquées, faire <code>select all</code> choisir un mode de visualisation dans le menu display
Mode de visualisation	en fil de fer	<i>Opérations à réaliser avec le menu Display</i>	<code>wireframe 10</code> Modifie l'épaisseur des liaisons. 10 : liaisons fines 100 : liaisons épaisses. Correspond à la commande sticks du menu Display.
	en sphères		<code>spacefill 100</code> Modifie la taille des sphères 10 : petite taille 100 : taille qui correspond à la commande Ball & Sticks du menu Display 400 : taille obtenue avec la commande spacefill
	Ball & Sticks		<code>wireframe 50</code> <code>spacefill 120</code>
Montrer masquer des liaisons	liaisons hydrogène	<code>hbonds on</code> <code>hbonds off</code>	montre les liaisons hydrogène masque les liaisons hydrogène
	liaisons soufre	<code>sbonds on</code> <code>sbonds off</code>	montre les ponts disulfures masque les ponts disulfures
Modifier les liaisons	la couleur	<code>color hbonds green</code> <code>color sbonds yellow</code>	Les liaisons hydrogène apparaissent en vert Les ponts soufre apparaissent en jaune
	l'épaisseur	<code>sbonds 50</code> <code>hbonds 10</code>	la liaison S-S prend une épaisseur 50 la liaison hydrogène prend une épaisseur 10

Faire tourner les molécules	Faire tourner avec la souris clic gauche : rotation X-Y clic droit : translation clic droit + majuscule enfoncée :rotation X-Z	rotate y 90	rotation de la molécule selon l'axe des Y de 90 °
		rotate x 20	rotation de la molécule selon l'axe des X de 20 °
		rotate z 50	rotation de la molécule selon l'axe des Z de 50 °
Afficher dans le module command line & Scripts			
Afficher une instruction	echo	echo Comment expliquer la disposition ? La question est affichée dans le module command Line. Cette commande est utile pour la réalisation de scripts	
Stopper le déroulement d'un script	pause	echo Comment expliquer la disposition ? pause Le script s'arrête. Il faut appuyer sur la barre espace pour continuer. Utile pour réaliser un questionnaire sans un script.	
Lancer un script	script adnsec.scr	Le script ADNSEC.scr est lancé. Remarque : le fichier ADNSEC.scr doit être placé dans le même dossier que Raswin.exe	
Afficher une molécule	load "ADN.pdb"	La molécule doit être placée dans le même dossier que Raswin.exe.	

Exemples de script : **ADN2.scr**

Cette partie du script d'ADN2.scr montre deux paires de nucléotides ADN, le squelette acide phosphorique-désoxyribose est coloré en orange en affiché en fil de fer, alors que les bases azotées sont affichées en Balls&Sticks, atomes en couleurs CPK.

Ce script permet d'afficher des informations dans le module Command Line : l'écran doit être divisé en deux parties à peu près égales :

- D'un côté la fenêtre de Rasmol
- De l'autre côté la fenêtre de Command line

L'affichage de ces informations est réalisé par la commande **echo**

Ce script se déroule par étapes, la commande **pause** permettant de stopper le déroulement du script.

zap	Fermer la molécule affichée à l'écran
load "2nuc.pdb"	Charger la molécule 2nuc.pdb
rotate y 90	Rotation de la molécule de 90° autour de l'axe Y
rotate x 30	Rotation de 30° autour de l'axe des X
zoom 150	Faire un zoom de 150%
hbonds on	Montrer les liaisons hydrogène
select all	Sélectionner la molécule entière
color cpk	Colorier en mode prédéfini (carbone en gris, oxygène en rouge ...)
spacefill 100	Montrer les atomes avec un rayon de 100
wireframe 30	Montrer les liaisons avec un rayon de 30
select not *.C? and not *.n? and not *.o? and not *.c5m	Ne pas sélectionner les atomes de carbone, d'azote et d'oxygène des bases azotées
color orange	Colorier la sélection (ici le squelette) en orange.
spacefill 1	Montrer les atomes sélectionnés avec un rayon de 1
wireframe 1	Montrer les liaisons sélectionnées avec un rayon de 1
echo ..Deux couples de bases sont conservees	
echo	
echo ..Certaines bases sont reliees par	
echo trois liaisons faibles	
echo	
echo ..et d'autres sont liees	
echo par 2 liaisons faibles	
echo	
echo ..les bases azotees sont differentes.	
Pause	
echo	

Comment réaliser un script ?

Utiliser le bloc note pour saisir les commandes de Rasmol, puis enregistrer au format texte avec un nom court et l'extension **.scr**.
Placer le fichier du script et les molécules concernées dans le dossier et au même niveau que Rasmol.exe.
Ne pas utiliser d'accents dans les textes placés après une commande echo.

Comment lancer un script ?

Saisir dans Commande line **script nom.scr** ou **nom** est le nom donné au script.

http://ww3.ac-poitiers.fr/svt/activite/jmc/ADN_2/INDEX.HTM