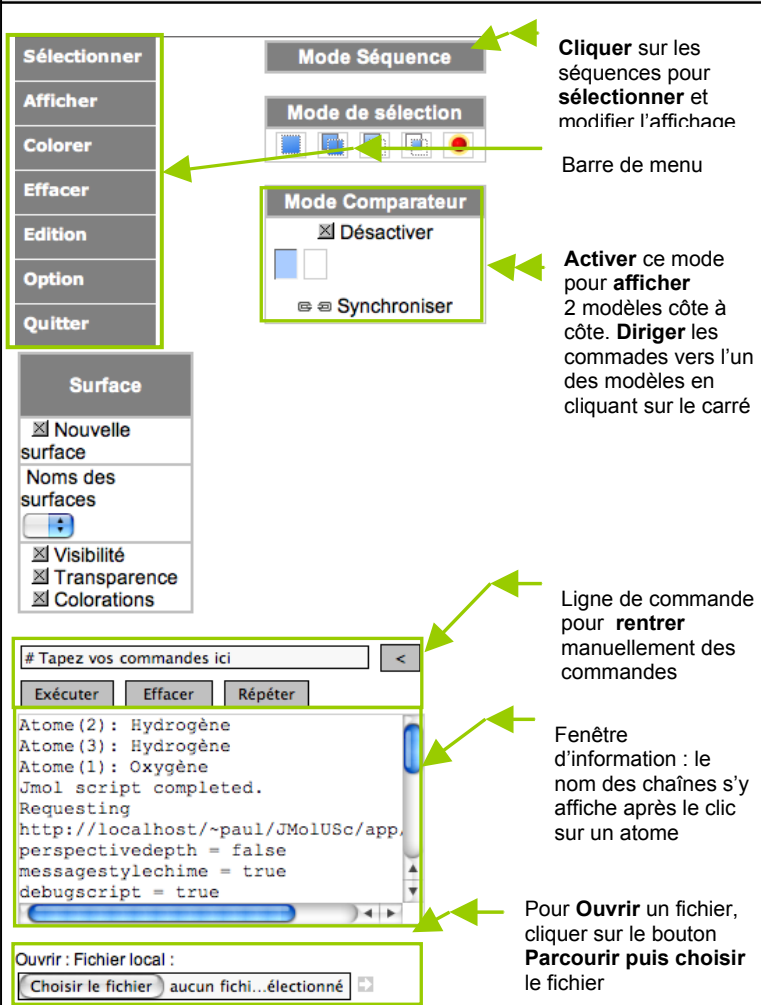


# VISUALISATION DE MOLÉCULES AVEC MOLUSC

Fenêtre de commande	Faire une sélection	Changer la représentation de la sélection																																																																						
 <p><b>Sélectionner</b> <b>Afficher</b> <b>Colorer</b> <b>Effacer</b> <b>Edition</b> <b>Option</b> <b>Quitter</b></p> <p><b>Mode Séquence</b> <b>Mode de sélection</b> <b>Mode Comparateur</b> ☒ Désactiver Synchroniser</p> <p><b>Surface</b> ☒ Nouvelle surface Noms des surfaces ☒ Visibilité ☒ Transparence ☒ Colorations</p> <p># Tapez vos commandes ici Exécuter Effacer Répéter</p> <pre>Atome (2) : Hydrogène Atome (3) : Hydrogène Atome (1) : Oxygène Jmol script completed. Requesting http://localhost/~paul/JMolUSC/app, perspectiveDepth = false messageStyleChime = true debugScript = true</pre> <p>Ouvrir : Fichier local : Choisir le fichier aucun fichi...électionné</p>	<p><b>Faire une sélection</b></p> <p><i>En mode séquence :</i></p> <p>Mode Séquence</p> <p>Dans le tableau ci-dessous sont affichées les séquences des chaînes composant le modèle. Survoler les résidus avec la souris pour afficher leur nom. Cliquer, pour appliquer la transformation ci-dessus.</p> <p>Afficher Colorer Sélection Boules et bâtons Jaune Conserver</p> <p>Chaîne A</p> <table border="1"> <thead> <tr> <th>1jwr</th> <th>134i</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>A</td> </tr> <tr> <td>LYS</td> <td>LYS</td> </tr> <tr> <td>VAL</td> <td>VAL</td> </tr> <tr> <td>PHE</td> <td>PHE</td> </tr> <tr> <td>GLU</td> <td>GLU</td> </tr> <tr> <td>ARG</td> <td>ARG</td> </tr> <tr> <td>CYS</td> <td>CYS</td> </tr> <tr> <td>GLU</td> <td>GLU</td> </tr> <tr> <td>LEU</td> <td>LEU</td> </tr> <tr> <td>ALA</td> <td>ALA</td> </tr> <tr> <td>ARG</td> <td>ARG</td> </tr> </tbody> </table> <p>1. Choisir le mode d'affichage et de coloration</p> <p>2. Survoler les résidus de la séquence et cliquer sur ceux à mettre en évidence</p> <p><i>À partir d'une expression :</i></p> <p>Taper dans la ligne de commande, une expression de la forme :</p> <p><b>select *L</b> sélectionne la chaîne L  <b>select 114</b> sélectionne l'acide aminé n° 114 de toutes les chaînes  <b>select 20-75</b> sélectionne les acides aminés du n°20 au n°75  <b>select *L,*H</b> sélectionne les chaînes L et H  <b>select *L and 20-75</b> sélectionne les acides aminés de 20 à 75 de la chaîne L</p>	1jwr	134i	A	A	LYS	LYS	VAL	VAL	PHE	PHE	GLU	GLU	ARG	ARG	CYS	CYS	GLU	GLU	LEU	LEU	ALA	ALA	ARG	ARG	<p><b>Changer la représentation de la sélection</b></p> <p><b>Modes d'affichage</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>Atomes</th> <th>Liaisons</th> <th>Repliements</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Sphères</td> <td>X</td> <td></td> <td></td> </tr> <tr> <td>Boules et bâtons</td> <td>X</td> <td>X</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Bâtonnets</td> <td></td> <td>X</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Fil de fer</td> <td></td> <td>X</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Rubans, Dessins</td> <td></td> <td></td> <td>X</td> </tr> <tr> <td>Squelette carboné</td> <td></td> <td></td> <td>X</td> </tr> <tr> <td>Spaghettis</td> <td></td> <td></td> <td>X</td> </tr> </tbody> </table> <p><b>Modes de Coloration</b></p> <table border="1"> <thead> <tr> <th></th> <th>Code couleur</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Atomes</td> <td>Une couleur par type d'atome <b>CHONS</b></td> </tr> <tr> <td>Chaînes</td> <td>Une couleur par chaîne de résidu</td> </tr> <tr> <td>Structure</td> <td>Jaune : feuillets, Rose : hélices, Bleu : coudes, Blanc : indéterminé</td> </tr> <tr> <td>Résidu</td> <td>Une couleur par type d'acide aminé ou de nucléotide</td> </tr> <tr> <td>ADN-ARN-Prot</td> <td>Marron : Protéine, Mauve ARN, Violet : ADN</td> </tr> <tr> <td>Position</td> <td>Dégradé du bleu au rouge d'un bout à l'autre de la chaîne</td> </tr> </tbody> </table> <p><b>Déplacements avec la souris</b></p> <p><b>ZOOM</b> : Roulette de la souris ou touche majuscule enfoncée + clic + glissé vers le bas ou le haut  <b>Translation</b> : Double clic sur la roulette ou touche Ctrl enfoncée + clic bouton droit</p>		Atomes	Liaisons	Repliements	Sphères	X			Boules et bâtons	X	X		Bâtonnets		X		Fil de fer		X		Rubans, Dessins			X	Squelette carboné			X	Spaghettis			X		Code couleur	Atomes	Une couleur par type d'atome <b>CHONS</b>	Chaînes	Une couleur par chaîne de résidu	Structure	Jaune : feuillets, Rose : hélices, Bleu : coudes, Blanc : indéterminé	Résidu	Une couleur par type d'acide aminé ou de nucléotide	ADN-ARN-Prot	Marron : Protéine, Mauve ARN, Violet : ADN	Position	Dégradé du bleu au rouge d'un bout à l'autre de la chaîne
1jwr	134i																																																																							
A	A																																																																							
LYS	LYS																																																																							
VAL	VAL																																																																							
PHE	PHE																																																																							
GLU	GLU																																																																							
ARG	ARG																																																																							
CYS	CYS																																																																							
GLU	GLU																																																																							
LEU	LEU																																																																							
ALA	ALA																																																																							
ARG	ARG																																																																							
	Atomes	Liaisons	Repliements																																																																					
Sphères	X																																																																							
Boules et bâtons	X	X																																																																						
Bâtonnets		X																																																																						
Fil de fer		X																																																																						
Rubans, Dessins			X																																																																					
Squelette carboné			X																																																																					
Spaghettis			X																																																																					
	Code couleur																																																																							
Atomes	Une couleur par type d'atome <b>CHONS</b>																																																																							
Chaînes	Une couleur par chaîne de résidu																																																																							
Structure	Jaune : feuillets, Rose : hélices, Bleu : coudes, Blanc : indéterminé																																																																							
Résidu	Une couleur par type d'acide aminé ou de nucléotide																																																																							
ADN-ARN-Prot	Marron : Protéine, Mauve ARN, Violet : ADN																																																																							
Position	Dégradé du bleu au rouge d'un bout à l'autre de la chaîne																																																																							
<p><b>Imprimer</b></p> <p>Dans le menu de commande, choisir : <b>Edition &gt; Exporter</b>          Bien vérifier que le modèle est sur fond blanc avant de l'imprimer.</p>	<p><b>Faire une mesure de distance</b></p> <p>Faire un <b>double clic</b> sur un atome, une ligne pointillée relie alors l'atome sélectionné au curseur.  <b>Double - Cliquer</b> ensuite sur le second atome pour obtenir la mesure de la distance.</p>	<p><b>Visualiser l'intérieur d'un modèle</b></p> <p>Dans le menu de commande, choisir : <b>Edition &gt; Couper</b>. Pour déplacer le plan de coupe, utiliser cliquer avec la souris en maintenant la <b>touche Ctrl</b> enfoncée.</p>																																																																						

**Informations sur les molécules** : Le nom des chaînes est donné dans la fenêtre d'information après un clic sur un atome (fréquemment H pour chaîne lourde, L pour légère, P ou Y pour les antigènes). Seule la partie terminale des anticorps est modélisée quand il ne s'agit pas de la molécule entière. Ce qui est affiché correspond à la molécule dont la séquence complète est affichée dans ANAGENE