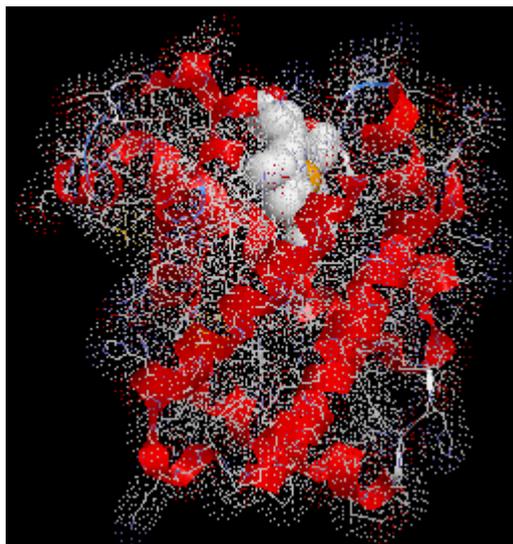


Rasmol

RASMOL est un logiciel de visualisation tridimensionnelle de molécules réalisé par Roger Sayle, Biomolecular Structures Group, Glaxo Wellcome Research & Development. Traduit avec l'accord de son auteur, il est diffusé à titre **gratuit**.



Démarrer avec le logiciel	Traitements courants	Questions pratiques	Aller plus loin
<ul style="list-style-type: none">☞ Téléchargement☞ Installation des données☞ Démarrage de Rasmol☞ Présentation☞ Ouverture d'un fichier	<ul style="list-style-type: none">☞ Afficher des informations☞ Changer l'affichage☞ Changer la coloration☞ Manipuler la molécule	<ul style="list-style-type: none">☞ Sélectionner un ensemble d'atomes☞ Réaliser des coupes☞ Exporter des images	<ul style="list-style-type: none">☞ Utiliser des commandes RasMol

Démarrer avec le logiciel

Téléchargement

Important : vous devez savoir utiliser un logiciel de décompression pour faire cette installation

RASMOL est un logiciel de visualisation tridimensionnelle de molécules réalisé par Roger Sayle, Biomolecular Structures Group, Glaxo Wellcome Research & Development. Traduit avec l'accord de son auteur, il est diffusé à titre **gratuit**.

Différentes versions de Rasmol sont disponibles.

- Version avec menus en français. Recommandée. Suffisante.

[Rasmol, version 2.6](#) pour Windows, 1996 sur le site BioGeo de l'INRP.
Regroupe tous les éléments nécessaires à une installation complète.
(Ne pas oublier de télécharger par ailleurs [les données](#))

- Autres versions de Rasmol

[Raswinsx](#) : Version pour PC 386 ou 486 SX sans co-processeur arithmétique

[Rasmol2.exe](#) : Version de l'Université de Californie à Berkeley (chargement de plusieurs molécules. En anglais)



[La Version 2.7.1 de Rasmol sur le site de l'INRP](#) (évolution de la version 2.6. En anglais)



[La version 2.7.1 à partir du site de Bernstein-plus-sons.com](#) (360 ko)

Installer Rasmol sur votre disque dur

- Toutes les versions de Rasmol possèdent un menu court intégré.
 - Télécharger raswin26.zip ou raswinsx.zip
 - cliquer dessus pour le décompresser ; le logiciel se décompacte dans un répertoire Rasmol sur le disque C
 - placer l'icône de Rasmol dans un groupe de programmes et la lier à Rasmenuf (menu en français)

- Pour installer une **version différente** du logiciel (version de l'UCB, ou version 2.7.1) :
 - Nommer la version actuelle (raswin.exe) raswin26.exe par exemple
 - Copier la version souhaitée dans le répertoire de Rasmol et la nommer raswin.exe

Rechercher des informations

- [Manuel en ligne de Rasmol](#)
- *Structures et fonctions des molécules biologiques. Exploitation pédagogique des visualisations 3D avec RASMOL.* J. Barrère, J-Y. Dupont, N. Salamé, 1997, 128 p.

Service des publications de l'INRP, 29, rue d'Ulm, 75230 PARIS Cedex 05
 INRP - Vente à distance, Centre Léon Blum - Place du Pentacle - BP 17, 69195 Saint-Fons Cedex

Installation des données

Les macromolécules utilisées proviennent, pour l'essentiel, de Protein Data Bank (PDB).
 Les applications pédagogiques ont été conçues par

- [Jacques Barrère](#) (enseignant associé à l'INRP, Lycée Paul Louis Courier, TOURS)
- [Jean-Yves Dupont](#) (IPR à l'académie d'Orléans-Tours) .

Installer les données sur votre disque dur

Les molécules sont rangées dans des fichiers compactés (adarn.zip, mut.zip, etc.).

- Télécharger les données souhaitées
- Cliquer sur les noms des fichiers pour les décompacter. Les molécules sont décompactées sur le disque C, dans le répertoire Rasmol.

Banque de données classée par thèmes d'étude

Sur de site de l'INRP ([BIOTIC](#))

- [Structure de l'ADN et de l'ARN \(Librairie de nucléotides associée\)](#)
- [Structure d'une protéine \(Librairie d'acides aminés associée\)](#)
- [Structure et fonction d'une globine](#)
- [Effet d'une mutation, la drépanocytose](#)
- [Aspects évolutifs des globines](#)
- [Aspects évolutifs des cytochromes C](#)
- [Structure et fonction de molécules du CMH](#)

- [Structure et fonction d'une immunoglobuline](#)
- [Structure et fonction d'une enzyme](#)

Banques de données internationales

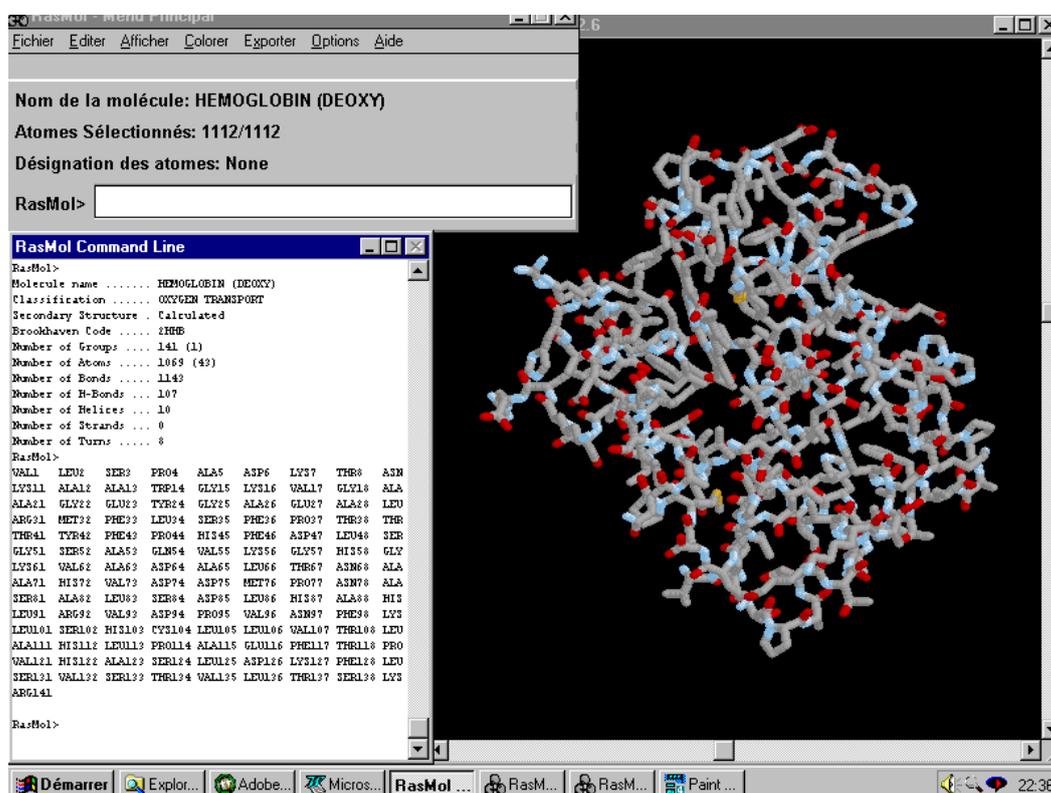
- [PDB RCSB](#)
- [Liste d'adresses à l'Université du Massachussets](#)

Démarrage de RasMol

RasMol peut-être démarré à partir de son icône de raccourci ou à partir de l'explorateur de fichiers en choisissant le fichier c:/rasmol/rasmenuf.exe.

Disposition des fenêtres

- Lancé à partir de son menu (Rasmenu ou Rasmenuf), RasMol ouvre plusieurs fenêtres : une fenêtre de menus déroulants (RasMol menu principal), une autre de visualisation graphique (RasMol version 2.6) et une troisième d'édition (RasMol Command line). (La version UCB ouvre une quatrième fenêtre pour la manipulation des différentes molécules).
- Pour une exploitation optimale du logiciel, il convient de disposer l'écran de manière à minimiser les possibilités de fermeture des fenêtres utiles. On peut adopter, par exemple, la disposition suivante.



Tout l'écran est occupé par les trois fenêtres. Quelle que soit la fenêtre active, on peut accéder facilement aux deux autres.

Un peu de technique

Windows permet de lancer successivement plusieurs logiciels ouvrant chacun une ou plusieurs fenêtres.

- Sous Windows 3.1, si plusieurs logiciels ont été lancés mais la fenêtre d'un seul est présente à l'écran, on passe d'un logiciel à un autre en appuyant simultanément sur les touches Alt et Tabulation (touche portant les deux flèches superposées) : en maintenant enfoncée la touche Alt, chaque pression sur la touche de tabulation montre l'icône et le nom d'une fenêtre du logiciel ouvert.

- Sous Windows 95, on peut procéder de la même manière, mais, comme les noms des dossiers, des logiciels et des fenêtres ouverts sont affichés au bas de l'écran, il est plus simple de cliquer directement sur le nom souhaité pour en voir apparaître la fenêtre.

- Si plusieurs fenêtres sont présentes à l'écran, une seule est active et se reconnaît à son bandeau supérieur bleu. Toute fenêtre ouverte est activée en cliquant dedans sur un point quelconque. Cette fenêtre vient alors au premier plan et, en fonction de ses dimensions, recouvre totalement ou partiellement les autres fenêtres ouvertes.

- Les fenêtres peuvent être dimensionnées et positionnées dans l'écran par l'utilisateur (cliquer dans le bandeau bleu d'une fenêtre et, en maintenant le clic, déplacer la fenêtre à l'endroit souhaité).

- Par défaut, le répertoire où le logiciel va chercher les fichiers d'aide et les données est celui où il est installé. C'est là aussi que seront enregistrés les fichiers produits au cours du travail. Il est possible de modifier le répertoire de travail (cliquer une fois sur l'icône du logiciel, puis dans **Fichier** choisir **Propriétés**).

Présentation

Disposition des fenêtres

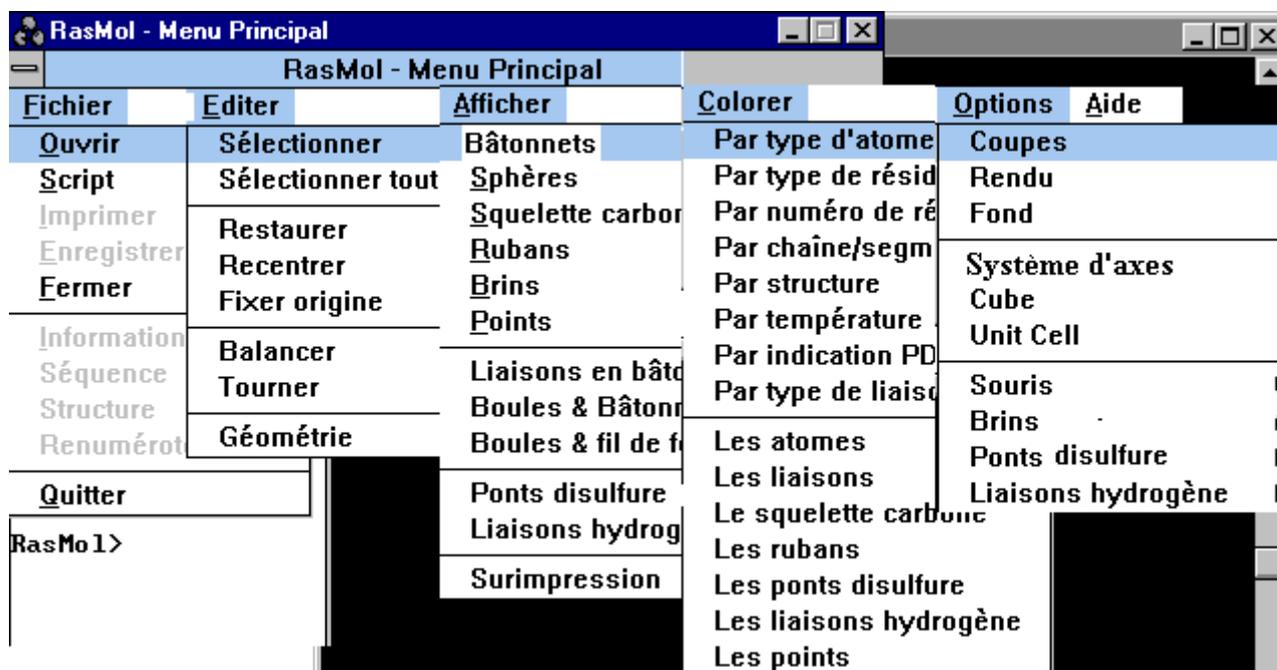
Lancé à partir de son menu (Rasmenu ou Rasmenuf), Rasmol ouvre plusieurs fenêtres :

- une fenêtre de menus déroulants (Rasmol menu principal)
- une autre de visualisation graphique (Rasmol version 2.6)
- une troisième d'édition (Rasmol Command line).

(La version UCB ouvre une quatrième fenêtre pour la manipulation des différentes molécules).

☞ La fenêtre des menus

Cette fenêtre est ouverte par Rasmenu ou Rasmenuf et donne accès pratiquement à toutes les commandes et à tous les éléments reconnus par Rasmol.



☞ La fenêtre graphique

Le logiciel RASMOL est capable d'afficher et de manipuler une seule molécule à la fois, formée de plusieurs milliers d'atomes.

La molécule est affichée dans l'écran graphique suivant le mode de représentation dit "en bâtonnets" ou en "fil de fer" suivant l'épaisseur des traits utilisés. On peut manipuler l'image de la molécule très simplement en cliquant dans l'écran noir avec le bouton gauche de la souris et, sans relâcher la pression sur ce bouton, en déplaçant lentement la souris vers la gauche ou la droite pour tourner autour de l'axe des y, vers le haut ou le bas pour tourner autour de l'axe des x. On peut aussi utiliser les ascenseurs vertical et horizontal.

☞ La fenêtre de l'éditeur

Sont affichés dans cette fenêtre les résultats fournis par les commandes Information, Structure, Séquence, ainsi que les informations concernant un atome désigné dans l'écran graphique avec la souris.

À partir de cette fenêtre on peut également taper directement les commandes reconnues par RASMOL ; on y reçoit aussi les messages d'erreur éventuels.

On peut circuler dans cette fenêtre avec les flèches et les ascenseurs

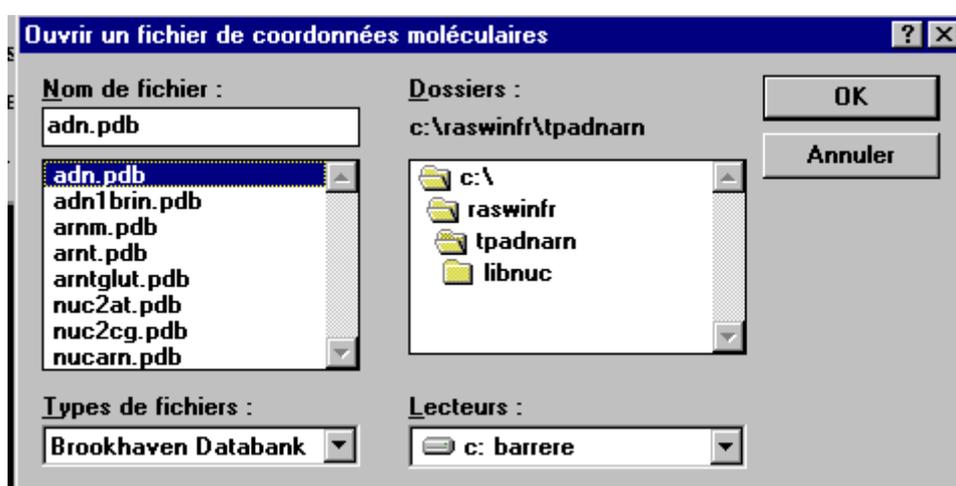
Ouverture d'un fichier

Dans Fichier, on trouve la plupart des options habituelles (ouvrir, fermer, enregistrer, etc.).

Afin d'éviter les erreurs du logiciel, avant d'ouvrir un nouveau fichier, fermer le fichier éventuellement déjà ouvert.

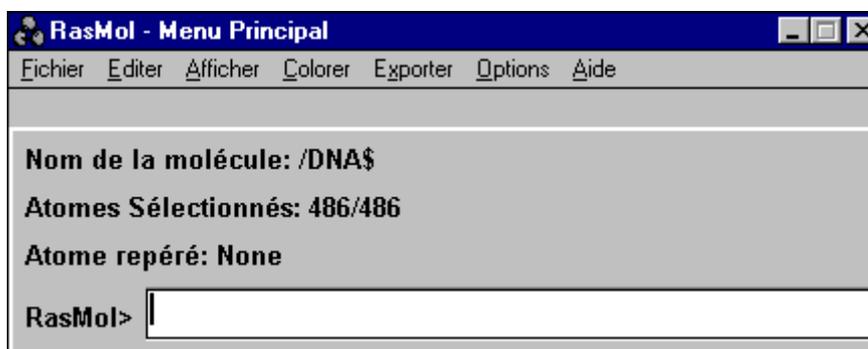
Pour ouvrir un fichier:

- sélectionner Fichier dans le Menu Principal
- sélectionner le dossier contenant le fichier pdb (exemple TPADNARN),
- sélectionner le type de fichier si nécessaire (par défaut Brookhaven Data Bank), puis le fichier, et valider le choix.



Les propriétés du fichier

Il convient de noter d'abord que, lorsqu'une molécule est ouverte, la fenêtre des menus affiche dans sa première ligne le nom de la molécule, et dans sa seconde ligne le nombre d'atomes sélectionnés. Si on clique sur un atome affiché, la troisième ligne en indique le nom et l'appartenance précise (chaîne et acide aminé). La ligne **RasMol>** permet d'entrer directement des commandes sans passer par les options du menu.



Traitements courants

Afficher des informations

Dans Fichier, on trouve les options suivantes :

 Script : permet de lancer une suite de commandes préalablement spécifiées dans un fichier. RASMOL permet d'écrire des Scripts. Un script est un enchaînement de commandes (écrit avec un traitement de texte). Lorsque plusieurs commandes successives sont nécessaires pour obtenir un effet particulier, un script prédéfini peut les réaliser automatiquement et afficher le résultat final. Les commentaires qui accompagnent le script s'affichent dans la fenêtre de l'éditeur.

 Informations: affiche dans la fenêtre de commande la nature, l'origine, la dimension de la molécule ainsi que ses caractéristiques (nombre de chaînes, nombre et dimension des hélices, coudes, feuillets, liaisons disulfure, etc.).

 Séquence : affiche la séquence complète de la molécule (chaîne par chaîne s'il y en a plusieurs) dans la fenêtre de commande.

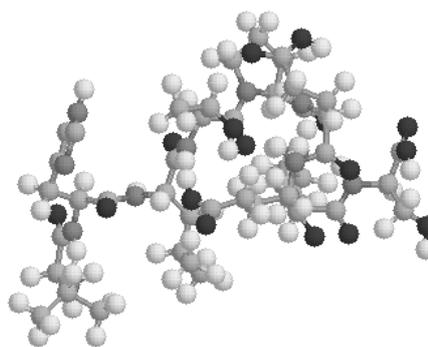
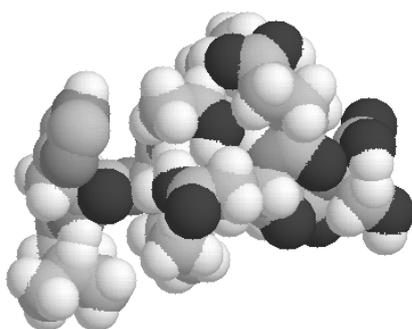
 Structure : recalcule le nombre de liaisons, d'hélices, de feuillets, etc. (attention : le résultat peut être différent de celui lu dans le fichier de coordonnées de la molécule).

Changer l'affichage

Dans Afficher se trouvent les différentes modalités d'affichage en bâtonnets, sphères, boules et bâtonnets, squelette carboné, ruban, brins, points (nuage électronique), etc. La connaissance de ces modalités est indispensable pour une exploitation optimale du logiciel.

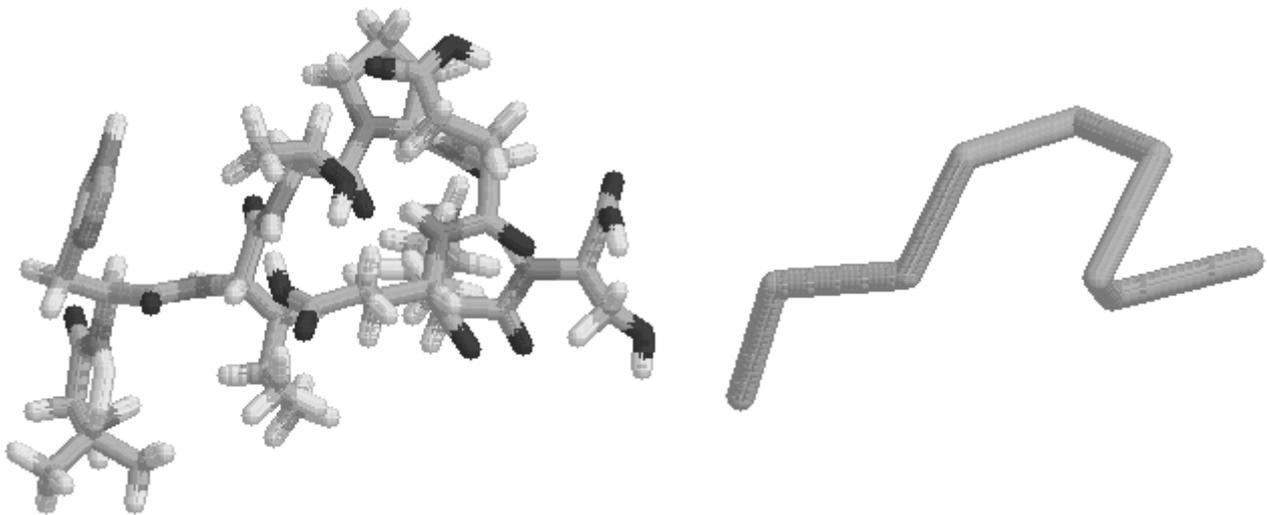
Chaque modalité de représentation apporte une information différente.

La représentation en sphères fait ressortir l'aspect compact de la molécule, donne une bonne idée de son encombrement spatial, fait apparaître les creux et les bosses. **La combinaison de boules et de bâtonnets** fournit une vision différente, en fonction du diamètre des boules.

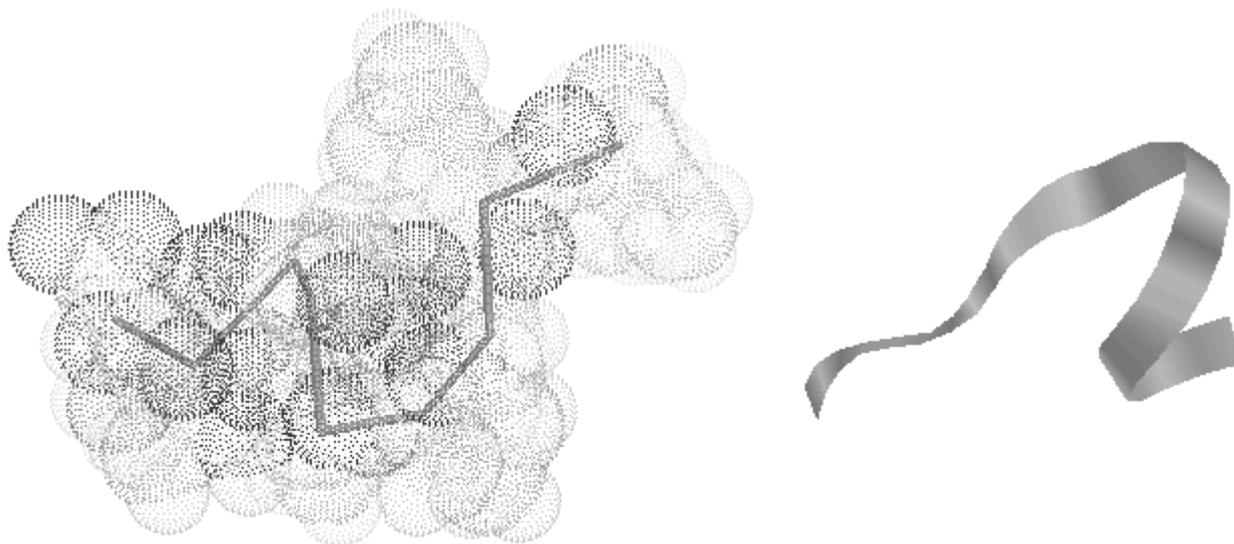


La représentation en bâtonnets fait apparaître tous les constituants des acides aminés d'une protéine : carbones alpha (C-alpha), liaisons peptidiques, chaînes latérales. C'est ce qui donne à la molécule son aspect buissonnant. Mais, comme les molécules biologiques comportent fréquemment plusieurs milliers d'atomes, la lisibilité de la structure dans l'espace est difficile avec ce mode de représentation.

Avec **la représentation en squelette carboné** on débarrasse les acides aminés de leurs chaînes latérales et on ne conserve que les C-alpha ce qui constitue un premier niveau de simplification. Cette représentation fait apparaître les mêmes caractéristiques que la précédente mais de façon plus dépouillée.



On sait aussi que les atomes impliqués dans la liaison peptidique entre deux C-alpha sont dans un même plan. On pourra donc supprimer la représentation des atomes en ne conservant que le plan propre à chaque liaison : c'est **la représentation en rubans** dont la position dans l'espace épouse précisément le plan des liaisons peptidiques successives. **La représentation en brins** en est une variante qui ne retient que la « trame » du ruban ; elle fait ainsi ressortir la disposition spatiale de la chaîne en mettant en évidence les divers motifs appartenant à la structure secondaire (hélices, feuilletts, coudes, boucles).



Dans la **représentation en points**, tous les atomes sont retenus, la densité des points matérialisant les surfaces de Van der Waal's (surface extérieure du nuage électronique). Transparente, cette représentation permet d'y superposer un autre mode de visualisation. La surimpression autorise la combinaison de différents modes d'affichages appliqués chacun à un sous ensemble de la molécule.



NB : le mode de représentation influe considérablement sur la vitesse de réaffichage d'une molécule quand on veut la manipuler à l'écran. Sur des PC 386, par exemple, ou même sur des 486 SX (sans coprocesseur arithmétique), il est fortement recommandé d'éviter la visualisation en sphères quand les molécules sont grosses.

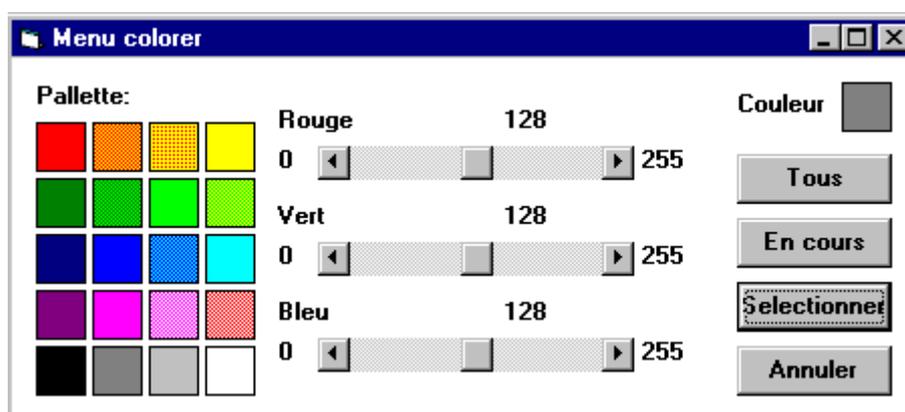
NB : Les options d'affichage "liaisons hydrogène" et "ponts disulfure" activent la visualisation de ces liaisons.



Changer la coloration

Dans Colorer on trouve les colorations en fonction de différents critères (types d'acides aminés, chaînes, structures, etc...) ; on a aussi la possibilité de modifier les couleurs attribuées par défaut et de spécifier des colorations personnalisées ; noter que la qualité des images en couleur est fonction du nombre de couleurs qu'il est possible d'afficher à l'écran ; mettre l'écran en 256 couleurs au moins si possible.

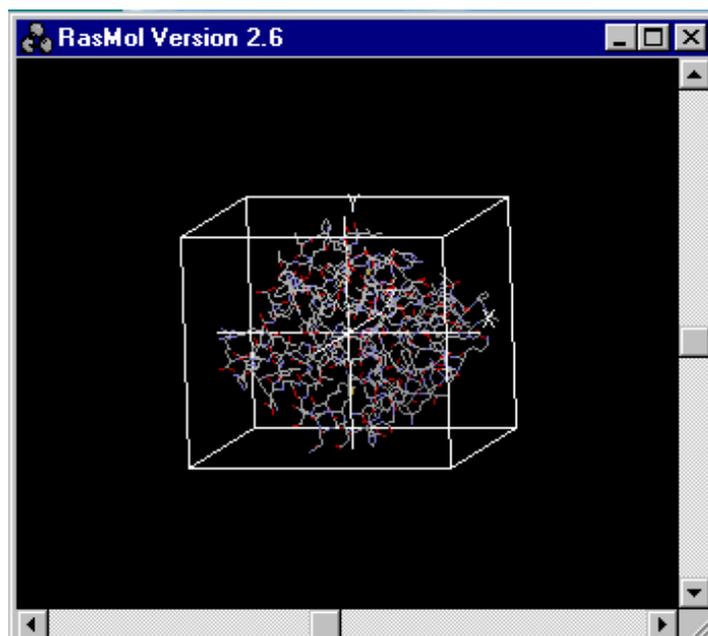
Si on choisit de colorer les atomes, les liaisons, le squelette carboné, etc., la palette qui s'ouvre permet de sélectionner la couleur souhaitée et de l'appliquer soit à toute la molécule, soit aux seuls éléments sélectionnés.



Manipuler la molécule

En cliquant en un point quelconque de la fenêtre de visualisation graphique et en maintenant la pression, on manipule la molécule dans l'espace. En appuyant simultanément sur certains boutons on obtient d'autres mouvements.

Bouton gauche	Rotation autour de X ou de Y
Bouton droit	Translation en X ou en Y
Shift et bouton gauche	Zoom
Shift et bouton droit	Rotation autour de Z
Control et bouton gauche	Coupes suivant Z



NB : dans Options, Rasmol propose différentes fonctions :

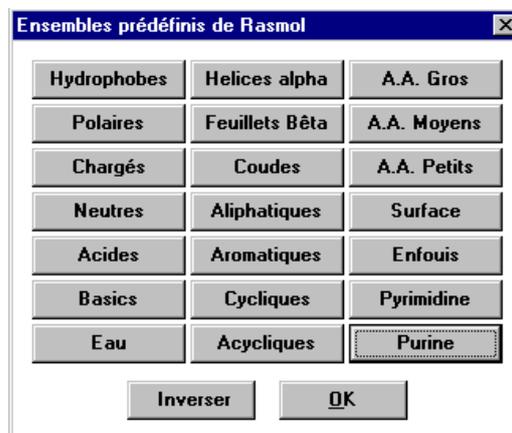
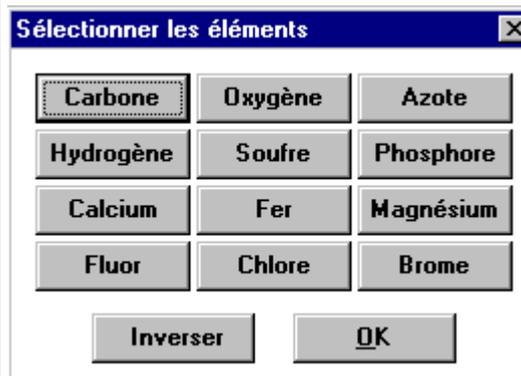
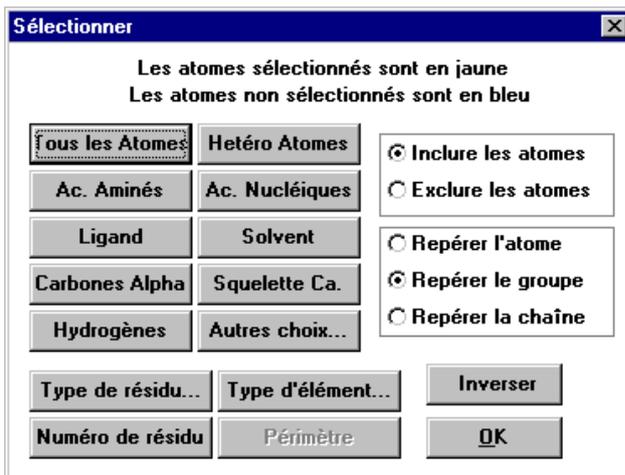
- Système d'axes : cette fonction positionne des axes Ox, Oy, Oz ayant pour origine le centre de gravité de la molécule ; solidaire de la molécule, ce système d'axes permet d'avoir un repère visuel lorsque la molécule est manipulée.
- Cube : cette fonction permet d'inscrire la molécule dans un cube, ce qui peut aider la vision en relief.

Questions pratiques



Sélectionner un ensemble d'atomes

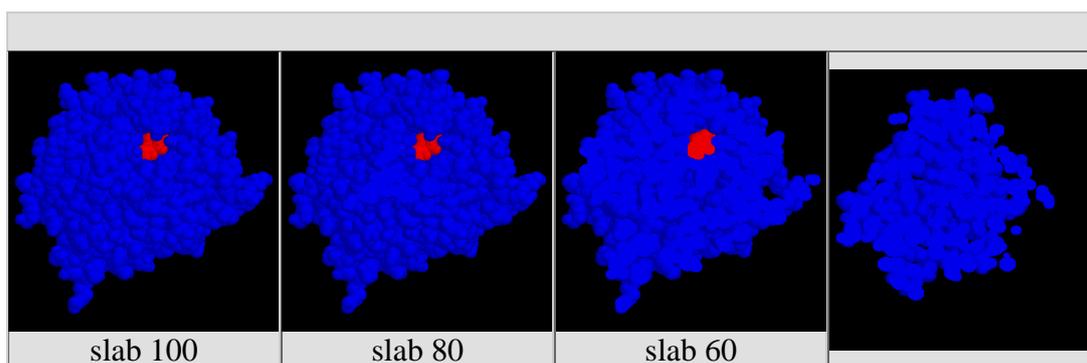
Éditer comporte les options de sélection. Par défaut, tous les atomes d'une molécule sont sélectionnés au départ ; on peut limiter ensuite cette sélection à un ensemble prédéfini, choisir une portion de la molécule, un motif moléculaire (chaîne, hélice, feuillet, etc.), des groupes ayant des propriétés particulières, un résidu et même un élément chimique précis.



NB : la fenêtre des menus affiche dans sa première ligne le nom de la molécule, et dans sa seconde ligne le nombre d'atomes sélectionnés.

Réaliser des coupes

Dans Options, la fonction Coupe présente un intérêt particulier. La coupe dans la molécule est réalisable selon un plan parallèle à l'écran à un niveau défini par un pourcentage, le plan passant par l'atome le plus éloigné de l'observateur étant à 0 et le plus proche à 100 ; seuls les atomes situés en arrière du plan désigné sont conservés ; c'est donc une option qui permet de voir à « l'intérieur » de la molécule.

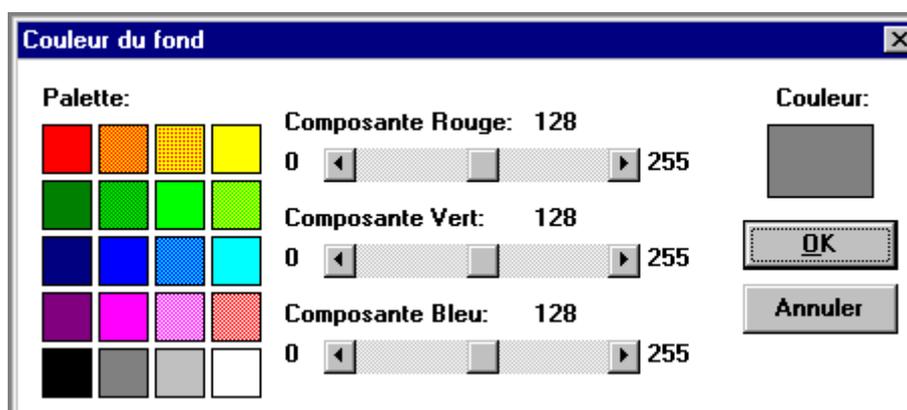


Exporter des images

Dans Exporter : RASMOL propose différents formats pour enregistrer l'image de la molécule présente à l'écran en vue d'une reprise de cette image avec un autre logiciel (traitement de texte ou logiciel de traitement d'images par exemple).



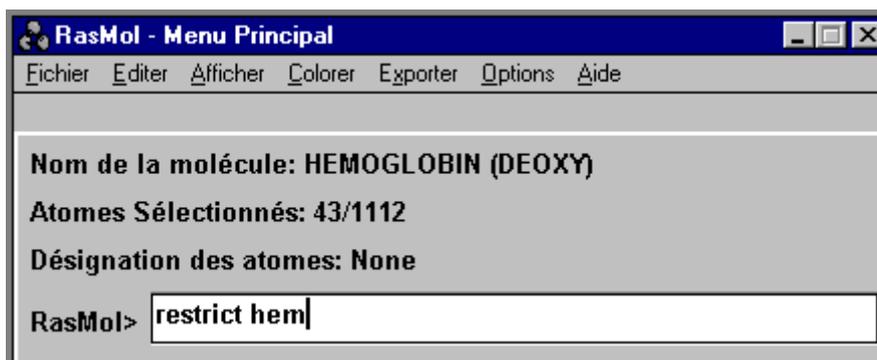
NB : Si on souhaite imprimer l'image, il est conseillé de modifier le fond de l'image avant exportation. Dans Options, la fonction Fond change la couleur du fond de l'écran (par défaut il est en noir).



Aller plus loin

Utiliser des commandes RasMol

RASMENU seul est traduit en français ce qui permet d'activer la majorité des traitements nécessaires. Cependant, toutes les commandes, même si elles ne figurent pas dans un menu, peuvent être introduites, en anglais seulement, à partir de l'éditeur de RASMOL (fenêtre RASMOL command line) ou de la ligne réservée à l'édition dans RASMENU (exemple ci-dessous: **restrict hem** affiche à l'écran le hème seul).



Il est plus simple d'utiliser les commandes plutôt que les menus dans certains cas.

Pour extraire une partie de la molécule

Utiliser **restrict** qui limite l'affichage à une sélection donnée. La syntaxe est : restrict suivi d'un objet reconnu par RASMOL . Les atomes non sélectionnés de la molécule ne sont pas effacés pour autant et sont accessibles par sélectionner tout. Exemples : restrict *A affiche à l'écran ce qui appartient à la chaîne A si celle-ci existe ; restrict 1-10 affiche uniquement les 10 premiers acides aminés. Pour créer un fichier limité à la chaîne A, restreindre l'affichage à A et enregistrer sous un nom avec l'extension .pdb : A.pdb par exemple. L'enregistrement se fait dans le répertoire de travail de RASMOL.

Pour mettre en évidence les atomes situés dans un périmètre donné

Utiliser **within** qui sélectionne tous les atomes situés à une distance donnée d'une chaîne, d'un motif, d'un résidu ou d'un atome spécifié. La syntaxe est : within(distance,objet) (sans espace entre within et la première parenthèse) où distance représente le rayon, et objet l'élément à partir duquel limiter la sélection.

Le rayon peut être exprimé de deux manières : en Å (exemple : within(4.0,val6) sélectionne les atomes situés dans un rayon de 4 Å, autour de val6 (val6 inclus) si val6 existe) ou en unités plus petites (unités de 0.004 Å) : exemple within(1000,val6).

Pour colorer facilement des éléments choisis

Utiliser **color**. La syntaxe est : color suivi du nom d'un objet à colorer et du nom d'une couleur (liste en fin de chapitre). Si color n'est suivi d'aucun nom d'objet, ce sont tous les éléments sélectionnés qui sont colorés avec la couleur spécifiée.

Pour inclure ou exclure

Utiliser les opérateurs logiques : and (et) or (ou) et not (non).

L'utilisation de ces opérateurs peut être associée à toute commande : par exemple, si la molécule est composée de trois chaînes notées A, B et C, restrict *A or *B sélectionne tous les éléments appartenant à la chaîne A ou à la chaîne B. On obtient la même chose si on tape restrict not *C.

Réaliser des coupes dans la molécule

Utiliser **slab**. La syntaxe est slab suivi d'une valeur exprimée en % (0 correspond au plan le plus éloigné de l'observateur et 100 au plan le plus proche). Exemple : slab 50. La coupe est

réalisée parallèlement au plan de l'écran et montre les atomes situés entre le plan désigné et l'atome le plus éloigné de la molécule.

 Pour en savoir plus sur les commandes Rasmol, il existe deux ressources complètes en langue anglaise :

- [Manuel de Rasmol + Chime \(version 0.99\)](#), sur le site de l'université du Massachussets
- [Manuel de Chime \(commandes nouvelles par rapport à Rasmol\)](#), sur le site officiel de Chime

Des ressources utiles pour débiter avec le langage de RasMol :

- [Guide sur l'académie d'Amiens par Jean-François Madre.](#)
- [Tutoriel sur le site de l'INRP par Jacques Barrère](#)