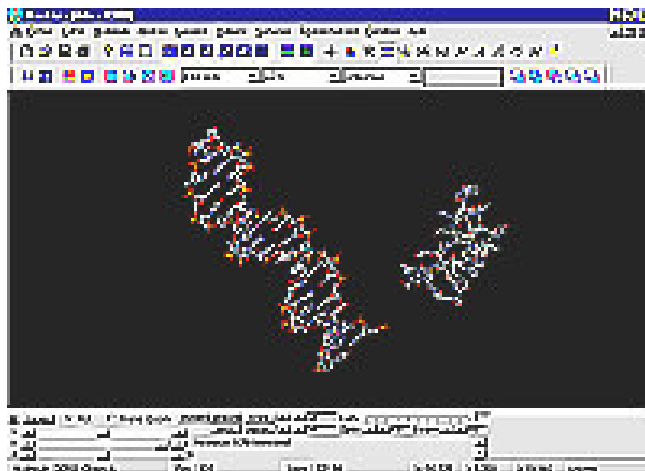


# Mode d'emploi simplifié du Logiciel RASTOP

Logiciel RASTOP VF 2.0.1 – © Naoum Salamé  
D'après l'aide de RASTOP V 2.01 – © Philippe Valandon

## Objectif du logiciel

" *Malgré la puissance des microscopes, les images des molécules de la matière vivante ne sont pas assez détaillées. Par contre, on parvient, en combinant les résultats des analyses chimiques, cristallographiques et de résonance magnétique nucléaire (RMN) à fournir suffisamment d'informations à des centres de calcul pour qu'ils puissent à l'aide de leurs ordinateurs calculer un modèle moléculaire en 3D que l'on peut ensuite manipuler grâce aux fonctions d'un logiciel de visualisation. Rastop est l'un de ces logiciels.* " d'après J.C. Le Hir



## Chargement des fichiers

ou Menu Fichier > Ouvrir... (nouvelle fenêtre)

L'action Fichier > Ajouter... permet de superposer les molécules dans la même fenêtre

### Type de fichiers :

- .pdb** : molécule "brute"
- .rsm** : dernier aspect de la molécule. Permet de continuer un travail
- .cif** : information sur cristallographie
- .scr** : script (ensemble de commandes) et **.top** (ensemble de scripts)

## -----Manipulation de la molécule par utilisation de la souris et du clavier-----

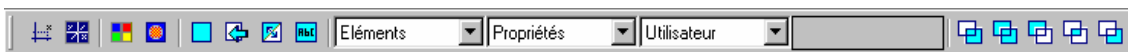
Rotation de la molécule (axes x et y)	Zoom	Déplacement de la molécule	Rotation (axe z)	Déplace le plan de coupe avant	Déplace le plan de coupe arrière
	 ou (roue)		 ou (roue)	 	 

-----Les barres d'outils-----



**Barre principale**

Manipulation fichiers		Rendu de la sélection		Sélection rapide		Liaisons	
	Nouvelle fenêtre		Sphères de Van der Waals		Pour sélectionner un atome		Centrer
	Ouvre un fichier		Etoiles		Pour sélectionner un groupe (nucléotide, aa...)		Sélectionner
	Sauvegarde un fichier		Fils de fer		Pour sélectionner une chaîne		Rotation
	Imprime l'aspect de la molécule		Bâtonnets		Pour sélectionner une molécule (disponible si plusieurs molécules dans la même fenêtre)		Affiche moniteur
	Aide (en Anglais)		Sphères et bâtonnets				Affiche les étiquettes
	Réorganise les fenêtres		Cache		Ajouter à une sélection		Mesure de distance
	Affiche le contenu du fichier molécule		Rubans		Ctrl Retirer d'une sélection		Mesure d'angle
			Enveloppes de points		Pour positionner l'éclairage.		Mesure de torsion



**Barre de sélection**

	Change la référence des coordonnées. (molécule environnement absolu écran)		Sélectionne tous les atomes	L'expression sélectionnée ou la sélection prédéfinie peut ensuite :	
	Affiche les axes de l'univers		Retour à la sélection précédente		Etre prise comme nouvelle sélection
	Affiche la palette des couleurs (1)		Inverse la sélection		Etre ajoutée à la sélection (+)
	Met en évidence les atomes sélectionnés		Sélectionne une expression (2)		Etre retirée de la sélection multiple (-)
			Boîtes de sélections prédéfinies		Etre extraite de la sélection courante (ET)
					Ne pas prendre en compte la sélection courante (SAUF)

**(1) Palette des couleurs**

Fenêtre de l'élément à modifier (Atomes, liaisons, fond etc.) **A vérifier !**

Choix de la couleur.

plus de couleurs

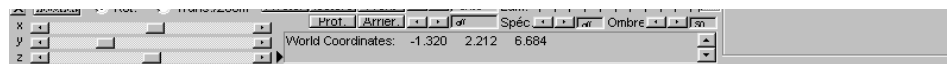
couleurs CPK

**(2) Fenêtre d'expression à sélectionner**

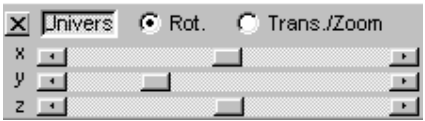


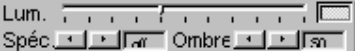
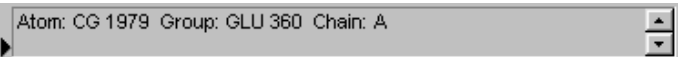
Sélection d'atomes

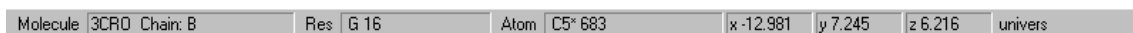
Taper une expression

OK Annuler



### Panneau de commande

	<p>Déplacement ou rotation de la (des) molécule(s) selon les axes <b>x</b>, <b>y</b> et <b>z</b></p> <p><b>"Univers"</b> : permet de manipuler une ou toutes les molécules de la fenêtre.</p> <p><b>"Rot."</b> ou <b>"Trans./Zoom"</b>: choix de rotation ou de translation (x, y) et de zoom (z)</p>		
	<p><b>Pivoter</b> lentement la molécule  <b>Restore</b> la position initiale de la molécule</p>		<p>Affiche et définit les plans de coupe avant et arrière de la molécule.</p>
	<p>Caractéristiques de l'éclairage</p>		
	<p>Informations sur l'atome sélectionné, les messages des scripts.          (Ancienne fenêtre Command Line)</p>		




### Barre d'état















Affiche les informations sur la molécule, la chaîne, le groupe, l'atome et les coordonnées correspondant à l'élément cliqué.

### -----Aperçu sur le menu-----

Voici les actions principales non disponibles dans les barres d'outils et accessibles par le menu

Fichier	Charger un fichier molécule	Permet comme la commande "Ajouter" d'afficher plusieurs molécules dans la même fenêtre
	Charger un script	Permet de charger un script (.scr ou .top)
	Exporter	Permet d'exporter images, fichiers molécule ou scripts.
Edit	Définir	Permet de donner un nom à la sélection (multiple) courante. S'ajoute à la fenêtre "Utilisateur" de la barre de sélection 
	Restreindre	Permet de restreindre l'affichage à la sélection
	Commande	Permet de taper une commande spécifique voire un script complet (Ancienne fenêtre Command Line)
Molécule	Information	Affiche diverses informations sur la molécule, la sélection etc.
	Séquence	Affiche la séquence de la molécule
Atomes	Représentation	Permet de choisir le mode de représentation ainsi que ses caractéristiques (tailles des sphères, etc.)
	Colorer par	Propose des colorations par chaîne, groupes etc.
Liaisons	Représentation	Permet de choisir le mode de représentation ainsi que ses caractéristiques (épaisseur du tracé etc.)
	Liaisons hydrogène	Permet d'afficher et de paramétrer les liaisons hydrogène
Rubans	Types	Permet de choisir le mode de représentation ruban (chaîne carbonée, plat etc.)
	Propriétés	Permet de paramétrer la représentation en ruban.
Surfaces		Permet d'afficher et de paramétrer les sphères et nuages de points.
Environnement	Stéréo (+ angle stéréo)	Affiche la molécule en deux exemplaires sous deux angles différents.

**Prise en main du logiciel RASTOP**  
**Exemples de manipulations**

<b>Affichage d'une molécule</b>	♣ Cliquez sur  puis recherchez le fichier <i>hbs.pdb</i> dans le dossier <i>C:/rasmol/hemoglobine</i>	
<b>Manipulation de la souris</b>	♣ Faites tourner, glisser la molécule à l'aide de la souris	
<b>Représentation</b>	♣ Avec les boutons  , modifiez l'aspect de la molécule	
<b>Séquence</b>	<p>♣ Affichez la séquence de la molécule en choisissant dans le menu <i>Molécule &gt; Séquence</i></p> <p>On observe alors les groupes (acides aminés) des quatre chaînes :A , :B, :C et :D constitutives de la molécule. Les groupes (acides aminés) sont identifiés par leur initiale VLSPADK...</p> <p>♣ Fermez la fenêtre " Molecular data "</p>	Bien que certaines molécules soient constituées de plusieurs chaînes elles peuvent ne pas être définies par les auteurs. Elles ne s'afficheront donc pas. Et ne pourront pas être mises en évidence. Cela dépend du fichier ouvert.
<b>Sélection d'une chaîne</b>	♣ Choisir le bouton  et cliquez sur une partie de la molécule	
<b>Changement de couleur et de représentation de la sélection</b>	<p>♣ Cliquez sur  puis choisissez une couleur</p> <p>♣ Modifiez le rendu de la sélection avec les boutons </p> <p>♣ Faites de même pour les autres chaînes de la molécule</p> <p>♣ Cliquez sur  pour supprimer le mode de sélection.</p>	
<b>Sélection de l'ensemble</b>	♣ Cliquez sur 	Penser à faire cette action sinon on travaille sur la sélection précédente
<b>Sélection d'un élément</b>	<p>♣ Dans la fenêtre  de la barre de sélection, sélectionnez 'A-ala' puis cliquez sur  (nouvelle sélection)</p>	Ne pas oublier de cliquer sur le bouton  (ou analogue) avant d'effectuer une modification.
<b>Changement de couleur et de représentation de la sélection</b>	<p>♣ Cliquez sur  puis choisissez une couleur</p> <p>♣ Modifiez le rendu de la sélection avec </p> <p>♣ Fermez la fenêtre « Palette »</p>	
<b>Sélection de l'ensemble</b>	♣ Cliquez sur 	
<b>Affichage des liaisons hydrogène</b>	♣ Menu <i>Liaison &gt; Liaisons hydrogène&gt;Afficher</i>	
<b>Modification de la couleur des liaisons hydrogène</b>	♣ Cliquez sur  puis choisissez « liaisons hydrogène » puis choisissez une couleur	Bien vérifier le nom apparaissant dans la fenêtre avant de changer la couleur.