

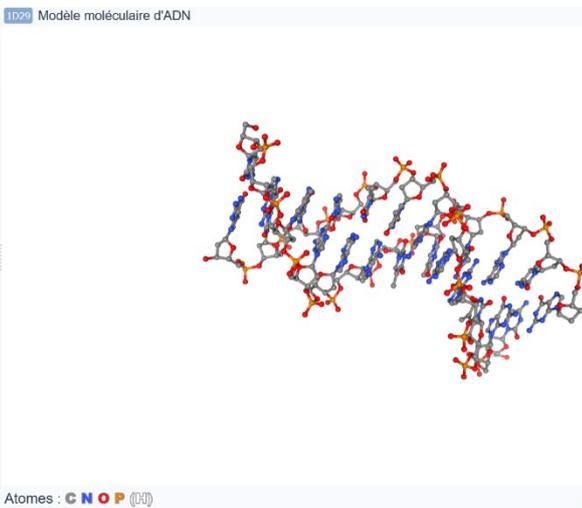
Utilisation de Libmol : la structure de l'ADN

Ce document présente des étapes permettant d'utiliser l'application Libmol (en ligne sur libmol.org ou hors ligne via MCNL) pour réaliser une illustration de la structure de l'ADN.

Libmol est une application de visualisation de modèle moléculaire en 3D. L'application dispose de sa propre banque de modèles dont la représentation peut être modifiée.

- 1) Nous allons pour notre exemple aller chercher dans la librairie de Libmol un modèle moléculaire de l'ADN. Pour cela taper ADN dans la barre de recherche et aller à « Modèle moléculaire de l'ADN »

Par défaut la molécule est représentée sous forme de boules (les atomes) et de bâtonnets (les liaisons entre atomes). Les couleurs correspondent à la nature des atomes (voir la légende en bas à gauche de l'écran). Ainsi les atomes d'oxygène sont colorés en rouge.

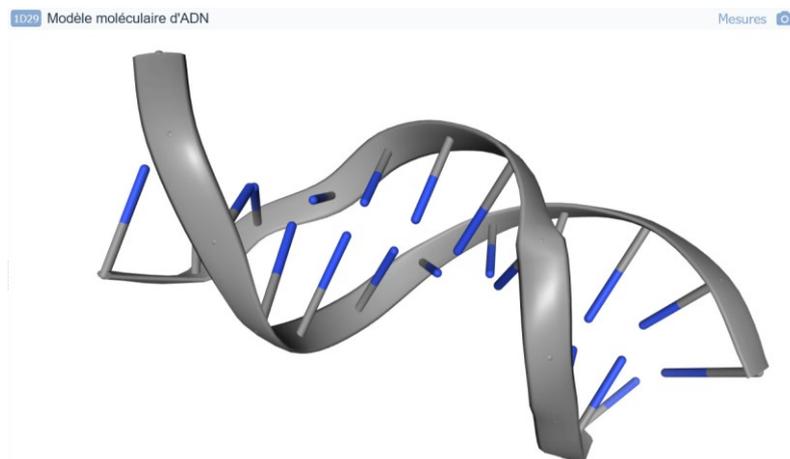


On remarque que laisser le pointeur de la souris sur un atome ouvre une boîte de dialogue avec : nature de l'atome, nature du nucléotide auquel il appartient et même séquence de nucléotides de la chaîne d'ADN.

- 2) Cherchons tout d'abord à avoir une vision globale de la forme de la molécule. Pour ce faire aller dans l'onglet « Commandes » sélectionner la représentation en mode « Rubans ».



L'onglet informations en bas à gauche vous explique en quoi consiste cette représentation en mode rubans.

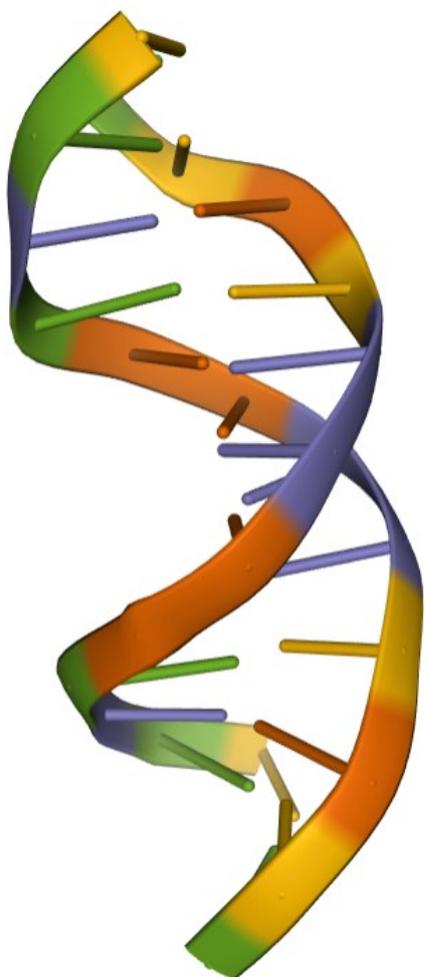


Cette représentation met bien valeur la structure en double hélice de l'ADN. On voit bien ici que 2 brins d'ADN (il y a 2 rubans distincts) s'associent ensemble en forme de 2 hélices.

En bleu sont alors colorées les bases azotées. On remarque donc que les bases azotées se trouvent au cœur/ à l'intérieur de la structure formée par les 2 hélices.

3) Nous voulons maintenant mettre en valeur la complémentarité des bases azotées. Il va falloir donc colorer la molécule selon les 4 bases azotées, et donc selon les 4 nucléotides. Pour cela, toujours dans l'onglet « Commandes » choisir « Colorer » « Résidus »

Encore une fois l'onglet informations en bas à gauche vous indique comment fonctionne cette coloration. Ici pour l'ADN on a coloré selon le type de nucléotide (et donc selon le type de base azotée portée par les nucléotides).



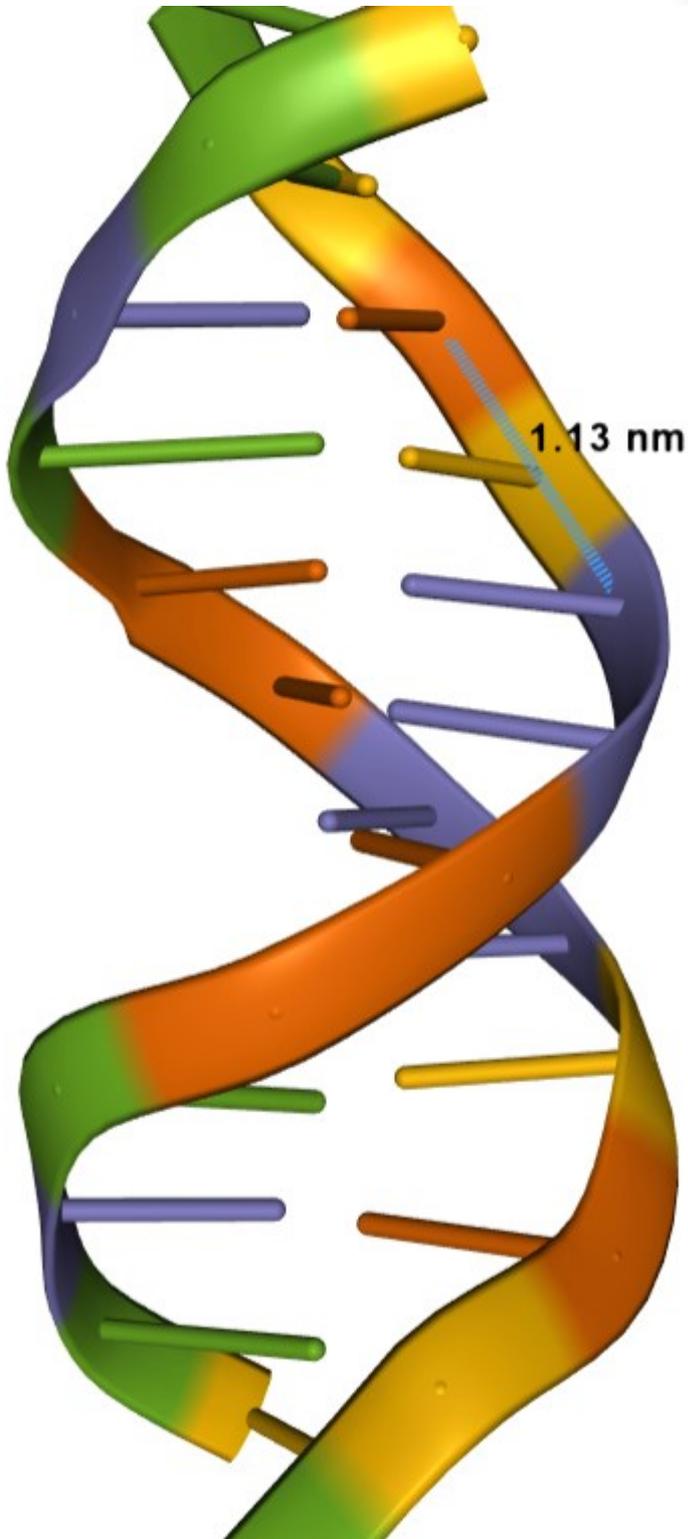
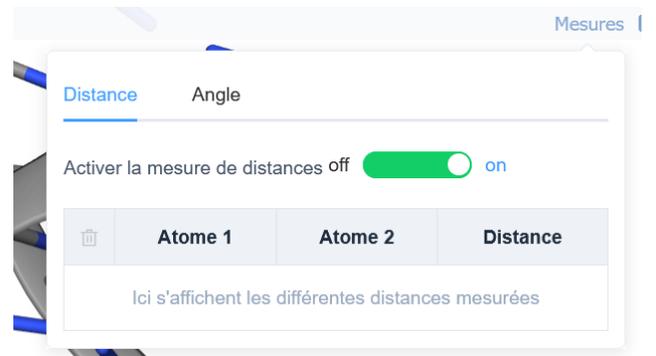
Résidus : **Da Dc Dg Dt**

Remarque : dans Libmol, les nucléotides sont écrits Da, Dt, Dc et Dg au lieu des classiques A, T, C et G. Le D correspond au « déoxy » d' « Acide DéoxyriboNucléique ».

On remarque que les couleurs Orange et Bleue se font toujours face tout comme les couleurs verte et jaune. On visualise donc la complémentarité entre les bases A et T et entre les bases C et G.

- 4) A ce stade comme notre molécule est assez simple on peut facilement mesurer la taille de ce qu'on observe. Pour cela cliquer sur « Mesure » en haut à droite et activer le mode mesure.

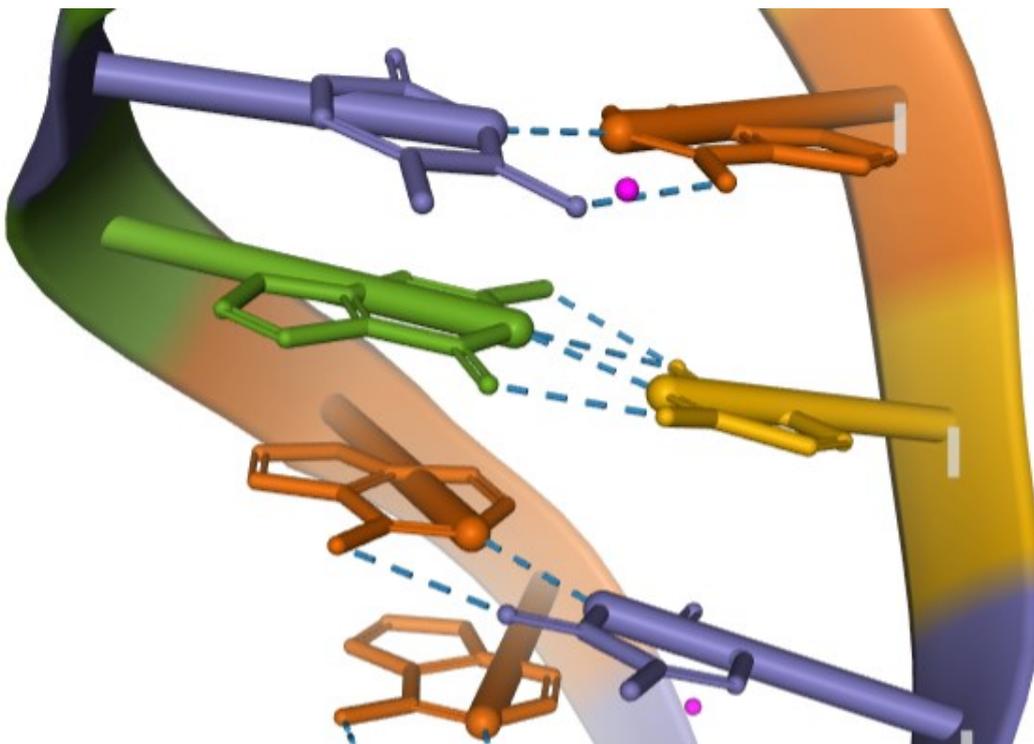
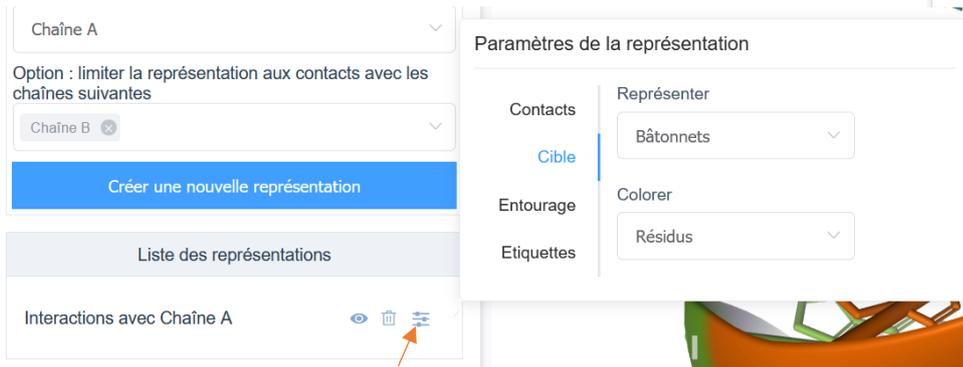
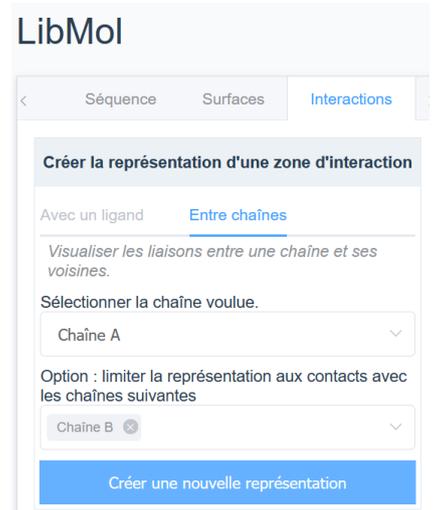
Cliquer en 2 point d'une hélice pour voir apparaitre la distance en nanomètres.



Nous avons donc une figure avec une échelle. [Capture d'écran]

- 5) On veut maintenant montrer clairement qu'il y a une interaction entre A et T et entre C et G. Pour cela aller dans l'onglet « Interactions » et sélectionner les 2 chaînes d'ADN (chaîne=brin). Les pointillés représentent des interactions liant A et T ainsi que C et G.

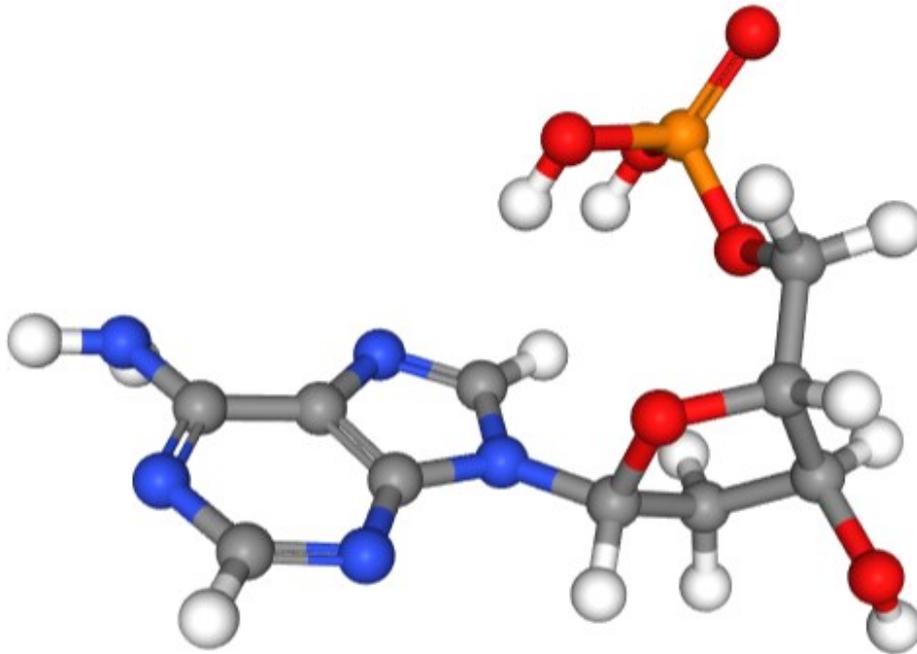
Les interactions réinitialisent la représentation des bases azotées. Il faut donc à nouveau la modifier. Pour cela rester dans l'onglet « Interactions » et dans les paramètres de l'interaction modifier la représentation de la « Cible » et de l'« Entourage » en colorant par résidus et représenter en mode bâtonnet pour quelque chose de plus clair.



[Capture d'écran]

- 6) Nous sommes en possession de la plupart des informations concernant la structure globale de l'ADN. Il ne nous reste plus qu'à avoir un zoom sur un nucléotide ainsi qu'une base azotée pour voir à quoi ressemblent les briques élémentaires de l'ADN. Pour cela, ouvrir d'abord le fichier « désoxyadénosine monophosphate ». C'est le nom du nucléotide A dans libmol.



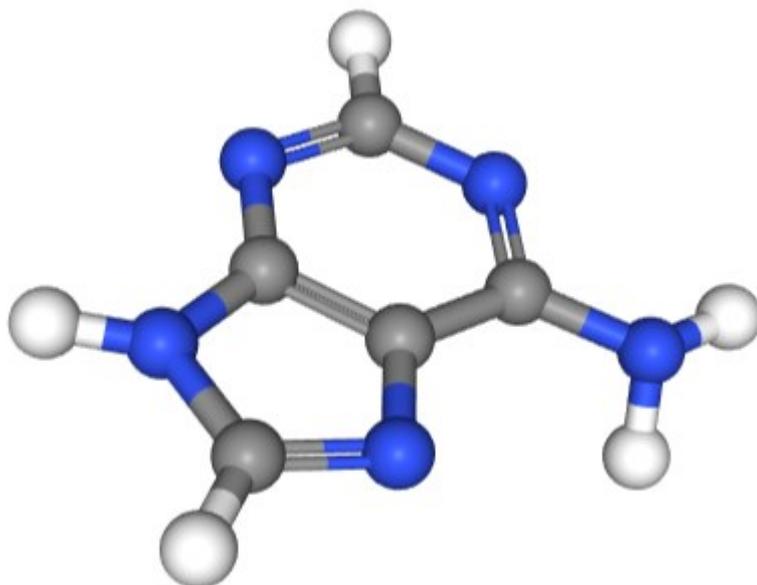


Atomes : **C** **H** **N** **O** **P**

[Capture d'écran]

7) Il ne nous reste plus qu'à avoir la base azotée du nucléotide A pour avoir tous les niveaux d'organisation :

Pour cela ouvrir le fichier « Adénine »



[Capture d'écran]

8) Une fois ces étapes réalisées on crée une figure légendée à partir des captures d'écran prises au fur et à mesure. Pour cela on peut utiliser Libre office writer, Libre office Impress ou encore Paint.