

Inaccessible dans le domaine de l'infiniment petit, l'étude des atomes et des molécules requiert l'emploi de modèles numériques. Téléchargeable, ou utilisable en ligne depuis

<https://libmol.org/>, l'application LibMol, développée par Paul Pillot, permet une étude intuitive de la plupart des molécules étudiées dans les programmes de SVT du lycée.

Méthode

étape 1

Ouvrir LibMol

étape 3

Explorer la molécule d'ADN mutée par irradiation à l'aide des commandes de la souris.

étape 2

Ouvrir le fichier indiqué ci-contre.
Libmol possède une large banque de données moléculaires accessibles depuis le menu recherche. Il est également possible d'exploiter les fichiers .pdb compatibles avec Rastop, et disponibles sur <https://www.rcsb.org/>.
Une fiche technique, utilisable à l'ECE, est téléchargeable : https://libmol.org/docs/FT_Libmol.pdf.

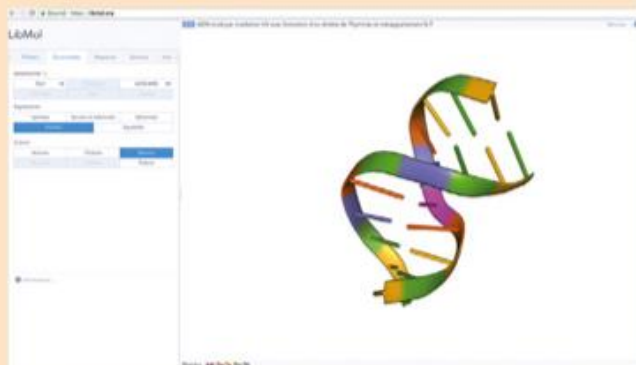
étape 4

Identifier les constituants de la molécule.

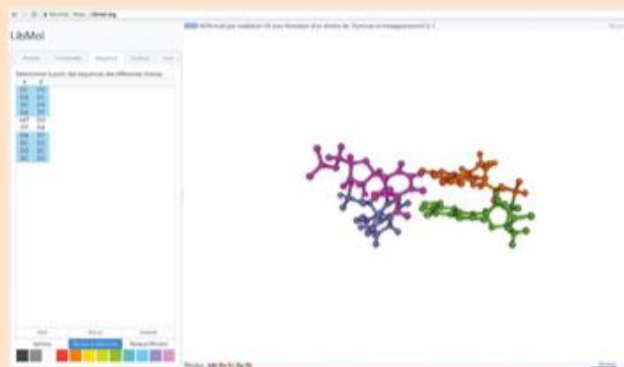
étape 5

Dans l'onglet commandes, modifier la coloration et l'affichage de tout ou partie de la molécule pour mettre en évidence l'effet des rayons UV sur la structure de l'ADN :

- formation d'un dimère de thymine (liaison supplémentaire anormale entre deux thymines successives sur le même brin) ;
- mésappariement de nucléotides au même niveau (un T associé à un G).



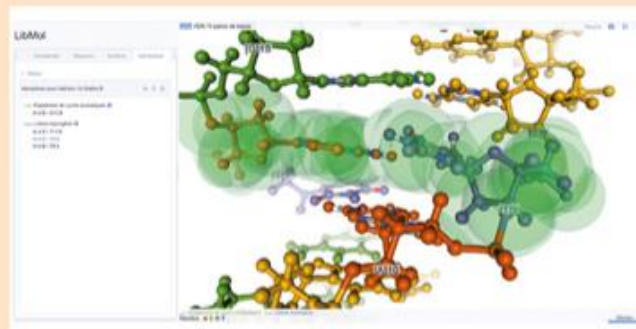
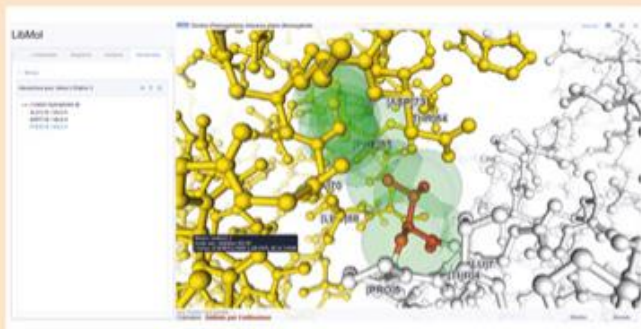
Exemple 1 : une coloration par résidus (nucléotides) et un affichage en rubans permettent de vérifier l'appariement des bases.



Exemple 2 : Dans l'onglet séquence, masquer l'ensemble de la molécule sauf les deux thymines en dimère (rose et violet) et leurs nucléotides complémentaires (G en vert et A en orange), que l'on affiche en boules et bâtonnets, permet de visualiser la liaison anormale entre les deux thymines.

Visualiser les interactions entre deux molécules (testostérone et son récepteur, antigène avec anticorps, entre hémoglobines drépanocytaires, entre nucléotides complémentaires...).

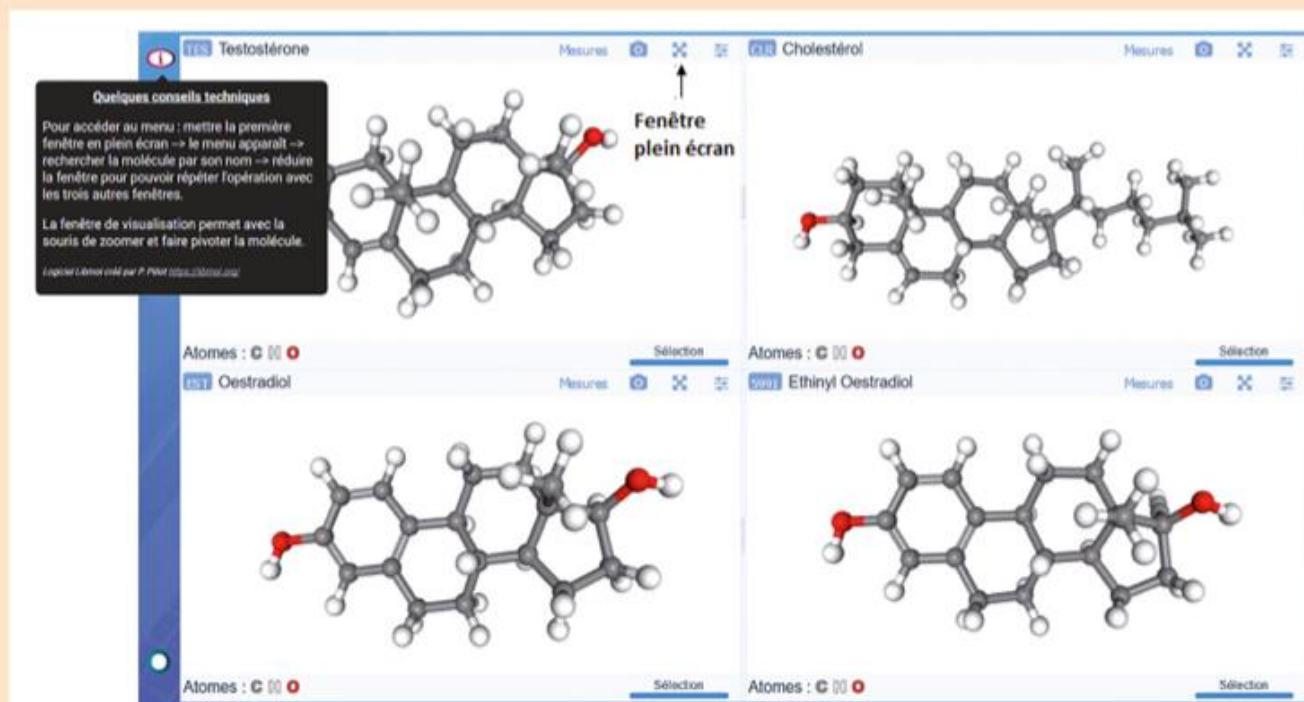
Pour cela, décocher tout dans le menu **Séquence** et faire un clic droit sur l'élément dont vous voulez voir les interactions. Le menu **Interactions** permet ensuite de modifier les paramètres de la représentation.



Afficher et comparer jusqu'à quatre molécules sur une même page

On peut utiliser ce module <http://opn.to/a/8ziag>.

- Explorer le modèle moléculaire pour positionner les molécules de manière à pouvoir les comparer.
- Le menu **Mesures** permet d'établir les distances et les angles entre atomes, qui s'affichent en cliquant sur les atomes considérés.
- Pour changer de molécules, l'affichage des molécules ou en sélectionner des parties, il faut repasser dans le menu **Plein écran**.



Ici, on visualise les hormones stéroïdiennes ainsi que leurs précurseurs, étudiés dans le chapitre 11.