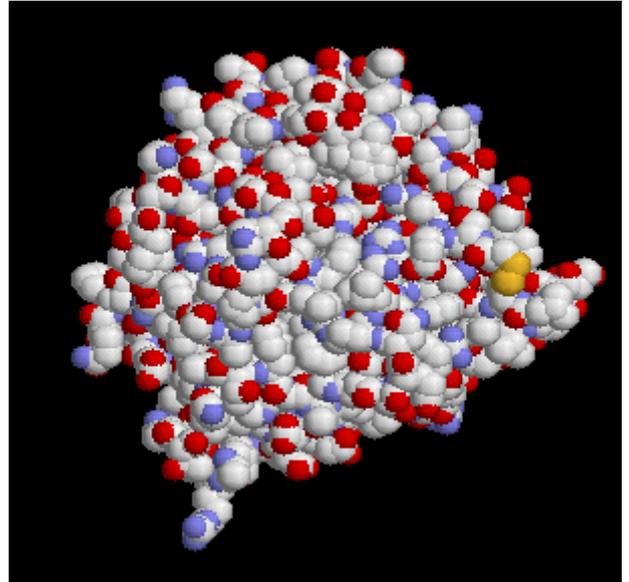


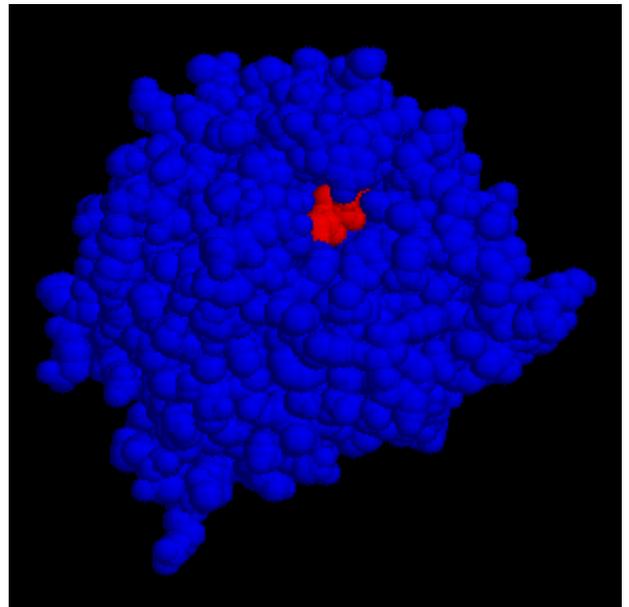
Afficher une enzyme et son substrat avec le logiciel Rastop

Le fichier à choisir est "cpa-sub". Il contient la carboxypeptidase et son substrat : un dipeptide.

On affichera la molécule en "Sphères VDW" ce qui correspond aux sphères de rayon de Van der Waals.



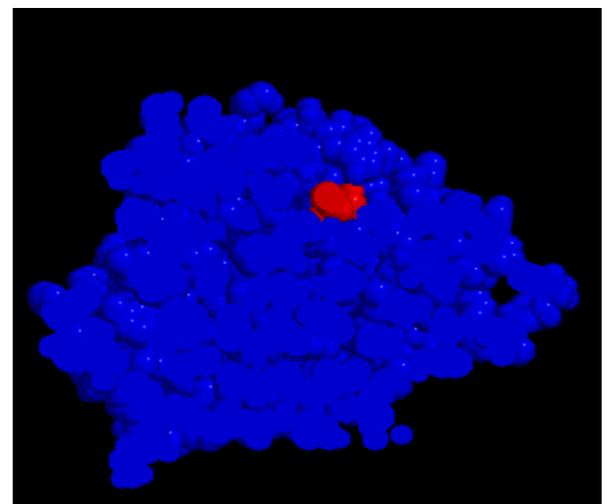
La première vision de la molécule n'est guère satisfaisante et il faut demander une coloration par chaîne comme précédemment. Le substrat apparaît logé au cœur de l'enzyme.



Pratiquer une coupe

La meilleure façon de percevoir la complémentarité est de faire une coupe virtuelle dans la molécule. Le panneau de contrôle inférieur permet de régler la profondeur de coupe.

Placez l'enzyme et son substrat en bonne position et enfoncez le bouton "Front". Les deux flèches immédiatement à droite vont régler la profondeur de la coupe. Observez le résultat qui s'affiche en même temps pour obtenir la meilleure coupe possible.



Afficher le squelette carboné

Pour chacune des molécules nous allons sélectionner uniquement l'enzyme et modifier l'affichage pour voir uniquement le squelette carboné. La molécule affichée ayant deux chaînes, la chaîne du substrat est identifiée par la lettre S alors que l'autre ne l'est pas.

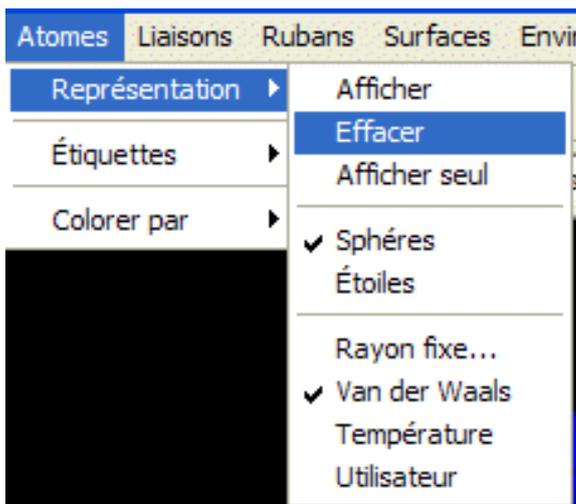
En utilisant le bouton expression () , il est possible d'ouvrir une fenêtre où l'on écrit les caractéristiques des atomes à sélectionner. Ici, il s'agit de tous les atomes qui appartiennent au substrat. L'expression "*S" est écrite dans la fenêtre puis validée.



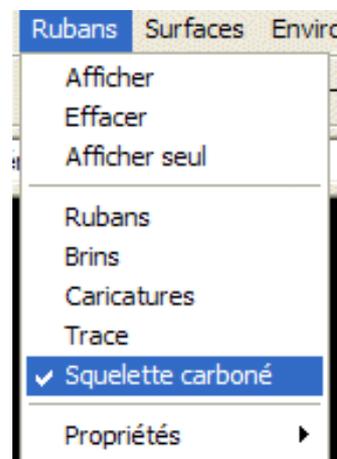
Le nombre d'atome sélectionné s'affiche.

Pour sélectionner maintenant la chaîne de l'enzyme, il suffit d'utiliser le bouton "inverser la sélection"

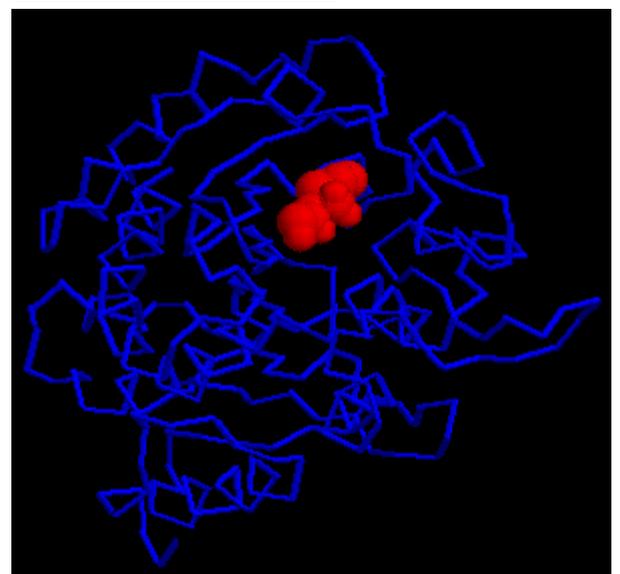
Deux commandes vont modifier l'aspect de cette chaîne :



puis :

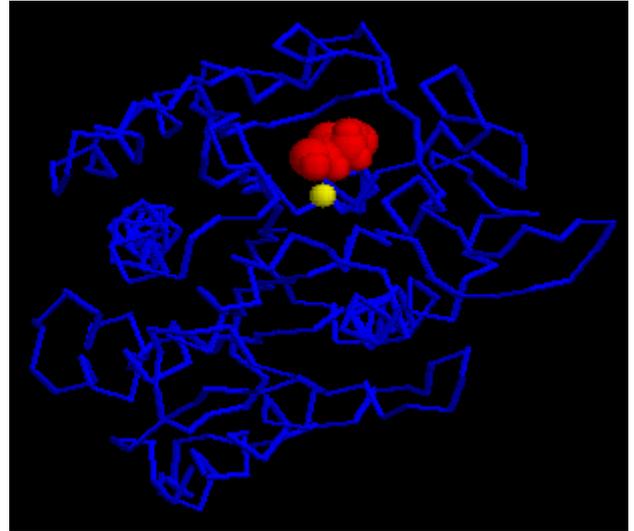
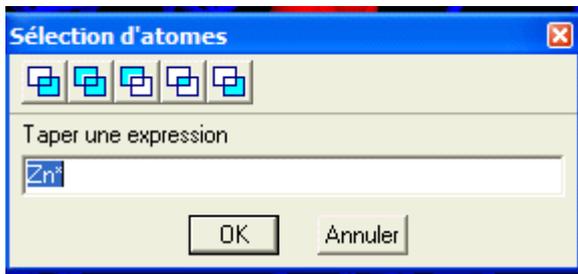


Le résultat est très clair : le substrat affiché en sphères VDW apparaît au milieu du squelette carboné.



Utiliser la ligne de commande pour mettre en évidence un hétéroatome

Il peut être intéressant de montrer que le site actif de l'enzyme contient un atome de Zinc responsable de la catalyse. Après avoir sélectionné la chaîne de l'enzyme sélectionner Zn*.



Il suffira en suite d'afficher en sphère VDW et de colorer l'atome sélectionné.