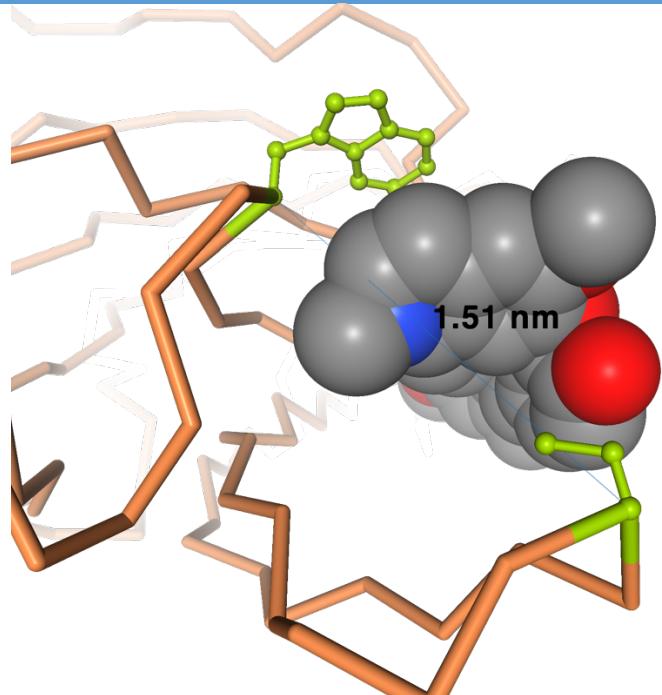
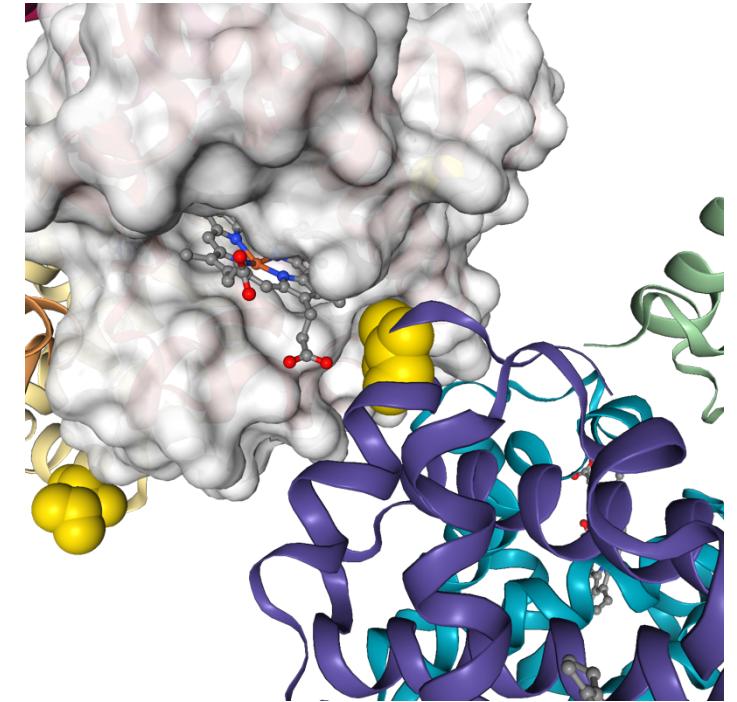
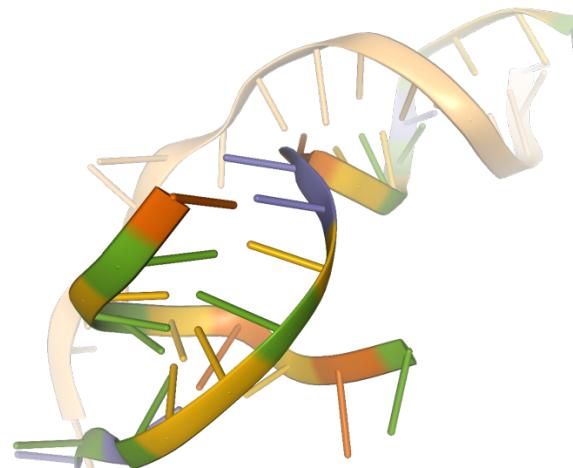


Libmol.org



Renouveler les usages pédagogiques de la visualisation moléculaire

Une application en ligne et un logiciel libre conçus pour que la résolution de problèmes biologiques soit au premier plan de la démarche des élèves

LibMol

1

Fichiers Commandes Séquence Surfaces

Sélectionner Q

Tout	Protéines	ADN/ARN
Glucides	Eau	Autres

Représenter

Sphères	Boules et bâtonnets	Bâtonnets
Rubans	Squelette	

5

Colorer

Atomes	Chaînes	Résidus
Structure	Nature	Palettes

6

Coloration par chaînes

La coloration par chaînes identifie les différentes chaînes présentes dans le modèle moléculaire et les colore de manière distincte.

Les principales chaînes identifiées sont :

- les protéines, constituées d'une ou plusieurs chaînes d'acides aminés,
- les acides nucléiques (ADN et ARN), constituées de chaînes de nucléotides.

Les ligands (eau, ion, hème, ...) associés à une chaîne (protéine ou acide nucléique) sont également colorés avec les autres atomes de cette chaîne.

Exemple d'une protéine à 4 chaînes :

1gzx Hémoglobine humaine oxygénée

Mesures

Atome: carbone CA
Res: Histidine HIS 50
Chaîne: A HEMOGLOBIN ALPHA CHAIN

2

3

4

Chains : A B C D Sélection Masqués

1 Le **titre** indique le nom du modèle actuellement chargé

2 Au survol de la souris, une **étiquette** présente l'atome correspondant et les entités auxquelles il appartient

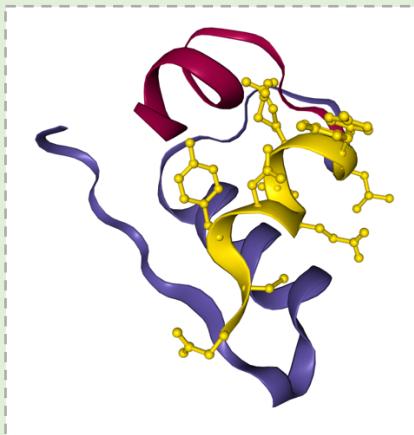
3 La **légende** informe sur la coloration de la sélection actuelle

4 Les zones actives donnent une visualisation de la **sélection actuelle** et des atomes cachés. Au survol une **silhouette** s'affiche

Une interface actuelle pour comprendre la complexité des modèles moléculaires

Un mode dédié pour relier la séquence à la structure 3D

- 3 Contrôles rapides de l'affichage ou de la coloration de la sélection en cours.
Les affichages se font en **superposition** des rubans ou des squelettes carbonés s'ils sont présents



1 Les **séquences** de chaque chaîne sont visualisées sous la forme de colonnes. L'arrière-plan bleu indique la **sélection** actuelle

< Fichiers Commandes Séquence Sur >

Sélectionner à partir des séquences des différentes chaînes

A	B
CYS	CYS
ALA	GLY
SER	SER
VAL	HIS
CYS	LEU
SER	VAL
LEU	LEU 13 Chaîne A Leucine
TYR	LEU
GLN	TYR
LEU	LEU
ASN	VAL
TYR	CYS
CYS	GLY

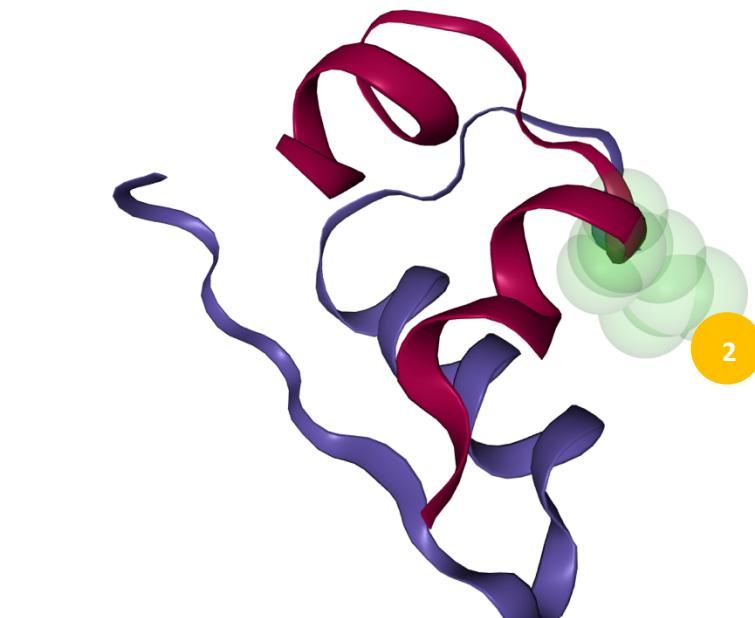
Tout Aucun
Inverser
Sphères Boules et bâtonnets
Masquer/Montrer

3

2 Une **étiquette** de description s'affiche au survol ainsi qu'une **silhouette** dans la fenêtre de visualisation.
Un menu contextuel pour le contrôle du **masquage** s'active au clic droit.

LEU 16 - Chaîne A

- Masquer
- Montrer
- Masquer le reste
- Montrer le reste



Chaînes : A B

Un assistant intégré à la ligne de commandes

pour ne plus utiliser de « formules magiques » : suggestions en cours de frappe et silhouette témoin

Sélectionner :A and ✓ 202 X

T Chaîne :A Chaîne A (INSULIN A CHAIN (PH 7))

ADP

B Résidu

ALA Alanine

ARG Arginine

ASN Asparagine

Mot-clé and et (opérateur logique d'intersection)

all tous les atomes

Représenter

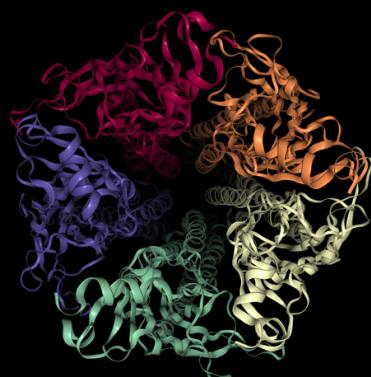
Spécificité

Batch

Colorer

Des capacités graphiques avancées pour percevoir la 3D

Effet de brouillard d'arrière-plan



Mesures d'angles et de distances

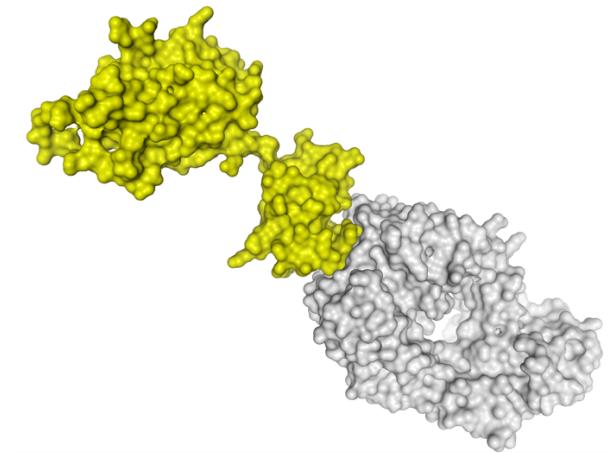
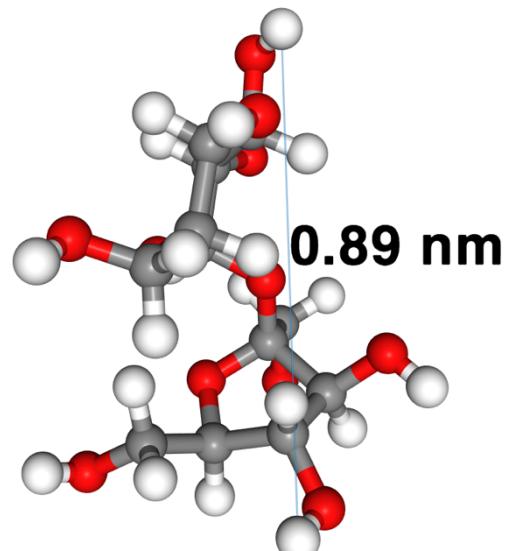
Longueurs exprimées en nm (SI)
Panneau pour contrôler les mesures

Mesures

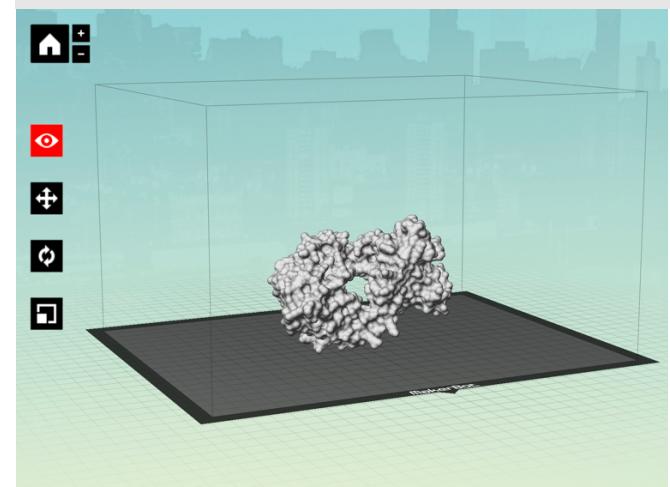
Distance Angle

Activer la mesure de distances

	Atome 1	Atome 2	Distance
<input type="button"/>	HO3 31 SUC1	HO4' 43 SUC1	0.89 nm



Des surfaces pour visualiser les volumes et les imprimer en 3D

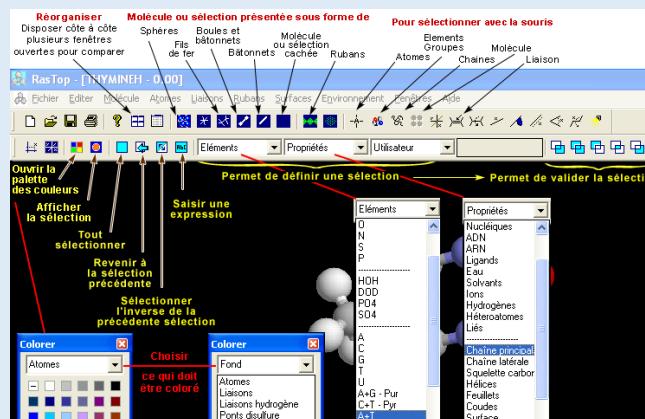


RasTop VS Libmol.org

Créé en 2000, en ajoutant à RasMol une interface d'application pour Windows (multifenêtrage, barre de menus), RasTop a été introduit dans l'enseignement des SVT en 2002. En **2004 il connaît sa dernière évolution** avec l'introduction d'une ligne de commande.

Norey (2012, « Les logiciels de visualisation moléculaire dans l'enseignement des sciences de la vie et de la Terre »), indique : « *Nous sommes arrivés à la conclusion qu'il semble y avoir une saturation de l'usage de ces logiciels. Elle se traduit par un usage ayant peu varié ces dix dernières années [...] Les activités qui utilisent ces logiciels semblent être très guidées (protocolières) [...] se contentant plutôt de donner à voir [des] représentations* ».

L'interface de RasTop a une **faible affordance** : Les graphismes des icônes ne permettent pas d'en deviner les fonctions, l'accès aux commandes de colorations nécessite une navigation dans 3 niveaux de menus



L'interface est peu informative : pas de légendes des couleurs, pas d'aide sur les commandes, ...

Les temps d'utilisation du logiciel en classe sont longs (« TP RasTop »), nécessitent une fiche technique ce qui réduit le nombre d'utilisations (deux par an d'après Norey), la maîtrise des élèves et donc leur degré d'autonomie.

En 15 ans, les enjeux pédagogiques en SVT ont évolué et RasTop n'y est pas adapté

Les fonctions de RasTop qu'on ne trouve pas dans Libmol.org :

- Comparaison de molécules
- Affichage des liaisons hydrogène
- Enregistrement de sessions

Témoignages d'enseignants comparant Libmol à RasTop

« Rastop est tellement complexe que les élèves passent plus de temps à résoudre des problèmes techniques que des problèmes scientifiques. Et la prise en main même pour les collègues n'est pas toujours évidente... On ne sait jamais comment s'appelle la chaîne, etc... »

« ... je peux leur faire faire la même chose que sur Rastop sans aucun problème. Mes élèves [...] m'ont confirmé que c'était beaucoup plus facile. »

« La commande de libmol est bien plus simple que rastop. Je pense même qu'une fiche d'utilisation n'est pas vraiment indispensable tant l'objectif de chaque commande est clair. »

« J'ai testé Libmol ... et il est en effet beaucoup plus facile d'utilisation que Rastop. Le gros problème reste l'impossibilité de comparer différentes molécules dans plusieurs fenêtres : à mon avis, c'est le seul point négatif... »

« La liberté pédagogique est beaucoup plus grande sur Libmol : travail avec des fichiers en local, à partir de la librairie de molécules ou directement de la PDB »

Libmol.org

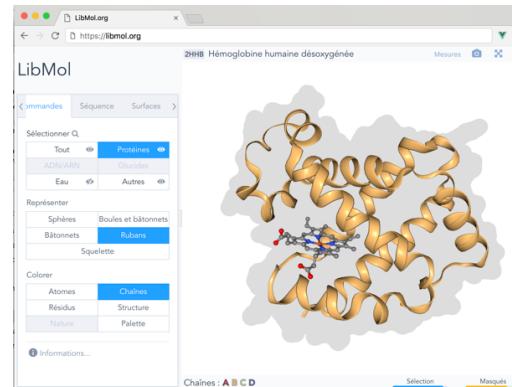
Un projet ouvert et coopératif

Librairie de molécules incluses
Des modèles moléculaires issus de la recherche et didactisés pour l'enseignement des SVT par un groupe collaboratif

The screenshot shows a search interface with a search bar containing "globine". Below it is a list of molecular models:

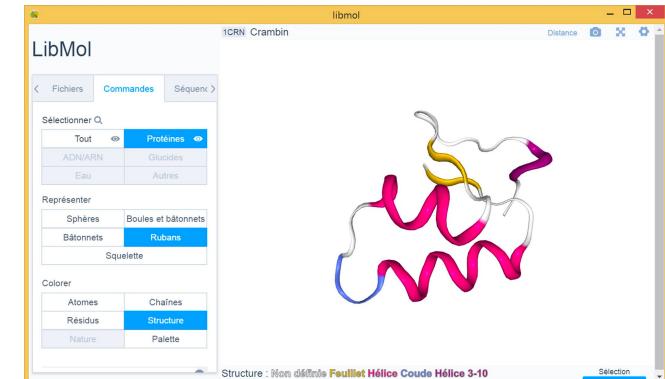
- Hémoglobine humaine oxygénée
- Dimère d'hémoglobine drépanocytaire désoxygénée
- Hémoglobine humaine désoxygénée** (highlighted in blue)
- Hémoglobine humaine oxygénée
- Hème oxygéné extrait de l'hémoglobine humaine
- Hème désoxygéné extrait de l'hémoglobine humaine
- Dipeptide extrait de la chaîne beta de l'hémoglobine humaine

Une application en ligne
Sans installation et toujours actualisée
Intégrable dans Moodle, Genially,...



<https://libmol.org>

Un logiciel Win/Mac
Indépendant d'une connexion internet
En local, sur clé USB ou sur un réseau



<https://libmol.org/downloads>

Logiciel libre

- ✓ Librement utilisable
- ✓ Librement modifiable
- ✓ Licence GPL/CeCILL

Lié à la Recherche

Portail vers les données de la Protein Data Bank. Propulsé par des librairies scientifiques pour les modélisations et les traitements de données.

Ressources

Fiche technique : <https://libmol.org/docs>
Code source : <https://github.com/ppillot/libmol>
Twitter : #libmol
Et aussi : Forum national SVT, Groupe facebook SVT : partage, conseils, questions

Avec les contributions de
P. Pillot (conception & développement), H. Furstoss (aide intégrée), les tests et les conseils de P. Cosentino, S. Beaudin, S. Gruszka, G. Gutjahr, J. Janin, E. Jourdan, V. Rambaud, F. Labaune, L. Delorme, A. Kervarrec, D. Bard, A. Casanova, M. Brez, E. Follien, Y. Thomas, T. Garrigues, L. Darriet, S. Rodot, P. Ferrand, N. Sellal, M. Fenaert, F. Hulot...