



# Manuel d'utilisation

---

*Comment utiliser votre Applet Molecul'Art ?*

Molecul'Art est une applet Java qui permet de visualiser des molécules en 3D à partir d'un fichier pdb téléchargé directement sur la base RCSB ou directement en local.

## Table des matières

|  |   |
|--|---|
| .....  | 0 |
| Charger une structure à partir d'un fichier pdb .....    | 2 |
| • Recherche simple .....                                 | 2 |
| • Recherche avancée .....                                | 2 |
| • Recherche hors ligne .....                             | 2 |
| • Génération de rapport .....                            | 3 |
| • Le rapport molécule .....                              | 3 |
| • Le rapport recherche.....                              | 4 |
| Visualiser la molécule.....                              | 4 |
| • Utilisation du zoom .....                              | 4 |
| • Manipuler la molécule .....                            | 5 |
| • Changer la couleur .....                               | 6 |
| • Changer la couleur de l'arrière-plan .....             | 6 |
| • Changer la couleur de la structure pdb.....            | 6 |
| • Visualisation selon les modèles de représentation..... | 6 |

## Charger une structure à partir d'un fichier pdb

- **Recherche simple**

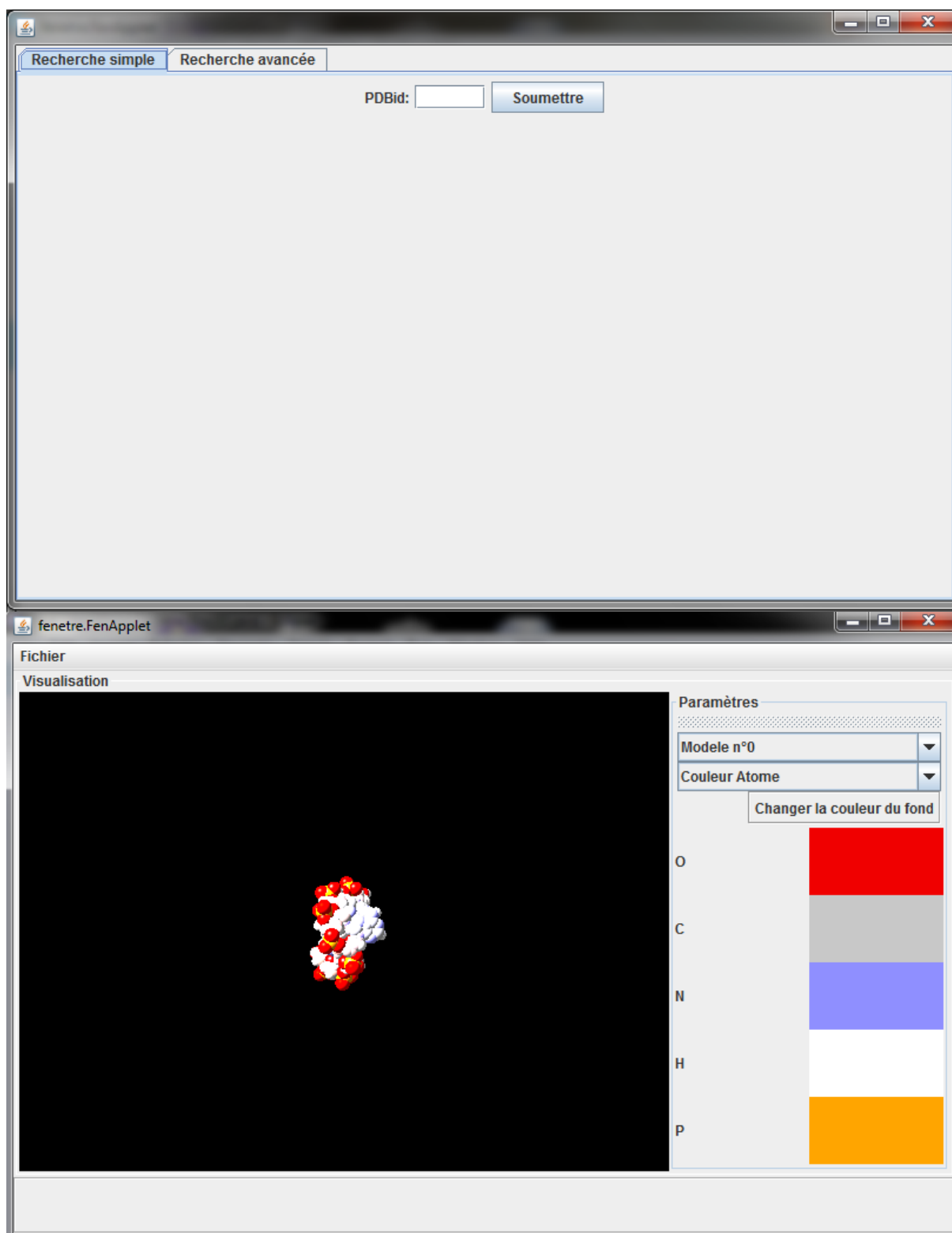
1. Dans le menu, cliquez sur fichier -> Rechercher une molécule.
2. Vous avez le choix entre deux onglets : recherche simple et recherche avancée. Choisissez recherche simple.
3. Entrez le pdbld de la molécule que vous recherchez, c'est une suite de 4 caractères (chiffre ou lettre en majuscule) puis cliquez sur « soumettre »
4. Molecul'Art modélise la molécule pendant un instant puis vous l'affichera directement sur le panel de visualisation.

- **Recherche avancée**

1. Cliquez sur fichier -> Rechercher une molécule
2. Cliquez sur l'onglet « Recherche avancée »
3. Vous avez le choix entre plusieurs champs, pour diminuer le temps de recherche et avoir une liste de molécules plus précises il vous est conseillé de remplir le plus de champs possible.
4. Cliquez sur « soumettre », après un court instant, la molécule que vous avez demandé s'affichera.

- **Recherche hors ligne**

1. Cliquez sur fichier -> Ouvrir
2. Le gestionnaire s'affichera, puis sélectionnez un fichier PDB se trouvant dans son répertoire
3. Cliquez sur Ouvrir puis la molécule s'affichera.



- **Génération de rapport**

- **Le rapport molécule**

- *En mode hors-ligne*

1. Il vous suffit de charger votre structure pdb comme précédemment expliqué.
2. Cliquez sur fichier -> Générer un rapport.

- **En ligne**

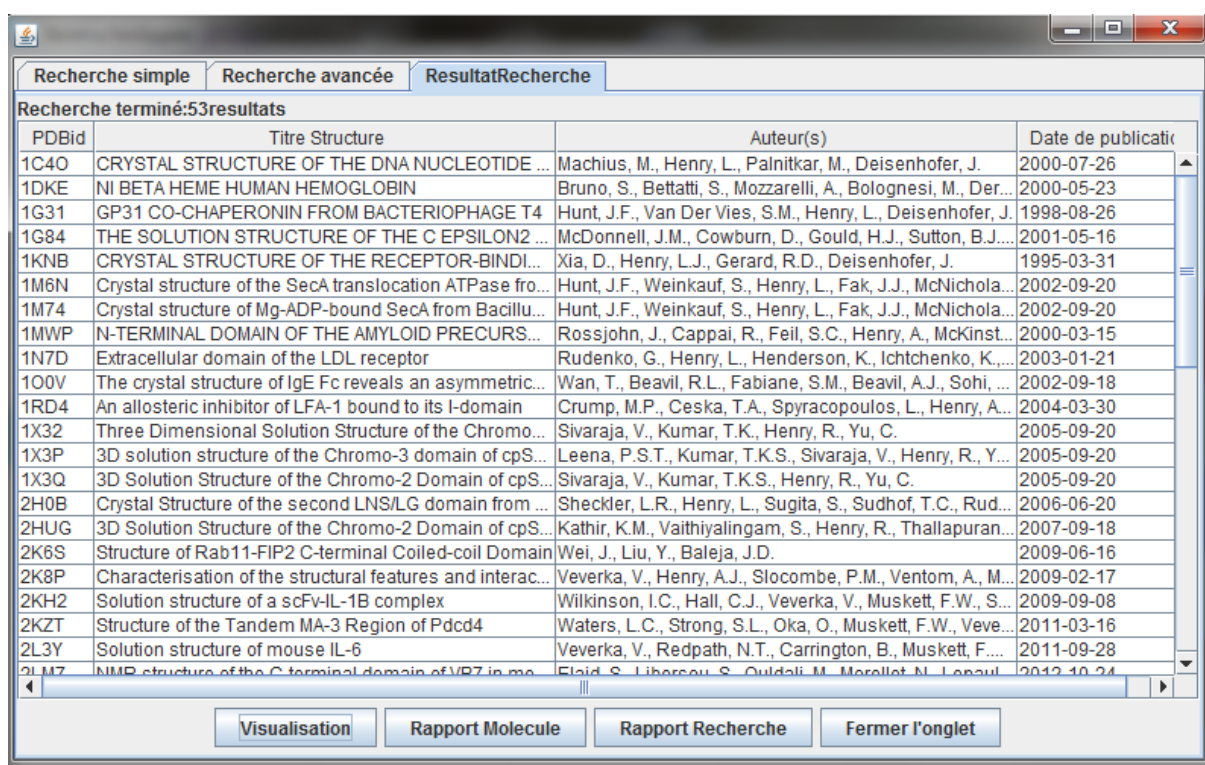
1. Effectuer une recherche simple ou avancée comme précédemment expliqué.
2. La liste des molécules s'affichera, sélectionnez la molécule dont vous voulez le rapport, ou les molécules en pressant la touche « CTRL » ou « Shift ».
3. Enfin, cliquer sur « Rapport Molécule »

*Le rapport des molécules sont au format HTML figurant le nom des auteurs, la date de publication, ainsi que la séquence des chaines.*

- **Le rapport recherche**

*Dans ce rapport figure les différents champs que vous aurez tapés ainsi que les résultats de la recherche sous forme de tableau.*

1. Effectuer une recherche comme précédemment expliqué.
2. Cliquer sur « Rapport recherche » puis le rapport s'affichera au format HTML.



| PDBId | Titre Structure  | Auteur(s)  | Date de publication |
|-------|--|--|---------------------|
| 1C40  | CRYSTAL STRUCTURE OF THE DNA NUCLEOTIDE ...                | Machius, M., Henry, L., Palnitkar, M., Deisenhofer, J.         | 2000-07-26          |
| 1DKE  | NI BETA HEME HUMAN HEMOGLOBIN                              | Bruno, S., Bettatti, S., Mozzarelli, A., Bolognesi, M., Der... | 2000-05-23          |
| 1G31  | GP31 CO-CHAPERONIN FROM BACTERIOPHAGE T4                   | Hunt, J.F., Van Der Vies, S.M., Henry, L., Deisenhofer, J.     | 1998-08-26          |
| 1G84  | THE SOLUTION STRUCTURE OF THE C EPSILON2 ...               | McDonnell, J.M., Cowburn, D., Gould, H.J., Sutton, B.J....     | 2001-05-16          |
| 1KNB  | CRYSTAL STRUCTURE OF THE RECEPTOR-BINDI...                 | Xia, D., Henry, L.J., Gerard, R.D., Deisenhofer, J.            | 1995-03-31          |
| 1M6N  | Crystal structure of the SecA translocation ATPase fro...  | Hunt, J.F., Weinkauf, S., Henry, L., Fak, J.J., McNichola...   | 2002-09-20          |
| 1M74  | Crystal structure of Mg-ADP-bound SecA from Bacillu...     | Hunt, J.F., Weinkauf, S., Henry, L., Fak, J.J., McNichola...   | 2002-09-20          |
| 1MWP  | N-TERMINAL DOMAIN OF THE AMYLOID PRECURS...                | Rossjohn, J., Cappai, R., Feil, S.C., Henry, A., McKinst...    | 2000-03-15          |
| 1N7D  | Extracellular domain of the LDL receptor                   | Rudenko, G., Henry, L., Henderson, K., Ichtchenko, K.,...      | 2003-01-21          |
| 1O0V  | The crystal structure of IgE Fc reveals an asymmetric...   | Wan, T., Beavil, R.L., Fabiane, S.M., Beavil, A.J., Sohi, ...  | 2002-09-18          |
| 1RD4  | An allosteric inhibitor of LFA-1 bound to its I-domain     | Crump, M.P., Ceska, T.A., Spyropoulos, L., Henry, A.,...       | 2004-03-30          |
| 1X32  | Three Dimensional Solution Structure of the Chromo...      | Sivaraja, V., Kumar, T.K., Henry, R., Yu, C.                   | 2005-09-20          |
| 1X3P  | 3D solution structure of the Chromo-3 domain of cpS...     | Leena, P.S.T., Kumar, T.K.S., Sivaraja, V., Henry, R., Y...    | 2005-09-20          |
| 1X3Q  | 3D Solution Structure of the Chromo-2 Domain of cpS...     | Sivaraja, V., Kumar, T.K.S., Henry, R., Yu, C.                 | 2005-09-20          |
| 2H0B  | Crystal Structure of the second LNS/LG domain from ...     | Sheckler, L.R., Henry, L., Sugita, S., Sudhof, T.C., Rud...    | 2006-06-20          |
| 2HUG  | 3D Solution Structure of the Chromo-2 Domain of cpS...     | Kathir, K.M., Vaitthiyalingam, S., Henry, R., Thallapuran...   | 2007-09-18          |
| 2K6S  | Structure of Rab11-FIP2 C-terminal Coiled-coil Domain      | Wei, J., Liu, Y., Baleja, J.D.                                 | 2009-06-16          |
| 2K8P  | Characterisation of the structural features and interac... | Veverka, V., Henry, A.J., Slocombe, P.M., Ventom, A., M...     | 2009-02-17          |
| 2KH2  | Solution structure of a scFv-IL-1B complex                 | Wilkinson, I.C., Hall, C.J., Veverka, V., Muskett, F.W., S...  | 2009-09-08          |
| 2K2T  | Structure of the Tandem MA-3 Region of Pdcd4               | Waters, L.C., Strong, S.L., Oka, O., Muskett, F.W., Veve...    | 2011-03-16          |
| 2L3Y  | Solution structure of mouse IL-6                           | Veverka, V., Redpath, N.T., Carrington, B., Muskett, F....     | 2011-09-28          |
| 2LM7  | NMR structure of the C-terminal domain of V77 in mo...     | Elaid, S., Libersau, S., Ouldali, M., Morellet, N., Lepaul...  | 2012-10-24          |

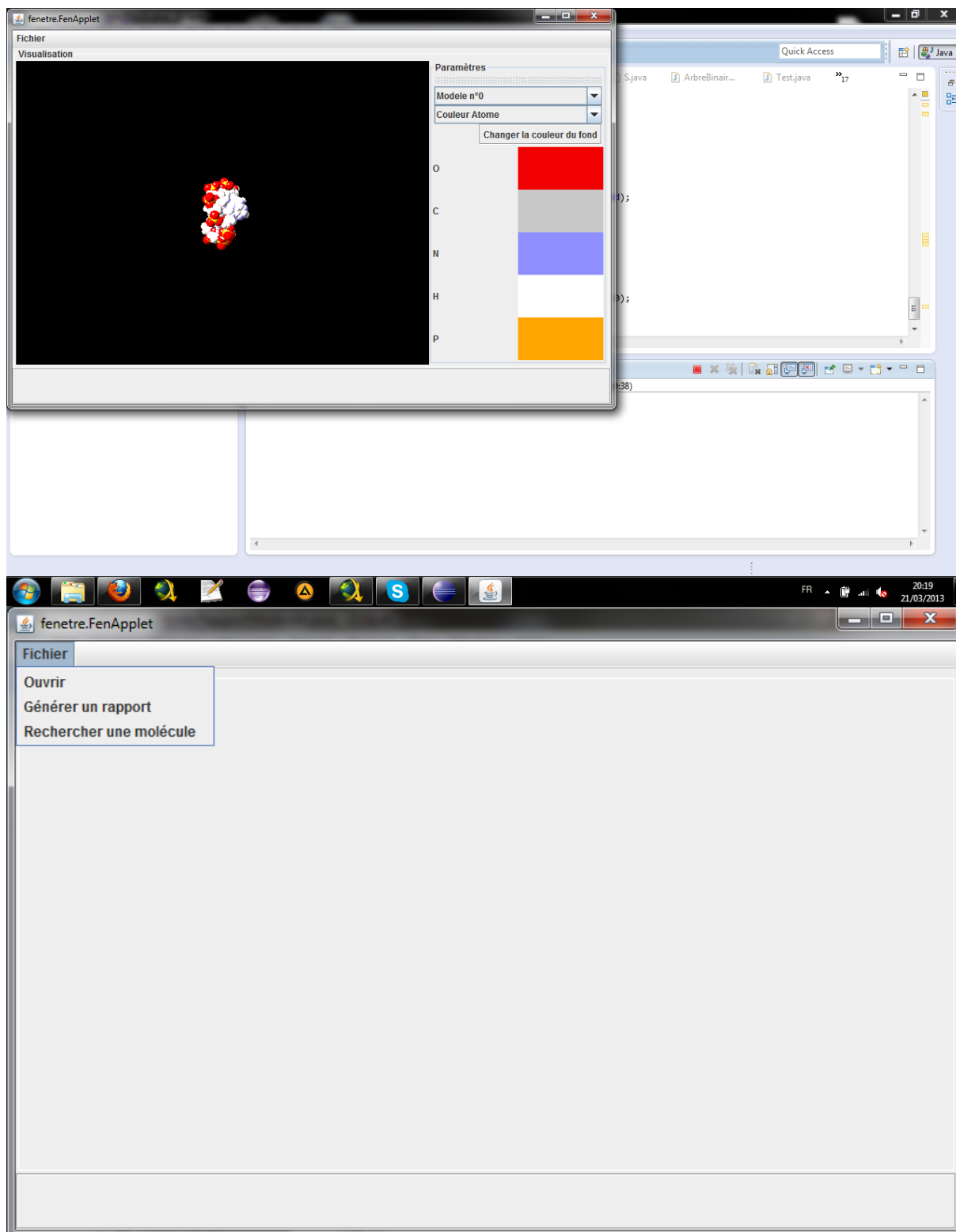
## Visualiser la molécule

- **Utilisation du zoom**

1. Pour zoomer à un endroit précis, placez le curseur de la souris à l'endroit qui vous intéresse.
2. Ensuite, appuyez sur « Alt » et pressez le bouton gauche de la souris
3. Selon le mouvement de la souris, il y aura un zoom + ou - à l'endroit désiré.

- **Manipuler la molécule**

Vous pouvez, par action de la souris, effectuer des rotations sur la molécule. Pour cela, il vous suffit de maintenir le clic gauche sur celle-ci, puis bouger la souris pour pouvoir observer la molécule dans la position que vous souhaitez.



- **Changer la couleur**

- **Changer la couleur de l'arrière-plan**

Il vous suffit d'appuyer sur « changer la couleur du fond », une palette de couleur apparaîtra et il ne vous restera plus qu'à choisir

- **Changer la couleur de la structure pdb**

Vous avez le choix de modifier la couleur de la structure pdb soit par atome, chaîne ou résidu.

1. Sur le panneau de droite, choisissez quel type de structure dont vous souhaitez modifier la couleur.
2. La couleur des atomes, des chaînes ou des résidus apparaîtront sur juste en dessous.
3. Enfin, cliquez sur la couleur que vous souhaitez modifier.

- **Visualisation selon les modèles de représentation**

Sur le panneau de droite, vous pouvez choisir votre modèle de représentation.

