


Visualisation de molécules avec Libmol.org

Sélection par éditeur de commande

Sélections prédéfinies
Le bouton  masque ou montre le composant

Représentations de la sélection

Colorations de la sélection

Aide contextuelle
(au survol d'une commande)

Remarque : la sélection active et ses propriétés apparaissent en bleu

LibMol

Fichiers

Commandes

Séquence

Surfaces

Sélectionner Q

Tout

Protéines

ADN/ARN

Glucides

Eau

Autres

Représenter

Sphères

Boules et bâtonnets

Bâtonnets

Rubans

Squelette

Colorer

Atomes

Chaînes

Résidus

Structure

Nature

Palette

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.


Espace de travail

Hémoglobine humaine oxygénée

Mesures







Atome: carbone CA

Res: Alanine ALA 272

Chaîne: B:HEMOGLOBIN BETA CHAIN

HEMOGLOBIN ALPHA CHAIN

Chaînes : A B C D

Sélection

Masqués

Réglages : couleur arrière-plan, plan de coupe,...

Capture d'écran

Mesures

Survol à la souris : nom de l'atome du résidu et de la molécule

Clic gauche : rotation

Clic droit : translation

Molette : zoom

Code couleur de la dernière coloration utilisée

Affichage des noms au survol

% atomes sélectionnés et masqués (surbrillance au survol)

Mode séquence

A	B	C	D
VAL	VAL	VAL	VAL
LEU	HIS	LEU	HIS
SER	LEU	SER	LEU
PRO	THR	PRO	THR
ALA	PRO	ALA	PRO
ASP	GLU	ASP	GLU
LYS	GLU	LYS	GLU
THR	LYS	THR	LYS
ASN	SER	ASN	SER
VAL	ALA	VAL	ALA
LYS	VAL	LYS	VAL
ALA	THR	ALA	THR
ALA	ALA	ALA	ALA
TRP	LEU	TRP	LEU
GLY	TRP	GLY	TRP
LYS	GLY	LYS	GLY
VAL	LYS	VAL	LYS

Tout

Aucun

Inverser

Sphères

Boules et bâtonnets

Masquer/Montrer

HIS 545 - Chaîne D

Masquer

Montrer

Masquer le reste

Montrer le reste

LYS 551 Chaîne D

Lysine

Chaînes du modèle. En bleu, chaîne entièrement sélectionnée

Clic droit : masquer/montrer un résidu ou une chaîne

Survol d'un résidu ou d'une chaîne : identification et mise en surbrillance

Les résidus sélectionnés apparaissent en bleu

Sélections prédéfinies


Modes de représentation appliqués à la sélection

Couleurs appliquées à la sélection

Mesures de distances et d'angles

Distance

Angle

Activer la mesure de distances 

Atome 1

Atome 2

Distance

CA 1414 | SER187

CA 1784 | LYS238

1.57 nm

Atome: carbone CA

Res: Lysine LYS 238

Chaîne: B:HEMOGLOBIN BETA CHAIN

Choisir le type de mesure

Activer la mesure des distances

Effacer les mesures réalisées

Repérage en rouge, des atomes choisis pour la mesure (cliquer pour sélectionner)

Éditeur de commandes

:H

Chaîne

:H Chaîne H (Long neurotoxin 1)

Résidu

HIS Histidine

Mot-clé

hetero hétéro atomes

helix Structures en hélice

507

Valider la sélection réalisée

Fermer l'éditeur

Nombre d'atomes (également en surbrillance)

Suggestions correspondantes aux lettres en cours de frappe

Après validation, la sélection devient un bouton éditable