

### LA SPECIFICITE DES ANTICORPS (version RASMOL)

Un organisme produit des anticorps dirigés contre les agents infectieux qui le contaminent. Les anticorps comprennent quatre chaînes polypeptidiques identiques deux à deux : deux chaînes lourdes et deux chaînes légères. Chaque chaîne comprend une région identique pour tous les anticorps produit par un individu et une région variable d'un anticorps à l'autre permettant la liaison spécifique de l'anticorps avec un antigène.

Dans le cas qui nous intéresse, 2 anticorps dirigés contre un même antigène, la protéine p24 de la capsid du virus HIV, ont été séquencés et modélisés chez un même individu. Ici seule une partie de l'anticorps, liée à l'antigène (fragment Fab), est séquencée et représentée (Fab 25.3 et Fab 13B5).

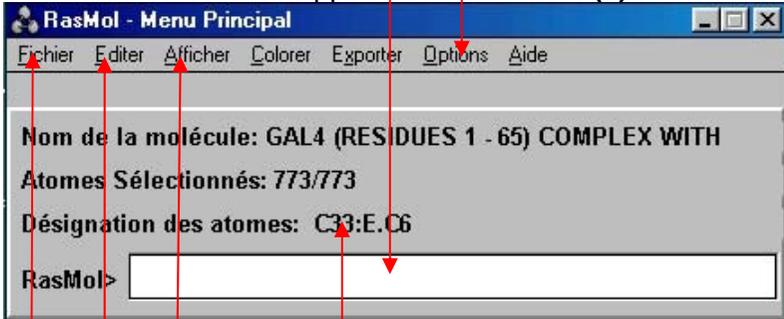
**On cherche à savoir comment ces deux anticorps sont capables de se fixer sur le même antigène.**

Matériel :		
<ul style="list-style-type: none"> <li>ordinateur avec les logiciels ANAGENE et RASMOL;</li> <li>fiches techniques d'ANAGENE et de RASMOL ;</li> <li>dossier « anticorpsRMOL1 » contenant tous les fichiers nécessaires placé dans le répertoire de travail ;</li> <li>imprimante noir et blanc ou couleur.</li> </ul>		
Activités et déroulement des activités	Capacités	Barème
<p>1. <b>Ouvrir</b> avec le logiciel ANAGENE, dans le répertoire « Sauve », <b>le fichier</b> « SIDA01.EDI » contenant les séquences d'une portion de chaîne lourde (H) et d'une chaîne légère (L) de chacun des deux anticorps.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Effectuer une comparaison</b> deux à deux des séquences des chaînes légères d'une part et des chaînes lourdes d'autre part.</li> </ul> <p style="text-align: center;"><b>Appeler l'examineur pour vérification</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Noter</b> pour chaque type de chaîne, les numéros du premier et du dernier acide aminé de sa région variable.</li> </ul>	<p><b>Utiliser un logiciel de traitement de données</b></p>	5
<p>2. <b>Ouvrir</b> deux fois le logiciel RasMol et <b>organiser</b> l'écran pour faciliter la lecture des deux fenêtres. <b>Ouvrir le fichier</b> « Mol_1.pdb » avec une version et <b>le fichier</b> « Mol_2.pdb » avec l'autre. Chaque fichier correspond aux associations de p24 avec chacun des anticorps étudiés. <b>Afficher</b> des sphères pour chaque atome. <b>Représenter l'antigène</b> (chaîne p) sous forme de sphères rouges <b>et la partie variable de l'anticorps</b> identifiée en (1) sous forme de rubans verts (chaîne L) et bleus (chaîne H). <b>Orienter</b> la molécule d'antigène de la même façon dans les 2 associations moléculaires.</p> <p style="text-align: center;"><b>Appeler l'examineur pour vérification</b></p>	<p><b>Utiliser un logiciel de visualisation de modèles</b></p>	7
<p>3. <b>Colorer</b> en blanc le fond de chaque fenêtre. <b>Imprimer</b> chaque fenêtre. <b>Légender</b> les impressions.</p>	<p><b>Utiliser des images numériques</b></p>	4
<p>4. <b>Rédiger</b> en quelques lignes votre conclusion au problème posé dans l'introduction, à partir de l'ensemble des résultats.</p>	<p><b>Appliquer une démarche explicative</b></p>	3
<p>5. En fin d'épreuve, <b>fermer</b> les logiciels.</p>	<p><b>Gérer et organiser le poste de travail.</b></p>	1

### LA SPECIFICITE DES ANTICORPS (version RASMOL)

Les icônes de la barre d'outils		Numérotation des éléments d'une séquence	
		<p>Echelle de repérage des nucléotides</p> <p>Attention au décalage des numéros</p> <p>On passe de l'échelle numérotant les nucléotides à celle des acides aminés en cliquant sur l'échelle</p>	
		<p><b>Bulles d'aide</b></p> <p>Pour vous aider, une <b>bulle d'aide</b> s'affiche sur l'objet pointé par le curseur de la souris</p>	
Editer une séquence		Sélectionner une séquence	
<p>Sélectionner cette séquence dans l'un des répertoires d'Anagène :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Banque de séquences</li> <li>- Thèmes d'étude</li> <li>- Programmes et documents</li> </ul> <p>ou par <b>Fichier/ Ouvrir/ sauve</b></p>		<p>Cliquer sur le <b>bouton de sélection</b>. La séquence sélectionnée s'inscrit sur fond blanc. On peut sélectionner plusieurs séquences. La <b>flèche rouge</b> indique la ligne pointée, sur laquelle il est possible d'obtenir des informations et que l'on peut déplacer à l'aide des flèches grises, haut - bas.</p>	
Traiter une séquence		Comparer des séquences	
<p>Utiliser pour cela le menu <i>traiter</i>. On peut <b>comparer les séquences</b> ou <b>convertir ces séquences</b>. Pour traiter une séquence, elle doit être au préalable sélectionnée.</p>		<p>La comparaison des séquences ne peut se faire que sur des séquences de même nature. Les flèches grises haut-bas permettent de placer la séquence de référence. On peut effectuer :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- <b>une comparaison par alignement</b> qui permet de comparer avec discontinuités, en éliminant les décalages résultant de délétion(s) ou d'insertion(s),.</li> <li>- <b>une comparaison simple</b>, point par point des séquences sans aucun alignement.</li> </ul> <p><b>Attention</b> : les valeurs affichées sont soit des ressemblances, soit des différences</p>	
Informations sur la ou les séquence(s) sélectionnée(s)			
<p>Utiliser le menu <i>informations</i> / <i>sur la ligne pointée</i> pour obtenir des informations sur la sélection : soit d'une ligne, soit de toutes les lignes en cliquant d'abord devant « traitement ».</p>			
Créer des séquences			
<p>Ouvrir le menu <b>Fichier Sélectionner</b> « créer » puis Choisir le type de séquence et lui <b>donner un nom</b>. Taper ou choisir dans la fenêtre d'édition de séquences, votre séquence.</p>			
<p><b>ATTENTION : pour comparer, la séquence de référence est toujours celle qui est placée en premier.</b></p>			

## LA SPECIFICITE DES ANTICORPS (version RASMOL)

Menu principal de Rasmol	Sélectionner un ou plusieurs motifs moléculaires
<p><b>Remarque</b> : le logiciel ne permet l'étude que d'une molécule (ou d'un assemblage moléculaire). Une étude simultanée de plusieurs molécules est malgré tout possible en lançant le logiciel autant de fois que de molécules</p> <p>Modification de la couleur du fond de la fenêtre (noire par défaut) (2) Zone de frappe des commandes (1)</p>  <p>Identification d'un atome dans une molécule (ici 6<sup>ème</sup> carbone de la cytosine 33 de la chaîne E)</p> <p>Modes d'affichage de la molécule ou de la sélection (Sphères, Squelette carboné, Rubans...)</p> <p>Restauration de la position et de la taille d'origine</p> <p>Ouvrir et fermer un fichier</p>	<p>- <b>Taper</b> dans la zone de frappe des commandes (1) par exemple :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>select leu76</b> pour sélectionner la leucine en position 76 d'une chaîne peptidique</li> <li>• <b>select atomno=923</b> pour sélectionner l'atome n° 923</li> <li>• <b>select leu76,hi81,pro89</b> pour sélectionner la leucine, l'histidine et la proline respectivement en position 76, 81 et 89</li> <li>• <b>select 50-65</b> pour sélectionner tous les acides aminés de la position 50 à 65</li> <li>• <b>select :a or :c</b> pour sélectionner les chaînes a et c d'un assemblage moléculaire</li> <li>• <b>select a6 or t8</b> pour sélectionner l'adénine et la thymine respectivement en position 6 et 8 d'une chaîne d'acides nucléiques</li> <li>• <b>select :a and 65-167</b> pour sélectionner les acides aminés de la chaîne a de la position 65 à 167</li> </ul> <p>- <b>Valider</b> la sélection par la touche <b>Entrée</b></p>
	<b>Colorer les motifs sélectionnés</b>
	<p>- <b>Taper</b> dans la zone de frappe des commandes (1) par exemple : <b>color red</b> (rouge) ou <b>color green</b> (vert) ou <b>color blue</b> (bleu) ou <b>color yellow</b> (jaune)....</p> <p>- <b>Valider</b> le choix par la touche <b>Entrée</b></p>
<b>Modifier l'angle de vue du modèle moléculaire</b>	<b>Colorer le fond de la fenêtre</b>
<p>- <b>Clic gauche maintenu</b> sur la molécule pour la faire tourner dans toutes les directions</p> <p>- <b>Clic gauche + touche shift (↑) maintenus</b> pour faire un zoom</p> <p>- <b>Clic droit maintenu</b> pour la déplacer dans le plan de la fenêtre</p> <p>- <b>Clic droit + touche shift (↑) maintenus</b> pour la faire tourner dans le plan de la fenêtre</p>	<p>- <b>Cliquer</b> sur le menu « <b>Options</b> » (2)</p> <p>- <b>Cliquer</b> sur « <b>Fond</b> »</p> <p>- <b>Choisir</b> la couleur du fond et <b>valider</b> par <b>OK</b></p>
	<b>Imprimer la molécule (ou l'assemblage moléculaire)</b>
	<p>- <b>Taper</b> dans la zone de frappe (1) la commande « <b>print</b> »</p> <p>- <b>Valider</b> par la touche <b>Entrée</b></p>