

Tastevejledning – Chime

Indholdsfortegnelse

REGISTRERING OG INSTALLATION.....	2
MIN FØRSTE CHIME-SIDE.....	3
BRUG AF TASTER OG MUS.....	5
CHIMES MENU	5

Chime er en plug-in til web-browsere, der muliggør visning og interaktiv manipulering af molekylære strukturer på websider. Chime stilles frit til rådighed af MDL Information Systems, Inc., der har oprettet et specielt [websted til Chime](#). For at få adgang hertil skal man lade sig registrere hos MDL Information Systems. Derved får man adgang til selve Chime plug-in og forskellige Chime-relaterede oplysninger.

Registrering og installation


Vis siden <http://www.mdlchime.com/chime/> i din browser.

Brug knappen Register til venstre på siden, hvis du er ny bruger.

New Users

Register

Når du er registreret og har logget ind, kan du i menuen til venstre i det nye skærbillede vælge Download.

 **Download**
→ Requirements
→ **Download**
→ Release Notes

Den nyeste version (april 2001) præsenteres med disse data:

Version	Chime 2.6 (Windows SP1)
Executable Name	Chime26SP1.exe
File Size	2.0MB

Download [Chime 2.6 \(Windows SP1\) for Windows](#)

Filen downloades til din computer og gemmes på harddisken (notér hvor den bliver gemt).

Hvis der er en tidligere version af Chime installeret, skal den fjernes først (Start | Indstillinger | Kontrolpanel | Tilføj/Fjern programmer. I listen med installerede programmer vælger du: Chime/Chime Pro for Communicator eller/og Chime/Chime Pro for Internet Explorer

Installer Chime ved at "køre" filen Chime26SP1.exe

Brug af installationsprogrammets standardindstillinger er godt nok, hvis man ikke ønsker helt specielle omstændigheder.

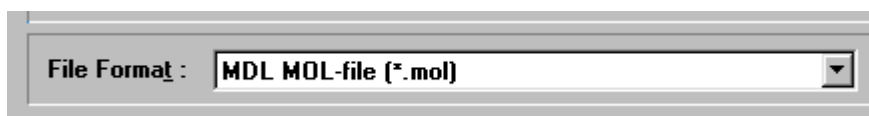
Når installationsprogrammet er færdigt, er din(e) browser(e) klar til at vise molekylstrukturer.

Min første Chime-side

Det følgende forudsætter, at du ved, hvordan du skal lave et HTML-dokument. Se evt. tastevejledninger til HTML-editorer.

Desuden skal du have et tegneprogram til strukturformler, fx ChemSketch, der kan gemme strukturformler i MOL-formatet. Det er et filformat, der beskriver molekylers eller andre kemiske strukturers rumlige opbygning og bindingsforhold. Du kan også hente en af de mange tilgængelige MOL-filer, der findes på nettet.

- Tegn 2-propanol (eller et andet molekyle) i ChemSketch. Afslut med en 3D optimering (det lille tetraeder-ikon i værktøjslinien)
- **Vælg** File | Export... fra menuen, og sørg for at der er valgt filtype MOL nederst i vinduet



- Gem filen i en passende mappe (der, hvor du om lidt placerer html-filen). I dette eksempel bruges navnet 2-propanol.mol
- Start din editor til html-sider. Du skal vide, hvorledes du kommer til at skrive i selve html-koden, da de grafiske editorer ikke er forsynet med de nødvendige værktøjer til at lave Chime-sider
- Skriv følgende:

```
<html>
<head>
  <title>Min første CHIME-side</title>
</head>

<body>
<H1>Min første CHIME-Side</H1>
En sekundær alkohol: 2-propanol<br>
<embed src="2-propanol.mol" bgcolor=black display3d=ball&stick height=300 width=300>

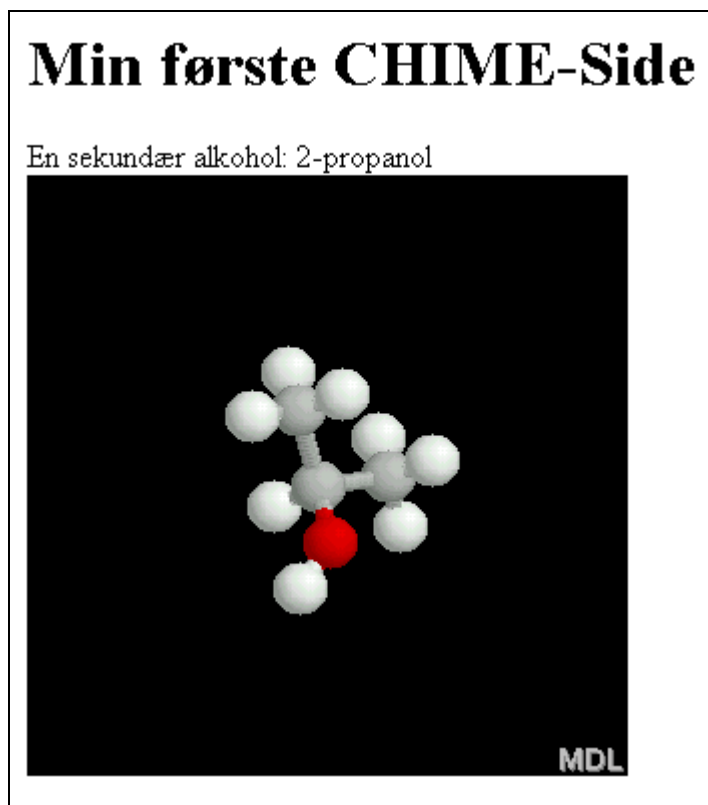
</body>
</html>
```

Gem filen i samme mappe som MOL-filen, fx med navnet Chimetest.htm

- Åbn filen i din browser (det kan somme tider være nødvendigt at "trække" med musen i Chime-vinduet for at få vist molekylmodellen (Internet Explorer))

Sådan ser det ud i browseren (Internet Explorer). Molekylmodellens begyndelsesposition afhænger af, hvorledes det blev tegnet.

Roter molekylmodellen (træk med venstre musetast nede):



<embed>-tagget er det, der sammen med Chime plug-in sørger for at vise den rumlige molekylmodel. Det er vist med nogle af de mulige parametre. Her er en kort liste over de mest relevante parametre (til "almindeligt" brug) og deres mulige værdier:

src MOL-filens navn, eventuelt med foranstillet sti-angivelse. Skal i dobbelt anførelsestegn. Her kan også angives molekylfiler af typerne PDB og XYZ

bgcolor Chime-vinduets baggrundsfarve.

Værdier: black | white | #rrggbb

Black og white giver sig selv. #rrggbb er farven angivet i RGB-farvemodellen (Red Green Blue). Heri angives intensiteten for hver af de tre primærfarver ved en hexadecimal værdi. Fx giver #00FFFF en lys cyan baggrund. Hvis det med RGB og hexadecimale værdier virker mystisk, så spekuler ikke mere på det.

display3d Bestemmer visning af 3D modellen. Navnene forklarer sig selv. Der findes andre, men de er til specielt brug.

ball&stick | spacefill | sticks | wireframe

startspin Bestemmer om modellen skal rotere, når den vises (kan slukkes fra menuen)

true | false | yes | no

height Chime-vinduets højde (i pixel)

width Chime-vinduets bredde (i pixel)

Prøv at ændre på de forskellige værdier og afprøv mulighederne. Husk at gemme html-filen med samme navn efter hver ændring. Klik derefter på Reload eller Opdater i browseren.

Brug af taster og mus

Molekylmodellen i et Chime-vindue kan manipuleres med disse kombinationer af mus og tastatur:

- Normal rotation: *venstre musetast*
- Zoom ind og ud: *venstre musetast* med SHIFT-tast holdt nede
- Flytning (translation) i vinduets plan: *højre musetast* med CTRL-tast holdt nede
- Rotation om z-akse (vinkelret på skærmens plan): *højre musetast* med SHIFT holdt nede
- Åbning af lokal menu: *højre musetast* alene

Tabellen her til højre vises i et særligt browser-vindue, når du fra menuen vælger Mouse ► Open Mouse Control Help Page. På denne side findes en ekstra række i tabellen (Slab plane Ctrl-Left), men den er kun aktiv, hvis den såkaldte "Slab mode" er aktiv. I Slab mode defineres en plan parallel med skærmen. Atomere eller bindinger, der ligger foran denne plan vises ikke. Med CTRL-Venstre musetast flyttes "slab plane". Det kan give et indtryk af atomernes placering vinkelret på skærmen.

Action	Windows
MENU	Right
Rotate X,Y	Left
Translate X,Y	Ctrl-Right
Rotate Z	Shift-Right
Zoom	Shift-Left

Chimes menu

Chime har som nævnt ovenfor en indbygget menu. Den aktiveres med et højreklik inde i Chime-vinduet:



- File ► Save Molecule As... En molekylmodel i et Chime-vindue kan gemmes på lokal harddisk som MOL-fil
- Edit ► – her nævnes de mest interessante underpunkter i dette menupunkt
 - Copy: Molekylmodellen i Chime-vinduet kopieres til udklipsholderen som billede
 - Clear: Indholdet af Chime-vinduet slettes. Kan genskabes ved at klikke på Opdater eller Reload i browseren
 - Transfer to ISIS/Draw: ISIS/Draw er et gratis tegneprogram fra MDL Information Systems. Det kan hentes på deres hjemmeside. Programmet har enkelte gode egenskaber, men mangler en del i at kunne måle sig med ChemSketch.
- 2D Rendering: Laver en todimensional udgave af den rumlige molekylmodel. Atomerne repræsenteres ved deres atomsymboler, der placeres ved en projektion ind på planen. Hvis der tilsyneladende ikke er noget i Chime-vinduet efter valg af 2D Rendering, kan du fra (2D)-menuen vælge Color med valgmulighederne Black og White. Vælg den modsatte af baggrundens farve. Du kan vende tilbage til 3D-visning fra (2D)-menuen.
- Rotation: Sætter eller sletter et flueben, der bestemmer om modellen roterer automatisk eller ej.
- Display ► For almindelige molekylmodelfiler (i MOL-format) vil det kun være de fire øverste muligheder i undermenuen, der er aktive. Den aktuelle visningsform angives med flueben.
 - Wireframe: Viser molekylmodellen med bindinger som tynde tråde. Trådene har samme farve som atom-kuglerne i Kugle-og-Pind modellen. Modellens atomer er ellers ikke specielt markerede
 - Sticks: Minder meget om Wireframe, blot med tykke pinde i stedet for tråde. Er på samme måde farvekodet efter atomtype.
 - Ball & Stick: Den klassiske Kugle-og-Pind model

- Spacefill: Kuglekalotmodel. Der skal angives, hvilken model kuglernes radier skal beregnes efter. For almindelige MOL-filer er der kun én mulighed: Van der Waals Radii.

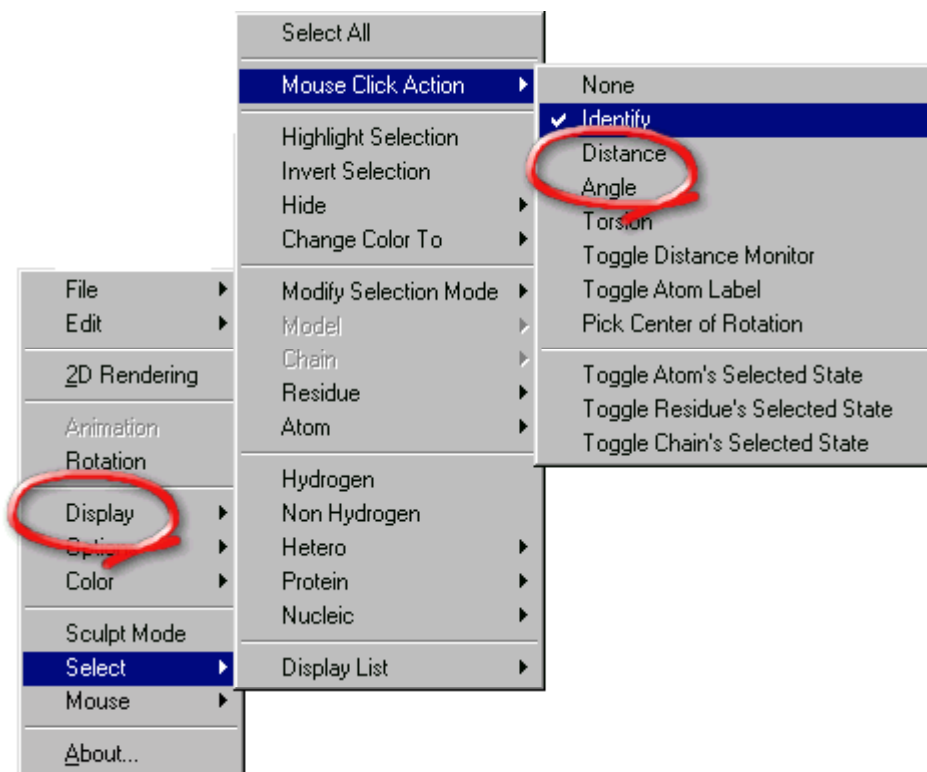
De nederste fire muligheder (Backbone, Ribbons, Strands, Cartoons) har alle med visning af proteinstrukturer at gøre. Modeller af store molekyler som proteiner eller DNA findes oftest i et filformat, der hedder PDB (Opkaldt efter den store database: (Brookhaven) Protein Data Bank). Mange mindre molekyler findes også som modeller i et PDB-format, der kan vises af Chime.

- Options ► De mest anvendelige muligheder omtales
 - Display Hydrogens: Et flueben angiver om modellens hydrogenatomer skal vises eller ej
 - Dot Surface ► Van der Waals Radii: Indlægger et prikket omrids svarende til den valgte radius uden om modellen.
 - Slab Mode: Et flueben angiver om den ovenfor omtalte Slab Mode er aktiv eller ej
 - Specular: Hvis valget er aktivt, bliver overflader på den valgte visningsform blanke, så de genspejler lyset fra "projektøren" (Sidder oppe til højre et sted)
 - Shadows: Modellens dele kaster nu også skygger
 - Labels: Viser atomsymbolet ved siden af atomet for visse atomer
 - Stereo: Viser modellen i to stereoskopiske udgaver i vinduet. Hvis man kan "skele-teknikken", der bruges til at se stereogrammer, får man et glimrende stereobillede af modellen. Det kræver, at vinduet ikke er for stort.
- Color ► Åbner en undermenu med en lang række muligheder, der dog næsten alle kun er interessante for PDB-filer med den nødvendige information indbygget. Standard er her CPK (opkaldt efter Corey, Pauling, Koltun):



CPK-farver

- Select ► Indeholder rigtig mange muligheder. Her nævnes et par af de mere interessante muligheder i undervisningsammenhæng
 - Måling af geometriske data på modellen (bindingsafstande og bindingsvinkler)



Stien ind til funktionen (Select ► Mouse Click Action ► Distance (eller Angle) er vist på figuren. Display er markeret, da det kan være formålstjenligt at vælge Ball & Stick som visningsform. Med Identify markeret (standard) vises data om et atom i browserens statuslinie, når der klikkes på atomet i Chime-vinduet:

```
Atom: O 4 Group: MOL 1
```

(Her er der klikket på O-atomet i 2-propanol)

Vælges Distance viser statuslinien "Chime script completed", når menuen er slukket efter valget. Der skal nu vælges to atomer: Klik fx igen på O-atomet, og se i statuslinien:

```
Atom #1: MOL1.O (4)
```

Klik derefter på det midterste C-atom. Statuslinien viser:

```
Atom #2: Distance : 1.428
```

Afstanden er beregnet og vises i enheden Å. Vælges i stedet Angle, foregår det næsten som med Distance, blot skal der vælges tre atomer.

Bestemmelse af bindingsvinklen C-C-C: Klik på C-atom nr. 1:

```
Atom #1: MOL1.C (3)
```

og dernæst på det midterste C-atom:

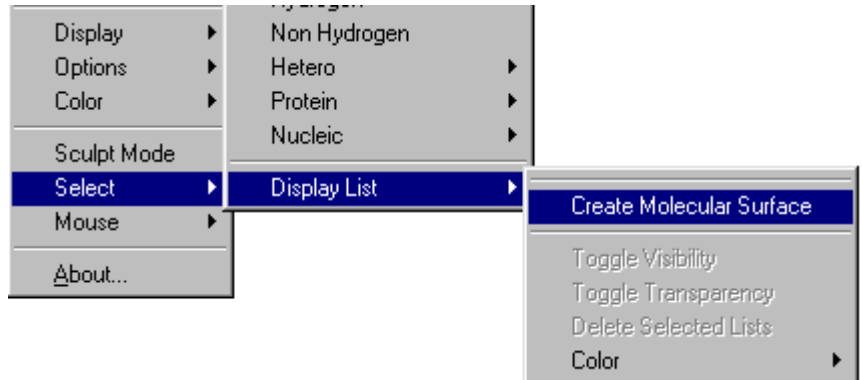
```
Atom #2: MOL1.C (1)
```

og endelig på det sidste C-atom:

Atom #3: Angle --: 109.7

Vinklen beregnes, og man kan kontrollere den tetraedriske opbygning.

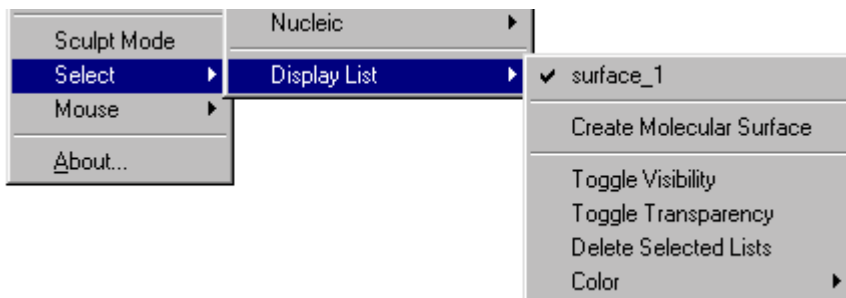
- Undersøgelse af ladningsfordeling (polaritet) i molekyler. Det er en flertrins proces.
 - Først vælges Select ► Display List ► Create Molecular Surface:



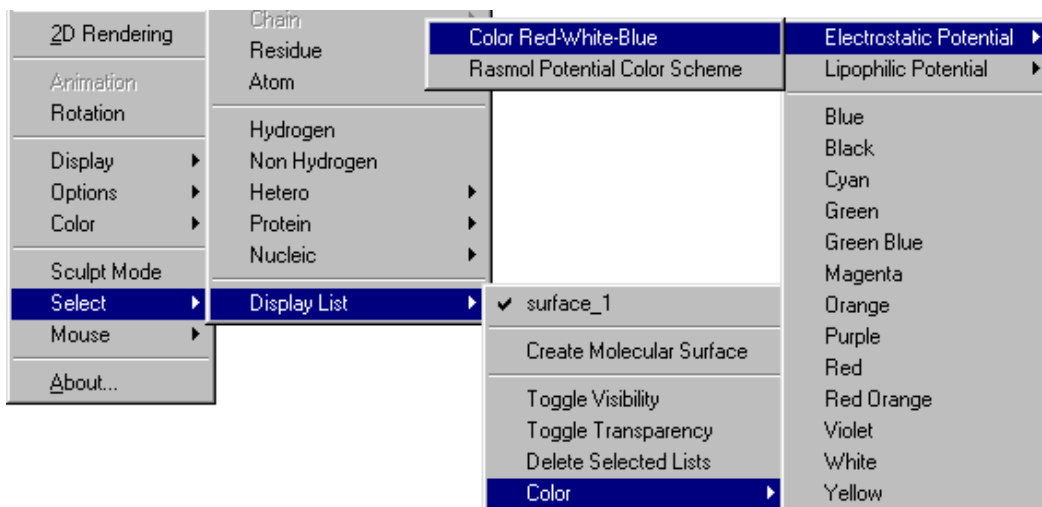
Modellen af 2-propanol molekylet "pakked ind".

Foretages det samme menuvalg igen, ser man, at der er dannet en overflade med navnet surface_1, og at de tre menuvalg, der før var grå og inaktive nu kan bruges.

Delete Selected Lists fjerner den netop dannede overflade. De to "Toggle"-valg tænder og slukker for de tilhørende egenskaber: Synlighed og transparens. Især den sidste er nyttig.



- Gå igen ind i menuen: Select ► Display List ► Color ► Electrostatic Potential ► Color Red-White-Blue



Modellens overflade farves nu i røde nuancer, hvor der beregnes et overskud af elektroner og i blå nuancer, hvor der tilsvarende er et underskud af elektroner. Vælges Rasmol Potential Color Scheme fås de samme informationer, men med en farvelægning, der ikke er så umiddelbar forståelig. Bruges Lipophilic Potential ► Relative MLP Coloring får man en farvelægning af overfladen efter polaritet, hvor de mest polære områder får "varme" farver og de mindst polære får "kolde" farver. MLP står for Molecular Lipophilicity Potential.