Catastrophe, il vous manque CHIME !!!

Vous le savez sans doute, vous l'avez peut-être déjà vu (au collège, au lycée ou chez un ami chez qui ça marchait), on peut « visualiser » des molécules sur internet. Mais sur votre ordinateur, ça ne marche pas et c'est pour ça qu'en ce moment, vous lisez ce document ;o))



CHIME est un greffon, plug-in ou add-on, c'est à dire un petit module qui se greffe sur le navigateur et permet de visualiser les structures moléculaires en 2D ou 3D (fichiers au format pdb , mol ... Il est en téléchargement libre (usage académique, login nécessaire) chez <u>www.mdli.com</u>



Installation : La greffe du plug-in **CHIME** au navigateur conseillé <u>FIREFOX</u> (qui sera noté FF par la suite) est quelque peu alambiquée. Je suppose ici que votre système d'exploitation est un de ceux que Microsoft propose (comme 90 % des utilisateurs de PC) et que FF est installé. Si vous êtes sous Linux, allez voir du côté de <u>RasMol</u> ...

- Installer le plugin CHIME pour Internet Explorer (et oui !!!).
- Rechercher le fichier npchime.dll présent dans Program Files/Internet Explorer/plugins (si tant est que votre IE soit où il doit être ;o)) et le copier dans Program Files/Firefox/plugins (si vous avez laissé FF s'installer dans le répertoire par défaut).
- Redémarrer Firefox et ça devrait marcher (« On te touche les pouces », comme disent nos amis suisses ;o)).

PS : si malgré tout, vous rencontrez des difficultés, contactez moi ...

Maintenant, chaque fois que vous accéderez à une page web contenant des fichiers pouvant être décodés par **CHIME**, votre fureteur ouvrira automatiquement le logiciel et affichera la molécule. Retournez sur la <u>page d'accueil</u> pour voir si tout va bien ...

Commandes de CHIME

CHIME propose un menu contextuel (obtenu en cliquant droit sur la molécule). Nous allons voir tout d'abord les principales commandes dont nous pourrons avoir besoin. Ce sont en fait surtout celle que l'on obtient par combinaison Souris+Clavier :

MENU	Bouton droit
Rotation X,Y	Bouton gauche
Translation X,Y	Ctrl-Bouton droit
Rotation Z	Shift-Bouton droit
Zoom	Shift-Bouton gauche
Slab mode ⁽¹⁾	Ctrl-Bouton gauche

Commandes souris

(1) *Slab Mode* permet d'examiner des tranches successives de la molécule (surtout intéressant pour les macromolécules).

L'ensemble des autres commandes est accessible via des séries de menus successifs une fois obtenu le menu principal (clic droit)

Détaillons quelques uns de ces menus :

- Menu File
 - Save Molecule As : permet d'enregistrer sur le disque la molécule observée.
- Menu Edit
 - Copy : copie le fichier molécule dans le presse-papier.
 - **Copy CHIME Script** : copie le script CHIME dans le presse-papier.
 - **Paste** : colle le contenu du presse-papier.
 - Clear : vide le presse-papier.
 - **Transfer to ISIS Draw** : transfère directement la molécule dans ce logiciel.
 - Transfer to Sculpt : idem avec le logiciel Sculpt.
- Menu 2D Rendering
- Menu Rotate
- Menu Display
 - Wireframe montre les liaisons sous forme de fils de fer.
 - Sticks montre les liaisons sous forme de bâtonnets, sans montrer les atomes
 - Ball & Stick affiche les liaisons sous forme de bâtons et les atomes (modèle éclaté).
 - Spacefill Van der Waals Radii affiche les rayons de Van der Waals des atomes (modèle compact).
- Menu Options
 - Display Hydrogens : active/désactive l'affichage des atomes d'hydrogène.
 - Display HeteroAtom Groups : active/désactive l'affichage des hétéroatomes.
 - **Display Hydrogen Bonds** : active/désactive l'affichage des ponts hydrogène.
 - **Display Disulfide Bridges** : active/désactive l'affichage des ponts disulfure.
 - Wireframe Double Bonds : doubles liaisons sous forme de fils de fer.
 - Dot Surface : affiche la surface pointillée suivante
 - Van der Waals Radii

Anisotropic Temperature

- Slab Mode permet de montrer une "tranche plane" de la molécule.
- Specular affiche des reflets obtenus par une source lumineuse dirigée.
- Shadows affiche des ombres.
- Labels affiche le symbole de chaque atome.
- Sprout Hydrogens
- Stereo Display : affichage stéréoscopique.
- Menu Color
 - Monochrome
 - CPK : couleurs conventionnelles employées pour les modèles moléculaires.
 - Amino Acid
 - Shapely
 - Group
 - Chain
 - Structure
 - User
 - Force Palette

