


Chime 簡介

簡介(Introduction)

Chime 是一套搭配瀏覽器來觀察化學結構的軟體，它是根據 RasMol 軟體所建立的，所以其功能都跟 RasMol 一樣，也可以說算是 RasMol 的瀏覽器版。當網頁上按插(Plug-In)此軟體後，就可以利用瀏覽器在網頁上直接觀察、旋轉、縮放...等

安裝(Install)

首先，要現在該網站註冊。之後，下載自己作業系統的版本，現在直提供 Windows 和 Macintosh 兩種，而且在 Windows 和 Macintosh 版本，不支援 Netscape 6.0 以上的瀏覽器。如果按裝完成的話，按下此連結 ，就可以看到一個 DNA 雙股螺旋的結構。

檢視與操作(View and Control)

當在網頁上看到化學結構時，可以簡單的利用滑鼠移動來操控，或是利用滑鼠右鍵來作進一步的檢視。下面將介紹在網頁上如何使用 Chime。

滑鼠操控(Mouse Control)

Action	Windows	Macintosh
MENU	Right	Hold Down
Rotate X,Y	Left	Unmodified
Translate X,Y	Ctrl-Right	Command
Rotate Z	Shift-Right	Shift-Command
Zoom	Shift-Left	Shift
Slab Plane*	Ctrl-Left	Ctrl

* Slab Plane 行為要先選擇[MENU]→[Options]→[Slab Mode]後，才可以使用。

選單(MENU)

File	1▶	1	檔案相關選項
Edit	2▶	2	編輯相關選項
2D Rendering	3	3	將結構轉換成平面(立體)結構
Animation	4	4	動畫選項
Rotation	5	5	結構旋轉選項
Display	6▶	6	結構表現選項
Options	7▶	7	額外設定選項
Color	8▶	8	顏色設定選項
Sculpt Mode	9	9	Sculpt Mode
Select	10▶	10	選擇相關選項
Mouse	11▶	11	滑鼠相關選項
About...	12	12	關於 Chime

File	▶	1	Save Molecule As...	1	將網頁上的結構儲存下來
Edit	▶				
2D Rendering					
Animation					
Rotation					
Display	▶				
Options	▶				
Color	▶				
Sculpt Mode					
Select	▶				
Mouse	▶				
About...					

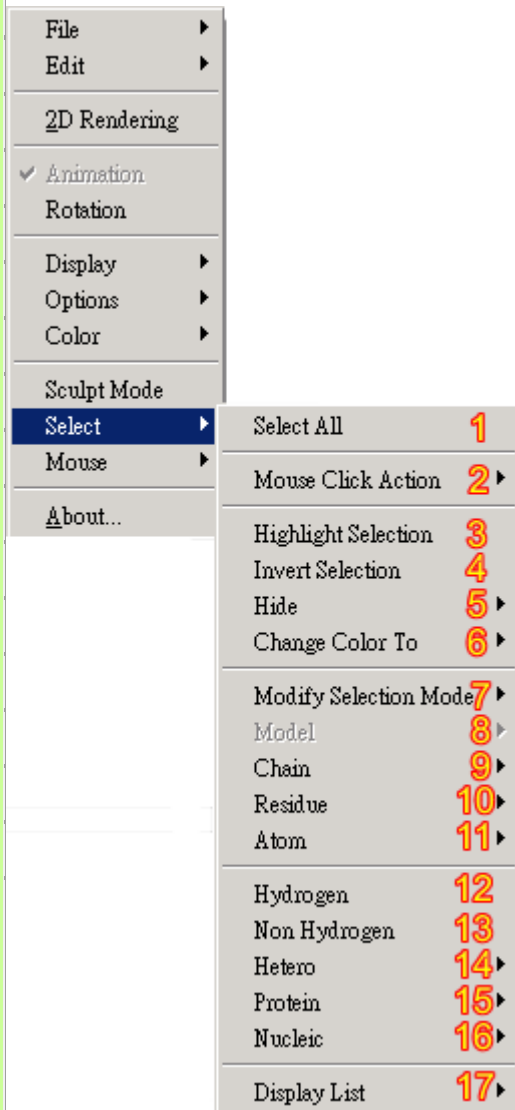
File	▶			1	將結構複製
Edit	▶	1	Copy	2	將該網頁上的 Chime 語法複製
		2	Copy Chime Script	3	貼上
2D Rendering		3	Paste	4	清除
Animation		4	Clear	5	將結構轉換到 ISIS/Draw
Rotation		5	Transfer to ISIS/Draw	6	將結構轉換到 Sculpt
Display	▶	6	Transfer to Sculpt		
Options	▶				
Color	▶				
Sculpt Mode					
Select	▶				
Mouse	▶				
About...					

File	▶			1	線條來表現結構
Edit	▶			2	圓柱來表現結構
2D Rendering				3	球和圓柱來表現結構
Animation	▼			4a	半徑為 VDW 長度的球來表現結構
Rotation				4b	Anisotropic Temperature
Display	▶	Wireframe	1	5	結構以骨架的形式表現
Options	▶	Sticks	2	6	結構以彩帶的形式表現
Color	▶	Ball & Stick	3	7	結構以簡單線條的彩帶形式表現
Sculpt Mode		Spacefill	4	8	結構以卡通的形式表現
Select	▶	Backbone	5		
Mouse	▶	Ribbons	6		
About...		Strands	7		
		Cartoons	8		
				a	Van der Waals Radii
				b	Anisotropic Temperature

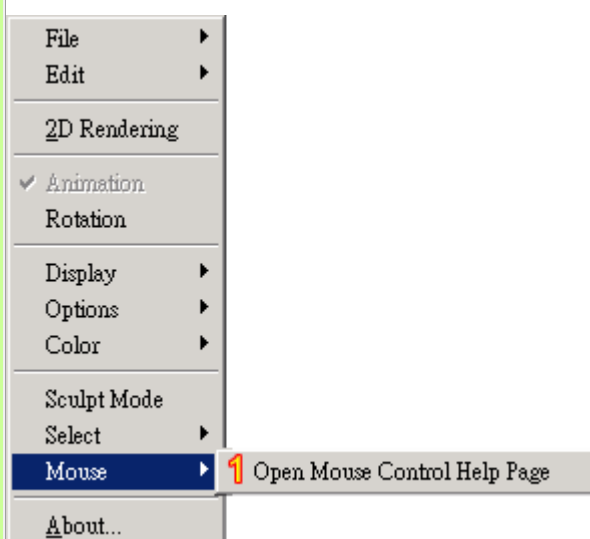
File	▶			1	秀出氫原子
Edit	▶			2	秀出其他分子
2D Rendering				3	秀出氫鍵
Animation	▼			4	秀出雙硫鍵
Rotation				5	秀出線條表示的雙鍵
Display	▶			6a	以 VDW 為半徑秀出用點表現的表面
Options	▶	Display Hydrogens	1	6b	秀出半徑為 1.2A 的點表面
Color	▶	Display Hetero Atom Groups	2	7	以分子剖切面來表現
Sculpt Mode		Display Hydrogen Bonds	3	8	結構會有光線反射的效果
Select	▶	Display Disulfide Bridges	4	9	結構會有影子的效果
Mouse	▶	Display Wireframe Double Bonds	5	10	將分子的名稱秀出
About...		Dot surface	6	11	將氫原子秀出來
		Slab Mode	7	12	以立體的形式
		Specular	8		
		Shadows	9		
		Labels	10		
		Sprout Hydrogens	11		
		Stereo Display	12		
				a	Van der Waals Radii
				b	Connolly/Richards Solvent (1.2 A)

File	▶			1	單一色
Edit	▶			2	顏色以原子種類來表現
2D Rendering				3	顏色以氨基酸來表現
Animation	▼			4	跟氨基酸很相似
Rotation				5	顏色以群組來表現
Display	▶			6	顏色以鍊來表現
Options	▶			7	顏色以溫度來表現
Color	▶	Monochrome	1	8	顏色以二級結構來表現
Sculpt Mode		CPK	2	9	顏色以使用者定義來表現
Select	▶	Amino Acid	3		
Mouse	▶	Shapely	4		
		Group	5		

10 Force Palette



- 1 選擇全部
- 2 滑鼠按鈕的功能設定
- 3 強調所選擇出來的原子
- 4 反轉所選擇的原子
- 5 隱藏
- 6 改變顏色
- 7 改變選擇的方式
- 8 選擇模型
- 9 選擇支鏈
- 10 選擇殘基
- 11 選擇原子
- 12 選擇氫原子
- 13 選擇非的氫原子
- 14 選擇主體以外的原子
- 15 選擇蛋白質相關的結構
- 16 選擇核酸原子
- 17 秀出分子表面

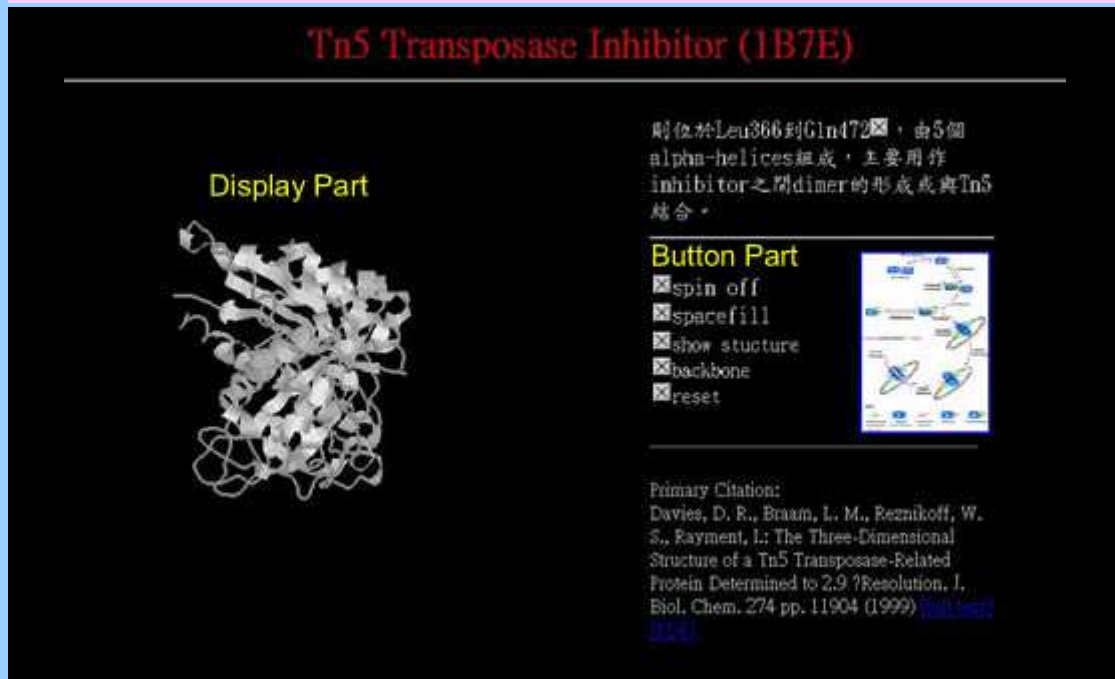


- 1 打開滑鼠控制的幫助網頁

接下來我們將針對如何製作一個有 Chime 的網頁來教學

Chime Script

製作一個 Chime 網頁，主要分成兩個部分，一個是結構視窗(Display Part)，另一部份是動作按鈕(Button Part)，我們將在下面分別描述。



Tn5 Transposase Inhibitor (1B7E)

則位於Leu366到Gln472，由5個alpha-helices組成，主要用作inhibitor之間dimer的形成或與Tn5結合。

Display Part

Button Part

- spin off
- spacefill
- show structure
- backbone
- reset

Primary Citation:
Davies, D. R., Braam, L. M., Reznikoff, W. S., Rayment, I.: The Three-Dimensional Structure of a Tn5 Transposase-Related Protein Determined to 2.9 Å Resolution. I, Biol. Chem. 274 pp. 11904 (1999)

基本語法

製作 Chime 網頁需要使用 HTML 語言及 Chime 的語言來製作，首先 Chime 的指令是於網頁裡的<body>及</body>之間，加入<embed>的標記，並於結束時加入</embed>，而所要執行的動作語法則是寫在<embed>裡面，下面將會針對<embed>裡的一些基本指令加以說明。

```
<html>
<head>
<title>Untitled Document</title>
<meta http-equiv="Content-Type" content="text/html;
charset=big5">
</head>
<body>
<embed .....(在此處加入 Chime 的指令)>
</embed>
</body>
</html>
```

結構視窗(Display Part)

結構視窗適用來表現結構的部分，如果製作一個 Chime 的網頁的話，一定要有此視窗，才能表現結構出來，下面是建立一個結構視窗的基本語法：

```
<embed src="file name" name= file name width=300 height=300 bgcolor = black display3d = ball&stick  
script=" ____">
```

上面用藍色的字都是 Chime 的語法，下面將分別描述。

指令(Tags) —Chime 在 embed 裡所使用的標記，可以使用於結構視窗及按鈕

指令	src
描述	指定所要打開的檔案，可以是 MOL、PDB 檔案或是 XYZ 的動畫檔，這個指令是製作一個 Chime 網頁必備的指令。
語法	src={file name}

指令	height
描述	設定結構視窗高的尺寸，其單位是像素。
語法	height={pixel}

指令	width
描述	設定結構視窗寬的尺寸，其單位是像素。
語法	width={pixel}

指令	bgcolor
描述	設定結構視窗的背景顏色，主要可選擇為黑色或是白色，如果要是此兩種顏色以外的話，可以輸入HTML 裡的色碼(#rrggbb)。
語法	bgcolor={black white #rrggbb}

指令	display3d
描述	指定結構在結構視窗上所要表現的樣式。
語法	display3d={backbone ball&stick cartoons ribbons spacefill sticks strands wireframe}

指令	color3d
描述	指定結構在結構視窗上所要表現的顏色。
語法	color3d={chain cpk group monochrome shapely structure temperature uuser}

指令	name
描述	指定結構在網頁上的名字，如果一個網頁裡有很多結構視窗的話，如過有設定名字的話，就不會有一個按鈕會改變所有結構視窗的現象出來。

語法	name ={name}
----	---------------------

指令	script
描述	使用 RasMol 的指令來控制結構，當指令超過一個以上的話，可以利用" " 或 ";" 來分開。
語法	script ={valid RasMol script commands}

指令	frank
描述	當 frank = ture 的話，將會在結構視窗的右下角會秀出 'MDL' 的標誌出來。
語法	frank ={false no ture yes}

指令	startspin
描述	設定結構視窗裡的結構是否要旋轉，如果不要的話，可以利用 RasMol 的指令(spin)來旋轉。
語法	startspin ={ture yes false no}

指令	spinX
描述	設定結構視窗裡的結構繞 X 軸(水平)旋轉的速率，內定值是設定 0(沒有旋轉)。

語法	spinX = {degrees per second}
----	-------------------------------------

指令	spinY
描述	設定結構視窗裡的結構繞 Y 軸(垂直)旋轉的速率，內定值是設定 30。
語法	spinY = {degrees per second}

指令	spinZ
描述	設定結構視窗裡的結構繞 Z 軸(垂直於電腦螢幕且指向使用者)旋轉的速率，內定值是設定 0(沒有旋轉)。
語法	spinZ = {degrees per second}

動作按鈕(Button Part)

當我們設定好結構視窗後，接下來就是製作執行動作的按鈕，我們如同上面所述，在<embed>裡面加入如下面的文字進去：

```
<embed type="application/x-spt" width=12 height=12 button=push target="struct"
script="___">
```

在此語法裡，**type** 是利用網頁 plug-in 的 **mime type**，如裡面所寫的 **application/x-spt**，是製作一個按鈕出來，而後面是設定按鈕的長與寬(**width,height**)，接下來是設定按鈕(**button**)為何種形式，再來是針對哪一個結構視窗來執行後面所描述的 RasMol 指令，此語法裡已有部分在上面已描述過了，我們將其他的指令描述如下：

指令	type
----	-------------

描述	使用 Chime 在網頁 the mime type of the plug-in 的功能。
語法	type ={Chime_mime_type}

指令	button
描述	設定按鈕的種類，當按下按鈕後，將會執行後面 Script 所描述的動作，而 radio#和 toggle 兩種類的按鈕有 push 及 unpush 的功能，而當使用 push 時，將會執行 script 內的動作，而使用 unpush 時，將會執行 altscript 內的動作。
語法	button ={push radio# toggle}

指令	altscript
描述	與 script 的描述一樣，只是用於按鈕有分 push 與 unpush 的時後，所要設定的另一個執行 RasMol 的指令，而此指令執行是當 push 變成 unpush 的時後。
語法	altscript ={RasMol script commands}

上面大致介紹了絕大部份 Chime 所使用的指令，而接下來的要如何操作結構視窗的結構，就要利用 RasMol 的指令來執行。由於 RasMol 的指令繁多，所以我們將連結 MDL 所提供的 Chime RasMol Tutorial 的網頁來介紹其 script 要如何寫。

[Chime RasMol Tutorial]

<http://ibm4.life.nthu.edu.tw/tool/chime/rastut/index.html>

<http://ibm4.life.nthu.edu.tw/cadd/2008/chime.htm>

製作一個 Chime 網頁

Chime 是一套搭配瀏覽器來觀察化學結構的軟體，它是根據 RasMol 軟體所建立的，所以其功能都跟 RasMol 一樣，也可以說算是 RasMol 的瀏覽器版。當網頁上按插(Plug-In)此軟體後，就可以利用瀏覽器在網頁上直接觀察、旋轉、縮放...等。本篇 Tutorial 是假設大家已有基本的網頁 html 基礎，可以直接套用現成的樣板，快速建立 chime page。

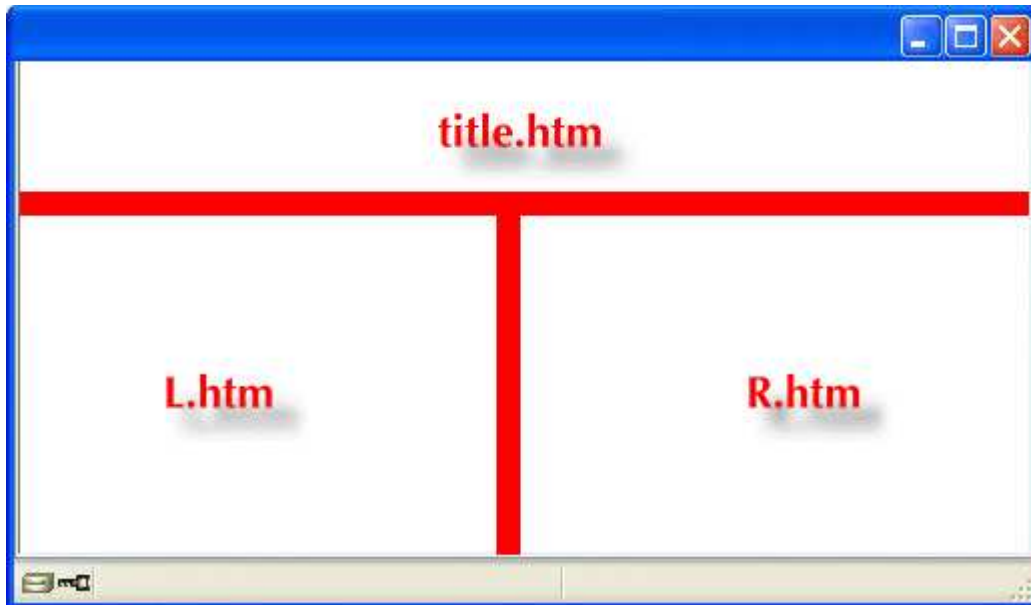
我們現在來開始套用樣板製作：

首先請解開下載的 html 檔案 ([data.rar](#))，解壓縮到 chime 的子目錄中：



網頁的架構如下，本樣板為包含 T 字型 frame 框架的網頁，所以需要下載的 html 檔案有四個：

1. **index.htm** (主檔)
2. **title.htm** (網頁上方 title 部分)
3. **L.htm** (頁面左方的結構視窗部份)
4. **R.htm** (頁面右方的動作按鈕和解說部份)



當然你也必須下載本篇的主角：蛋白質結構 [1UDU](#)，同樣放到 `chime` 的子目錄中。

利用記事本 (Notepad) 開啟 `title.htm` [當然你也可以用其他網頁編輯軟體像 **Dreamweaver** 去開啟]，

```
title.htm - 記事本
檔案(F) 編輯(E) 格式(O) 檢視(V) 說明(H)
<html>
<head>
<meta http-equiv="Content-Type" content="text/html; charset=big5">
<title>title</title>
</head>
<!--設定title.htm背景顏色-->
<body bgcolor="#000000">
<!--設定網頁標題居中與顏色-->
<h1 align="center">
<font color=#FFFFFF>
這裡可以放你的網頁標題
<br>
Crystal structure of Human Phosphodiesterase 5 complexed with tadalafil (Cialis)
</font>
</h1>
</body>
</html>
```

請注意上圖紅色框部份，可供更改的說明都會放在如圖示驚嘆號的地方，同樣的操作與解說套用於 `R.htm` 及 `L.htm`，下圖是 `L.htm` 的部份。

```
L.htm - 記事本
檔案(F) 編輯(E) 格式(O) 檢視(V) 說明(H)
<html>
<head>
<meta http-equiv="Content-Type" content="text/html; charset=big5">
<title>Crystal structure of Human Phosphodiesterase 5 complexed with tadalafil(Cialis)</title>
</head>

<body bgcolor="#000000">
<table width="430" border="0">
<tr>
<td>
<!--設定ludu.pdb --原始要顯示給作者的樣式-->
<embed src="ludu.pdb" width=400 height=400 name= pde5 bgcolor = black display3d=
wireframe startspin= true spinY= 30
script="select *; spacefill off; wireframe on"
></embed>
</td>
</tr>
<tr>
<td>
<div align="center"><font size=+1 color="#FFFFFF">
<!--設定spin on/ off button-->
<embed type="application/x-spt" width=15 height=15
button="toggle" target="pde5"
script="spin off"
altscript="spin on"></embed>
Stop Rotation
<!--設定 Reset button-->
<embed type="application/x-spt" width=15 height=15
button="push" target="pde5"
script="reset"></embed>
Reset</font><br>
</div></td>
</tr>
</table>
</body>
</html>
```

至於相關的 Chime Script, 請參考課堂解說及[網頁敘述](#)加以應用。