

# Visualiser des molécules dans une page internet



Chime est un logiciel particulier. Il fonctionne uniquement dans un navigateur internet, comme une extension de celui-ci, pour lui permettre d'afficher des structures moléculaires. De façon générale, ces extensions de programmes sont appelées des Plug-ins (parfois traduites par le terme de "greffons").

En plus de permettre un affichage de molécules, Chime offre à l'utilisateur la possibilité de manipuler la molécule dans les trois dimensions de l'espace, de lui appliquer des zooms et des transformations extrêmement variées.

Chime est fourni gratuitement par ses concepteurs (MDLI).

## Installation de Chime

- [Configuration requise](#)
- [Test de votre configuration](#)
- [Téléchargement et installation](#)

## Démarrer avec Chime

- [Utilisation de la Souris](#)
- [Les boutons de commande](#)
- [Le menu interactif](#)

## Ressources utilisant Chime

- [Des pages en français](#)
- [Des pages en anglais](#)

## Construire un document incluant Chime

- [Insérer une molécule dans une page HTML](#)
- [Insérer un bouton dans une page](#)
- [Les commandes RasMol](#)
- [Outils pour créer un script de commande](#)
- [Chime et JavaScript](#)

## Installation de Chime

- **Configuration requise**

Comme Chime est une extension d'un navigateur, son bon fonctionnement est en étroite relation avec le type de navigateur utilisé.

Tableau de compatibilité

Versions des Navigateurs	Chime 2.0	Chime 2.4	Chime 2.6 2.6 SP1 2.6 SP2	Chime 2.6 SP3	Chime 2.6 SP4
Netscape 4.x	OK	OK	OK	OK	OK
Netscape 6.0 et 6.1	Impossible	Impossible	Impossible	Impossible	Impossible
Netscape 6.2, 7 et Mozilla	?	?	?	(possible)	(possible)
Internet Explorer 4.x	OK	OK	Instable	Instable	Instable
Internet Explorer 5.0, 5.5, 5.5 SP1	OK	OK	OK	OK	OK
Internet Explorer 5.5 SP2	Impossible	Impossible	Impossible	OK	OK
Internet Explorer 6.0	Impossible	Impossible	Impossible	(incertain)	OK
Opera 5.0, 6.0	?	?	Instable	Instable	Instable

(incertain) : configuration testée positivement mais non recommandée par MDL

? : non testé

(possible) : installation de Chime à réaliser manuellement, non recommandé par MDL

**Instable** : Chime entraîne rapidement une erreur lorsqu'il est en fonctionnement. Cette instabilité dépend aussi de la complexité des pages.

- En fait, il est recommandé d'utiliser les dernières versions des navigateurs et de Chime : les mises à jour rectifient des problèmes de sécurité et de stabilité. Le seul navigateur 100% compatible avec Chime est Netscape Communicator, dans ses versions 4.x à partir de la version 4.1  
La version 4.75 de Communicator est disponible sur [le site de Netscape](#) depuis Septembre 2001. Toutefois ce navigateur commence à être dépassé dans de nombreux autres domaines de l'internet...
- Avec Internet Explorer, Netscape 6.2 et 7 (et les dernières versions de Mozilla), la grande majorité des caractéristiques de Chime est disponible. Toutefois, quelques sites sont instables avec Internet Explorer.  
Pour les utilisateurs de Windows 95, Internet Explorer 5.5 SP2 est la dernière version disponible.

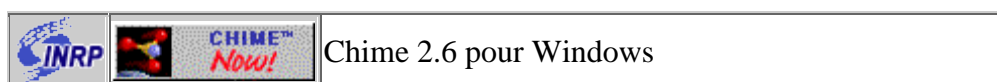
- Si vous ne connaissez pas la version de votre navigateur ou la version de Chime que vous possédez, passez à la [page de test](#) pour vérifier sa compatibilité.

- **Téléchargement et installation**

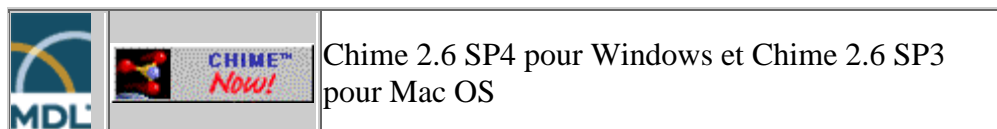
Chime est issu du logiciel Rasmol. Roger Sayle, le concepteur de Rasmol a rendu public le code source de son oeuvre. Grâce à cette participation, de nombreux logiciels de visualisation de molécules en 3D ont pu être développés. Pour poursuivre dans l'esprit initié par Roger Sayle, certains logiciels issus de Rasmol sont disponibles gratuitement, c'est le cas notamment de Chime (même si le code source n'est pas disponible).

Pour télécharger Chime, cliquer sur les liens suivants.

- Télécharger à partir du site de l'INRP



- Télécharger à partir du site de MDL (les concepteurs de Chime), après enregistrement  
Remarque : sur le site de MDL, on trouve des liens vers d'anciennes versions de Chime (plus stables avec d'anciens navigateurs tels que IE 4.0), et des logiciels tels que ISIS Draw qui permet de dessiner des molécules.



## Démarrer avec Chime

- **Utilisation de la Souris**

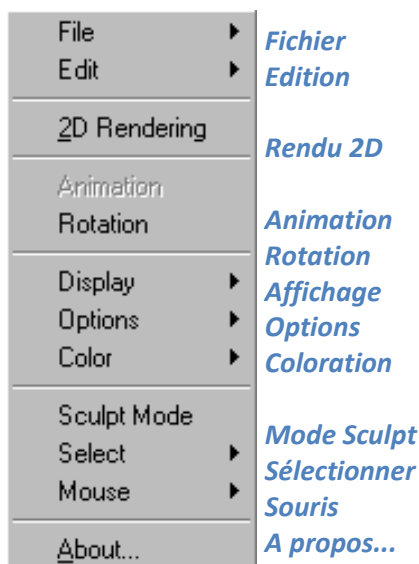
Utilisez la souris en combinaison avec les touches du clavier pour manipuler les molécules affichées par Chime.

	Bouton gauche	Bouton droit
Clic simple	Informations sur l'atome	Ouverture du Menu de commande
Cliqué-glissé	Rotation de la molécule dans les plans perpendiculaires à l'écran	
Touche Maj.+Clic	Zoom vers l'avant ou vers l'arrière	Rotation dans le plan de l'écran
Touche Control+Clic	Avance ou recule le plan de coupe en mode coupe	Déplacement de la molécule sur la surface de l'écran

- **Le menu interactif**

Ce menu est accessible directement en cliquant sur le bouton droit de la souris dans une fenêtre Chime.

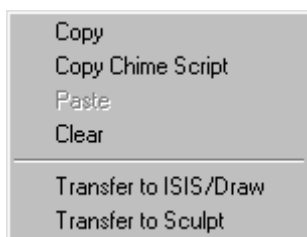
Il permet d'appliquer rapidement des transformations au mode d'affichage, de coloration,... Ce menu est en langue anglaise, mais il reste accessible à l'utilisateur francophone.



#### Fichier

**Save Molecule As...** Permet d'enregistrer le modèle affiché sur le disque dur local. Cette option est intéressante lors de la consultation de sites internet pour conserver le fichier du modèle.

#### Edition



**Copy** : Copie l'image affichée dans le presse-papier. Celle-ci peut ensuite être collée dans un traitement de texte ou un logiciel de traitement d'image par exemple.

**Copy Chime Script** : Copie dans le presse papier un script, c'est à dire une liste d'instructions, qui permet de retrouver la molécule dans l'état où elle est affichée à l'écran. Il est préférable de ne pas utiliser cette fonction pour réaliser des scripts (voir utilisation avancée).

**Paste** : Colle une molécule provenant d'un autre logiciel comme Isis draw

**Clear** : Supprime la structure chargée  
Les autres fonctions permettent le transfert vers d'autres logiciels de MDL.

#### Rendu 2D

Projette la molécule affichée en 3 dimensions, sur un plan. Ceci est surtout utile pour les petites molécules. Pour revenir en affichage 3D, il faut choisir l'option **3D Rendering**

## Animation

Certains fichiers (extension XYZ), représentent des molécules avec des animations qui se déclenchent par défaut à la lecture du fichier. Pour les stopper on utilise cette commande.

## Rotation

Pour mettre en rotation la molécule ou pour arrêter celle-ci

## Affichage

Ces commandes modifient l'affichage de la sélection de la façon suivante :

<input checked="" type="checkbox"/> Wireframe	<b>Wireframe</b> : affichage en fils de fer uniquement des liaisons entre atomes.
<input type="checkbox"/> Sticks	<b>Sticks</b> : affichage en bâtonnets
<input type="checkbox"/> Ball & Stick	<b>Ball &amp; Stick</b> : affichage en boules et bâtonnets
<input type="checkbox"/> Spacefill	<b>Spacefill</b> : affichage en sphères (modèle compact)
<input type="checkbox"/> Backbone	<b>Backbone</b> : affiche la ligne brisée passant par tous les carbones alpha (ou les phosphore d'un acide nucléique)
<input type="checkbox"/> Ribbons	<b>Ribbons</b> : ruban passant par le plan des liaisons peptidiques
<input type="checkbox"/> Strands	<b>Strands</b> : ensemble de lignes formant un ruban
<input type="checkbox"/> Cartoons	<b>Cartoons</b> : ruban en épaisseur, mise en évidence des structures secondaires

## Options

<input checked="" type="checkbox"/> Display Hydrogens	Les options principales sont : Display Hydrogen Bonds : Affichage des liaisons hydrogène Display Disulfide Bridges : Affichage des ponts disulfures Slab Mode : permet de réaliser une coupe à travers la structure affichée. Pour faire varier la profondeur du plan de coupe, maintenir la touche "Ctrl" enfoncée en faisant un cliquer-glisser vers l'avant ou l'arrière. Labels : légende les résidus Stereo Display : donne deux images de la molécule décalées de quelques degrés pour une visualisation stéréoscopique en parallèle
<input type="checkbox"/> Display Hetero Atom Groups	
<input type="checkbox"/> Display Hydrogen Bonds	
<input type="checkbox"/> Display Disulfide Bridges	
<input type="checkbox"/> Display Wireframe Double Bonds	
<input type="checkbox"/> Dot surface	
<input type="checkbox"/> Slab Mode	
<input type="checkbox"/> Specular	
<input type="checkbox"/> Shadows	
<input type="checkbox"/> Labels	
<input type="checkbox"/> Sprout Hydrogens	
<input type="checkbox"/> Stereo Display	

## Coloration

<input type="checkbox"/> Monochrome	CPK : coloration selon la nature de l'atome d'après Corey, Pauling et Kuntz
<input checked="" type="checkbox"/> CPK	CHONSPFe
<input type="checkbox"/> Amino Acid	Amino Acid : coloration en fonction de la nature de l'acide aminé Asp Glu Cys Met Lys Arg Ser Thr Phe Tyr Asn Gln Gly Leu Val Ile Ala Trp His Pro
<input type="checkbox"/> Shapely	Shapely : coloration en fonction de la nature de l'acide aminé ou du nucléotide
<input type="checkbox"/> Group	Group : Coloration des résidus du bleu au rouge en fonction de la position dans la chaîne d'acides aminés ou de nucléotides
<input type="checkbox"/> Chain	Chain : Colore chaque chaîne de façon différente
<input type="checkbox"/> Temperature	Temperature : disponible lorsque le fichier PDB contient des informations
<input type="checkbox"/> Structure	
<input type="checkbox"/> User	
<input type="checkbox"/> Force Palette	

sur la "température" des atomes, c'est à dire leur degré d'agitation lorsque la structure a été déterminée. En général, les extrémités des protéines sont plus "chaudes" que le coeur.

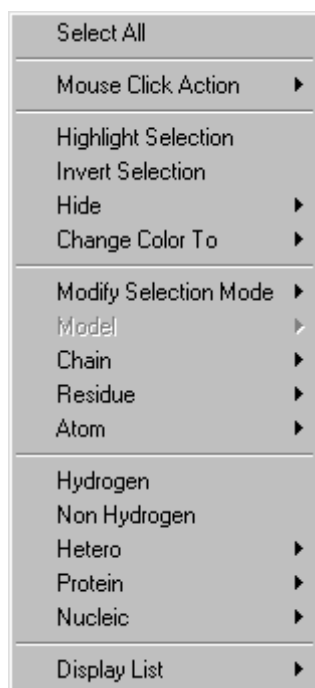
Structure : Coloration en fonction de la structure secondaire Hélice alpha  
Feuillet bêta Coude

## Mode Sculpt

Change le mode de fonctionnement de la souris pour permettre de déformer la molécule. Un cliqué-glissé sur un atome, provoque une torsion à partir de ce point. C'est surtout une fonction de démonstration des possibilités du logiciel Sculpt produit par MDL, il n'est pas possible d'enregistrer la structure obtenue.

## Selectionner

Ce menu sert à réaliser des sélections. De très nombreuses options sont disponibles et sont détaillées à la [page suivante](#).



## Souris

Ce menu contient une commande pour appeler une page en anglais résumant les fonctions de la souris (comme dans la page "Souris" de ce manuel).

## A propos...


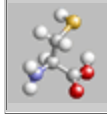



Ce menu ouvre une petite fenêtre d'information sur Chime. C'est notamment le seul moyen de connaître la version exacte de Chime si vous utilisez Internet Explorer.

## Ressources utilisant Chime

- [Des pages en français](#)


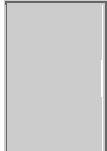
Vous trouverez ci-dessous un choix subjectif et non exhaustif de ressources en français, nécessitant l'utilisation de Chime. Si vous pensez qu'une ressource que vous connaissez ne figure pas dans cette liste mais pourrait être intéressante, n'hésitez pas à me la communiquer.

### Tutoriels



	Sites <a href="#">BioGéo</a> et <a href="#">Biotic</a> De nombreuses pages à destination des enseignants, sur des sujets en rapport avec les programmes de SVT (ex : les enzymes, les immunoglobulines, l'hémoglobine, les mutations, les cancers,...)
	<a href="#">Dossier 3D sur le site SVT de l'académie Orléans-Tours</a> Une initiation au traitement des données moléculaires à destination des enseignants, avec de nombreux dossiers et une librairie de molécules à télécharger
	Un ensemble de pages à télécharger sur l'académie de Toulouse
	<a href="#">Université de Montpellier</a> De niveau universitaire, des pages traitant de biologie structurale, biochimie, bioinformatique...
	<a href="#">Académie de Lyon</a>

### Visionneuses

Les visionneuses sont des pages HTML qui fonctionnent comme des logiciels de visualisation à part entière. Elles permettent d'effectuer tous types de traitement sur la molécule voulue par l'utilisateur.

	<a href="#">MolUSc</a> Sur le site de l'académie Orléans-Tours. Une visionneuse conçue pour une utilisation au Lycée
	<a href="#">Protéine explorer</a> Traduction française de Protein Explorer d'Eric Martz par Hervé Furstoss. Une visionneuse très complète. La version compatible avec Internet Explorer est en cours de traduction

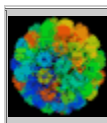




### Autres guides d'utilisation de Chime

	Sur le site <a href="#">Biogéo</a> , un guide sur la réalisation de pages incluant Chime
	<a href="#">Académie d'Amiens</a> Des pages expliquant le langage de script de Chime, et un outil pour tester le résultat d'un script


- [Des pages en anglais](#)

Vous trouverez ci-dessous un choix subjectif et non exhaustif de ressources en anglais, nécessitant l'utilisation de Chime. Si vous pensez qu'une ressource que vous connaissez ne figure pas dans cette liste mais pourrait être intéressante, n'hésitez pas à me la communiquer.




### Tutoriels

	<a href="#">World Molecular Visualisation Home Page</a> C'est LA ressource concernant la visualisation de molécules. Des centaines de liens y sont disponibles
	<a href="#">Lehninger in 3D</a> Des pages accompagnant le manuel de Biochimie de Lehninger. Les animations sont superbes. Au programme : Structure des protéines, CMH, Protéines G, Rhodopsine,...
	<a href="#">University of Massachussets</a> Site maintenu par Eric Martz, contenant de nombreux liens vers des tutoriels et des présentations
	<a href="#">C4 Computers in Chemistry at Cabrillo College</a> Une librairie de molécules, et un tutoriel sur l'insuline (nécessite Netscape 4.x et Java)
	<a href="#">The Online Macomolecular Museum</a> "Musée", présentant par "galeries" des tutoriels sur de nombreuses molécules

### Visionneuses

	<a href="#">Protein Explorer</a> La dernière version du logiciel de visualisation d'Eric Martz. Compatible avec Internet Explorer
	<a href="#">Sting Millenium</a> Un utilitaire de visualisation en ligne. Il assure la liaison avec d'autres bases de données en ligne, pour des traitements complexes. Nécessite que JAVA soit activé dans le navigateur

### Autres guides d'utilisation de Chime

	<a href="#">University of Massachussets</a> Le site d'Eric Martz où est expliqué le principe de l'écriture des pages avec Chime. C'est une mine d'information, un peu complexe parfois.
	<a href="#">MDL</a> Chez le producteur de Chime. Le manuel officiel et une foire aux questions
	<a href="#">University of the West Indies</a> Un site présentant une application très peu documentée de Chime : la possibilité de traiter des fichiers de spectroscopie au format JCAMP-DX, et de les lier avec une structure 3D



## Construire un document incluant Chime

- Insérer une molécule dans une page HTML

Avertissement : pour réaliser une page contenant une structure moléculaire, il est préférable d'avoir quelques notions sur la composition d'une page HTML.

### Rappels sur la structure d'une page HTML

Une page HTML est un fichier de type texte. Pour voir le contenu du fichier, il suffit avec votre navigateur d'afficher la source de la page (cette commande est disponible avec un clic droit de la souris).

Ce fichier contient le texte affiché lorsque la page est visualisée, mais aussi des informations sur comment ce texte doit être affiché (par exemple si le texte doit être mis en caractères gras). Ces informations qui ne doivent pas être affichées sont placées dans des balises. Par exemple, si l'on veut écrire en caractères gras le mot **Chime**, il faut que dans le document on trouve écrit : `<B>Chime</B>`.

`<B>` est la balise indiquant le début du texte à mettre en gras ( Bold en anglais), et `</B>` est la balise de fin de texte en caractères gras.

D'autres balises permettent d'insérer des fichiers extérieurs au fichier HTML, par exemple des images : ``. `img` indique qu'il faut afficher à cet endroit une image, mais pour que cette image s'affiche il faut préciser au navigateur où il doit la chercher. C'est ce qui est indiqué par le paramètre `src` (pour source). `"eau.gif"` indique au navigateur qu'il doit afficher le fichier image qui s'appelle `eau.gif` et qui est contenu dans le même répertoire que celui de ce fichier HTML.

A présent pour afficher une molécule, on procède de manière similaire, en utilisant la balise `EMBED`, et en indiquant l'adresse du fichier PDB voulu.

### Ecriture d'une balise pour Chime

Pour écrire une balise, il faut modifier la source de la page affichée. Pour cela, l'outil le plus simple est le bloc-note de votre ordinateur (disponible dans les accessoires de Windows, ou en demandant l'affichage de la source de la page avec Internet Explorer). Attention : on ne peut modifier qu'une page enregistrée sur son disque dur.

Le code pour afficher la structure ci-dessous est le suivant :

```
<embed type="chemical/x-pdb" src="eau.pdb" name="eau" width="200" height="200" script="spacefill 0.45; wireframe 0.15"></embed>
```

`EMBED` indique qu'il faut faire intervenir un Plug-In

`TYPE="chemical/x-pdb"` est un paramètre optionnel. Il précise que le plug-in qui doit être utilisé ici, traite des fichiers de type `pdb`.

`SRC="eau.pdb"` indique l'adresse du fichier à utiliser. Ici, c'est le fichier `eau.pdb` contenu dans le même répertoire que ce fichier HTML.

`NAME="eau"` donne un nom au Plug-in, ce qui n'est pas utile encore ici, mais sera indispensable avec les boutons de commande plus tard.

`WIDTH="200" HEIGHT="200"` fixe la largeur et la hauteur du Plug-in en pixels.

`SCRIPT="spacefill 0.45; wireframe 0.15"` c'est une série d'instructions destinées à

Chime. Elles sont écrites dans le langage de script de RasMol. Ici les instructions indiquent que les atomes doivent être affichés en boules et bâtonnets.

</EMBED> indique la fin de la balise, mais est optionnel.

et voilà le résultat !

Pour faire des essais, téléchargez les documents suivants en cliquant avec le bouton droit sur les liens et en choisissant d'enregistrer le lien : [essai.htm](#), [eau.pdb](#)

- **Insérer un bouton dans une page**
- Les boutons qui modifient l'affichage sont des objets gérés par Chime, qui envoient une série d'instructions appelée script à un modèle moléculaire présent sur la page.

## La balise EMBED pour un bouton

- Le code d'un bouton est de la forme suivante :  

```
<embed type="application/x-spt" button="push" target="eau" width="15" height="15" script="spacefill"></embed>
```

<EMBED indique qu'il faut faire intervenir un Plug-In  
TYPE="application/x-spt" est cette fois-ci obligatoire. Il précise que le plug-in qui doit être utilisé ici, traite des instructions de type spt, c'est à dire des scripts. C'est Chime qui est chargé de ce type d'instructions, mais cette fois, Chime doit afficher un bouton (et pas une fenêtre de visualisation).  
BUTTON="push" précise le type de bouton. La plupart du temps c'est ce type qui est utilisé.  
TARGET="eau" indique la cible, c'est à dire la molécule vers laquelle seront dirigées les instructions. Ce paramètre est surtout important quand plusieurs molécules sont affichées sur une même page.  
WIDTH="15" HEIGHT="15" fixe la largeur et la hauteur du bouton en pixels.  
SCRIPT="spacefill" comme pour l'affichage d'une molécule, ce paramètre contient une série d'instructions destinées à Chime. Elles sont écrites dans le langage de script de RasMol. Ici l'instruction indique que les atomes doivent être affichés en Sphère de Van Der Waals.  
</EMBED> indique la fin de la balise, mais est optionnel.
- et voilà le résultat : !  
Bien sûr pour voir l'effet de ce script, il faut aussi afficher la molécule voulue dans la page :
- Pour faire des essais, téléchargez les documents suivants en cliquant avec le bouton droit sur les liens et en choisissant d'enregistrer la cible du lien : [essai2.htm](#), [eau.pdb](#)

## Les options des boutons

- Il existe 4 types de boutons différents ([voir la page sur les boutons](#)). Le premier est le type "push" vu précédemment. Les autres sont :

	<p><b>Followed</b> <code>&lt;embed type="application/x-spt" button="followed" target="mol" width="15" height="15" script="spacefill off; wireframe 0.3"&gt;&lt;/embed&gt;</code>  Pas de changement par rapport au précédent, sauf le paramètre de button</p>
	<p><b>Toggle</b> <code>&lt;embed type="application/x-spt" button="toggle" target="mol" width="15" height="15" script="background white" altscript="background black"&gt;&lt;/embed&gt;</code>  Ce bouton permet d'exécuter deux scripts différents en cliquant deux fois sur le bouton. Il faut donc écrire deux scripts différents, placés dans les paramètres script et altscript</p>
	<p><b>Radio</b> <code>&lt;embed width="15" height="15" type="application/x-spt" button="radio1" target="mol" script="color cpk" buttonstate="pushed"&gt;&lt;/embed&gt;</code>  <code>&lt;embed width="15" height="15" type="application/x-spt" button="radio1" target="mol" script="select oxygen; color green; select hydrogen; color grey; select all"&gt;&lt;/embed&gt;&lt;br&gt;</code>  Les boutons "radio" d'un même groupe sont liés entre eux : si l'on enfonce l'un, les autres ressortent. Ils sont désignés sous la forme radio# où # permet de distinguer des groupes de boutons différents. Le paramètre buttonstate="pushed" indique que le premier bouton est enfoncé dès le chargement de la page.</p>

### Autres options :

- `src="nomdefichier.spt"` : au moment où l'on clique sur le bouton, Chime charge le fichier de commandes RasMol nommé nomdefichier.spt. Cela permet de séparer le contenu du fichier HTML des commandes RasMol, ce qui est plus commode pour l'écriture et la maintenance des pages.  
Les fichiers de commandes (appelés scripts), peuvent être écrits à l'aide du bloc-notes et enregistrés au format de fichiers textes, avec l'extension .spt ou .scr.
- `immediate=true` : déclenche automatiquement l'exécution du script du bouton au chargement de la page, même si le bouton n'a pas été cliqué.
- `hidden=true` : cache le bouton. Ce paramètre n'est sans doute utile que combiné avec `immediate`
- `buttonCallBack=nomDUneFonctionJavascript` : exécute la fonction Javascript quand le bouton est cliqué, puis après l'exécution du script. Ce paramètre n'est utilisé que très rarement, quand il est nécessaire de connaître les boutons cliqués par l'utilisateur pour prévoir une commande particulière par exemple.  
Deux paramètres sont envoyés à la fonction : le nom du plug-in, et un booléen indiquant si le script a déjà été exécuté ou pas.  
`<embed width="15" height="15" type="application/x-spt" button="push" target="mol" script="move 0 360 0 0 0 0 0 0 3 30 3"`

`buttoncallback="clicBouton"></embed>` clicBouton est le nom de la fonction Javascript utilisée. Elle est définie entre les balises `<SCRIPT>` au début du document :

```
<script language='javascript'>
function clicBouton(nom, clique)
{
  if(clique)
  {
    alert('Le bouton a été cliqué');
  }
  else
  {
    alert('Un petit tour !');
  }
}
</script>
```

- **Les commandes RasMol**
- Chime utilise un langage d'instructions dérivé du langage de RasMol. Toutes les commandes de RasMol existent sauf celles entraînant une écriture de fichiers sur le disque dur (pour des problèmes de sécurité). Il n'est donc pas possible d'écrire des images gif directement.  
Des commandes supplémentaires sont aussi disponibles, et permettent de gérer les présentations (déplacements, pauses,...), ou de nouvelles fonctions comme la création de surfaces.
- Il existe près d'une centaine de commandes, et leur exposé exhaustif pourrait faire l'objet d'un manuel.  
Pour découvrir ce langage, vous pouvez vous référer à cette page présentant toute une série de boutons de commandes et leurs scripts associés :



[An introduction to Chime scripting](#)  
[\(The Online Macromolecular Museum\)](#)

•

## Les commandes qui posent problème

- `show pdbheader` : n'existe que depuis la version 2.6, entraîne un plantage d'Internet Explorer dans le cas de longs fichiers (comme ceux venant de la PDB)
- `show version` : n'existe que depuis la version 2.6 SP4
- `load` ou `script` : ces commandes qui chargent des fichiers externes posent problème avec Internet Explorer : toutes les commandes qui les suivent dans un script sont ignorées. Le script s'arrête donc au chargement du fichier.  
Mais, curieusement, si l'on charge un nouveau fichier (par une commande `script` ou

load), les commandes qui avaient précédemment été ignorées réapparaissent et sont exécutées !

- 

## Problèmes avec les scripts externes

- Les scripts externes sont les scripts placés dans un fichier .spt ou .scr externe à la page HTML. On a constaté qu'avec Internet Explorer, certaines commandes posaient problème et entraînaient le plantage du navigateur. Lorsque l'on souhaite utiliser ces commandes, il faut mieux les placer à l'intérieur de la page.
- - move  
- delay  
- load  
-script
- La conséquence de ces bugs est que si l'on souhaite réaliser des enchaînements de plusieurs scripts (en particulier avec des chargements de fichiers), il faut utiliser des mécanismes plus complexes avec une [programmation en JavaScript](#).

- [Outils pour créer un script de commande](#)

- [Chime et JavaScript](#)

## Pourquoi le JavaScript ?

Une page HTML telle que celles présentées précédemment est statique : il n'y a qu'une façon de la parcourir, les boutons n'ont qu'une interactivité limitée.

Il peut être intéressant de concevoir des pages pour lesquelles les commandes envoyées à Chime dépendront d'autres actions de l'utilisateur. En ce cas, il faut un mécanisme de communication avec Chime, "intelligent". C'est ce que permet le JavaScript.

## Le JavaScript qu'est-ce que c'est ?

En quelques mots, le JavaScript est un langage de programmation qui permet d'écrire de petits programmes (appelés scripts) dans une page HTML. La syntaxe de ce langage reprend celle du langage Java, il a donc été baptisé JavaScript (même si ce n'est pas du langage Java). De nombreux sites traitent du langage JavaScript, vous pouvez vous y référer pour aller plus loin dans la question.

Le code des scripts Javascript doit être écrit dans la page HTML entre les balises `<script language="javascript">` et `</script>`.

Ces balises doivent être placées soit avant la balise `<BODY>` du document, soit à l'intérieur de cette balise. Dans ce dernier cas, le code du script n'est exécuté que lors du chargement de la page.



## Envoyer une commande à Chime

Il existe deux méthodes pour envoyer une commande vers un objet Chime, selon le navigateur utilisé : Netscape Communicator ou un autre navigateur.

### 1. Avec Netscape Communicator

Les ingénieurs de MDL ont utilisé une propriété du navigateur Communicator pour faire communiquer des plug-ins avec des applets Java et des Javascripts. Cette fonctionnalité s'appelle LiveConnect. Dans Netscape Communicator, toute fenêtre Chime est considérée comme un objet du document. Il peut être atteint par son nom tel qu'il est défini dans la propriété `NAME` de la balise `EMBED`.

Cet objet possède la méthode `executeScript()` qui permet de lui envoyer une commande.

Exemple : si on place sur une page un objet Chime, nommé `molecule` :

```
<embed type="chemical/x-pdb" src="eau.pdb" name="molecule"
width="100" height="100"></embed>
```

On peut lui envoyer une commande par un script JavaScript du type

```
document.molecule.executeScript("spacefill on")
```

Ce script peut être placé simplement dans un lien HTML comme [celui-ci](#) (attention : ne fonctionne qu'avec Netscape Communicator), ou dans un programme plus complexe.



### 2. Avec les autres navigateurs

La fonction LiveConnect de Chime n'est pas compatible avec les autres navigateurs. Une astuce a été trouvée par Tim Maffet (un des concepteurs de Chime). Elle consiste à écrire dans une zone invisible de l'écran, un document HTML contenant un bouton Chime s'exécutant automatiquement !

La technique qui utilisait initialement des `FRAME` a été perfectionnée pour qu'elle puisse fonctionner dans une page unique sans `FRAME`. Actuellement, la meilleure solution est d'utiliser un `IFRAME`, c'est à dire un cadre interne au document, mais suffisamment petit pour passer inaperçu. La balise `IFRAME` n'est pas reconnue par Netscape Communicator.

Les commandes sont traitées par une fonction Javascript qui se charge d'écrire un bouton dans le cadre interne.

Exemple :

Si le cadre interne s'appelle `cadreInterne`, et le plug-in s'appelle `molecule` :

```
function commandeChime(spt)
{
  html='<html><body>';
  html+='<embed type="application/x-spt" hidden=true width=10
height=10 button=push target=molecule2 script="' + spt + '"
immediate=1></embed>';
  html+= "</body></html>";

  with (document.cadreInterne.document)
  {
    open();
```

```
write(html);
close();
}
}
```

Votre navigateur ne permet pas de voir les cadres internes

La fonction commandeChime peut-être appelée par un lien comme [celui-ci](#) (Attention : ne fonctionne pas avec Netscape Communicator) ou par un programme plus complexe.

Ici, le cadre interne est rendu visible ainsi que le bouton. Pour ne pas les voir, il faut réduire la taille du cadre interne à 0 pixels en hauteur et 5 pixels en largeur (pour des largeurs plus petites, le mécanisme ne fonctionne pas). Sous Mozilla, pour ne pas voir les bordures, il faut en plus leur affecter une épaisseur de 0 pixels. Ce qui donne pour le cadre interne les balises suivantes :

```
<IFRAME src='vide.htm' name=cadreInterne' height='0' width='5'
frameborder=0 scrolling='no'></IFRAME>
```



## Recevoir des messages de Chime

Dans certains cas, il est nécessaire de recevoir des informations de Chime pour savoir si un script a été correctement exécuté, ou pour obtenir le résultat d'une commande particulière (par exemple "show sequence" qui renvoie la séquence d'une molécule).

Lors de l'écriture des balises correspondant aux objets chime, il est possible de leur affecter des fonctions JavaScript pour la prise en charge des messages venant de Chime. Les options correspondantes sont :

- `MessageCallBack = retourMessage(nomDuPlugIn , message , NoDuMessage)`  
La fonction Javascript `retourMessage()` recevra en paramètre pour chaque message renvoyé par Chime : le nom de la fenêtre Chime qui renvoie ce message, le texte du message lui-même, et le numéro du message dans l'ordre d'envoi au navigateur.
- `PauseCallBack = retourPause(nomDuPlugIn , estEnPause)`  
La fonction `retourPause()` sera appelée chaque fois qu'un script en boucle sera en pause temporaire. Lorsque le script est interrompu, la fonction reçoit en paramètre la valeur `true` pour `estEnPause`. Lorsque le script est réactivé, la fonction reçoit en paramètre la valeur `false` pour `estEnPause`.
- `PickCallBack = retourClic(nomDuPlugIn , atomClique)`  
La fonction `retourClic()` est appelée lorsque l'utilisateur fait un clic d'identification sur un atome. Le paramètre `atomClique` reçoit la valeur d'une chaîne de caractères correspondant à l'atome cliqué (n° et nature de l'atome, résidu auquel il appartient...)
- `debugScript = true`  
Avec cette option, tous les messages de Chime sont renvoyés

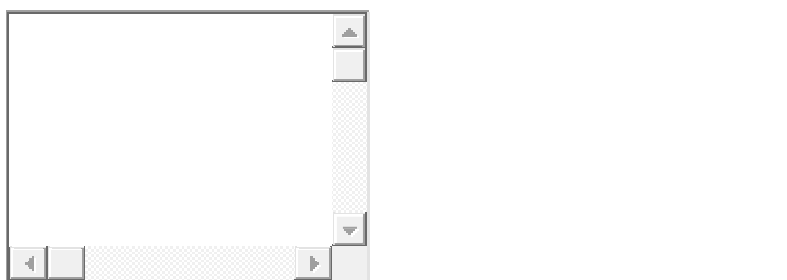
Exemple :

Soit l'objet Chime `molecule3` suivant :

```
<embed type="chemical/x-pdb" height="200" width="200" src="eau.pdb"
name="molecule3" debugScript=true
messagecallback=messageRetour></embed>
```

On peut définir la fonction Javascript `messageRetour` pour qu'elle inscrive les messages à la suite les uns des autres, dans une zone de texte du document appelée `zoneDeTexte`

```
function messageRetour(nomDuPlugIn, message, nb)
{
  texte = "message n°" + nb + " de " + nomDuPlugIn + "\r\n";
  texte += message + "\r\n";
  document.formulaire.zoneDeTexte.value = texte +
document.formulaire.zoneDeTexte.value;
}
```



Bug avec Netscape 4.x : ce navigateur ne traite pas les messages dans l'ordre. Lorsque les messages sont nombreux (par exemple un long script), au bout d'un moment leur ordre n'est plus suivi. Si l'ordre est important, vous devez créer une fonction pour replacer les messages en ordre.



## Construire une page pour utiliser Chime avec Javascript

Il est possible de combiner l'ensemble de ces fonctions pour réaliser des projets avec Chime et JavaScript. Toutefois, rapidement la prise en compte de l'ensemble des navigateurs avec leurs particularités relève du casse-tête. Une solution a été apportée par un programmeur Canadien, Jean-Philippe Demers, lequel a rassemblé l'ensemble des fonctions nécessaires dans un kit de développement complet. Vous pouvez le trouver à l'adresse suivante : [Mechanism Of Interaction](#)