**HANDLEIDING** [**www.molview.org**](http://www.molview.org)

**Structuurformules tekenen**

MolView bestaat uit twee hoofdonderdelen, een structuurformule-editor en een 3D-modelviewer.

De structuurformule-editor is omgeven door drie werkbalken die de tools bevatten om moleculen te vormen. Nadat je een molecuul hebt getekend, kun je op de knop 2D naar 3D klikken om het molecuul om te zetten in een 3D-model dat vervolgens in de viewer wordt weergegeven.

Lijst met alle tools:

**Bovenste werkbalk**

Bovenste werkbalk

* **Prullenbak:** alles wissen
* **Gom:** wis atomen, bindingen of de huidige selectie
* **Ongedaan maken/opnieuw:**  recente wijzigingen ongedaan maken of opnieuw uitvoeren
* **Selectietools:** al deze tools kunnen worden gebruikt om de huidige selectie of individuele atomen en bindingen te slepen. Je kunt atomen en bindingen aan de selectie toevoegen/verwijderen door erop te klikken. Als je een apart fragment hebt geselecteerd, kun je het roteren door een atoom in de selectie te slepen. Je kunt de selectie verwijderen met de **DEL** -toets of met de gom. Elke tool heeft een ander gedrag voor de rechtermuisknop:
  + **Slepen:** verplaatst het hele molecuul (je kunt hiervoor al de linkermuisknop gebruiken)
  + **Rechthoek selecteren:** selecteer atomen en bindingen met behulp van een rechthoekig selectiegebied
  + **Lasso selecteren:** selecteer atomen en bindingen door een selectiegebied uit de vrije hand te tekenen
* **Kleurmodus:** atomen en bindingen weergeven met kleuren
* **Volledige modus:** geeft alle C- en H-atomen weer in plaats van skeletweergave
* **Center:** centreert het hele molecuul
* **Clean:** verwijdert de structuurformule
* **2D naar 3D:** zet de structuurformule om in een 3D-model

**Linker werkbalk**

Linker werkbalk

<tekst> hieronder naast deze verticale voorstelling

* **Bindingen:** kies een van de typen bindingen(enkel, dubbel, drievoudig, omhoog, omlaag) en voeg bindingen toe of wijzig ze
* **Structuren:** kies een van de structuren (benzeen, cyclopropaan, enz.) en voeg structuren toe
* **Keten:** maak een keten van koolstofatomen
* **Elektronen:** verhoog (+) of verlaag (-) de lading van atomen

**Rechter werkbalk**

Rechter werkbalk

<tekst hieronder naast de kolom hierboven>

In deze werkbalk kun je kiezen uit een aantal elementen, ook kun je met de laatste knop een element uit het periodiek systeem kiezen. Je kunt het element gebruiken om nieuwe atomen te maken of bestaande atomen te wijzigen.

**Search**

Zoekbalk

Je kunt moleculen laden uit grote databases zoals PubChem en RCSB met behulp van het zoekformulier aan de linkerkant van de menubalk. Typ wat je zoekt en er verschijnt een lijst met beschikbare moleculen. Let wel op dat de naamgeving in het Engels gebeurt. Je kunt ook een brutoformule of een verkorte structuurformule ingeven. Let hierbij op dat de structuurformule uit de database niet altijd overeenkomt met hoe je de verkorte structuurformule aangeleerd kreeg.

Je kunt ook op de vervolgkeuzeknop naast het zoekveld klikken om een ​​specifieke database te selecteren. Hiermee wordt een uitgebreidere zoekopdracht uitgevoerd in de geselecteerde database.

**Molview**

Het menu “**molview**”geeft een keuze op welke manier je de formules of modellen in

2D of 3D wil voorstellen op het scherm.

**Tools**

Het menu “**tools”** bevat verschillende hulpprogramma's.

**Embed**

Je kunt een specifieke verbinding, macromolecuul of kristal inbedden op je eigen website of in een document met behulp van een URL of HTML-code. De gekoppelde structuur is deze die in het modelvenster wordt weergegeven. Je kunt ook de URL uit de adresbalk kopiëren om naar de huidige structuur te linken.

**Export**

Exportopties:

* **Structural formula image:** png-bestand van de structuurformule met een transparante achtergrond.
* **3D model image:** png-bestand van de 3D-structuur met een transparante achtergrond.
* **MOL file:** exporteert een MDL-molbestand uit het 3D-model (gewone moleculen). Je hebt wel specifieke software nodig om deze info te bekijken.

#### Information card

Hiermee vind je informatie over de structuurformule.

#### Spectroscopy

Dit toont een nieuwe laag waar je moleculaire spectra van de huidige structuurformule kunt bekijken

#### 3D model resource

Hiermee word je omgeleid naar de webpagina voor het huidige 3D-model op de website van de bron database (behalve wanneer het model is opgelost met behulp van de Chemical Identifier Resolver)

#### Advanced search

Met deze functies kun je enkele geavanceerde zoekopdrachten uitvoeren in de PubChem-database met behulp van de structuurformule van de sketcher.

1. **Similarity:** zoeken naar verbindingen met een vergelijkbare structuurformule
2. **Substructure:** zoeken naar verbindingen met de huidige structuur als onderdeel van de structuurformule
3. **Superstructure:** zoeken naar verbindingen met onderdelen van de huidige structuur

**Model**

Het menu **Model** bevat enkele algemene functies voor het 3D-model.

**Reset**

Deze functie zet de modelpositie, zoom en rotatie terug naar standaard.

#### Representation

Je kunt kiezen uit een lijst met verschillende molecuulrepresentaties, waaronder: Ball and stick (balstaafmodel), stick (staafmodel),van der Waals Spheres ( bolschilmodel), wireframe (draadvoorstelling),Line ( lijnenstructuur).

#### Background

Je kunt wisselen tussen een zwarte, grijze of witte achtergrond. De standaardachtergrond is zwart (geëxporteerde afbeeldingen van GLmol of ChemDoodle hebben een transparante achtergrond)

#### Engines

Je kunt kiezen uit drie verschillende voorstellingsvormen: **GLmol** , **Jmol** en **ChemDoodle** .

GLmol is de standaard voorstelling.

GLmol en ChemDoodle zijn gebaseerd op WebGL, een browsertechnologie die 3D-graphics ondersteunt.

Als WebGL niet beschikbaar is in je browser, wordt Jmol gebruikt voor alle weergave.

#### Crystallography

Je kunt een reeks kristalcellen (2x2x2 of 1x3x3) of een enkele eenheidscel laden om de kristalstructuren te bekijken.

**Protein**

Het **menu “protein”** biedt een aantal instellingen voor het weergeven van eiwitten, waaronder verschillende kleurenschema's en verschillende weergaven van het eiwit.

#### Show bio assembly

Bij het laden van een eiwitstructuur toont MolView standaard de asymmetrische eenheid. Met deze functie kun je in plaats daarvan de volledige biologische eenheid bekijken.

#### Chain representation

Je kunt kiezen uit vier verschillende modelweergaven.

1. **Ribbon:** tekent lintdiagram *(standaardweergave)*
2. **Cylinder and plate:** massieve cilinders voor α-helices en massieve platen voor β-vouwbladstructuur
3. **B-factor tube:** buis met B-factor als dikte
4. **C-alpha trace:** lijnen tussen centraal koolstofatoom in aminozuren

#### Bond

Tekent de primaire structuur van het eiwit.

#### Chain coloring

Je kunt kiezen uit zes kleurenschema's.

1. **Secondary structures:** verschillende kleuren voor α-helices, β-sheets, enz.
2. **Spectrum:** kleurenspectrum *(regenboog)*
3. **Chain:** elke keten krijgt een andere kleur
4. **Residu:** alle aminozuurresten zijn anders gekleurd
5. **Polarity:** kleuren polaire aminozuren rood en niet-polaire aminozuren wit
6. **B-factor:** blauw voor lage B-factor en rood voor hoge B-factor

**Jmol**

Het “**Jmol”**-menu biedt een aantal Jmol-functies en berekeningen.

**Clear**

Wist alle uitgevoerde berekeningen en metingen.

**High quality**

Laat voorstelling van hoge kwaliteit in Jmol mogelijk (standaard ingeschakeld) Indien uitgeschakeld wordt het model getekend met lijnen.

#### Calculations

Je kunt de volgende Jmol-berekeningen uitvoeren in Jmol:

* **MEP surface lucent/opaque:** berekent en projecteert moleculaire elektrostatische potentiaal op een doorschijnend of ondoorzichtig van der Waals-oppervlak
* **Charge:** berekent en projecteert atomaire lading als tekstlabel en kleurverloop van wit naar atoom
* **Bond dipoles:** berekent en tekent dipolen bij individuele bindingen
* **Overall dipole:** berekent en tekent dipoolmoment
* **Energy minimization**

#### Measurement (*meting*)

Je kunt afstand, hoek en torsie meten met Jmol. Via het menu Jmol kun je één van deze metingen activeren en deactiveren.

* **Distance** afstand tussen twee atomen in nm
* **Angle** hoek tussen twee bindingen in graden
* **Torsion** draaiing tussen vier atomen in graden