

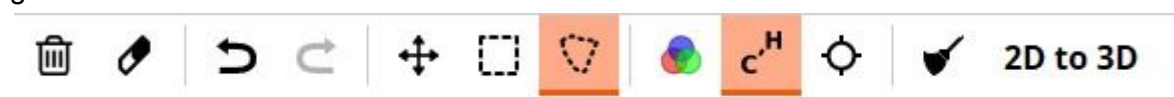


# Molekylmodellering med hjälp av MolView

MolView är ett gratis nätbaserat program för molekylmodellering, det finns på [molview.org](http://molview.org).

MolView består av två fönster. I det vänstra kan man konstruera modeller av molekyler. I det högra fönstret skapas modellen.

Olika verktyg hittas i kanterna. Då man för musen över ett verktyg visas en text vad verktyget gäller.



Från vänster till höger visas verktygen skräpkorg, sudda, ångra, gör om. De tre följande är verktyg för att välja. Om du vill flytta en atom, kan du dra i den med verktyget med pilar i ändarna. Om du vill flytta flera atomer, måste du först välja alla du vill flytta. Det kan du göra med rektangelverktyget i mitten, men om det inte är en lämplig form kan du välja atomer genom att avgränsa ett område med det sk. lasso-verktyget. Följande verktyg: färgverktyg, visa alla bindningar, centrera, snygga upp (kvasten) och skapa 3D-modell.



I högra kanten finns några vanliga grundämnen, men om du behöver något annat är det bara att trycka på de tre punkterna (...) längst ner så öppnas ett periodiskt system.

I vänstra kanten kan man välja mellan olika kovalenta bindningar, cykliska kolväten, positron och elektron.

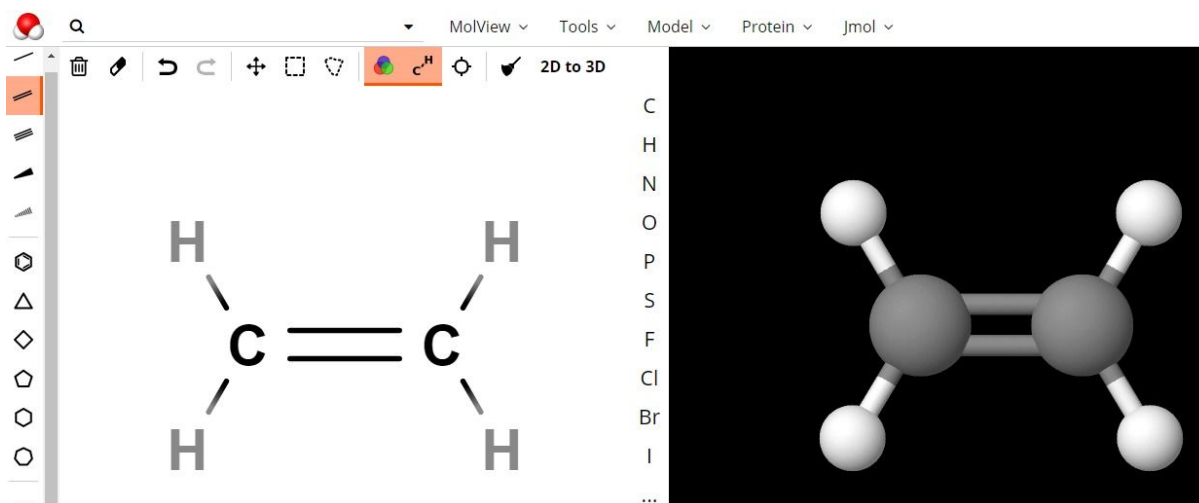
## Exempel: Rita strukturformel och undersök 3D-modell för metan

1. Rensa fönstret genom att klicka på skräpkorgen. Välj "Visa alla bindningar"-verktyget.
2. Välj kolatom C och placera den i fönstret.
3. Välj enkelbindning från vänstra kanten och klicka fyra gånger på kolatomen.
4. Välj väteatom H och ersätt kolatomerna som skapats med väteatomer, genom att klicka på kolatomerna.
5. Klicka på kvasten för att snygga upp molekylen och få rätt vinkel mellan bindningarna.
6. Då du klickar "2D to 3D" skapas 3D-modell av metanmolekylen, som du kan vrida på och zooma in och ut. Du kan också välja hur den ska se ut, i menyn Model kan du välja "Representation" och "Background". Om du vill överföra bilden till någon uppgift kan det ibland vara nyttigt att kunna ändra bakgrundsfärgen.



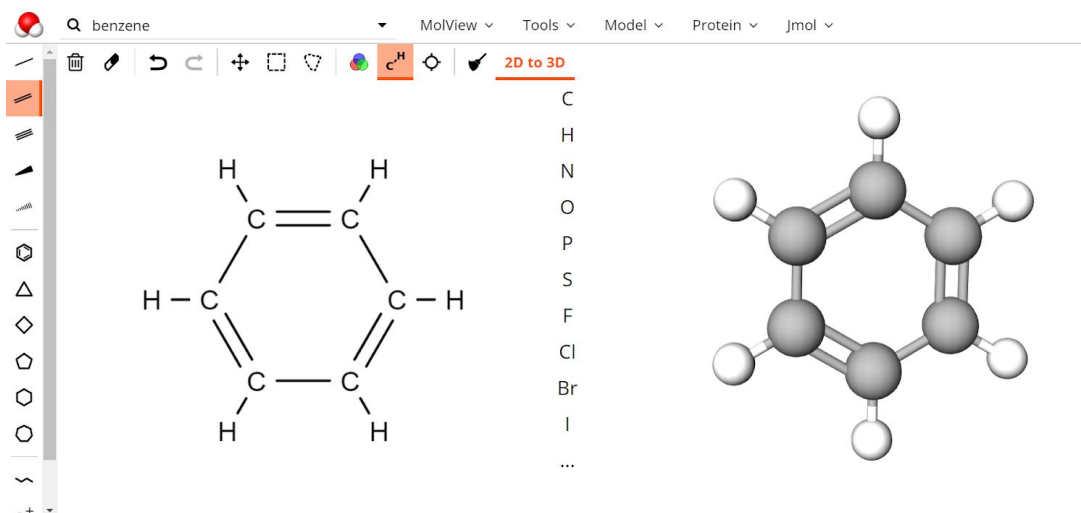
## Exempel: Rita strukturformel och undersök 3D-modell för eten eller etyn

1. Rita en kolatom.
2. Välj dubbel- eller trippelbindning och klicka på kolatomen.
3. Klicka två gånger på "Visa alla bindningar" så uppstår väten som saknas automatiskt.
4. Testa centreringsverkyget. Snygga sedan upp molekylen och skapa 3D-modell.



## Exempel: Cykliska kolväten

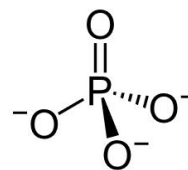
1. Rita en kolatom.
2. Välj en cyklisk struktur och klicka på kolatomen.
3. Klicka två gånger på "Visa alla bindningar", snygga upp och skapa 3D-modell.
4. Skapa till exempel bensen på motsvarande sätt:



## Exempel: Modell av en jon

När man skapar en modell av en jon måste man beakta fria elektroner. Om man inte märker ut dem, kommer programmet att sätta väte på deras plats.

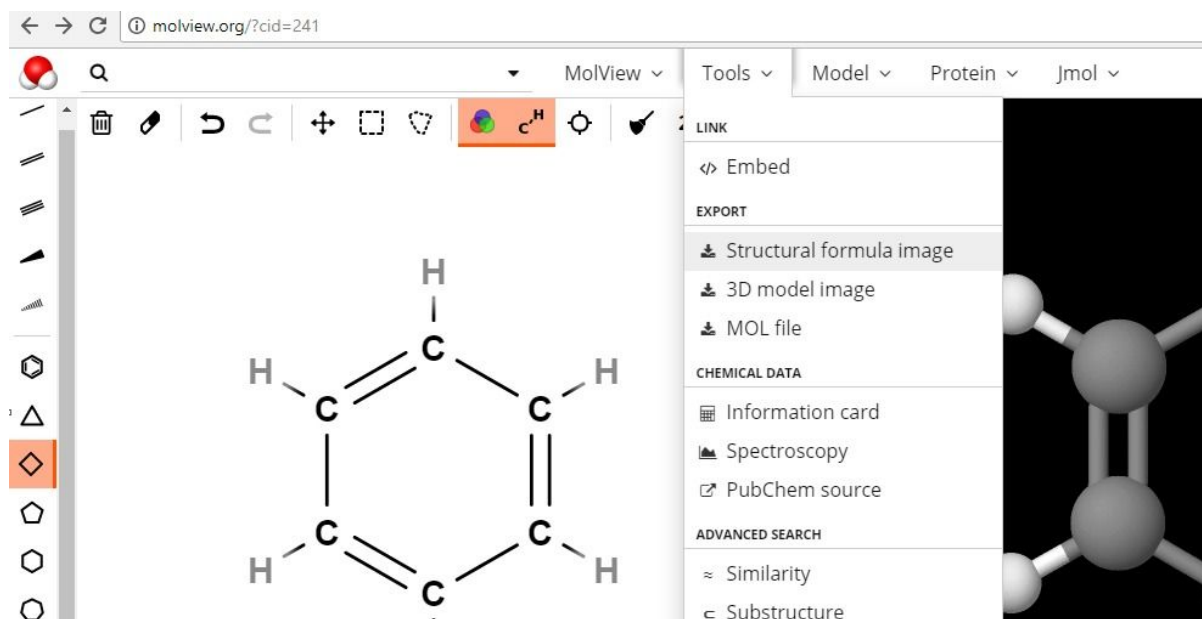
Vi skapar t.ex. fosfatjonen till höger.



1. Rita en fosforatom P.
2. Välj enkelbindning och klicka tre gånger på P.
3. Välj dubbelbindning och klicka en gång på P.
4. Välj en syreatom O och ersätt kolatomerna som skapats med syre.
5. Om du nu klickar på kvasten eller 2D to 3D, märker du att programmet placerar ut väteatomer där de skulle behövas.
6. Välj elektron  $e^-$  från vänstra kanten, och klicka på alla syreatomer.
7. Ta bort överlops väten med suddgummit, städa och skapa 3D-modell.

## Spara strukturformler och 3D-modeller

Under menyn *Tools* kan du spara antingen strukturformelbilden eller 3D-modellen. De sparas i png-format och utan bakgrundsfärg. Du kan också högerklicka på 3D-modellen för att spara bilden.



The screenshot shows the MolView web application. The main window displays the chemical structure of benzene (C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>) in a 2D structural formula. The right-hand panel is open to the 'EXPORT' section, showing options to download the 'Structural formula image' or a '3D model image'. The '3D model image' option is currently selected. Below the 'EXPORT' section, there are sections for 'CHEMICAL DATA' (Information card, Spectroscopy, PubChem source) and 'ADVANCED SEARCH' (Similarity, Substructure). The 3D model of benzene is visible on the right side of the interface.

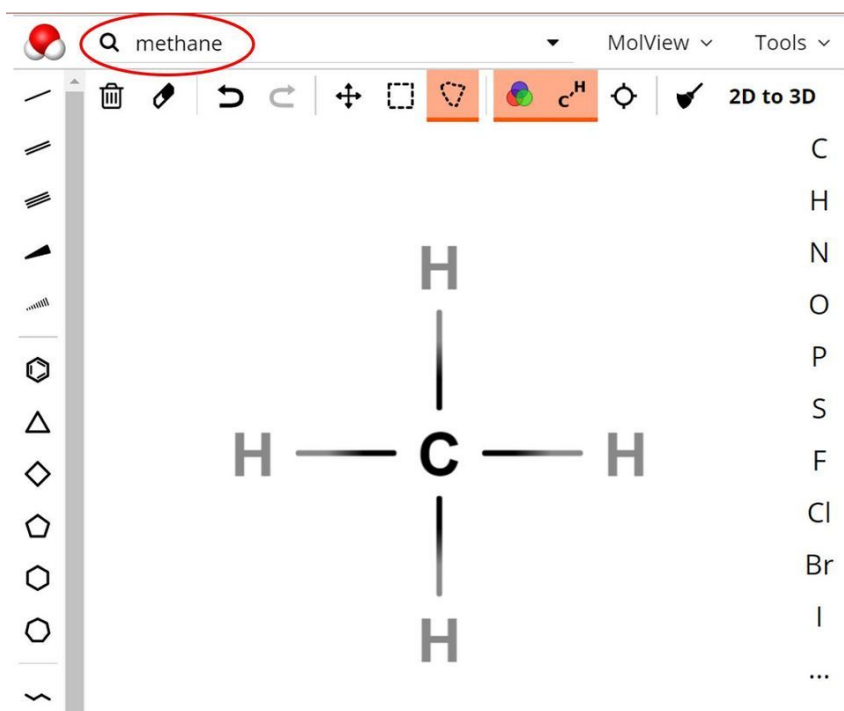
## Bädda in 3D-modeller

Om du vill bädda in en modell av en molekyl, till exempel i ett blogginlägg eller en site, väljer du verktyget *Embed* som finns under *Tools*-menyn.

## Färdiga strukturformler

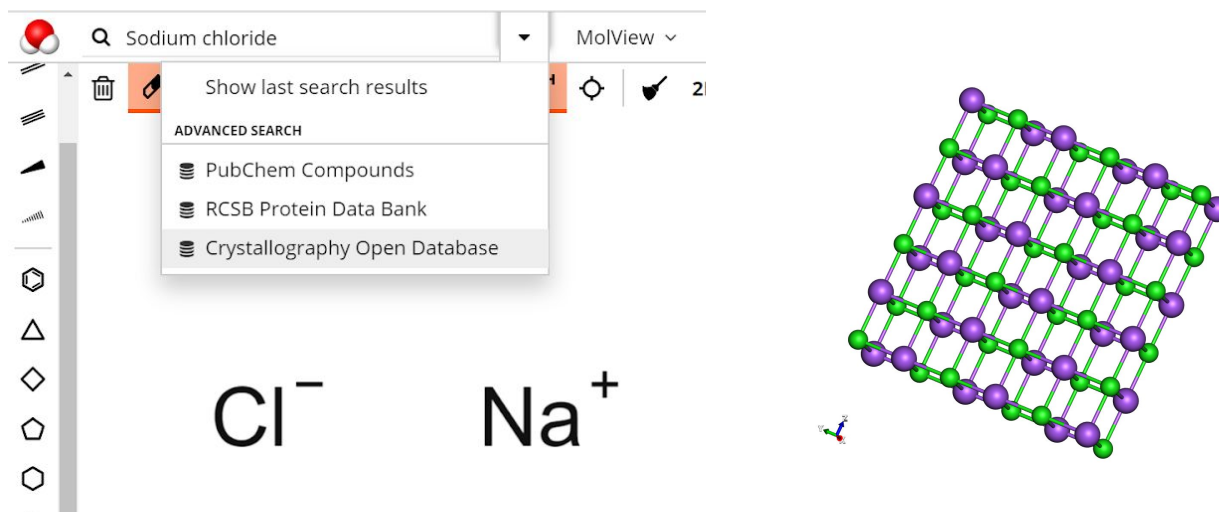
Nu när du kan använda programmet är det dags att avslöja att det finns en massa färdiga molekyler som du fritt får använda. Du skriver in namn på engelska, molekylformel eller CAS-nummer i sökfältet.

Till exempel för metan skriver du methane, CH<sub>4</sub> eller 74-82-8. Testa!



## Salters kristallstruktur

Du kan undersöka olika salters kristallstruktur. Skriv in t.ex. namn på engelska, exempelvis *sodium chloride*. Välj sedan Chrystallography Open Database, vid sökfältet. Oftast är första alternativet det rätta.



The screenshot shows the MolView software interface. The search bar contains 'Sodium chloride'. A dropdown menu is open, showing search results from the Crystallography Open Database. Below the search bar, the chemical formulas  $\text{Cl}^-$  and  $\text{Na}^+$  are displayed. To the right, a 3D ball-and-stick model of the sodium chloride crystal structure is shown, consisting of alternating purple and green spheres connected by bonds.

Därefter kan du vrida på kristallen.