



MolView

Das Programm *MolView* ist eine webbasierte Anwendung zum Zeichnen und zur räumlichen Darstellung chemischer Strukturen. Das Programm ist ein Open-Source-Projekt (GNU AGPL license) des Bioinformatikers Herman Bergwerf der TU Delft. Besonders das Abrufen von 3D-Darstellungen aus Online-Datenbanken (*PubChem*, *RCSB Protein Data Bank*, *Crystallography Open Database*) ist mit dieser Anwendung sehr einfach möglich.



zur Web-App

<http://molview.org>

Anleitung

Nachdem den Nutzungsbedingungen zugestimmt wurde, öffnet sich der Startbildschirm, wobei standardmäßig das Koffein-Molekül angezeigt wird (Abb. 1).

Erstellung der Strukturformeln auf der 2D-Zeichenarbeitsfläche



Mit Hilfe des *Mülleimer*-Symbols in der allgemeinen Werkzeugleiste kann das voreingestellte Koffein-Molekül entfernt werden und mit dem Zeichnen

einer eigenen Struktur begonnen werden. Alternativ kann durch die Auswahl des *Radiergummi*-Symbols das Koffein-Molekül den eigenen Wünschen entsprechend angepasst werden.

Dazu können Atome oder einzelne Strukturelemente markiert und verschoben werden (*Rechteck*- bzw. *Lasso*-Symbol). Zusätzlich kann die Farbe von Heteroatomen, die Art der Darstellung (Skelett- oder Strukturformel) ausgewählt und die gezeichnete Struktur auf der Arbeitsfläche zentriert werden. Durch die Anwahl des *Pinset*-Symbols erfolgt eine geometrische Optimierung und daneben ist eine Konvertierung von 2D nach 3D möglich. Das Erstellen neuer Strukturformeln erfolgt mit Hilfe der Zeichenwerkzeug- und der Atomartenleiste.

