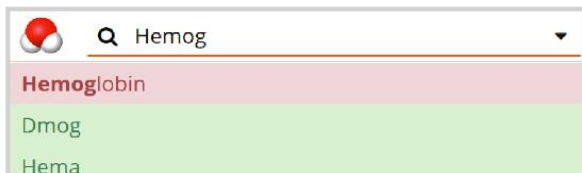


**Abrufen von Strukturen aus Datenbanken**

Im Suchfeld der Menüleiste können Strukturen aus verschiedenen Datenbanken (*PubChem*, *RCSB Protein Data Bank*, *Crystallography Open Database*) abgerufen werden. Das ist vor allem für Biomoleküle sehr hilfreich.

„Tools“ - Werkzeuge

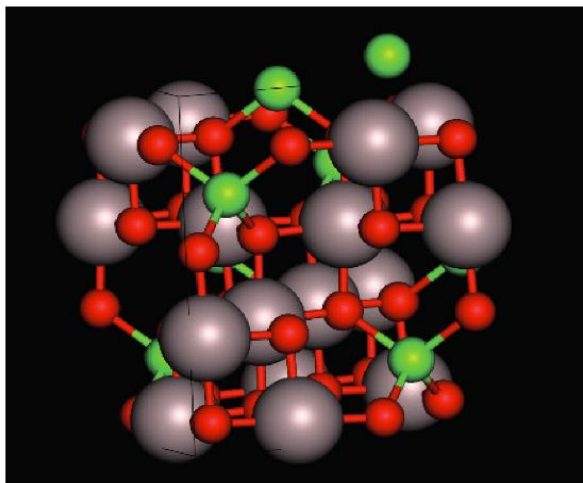
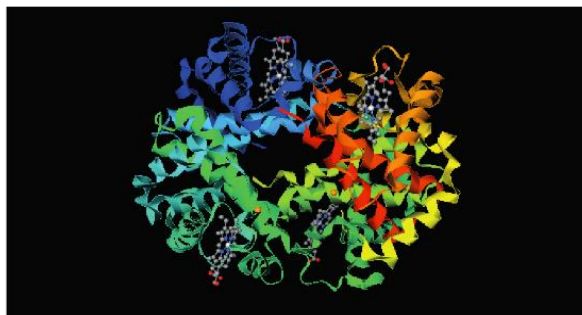
Unter dem Reiter *Tools* in der Menüleiste sind verschiedene weiterführende Schritte möglich, z.B. können die Strukturen (2D und 3D) als Bilddateien (.png) exportiert werden. Außerdem können verschiedene Informationen zu der gezeichneten Struktur aufgerufen werden:

- » Chemische Daten (systematischer Name, Molekülmasse, Formel, etc.)
- » Spektroskopische Daten (z.T. Massen-, IR- und ¹H-NMR- Spektren)

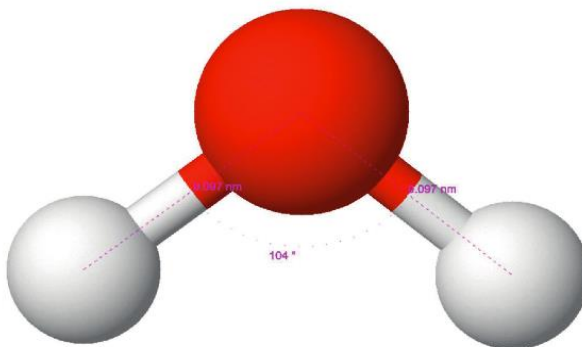
Es sind Links zu Datenbanken (PubChem) und Recherchen zu ähnlichen Strukturen oder Substrukturen möglich.

„Model“ - Anpassung von 3D- Darstellungen

In der Menüleiste wird unter dem Reiter „Model“ die 3D- Darstellung (Ball&Stick, Wireframe, etc.) und der Hintergrund angepasst. Verschiedene Elementarzellen können in die Abbildung eingefügt werden.

**„Protein“ - Darstellung**

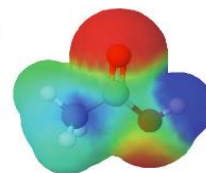
Die Anpassung gezeichneter oder abgerufener Biomoleküle kann mit Hilfe des Reiters „Protein“ durchgeführt werden (Bänderdarstellungen, Farben, etc.).

„Jmol“ - Werkzeug

Dieses Werkzeug in der Menüleiste führt zu verschiedenen Berechnungsmöglichkeiten zu Molecular Modelling und Messmöglichkeiten.

Mögliche Berechnungsmethoden:

- » Potentialoberfläche
- » Elektronendichteoberfläche
- » Verschiedene Dipolmomente
- » Energetische Minimierung (MMFF94)



Mögliche Messmöglichkeiten:

- » Bindungslänge in nm
- » Bindungswinkel
- » Torsionswinkel

Tipps & Tricks**Weitere Anleitungen zum Programm**

- » <http://molview.org/docs/manual.pdf>
- » Video-Tutorials auf YouTube

HuN