

# Workshop Jmol/JSmol

## Jmol / JSmol und andere 3D-Viewer

- Jmol war ursprünglich ein Standalone-Programm und ein Java-Applet, das in Webseiten eingebunden werden konnte.
- Virenprobleme bewirkten, dass Java im Internet sehr an Beliebtheit eingebüsst hat. iPhone und iPad unterstützen Java nicht, Chrome unterstützt Java seit 2015 nicht mehr.
- Dafür weisen alle Browser, die dem HTML5-Standard entsprechen, mit dem Canvas-Element ein leistungsfähiges Grafik-Element auf, das mit Javascript gesteuert werden kann. Javascript ist weniger schnell als Java, aber dafür „gesandboxt“.
- Also wurde der Jmol-Source-Code so umgeschrieben, dass derselbe Code nun zugleich das Java-Jmol-Applet liefert und durch das Programm Java2Script in ein Javascript/HTML5-Applet übersetzt werden kann. Diese Arbeit ist noch nicht perfekt und es verbleiben einige Bugs in JSmol, an denen man besonders leidet, wenn man komplexere Abläufe umsetzen will. Man kann das Web-Applet in geeigneten Browsern immer noch auf die Java-Variante umstellen (sie läuft dann schneller und flüssiger) wie auch auf eine WebGL-Version.
- Jmol existiert daneben weiterhin als leistungsstarkes Standalone-Java-Programm (im Download inbegriffen), das aus demselben Source-Code erzeugt und mit genau denselben Skriptbefehlen gesteuert wird, wie das Web-Applet. Ich setze es nur selten ein – wenn ich besonders grosse Proteine bearbeiten will oder Bilder für eine Filmsequenz speichere, was aus der Webapplikation heraus sehr mühsam ist, weil man aus Virenschutzgründen die Speicherung jedes einzelnen Bildes manuell bestätigen muss.
- JSmol ist nicht sehr schnell. Es gibt neuere Viewer (die auch unter molekularium ausprobiert werden können), die auf der WebGL (Web Graphics Library)-Technologie beruhen und wesentlich schneller performen, die aber sehr viel weniger leistungstark sind, was die Manipulation der Modelle angeht. Auch in JSmol selber kann man in einen solchen Viewer umschalten.

## JSmol/Jmol interactive scripting und Betriebsspionage

JSmol erlaubt enorm viele Operationen an den dargestellten Modellen. Man kann diese Operationen durch Skriptbefehle in einer Konsole ausführen. Die Konsole öffnet man mit dem *Kontextmenü* (Rechts-Klick auf die JSmol-Abbildung, bzw. auf Macs mit Control + Mausklick) mit der Option *Konsole*. Eine Dokumentation der Skriptbefehle erhält man, indem man im Konsolenrahmen oben die Option *help* wählt.


Wird eine vordefinierte Menü-Funktion einer Seite verwendet, kann man mit Hilfe der Konsole herausfinden, wie der zugehörige Skriptbefehl lautet, indem man auf *history* klickt. Die Details vordefinierter JSmol-Funktionen werden allerdings nicht angezeigt.

Weitere „Spionage-Möglichkeiten“ findet man im Kontextmenü unter Anzeigen (weit unten). Man kann sich zum Beispiel die gesamte Information der angezeigten Dateien anzeigen lassen (und die Daten extrahieren). Will der Webseitengestalter diese Daten allerdings nicht preisgeben, kann er den Zugriff einschränken.

## Modelle laden und Bilder speichern

Es gibt viele verschiedene Möglichkeiten, Modelle zu laden:

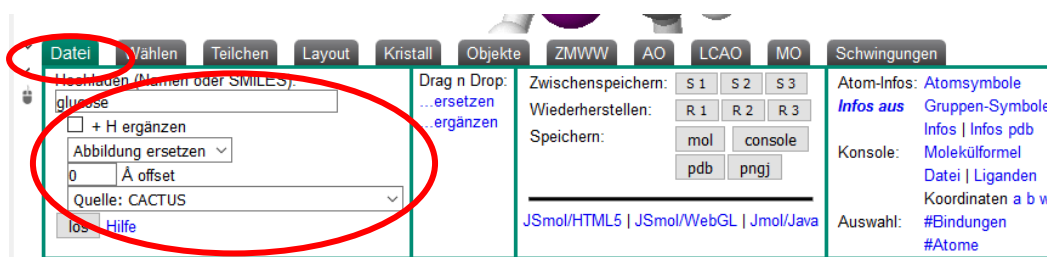
- Modelle aus dem Internet herunterladen. Auf verschiedene Datenbanken kann direkt zugegriffen werden – z.B. mit dem Namen, CAS-Nummern oder SMILES.
- Modelle aus anderen Programmen einlesen (drag and drop). JSmol kann enorm viele verschiedene Datentypen einlesen, so mol, cif, pdb, xyz, Gamess-output, Gaussian-Output, cube, und viele mehr. Auf der Seite, die dem Link *Hilfe* unterlegt ist, gibt es zwei Links zu Internet-Seiten, auf denen man Moleküle zeichnen und dann in JSmol darstellen kann, indem man z.B. SMILES erzeugt.
- Modelle mit JSmol zeichnen. Auch das geht, allerdings mehr schlecht als recht.

Die Bildschirmgröße und damit das Layout kann man einstellen, indem man mit der Maus neben die JSmol-Abbildung fährt und das Mäusrädchen betätigt. Die Abbildungen kann man mit der Maus bequem auf verschiedene Weise drehen und zoomen, beachten Sie bitte den Link unter .

Bilder speichern am einfachsten mit dem *Kontextmenu* (Rechtsklick auf das JSmol-Fenster) /Datei/export/exportiere PNG-Abbild.

SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification)

Öffnen Sie im Molekularium (<http://www.swisseduc.ch/chemie/molekularium/index.htm>) eine beliebige Seite und geben Sie im Register *Datei* unter *Hochladen* entweder den Namen eines gewünschten Moleküls oder einen SMILES ein (eine Art typographische Skelettformel).



Beispiele:

- |                   |                              |
|-------------------|------------------------------|
| • Ethan:          | CC                           |
| • Propen:         | CC=C oder Ccc <sup>1</sup>   |
| • Cyanwasserstoff | C#N oder c=n                 |
| • Cyanid-Ion:     | [C-]#N <sup>2</sup>          |
| • D-Alanin:       | N[C@H](C)C(=O)O <sup>3</sup> |
| • L-Alanin:       | N[C@@H](C)C(=O)O             |

Bezeichnungen: Namen und Kürzel

Geben Sie anstelle von SMILES folgende Bezeichnungen ein:

- *glucose*
- *glucopyranose*
- *glucose* und im untersten Auswahlfeld statt Quelle: NIH *Quelle: Pubchem*
- *2RVE* und im untersten Auswahlfeld *Makromolekül (RSCB)*. Nun wird das Modell des Restriktionsenzym *EcoRV* geladen.
- Laden Sie dieses Modell nochmals, klicken Sie aber vorher die Checkbox *+ H ergänzen* an. JSmol ergänzt nun automatisch an plausiblen Stellen mit H-Atomen. Das geht mit typischen

<sup>1</sup> Kleinbuchstaben oder Gleichheitszeichen für Doppelbindungen,

<sup>2</sup> Wo nötig, führt man Ladungen oder H-Atome in eckigen Klammern explizit an.

<sup>3</sup> Blickt man vom N-Atom (links des stereogenen C-Atoms) auf das stereogene C-Atom, so erscheinen die nachfolgenden Atome oder Atomgruppen der Reihe nach im Gegenuhrzeigersinn, bei @@ im Uhrzeigersinn.

Biomolekülen gut, ist aber bei Wassermolekülen nicht möglich, weil die Orientierung nicht eindeutig ist, und Disauerstoff kann sich bei dieser Operation durchaus auch mal in ein Peroxid verwandeln.

- In der Konsole oder auf Kommandozeilen lädt man Moleküle mit Skript-Befehlen wie *load \$CC*; *load :SMILES:CC*; oder *load =2RVE*; (RSCB) (mit vorangestelltem Dollar-Zeichen gehen die Anfragen an den NIH-Server, mit Doppelpunkt an Pubchem und mit :SMILES: kann man bei Pubchem erzwingen, dass die Eingabe als SMILES und nicht als Abkürzung interpretiert wird).

### Aminosäuresequenzen

Kurze Aminosäureketten kann man wie oben angegeben laden. Ab ca 3-5 Aminosäuren kommen vom Sever aber nur noch flache Modelle zurück.

Wählt man im Auswahlménü aber *Lange Aminosäuresequenz (ala\_cis\_gln...)*, so hängt das Molekularium die verschiedenen Aminosäuren zusammen. Welche Kürzel verwendet werden können, findet man auf der Hilfe-Seite. Geben Sie *ala\_gly\_asnn\_gly\_gly\_ptyr\_pro\_pro\_pro* ein – was wird dargestellt?

### Beispiele für Fragestellungen im Unterricht zu SMILES

- Zu Beginn des Chemieunterrichts:
  - Periodizität Periodensystem: Die SuS geben jedes Nichtmetallatom als SMILES ein und beschreiben die Periodizität der Wasserstoffverbindungen (siehe Molekularium-Seite Einführung).
  - Von einfachen Wasserstoffverbindungen zu organischen Molekülen: Die SuS geben dann die SMILES etwas grösserer Moleküle wie Ethan oder Methanol ein und versuchen Regeln aufzustellen, wie man die Summenformeln längerer Molekülketten vorhersagen kann (Seite Einführung). Bei diesem Auftrag ist einer Schülergruppe aufgefallen. Dass die Moleküle stets gestaffelte Konformationen einnehmen und sie kamen selber auf die Idee, dies könne an einer gegenseitigen Abstossung der Valenzelektronen liegen – lange, bevor Ladungswolkenmodelle oder VSEPR besprochen wurden.
  - Keil/Strich-Formeln: Projiziert man die Moleküle mit einem dunklen Hintergrund auf die Wandtafel, kann man gut daneben die zugehörigen Keil/Strich-Formeln zeigen.
- Nomenklatur: Beispiel einer Anwendung findet sich auf der Seite *Organische Nomenklatur Teil 2*. Die SuS müssen hier gewisse Moleküle mit Hilfe von SMILES erzeugen und dann überprüfen, ob sie den Namen korrekt umgesetzt haben.

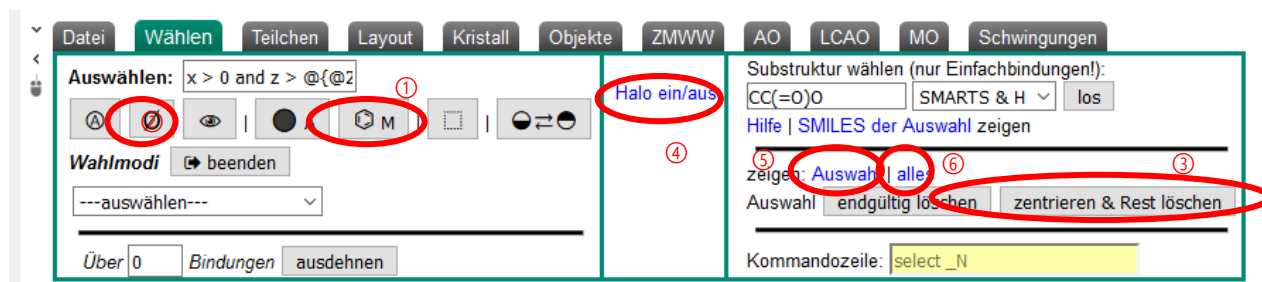
### Modelle bearbeiten

Im Molekularium gibt es auf den Menü-Reitern *Wählen*, *Teilchen* und *Layout* viele Möglichkeiten, Atome und Bindungen auszuwählen und zu bearbeiten oder das Layout anzupassen. Die JSmol-Skriptbefehle erlauben noch enorm viel mehr Operationen.

Wichtig: Mit den ausgewählten Atomen geschieht zunächst noch nichts. Nimmt man aber anschliessend Veränderungen vor – zum Beispiel mit roter Farbe einfärben oder den Atomradius vergrössern – so geschehen diese Veränderungen üblicherweise nur an den ausgewählten Atomen.

- **Auswählen.**, so wären typische „Spielzüge“:
  - Will man beispielsweise bei einem Beryll/Smaragd ein einzelnes Anion zeigen, so sucht man als erstes auf der Seite Kristallstrukturen mit ctrl + F nach Beryll und lässt das Modell anzeigen.

Im Register *Wählen* klickt dann man in der Mitte auf *Molekül* (Siehe Abbildung, ①). Es erscheinen nun gelbe Halos, die anzeigen, welche Atome derzeit angewählt sind. Man klickt auf  $\emptyset$  *nichts* ②, um alle Atome abzuwählen und dann auf diejenigen Strukturen, die man anzeigen will. Wählt man den Button *Auswahl zentrieren & Rest löschen*. Stören die gelben Halos, so kann man sie mit der Funktion *Halo ein/aus* ④ entfernen. Braucht man die gelöschten Strukturen wieder, so lädt man das Modell neu. Alternativ kann man die nicht angewählten Strukturen auch nur ausblenden mit ⑤ und wieder einblenden mit



- Um von Bertrandit eine Ebene mit Anionen anzuzeigen, könnte man zuerst *Wählen durch Ziehen* ⑤ anklicken, dann *nichts* ② und anschliessend die anzuzeigenden Anionen teilweise übermalen. Anschliessen erweitert man die Auswahl auf die ganzen Anionen mit *Auswahl über 0 Bindungen ausdehnen* ⑥ und verfährt wie oben.
- Laden Sie das Restriktionsenzym EcoRV mit Hilfe des Skript-Befehls `load =2RVE;`, ändern Sie das Seitenlayout mit Befehlen aus dem Register *Layout* und modifizieren Sie das Enzym dann mit Hilfe der Optionen im Register *Teilchen*; am besten beginnen Sie in der dritten Kolonne mit den Optionen unter *Proteine / DNA darstellen*.

Will man kompliziertere Darstellungen untersuchen, muss man oft einen Teil der Moleküle löschen, die Grössen von Atomen anpassen, usw. Eine der grossen Stärken von Jmol liegt darin, dass man auf sehr bequeme Weise Gruppen von Atomen auswählen und dann gezielt modifizieren kann.

Wenn ein Befehl scheinbar nicht funktioniert, liegt das übrigens oft daran, dass man keine Atome ausgewählt hat. Alle Atome kann man selektieren, indem man im Register *Wählen* den Befehl *alle Atome auswählen* wählt oder mit dem Skriptbefehl `select *`; bzw. `select all`;

- Im Modell des Restriktionsenzym EcoRV kann man z.B. mit folgenden Skript-Befehlen Teilauswahlen treffen: `select DNA`; `select within(5,DNA)`; (alles, was weniger als 5 Å von der DNA entfernt ist), `select protein`; `select !protein`; (alles ausser Proteinen auswählen), `select water`; `select ala`;(Alanin) `select backbone`; `select sidechain`; `select polar`; `select hydrophobic`; `select basic`; (oder *acidic* oder *neutral*), `select A`; (Adenosin) `select :A`; (mit vorangestelltem Doppelpunkt: Protein-Kette A), `select protein and 1-20`; (Aminosäuren 1 bis 20 aller Proteinketten), usw. usf.

## Vorbereitete Sequenzen

Als Webseitenprogrammierer kann man vorbereitete Beispiele zusammenstellen und von den Schülern untersuchen lassen. Auf der Seite *Kristallstrukturen* finden sich viele Kristallstrukturen, die etwas aufbereitet sind – man muss bei den Originaldateien oftmals etwas Hand anlegen, um auch für Schülerinnen und Schüler brauchbare Abbildungen zu erhalten: Abbildung ausweiten, Bruchstücke wegschneiden, Komplexbindungen etwas andersartig darstellen, usw.

- Suchen Sie auf der Seite *Kristallstrukturen* einige Strukturen mit Wasserstoffbrücken. Wasserstoffbrücken kann man automatisch einzeichnen lassen, indem man auf der

Registerkarte *ZMWW* unter *Wasserstoffbrücken einzeichnen* eine der Optionen 0.05 | 0.1 | 0.2 wählt. Gibt es interessante Strukturen? Falls eine gewünschte Darstellung nicht gelingt: Bitte melden oder das Problem ins Plenum einbringen!

### Beispiele für Fragestellungen im Unterricht

- Anhand der molek-Seite Kristallstrukturen kann man Fragen im folgenden Stil bearbeiten
  - Normalerweise weisen polar gebundene H-Atome in Molekülen positive Partialladungen auf. Erhalten auch Hydroxid-Ionen, obwohl sie doch insgesamt negativ geladen sind, durch die H-Atome einen positiven – oder einen deutlich weniger negativen - Pol? Tipp: mit dem Filter auf der Seite links oben unter *beliebiger Formeltext* „hydroxid“ eingeben.
  - Wie gross ist ein Wasserstoffatom? Die Frage könnte man so anpacken: Man misst in elementarem Sauerstoff den Abstand zwischen zwei benachbarten O-Atomen verschiedener Moleküle. Dann misst man in Eis den Abstand zwischen zwei benachbarten O-Atomen<sup>4</sup>. Die Differenz müsste in erster Näherung der Grösse eines H-Atoms entsprechen, das sich zwischen die O-Atome schiebt. Welche erstaunliche Tatsache stellt man aber fest und wie kann man sie erklären?
    - Wie arrangieren sich Ionen in einem Salz, die nicht entgegengesetzt *gleich* geladen sind, bei denen die Ladungen von Kat- und Anion nicht den gleichen Betrag aufweisen? Interessante Beispiele:  $\text{CoCl}_2$ ,  $\text{CrCl}_2$  (Welche Geometrie ist überraschender?),  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . In Aluminiumoxid kommen sich die Anionen sehr nahe – müssten da nicht die abstossenden Kräfte überwiegen und das Material auseinandertreiben?
    - Liegt das Kristallwasser in Salzen üblicherweise an Kationen oder Anionen koordiniert vor? Wie lässt sich der Trend erklären? Gibt es Strukturen mit untypisch koordiniertem Kristallwasser? Tipp: Salze mit vielen Kristallwassermolekülen pro Formeleinheit untersuchen.
    - Lagern sich  $\text{H}_2\text{O}$ -Moleküle in Kristallen eher wie Dipole an die Ionen oder eher, wie man das von Wasserstoffbrücken her kennt? Lohnenswertes Untersuchungsobjekt ist Kupfer(II)-sulfat Pentahydrat. Unterschiedliche Positionen untersuchen!
- Weitere Fragestellungen zur selbständigen Bearbeitung durch die SuS finden sich auf den Seiten *Stereochemie*, *Dipolmoleküle und Wasserstoffbrücken in Kristallen*, *organische Nomenklatur*, *Salzkristalle auf Teilchenebene* untersuchen, *Repetition Stofflehre*, *Silikate*. Manche Aufgaben sind differenzierter ausgearbeitet, andere eher (im Unterricht bewährte) Entwürfe. Bei einigen Seiten erfolgt eine automatische Meldung an die Lehrperson, welche Aufgaben wie gut gelöst wurden.
- Dank der 3D-Ansicht können relativ komplexe Sachverhalte anschaulich dargestellt werden (auch für Frontalunterricht). Beispiele: Auf der Molek-Seite *Lipide und biologische Membranen* bzw. *ATP Synthase* finden sich Abbildungen, die sich eignen, komplexere biochemische Fragestellungen mit SuS zu diskutieren:
  - Wie verhindert ein Kaliumkanal den Durchtritt der kleineren Natrium-Ionen – und wie kann ein Kationen-Kanal mit negativer Ladung ausgekleidet sein, ohne dass die Kaliumionen dann in diesem Kanal haften bleiben und den Kanal verstopfen?
  - Wie ermöglichen Aquaporine den schnellen Durchtritt von Wasser, ohne für  $\text{H}_3\text{O}^+$  durchlässig zu sein?

---

<sup>4</sup> Distanzen misst man, indem man zuerst auf das eine Atom und dann auf das andere doppelklickt. Mit Doppelklick-Einfachklick-Doppelklick lassen sich Winkel messen, mit zwei Einfachklicken dazwischen auch Diederwinkel.

- Wie schafft es die ATP-Synthase, nur aus einem Konzentrationsunterschied nutzbare Energie zu gewinnen?
- ...

## Hybridorbitale

Mit JSmol lassen sich Hybridorbitale darstellen (Register *LCAO*). Wer nach Einführung des Kimball-Modells ein Ladungswolkenmodell für  $\pi$ -Systeme erweitern will, kann mit JSmol aussagekräftige Abbildungen erstellen. Auf der Seite  *$\pi$ -Systeme* sind meine Beispiele aufgeführt.

## Orbitale und Schwingungen

Orbitale und Schwingungen lassen sich mit JSmol nicht berechnen, aber Daten aus den verschiedensten Quantenchemie-Programmen gut darstellen. Auf der Seite *Atomorbitale*, *Molekülorbitale*, *Schwingungsmodi* finden sich Molekülorbitale, Partiaalladungen und Schwingungsmodi vieler Moleküle und Ionen, zudem auch natural bond orbitals (NBO) einiger ausgewählter Teilchen. In der Mittelschule kann diese Seite bei der Behandlung von IR-Spektren interessant sein. Zuerst auf der Seite gibt es einige vorbereitete Sequenzen.

Beispiele für Fragestellungen:

- Welche Schwingungen weisen in Propen eine hohe Frequenz auf, welche eine tiefe?
- Aufspaltung von Peaks: Beispiel H-Streckschwingungen in Methanal
- Stabilität von Hexa-1,3,5-trien und Benzol
- Weshalb zerfallen angeregte Zustände von Polyenen schnell, bei Chlorophyll viel langsamer?
- NBO und NLMO: wie kann man sich die aus Hybridorbitalen gebildeten Orbitale vorstellen? Weshalb gibt es kein Dihydroxymethan? Wie kann man eine intramolekulare  $H^+$ -Übertragung beschreiben (Malondialdehyd)?

## Animationen

Auf der Molekularium-Seite *Vorgänge* finden sich Beispiele für zwei verschiedene Arten von Animationen:

- Reaktionsabläufe 3D betrachten.
- Konformationsänderung Cyclohexan: Diese Animation beruht auf einer Serie von Modellen mit Atompositionen, die nacheinander abgespielt werden wie Frames bei einem Film. Man kann zwar das Modell drehen, Atome neu einfärben etc, aber wenn man die Positionen von einzelnen Atomen verschiebt, sind sie im nächsten Frame wieder am alten Platz. Immer kann man auch hier denselben Ablauf aus unterschiedlichen Positionen betrachten.
- Demgegenüber werden bei der Animation zum Ringschluss von Glucose während der Animation die Operationen an den Atome direkt vorgenommen: Bindungen werden gedreht, Atome verschoben etc. Wenn man in eine solche Animation eingreift, kann sie einen anderen Verlauf nehmen mit einem anderen Resultat.

### Beispiele für Fragestellungen im Unterricht

- Alternative für eine Diskussion von Reaktionsabläufen an 3D-Modellen.
- Welche Reaktionstypen laufen beim Ringschluss von Glucose bei den einzelnen Teilschritten ab. Spezifiziere die Teilchen so genau wie möglich (welches ist die Säure, die Base, das Nukleophil, ...)
- Bei offenkettiger Glucose erhält das C-Atom der Aldehydgruppe die Nummer (Lokant) 1.

- Wo befindet sich dieses C-Atom nach dem Ringschluss? Worin unterscheidet sich seine unmittelbare Umgebung von derjenigen der andern C-Atome bzw. wie erkennt man das C-Atom mit Nummer 1 in ringförmigen Zuckern?
- DNS weist ein 5' und ein 3'-Ende auf. In der Figur *DNA beschriftet* im Abschnitt zur DNA auf der Seite *Kristallstrukturen* sind diese Enden beschriftet. Was haben diese Bezeichnungen mit der Nummerierung der C-Atome in Glucose zu tun? Sind die beiden mit A und B beschrifteten Enden von DNA-Strängen 5' oder 3'-Enden?

## Eine eigene JSmol-Seite gestalten

Im Ordner `jmolStarter` findet sich eine Webseite mit funktionstüchtigem JSmol. Die Einbindung des Applets benötigt nur eine einzige Zeile, die bewirkt, dass der Browser die jeweils benötigten Applet-Komponenten von einer Webseite herunterlädt. Zudem enthält die Seite eine Reihe von Beispielen, die zeigen, wie man mit HTML-Elementen auf die Applet zugreifen kann, und einige Dateien, die man zB. mit `drag&drop` auf das JSmol-Fenster ziehen und dann bearbeiten kann.

Ich möchte das eigene Experimentieren mit JSmol sehr empfehlen. Generell empfiehlt es sich, kompliziertere Funktionen in Javascript und nicht in der JSmol-Skriptsprache zu programmieren, da letztere immer wieder ziemlich überraschendes Verhalten zeigt, wohl eine Folge davon, dass derselbe Programmcode automatisch sowohl Java- als auch Javascript-Versionen generiert.