आओ सीखें जेमोल

जेमोल के बारे में

- JMOL एक ओपन-सोर्स सॉफ्टवेयर है जोकि 3D/त्रिविमि आकृति आणविक मॉडल / रसायनिक संरचना बनाने के लिए इस्तेमाल किया जाता है
- इसका उपयोग विंडोज, मैक ओएस एक्स, और लिनक्स / यूनिक्स सिस्टम पर किया जा सकता है।
- इसके लिए जावा एप्लिकेशन की आवश्यकता होती है जो डेस्कटॉप पर चलता है
- बनाई गई संरचनाओं को वेब पृष्ठों में एम्बेड किया जा सकता है

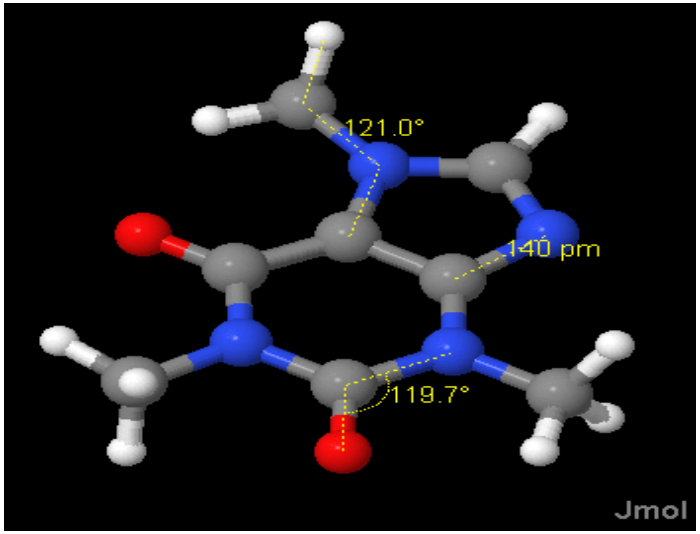
- JSmol एक जावास्क्रिप्ट ढांचा है जो वेब डेवलपर्स को ऐसे पेज बनाने की अनुमति देता है ।
- प्रोटीन डेटा बैंक (PDB) और रासायनिक मार्कअप भाषा (CML) सहित रासायनिक फ़ाइल स्वरूपों की एक विस्तृत श्रृंखला का समर्थन करता है
- अणु के दृश्य प्रतिनिधित्व को नियंत्रित करने के लिए स्क्रिप्टिंग भाषा का उपयोग किया जा सकता है

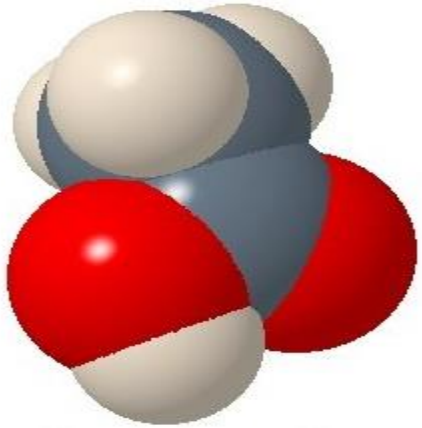
- 16 भाषाओं में उपलब्ध है
- इसका उपयोग छात्रों, शिक्षकों और शोधकर्ताओं द्वारा रसायन विज्ञान, जैव रसायन, आदि में किया जा सकता है।
- कई 3 डी दृश्य / आभासी वास्तविकता / 3 डी प्रिंटर प्रारूप आदि निर्यात किये जा सकते हैं ।
- अणुओं की संरचना का अधिक सटीक परिप्रेक्ष्य।

3D नमूने समझने के चार तरीके

- वायरफ्रेम/ ढांचागत मॉडल
- स्टिक मॉडल
- बॉल और स्टिक मॉडल
- स्पेस फिलिंग /स्थानीय पूरक मॉडल

संरचनाओं के विभिन्न दृश्य

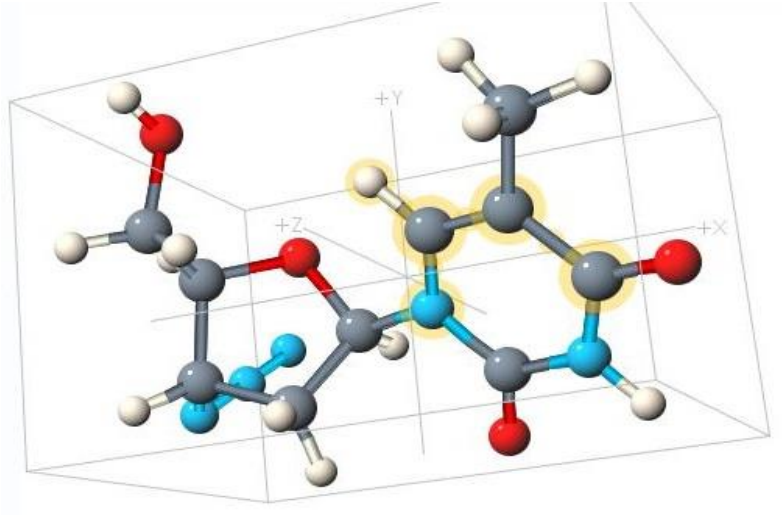


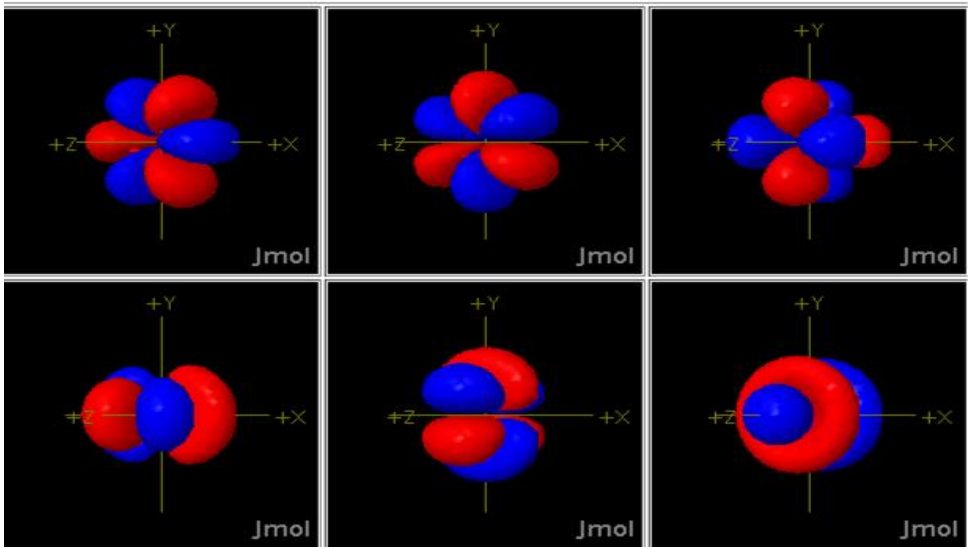


कोण

मापन

बाउंडिंग बॉक्स का प्रदर्शन



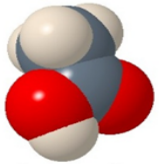


4f-ऑर्बिटल्स

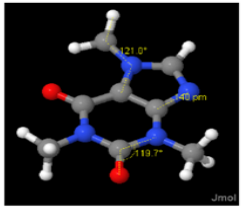
नमूना Jmol गैलरी

http://jmol.sourceforge.net/screenshots/

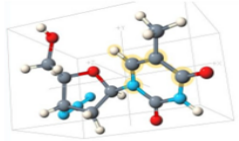
Not secure | jmol.sourceforge.net/screenshots/



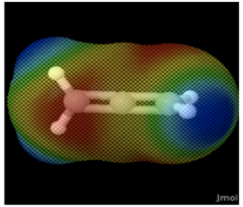
Acetic acid using CPK colors and spacefilled atoms.
Ácido acético usando colores CPK y átomos como esferas.
Acide acétique utilisant les couleurs CPK et des atoms remplis.



A shaded rendering of caffeine, with some measurements shown (distance, angle, dihedral).
Una representación sombreada de la cafeína, mostrando algunas mediciones (distancia, ángulo, ángulo diedro).
Un rendu avec ombre de la caféine, avec quelques mesures affichées (distance, angle, dihèdre).

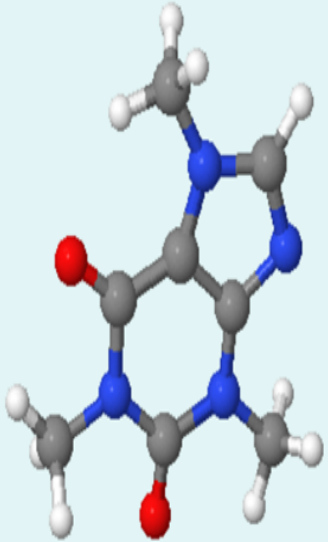


Display of bounding box and axes of coordinates space. Note the transparency of the yellow halo around selected atoms.
Representación de la caja limitante y los ejes de las coordenadas espaciales. Observa la transparencia del halo amarillo alrededor de los átomos seleccionados.
Affichage de la boîte englobante et des axes du système de coordonnées. Il faut noter la transparence du halo jaune autour des atomes sélectionnés.



The electrostatic potential of allene mapped onto a translucent surface.
Potencial electrostático del aleno, mapeado sobre una superficie translúcida.
Le potentiel électrostatique de l'***allene*** mappé sur une surface translucide.
(Nick Greeves)

http://jmol.sourceforge.net/demo/



JSmol

Representation of atoms

This is caffeine

The Jmol scripting language has two synonymous commands to control atom size, **spacefill** and **cpk** (for Corey, Pauling, and Koltun). The commands are aliases and run exactly the same code.

- spacefill on *or* cpk on *or* spacefill 100%
- spacefill off *or* cpk off *or* spacefill 0 *or* spacefill 0%

As an extension to the RasMol scripting language, Jmol allows you to specify your size as a percentage of the vanderWaals radius.

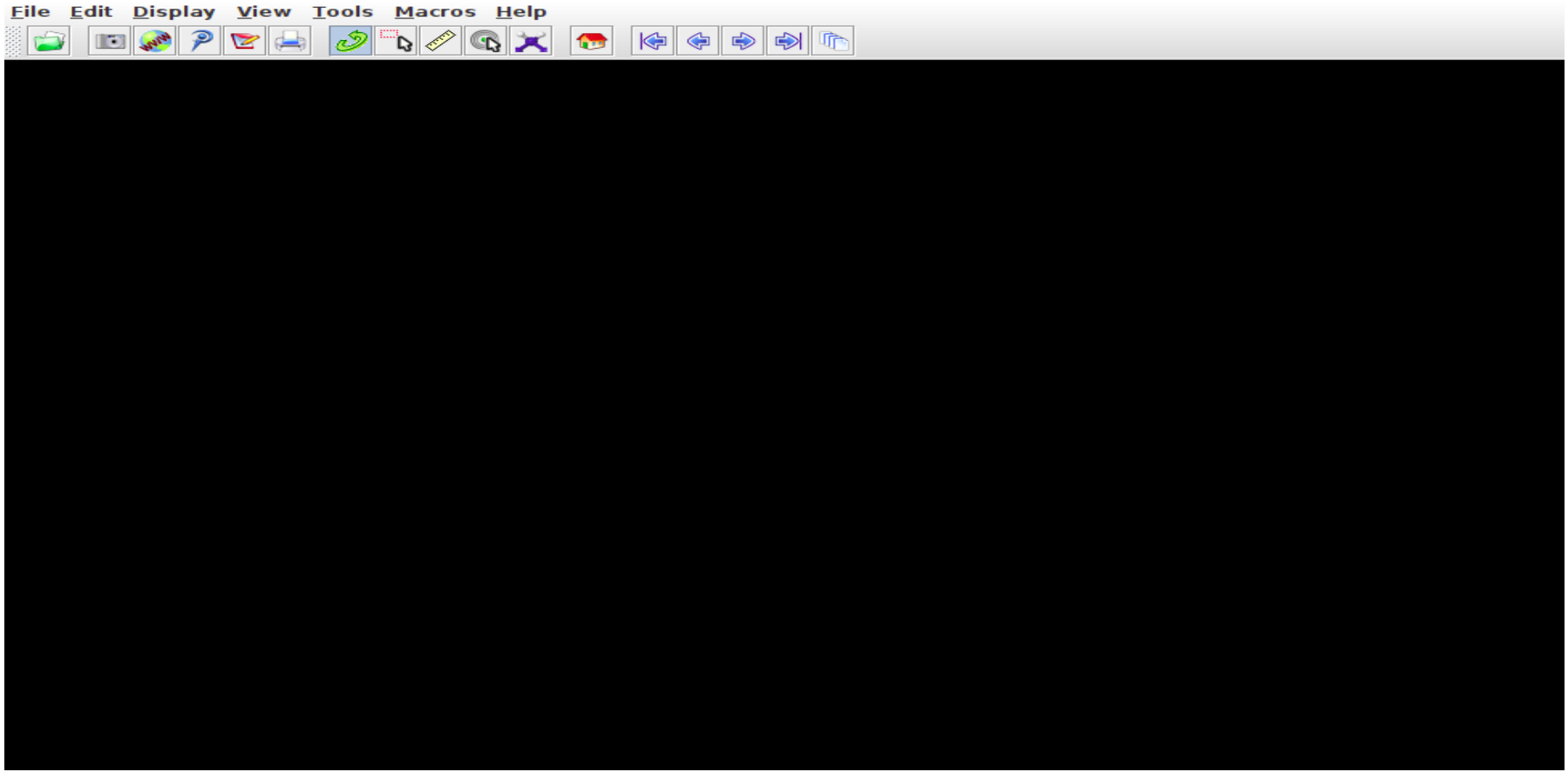
- (•) spacefill 20% *or* cpk 20%
- spacefill 25% *or* cpk 25%
- spacefill 50% *or* cpk 50%
- spacefill 75% *or* cpk 75%

If you want to specify a fixed size then you can do so in Angstroms. Note that the last button specifies "1.0" instead of the integer "1". This is important because integer values specify *RasMol units (1/250th Angstrom)*

चर्चा के लिए बिंदु

- Jmol पैनल, मेन्यू बार, टूलबार
- सरल कार्बनिक अणुओं का मॉडल
- अन्य परमाणुओं के साथ प्रतिस्थापित करके विभिन्न अणुओं का निर्माण
- अणुओं के स्थिरीकरण के लिए ऊर्जा को कम करना
- बनाई गई संरचना को सेव करना
- परमाणुओं और बंधों को जोड़ना और हटाना
- बनाए गए अणुओं की आबंध लम्बाई और कोणों का पता लगाना

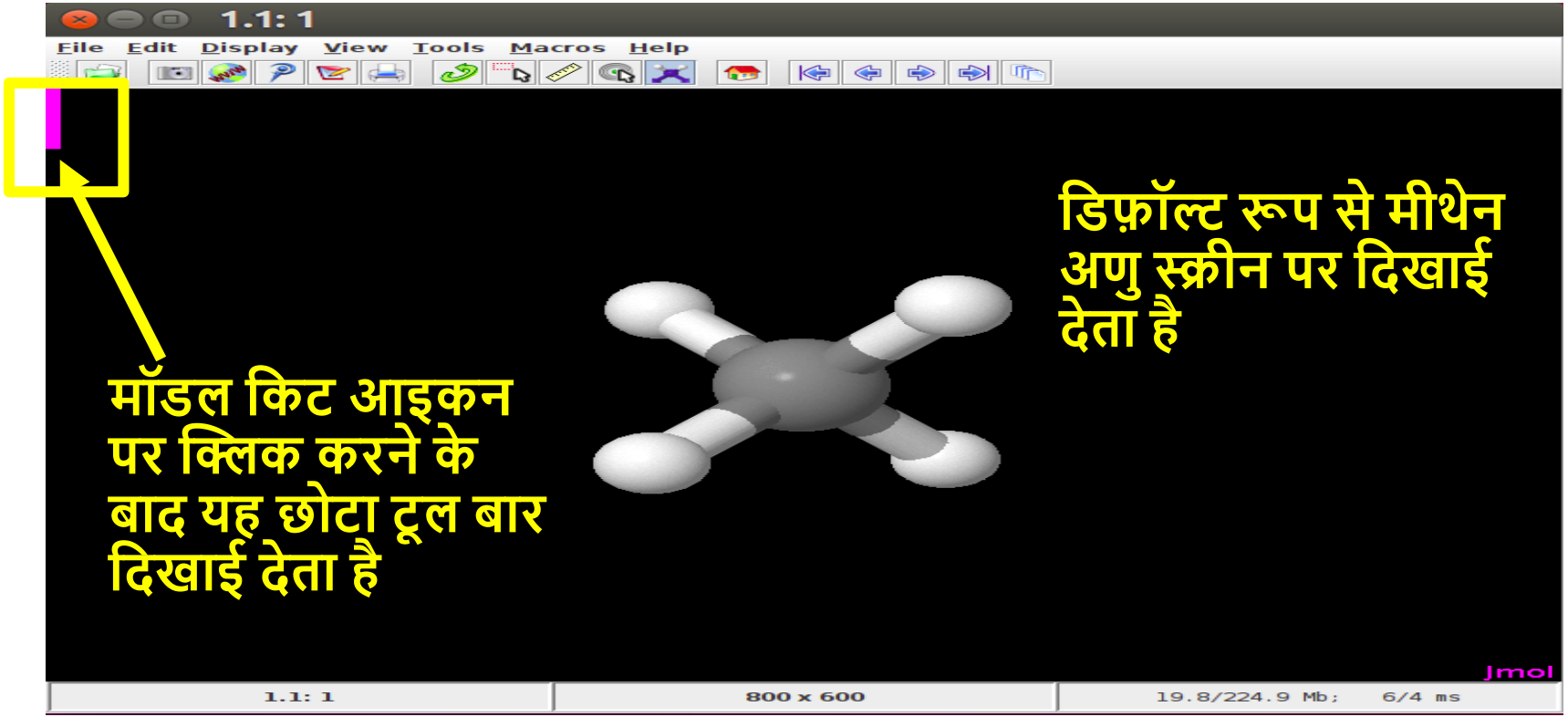
Jmol सॉफ्टवेयर



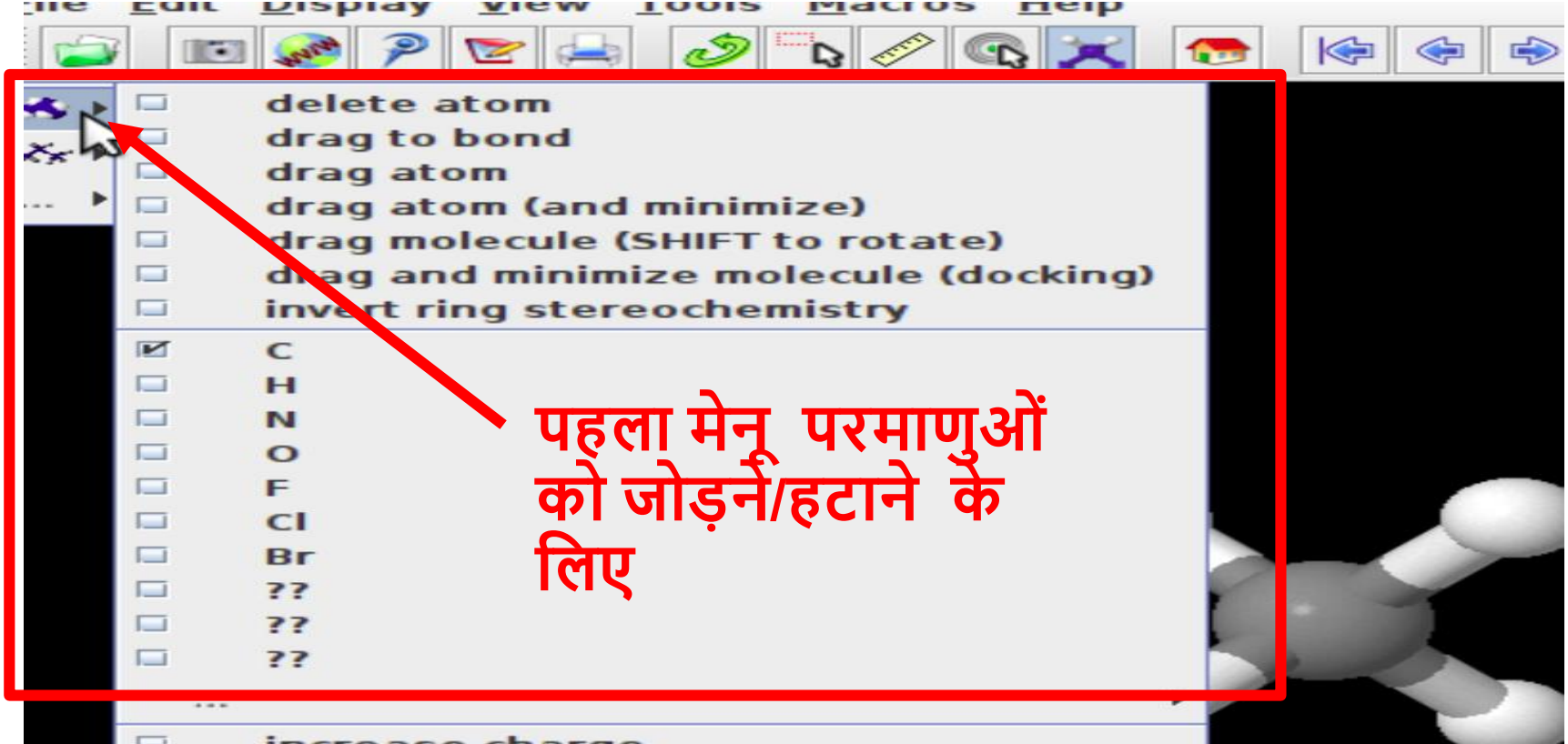
टूल / मेनू बार

नई फ़ाइल खोलें
File Edit Display View Tools Macros Help
सेव इमेज
अणु को घुमाएं
मॉडल किट मेनू

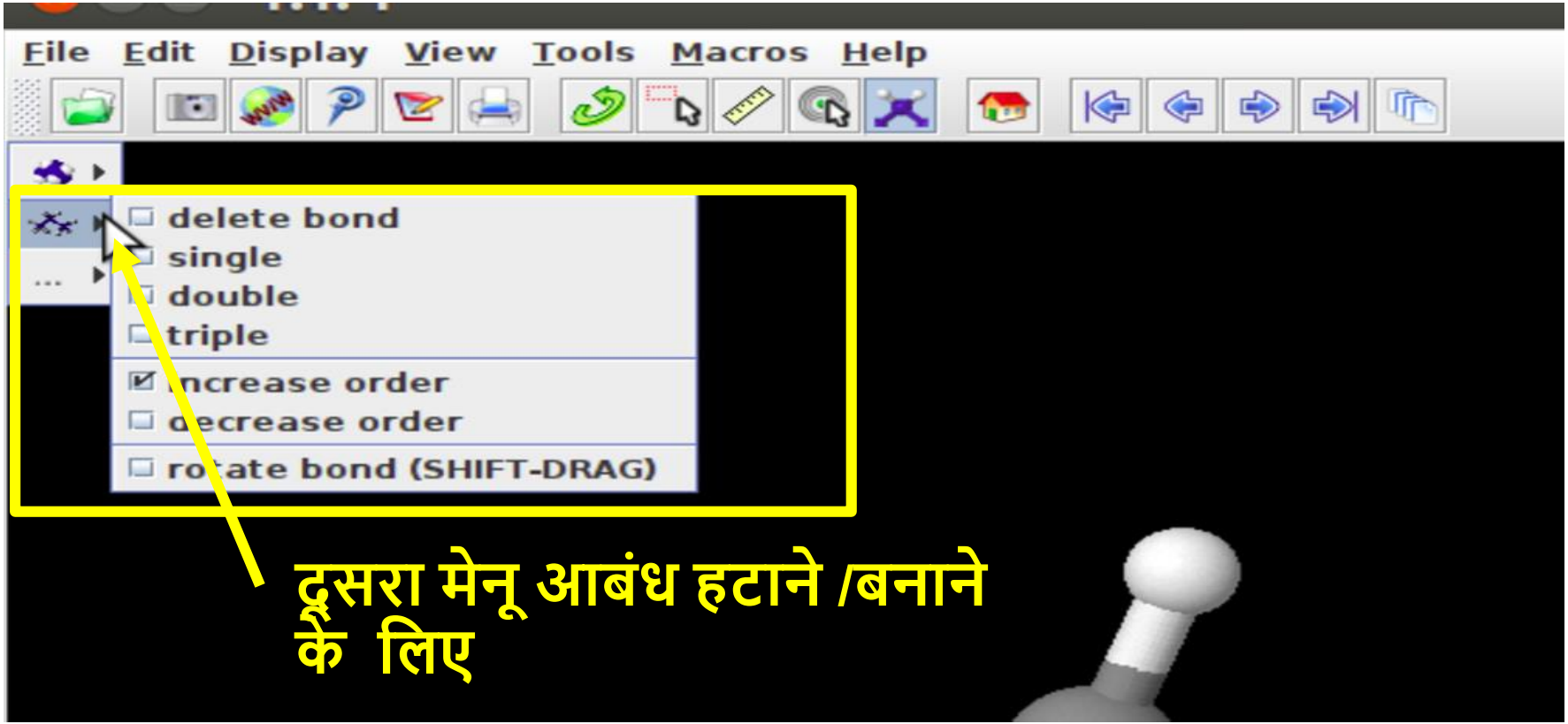
संरचना बनाने के लिए मॉडल किट चिह्न का उपयोग



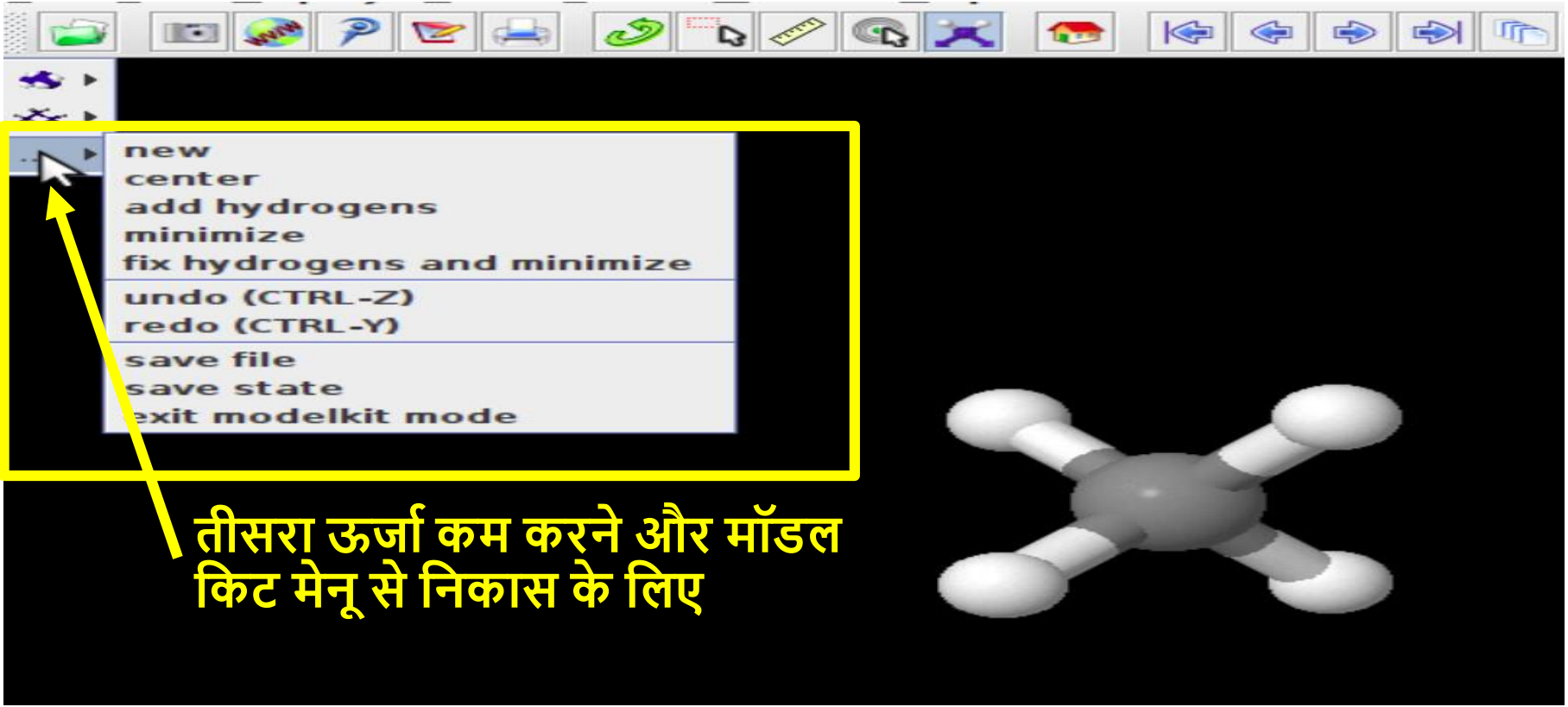
मॉडल किट मेनू के टूल्स
1. परमाणु को जोड़ने / हटाने के लिए



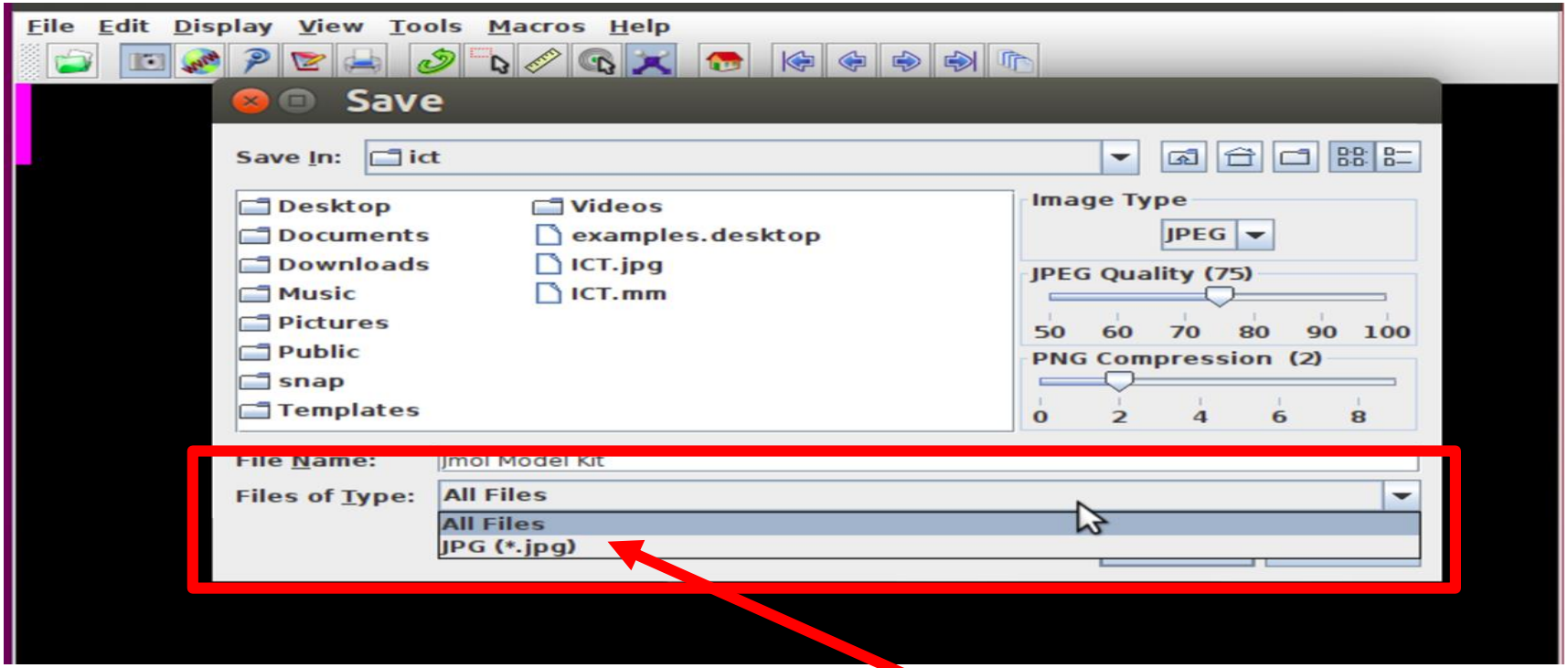
बॉन्ड बनाने के लिए


File Edit Display View Tools Macros Help
delete bond
single
double
triple
increase order
decrease order
rotate bond (SHIFT-DRAG)
दूसरा मेनू आबंध हटाने /बनाने के लिए

ऊर्जा कम करने और मॉडल किट मेनू से निकास के लिए



फाइल को इमेज की तरह सेव करना



फाइल को इमेज की तरह सेव करना

रंग, सतहों, भाषा, अणुओं की लेबलिंग के लिए मेनू