

Orfeus

MOSTER

Michael Ringgaard, Orfeus

September 1990

MOSTER

Referencemanual

MOSTER

3D molekylemodeller

Version 1.07 - september 1990

Udviklet af Michael Ringgaard, Sunset Software for

Orfeus

Graham Bells Vej 1A
8200 Århus N

ISBN 87-89567-05-6

Copyright © 1990 *Orfeus*

Werks Offset · Tlf. 86 19 11 39

Indholdsfortegnelse

Introduktion	1
Faciliteter i MOSTER	1
Musen	1
Opstart og afslutning af MOSTER	1
Skærmopbygning	2
Terminologi	5
 Atomer	 7
Tilføj atom	7
Fjern atom	8
 Markeringer	 9
Marker alle	9
Annuller mærkning	10
Inverter mærkning	10
Marker atomtype	10
Marker naboer	11
Marker fragment	11
Marker F-bindinger	12
Marker origo	12
 Kamera	 13
Flytning	13
Rotation	13
Rotation om x-aksen	14
Rotation om y-aksen	14
Rotation om z-aksen	14
Rotation om binding	15
Zoom	15
Zoom ind	15
Zoom ud	15

Bindinger	17
Lav binding	17
Fjern binding	18
Ændring af bindingstype	18
Enkeltbinding	18
Dobbeltbinding	19
Trippelbinding	19
Sæt bindingslængde	20
Torsion om binding	21
Sæt torsion	21
 Grupper	 22
Tilføj gruppe	22
Gem gruppe	22
Hent gruppe	23
Slet gruppe	23
Hent gruppetabel	24
Gem gruppetabel	24
 Fragmenter	 25
Gem fragment	25
Fjern fragment	26
 Molekyler	 27
Nyt molekyle	27
Hent molekyle	28
Gem molekyle	28
Gem i MOBILE-format	28
Udskriv molekyle	29
Skjul atomer	29
Vis alle atomer	30
Sæt titel	30
Sæt origo	30

Tutor	31
Start tutor	31
Afslut tutor	32
Genstart tutor	32
Check molekyle	32
Næste opgave	33
Vælg ny opgave	33
Vis opgave	34
 Opsætning	 35
Kuglemodel	35
Stregmodel	35
Perspektiv	36
Plan	36
Vis hydrogen	37
Vis labels	37
 Appendiks A: Installation	 38
Installation	38
Mus	39
Dansk tegnsæt	39
 Appendiks B: TUTBUILD	 40
 Appendiks C: Atomtabel filformat	 41
Format af ELEMENTS.TAB	41
Oversættelse af atomtabel	43
Grammatik	43
 Appendiks D: Printer definitioner	 44
Format af PRINTERS.DEF	44
 Appendiks E: MOSTER i kemi-undervisningen	 46

Introduktion

Faciliteter i MOSTER

MOSTER er et grafik-baseret værktøj til at opbygge tredimensionale modeller af molekyler. Modellerne kan enten være kugle- eller stregmodeller. Opbygningen foregår interaktivt ved hjælp af en mus. Man starter med en grundstruktur (et methanmolekyle), som man udbygger ved at udskifte hydrogen med atomer af andre typer. Når der tilføjes atomer, kan der opstå åbne valenser, og disse fyldes så automatisk ud med hydrogen. I stedet for at udskifte et hydrogen med et andet atom, kan man udskifte med en gruppe af atomer (f.eks. en alkoholgruppe). Modellen kan så drejes og flyttes, således at den kan ses fra alle vinkler.

Desuden indeholder MOSTER en Tutor, således at læreren kan lægge en række opgaver ind, som hver går ud på at opbygge et bestemt molekyle. Eleven opbygger så molekylerne og kan få checket, om disse er rigtigt opbygget.

Musen

Næsten al brug af MOSTER foregår ved at klikke med musen forskellige steder på skærmen. MOSTER kræver en Microsoft (TM) kompatibel mus med mindst to knapper, samt at det er installeret en Mouse Driver (se Appendiks A). Hvis ikke andet er nævnt, er et klik med musen altid med venstre knap på musen.

Opstart og afslutning af MOSTER

MOSTER startes ved at taste *MOSTER* når man står i DOS-prompten. Man kan angive forskellige argumenter på kommandolinien, og den fulde syntaks for MOSTER kommandoen er:

```
MOSTER [/O <tal>] [/G <filnavn>]
```

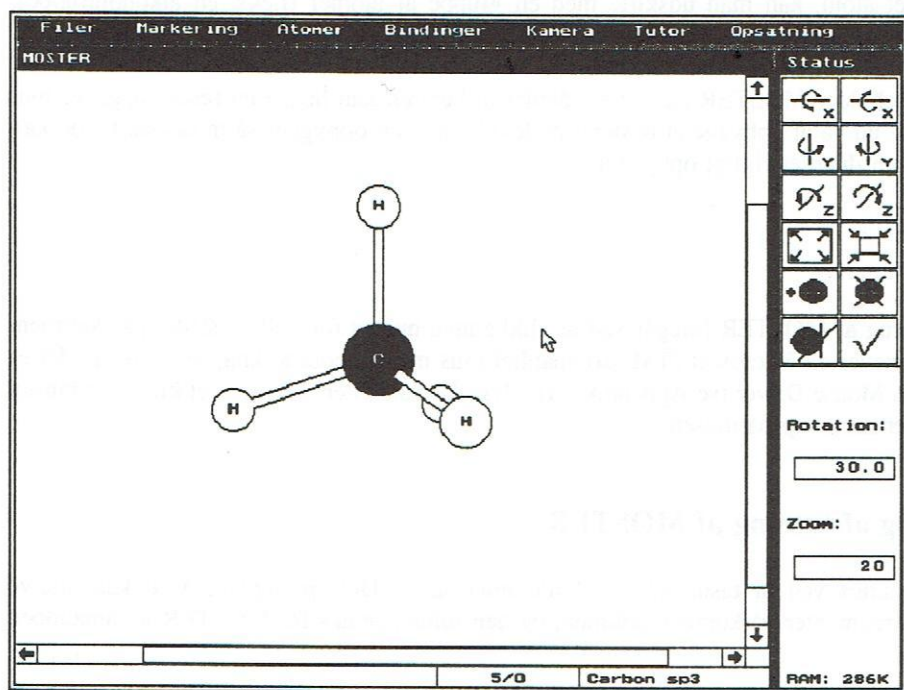
Hvis man angiver en /O parameter efterfulgt af et tal, kan man ændre på det maksimale antal objekter (atomer og bindinger), man kan have i et molekyle. Hvis ikke andet angives, er 500 objekter standard, men alle værdier mellem 1 og 2000 kan vælges.

Hvis man angiver en /G parameter efterfulgt af et filnavn på en gruppetafel, kan man bestemme, hvilken gruppetafel der skal hentes ind fra starten. Hvis ikke andet angives, er gruppetafellen *STANDARD.GRP*.

Når MOSTER startes, kommer en intro-dialogboks op på skærmen, hvor bl.a. versionsnummer er angivet. Ved rapportering af fejl, skal dette nummer opgives. Der klikkes på *Fortsæt*. Herefter vises et methanmolekyle i modelvinduet, og man er så klar til at begynde at opbygge molekylemodeller.

Når man ønsker at forlade MOSTER, vælges *Slut* i filmenuen. Hvis man har lavet ændringer i molekylemodellen, som ikke er gemt på en fil, kommer en dialogboks op, som giver mulighed for at fortryde afslutning af programmet. Hvis man ønsker at afslutte alligevel, klikkes på *Ja*.

Skærmopbygning



Figur 1. Skærbilledets udseende, når MOSTER startes.

I figur 1 ses hvordan skærmopbygningen er i MOSTER. De forskellige felter har følgende funktioner:

1. Dette er modelvinduet. Her vises det molekyle som er under opbygning. Man kan klikke på de enkelte atomer og bindinger.

Hvis man klikker med venstre knap på musen, vil atomet eller bindingen blive markeret. Hvis det var markeret i forvejen, vil markeringen blive slettet. Se også side 9.

Hvis der klikkes med højre knap på musen på et hydrogenatom, vil dette blive udskiftet med den atomtype eller gruppe, som er vist i felt 7.

Hvis man klikker med højre knap på musen på en binding, vil bindingen skifte bindingstype. Hvis det er en enkeltbinding, man klikker på, vil denne blive lavet til en dobbeltbinding, ellers vil den blive lavet til en enkeltbinding.

2. Dette er menulinien. Hvis der klikkes på en af felterne i menulinien, vil der fremkomme en rullegardin-menu. I disse menuer kan man så vælge forskellige funktioner.
3. Dette er ikonboksen. De hyppigst anvendte funktioner, som findes i menuerne, kan også vælges ved at klikke på ikonerne i felt 3. Ikonerne svarer til følgende funktioner i menuerne:

- | | |
|---------------------------|---------------------------|
| 1) Roter om x-aksen (pos) | 2) Roter om x-aksen (neg) |
| 3) Roter om y-aksen (pos) | 4) Roter om y-aksen (neg) |
| 5) Roter om z-aksen (pos) | 6) Roter om z-aksen (neg) |
| 7) Zoom ind | 8) Zoom ud |
| 9) Tilføj atom | 10) Fjern atom |
| 11) Fjern markering | 12) Check molekyle |

4. Under og til højre for modelvinduet findes to rullebjælker. Disse bruges til at flytte molekylemodellen til højre og venstre, og op og ned. Man kan enten klikke på pilene for at flytte et halvt skærbillede eller klikke i det grå eller hvide område for at flytte til et bestemt sted. Den hvide boks angiver hvilket udsnit af molekylet, som vises på skærmen.
5. I dette felt vises titlen på molekylet (se under *Sæt titel*).
6. I dette felt vises hvor mange atomer, der er i molekylet, og hvor mange af disse som er skjulte (se *Skjul atomer*).
7. I dette felt vises standard atomtype eller gruppe. Hvis man klikker på et hydrogenatom i modelvinduet med højre knap på musen, vil dette hydrogen blive udskiftet med standard atomtype eller gruppe. Standard atomtype eller gruppe bliver automatisk sat, når man vælger en atomtype eller gruppe med funktionerne *Tilføj atom* eller *Tilføj gruppe*.

8. Dette er en inputboks, som indeholder den vinkel i grader, der benyttes af rotationsfunktionerne.
Indholdet i en inputboks ændres ved at klikke på boksen, hvorefter man kan rette i indholdet ved hjælp af tastaturet.
9. Dette felt er også en inputboks. Her angives, hvor mange procent der skal zoomes ind eller ud. Der kan benyttes værdier mellem 1 og 99.
10. Her angives hvor meget af RAM-lageret, der ikke er brugt - angivet i kilobytes. Denne værdi skal helst ikke komme under 50K. Hvis man kommer under 50K, lyder et bip, og feltet skrives med rødt.

Terminologi

I MOSTER har visse termer en speciel betydning, som enten afviger en smule fra deres normale betydning inden for kemi eller ofte benyttes i MOSTER. Disse termer er:

Gruppe

I MOSTER er en gruppe et molekyle, hvor der er defineret et specielt hydrogenatom, som angiver bindingspunktet for gruppen. Når funktionen *Tilføj Gruppe* benyttes på et hydrogenatom, vil gruppen og molekylet blive forbundet i bindingspunktet.

Fragment

Et fragment er en delmængde af atomer i et molekyle. Fragmentet er bundet til de resterende atomer med netop en enkeltbinding.

Nabo

Et atoms naboer er de atomer, som er direkte forbundet til atomet med en binding. En bindings naboer er de to atomer, som bindingen forbinder.

Forceret binding

Når man skal lave en ring, lukkes ringen ved at lave en eksplicit binding mellem to atomer. Sådant en binding kaldes en forceret binding. Forcerede bindinger er elastiske, forstået på den måde, at bindingslængde og bindingsvinkel ændres, hvis naboatomerne ændrer position i forhold til hinanden.

Origoatom

Der findes netop ét origoatom i hvert molekyle. Alle andre atomer er placeret ud fra origoatomets placering. Det er kun i sjældne tilfælde, det er nødvendigt at bekymre sig om, hvilket atom som er origoatomet. I funktionen *Marker Fragment* har det dog en betydning.

Torsion

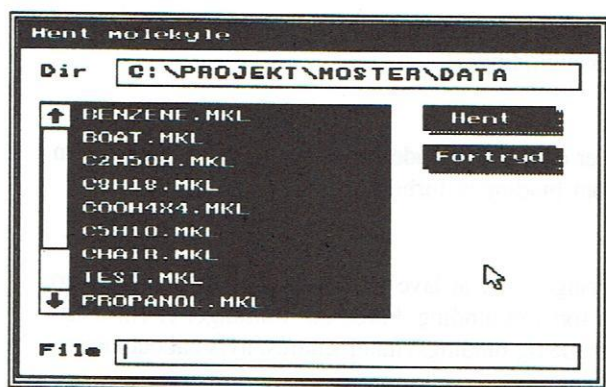
Hver binding i atomet har en torsionsvinkel. Denne vinkel angiver, hvor meget bindingen vrides. Nulpunktet er defineret ud fra vinklen mellem de planer, som udspændes af bindingen selv og en nabobinding. Dette nulpunkt har sjældent nogen praktisk betydning, så det er ofte mere interessant at se på ændringer i torsionen i stedet for selve torsionsvinklen.

Atomtype

Atomtype betyder næsten det samme som et grundstof, f.eks. hydrogen eller carbon. Den eneste forskel er, at der, for f.eks. carbon, findes flere forskellige typer af hvert grundstof. Carbon findes f.eks. både i sp^2 og sp^3 udgaver.

Fil-dialogboks

En fil-dialogboks benyttes til at vælge en fil. Den består af en filliste, et underkatalog-inputfelt og et filnavn-inputfelt. Man kan enten klikke et filnavn i listen eller skrive det i filnavn-inputfeltet. Hvis man ønsker at skifte underkatalog, kan man enten klikke på navnet i listen eller skrive det nye underkatalog i underkatalog-inputfeltet. Kataloger er angivet i firkantede parenteser i fillisten. Man afslutter dialogboksen ved enten at klikke i det øverste valgfelt eller taste <Retur>, når tekst-markøren er i filnavn inputfeltet. Hvis man fortryder den funktion, man er i gang med, klikkes i *Fortryd* feltet.



Figur 2. Eksempel på en fil-dialogboks

Atomer

Opbygningen af molekylemodellerne i MOSTER foregår ved, at man udskifter hydrogen med andre atomtyper. Når ét hydrogen udskiftes med en anden atomtype, som har mere end en binding, fyldes de resterende bindinger på det nye atom med hydrogen.

Tilføj atom

Placering:

Denne funktion findes både i atomer-menuen og som ikon.

Forudsætninger:

Før *Tilføj atom* udføres, skal et hydrogen-atom være markeret. Bemærk, at der ikke må være flere atomer markeret.

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, fremkommer en atomtype-dialogboks. Her kan man klikke den atomtype, man ønsker, hvorved den bliver fremhævet. Herefter klikkes på *OK*, og hydrogen-atomet udskiftes da med et nyt atom med den valgte atomtype. Hvis dette atom har mere end én binding, vil resten blive fyldt op med hydrogen-atomer. I stedet for *OK* kan man klikke på *Fortryd*, hvilket betyder, at funktionen annulleres.

Fejlmeddelelser:

- Intet atom markeret
- Mere end et atom markeret
- Markeret atom ikke hydrogen

Fjern atom

Placering:

Denne funktion findes både i atomer-menuen og som ikon.

Forudsætninger:

Før *Fjern Atom* udføres skal, netop ét atom være markeret. Dette atom må højst have én nabo, som ikke er hydrogen, og atomet skal være enkeltbundet til denne nabo. Hvis man skal fjerne mange atomer fra et molekyle, er det ofte lettere at benytte funktionen *Fjern fragment* i atomer-menuen.

Beskrivelse:

Det markerede atom fjernes og udskiftes med et hydrogen-atom.

Fejlmeddelelser:

Intet atom markeret

Mere end et atom markeret

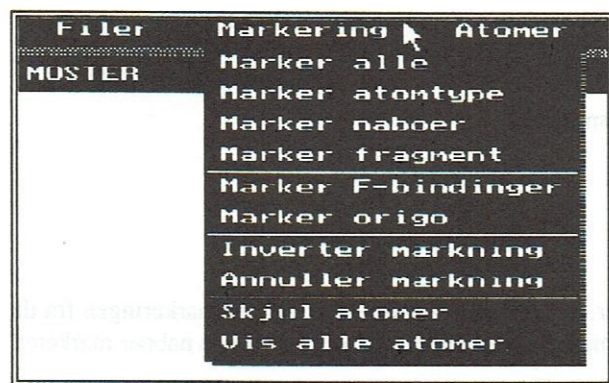
Dette atom kan ikke fjernes

Markeringer

Mange af funktionerne i MOSTER virker på de atomer og bindinger, der er markeret. Den simpleste måde at markere atomer og bindinger på er ved at klikke på dem i modelvinduet. Hvis det klikkes på et atom, vil det blive markeret, hvis det ikke er markeret i forvejen. Hvis det var markeret, vil markeringen blive fjernet.

Når et atom markeres, enten enkeltvis som ovenfor eller v.h.j.a. nedenstående funktioner, vil bindinger til naboer, der er markeret, også blive markeret. Når en binding markeres, bliver naboatomerne også markeret. I stregmodellen kan man kun markere atomer og ikke bindinger. En binding bliver da markeret, hvis begge naboatomer er markeret.

Skjulte atomer og bindinger er pr. definition ikke markerede. Dette er for at undgå at lave operationer på dele af molekylet, som er skjult.



Figur 3. Markeringsmenuen.

Marker alle

Placering:

Denne funktion findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

- Funktionen markerer alle atomer og bindinger i molekylet, dog ikke de atomer og bindinger, som er skjulte.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Annuler mærkning

Placering:

Denne funktion findes både i markeringsmenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen fjerner markeringen fra alle atomer og bindinger i molekylet.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Inverter mærkning

Placering:

Denne funktion findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen markerer alle de atomer, som ikke er markeret, og fjerner markeringen fra de atomer, som er markeret. Herefter markeres de bindinger, som har begge naboer markeret.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Marker atomtype

Placering:

Denne funktion findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når *Marker atomtype* vælges, fremkommer en atomtype-dialogboks. Her vælges en atomtype, hvorefter alle atomer i molekylet med denne atomtype markeres.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Marker naboer

Placering:

Denne funktion findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen markerer alle naboer til atomer, som var markeret i forvejen.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Marker fragment

Placering:

Denne funktion findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Marker fragment kræver, at der er markeret netop ét atom.

Beskrivelse:

Alle atomer, som direkte eller indirekte er forbundet til origoatomet gennem det markerede atom, vil blive markeret. Her ses bort fra forbindelser gennem forcede bindinger.

Et fragment er karakteriseret ved, at det deler molekylet op i to dele, som er forbundet med netop én binding. Denne binding kaldes separatorbindingen. Følgende procedure kan følges, hvis et fragment ønskes markeret:

- Vælg *Annuller mærkning*.
- Marker den nabo af separatorbindingen, som ikke skal være med i fragmentet.
- Vælg *Sæt origo* i atomer-menuen.
- Vælg *Annuller mærkning*.
- Marker den nabo af separatorbindingen, som skal være med i fragmentet.
- Vælg *Marker fragment* i markeringsmenuen.

Fejlmeddelelser:

Intet atom markeret

Mere end et atom markeret

Marker F-bindinger

Placering:

Funktionen findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen markerer alle de forcerede bindinger i molekylet.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Marker origo

Placering:

Funktionen findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen markerer origoatomet.

Fejlmeddelelser:

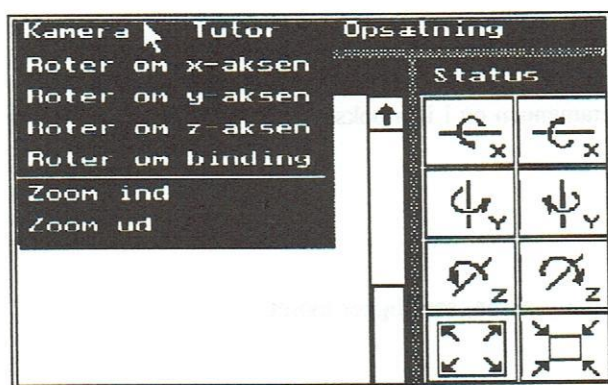
Ingen

Kamera

Det billede af den tredimensionale molekylemodel, som præsenteres i modelvinduet, er på mange punkter lig et foto, taget med et kamera. For at kunne se molekylet i alle udsnit fra forskellige vinkler, findes funktioner i MOSTER til at flytte og indstille de imaginære kamera. Disse operationer kan inddeles i tre hovedgrupper:

- Flytning
- Rotation
- Zoom

For at forstå kamerafunktionerne i MOSTER er det bedst at tænke på, at man ser molekylet gennem et kamera, som man så kan flytte, rotere og zoome ind og ud.



Figur 4. Kameramenuen - de fleste af funktionerne findes også som ikoner.

Flytning

Man kan flytte kameraet op, ned, til højre og til venstre. Dette gøres ved at benytte rullebjælkerne i bunden og i højre side af modelvinduet. Man kan klikke på pilene for at flytte i en bestemt retning, eller man kan flytte til et bestemt sted ved at klikke på det grå/hvide område mellem pilene.

Rotation

Det findes fire operationer til at rotere kameraet. Rotationsvinklen for hver funktion bestemmes af tallet i rotations-inputfeltet. Hvis man ønsker at rotere den modsatte vej, angives samme vinkel, men med modsat fortegn. Vinklen angives i grader, d.v.s. 360 grader for en hel omdrejning.

Rotation om x-aksen

Placering:

Denne funktion findes både i kameramenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, roteres der om x-aksen, som ligger vandret.

Fejlmeddelelser:

Ugyldig rotationsvinkel

Rotation om y-aksen

Placering:

Denne funktion findes både i kameramenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, roteres der om y-aksen, som ligger lodret.

Fejlmeddelelser:

Ugyldig rotationsvinkel

Rotation om z-aksen

Placering:

Denne funktion findes både i kameramenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, roteres der om z-aksen, som ligger ind i skærmen.

Fejlmeddelelser:

Ugyldig rotationsvinkel

Rotation om binding

Placering:

Denne funktion findes både i kameramenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Der skal være netop én binding markeret.

Beskrivelse:

Funktionen roterer molekylet om den markerede binding.

Fejlmeddelelser:

Ugyldig rotationsvinkel

Ingen binding markeret

Zoom

Zoom ind

Placering:

Denne funktion findes både i kameramenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen zoomer ind på samme måde som en zoomlinse på et kamera. Værdien i zoom-inputfeltet bestemmer, hvor mange procent billedet forstørres. Denne værdi skal ligge mellem 1 og 99.

Fejlmeddelelser:

Ugyldig zoomfaktor

Zoom ud

Placering:

Denne funktion findes både i kameramenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen zoomer ud på samme måde som en zoomlinse på et kamera. Værdien i zoom-inputfeltet bestemmer, hvor mange procent billedet formindskes. Denne værdi skal ligge mellem 1 og 99.

Fejlmeddelelser:

Ugyldig zoomfaktor

Bemærk, at det kan tage lang tid at opdatere modelvinduet, hvis man zoomer ekstremt tæt ind på et objekt. Hvis man fortsætter med at zoome ind, vil dette objekt forsvinde om bag kameraet. Det kan være en god ide at vælge stregmodellen, hvis man vil flytte et molekyle på plads, da opdateringen af modelvinduet er væsentlig hurtigere i stregmodellen end i kuglemodellen.

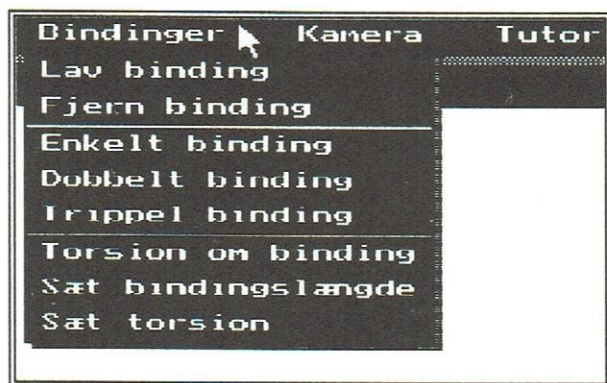
Bindinger

I MOSTER findes tre former for bindinger:

- Enkeltbinding (hvid)
- Dobbeltbinding (grå)
- Trippelbinding (sort)

Bindingsvinklerne i MOSTER er faste, og kan ikke ændres interaktivt. Man kan derimod ændre både længde og torsion for hver binding.

Der skelnes mellem almindelige bindinger og forcerede bindinger. En forceret binding bruges til at slutte en ring. En sådan binding er elastisk, forstået på den måde at den kun forbinder de to naboatomer; og længde og bindingsvinkel ændres, når de to atomer ændrer position i forhold til hinanden.



Figur 5. Menuen, der hører til bindinger.

Lav Binding

Placering:

Denne funktion findes i bindingsmenuen.

Forudsætninger:

Før funktionen vælges, må de to atomer, som skal forbindes, markeres. Desuden skal begge atomer hver være forbundet til mindst ét hydrogen-atom.

Beskrivelse:

Funktionen fjerner et hydrogen-atom fra hvert atom, og laver en forceret enkeltbinding mellem de to atomer.

Fejlmeddelelser:

Der skal være to markerede atomer
Ingen ledige hydrogen-atomer
Binding eksisterer allerede

Fjern binding**Placering:**

Denne funktion findes i bindingsmenuen.

Forudsætninger:

Før funktionen vælges, må bindingen, som skal fjernes, markeres. Det er kun bindinger, som indgår i netop én ring, der kan fjernes.

Beskrivelse:

Når funktionen vælges fjernes bindingen, og der indsættes et hydrogen-atom på hvert af de to naboatomer. Bemærk, at det ikke kun er forcerede bindinger, som kan fjernes. Hvis en almindelig binding i en ring fjernes, laves den forcerede binding i ringen om til en normal binding.

Fejlmeddelelser:

Ingen binding markeret
Mere end en binding markeret
Binding er ikke i en ring
Binding indgår i mere end én ring
Binding er ikke enkeltbinding

Ændring af bindingstype**Enkeltbinding****Placering:**

Funktionen findes i bindingsmenuen.

Forudsætninger:

Der skal være netop én binding markeret. Desuden skal bindingsformen eksistere for begge naboatomer.

Beskrivelse:

Den markerede binding ændres til en enkeltbinding. De ekstra bindinger, som opstår på naboatomerne, fyldes ud med hydrogen-atomer.

Fejlmeddelelser:

- Ingen binding markeret
- Mere end én binding markeret
- Binding allerede enkeltbinding
- Bindingsform findes ikke
- Kan ikke laves til enkeltbinding

Dobbeltbinding**Placering:**

Funktionen findes i bindingsmenuen.

Forudsætninger:

Der skal være netop én binding markeret. Desuden skal bindingsformen eksistere for begge naboatomer. Hvis bindingen i forvejen er en enkeltbinding, skal der være mindst et hydrogen-atom på hvert af naboatomerne.

Beskrivelse:

Den markerede binding ændres til en dobbeltbinding. Hvis bindingen i forvejen var en trippelbinding, vil de ekstra bindinger, som opstår på naboatomerne, fyldes ud med hydrogen-atomer.

Fejlmeddelelser:

- Ingen binding markeret
- Mere end en binding markeret
- Binding allerede dobbeltbinding
- Bindingsform findes ikke
- Kan ikke laves til dobbeltbinding

Trippelbinding**Placering:**

Funktionen findes i bindingsmenuen.

Forudsætninger:

Der skal være netop én binding markeret. Desuden skal bindingsformen eksistere for begge naboatomer. Hvis bindingen i forvejen er en enkeltbinding, skal der være mindst to hydrogen-atomer på hvert af naboatomerne. Hvis bindingen i forvejen er en dobbeltbinding, skal der være mindst et hydrogen-atom på hvert af naboatomerne.

Beskrivelse:

Den markerede binding ændres til en trippelbinding. Hvis bindingen i forvejen var en enkelt- eller dobbeltbinding, vil de ekstra bindinger, som opstår på naboatomerne, fyldes ud med hydrogen-atomer.

Fejlmeddelelser:

- Ingen binding markeret
- Mere end én binding markeret
- Binding allerede trippelbinding
- Bindingsform findes ikke
- Kan ikke laves til trippelbinding

Hvis man klikker med højre museknap på en binding, vil bindingstypen blive ændret efter følgende regler:

- Hvis bindingen er en enkeltbinding, ændres bindingen til en dobbeltbinding.
- Hvis bindingen er en dobbelt- eller trippelbinding, ændres bindingen til en enkeltbinding.

Sæt bindingslængde**Placering:**

Denne funktion findes i bindingsmenuen.

Forudsætninger:

Før funktionen vælges, skal netop én binding være markeret.

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, kommer en dialogboks op på skærmen, hvor man så kan ændre på bindingslængden, hvorefter man trykker <Retur>. Bindingslængden angives i picometer (pm).

Fejlmeddelelser:

- Ingen binding markeret
- Mere end én binding markeret

Torsion om binding

Placering:

Denne funktion findes både i bindingsmenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Før funktionen vælges, skal netop én binding være markeret.

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, ændres bindingens torsion med det antal grader, som står i rotations-inputfeltet. Dette svarer til at vride molekylet omkring den markede binding.

Fejlmeddelelser:

Ingen binding markeret

Mere end én binding markeret

Ugyldig rotationsvinkel

Sæt torsion

Placering:

Denne funktion findes i bindingsmenuen.

Forudsætninger:

Før funktionen vælges, skal netop én binding være markeret.

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, kommer en dialogboks op på skærmen, hvor man så kan ændre på torsionen, hvorefter man trykker <Retur>. Torsionen angives i grader.

Fejlmeddelelser:

Ingen binding markeret

Mere end én binding markeret

Grupper

I MOSTER er en gruppe et molekyle, hvor der er defineret et specielt hydrogen-atom, som angiver bindingspunktet for gruppen. Man kan så udskifte et hydrogen-atom med en gruppe. MOSTER har en gruppetafel, hvor grupperne gemmes. Denne gruppetafel kan gemmes på en fil og hentes ved senere lejlighed. Ved opstart indlæses gruppetafellen med filnavnet STANDARD.GRP, hvis man ikke har specificeret andet med /G muligheden i kommandolinien.

Tilføj gruppe

Placering:

Denne funktion findes både i atomer-menuen og som ikon.

Forudsætninger:

Før *Tilføj gruppe* udføres, skal et hydrogen-atom være markeret. Bemærk, at der ikke må være andre atomer markeret.

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, fremkommer en gruppetafel-dialogboks. Her kan man klikke den gruppe, man ønsker, hvorved den bliver fremhævet. Herefter klikkes på *OK*, og det markerede hydrogen-atom udskiftes da med den gruppe, man har valgt. I stedet for *OK* kan man klikke på *Fortryd*, hvilket betyder, at funktionen annulleres.

Fejlmeddelelser:

- Intet atom markeret
- Mere end ét atom markeret
- Markeret atom ikke hydrogen

Gem gruppe

Placering:

Denne funktion findes i atomer-menuen.

Forudsætninger:

Før funktionen vælges, skal netop ét hydrogen være markeret.

Beskrivelse:

Denne funktion gemmer molekylet i modelvinduet som en gruppe. Når funktionen vælges, får man præsenteret en input-dialogboks, hvor man kan angive en titel. Hvis man ikke angiver en titel, får gruppen et fortløbende nummer. Bemærk, at disse numre kan ændre sig, hvis man sletter grupper, som står længere oppe i gruppetafellen. Det markerede hydrogen-atom bruges til at bestemme, hvordan gruppen skal hæftes, når man bruger funktionen *Tilføj gruppe*.

Fejlmeddelelser:

- Intet atom markeret
- Mere end ét atom markeret
- Markeret atom ikke hydrogen
- Ikke plads til flere grupper

Hent gruppe**Placering:**

Denne funktion findes i atomer-menuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når denne funktion vælges, kommer en gruppetafel-dialogboks op på skærmen. Man vælger en gruppe ved at klikke på dens navn og klikke på *OK*. Den valgte gruppe vises så i modelvinduet. Bemærk, at det molekyle, som var i modelvinduet, før funktionen blev valgt, bliver slettet.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Slet gruppe**Placering:**

Denne funktion findes i atomer-menuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når denne funktion vælges, kommer en gruppetafel-dialogboks op på skærmen. Der vælges en gruppe ved at klikke på dens navn og klikke på *OK*. Den valgte gruppe bliver så slettet fra gruppetafellen.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Hent gruppetablel

Placering:

Denne funktion findes i filmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, kommer en fil-dialogboks op på skærmen. Der vælges et filnavn (se side 6). Gruppetablellen i denne fil hentes ind, og disse grupper kan så benyttes v.h.j.a. ovenstående operationer. Bemærk, at den tidligere gruppetablel fjernes fra hukommelsen, men ikke fra disken, så det er kun de ændringer, der er lavet, siden man sidst gemte gruppetablellen, der bliver slettet.

Fejlmeddelelser:

Fejl ved læsning

Gem gruppetablel

Placering:

Denne funktion findes i filmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, kommer en fil-dialogboks op på skærmen. Der vælges et filnavn (se side 6). Gruppetablellen gemmes så i denne fil.

Fejlmeddelelser:

Fejl ved skrivning

Fragmenter

Fragmenter i MOSTER benyttes til at klippe og klistre dele af molekyler. Et fragment er en delmængde af atomer i et molekyle, som kun er bundet til de resterende atomer med netop én enkeltbinding. Disse fragmenter kan enten gemmes som en gruppe i gruppeta-bellen, eller slettes. Hvis man ønsker at flytte en del af et molekyle til et andet sted på molekylet benyttes følgende procedure:

- Marker fragmentet (f.eks. med funktionen *Marker fragment*)
- Gem fragmentet som en gruppe med funktionen *Gem fragment*
- Fjern fragmentet med funktionen *Fjern fragment*
- Flyt fragmentet til et andet sted på molekylet v.h.j.a. funktionen *Tilføj gruppe*

Gem fragment

Placering:

Denne funktion findes i atomer-menuen.

Forudsætninger:

Før funktionen vælges, skal et fragment være markeret.

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, spørges om et navn til fragmentet. Hvis man ikke angiver noget navn, vil fragmentet få et nummer. Fragmentet gemmes i gruppeta-bellen under det nummer eller navn, det har fået. Herefter kan fragmentet benyttes som en almindelig gruppe. Hæftepunktet for fragmentet bliver den binding, som adskiller de markerede atomer fra dem, som ikke er markeret.

Fejlmeddelelser:

Intet fragment markeret

Fragment ikke bundet med enkeltbinding

Ikke plads til flere grupper

Fjern fragment

Placering:

Denne funktion findes i atomer-menuen.

Forudsætninger:

Før funktionen vælges, skal et fragment være markeret.

Beskrivelse:

Funktionen sletter de markerede atomer fra molekylet.

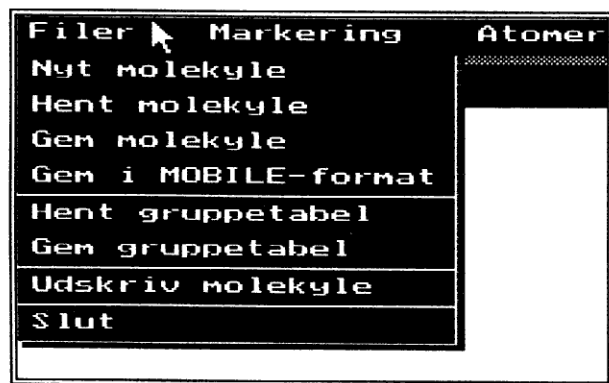
Fejlmeddelelser:

Intet fragment markeret

Fragment ikke bundet med enkeltbinding

Molekyler

Nedenstående funktioner opererer alle på det molekyle, som er vist i modelvinduet.



Figur 6. Filmenuen.

Nyt molekyle

Placering:

Denne funktion findes i filmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen sletter det molekyle, som er vist i modelvinduet, fra hukommelsen, men ikke på disken. Derved er det kun de ændringer, som er lavet efter molekylet sidst er gemt, som bliver slettet. Hvis der er lavet ændringer på molekylet siden det sidst er gemt, spørges om man virkelig ønsker at slette molekylet. Derefter vises et methanmolekyle, som man så kan bygge videre på.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Hent molekyle

Placering:

Denne funktion findes i filmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen viser en fil-dialogboks (se side 6) på skærmen. Den valgte fil læses ind fra disken og vises i modelvinduet.

Fejlmeddelelser:

Fejl ved læsning

Gem molekyle

Placering:

Denne funktion findes i filmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen viser en fil-dialogboks (se side 6) på skærmen. Molekylet i modelvinduet gemmes så i denne fil. Hvis molekylet tidligere har været hentet fra en fil, vil dette filnavn være vist i fil-dialogboksens filnavn-inputfelt.

Fejlmeddelelser:

Fejl ved skrivning

Gem i MOBILE-format

Placering:

Denne funktion findes i filmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen viser en fil dialogboks (se side 6) på skærmen. Molekylet i modelvinduet gemmes i den valgte fil i MOBILE-format. Man kan så vise en animation af molekylet v.h.j.a. præsentations-programmet **MOBILE**.

Fejlmeddelelser:

Fejl ved skrivning

Udskriv molekyle**Placering:**

Denne funktion findes i filmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen viser en dialogboks, hvor man kan vælge printertype. Det udsnit af molekylet, som er vist i modelvinduet, udskrives på printer. Udskriften kan afbrydes med <ESC>.

Fejlmeddelelser:

Ingen printer valgt

Printer ikke klar

Udskrivning afbrudt

Skjul atomer**Placering:**

Denne funktion findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen skjuler alle de atomer, som er markeret. Dette kan være en fordel, hvis man arbejder på meget store molekyler, da opdateringen af skærbilledet går hurtigere. Antallet af skjulte atomer er vist midt på skærmen foruden sammen med det totale antal atomer i molekylet.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Vis alle atomer

Placering:

Denne funktion findes i markeringsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når denne funktion vælges, vises alle atomer, som har været skjult.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Sæt titel

Placering:

Denne funktion findes i atomer-menuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen bruges til at sætte titlen på molekylet. Ved valg af denne funktion fremkommer en inputboks på skærmen, og man kan herefter rette i titlen og afslutte ved at taste <Retur>.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Sæt origo

Placering:

Denne funktion findes i atomer-menuen.

Forudsætninger:

Der skal være netop ét atom markeret.

Beskrivelse:

Funktionen sætter det markerede atom til at være origoatomet for molekylet.

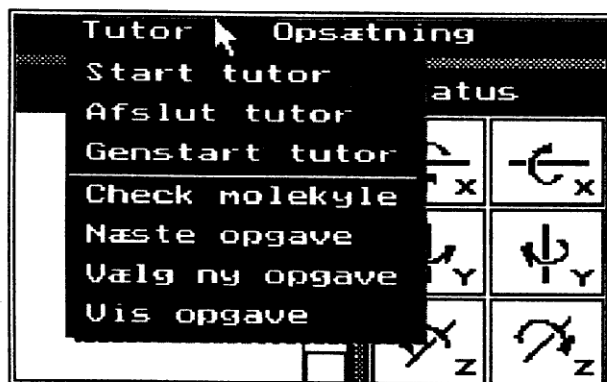
Fejlmeddelelser:

Intet atom markeret

Mere end ét atom markeret

Tutor

En tutor er en række opgaver, som alle går ud på at konstruere et bestemt molekyle. Tutoren opbygges v.hj.a. programmet TUTBUILD (se Appendiks B).



Figur 7. Tutormenuen.

Start tutor

Placering:

Funktionen er placeret i tutormenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, præsenteres en fil-dialogboks, hvor man kan vælge den tutor, man ønsker at arbejde med. Efter at tutoren er valgt, præsenteres den første opgave.

Fejlmeddelelser:

Der er ingen opgaver i denne tutor
Tutor findes ikke

Afslut tutor

Placering:

Funktionen er placeret i tutormenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Tutoren lukkes, således at man kan åbne en ny tutor. Når tutoren lukkes, slettes alle informationer om, hvilke opgaver der er løst.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Genstart tutor

Placering:

Funktionen er placeret i tutormenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Denne funktion sletter alle informationer om, hvilke opgaver der er løst. Funktionen kan bruges, hvis man ønsker at starte forfra på opgaverne i tutoren.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Check molekyle

Placering:

Funktionen er placeret i tutormenuen og i ikonboksen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Funktionen checker, om molekylet i modelvinduet stemmer overens med checkmolekylet i den opgave, man er i gang med at løse. Hvis molekylerne er ens, kan man vælge at få næste opgave præsenteret. Bemærk, at funktionen kun checker, om molekylerne er **strukturelt ens**.

Fejlmeddelelser:

Kan ikke sammenligne molekyler
Sammenligning afbrudt
Check-molekyle ikke fundet
Molekyle strukturelt rigtigt
Rigtigt antal atomer, men molekylet er forkert
For mange carbon
For få carbon
For mange hydrogen
For få hydrogen
For mange atomer
For få atomer
Molekyle forkert

Næste opgave**Placering:**

Funktionen er placeret i tutormenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Denne funktion giver mulighed for at fortsætte med næste opgave, selvom man ikke har løst den nuværende opgave.

Fejlmeddelelser:

Alle opgaver løst

Vælg ny opgave**Placering:**

Funktionen er placeret i tutormenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Når funktionen vælges, kommer en opgave-dialogboks op på skærmen. Den opgave, man er i gang med, vil være markeret; og de opgaver, som er løst, vil være markeret med et "flueben". Man kan da vælge en ny opgave ved først at klikke på opgaven, og dernæst klikke på OK.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Vis opgave**Placering:**

Funktionen er placeret i tutormenuen.

Forudsætninger:

Ingen

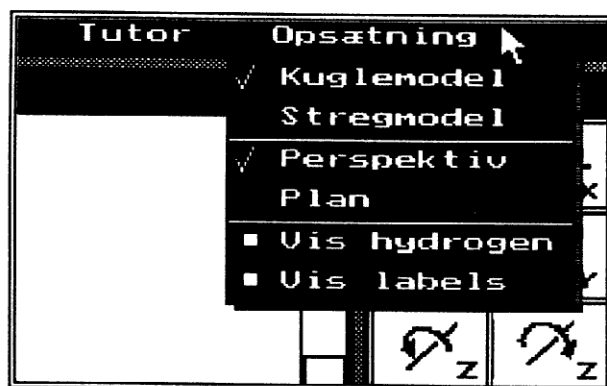
Beskrivelse:

Denne funktion viser opgaveteksten til den opgave, man er i gang med. Opgaveteksten fjernes fra skærmen ved at klikke på *OK*.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Opsætning



Figur 8. Opsætningsmenuen.

Kuglemodel

Placering:

Funktionen findes i opsætningsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Hvis denne funktion vælges, vises molekylet i modelvinduet v.h.j.a. en kuglemodel. I kuglemodellen vises atomer som kugler og bindinger som stænger. Når kuglemodellen er valgt, er der et "flueben" ud for *Kuglemodel* i opsætningsmenuen.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Stregmodel

Placering:

Funktionen findes i opsætningsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Hvis denne funktion vælges, vises molekylet i modelvinduet v.h.j.a. en stregmodel. I stregmodellen vises kun bindingerne. Hver binding har to farver, som viser hvilke atomtyper, de to naboatomer har. Når stregmodellen er valgt, er der et "flueben" ud for *Stregmodel* i opsætningsmenuen.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Perspektiv**Placering:**

Funktionen findes i opsætningsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Hvis denne funktion vælges, vises molekylet i modelvinduet i perspektiv- projektion. Når perspektiv-projektion er valgt, er der et "flueben" ud for *Perspektiv* i opsætningsmenuen.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Plan**Placering:**

Funktionen findes i opsætningsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Hvis denne funktion vælges, vises molekylet i modelvinduet i plan-projektion. Når plan-projektion er valgt, er der et "flueben" ud for *Plan* i opsætnings- menuen.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Vis hydrogen

Placering:

Funktionen findes i opsætningsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Denne funktion skifter mellem en model, hvor hydrogen-atomer vises, og en model, hvor hydrogen-atomer ikke vises. Denne funktion kan være nyttig til at danne sig et overblik over strukturen i et stort molekyle. Når der er en hvid firkant ud for *Vis hydrogen* i opsætningsmenuen, vises hydrogen-atomer i modellen.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Vis labels

Placering:

Funktionen findes i opsætningsmenuen.

Forudsætninger:

Ingen

Beskrivelse:

Denne funktion skifter mellem en model, hvor atomtypen vises på hvert atom, og en model, hvor den ikke vises. Når der er en hvid firkant ud for *Vis labels* i opsætningsmenuen, vises atomerne med atomtype.

Fejlmeddelelser:

Ingen

Appendiks A: Installation

Krav

MOSTER kræver følgende hardware og software:

- IBM PC eller kompatibel
- 640 KB RAM
- En Microsoft (TM) kompatibel mus med mindst to knapper og en Mouse Driver
- EGA eller VGA grafikkort

Filer

Følgende filer findes på MOSTER distributionsdisketten:

MOSTER.EXE	MOSTER programmet
TUTBUILD.EXE	Tutor Builder programmet (se Appendiks B)
ELEMCONV.EXE	Element Converter programmet (se Appendiks C)
ELEMENTS.TAB	Atomtabel (se Appendiks C)
ELEMENTS.TBL	Atomtabel (oversat)
BONDS.TBL	Bindingstabel (oversat)
EGAVGA.BGI	Grafikdriver
TRIP.CHR	Tegnsæt
PRINTERS.DEF	Printer definitioner
PRINTERS.DRV	Printer definitioner (oversat)
PRTCONV.EXE	Printer definition converter program
***.TUT	Tutoropgaver lavet med TUTBUILD
***.MKL	Molekyler
***.GRP	Grupper

Installation

Installation på diskette:

Filerne på distributionsdisketten kopieres over på en formateret diskette. Hvis distributionsdisketten findes i drev A og den formaterede diskette i drev B, kopieres filerne med DOS-kommandoen:

```
COPY A:\*.* B:\
```

Installation på harddisk:

Filerne på distributionsdisketten kopieres over i en nyt underkatalog. Hvis distributionsdisketten findes i drev A, og det nye underkatalog kaldes C:\MOSTER, gøres dette med følgende DOS-kommandoer:

```
MKDIR C:\MOSTER  
XCOPY A:\*.* C:\MOSTER /S
```

Hvis ordren COPY bruges, skal man huske også at kopiere underkatalog(er).

Mus

Der skal være installeret en Microsoft (TM) kompatibel mouse driver, før MOSTER startes. Dette kan gøres ved at lægge filen MOUSE.SYS eller tilsvarende i rodkataloget. Denne fil følger med på en diskette, når man køber musen. Desuden skal følgende linie indsættes i CONFIG.SYS filen:

```
DEVICE=C:\MOUSE.SYS (eller tilsvarende)
```

Konsulter dokumentationen til musen for mere detaljeret instruktion i, hvordan mouse driveren installeres.

Dansk tegnsæt

For at få danske bogstaver til at virke i MOSTER skal man i DOS version 3.20 eller mindre udføre DOS-kommandoen:

```
GRAFTABL (evt. GRAFTADK eller GRAFTADA)
```

og i DOS version 3.30 eller højere udføre DOS kommandoen:

```
GRAFTABL 865
```

Appendiks B: TUTBUILD

TUTBUILD programmet anvendes til at opbygge en tutor. En tutor er en række af opgaver, der alle som svar har et molekyle. Før man begynder at opbygge tutoren, skal man lave de checkmolekyler, som indgår i opgaverne. Disse skal ligge i det samme underkatalog, som tutoren oprettes i.

TUTBUILD startes med DOS-kommandoen:

TUTBUILD <tutorfil>

hvor <tutorfil> er filnavnet på den tutor, man ønsker at rette eller oprette. Når TUTBUILD startes, vises et skærbillede med fire felter.

- Til højre ses en liste over de opgaver, der er i tutoren. Hvis der ikke er angivet nogen titel til en opgave, får denne opgave et nummer. Den aktuelle opgave er vist med fremhævet skrift.
- Øverst til venstre er titel-inputfeltet. I dette felt angives titlen på den aktuelle opgave. Denne titel vises også i opgavelisten til højre.
- Til venstre i midten findes fil-inputfeltet. I dette felt angives filnavnet på den molekylefil, som er svaret på den aktuelle opgave. Hvis filnavnet ikke findes, gives en fejlmeddelelse.
- Nederst til venstre findes opgavetekst-inputfeltet. Heri skrives den opgavetekst, som hører til den aktuelle opgave. Der kan maksimalt angives ti linier tekst.

Følgende taster kan bruges i TUTBUILD:

F1	Indsæt en ny opgave lige over den aktuelle opgave
F2	Indsæt en ny opgave lige under den aktuelle opgave
F3	Slet den aktuelle opgave
ESC	Afslutter TUTBUILD og gemmer tutoren
TAB	Skifter mellem inputfelterne
PgUp	Skifter den aktuelle opgave til den forrige opgave
PgDn	Skifter den aktuelle opgave til den næste opgave

I inputfelterne kan benyttes normale editeringstaster til at rette i teksten.

Appendiks C: Atomtabel filformat

Format af ELEMENTS.TAB

I filen ELEMENTS.TAB findes definitioner af bindingslængder, bindingsvinkler m.v. for de forskellige atomtyper. Der er to forskellige typer definitioner: atomdefinitioner og bindingsdefinitioner. Disse kan komme i vilkårlig rækkefølge. Filen afsluttes med en linie, hvor der står END. Alt hvad der står efter et #-tegn på en linie betragtes som en kommentar. Bindingslængder angives i Ångström og bindingsvinkler i grader (360 grader pr. omdrejning).

Atomdefinitionen for Carbon sp3 med en dobbeltbinding og to enkeltbindinger ser f.eks. ud som følger:

```
ATOM 'Carbon sp3' # plan trigonal
NUMBER      6
FAMILY      60
COLOR       0
PATTERN     1
RADIUS      77
BONDS       3
BOND        2 56 (0 0 0)
BOND        1 77 (0 0 120)
BOND        1 77 (0 0 -120)
ENDATOM
```

De forskellige felter har følgende betydning:

NUMBER	Dette felt angiver atomnummeret på atomer. Carbon har atomnummer 6.																
FAMILY	Dette nummer angiver den familie, atomdefinitionen hører til. Som standard bruges ti gange atomnummeret. Dette felt bruges til at skelne forskellige typer af atomtyper med samme atomnummer, f.eks. Carbon sp2 og sp3.																
COLOR	Dette felt angiver hvilken farve atomet skal vises med på skærmen. Farverne fra 0-15 er defineret som følger: <table><tr><td>0 sort</td><td>8 mørk grå</td></tr><tr><td>1 blå</td><td>9 lys blå</td></tr><tr><td>2 grøn</td><td>10 lys grøn</td></tr><tr><td>3 cyan</td><td>11 lys cyan</td></tr><tr><td>4 rød</td><td>12 lys rød</td></tr><tr><td>5 magenta</td><td>13 lys magenta</td></tr><tr><td>6 brun</td><td>14 gul</td></tr><tr><td>7 lys grå</td><td>15 hvid</td></tr></table>	0 sort	8 mørk grå	1 blå	9 lys blå	2 grøn	10 lys grøn	3 cyan	11 lys cyan	4 rød	12 lys rød	5 magenta	13 lys magenta	6 brun	14 gul	7 lys grå	15 hvid
0 sort	8 mørk grå																
1 blå	9 lys blå																
2 grøn	10 lys grøn																
3 cyan	11 lys cyan																
4 rød	12 lys rød																
5 magenta	13 lys magenta																
6 brun	14 gul																
7 lys grå	15 hvid																
PATTERN	Dette felt angiver, hvilket mønster atomet skal tegnes med. Et 1-tal angiver fuld udfyldning. Konsulter Turbo Pascal manualen for andre værdier af dette felt. User Defined Fill (12) er sat til at være 50% fyldning.																

RADIUS	Radius angiver radius af atomet i Ångström. Denne bruges til at angive størrelsen af kuglen i kugle/streg-modellen.
BONDS	Angiver antallet af bindinger. En dobbelt- eller trippelbinding tæller kun som en binding. Feltet bruges til at angive, hvor mange BOND definitioner der er i denne atomdefinition.
BOND	Denne bruges til at definere en binding på atomet. Første tal angiver om det er en enkelt- (1), dobbelt- (2) eller trippel- binding (3). Næste tal angiver den halve bindingslængde. Hvis der ikke er en bindingsdefinition for en bestemt type binding, beregner MOSTER bindingslængden af bindingen ved at lægge de to halve bindingslængder sammen. Som værdi kan bruges halvdelen af bindingslængden mellem to atomer af den type, man er ved at definere. De sidste tre tal i parentes angiver bindingsvinklen. De tre tal er rotation om h.h.v. x-, y- og z-aksen.
SUPPORT	Hvis der kun er én binding i atomet, eller alle bindingerne i atomet ligger parallelt, skal der angives en supportvektor. Den angives som tre gradtal lige som i BOND definitioner og må ikke være parallel med nogle af bindingerne. Nødvendigheden af dette felt er af hensyn til simplifikation af beregningsmodellen i MOSTER. Hvis der kun er én binding i et atom, kan man f.eks. angive (0 0 0) i BOND definitionen og (0 0 90) som supportvektor.

Bemærk, at man skal lave en atomdefinition for hver konfiguration af bindingstyper for et atom. F.eks. er der for Carbon sp³ defineret følgende konfigurationer:

- 4 enkeltbindinger
- 1 dobbeltbinding og 2 enkeltbindinger
- 2 dobbeltbindinger
- 1 trippelbinding og en enkeltbinding

Man kan desuden angive bindingsdefinitioner i atomtabellen. En bindingsdefinition kan have følgende form:

BOND 1 80 60 143 180

Denne definition angiver, at en enkeltbinding (1) mellem et oxygenatom (familie 80) og et carbon sp³ (familie 60) skal have en bindingslængde på 143 Ångström og en torsion på 180 grader.

Oversættelse af atomtabel

Hvis man har ændret i ELEMENTS.TAB, skal denne oversættes for at få virkning i MOSTER programmet. Dette gøres med DOS-kommandoen:

ELEMCONV ELEMENTS.TAB

ELEMCONV oversætter ELEMENTS.TAB og lægger atomdefinitionerne i filen ELEMENTS.TBL og bindingsdefinitionerne i filen BONDS.TBL.

Grammatik

BNF grammatikken for atomtabel-filformatet er følgende:

```
<atomtabel>      ::=      { <atomdefinition> | <bindingsdefinition> } END

<atomdefinition> ::=      ATOM <string>
                           { NUMBER <integer> | FAMILY <integer> |
                           COLOR <integer> | PATTERN <integer> |
                           RADIUS <float> | SUPPORT <vector> |
                           BONDS <integer> |
                           BOND <integer> <float> <vector> }

<bindingsdefinition> ::=  BOND <integer> <integer> <integer>
                           <float> <float>

<vector>          ::=      ( <float> <float> <float> )
```

Appendiks D: Printer definitioner

Format af PRINTERS.DEF

I filen PRINTERS.DRV findes definitionen af styrekoderne til forskellige typer printere. Der skal være en definition for hver printer, men der kan godt være flere definitioner for én printer, hvis denne supporterer flere forskellige grafik-modes.

Printerdefinitionen for en NEC P2200 printer med 60dpi grafik kan f.eks. se ud som følger:

```
PRINTER      "NEC P2200 60dpi"
  XRES        60 # dpi
  YRES        60 # dpi
  PINS        8
  MSB         TOP
  FORMAT      INTEL16
  INIT        (27 65 8 13 10)
  RESET       (27 50 12)
  NEWLINE     (13 10)
  GRAPHICS    (27 42 0 n)
ENDPRINTER
```

De forskellige felter har følgende betydning:

XRES	Dette felt angiver den vandrette udskrivningstæthed. Enheden er dpi (dots per inch).
YRES	Dette felt angiver den lodrette udskrivningstæthed. Enheden er dpi (dots per inch).
PINS	Dette felt angiver, hvor mange nåle der er på printerens skriveskive. Bemærk, at f.eks. NEC P2200 er en 24-nåls printer, men den benytter kun otte nåle i 60 dpi grafikmode.
MSB	Dette felt angiver, om den mest betydende bit i en byte udskrives øverst (TOP) eller nederst (BOTTOM).
FORMAT	Dette felt angiver, hvordan printerens fortolker numeriske parametre. Dette felt kan have følgende værdier: ASCII: som ASCII strenge BYTE: som en 8-bit byte INTEL16: som et 16-bit tal med den mindst betydende byte først MOTOROLA16: som et 16-bit tal med den mest betydende byte først
INIT	Dette felt definerer den indledende sekvens til printerens. Denne sekvens skal f.eks. sætte printerens i den aktuelle grafikmode. På mange printere er det også nødvendigt at justere linieafstanden.

RESET	Dette felt definerer den afsluttende sekvens til printeren. Denne sekvens skal f.eks. sætte printeren tilbage i tekstmode.
GRAPHICS	Dette felt definerer den sekvens, der skal sendes til printeren for at sende grafikdata. Bogstavet n angiver, hvor den numeriske længde parameter skal indsættes.

Oversættelse af printer definitioner

Hvis man har ændret i PRINTERS.DEF, skal denne oversættes for at få virkning i MOSTER. Dette gøres med DOS-kommandoen:

```
PRTCONV PRINTERS.DEF
```

PRTCONV oversætter PRINTERS.DEF og lægger de oversatte printer definitioner i filen PRINTERS.DRV

MOSTER i kemi-undervisningen.

af Poul Thulstrup

MOSTER er et program, der kan supplere og til en vis grad erstatte et almindeligt molekylbyggesæt. MOSTER kan i undervisningen benyttes på forskellig vis:

1. Demonstration på én maskine

- a) Læreren opbygger sammen med eleverne de ønskede modeller, som eventuelt kan udskrives på printer og senere benyttes som transparenter.
- b) Færdige modeller af behandlede molekyler hentes ind og deres opbygning undersøges.

2. Værktøj for eleverne

- a) På grundlag af lærebogen og trykt øvelsesmateriale opbygger eleverne i grupper modeller af forskellige molekyler.
- b) Ved hjælp af en tutor ledes eleverne igennem opbygningen af mere komplekse strukturer, idet konstruktionen foregår trinvis med check af opbygningen i hvert trin. (Se tutor-eksemplet ASPIRIN på disketten).
- c) Færdigopbyggede modeller undersøges med henblik på for eksempel: rumlig opbygning og isomeriforhold, forskelle og ligheder af forskellige former, klassificering og navngivning.

3. Test

- a) Med en simpel tutor kan eleverne teste deres viden om sammenhængen mellem et stofs systematiske navn og kemiske opbygning. I hver opgave skal eleven for en given opbygning hente check-molekylet med det rigtige navn.
- b) Med en simpel tutor kan eleverne teste deres viden om (simple) molekylers opbygning, idet hver enkelt opgave går ud på at opbygge et bestemt molekyle.

Eksempler på anvendelse af MOSTER i den elementære undervisning i organisk kemi:

1. Alkaner

- a) Ud fra methan opbygges ved successiv udskiftning den homologe række af alkaner. Modellerne drejes, og man studerer den tetraediske opbygning omkring carbonatomerne. Isomeri-forholdene undersøges, og der knyttes systematiske navne til modellerne.
- b) En række alkaner er på forhånd opbygget og lagret. Ved hjælp af TUTBUILD opbygges en simpel test, hvor eleverne skal bygge tilsvarende modeller på grundlag af de opgivne systematiske navne.

2) Alkaner, alkenener, alkyner

- a) Eleverne opbygger modeller af propan, propen, propyn og studerer forskellene i rumlig opbygning.
- b) Der opbygges modeller af buten. Mulighederne for isomeri undersøges. Til modellerne knyttes systematiske navne.
- c) Test opbygget med TUTBUILD. Bemærk, at MOSTER ikke skelner mellem stereoisomere former. MOSTER tror, at to molekyler er ens, hvis de består af de samme atomer, og hvis hvert atom i de to molekyler har de samme naboer.

3) Alkoholer og deres oxidationsprodukter

- a) Opbygning og isomeriforhold hos alkoholer studeres. Man bemærker forskellen på primære, sekundære og tertiære alkoholer og knytter systematiske navne til modellerne.
- b) Omdannelsen til oxoforbindelser sker ved udskiftning af -OH med =O. De dannede forbindelser klassificeres som aldehyder eller ketoner og navngives.
- c) Test med TUTBUILD til understregning af forskellene på fx 1-propanol, 2-propanol, propanal og propanon.

4) Cykliske forbindelser

- a) De simpleste cykloalkaner opbygges. Ringspændingen fremgår af vanskeligheden ved at lave en "pæn" tegning. Cyklohexan kan tegnes pænt, og det ses, at ringen ikke er plan.
- b) Benzen bygges, og det ses, at ringen er plan. Tilsvarende bygges naphthalen og polycykliske arener, der ligeledes er plane.
- c) Med TUTBUILD opbygges en test, hvor kendskab til fx toluen, xylener, phenol, nitrobenzen, anilin kontrolleres.

5) Carbohydrater

- a) Glycerolaldehyd tegnes både i D- og L-form. Molekylerne drejes, så de ses i Fischer-projektion. Ud fra D-formen opbygges D-glucose, og man ser muligheden for halvacetaldannelse. Pyranose-formen dannes, og man ser muligheden for at få både alpha- og beta-former.
- b) Tilsvarende for fructose.
- c) Ud fra de tegnede (og gemte) molekyler dannes disaccharider og stykker af amylose og cellulose.

Orfeus

Programudvikling til skolerne

Graham Bells Vej 1A

8200 Århus N

Tlf. 86 16 90 55