



Lehrerfortbildung: „Computereinsatz im Chemieunterricht“

Modul 1 - „Zeichnen“

In diesem Modul geht es um das Zeichnen von chemischen
Verbindungen und Versuchsaufbauten

Philipp Reiß, Tobias Gerhardt
03.08.2009

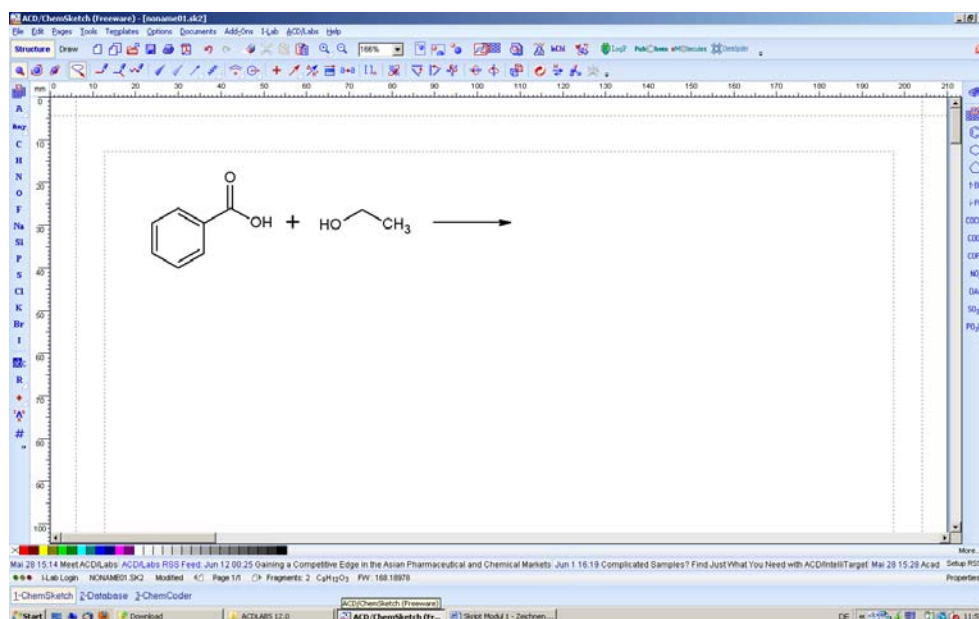
Inhalt

| | | |
|-------|--|----|
| A | Kurzvergleich verschiedener Programme | 3 |
| A.1 | ACD ChemSketch | 3 |
| A.2 | IsisDraw | 4 |
| A.3 | MarvinSketch..... | 4 |
| A.4 | ChemDraw | 5 |
| A.5 | C-Design..... | 5 |
| B | Erstellen von Zeichnungen mit ACD ChemSketch | 6 |
| B.1 | Einleitung..... | 6 |
| B.2 | Programmoberfläche | 6 |
| B.2.1 | Der Structure-Modus..... | 6 |
| B.2.2 | Der Draw-Modus | 9 |
| | Zeichnen mit ChemSketch..... | 11 |
| B.2.3 | Grundfunktionen | 11 |
| B.2.4 | Zeichnen einfacher Strukturen..... | 12 |
| B.2.5 | Weitere Funktionen zum Bearbeiten von Molekülen..... | 13 |
| B.2.6 | Erstellen von Reaktionsmechanismen | 16 |
| B.2.7 | Zeichnen von Versuchsaufbauten | 20 |
| C | Übungsaufgaben | 21 |

A Kurzvergleich verschiedener Programme

Auf dem Markt gibt es diverse kostenpflichtige und kostenfreie Programme, um chemische Strukturen und Versuchsaufbauten zu zeichnen. Die meisten Chemielehrer werden Zugriff auf eines dieser Programme haben, häufig als nicht lizenzierte Kopie. Damit zu arbeiten ist kein Problem, denn die Softwareindustrie hat besseres zu tun als Lehrer zu verfolgen, aber wenn man die Kopien klassensatzweise verteilt, damit die Schüler in ihren Präsentationen auch einmal Zeichnungen präsentieren, betreibt man *asking for trouble*.

A.1 ACD ChemSketch



ChemSketch, gegenwärtig Version 12 der Freeware, von ACD (<http://www.acdlabs.com/download/chemsketch/>) ist Teil eines größeren Paketes, das noch einen 3D-Betrachter und ein Programm zum Bearbeiten von NMR-Spektren enthält. Es existieren noch kostenpflichtige und sehr teure Versionen zur NMR-Vorhersage.

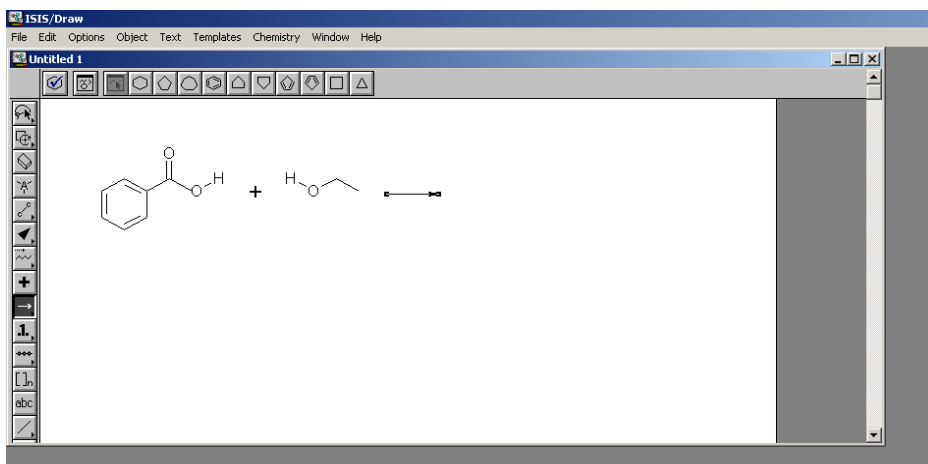
Vorteile:

- sehr leistungsfähig
- große Strukturbibliothek und eine große Zahl an Reaktions- und Elektronenwanderungspfeilen
- Funktionen zum Aufräumen von Zeichnungen, d.h. Bindungslängen u. -winkeloptimierung
- Umfangreicher Import und Export
- 3D-Erstellung

Nachteile:

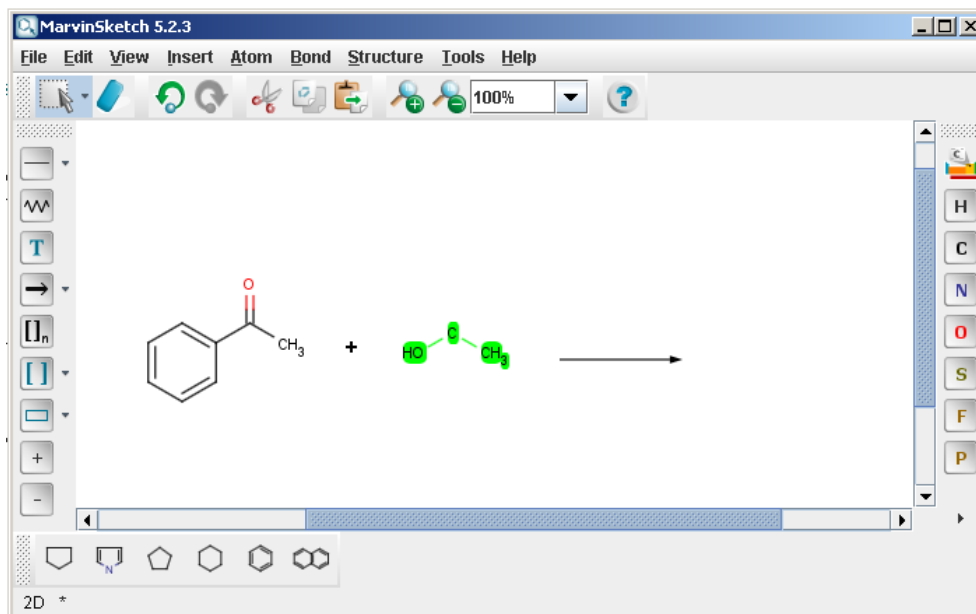
- Englische Bedienung
- Unübersichtliche Oberfläche und mit zwei Zeichenmodi relativ komplex
- Relativ wenige Laborgeräte
- Keine Elektronenpaare an Heteroatomen

A.2 IsisDraw



IsisDraw ist als Bedienoberfläche größerer Datenbanken gedacht und wurde seit Jahren nicht mehr grundlegend erweitert. Dem englischsprachigen Programm fehlen dementsprechend grundlegende Zeichenmöglichkeiten sowie Aufräum- und 3D-Funktionen. Durch die geringen Optionen ist es allerdings übersichtlich.

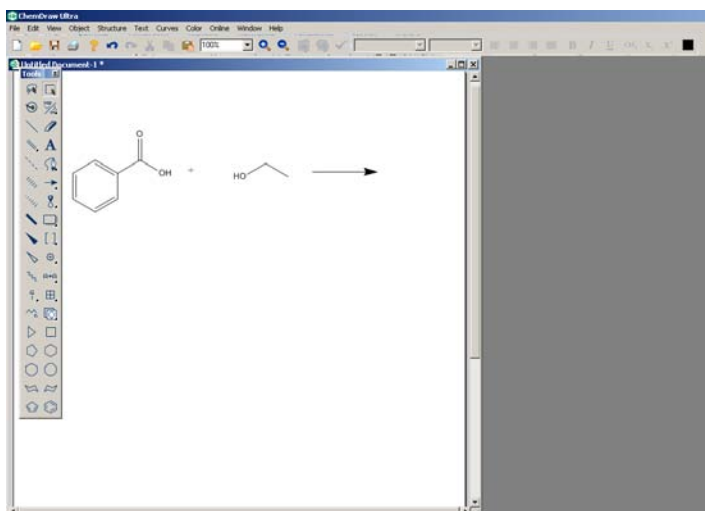
A.3 MarvinSketch



MarvinSketch (<http://www.chemaxon.com>) ist Teil des Marvin Beans Paketes, das auch noch 3D-Betrachter enthält und das komplett in der Programmiersprache Java verfasst ist. Das ermöglicht es, das Programm unverändert auf allen wesentlichen Betriebssystemen laufen zu lassen (Apple, Linux usw.) und es auf Internetseiten einzubinden.

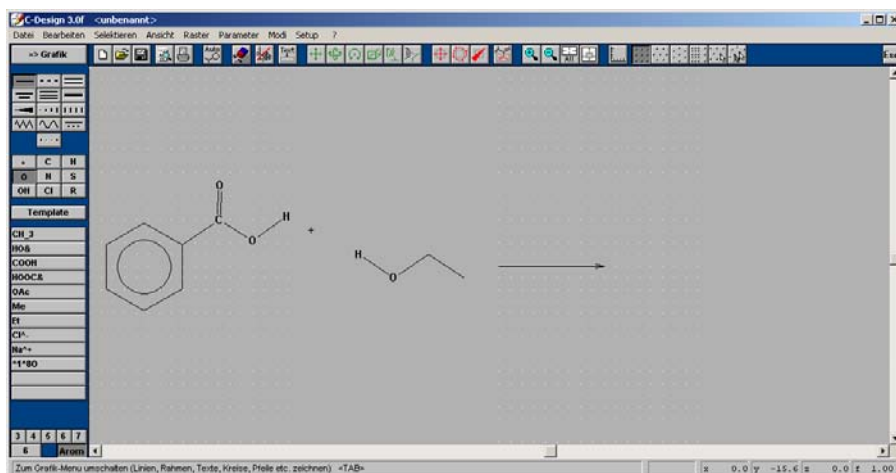
Es hat eine ähnliche Ausrichtung wie IsisDraw, es fehlen ihm also die grundlegenden Zeichenmöglichkeiten, aber es zeichnet sich durch eine moderne Oberfläche, Aufräummöglichkeiten in 2D und 3D und als einziges Programm durch die Möglichkeit, freie Elektronenpaare einzuzichnen.

A.4 ChemDraw



ChemDraw ist ein rein kommerzielles, englischsprachiges Programm und einzeln oder als Teil des ChemOffice-Pakets zu erhalten, wobei selbst die einfache ChemDraw-Variante als Version für alle Chemie-Lehrer einer Schule einen vierstelligen Betrag kostet. Es ist das meistgenutzte Programm an Hochschulen und in der Industrie und bietet vordefinierte Einstellungen für Fachzeitschriften, NMR-Vorhersage und vieles Weitere, was primär in der Forschung benötigt wird. Die Oberfläche ist übersichtlich gehalten und hat sich seit vielen Versionen nicht wesentlich verändert, wodurch bei einem Versionswechsel kaum Einarbeitung notwendig ist.

A.5 C-Design



C-Design ist ein ehemals kommerzielles, seit 2003 aber kostenloses Programm.

Es ist als einziges der hier getesteten Programme deutsch und hat die umfangreichste Bibliothek an Laborgeräten. Aufgrund seines Alters hält sich das Programm leider nicht an Windows-Konventionen – so ist zum Auswählen und Einfügen aus Bibliotheken ein doppelter Rechtsklick erforderlich, was zusammen mit einer teilweise komplizierten Bedienung (Rückgängig machen funktioniert selten und wenn, dann nur einmal) das Programm für Schüler ungeeignet macht. Lehrer, die Laborgeräte zeichnen möchten, finden aber kaum eine Alternative.

B Erstellen von Zeichnungen mit ACD ChemSketch

B.1 Einleitung

Das leistungsfähigste Programm, das gleichzeitig kostenfrei ist, ist ACD ChemSketch. Es ist jedoch nicht sicher, dass man die Software selber frei verteilen oder im Netzwerk der Schule nutzen darf, sondern es ist formal teilweise eine kostenlose Lizenzierung notwendig.

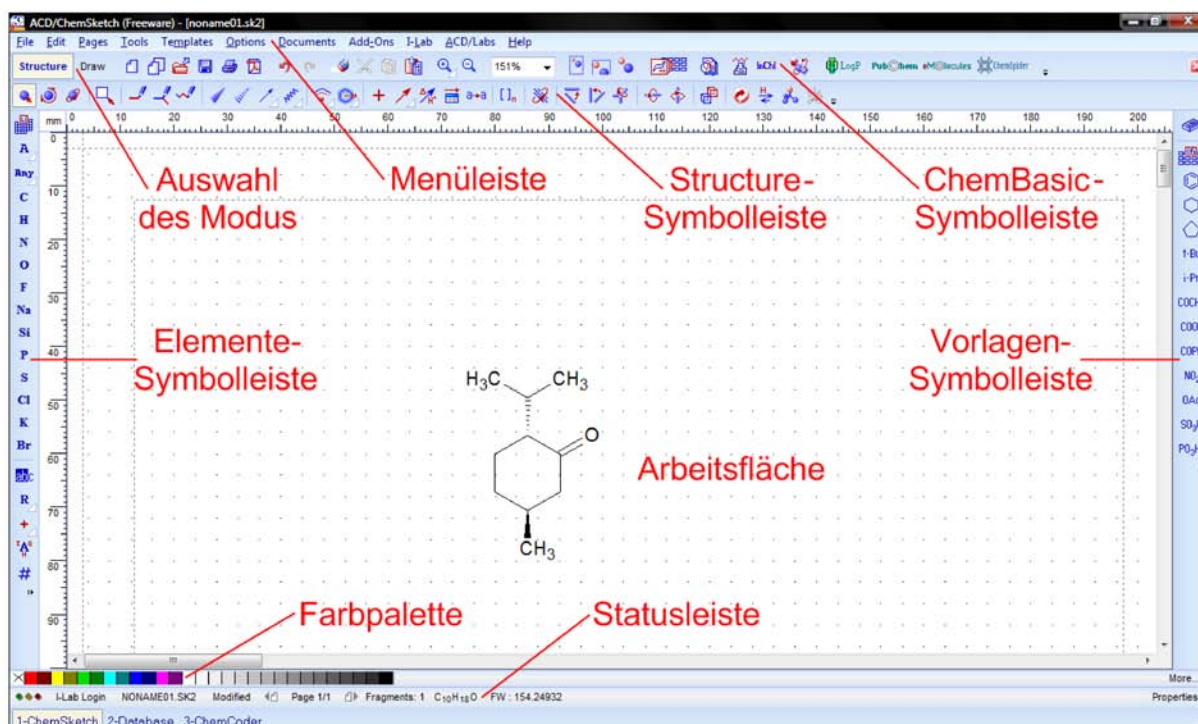
Bevor man Schüler damit arbeiten lässt, sollte man jedoch etwas Zeit zur Vorführung und Einarbeitung in einer Schulstunde einplanen, gerade da die Oberfläche sehr viele und verwirrende Optionen präsentiert und da die englische Sprache eine zusätzliche Hürde darstellt. Nach einer kurzen Einführung konnte aber Oberstufenkurse, die am Fachbereich Chemie einen Lernzirkel besuchten, das Programm in seinen Grundfunktionen sicher und problemlos handhaben.

B.2 Programmoberfläche

Das Programm hat zwei verschiedene Modi, zwischen denen hin- und her gewechselt werden kann, indem man die Modus-Symbolleiste nutzt (links oben, unterhalb von *File* und *Edit*). Der Structure-Modus dient dabei zum Zeichnen der chemischen Strukturen, Pfeile usw., während es sich beim Draw-Modus um ein einfaches Zeichenprogramm handelt.





B.2.1 Der Structure-Modus





Beim Start des Programms ist üblicherweise der Draw-Modus aktiviert, erkennbar dadurch, dass das entsprechende Feld hell hervorgehoben ist.












Schaltflächen der Structure-Symbolleiste

| | |
|------------------|--|
| Structure | Structure: Aktiviert den Structure-Modus |
| Draw | Draw: Aktiviert den Draw-Modus |



| | |
|---|--|
|  | Full Page (links): Zeigt die gesamte Zeichenfläche Page Width (Mitte): Vergrößert die Zeichenfläche auf Bildschirmbreite Fit All (rechts): Zeigt die Zeichenfläche so, dass alle gezeichneten Objekte zu sehen sind |
|  | Open Template Window: Öffnet das Vorlagen-Fenster, um vorgezeichnete Strukturen auswählen und einfügen zu können (auch Laborgeräte sind hier vorhanden) |
|  | Search for Structure: Generiert die zugehörige Struktur aus dem korrekten IUPAC-Namen (Nur in der kostenpflichtigen Version verfügbar!) |
|  | Generate Name for Structure: Generiert den IUPAC-Namen für eine markierte Struktur |
|  | 3D-Viewer: Startet den ACD/3D Viewer zum Betrachten von 3D-Molekülen |
|  | Select/Move: Ermöglicht die Auswahl von Objekten sowie das Bewegen und Ändern ihrer Größe |
|  | Select/Rotate/Resize: Ermöglicht die Auswahl von Objekten sowie das Drehen um einen Punkt und das Ändern ihrer Größe |
|  | 3D Rotation: Ermöglicht die Auswahl von Objekten und das dreidimensionale Drehen |
|  | Lasso On/Off: Wechselt den Selektionsmodus zwischen Lasso und Box |
|  | Draw Normal (links): Ermöglicht das Zeichnen von Bindungen und Atomen Draw Continuous (Mitte): Ermöglicht das Zeichnen von Atomen, welche automatisch durch Bindungen verknüpft werden Draw Chains (rechts): Ermöglicht das Zeichnen von Molekülketten |
|  | Up Stereo Bonds (links)/Down Stereo Bonds (rechts): Ermöglicht das Zeichnen von aus der Ebene heraus (up) oder in die Ebene (down) gerichteten Bindungen |
|  | Coordinating Bonds: Ermöglicht das Zeichnen von koordinativen Bindungen |
|  | Undefined Stereo Bonds: Ermöglicht das Zeichnen von Sonderformen an Bindungen |
|  | Dotted/Solid Delocalization Curve: Fügt delokalisierte Bindungen in ein markiertes Objekt ein |
|  | Markush Bond: Fügt delokalisiert gebundene Substituenten in ein Objekt ein |
|  | Reaction Plus: Ermöglicht das Einfügen von Pluszeichen |
|  | Reaction Arrow (links): Ermöglicht das Einfügen von Reaktionspfeilen Reaction Arrow Labeling (rechts): Ermöglicht das Beschriften von Reaktionspfeilen |
|  | Atom-Atom Map: Ermöglicht das Nummerieren von Atomen einer Reaktion |
|  | Polymers: Ermöglicht das Einfügen von Polymerklammern in Moleküle |
|  | Change Position: Ändert die Position der Protonen eines Substituenten (z.B. -CH ₃) |
|  | Set Bond Horizontally (links)/Set Bond Vertically (rechts): Dreht das Molekül so, dass die ausgewählte Bindung horizontal/vertikal angeordnet wird |
|  | Flip on Bond: Dreht das Molekül um die ausgewählte Bindung |
|  | Flip Top to Bottom (links): Spiegelt ein markiertes Objekt horizontal |


| | |
|---|--|
| | Flip Left to Right (rechts): Spiegelt ein markiertes Objekt vertikal |
|  | Instant Template: Erzeugt eine Kopie des gewählten Moleküls, welches dann als Schatten am Mauszeiger angehängt wird und durch Linksklick eingefügt werden kann |
|  | Clean Structure: Erzeugt aus einer Struktur ein stereochemisch korrektes Molekül |
|  | Check for Tautomeric Forms: Zeigt, wenn möglich, die tautomere Form eines markierten Moleküls an |
|  | 3D Optimization: Erzeugt eine dreidimensionale Struktur für ein gewähltes Molekül |

Schaltflächen der Elemente-Symbolleiste

| | |
|---|--|
|  | Periodic Table of Elements: Öffnet das Periodensystem zur Auswahl von Elementen, die dann in der Elemente-Auswahl angezeigt werden |
|  | Any Atom: Ermöglicht das Einfügen eines Platzhalteratoms (z.B. für irgendein Halogenatom) |
|  | Any Bond: Ermöglicht das Einfügen einer Platzhalterbindung (z.B. für irgendeine Ringbindung) |
|  | Carbon/Hydrogen/etc.: Ermöglicht das Einfügen von Kohlenstoff, Wasserstoff, etc. |
|  | Edit Atom Label: Ermöglicht das Editieren von einzelnen Atomen einer Struktur |
|  | Radical Label: Ermöglicht das Einfügen von Radikalen (auch mit Nummerierung möglich, z.B. -R2) |
|  | Increment (+) Charge/Decrement (-) Charge: Ermöglicht die Änderung Atomladung |
|  | Atom Chemical Properties: Ermöglicht die Änderung der chemischen Eigenschaften eines Atoms |
|  | Manual Numbering: Ermöglicht die manuelle Nummerierung von Atomen |

Schaltflächen der Vorlagensymbolleiste

| | |
|---|---|
|  | ACD/Dictionary: Funktion unbekannt (Nur in der kostenpflichtigen Version verfügbar!) |
|  | Table of Radicals: Öffnet ein zweites Vorlagen-Fenster, um vorgezeichnete Strukturen einzufügen (Dies sind andere Vorlagen als im Template Window der ChemBasic- |

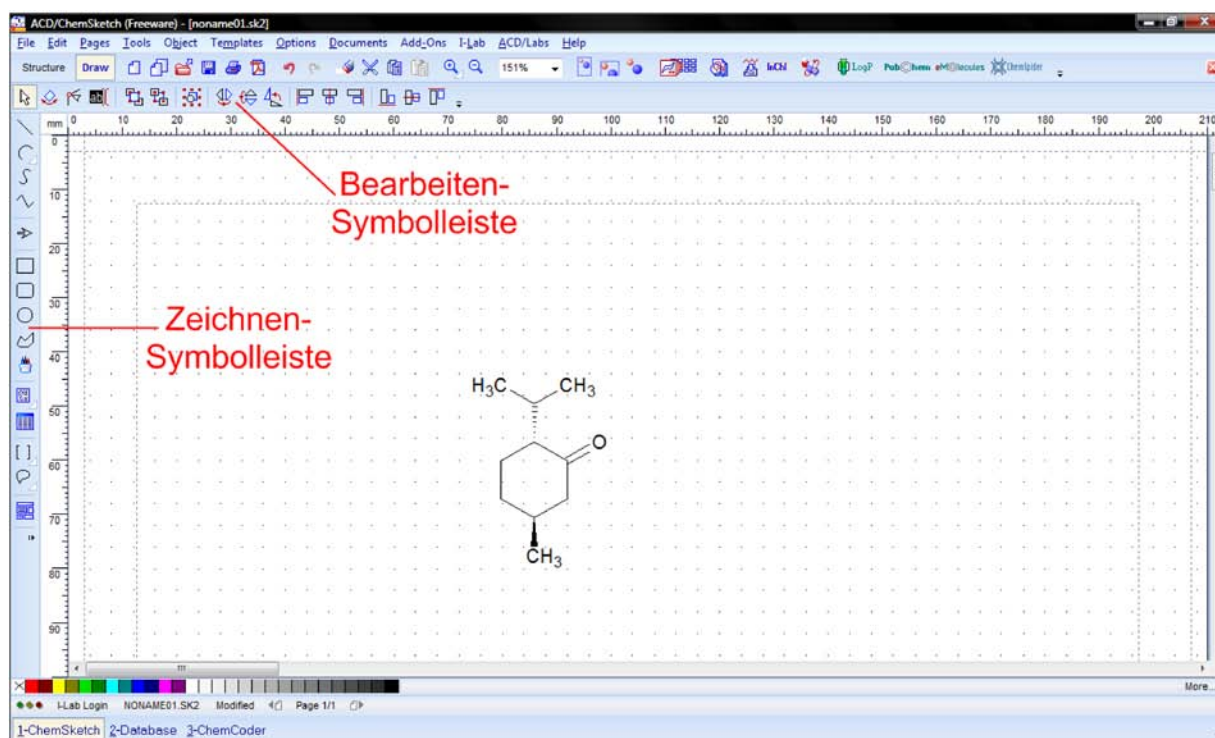
| | |
|---|--|
| | Symbolleiste!) |
|  | Benzene/Cyclohexane/etc.: Ermöglicht das Einfügen von Benzol, Cyclohexan, etc. |




B.2.2 Der Draw-Modus





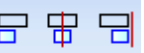
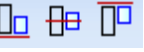












Der Draw-Modus, der durch die entsprechende Schaltfläche oben links erreicht werden kann, ist ein einfaches Zeichenprogramm. In diesem werden vor allem

- Textfelder eingefügt
- Grafikelemente relativ zueinander ausgerichtet
- Elektronenwanderungspfeile erstellt und
- Glasgeräte gezeichnet.

Strukturformeln werden dabei als vollständige Elemente behandelt, es können also keine Bindungen oder Atome verändert werden.



| | |
|---|--|
|  | Select/Move/Resize: Ermöglicht die Auswahl von Objekten sowie das Bewegen und Ändern ihrer Größe |
|  | Select/Move/Rotate: Ermöglicht die Auswahl von Objekten sowie das Drehen um ihren Mittelpunkt |
|  | Edit Nodes: Eine gezeichnete Kurve (Curve) oder Polyline beeinflussen |

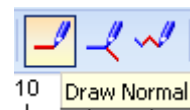
| | |
|---|--|
|  | Edit Text: Ermöglicht das Einfügen eines Textfeldes und nachträgliches Bearbeiten |
|  | Bring to Front (links): Verschiebt Objekte in den Vordergrund Send to Back (rechts): Verschiebt Objekte in den Hintergrund |
|  | Group: Ermöglicht das Gruppieren von mehreren Objekten (die Gruppierung kann über diese Schaltfläche auch wieder aufgehoben werden) |
|  | Flip Left to Right (rechts): Spiegelt ein markiertes Objekt horizontal Flip Top to Bottom (Mitte): Spiegelt ein markiertes Objekt vertikal Rotate 90° (rechts): Dreht ein markiertes Objekt um 90° nach links |
|  | Align Left (links): Ordnet mehrere markierte Objekte linksbündig an Center Horizontally (Mitte): Ordnet mehrere markierte Objekte vertikal zentriert an Align Right (rechts): Ordnet mehrere markierte Objekte rechtsbündig an |
|  | Align Bottom (links): Ordnet mehrere markierte Objekte bodenbündig an Center Vertically (Mitte): Ordnet mehrere markierte Objekte horizontal zentriert an Align Top (rechts): Ordnet mehrere markierte Objekte deckenbündig an |
|  | Line: Ermöglicht das Zeichnen einer Linie |
|  | Arc 90°: Ermöglicht das Zeichnen von Bögen verschiedener Spannung |
|  | Curve: Ermöglicht das Zeichnen von Kurven mit zwei vorbestimmten Krümmungen |
|  | Polyline: Ermöglicht das Zeichnen von Bögen mit frei wählbaren Krümmungen oder von mehrfach gewinkelten Linien |
|  | Arrow: Ermöglicht das Zeichnen von Pfeilen (in Verbindung mit Line, Arc, Curve oder Polyline) |
|  | Rectangle (oben): Ermöglicht das Zeichnen eines Rechtecks Rounded Rectangle (Mitte): Ermöglicht das Zeichnen eines Rechtecks mit abgerundeten Ecken Ellipse (unten): Ermöglicht das Zeichnen einer Ellipse oder eines Kreises |
|  | Polygon: Ermöglicht das Zeichnen eines Polygons |
|  | Insert Image: Ermöglicht das Einfügen eines Bildes |
|  | Text: Ermöglicht das Einfügen eines Textfeldes und/oder dessen nachträgliche Bearbeitung. Beim Anklicken wird der rechte Teil der Bearbeiten-Symbolleiste durch die Text-Symbolleiste ersetzt, bekannt aus Schreibprogrammen |
|  | Table: Ermöglicht das Einfügen einer Tabelle |
|  | Brackets: Ermöglicht das Einfügen von verschiedenartigen Klammern |
|  | Rounded Callout: Ermöglicht das Einfügen verschiedenartiger Sprechblasen |

Zeichnen mit ChemSketch

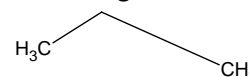
B.2.3 Grundfunktionen

Zum Kennenlernen der Grundfunktionen sollen einfache Moleküle gezeichnet werden.

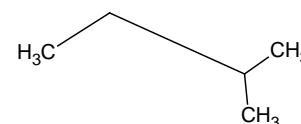
1. Im Structure-Modus wählt man, sofern das nicht schon eingestellt ist, aus der Structure-Symbolleiste die Schaltfläche *Draw Normal*. Dann klickt man auf das Arbeitsblatt, hält die linke Maustaste gedrückt, bewegt die Maus etwas zur Seite und lässt die Taste los. ChemSketch zeichnet auch diese Weise Ethan, wobei die beiden Kohlenstoffatome an den Punkten des Drückens und des Loslassens der Maustaste liegen.



2. Geht man mit dem Mauszeiger über eine der CH₂-Gruppen, so wird ein Kasten darum gezeichnet. Klickt man wie beim ersten Mal wieder, hält gedrückt und zieht zur Seite, wird aus Ethan Propan.

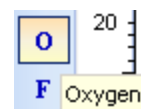


3. Eine weitere Methode zum Zeichnen ist es, einfach auf ein Kohlenstoffatom zu klicken. In diesem Fall werden einheitliche und sinnvolle Bindungswinkel und -abstände gewählt.

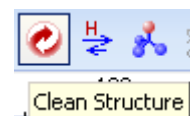
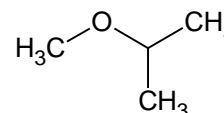


4. Nun soll ein Ether erstellt werden.

Dazu wählt man auf der Elemente-Symbolleiste (links) den Sauerstoff durch Linksklick aus und klickt dann in der Zeichnung auf die CH₂-Gruppe, die ersetzt werden soll.



5. Das Molekül ist zwar chemisch korrekt, aber aufgrund seiner uneinheitlichen Bindungswinkel und -längen nicht schön. Zum Aufräumen dient die Funktion *Clean Structure* aus der Structure-Symbolleiste, die diese Faktoren optimiert. Dabei ist das Ergebnis allerdings nicht immer vorherzusehen, weswegen es meist besser ist, von vorne herein sauber zu zeichnen (also eher durch einfaches Klicken statt durch Klicken-und-Ziehen).



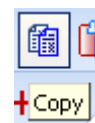
6. Um Moleküle auszuwählen, sind die Funktionen *Lasso On/Off* geeignet. Von diesen beiden Funktionen wird immer nur eine angezeigt, die andere erreicht man durch Drücken der Schaltfläche. Beide erlauben die Auswahl von Molekülen, Molekülteilen und Zeichenelementen. Das Lasso ist vor allem dann sinnvoll, wenn mehrere Elemente dicht beieinander liegen.



7. Für den Fall, dass man Fehler macht, stehen die üblichen Schaltflächen für Rückgängigmachen (*Undo Draw*) und die Tastenkombination Steuerung +Z bereit. Daneben gibt es noch das Radiergummi (*Delete*). Nach dem Anklicken verwandelt sich der Mauszeiger in einen Pfeil mit der Aufschrift DEL und damit angeklickte Atome, Bindungen oder ausgewählte Zeichnungselemente werden gelöscht.



8. Zum Kopieren der Auswahl dient die Schaltfläche *Copy* oder die Tastenfunktion Steuerung + C, anschließend kann die Zeichnung in Word oder OpenOffice eingefügt werden.

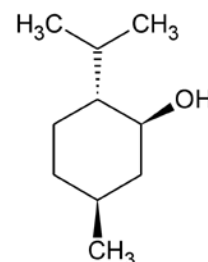
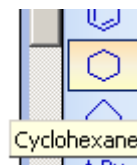


9. Zum Speichern der Zeichnung dient wie üblich das Diskettensymbol. Um unter einem anderen Namen oder in einem anderen Format zu speichern, wird im Menü *File* das Untermenü *Save as* genutzt.

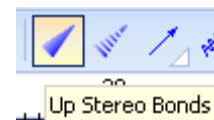
B.2.4 Zeichnen einfacher Strukturen

Bevor im Folgenden das Zeichnen von Mechanismen beschrieben wird, soll hier zuerst das Zeichnen einfacher Strukturen beschrieben werden. Als Zielmolekül dient Menthol, das sich in wenigen Schritten aufbauen lässt.

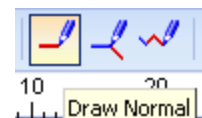
1. Im Structure-Modus wählt man in der Vorlagensymbolleiste (rechte Seite) mit einem Linksklick das Cyclohexanmolekül aus und fügt es durch einen weiteren Linksklick auf der Zeichenfläche ein.



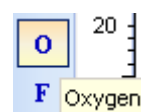
2. Nun wählt man in der Structure-Symbolleiste die nach vorne gerichtete Einfachbindung aus und klickt auf die beiden Kohlenstoffatome im Ring, die nach vorne gerichtete Bindungen enthalten. Dadurch erscheinen an beiden Stellen Methylgruppen.
3. Anschließend wählt man die daneben liegende Schaltfläche *Down Stereo Bonds* und zeichnet auf gleiche Weise die nach hinten gerichtete Bindung am obersten Kohlenstoffatom des Rings.



4. Durch Linksklick auf die Schaltfläche *Draw Normal* wählt man normale Einfachbindungen ohne Stereoinformationen aus. Mit dieser Einstellung klickt man zweimal nacheinander auf die ganz oben stehende CH₃-Gruppe, wodurch die benötigte Isopropylgruppe entsteht.



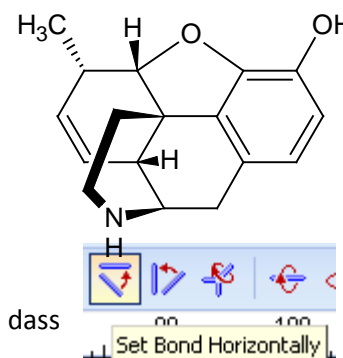
5. Als letzter Schritt fehlt noch die Umwandlung einer Methyl- in eine Hydroxy-Gruppe. Dazu wählt man auf der Elemente-Symbolleiste (links) den Sauerstoff durch Linksklick aus und klickt dann in der Zeichnung auf die Methylgruppe, die ersetzt werden soll. Die Hydroxy-Gruppe entsteht, wobei das Proton automatisch mitgeschrieben wird.



Damit ist das Zeichnen des Moleküls abgeschlossen. Man könnte es jetzt über *File* → *Save as* (oder durch das Diskettensymbol) speichern.

Zum Erlernen weiterer, komplexerer Funktionen werden wir ein aufwendigeres Molekül zeichnen:
Morphin

1. Man beginnt wie oben damit, dass man einen Cyclohexanring aus der rechten Vorlagensymbolleiste auswählt und diesen einfügt. Vergleicht man ihn allerdings mit dem zentralen Ring der Zeichnung auf dieser Seite, so stellt man fest, dass die Lage nicht stimmt – der gezeichnete Ring hat oben eine Spitze, der gewünschte hat oben eine Bindung, liegt also quer. Um das zu erreichen wählt man *Set Bond Horizontally* und klickt dann eine der Bindungen an, worauf das Molekül so gedreht wird, dass diese Bindung waagrecht liegt und der Ring quer liegt.



2. Man wählt nochmals den Cyclohexanring und klickt auf die linke obere Bindung des bereits gezeichneten Rings, wodurch der linke Ring (noch ohne Doppelbindung) entsteht.
3. Durch Wahl des Benzolrings und Klicken der rechten oberen Bindung des zentralen Cyclohexanrings wird der Aromat angefügt – aber ChemSketch legt die gemeinsame Doppelbindung in den Cyclohexanring und nicht in den Aromaten. Das ändert man, indem man die



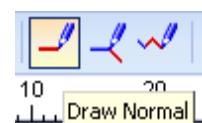
Schaltfläche *Change Position* in der Structure-Symboleiste auswählt und dann mehrfach auf die fragliche Bindung klickt.

- Der sauerstoffhaltigen Ring wird aufgebaut, indem man links die Schaltfläche Sauerstoff auswählt, auf eines der Kohlenstoffatome, die mit dem Sauerstoffatom verbunden werden sollen, klickt und gedrückt hält, und dann die Bindung bis zur gewünschten Position des Sauerstoffatoms zieht, an der man die Maustaste wieder los lässt. An der entsprechenden Stelle entsteht eine Hydroxygruppe. Auf die gleiche Weise (klicken, gedrückt halten und ziehen) wird der Ring geschlossen.



- Sollte das Sauerstoffatom nicht in der richtigen Lage sein und der THF-Ring deswegen unschön aussehen, so wählt man *Select/Move* (links oben), klickt auf das Sauerstoffatom, hält gedrückt und zieht es in die gewünschte Position.

- Um die Doppelbindung zu erhalten, wählt man *Draw Normal* und klickt auf die entsprechende Einfachbindung, die dadurch zur Doppelbindung wird. Weiteres Klicken würde zur Dreifach- und dann wieder zur Einfachbindung führen.



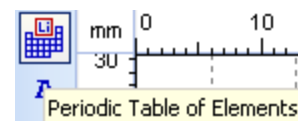
- Die nach hinten gerichtete Methylgruppe wird durch Wahl der Schaltfläche *Down Stereo Bonds* und Klicken des entsprechenden Kohlenstoffatoms im linken Ring erzeugt. Anschließend wählt man *Up Stereo Bonds* und auf der linken Seite das Wasserstoffatom und zeichnet die angegebenen Wasserstoffatome durch Gedrückt-halten und Ziehen.
- Um den nach vorne gerichteten Ring aufzubauen, wird bei noch aktiver Schaltfläche *Up Stereo Bonds* das Kohlenstoffsymbol gewählt und vom mittleren Ring zwei Methylgruppen nach links gezeichnet (durch Gedrückt-halten und Ziehen). Durch zwei weitere Bindungen, die auf die gleiche Weise gezeichnet werden, wird der Ring geschlossen. Die zwei zuletzt gezeichneten Bindungen haben allerdings noch die Keilform, lassen sich durch mehrfaches Anklicken in die gewünschte, gleichmäßig fette Form bringen.
- Zum Abschluss wählt man das Stickstoff-Symbol auf der linken Seite und klickt das zu ersetzende Kohlenstoffatom an. Anschließend wird wieder der Kohlenstoff sowie oben die Einfachbindung *Draw Normal* gewählt und durch Anklicken des Stickstoffs die letzte Methylgruppe eingefügt

B.2.5 Weitere Funktionen zum Bearbeiten von Molekülen

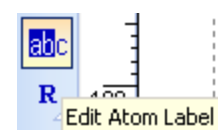
Es gibt viele weitere Hilfsfunktionen, mit denen sich Moleküle bearbeiten lassen.

Weitere Elemente und Reste

Nicht immer sind die Elemente, die man für das Zeichnen benötigt, in der linken Elemente-Symboleiste vorhanden. In diesem Fall wählt man das Feld *Periodic Table of Elements* an und wählt das Element, das man benötigt. Dessen Symbol erscheint dann in der Symboleiste und kann verwendet werden.



Noch freier ist man mit dem Symbol *Edit Atom Label*, mit dem man beliebige Zeichen (auch griech. Symbole) oder Abkürzungen wie COOMe verwenden kann. Bei bekannten Abkürzungen bleiben die Fähigkeiten des Programms, Eigenschaften zu berechnen, erhalten.



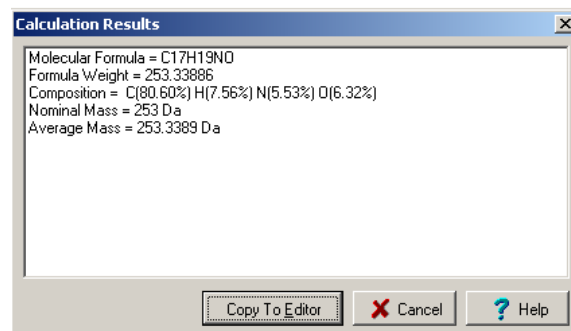
Berechnung der Eigenschaften von Molekülen

Wählt man ein Molekül an, so erscheint in der unteren Leiste eine Information über Zusammensetzung und Molmasse.

Sel. Fragments: 1 C₁₇H₁₉NO FW: 253.33886

Möchte man diese und weitere Eigenschaften auch in das Dokument einfügen, so wählt man aus dem Menü *Tools* den untersten Punkt *Calculate*. Hier lassen sich diverse Parameter berechnen und mit einem Klick auf *Copy to Editor* in das Arbeitsblatt einfügen.

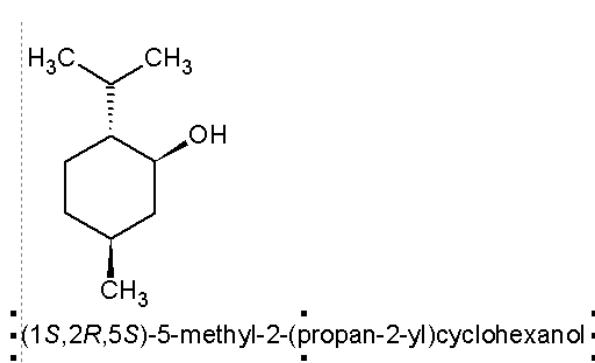
ChemSketch wechselt dabei in den Draw-Modus, da nur in diesem Textfelder bearbeitet werden können.



Bestimmen des Molekülnamens und der Stereodeskriptoren

ChemSketch kann den IUPAC-Namen von Molekülen berechnen, allerdings in der kostenlosen Variante beschränkt auf maximal 50 Atome und 3 Ringe, was das zuletzt gezeichnete Morphin leider ausschließt.

Zum Testen markiert man also das zuerst gezeichnete Menthol und wählt dann *Tools* → *Generate* → *Name for Structure*, worauf unterhalb der Struktur der englische Name der Verbindung incl. der Stereodeskriptoren eingefügt wird.



Darstellungsoptionen

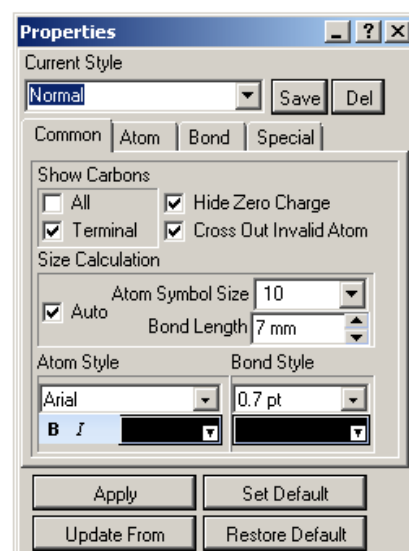
Nicht immer ist man mit der von ChemSketch gewählten Darstellung zufrieden.

Am einfachsten ist es, einzelnen Teilen (Molekülen, Bindungen, Atomen, Textelementen) Farben zuzuweisen. Man markiert diese Elemente und klickt dann in der unteren Leiste auf die Farbe, die man sich wünscht. Weitere Farben kann man über die Schaltfläche *More...* am rechten Ende der unteren Leiste erhalten.

Für weitergehende Optionen wählt man das Element, z.B. ein ganzes Menthol-Molekül, und ruft dann im Menü *Tools* den obersten Punkt *Structure Properties* auf. Es erscheint ein neues Menü mit der Bezeichnung *Properties*, in der man die Eigenschaften wählen kann.

Das Drop-down-Menü *Current Style* enthält die Darstellungswünsche diverser Zeitschriften, ermöglicht es aber auch, Darstellungseigenschaften abzuspeichern, so dass man für eine Klasse 10 eine andere Darstellung erhält als für einen Leistungskurs kurz vor dem Abitur.

Interessant ist vor allem die Option *Show Carbons* auf *All* zu setzen, da dann immer CH₂-Gruppen statt der Strichformeln gezeichnet werden. Da-



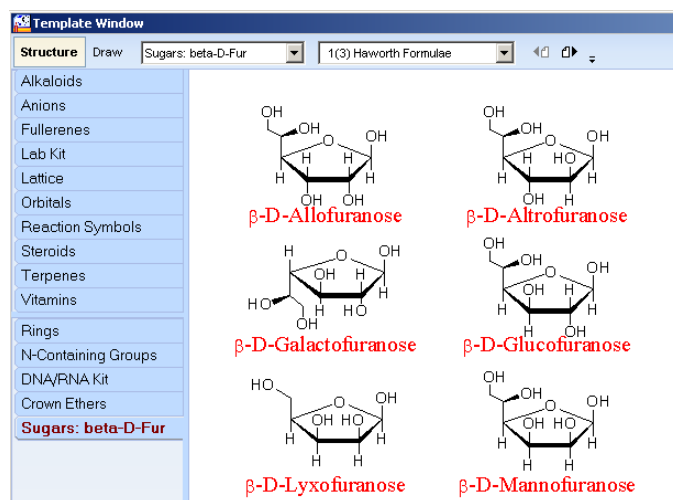
mit die Änderungen für das gewählte Molekül wirksam werden, muss *Apply* gedrückt werden.

Molekülbibliotheken (Templates)

Es existieren viele größere Moleküle, die von vielen regelmäßig benötigt werden. Für solche Fälle gibt es Bibliotheken, die z.B. Kohlehydrate, Alkaloide, Orbitale, Steroide und vieles weitere enthalten.

Durch die Wahl von *Templates* → *Template Window* oder durch Drücken der Funktionstaste F5 gelangt man dorthin.

In der linken Leiste kann man auf bis zu 15 verschiedene Bibliotheken (z.B. *Alkaloids*) direkt zugreifen. Die oberen 10 Bibliotheken werden über den Organizer rechts in der oberen Leiste bestimmt – hier kann man vor bis zu 10 Bibliotheken ein Häkchen machen oder sogar eigene Bibliotheken erstellen. Die unteren 5 Bibliotheken sind durch das Drop-down Menü links in der oberen Leiste zu erreichen. Viele Bibliotheken bestehen aus mehreren Seiten, durch die man mit den Schaltflächen *Previous Page* und *Next Page* navigieren kann.



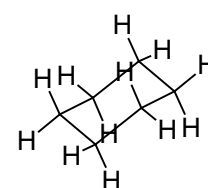
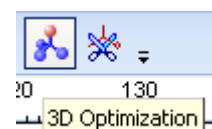
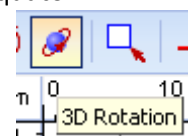
Durch Anklicken eines Moleküls wird dieses ausgewählt und kann durch einen weiteren Klick im Arbeitsblatt eingefügt werden.

Räumliches Drehen

Es gibt diverse Gründe von der papiertypischen Planarität abzuweichen: Man möchte einen Aromaten von der Seite zeigen oder am Cyclohexan-Sessel die Unterschiede zwischen axialen und äquatorialen Resten erklären.

Möchte man einfach die planare Form drehen, so reicht es, das entsprechende Molekül zu markieren und die Schaltfläche *3D Rotation* zu aktivieren. Der Mauszeiger verwandelt sich in einen Punkt, der von zwei Pfeilen umgeben ist, und wenn man damit auf das Molekül zeigt, klickt und gedrückt hält, so lässt sich das Molekül dreidimensional drehen.

Interessanter ist es aber, das planare Molekül vorher in eine dreidimensionale Form zu bringen. Dazu zeichnet man das Molekül in der bekannten Weise, markiert es und drückt dann die *3D Optimization* Schaltfläche. Die danach erscheinenden Fragen, ob Stereobindungen durch normale Einfachbindungen ersetzt und eventuell, ob Wasserstoffatome entfernt werden sollten, verneint man – dadurch würde die Stereoinformation verloren gehen. Man erhält eine begrenzt optimierte dreidimensionale Struktur, die sich wie oben beschrieben drehen lässt.



Mehrseitige Dokumente

Der Platz auf einer Seite wird recht schnell knapp, was dann dazu führt, dass man viele einzelne ChexSketch-Dateien erhält, die eigentlich zusammengehören. Deswegen bietet ChemSketch im Menü *Pages* die Möglichkeit neue Seiten in einem Dokument zu erstellen, diese zu benennen, die Reihenfolge zu ändern usw. Auf welcher Seite man sich befindet ist in der unteren Symbolleiste zu erkennen, in der auch zwischen den Seiten hin- und her geblättert werden kann.

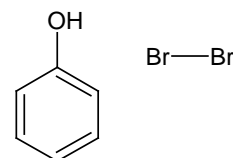


B.2.6 Erstellen von Reaktionsmechanismen

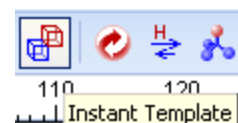
Viele Lehrer werden es nicht bei einzelnen Strukturen belassen wollen, sondern ganze Mechanismen zeichnen wollen, denn gerade in diesem Fall sind Arbeitsblätter sinnvoll.

Als Beispiel soll hier die elektrophile aromatische Substitution von Phenol durch Brom gezeigt werden.

1. Man beginnt damit, dass man Phenol auf die besprochene Weise zeichnet. Brom wird erstellt, indem man links das Brom-Elementsymbol auswählt, auf das Arbeitsblatt klickt und bei gedrückter Maustaste die Maus zur Seite bewegt.

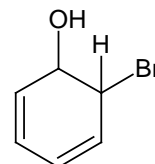


2. Als Produkt soll das ortho-Bromphenol angenommen werden. Um nicht immer wieder das gleiche Molekül zeichnen zu müssen, wählt man aus der Structure-Symbolleiste die Schaltfläche *Instant Template* und klickt dann auf eine Bindung des Phenols, wodurch ein Schatten des Phenols mit dem Cursor mitwandert und eine Kopie durch einen Mausklick eingefügt werden kann.

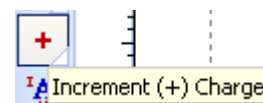


3. In ortho-Position zeichnet man noch ein Bromatom und fügt ein Pluszeichen aus der oberen Structure-Symbolleiste hinzu. Zudem erzeugt man durch Auswählen des Brom-Elementsymbols und Klicken ein HBr-Molekül. Die so erzeugten Produkte werden zusammen markiert und etwas nach unten verschoben (mit der Maus auf eine Bindung gehen und ziehen).

4. Für die mesomeren Grenzstrukturen wird die *Instant Template*-Methode ausgehend vom Produkt angewendet. Die Doppelbindung zwischen den beiden substituierten Kohlenstoffatomen wird durch eine Einfachbindung ersetzt (*Draw Normal*, mehrfach auf die Bindung klicken) und durch Anklicken des mit Brom substituierten Kohlenstoffatoms wird dort eine Methylgruppe addiert. Diese wird dann durch ein Wasserstoffatom ersetzt (Elementsymbol H, dann auf die Methylgruppe klicken).

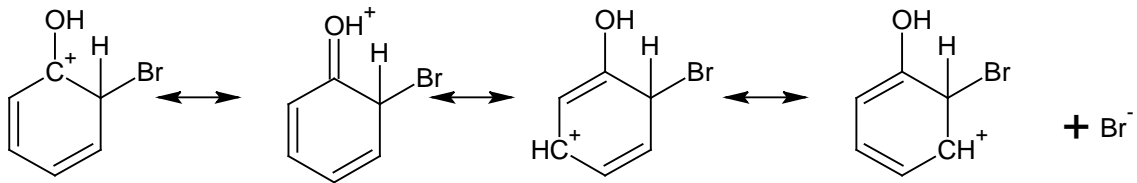


5. Mit Hilfe von *Instant Template* werden drei Kopien der gerade erzeugten Struktur erstellt und nebeneinander angeordnet. Diese vier Strukturen werden dann durch Entfernen und Erzeugen der Doppelbindungen und Festlegen der positiven Ladung in die mesomeren Grenzstrukturen überführt. Zum Erhöhen der Ladungszahl an einem Atom wird die Schaltfläche *Increment Charge* in der linken Symbolleiste genutzt und dann auf das entsprechende Atom geklickt.



Es fehlt noch das Bromid. U dieses zu erhalten wird in der Elemente-Symbolleiste Br gewächt und durch einen Klick an die richtige Stelle gesetzt. ChemSketch fügt allerdings fehlende Protonen sofort hinzu, zeichnet also HBr. Deswegen wird an der Schaltfläche *Increment (+)*

Charge das Dreieck geklickt und Decrement (-) Charge gewählt. Ein Klick wandelt dann HBr in Br^- um. Die Strukturen sollten etwa folgendermaßen aussehen:

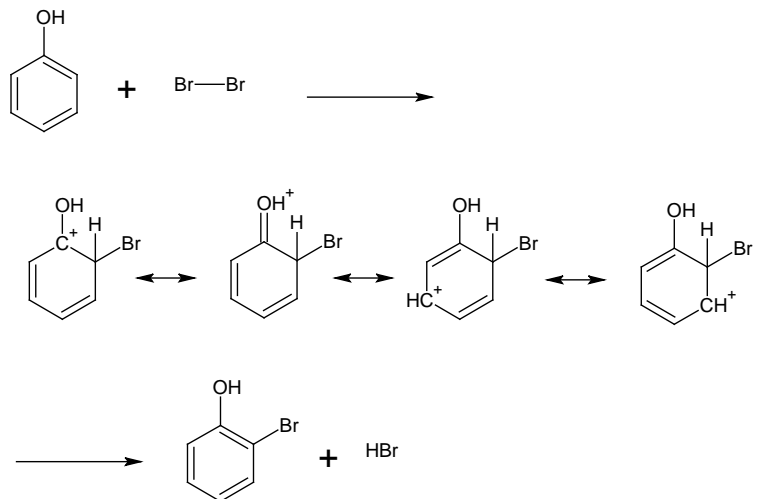


6. Nun werden Reaktionspfeile eingefügt. Dazu klickt man auf die Schaltfläche *Reaction Arrow*

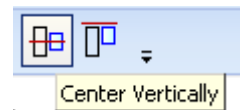
in der Structure-Symbolleiste und wählt einen Reaktionspfeil, den man hinter den Edukten einfügt. Um einheitliche Längen der Pfeile zu haben, wird der Pfeil markiert und mit den entsprechenden Schaltflächen kopiert und vor den Produkten wieder eingefügt.



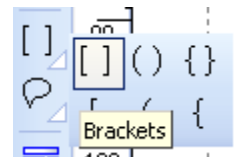
7. Zwischen den mesomeren Grenzstrukturen werden auf die gleiche Weise Mesomerie-Pfeile eingefügt. (Pfeilart wählen, zeichnen, markieren, kopieren, zweimal einfügen). In der Gesamtansicht sollte es etwa so aussehen:



8. Sofern das Kopieren nicht automatisch den Draw-Modus aktiviert hat, wechselt man durch Klicken der Schaltflächen in diesen Modus. Zuerst sollen dann die noch nicht perfekten horizontalen Ausrichtungen der Zeichenelemente korrigiert werden. Dazu wird die Shift-Taste (die zu Großschreiben) gedrückt gehalten und die Zeichenelemente einer Zeile angeklickt, wodurch diese markiert werden (alternativ Auswahl mit der *Select/Move/Resize*-Schaltfläche). Mit einem Klick auf *Center Vertically* –Schaltfläche (die heißt wirklich so!) werden die Zeichenelemente entsprechend ausgerichtet.



9. Um die mesomeren Grenzstrukturen herum fehlt noch eine eckige Klammer. Diese erstellt mit dem entsprechenden *Brackets*-Symbol der linken Leiste, das nach Klick auf das Dreieck verschiedene Klammerformen anbietet. Je nach Einstellungen sind die Klammern noch von einer gestrichelten Linie umgeben. Farbe der Klammer und der Umrandung sind im Menü *Tools* durch die Menüs *Pen Style Panel* und *Fill Style Panel* einzustellen oder auch zu entfernen.

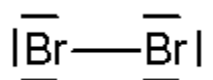


10. Freie Elektronenpaare sind vom Programm leider nicht vorgesehen.

Am einfachsten erhält man sie wenn man die Schaltfläche *Line* (linkes Menü, ganz oben) wählt und eine waagerechte, kurze Linie zeichnet.

Nach dem Anwählen mit *Select/Move/Resize* kann die Länge geändert werden, über *Pen Style Panel* aus dem Menü *Tools* Strichdicke und Farbe so gewählt werden,

dass es zu den Bindungen passt. Hat man ein gutes freies Elektronenpaar gezeichnet so wird es immer wieder kopiert *Select/Move/Resize* oder *Rotate 90°* richtig ausgerichtet. Al-



ternativ kann man aus dem *Template* (Bibliothek) *Lewis Structures* freie Elektronenpaare, bestehend aus zwei Punkten, kopieren.

11. Als nächstes sollen die Elektronenwanderungspfeile eingefügt werden.

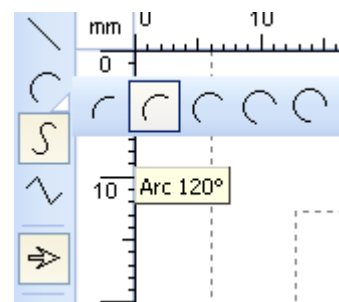
Dafür sind im linken Menü die folgenden Schaltflächen wichtig:

Line: zeichnet eine gerade Linie

Arc: zeichnet eine gebogene in Form eines Kreisausschnitts

Curve: Zeichnet eine flexible S-Kurve

Arrow: zeichnet verschiedene Pfeilspitzen



Man beginnt mit einem einfach gebogenen Elektronenwanderungspfeil, indem man auf der Fläche *Curve* das Dreieckssymbol anklickt, worauf sich ein Menü öffnet, in dem man *Arc 120°* wählt und zudem auf das *Arrow*-Symbol aktiviert.

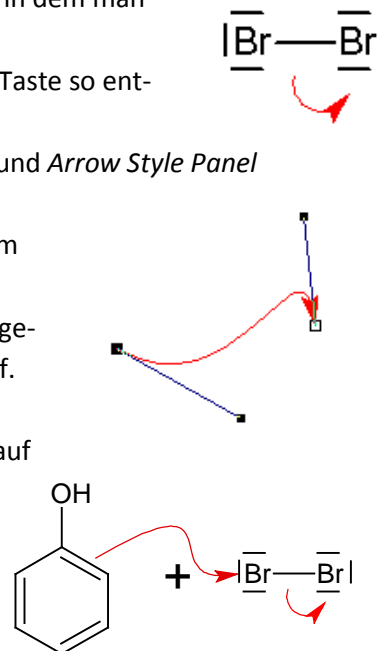
Klickt man dann auf das Arbeitsblatt und zieht die Maus bei gedrückter Taste so entsteht ein Pfeil.

Diesen kann man durch die Menüs *Pen Style Panel* und *Fill Style Panel* und *Arrow Style Panel* aus dem Menü *Tools* in Bezug auf Farbe, Strichart usw. noch anpassen.

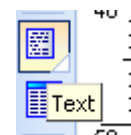
Wichtig ist insbesondere die Aufklappfläche im *Arrow*-Menü neben dem Pfeil, die weitere Pfeilspitzenarten erlaubt.

Häufig sind Kreisbögen nicht ausreichend, sondern es werden doppelt gebogene Pfeile benötigt. Dazu wählt man die Schaltfläche *Curve* (und ggf. *Arrow*) und zeichnet den Pfeil vom Ursprung zur Spitze.

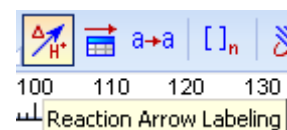
Anschließend wählt man die Schaltfläche *Edit Nodes* (oberes Menü, links) und klickt auf eines der Kästchen, das an den Enden der Kurve erscheint. Es entstehen zwei neue Linien mit Quadraten an den Enden. Durch das Verschieben der vier Quadrate kann die Kurve nach Belieben verändert werden.



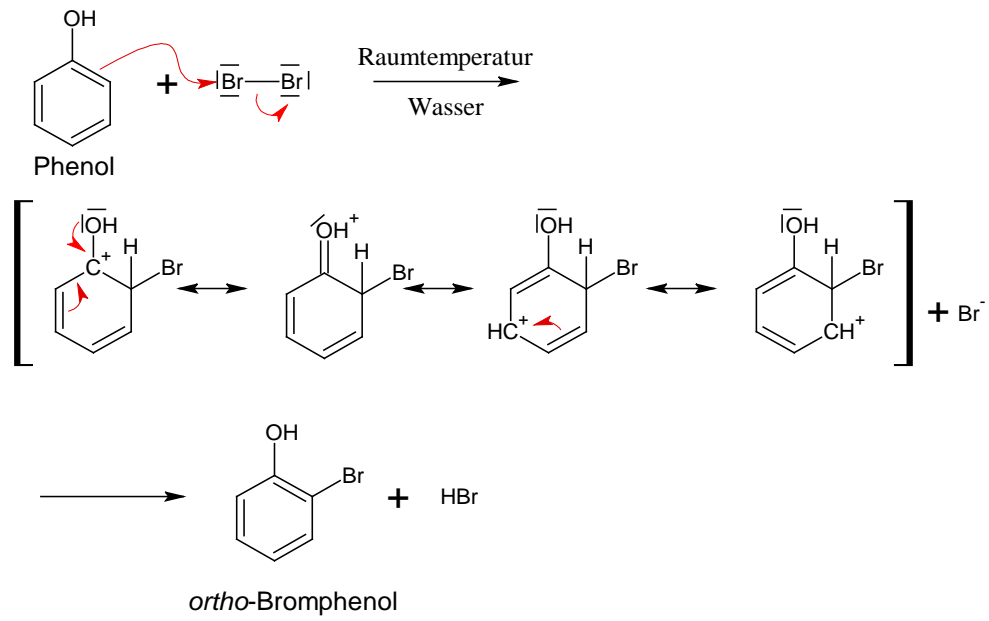
12. Zur Beschriftung kann die *Text-Funktion* genutzt werden. Nach dem Klicken auf die Schaltfläche und dann auf das Arbeitsblatt entsteht eine Textbox, in die der gewünschte Text geschrieben werden kann. Gleichzeitig wird am oberen Rand eine neue Schaltfläche für die Textformatierung angezeigt.



13. Zum Abschluss können noch weitere Daten wie Reaktionsbedingungen hinzugefügt werden, beispielsweise bei den Reaktionspfeilen. Dieses macht man sinnvollweise nicht über die Textfeldfunktion im Draw-Modus, sondern nach Auswahl des Pfeils im Structure-Modus über die Funktion *Reaktion Arrow Labeling*.



Nach Abschluss dieser Schritte könnte der ganze Mechanismus so aussehen:



B.2.7 Zeichnen von Versuchsaufbauten

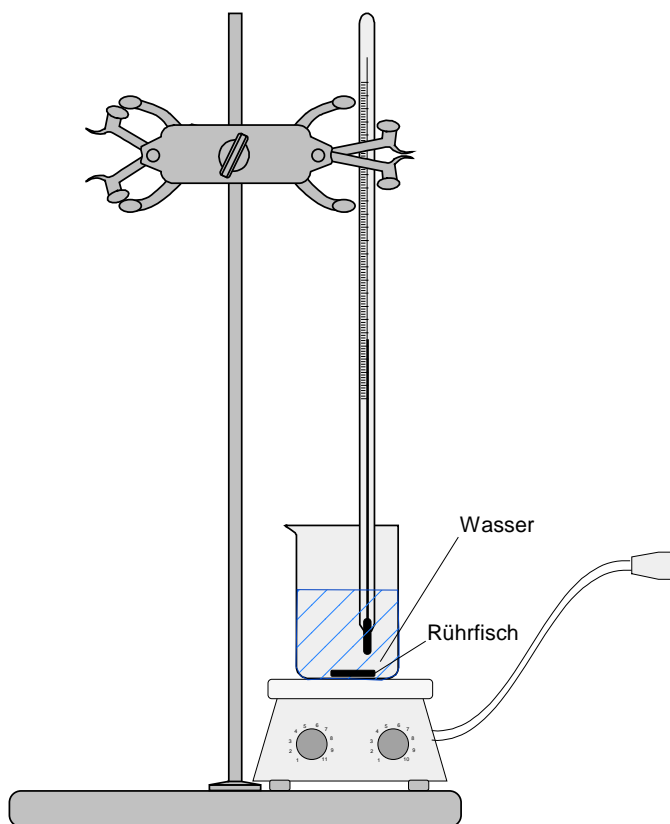
Viele Versuchsanleitungen enthalten nur Beschreibungen von Versuchsaufbauten – was bei den häufig vorkommenden, unvollständig lesenden Schülern zu teilweise abenteuerlichen Aufbauten führt.

Nun sagt bekanntlich ein Bild mehr als tausend Worte und so kann eine gute Zeichnung einer halben Seite Beschreibung überlegen sein. Neuerdings werden häufig Photos gemacht, aber gute Photos sind durchaus zeitaufwändig zu erstellen und verlangen häufig Farbdruck, kommen also aus Kostengründen nicht immer in Frage.

In diesem Fall kann eine gute Zeichnung die beste Lösung sein.

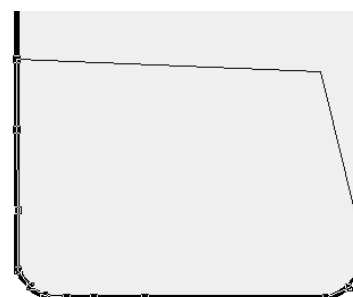
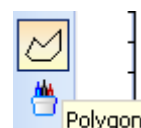
Ziel ist die Zeichnung eines einfachen Versuchsaufbaus, mit dem z.B. grob bestimmt werden kann, ob das Lösen eines Salzes in Wasser exotherm oder endotherm stattfindet.

Grundlage ist das Template *Lab Kit*, das aus sieben Seiten besteht und die wesentlichen Glasgeräte enthält. Wie allerdings bemerkt gibt noch deutliche Lücken – erheblich umfangreicher ist hier C-Design, dessen Bedienung allerdings sehr schwer zu erlernen ist.



1. Man beginnt mit ChemSketch im Draw-Modus und wählt *Templates* → *Template Window*. Da das im Verlauf dieser Anleitung häufiger passieren soll, spart es Zeit, sich dafür die Funktionstaste F5 zumerken. Sollte das *Lab Kit* nicht in der Liste der Bibliotheken (Templates) erscheinen, wählt man es durch das Drop-down-Menü aus.
2. Man beginnt mit dem Magnettrührer, den man auf Seite 2 anklickt und durch einen weiteren Klick im Arbeitsblatt einfügt.
3. Das nötige Stativmaterial findet man auf Seite 6. Es wird ebenfalls angeklickt und eingefügt, wobei es allerdings noch eine Bürette enthält. Deswegen es markiert und *Objekt* → *Ungroup* aufgerufen. Danach kann die Bürette einzeln ausgewählt und gelöscht werden.
4. Anschließend werden Becherglas (S. 1) und Thermometer ohne Schriff (S. 3) eingefügt und platziert.
5. Das Wasser wird mittels der *Polygon*-Schaltfläche erzeugt. Dazu stellt man die Vergrößerung auf 400 % und legt durch Klicken entlang des Erlenmeyerkolbenrandes Punkte fest, die die Wasserfläche begrenzen. Als letztes klickt man auf den Anfangspunkt und

drückt dann die Escape-Taste, worauf sich die gewählt Fläche färbt. Füllfarbe und -muster sowie Eigenschaften der Umrandung werden wieder über die Menüs *Pen Style Panel* und *Fill Style Panel* aus dem Menü *Tools* eingestellt, wobei sich eine gestreifte Fläche gut eignet, da ja die Geräte in der Lösung er-



kennbar bleiben müssen.

6. Der Rührfisch wird über die Funktion Rounded Rectangle erzeugt und die Eigenschaften wieder mittels der Menüs *Pen Style Panel* und *Fill Style Panel* aus dem Menü *Tools* eingestellt.



Die Beschriftungen werden wie bekannt mittels der Textfelder, die Linien durch *Line* erstellt.

Damit ist die Zeichnung vollendet und kann in Textdokumente kopiert werden.

C Übungsaufgaben

Bitte erstellen Sie zur Übung folgende Arbeitsblätter:

a. Zeichnen Sie Strychnin!

b. Zeichnen Sie Phenolphthalein in der farblosen und der farbigen Konfiguration und zeichnen Sie die Elektronenwanderungspfeile ein!

c. Zeichnen Sie Den Mechanismus der radikalischen Polymerisation von Styrol mit AIBN als Radikalstarter.

Achten Sie darauf, Radikalpfeile mit halben Spitzen zu zeichnen und erklären Sie den die Regiospezifität des radikalischen Angriffs auf die Doppelbindung, bei der das benzyliche Radikal entsteht.

Tipp: Hier helfen die Templates *Orbitals* und *Reaction Symbols* sowie die 3D-Drehfunktion *3D Rotation* im Structure-Modus.

