



UNIVERSITÄT
BAYREUTH



Seminar

Multimediale Fähigkeiten und Fertigkeiten für den Naturwissenschaftlichen Unterricht

05 Formeditoren

Inhalt

5	Formeleditoren	3
5.1	Beschreibung	3
5.2	Formeleditoren für mathematische Anwendungen in Office 2013 (und höher)...	3
5.2.1	Übung 1: Das vollständige Elementsymbol.....	3
5.3	Strukturformel-Editoren	4
5.3.1	Übung 2: Zeichnen einer einfachen Struktur mit IUPAC-Sonderzeichen	6
5.3.2	Übung 3: Zeichnen einer kovalenten, zusammengesetzten Struktur	8
5.3.3	Übung 4: Zusammenfügen eines Versuchsaufbaues aus fertigen Einzel-Geräten	9
5.3.4	Zusatz: selbst erstellte Geräte importieren.	10
5.3.5	Alternativen:	11
5.3.6	Übung 5: Zeichnen und Optimieren von 3D-Formeldarstellungen	11
5.4	Leistung F1.....	13
5.4.1	Anforderungen F1	13
5.4.2	Mögliche Aufgaben	13
5.5	Leistung F2.....	15
5.5.1	Zusätzliche Anforderungen	15
5.5.2	Mögliche Aufgaben	15

5 Formeleditoren

[Download Abbildungen](#), pptx

Die Chemie verfügt über eine Kürzel-Fachsprache mit besonderen Zeichen und Positionen, die in herkömmlichen Text-Editoren nicht darstellbar sind. Diese Einheit zeigt Ihnen, inwieweit man sich mit Hilfe von Zusatzfunktionen in Word teilweise helfen kann und bietet Übungen für kovalente Molekülformeln und Versuchsaufbauten in einem kostenfreien Programm.

5.1 Beschreibung

Ich unterscheide zwei Arten von Formel-Editoren:

1. Software für **mathematische Formelschreibweisen**; sie ist häufig als Tool bei Office-Anwendungen enthalten und findet in der Chemie gelegentlich Anwendung (chemisches Rechnen oder Kern-Chemie).
2. Spezifische Software für Chemiker zum zeichnen **kovalenter Molekül-Formeln** wird häufig eingesetzt und sollte schon von Lernenden zum Einstieg in die organische Chemie in Grundzügen beherrscht werden.

5.2 Formeleditoren für mathematische Anwendungen in Office 2013 (und höher)

Microsoft Office verfügt über ein Tool, mit dem sich in der Chemie

- mathematische Schreibweisen (mehrfache Brüche, Wurzel, Matrizen, usw.) sowie
- die vollständige Symbol-Darstellung von Teilchen realisieren lassen.

Auf spezifisch mathematische Schreibweisen wird nicht näher eingegangen (ist trivial, liebe Mathematiker 😊)

5.2.1 Übung 1: Das vollständige Elementsymbol

Ziel ist es, die vollständige Symbol-Schreibweise des Kohlenstoff-Isotops ^{12}C in der anionischen Form korrekt darzustellen.

1. Öffnen Sie PowerPoint 2013. Entfernen Sie im neuen Dokument alle vorgegebenen Textfenster (nicht Titelfeld).
2. Registerkarte **Einfügen**, Menü **Formel** (Symbol π). Es erscheint ein Feld mit der Aufforderung „Geben Sie hier eine Formel ein“, gleichzeitig die zusätzlichen Menüs Zeichentools und Formeltools.
3. In **Formeltool**, **Entwurf** klappen Sie **Hoch/Tief** auf und wählen Sie *links tiefgestellt-hochgestellt*. Das Format erscheint in einem Textfeld, aber ziemlich klein. Stört noch nicht: Sie können es über **Ansicht**, **Zoom** vergrößern.
4. Geben Sie die Massenzahl, die Ordnungszahl und das Symbol ein.
5. Nun fehlen noch die Ionenladung und die Teilchenzahl. Dies geht leider nur mit einem Trick: fügen Sie hinter das Symbol nochmal **Hoch/Tief links tiefgestellt-hochgestellt** ein. Tragen Sie 4- als Ladung und (1 währe zu leicht als Teilchenzahl das Unendlich-Zeichen ein. Sie finden es im Symbole-Fenster, Bereich **Grundlegende Mathematik**. Das leer bleibende größere Feld rechts soll nicht weiter stören, es wird nicht gedruckt.

Hinweis 1: Erstmalig finden Sie im Bereich **Symbole**, Teil **Pfeile**, den Gleichgewichtspfeil („Harpune nach rechts über Harpune nach links“).

Hinweis 2: Sie können erstmals auch Pfeile mit Reaktionsbedingungen schreiben: wählen Sie **Operator**, **Pfeil nach rechts unten** und geben Sie in das Feld **1000°C** ein.

6. Nun könnte man die Größe anpassen, falls nötig: gesamtes Feld markieren, dann Schriftgröße anpassen.
7. Schriftart ändern ist etwas komplizierter: gewünschten Formelbereich innen im Formelfeld markieren, **Formeltools**, **Entwurf**, im Menü **Tools** den Punkt **abc Normaler Text** wählen (der Eintrag färbt sich um). Dann über Register Start wie gewohnt Schriftart und -größe ändern, z. B. auf die Schriftart Ihres sonstigen Textes.

Das gerade erstellte Objekt lässt sich

- als gif-Folie speichern, zurecht schneiden und als Bild in HTML-Dokumente einbinden,
- mit weiteren Objekten zu Kern-Gleichungen o. ä. kombinieren, achten Sie dabei auf gleiche Endgrößen nach dem Ziehen, am besten über das Einstellen gleicher Höhen über rechte Maustaste, Größe und Position in % oder cm.

5.3 Strukturformel-Editoren

Für kovalente Moleküle gibt es eine Reihe von Formel-Editoren speziell für Chemiker:

Name	Ver.	Bemerkungen	Preis
ChemSketch (ACD labs)	2018 1.1	Engl.; 3D, Glasgeräte	Freew.
Accelrys Draw (ISIS, BIOVIA)	4.1	Engl.;	Freew.
KnowItAll (BioRad)	2018	3D, Glasgeräte, Spektren, IUPAC-Nomenklatur, gif	Freew. Ac.Ed.
ChemOffice pro (Cambridgesoft)	18.1	Engl., gif, academic	\$ 831/a
ChemDraw prime	18.1	Engl.	\$ 182/a

Abb. 5.1: Aktuelle Marktlage Formel-Editoren, Stand 06/19

Jedes der erwähnten Programme bietet spezifische Sonder-Funktionen, die hier nur beispielhaft gelistet werden sollen:

- 2D- in 3D-Formeln konvertieren,
- Formeln nach IUPAC benennen,
- Formeln aus IUPAC-Namen konstruieren,
- Experimental-Aufbauten zeichnen,
- NMR-, MS- und/oder IR-Spektren vorhersagen,
- Formeln von gescannten Vorlagen erkennen.

Exkurs: Begriffe rund um chemische Formeln.

Elementar-Formel: gibt die Art und das Zahlenverhältnis von Atomen in einer Verbindung an: z. B.: NaCl, CaCl₂, CH₂O (Glucose!). Synonym: **Verhältnis-Formel**.

Molekül-Formel: gibt die Art und die Anzahl von Atomen in einer Verbindung an. z. B.: $C_6H_{12}O_6$ (Glucose), C_2H_6O (Ethanol). Synonym, **Gebrauch aber nicht empfohlen: Summen-Formel**. Gebräuchlich ist auch die **rationelle Formel**: $H_3C-COOH$. Hier sind die Atome so gruppiert, dass man funktionelle Gruppen erkennt.

Konstitutionsformel: gibt die Verknüpfungsart (Konstitution) von Atomen im Molekül an, ohne jedoch die vollständige Struktur des Moleküls aufzuzeigen. Sie sollte von der Struktur-Formel unterschieden werden.

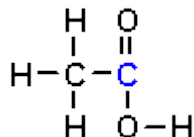


Abb. 5.2: Konstitutionsformel für Ethansäure (Essigsäure)

Struktur-Formeln vermitteln in zweidimensionaler Darstellung Informationen, die über diejenigen der Konstitutionsformeln hinausgehen, z. B. Verknüpfungen, die sich nicht mit Konstitutionsformeln darstellen lassen, spezielle Bindungsarten oder die räumliche Anordnung von Atomen und Atom-Gruppen.

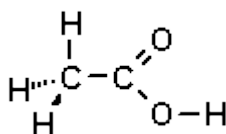


Abb. 5.3: Struktur-Formel für Ethansäure mit der Doppel-Bindung in der Carbonyl-Gruppe und der sp^3 -Umgebung des Methyl-C-Atoms.

Darstellungsvarianten: Elektronen-Formel, Valenzstrich-Formel, Skelet-Formel, 3D-Formel. Der Begriff 3D-Formel kommt in den DIN-Normen und IUPAC-Veröffentlichungen nicht vor. Wir bezeichnen damit Formel-Darstellungen, die:

- die exakte, statisch-räumliche Anordnung von Atomen und Atom-Gruppen wiedergeben und
- es dem Betrachter ermöglichen, das Molekül von mehreren Seiten zu betrachten.

Genau genommen ist die Darstellung nur pseudo-3D, da auf zweidimensionalem Bildschirm nur ein 3D-Endruck vermittelt wird.

Gängige Darstellungsformate sind pdb (protein data base, älter und eher für große Moleküle wie Proteine gedacht) und JMOL (neuer, sehr vielseitig).

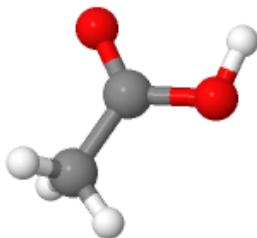


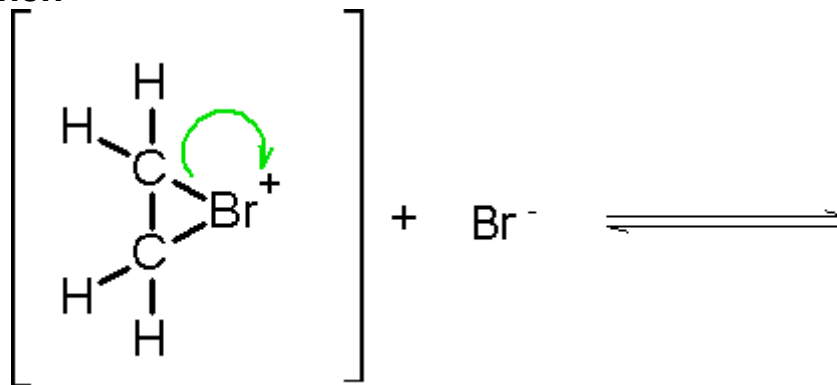
Abb. 5.4: Essigsäure im pdb-Format, Kugel-Stäbchen-Darstellung. Für Word ist noch keine Einfüge-Möglichkeit bekannt, deswegen lässt sich die Struktur hier nicht bewegen

Beispiele für JMOL-Darstellungen mit Hilfe von Java finden sie [hier](#).

Zusammenfassung Formelarten:

1. Elementar-Formel: CH_2O = Glucose
2. = Verhältnis-Formel (Ionen-Verbindungen): CaCl_2
3. Molekül-Formel: $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$
4. Rationelle Formel: $\text{H}_3\text{C-COOH}$
5. Konstitutionsformel = „Struktur-Formel“
6. Struktur-Formel: mit 3D-Anteil (Bindungswinkel, Stereochemie, ...)

5.3.1 Übung 2: Zeichnen einer einfachen Struktur mit IUPAC-Sonderzeichen



σ - Komplex

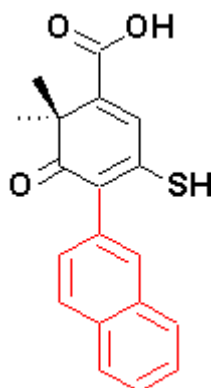
Abb. 5.5: Angestrebtes Ergebnis von Übung 2

1. Öffnen Sie das Programm „ChemSketch“ vom Desktop, Zugang Chemie.
2. Das Programm ins voreingestellt auf die Struktur-Zeichenfunktion („Structure“). Damit wird die Grund-Struktur der Formel erstellt.
3. Ändern Sie Schriftart, Schriftgröße, Bindungsstärke und -länge usw. in **Tools, Structure Properties**: Bereich *Common*: *Current Style Normal*, Show Carbons: Häkchen bei *all* setzen, Size Calculation Atom Symbol Size 14, Atom Style *Arial*, **Set Default**.
Bereich *Atom*: n in blauer Leiste anklicken, fett formatieren durch Anklicken von B, **Set Default**.
4. Zum Erstellen des C-Grundkörpers Auf „C“ (linke Leiste) klicken. Dann klickt man mit der linken Maustaste auf die Arbeitsfläche (eher links orientieren, da man eine Gleichung erstellen möchte). Es erscheint „CH₄“.
5. Durch erneutes Drucken auf das „C“ des „CH₄“ kann man nun die Bindung zum zweiten „C“ zeichnen. Dabei sollte das Symbol **Draw Normal** gewählt sein. Man hält die linke Maustaste so lange gedrückt, bis sich der Cursor auf der gewünschten Stelle befindet. Dabei ist zu beachten, dass die Linie gleich gerade gezeichnet wird. Auch der Abstand sollte so gewählt werden, dass Brom im Anschluss nicht daneben „gequetscht“ wird.
6. Man wählt nun in der linken Leiste Brom „Br“ aus und klickt mit dem Cursor rechtsmitten neben die C-C-Bindung (s. o.). Es erscheint „HBr“.
7. Man klickt erneut auf HBr und führt die Bindung durch gedrückt halten der linken Maustaste zum ersten C. Danach wiederholt man den Vorgang zum zweiten C. Das man jeweils am „C“ angekommen ist, erkennt man durch das Erscheinen von „CH₃“ bzw. „CH₂“.
8. Man hat nun einen cyclischen Komplex, bei dem das Brom eine positive Ladung trägt (erscheint automatisch). Im Folgenden muss die Struktur markiert werden. Dazu klickt man auf das Symbol „Select/Move“ (Symbol: blaue Kugel mit rotem Pfeil). Die Struktur wird durch Ziehen des Cursors von oben links nach unten rechts markiert.

9. Nun klicken Sie **Tools, Add Explicit Hydrogens**, um die weiteren H-Atome mit Bindungen angezeigt zu bekommen.
10. Um die richtigen Bindungslängen-Verhältnisse zu bekommen, klickt man, während die Struktur noch markiert ist auf **Tools, Clean Structure**.
11. Um den seitenverkehrten Komplex zieht man nun die Klammer: **Polymers** (Symbol: eckige Klammer mit tief gestelltem „n“). Die Klammern setzt man durch Anklicken eines Punktes links oberhalb der Struktur und ziehen des Cursors nach rechts unterhalb (keinen Index angeben).
12. Der δ -Komplex ist nun seitenverkehrt, was man durch Auswahl des Symbols **Select/Rotate/Resize** (blaue Kugel mit rotem Pfeil um sich geschlungen) verändern kann. Man klickt mittig auf die Struktur, hält die Maustaste gedrückt und zieht nach rechts. Es erscheint ein Verhältnisfeld. Man zieht so lange, bis man etwa „-100%“ erreicht hat. Proportionen bleiben erhalten.
13. Zum Zeichnen des grünen Pfeils muss man nun vom **Structure**- in den **Draw**-Modus wechseln (links oben).
14. In der linken Leiste befindet sich die Form „Arc 204°“. Diese anklicken und mittig an der gewünschten C-Br-Bindung ansetzen. Maustaste gedrückt lassen und die Linie zu „Br“ führen.
15. Danach klickt man, um eine Pfeil-Spitze zu erhalten, doppelt auf die eben erstellte Linie. Es öffnet sich das Fenster **Objects Panel**. Dort wählt man den Reiter **Arrow** aus und klickt bei der rechten Einstellung zu Arrowhead Shape die gewünschte Pfeil-Spitze an. Wichtig: Zum Anwenden der Einstellung danach immer auf **Apply** klicken. Danach Reiter Pen auswählen und noch die gewünschte Linienstärke („Width“) einstellen, am besten 1,5 pt bis 2 pt, **Apply**.
16. Zum Einfärben der Linie mit der **rechten Maustaste** auf die gewünschte Farbe in der Farbleiste (unten) klicken.
17. Nun auf das Symbol **Text** (linke Leiste) klicken und neben der Klammer ein Textfeld platzieren. Dort den Text „Br [leer] (dann auf das Symbol s^+ in der oberen Leiste klicken) – „. Darauf achten, dass die Schriftgröße/-dicke mit der aus der Formel übereinstimmt.
18. Zum Erstellen des Doppel-Pfeils das Symbol **Arrow** in der linken Leiste anklicken. Den Pfeil durch „ziehen“ mit der Maus rechts neben „Br“ setzen. Danach Doppelklick auf den einfachen Pfeil. Es erscheint das Fenster Objects Panel. Reiter Arrow, Body Style, *[zwei Linien] 4 pt* wählen und dann bei Arrowhead Shape die entsprechenden Pfeil-Spitzen einstellen. (Obere Zeile: Doppel-Pfeilspitze links; Untere Zeile: Doppel-Pfeilspitze rechts).
19. Man wechselt nun in den Structure-Modus zurück und klickt dort auf das rote Plus („Reaction Plus“). Das Plus platziert man dann zwischen Komplex und Br^- .
20. Abschließend, zur Benennung des Komplexes, wählt man das Symbol Edit Text („ab“, oben). Dann klickt man unter den Sigma-Komplex. Es öffnet sich das Fenster Edit Label. Man wählt nun das Symbol „ Ω “ (Greek Font) und tippt in die Textzeile „s“, welches als „ δ “ erscheint. Danach nochmals auf „ Ω “ klicken, um den Befehl zu deaktivieren. Dann noch „-Komplex“ schreiben und auf die Arbeitsfläche klicken. Das Textfeld kann, wie alle Teile der Formel, beliebig verschoben werden. Es muss nur das Symbol **Select/Move/Resize** (siehe 8.) angeklickt und das Textfenster angefasst werden.
21. Die Struktur ist nun fertig. Sie kann als ChemSketch-Datei (.sk2) oder als Bild abgespeichert werden. Des Weiteren kann sie, nachdem man sie markiert hat direkt über

Strg + C kopiert und in ein Word- oder PowerPoint-Dokument (z. B. Arbeitsblatt) eingefügt werden (wenn es im Pool nicht geht – lokal zu Hause funktioniert es auf jeden Fall).

5.3.2 Übung 3: Zeichnen einer kovalenten, zusammengesetzten Struktur



Formel 2

Abb. 5.6: Angestrebtes Ergebnis von Übung 3

Viele Standard-Verbindungen (Kohlenhydrate, Aminosäuren, DNA, usw.) findet man vorgefertigt unter **Templates**, **Template Window** oder durch Drücken von F5. Ein kurzer Blick kann viel Zeichenarbeit ersparen.

*Das Ziel von Übung 3 ist das Zusammensetzen größerer Moleküle aus Bausteinen in sauberer Skelett-Schreibweise. Dazu in **Properties**, **Show Carbons**, **All** Häkchen wegnehmen.*

1. **Benzene** aus der Symbol-Leiste rechts auswählen. Ersten Ring mittig auf die Zeichen-Ebene setzen.
2. Zweiten Ring direkt an die Kante links oben durch Hinschieben des Cursors platzieren.
3. Jetzt Symbol Cyclohexane wählen.
4. Cursor ans oberste C-Atom des zweiten Benzol-Rings bewegen, damit man die C-C-Bindung erhält.
5. Jetzt aus der linken Symbol-Leiste Atom-Art C wählen und sicher stellen, dass in der oberen Leiste **Draw Normal** eingestellt ist.
6. Jetzt an den Cyclohexanring-Positionen 2 und 6 jeweils auf den Ring-Kohlenstoff klicken. Man erhält Einfach-Bindungen (Methyl-Gruppen), die bereits den richtigen Winkel aufweisen.
7. An Ring-Position 2 noch einmal etwa mittig auf die neu gezeichnete Einfach-Bindung klicken – es entsteht eine Doppel-Bindung.
8. Element O wählen und durch Klicken an das Ende der Doppel-Bindung setzen.
9. Element S wählen und ans Ende der Einfach-Bindung in Position 6 setzen. Die Gruppe wird automatisch zu SH.
10. In der rechten Symbol-Leiste **Acetyl** (COOH) wählen und an die 4. Position setzen.
11. Wieder Element C auswählen und durch direktes Klicken auf die Bindungen Doppel-Bindungen erzeugen.
12. Wählen Sie in der oberen Symbol-Leiste **Up Stereo Bonds** (Keil) und setzen Sie sie durch Klicken, danach das Gleiche mit **Down Stereo Bonds**. Stören Sie sich nicht an der ungewöhnlichen Anordnung der Methyl-Gruppen, denn:

13. Über **Tools, Clean Structure** entstehen die richtigen Winkel.
14. Zum farblichen Markieren: Aktivieren Sie die Lasso-funktion (viertes Symbol v. l. in der oberen Symbol-Leiste), markieren Sie die entsprechende Gruppe und wählen sie die gewünschte Farbe in der unteren Leiste durch Rechtsklick. Heben Sie die Markierung durch Klick daneben auf.

Spiele: Das Programm enthält des Weiteren die Funktion Generate Name for Structure unter **Tools, Generate, Name for Structure**. **Achtung:** Es handelt sich um automatisch generierte Namen, die nicht immer der IUPAC-Nomenklatur entsprechen. Der automatisch generierte Name der oberen Struktur wird ausgegeben mit 6,6-dimethyl-4-(naphthalen-2-yl)-5-oxo-3-sulfanylcyclohexa-1,3-dien-1-carboxylic acid. Hätten Sie sicher auch hingekriegt 😊.

5.3.3 Übung 4: Zusammenfügen eines Versuchsaufbaues aus fertigen Einzel-Geräten

Beim Erstellen von Skizzen eines Versuchsaufbaus ist das Programm ChemSketch sehr hilfreich. Fast alle Geräte, die man im Chemie-Unterricht benötigt, sind vorgefertigt. Das Erstellen von Versuchsaufbauten muss im Draw-Modus durchgeführt werden, da nicht alle Apparaturen vorgefertigt im Template-Feld enthalten sind.

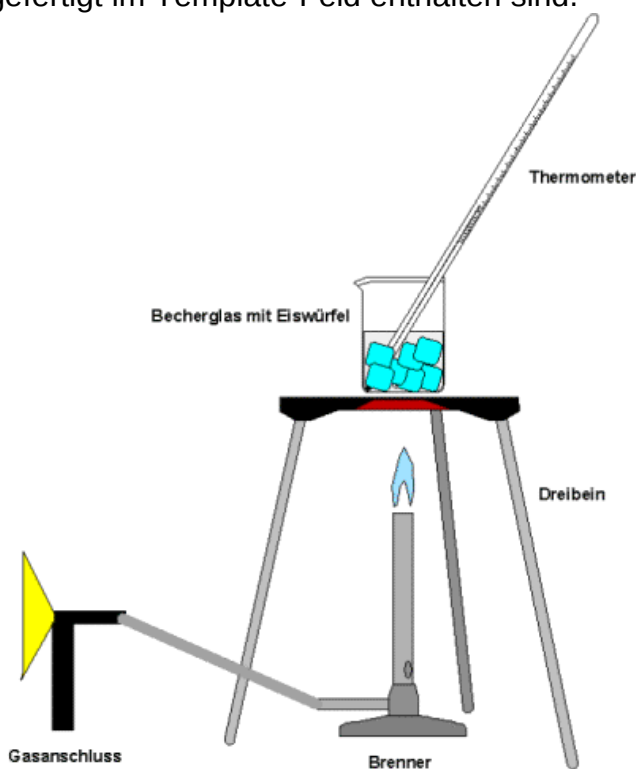


Abb. 5.7: Angestrebtes Ergebnis von Übung 4.

Achtung: die Abbildung enthält keine nichtgerade Schlauchverbindung!

1. Im Menü **Templates, Template Window** in der oberen Leiste Option **Lab Kit** wählen. Links neben Lab Kit kann man nun zwischen sieben verschiedenen Bereichen auswählen.
2. Dreibein: Tripod Stand ist unter **7(7) Burners, Beakers, Crucibles**. Nach dem Auswählen kann man die Objekte immer direkt in die Zeichen-Ebene einfügen. **Achten Sie auf eine sinnvolle Anordnung.**
3. Becherglas: Beaker (eines, das mit Wasser gefüllt ist).
4. Brenner: Burner.
5. Thermometer: Durch Anklicken des Symbols Select/Move/Rotate kann man das Thermometer in eine schräge Position bringen. Dazu klickt man auf den Anfasser

(schwarze Quadrate an den Markierungsgrenzen) und dreht das Thermometer in die gewünschte Position.

6. Die Eiskwürfel müssen per Hand gezeichnet werden. Man wählt in der linken Symbol-Leiste Rounded Rectangle und fügt den ersten Eiskwürfel ins Glas ein. Durch Drehung der Eiskwürfel wird eine realistischere Darstellung erreicht. Durch einfärben (z. B. Eisblau) erreicht man eine zusätzliche Anschaulichkeit.
7. Zum einfärben muss die Form markiert sein. Dann klickt man mit der linken Maustaste auf die gewünschte Farbe (es wird die Fläche der Form eingefärbt). Möchte man den Rand auch einfärben, so klickt man zusätzlich noch mit der rechten Maustaste auf die gewünschte Farbe.
8. Als Zusatz kann man z. B. noch eine Verbindung des Brenners mit dem Gas-Anschluss zeichnen. Dies beugt Fragen wie „Arbeitet der Brenner wohl mit Luft?“ oder „Der Brenner ist doch gar nicht angeschlossen!“ vor. Zum Zeichnen arbeitet man dabei mit **Polygon**, **Rectangle** und **Line**.
9. Eine Beschriftung der einzelnen Elemente erfolgt abschließend über **Text** (linke Symbol-Leiste). Anklicken und das Textfeld an der gewünschten Stelle durch Ziehen platzieren. Danach Text einfügen. Durch Wählen des Symbols **Pfeil** (obere Leiste) kann das Textfeld danach noch beliebig verschoben werden.

5.3.4 Zusatz: selbst erstellte Geräte importieren.

Die verwendeten Geräte im Chemie-Unterricht gehen teilweise über die vorgefertigten Abbildungen im Template-Ordner hinaus. Aus diesem Grund ist es wichtig, dass man mit ChemSketch auch Abbildungen importieren kann, die in anderen Programmen erstellt worden sind. Beispielhaft soll dieser Import-Vorgang hier für den Weg einer Abbildung aus PowerPoint in ChemSketch dargestellt werden.

1. Öffnen Sie ChemSketch.
2. Man muss sich entweder für **Draw** oder **Structure** entscheiden, je nach dem womit man im Anschluss weiterarbeiten möchte (im Folgenden wird die Einstellung Draw gewählt).
3. Da man auch in ChemSketch weiterhin die Möglichkeit haben möchte, die importierte Zeichnung zu bearbeiten, ist der Import-Vorgang etwas knifflig, einfaches copy/paste ist deshalb nicht möglich. Die Objekte kommen einheitlich schwarz im Programm an und ein gesondertes Bearbeiten der einzelnen Teile ist im Anschluss nur schwer möglich.
4. Man klickt nun auf Edit, Insert Object und erhält somit zwei Möglichkeiten, eine Zeichnung zu importieren.

Variante 1: Klickt man im geöffneten Menü **Objekt einfügen** links auf **Aus Datei erstellen**, so kann man eine bereits fertige Datei auswählen (beispielsweise ein .jpg-Bild), welches dann mit dem entsprechenden Programm auf dem Computer geöffnet wird. Dort muss man das Bild markieren und kopieren (Strg + C) und kann es dann bei ChemSketch via **Einfügen/Paste/Strg + V** an der gewünschten Stelle einfügen. Man erhält dabei eine Rahmenvorgabe, welche die Umrisse des Bildes vor dem Einfügen darstellt.

Variante 2: Neu erstellen anwählen. Als Objekt-Typ wählt man nun den Datei-Typ aus, in dem die Zeichnung erstellt werden soll, in unserem Fall *Microsoft Office PowerPoint Folie*, OK. Dadurch wird im Hintergrund PowerPoint geöffnet und gleichzeitig ein grauschrattiertes Feld in der ChemSketch-Zeichenfläche eingefügt, welches die Folie der Präsentation simuliert.

5. Nun kann in PowerPoint die entsprechende Zeichnung erstellt werden, die dann gleichzeitig auch auf der ChemSketch-Arbeitsfläche entsteht.

6. Nach dem Erstellen der Zeichnung kann diese durch Doppelklick in ChemSketch jederzeit mit PowerPoint nachbearbeitet werden, es ist eine Objekt-Datei.

Hinweis: Hat man bereits eine Zeichnung erstellt, die man beispielsweise via PowerPoint nach Version 1 in die ChemSketch-Vorlage kopieren möchte, so muss die Zeichnung Schritt für Schritt übernommen werden, da eventuelle Farben beim Kopieren verloren gehen und in ChemSketch neu erstellt werden müssen.

7. Farben verändern: Doppelklick auf das eingefügte Objekt, es öffnet sich das Menü **Object Panel**. Hier auf **Fill** gehen, gewünschte Farbe auswählen und durch **Apply** bestätigen. Ggf. kann bei **Style** die Farb-Führung noch angepasst werden.
8. Um realistische Konturen zu erhalten, kann es sein, dass man z. B. Flüssigkeiten in einem Reagenzglas in den Hintergrund stellen muss, da diese sonst den Rand des Reagenzglases überdecken. Dies geschieht durch klicken von „Send to back“ (6. Icon von links, obere Leiste).
9. Das eingefügte Objekt kann nun komplett markiert werden **Select**, Objekt auswählen, **Select/Move/Rotate** und das Objekt kann mit der Maus an den schwarzen Eck-Quadraten, die das Objekt umgeben, rotiert werden.

5.3.5 Alternativen:

1. In PowerPoint wurden von Kollegen Maisenbacher Gerätschaften für Experimental-aufbauten gezeichnet und zur Verfügung gestellt. Wir haben die Datei ins neue Format übertragen und stellen Ihnen zwei Varianten zur Verfügung:

[Versuchsskizzen](#) (pptx)

[Versuchsskizzen](#) (odp)

2. Online: <https://chemix.org/>

5.3.6 Übung 5: Zeichnen und Optimieren von 3D-Formeldarstellungen

Aufgabe: Erstellen einer 3D-Kugel-Stab-Darstellung des Saccharose-Moleküls in CPK-Farben.

1. Öffnen Sie das Programm ChemSketch vom Desktop, Zugang Chemie.
2. **Templates, Template Window** (F5).
3. Wählen Sie **Sugars: alfa-D-Pyr, 1(4) Haworth Formulae**. Dort klicken Sie die benötigte Molekül-Darstellung an (welche brauchen wir denn ☺?) und übertragen sie auf die Zeichen-Fläche.
4. **Templates, Template Window**, wählen Sie **Sugars: alfa-D-Fur, 1(3) Haworth Formulae**. Dort klicken Sie die benötigte Molekül-Darstellung an (welche brauchen wir denn ☺?) und übertragen sie auch auf die Zeichen-Fläche neben die Glucose.
5. Die Fructose steht um 180° gedreht. Drehen Sie sie richtig über **Select/Move**, markieren Sie, Symbol **Flip Left to Right** anwenden. Bringen Sie C1 der Glucose auf die gleiche Höhe wie C2 der Fructose über die Cursor-Tasten. Klicken Sie auf die Arbeitsfläche, um Markierung aufzuheben.
6. Modus **Structure**, Symbol **Draw Normal**. Ziehen Sie die neue glycosidische Bindung von einem der Sauerstoff-Atome zum richtigen C-Atom. Stellen Sie sicher, dass Sie das C-Atom treffen, sonst verbinden sich die Moleküle nicht zu einer einzigen Struktur. Löschen Sie die überflüssige Hydroxy-Gruppe über das Symbol **Delete**.
7. Wählen Sie **Select/Move**. Fassen Sie das Brücken-O an und ziehen Sie es in die Mitte.
8. Wählen Sie **Up Stereo Bonds** und klicken Sie die gestrichelten Bindungen an.

9. Nun sind noch die Stereozentren 3, 4 und 5 der Fructose falsch. Am schnellsten geht es über die Atom-Symbole: wählen Sie C und zeichnen eine Methyl-Gruppe an C5 nach unten. Wählen Sie O und ändern Sie die H in OH an C3 und C4, wählen Sie H und ändern Sie die OH in H an C3 und C4.
10. Saccharose wäre in der Haworth-Schreibweise fertig und sollte so aussehen wie unten. Speichern Sie. Sie können wahlweise auch die C-Wasserstoffe ausblenden lassen: **Tools, Remove Explicit Hydrogens**.

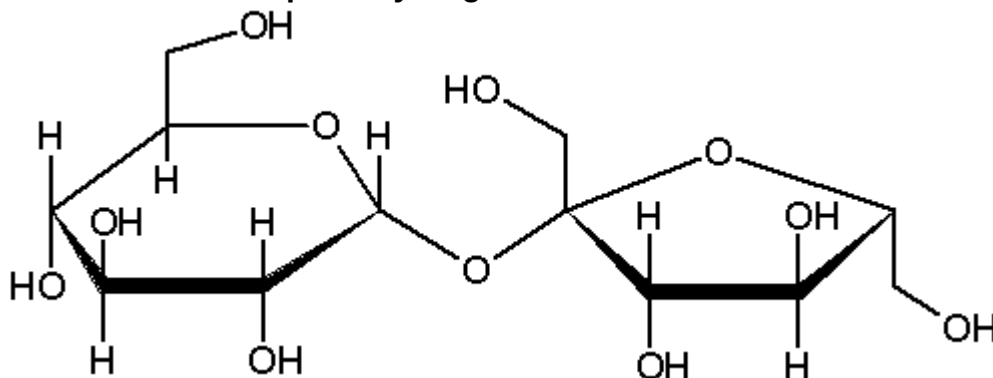


Abb. 5.8: Saccharose

Im nächsten Schritt soll die 3D-Darstellung erreicht werden:

1. Wählen Sie das Symbol **3D Optimization**. Es erscheint ein Drehen-Symbol neben dem Mauszeiger. Jetzt kann man die Struktur schon drehen.
2. Wählen Sie das Symbol **3D Viewer**. In diesem Programm-Teil lassen sich verschiedene Modell-Darstellungen einstellen. Probieren Sie Kugel-Stab-, Kalotten- und Gitter-Darstellung. Vor dem weiter Arbeiten wählen Sie die Kugel-Stab-Darstellung.
3. Stellen Sie CPK-Farben ein: **Options, Colours**. Der Hintergrund soll die Farbe Silber, H Weiß, C Schwarz und O Rot bekommen.
4. Die 3D-Darstellung kann als ChemSketch-Datei *.S3d gespeichert werden. Für Anwendungen im Web als drehbare Darstellung benötigt man *.mol Dateien.
5. Einbinden von 3D-Darstellungen geschieht, indem Sie die folgende HTML-Zeile in den Code einer Seite einfügen. Ergebnis wie unten.

http://daten.didaktikchemie.uni-bayreuth.de/3d_molekuele/02_app_einb.htm

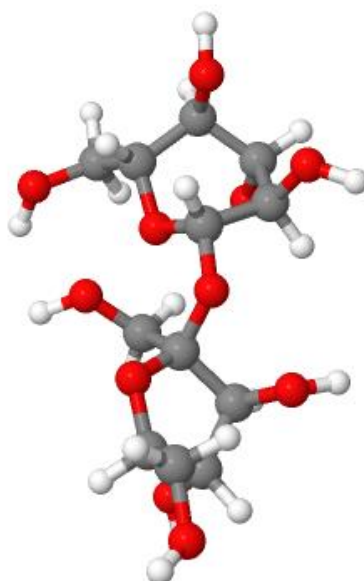


Abb. 5.9: Saccharose-Ansicht aus dem pdb-Format.
Einfügen in Word ist nicht bekannt, deshalb statisches Bild.

Spiele: Probieren Sie die verschiedenen Funktionen aus, die sich hinter einem Klick mit der rechten Maustaste auf das Bild oben eröffnen.

5.4 Leistung F1

5.4.1 Anforderungen F1

- Verzeichnis der Funktionen in einem Text-Dokument.
- Kovalente Moleküle in Skelett-Schreibweise zeichnen.
- Teil-Strukturen in unterschiedlicher Schriftgröße, Strichstärke und Farbe darstellen.
- Zwei mesomere Grenz-Strukturen nach IUPAC darstellen (ggf. anderes Beispiel).
- Ionen-Ladungen und Formal-Ladungen setzen.
- Aus Templates einfache Versuchsaufbauten aus 4 – 5 Elementen zusammensetzen (ein Element muss eine nichtgerade Schlauch-Verbindung sein).
- Formel-Darstellung oder Aufbau-Skizze zusätzlich im gif-Format ausgeben.

5.4.2 Mögliche Aufgaben

Erstellen Sie jeweils eine Skelettformel-Darstellung (Original und gif) und einen Versuchsaufbau nach o. a. Anforderungen.

Ideen-Sammlung Formeln:

- ein einfach protonierter Azo-Farbstoff
- ein einfach protonierter Triphenylmethan-Farbstoff
- zwei Schritte des Mechanismus der Veresterung kurzkettiger Edukte
- zwei Schritte des Mechanismus der Ester-Spaltung an einem kurzkettigen Ester
- fünf verschiedene Aroma-Stoffe, einer protoniert
- fünf verschiedene Duft-Stoffe, einer geladen
- fünf Aminosäuren aus unterschiedlichen Gruppen
- die 5 häufigsten Nukleinbasen
- Mesomerie am Nitrat-Anion
- Mesomerie am Carbonat-Anion
- Für einen Teilschritt eines biochemischen Reaktionsweges
- Zusammenhänge zwischen Siedepunkt und Molekül-Bau am Beispiel von Carbonyl-Verbindungen
- Zusammenhänge zwischen pKs-Werten und Molekül-Bau am Beispiel von Halogen-Carbonsäuren
- Das Alkyl-Oxonium-Ion als zentrales Interdukt-Teilchen.

Ideen-Sammlung Versuchsaufbauten:

- Apparatur zur Herstellung eines Gases aus einem Feststoff und einer Lösung
- Kopplung von zwei Waschflaschen über einen Dreiwege-Hahn
- Absaugen von Verbrennungsgasen eines Teelichts durch ein mit Eiswasser gekühltes U-Rohr
- Absaugen von Verbrennungsgasen einer Benzin-Flamme durch zwei Waschflaschen
- für eine metall-katalysierte Reaktion, z. B. Ethen-Hydrierung
- Darstellung und Reaktivität von Ethen
- Cracken von Paraffin-Öl

Abgabe-Form: Drei Dateien als E-Mail-Anhang

- eine Formeleditoren-Datei mit Formeln,
- eine mit dem Versuchsaufbau,
- ein gif-Bild mit einer der beiden Darstellungen

5.5 Leistung F2

Anforderungen F1 müssen auch hier erfüllt werden:

- Verzeichnis der Funktionen in einem Text-Dokument.
- Kovalente Moleküle in Skelett-Schreibweise zeichnen.
- Teil-Strukturen in unterschiedlicher Schriftgröße, Strichstärke und Farbe darstellen.
- Zwei mesomere Grenz-Strukturen nach IUPAC darstellen (ggf. anderes Beispiel).
- Ionen-Ladungen und Formal-Ladungen setzen.
- Aus Templates einfache Versuchsaufbauten aus 4 – 5 Elementen zusammensetzen (ein Element muss eine nichtgerade Schlauch-Verbindung sein).
- Formel-Darstellung oder Aufbau-Skizze zusätzlich im gif-Format ausgeben.

5.5.1 Zusätzliche Anforderungen

- Fertigkeit, aus Teil-Strukturen komplizierte Moleküle zusammen zu setzen; dabei sollten Kohlenhydrat-, Aminosäure- oder andere Naturstoff-Grundkörper wie Adamantan-, Steran-, Isopren-Einheiten oder Enantiomere bzw. Moleküle mit mindestens 2 Stereozentren beteiligt sein
- 3D-Optimierung ausführen
- CPK-Farben anwenden und Hintergrundfarbe ändern

5.5.2 Mögliche Aufgaben

Erstellen Sie jeweils eine Skelettformel-Darstellung (Original und gif) und einen Versuchsaufbau nach o. a. Anforderungen.

Ideen-Sammlung Formeln:

- ein einfach protonierter Azo-Farbstoff
- ein einfach protonierter Triphenylmethan-Farbstoff
- zwei Schritte des Mechanismus der Veresterung kurzkettiger Edukte
- zwei Schritte des Mechanismus der Ester-Spaltung an einem kurzkettigen Ester
- fünf verschiedene Aroma-Stoffe, einer protoniert
- fünf verschiedene Duft-Stoffe, einer geladen
- fünf Aminosäuren aus unterschiedlichen Gruppen
- die 5 häufigsten Nukleinbasen
- Mesomerie am Nitrat-Anion
- Mesomerie am Carbonat-Anion
- Für einen Teilschritt eines biochemischen Reaktionsweges
- Zusammenhänge zwischen Siedepunkt und Molekül-Bau am Beispiel von Carbonyl-Verbindungen
- Zusammenhänge zwischen pKs-Werten und Molekül-Bau am Beispiel von Halogen-Carbonsäuren
- Das Alkyl-Oxonium-Ion als zentrales Interdukt-Teilchen.

Ideen-Sammlung Versuchsaufbauten:

- Apparatur zur Herstellung eines Gases aus einem Feststoff und einer Lösung
- Kopplung von zwei Waschflaschen über einen Dreiwege-Hahn
- Absaugen von Verbrennungsgasen eines Teelichts durch ein mit Eiswasser gekühltes U-Rohr
- Absaugen von Verbrennungsgasen einer Benzin-Flamme durch zwei Waschflaschen
- für eine metall-katalysierte Reaktion, z. B. Ethen-Hydrierung
- Darstellung und Reaktivität von Ethen
- Cracken von Paraffin-Öl

Ideen-Sammlung 3D:

- Raum-Struktur von Kohlenhydrat-Molekülen
- Raum-Struktur von je einem Pärchen D- und L-Aminosäure
- Umwandlung Sessel-Twist-Wannen-Formen, z. B. Methylcyclohexan

Abgabe-Form: E-Mail-Anhang

- Zwei Dateien: eine Formeditoren-Originaldatei mit der Skelett-Formel und eine mit der 3D-Darstellung
- Weitere zwei Dateien: eine Formeditoren-Originaldatei mit dem Versuchsaufbau und eine gif-Datei mit demselben