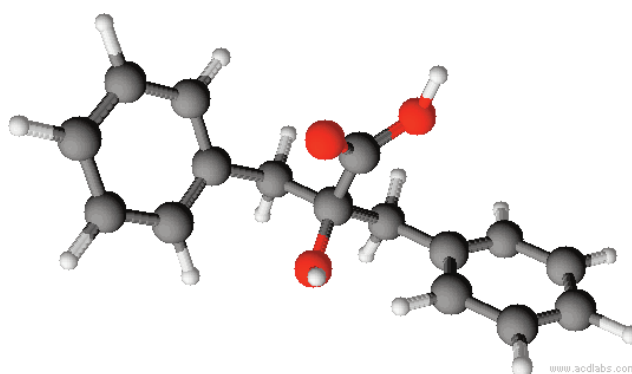


Chemsketch - Tutorials

W. Hölzel

Teil 2

1. Molekülzeichnen - Doppelbindungen, Dreifachbindung, Halbstrukturformel und Strukturformel
2. Freie Elektronenpaare, bunte Elementsymbole, Grafiken einfügen
3. Summenformeln und Reaktionsgleichungen erstellen
4. Große Moleküle mit unterschiedlichen Gruppen schnell zeichnen, optimieren und in 3D-Version darstellen lassen



Vorbemerkung

Im Tutorial Teil 2 geht es um das eigentliche Molekülzeichnen. Dabei wird auch geübt, wie man Ladungen ergänzt oder freie Elektronenpaare einzeichnet. In der 4. Übung zeige ich, wie man große Moleküle schnell darstellen kann.

Ich habe versucht, dass man allein mit Hilfe der Abbildungen des Tutoriales die Zeichnungen/Moleküle schnell erstellen kann. Hierzu habe ich alle notwendigen **Schalter/Buttons/Tools gelb** markiert und die **einzelnen Teilschritte** möglichst vollständig durchnummeriert (**orangene Nummern**). Falls die Abbildungen alleine nicht ausreichen, stehen vor den Abbildungen die dazugehörigen Texte. Durch diese Doppelungen wird das Tutorial sehr redundant. Deshalb hier mein Tipp:

Arbeitet wann immer es geht, alleine mit den Abbildungen. Der Text sollte nur als Ergänzung bei Unklarheiten zu Hilfe genommen werden.

Über Kritik, Korrekturen, Anmerkungen, Verbesserungsvorschläge würde ich mich wie immer freuen.

Wolfram Hölzel

Errata: In einigen Zeichnungen ist der Begriff „protogen“ zu lesen, was in diesem Zusammenhang absoluter Blödsinn ist. Es muss „proteinogen“ heißen. Sorry.

Allgemeine Erklärung zu diesem Tutorial





Grün sind die in sich abgeschlossene Schritte zusammengefasst. Das soll ermöglichen, bei konkreten Fragen nur an diese Stelle zu spingen und nicht alles langsam durchkauen zu müssen.

1. Schritt:

Diese Hauptschritte sind in **Teilschritten** untergliedert, die ich möglichst kleinschrittig und lückenlos versucht habe zu gestalten. Zum schnellen Überfliegen habe ich die wichtigsten Begriffe **orange** gefärbt.

1. Schritt:

Wichtige Tasten / Tastenkombinationen:

 = Umschalttaste = Hochsteltaste = Großbuchstaben
 = Strg -Taste
 + 

Office-Programme + ChemSketch

Meistens möchte man ja ChemSketch-Objekte in andere Dokumente einfügen. Dafür gibt es viele Möglichkeiten. Da ich annehme, dass jeder das eigentlich schon kann, hier nur kurz die wichtigsten Möglichkeiten im Schnelldurchgang:

1. Möglichkeit:

Man **speichert** die Datei in ein gewünschtes Format welches Word lesen kann (*.gif, *.jpg, *.pgn...) und **importiert** diese Datei dann in Word.

2. Möglichkeit:





- Man **markiert** die gewünschten Elemente mit Hilfe von Move/Select im ChemSketch-Fenster.
- kopiert diese Elemente mit „**Strg + c**“ und fügt sie in Word an die entsprechende Stelle mit „**Strg + v**“ ein.

3. Möglichkeit:

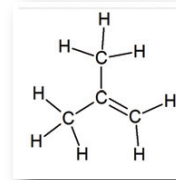
- Man wählt in „Word/Write“: **Einfügen** → **Objekte** → **ACD ChemSketch**

Ich habe mir die 2. Möglichkeit angewöhnt, da häufig das Programm sowieso läuft. Der Vorteil von der direkten Einbindung (2. und 3. Möglichkeit) ist, dass man jederzeit durch einen Doppelklick, das ChemSketch-Objekt wieder öffnen und bearbeiten kann.

In ein anderes Dokument einfügen:

 + 
 + 

1. Zeichnen von Isobuten



1. Schritt: Vorbereitung

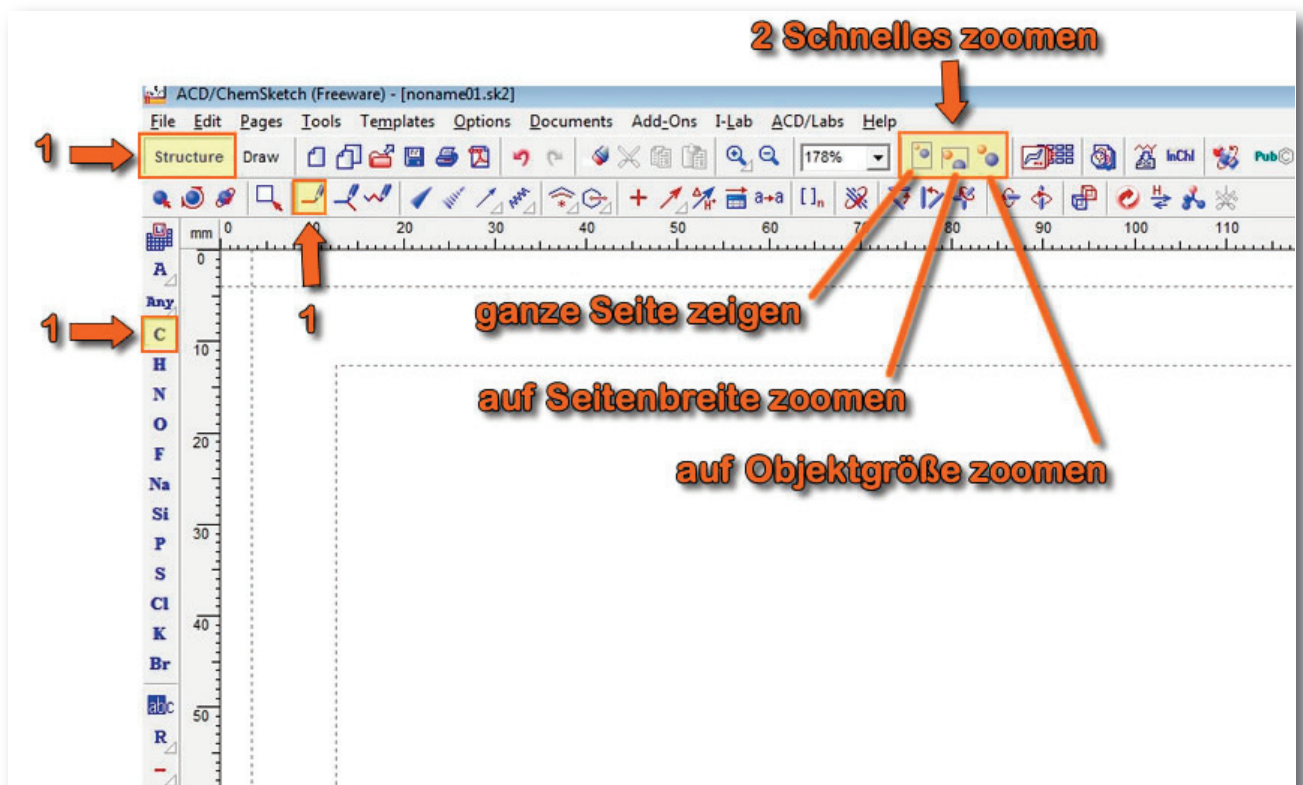
Was wird in diesem Tutorial geübt?

- Zeichnen von einfachen Verbindungen
- Erstellen von Doppelbindungen
- Lewis-Formel aus der Halbstrukturformel erstellen

In dieser Übung geht es darum, ein einfaches Molekül mit Doppelbindung zu zeichnen.

Anschließend soll das Molekül in Halbstrukturformel in die Lewisformel geändert werden.

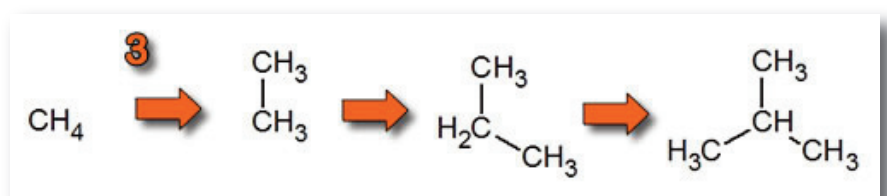
1. Überprüft, ob die 3 Schaltflächen aktiviert sind.
2. Diese Schaltflächen ermöglichen ein schnelles ein- und auszoomen.



2. Schritt: 2 Methylpropan zeichnen

3. Man zeichnet ein Isobutan, in dem man zunächst einmal auf das weite Papier klickt: es müsste ein Methan (linke Abbildung) entstehen. Indem man auf das Methan **klickt** (Maustaste nicht loslassen) und nach oben **zieht**, wird ein Methylgruppe angehängt. Genauso verfährt man mit den restlichen zwei Methylgruppen.

Als Ergebnis müsste man das Molekül ganz rechts erhalten.



3. Schritt: Doppelbindung hinzufügen

4. Indem man auf eine **Bindung klickt**, erhält man eine Doppelbindung. Durch mehrmaliges klicken geht man alle mögliche Bindungen durch und kommt somit auch wieder zur Einfachbindung.



- Damit hätten wir ein Isobuten als Halbstrukturformel gezeichnet. **4. Schritt: H-Atome mit Bindungen zeichnen**

Hinweis: Im Folgenden werden zwei Möglichkeiten besprochen, wie man zu einem ähnlichen Ziel kommen kann: (a) oder (b). Nicht immer funktioniert die Möglichkeit (b). Testest es selbst.

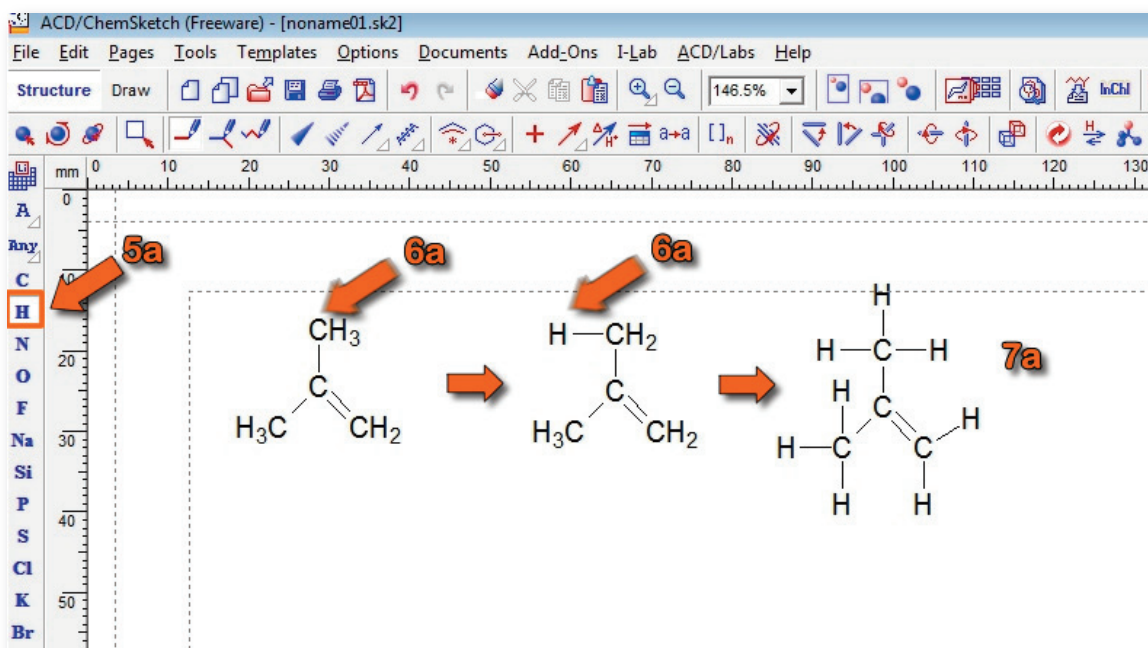


a) 1. Möglichkeit: Lewis-Formel zeichnerisch erstellen

- 5a.** Zunächst aktiviert man das **H** („Hydrogen“), um H-Bindungen zu zeichnen.
6a. Durch „**klicken + ziehen**“ der **linken Maustaste**, zieht man das H-Atom an die gewünschte Stelle.
7a. Diesen Vorgang wiederholt man so oft, bis man alle gewünschten H-Atome an der gewünschten Stelle hat.

Vorteil dieser Vorgehensweise: + Molekül nach Wunsch

Nachteil dieser Vorgehensweise: - umständlich und „langwierig“



**4. Schritt: Tool:
Add Explicit
Hydrogens**

a) 2. Möglichkeit: Lewis-Formel mit einem Tool.

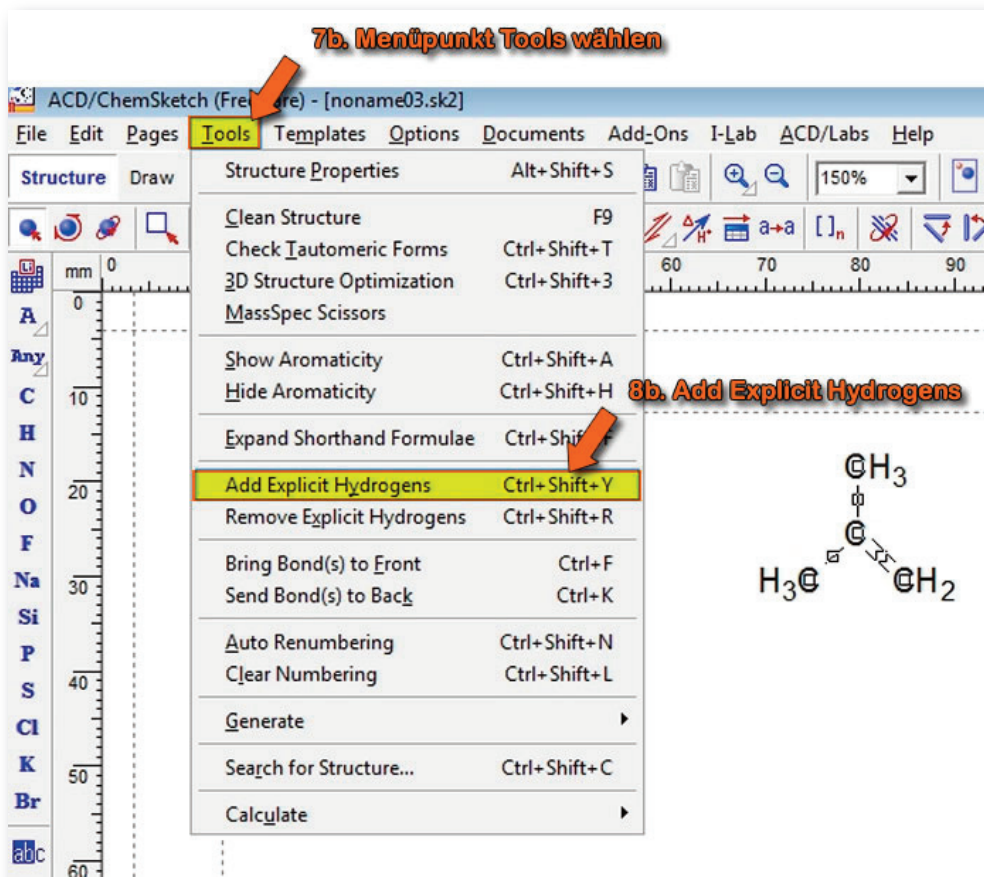
5b. Zunächst aktiviert man den „Markierungsknopf“ (= **Select/Move**).

6b. Durch „**klicken + ziehen**“ der **linken Maustaste**, zieht man einen rechteckigen Rahmen um das Molekül, so dass das gesamte Molekül markiert ist.

The screenshot shows the ACD/ChemSketch software interface. The title bar reads "ACD/ChemSketch (Freeware) - [noname01.sk2]". The menu bar includes "File", "Edit", "Pages", "Tools", "Templates", "Options", "Documents", "Add_Ons", "I-Lab", and "ACD/". The "Structure" menu is open, and the "Draw" sub-menu is active. The toolbar contains various drawing tools, with the "Select/Move" tool (represented by a black square with a white dot) highlighted in yellow. An orange arrow points to this tool with the text "5b: Schaltfläche aktivieren". Below the toolbar is a ruler and a vertical element list on the left containing "A", "Any", "C", "H", "N", "O", "F", "Na", "Si", and "P". Another orange arrow points to a rectangular selection box drawn around a chemical structure, with the text "6b: mit der Maus einen Rahmen ziehen". The chemical structure inside the box is a Lewis structure of a carbocation, specifically a 2-methylpropan-2-yl cation, shown as a central carbon atom bonded to three methyl groups (CH₃) and one methylene group (CH₂), with a positive charge on the central carbon.

7b. Man „aktiviert“ das Menü **Tool** und wählt

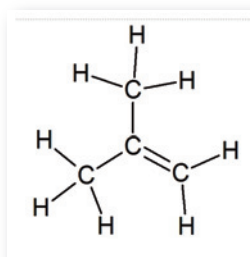
8b. den Menüpunkt: **Add Explicit Hydrogens**. Schneller kann man natürlich vorgehen wenn man den Tastaturbefehl nutzt: „Strg“+„Shift“+„Y“.



Das Resultat kann sich meistens sehen lassen. Und damit ist auch schon der wichtigste (seltene) Nachteil genannt. Das Ergebnis ist nicht immer voraussagbar und manchmal ganz anders, als man es sich wünscht. In diesem Fall vergesst nicht die wichtigste Tastenkombination: „Strg“ + „Z“.

Vorteil dieser Vorgehensweise: + schnell

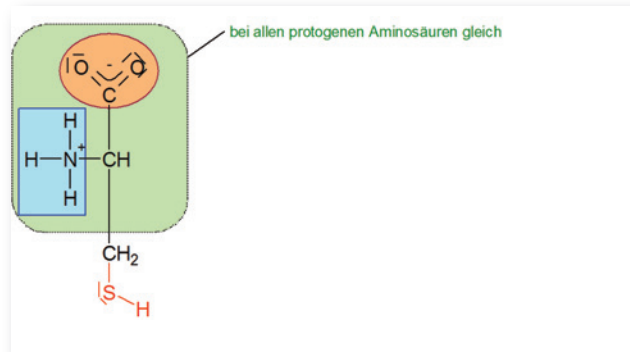
Nachteil dieser Vorgehensweise: - hin und wieder überraschende Ergebnisse.



2. Zeichnen und malen von Cystein

Was wird in diesem Tutorial geübt?

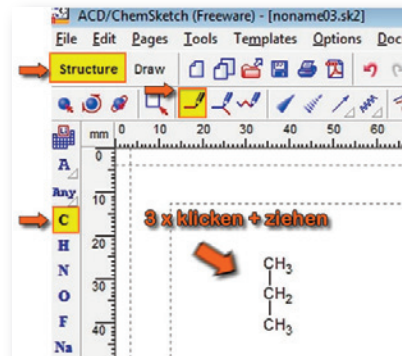
- Zeichnen von Verbindungen mit Heteroatomen;
- Ergänzung von freien Elektronenpaaren;
- Ergänzung von Ladungen;
- Änderungen von Farben;
- Hervorhebungen mit Hilfe des Draw-Modus.



1. Schritt: C-Kette zeichnen

1. Als Übung soll zunächst eine **C-Kette** aus 3 C-Atomen nach der Fischprojektion **gezeichnet** werden (oder einfacher: senkrecht).

Achtet darauf, dass die Optionen richtig gewählt wurden (vgl. gelbe Rechtecke in der Abbildungen).



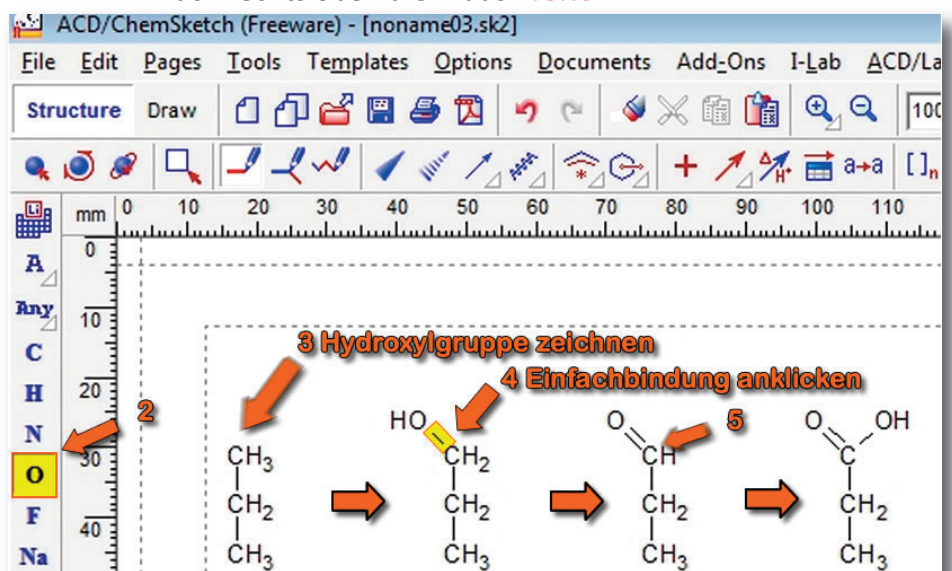
2. Schritt: Carboxylgruppe zeichnen

2. Als nächstes aktiviert man das **O**-Symbol (Oxygen)
3. Man **zeichnet** eine Hydroxylgruppe (die Hydroxylgruppe erscheint automatisch; man darf sich davon nicht irritieren lassen) indem man am oberen C-Atom **klickt** und nach links oben **zieht**.
4. Durch einen **Klick** auf die **O-C-Einfachbindung**, wandelt man die Hydroxylgruppe in eine Carbonylgruppe um.
5. Abschließend **zeichnet** man eine weitere Hydroxylgruppe, indem man wieder am oberen C-Atom **anklickt** und diesmal nach rechts oben die Maus **zieht**.

Hinweis:

Nebstehende Zeichnung gibt die Arbeitsschritte 2 bis 5 innerhalb einer Zeichnung wieder. Natürlich sollte eigentlich nur ein Molekül zu sehen sein.

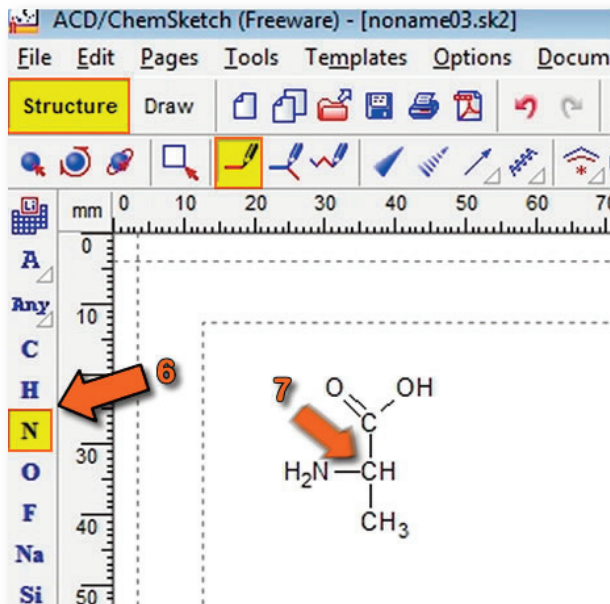
Das Ergebnis ist immer nachdem waagrechten Pfeil zu sehen.



Hinweis: Am Ende wird eine andere, viel schnellere Art vorgestellt, wie man die Carboxylgruppe zeichnen/einfügen kann.

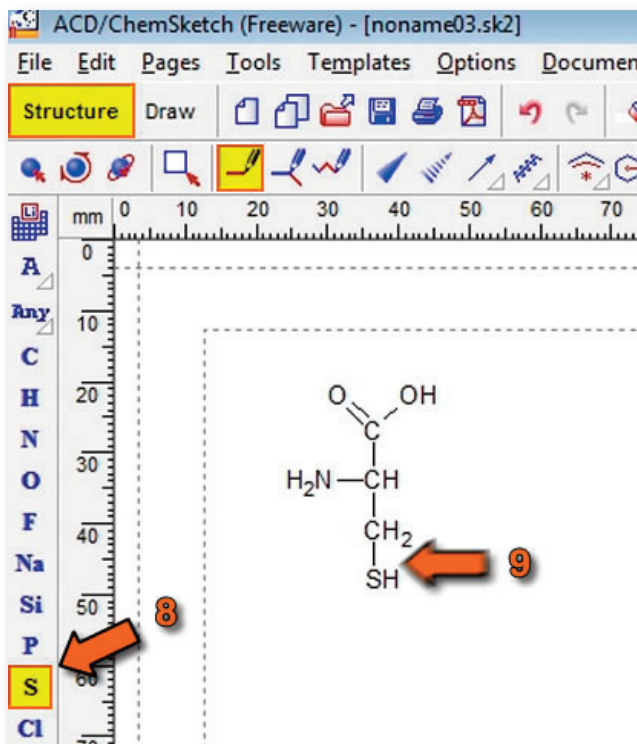
6. Bevor man eine Aminogruppe zeichnen kann, aktiviert man das N-Zeichen („Nitrogen“).
7. Man **klickt** auf das mittlere C-Atom und **zieht** dann nach links.

3. Schritt: Aminogruppe zeichnen



8. Aktivierung des S-Zeichens („Sulfur“)
9. Zeichnen der S-H-Gruppe, indem man auf das untere C-Atom **klickt** und nach **unten** zieht.

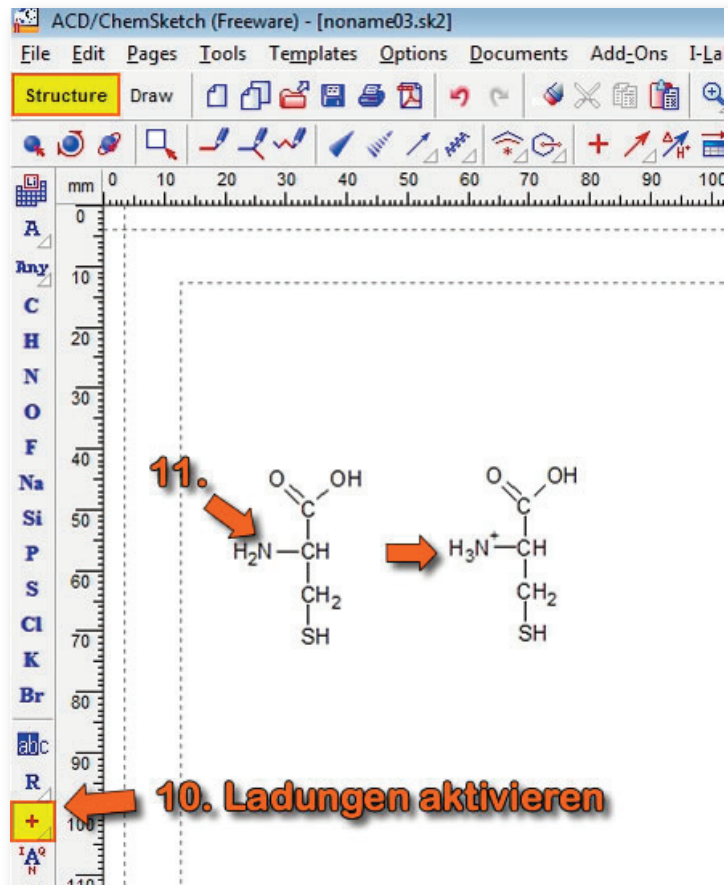
4. Schritt: Thiolgruppe zeichnen



5. Schritt: Ladungen angeben

Häufig benötigt man Ladungen innerhalb eines Moleküls. Hier zeigt Chemsketch seine Stärken: Man klickt nach Aktivierung des Ladungs-Tools einfach das gewünschte Atom an (einfache Ladung = einmal anklicken; zweifache Ladung = zweimal anklicken) und ChemSketch gleicht mit der Änderung der Anzahl der Elemente (z.B. Wasserstoff) aus. Am Beispiel der Aminogruppe und der Carboxylgruppe soll das nun geübt werden.

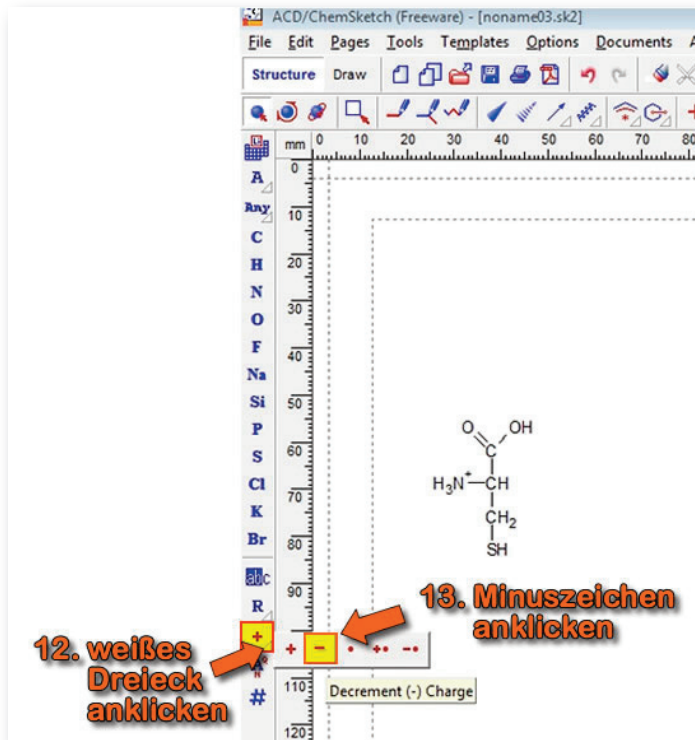
10. Das **+** Tool für Ladung („Increment (+) charge“) aktivieren.
11. Einmal auf das **Stickstoffatom klicken**. Wie man sieht, ändert sich die Anzahl der H-Atome von zwei auf drei.



Hinweis: Ladungen kann man nicht mehr angeben, wenn das Molekül in Lewis-Formeln vorliegt. Deshalb muss man sich merken, die Lewis-Formeln nach der Angabe der Ladungen zu zeichnen.

12. Alle Symbole mit einem kleinen weißen Dreieck unten rechts, haben noch Unterpunkte. Zum Aktivieren, das **weiße Dreieck** anklicken.
13. Es öffnet sich ein Untermenü. Jetzt muss nur das **Minuszeichen gewählt** werden.

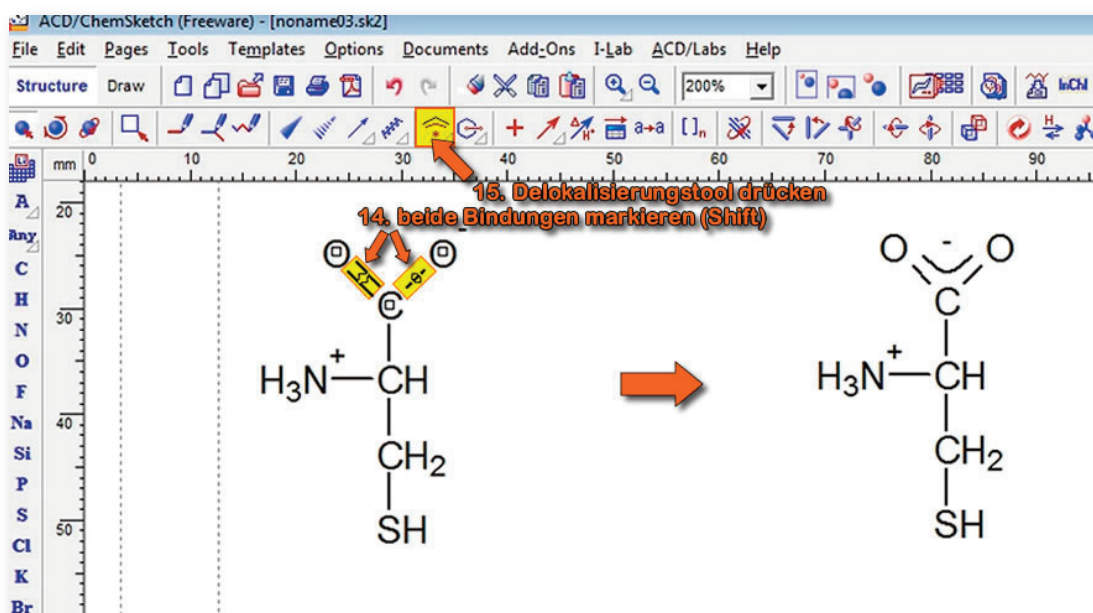
Abbildung siehe nächste Seite.



Damit ist das Zwitterion fertig. Wenn wir schon bei der Carboxylgruppe sind, dann können wir auch gleich mal die Elektronen delokalisiert darstellen:

14. Dafür müssen die **Elektronenpaarbindungen**, die involviert sind markiert werden. Wie immer markiert man mehrere Objekte, indem man beim „Anklicken“ die „Shift“-Taste (Hochstellen) drückt.
15. Wenn die Bindungen markiert sind, drückt man auf die „**Delokalisations-Taste**“ (= **Solid Delocalization Curve**). Durch drücken des weißen Dreiecks, kann man auch eine gepunktete Linie auswählen.

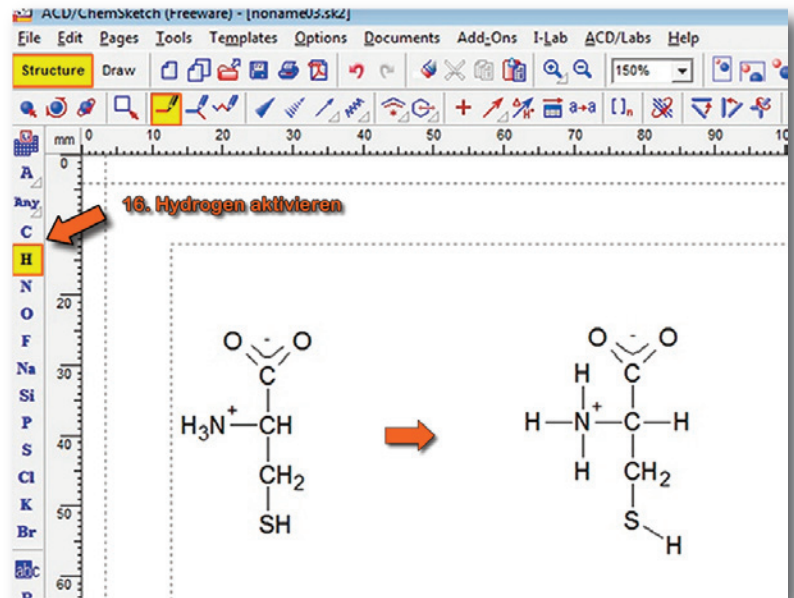
7. Schritt: Delokalisierte Elektronen



9. Schritt: Lewis-Formel erstellen

Wie schon in der Übung 1 gesehen, werden auch hier die H-C-, bzw. H-N- und H-S-Bindungen manuell erstellt.

16. Hydrogen **aktivieren** und mit „**klick+ziehen**“ die H-Atome an die gewünschte Stelle ziehen.



10. Schritt: freie Elektronen-paare ein-zeichnen

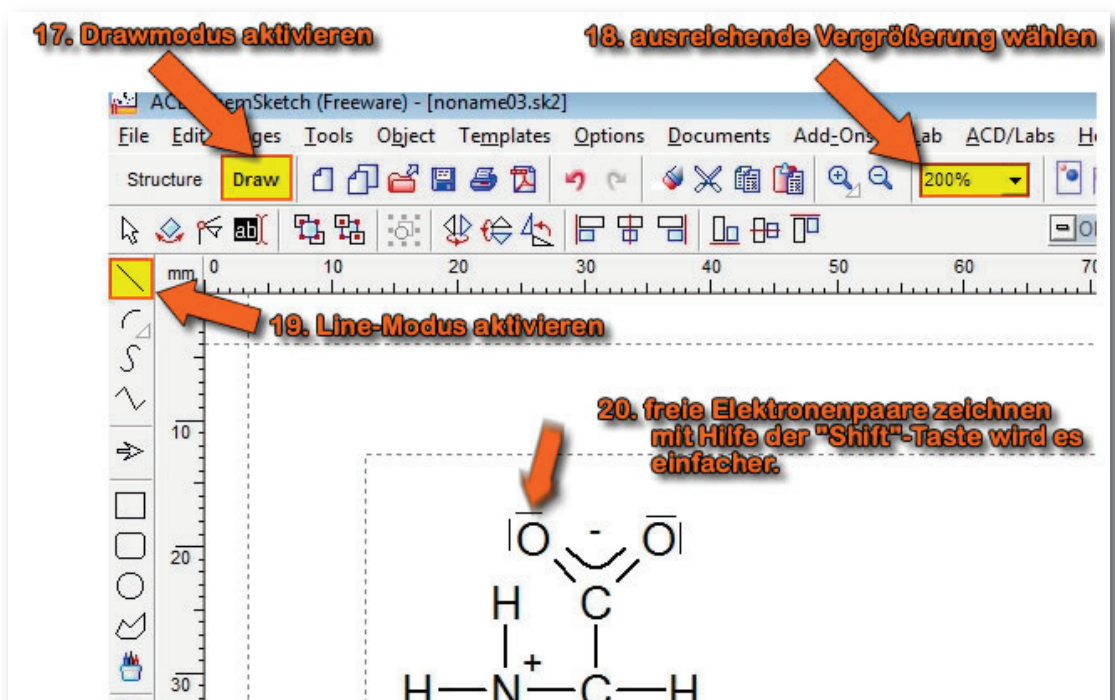
Das Einzeichnen von freien Elektronenpaaren ist beim ChemSketch schlecht gelöst (zumindest, in der Art und Weise, wie ich es mache). Falls jemand eine bessere und einfachere Lösung kennt, würde ich mich um eine kurze Mitteilung freuen.

17. Um freie Elektronen zeichnen zu können, wechselt man in den „Zeichnen“ (= „**Draw**“) Modus.

18. Damit man es einfacher hat, wählt man die passende **Vergrößerung** aus (ruhig auch 400%).

19. Die freie Elektronenpaare **zeichnet** man dann mit Hilfe des „**Line**“-Modus.

20. Durch gleichzeitiges Drücken der **Shift**-Taste, lassen sich die Elektronenpaare halbwegs sauber zeichnen (**klicken + ziehen**).

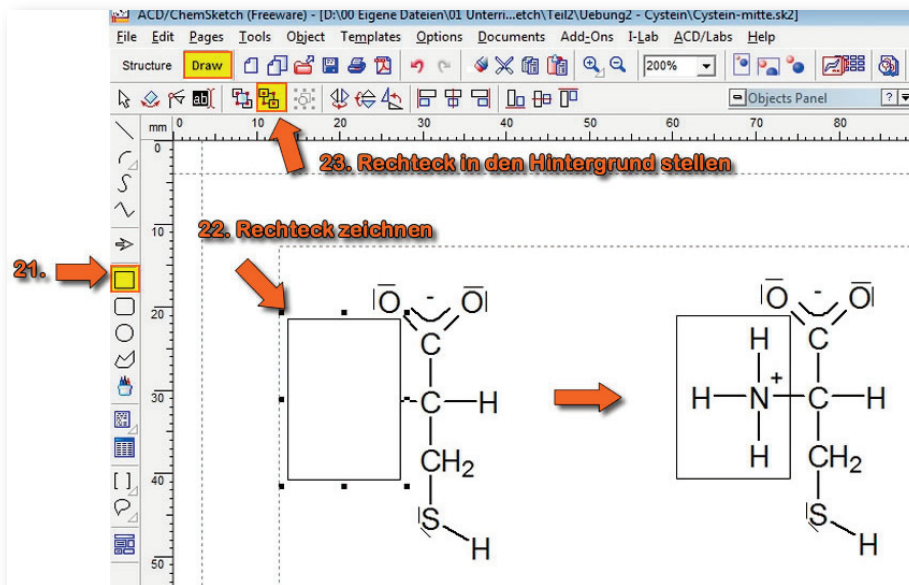


Im Folgenden möchte ich zum Abschluss zeigen, wie man mit Hilfe des Moduls ChemSketch Draw einfache Formen zeichnen kann, so dass man einzelne Atomgruppen z.B. hervorheben kann.

11. Schritt: Hervorhebungen mittels Farben und Formen

Wichtig: Wir befinden uns nach wie vor im **Draw** Modus.

21. Mit Hilfe des **Rechtecktools (rectangle)** ...
22. ... zieht man ein gewünschtes Rechteck auf (**klicken + ziehen**).
23. Das Rechteck muss natürlich in den Hintergrund. Dafür drückt man einfach auf die „**send to back**“-Taste.



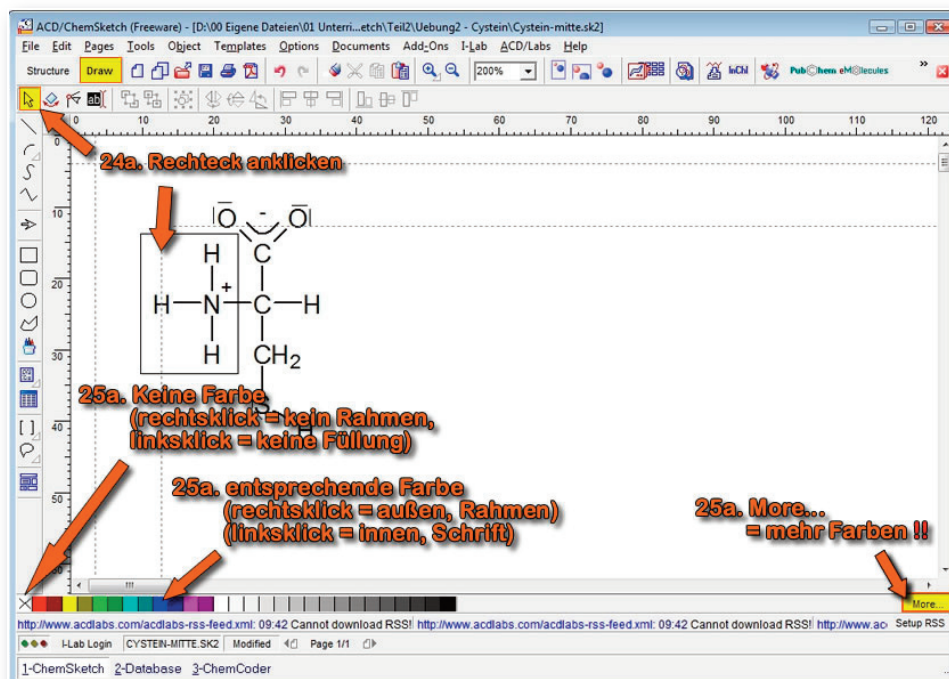
Das Rechteck soll farbig markiert werden.

1 Möglichkeit:

24a: Move/Select aktivieren und Rechteck **anklicken**.

25a: Linksklick auf Farbe: Schriften und Füllungen werden entsprechend eingefärbt. **Rechtsklick auf Farbe:** Linien (Rahmen + Bindungen) werden eingefärbt.

More... Hier finden sich **alle Farben**. Auch hier gilt rechts/links-klick.



Die zweite, variantenreichere, aber umständlichere Möglichkeit::

24b. Aktiviere **Select/Move/Resize**-Button

25b. **Doppelklick** auf das weiße **Rechteck** hinter der Amino-
gruppe.

26. Unter **Pen**, kann man die Rahmenart und Farbe angeben und
unter **Fill** die Füllung des Rechtecks.

27. Hierfür drückt man das **schwarze Dreieck** und wählt dann
die **gewünschte Farbe**.

28. Damit man die Änderung auch sehen kann, wird zum Schluss
noch auf **Apply** gedrückt.

Als nächste Übung soll hinter der Carboxylgruppe eine orangene Ellipse positioniert werden. Dabei ist der Ablauf i von Teilschrift **21.** bis zum Schritt **28.** gleich, mit der Ausnahme, dass **Ellipse** (21b) gewählt wird. Die dafür notwendigen Handlungen sind an-
nähernd im folgenden Bild wiedergegeben. Falls ein Schritt unklar
ist, dann müsst ihr einfach nochmals die Schritte 21. bis 28. durch-
gehen.

Den einen oder anderen mag es stören, dass sich das Rechteck und die Ellipse überschneiden. Überhaupt können einige Atomgruppen für eine Abbildung ungünstig stehen. Deshalb eine kurze Erläuterung, wie man einzelne Atomgruppen relativ einfach an die gewünschte Stelle manövrieren kann.

12. Schritt: Atomgruppen markieren

Im nächsten Schritt soll nur die Carboxylgruppe markiert werden.

1. Möglichkeit:

Einzelnes Markieren der Atome mit **Shift + linke Maustaste**.

2. Möglichkeit:

29a. Um einzelne Atome zu markieren, wechselt man wieder auf die „Struktur“-Seite (= „**Structure**“). Man markiert das „**Select**“-Tool und sieht, dass das **Lasso**-Tool auf **off** steht (3 gelbe Rechtecke).

30a. **Zieht** man jetzt ein **Rechteck** auf, so wird zwar die Carboxylgruppe markiert, leider auch ein H-Atom aus der Ammonium-Gruppe.

31a: Dieses einzelne H-Atom kann deselektieren, indem man zusammen mit der **Shift**-Taste das H-Atom **anklickt**.

29. Structure Select Lasso off

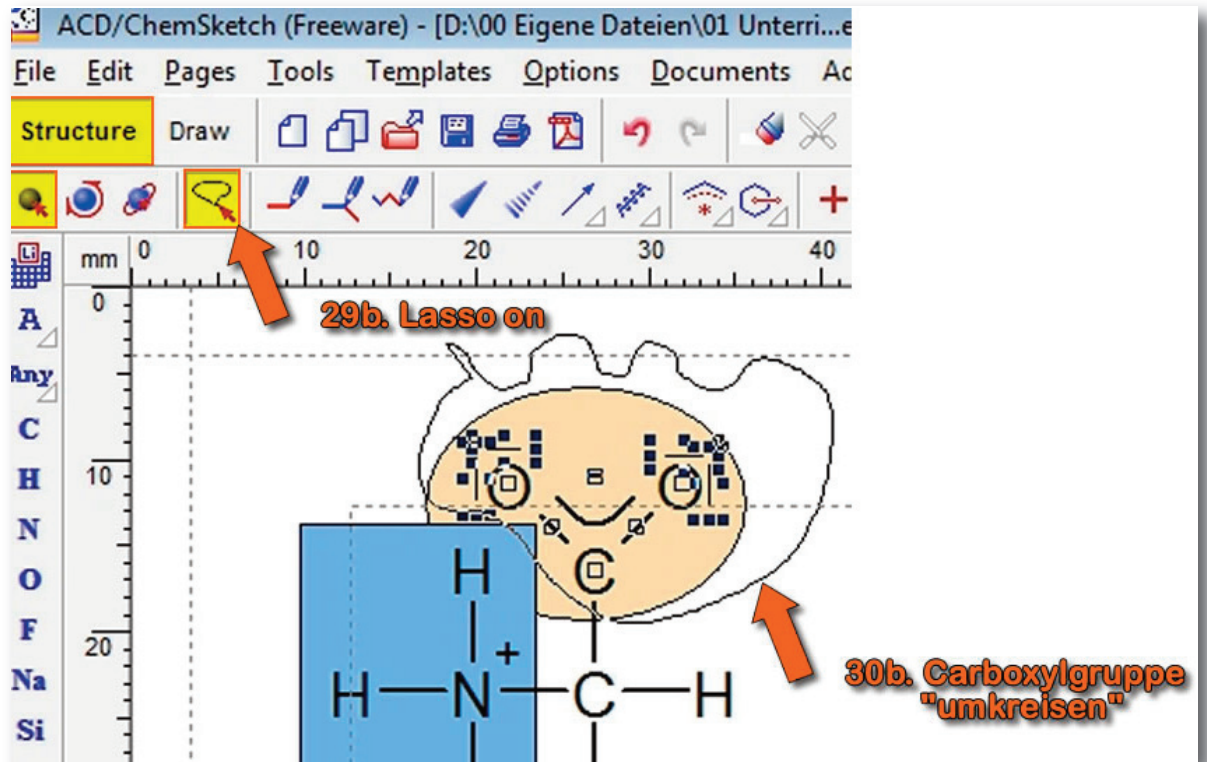
Vorsicht!

30a. Rechteck aufziehen

3. Möglichkeit:

29b. Um einzelne Atome zu markieren, wechselt man wieder auf die „Struktur“-Seite (= „**Structure**“). Man markiert das „**Select**“-Tool und sieht, dass das **Lasso**-Tool auf **on** steht (3 gelbe Rechtecke).

30b. Nun lässt sich die Carboxylgruppe ganz leicht markieren, indem man mit **gedrückter linker Maustaste** die gewünschte Gruppe einkreist.



13. Schritt: Verschieben von Atomen / Atomgruppen

Auch beim Verschieben einer Atomgruppe gibt es mehrere Möglichkeiten.

1. Möglichkeit:

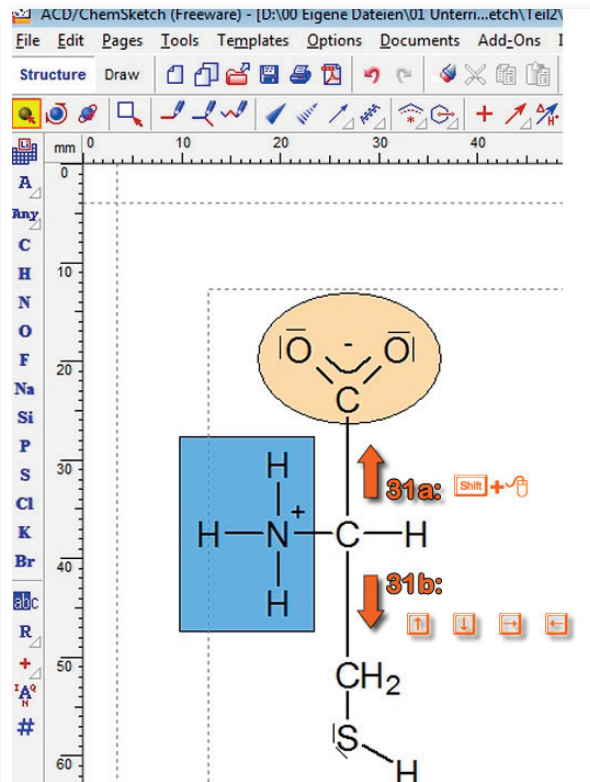
31a. Mit Hilfe der **Maus**. Durch das Drücken der **Shift**-Taste sorgt man dafür, dass die markierte Gruppe entweder senkrecht oder waagrecht verschoben wird.



2. Möglichkeit:

31b. Mit Hilfe der **Cursor**-Tasten (Pfeil-Tasten).





Als nächstes soll ein kleiner Text eingefügt werden.

14. Schritt: Text eingeben

32. Man wechselt in den **Draw**-Modus.
33. **Zeichnet** ein abgerundetes Rechteck.
34. **Färbt** den Rahmen und Figur mit den gewünschten Farben.
35. Man aktiviert das **Textfenster** auf und klickt auf die Stelle, an der Text erscheinen soll.
36. Man **tippt** den gewünschten Text ein.

32. Draw aktivieren

33. abgerundetes Rechteck

34. Doppelklick und Farben wahlen.

35. Text aktivieren

36. Text eingeben

bei allen protogenen Aminosäuren gleich

14. Schritt: Atome und Bindungen einfärben

Zum Abschluss soll noch die Möglichkeit werden, wie man Atome und Bindungen einfärbt.

- 37. **Structure** wählen
- 38. Gewünschte Atome und Bindungen **markieren**
- 39. **Doppelklick** auf die markierten Atome/Bindungen.

Ein neues Fenster geht auf, mit Hilfe dessen man sehr viele Einstellungen treffen kann. Uns interessiert hier nur die Farbe.

- 40. **Atom/Bond** wählen
- 41. Gewünschte **Farbe** wählen
- 42. **Apply** drücken

Einfacher, aber mit weniger Auswahl geht es mit der Farbenleiste unten (Linksklick = Atome, Rechtsklick = Bindungen).

37. Structure wählen

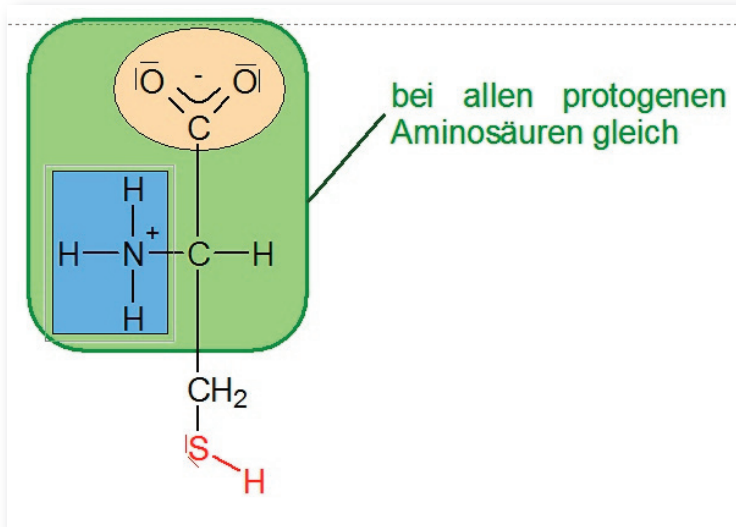
38. Alles auswählen
39. Doppelklick

40. Atom- und Bond auswählen.

41. Farbe wählen

42. Apply drücken

bei allen protogenen Aminosäuren gleich

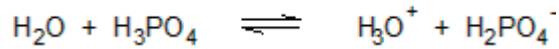


So oder so ähnlich wird das fertige Molekül aussehen. Obwohl es kompliziert und langwierig am Anfang erscheinen mag, benötigt man mit etwas Übung keine 5 Minuten zum Erstellen dieser Abbildung.

In den folgenden Übungen wird davon ausgegangen, dass das Zeichnen von Molekülen keine Schwierigkeiten mehr bereitet. Falls jemand nicht mehr weiß, wie man das macht, sollten einfach die alten Übungen angeschaut werden.

3. Summenformeln erstellen

1. Schritt: Wasser und Phosphorsäure



Was wird in diesem Tutorial geübt?

- Summenformeln erstellen;
- Reaktionsgleichungen erstellen;
- Griechische Buchstaben einfügen;

Wenn ich viele Reaktionsgleichungen in einem Word-Dokument erstellen muss, nervt mich das manuelle Hoch- und Tiefstellen sehr an. Dafür gibt es zwar Autotexte, aber ich persönlich finde die Funktion von ChemSketch schneller. Ob es auch schöner aussieht, muss jeder für sich entscheiden.

1. **Structure** aktivieren;
2. **Edit Atom Label** aktivieren;
3. Gewünschter **Text eingeben**:

ACHTUNG 1: ChemSketch stellt automatisch hoch und tief. Man muss das nur in Spezialfällen manuell machen.

ACHTUNG 2: Die Reaktionspfeile geben wir anschließend manuell ein. Man sollte ausreichend Platz lassen.

4. Man fügt die Formel ein indem man auf **Insert** drückt.

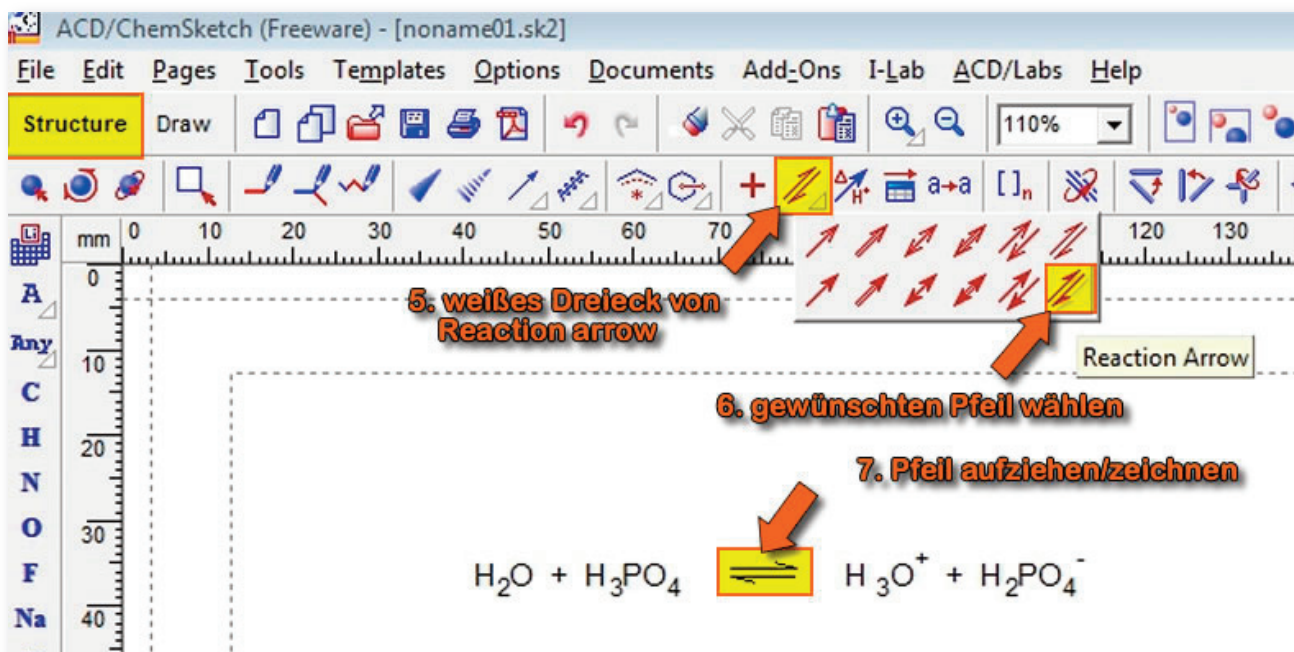
The screenshot shows the ChemSketch interface with the following annotations:

- 1. Structure:** An arrow points to the 'Structure' button in the top toolbar.
- 2. Edit Atom Label:** An arrow points to the 'abc' button in the left-hand vertical toolbar.
- 3. Text eingeben: Wichtig: Hoch- und tiefgestellt, funktioniert in der Regel automatisch!** An arrow points to the text input field in the 'Edit Label' dialog box, which contains the chemical equation: $\text{H}_2\text{O} + \text{H}_3\text{PO}_4 \text{ H}_3\text{O}^+ + \text{H}_2\text{PO}_4^-$.
- 4. Insert:** An arrow points to the 'Insert' button at the bottom of the 'Edit Label' dialog box.

Im nächsten Schritt muss noch der Reaktionspfeil ergänzt werden:

2. Schritt: Reaktionspfeil einfügen

- Man aktiviert die „**Reaction Arrow**“-Taste, wenn man mit dem angezeigten Pfeil einverstanden ist. Falls man sich einen anderen Pfeil wünscht, drückt man auf das **weiße Dreieck**.
- Man **wählt** den gewünschten Pfeil.
- Mit Hilfe der Maus **zeichnet** man den Pfeil an die gewünschte Stelle.



Nochmals zur Erinnerung:

3. Schritt: In Word / Write einfügen

1. Möglichkeit:

Man **speichert** die Datei in ein gewünschtes Format welches Word lesen kann (*.gif, *.bmp, *.png,...) und **importiert** diese Datei dann in Word.

2. Möglichkeit:

- Man **markiert** die gewünschten Elemente mit Hilfe von Move/Select.
- Kopiert diese Elemente mit „**Strg + c**“ und fügt sie in Word in die entsprechende Stelle mit „**Strg + v**“

3. Möglichkeit:

- Man wählt in „Word/Write“: **Einfügen** → **Objekte** → **ACD ChemSketch**

Ich habe mir persönlich die 2. Möglichkeit angewöhnt, da häufig das Programm sowieso läuft. Der Vorteil von der direkten Einbindung (2. und 3. Möglichkeit) ist, dass man jederzeit durch einen Doppelklick, das ChemSketch-Objekt wieder öffnen und bearbeiten kann.

In ein anderes Dokument einfügen:

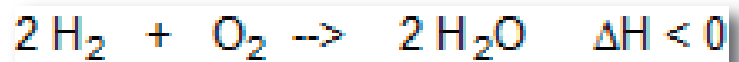
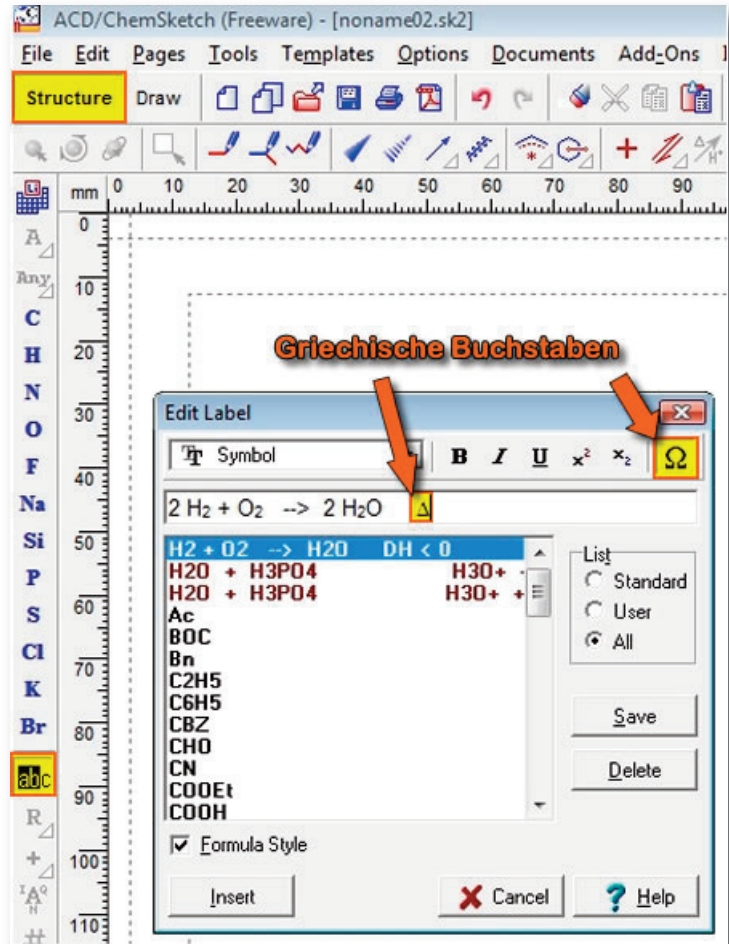
Ctrl + C

Ctrl + V

4. Schritt: Griechische Buchstaben

Die Texteingabe „**Edit Atom Label**“ erleichtert auch die Eingabe von griechischen Buchstaben.

Drückt man das **Ω-Symbol** und gibt **Shift** + **D** ein, so erscheint ein **Δ**. Somit wird Eingabe der Enthalpie-Änderung ein Kinderspiel.



4. Glutaminsäure in Halbstruktur und 3D

Zum Abschluss dieses Tutorials möchte ich noch die Möglichkeiten zeigen, wie man schnell ein längerkettiges Molekül zeichnen kann, deren unterschiedliche Atomgruppen mit Hilfe des Edit Atom Labels gezeichnet wird.

1. Schritt: Pentan-Gerüst zeichnen

Da Glutaminsäure aus 5 C-Atomen besteht, zeichnet man zunächst ein Pentan.

1. **Structure** wählen
2. **C-Atom** wählen
3. **Draw-Chain** wählen; erleichtert das zeichnen von langen C-Ketten sehr. Die Anzahl der C-Atome wird dabei immer angezeigt. Somit sind auch lange C-Ketten nicht wirklich ein Problem.

Was wird in diesem Tutorial geübt?

- schnell, große Moleküle zeichnen;
- Atomgruppen unterschiedlicher Art zufügen;
- Informationen zum Molekül anzeigen lassen;
- automatisch Benennen;
- diverse automatische Tools zur Veränderung der Strukturformel nutzen;
- 3D-Darstellungen.

1. **Structure** wählen

2. **C** wählen

3. **Draw-Chain** wählen

4. Eine Kette mit 5 C-Atomen zeichnen (klick + ziehen)

Hinweis: Die Anzahl der gezeichneten C-Atome wird angezeigt.

Am ersten C-Atom und am letzten C-Atom befindet sich eine Carboxylgruppe. Das manuelle Eingabe über O-Atom ist zwar möglich, aber es geht schneller.

2. Schritt: C-Kette mit Atomgruppe ergänzen

5. **Edit Atom Label** wählen;
6. Das **Atom**, das durch die Carboxylgruppe ersetzt werden soll wird **angeklickt**;
7. Gewünschte **Atomgruppe eingeben** oder aus der Liste auswählen.

Zwei Möglichkeiten:

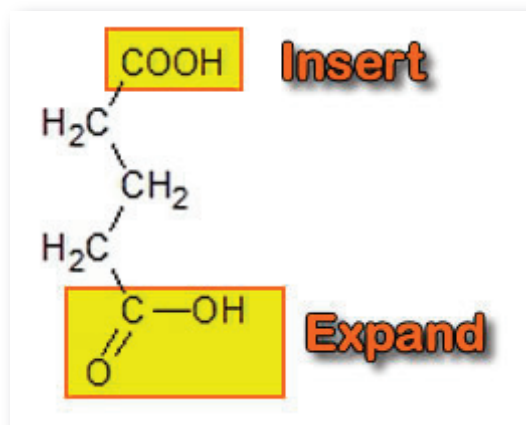
8. **Insert** = Atomgruppe wird als Summenformel eingefügt.
Expand = Atomgruppe wird als Strukturformel eingefügt.

6. Gewünschtes C-Atom anklicken

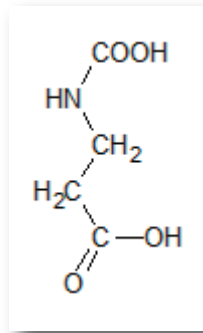
7. Gruppe eintippen oder auswählen

5. "Edit Atom Label"

8. **Insert** = Atomgruppe wird ohne Bindungen eingefügt
Expand = Atomgruppe wird mit Atombindungen eingefügt



Wenn man an der erhaltenen Strukturformel die Aminogruppe über Edit Atom Label einfügen möchte und dafür das zweite C-Atom anklickt, führt das zu folgendem Molekül:



3. Schritt: Aminogruppe einfügen

Ist auch schön, aber leider nicht die Glutaminsäure. Wir benötigen also ein Atom neben dem zweiten C-Atom. Das könnte man jetzt über ein H-Atom machen. Viel einfacher ist aber jetzt direkte Eingabe:

9. **Nitrogen** wählen;

10. Aminogruppe mit Hilfe der Maus (**klick + ziehen**) zeichnen,

The screenshot shows the ACD/ChemSketch software interface. The menu bar includes File, Edit, Pages, Tools, Templates, Options, and Documents. The Structure menu is open, and the Draw option is selected. The toolbar contains various drawing tools. A ruler is visible at the top, and a vertical scale is on the left. The chemical structure of glutamic acid is shown in the center. An orange arrow points to the 'N' element in the vertical scale, labeled '9. Nitrogen wählen'. Another orange arrow points to the second carbon atom in the structure, labeled '10. Auf das 2. C-Atom klicken und nach links ziehen'. The 'H₂N-HC' group is highlighted in yellow, indicating the addition of the amino group.

4. Schritt: Molekülmasse berechnen, bzw. ablesen

Im folgenden wollen wir noch einige mehr oder weniger nützliche Tools anschauen.

ChemSketch bietet einiges an Informationen:

In der Leiste unten, kann man verschiedene Informationen ablesen:

Zunächst wäre da eine Art **Summenformel**, dann die **Molekülmasse** (sofern das so eingestellt ist). Ganz rechts unten verste-

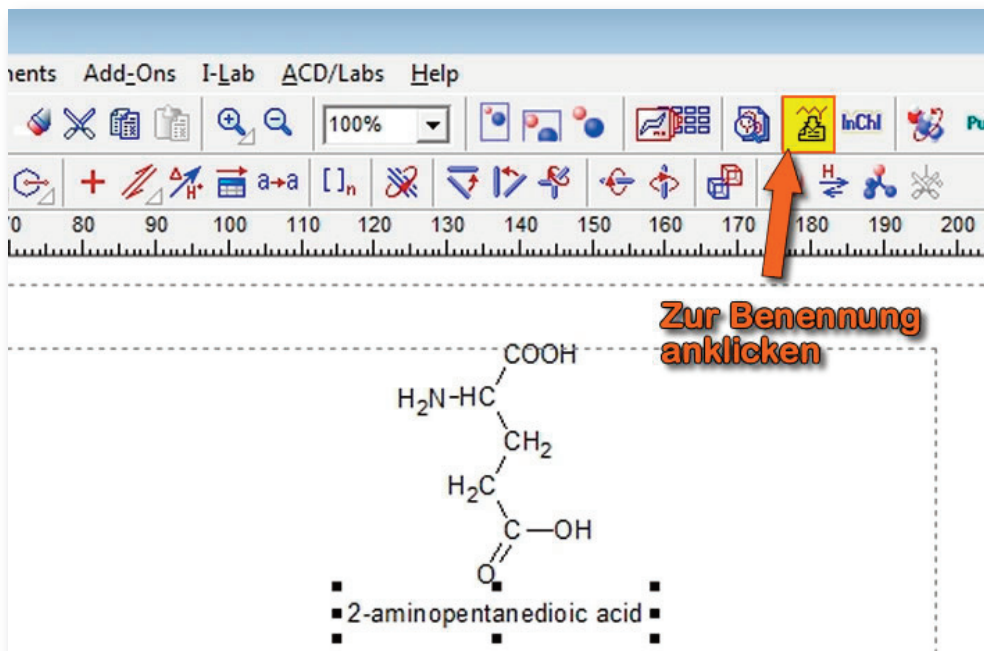
The screenshot shows the ChemSketch software interface. In the center, a chemical structure of a dipeptide is displayed: NC(CCC(=O)O)C(=O)O. The status bar at the bottom contains the following information: **Summenformel** (C₅H₉NO₄), **Molekülmasse** (FW 147.12926), and **Formula Weight**. Red arrows point to these fields with labels: "Summenformel", "Molekülmasse", and "weitere Untermenüs".

cken sich weitere Eigenschaften (**Formula Weight**).

Wenn man auf „**Formula Weight**“ drückt (unten rechts) ergeben sich weitere Möglichkeiten.

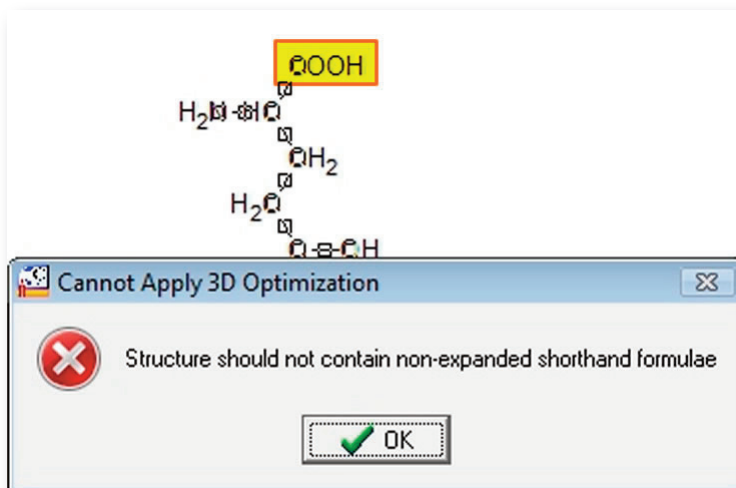
This image shows a close-up of the 'Formula Weight' dropdown menu. The menu is open, showing a list of properties. The 'Composition' option is selected and highlighted in yellow. An arrow labeled "Anklicken" points to the 'Composition' option. Below the menu, the composition data is displayed: **Composition: C(40.82%) H(6.17%) N(9.52%) O(43.50%)**. Another arrow points to this data.

Man kann seine Moleküle auch per Knopfdruck **benennen** lassen. **5. Schritt: systematische Bezeichnung (englisch)**



Zum Abschluss dieses Tutorials möchte ich noch kurz ein erst Blick auf die 3D-Modelle werfen. **6. Schritt: 3D-Modelling**

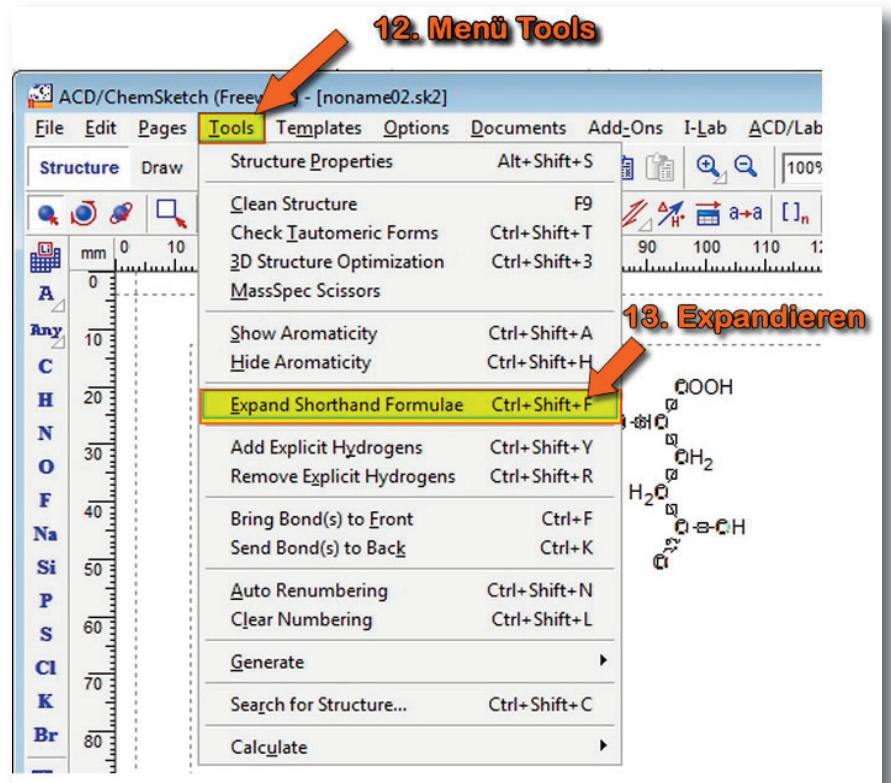
11. Im ersten Schritt müssten wir unsere Struktur müssten wir **3D-Optimization** durchführen, allerdings kommt dann bei diesem Molekül eine Fehlermeldung:



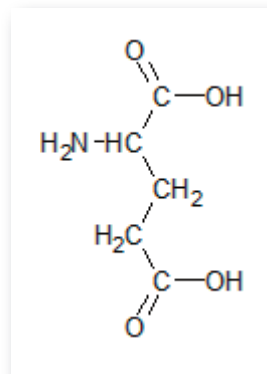
Schuld ist die COOH-Carboxylgruppe. Aber auch dafür gibt es ein Tool.

7. Schritt: Atomgruppen expandieren

- 12. Menü **Tools** wählen;
- 13. **Expand Shorthand Formulae** wählen;



Das Ergebnis sieht folgendermaßen aus:

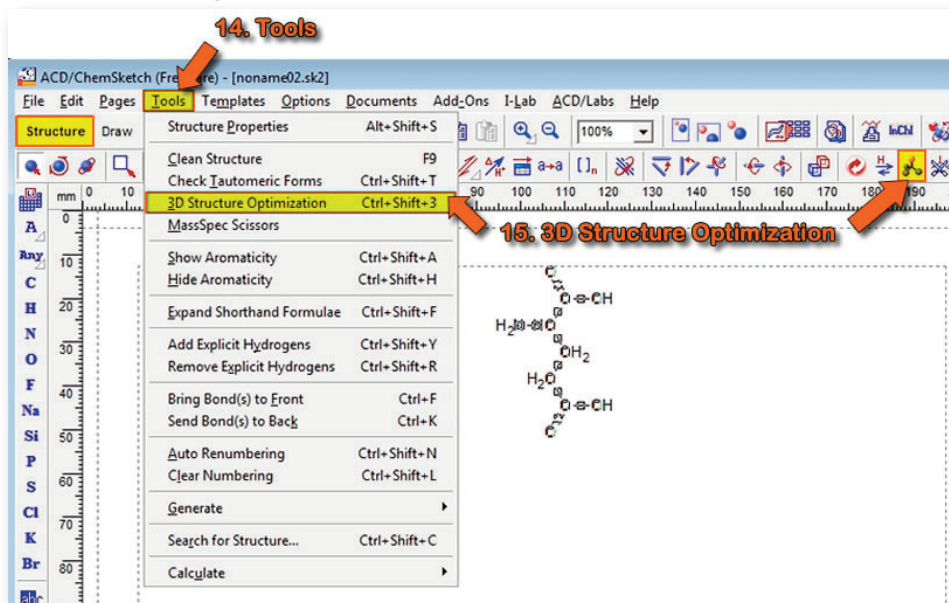


Bevor man ein 3D-Modell sich erstellen lässt, sollte man sich überlegen, ob man das Modell mit oder ohne H-Atome betrachten möchte. Ich stelle hier die Variante mit H-Atomen vor.

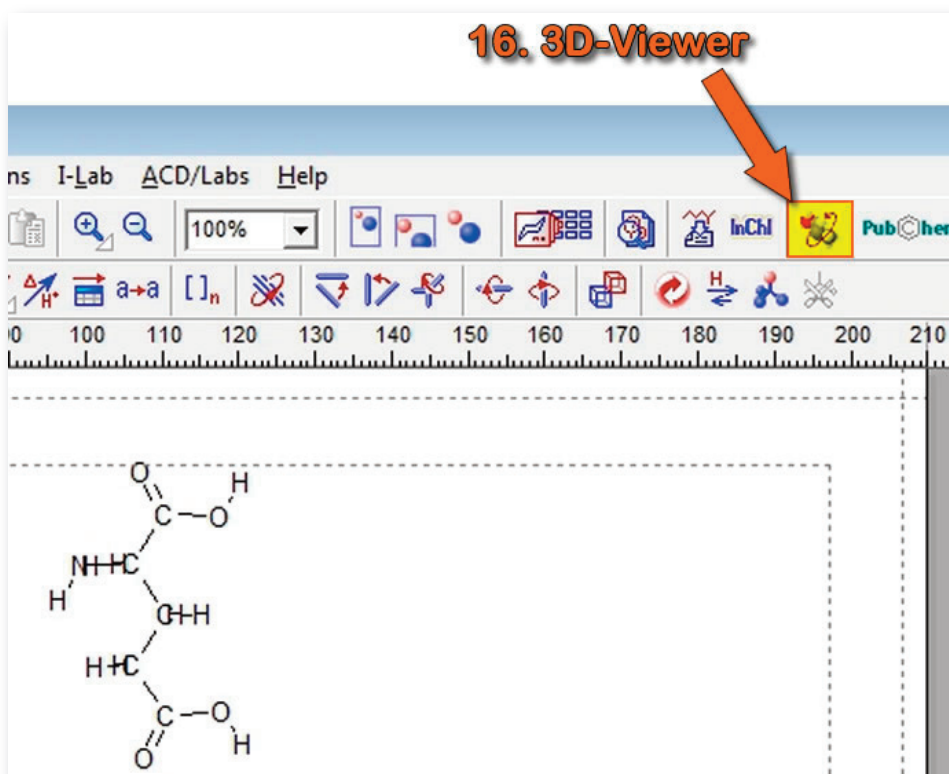
8. Schritt: 3D-Moleküle anzeigen lassen

14. Tools wählen

15. 3D-Structure Optimization (oder gleich die im gelben Quadrat dargestellte Auswahl drücken).



16. 3D-Viewer starten;



Das Bild, das man dann so ähnlich sehen sollte wird auf der nächsten Seite gezeigt.

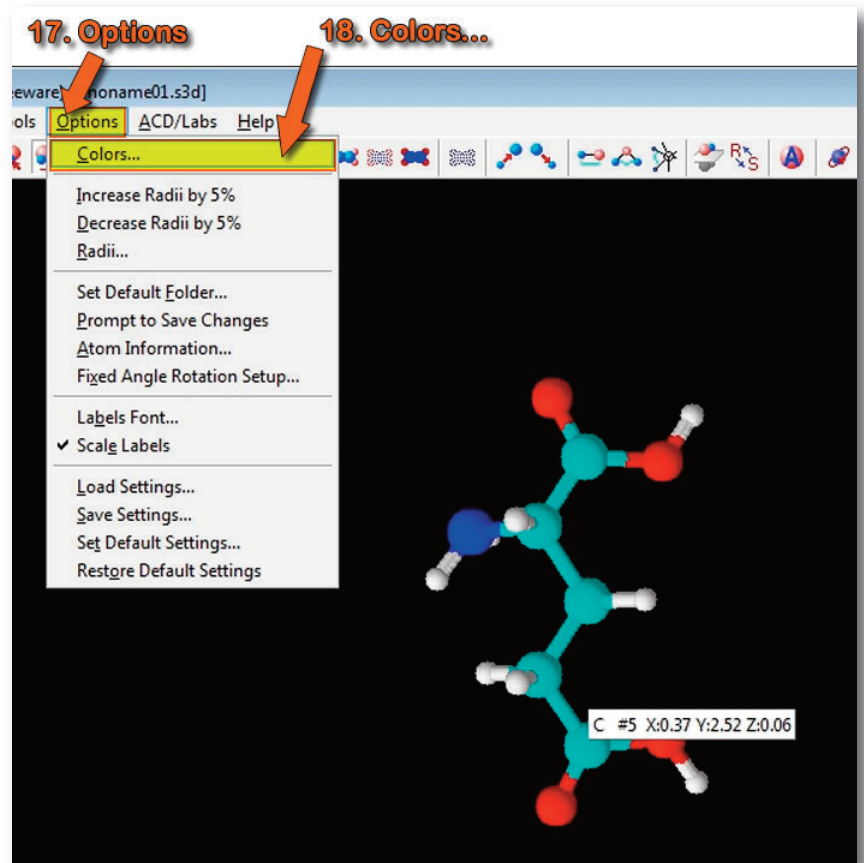
7. Schritt: Farbwahl im 3D-Viewer

Das vom 3D-Viewer erhaltene Bild ist nicht schlecht. Möchte man allerdings diese Abbildungen kopieren/drucken, dann wäre ein weißer Hintergrund Ressourcenschonender.

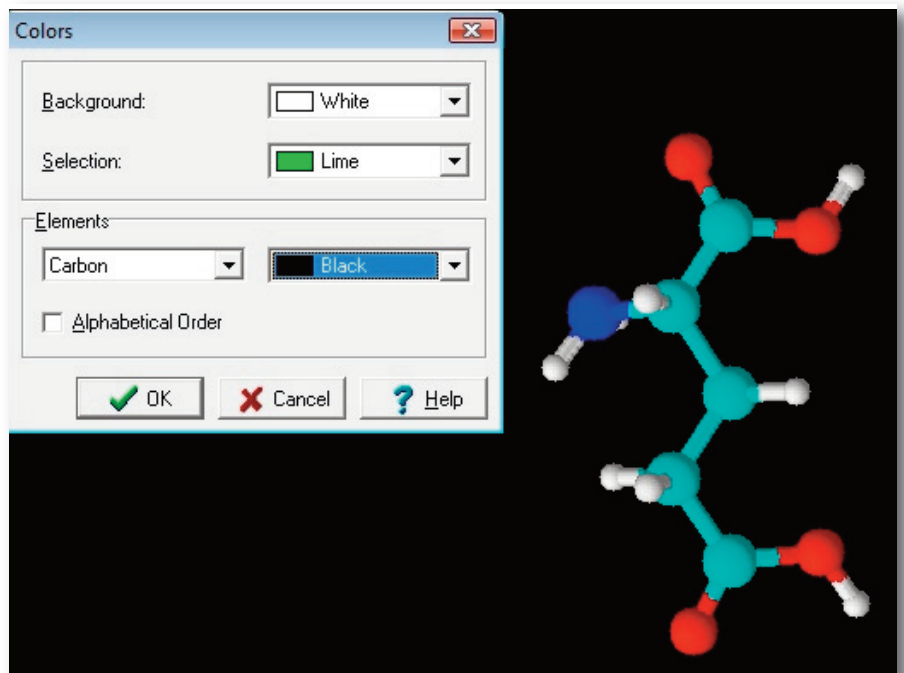
Auch begeistern mich türkise Kohlenstoffatome nicht wirklich.

17. Im 3D-Viewer öffnet man das Menü: „Options“

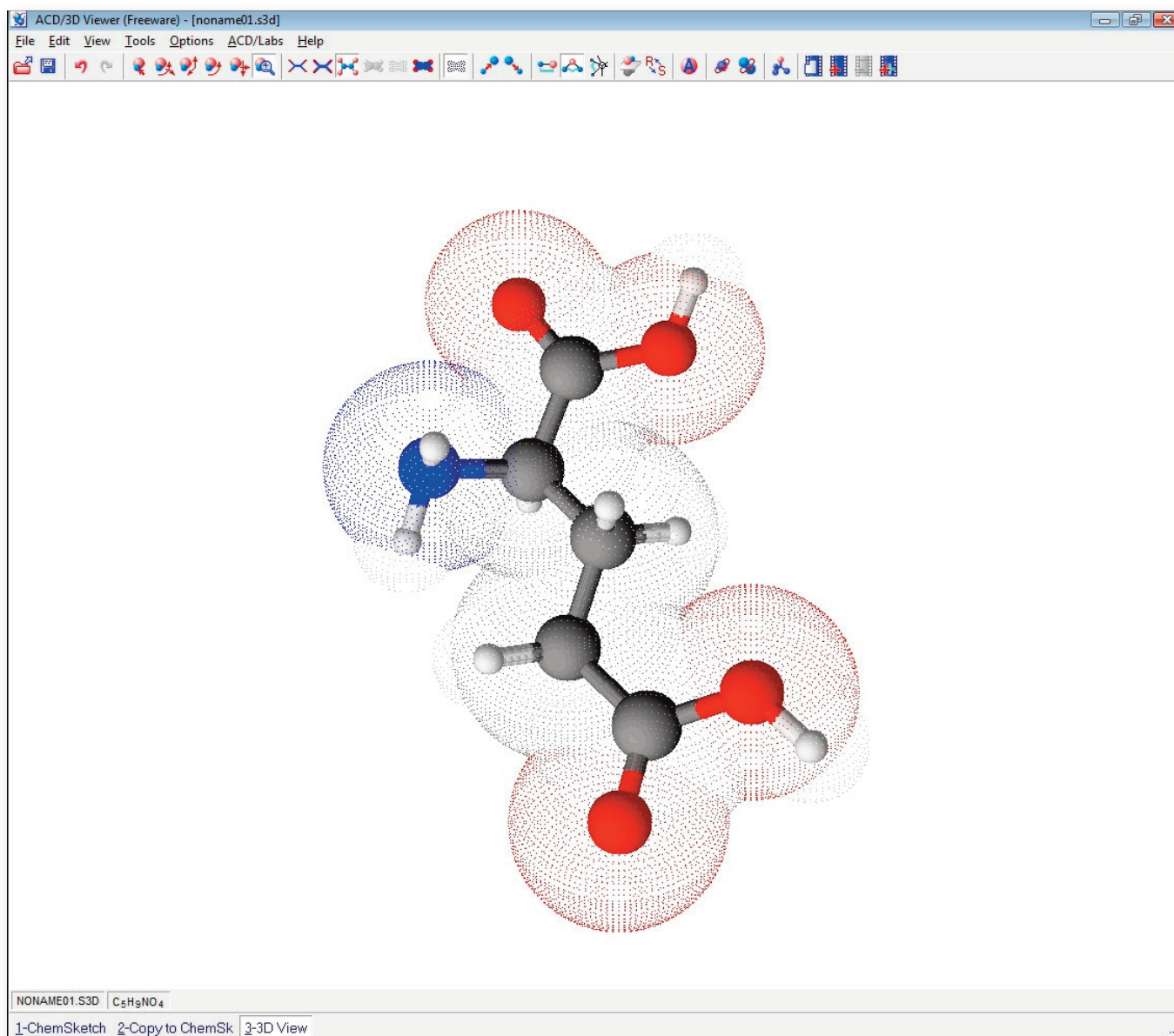
18. und wählt Colors.



In der folgenden Abbildung sieht man meine Farbwahl: Hintergrund = weiß; Carbon = Kohlenstoff = schwarz.



Das Ergebnis sieht man in der folgenden Abbildung:



Damit wäre ich mit dem zweiten Teil des Tutorials am Ende. Über Feedback jeder Art würde ich mich freuen. Nachdem das Erstellen dieses Tutorials weit aus länger gedauert hat, als veranschlagt und das in aller Hektik, was man an den vielen Fehlern erkennen kann, mach ich mal noch keine Voraussagen, ob es einen 3. Teil geben wird und falls ja, wann.

Das Programm ChemSketch hätte dafür bestimmt genug Möglichkeiten: Animierte Gifs, Kunststoffe, Templates, etc. ...