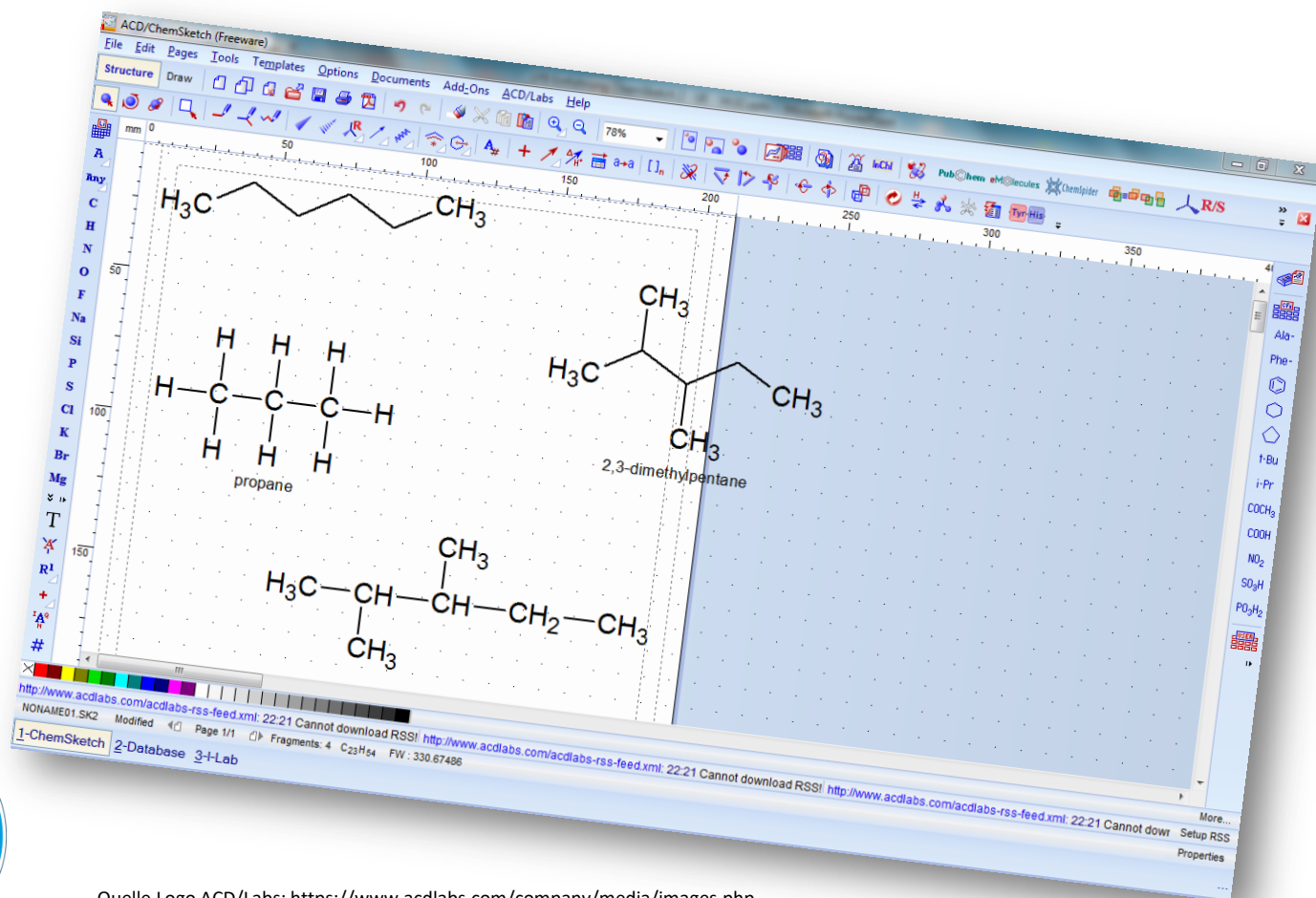


Lerntutorial ACD ChemSketch

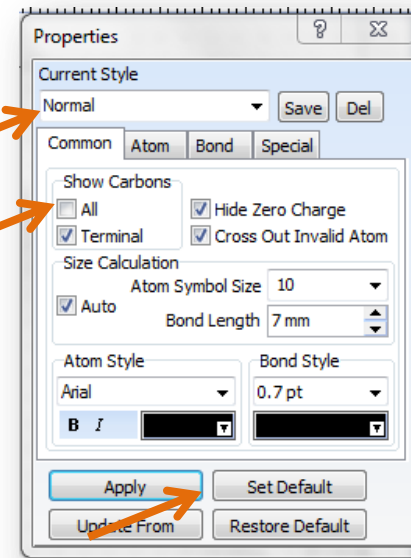
„Einführung in ChemSketch, Zeichnen und Benennen von Alkanen und deren Isomeren“



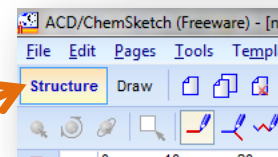
Quelle Logo ACD/Labs: <https://www.acdlabs.com/company/media/images.php>
Screenshots aus ACD/ChemSketch Freeware Version

1: ACD ChemSketch – Grundeinstellungen vornehmen

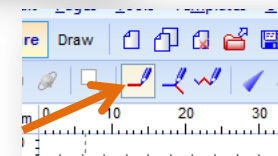
1. Öffne das Programm ACD ChemSketch und bestätige das sich öffnende Fenster mit OK.
2. Wähle im Menüpunkt TOOLS die Funktion STRUCTURE PROPERTIES aus [alternativ: Tastenkombination ALT + SHIFT + S].
3. Wähle innerhalb des sich öffnenden PROPERTIES-Fensters im Dropdown-Menü die Stilvorlage NORMAL aus.
4. Markiere nun innerhalb des PROPERTIES-Fensters die Option ALL im Menübereich SHOW CARBONS.
5. Beende die Vornahme der Grundeinstellungen durch KLIKEN des Buttons SET DEFAULT und Schließen des PROPERTIES-Fensters.



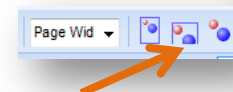
6. Achte darauf, dass sich das Programm im STRUCTURE-Modus befindet (ggf. durch Klicken des Button STRUCTURE aktivieren).



7. Achte weiterhin darauf, dass im Menüband über dem horizontalen Lineal die Option DRAW NORMAL ausgewählt ist.



8. Wähle als Anzeigegröße die Option PAGE WIDTH (Seitenbreite) durch Anklicken des Symbols PAGE WIDTH aus [alternativ: Auswahl im Dropdown-Menü]

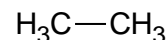


2: ACD ChemSketch – Erste Schritte

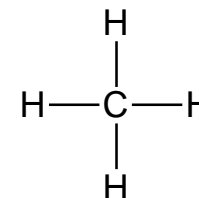
1. Wähle im linken Menüband „C“ für das Zeichnen von Kohlenstoff-Atomen aus.
2. Klicke mit der Maus auf die Arbeitsfläche und erstelle so ein C-Atom.
ACHTUNG: Da das Programm immer automatisch durch Bindungen zu H-Atomen dafür sorgt, dass die Atome Edelgaskonfiguration erlangen, entsteht so ein Methan-Molekül (CH_4).



3. Durch Anklicken und gleichzeitiges Ziehen erstellst du an der Position des Loslassens ein zweites, über eine Elektronenpaarbindung angebundenes C-Atom [alternativ: Einfachklick auf das bereits erstellte C-Atom].

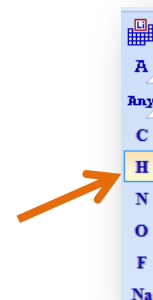
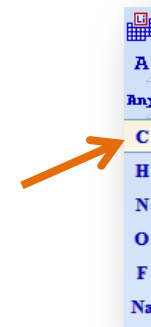


4. Zeichne ein Methan-Molekül (CH_4), sodass alle vier enthaltenen Elektronenpaarbindungen dargestellt werden (Wasserstoff-Atome zeichnest du, indem du im linken Menüband „H“ für das Zeichnen von Wasserstoff-Atomen auswählst).






ACHTUNG: Du hast sicher festgestellt, dass die Strukturformeln keine korrekten/vollständigen LEWIS-Formeln darstellen. Wie bei den Molekülbaukästen werden die nichtbindenden Elektronenpaare nicht dargestellt – diese muss man sich in Gedanken ergänzen!

TIPP: Durch Anklicken der Funktion CLEAN STRUCTURE („Recycling-Symbol“)[oder F9] wird die 2D-Darstellung auf der Arbeitsebene optimiert.



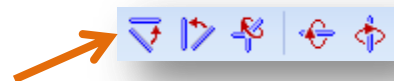
3: Zeichnen von Alkanen

1. Zeichne unter das Methan-Molekül ein Ethan-Molekül, indem du ein C-Atom zeichnest und erneut auf dieses klickst. Nachdem die beiden C-Atome gezeichnet sind, ergänze die H-Atome und optimiere ggf. mit der Funktion CLEAN STRUCTURE [F9]. 
2. Zeichne unter das Ethan-Molekül nun noch ein Propan-Molekül, indem du auf das erste C-Atom zwei mal klickst.
3. Wechsle von der Option DRAW NORMAL in die Option SELECT/MOVE mithilfe des Icons im Menüband über dem horizontalen Lineal. 
4. Klicke innerhalb des Moleküls auf die Zeichenfläche (ohne ein Einzelatom direkt anzuklicken!), um das gesamte Propan-Molekül zu markieren.
5. Um die Wasserstoff-Atome zu ergänzen, wähle die Funktion ADD EXPLIZIT HYDROGENS im Menü TOOLS [STRG + SHIFT + Y].
6. Optimierte ggf. durch Anwenden der Funktion CLEAN STRUCTURE [F9].
7. Zum Zeichnen längerer Ketten von Kohlenstoff-Atomen (z. B. für länger-kettige Alkane) empfiehlt sich die Funktion DRAW CHAINS im oberen Menüband. Wähle diese durch Anklicken der Funktion aus. 
8. Klicke an einer Stelle mit der Maus auf die Arbeitsfläche und halte die linke Maus gedrückt. Ziehe mit der Maus eine Kohlenstoff-Atom-Kette der gewünschten Länge.
9. Ergänze dann nach Punkt 5. die Wasserstoff-Atome.
10. Zeichne auf verschiedenen der beschriebenen Wegen die Moleküle der homologen Reihe der Alkane von Methan bis Octan untereinander. Achte dabei auf eine anschauliche und saubere 2D-Darstellung.

4: Zeichnen von Isomeren von Alkanen

Das Zeichnen von Isomeren unterscheidet sich eigentlich nicht vom Zeichnen der unverzweigten Alkane. Mache dich durch Zeichnen einiger Alkane und deren Isomere mit folgenden Funktionen vertraut:




1. die Veränderung der Orientierung der gezeichneten Strukturen durch horizontale bzw. vertikale Positionierung einzelner Bindungen bzw. durch Drehung der Darstellungen um gezeichnete Bindungsachsen.



2. Kopieren eines Moleküls auf der Arbeitsfläche über die Funktion INSTANT TEMPLATE: Anklicken des zu kopierenden Moleküls (ACHTUNG: Es muss ein Atom oder eine Bindung berührt werden) und anschließendes Klicken an der abzulegenden Stelle.



5: Automatische Benennung von Molekülen

1. Wechsle von der Option DRAW NORMAL in die Option SELECT/MOVE mithilfe des Icons im Menüband über dem horizontalen Lineal.

An orange arrow points from the text to the icon.
2. Achte darauf, dass die Lasso-Funktion auf LASSO OFF eingestellt ist [ggf. durch Anklicken des Buttons ändern, sodass das weiße Quadrat angezeigt wird].

An orange arrow points from the text to the icon.
3. Markiere das zu benennende Molekül durch Ziehen eines Rahmen um das Molekül.
4. Generiere den systematischen Namen in englischer Sprache über die Funktion GENERATE NAME FOR STRUCTURE
→ der Name wird automatisch unter das Molekül platziert, kann anschließend jedoch einfach verschoben werden.

An orange arrow points from the text to the icon.

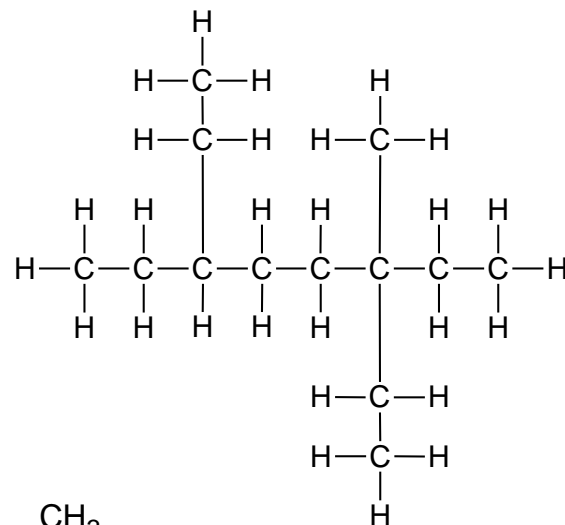
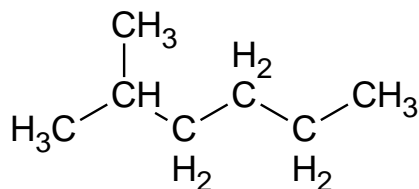
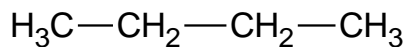
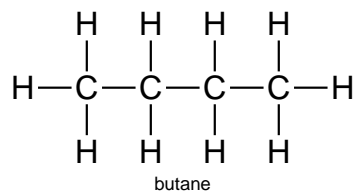
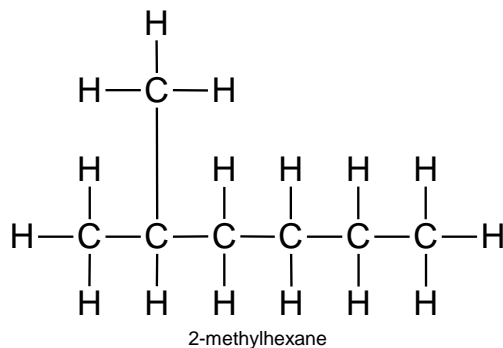
AA: Zeichnen und Benennen von Isomeren

Zeichne von folgenden Molekülen jeweils eine Halbstrukturformel und eine Strukturformel in dein Heft.

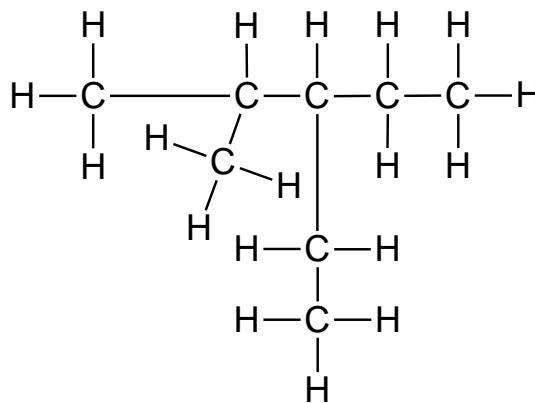
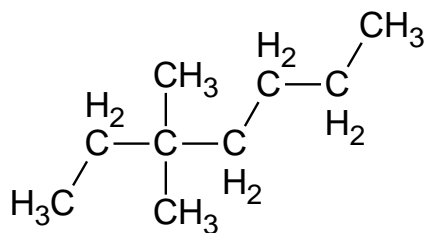
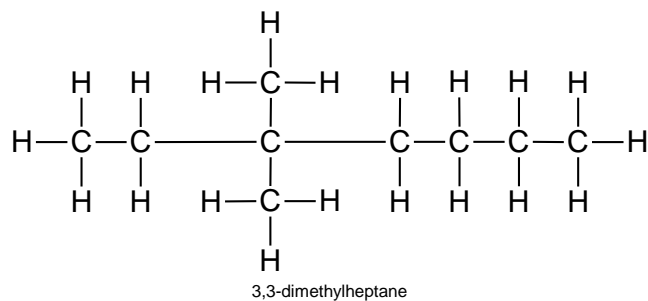
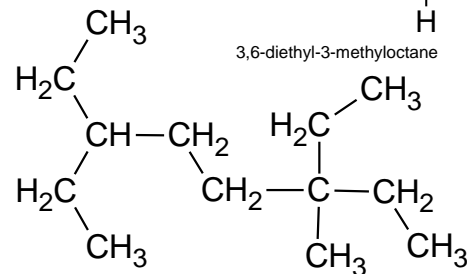
Überprüfe anschließend durch Zeichnen des Moleküls in ChemSketch und anschließendes Generieren des automatischen Namens deine Halbstruktur- und Strukturformeln im Heft.

1. Butan
2. 2-Methylhexan
3. 3,3-Dimethylheptan
4. 3,6-Diethyl-3-methyloctan
5. 3-Ethyl-2-Methylpentan

LÖSUNGEN



3,6-diethyl-3-methyloctane



3-ethyl-2-methylpentane

