

11008 Bestimmung von Bindungswinkeln mit „ChemSketch“

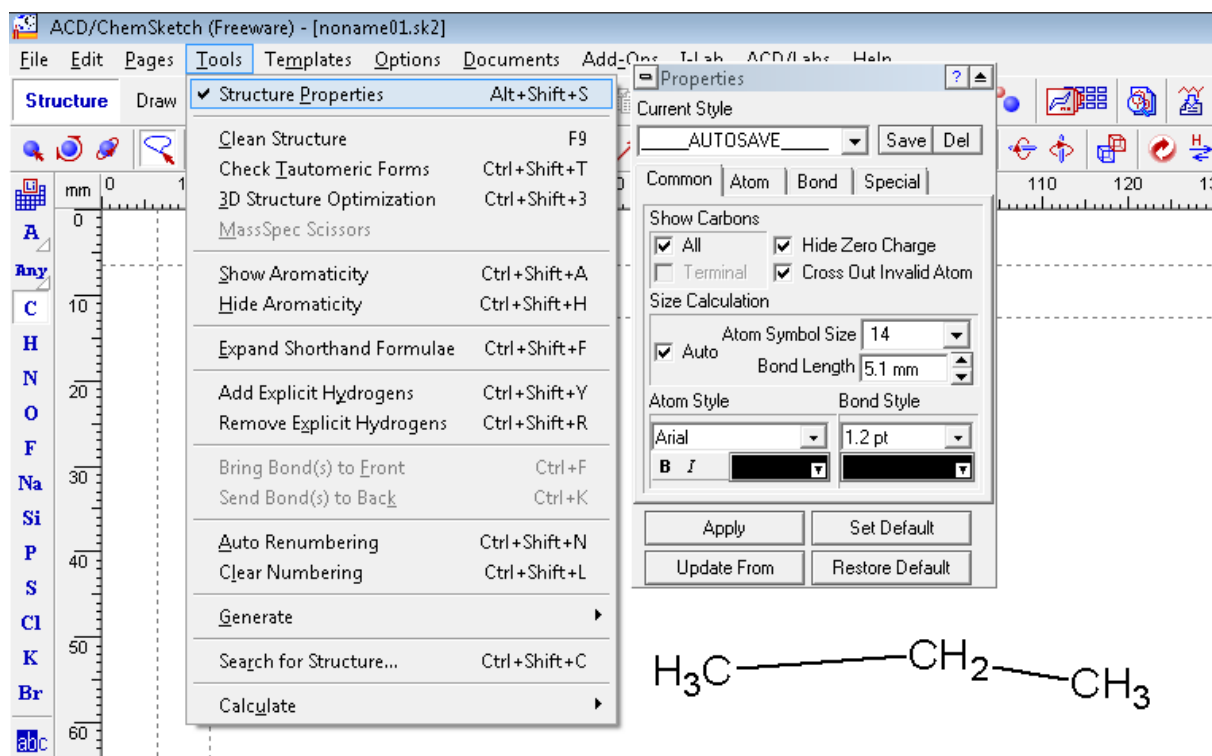
Vorbereitung: Zur Lösung der Aufgabe ist der Download des Programms „ChemSketch“ notwendig. Die Download-Seite des Herstellers ist:
<http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html>

Das Programm lässt sich nach kurzer Registrierung recht einfach installieren. Mit dem chemischen Editor ChemSketch genügt je ein Mausklick, um zum Beispiel CH₄-Moleküle zu zeichnen. Verbindet man zwei davon, erkennt das Programm von selbst, dass sich die Zusammensetzung von Methan (2 CH₄) in Ethan (H₃C-CH₃) ändern muss

1. Änderung der vordefinierten Einstellungen

a) Im Menü „Tools“ lassen sich unter „Structure Properties“ die Proportionen der dargestellten Strukturformeln ändern. Um einfache Lewis-Formeln zu zeichnen sollte man die Option Show „All“ Carbons aktivieren, damit alle Kohlenstoffatome angezeigt werden!

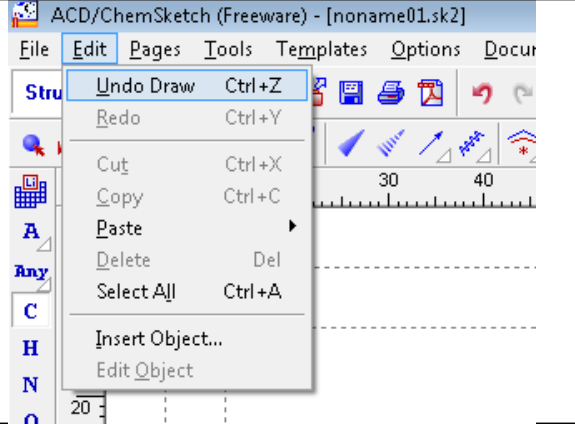
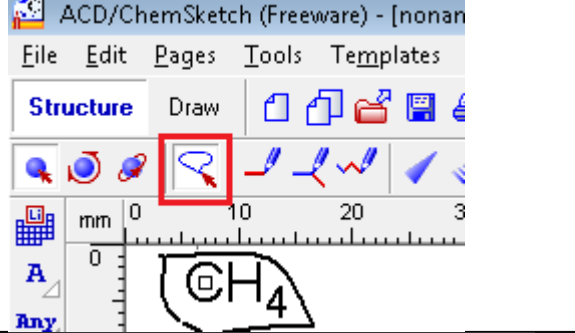
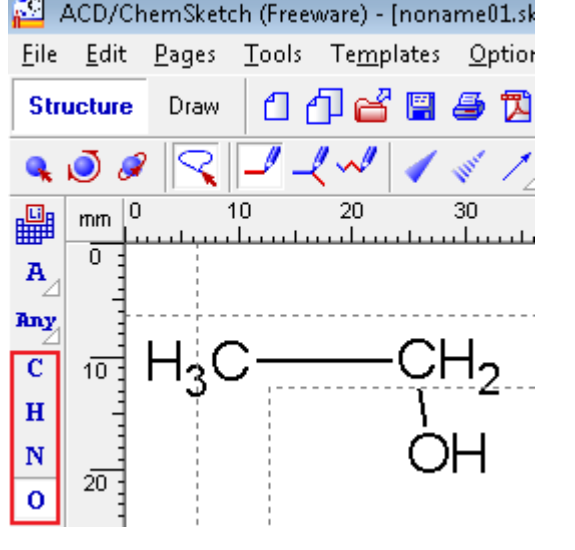
Die Bindungslänge kann man auf einen Wert von ca. 5mm einstellen, die Schriftgröße für die Atomsymbole sollte bei einem Wert von 14 liegen.



The screenshot shows the ChemSketch software interface. The 'Tools' menu is open, and the 'Structure Properties' option is selected. The 'Properties' dialog box is also open, showing the 'Show Carbons' section with the 'All' checkbox checked. The 'Atom Symbol Size' is set to 14, and the 'Bond Length' is set to 5.1 mm. The 'Atom Style' is set to Arial, and the 'Bond Style' is set to 1.2 pt. Below the dialog box, a chemical structure of ethane (H₃C-CH₂-CH₃) is shown.

11008 Bestimmung von Bindungswinkeln mit „ChemSketch“

Wichtige „ChemSketch“-Befehle im Überblick:

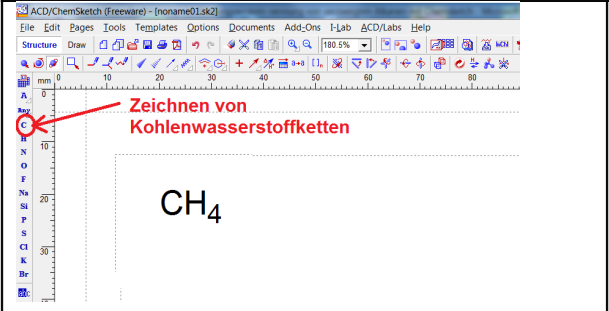
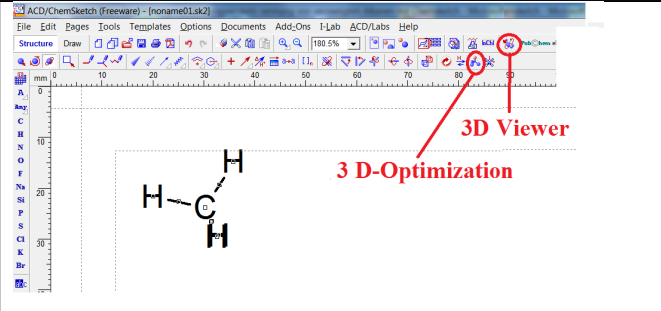
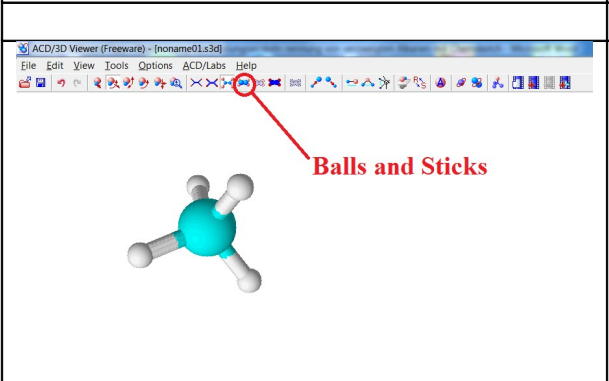
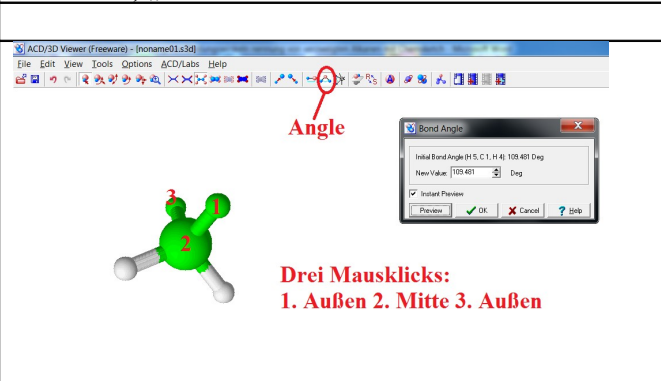
	<p>Einige Befehle im Menü „Edit“</p> <p>„Undo“: macht den letzten Bearbeitungsschritt rückgängig (und bietet eine gute Möglichkeit, Fehler zu korrigieren)</p> <p>„Delete“: löscht eine zuvor markierte Strukturformel</p> <p>„Select All“: markiert alles (also den gesamten Inhalt)</p>
	<p>Mit dem Lasso-Werkzeug lässt sich eine gezeichnete Struktur markieren</p>
	<p>Die Strukturformeln lassen sich mit den Elementsymbolen C, H, N, O usw. darstellen. Es sind folgende Grundeinstellungen festgelegt:</p> <ul style="list-style-type: none">• eine einfache Linie erzeugt eine Kohlenstoffkette• Wasserstoffatome werden automatisch ergänzt• ein Mausklick auf eine Einfachbindung macht diese zu einer Doppelbindung• ein Mausklick auf eine Doppelbindung macht diese zu einer Dreifachbindung

11008 Bestimmung von Bindungswinkeln mit „ChemSketch“

Bestimmung von Bindungswinkeln mit Hilfe des Programmes „ChemSketch“

Mit Hilfe des Programmes „ChemSketch“ lässt sich der Bindungswinkel von Molekülen bestimmen.

Bsp: Bestimmung des Bindungswinkels im Methan!

 <p>Zeichnen von Kohlenwasserstoffketten</p>	 <p>3D Viewer</p> <p>3 D-Optimization</p>
<p>1. Methanmolekül zeichnen</p>	<p>2. a) Button für „3 D-Optimization“ drücken und dann b) „3D Viewer“ starten</p>
 <p>Balls and Sticks</p>	 <p>Angle</p> <p>Drei Mausklicks: 1. Außen 2. Mitte 3. Außen</p>
<p>3. a) „Balls and Sticks“-Button drücken um die Ansicht zu optimieren</p>	<p>4. a) „Angle“-Button drücken um b) den zu bestimmenden Bindungswinkel mit drei Mausklicks markieren, wobei das zentrale Atom mit dem zweiten Klick zu treffen ist. Der Winkel wird grün markiert und nach dem dritten Mausklick angezeigt</p>