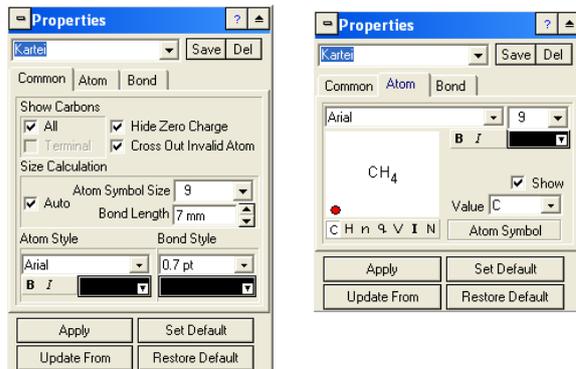


Moleküle zeichnen mit ChemSketch (9.2017)

(Programme/Unterricht/Chemie/Chemsketch/ChemSketch.exe)

Voreinstellungen

- links oben Modus *Structure* (statt *Draw*) wählen
- In *Tools/Structure Properties* (Menuleiste ganz oben) Voreinstellungen vornehmen:
 1. Karteikarte *Common*: Haken bei *Show Carbons* all setzen dann *Set Default*.
 2. Karteikarte *Atom*: C wählen und Haken setzen bei *Show* dann *Set Default*. In der gleichen Karteikarte überprüfen, ob beim Atomsymbol H ebenfalls der Haken bei *Show* gesetzt ist.



Moleküle zeichnen

- Prinzip: Ein Klick zeichnet ein Atom das links gewählt wurde mit all seinen H-Atomen. Zieht man von diesem Atom weg eine Bindung, wird die Anzahl H angepasst.

Mit Maus am linken Rand des Desktops auf C Klicken und mit gedrückter Maustaste die erste Bindung zwischen zwei C-Atomen zeichnen. Weitere Bindungen zeichnen, indem ein C-Atom angeklickt wird und eine weitere Bindung gezogen wird. Falls eine Bindung zu einem anderen Atom gezogen werden soll, zuerst links das andere Atom auswählen. Oder man wählt ein anderes Atom aus und klickt auf ein bestehendes C, worauf das Atomsymbol wechselt. Doppelbindungen werden durch wiederholtes Zeichnen der Bindung gezeichnet.

Vorerst erscheinen die H-Atome nur in ihrer Anzahl, aber ohne Bindungen. Ist das Molekül fertig, wird im *Menu Tools/Add Explizit Hydrogens* (Ctrl Shift Y) das Molekül vervollständigt.

Moleküle winkeltrecht darstellen – "reinigen"

- Mit Taste  oder  und dann mit gedrücktem Mauszeiger Objekt umschliessen und auswählen
- Im *Menu Tools/Clean Structure* (F9) Molekülgeometrie berichtigen.

Moleküle benennen

- Mit Taste  oder  und dann mit gedrücktem Mauszeiger Objekt umschliessen und auswählen
- Im *Menu Tools* die Funktion „Generate“ und dann „Name for Structure“ aufrufen.

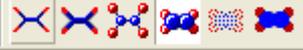
Darstellung in 3 D

- Molekül auswählen

- auf Taste  drücken und dann bei *Remove Hydrogen?* Nein drücken
- Das Molekül kann jetzt gedreht werden

Uebnahme ins 3 D-Programm

- Im *Menu ACD/Labs* → *3 D Viewer* drücken
- Das Molekül erscheint in einer Stabdarstellung, wo die Bindungen gemäss Atomfarben eingefärbt wurden. Wegen dem schwarzen Hintergrund sind die C-Atome nicht schwarz sondern hellblau.

- Mit den Tasten  können die Moleküle anders dargestellt werden.
- Falls etwas nicht klappt: 3 D-Programm schliessen, zurück in den *Structure* Modus und von dort neu in den 3 D-Modus.

Zurück in den Structure Modus

- Menu ACD/Labs → ChemSketch Freeware

Uebernahme des Moleküls in Word

- Menu *Edit/Copy*

-Wechseln zu Word und *Bearbeiten/Einfügen*