

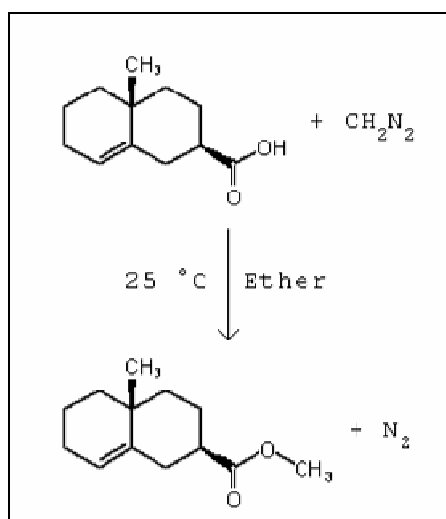
# Tutorium zum Strukturformeleditor

Stand: 12.2.2008

Das folgende Beispiel ist konzipiert für die nicht registrierte Version des Programms. Durch eine Registrierung kann der Zeichenbereich vergrößert werden und es können vorgefertigte Ringe und Ringsysteme schnell in die Zeichnung eingefügt werden. Die Registrierung wird auf der letzten Seite dieses Tutoriums vorgestellt.

## 1. Erstellung einer Reaktionsgleichung

Ziel ist es, die folgende Grafik mit dem Strukturformel-Editor zu erstellen.



Zunächst müssen grundlegende Parameter für die Zeichnung festgelegt werden:

1. Bei einfachen Reaktionsgleichungen sollte man die Bindungslänge auf 30 einstellen.
2. Die Farbe steht standardmäßig auf schwarz und die Ringgröße auf 6.

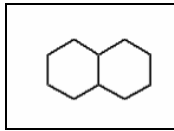
Man beginnt mit dem Zeichnen einer Einfachbindung. Im Feld „Linke Maustaste“ muss die Einfachbindung ausgewählt sein.



Einfachbindungen werden gezeichnet indem man mit der linken Maustaste auf den Startpunkt der Bindung klickt, die Maustaste gedrückt hält und mit der Maus in die Richtung zieht, in die die Bindung führen soll.

Hinweis: Es werden nur Winkel zugelassen, die das Zeichnen eines Sechsrings vereinfachen. Wenn man Fünf- oder Siebenringe zeichnen will, wählt man dieses im Kasten „Ringgröße“ aus. Soll der Winkel frei wählbar sein, muss der Button „Raster ist an“ gedrückt werden.

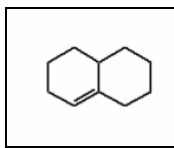
Nach dem Zeichnen der ersten Bindung werden die weiteren Bindungen wie oben beschrieben eingezeichnet. Als Startpunkt wählt man einen der Endpunkte einer schon bestehenden Bindung.



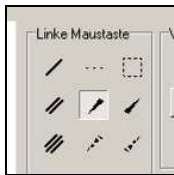
Kommen wie in diesem Beispiel Doppelbindungen in Ringen vor, sollten diese nun gezeichnet werden. Dafür wählt man im Kasten „Rechte Maustaste“ das Feld „DB“ aus.



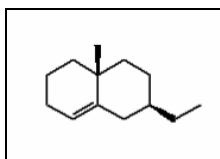
Man klickt nun neben die Einfachbindung mit der rechten Maustaste, die eine Doppelbindung werden soll.



Bei unserem Beispiel gehen vom Ringsystem Bindungen aus, die eine räumliche Orientierung anzeigen. Diese Bindungen können im Kasten „Linke Maustaste“ angewählt werden.



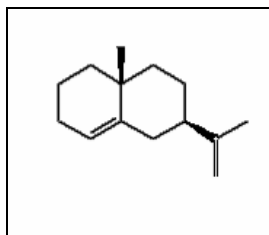
Diese Bindungen werden analog zu den „normalen“ Einfachbindungen hinzugefügt. Durch Zurückschalten auf die „normale“ Einfachbindung, kann jetzt auch gleich die noch fehlende Einfachbindung eingezeichnet werden.



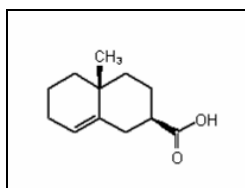
Die letzte Bindung, die in der ersten Formel noch fehlt ist nun die C-O-Doppelbindung. Diese wird nicht eingezeichnet wie die Doppelbindung im Ringsystem, sondern indem man im Kasten „Linke Maustaste“ das Symbol der Doppelbindung auswählt.



Diese Art von Doppelbindung, die zentriert verläuft, wird genauso wie Einfachbindungen gezeichnet.



Nun müssen noch die Atome eingezeichnet werden. Häufige Atome und Gruppen können im Kasten „Rechte Maustaste“ direkt ausgewählt werden und mit einem Klick der rechten Maustaste an eine bestimmte Position in die Formel eingefügt werden. In unserem Beispiel sind dies das O-Atom, die OH- und die CH<sub>3</sub>-Gruppe. (Die CH<sub>3</sub>-Gruppe muss aus CH und einer <sub>3</sub> zusammengesetzt werden.)



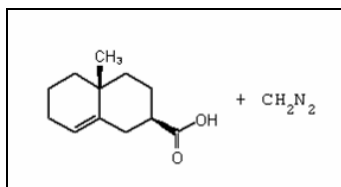
Hinweis: Direkt nach dem Einfügen kann die Position noch über die Pfeile im Kasten „Verschieben“ genau eingestellt werden.



Nun fehlt noch das zweite Edukt. Da es sich um eine Summenformel handelt, wird diese als Text mit der rechten Maustaste eingefügt. Buchstaben werden hoch- bzw. tiefgestellt indem man direkt vor sie > bzw. < eingibt. Man gibt also in unserem Beispiel „+ CH<2N<2“ in das Feld hinter „Text“ ein und klickt auf das Feld „Text“.

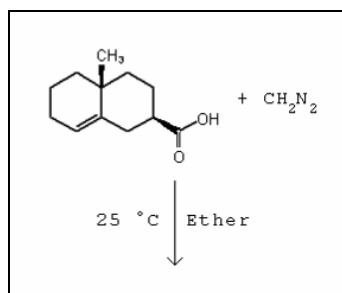


Der Text wird dann durch Klicken mit der rechten Maustaste an die gewünschte Stelle in der Grafik eingefügt.



Hinweis: Über diese Funktion können auch seltene Atome beziehungsweise Gruppen in Formeln eingezeichnet werden.

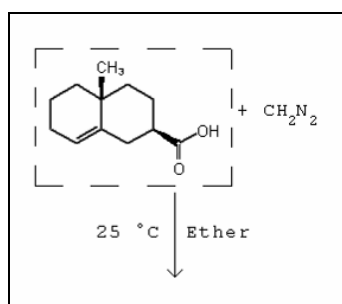
Nun wird der Reaktionspfeil mit der linken Maustaste wie die Bindungen eingefügt mit dem Unterschied, dass die Länge frei wählbar ist. Die Reaktionsbedingungen werden mit dem gerade beschriebenen Textfeld eingefügt.



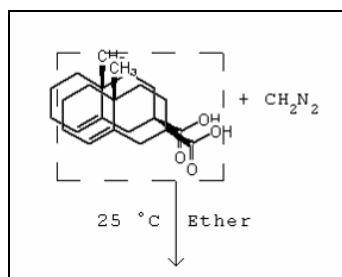
Da das Produkt dem Edukt in unserem Beispiel sehr ähnelt, kopieren wir zunächst das Edukt. Hierzu muss es als erstes markiert werden. Im Kasten „Linke Maustaste“ wählt man das gestrichelte Rechteck.



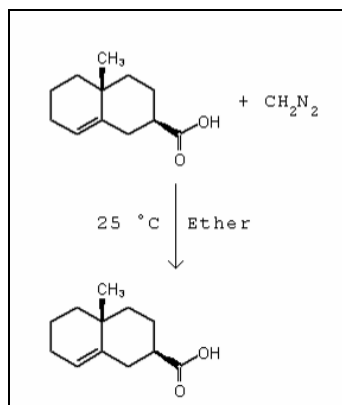
Mit der rechten Maustaste zieht man nun ein Rechteck um die zu kopierende Struktur auf.



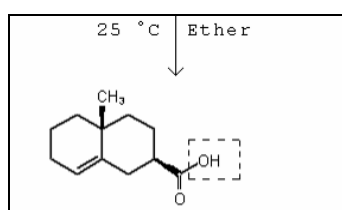
Als nächstes wählt man im Menü „Bearbeiten“ den Punkt „Kopieren“ aus. Die Markierung verschwindet. Um die Kopie zu erstellen wählt man im Menü „Bearbeiten“ den Punkt „Einfügen“ aus. Die kopierte Struktur erscheint nun leicht versetzt in einem gestrichelten Rechteck.



Durch Klicken mit der linken Maustaste in das Rechteck, kann man die Struktur an die gewünschte Stelle verschieben. (Klicken, gedrückt halten und dabei verschieben)

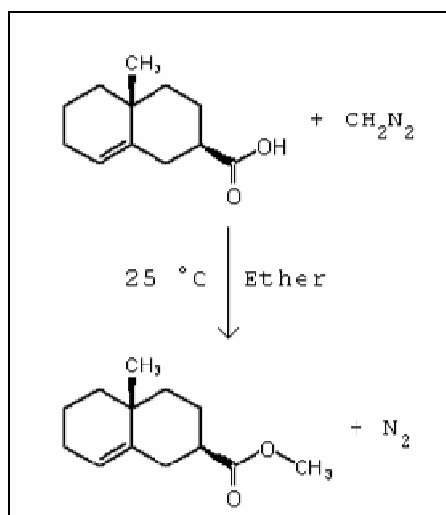


Da aus der Carbonsäure ein Ether werden soll, muss nun die OH-Gruppe entfernt werden. Hierzu wird sie zunächst mit dem gestrichelten Rechteck mit der linken Maustaste markiert.



Hinweis: Es macht einen Unterschied, ob das Rechteck mit der linken oder der rechten Maustaste aufgezogen wird. Bindungen sind im markierten Bereich beim Aufziehen mit der linken Maustaste nur dann, wenn ihr Anfangs- und Endpunkt innerhalb der Markierung sind. Beim Aufziehen mit der rechten Maustaste reicht es, wenn nur einer der Endpunkte innerhalb der Markierung ist.

Wenn man nun die Entfernen-Taste der Tastatur drückt verschwindet die OH-Gruppe aus der Formel. Jetzt können, wie oben bereits beschrieben, die noch fehlende Einfachbindung, das O-Atom und die  $\text{CH}_3$ -Gruppe eingefügt werden. Zuletzt wird mit Hilfe des Textfeldes noch das zweite Produkt hinzugefügt.



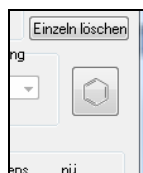
Fertig! Wenn Sie alle Schritte erfolgreich durchgeführt haben, haben Sie die gewünschte Reaktionsgleichung gezeichnet und eine Menge über die Verwendung des Strukturformel-editors gelernt.

## 2. Registrierung

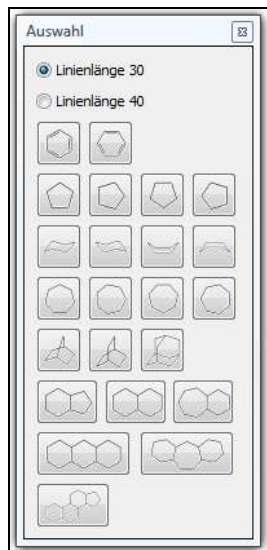
Durch eine Registrierung, die 5 € kostet, können Sie die Weiterentwicklung dieses Programms unterstützen und zwei zusätzliche Funktionen freischalten:

1. Die Zeichenfläche kann auf maximal 1200x1000 Pixel vergrößert werden.
2. Einige Strukturelemente können durch eine Auswahl leichter eingefügt werden.

Für die Registrierung klicken Sie einfach auf den Benzolring. Das weitere Vorgehen wird Ihnen dann erklärt.



Wenn Sie nach der Registrierung auf den Benzolring klicken, erscheint die Auswahl mit den verfügbaren Strukturelementen.



Ein Klicken auf eines der Strukturelemente fügt dieses in markierter Form auf der Zeichenfläche ein. Sie können es nun mit geklickter linker Maustaste an die gewünschte Position auf der Zeichenfläche verschieben. Hier gezeigt am Beispiel des Benzolrings.

