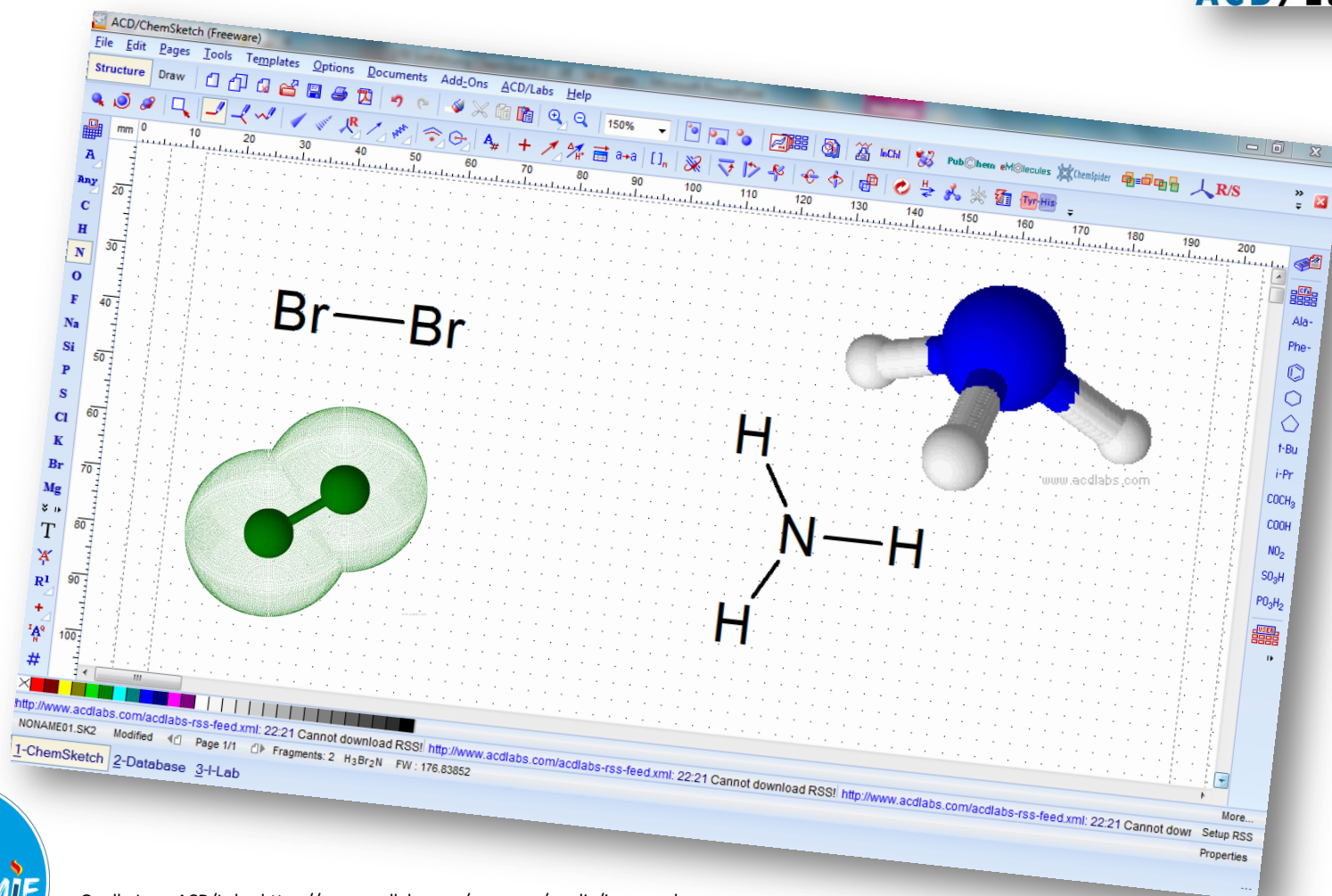


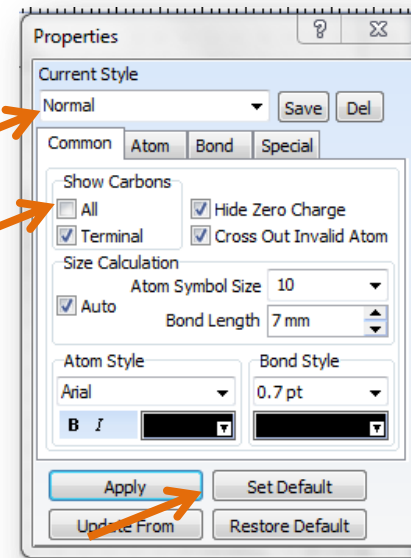
# Lerntutorial ACD ChemSketch „Räumlicher Bau von Molekülen“



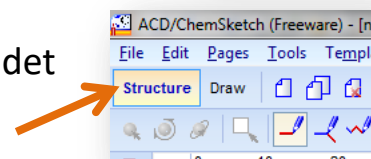
Quelle Logo ACD/Labs: <https://www.acdlabs.com/company/media/images.php>  
Screenshots und Formeln erstellt mit ACD/ChemSketch (Freeware), Version 2017.1.2,  
Advanced Chemistry Development, Inc., Toronto, On, Canada, [www.acdlabs.com](http://www.acdlabs.com), 2018  
Mit freundliche r Genehmigung der Advanced Chemistry Development, Inc. (ACD/Labs)

# 1: ACD ChemSketch – Grundeinstellungen vornehmen

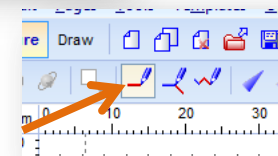
1. Öffne das Programm ACD ChemSketch und bestätige das sich öffnende Fenster mit OK.
2. Wähle im Menüpunkt TOOLS die Funktion STRUCTURE PROPERTIES aus [alternativ: Tastenkombination ALT + SHIFT + S].
3. Wähle innerhalb des sich öffnenden PROPERTIES-Fensters im Dropdown-Menü die Stilvorlage NORMAL aus.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



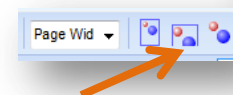
6. Achte darauf, dass sich das Programm im STRUCTURE-Modus befindet (ggf. durch Klicken des Button STRUCTURE aktivieren).



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

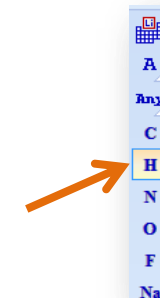


8. Wähle als Anzeigegröße die Option PAGE WIDTH (Seitenbreite) durch Anklicken des Symbols PAGE WIDTH aus [alternativ: Auswahl im Dropdown-Menü]

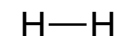


## 2: ACD ChemSketch – Erste Schritte

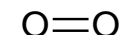
1. Wähle im linken Menüband „H“ für das Zeichnen von Wasserstoff-Atomen aus.
2. Klicke mit der Maus auf die Arbeitsfläche und erstelle so ein H-Atom.  
*ACHTUNG: Da das Programm immer automatisch durch Bindungen zu H-Atomen dafür sorgt, dass die Atome Edelgaskonfiguration erlangen, entsteht so ein Wasserstoff-Molekül ( $H_2$ ).*



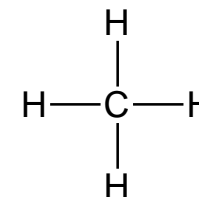
3. Durch Anklicken und gleichzeitiges Ziehen erstellst du an der Position des Loslassens ein zweites, über eine Elektronenpaarbindung angebundenes H-Atom [alternativ: Einfachklick auf das bereits erstellte H-Atom].



4. Wiederhole die Schritte 2. und 3. mit Sauerstoff-Atomen. Durch Anklicken einer bereits erstellten Elektronenpaarbindung erzeugst du eine Doppel- bzw. eine Dreifachbindung. Zeichne mithilfe einer Doppelbindung ein korrektes Sauerstoff-Molekül.



5. Zeichne ein Methan-Molekül ( $CH_4$ ), sodass alle vier enthaltenen Elektronenpaarbindungen dargestellt werden.



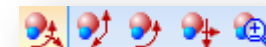
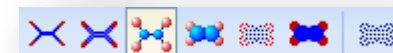
*ACHTUNG: Du hast sicher festgestellt, dass die Strukturformeln keine korrekten/vollständigen LEWIS-Formeln darstellen. Wie bei den Molekülbaukästen werden die nichtbindenden Elektronenpaare nicht dargestellt – diese muss man sich in Gedanken ergänzen!*

*TIPP: Durch Anklicken des „Recycling-Symbols“ [oder F9] wird die 2D-Darstellung auf der Arbeitsebene optimiert.*



# 3: 3D-Betrachtung von Molekülen

1. Wechsle von der Option DRAW NORMAL in die Option SELECT/MOVE mithilfe des Icons im Menüband über dem horizontalen Lineal.
2. Achte darauf, dass die Lasso-Funktion auf LASSO OFF eingestellt ist [ggf. durch Anklicken des Buttons ändern, sodass das weiße Quadrat angezeigt wird].
3. Markiere eine gezeichnete Struktur durch Klicken und gleichzeitiges Ziehen eines Rahmens um die Moleküldarstellung [alternativ: Einfachklick innerhalb der Moleküldarstellung, ohne ein Atom oder eine Elektronenpaarbindung direkt anzuklicken].
4. Wähle die Funktion 3D-VIEWER aus und mache dich mit den dort zur Verfügung stehenden Ansichtsoptionen vertraut:  
(WIRE FRAME (Drahtgerüst), STICKS (Stabmodell), BALLS AND STICKS (Kugelstabmodell), SPACEFILL (Kalottenmodell), DOTS ONLY (transparente Moleküloberfläche), DISKS (Plattenzeichnung), WITH DOTS (zusätzliche Anzeige der Moleküloberfläche in den Optionen WIRE FRAME, STICKS und BALLS AND STICKS))
5. Mache dich zusätzlich mit den verschiedenen Betrachtungsvarianten durch Klicken und gleichzeitiges Ziehen mit der Maus vertraut:  
3D ROTATE (räumliches Drehen),  
FIXED ANGLE ROTATION (Drehen vor und hinter die Anzeigeebene), ROTATE (Drehen auf der Anzeigeebene), MOVE (Bewegen auf der Anzeigeebene), RESEIZE (Verändern der Größe der Darstellung)



*ACHTUNG: Du hast sicher festgestellt, dass das Molekül nicht korrekt räumlich dargestellt wird. Bis jetzt wird lediglich die zweidimensionale Zeichnung im 3D-Viewer betrachtet (die Atome und Elektronenpaarbindungen liegen alle in einer Ebene).*

6. Wähle die Funktion 3D-OPTIMIZATION aus.



*Jetzt wird das Molekül korrekt räumlich dargestellt. Diese Funktion berechnet, wie die Atome und Elektronenpaarbindungen in der Realität angeordnet sind und stellt sie dann entsprechend korrekt dar.*

# AA: Schreibweise und räumlicher Bau von Molekülen

Folgende Moleküle sollen genauer betrachtet werden:

- Wasser-Molekül
- Ammoniak-Molekül ( $NH_3$ )
- Ethen-Molekül ( $C_2H_4$ )
- Propan-Molekül ( $C_3H_8$ )
- Methan-Molekül ( $CH_4$ )
- Kohlenstoffdioxid-Molekül

## **VORGEHENSWEISE:**

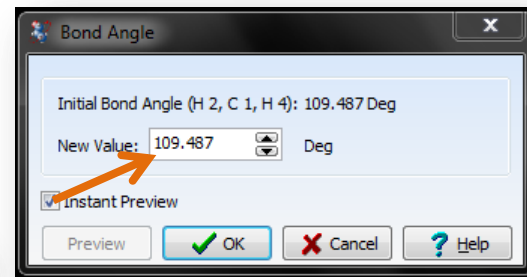
1. Baue das Molekül mit dem Molekülbaukasten.
2. Zeichne das Molekül dann in ChemSketch und optimiere die Schreibweise (optimierte 2D-Darstellung [Recycling-Symbol oder F9]).
3. Betrachte dann mithilfe des 3D-Viewers den realen räumlichen Bau des Moleküls (ACHTUNG: 3D-Optimierung nicht vergessen!)
4. Notiere die Ergebnisse in Form einer Tabelle in dein Heft:

Molekül-Name	LEWIS-Formel des Moleküls [2D] <i>(ACHTUNG: nichtbindende Elektronenpaare ergänzen!)</i>	Beschreibung/Skizze des räumlichen Baus des Moleküls

# 4: Bindungswinkel und Bindungslängen ausmessen

1. Wähle im 3D-Betrachtungsmodus die Option BOND ANGLE (Bindungswinkel) durch Anklicken aus.
2. Klicke anschließend nacheinander drei Atome deines Moleküls an, die einen Winkel bilden (nach dem Anklicken werden diese eingefärbt). Der Bindungswinkel wird dann in einem separaten, automatisch erscheinenden Fenster sowie in der Fußzeile in ° angezeigt.

Bond Angle O (2)-C (1)-H (3)=120.00 Deg Select 2 atoms



*TIPP: Unter Umständen wird im Fenster der Komplementärwinkel angezeigt. In diesem Falle hilft es, die Funktion nochmals anzuwenden und die Atome in umgekehrter Reihenfolge anzuklicken, um den korrekten Winkel zu berechnen. In der Fußzeile wird immer der korrekte Winkel angezeigt.*

3. Wähle im 3D-Betrachtungsmodus die Option BOND LENGTH (Bindungslänge) durch Anklicken aus.
4. Klicke anschließend nacheinander zwei durch eine Elektronenpaarbindung verbundene Atome deines Moleküls an (nach dem Anklicken werden diese eingefärbt). Die Bindungslänge wird dann in einem separaten, automatisch erscheinenden Fenster in pm [Picometer] angezeigt (alte Einheit für Picometer: Å („Angström“)).

# AA: Bindungswinkel unterschiedlicher Moleküle

Folgende Moleküle sollen genauer betrachtet werden:

- Wasser-Molekül
- Ammoniak-Molekül ( $NH_3$ )
- Methan-Molekül ( $CH_4$ )
- Kohlenstoffdioxid-Molekül

## **VORGEHENSWEISE:**

1. Baue das Molekül mit dem Molekülbaukasten.
2. Zeichne das Molekül dann in ChemSketch und optimiere die Schreibweise (optimierte 2D-Darstellung [Recycling-Symbol oder F9]).
3. Betrachte dann mithilfe des 3D-Viewers den realen räumlichen Bau des Moleküls (ACHTUNG: 3D-Optimierung nicht vergessen!) und vermesse die Moleküle.
4. Notiere die Ergebnisse in Form einer Tabelle in dein Heft:

Molekül-Name	Skizze des räumlichen Baus des Moleküls unter Angabe der Bindungswinkel	ggf. Erläuterung der Abweichung vom Tetraederwinkel.