



Mol4D – Moleküle in der 4. Dimension

Schon früh im Chemiestudium wird Studierenden klar, dass zweidimensionale Darstellungen viele Phänomene der Chemie nur unzureichend beschreiben und so mancher räumliche oder dynamische Sachverhalt schwer vorstellbar bleibt. Helfen kann der Erwerb eines Molekülbaukastens, der jedoch nicht billig ist. Autoren moderner Lehrbücher sind bemüht, durch gute grafische Darstellungen den Hauch einer dritten Dimension zu vermitteln. Richtig vordringen in diese Dimension kann man aber eigentlich erst durch geeignete Computerprogramme, die eine freie dreidimensionale Drehbarkeit von chemischen Strukturen erlauben. Im Internet bietet dies die niederländische Web-Site Mol4D, Preisträger des European Academic Software Award 2004.

Nach der Installation der nötigen Software (Java, Chime) steht eine Vielzahl vorgefertigter dreidimensionaler Abbildungen und Animationen zur Verfügung. Beginnend mit der Visualisierung von MO-Schemata durch eine hervorragende Darstellung von Molekülorbitalen kann der Benutzer Grundlegendes zu bestehenden Bindungsmodellen betrachten (Abbildung 1). Ein besseres Verständnis konformationeller und sterischer Probleme in der organischen Chemie vermitteln Moleküldarstellungen in Kombination mit Energiediagrammen. In kleinen Animationen kann hier das Durchlaufen der einzelnen energetischen Minima und Maxima anhand direkt gekoppelter Moleküldrehungen verfolgt werden. Diese Form der Darstellung wird auch in den darauf folgenden Kapiteln zu Reaktionsmechanismen didaktisch sinnvoll eingesetzt. Neben klassischen Lehrin-

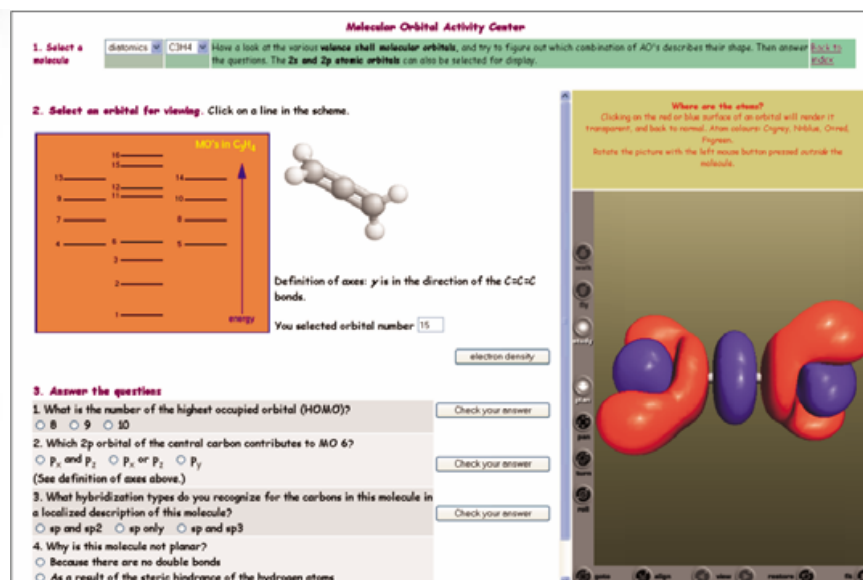


Abbildung 1. Visualisierung von Molekülorbitalen, hier: C_3H_4 .


halten der Grundvorlesung in Organischer Chemie werden auch speziellere Themen, wie die Sharpless-Epoxidierung oder Molekülstrukturen von Geschmacks- und Geruchsstoffen (zu finden unter „Food Science“), angeschnitten. Tetraedrische Zwischenstufen, stereochemische Inversion einer S_N2 -Reaktion oder das Durchschwingen eines Stickstoffatoms in Aminen werden in dreidimensionaler Darstellung selbsterklärend. Sehr anschaulich ist die Kombination von dreidimensionalen Animationen neben synchron verlaufenden Animationen in Valenzstrichschreibweise. Dies hilft dem Betrachter, die Brücke von der „Papierchemie“ zu Reaktionsabläufen im dreidimensionalen Raum zu schlagen. Durch wenige Mausbewegungen kann eine Reaktion von vorne, von hinten, von oben oder unten betrachtet werden. An jedem beliebigen Punkt der Animation kann man stoppen und in aller Ruhe den neuen Sachverhalt betrachten. Alternativ kann die Animation auch mittels Maussteuerung Bild für Bild nach vorne und hinten durchgeklickt werden. Das im Selbststudium erworbene Wissen kann in kleinen abschließenden Tests überprüft und gefestigt werden. Dabei können Studierende zur Beantwortung der Fragen auf dreidimensionalen Darstellungen als Lösungshilfen zurückgreifen. Bei falschen

Antworten wird vom Programm Hilfe angeboten.

Die Animationen sind nicht nur für Studierende als Lernhilfe nützlich, sondern können ebenso von Lehrenden zur Veranschaulichung in Vorlesungen und im Unterricht genutzt werden. Mit einem sehr guten Editor kann der Benutzer zudem beliebige eigene Moleküle und Reaktionen visualisieren und animieren. Nach einer kurzen Einführung zur Benutzung des Animationprogrammes ist dessen Anwendung durch die bereitgestellten Vorlagen sehr einfach.

Hinter der recht einfach gestalteten Startwebsite wartet eine Vielzahl didaktisch wertvoller Animationen und Darstellungen auf den Nutzer. Zwar fehlen ein optisch ansprechendes Raster und eine Suchfunktion, dennoch macht es der klar strukturierte Aufbau dem Benutzer sehr leicht, gewünschte Themen zu finden, zu bearbeiten, zu lösen – und vor allem aber dreidimensional zu betrachten.

Eva Engel, Michael Kruppa, Burkhard König
Universität Regensburg (Deutschland)

 Für mehr Informationen besuchen Sie
<http://www.cmbi.kun.nl/wetche/organic/>
 oder nehmen Sie Kontakt auf mit
h.borkent@cmbi.ru.nl