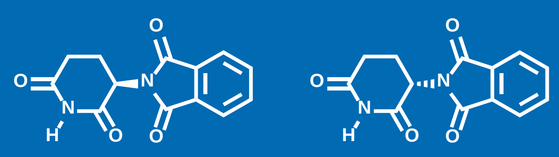
PD Dr. Klaus Schaper

scheLM 3D
3D-Animationen in der Chemie

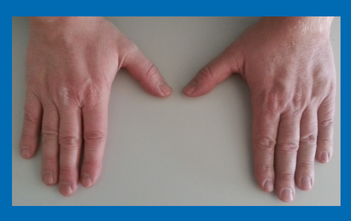
Einleitung

Das Erfassen des dreidimensionalen Aufbaus von Molekülen ist von elementarer Bedeutung zum Verständnis der Wechselwirkung von Molekülen untereinander. Dieser Sachverhalt zeigt sich im alltäglichen Leben in Begriffen wie „rechtsdrehende Milchsäure“.
Das wohl bekannteste Beispiel, das die Bedeutung der dreidimensionalen Anordnung von Atomen im Molekül zeigt, ist Thalidomid.



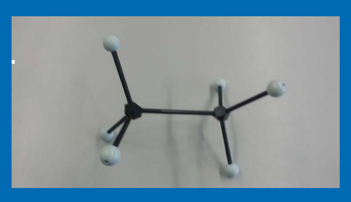
R-Thalidomid S-Thalidomid

Thalidomid wurde Ende der 50iger Jahre unter dem Handelsnamen Contagan in Deutschland als Schlafmittel eingeführt. Die Wirkung beruht dabei ausschließlich auf der R-Form. Das Spiegelbild dazu, die S-Form, ist fruchtschädigend und Auslöser von Missbildungen, die durch Contagan hervorgerufen werden.



Moleküle, die sich wie Bild und Spiegelbild verhalten, aber nicht identisch sind, werden als Enantiomere bezeichnet. Unsere Hände verhalten sich wie Enantiomere: Die rechte Hand ist das Spiegelbild der linken Hand, aber die beiden Hände sind verschieden.

Molekülmodelle



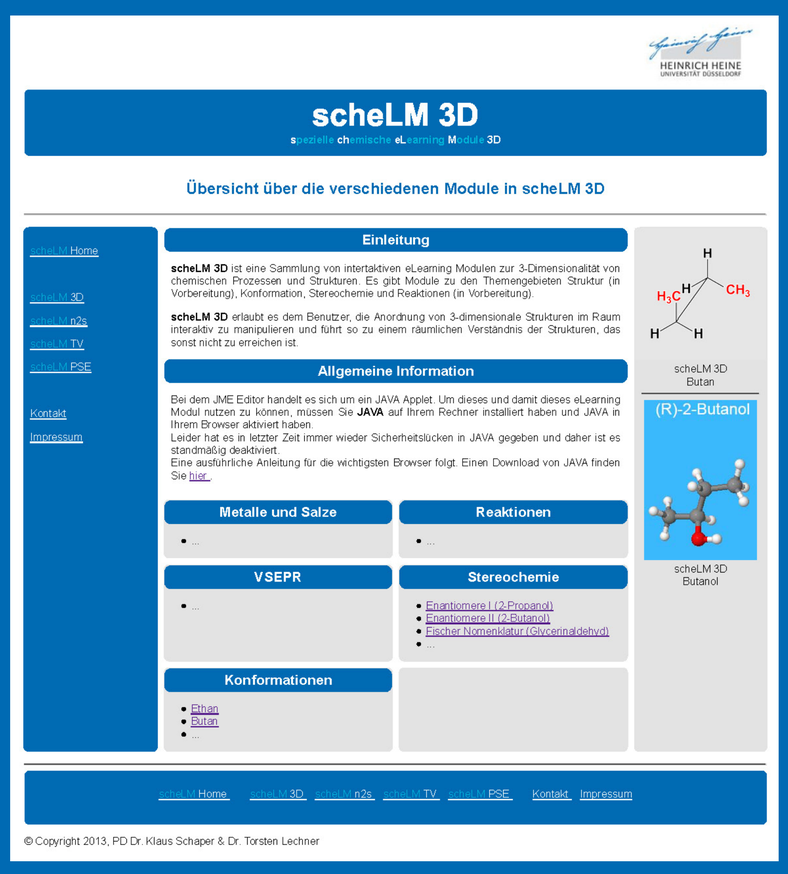
Häufig fällt es Studierenden schwer, die dreidimensionale Struktur von Molekülen zu erfassen. Hier kann der Einsatz von Modellen helfen.

Modelle haben aber auch Nachteile:

1. Um wichtige Details im Modell erkennen zu können, kommt es auf den richtigen Blickwinkel an. Im Hörsaal ist es nicht möglich, ein Modell so zu zeigen, dass alle Studierende eine gute Perspektive haben.
2. Der Studierende sieht das Modell nur einmal kurz in der Vorlesung. Selbst wenn der Studierende sich selbst einen Molekülbaukasten zulegt, kann er Sachverhalte zwar prinzipiell nachverfolgen, aber nicht auf Richtigkeit prüfen.
3. Ein interaktives Vermitteln und Wiederholen des Lernstoffes ist nicht möglich.

scheLM 3D

An diesem Punkt setzt das Interaktive eLearning Modul scheLM 3D (spezielles chemisches eLearning Modul 3D) ein.



In der obenstehenden Abbildung ist die Startseite gezeigt. Fünf Module in zwei Bereichen sind implementiert. Weitere Module in insgesamt fünf Bereichen sind geplant.

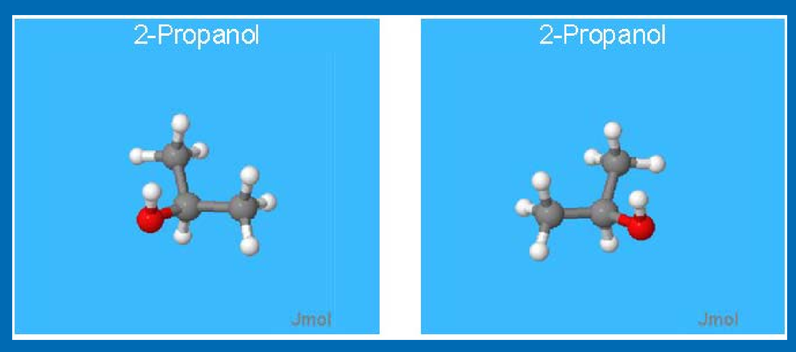
Prinzip

Die dreidimensionale Struktur eines Moleküls lässt sich mathematisch beschreiben. Basierend auf dieser Beschreibung können Moleküle mit Hilfe des „open-source“ Java-Applets Jmol innerhalb einer Webseite dargestellt und interaktiv vom Benutzer verändert werden. Dies beinhaltet

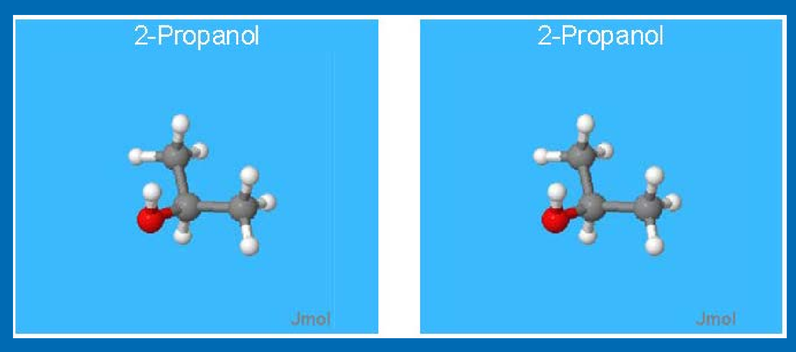
- die Änderung des Blickwinkels,
- das Verfolgen chemischer Reaktionen,
- das Verfolgen von Veränderungen der Geometrie
- und die Anpassung der Darstellung auf die aktuelle Fragestellung.

Enantiomere

Im Modul Enantiomere I ist dies am Beispiel von 2-Propanol gezeigt (siehe Abbildung nächste Spalte oben). Wenn man dieses Modul öffnet, erhält man neben Erläuterungen und Anleitungen die beiden oben gezeigten Darstellungen von 2-Propanol, die sich offensichtlich wie Bild- und Spiegelbild verhalten.

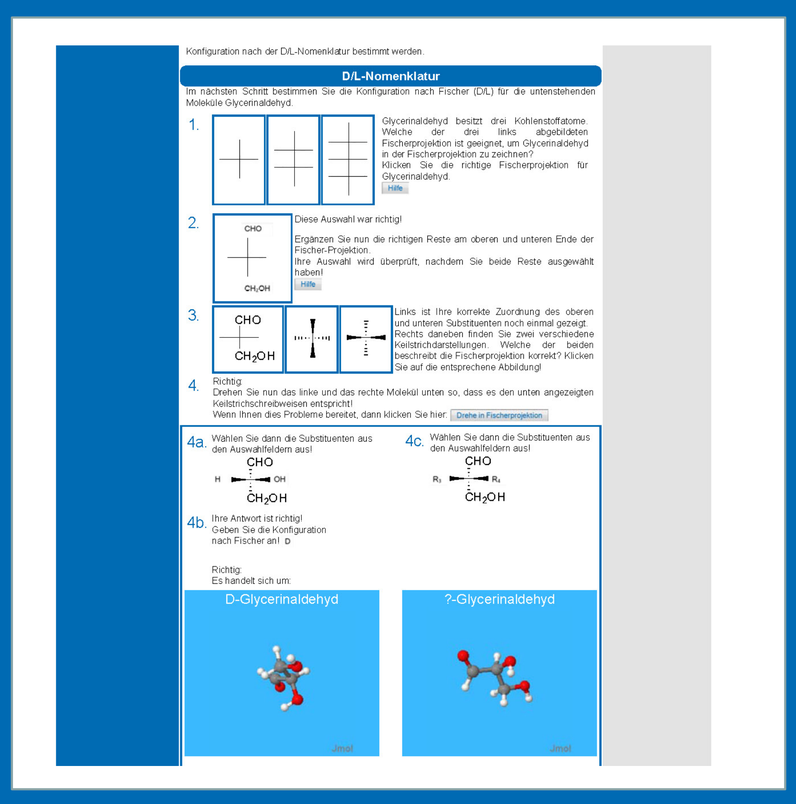


Wird das rechte Molekül in eine andere Orientierung gedreht, so lässt sich leicht erkennen, dass es sich nicht um Enantiomere, sondern um identische Moleküle handelt. Diese Drehung kann direkt mit der Maus vorgenommen werden und übt so, die Dreidimensionalität von Molekülen zu begreifen.



D/L-Nomenklatur

Zur Unterscheidung von zwei Enantiomeren benutzt man entweder die R/S-Nomenklatur oder die D/L-Nomenklatur.



Das Modul Glycerinaldehyd liefert eine schrittweise Einführung in die D/L-Nomenklatur. Die Schritte 1 bis 4 werden nach und nach bearbeitet und der nächste Schritt wird erst nach der richtigen Antwort eingeblendet. Bei einer falschen Antwort erscheint eine Hilfe.
Auch hier ist es von entscheidender Bedeutung, dass der Benutzer das Molekül in eine geeignete Anordnung dreht.

Institut für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie
PD Dr. Klaus Schaper
Dr. Torsten Lechner

scheLM.hhu.de/scheLM_3D

Heinrich-Heine-Universität
eTeaching-Netzwerktreffen 2013