

1 Bedienung von IMES

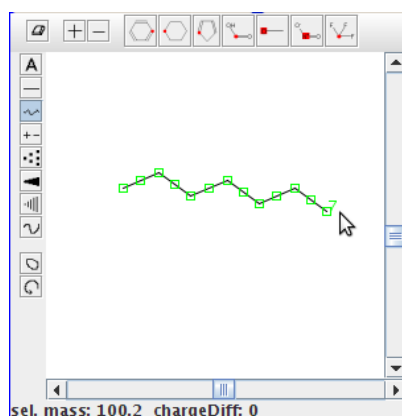


Abbildung 1:
Kettenwerkzeug

1.1 Einfügen von Bindungen

Wählen Sie in der linken Symbolleiste die gewünschte Bindungsordnung (in vereinfachten Modus werden Mehrfachbindungen durch mehrmaliges Anklicken einer Bindung erzeugt) und klicken Sie in den Zeichenbereich.

Durch Klicken und Ziehen können Sie die Bindung in einer anderen Orientierung einfügen. Beim Ziehen auf ein bereits gezeichnetes Atom wird eine Verknüpfung erzeugt.

Durch Halten von [Umschalt] wird das 15°-Winkelraster deaktiviert. Durch Halten von [Strg] kann man die Bindungslänge frei einstellen.

Das Kettenwerkzeug kann genutzt werden, um Alkylketten zu

zeichnen.

1.1.1 Stereochemie

Mit den Werkzeugen „Bindung nach vorn“, „Bindung nach hinten“ sowie „Stereochemie undefiniert“ können entsprechende Bindungen eingefügt werden bzw. Einfachbindungen entsprechend modifiziert werden.

1.2 Ändern von Atomen

Zeigen Sie mit der Maus auf ein Atom, das bearbeitet werden soll. Wenn sich unter dem Mauszeiger kein Atom befindet, dann werden die ausgewählten Atome bearbeitet.

Tippen Sie das Atomsymbol ein, ggf. auch mit vorgestellter Atommasse (**Eingabe von Isotopen**), nachgestellte Anzahl an Wasserstoffatomen und Ladungssymbol, ggf. wiederum mit einer Anzahl. Ebenso kann man die Abkürzung einer Vorlage eingeben, die dann eingefügt wird. Schließen Sie die Eingabe mit [Enter] ab.

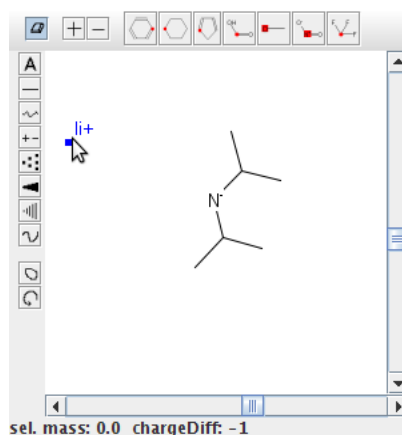


Abbildung 2: Atome
eingeben

Beispiele:

^{13}C => Kohlenstoff als Isotop der Masse 13, automatische Anzahl an Wasserstoffatomen

Na^+ => Natriumion

$\text{CH}\cdot$ => monoradikalisches Kohlenstoffatom mit einem Wasserstoffatom

CH_0 => Kohlenstoffatom ohne Wasserstoffatome

Drückt man [Enter], ohne daß vorher eine Eingabe erfolgt ist, so wird die vorherige erneut angewandt.

Für Suchanfragen können zusätzlich die Platzhalter

- % für ein beliebiges Element
- X für Halogene
- M für Metalle

- Ln für Lanthanoide

eingegeben werden.

1.2.1 Ladung

Die Ladung eines Atoms lässt sich durch das Ladungswerkzeug ändern. Ein Klick mit der linken Maustaste erhöht die Ladung des Atoms unter dem Mauszeiger um eine Einheit, durch Klick mit der rechten Maustaste verringert sich die Ladung um 1. Gleiches lässt sich durch Drücken von [+] bzw. [-] erreichen.

1.2.2 Radikale

Durch das Radikalwerkzeug lässt sich die Zahl ungepaarter Elektronen eines Atoms erhöhen (linke Maustaste) bzw. erniedrigen (rechte Maustaste).

1.3 Einfügen von Vorlagen

In der oberen Symbolleiste kann man eine Vorlage auswählen und dann an einem Atom oder einer Bindung einfügen. Durch Drehen des Mauseis können Anknüpfungspunkt in der Vorlage und Orientierung verändert werden.

Beispiel: aktive Vorlage ist 2-Pyridyl. Durch Anfügen an ein *Kohlenstoffatom von Benzol* entsteht 2-Phenylpyridin. Mit Hilfe des Mauseis lassen sich auch 3- bzw. 4-Phenylpyridin zeichnen. Durch Anfügen an eine *Bindung von Benzol* lassen sich Chinolin bzw. (mit dem Mauseis) Isochinolin zeichnen.

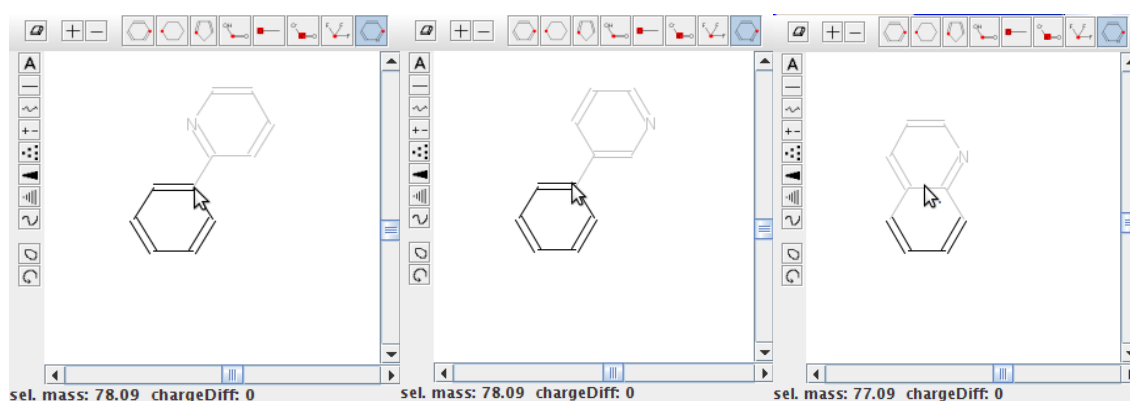


Abbildung 3: 2-Ph-pyridin

Abbildung 4: 3-Ph-pyridin

Abbildung 5: Chinolin

1.4 Reaktionen

Mit dem Werkzeug „-->“ gibt man einen Reaktionspfeil ein, um Edukte und Produkte zu trennen. Einzelne Komponenten kann man mit „+“ trennen.

1.5 Bearbeiten von Strukturen

Die Werkzeuge „Rechteckauswahl“ und „Freihandauswahl“ erlauben es, Atome und Bindungen auszuwählen, so daß diese

1. verschoben (durch Ziehen eines der ausgewählten Atome)
2. rotiert (mit dem Rotationswerkzeug)
3. ausgeschnitten/kopiert (über die Schaltflächen „Kopieren“ bzw. „Ausschneiden“)
4. gelöscht werden (über die Schaltfläche „Auswahl löschen“)

Die Masse der ausgewählten Atome wird in der Fußzeile angezeigt.

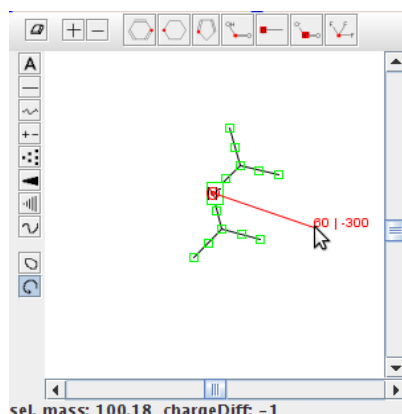


Abbildung 6: Auswahl
rotieren

1.5.1 Rotieren

Das Rotationswerkzeug rotiert durch Ziehen mit gedrückter linker Maustaste die Auswahl oder die gesamte Struktur um den Punkt, an dem die Maustaste gedrückt wurde. Der Winkel wird neben dem Mauszeiger angezeigt, durch Halten von [Umschalt] wird das 15°-Winkelraster deaktiviert.

1.5.2 Löschen von Atomen und Bindungen

Mit dem Löschwerkzeug kann man durch klicken und ziehen Atome und Bindungen unter dem Mauszeiger entfernen. Ziehen mit der rechten Maustaste löscht rechteckige Bereiche.

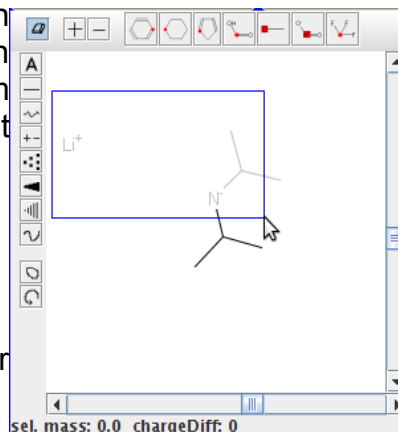


Abbildung 7: Rechteckige
Bereiche löschen

1.5.3 Rückgängig/Wiederherstellen

Mit den entsprechenden Symbole kann man sich in der Historie der Bearbeitung bewegen.

1.6 Ansicht

Die Symbole „+“ und „-“ Zoomen die Ansicht. Mit Hilfe der Scrolleisen kann der Ausschnitt verschoben werden.

1.7 Tastenkombinationen

[Strg]+X	Ausschneiden
[Strg]+C	Kopieren
[Strg]+V	Einfügen
[Entf]	Auswahl löschen
[Strg]+Z	Rückgängig
[Strg]+W	Wiederherstellen

IMES is © 2007-2010 Otmar Ginkel

IMES is licensed under the terms of the GPL

Manual © 2010 Felix Rudolphi