



**Diese Arbeit wurde vorgelegt am Lehr- und Forschungsgebiet
Informatik 9**

**The present work was submitted to Learning Technologies
Research Group**

Entwicklung eines Widgets für Chemische Zeichnungen

Developing a Widget for Chemical Drawings

Bachelorarbeit

Bachelor-Thesis

von / presented by

Thelen, Raphael

421980

Dr.-Ing., Prof Ulrik Schroeder

Dr. rer. nat., Prof. Bernhard Rumpe

Aachen, 06.12.2023

Inhaltsverzeichnis

Teil I	Motivation und Einleitung.....	5
Kapitel 1	Motivation	6
Kapitel 2	Aufbau der Arbeit	7
Teil II	Grundlagen	9
Kapitel 3	Technische Grundlagen	10
3.1.	WebWriter	10
3.2.	Web Components	10
3.3.	Lit.....	11
3.4.	Canvas API.....	11
Kapitel 4	Didaktische Grundlagen	13
4.1.	Multimedia Learning	13
4.2.	Personalized Learning	13
4.3.	Explorable Explanation	14
Kapitel 5	Chemische Grundlagen.....	15
Kapitel 6	State of the Art.....	17
6.1.	Ähnliche Implementationen	17
6.2.	Verfügbare Bibliotheken und Pakete.....	18
Teil III	Eigenes Projekt	19
Kapitel 7	Zielsetzung und Konzeptionierung	20
7.1.	Zielsetzung.....	20
7.2.	Konzeptionierung	20
Kapitel 8	Implementation und Hürden	22
8.1.	Zeichenfläche.....	22
8.2.	Speichern der Moleküle.....	26
8.3.	Nutzeroberfläche	27
8.4.	InChI-Kompatibilität	28
8.5.	Bereits implementierte Funktionen	28
Teil IV	Fazit und Ausblick.....	29
Kapitel 9	Fazit.....	30
9.1.	Bewertung der verwendeten Technologien	30
Kapitel 10	Ausblick	32

Zur besseren Lesbarkeit wird in dieser Arbeit das generische Maskulinum verwendet.

Die in dieser Arbeit verwendeten Personenbezeichnungen beziehen sich – sofern nicht anders kenntlich gemacht – auf alle Geschlechter.

Zusammenfassung

Diese Bachelorarbeit befasst sich mit der Konzeptionierung und Implementierung eines Widgets für WebWriter, das die Erstellung von chemischen Molekülzeichnungen und Reaktionsgleichungen ermöglicht. Ziel ist die Entwicklung einer intuitiven App, die das Erlernen chemischer Konzepte auf molekularer Ebene mittels gut erforschter didaktischer Konzepte erleichtert und die Motivation der Schüler steigert.

Entstanden ist eine detaillierte Konzeptionierung, die Anforderungen an das Widget von grundlegender Zeichnung über die Unterstützung unterschiedlicher Darstellungsformen von Molekülen bis zur Einbindung der Industriestandards SMILES und InChI zur Export- und Importfähigkeit von Molekülen definiert und deren Umsetzbarkeit untersucht.

Bedeutsam sind die Ergebnisse wird im Kontext des digitalen Lernens und der Anwendung im Chemieunterricht. insbesondere Die Konzepte des Multimedia Learning, Personalized Learning und Explorable Explanations werden auf den Fachbereich der Chemie angewandt. Das entwickelte Programm bietet eine gute Basis für künftige Weiterentwicklung.

Teil I Motivation und Einleitung

Kapitel 1 Motivation

Der Chemieunterricht ist als Teil des MINT-Bereichs fester Bestandteil des Naturwissenschaftlichen Unterrichts und somit Alltag für Millionen von deutschen Schülern. Als einer der drei Grundpfeiler der Chemischen Lehre gilt, neben der Symbolischen und Makroskopischen Ebene, die Molekulare Ebene [1]. Diese wird Lernenden mit verschiedenen Modellen der räumlichen Darstellung nähergebracht. Als solche gelten auch Zeichnungen, beispielsweise in Form von Lewis-Strukturen oder der Skelettschreibweise.

Für das an der RWTH Aachen unter den Aspekten der Explorable Explanations [2] und des individuellen Lernens [3] entwickelte WebWriter ist es daher sinnvoll auch die Chemie abzudecken. Diese Konzepte finden hier sinnvoll Anwendung und können Schülern und Lehrern den Alltag durch den Umzug von Stift und Papier in die digitale Welt vereinfachen und zeitgleich das Verständnis des Themas erleichtern.

Zielsetzung der Arbeit ist die Konzeptionierung und Entwicklung eines Widgets für WebWriter, mit welchem Zeichnungen von chemischen Molekülen sowie Reaktionsgleichungen erstellt werden können. Erforscht werden soll die Umsetzbarkeit verschiedene Darstellungsformen, die Schülern unterschiedlicher Lernstadien die Nutzung der Software erlaubt. Zu Beginn soll insbesondere die grundlegendste Form, die bereits genannten Lewis-Strukturen, unterstützt werden. Viele weitere Formen der Visualisierung wie die in der organischen Chemie bevorzugte Skelettschreibweise sind neben vielen weitere Darstellungsformen für zukünftige Arbeit denkbar.

Ein weiteres Forschungsziel ist die Umsetzbarkeit einer Einbindung der Industriestandards SMILES und InChI, mit denen Moleküle in programmübergreifenden Formaten exportiert und importiert werden können. Zuletzt ermöglichen diese durch Kanonisierung eine Vergleichbarkeit zweier Zeichnungen, was die Automatische Kontrolle einer von der Lehrperson im Kontext interaktiver Arbeitsblätter gestellten Aufgabe ermöglicht.

Kapitel 2 Aufbau der Arbeit

In den folgenden vier Abschnitten beleuchte ich den Entwicklungsprozess im Rahmen des aktuellen wissenschaftlichen Standes und bewerte die Ergebnisse mit Bezug auf die Verwendbarkeit des beiliegenden Codes für kommende Projekte

Teil I – Motivation und Einleitung fasst den Rahmen des Projektes zusammen und gibt einen Ausblick auf die erwarteten Forschungsergebnisse. Das WebWriter Projekt, in dessen Rahmen dieses Widget entwickelt wird, soll kurz beleuchtet werden, um die Motivation der Arbeit zu skizzieren und deren Relevanz einzuordnen.

Teil II – Grundlagen erläutert die der Implementation zugrundeliegenden Bausteine und verwendeten Technologien um anschließend den aktuellen Forschungsstand zusammenzufassen.

Teil III – Eigenes Projekt definiert die ursprüngliche Zielsetzung und zeigt den Stand des Projekts. Besonders illustriert werden die während der Entwicklung aufgetretenen Schwierigkeiten, um insbesondere verworfene und hinten angestellte Konzepte aufzuführen, durch die dennoch wertvolle Erkenntnisse gewonnen werden können. Das entwickelte Widget wird näher beleuchtet und getroffene Designentscheidungen werden näher fundiert.

Teil IV – Fazit und Ausblick bewertet die Resultate kritisch und gibt einen Ausblick auf mögliche Weiterentwicklung. Weitere Konzepte von nicht vollständig oder nicht fertig implementierter Vorhaben werden hier vorgestellt.

Teil II Grundlagen

Kapitel 3 Technische Grundlagen

Dieses Kapitel erläutert die dem Widget zugrundeliegenden Technologien. Ein grundlegendes Verständnis ebendieser wird in den folgenden Teilen vorausgesetzt.

3.1. WebWriter

WebWriter ist eine an der RWTH Aachen entwickelte Software zur Erstellung digitaler Arbeitsblätter. Auf Basis des „WYSIWYG-Prinzips“ (What-You-See-Is-What-You-Get) soll es Lehrkräften mit einer intuitiv bedienbaren Software ermöglicht werden Arbeitsblätter digital zu erstellen und ebenso digital von ihren Schülern bearbeiten zu lassen. Auf Basis der Explorable Explanations soll so das Lehr- und Lernerlebnis verbessert werden.

Um möglichst breit viele Fachbereiche zu erreichen, setzt das Projekt auf separat entwickelte, modulare, Plug-Ins. Technisch ermöglicht wird dies durch die Verwendung von Web Components mittels der Library Lit.

3.2. Web Components

Web Components sind eine Erweiterung des HTML-Standards. Sogenannte HTML-Templates ermöglichen es, Vorlagen zu definieren und im HTML DOM mehrfach wiederzuverwenden. Von essenzieller Natur ist dabei die Wiederverwendbarkeit der Komponenten und die Kapselung ebenjener.

Dies wird durch sogenannte Shadow-DOMs erreicht. Die HTML-Knoten einer Komponente werden vor dem darüberliegenden DOM versteckt und isoliert, sodass jede Komponente insbesondere in Bezug auf JavaScript Skripte und CSS Style Regeln weder von Vorgänger Elementen oder anderen Komponenten beeinflusst wird noch selbst Einfluss auf den Rest des HTML Dokuments nehmen kann. Dies erleichtert die

Entwicklung komplexer Anwendungen, indem sowohl die stilistische Konsistenz der Nutzeroberfläche als auch die Lesbarkeit des Codes verbessert werden.

Mit der Custom Elements API können zudem eigene HTML-Elemente definiert und bestehenden Elemente um Tags erweitert werden.

Die Verwendung von Web Components ist insbesondere für die Entwicklung von Nutzeroberflächen sinnvoll, da dort häufig einander ähnliche Komponenten wie Knöpfe auftreten. Nichtsdestotrotz eignet es sich aber genauso für modular aufgebaute Projekte wie WebWriter.

3.3. Lit

Die Bibliothek Lit erlaubt die Entwicklung von nativen Web Components auf Basis von JavaScript oder TypeScript unter Einhaltung der Web Component Definition. Da die Komponenten mit der Custom Elements API erstellt werden, können diese vollständig mit anderen Web-Technologien, wie Frameworks, verwendet werden.

Darüber hinaus führt diese Praxis dazu, dass JavaScript mittels Template-Literal-Syntax direkt in die Komponenten eingebaut werden kann und diese so dynamisch manipuliert werden können. Somit entfällt die Kompilierung des Codes und die Komponenten sind ohne Mehrarbeit Browserübergreifend funktionsfähig. Dabei erstellt Lit seine Komponenten so, dass diese Änderungen an ihren Attributen selbstständig erkennen, sowie den gesamten DOM neu laden, ohne dass dies manuell herbeigeführt werden muss.

3.4. Canvas API

Die Canvas API ist eine native JavaScript Schnittstelle zur dynamischen Erzeugung von Pixelgrafiken im Browser.

Mithilfe des Canvas HTML-Tags werden Container erstellt, die unter Nutzung von JavaScript mit Grafiken gefüllt werden können. Es existieren verschiedene Methoden

zum Zeichnen von vordefinierten Figuren sowie eigenen Pfaden, zudem können Texte erzeugt und bereits bestehende Grafiken importiert werden. Der Fokus der Canvas API liegt dabei auf der Erstellung zweidimensionaler Grafiken. Um dreidimensionale Figuren zu erzeugen, existiert die separate WebGL API.

Nachdem ein Pfad oder Objekt gezeichnet ist, wird es fester Bestandteil der Pixelgrafik. Dabei kann es nur durch Übermalen oder vollständigem Zurücksetzen der Leinwand entfernt werden.

Kapitel 4 Didaktische Grundlagen

Als Didaktik versteht man die Wissenschaft der Planung, Umsetzung und Bewertung von Lehr- und Lernprozessen [4]. Insbesondere in der Chemie besteht eine Herausforderung komplexe Konzepte auf eine verständliche Weise zu vermitteln, welche Neugier in Schülern weckt und motiviert [5].

Wichtiger Bestandteil der Didaktik ist die Auswahl der verwendeten Lehrmethoden. Interaktive Arbeit erleichtert den Lernprozess und macht abstrakte Konzepte greifbarer [6]. So hat digitales Lernen einen signifikant positiven Einfluss auf den Lernerfolg und die Motivation von Lernenden [7]. Hier kann die Informatik ansetzen und unter Verwendung gut erforschter Konzepte Lösungsansätze bieten.

4.1. Multimedia Learning

Multimedia Learning ist eine Form des Lernens, bei der mehrere Modalitäten gleichzeitig Verwendung finden. Unter Modalitäten werden in diesem Kontext Texte, Bilder, Animationen oder Videos verstanden. Indem mehrere sensorische Systeme gleichzeitig angesprochen werden, soll die kognitive Verarbeitung und das Verständnis des präsentierten Inhalts verbessert werden. Dadurch, dass überflüssige Informationen ausgespart werden, kann eine Überbelastung der Sinne effektiv vermieden werden. Weitere Gestaltungsprinzipien umfassen räumliche Kontiguität sowie designtechnische Kohärenz [8].

4.2. Personalized Learning

Das Konzept des Personalisierten Lernens ist eines der ältesten der Geschichte der Bildung. Während in früheren Zeiten Lehrer ihr Wissen nur an wenige Personen oder Auszubildende weitergegeben haben, erlauben moderne informationstechnische Systeme heutzutage die Anwendung von Personalized Learning Konzepten auf eine breite Masse. Die Grundkonzepte umfassen individuell angepasste Lehrpläne und auf persönliche Bedürfnisse zugeschnittene Erklärungen. Eine erfolgreiche Anwendung

kann das Verständnis des Gelernten drastisch verbessern und sorgt zeitgleich für mehr Motivation sorgen. [3]

4.3. Explorable Explanation

Unter Explorable Explanations versteht man das Konzept Dokumente, insbesondere auch im wissenschaftlichen Bereich, reaktiv zu gestalten. Das bedeutet, (unter anderem) die Verwendung interaktiver Beispiele, die angepasst werden können, sodass der Leser selbst Unterschiede erkennen, sowie Konzepte besser greifen kann [2]. Sinnvoll ist dieses Konzept auch in Bezug auf chemische Zeichnungen. So können Schüler mit den von den Lehrpersonen gestellten Arbeitsblättern selbstständig experimentieren, indem sie Elemente entfernen oder ersetzen. Diese Art des selbstständigen Experimentierens bietet eine interaktivere Art des Lernens als das bloße Betrachten gedruckter Moleküle.

Kapitel 5 Chemische Grundlagen

Die Molekulare Ebene wird als eine der drei Grundpfeiler der chemischen Lehre erachtet [1]. Ziel der Arbeit ist die Entwicklung eines Zeichenprogramms für chemische Strukturen. Dieses Kapitel befasst sich mit der Erklärung verwendeter chemischer Konzepte.

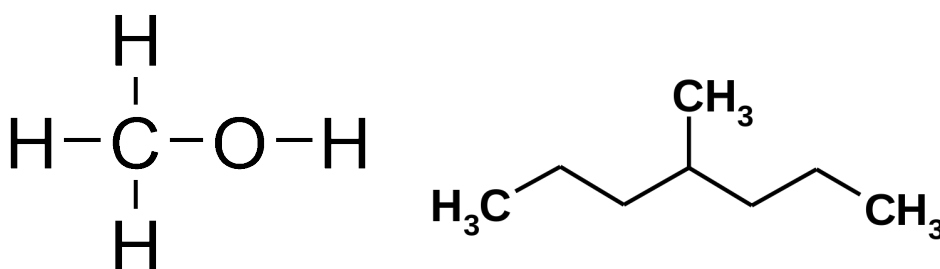


Abbildung 1 Die Stoffe Methanol als Lewis-Struktur (links) und ein Oktan als Skelettstruktur (rechts)

Als Molekül bezeichnet man eine Verbindung von Atomen. Neben Ionenmolekülen zählen kovalente Bindungen zu den am häufigsten auftretenden Molekülen. Bei dieser Art der Verbindung teilen zwei Atome Elektronen, um stabile Moleküle zu binden. Man unterscheidet hierbei zwischen einfachen und mehrfachen kovalenten Bindungen. Bei der einfachen kovalenten Bindung wird ein Elektronenpaar zwischen den Atomen geteilt. Von mehrfacher Bindung spricht man dann, wenn zwei oder drei Elektronenpaare geteilt sind, [9].

Bindungen in Form von Elektronenpaaren werden beim Zeichnen in sogenannten „Lewis-Formeln“ als Linie dargestellt, bei Mehrfachbindungen dagegen werden sie als zwei beziehungsweise drei parallele Linien zwischen zwei Elementsymbolen dargestellt. Zusätzlich existieren freie Elektronenpaare, sowie Radikale, die als einzelne Elektronen nicht gebunden sind, also nicht zwischen zwei Atomen geteilt werden, sondern Teil eines einzigen sind [9].

Ein besonders in der Organischen Chemie wichtiger Begriff sind zyklische Verbindungen, bei denen kovalente Bindungen in Ringstruktur vorliegen. Diese sind besonders wichtig im Bereich der organischen Chemie, da sie die Grundlage für viele organische Verbindungen darstellen. Die Anordnung der Atome innerhalb des Ringes, sowie die Art der Bindung beeinflussen die chemischen und physikalischen Eigenschaften der Moleküle signifikant. [10].

Neben Lewis-Formeln existiert mit der Skelettformel eine weitere, andere, Form der Darstellung, die besonders in späteren Schuljahren, im Chemieunterricht gelehrt wird. Bei dieser Darstellungsform werden Kohlenstoffatome seltener mit ihrem Elementsymbol C gekennzeichnet, sondern durch Endpunkte und Verzweigungen von Linien repräsentiert. Mit Kohlenstoffatomen verbundene Wasserstoffatome werden in der Regel ausgelassen [9].

Aus der Untersuchung an deutschen Schulen verwendeter Schulbücher geht die Relevanz einiger im Lehrplan vorkommender Mechanismen hervor, die in der fertigen Anwendung unterstützt werden sollten. Konkret ist das sogenannte „Ostwaldverfahren“ als eine Methode zur Herstellung von Salpetersäure fester Bestandteil des Unterrichts. Beim zweiten Mechanismus, dem der „elektrophilen Addition“, wird ein Molekül mit Elektronenüberschuss an eine Doppel- oder Dreifachbindung eines anderen Moleküls addiert. Der Mechanismus der sogenannten „Veresterung“ schließlich beschreibt die Reaktion einer Säure und eines Alkohols zu einem Ester, eine Stoffgruppe, der viele Aromastoffe und Kunststoffe angehören.

Neben den rein chemischen Grundlagen existieren auch im Gebiet der Chemoinformatik wichtige Grundsteine. Die Formate SMILES und InChI sind Standarte zur digitalen Speicherung von Molekülen. SMILES oder „Simplified Molecular-Input Line-Entry System“ ist ein seit den 1980er Jahren gebräuchliches Format und bildet Moleküle als String aus ASCII-Zeichen ab [11]. Der Standard hat sich über die Jahre stetig weiterentwickelt und ist seit 2007 als OpenSMILES in der public domain. InChI ist ein weiterer Standard der von der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) im Jahr 2005 veröffentlicht wurde. Im Gegensatz zu SMILES unterstützt InChI die Speicherung von Stereoinformationen und erlaubt so die Eindeutige Unterscheidung von Stereoisomeren, also Isomeren, die sich nur durch die räumliche Anordnung ihrer Atome unterscheiden.

Kapitel 6 State of the Art

Im Folgenden wird eine Auswahl von diesem Projekt ähnlichen Programmen vorgestellt und in den Kontext Lehre und Didaktik gesetzt. Einige Frameworks und Bibliotheken mit Projektbezug werden ebenfalls genannt und bezüglich Verwendbarkeit als Teil des Projekts bewertet.

6.1. Ähnliche Implementationen

Es existieren viele Programme auf dem Markt die das Erstellen chemischer Zeichnungen ermöglichen. Zu den Marktführern gehören ChemDraw [11] und Marvin von der Firma Chemaxon [12], die beide als Lizenzprodukt vertrieben werden. Die National Library of Medicine der Vereinigten Staaten bietet mit PubChem Sketcher [13] eine kostenfrei Alternative an. Solche Produkte existieren mit ChemsSketch [14], Molview [15] und ChemDoodle [16] ebenfalls, wobei nur letztere Zwei über eine dreidimensionale Ansicht verfügen. Bezüglich ihrer Funktionen gibt es große Unterschiede im Umfang, beispielsweise in Hinblick auf verfügbare Bindungstypen und Elemente, wobei die unter Lizenz verfügbaren Programme deutlich umfangreicher ausfallen.

ChemDraw muss hier besonders hervorgehoben werden. Seit seinen Anfängen 1986 als Projekt an der Universität Harvard hat sich ChemDraw zu einem der dominierenden Programme in der organischen Chemie durchgesetzt [17]. Neben dem Zeichnen von chemischen Strukturen erlaubt ChemDraw die Generierung von Molekülen aus einem Namen, sowie die automatische Benennung von Strukturen. Bindungen können farbig gekennzeichnet und Strukturen auf Knopfdruck optimiert werden.

ChemAxon Marvin aus dem Jahr 1988 ist nur unwesentlich jünger und mit (nach eigenen Angaben) mehr als 100.000 täglichen Nutzern [12] ebenfalls weit verbreitet. Interessante Funktionen stellt die Option einer dreidimensionalen Ansicht und der integrierten Strukturprüfung dar, die Fehler in einem gezeichneten Molekül automatisch hervorhebt. [8]

Chemotion verfolgt einen anderen Ansatz: Die 2018 vom Karlsruher Institut für Technologie entwickelte Plattform hat sich die Speicherung und Veröffentlichung von Forschungsergebnissen im Fachbereich der Chemie mittels eines als „Laborjournal“ bezeichneten Softwareprodukts zum Ziel gemacht. So soll die zeitgleiche Veröffentlichung von Publikation und zugrundeliegenden Datensätze ermöglicht werden [18]. Als Teil davon verfügt Chemotion auch über einen Moleküleditor der unter anderem über ein mächtiges Verwaltungssystem für erstellte Strukturen verfügt [19].

6.2. Verfügbare Bibliotheken und Pakete

Einige der oben genannten Anbieter bieten zusätzlich zu den herunterladbaren Programmen browserbasierte Packages, Plugins oder Webkomponenten an. So existiert die Marvin JS Bibliothek [12], die auf Webseiten von Drittanbietern ebenso eingebunden werden kann wie ChemDraw JS [11] und der ChemDoodle Web Component der Konkurrenz [16].

Neben diesen Closed-Source Programmen gibt es auch open-source Alternativen, wie *ketcher* von *epam* [20] oder *kerkule.js* [21], die vollständige Editoren im Browser implementieren und nutzbar machen. Insbesondere *ketcher* ist hier hervorzuheben, da es als Widget verpackt direkt verwendet werden kann und darf. [20]

OpenChemLib JS ist als JavaScript Port der vom Schweizer Pharmaunternehmen Actelion Pharmaceuticals Ltd entwickelten Java Bibliothek OpenChemLib unter der BSD-3 Lizenz auf GitHub verfügbar [22]. Als umfangreichste der zuvor genannten Bibliotheken umfasst OpenChemLib JS eine Vielzahl an Modulen. Neben Branchenspezifischen Werkzeugen wie einem Rechner zur Bewertung des „Drug Score“ gibt es für den schulischen Unterricht sinnvolle Funktionen wie etwa Rechner zur Bestimmung anderer Moleküleigenschaften, wie beispielsweise Gewicht. [22]

Von besonderer Bedeutung im Zusammenhang mit diesem Projekt sind verfügbare Module zur Kanonisierung oder SMILES-Parsing von Molekülen. [22] Aufgrund der Überladung mit Funktionen und der Abhängigkeit von Java JDK wird OpenChemLib JS in diesem Projekt jedoch nicht verwendet.

Teil III Eigenes Projekt

Kapitel 7 Zielsetzung und Konzeptionierung

Zu Beginn der Arbeit wurden Ziele für das fertige Widget gesetzt und Testfälle festgelegt.

7.1. Zielsetzung

Ziel des Projekts ist die Konzeptionierung und Entwicklung eines Widgets für chemische Zeichnungen im Rahmen des WebWriter Projekts der RWTH Aachen. Nach den Prinzipien des Multimedia Learning, Personalized Learning und der Explorable Explanations soll ein für Lehrer intuitiv zu verwendendes Programm entstehen, das das Erlernen chemischer Konzepte auf der molekularen Ebene erleichtert und die Motivation der Schüler steigert. Zur Verwendung kommen sollen dabei moderne Web-Technologien auf Basis von HTML Components und der Bibliothek Lit.

7.2. Konzeptionierung

Kern des Programms stellt das Zeichnen chemischer Strukturen mittels HTML Canvas dar. Dazu zählen insbesondere die Möglichkeit der Verwendung aller chemischen Elemente, das Erzeugen symbolischer Restgruppen, sowie die Option der Verwendung aller Bindungsarten, insbesondere kovalente Einzel- und Mehrfachbindungen, sowie frei Elektronenpaare und Radikale. Spezialformen wie zyklische Strukturen müssen erzeugbar sein. Zwecks Überprüfung der Nutzbarkeit des Programms werden Testmoleküle definiert, die in den schulisch relevanten Mechanismen zur Anwendung kommen: Salpetersäure, Ethylacetat als Ester, Ethylen und Ethylenglycol als Beispiel für eine Elektrophile Addition, sowie Triphenylmethan zur Demonstration von Ringbindungen.

Die Moleküle sollen sowohl in Lewis-Schreibweise als auch in Skelettstruktur darstellbar sein, um den Anforderungen aller schulischen Jahrgänge nachzukommen.

Darüber hinaus sollen die Moleküle zu Reaktionsgleichungen verknüpft werden können.

Die Nutzeroberfläche soll dabei den Anforderungen des Multimedia Learnings entsprechen und sowohl Text als auch Grafikelemente abbilden und diese mit einem intuitiven und angenehmen Design kombinieren. Die Oberfläche darf keinesfalls überfrachtet wirken.

Weitere, insbesondere für den Gebrauch im Lehrwesen, wichtige Funktionen stellt das Hinzufügen von Annotationen in Form von farbigen Markierungen und Textbeschreibungen dar. Die Unterstützung der Standards SMILES und InChI sorgt darüber hinaus für Kompatibilität mit bestehenden Softwareprodukten und erlaubt neben der Kanonisierung der Moleküle die Anbindung an Datenbanken. So können Moleküle aus einem UIPAC Namen generiert oder gezeichnete Moleküle automatisch benannt werden.

Reaktionsgleichungen sollten ähnlich wie bei bestehenden Programmen auf ihre Korrektheit überprüft werden können.

Kapitel 8 Implementation und Hürden

8.1. Zeichenfläche

Bei der Wahl der Zeichenfläche setzen bestehende Programme in der Regel auf eine freie Leinwand, auf der Atome frei positioniert werden können und Verbindungen mit einem separaten Werkzeug hinzugefügt werden. Diese Herangehensweise ermöglicht die größte Flexibilität für den Nutzer, ist aber auch umständlich in der Handhabung. Ohne Nachbearbeitung in Form von manueller oder automatischer Formatierung sind die Moleküle meistens unschön anzusehen. Eine andere Option ist die Anordnung der Atome auf einem Gitter, wobei nur Verbindungen zu Nachbarzellen erlaubt sind. Im Vergleich zur ersten Methode erleichtert und beschleunigt dies das Zeichnen, da eine anschließende Formatierung entfällt. Dies führt anschließend zu einem ästhetischeren Bild.

Leider bringt diese Methode beachtliche Nachteile mit sich, die ursächlich dafür sind, dass diese Methode in der Wirtschaft und Forschung wenig beachtet wird. Eine Limitierung auf ein Raster bringt zugleich eine Limitierung der möglichen Verbindungen des Atoms auf die Anzahl der Kanten mit sich und stellt ein Problem bei der Anordnung der Atome größerer Moleküle dar.



Abbildung 2 Problematik der Rastermethode: Methan auf Quadratraster (links), unfertiges Molekül mit zyklischer Kohlenstoffkette (rechts)

Wie aus *Abbildung 2* ersichtlich, funktioniert die Verwendung eines Quadratrasters nur für sehr einfache Moleküle wie Methan (CH_4) problemlos. Die Darstellung eines

beispielhaft gewählten, komplexeren Moleküls scheitert aus mehreren Gründen. Zum einen ist der Kohlenstoffring nicht ringförmig. Das beeinträchtigt zwar nicht zwangsläufig die strukturelle Integrität des Moleküls, vermindert aber die Anschaulichkeit der Abbildung und steht so in Widerspruch zu den Kernprinzipien des Projekts. Des Weiteren kann dem Kohlenstoff-Atom, das bereits mit einem Wasserstoff-Atom verbunden ist, keine weitere Verbindung hinzugefügt werden und viele Stoffe so nicht dargestellt werden.

Ein Lösungsansatz an dieser Stelle wäre es, Verbindungen nicht nur zu Nachbarzellen zu erlauben. Damit entfallen aber die Vorteile der Herangehensweise und man endet auf einer bedienungsunfreundlicheren und weniger ästhetischen Version einer schlichten Leinwand. Ein weiterer Lösungsansatz wäre die Erhöhung der Kanten jeder Zelle. Zwar können die aufgezeigten Probleme so nicht gänzlich annulliert werden, jedoch kann ihr Einfluss auf die Praxis der Nutzung stark reduziert werden.

Es wurden zwei weitere Gittervarianten untersucht, Hexagone und Oktagone. Gleichseitige Sechsecke sind die an ihrer Eckenanzahl gemessen mächtigsten Polygone, die noch zu einem Gitter kombiniert werden können. Bei der Verwendung von Achtecken müssen „zwischen-Zellen“ verwendet werden. Je nach Anordnung erhält man also Raster, wie in *Abbildung 3* ersichtlich.

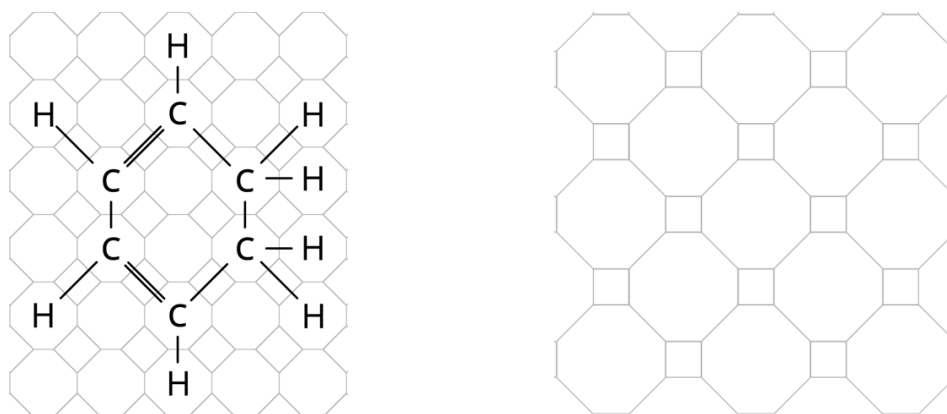


Abbildung 3 Oktagonale Raster mit quadratischen zwischen-Zellen in gekippter und waagerechter Form. Links das fertiggestellte Molekül aus *Abbildung 2*

Welches der beiden Raster als besser zu beurteilen ist, ist an dieser Stelle reine Präferenz, die Vor- und Nachteile sind identisch. Wie aus der Abbildung ersichtlich, kann das Molekül nun fertig gestellt werden und bildet eine korrekte Struktur. Der Ring ist ebenfalls als solcher erkennbar und deutlich näher an der gängigen Praxis der Darstellung. Dennoch gibt es auch Nachteile. Noch komplexere Stoffe wie Hämoglobin oder ein Azopolyether bleiben undarstellbar. Zusätzlich sind die Elektronenpaarverbindungen zwischen den Atomen auf der Diagonalen von anderer Länge als in der Horizontalen und Waagerechten.

Wenigstens Letzteres lässt sich durch die Verwendung von Hexagonen umgehen.



Abbildung 4 Hexagonale Raster in verschiedener Orientierung

Auch hier gilt, dass die technischen Vor- und Nachteile für beide Orientierungen identisch sind. Verglichen mit der oktagonalen Variante gehen nur wenige Stoffe verloren, die auf dem hexagonalen Raster nicht mehr dargestellt werden können. Dazu zählen weitere für den schulischen Gebrauch wenig relevante Chemikalien wie zum Beispiel der Farbstoff Patentblau V.

Die Verwendung von Sechseckrastern ist in der Chemie nicht unüblich. Händische Zeichnungen in der organischen Chemie werden häufig auf Sechskantpapier angefertigt, das dem rechten Raster aus *Abbildung 4* entspricht. Im Gegensatz zu diesem Widget werden die Atome hier aber auf die Ecken statt in die Mitte des Sechsecks gesetzt. So können zeichnerisch perfekte Zyklen erreicht werden, eine strikte Einhaltung führt aber

dazu, dass jedes Atom nur 3 Verbindungen besitzen kann und wäre somit ähnlich restriktiv, wie das bereits verworfenen Konzept des Quadratrasters wäre.

In diesem Projekt ist die Wahl schließlich auf das Linke der beiden Raster gefallen, da die gängige Art des Darstellens von Zyklen eine Spitze oben und unten aufweist, wie bereits in *Abbildung 3* demonstriert.

Auf Basis dieser Entscheidung konnten die grundlegenden Zeichenfunktionen implementiert werden und Moleküle erstmals auf der Zeichenfläche angezeigt werden.

Eine Besonderheit im Aufbau des HTML-DOMs bildet hier eine Stapelung von Canvas-Elementen, die mittels CSS-Regeln übereinander angezeigt werden. Dies erlaubt es, Hovereffekte und Markierungen beim Auswählen einer Zelle zu setzen, ohne dass das gesamte Molekül neu gerendert werden muss. Dies ist keine zwingende Entscheidung, es wäre genauso möglich alles in einer Canvas abzuhandeln und das gesamte Objekt bei einer Mausbewegung neu zu rendern. Dieses System führt allerdings zu einer minimalen Performanceverbesserung und erleichtert zudem die Entwicklung durch Separierung von UI-Elementen und Molekülen.

Eine folgende Herausforderung besteht bei der Verwendung eines Rasters aus der Konvertierung der Canvas-Koordinaten zu Koordinaten des Grids. Unter Verwendung eines hexagonalen Koordinatensystems muss jede zweite Spalte verschoben werden, da der Mittelpunkt des Sechsecks auf Höhe der oberen beziehungsweise unteren Kante des Nachbarn liegt [24].

Zudem muss, um das Raster anklickbar zu machen, ermittelt werden, in welchem Sechseck der Klick stattgefunden hat. Hierzu ist die Eigenschaft der Sechsecke von Wert, die es erlaubt, das Polygon in acht Rechtecke zu unterteilen. Diese haben bei der gewählten Ausrichtung jeweils eine Höhe gleich dem Radius des Sechsecks und eine Breite gleich der Hälfte des Radius. Vier der so entstandenen Rechtecke liegen vollständig in einem Hexagon, die restlichen vier werden je von zwei Hexagonen in der Diagonalen geteilt. Um nun zu ermitteln welche Hälfte des Rechtecks und damit auch welches Hexagon angeklickt wurde, erweist sich folgende Eigenschaft von Quadraten als hilfreich: Für die diagonal links unten gelegene Hälfte gilt unter Annahme des Nullpunkts an der oberen linken Ecke des Quadrats, dass für jeden Punkt innerhalb der Fläche die Y-

koordinate, größer der X-Koordinate ist, für die obere rechte Hälfte umgekehrt. Bei der Umrechnung der globalen Koordinaten zu Lokalen, können unsere Rechtecke so gestreckt und fallabhängig gespiegelt werden, dass sie zu Quadraten werden und somit die Nutzung besagter Eigenschaft erlauben.

Ähnlich knifflig erweist sich die Überprüfung, ob zwei Hexagone benachbart sind, also eine Kante teilen.

Die resultierenden Formeln ergeben sich aus dem beiliegenden Code.

8.2. Speichern der Moleküle

Auch bei der Speicherung der Moleküle gibt es Optionen. Die Verwendung von String förmigen Standards wie InChI oder SMILES erlaubt es das native Format direkt zum Export zu verwenden und garantiert vollständige Kompatibilität, wenn das Rendern des Moleküls direkt auf einem offiziellen Standard basiert. Als nachteilig erwies sich bei ersten Implementationen jedoch die Tatsache, dass der Verzicht auf explizite Speicherung der Koordinaten von Atomen und Verbindungen einer algorithmischen Anordnung der molekularen Bestandteile bedarf. Erstens erwies sich die Entwicklung eines solchen Algorithmus, der mit dem Raster kompatibel ist, als im Zeitrahmen nicht stemmbar, zum anderen kristallisierte sich bei der Konzeptionierung einer vereinfachten Version ein weiteres Problem heraus. Da die Koordinaten nicht explizit gespeichert sind, führt das Hinzufügen eines Atoms im Editor nur zur Veränderung des Strings und einem anschließenden Neu-Rendern des Moleküls. Aufgrund der automatischen Anordnung platziert der primitive Algorithmus das hinzugefügte Atom jedoch an einer, aus Sicht des Algorithmus, optimalen Position und nicht zwangsläufig an der vom Nutzer geklickten Stelle. Im Zuge des Neu-Renderns änderten sich so auch bereits fertig gezeichnete Teile des Moleküls unerwartet.

Stattdessen sollte es nun doch eine explizite Speicherung von Koordinaten zu jedem Atom und jeder Verbindung geben. Ein erster Versuch unter Verwendung eines proprietären String Formats wurde ebenfalls schnell wieder verworfen, da ein solches Konzept wenig Vorteile im Vergleich mit einem JavaScript-Objekt bietet und zusätzlich geparst werden muss.

Letztendlich wurde ein solches als Speicherformat gewählt. Nachteilig zu bewerten ist, dass eine Konvertierung stattfinden muss, um eine Kompatibilität mit SMILES und InChI zu erreichen. Zusätzlich ist das Programm unter Implementierung dieser Methode blind. Chemische Informationen, wie Nachbarmoleküle oder Kettenlänge ergeben sich nicht aus dem Format selbst, sondern müssen aufwendig kalkuliert werden oder nach vorheriger InChI-Konvertierung aus anderem Format ermittelt werden. Vorteilhaft ist neben der einfacheren Implementation aber die Speicherung programmspezifischer Informationen wie Farbdaten und Textdekoration an einer Stelle mit den Molekülinformationen.

8.3. Nutzeroberfläche

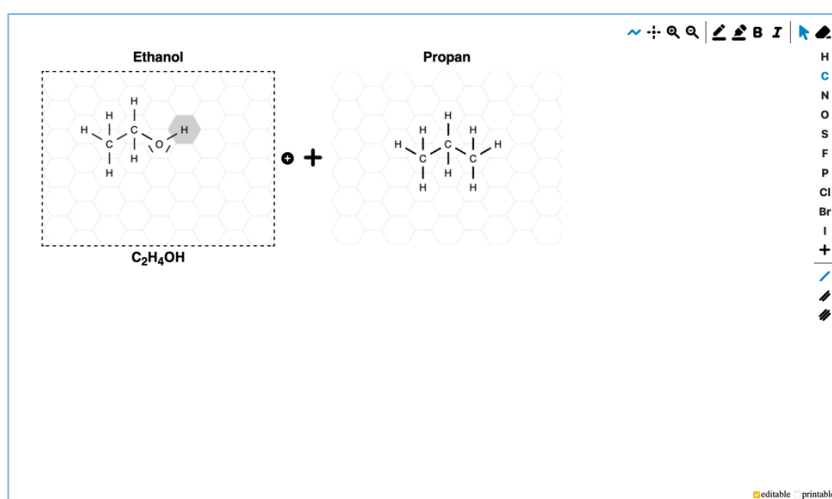


Abbildung 5 Die Benutzeroberfläche des Widgets; die linke Zeichenfläche ist ausgewählt

Das Design der Nutzeroberfläche orientiert sich grob an gängigen Programmen. Oben findet sich eine Leiste mit Werkzeugen, rechterhand eine Palette mit Elementen und Bindungstypen. Die Oberfläche ist entsprechend der Maximen des Projekts aufgeräumt und simpel gehalten. Zusätzliche Informationen zu den Moleküleinwänden, wie die Knöpfe zum Hinzufügen weiterer Stoffe zur Reaktionsgleichung, sind nur beim Hovern

über der Leinwand sichtbar. Auch die Molekülformel darüber verschwindet beim Wegbewegen des Zeigers.

8.4. InChI-Kompatibilität

Um fortgeschrittene Funktionen implementieren zu können, ist die Konvertierung zu InChI unerlässlich. Eine solche Konvertierung muss in beide Richtungen möglich sein. Die Eigenentwicklung eines solchen Algorithmus erwies sich als ausgesprochen schwierig. Erste Prototypen waren in der Lage, simple Kohlenstoffketten mittels Nummerierung der Kohlenstoffe und anschließender Abzählung der je verbundenen Wasserstoffatome zu konvertieren. Dieses Konzept scheitert jedoch schon beim Hinzufügen einer Hydroxygruppe. Nun werden relevante Informationen über die Struktur des Moleküls zusätzlich aus der Summenformel gezogen, und eine sture Nummerierung erweist sich als nicht zielführend.

Einen verlässlich funktionierenden Algorithmus selbst zu entwickeln ist aufgrund der enormen Komplexität und dem daraus resultierenden Zeitaufwand an dieser Stelle wenig sinnvoll und könnte an sich als Thema einer eigenständigen Arbeit dienen. Alternativ finden sich Bibliotheken, die auf das interne Format angepasst den Großteil der Arbeit stemmen könnten.

8.5. Bereits implementierte Funktionen

Neben den grundlegenden Zeichenfunktionen sind bereits einige weitere Funktionen implementiert. Mithilfe der Zoomtasten kann die nutzbare Zeichenfläche heran- und herausgezoomt werden, um mehr Platz für große Moleküle zu schaffen. Grundliegende Textbearbeitungsfunktionen sind ebenfalls bereits verfügbar. So können die Elementsymbole fett, kursiv, sowie farbig gezeichnet werden und Felder können farbig hinterlegt werden. Zusätzlich zu den bereits vorab verfügbaren Elementen können Eigene angelegt und verwendet werden. Es sind alle geplanten Bindungstypen enthalten; freie Elektronenpaare und Radikale können ebenfalls angezeigt werden, jedoch fehlen die Knöpfe in der Nutzeroberfläche zum Aktuellen Stand.

Teil IV Fazit und Ausblick

Kapitel 9 Fazit

Fester Bestandteil dieser Arbeit ist das entwickelte Widget für WebWriter. Obwohl sich das Projekt als deutlich komplizierter herausgestellt hat als zu Anfang erwartet, ist das Ergebnis ein funktionsfähiges Widget, das in seinen Grundfunktionen robust und zuverlässig funktioniert.

Das zugrundeliegende Konzept wendet die vorgestellten Themen der Didaktik sinnvoll auf einen wichtigen Grundpfeiler der chemischen Lehre an und demonstriert, wie ein zukünftiges fertiges Projekt aussehen könnte. Dabei leisten bereits verworfene Konzepte und Versuche der Implementierung einen Beitrag zur Weiterentwicklung und Verbesserung in künftigen Iterationen.

Trotz der im Designprozess getroffenen Entscheidungen, die zu Limitierungen des Widgets führen, sind die für den schulischen Gebrauch relevanten Chemikalien darstellbar.

9.1. Bewertung der verwendeten Technologien

Die Verwendung von Lit und HTML-Components ist eine sinnvolle Vorgehensweise bei der Entwicklung eines Programms mit vielen Komponenten. So mussten mehrfach verwendete Buttons nur einmal erstellt werden und sind designtechnisch konsistent. Das System des Shadow-DOMs ist dabei auf der geringen Größe dieses Projekts dennoch genauso hinderlich wie hilfreich. Einerseits ist die Kapselung der Skripte praktisch, da die Verwaltung eines gezeichneten Moleküls vollständig innerhalb der Komponente stattfinden kann und so das Verteilen der Daten an die Canvas-Elemente nicht manuell geregelt werden muss. Andererseits erschwert die Isolation die Anwendung simpler CSS-Klassen auf spezielle Sonderfälle, für die eine eigene Komponente eigentlich überflüssig ist. Zudem sind gängige CSS-Praktiken nicht auf Shadow-DOM-Elemente anwendbar. So existieren Knöpfe als Teil der Canvas-Container zum Hinzufügen neuer Moleküle. Diese Knöpfe sind den Buttons der Menüleiste ähnlich, allerdings sollen sie hier nicht eine feste Größe annehmen, sondern die Hälfte ihres Parent-Elements. Das Styling mittels „height: 50%;“ oder CSS-Flexbox ist aufgrund der Kapselung nicht

möglich, es muss mit absoluten Werten gearbeitet werden. Auch kann der CSS-Style so nicht, wie sonst üblich, in Abhängigkeit zu Vorgängerelementen definiert werden. Stattdessen müssen Parameter dem HTML-Element übergeben werden, um Sonderfälle zu behandeln.

Kapitel 10 Ausblick

Aktuell bietet das Widget einen begrenzten Umfang an Funktionen und Werkzeugen. Um sinnvoll im Chemieunterricht und als digitales Arbeitsblatt angewandt zu werden, bedarf das Projekt einer Weiterentwicklung. Denkbar sind die bereits untersuchten und konzeptionierten Funktionen, insbesondere die Konvertierung zu InChI. Viele Funktionen und Werkzeuge, die bei vergleichbaren Tools der Industrie Verwendung finden können auf Basis der erwähnten Konvertierungsfunktion auch bei diesem Projekt leicht hinzugefügt werden. Da diese bereits in vorherigen Kapiteln ausführlich diskutiert wurden, wird hier von einer erneuten Aufzählung abgesehen. Die vorgestellten Konzepte können als stabile Basis für folgende Projekte dienen.

Von den bereits vorgestellten Funktionen abgesehen sind wohl 3D-Darstellungen, beziehungsweise Fischer-Projektionen, ein sinnvolles Zukunftsprojekt, mit dem die molekulare Ebene für Schüler noch greifbarer gemacht werden kann. Interessant ist diese Idee auch für andere Fachbereiche wie denen der Physik und Biologie, die sich ebenfalls mit Molekülen befassen und von einer angepassten Version des Widgets profitieren könnten.

Um den Basispunkten der Didaktik noch gerechter zu werden, sollten in Zukunft zudem Nutzerstudien zu Nutzbarkeit und Intuitivität durchgeführt werden, um auf diesem Gebiet Verbesserungen zu erzielen. Eine Angleichung an gängige Industriestandards wie Apples Human Interface Guidelines ist denkbar.

Davon abgesehen kann ein Editor für chemische Formeln, wie er hier vorgestellt wird, als Grundlage weiterer Module und Widgets im Bereich der Chemie dienen. Konkreter können in naher Zukunft Widgets für spezifische Anwendungsfälle, wie das Thema der Akkumulatoren oder der Kunststoffe folgen, bei denen der Editor auf einen Themenbereich zugeschnitten und durch weitere Grafiken im Sinne des Multimedia Learnings erweitert wird.

Anhang A Literaturverzeichnis

- [1] P. Mahaffy, „The Future Shape of Chemistry Education,“ in *Chemistry Education Research and Practice*, Bd. 3, 2004, pp. 229-245.
- [2] B. Victor, „Explorable Explanations,“ 2011. [Online]. Available: <http://worrydream.com/ExplorableExplanations/>. [Zugriff am 16 Juli 2023].
- [3] A. Shemshack und J. M. Spector, „A systematic literature review of personalized learning terms,“ *Smart Learn*, Bd. 7, Nr. 33, 2020.
- [4] T. Anderson und J. Shattuck, „Design-Based Research: Decade of Progress in Education Research,“ *Educational Researcher*, Bd. 41, Nr. 1, pp. 16-25, Januar 2012.
- [5] I. Bellou, N. M. Papachristos und T. A. Mikropoulos, *Digital Learning Technologies in Chemistry Education: A Review*, 2018.
- [6] D. I. J. S. P. I. D. Sampson, *Digital Technologies: Sustainable Innovations for Improving Teaching and Learning*, Springer International Publishing AG, 2017.
- [7] Ming-Hung Lin, Huang-Cheng Chen und Kuang-Sheng Liu, „A Study of the Effects of Digital Learning on Learning Motivation and Learning Outcome,“ *Eurasia journal of mathematics, science and technology education*, 15 Juni 2017.
- [8] R. Mayer, *Multimedia Learning*, 3 Hrsg., Cambridge: Cambridge University Press, 2020.
- [9] Ernst Klett Verlag, *Elemente Chemie 7-10 Ausgabe Rheinland-Pfalz*, Klett, 2021.
- [10] Ernst Klett Verlag, *Elemente Chemie Oberstufe*, Klett, 2019.
- [11] D. Weininger, „SMILES, a chemical language and information systems,“ *Journal of Chemical Information and Computer Science*, Januar 1988.
- [12] Revvity Signals, „ChemDraw | Revvity Signals (Formerly Known as PerkinElmer Informatics,“ [Online]. Available: <https://revvitysignals.com/products/research/chemdraw>. [Zugriff am 26 Juli 2023].

-
- [13] Chemaxon Ltd, „Marvin“, [Online]. Available: <https://chemaxon.com/marvin>. [Zugriff am 07.12.2023].
- [14] National Center for Biotechnology Information, „Pubchem Sketcher v.2.4.“, [Online]. Available: pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/edit3/index.html. [Zugriff am 26. Juli 2023].
- [15] ACD/Labs, „Free Chemical Drawing Software for Students: ChemsSketch“, [Online]. Available: www.acdlabs.com/resources/free-chemistry-software-apps/chemsSketch-freeware/#chemsSketch_modal. [Zugriff am 19. Juli 2023].
- [16] H. Bergwerf, „Molview“, [Online]. Available: <https://molview.org>. [Zugriff am 26. Juli 2023].
- [17] iChemLabs, „Chemical Drawing Software“, [Online]. Available: <https://www.chemdoodle.com>. [Zugriff am 26. Juli 2023].
- [18] P. D. A. Evans, „History of the Harvard ChemDraw Project“, *Angewandte Chemie*, Bd. 53, Nr. 42, 2014.
- [19] N. Jung, P. Tremouilhac, C. Kramer und J. Potthoff, „Erfassung und Speicherung von Forschungsdaten im Fachbereich Chemie: Bereitstellung moderner Forschungsinfrastrukturen durch ein elektronisches Laborjournal mit Repositorium-Anbindung“, *E-Science Tage 2017*, pp. 127-134, 2017.
- [20] S. Bräse, N. Jung und P. Tremouilhac, „Chemotion“, [Online]. Available: <https://chemotion.net>. [Zugriff am 07.12.2023].
- [21] epam, „GitHub - epam/ketcher“, [Online]. Available: <https://github.com/epam/ketcher>. [Zugriff am 08. Dezember 2023].
- [22] Kekule.js Lab, „Kekule.js - A JavaScript Library for Chemoinformatics“, [Online]. Available: <http://partridgejiang.github.io/Kekule.js/>. [Zugriff am 23. Juli 2023].
- [23] Cheminfo, „Cheminfo/Openchemlib-JS: JavaScript Port of Openchemlib“, [Online]. Available: GitHub, github.com/cheminfo/openchemlib-js. [Zugriff am 26. Juli 2023].
- [24] Red Blob Games, „Hexagonal Grids“, [Online]. Available: <https://www.redblobgames.com/grids/hexagons/>. [Zugriff am 22.09.2023].
- [25] J. D. Herron und S. C. Nurrenbern, *Chemical Education Research: Improving Chemistry Learning*, 1999.