

Strukturformeln aus dem SMILES-Format in Libreoffice (oder OpenOffice) anzeigen

1. Voraussetzungen

- Es muss ein aktuelles LibreOffice oder OpenOffice installiert sein.
- Dort wird dann einmalig die Erweiterung Chemistry wie folgt installiert:
 - Herunterladen der Datei chemistry.oxt von der Seite extensions.libreoffice.org/extension-center/chemistry
 - Im Office-Programm dann unter „Extras“ > „Extension Manager“ > „Hinzufügen“ und die Lizenzvereinbarung bestätigen
 - Nach erfolgreicher Installation der Erweiterung das Office-Programm schließen und neu starten
 - Nach erfolgreicher Installation erscheint dann oben in der Werkzeugleiste das Symbol



2. Benutzung

- Man holt sich aus einer Struktursammlung z.B. ausgehend von der Seite chemie-lernprogramme.de/daten/programme/js/chemische_strukturen/index_de.html unter „Aromate“ > „Benzoessäure“ ganz unten im Abschnitt „SMILES“ die Textzeile c1ccc(C(=O)O)cc1 und kopiert diese in ein Office-Dokument
- Die Formel im SMILES-Format wird markiert c1ccc(C(=O)O)cc1 und nach Anklicken des



-Symbols erscheint das folgende Fenster:

Chemistry

Formula:

Format:

Width: Height:

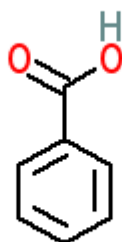
Line width: Symbol font size

Show all symbols? H-symbol C-symbol

Show stereo? yes

The selected text will be replaced!

- Je nach gewählten Einstellungen, wird dann z.B. die folgende Abbildung erzeugt:

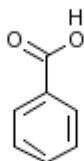


3. Online Alternativen

Falls man mit dem Darstellungs-Ergebnis des oben beschriebenen Office-Plugins nicht weiterkommt, so kann man alternativ die gewünschte Formelabbildung auch die SMILES-Textzeile mit Hilfe des folgenden Online-Konvertierungsprogramms erzeugen:

cactus.nci.nih.gov/gifcreator/



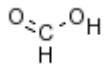

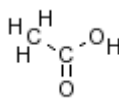
Mit den dortigen Standardeinstellungen wird dann z.B. die folgende Abbildung erzeugt. Diese kann heruntergeladen und dann in jedes Office-Dokument eingefügt werden.



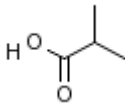


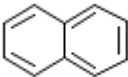
4. Moleküle selbst im SMILES-Format beschreiben

Das SMILES (Simplified Molecular Input LineEntry System) Format beschreibt die 2D-Struktur eines Molekül jeweils in einer Zeile gemäß den folgenden sechs einfachen Regeln:

1. Atome werden durch ihre Elementsymbole dargestellt.
2. Wasserstoffatome sättigen automatisch alle freien Bindungsstellen ab und werden einfach weggelassen.
3. Benachbarte Atome stehen direkt nebeneinander. Falls z.B. Ionen getrennt voneinander vorliegen, so werden sie in eckige Klammern gesetzt und durch einen Punkt „.“ getrennt. Mehrfach-Ladungen werden entweder als z.B. „++“ oder „2+“ geschrieben.
4. Doppel- und Dreifachbindungen werden mit einem Istgleichzeichen „=“ bzw. einen Komma „,“ dargestellt.
5. Seitenäste werden durch Klammern begrenzt.
6. Ringe werden durch Zahlen nach den Ring schließenden Atomen beschrieben.
Alle an einem aromatischen System beteiligten Atome werden in Kleinbuchstaben geschrieben.

Beispiel	SMILES	Molekül (erzeugt mit dem Online-Programm aus 3.)
Methan	C	
Ethan	C=C	
Methansäure	O=C O	
Natriumhydroxid	[Na+] . [OH-]	
Ethansäure	CC(=O)O	

Strukturformeln aus dem SMILES-Format in Libreoffice (oder OpenOffice) anzeigen

2-Methylbutansäure	<chem>CC(C)C(=O)O</chem>	
Cyclohexan	<chem>C1CCCCC1</chem>	
Furan	<chem>o1cccc1</chem>	
Naphthalin	<chem>c1cc2ccccc1cc2</chem> oder <chem>c12c(cccc1)cccc2</chem>	

Bei komplexeren Molekülen sind häufig mehrere Lösungen richtig!

Eine ausführliche Anleitung findet sich unter www.opensmiles.org/spec/open-smiles.html

Falls man eine SMILES-Datei lokal abspeichern will, wird die Dateierweiterung `.smi` empfohlen.

5. Moleküle aus Vorlagen oder komplett neu erstellen

Auf der Seite

chemie-lernprogramme.de/daten/programme/js/strukturformeleditor/index.html

findet man ein eingebettetes JchemPaint-Applet. Dort kann man dann einfach das Molekül erstellen und anschließend entweder direkt als Bitmap-Grafikdatei (z.B. GIF oder PNG) oder als MOL-Datei oder in der SMILES-Notation abspeichern.

6. Literaturhinweis

Viele weitere Informationen zu Dateiformaten zur Molekülbeschreibung sowie nützlichen Programmwerkzeugen und den theoretischen Hintergründen bietet:

Cheminformatics: A Textbook, J. Gasteiger, T. Engel, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA; Auflage: 1. Auflage (26. September 2003)