

Anleitung zum Fragentyp: Musterabgleich mit *JAVA MOLECULAR EDITOR*

Inhalt

Hinweise	2
Einführung	2
Java (Script) Molecular Editor.....	3
SMILES-Nomenklatur.....	4
Anlegen einer neuen Aufgabe.....	5
Definieren der Antworten	9
Einschränkungen.....	12
Beispiele.....	13
Links	18

Diese Anleitung bezieht sich auf die Version 2.1 des Plug-Ins. Getestet mit der ISIS/moodle-Version 3.8 vom 23.05.2020.

Dem ISIS-Team oder mir ist es nicht möglich, Änderungen an der Funktionsweise des Plug-Ins vorzunehmen!

Bei Fehlern, Ergänzungen oder hilfreichen Hinweisen, würde ich mich über eine Nachricht freuen.

Kontakt:

Tobias Lüdtker (luedtke@tu-berlin.de)

Institut für Chemie

Hinweise

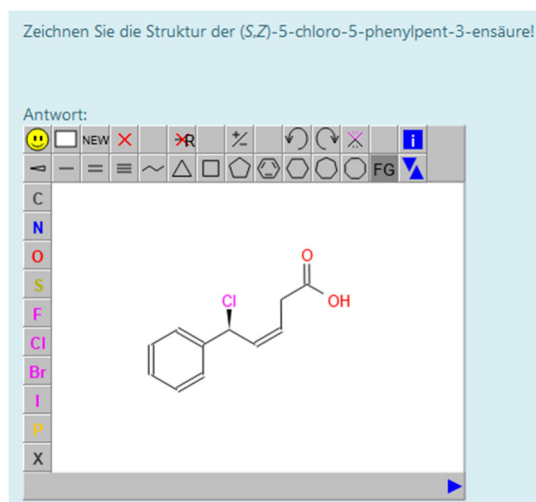
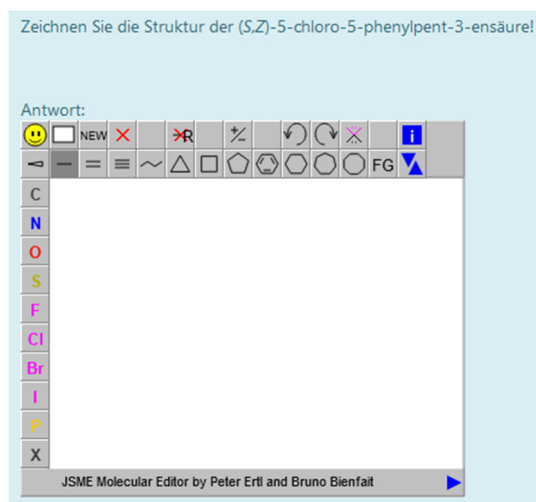
Dieser Fragentyp gehört nicht zu den Standardmodulen der moodle/ISIS-Installation. Die Installation einer neuen moodle-Version kann unter Umständen dazu führen, dass dieser Fragentyp nicht mehr ordnungsgemäß funktioniert, bis vom Anbieter ein Update bereitgestellt wird. **Speichern Sie Ihre erstellten Fragen in regelmäßigen Abständen auf Ihrer lokalen Festplatte ab!**

Zudem wird mit dem JAVA MOLECULAR EDITOR (JME) ein Programm eines Drittanbieters genutzt. Wenn dieses Programm verändert oder der Support eingestellt wird, kann dies auch Auswirkungen auf diese moodle-Erweiterung haben.

! **ACHTUNG!** Die eingegebenen Antworten werden nur an das System übertragen, wenn die Testteilnehmer zwischenspeichern oder aktiv den Test abgeben. Antworten können verloren gehen, wenn der Test durch Zeitablauf beendet wird. Fordern Sie die Teilnehmer im Fragetext zum Zwischenspeichern auf und/oder platzieren Sie die Fragen jeweils auf einer eigenen Seite!

Einführung

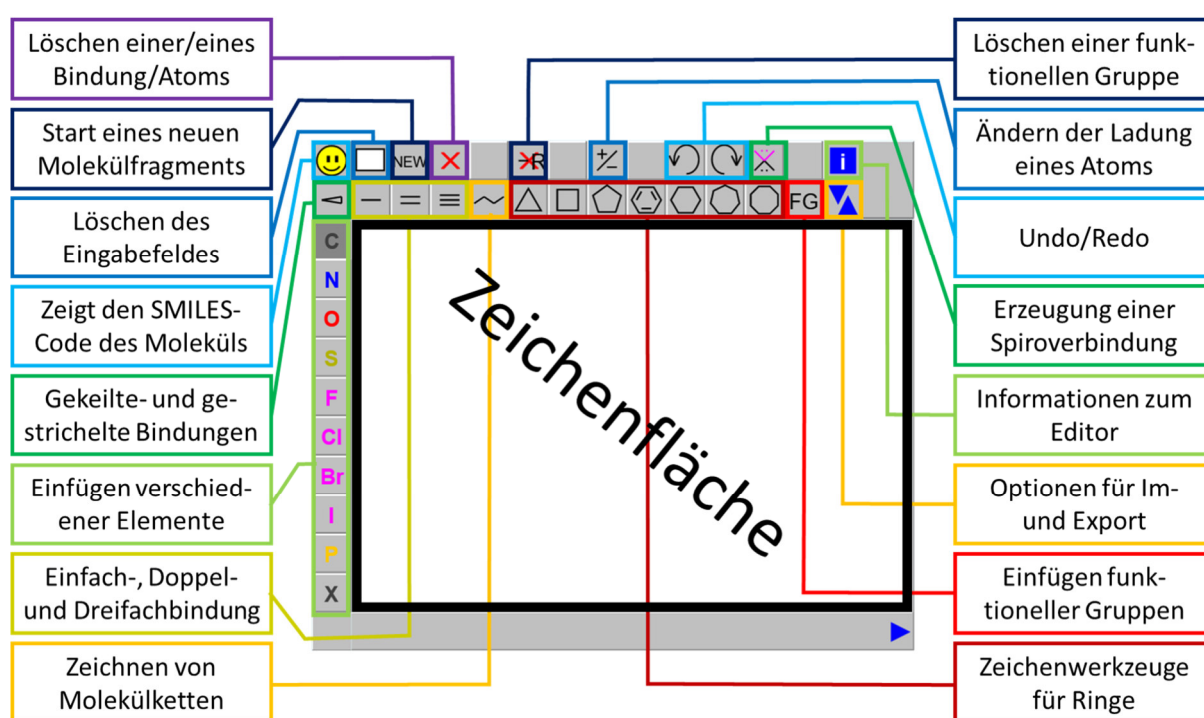
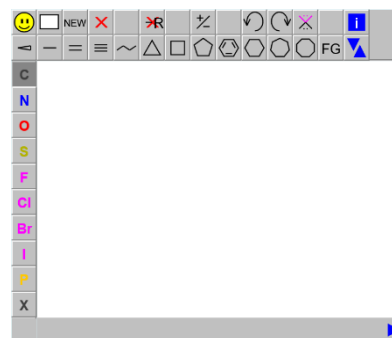
Mit diesem neuen Aufgabentyp für ISIS werden der Algorithmus des Aufgabentyps „Musterabgleich“ mit dem JAVA MOLECULAR EDITOR kombiniert. Somit können, bis zu einer gewissen Komplexität, chemische Strukturen in der Keilstrichschreibweise von den Studierenden oder Testteilnehmenden abgefragt werden. Der Editor wandelt die eingegebene Struktur in den entsprechenden SMILES-Code um, welcher dann mit der hinterlegten Musterlösung abgeglichen wird.



Der Fragentyp steht nicht für die Aktivität „Lektion“ zur Verfügung!

Java (Script) Molecular Editor

Der für diesen Aufgabentyp verwendete Moleküleditor basiert auf JavaScript und lässt sich ohne zusätzliche Installation in nahezu jedem Webbrowser nutzen. Er bietet ausreichende Optionen für viele Fragestellungen und lässt sich intuitiv bedienen, bietet aber nicht den Komfort professioneller Softwarelösungen, wie bspw. CHEMDRAW. Mit dem Mausrad kann die Ansicht der Zeichenfläche vergrößert oder verkleinert werden.



Nützliche Tastenkürzel:

D	Löschen	C	Kohlenstoff	Esc	Einfachbindung
U	Undo/Rückgängig (auch mit STRG + Z)	N	Stickstoff	0	Furylgruppe
Entf	Löschen	O	Sauerstoff	1	Phenylring
A	Carbonsäure	S	Schwefel	2	Doppelbindung
E	Ethingruppe	F	Fluor	3	Dreiring
Q	Nitrilgruppe	L	Chlor	4	Vierring
T	<i>Tert</i> -Butylgruppe	B	Brom	5	Fünfring
Z	Sulfonsäuregruppe	I	Iod	6	Sechsring
Y	Nitrogruppe	H	Wasserstoff	7	Siebenring
FT	CF ₃ -Gruppe	R	Rest	8	Achtring
		X	Element (definierbar)	9	Neunring

SMILES-Nomenklatur

Die [Wikipedia-Definiton](#):

Simplified Molecular Input Line Entry Specification (SMILES) ist ein chemischer Strukturcode, bei dem die Struktur beliebiger Moleküle stark vereinfacht als (ASCII-)Zeichenkette wiedergegeben werden. Mehrere Molekül-Editoren können SMILES-Strings importieren und so zweidimensionale und dreidimensionale Modelle erzeugen.

Sie müssen diese Nomenklatur **nicht** können oder lernen, um Aufgaben dieses Typs erstellen zu können. Es wird sogar ausdrücklich empfohlen, selbst bei exzellenten Kenntnissen dieser Nomenklatur, auf die automatische Erzeugung des JSME zurückzugreifen. Die meisten Moleküle lassen sich auf unterschiedliche Weise mit SMILES beschreiben. Viele Programme zum Zeichnen chemischer Strukturen erzeugen den Code nach einem anderen Verfahren. Untereinander haben die Programme zumeist keine Probleme den jeweils anderen Code zu interpretieren und die richtige Struktur zu erzeugen. Abgeprüft wird bei diesem Aufgabentyp aber lediglich der vom JSME erzeugte Code, der Abgleich mit einem anderen Code, passend zur selben Struktur, wird als Falsch gewertet!

Trotzdem kann ein gewisses Basiswissen zu SMILES hilfreich sein, um Fehler finden und lösen zu können. Eine detaillierte Übersicht in englischer Sprache über die wesentlichen Regeln zur SMILES-Nomenklatur finden Sie auf folgender Seite:

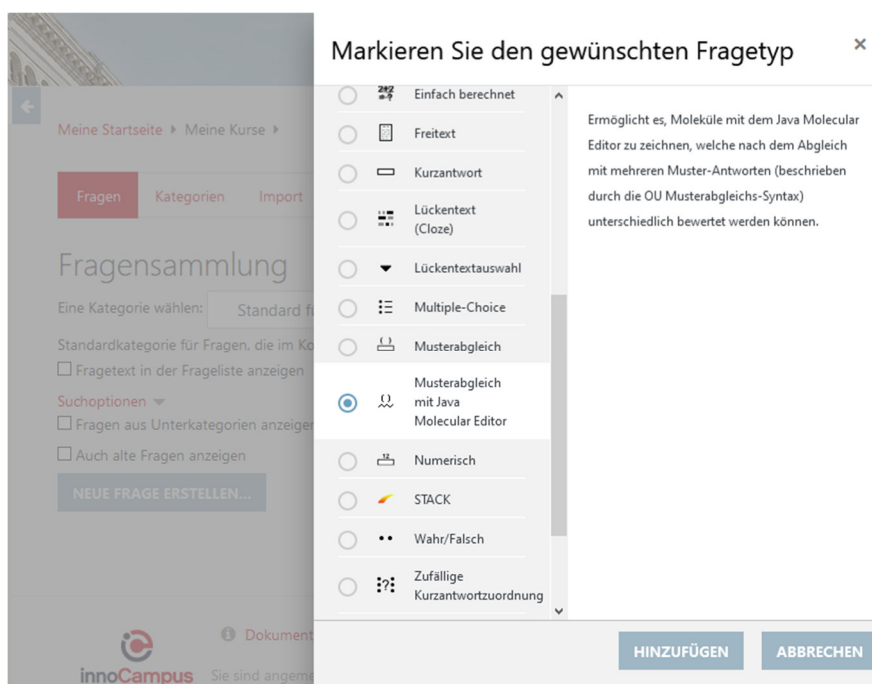
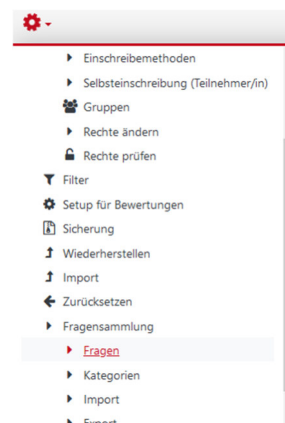
<https://www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/theory.smiles.html>

Eine gute Übersicht zur Schreibweise chemischer Sachverhalte bei der Nutzung von moodle (ISIS), unter Verwendung von L_AT_EX bzw. des neu eingebundenen Editors bietet folgende Seite:

https://docs.moodle.org/38/en/Chemistry_notation_using_mhchem

Anlegen einer neuen Aufgabe

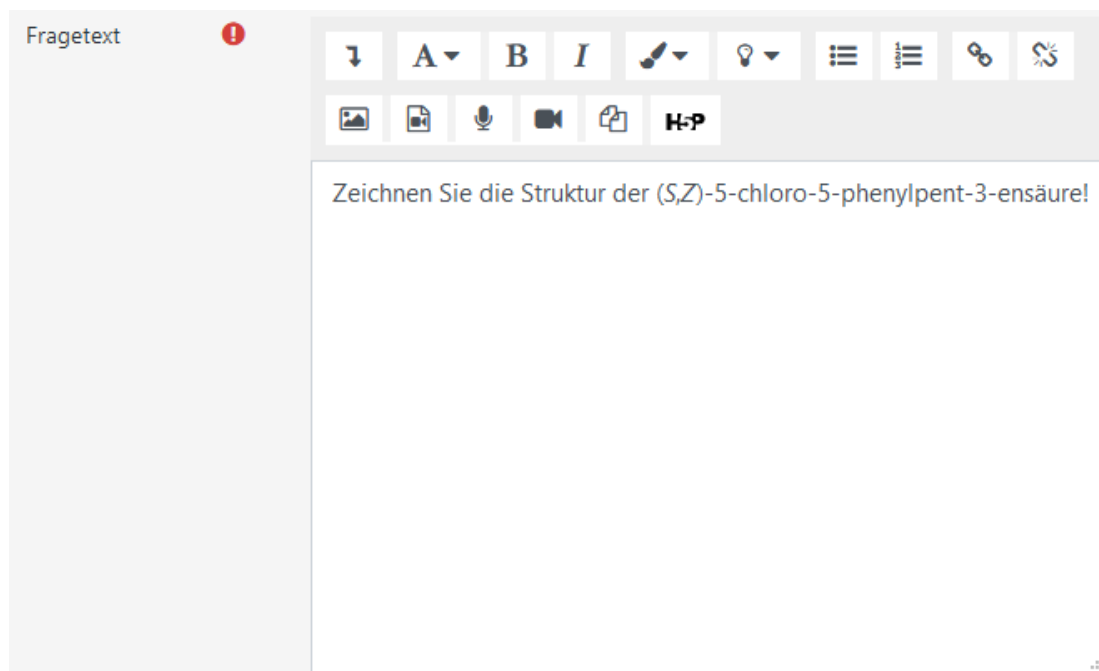
1. Wählen Sie in Ihrem Kurs unter dem Aktionsmenü (Zahnrad oben links) die Option „Fragen“.
2. In der Fragensammlung klicken Sie auf „**Neue Frage erstellen**“ und in dem sich öffnenden Fenster wählen Sie die Option „**Musterabgleich mit JAVA MOLECULAR EDITOR**“ aus.



3. Es öffnet sich direkt das Bearbeitungsfenster der neuen Frage. Unter „**Fragetitel**“ geben Sie bitte eine **eindeutig zuweisbare Bezeichnung** für die Frage ein.



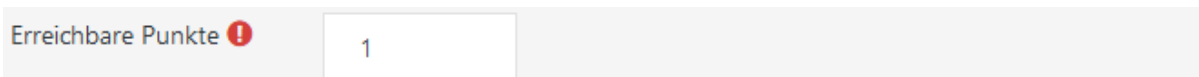
4. Im Bereich „**Fragetext**“ formulieren Sie die eigentliche Fragestellung dieser Aufgabe. Es können auch Bilder eingebunden werden, falls bspw. Reaktionsverläufe gezeigt werden sollen.



Fragetext

Zeichnen Sie die Struktur der (S,Z)-5-chloro-5-phenylpent-3-ensäure!

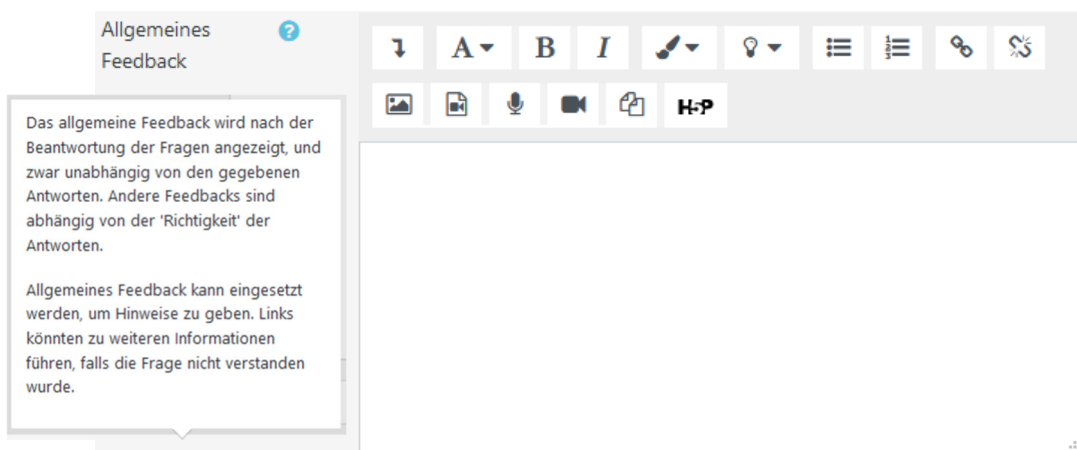
5. Im nächsten Feld können die „**Erreichbaren Punkte**“ festgelegt werden, die bei einem Test für diese Aufgabe maximal vergeben werden.



Erreichbare Punkte

1

6. Das „**Allgemeine Feedback**“ wird unabhängig davon angezeigt, ob die Frage richtig oder falsch beantwortet wurde. Hier können zusätzliche Informationen zum Verständnis der Aufgabenstellungen, Verweise zu anderen Kursinhalten, Hilfestellungen etc. eingefügt werden.



Allgemeines Feedback

Das allgemeine Feedback wird nach der Beantwortung der Fragen angezeigt, und zwar unabhängig von den gegebenen Antworten. Andere Feedbacks sind abhängig von der 'Richtigkeit' der Antworten.

Allgemeines Feedback kann eingesetzt werden, um Hinweise zu geben. Links könnten zu weiteren Informationen führen, falls die Frage nicht verstanden wurde.

7. Die **ID-Nummer** kann bei einer großen Fragensammlung zur weiteren Sortierung genutzt werden.

ID-Nummer 

Wenn verwendet, muss die ID-Nummer in jeder Fragenkategorie eindeutig sein. Dies ist ein alternativer Weg, um Fragen zu identifizieren. Manchmal ist dies sinnvoll, aber normalerweise kann das Feld leer bleiben.

8. Unter „**Einstellungen für den JAVA MOLECULAR EDITOR**“ kann das Strukturzeichenprogramm minimal angepasst werden. Es wird jedoch empfohlen, die Standardeinstellung **beizubehalten**.

Einstellungen für den Java Molecular Editor

- Automatische Erstellung von SMILES mit E,Z Stereochemie ("autoez")
- Stereochemie nicht beachten beim Erzeugen von SMILES ("nostereo")

- **Automatische Erstellung von SMILES mit E,Z Stereochemie ("autoez"):**

ACHTUNG! Der aktuelle Editor bestimmt in jedem Fall die *E,Z*-Stereochemie der gezeichneten Verbindung!

- **Stereochemie nicht beachten beim Erzeugen von SMILES ("nostereo"):**

In diesem Fall ist es nicht möglich, im Editor Stereoinformationen einzelnen Bindungen zuzuweisen. Diese Option ist deaktiviert und nicht anwählbar.

ACHTUNG! Enthält die Musterantwort Stereoinformationen, kann die Aufgabe nicht richtig beantwortet werden!

9. Der Abschnitt „**Synonyme**“ stammt aus dem Aufgabentyp „Musterabgleich“. Bei mehreren richtigen Antwortmöglichkeiten sollten diese bestenfalls unter dem nächsten Abschnitt definiert werden.

Synonyme

Synonyme für Wörter in der Antwort festlegen

Synonyme 1	Wort <input type="text"/>	Synonyme <input type="text"/>
Synonyme 2	Wort <input type="text"/>	Synonyme <input type="text"/>
Synonyme 3	Wort <input type="text"/>	Synonyme <input type="text"/>

LEERFELD FÜR {SA} WEITERE SYNONYME

10. Unter Antworten werden die Richtigen Lösungen definiert. Das Vorgehen wird im nächsten Kapitel ([Definieren der Antworten](#)) genauer erläutert.

11. Werden den Testteilnehmern mehrere Versuche zum Lösen der Aufgabe eingeräumt, so können unter „**Mehrfachversuche**“ die Punktabzüge festgelegt und Tipps zur Lösung der Aufgabe hinterlegt werden.

12. Unter „**Erstellt/Verändert**“ werden lediglich die Nutzer angezeigt, die diese Aufgabe bearbeitet haben.

13. Die Aufgabe wird mit „**Sichern und weiter Bearbeiten**“ oder „**Änderungen Speichern**“ gesichert. Bei der Wahl der zweiten Option wird diese Seite geschlossen und wieder die Fragensammlung aufgerufen.

Definieren der Antworten

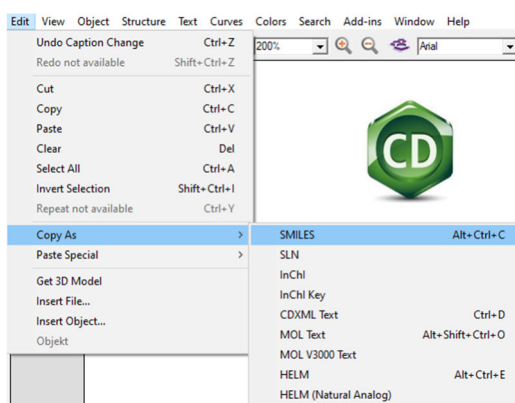
Der schwierigste Teil der Aufgabenerstellung ist die eindeutige Definition der Musterlösung unter dem Menüpunkt „**Antworten**“. Wenn Sie einige grundlegende Sachen beachten, lassen sich aber in relativ kurzer Zeit viele Aufgaben erstellen:


- Um den Musterabgleichalgorithmus anzusprechen, muss zunächst der Ausdruck „**match** (**)**“ eingetragen werden.



- Zwischen diesen beiden runden Klammern wird die Lösung nach der SMILES-Nomenklatur definiert.
- Nutzen Sie auf jeden Fall den JSME-Editor zur Erstellung des SMILES-Codes. Jedes andere Molekülzeichenprogramm könnte einen abweichenden Code für die gesuchte Verbindung erzeugen. Untereinander verstehen die Programme zwar den jeweils anderen Code, bei diesem Aufgabentyp wird aber lediglich der erzeugte SMILES-Code des JSME mit einer Vorlage abgeglichen. Gibt es dort Abweichungen, obwohl die Musterlösung dasselbe Molekül beschreibt, wird die Aufgabe als nicht richtig bewertet.

TIPP: Lassen Sie ihre bereits vorhandenen Moleküle übersetzen. Beispielsweise können Sie bei CHEMDRAW ihr markiertes Molekül mit der Tastenkombination STRG + ALT + C als SMILE-Code in die Zwischenablage kopieren.



Auf der Seite https://peter-ertl.com/jsme/JSME_2017-02-26/JSME.html steht Ihnen der Java-Editor ebenfalls zur Verfügung. Durch einen Klick auf das Symbol mit den zwei  blauen Dreiecken, kann die Option zum Import eines SMILES-Code aufgerufen werden („**Paste MOL or SDF or SMILES**“). In dem sich öffnenden Fenster wird mit STRG + V der Code hineinkopiert und mit „**Accept**“ die Struktur erstellt.

Antworten

Richtige Antworten Benutzen Sie die Musterabgleich-Syntax, um die richtige Antwort zu beschreiben. Sie müssen mindestens eine Antwort vorgeben. Leergelassene Antworten werden nicht verwendet. Die erste passende Antwort wird genommen und benutzt, um das Ergebnis und das Feedback zu bestimmen.

Antwort 1 `match (O=C\ (O\ C/C=C\ \ [C@H\] \ (C1\) o1cccc1)`

Bewertung 100%

Feedback
 Feedback über Anzahl der Atome

LEERFELD FÜR (\$A) WEITERE ANTWORTEN

Jede andere Antwort

Bewertung 0%

Feedback
 Feedback über Anzahl der Atome

Falsch!

Unter „Antwort 1“ muss die (bzw. eine) richtige Musterlösung hinterlegt werden. Die Bewertung muss auch auf 100% gesetzt werden, ansonsten kann die Aufgabe nicht gespeichert werden. Bei den weiteren Antwortmöglichkeiten können Ergebnisse definiert werden, wenn beispielweise Stereoinformationen bei der Beantwortung der Frage ignoriert werden können. Da der Editor bei Doppelbindungen immer eine *E,Z*-Isomerie erkennt, müssen hier ggf. beide Varianten aufgelistet werden und die Bewertung auf 100% gestellt werden.

! **ACHTUNG!** Die Optionen „Feedback über Anzahl der Atome“ scheint nicht zuverlässig zu funktionieren und sollte nicht genutzt werden.

TIPP: Tragen Sie wenigstens zum Testen der Aufgabe ein Feedback für die richtige und falsche Antwort ein, da bei der Aufgabenvorschau keine Musterlösung angezeigt wird.

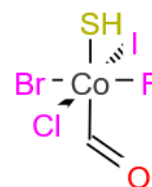
Einschränkungen

Die folgenden Einschränkungen beziehen sich auf die automatische Korrektur der gegebenen Antworten. Die Aufgaben können aber immer noch manuell ausgewertet werden.

- Antworten können verloren gehen, wenn der Test automatisch durch Zeitablauf beendet wird. Ergänzen Sie den Fragetext um eine Aufforderung zum Zwischenspeichern und/oder platzieren Sie diese Fragen jeweils auf einer eigenen Aufgabenseite! Auch bei der Schulung der Studierenden sollte bereits auf diese Problematik hingewiesen werden.
- Obwohl der JSME die Eingabe von mehreren Molekülen durch die *NEW*-Schaltfläche unterstützt, kann dies **nicht** als Musterlösung hinterlegt werden. Der SMILES-Code nutzt als Trennzeichen für die verschiedenen Moleküle den Punkt (.), der vom Algorithmus nicht erkannt wird.
- Es kann **kein** Reaktionsschema abgefragt werden. Die verwendete Version des Editors unterstützt nicht das Zeichnen von Reaktionen. Es ist lediglich möglich, eine Verbindung pro Aufgabe zu testen. Es kann jedoch durch Kombination mehrerer Aufgaben auf einer Testseite ein vergleichbares Szenario entwickelt werden.
- Bei der Abfrage von Koordinationspolyedern wird die Anordnung der Liganden in der Äquatorialebene und auf den axialen Positionen **nicht** richtig erkannt, wodurch eine automatische Korrektur nicht möglich ist.

Beispielsweise sollte der folgende SMILES-Code den rechts gezeigten Oktaeder eigentlich eindeutig definieren, so dass S und COe gegenüberliegen:

```
S [Co@@] (F) (Cl) (Br) (I) C=O
```



Jedoch interpretiert der Editor streng nach den Prioritäten der Liganden und setzt die Aldehydgruppe (niedrigste) und das Iodid (höchste Priorität) auf die „axialen“ Positionen.

```
O=C [Co] (S) (F) (Cl) (Br) I
```

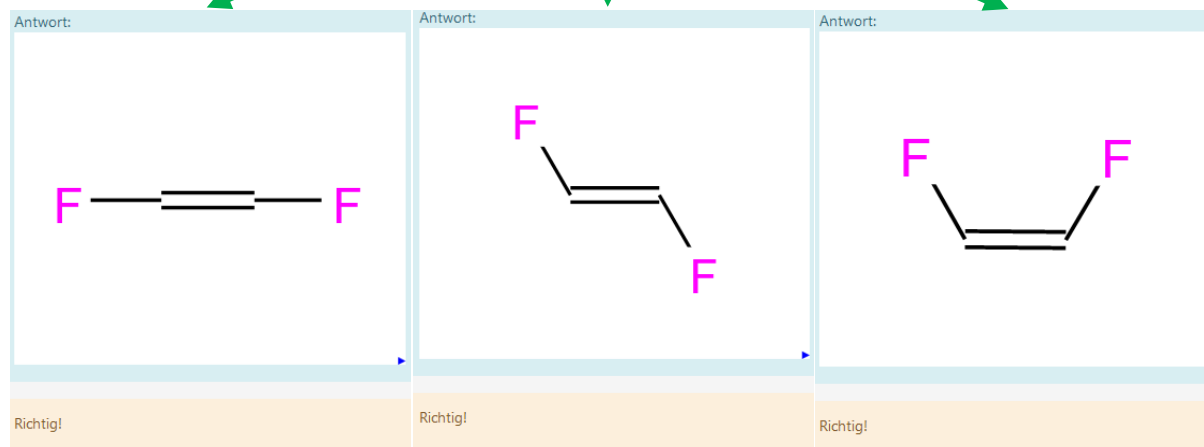
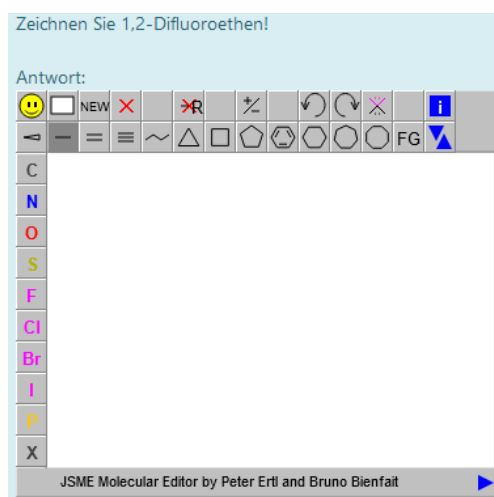
Auch geht die Anordnung der „äquatorial“ angeordneten Liganden (F, Cl, Br, I) im Uhrzeigersinn durch das Weglassen von „@@“ verloren.

Ggf. lässt sich durch eine geschickte Aufgabenstellung das Problem lösen.

Beispiele

1. 1,2-Difluoroethen

In diesem Beispiel wird keine gesonderte Stereoinformation abgefragt. Je nachdem, welchen Anspruch Sie an die Studierenden stellen, müssen bei der Erstellung dieser Aufgabe bis zu drei richtige Antworten definiert werden, wenn alle Möglichkeiten berücksichtigt werden sollen.



Code:

```
match (FC=CF)
```

```
match (F/C=C/F)
```


```
match (F/C=C\\F)
```

2. (*S,Z*)-5-chloro-5-phenylpent-3-ensäure

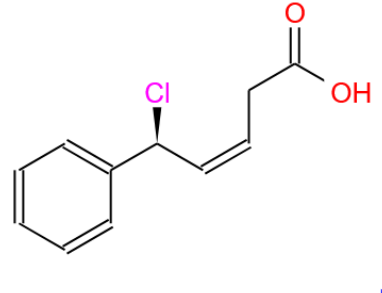
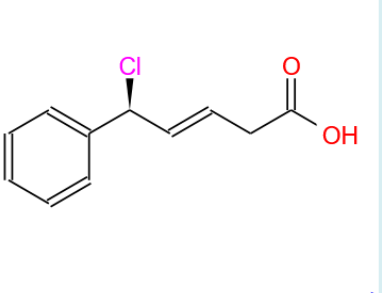
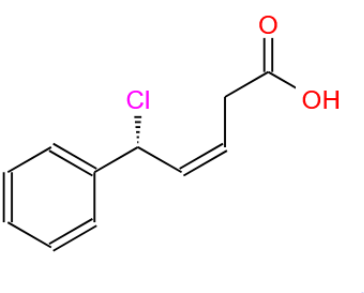
Ein komplexeres Beispiel mit zwei Stereoinformationen.

Zeichnen Sie die Struktur der (*S,Z*)-5-chloro-5-phenylpent-3-ensäure!

Antwort:



JSME Molecular Editor by Peter Ertl and Bruno Bienfait

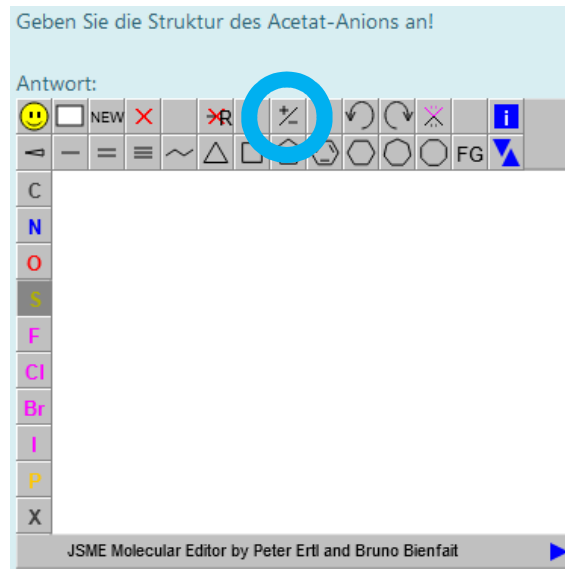
Antwort:	Antwort:	Antwort:
		
Das ist richtig!	Falsch!	Falsch!



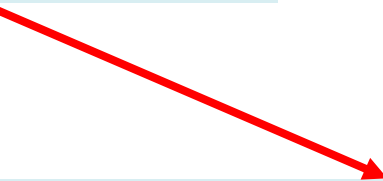
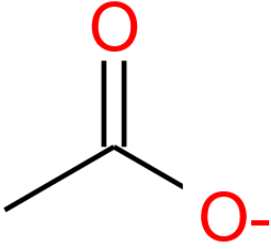
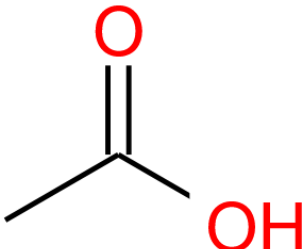
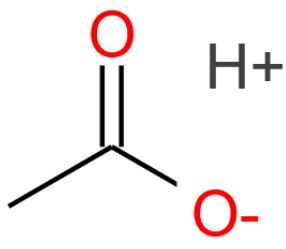
Code:

```
match (O=C\ (O\ )C/C=C\\ \ [C@H\ ] \ (Cl\ ) c1cccc1)
```

3. Acetat-Anion

Hier muss die funktionelle Gruppe angepasst werden, dass die deprotonierte Form vorliegt.



		
Antwort: 	Antwort: 	Antwort: 
Das ist richtig!	Falsch!	Falsch!

Eine derartige Aufgabenstellung ist nicht möglich!

Code:

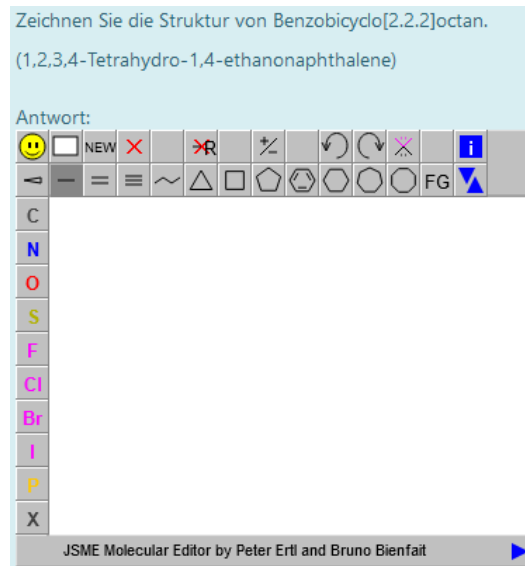
```
match (CC(=O)\)[O-\])
```

4. Bicyclen

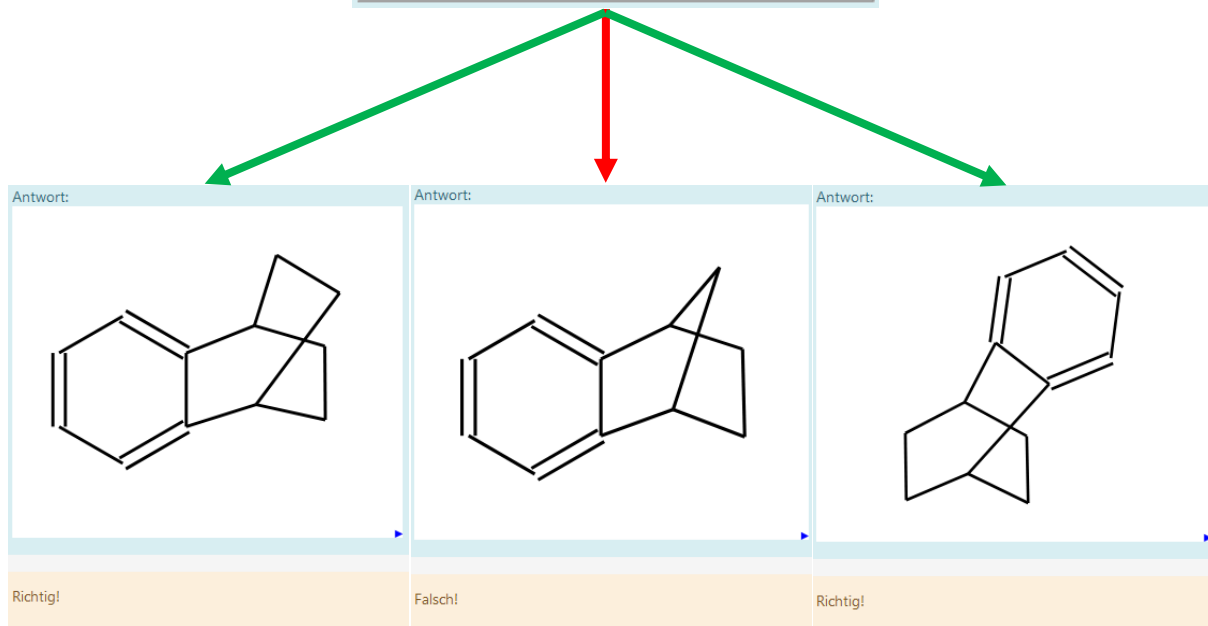
Das Zeichnen von Bicyclen erfordert etwas Übung.

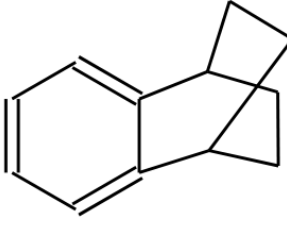
Zeichnen Sie die Struktur von Benzobicyclo[2.2.2]octan.
(1,2,3,4-Tetrahydro-1,4-ethanonaphthalene)

Antwort:

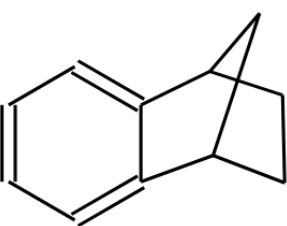


JSME Molecular Editor by Peter Ertl and Bruno Bienfait

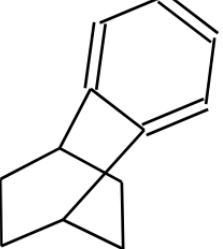


Antwort: 

Richtig!

Antwort: 

Falsch!

Antwort: 

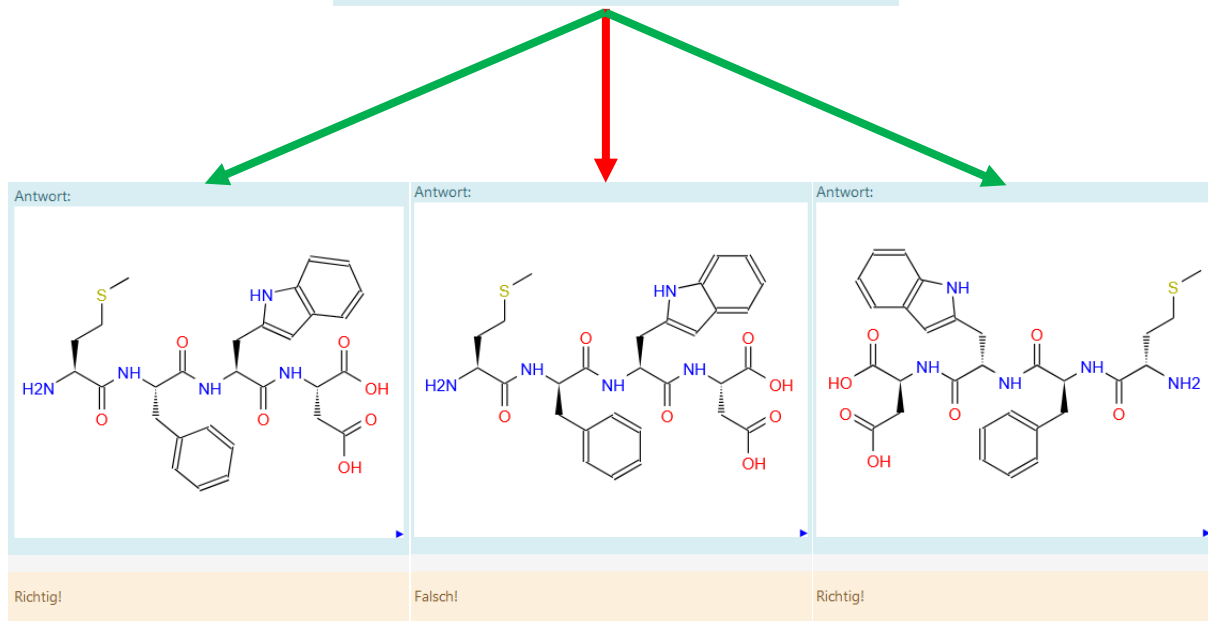
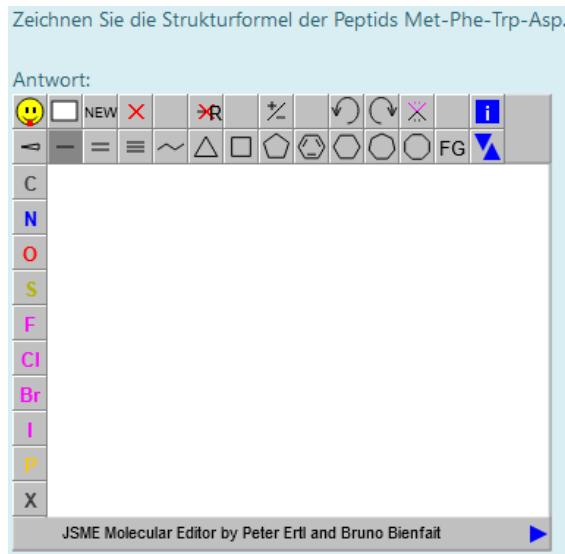
Richtig!

Code:

```
match (c1ccc2c\ (c1\ ) C3CCC2CC3)
```

5. Peptid

Auch Aminosäureketten/Peptide lassen sich mit dem Fragentyp testen.



Code:

match

```
(CSCC\[C@H\]\(N\)C\ (=O\)N\[C@@H\]\(Cc1ccccc1\)C\ (=O\)N\[C@@H\]\(Cc3cc2ccccc2\[nH\]3\)C\ (=O\)N\[C@@H\]\(CC\ (=O\)O\)C\ (=O\)O)
```

Links

- Originaldokumentation:

<https://www.open.edu/openlearncreate/mod/oucontent/view.php?id=52747§ion=2.5.2>

- Quelle des Plug-Ins:

https://moodle.org/plugins/qtype_pmatchjme

- SMILES-Nomenklatur:

<https://www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/theory.smiles.html>

- Andere Ressourcen des Editors:

https://peter-ertl.com/jsme/JSME_2017-02-26/JSME.html

<https://cactus.nci.nih.gov/gifcreator/editor.html>

- Publikation zum Editor:

Bienfait, B., Ertl, P. JSME: a free molecule editor in JavaScript. *J Cheminform* **5**, 24 (2013).

<https://doi.org/10.1186/1758-2946-5-24>

- Chemische Notation bei ISIS/moodle

https://docs.moodle.org/38/en/Chemistry_notation_using_mhchem