# **G8** Abituraufgaben Chemie Fette und Tenside 2011/B2

- 1.2 Margarine ist eine Emulsion aus Pflanzenfetten und ca. 15 % Wasser. Um eine Entmischung der Phasen zu verhindern, können Tenside als Emulgatoren zugesetzt werden. Zeichnen Sie die Strukturformel eines Tensidmoleküis ihrer Wahl und erläutern Sie die beschriebene Emulgatorwirkung! [7 BE]
- 1.3 Zur Hersteilung von Margarine werden gehärtete Fette verwendet.

Tab: Fettsäuren, die in zur Margarineherstellung verwendeten Fetten vorkommen

Palmitinsäure	Hexadecansäure
Stearinsäure	Octadecansäure
Ölsäure	(Z)-Octadeca-9-ensäure
Linolsäure	(Z,Z)-Octadeca-9,12-diensäure
Linolensäure	(Z,Z,Z)-Octadeca-9,12,15-triensäure

Formulieren Sie mithilfe der oben angegebenen Fettsäuren eine Strukturformelgleichung für die Härtung eines Fettes und erklären Sie die Konsistenzänderung! [10 BE]

#### A1 Musterabitur 2011 - Chemie

Der zufällige Einschluss verschiedener Biomoleküle innerhalb einer Hülle aus einer Lipid-Doppelschicht war vermutlich ein weiterer Meilenstein bei der Entstehung vonlebenden Zellen aus organischen Molekülen. Abbildung 5 zeigt eine Modellvorstellung zur Entstehung von Lipid-Doppelschichten in "Ursuppen". Solche Lipid-Doppelschichten können bedingt mit Zellmembranen verglichen werden.

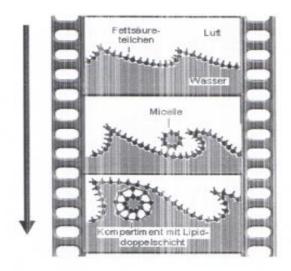


Abb. 5: Modellvorstellung zur Entstehung von Lipid-Doppelschichten

Erklären Sie den in Abbildung 5 dargestellten Prozess der Entstehung von Kompartimenten mit Lipiddoppelschicht auf der Basis der Eigenschaften von Fettsäuremolekülen! [6 BE]

Bakterien besitzen sehr ursprüngliche Zellen. Zusätzlich zu einer Zellmembran aus einer Lipid-Doppelschicht besitzen Bakterienzellen eine Zellwand. Teichonsäuren sind polymere Bestandteile mancher Zellwände. Die saure Hydrolyse einer Teichonsäure liefert unter anderem eine Aminosäure, Phosphorsäure (H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>), Glycerin (1,2,3-Propantriol), D-Glucosamin und Ethansäure

Abb. 6: Strukturformelausschnitt einer Teichonsäure

Geben Sie die Strukturformelgleichung für die vollständige Hydrolyse des in Abbildung 6 gezeigten Teichonsäureausschnitts an! Kennzeichnen Sie diejenigen Atome (Sauerstoff bzw. Stickstoff), an denen hierbei Bindungen geöffnet werden, und benennen Sie dabei die hydrolysierbaren Bindungen!

[6BE]

#### 2012 B1

- Butter und Margarine sind fettreiche Lebensmittel, die sich in ihrer Zusammensetzung deutlich unterscheiden.
- 1.1 Aus Butter können unter anderem folgende Fettsäuren gewonnen werden:

Tab. 1: Auswahl von Butter-Fettsäuren<sup>1</sup>

Abbildungen und Tabellen:

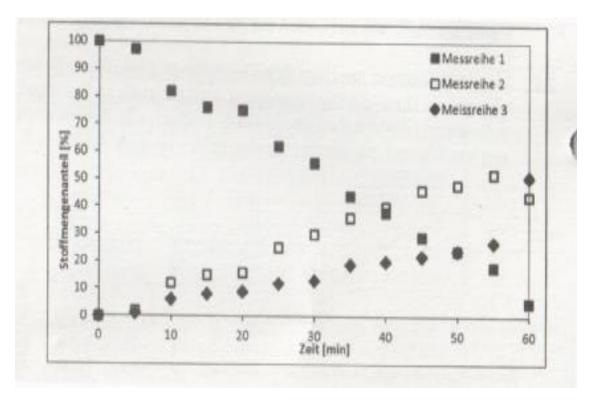
1 Dt. Forschungsanstalt f. Lebensmittelchemie: Food *Composition and nutrition tables*. Medpharm Scientific Publishers, Stuttgart, 1994; J. FALBE, M. REGITZ (Hrsg.): *Römpp Chemie Lexikon*. Georg Thieme Verlag, Stuttgart, 9. Aufl., 1990-1992

#### Stuttgart, 1999, S. 47

Trivialname	IUPAC-Name
Elaidinsäure	(E)-Octadec-9-ensäure
Linolensäure	(Z,Z,Z)-Octadeca-9,12,15-triensäure
Linolsäure	(Z,Z)-Octadeca-9,12-diensäure
Ölsäure	(Z)-Octadec-9-ensäure
Stearinsäure	Octadecansäure
Vaccensäure	(E)-Octadec-11 -ensäure

- Bei der Ermittlung der Schmelztemperaturen der in der Tabelle genannten ungesättigten Fettsäuren erhält man folgende Werte: -11 °C, -5 °C, +17 °C, +44 °C. Die Schmelztemperaturen zweier Fettsäuren sind gleich. Ordnen Sie den Fettsäuren die Schmelztemperaturen zu und erläutern Sie Ihre Zuordnung! [9 BE]
- 1.2 Zur Herstellung von Margarine werden Pflanzenöle chemisch weiter verarbeitet.
  - Formulieren Sie ausgehend von einem Triacylglycerinmolekül, das ausschließlich Linolensäurebausteine enthält, eine Strukturformelgleichung für die zugrunde liegende Reaktion und benennen Sie den beschriebenen Vorgang! [8 BE]
- Im Dünndarm gerät der aus dem Magen kommende saure Nahrungsbrei mit verschiedenen Verdauungssäften in Kontakt, die u. a. Enzyme zur Fettverdauung (Lipasen) enthalten.
- 2.1 Lipasen arbeiten optimal im schwach basischen pH-Bereich. Im Dünndarm wird dieser pH-Bereich erreicht, indem Hydrogencarbonat aus der Bauchspeicheldrüse (Pankreas) abgegeben wird. Bei normaler Funktion der Bauchspeicheldrüse bildet sich im Dünndarm ein Kohlensäure/Hydrogencarbonat-Puffer.
- 2.1.1 Erklären Sie unter Verwendung von Formelgleichungen, wie der Kohlensäure/ Hydrogencarbonat-Puffer mit der Magensäure (Salzsäure) reagiert![4 BE]
- 2.1.2 Bei Pankreasinsuffizienz gibt die Bauchspeicheldrüse nicht genügend Hydrogencarbonat ab, sodass der pH-Wert im Dünndarm teilweise bei Werten zwischen 4-5 liegt. Erläutern Sie mithilfe einer Modellvorstellung die Auswirkungen einer
  - Pankreasinsuffizienz im Hinblick auf die Fettverdauung durch Lipasen! [7 BE]
- 2.2 Im ersten Abschnitt des Dünndarms wird von der Gallenblase Gallensaft abgegeben. Durch die Darmbewegung emulgieren die im Gallensaft enthaltenen Lecithine die Fette im Darm. Dadurch wird die Fettverdauung beschleunigt. Ein Beispiel für ein Lecithin-Ion zeigt Abbildung 1.

Abb. 1: Beispiel für ein Lecithin-Ion
Erklären Sie die Wirkungsweise der Lecithine anhand der Molekülstruktur
sowie die beschleunigende Wirkung auf die Fettverdauung! [7BE]
In der Lebensmittelindustrie werden gezielt Fette mit bestimmten
Eigenschaften, z. B. mit einer verbesserten Streichfähigkeit, hergestellt.
Hierbei wird ein Monoacylglycerin (A) über ein Diacylglycerin (B) zum
Triacylglycerin (C) umgesetzt. Bei einem Versuchsansatz wurden die
Stoffmengenanteile der beteiligten Stoffe A, B und C über eine Stunde
gemessen und grafisch aufgetragen:



# Abb. 2: Stoffmengenanteil der Stoffe A, B und C im Gemisch während der Synthese eines Fettes<sup>2</sup>

2 verändert nach: U. SCHMID: *Lipase-katalysierte Synthese strukturierter Triglyceride.* Dissertation Universität Stuttgart, 1999, S. 47

Nach zwei Stunden wurde für die Messreihen 1 bis 3 je ein weiterer Wert ermittelt:

Tab. 2: Messwerte nach zwei Stunden Versuchsdauer

Messreihe	Stoffmengenanteil in %
1	2
2	6
3	92

Ordnen Sie die drei Messreihen den Stoffen A bis C zu und begründen Sie Ihre Aussage! [5]

#### **2013 B1Seide**

1.2 Für die Herstellung von Seide als Textilfaser muss die Seidenfaser vom Seidenleim befreit werden, da dieser die Faser rau und hart macht. Dieser Vorgang wird als Entbasten bezeichnet.

Zur Entbastung dient ein siedendes Seifenbad, das innerhalb von zwei bis drei Stunden den Seidenleim entfernt.

Traditionell verwendet man hierzu die so genannte Marseiller Seife, die auf der Basis von Olivenöl hergestellt wird. Die in den Molekülen des Olivenöls gebundenen Fettsäuren sind in der Tabelle angegeben.

Tab.: In den Molekülen des Olivenöls gebundene Fettsäure

Myristinsäure	Tetradecansäure
Palmitinsäure	Hexadecansäure
Palmitoleinsäure	(Z)-Hexadec-9-ensäure
Stearinsäure	Octadecansäure
Ölsäure	(Z)-Octadec-9-ensäure
Linolsäure	(Z,Z)-Octadeca-9,12-diensäure
Linolensäure	(Z,Z,Z)-Octadeca-9,12,15-triensäure

- 1.2.1 Zeichnen Sie die Strukturformel eines Fettmoleküls, in dem drei verschiedene Fettsäuren auftreten, von denen mindestens zwei ungesättigt sind, und formulieren Sie ausgehend von diesem Molekül eine Reaktionsgleichung für die Herstellung einer Seife! [7 BE]
- 1.2.2 Begründen Sie mithilfe einer Reaktionsgleichung, weshalb beim Entbasten der Seide enthärtetes Wasser verwendet werden sollte! [3 BE]

#### 2013/B2 Cholesterin

1 Eine unregulierte Cholesterinsynthese in der Leber kann zusammen mit einer übermäßigen Aufnahme von Cholesterin über die Nahrung zu einer

gesundheitsschädlichen Cholesterin-Konzentration im Blut führen und damit das Risiko für Arteriosklerose erhöhen.

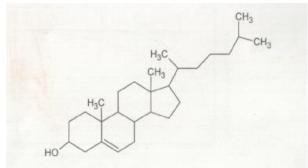


Abb.1: Strukturformel von Cholesterin

1.1 Problematisch in Bezug auf Arteriosklerose sind die so genannten LDL-Partikel, in denen neben Cholesterin auch Cholesterinester vorkommen. Die häufigste Säurekomponente ist hierbei die Linolsäure ((Z,Z)-Octadeca-9,12diensäure).

Formulieren Sie die Strukturformelgleichung für die Bildung des Esters aus Linolsäure und Cholesterin! Nicht an der Esterbindung beteiligte Bereiche des Cholesterinmoleküls können abgekürzt werden. [4 BE]

#### 2013/B2

Als Hauptabbauprodukt von Cholesterin entstehen in der Leber Gallensalze. Als Bestandteil der Gallenflüssigkeit haben sie eine wichtige Bedeutung bei der Fettverdauung. Im schwach basischen Milieu des Zwölffingerdarms entfalten die beiden dargestellten Gallensalze optimale Wirkung.

A: Taurocholat-Ion B: Glycocholat-Ion Abb. 3: Strukturformeln von Gallensalz-Anionen

Tab.: pKs-Richtwerte von Alkylsulfonsäuren und Alkylcarbonsäuren

	pKs-Wert
Alkylsulfonsäuren	ca. 0
Alkylcarbonsäuren	ca. 4

2.1 Erläutern Sie ausgehend von charakteristischen Strukturmerkmalen die Wirkungsweise der Gallensalz-Anionen auf den Nahrungsbrei - ein Öl- in- Wasser-Gemisch - unter Verwendung schematischer Skizzen! Erläutern Sie, welches der beiden Gallensalz-Anionen beim Ansäuern zuerst seine Wirkung verliert! [10 BE]

2014 A2

Manche Fettcremes zur Hautpflege, die wässrige Papayaextrakte enthalten, werben mit der "Kraft der Papaya", die einen "unschlagbaren Cocktail an Vitaminen, Mineralsalzen und Enzymen" enthält. Um eine stabile Emulsion zu erhalten, werden solchen Cremes Emulgatoren zugesetzt. Ein Beispiel für einen Emulgator ist Natriumlaurylsulfat.

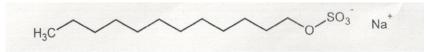


Abb. 3: Strukturformel von Natriumlaurylsulfat Erklären Sie anhand der Molekülstruktur von Natriumlaurylsulfat seine emulgierende Wirkung! [6 BE]

#### 2015/C1

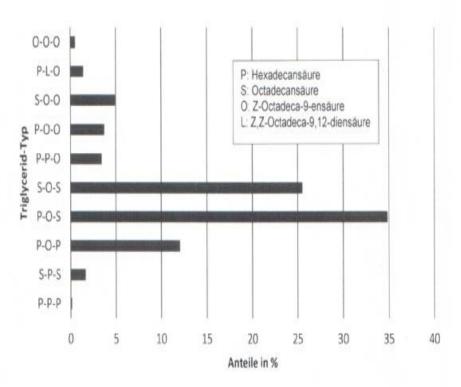
Vanillezucker wird im Gegensatz zu Vanillinzucker aus Saccharose und dem fein geriebenen Mark der Vanilleschoten hergestellt. Er enthält daher eine Vielzahl verschiedener Inhaltsstoffe, unter anderem auch Fette.

Beschreiben Sie den Aufbau eines natürlichen Fettmoleküls! [4 BE]

## 2016/B 1 Kakao und Schokolade

Das Wort Schokolade leitet sich vom Namen des ersten kakaohaltigen Getränks ab, dem *xocoatl* (Kakaowasser) der Azteken.

- 1 Zur Herstellung von Schokolade werden die Grundzutaten Kakaobutter, Kakaomasse und Zucker (z. B. Saccharose) benötigt.
- 1.1 Bei der Analyse von Kakaobutter lässt sich folgende Zusammensetzung feststellen:



## Abb. 1: Prozentualer Anteil ausgewählter Triglycerid-Typen in Kakaobutter.

Die Buchstabenkombinationen kennzeichnen die imTriglycerid gebundenen Fettsäurebausteine.1

Zeichnen Sie die Strukturformel des am häufigsten in Kakaobutter vorkommenden

Fettmoleküls und formulieren Sie eine begründete Hypothese zum Aggregatzustand der Kakaobutter bei Raumtemperatur! [7 BE]

1.2 Durch Zugabe großer Mengen Zucker wird der bittere Geschmack der Kakaomasse überdeckt. Um aus Kakaobutter und Zucker eine stabile Mischung erzeugen zu können, wird zum Beispiel das amphiphile Phospholipid

Lecithin zugesetzt und die Mischung unter ständigem Rühren erwärmt bis sie schmilzt. Die Schmelze wird über einen längeren Zeitraumweiter gerührt.

Begründen Sie die Notwendigkeit des Zusatzes von Lecithin bei der Schokoladenherstellung und beschreiben Sie seine Wirkung! [6 BE]

1.3 Die für die Herstellung von Vollmilchschokolade benötigte Milch muss zunächst erhitzt werden, um Keime abzutöten und so die Haltbarkeit der Schokolade zu erhöhen.

Ob die Milch ausreichend abgekocht wurde, lässt sich mithilfe des Schardinger-Nachweises feststellen. Hierbei wird eine Probe der Milch mit Methylenblau und Methanal versetzt. Das in der Milch vorkommende Schardinger-Enzym katalysiert hierbei folgende Reaktion:

Methanal + Methylenblau (blau)

[Schardinger-Enzym]

Methansäure + Leukomethylenblau (farblos)

Abb. 2: Prinzip des Schardinger-Nachweises

Die beiden folgenden Strukturformeln A und B können den Stoffen Methylenblau bzw. Leukomethylenblau zugeordnet werden:

A: B: 
$$\frac{H}{N} = \frac{1}{N} \frac{1}{N(CH_3)_2} \frac{1}{(H_3C)_2N} \frac{N}{N(CH_3)_2} \frac{N$$

Abb. 3: Strukturformeln A und B

- 1.3.1 Ordnen Sie die beiden Strukturformeln A und B den Stoffen Methylenblau bzw. Leukomethylenblau zu und begründen Sie Ihre Zuordnung mithilfe je einer weiteren Grenzstrukturformel! [8 BE]
- 1.3.2 Erklären Sie mithilfe einer Modellvorstellung, weshalb durch den Schardinger-Nachweis unbehandelte und abgekochte Milch experimentell unterschieden werden können! [6 BE]

#### 2017/C1

2 Das aus Lachsen gewonnene Öl enthält Fettmoleküle mit einem hohen Gehalt an essentiellen Omega-3-Fettsäureresten Omega-3-Fettsäuren

Trivialname	Summenformel	IUPAC-Nomenklatur
α-Linolensäure	C18H30O2	(9Z,12Z,15Z)-Octadeca-9,12,15-triensäure
Timnodonsäure	C20H30O2	(5Z,8Z,11Z,14Z,17Z)-Eicosa-5,8,11,14,17- pentaensäure
Cervonsäure	C22H32O2	(4Z,7Z,10Z,13Z,16Z,19Z)-Docosa- 4,7,10,13,16,19- hexaensäure

- 2.1 Für eine Analyse sollen die Fettmoleküle im Lachsöl hydrolysiert werden. Formulieren Sie die Strukturformelgleichung für die Hydrolyse eines Fettmoleküls, das mindestens einen Omega-3-Fettsäurerest enthält. [6 BE]
- 2.2 In einer Studie wurde die Wirkung von Fischölkapseln untersucht: Dazu nahm die "Fischölkapsel-Gruppe" über drei Monate täglich eine Fischölkapselein. Die Placebo-Gruppe nahm täglich eine fettreiche Kapsel ein, die keine fischtypischen Fette enthielt. Bei allen Teilnehmern der Studie wurde die Konzentration des Proteins PDGF-AB im Blut zu Beginn, inder Mitte und am Ende der Studie bestimmt.PDGF-AB ist ein Protein, das im Verdacht steht, das Risiko für Arteriosklerose zu erhöhen. Die Graphiken zeigen die Ergebnisse der Studie:

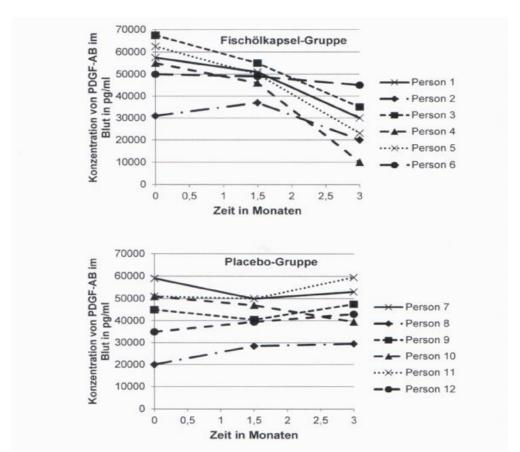


Abb. 3: Ergebnisse einer Studie zur Wirksamkeit von Fischölkapseln<sup>1</sup>

Beurteilen Sie, ob die Ergebnisse der Studie die Ernährungsempfehlung der Deutschen Gesellschaft für Ernährung zum Verzehr von Seefisch stützen. [5 BE]

Abbildungen und Tabellen:

<sup>1</sup> J. Hiebl. Organochlorpestizide und Polychlorierte Biphenyle (PCB) in Lachs - Untersuchungsergebnisse. Bayerisches Landesamt

für Gesundheit und Leensmittelsicherheit (2004), https://www.lgl.bayern.de/lebensmittel/warengruppen/wc\_10\_fische/ue\_2004\_pcb\_lachs.htm , zuletzt aufgerufen am 14.11.2016

verändert nach: F. Graf von Spiegel zum Diesenberg-Hanxleden: Die Einnahme niedrig dosierter  $\omega$ -3-Fettsäuren und die Genexpression

und Proteinbildung von PDGF, MCP-1 und VEG., Dissertation, München, 2005, S. 43; https://edoc.ub.unimuenchen.de/3159/1/Spiegel\_zum\_Diesenberg-Hanxleden\_Felix.pdf, zuletzt aufgerufen am 14.11.2016 2Japanese Conference on the Biochemistry of Lipids: LipidBank, http://lipidbank.jp/image/VCA0001SP1101.gif bzw.

#### 2017/C2

Im Jahr 2014 wurde das sogenannte Freistoß-Spray im deutschen Profifußball zum ersten Mal eingesetzt. Beim Aufsprühen auf den Rasen wird ein feiner Schaum erzeugt, der sich nach einigen Minuten wieder auflöst. Im Spray ist neben Wasser und dem Treibgas Butan ein Tensid enthalten, das im Handel unter dem Namen Polysorbat-20 angeboten wird

Abb. 3: Strukturformel von Polysorbat-20

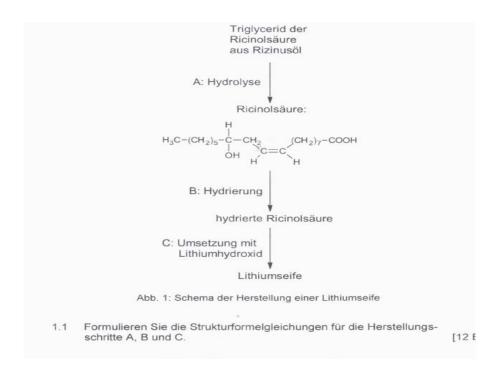
Voraussetzung für die Bildung einer Schaumblase ist eine Tensid-Doppelschicht, in der die einzelnen Tensidschichten durch eine dünne Schicht Wasser voneinander getrennt sind. Im Inneren der Schaumblase befindet sich das Treibgas Butan, außen ist die Blase von Luft umgeben. Fertigen Sie eine beschriftete Skizze des Querschnitts durch eine Schaumblase des Freistoß-Sprays an und erklären Sie die Anordnung der Polysorbat-20-Moleküle. [7 BE]

#### 2018 B 2

Nachwachsende Rohstoffe

Das Chinaschilf (Miscanthus sinensis) und die Rizinusstaude (Ricinus communis) liefern nachwachsende Rohstoffe. Aus Chinaschilf kann Bioethanol hergestellt werden. Die Rizinusstaude ist eine Ölpflanze. Das aus ihr gewonnene Rizinusöl besteht zu 80 – 85 % aus dem Triglycerid der Ricinolsäure.

1 Aus Rizinusöl kann in einer mehrstufigen Synthese eine Lithiumseife hergestellt werden, die in Schmiermitteln verwendet wird. Das folgende Schema zeigt die einzelnen Herstellungsschritte: Triglycerid der Ricinolsäure aus Rizinusöl



3 Als Alternative zum Dieselkraftstoff aus Erdöl kann man Biodiesel einsetzen. Dieser wird durch Umesterung von Pflanzenölen mit Methanol hergestellt. DieTabelle zeigt ein typisches Fettsäuremuster von Rapsöl:

Tab.: Fettsäuremuster von Rapsöl

Trivialname	IUPAC-Name	Anteil in %
Palimitinsäure	Hexadecansäure	4,0%
Strearinsäure	Octadecansäure	1,5%
Ölsäure	(Z)-Octadecen-9-säure	63%
Linolsäure	(Z,Z)Octadeca-9,12 diensäure	20,0%
Linolensäure	(Z,Z,Z)-Octadeca-9,12,15 triensäure	9,0%
weitere Fettsäuren		2,5 %

- 3.1 Formulieren Sie die Reaktionsgleichung für die Umesterung eines charakteristischen Fettmoleküls aus Rapsöl mit drei verschiedenen Fettsäureresten. [5 BE]
- 3.2 Bewerten Sie den Einsatz von Biodiesel im Vergleich zu herkömmlichem Diesel unter Berücksichtigung zweier gesellschaftlich relevanter Werte wie Umweltschutz, Gesundheit, Wohlstand und Würde des Menschen. [5 BE]

### **B 2 Fleckentfernung**

Flecken auf der Kleidung können durch verschiedene Substanzen hervorgerufen werden. Schwierigkeiten bei der Reinigung bereiten dabei sowohl Fette als auch Farbstoffe.

Zum Entfernen von Fettflecken werden Waschmitteln sogenannte Alkylpolyglycoside (APG) (Abb. 1) zugesetzt:

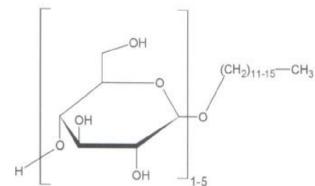


Abb. 1: Strukturformel Alkylpolyglycosid

- 1.1 Erklären Sie anhand der Strukturformel die waschaktive Wirkung des Alkylpolyglycosids und beschreiben Sie mithilfe von Skizzen auf Teilchenebene die Entfernung eines Fettflecks von einer hydrophoben Faser.

  [8 BE]
- 1.2 Neben APG können auch Kernseifen (Natriumsalze von Fettsäuren) zum Entfernen von Fettflecken eingesetzt werden. Begründen Sie anhand einer Reaktionsgleichung, ob sich APG oder Kernseifen bei hartem Wasser besser zur Entfernung von Flecken eignen. [5 BE]
- 2 Curcumin aus Currypulver verursacht besonders hartnäckige Flecken. Je nach pH-Wert liegt dieser Farbstoff in unterschiedlichen Formen vor (Abb. 2). Das Absorptionsspektrum der beiden Formen ist in Abbildung 3 dargestellt:

Abb. 2: Strukturformeln von Curcumin bei pH = 7 (A) und pH = 8,5 (B)

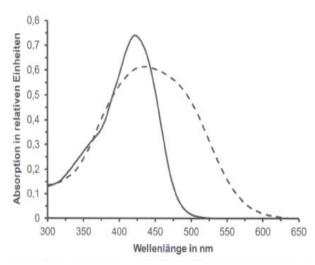


Abb. 3: Absorptionsspektren von Curcumin bei pH = 7 und pH = 8,51

Ordnen Sie die Absorptionsspektren in Abbildung 3 den beiden Formen von Curcumin begründet zu. [5 BE]

Auch Lippenstifte können auf Kleidung hartnäckige Flecken verursachen. Grund hierfür ist z. B. der dunkelrote Farbstoff Litholrubin BK. Eine Vorstufe ist in Abbildung 4 dargestellt:

Abb. 4: Strukturformel der Vorstufe von Litholrubin BK

Die Synthese der Vorstufe erfolgt ausgehend von zwei aromatischen Komponenten in zwei Schritten. Formulieren Sie die Strukturformelgleichungen für die beiden Syntheseschritte und benennen Sie diese. Nicht relevante Molekülbereiche können abgekürzt werden.

[7 BE]

4 Beim Waschen von Baumwolltextilien bleiben von Marmelade-Flecken oft blaue Rückstände auf dem Kleidungsstück zurück. Diese werden von einem Farbstoff A aus der Stoffklasse der Anthocyane verursacht (Abb. 5)

Abb. 5: Strukturformel des Farbstoffs A

- 4.1 Stellen Sie eine Hypothese auf, weshalb Tenside den Farbstoff A nicht aus den Cellulose-Fasern entfernen können. [3 BE]
- 4.2 Zur Entfärbung der blauen Rückstände kann man Farbstoff A (Abb. 5) mithilfe von Peressigsäure (C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O<sub>3</sub>) in der Waschlauge (pH-Wert 8) oxidieren. Ein mögliches Oxidationsprodukt (Stoff B) ist in Abbildung 6 dargestellt:

Abb. 6: Strukturformel des möglichen Oxidationsprodukts (Stoff B)

4.2.1 Formulieren Sie die Teilgleichung für die Oxidation von Farbstoff A zu Stoff B. Nicht relevante Molekülbereiche können abgekürzt werden. [4 BE]