

# Softwareübersicht für ein Chemiestudium

Aktualisierte Version vom 16.11.13

überarbeitet: 14. Februar 2016

Während eines Chemiestudiums benötigt man vielfältige und teilweise spezifische Software, um Informationen darzustellen und zu bearbeiten.

Die FSU besitzt einen Grundstock an [lizenzierten Programmen](#), mit welchen die wichtigsten anstehenden Aufgaben bewältigt werden können. Bei einigen Anbieter gibt es auch vergünstigte Lizenzen für Studierende. Falls die Software nicht über die Hochschule verfügbar ist, findest du diese Informationen auf den Seiten der jeweiligen Anbieter.

Die folgende Ausarbeitung kann dir, über das Angebot deiner Hochschule hinaus, einen Überblick zu nützlicher Software für dein Studium bieten. Die subjektive Frage des besten Programms können wir dir nicht beantworten. Hier findest du lediglich eine Zusammenfassung, in welcher du ein dir unbekanntes und für dich ideales Programm für eine spezielle Aufgabe finden kannst. Die Liste ist in ständiger Bearbeitung und erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit.

[Handbücher](#) zu gängigen Programmen sind meist bei den regionalen Rechenzentren (RRZN) erhältlich.

*Falls du fehlende Software ergänzen willst, dann kannst du deine Vorschläge gerne an unsere Homepage Administration schicken.*

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Text</b>	<b>3</b>
1.1	Textbearbeitung . . . . .	3
1.2	Textsatzprogramme . . . . .	3
1.3	Literaturverwaltungsprogramme . . . . .	4
<b>2</b>	<b>Grafik</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Datenauswertung</b>	<b>5</b>
3.1	Datenverarbeitung . . . . .	5
3.2	Analyse . . . . .	6
<b>4</b>	<b>Simulation</b>	<b>7</b>
4.1	Molecular Modelling . . . . .	7
4.2	NMR Modelling . . . . .	7
<b>5</b>	<b>sonstiges</b>	<b>8</b>
5.1	Programme . . . . .	8
5.2	Apps . . . . .	8
5.2.1	Windows 8 . . . . .	8
5.2.2	Android . . . . .	8
<b>6</b>	<b>Weblinks</b>	<b>9</b>
6.1	Datenbanken . . . . .	9
6.2	Nachschlagewerke . . . . .	9
6.3	Übersetzung . . . . .	9

# 1 Text

## 1.1 Textbearbeitung

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
<a href="#">LibreOffice/ OpenOffice</a>	✓	✓		
<a href="#">Microsoft Word</a>			✓	
<a href="#">Pages</a>			✓	Apple-Analogon zu Word

## 1.2 Textsatzprogramme

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
<a href="#">LateX</a>	✓	✓	✓	codebasierter Textsatz (Editor-Vorschläge: Lyx, TeXMaker, TeXStudio)
<a href="#">Inkscape</a>	✓	✓	✓	Flyererstellung, Vektrographikprogramm
<a href="#">Scribus</a>	✓	✓	✓	Flyer- und Readererstellung
<a href="#">QuarkXPress</a>			✓	kommerzielles Analogon zu Scribus

### 1.3 Literaturverwaltungsprogramme

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
Endnote			✓	
Citavi				
BibTeX	✓	✓	✓	
Mendeley	✓	✓	✓	

## 2 Grafik

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
Gimp		✓	✓	Bildbearbeitungsprogramm
Photoshop			✓	Bildbearbeitungsprogramm von <i>Adobe</i> ; alte Version CS2 frei erhältlich
CorelDraw				Anwendung für Vektor-Illustration, Seitenlayout, Bildbearbeitung und Bitmap-Vektorisierung
hemSketch	✓			einfache Erzeugung von Formelzeichnungen und drehbarer 3D-Strukturen
ChemDraw			✓	kommerzielles Analogon zu ChemSketch
C-Design	✓	✓		Zeichnen von chemischen Formeln, Schemata, Apparaturen
ChemCraft	✓	✓		Visualisierungstool für quantenchemische Berechnungen

## 3 Datenauswertung

### 3.1 Datenverarbeitung

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
MatLab		✓	✓	umfangreiches, leistungsfähiges Paket für alle Arten der Datenverarbeitung und -analyse
SciLab	✓	✓	✓	numerisches Matheprogramm, kostenfreie Alternative zu MatLab
QtiPlot	✓	✓	✓	Analyse- und Darstellungsprogramm für wissenschaftliche Daten, OpenSource
Origin				kommerzielles Analogon zu QtiPlot; neben Darstellung von Rohdaten in publikationsfähigen Grafiken (2D und 3D) beherrscht Origin viele gängige Analyseverfahren wie Fits, Fourier-Transformation, ANOVA usw.
Gnuplot	✓	✓	✓	Darstellung von Messdaten und Funktionen, Steuerung über Kommandozeile (Programmiersprache erforderlich)
LibreOffice/ OpenOffice Calc	✓	✓	✓	Tabellenkalkulationsprogramm
Microsoft Excel			✓	Tabellenkalkulationsprogramm
IgorPro		✓	✓	

### 3.2 Analyse

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
<a href="#">ImageJ</a>	✓	✓	✓	simples Programm um Winkel und Längen aus Graphikdaten auszulesen, Normierung möglich
<a href="#">Spek Win32</a>	✓	✓		Darstellung und Bearbeitung optischer Spektren (UV/Vis, IR, Raman, Fluoreszenz)
<a href="#">TopSpin</a>		✓	✓	NMR-Analyse
<a href="#">Spinworks</a>	✓	✓		NMR-Analyse
<a href="#">MestreLab</a>		✓	✓	Auswertungstool für diverse Analysemethoden (NMR, GC-MS)
<a href="#">ACD Labs</a>	✓			Auswertungstool für diverse Analysemethoden
<a href="#">Mercury</a>	✓	✓	✓	Visualisierung und Untersuchung von Kristallstrukturen
<a href="#">X'Pert Highscore Plus</a>				Analyse von Pulver-Diffraktogrammen
<a href="#">ImageLab</a>			✓	kommerzielles Programm zur Analyse von Gelen

## 4 Simulation

### 4.1 Molecular Modelling

---

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
<a href="#">Materials Studio</a>				Simulation und Modellierung von Materialien
<a href="#">Jmol</a>	✓	✓	✓	Erstellung von Strukturen in 3D
<a href="#">Diamond</a>				Visualisierung von Kristall und Molekularstrukturen

---

### 4.2 NMR Modelling

---

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
<a href="#">Simpson</a>	✓	✓	✓	Simulation von Festphasen-NMR

---

## 5 sonstiges

### 5.1 Programme

Programm	kostenfrei	Kompatibilität		Erläuterung
		Linux	Mac OS	
<a href="#">AxioVision</a>	✓			Bearbeitung von Mikroskopie
<a href="#">doPdf</a>	✓			PDF-Konverter
<a href="#">Doxillion</a>	✓		✓	Tool um PDF in Textformate umzuwandeln
<a href="#">FoxitReader</a>	✓	✓		PDF-Betrachtung und Bearbeitung analog zu <i>Adobe</i>
<a href="#">NitroReader</a>	✓			PDF-Betrachtung und Bearbeitung analog zu <i>Adobe</i>
<a href="#">Adobe</a>			✓	PDF-Betrachtung und Bearbeitung

### 5.2 Apps

#### 5.2.1 Windows 8

- Chemielabor
- Chemistry Sky App
- Chemistry LabSuite
- ChemLab 2.5.1

#### 5.2.2 Android

- Calculator ++
- Chemistry Helper

## 6 Weblinks

### 6.1 Datenbanken

[GESTIS-Stoffdatenbank](#)

[Chemdat - Datenbank](#) für Substanzen der Firma Merck

[SDBS](#) spektrale Datenbank für organische Substanzen

[NIST Chemistry WebBook](#) große Substanzdatenbank mit IR-Spektren und thermodynamische Daten des NIST)

[SciFinder](#) kommerzielle Datenbank für Fachhandel und Informationen zu Stoffen und Reaktionen

[Reaxys](#) kommerzielle Datenbank zu Stoffen und Reaktionen, Literaturrecherche möglich

### 6.2 Nachschlagewerke

[Wolfram|Alpha](#)

[Chemgapedia](#)

[Chemieonline – Forum](#)

[Portal für Organische Chemie](#) Sammlung organischer Reaktionen und Namensreaktionen

[CTAN – Comprehensive TeX Archive Network](#) zentrale Anlaufstelle für alle Arten von Material rum um TeX

### 6.3 Übersetzung

[Leo](#) Online-Wörterbuch für diverse Sprachen

[dict.cc](#) mehrsprachiges Online-Wörterbuch; für Deutsch-Englisch auch Kontextübersetzung möglich