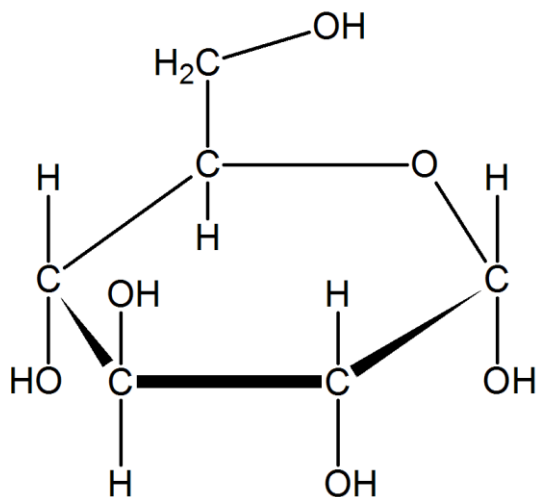
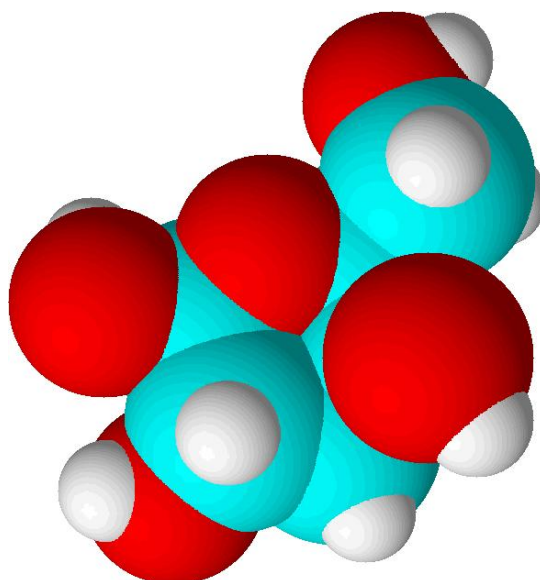


# BLIV KLOGERE PÅ KEMI MED CHEMSKETCH



Kursusite: [www.plan-k.dk/ChemSketch](http://www.plan-k.dk/ChemSketch)



Helge Blom Andersen  
Center for Undervisningsmidler  
Damhaven 13A, 7100 Vejle  
[heba@ucl.dk](mailto:heba@ucl.dk)

UNIVERSITY COLLEGE  
**Lillebaelt**  
Center for Undervisningsmidler

De følgende sider er udskrifter af websider.

Derfor kan der optræde uheldige sideskrift. Det betyder at en figur, der hører til en vejledning nederst på en side først optræder øverst på den følgende side

## OM TYPOGRAFIEN

De meget kortfattede instruktioner skal læses på en bestemt måde.

Alle instrukser er samlet i punktopstillinger med bullets.

En instruks består af en Ordre efterfulgt af det, som ordren skal udføres med eller på - evt. efterfulgt af en parentes med et tal. Tallet henviser til en nummereret pil i den ledsagende illustration.

Ordren er altid skrevet fed og kursiv, og det ordren skal udføres med eller på er skrevet med fed.

Ordre kan typisk være Klik , Højreklik, Dobbeltklik, Tryk, Vælg, Marker, Skriv, Udfyld, Afmærk.

En instruks er altid anbragt til venstre for den illustration, der belyser problemstillingen.

## OM BRUG AF PILE OG DERES FARVER

De fleste af illustrationerne er forsynet med en eller flere pile.

Røde pile viser hvor en instruks skal udføres.

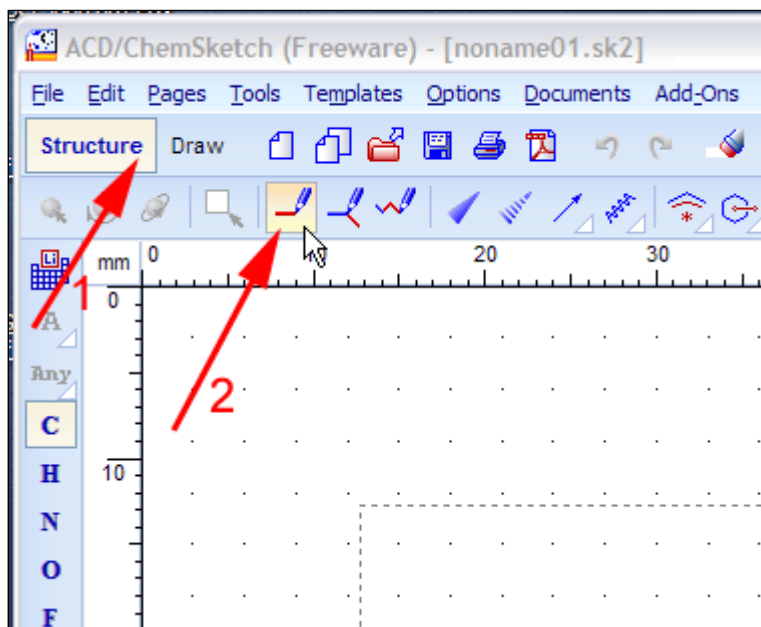
Hvis der er flere røde pile i en illustration, vil de ofte være forsynet med et nummer, der refererer til en instruks.

## Tegn simple alkaner og lær deres navne

I denne øvelse lærer du

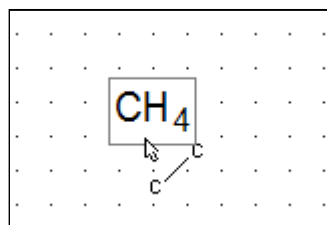
- at tegne simple alkaner
- at navngive simple alkaner

- **Tryk Structure**  
(hvis den ikke allerede er trykket ind)  
(1)
- **Tryk Draw normal** (hvis den ikke allerede er trykket ind)  
(2)



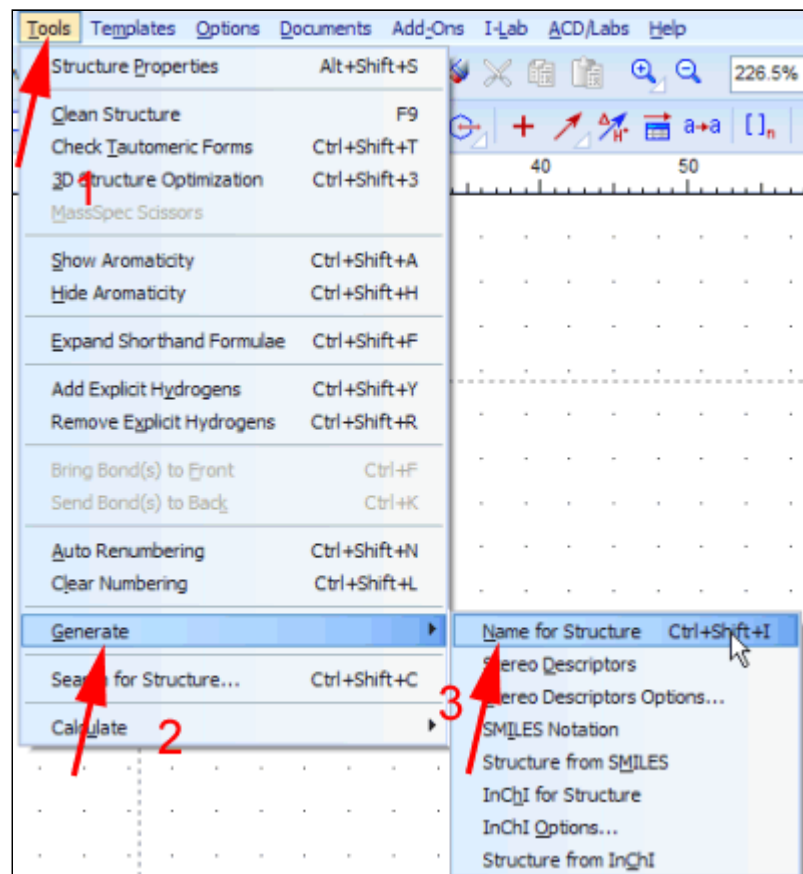
- **Klik i dokumentet**

Herved tegnes den simpleste alkan (i ChemSketch indsættes ikke-metaller i deres lavest valens som brintforbindelser)

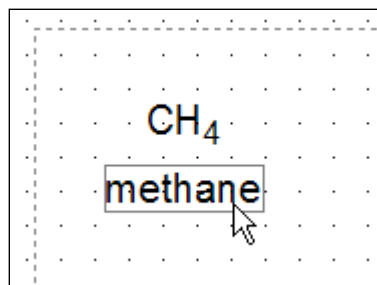


- **Vælg menuen Tools** (1)
- **Vælg Generate** (2)
- **Vælg Name for Structure** (3)

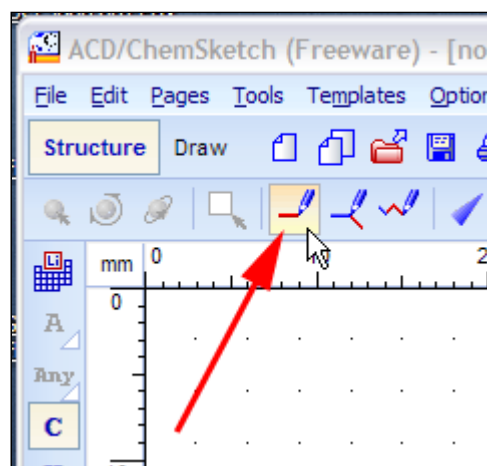
(Bemærk genvejstaste:  
**CTRL+Shift+I**)



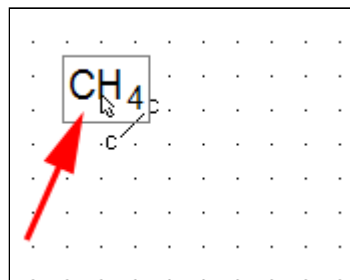
Herved navngives forbindelsen. Navnet er på engelsk, men du kan få det danske navn ved at fjerne det sidste e. Det vender vi senere tilbage til.



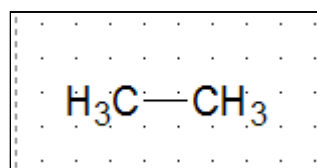
- **Tryk Draw normal** (hvis den ikke allerede er trykket ind)



- **Klik** i dokumentet under **methane**
- **Klik** igen inden for **firkanten** der afgrænser  $\text{CH}_4$



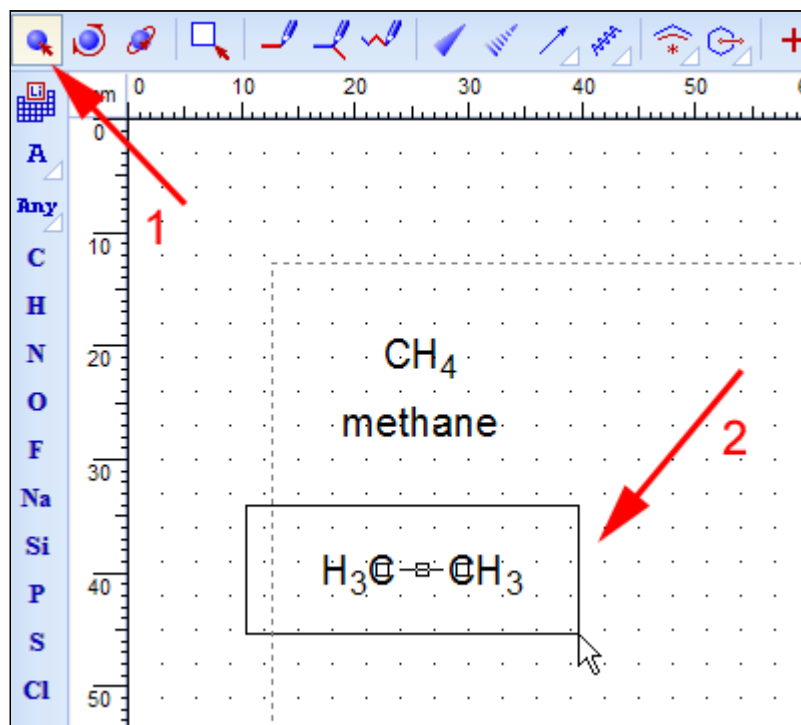
Herved tegnes den næstsimpleste alkan



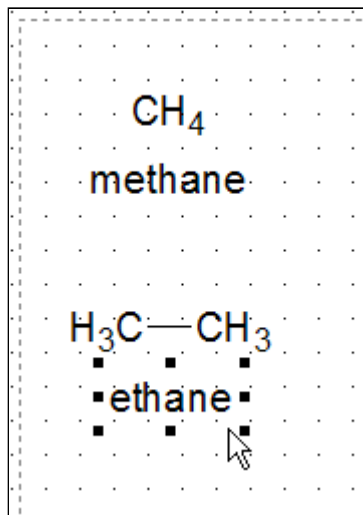
- **Tryk** **Select/Move**

Det er det normale markeringsværktøj

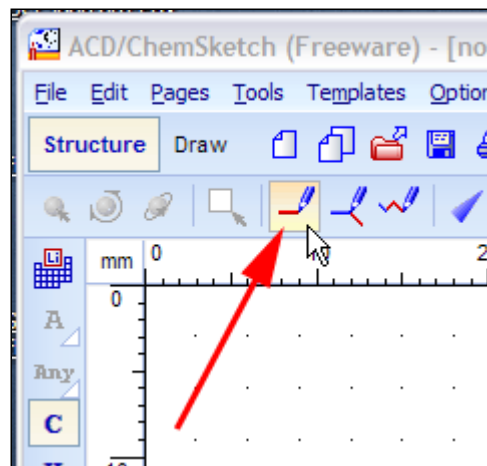
- **Marker** det sidste molekyle
- **Tast** **CTRL+Shift+I**



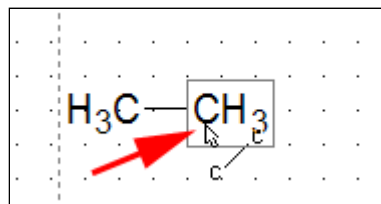
Herved navngives forbindelsen.



- **Tryk Draw normal**



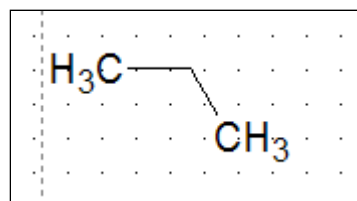
- Tegn på samme måde som før en alkan med 2 C
- Klik på det sidste C



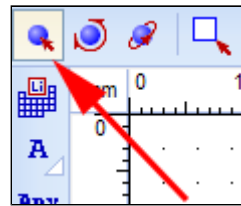
Hov, det ser underligt ud. Der skulle jo være 3 C-atomer.

Forklaringen er, at det er der også, men ChemSketch viser som standard kun de endestillede C og H.

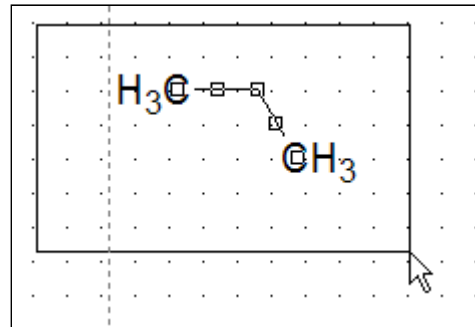
Du skal nu ændre på indstillingen så alle C og H vises.



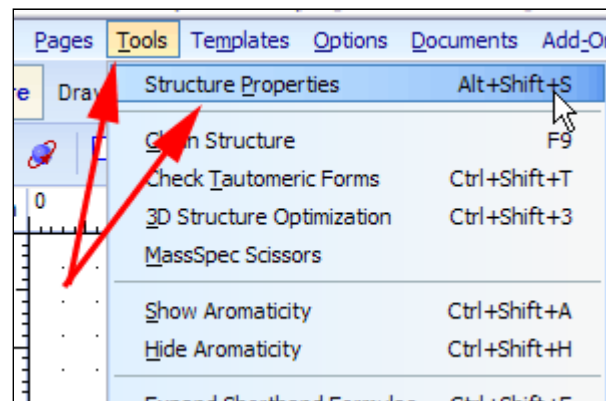
- **Tryk Select/Move**



- **Marker** det sidste molekyle



- **Vælg** menuen **Tools**
- **Vælg** Name **Structure Properties**



- **Afmærk Show Carbon All** (1)
- **Tryk Apply** (2)
- **Tryk Set Default** (3)

CH<sub>4</sub>  
methane

H<sub>3</sub>C—CH<sub>3</sub>  
ethane

H<sub>3</sub>C—CH<sub>2</sub>  
CH<sub>3</sub>

**Properties**

Current Style

Common Atom Bond Special

Show Carbons

All  Hide Zero Charge

Terminal  Cross Out Invalid Atom

Size Calculation

Auto Atom Symbol Size 10

Bond Length 7 mm

Atom Style Bond Style

Arial 0.7 pt

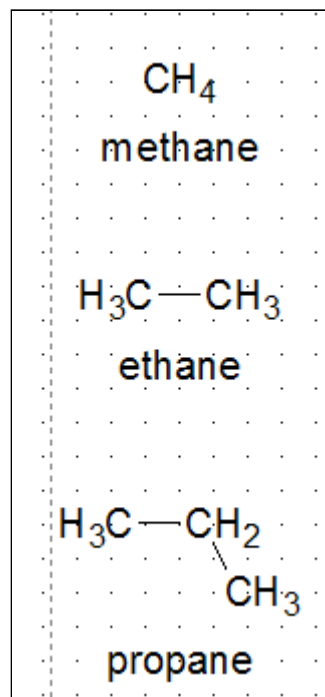
**1** **2** **3**

Apply Set Default

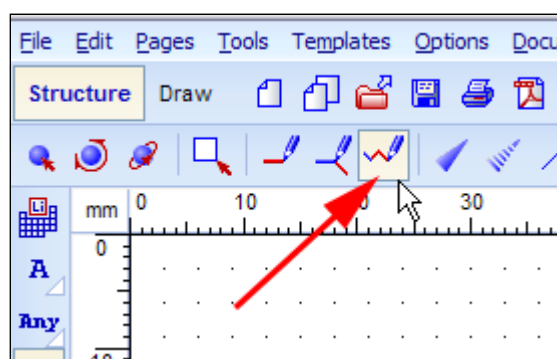
Update From Restore Default

Hermed de tre første alkaner med deres engelske navne.

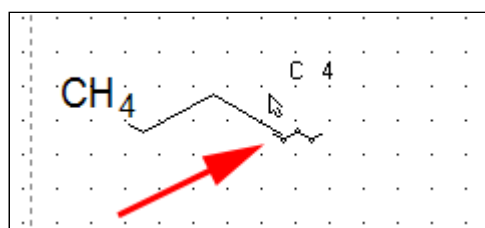
Nu skal du tegne længere kædeformede molekyler.



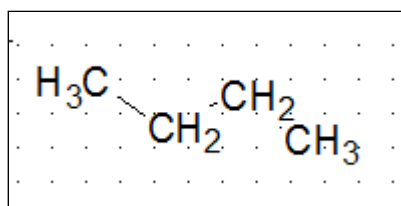
- **Tryk Draw Chains**



- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 4**
- **Slip musen**



Her ses den fjerde alkan. Bindingen mellem 3. og 4. C er skjult . Det er ikke godt ud og kan virke misvisende. Vi vender senere tilbage til hvorledes molekylerne kan gøres tydeligere.

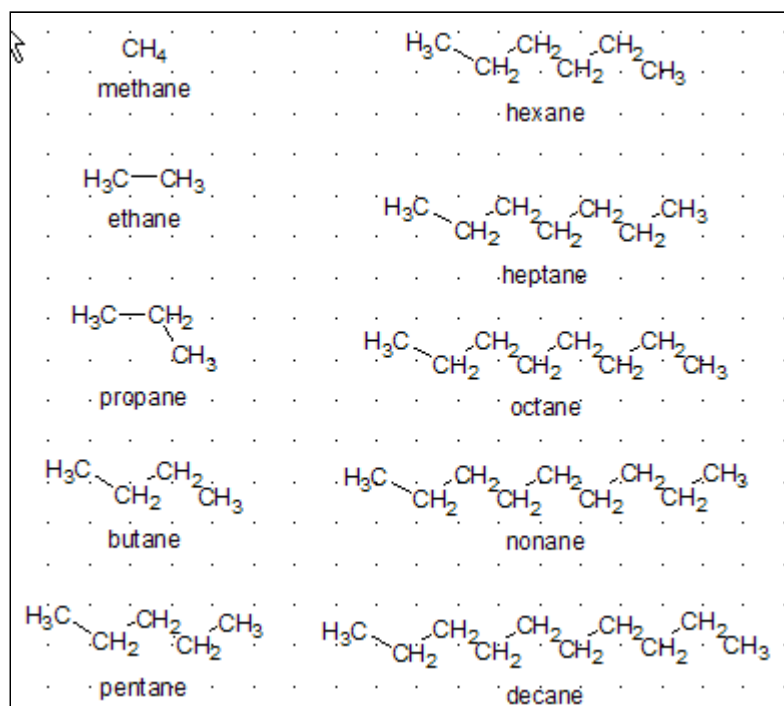


Fortsæt på samme måde med at opbygge alkaner og navngiv dem som beskrevet oven for.

Formlerne er strukturformler.

En strukturformel angiver:

1. hvilke atomer
2. hvor mange atomer af hver slags
3. hvilke atomer der er forbundne



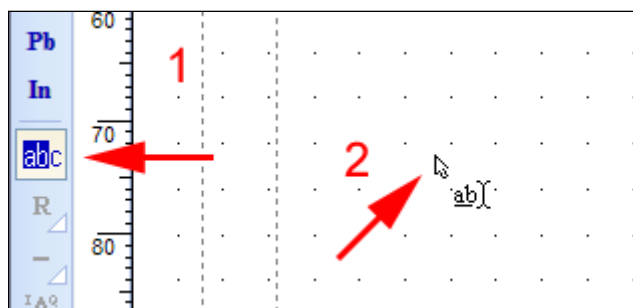
Her af fremgår navnene på dansk - ligesom på engelsk, blot uden e til sidst:

1 C	2 C	3 C	4 C	5 C	6 C	7 C	8 C	9 C	10 C
<b>methan</b>	<b>ethan</b>	<b>propan</b>	<b>butan</b>	<b>pentan</b>	<b>hexan</b>	<b>heptan</b>	<b>Octan</b>	<b>Nonan</b>	<b>Decan</b>

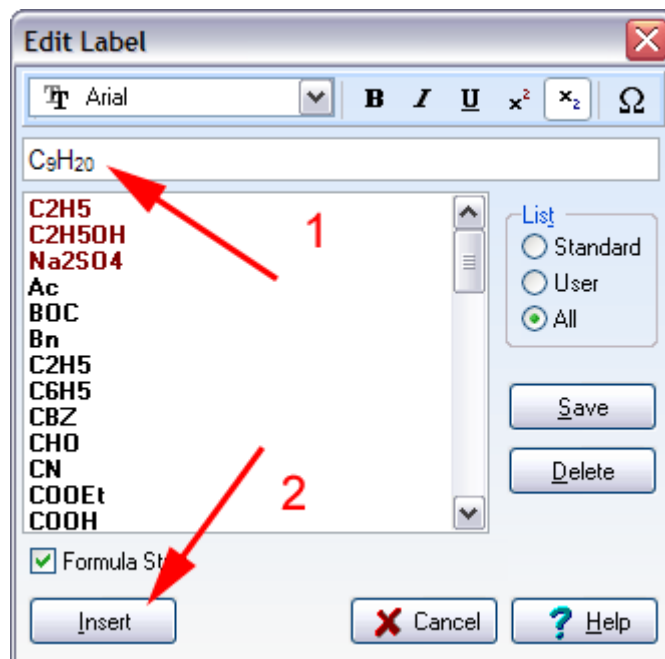
Du kan også skrive molekyleformler i ChemSketch

- **Tryk Edit Atom Label** (1)
- **Klik** i dokumentet (2)

Herved fremkommer boksen Edit Label

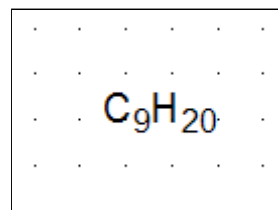


- **Skriv C9H20** (1)  
(bemærk at antalsbetegnelsen automatisk bliver subskript)
- **Tryk Insert**



En molekyleformel angiver:

1. hvilke atomer
2. hvor mange atomer af hver slags



## Opgave

### Simple cycloalkaner

Tegn og navngiv simple ringsluttede alkaner med hhv. 3, 4, 5 og 6 C-atomer.  
(Husk "Clean Structure")

Tip: En simpel ringsluttet alkan kan tegnes ved først at tegne en alkan og derpå forbinde de to endestillede C-atomer.

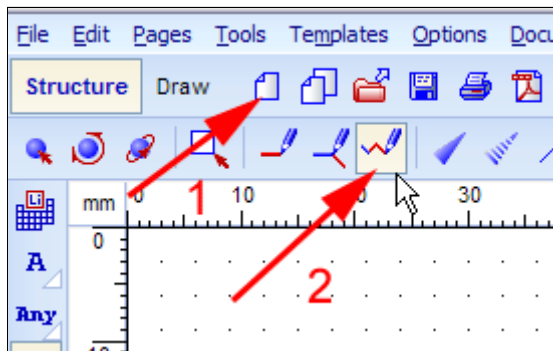
[Simple Cycloalkaner løsning](#)

## Tilpas formelvisning

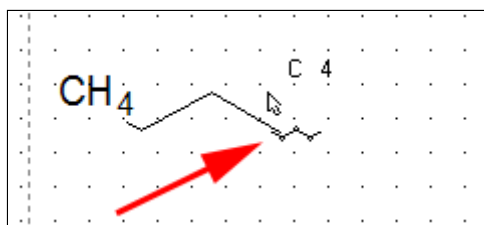
I denne øvelse lærer du:

- At indstille parametre for strukturformler, så de bliver mere læsevenlige

- **Opret** et nyt dokument (1)
- **Tryk Draw Chains** (2)

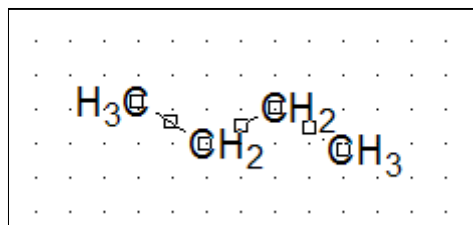


- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 4**
- **Slip musen**

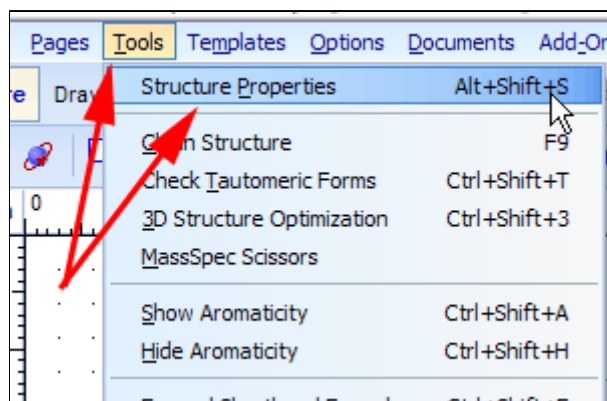


- **Tast CTRL+A**

Herved markeres hele formelen

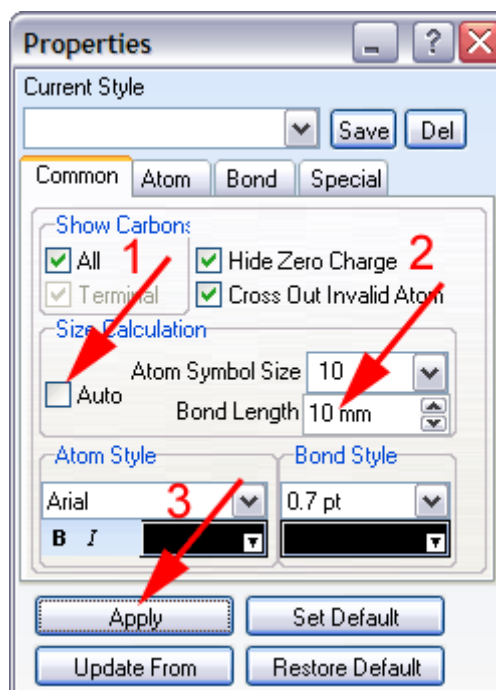


- **Vælg** menuen **Tools**
- **Vælg Name Structure Properties**

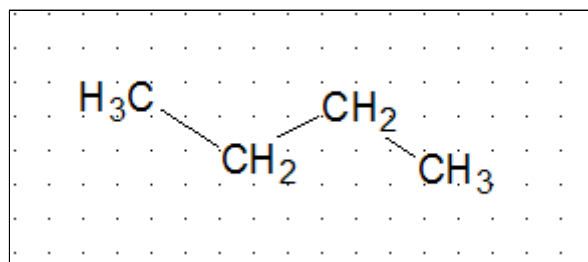


- **Fjern afmærkning Auto** (1)

- **Vælg Bond Length = 10 mm** (2)
- **Tryk Apply** (3)

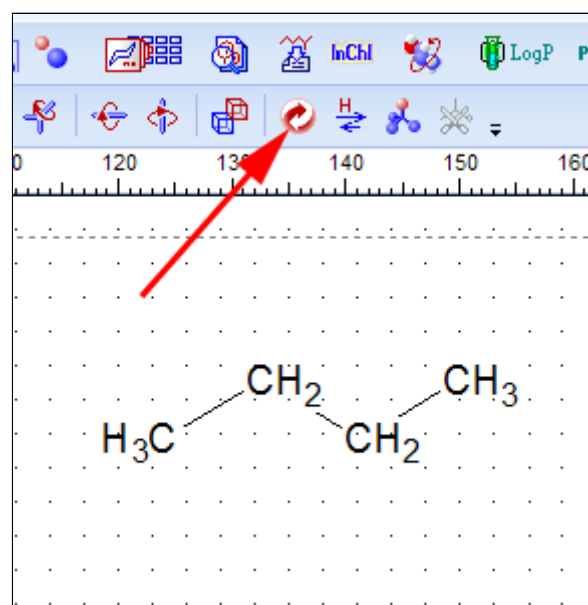


Nu ses alle bindingerne

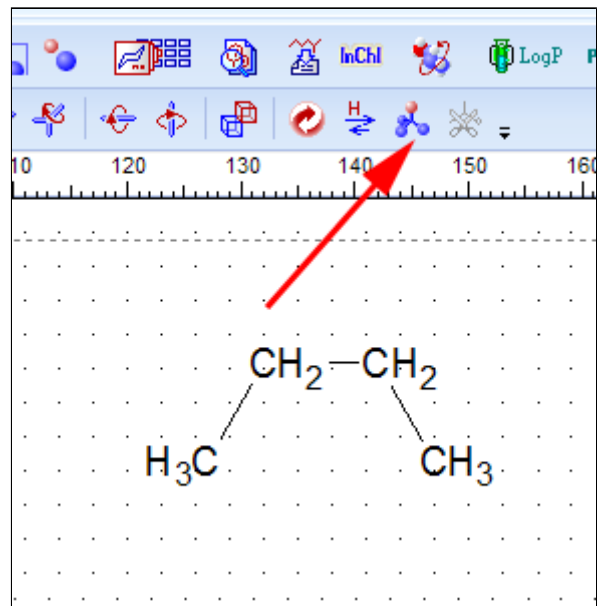


- **Tryk Clean Structure** gentagne gange

Bemærk de forskellige visninger af formelen

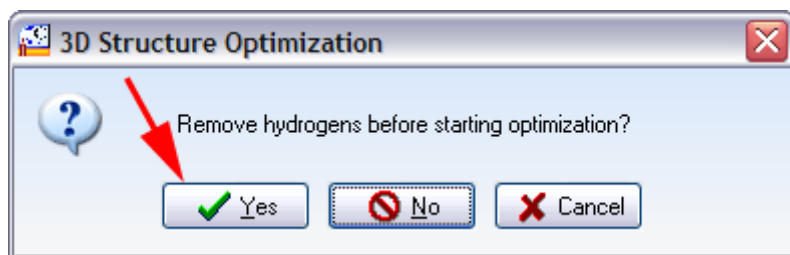


- **Tryk 3D-optimization**

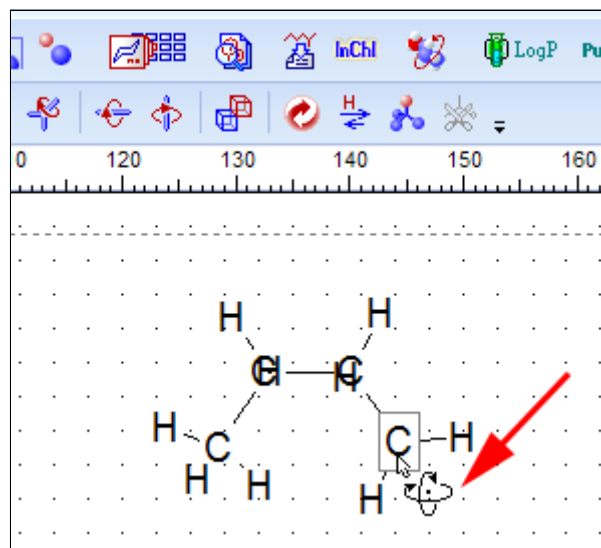


Hvis denne boks fremkommer:

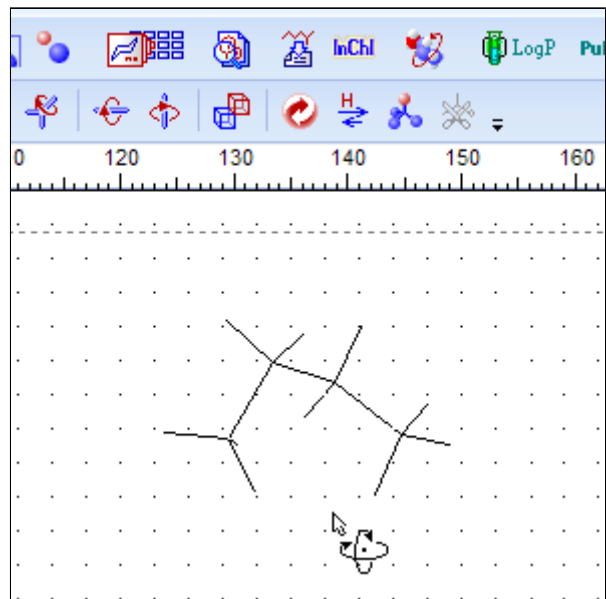
- **Tryk Yes**



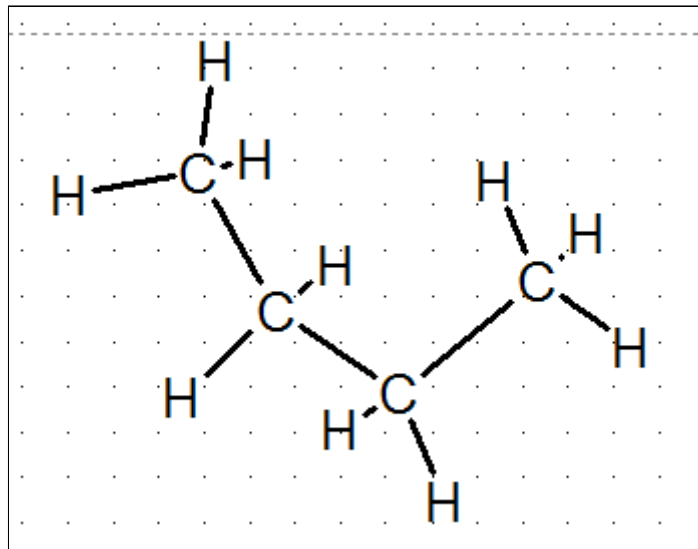
- **Anbring markøren** i nærheden af et atom
- **Hold musen nede** og træk til siden



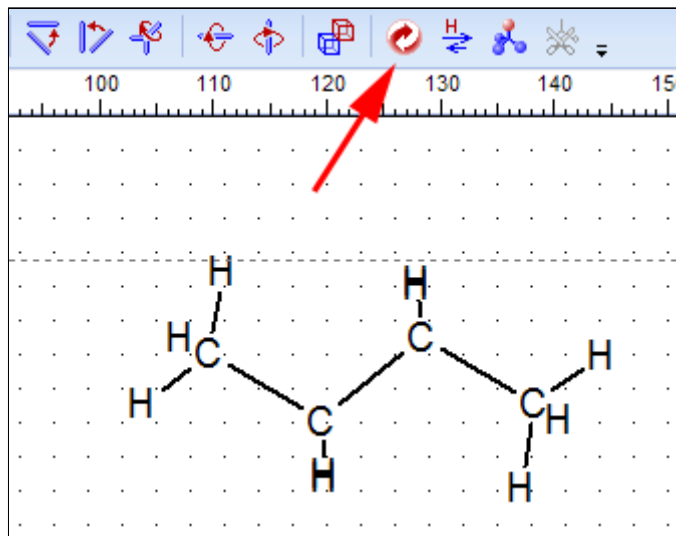
Molekylets rumlige struktur vises som pinde



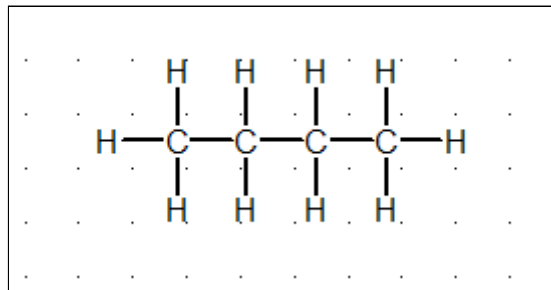
- **Slip musen**



- **Tryk Clean Structure**



Her ses formelen som den ofte vises i lærebøger

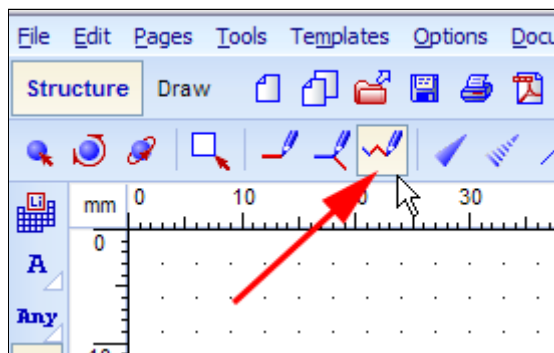


## Alkaner med sidegrupper

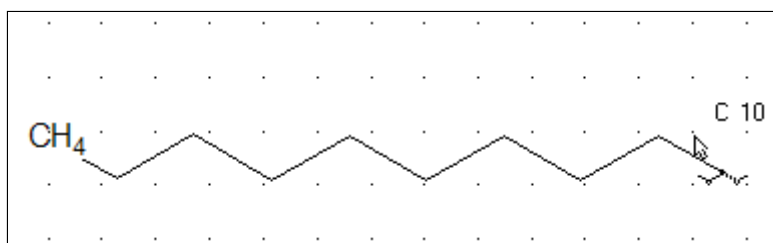
I denne øvelse lærer du at:

- Tegne forgrenede alkaner
- Navngive alkaner med sidegrupper

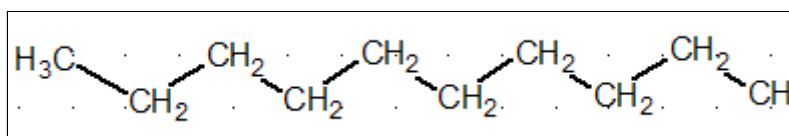
- **Tryk Draw Chains**



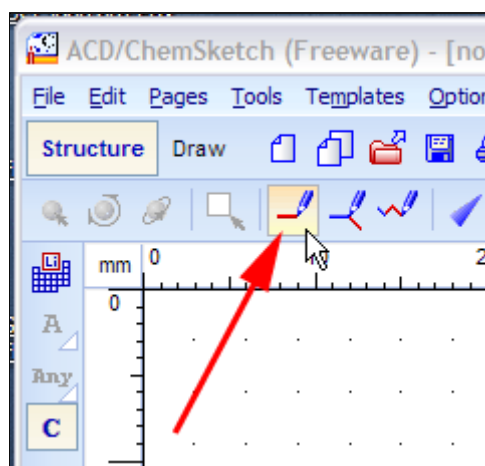
- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 10**
- **Slip musen**



Herved fås decan. Ved at erstatte et H-atom på et ikke-endestillet C med fx en CH<sub>3</sub> fås en alkan med en sidegruppe. Altså en forgrenet alkan.



- **Tryk Draw normal**

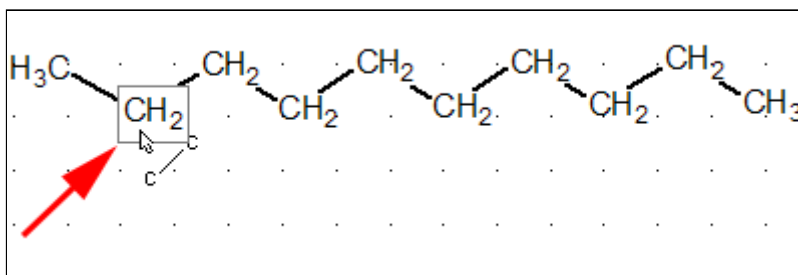


- **Klik på C nr.**

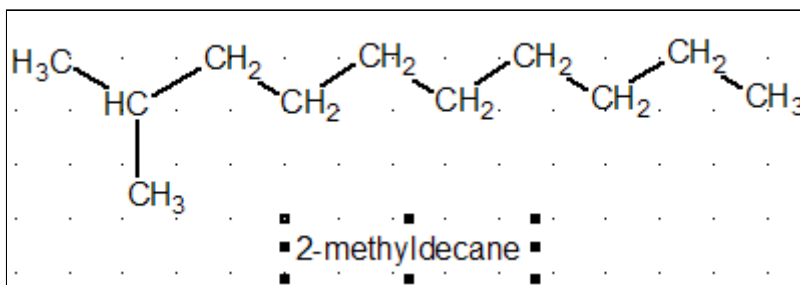
2

- **Tast CTRL+Shift+I**

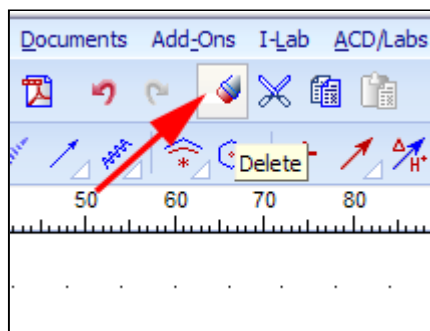
Herved navngives forbindelsen.



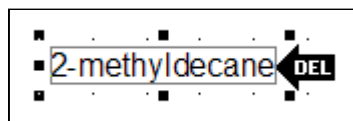
Bemærk navnet. Sidegruppens navn afledes af den tilsvarende alkans navn, blot med endelsen -yl. Placeringen angives ved nummeret på det C-atom hvor sidegruppen er placeret.



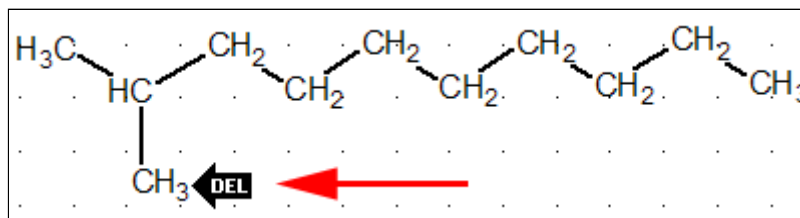
- **Tryk Delete**



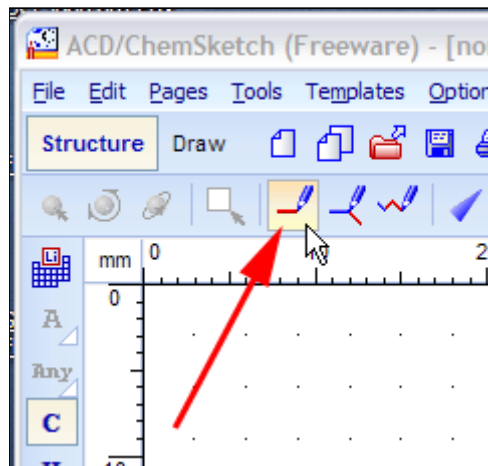
- **Klik på navnet** for at slette det



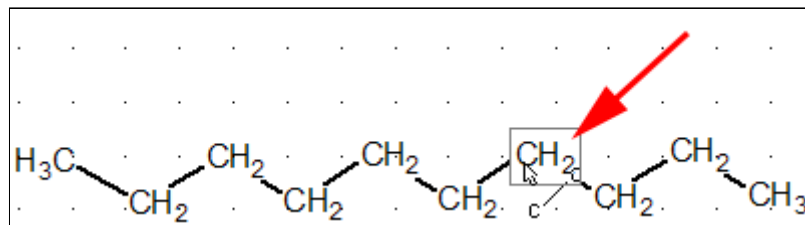
- **Klik på sidegruppen** for at slette den



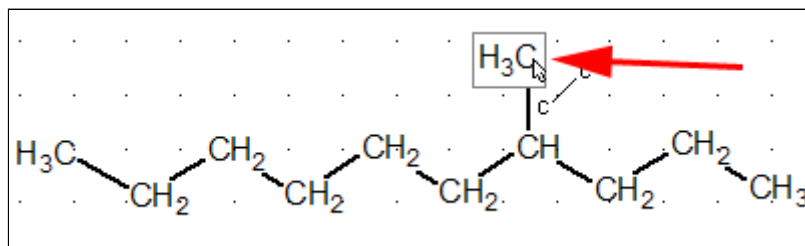
- **Tryk Draw normal**



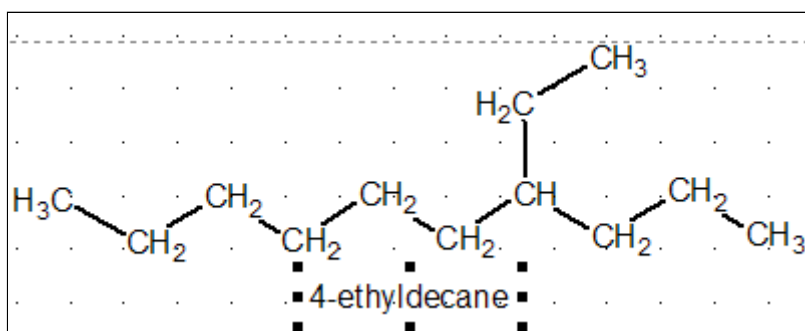
- **Klik** på **C nr. 4** fra modsatte ende



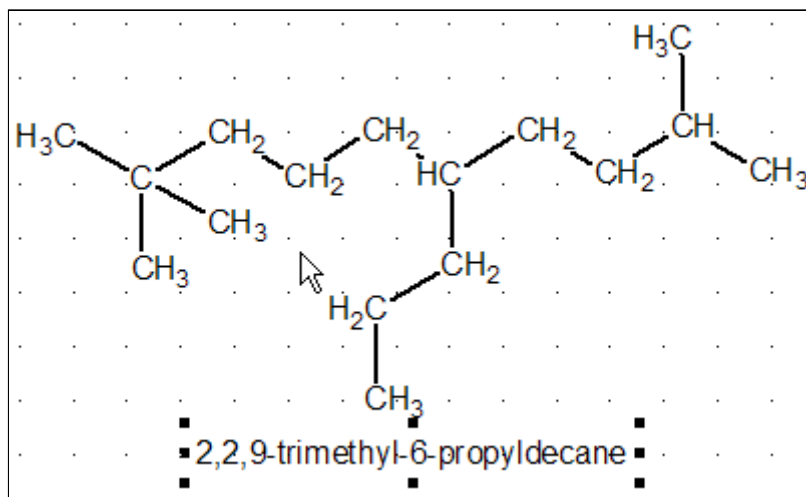
- **Klik** på den ny sidegruppe
- **Tast CTRL+Shift+I**



Bemærk navnet. Sidegruppens nr. tælles fra den ende hvor sidegruppen sidder nærmest.



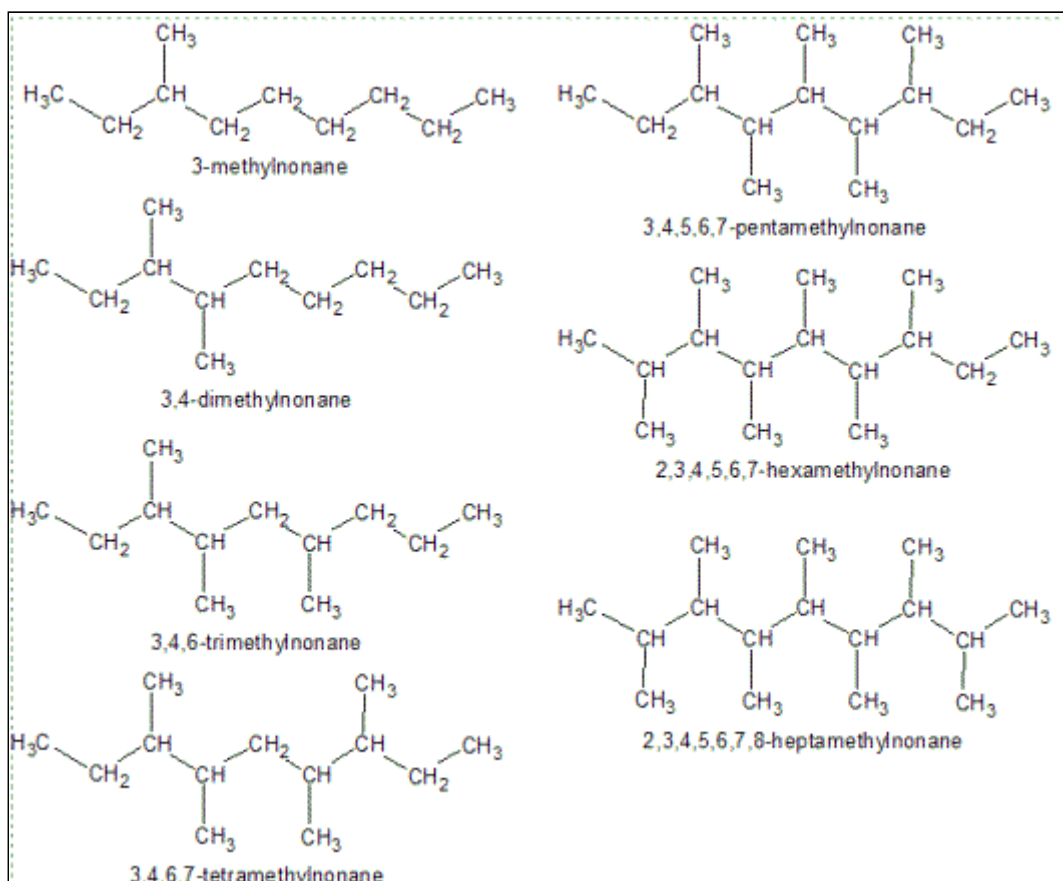
Prøv at fremstille forskellige forgrenede forbindelser og tjek om navnene stemmer overens med nedenstående regler for navngivning af alkaner



**Navngivning på dansk:**

1. Alkaners navne ender på -an.
2. Sidegrupperne navngives som de tilsvarende alkaner, men ender på -yl i stedet for -an.
3. Opsøg den længste uforgrenede C-kæde og nummerer fra den ende, der er nærmest en forgrening. Dette er moderstrukturen, der giver hovednavnet til forbindelsen.
4. Sidegrupperne placering angives ved nummeret for det C-atom, hvor den sidder.
5. Er der f. eks. tre methylgrupper på en kæde, anvendes tre numre til deres placering og præfikset tri- foran methyl.
6. Sidegrupperne ordnes i alfabetisk rækkefølge og skrives foran moderstrukturens navn.

Du kan lære præfikserne ved fx at fremstille en lang alkan og give den flere sidegrupper:



Her af fremgår betegnelserne:

2 sidegrupper    3 sidegrupper    4 sidegrupper    5 sidegrupper    6 sidegrupper    7 sidegrupper

**di**                **tri**                **tetra**            **penta**            **hexa**            **hepta**

osv...

## Cycloalkaner

Tegn og navngiv alle mulige ringsluttede alkaner med 6 C-atomer.  
(Husk "Clean Structure")

Tip: En ringsluttet alkan kan tegnes ved først at tegne en alkan og derpå forbinde 2 C-atomer som ikke er naboer.

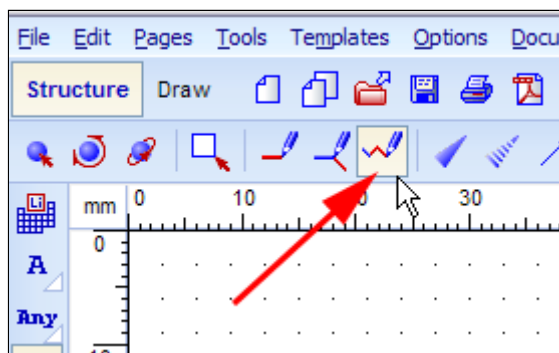
[Cycloalkaner med 6 C-atomer løsning](#)

## Carbonhydrider med dobbelt- eller trippelbindinger

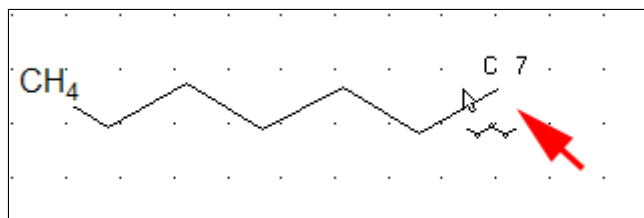
I denne øvelse lærer du at:

- Tegne formler for alkener og alkyner
- At forstå principper i navngivningen af disse stoftyper

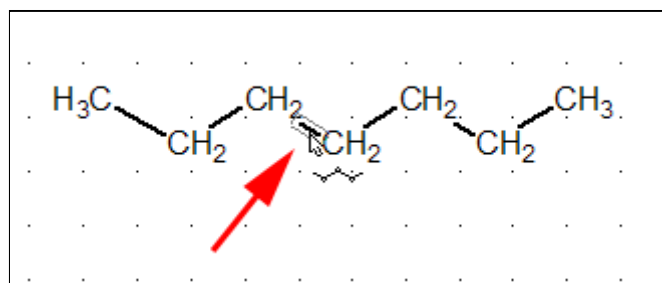
- **Tryk Draw Chains**



- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 7**
- **Slip musen**

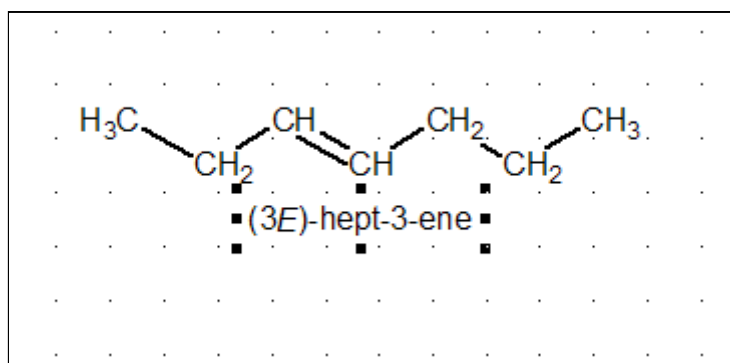


- **Klik** på **binding mellem 3. og 4. C** (Et af de tre Draw-værktøjer skal være aktivt)
- **Tast CTRL+Shift+I**



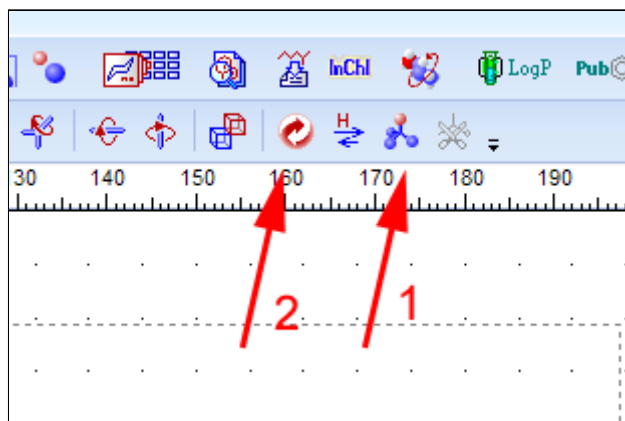
Her ses en alken (en hepten) og dens navn. Alkener navngives som alkaner, men med endelsen *-ene* (på danske *-en*) i stedet for *-ane* (på dansk *-an*), og med en angivelse af dobbeltbindingens placering.

Betegnelsen (3E) forrest i navnet vedrører alkenens rumlige struktur.



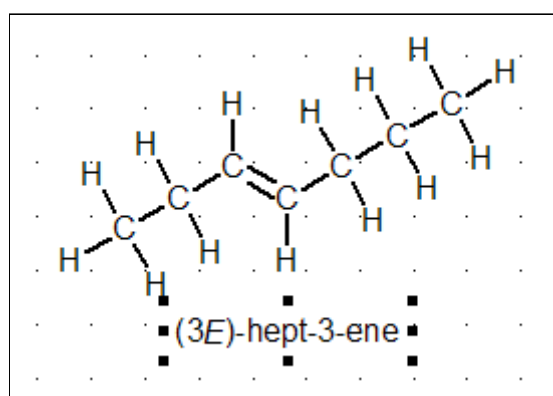
- **Tryk 3D-optimization** (1)

- **Tryk Clean Structure (2)**
- **Tast CTRL+Shift+I**



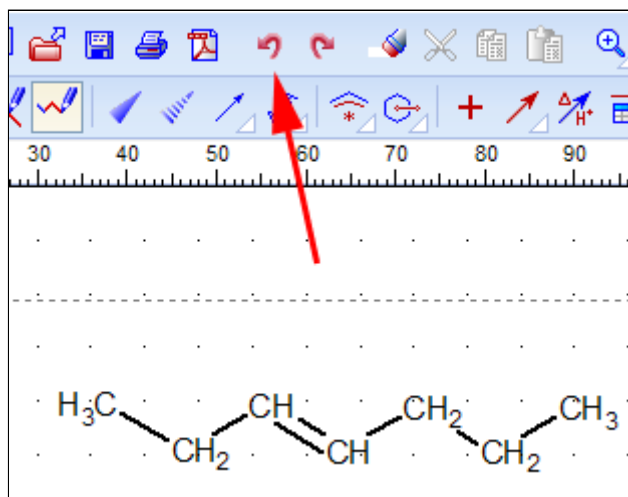
Mod hedder på tysk *Entgegen*.

For at markere at de to store grupper sidder modsat hinanden omkring dobbeltbindingen på 3. C starter navnet med med (3E)

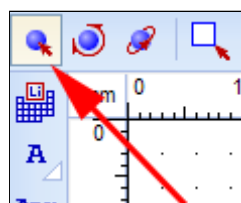


Nu skal forbindelsen "vrides" om dobbeltbindingen så de to store grupper kommer til at sidde på samme side.

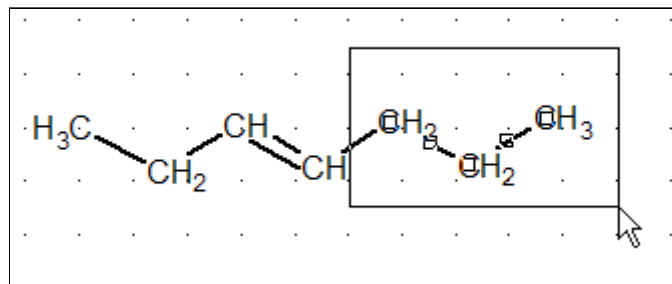
- **Tryk Undo** gentagne gange indtil alkenen ser ud som vist
- **Slet navnet**



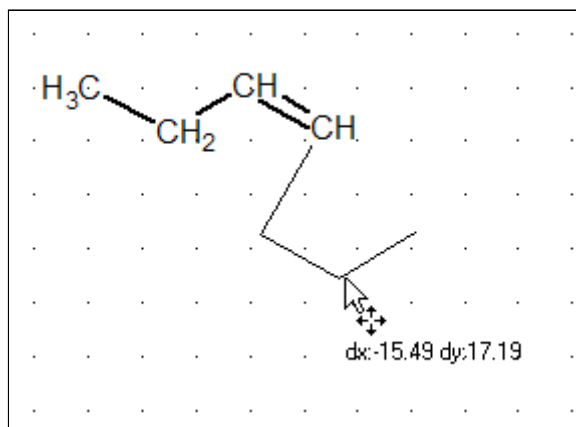
- **Tryk Select/Move**



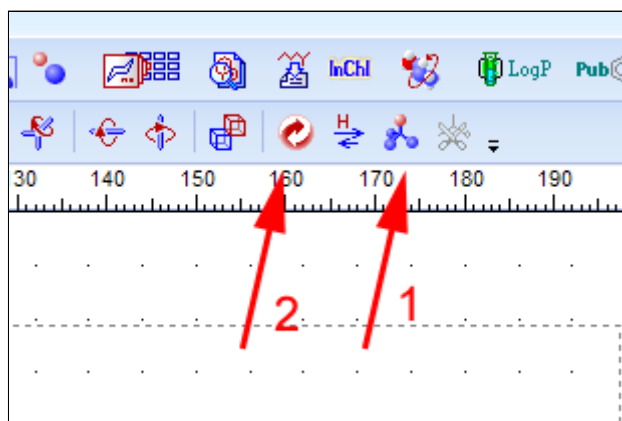
- **Marker** de **sidste 3 C-atomer**



- **Anbring markøren** på et C
- **Træk** nedad og til venstre så de to "store" grupper kommer tæt på hinanden

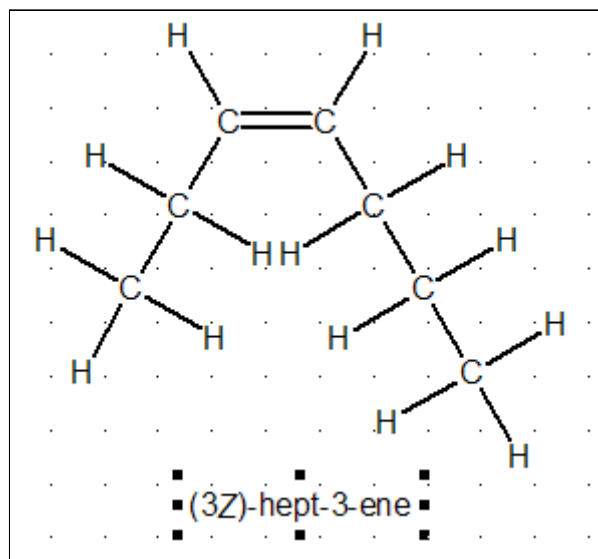


- **Tryk 3D-optimization** (1)
- **Tryk Clean Structure** (2)
- **Tast CTRL+Shift+I**

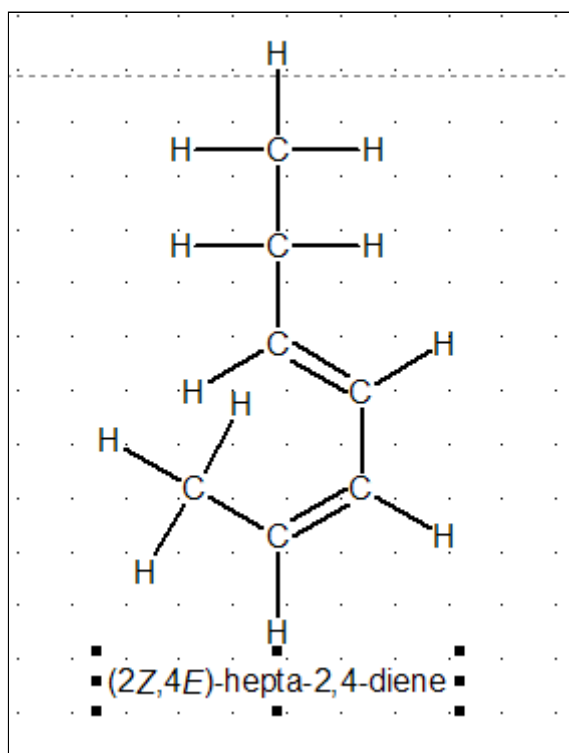


Sammen hedder på tysk **Zusammen**.

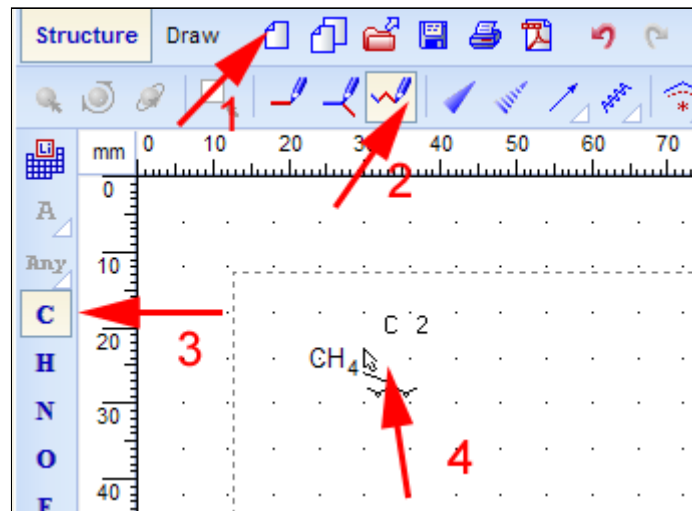
For at markere at de to store grupper sidder på samme side i forhold til dobbeltbindingen på 3. C starter navnet med med (3Z)



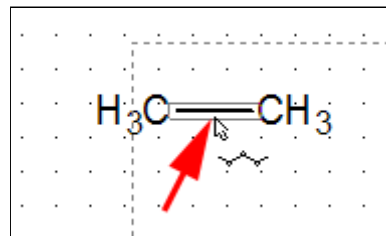
Prøv selv at tegne en alken med to eller flere dobbeltbindinger og undersøg navngivningen.



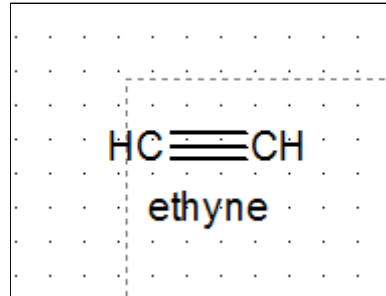
- **Tryk New Document** (1)
- **Tryk Draw Chains** (2)
- **Tryk C** (3)
- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 2** (4)
- **Slip musen**



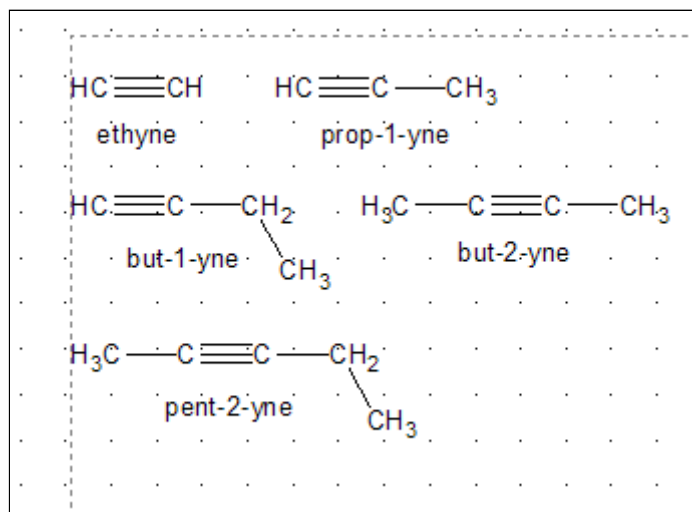
- **Klik 2 gange** på **bindingen** (Et af de tre Draw-værktøjer skal være aktivt)
- **Tast CTRL+Shift+I**



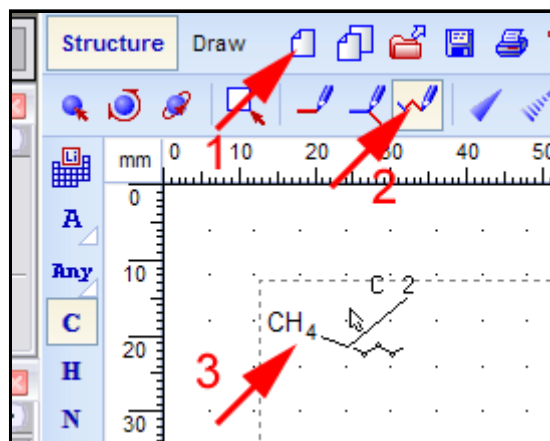
Her ses en alkyn (ethyn) og dens navn. Alkener navngives som alkaner, men med endelsen *-yne* (på danske *-yn*) i stedet for *-ane* (på dansk *-an*), og med en angivelse af triplebindingens placering - lige som hos alkaner.



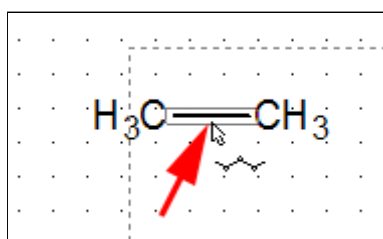
Prøv selv af tegne og navngive nogle eksempler!



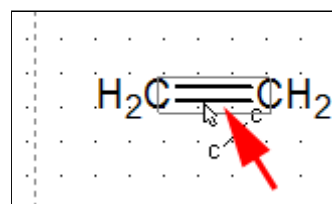
- **Tryk New Document** (1)
- **Tryk Draw Chains** (2)
- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 2** (3)
- **Slip musen**



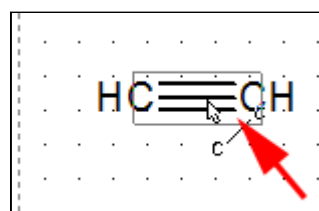
- **Klik** på **bindingen** (Et af de tre Draw-værktøjer skal være aktivt)



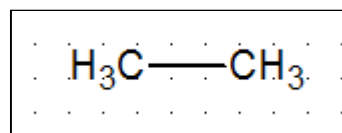
- **Klik** på **dobbeltbindingen** (Et af de tre Draw-værktøjer skal være aktivt)



- **Klik** på **triplebindingen** (Et af de tre Draw-værktøjer skal være aktivt)

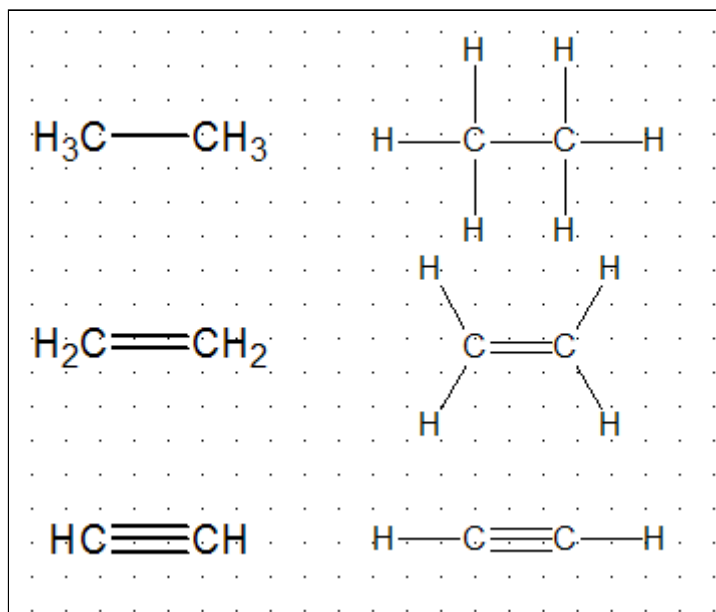


Så får du atter en enkeltbinding.



**ChemSketch lærer dig at et C-atom højst kan danne triplebindinger og altid fire bindinger i alt.**

Ved at bruge "3D Optimization" og "Clean Structure" kan du fremtille denne oversigt.



## Opgave

### Pentener

Tegn og navngiv alle alkener med 5 C-atomer og 10 H-atomer.  
(Husk "3D Optimization" og "Clean Structure")

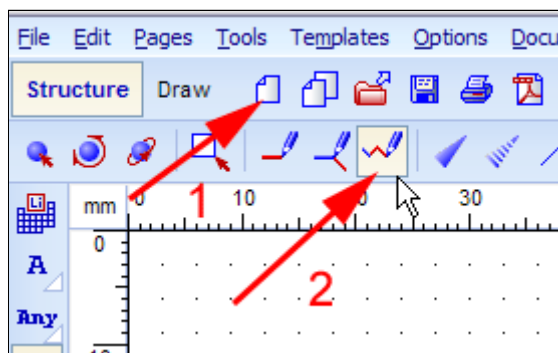
[Alkener Løsning](#)

## Alkoholer og carboxylsyrer

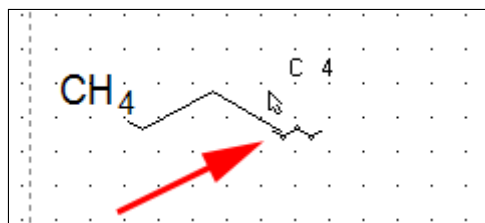
I denne øvelse lærer du

- At tegne strukturformler simple alkoholer og carboxylsyrer
- At navngive simple disse forbindelser

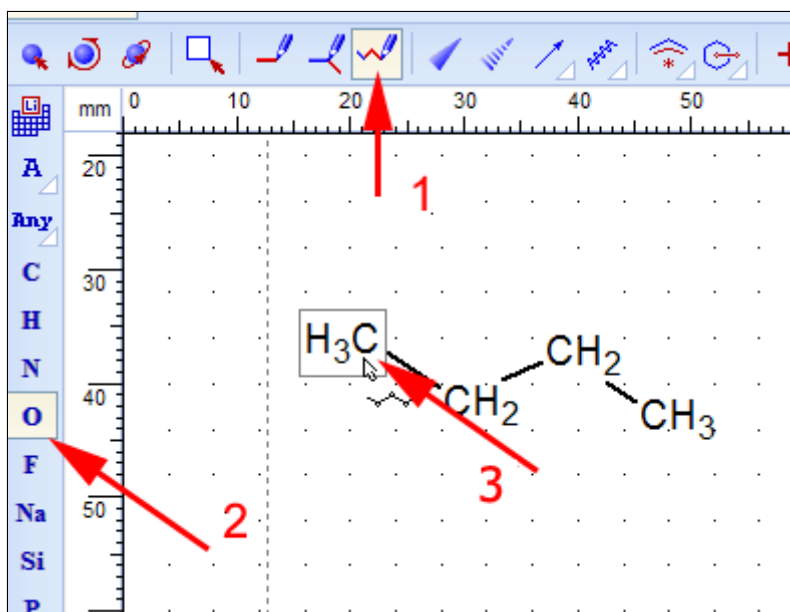
- **Opret** et nyt dokument (1)
- **Tryk Draw Chains** (2)



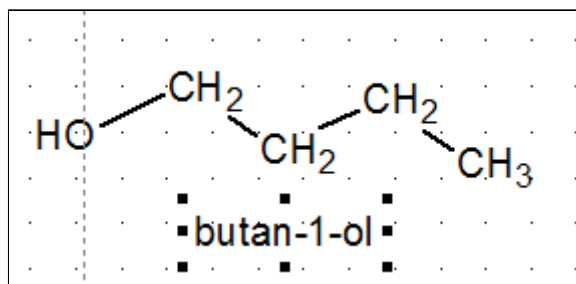
- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 4**
- **Slip musen**



- **Bemærk** at **Draw Chains** stadig er trykket ind (1)
- **Tryk Oxygen** (2)
- **Klik** på det første **C** (3)



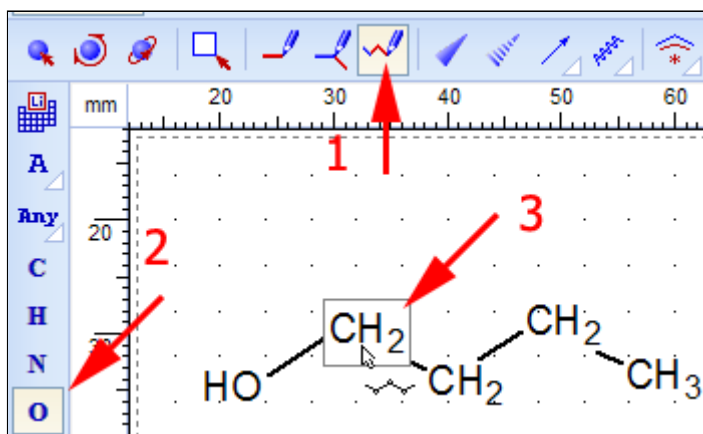
- **Tast** **CTRL+Shift+I**



**Navngivning på dansk:**

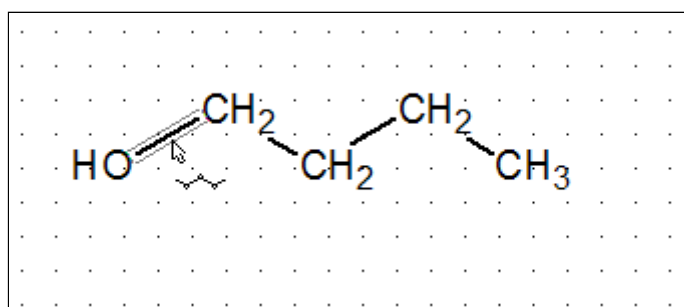
Alkoholer navngives som de tilsvarende alkaner, blot med endelsen -ol og angivelse af nummeret på det C-atom, der bære OH-gruppen.

- **Slet navnet**
- **Bemærk** at **Draw Chains stadig er trykket ind** (1)
- **Tryk Oxygen** (2)
- **Klik** på det **første C** (3)



- **Klik** på bindingen mellem **C** og **OH**

Herved fremkommer en dobbeltbinding til O og der forsvinder 2 H.

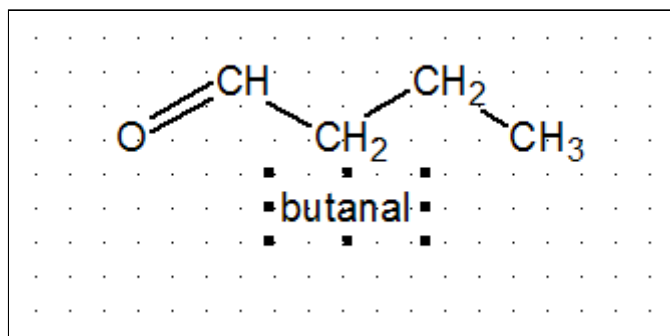


- **Tast CTRL+Shift+I**

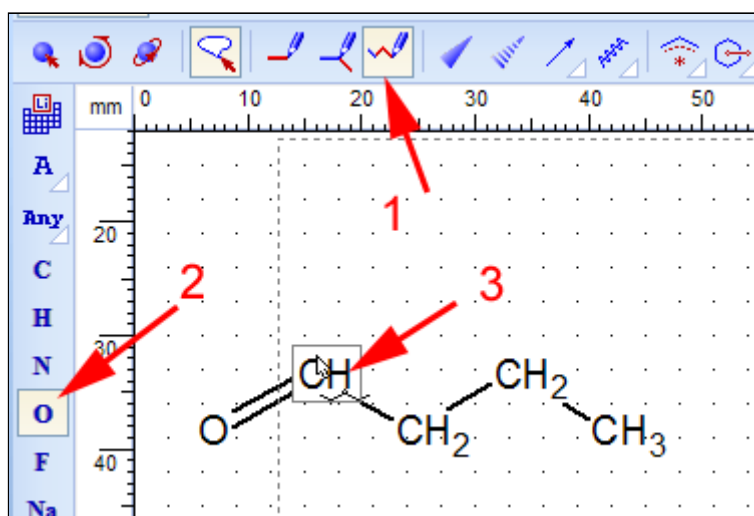
Dette "mellemprodukt" er et eksempel på en aldehyd. Aldehyder kendetegnes på gruppen **-CHO**.

Aldehyder navngives

som alkoholer, blot med endelsen -al i stedet for -ol.

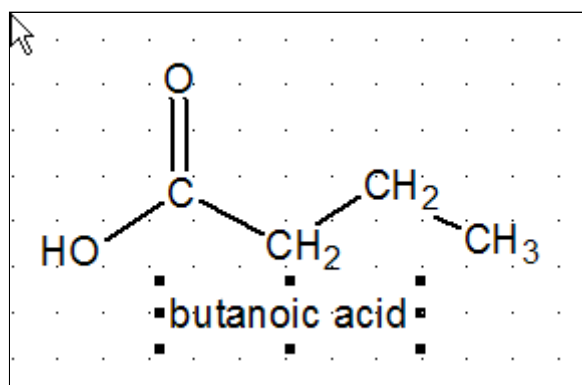


- **Slet navnet**
- **Bemærk** at **Draw Chains stadig er trykket ind** (1)
- **Tryk Oxygen** (2)
- **Klik** på det **første C** (3)
- **Tast CTRL+Shift+I**

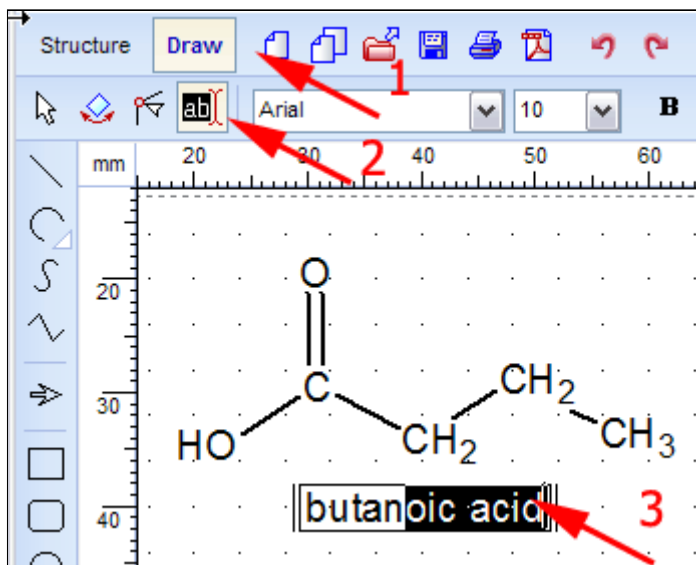


Navnet er naturligvis på engelsk. Det danske navn fås ved at fjerne **oic** og oversætte **acid** med **syre**

Arbejdet med tekster sker i ChemSketchs Draw-modul.

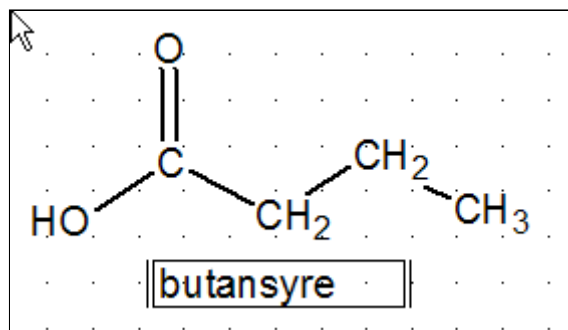


- **Tryk Draw** (1)
- **Tryk Edit tText** (2)
- **Marker oic acid** i tekstfeltet (3)
- **Overskriv** med **syre**



Hermed har du det danske navn for  $C_3H_7COOH$ , der også har trivialnavnet smørsyre.

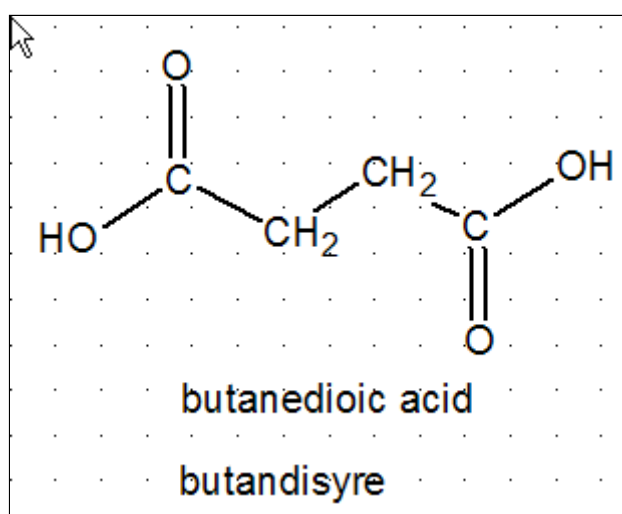
Smørsyre lugter meget ubehagelig og findes i bl.a. harsk smør og fordærvede ananas.



### Navngivning på dansk:

Carboxylsyrer navngives som de tilsvarende alkaner, blot med endelsen -syre.

Hvis der er to syregrupper kan syre navngives således:



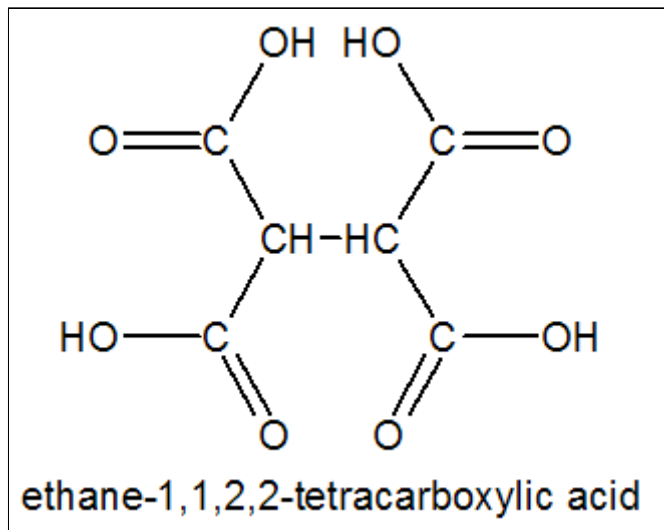
Hvis der er mere end to syregrupper anvendes en alternativ

navngivning.

Her opfattes forbindelsen som en ethan, som bærer 4 - COOH (carboxylgrupper).

På dansk bliver navnet:

ethan-1,1,2,2-tetracarboxylsyre



### Nogle Butan- og Propan-oler

Tegn og navngiv alle mulige ikke ringsluttede butanoler med én OH-gruppe (Husk "Clean Structure")

Tegn og navngiv alle mulige ikke ringsluttede propanoler med to OH-grupper (Husk "Clean Structure")

Tip: Aldrig to OH-grupper på samme C-atom i stabile forbindelser

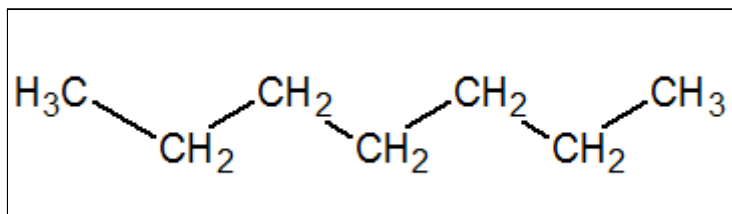
[Nogle Butan- og Propan-oler Løsning](#)

## Add/Remove Explicit Hydrogen

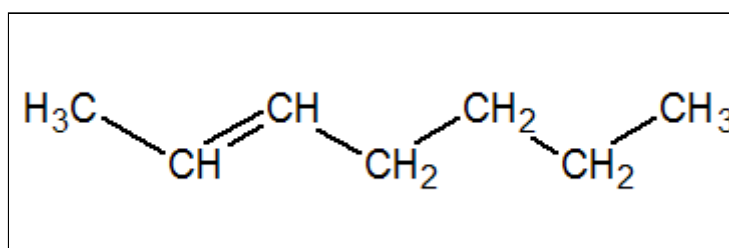
I denne øvelse lærer du at vise eller skjule H som selvstændige atomer.

Når du 3D-optimerer en strukturformel er det ikke længere muligt at tilføje nye grupper og dobbelt- eller triplebindinger. Derfor er det muligt at skifte mellem visning eller ikke-visning af eksplicite hydrogenatomer.

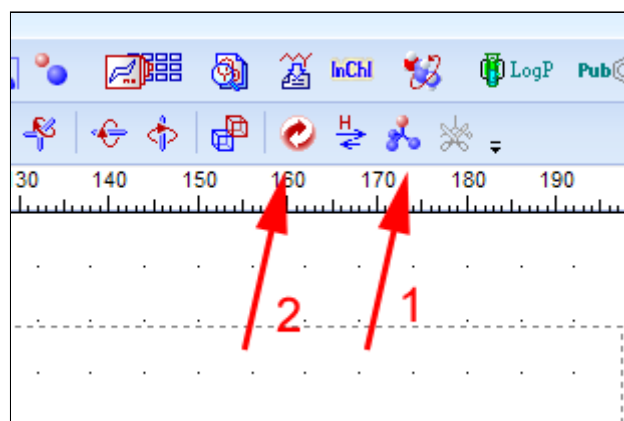
- **Tegn Heptan**



- **Indsæt en dobbeltbinding efter C2**

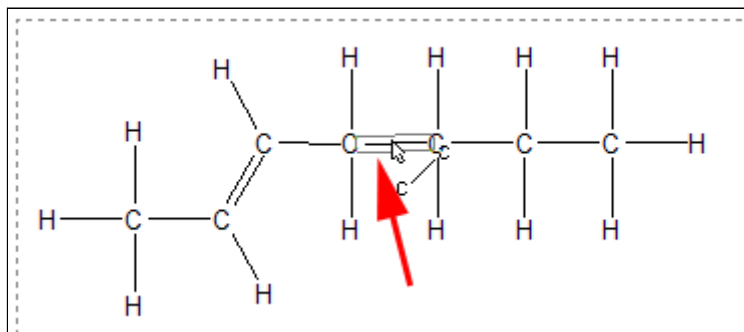


- **Tryk 3D-optimization (1)**
- **Tryk Clean Structure (2)**

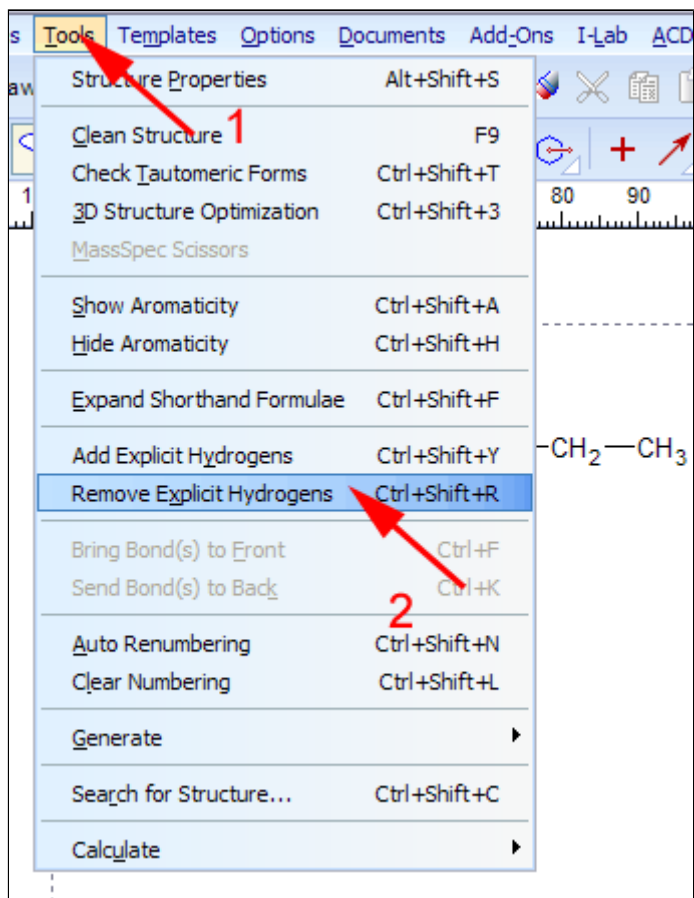


- **Vælg** et af de tre bindingsværktøjer
- **Prøv** at indsætte en dobbeltbinding

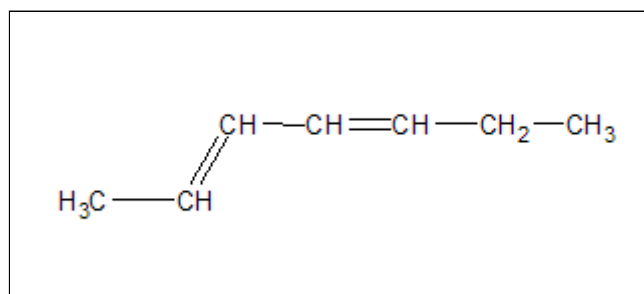
Det lader sig ikke gøre!



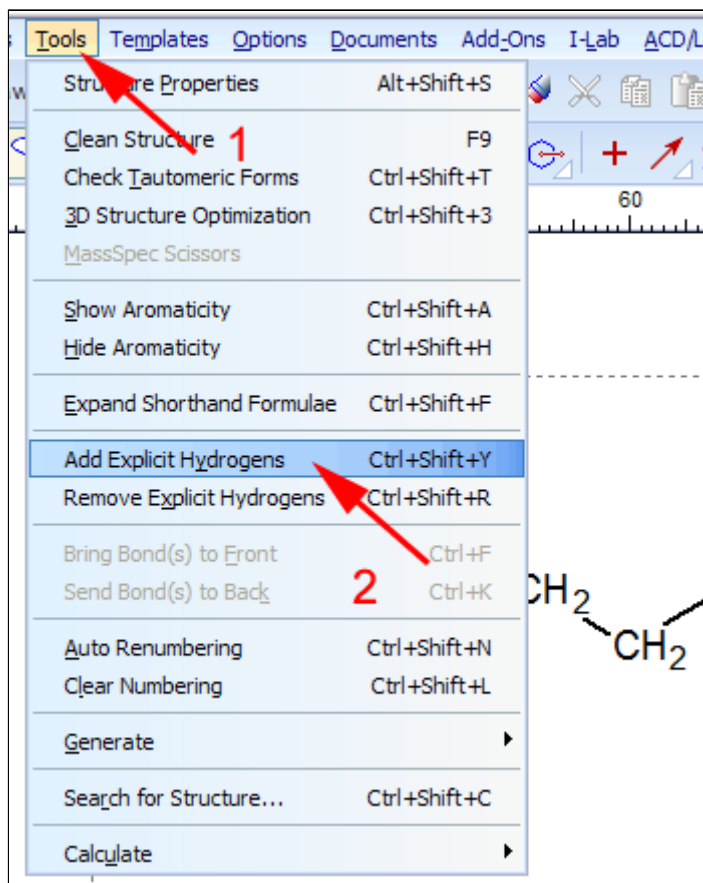
- **Tryk Tools (1)**
- **Vælg Remove Explicit Hydrogens (2)**



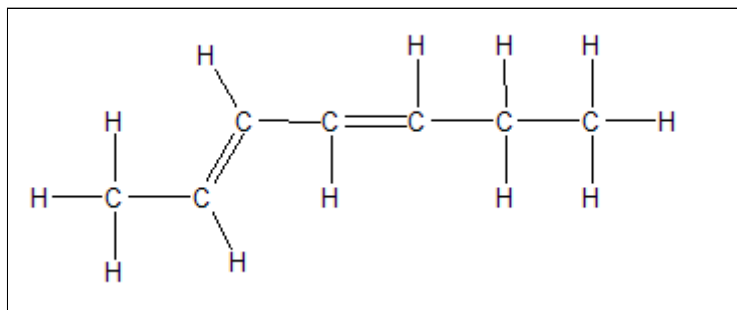
Nu kan du indsætte en dobbeltbinding. Og for den sags skyld sidegrupper mv.



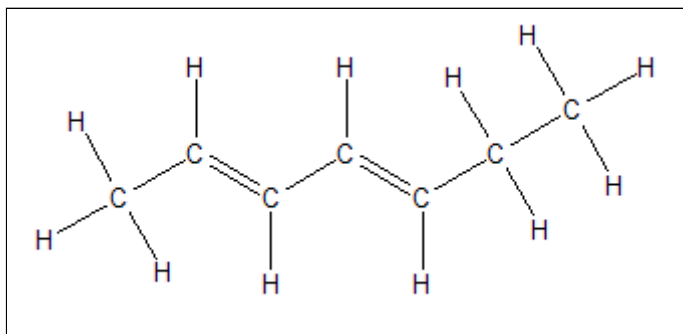
- **Tryk Tools** (1)
- **Vælg Add Explicit Hydrogens** (2)



Nu ses hvert H som selvstændigt atom.



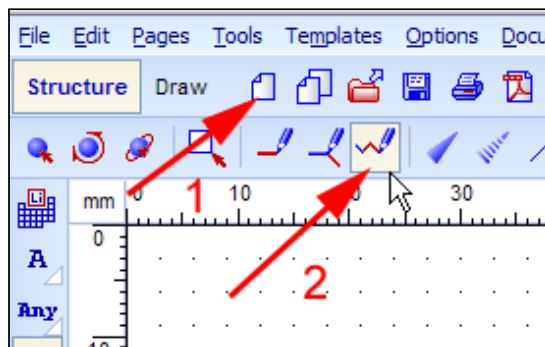
- **Tryk Clean Structure** et par gange



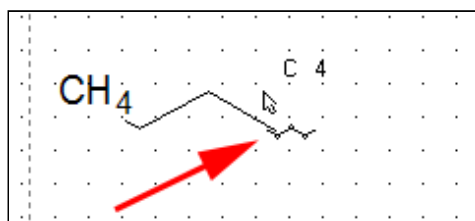
## Brug radikaler

I denne øvelse lærer du at sætte sidegrupper (radikaler) på molekyler på en nem måde.

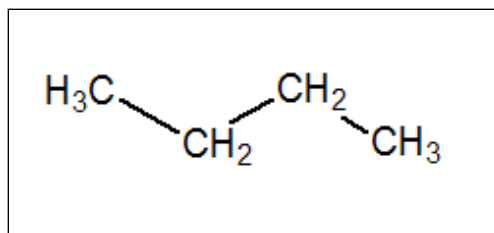
- **Opret** et nyt dokument (1)
- **Tryk Draw Chains** (2)



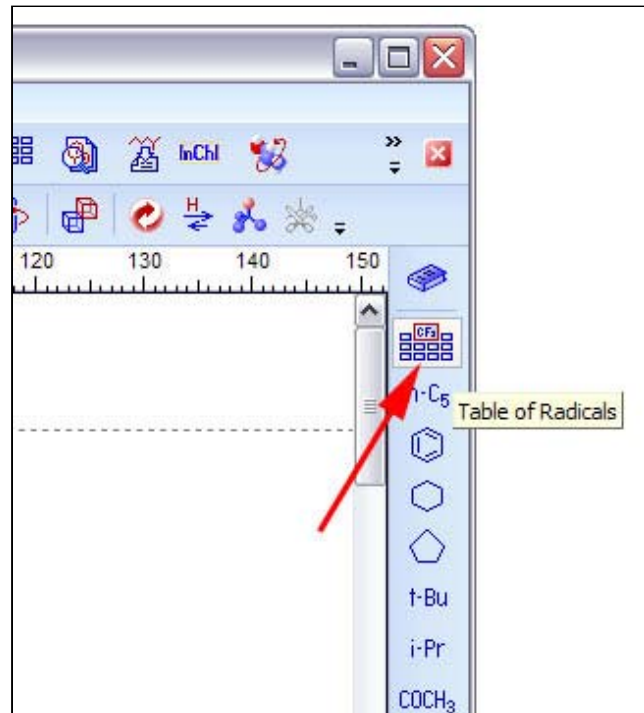
- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 4**
- **Slip musen**



Så har du butan.

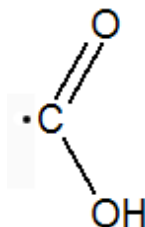
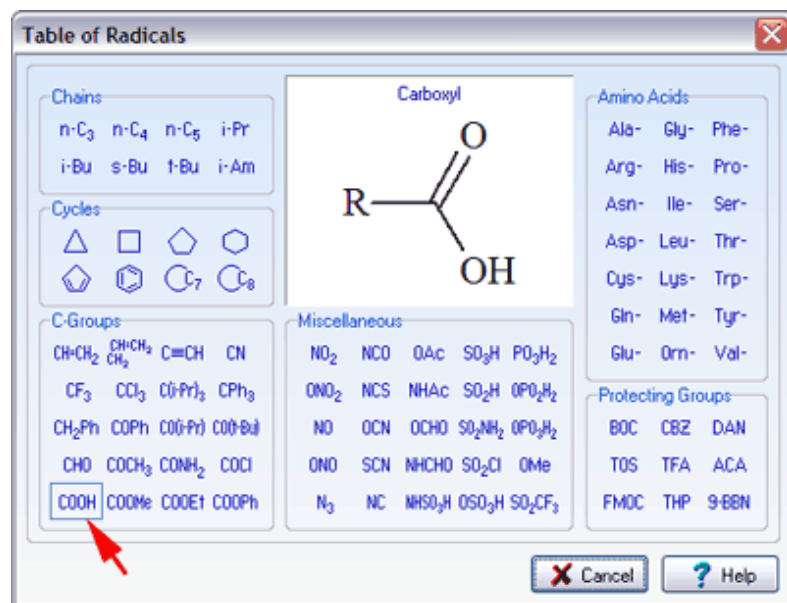


- **Tryk Table of Radicals** i programvinduet yderst til højre



Et radikal er partikel der stammer fra et molekyle, hvor en enkeltbinding er brækket midt over. Eller sagt lidt mere præcist - en partikel med en uparret elektron.

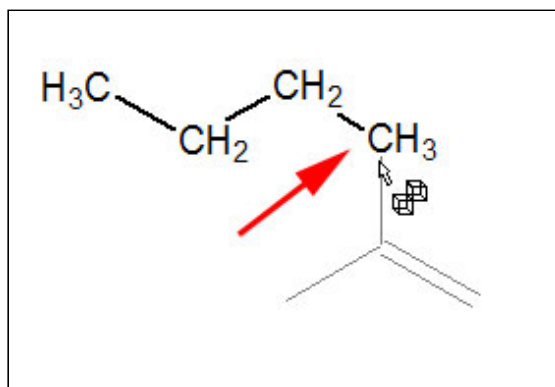
Eftersom en enkeltbinding består af to elektroner er et radikal derfor kendetegnet ved at det har en uparret elektron. Sådanne forbindelser er ustabile og prøver straks at danne stabile forbindelser ved at reagere med andre stoffer.



- **Tryk COOH**

Markøren skifter udseende og der vises en kontur af radikalet.

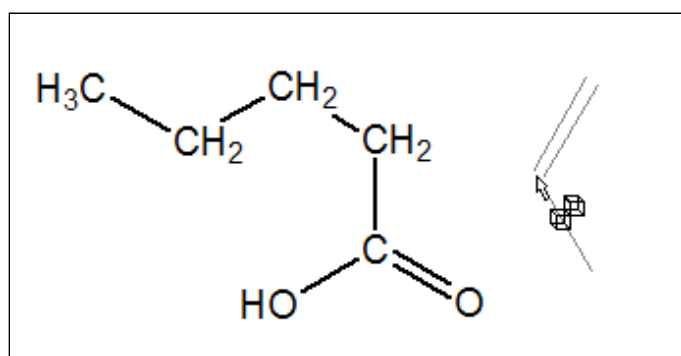
- **Klik på det C-atom hvor radikalet skal erstatte et H**



Markøren bærer stadig konturen af radikalet.

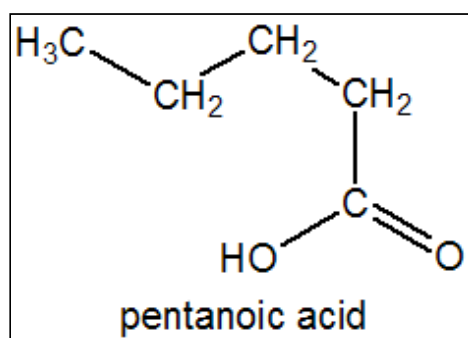
- **Højreklik**

Markøren bliver normal igen



- **Tast CTRL+Shift+I**

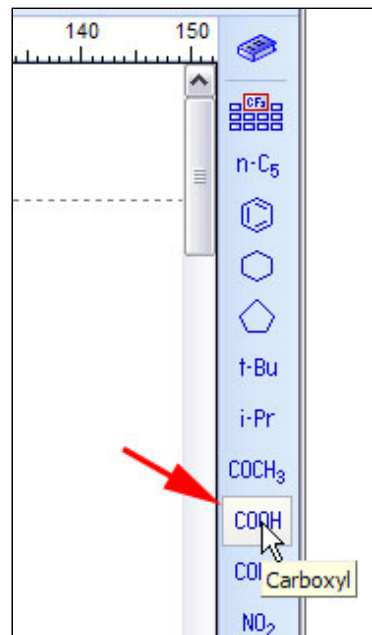
Butan er blevet til pentansyre



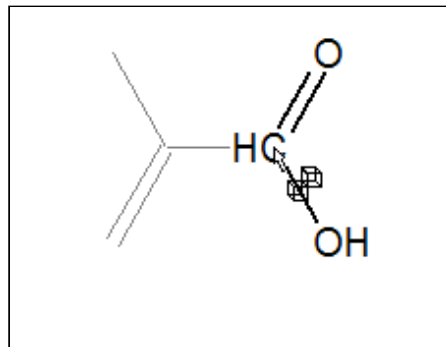
Du kan også fremstille molekyler ved at sætte to radikaler sammen.

- **Tryk COOH** i programvinduet yderst til højre

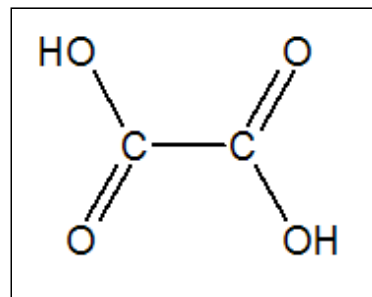
Bemærk at radikaler



- **Klik i dokumentet**
- **Klik på C-atomet**
- **Højreklik**



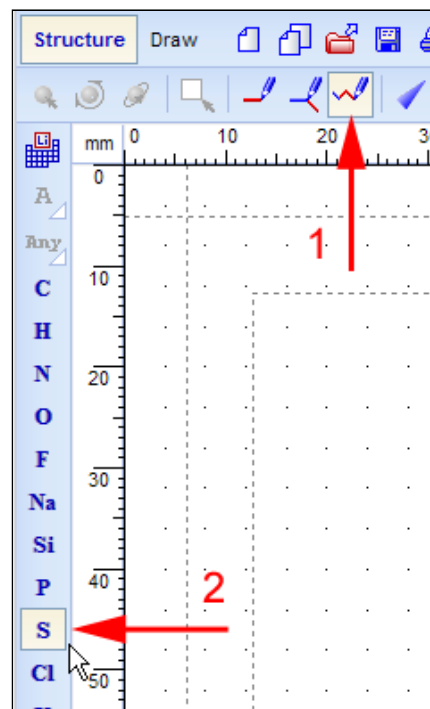
To carboxyl-radikaler giver ethandisyre



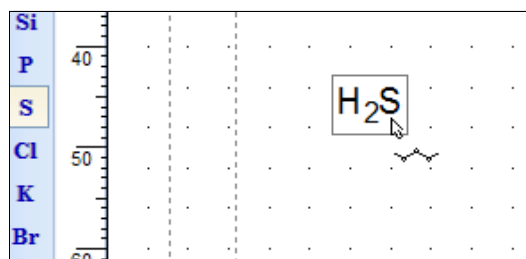
## Uorganiske molekyler

I denne øvelse lærer du at bygge nogle almindelige uorganiske molekyler.

- **Tryk Draw Chains** (1)
- **Tryk Sulfur** (2)

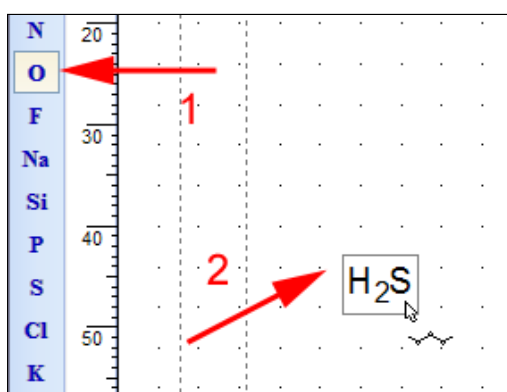


- **Klik** i dokumentet

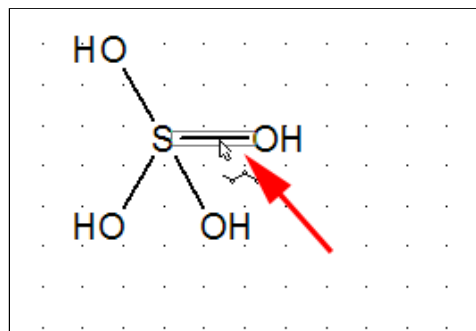


- **Tryk Oxygen** (1)
- **Klik** 4 gange direkte på **S** (2)

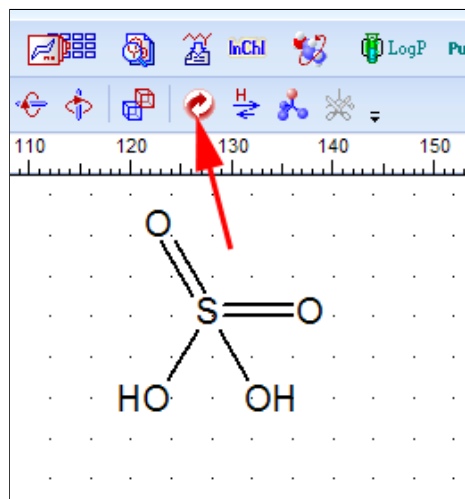
Herved fremkommer en forbindelse  $H_4SO_4$  som ikke findes i virkeligheden. Den skal laves om til  $H_2SO_4$ .



- **Klik** én gang på to af bindingerne, så der fremkommer to dobbeltbindinger

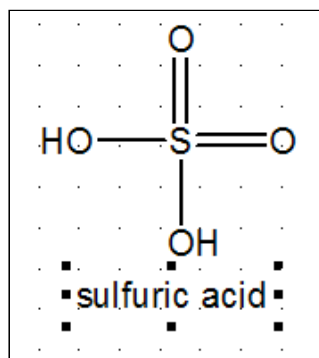


- **Tryk Clean Structure**



- **Tast CTRL+Shift+I**

På dansk: Svovlsyre



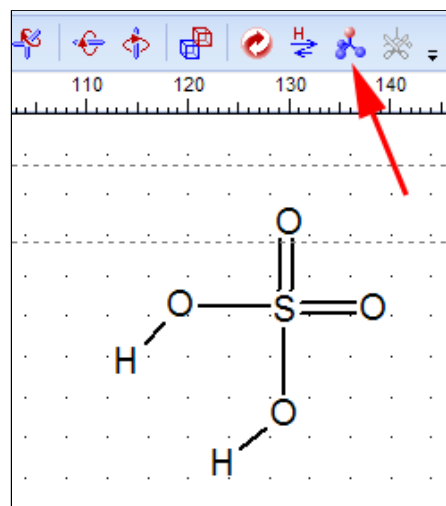
- **Tryk 3D-optimization**

Som bekendt består en enkeltbinding af ét elektronpar.

Vi ser at S danner 2 dobbeltbindinger og 2 enkeltbindinger - dvs. at S er omgivet af 12 elektroner.

S og O står begge i 6. hovedgruppe. Det betyder at de har 6 valenselektroner. H står i 1. hovedgruppe og har 1 valenselektron. Svovlsyre har derfor 32 valenselektroner eller 16 elektronpar.

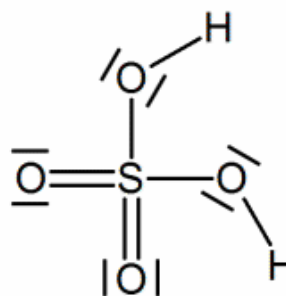
Den viste forbindelse viser 8 elektronpar.



De resterende valenselektroner er ensomme elektronpar (Lonepairs) på O som ikke indgår i bindinger.

Ved at bruge ChemSketch's tegnemodul kan man redegøre for alle valenselektroner i svovlsyre som vist her.

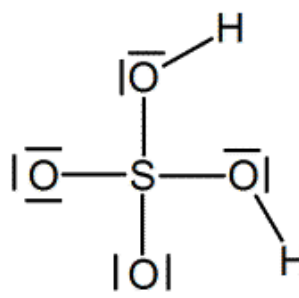
Den viste struktur strider mod ædelgasreglen (oktetreglen).



#### Ædelgasreglen:

Alle atomer i hovedgrupperne stræber efter at opnå samme elektronstruktur som nærmeststående (i periodesystemet) ædle gas.

Hvis man skal tegne svovlsyre efter ædelgasreglen, skulle molekylet se ud som vist her.



Hvad er nu rigtigt?

ChemSketch bruger [VSEPR-modellen](#) til at beregne molekylers struktur. Denne model går kort fortalt ud på molekylet fordeler sine valenselektroner, så den samlede indbyrdes frastødning mellem elektronpar bliver mindst mulig. Denne model har vist velegnet til at forudsige molekylers rumlige opbygning.

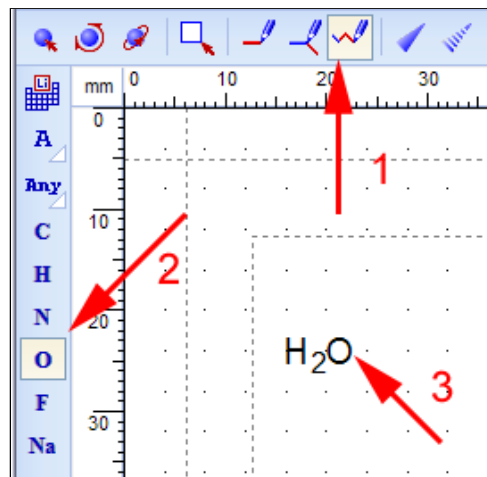
Husk at naturvidenskabelige modeller blot er beskrivelser af fænomener baseret på kvalificerede forestillinger.

Oven for fremstillede du en strukturformel for svovlsyre ud fra S ( $H_2S$ ).

Nu skal du fremstille  $\text{HNO}_3$  ud fra O ( $\text{H}_2\text{O}$ ).

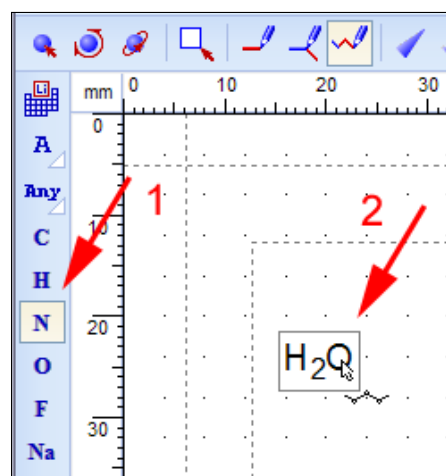
- **Tryk Draw Chains** (1)
- **Tryk Oxygen** (2)
- **Klik** i dokumentet (3)

Herved fremkommer formlen for vand

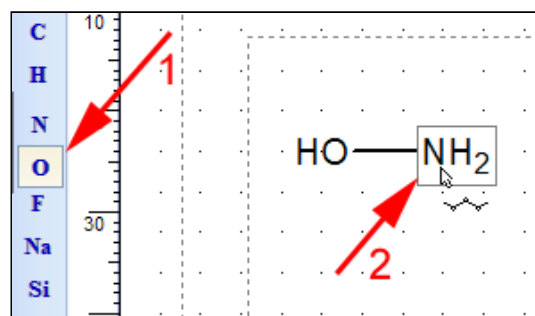


- **Tryk Nitrogen** (1)
- **Klik** 1 gang direkte på O (2)

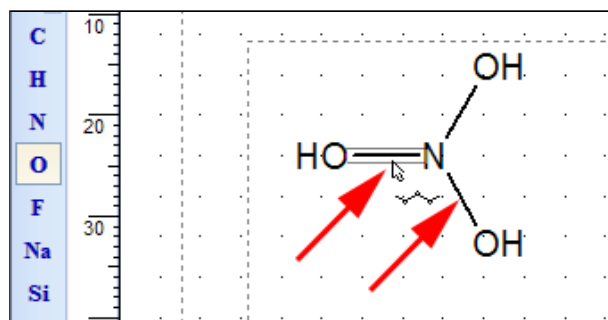
Herved fremkommer en forbindelse  $\text{H}_4\text{SO}_4$  som ikke findes i virkeligheden. Den skal laves om til  $\text{H}_2\text{SO}_4$ .



- **Tryk Oxygen** (1)
- **Klik** 2 gange direkte på N (2)



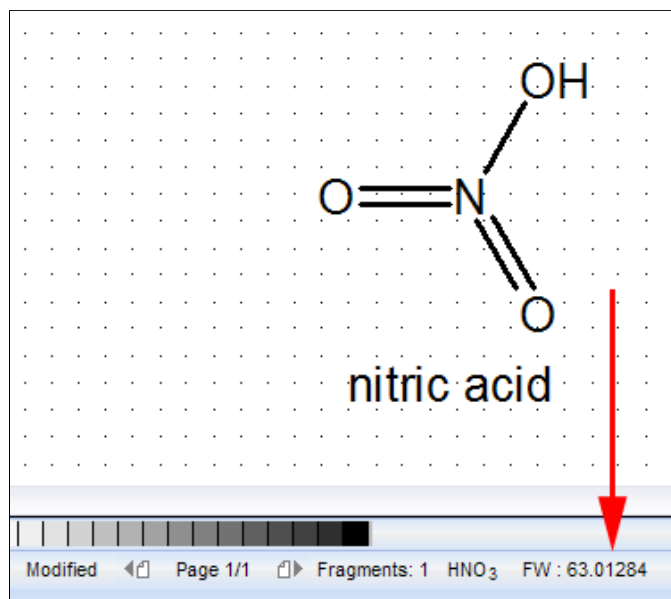
- **Klik** én gang på to af bindingerne, så der fremkommer to dobbeltbindinger



- **Tast CTRL+Shift+I**

På dansk: Salpetersyre

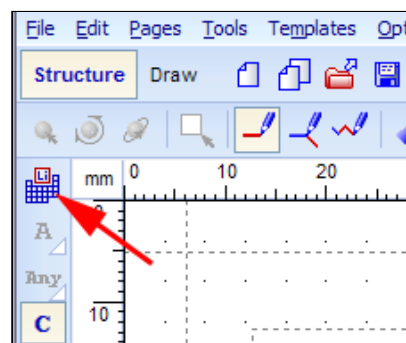
Bemærk i øvrigt, at ChemSketch beregner FW, Formula Weight - det vi normalt kalder molarmassen, M med enheden g/mol.



Undertiden kan man andre atomer, end de der findes i Tool Bar.

- **Tryk Periodic Table of the Elements**

Herved fremkommer periodesystemet som vist herunder.



- **Tryk det ønskede grundstof (1)**
- **Tryk OK (2)**

Periodic Table of Elements

1	<b>I Iodine 53</b> Mass: 126.90447 Valence: 1,3,5,7 Electron configuration: -18-18-7																18	
H	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg								
		*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	D
		**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	T

\*  \*\*  ↑

General | NMR | Mass | Coloration

Characters : rhombic violet-black cryst., metal lustrous  
 Discoverer : 1811, B.Courtois, France  
 Name Origin : from 'iodes' (Greek) - violet  
 Atomic Radius, A : 1.38      Ionization Potential, kJ/mol : 1008      Density, g/cm<sup>3</sup> : 4.9  
 Electronegativity : 2.66      Electron Affinity, kJ/mol : 295.2      Melting Point, K : 387  
 Boiling Point, K : 458

Det valgte vises nederst i Tool Bar

## HIO<sub>4</sub>

Tegn strukturformlen for HIO<sub>4</sub>

Hvad er navnet?

[HIO<sub>4</sub> Løsning](#)

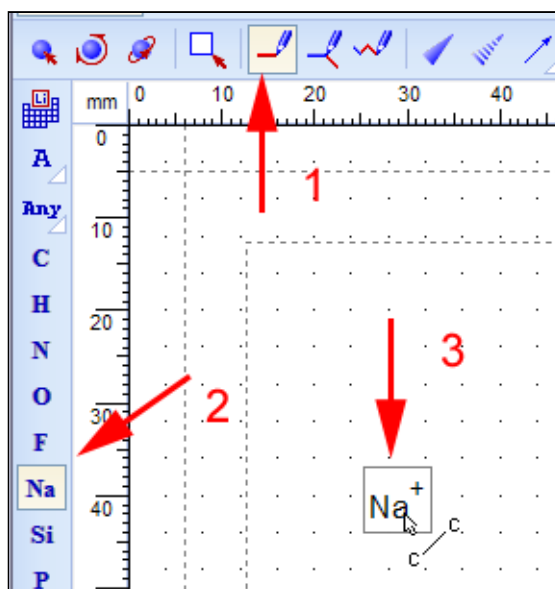
## Ioner og salte

I denne øvelse lærer du at:

- Tegne formler for ioner
- Navngive salte (på engelsk)

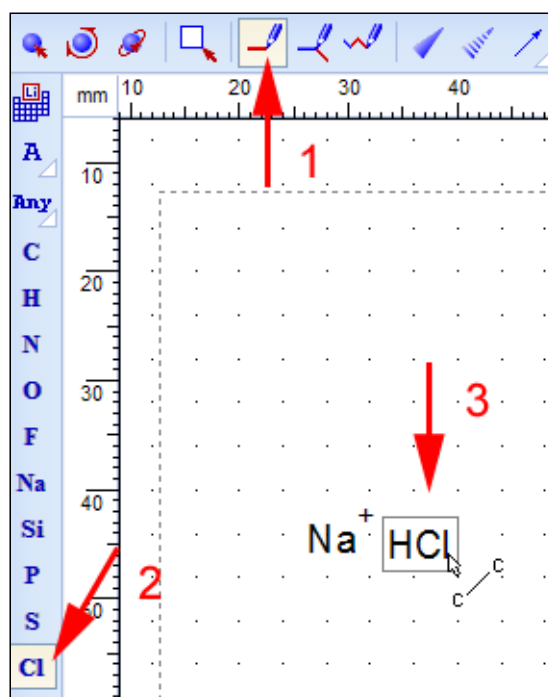
- **Tryk Draw normal** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (1)
- **Tryk Na** (2)
- **Klik** i dokumentet (3)

Herved fremkommer  $\text{Na}^+$   
(i ChemSketch indsættes metaller som ioner i deres lavest oxidationstilstand)



- **Tryk Draw normal** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (1)
- **Tryk Cl** (2)
- **Klik** i dokumentet (3)

Herved fremkommer HCl  
(i ChemSketch indsættes ikke-metaller i deres lavest valens som brintforbindelser)

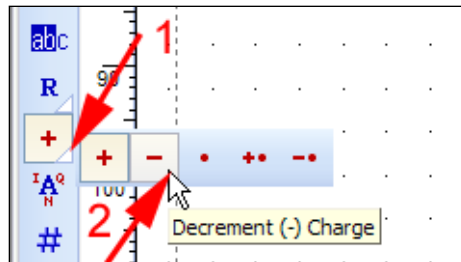


- **Tryk** på den lille **hvide trekant** ved + i værktøjsbjælken (1)

Herved fremkommer en

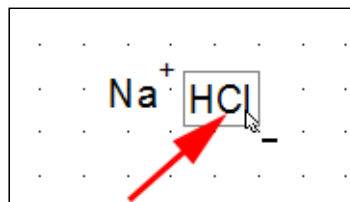
miniværktøjsbjælke

- **Tryk** - (2)



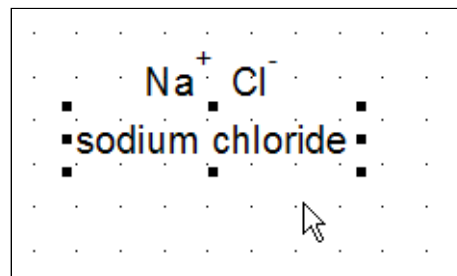
- **Klik** på HCl

Herved fremkommer  $\text{Cl}^-$



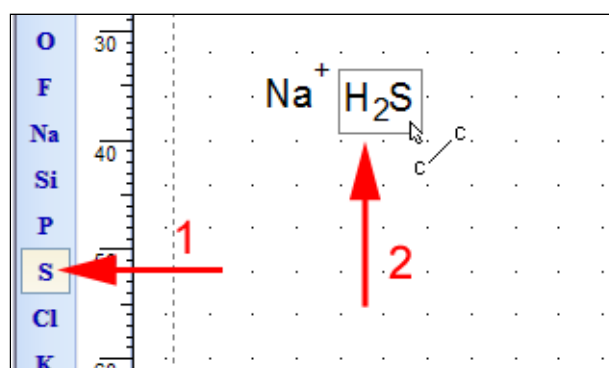
- **Tast**  
**CTRL+Shift+I**

Herved navngives forbindelsen. Som ved carbonhydriderne er det nødvendigt at fjerne det sidst e i anionen for at få dens danske betegnelse.



- **Slet sodium chloride**
- **Slet  $\text{Cl}^-$**

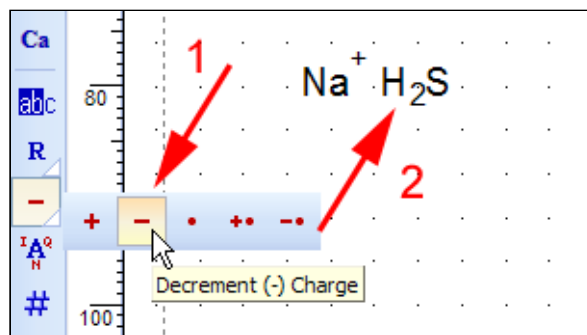
- **Tryk S** (1)
- **Klik** i dokumentet (2)



- **Tryk** på den lille **hvide trekant** ved - i værktøjsbjælken
- **Tryk** - (1)
- **Klik** på  $\text{H}_2\text{S}$  2 gange (2)

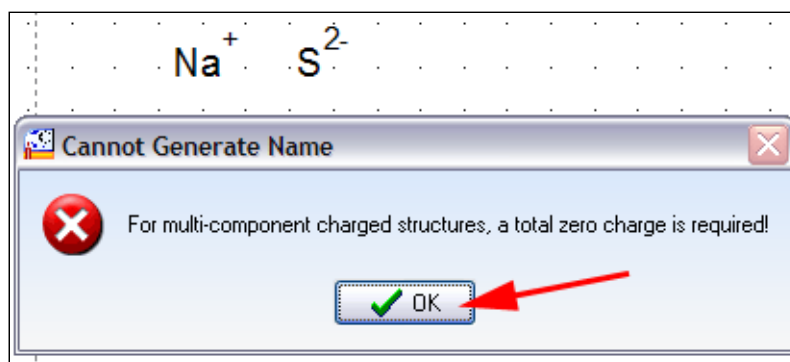
Herved fremkommer sulfidionen  $S^{2-}$

- **Tast CTRL+Shift+I**



Her lærer vi atter lidt kemi.

- **Tryk OK**

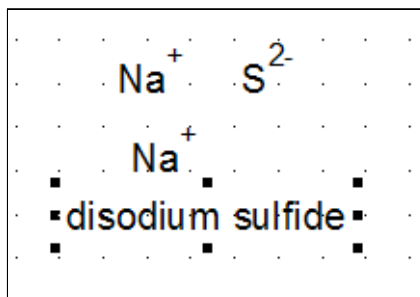


- **Indsæt** endnu en  $Na^+$
- **Tast CTRL+Shift+I**

Hvis navnet skulle oversættes til dansk ville det blive til dinatriumsulfid.

Det er ikke helt korrekt. Man plejer ikke at angive antallet af metalioner, da dette er underforstået ud fra partiklernes ladninger. Navnet er derfor **natrumsulfid**.

Prøv at søge disodium sulfide på [Wikipedia](#)



## $MnO_4^-$

Tegn strukturformlen for  $MnO_4^-$

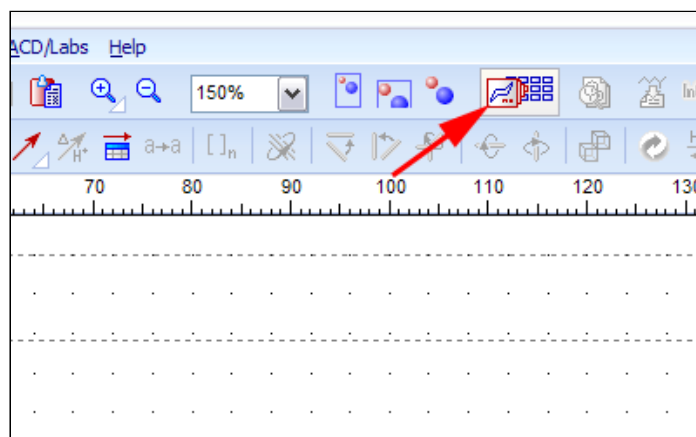
Tip: Brug +værktøjet til at justere ladningen på Mn og -værktøjet til at justere ladningen på O

[MnO4- Løsning](#)

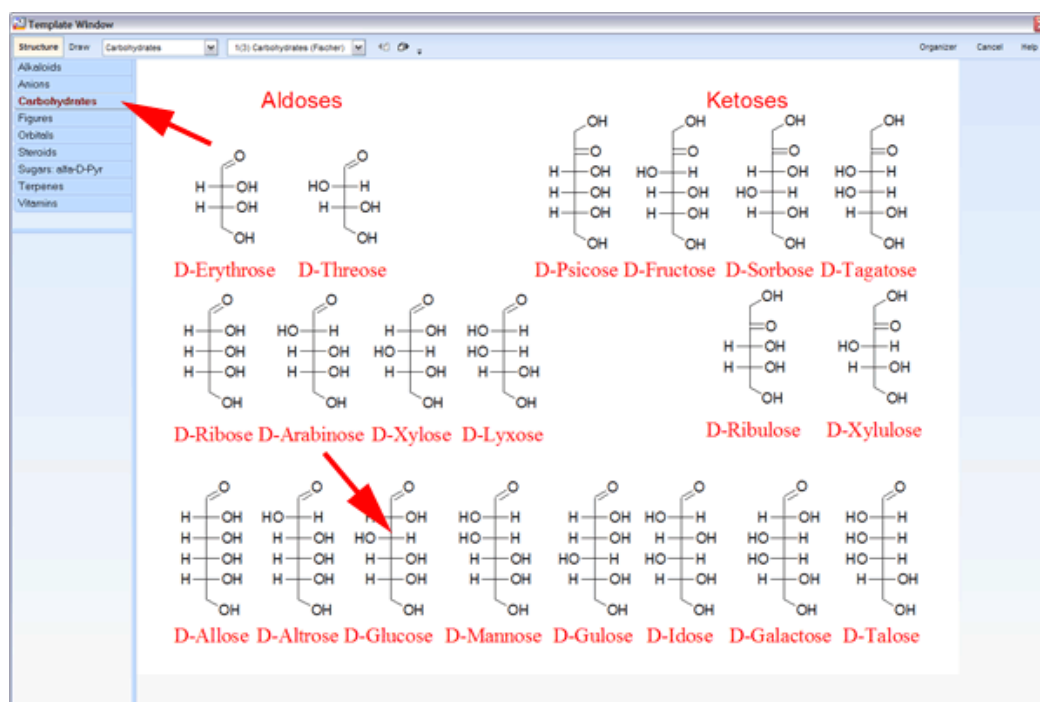
## Brug Templates

I denne øvelse lærer du at benytte biblioteket af færdige molekyler og ioner.

- **Tryk Template Window**

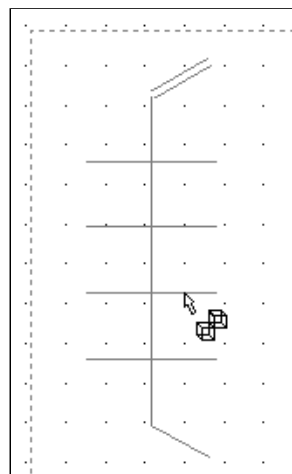


- **Tryk Carbohydrates**
- **Tryk D-Glucose**



Markøren skifter udseende og der vises en kontur af molekylet.

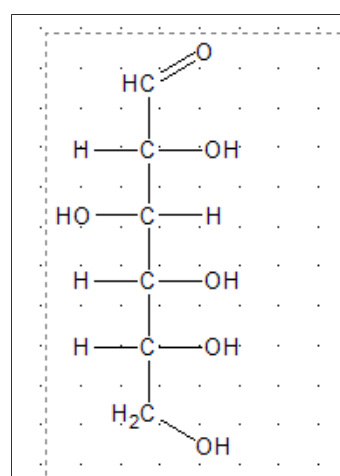
- **Klik** i dokumentet



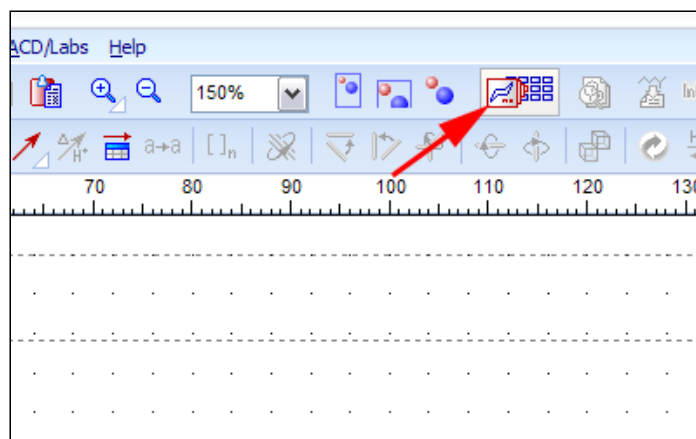
Her er formelen for D-glucose

- **Højreklik**

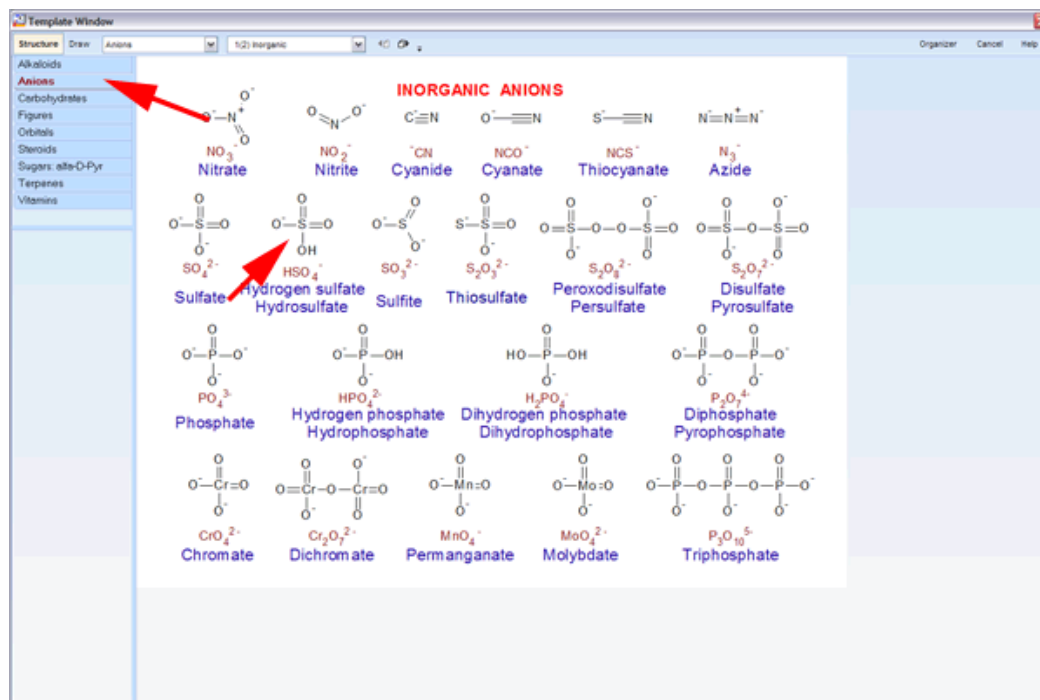
Markøren bliver normal igen



- **Tryk Template Window**

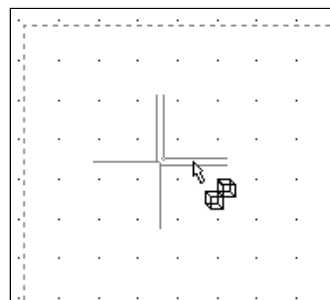


- **Tryk Anions**
- **Tryk Hydrogensulfate**



Markøren skifter udseende og der vises en kontur af ionen.

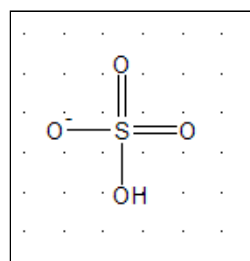
- **Klik** i dokumentet



Her er formelen for Hydrogensulfate

- **Højreklik**

Markøren bliver normal igen



## Reaktionsskemaer

I dette modul lærer du at opskrive og afstemme reaktionsskemaer ved brug af ChemSketch. Metoden er meget visuel og giver et godt indtryk af de kvantitative forhold.

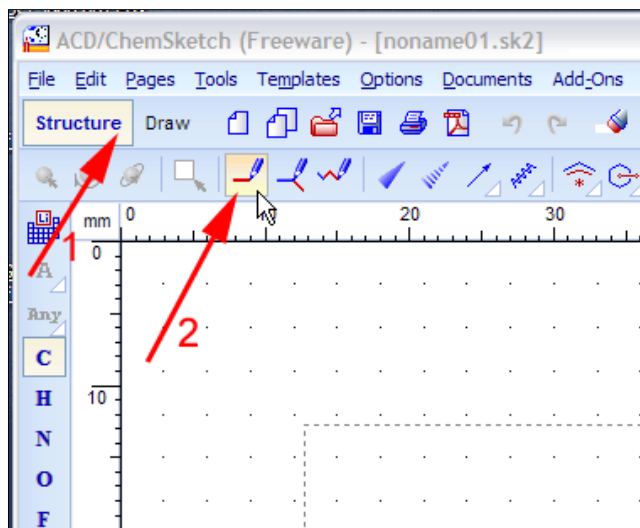
Her gennemgås principperne med bruttoreaktionen for fotosyntesen som eksempel.

Du ved, at reaktanterne er carbondioxid og vand og produkterne er glukose og oxygen.

Endvidere gælder for afstemning af reaktionsskemaer, at der skal være lige mange af de forskellige slags atomer på hver side af reaktionspilen.

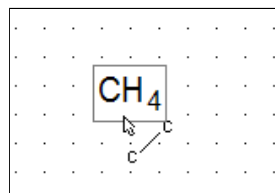
Først tegnes reaktanterne - du starter med  $\text{CO}_2$

- **Tryk Structure** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (1)
- **Tryk Draw normal** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (2)



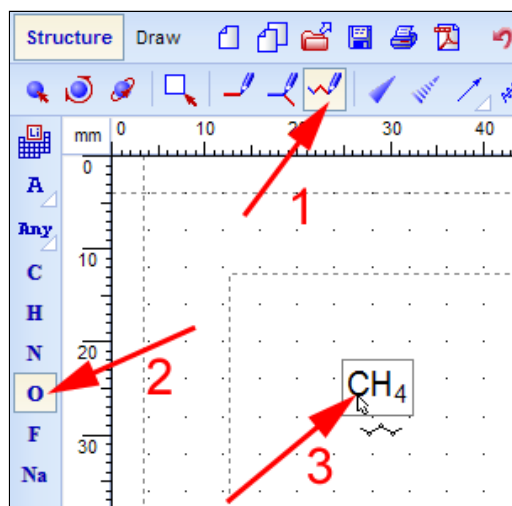
- **Klik i dokumentet**

Nu har du methan som udgangspunkt for at tegne carbondioxid.

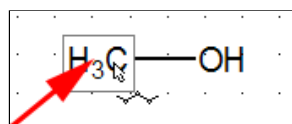


- **Tryk Draw Chains F** (1)
- **Tryk O** (2)
- **Klik på  $\text{CH}_4$**  (3)

Herved fremkommer methanol.

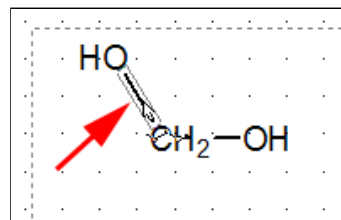


- **Klik igen på  $\text{H}_3\text{C}$**



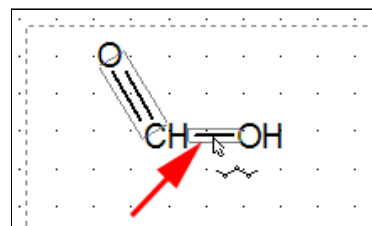
- **Klik på en binding**

Nu fremkommer en dobbeltbinding

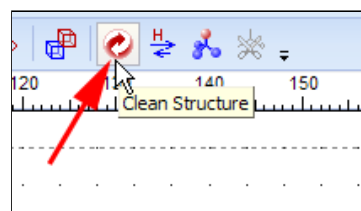


- **Klik på den anden binding**

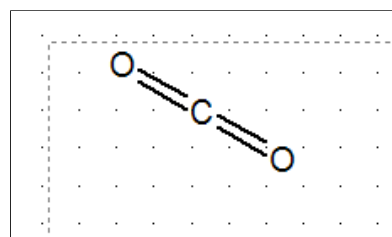
Nu har du  $\text{CO}_2$ , men molekylet er underlig vinklet. Med lidt mere kendskab til kemi ved man, at molekylet er lineært.



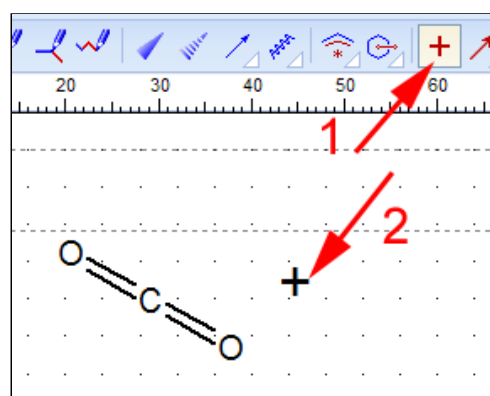
- **Tryk Clean Structure**



Her ses at molekylet er lineært.

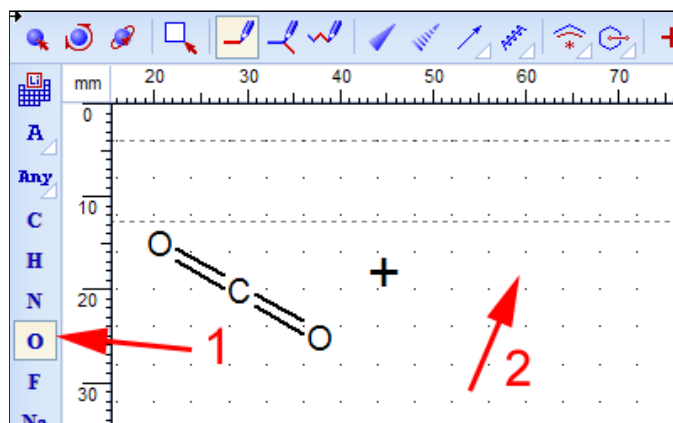


- **Tryk Reaction Plus (1)**
- **Klik i dokumentet (2)**

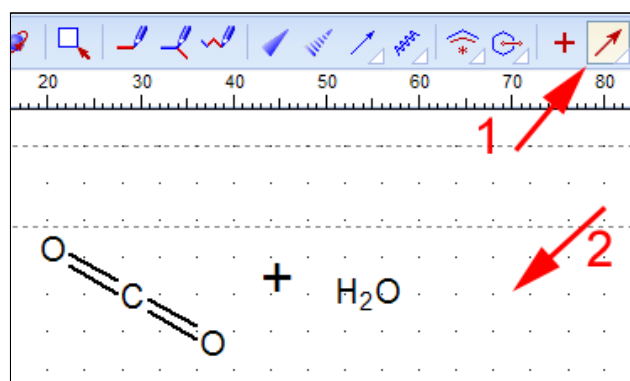


- **Tryk O (1)**
- **Klik i dokumentet (2)**

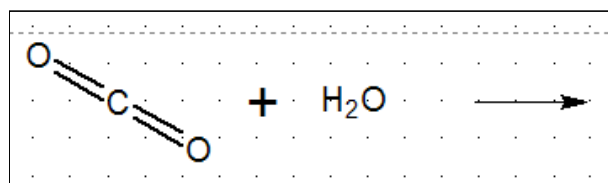
Herved fremkommer  $\text{H}_2\text{O}$ .



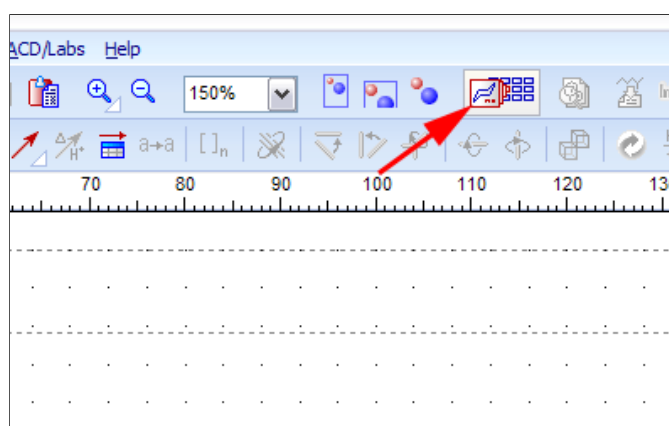
- **Tryk Reaction Arrow** (1)
- **Klik** i dokumentet (2)



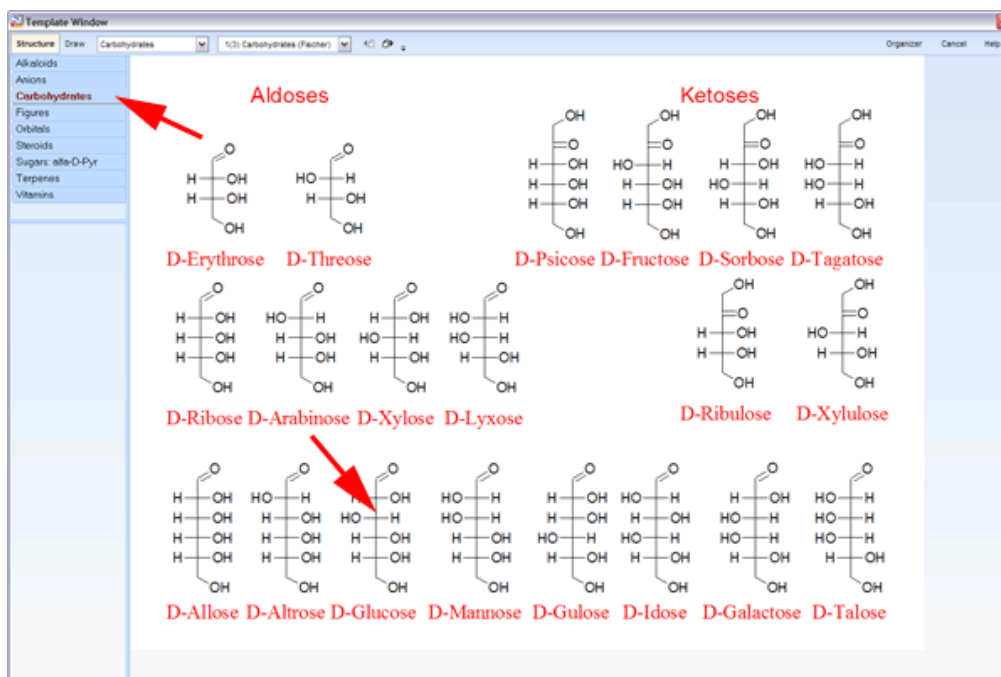
Så har du en reaktionspil.



- **Tryk Template Window**

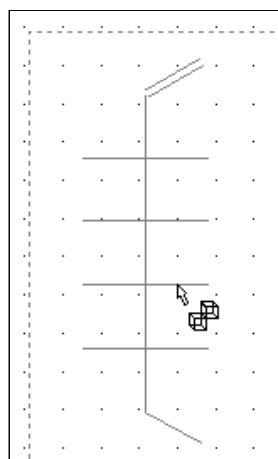


- **Tryk Carbohydrates**
- **Tryk D-Glucose**



Markøren skifter udseende og der vises en kontur af molekylet.

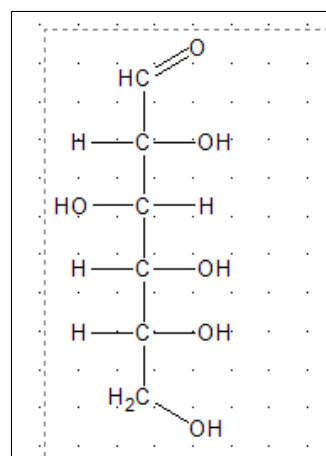
- **Klik** i dokumentet



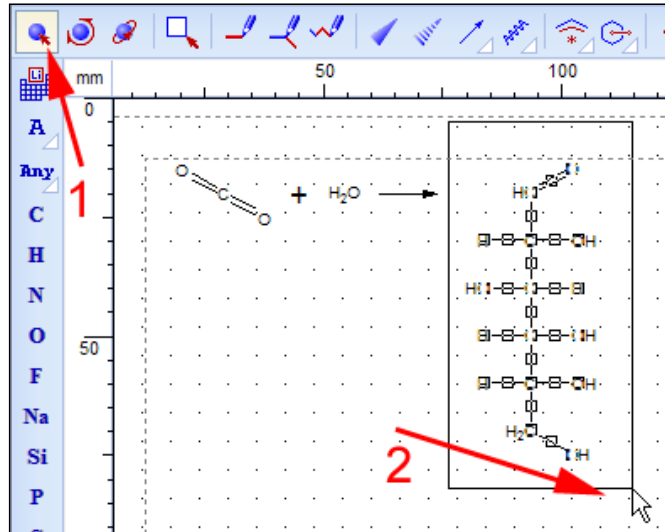
Her er formelen for D-glucose

- **Højreklik**

Markøren bliver normal igen



- **Tryk Select/Move** (1)
- **Marker D-glucose** ved at trække musen diagonalt ned over molekylet(2)



Nu kan du begynde at **afstemme** reaktionsskemaet.

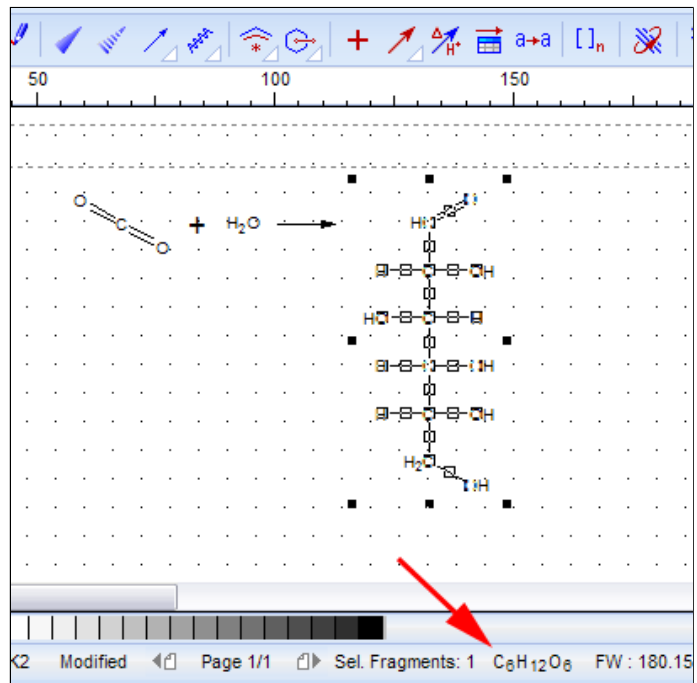
Du mangler at opskrive formelen for  $\text{O}_2$ , der også dannes ved reaktionen, men da oxygen indgår i alle reaktanter og produkter er det smartest at redegøre for oxygen til sidst.

Når man skal afstemme et reaktionsskema er det altid lettest at starte med at afstemme den forbindelse, hvor et atom optræder i "en-tal" på enten venstre eller højre side af reaktionspilen. I dette tilfælde er det C.

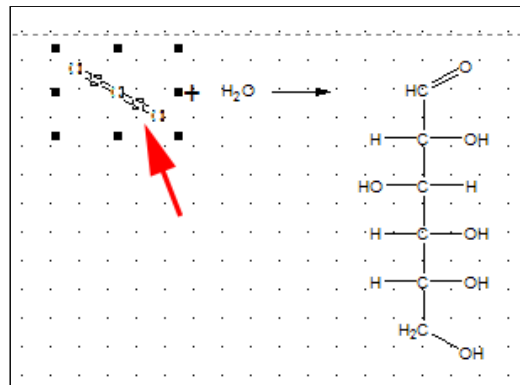
I statuslinjen kan du aflæse, at markeringen består af et fragment med bruttoformlern  $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$ .

På produktsiden har du altså 6 C.

Heraf kan du konkludere, at der skal bruges 6  $\text{CO}_2$  til fremstilling af ét glukosemolekyle.

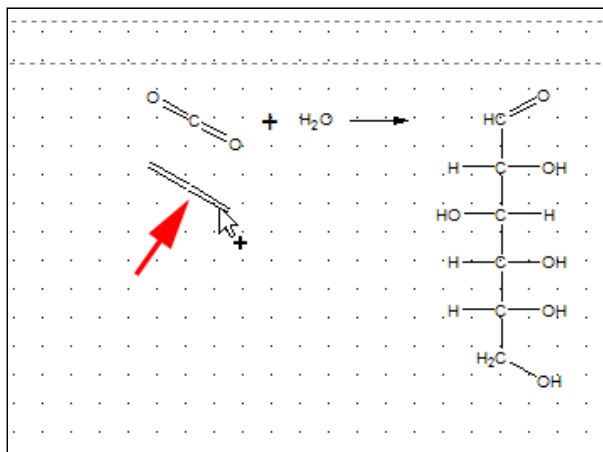


- **Marker**  $\text{CO}_2$  ved at trække musen diagonalt ned over molekylet

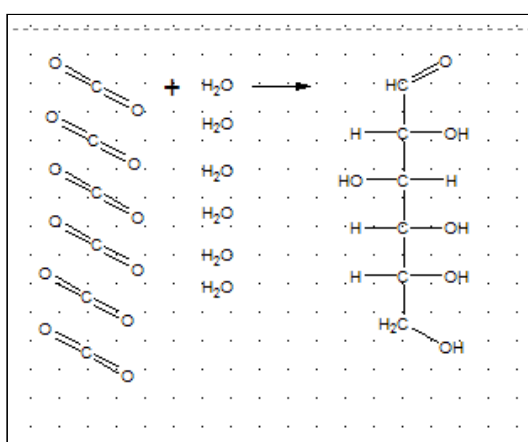


- **Hold Ctrl** nede og træk en kopi af molekylet
- **Træk** yderligere 4 kopier af  $\text{CO}_2$

og 5 kopier af H<sub>2</sub>O



Så er er styr på antallet af C og H på begge sider af pilen, men hvordan ser regnestykket ud for O?

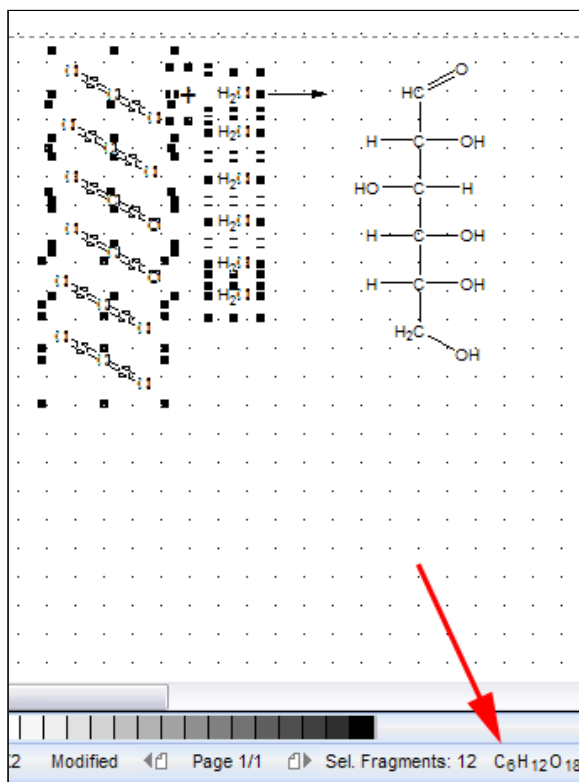


- **Marker** venstre side ved at trække musen diagonalt ned over molekylerne

I statuslinjen kan du aflæse at markeringen består af 12 fragmenter med bruttoformlern C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>18</sub>.

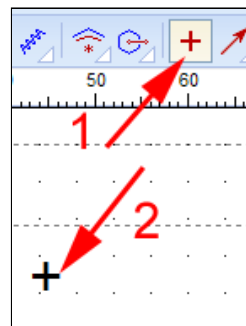
Tidligere så du at glukose havde bruttoformlen C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub>.

Der er altså 12 O for meget på på venstre side og du skal derfor tilføje 6 O<sub>2</sub> på højre side.



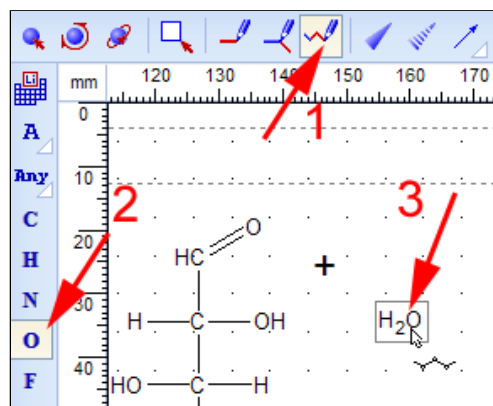
- **Tryk Reaction Plus (1)**

- **Klik** i dokumentet (2)

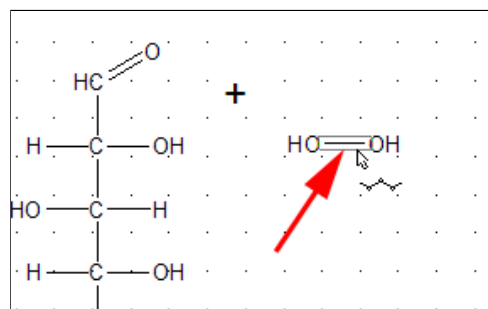


- **Tryk Draw Chains F** (1)
- **Tryk O** (2)
- **Klik** i dokumentet (3)

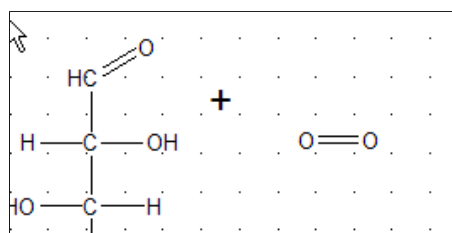
Nu har du H<sub>2</sub>O som udgangspunkt for at tegne O<sub>2</sub>.



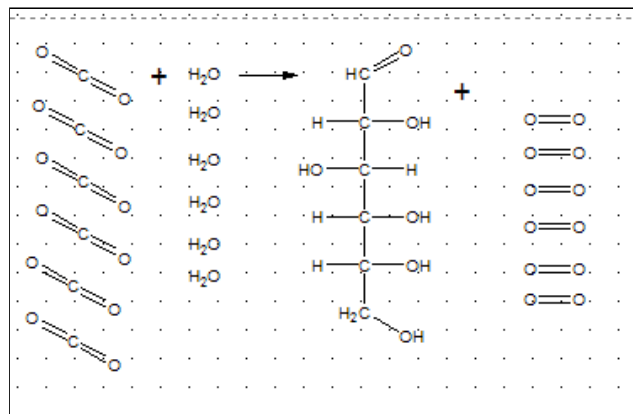
- **Klik** på H<sub>2</sub>O
- **Klik** på bindingen i HO-OH



Så har du frit oxygen



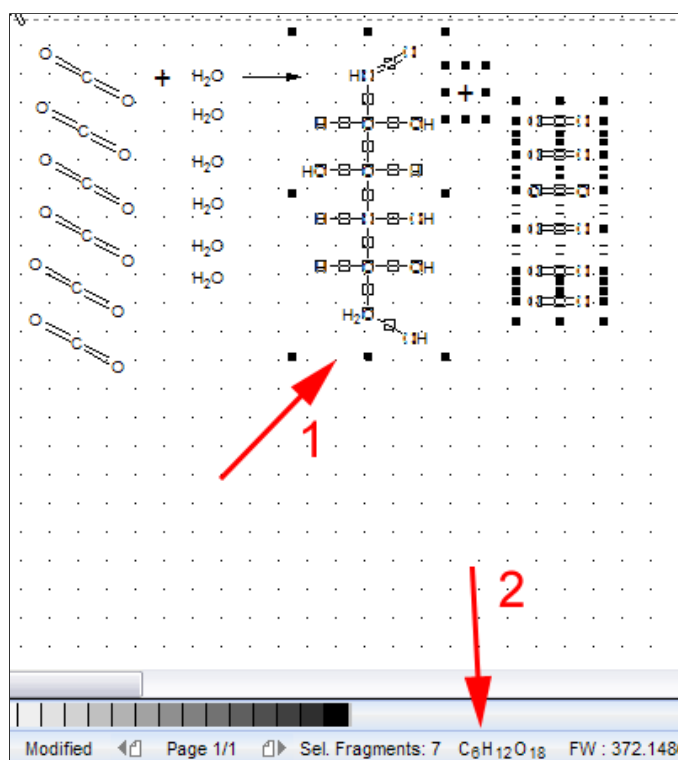
- **Træk** 5 kopier af O<sub>2</sub>



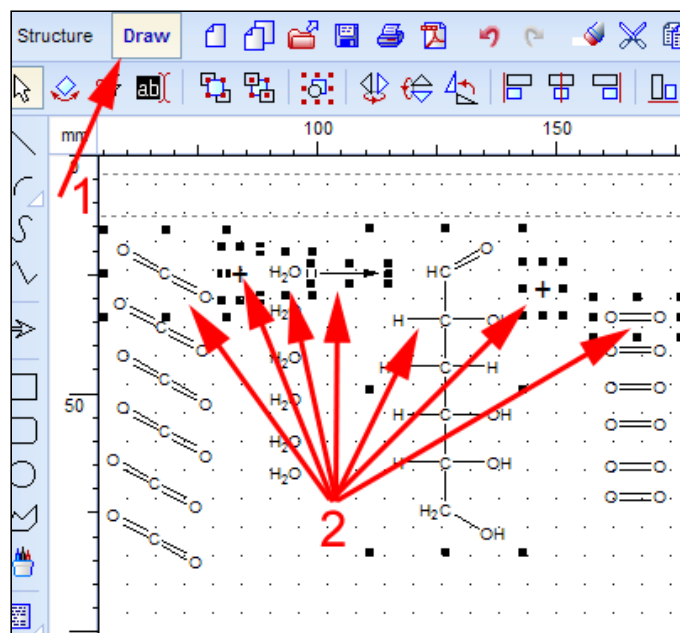
- **Marker** højre side ved at trække musen diagonalt ned over molekylerne (1)
- **Aflæs** at markeringen består af 7 fragmenter med bruttoformlern  $C_6H_{12}O_{18}$  (2)

Nu er der lige mange af de forskellige slags atomer på hver side af reaktionspilen.

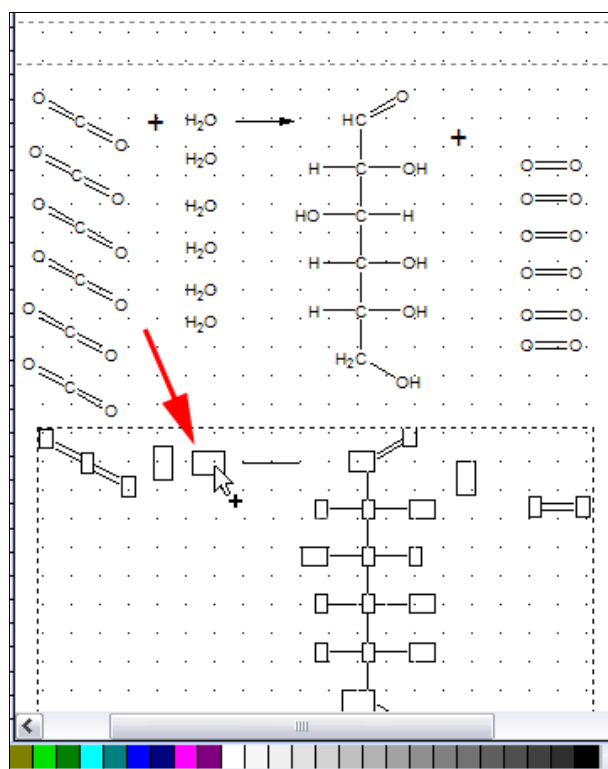
Til slut skal det kompakte reaktionsskema opskrives.



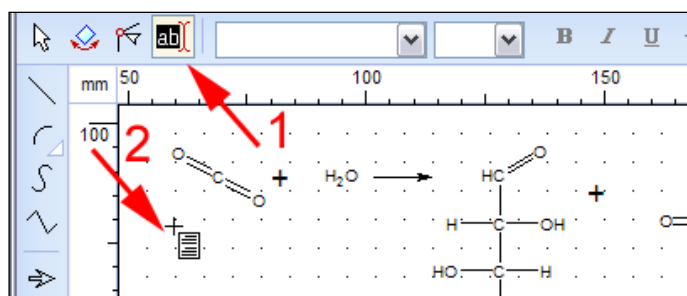
- **Tryk Draw** (1)
- **Hold Shift** nede og klik på  $O=C=O$ , +,  $H_2O$ ,  $\rightarrow$ ,  $C_6H_{12}O_6$ , + og  $O_2$  (2)



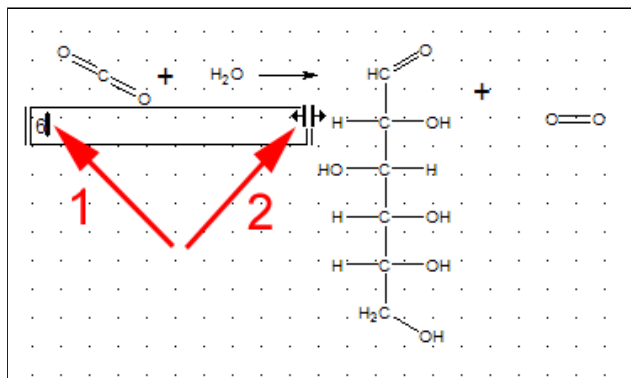
- **Hold** stadig **Ctrl** nede og træk en kopi af hele markeringen længere ned i dokumentet



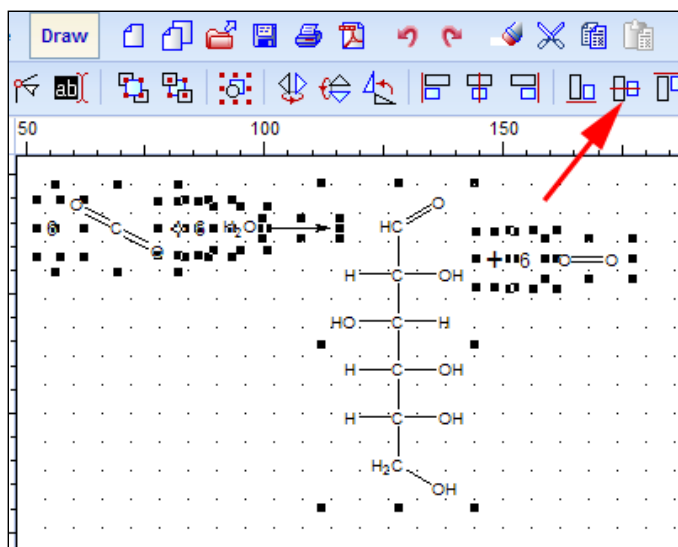
- **Tryk Edit Text** (1)
- **Klik** i dokumentet (2)



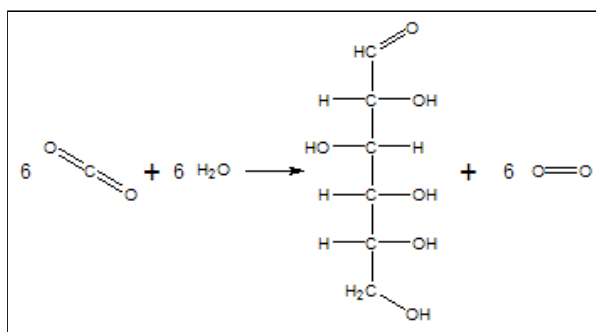
- **Skriv 6** (1)
- **Træk** til venstre i kanten af tekstboksen, så den får en passende størrelse (2)
- **Træk** 2 kopier af tekstboksen og placer dem foran  $\text{H}_2\text{O}$  og  $\text{O}_2$  (2)



- **Marker alt**
- **Tryk Center Vertically**



Her er så det færdige reaktionsskema.



## Reaktion

Opskriv og afstem reaktionsskemaerne for forbrænding af ethanol og methanol!

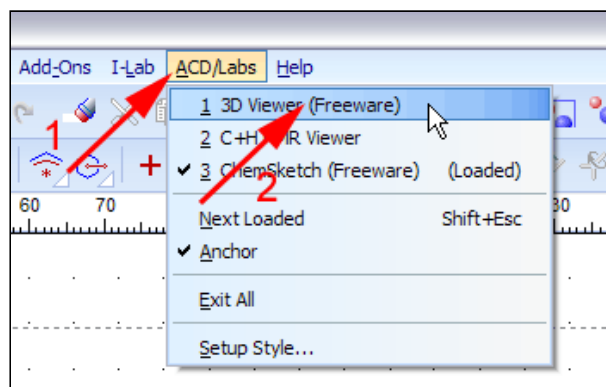
[Reaktion Løsning](#)

## Vand - verdens vigtigste kemiske forbindelse

Uden flydende vand - intet liv!

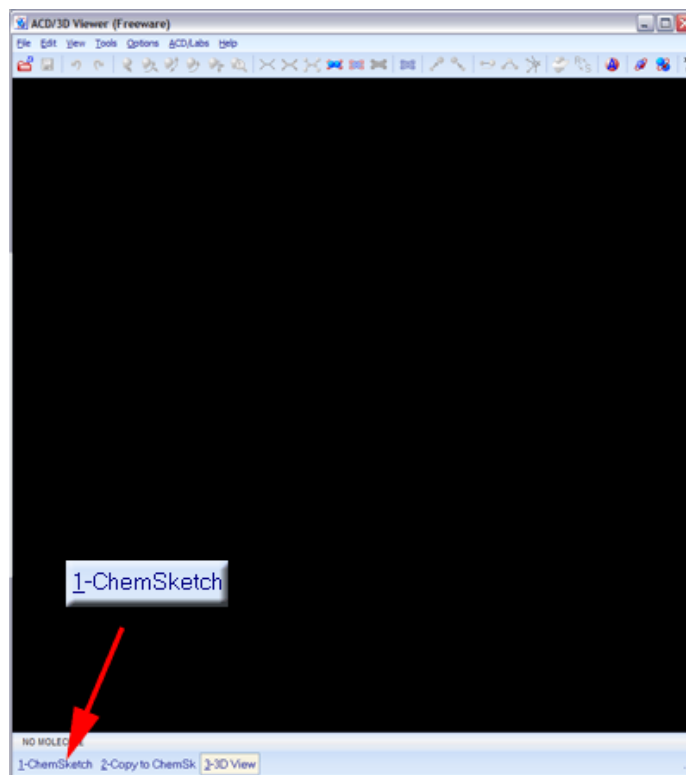
I denne øvelse lærer du at vand er en dipol, og hvad det betyder.

- **Tryk ACD/Labs** (1)
- **Vælg 3D Viewer** (Freeware) (2)



Herved åbner programmet **3D Viewer**.

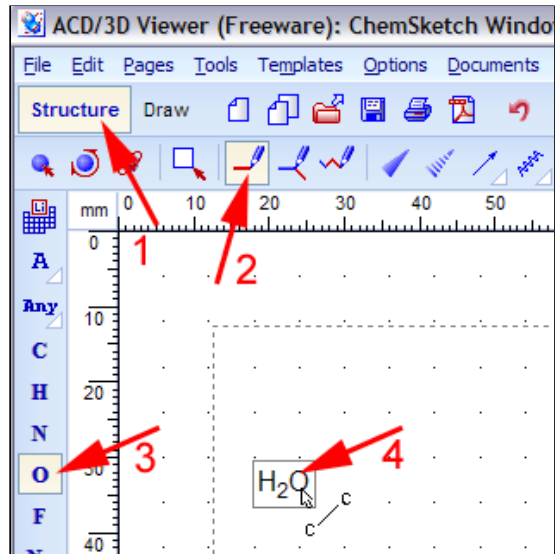
- **Tryk 1-ChemSketch**



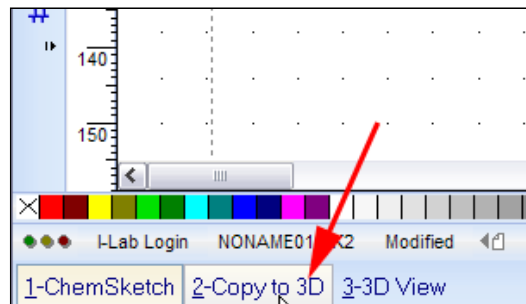
Så er du tilbage i ChemSketch

- **Tryk Structure** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (1)
- **Tryk Draw normal** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (2)
- **Tryk O** (3)
- **Klik** i dokumentet (4)

Nu har du H<sub>2</sub>O.

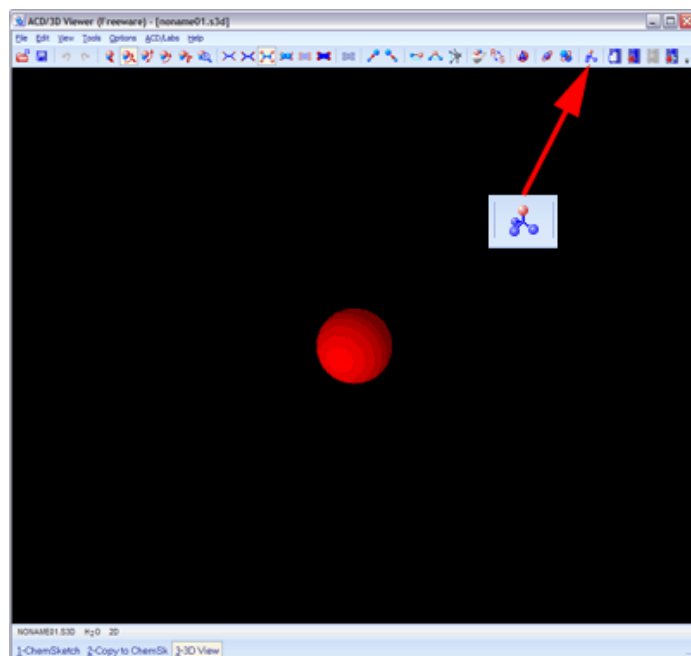


- **Tryk 2-Copy to 3D**

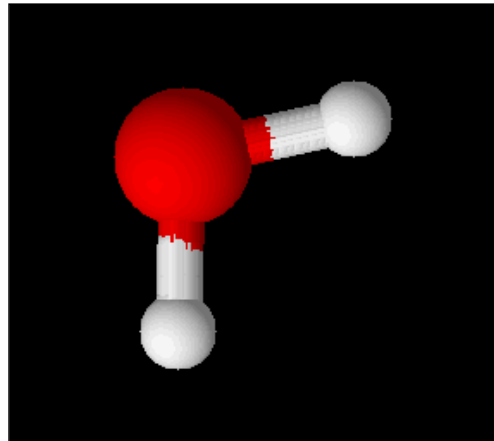


Nu vises et O. For at se H skal formelen 3D-optimeres

- **Tryk 3D-Optimization**



Nu har du H<sub>2</sub>O som en 3D-figur.  
Den kan vises i forskellige repræsentationer.

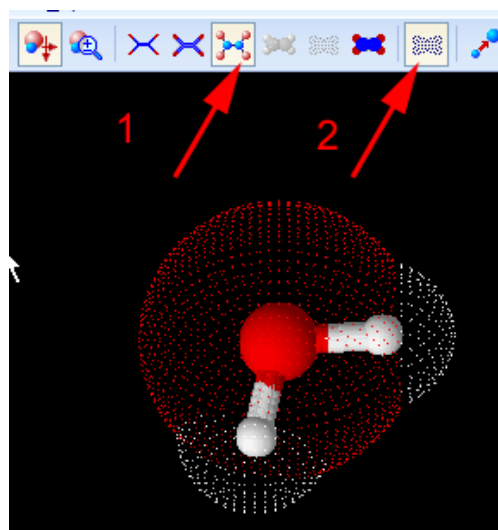


- **Tryk Ball and Sticks** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (1)
- **Tryk with Dots** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (2)

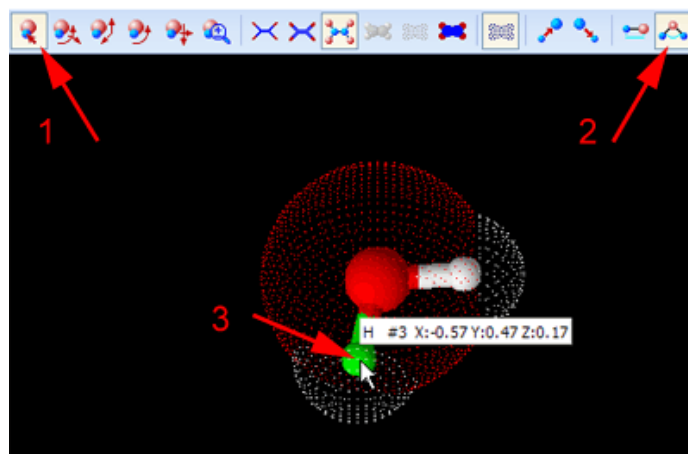
Vandmolekylet har 2 + 6 valenselektroner.

Områderne hvor elektronerne fra hhv. H og O befinder sig, er illustreret ved hhv. hvide og røde prikker.

Du kan bruge **3D Viewer** til at beregne vinklen mellem de to O-H bindinger.



- **Tryk Select Atoms** (1)
- **Tryk Angle** (2)
- **Klik** på et **H**(3)  
Herved markeres det grønt



- **Klik** på **O** (1)
- **Klik** på **H** (2)

Når de tre atomer er markerede popper boksen **Bond Angle** op.

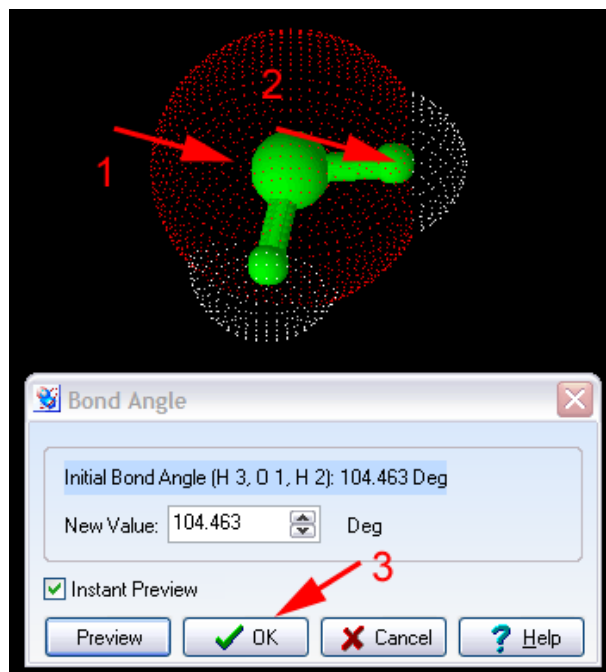
Bindingsvinklen er 104.5 grader. Dvs. at vandmolekylet er "trekantet".

Hvis du trykker på 3D-Optimization igen og derefter på Preview, vil du se en lidt ændret værdi af vinklen.

Det skyldes at ChemSketch gennem en iterativ procedure beregner de geometriske parametre ud fra empirisk viden om atomerne med henblik på at opnå molekylet i den mest stabile tilstand.

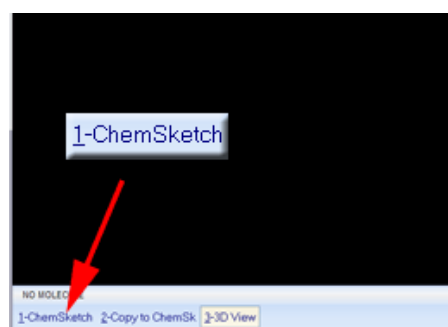
Da en fornyet beregning tager udgangspunkt i slutsituationen for den forrige, vil beregningen af den mest stabile tilstand ændre sig lidt fra beregning til beregning.

- **Tryk OK** (3)

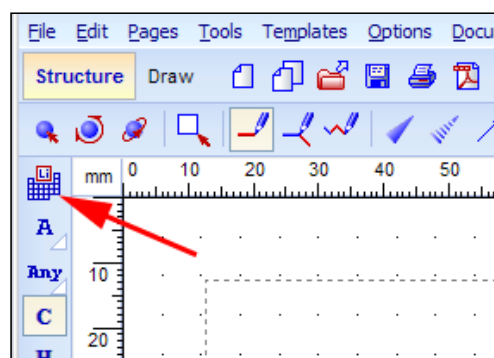


- **Tryk 1-ChemSketch**

Så er du tilbage i ChemSketch



- **Tryk Periodic Table of the Elements**



- **Klik på O** (1)
- **Aflæs Elektronegativity =3,44** (2)

Periodic Table of Elements

1																	18
H																	He
2																	10
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
Na	Mg	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
K	Ca	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Rb	Sr	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Cs	Ba	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg							
Fr	Ra																

**O Oxygen**

Mass: 15.9994

Valence: 2

Electron configuration: 2-6

\* La Ce Pr Nd Pm Sm Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb Lu D

\*\* Ac Th Pa U Np Pu Am Cm Bk Cf Es Fm Md No Lr T

General | NMR | Mass | Coloration

Characters : colorless gas

Discoverer : 1774, J.Priestley, England; C.Scheele, Sweden

Name Origin : from 'oxy genes' (Greek) - acid forming

Atomic Radius, A : 0.66      Ionization Potential, kJ/mol : 1314      Density, g/L : 1.43

Electronegativity : 3.44      Electron Affinity, kJ/mol : 141.1      Melting Point, K : 54.8

Boiling Point, K : 90.2

OK Cancel Help

- **Klik** på **H** (1)
- **Aflæs Elektronegativity** =2,2 (2)

Periodic Table of Elements

1																	18	
<b>H</b>	<b>Hydrogen</b>																<b>He</b>	
	Mass: 1.00794																	
	Valence: 1																	
	Electron configuration: 1																	
2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18		
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	*	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg								
		*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	D
		**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	T

General NMR Mass Coloration

Characters: colorless gas  
 Discoverer: 1766, H. Cavendish, England  
 Name Origin: from 'hydro genes' (Greek) - water forming  
 Atomic Radius, Å: 0.35  
 Electronegativity: 2.2  
 Ionization Potential, kJ/mol: 1312  
 Electron Affinity, kJ/mol: 72.8  
 Density, g/L: 0.09  
 Melting Point, K: 14  
 Boiling Point, K: 20.3

OK Cancel Help

Elektronegativiteten er et grundstof evne til tiltrække elektroner i en kemisk binding.

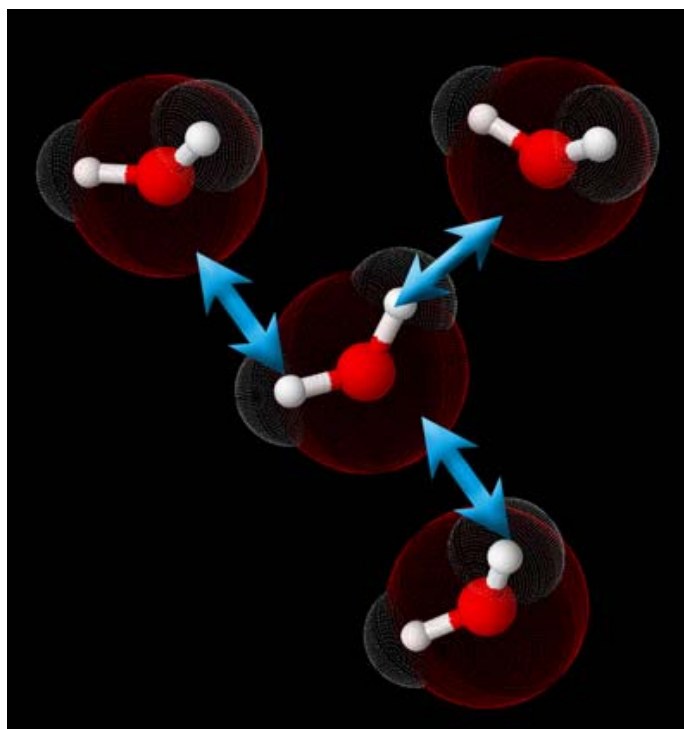
Da O er meget stærkere til at tiltrække elektroner end H betyder det, at vandmolekylet vil have et overskud af negativ ladning (elektroner) i den del af molekylet, der er illustreret med rødt og overskud af positiv ladning, hvor elektronerne er trukket bort fra brintatomernes (positive) protoner.

Herved opstår en to-pol, en dipol. Flere dipoler tiltrækker hinanden med elektrostatiske kræfter - her vist som pile mellem områder på nabomolekyler, der er illustreret med hhv. rødt og hvidt.

Fordi O er det næstmest elektronegative grundstof og H er lille et atom (praktisk taget kun en proton) er vandmolekylet - i forhold til størrelsen - en af de stærkeste dipoler der kendes.

Det betyder så igen, at vand har et meget højt kogepunkt i forhold til vandmolekylets størrelse.

Hvis vandmolekylet havde været lineært som CO<sub>2</sub> ville alt vand på jorden være på gasform og intet liv ville være muligt.

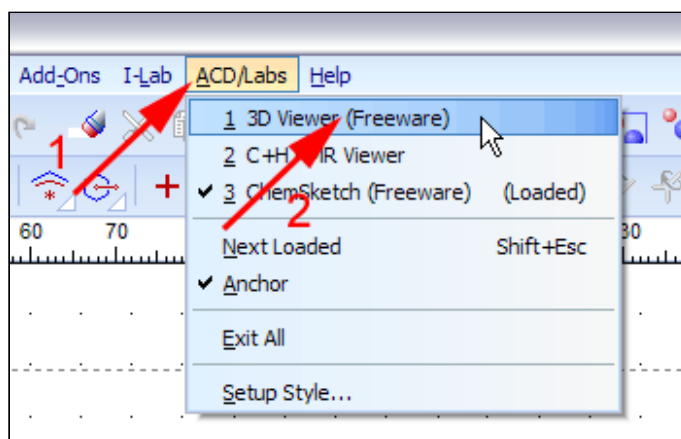


## Carbonhydrider

I denne øvelse lærer du:

- At vise forskellige repræsentationer af molekyler
- At undersøge geometrien i alkaner, alkenere og alkyner

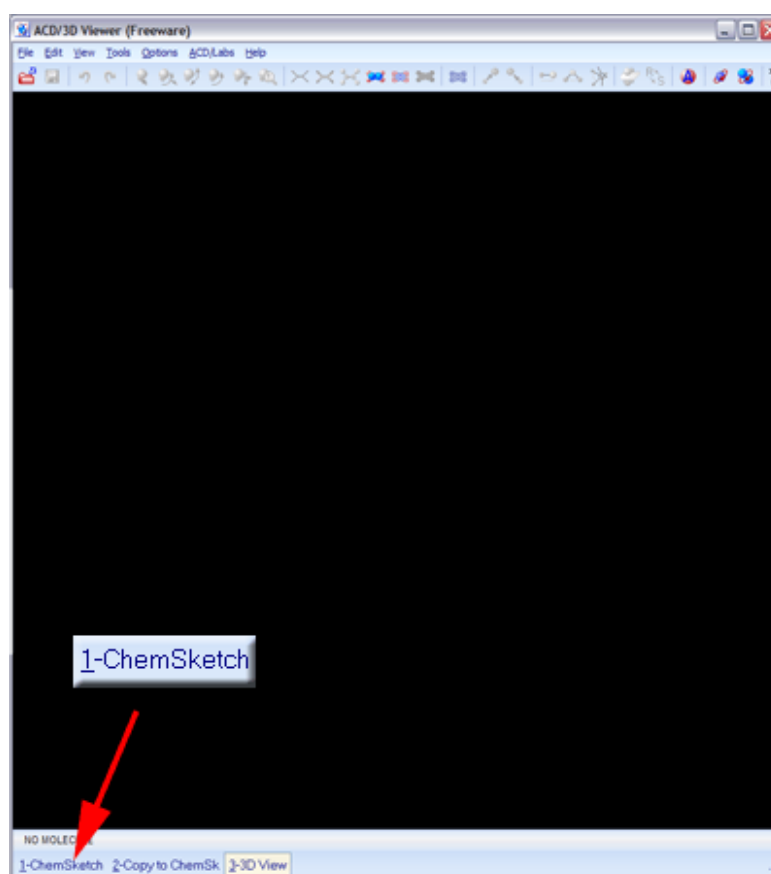
- **Tryk ACD/Labs**  
(1)
- **Vælg 3D Viewer**  
(Freeware) (2)



Herved åbner  
programmet

- **Tryk 1-  
ChemSketch**

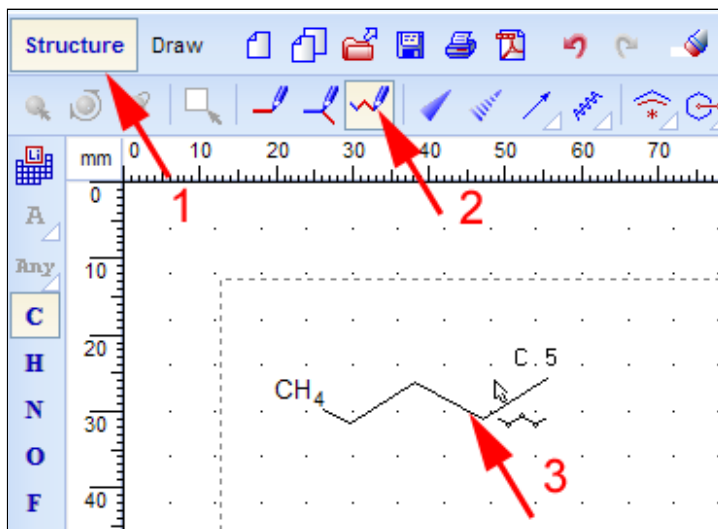
Så er du tilbage i  
ChemSketch



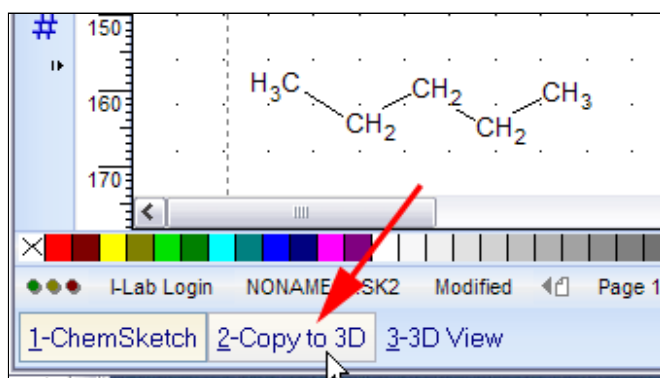
- **Tryk Structure**  
(hvis den ikke  
allerede er  
trykket ind) (1)
- **Tryk Draw  
Chains** (2)

- **Hold musen** nede og **træk** vandret mod højre til markøren viser **C 5 (3)**
- **Slip musen**

Nu har du pentan.

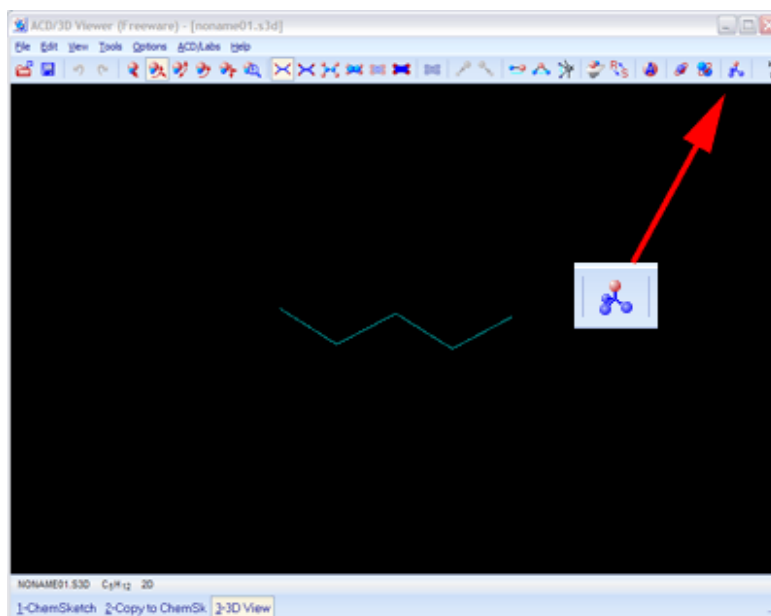


- **Tryk 2-Copy to 3D**



Nu vises et "skelet". For at se H skal formelen 3D-optimeres

- **Tryk 3D-Optimization**

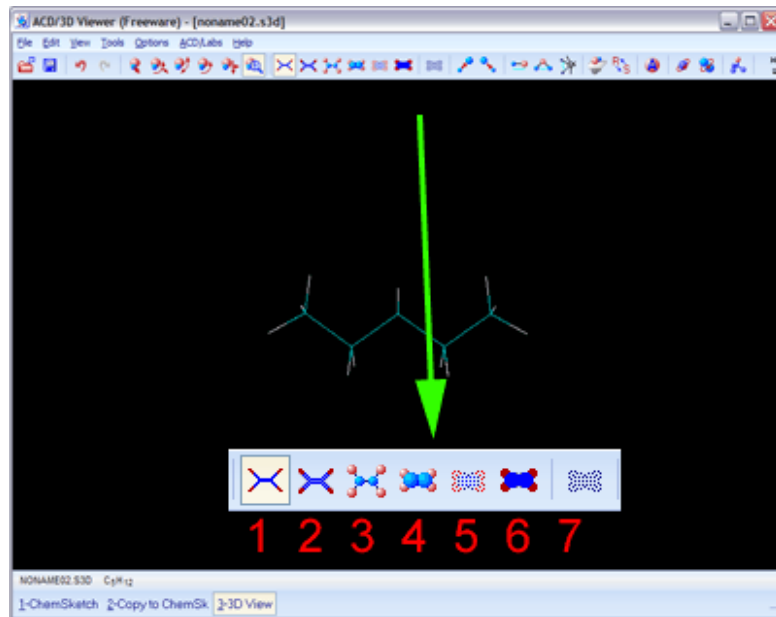


Nu ses molekylet som Wireframe.

I værktøjsbjælken findes knapper til forskellige

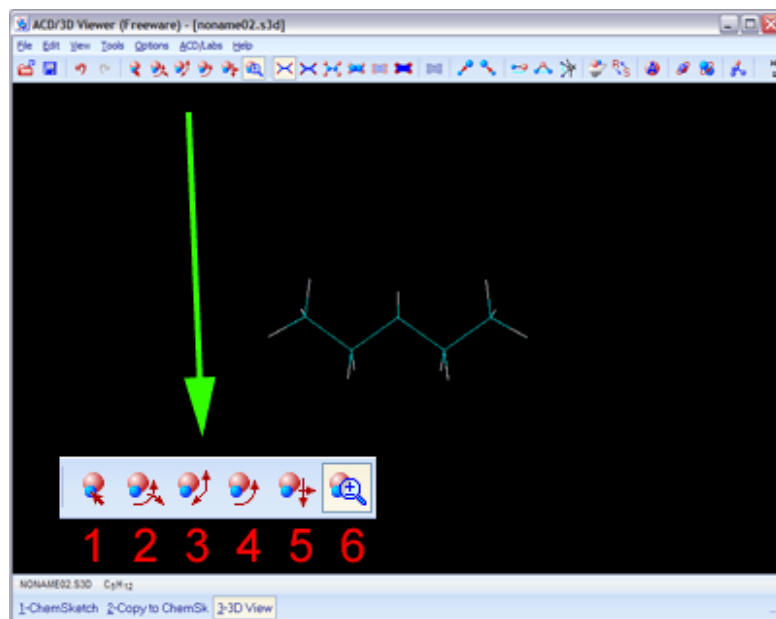
repræsentationer af molekylet.

- **Afprøv** 2 til 6
- **Afprøv** 7 sammen med 2 eller 3
- **Vend** tilbage til 1



I værktøjsbjælken findes knapper til håndtering af molekylet:

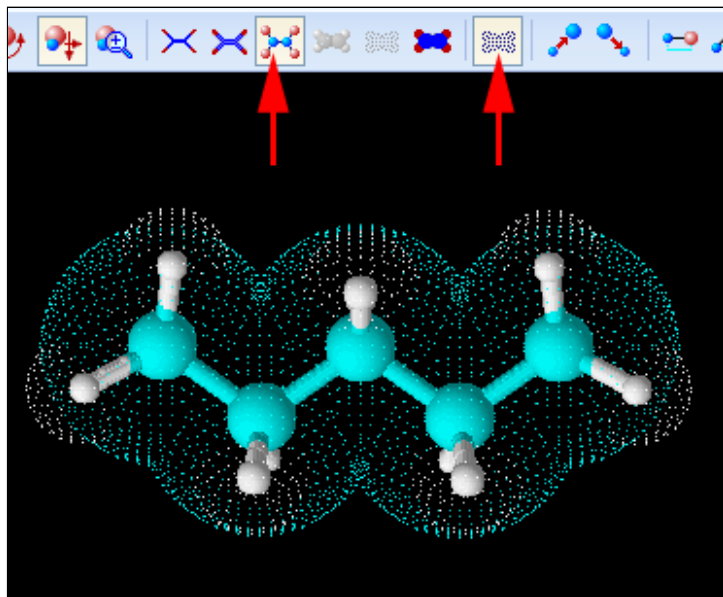
1. Vælg atom
2. Roter i 3D
3. Roter en bestemt vinkel om en bestemt akse (se *Fixed Angle Rotation Setup...* under *Options*)
4. Roter i planet
5. Flyt
6. Skaler (træk ud eller ind)



- **Tryk Balls and Sticks**
- **Tryk With Dots**

Denne repræsentationsform giver et godt billede af molekylets geometri.

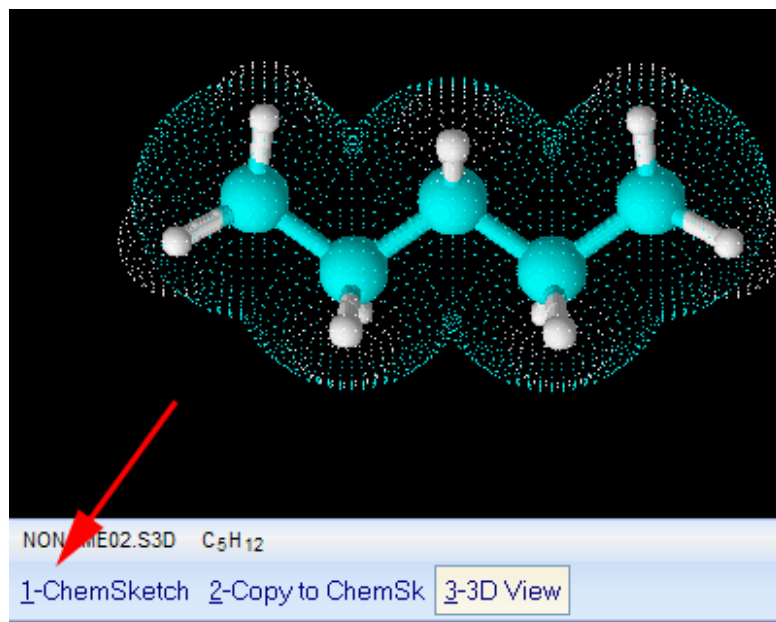
De små prikker viser elektronskyens udstrækning.



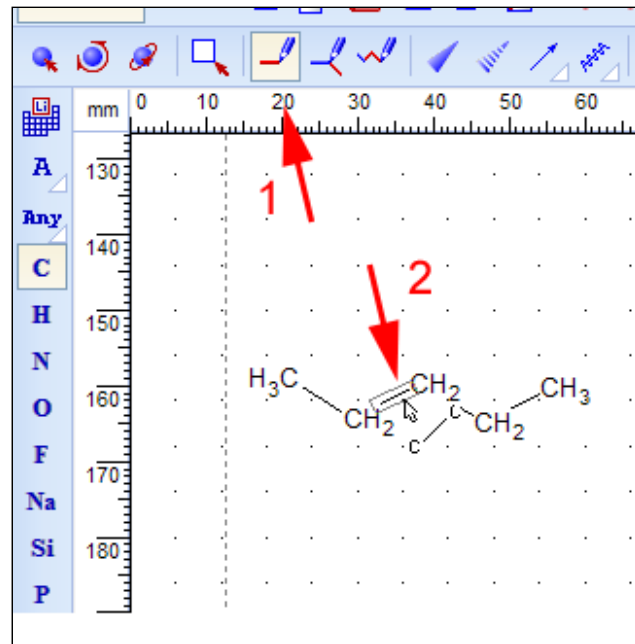
Den viste forbindelse indeholder kun enkeltbindinger.

Efterfølgende skal du sammenligne geometrien omkring hhv. enkeltbinding, dobbeltbinding og triplebinding.

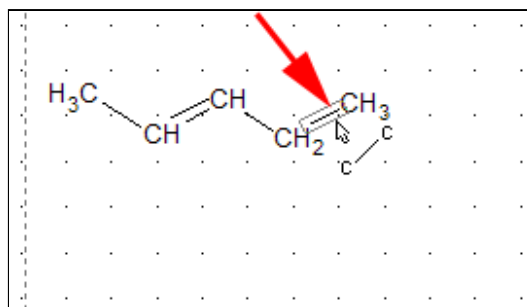
- **Tryk 1-ChemSketch**



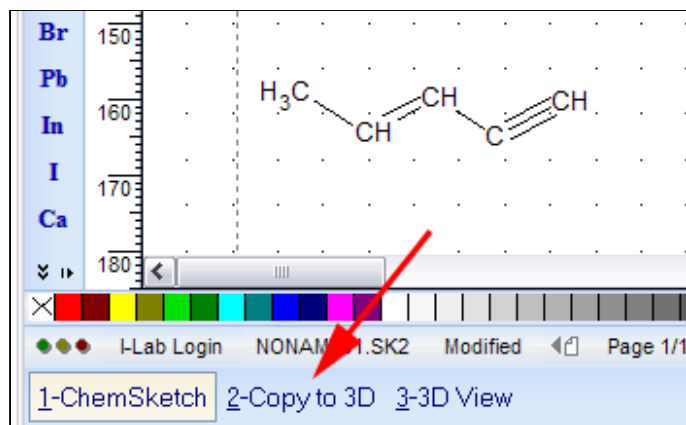
- **Tryk Draw normal** (hvis den ikke allerede er trykket ind) (1)
- **Klik på binding** mellem C2 og C3 (2)



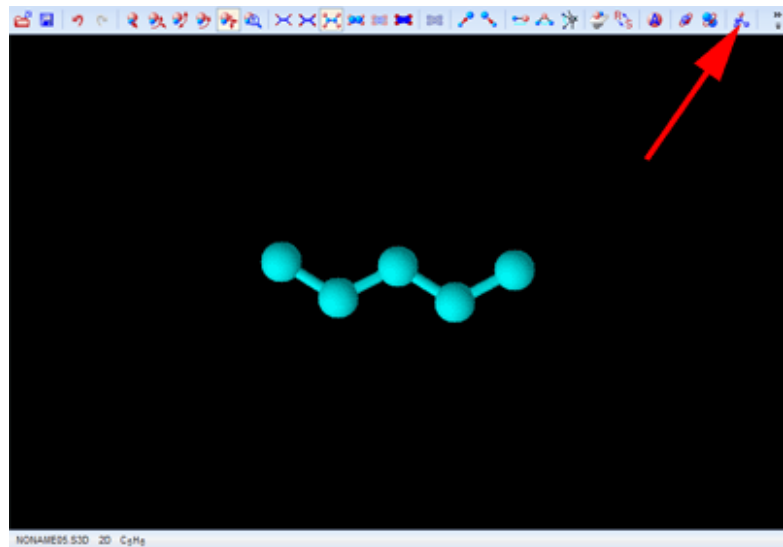
- **Klik** 2 gange på **binding** mellem C4 og C5 (2)



- **Tryk** 2-Copy to 3D

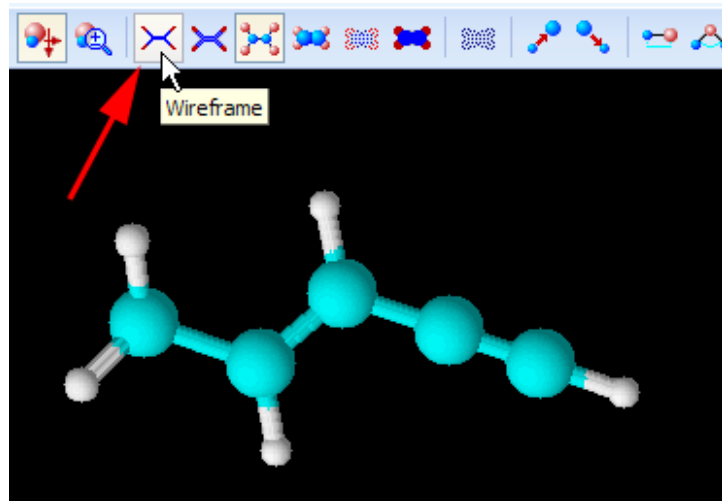


- **Tryk** 3D-Optimization



Når molekylet ses som Balls and Sticks fremgår ikke direkte, at der er dobbelt- eller triplebindinger

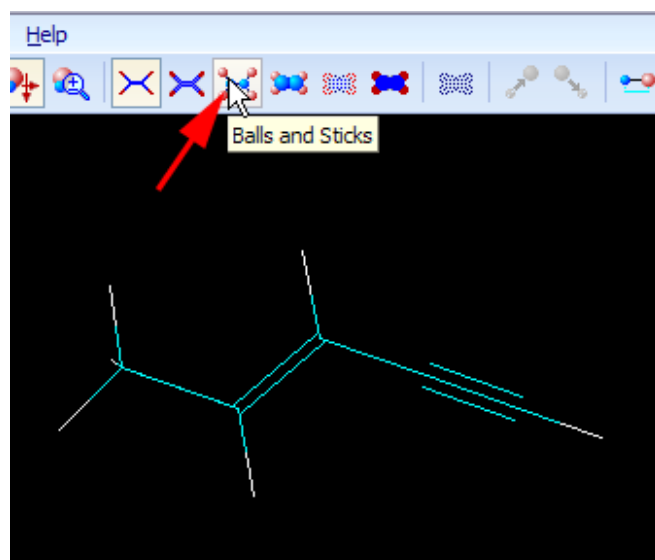
- **Tryk Wireframe**



Med Wireframe-repræsentation ses multiple bindinger.

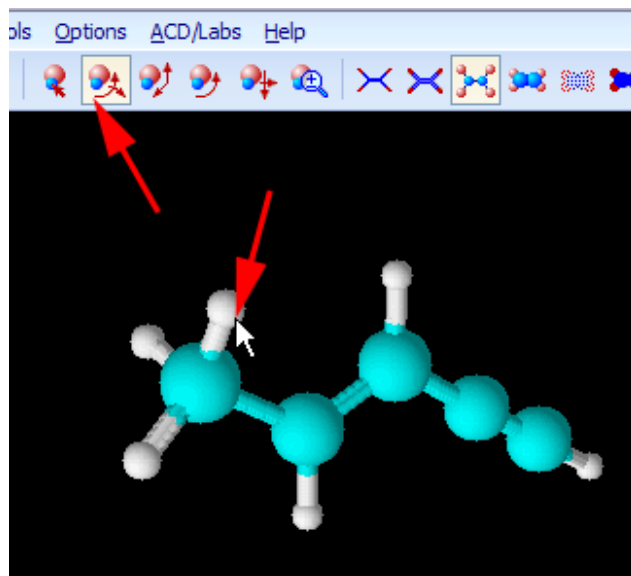
Her ses tydeligt at molekylet er lineært omkring en triplebinding, men hvordan er forholdende omkring enkeltbindinger og dobbeltbindinger?

- **Tryk Balls and Sticks**

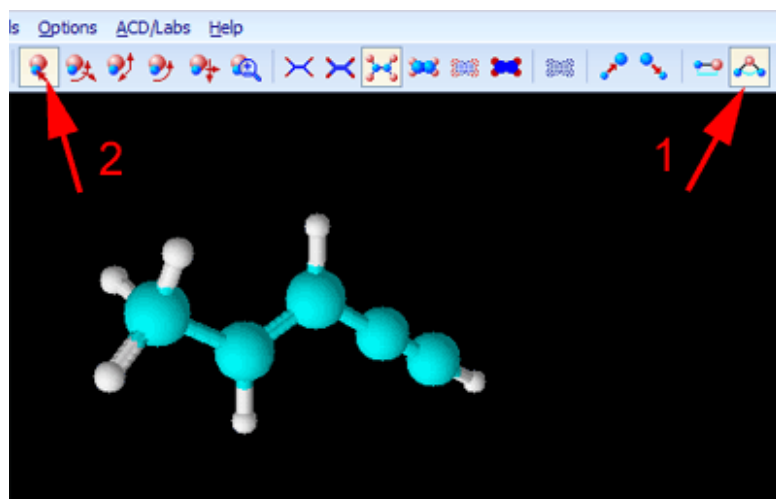


- **Tryk 3D Rotate**

- **Træk i et atom,**  
så du kan se alle  
3 H på C1



- **Tryk Angle** (1)
- **Tryk Select Atoms** (2)



- **Klik på H på C1**  
(1)
- **Klik på C1** (2)
- **Klik på C2** (3)
- **Bemærk**  
bindingsvinklen  
på 109,5 grader

Hvis du trykker på 3D-Optimization igen og derefter på Preview, vil du se en lidt ændret værdi af vinklen.

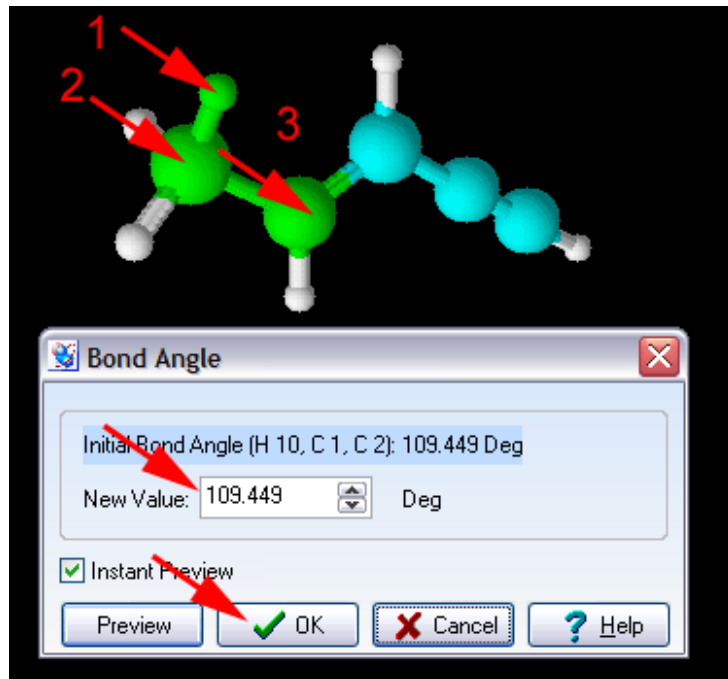
Det skyldes at ChemSketch gennem en iterativ procedure beregner de geometriske parametre ud fra empirisk viden om atomerne med henblik på at opnå molekylet i

den mest stabile tilstand.

Da en fornyet beregning tager udgangspunkt i slutsituationen for den forrige, vil beregningen af den mest stabile tilstand ændre sig lidt fra beregning til beregning.

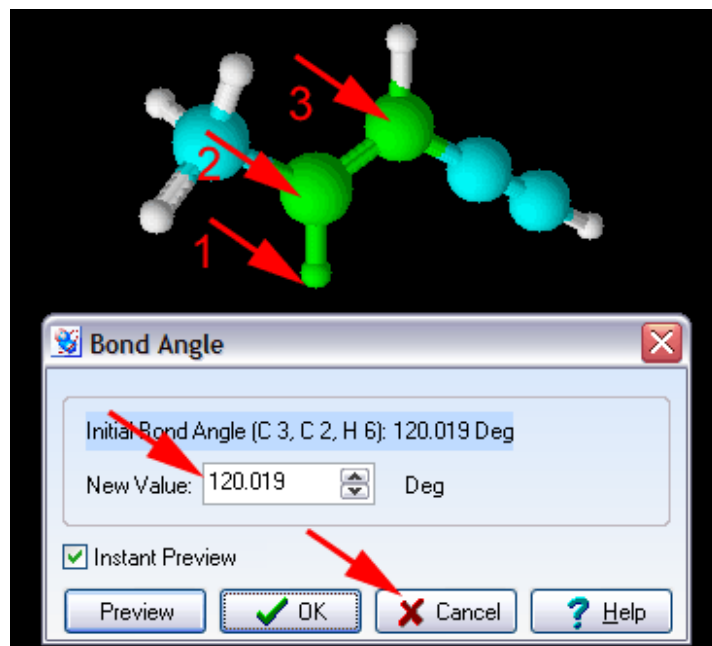
- **Tryk OK**

Den grønne markering forbliver, når du har tastet OK.



- **Klik** på **H** på **C2** (1) (evt. 2 gange)
- **Klik** på **C2** (2)
- **Klik** på **C3** (3)
- **Bemærk** bindingsvinklen på 120 grader
- **Tryk Cancel**

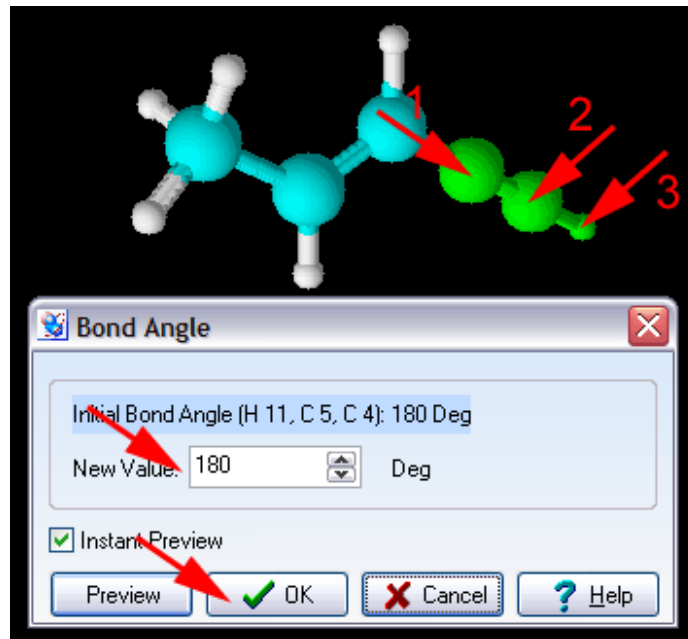
Den grønne markering forsvinder, når du taster Cancel.



- **Klik** på **C4** (1)
- **Klik** på **C5** (2)
- **Klik** på **H** på **C5** (3)
- **Bemærk** bindingsvinklen på 180 grader
- **Tryk OK**

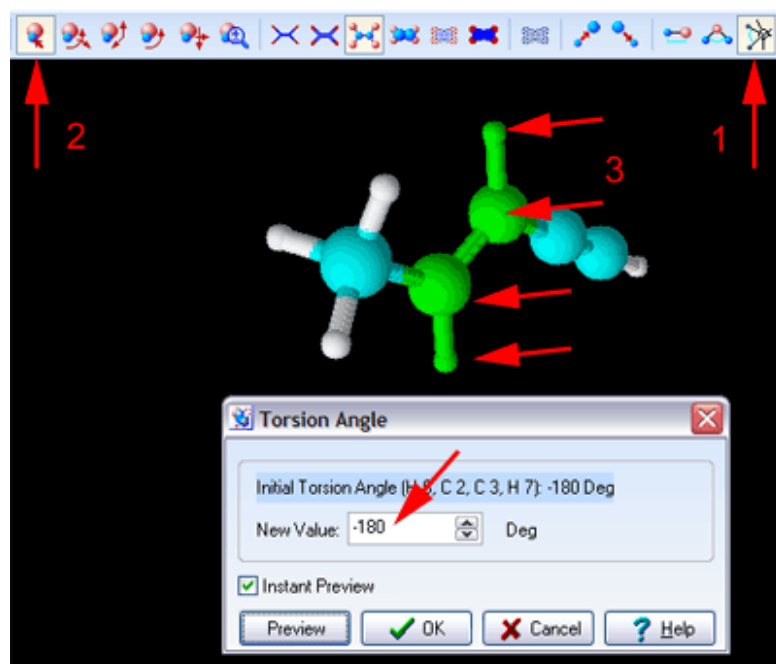
Heraf kan du slutte at konfigurationen omkring en triplebinding

er lineær.



- **Tryk Torsion Angle** (1)
- **Tryk Select Atoms** (2)
- **Klik** på de 4 viste atomer
- **Bemærk** torsionsvinklen på 0 grader eller 180 grader afhængig af rækkefølgen

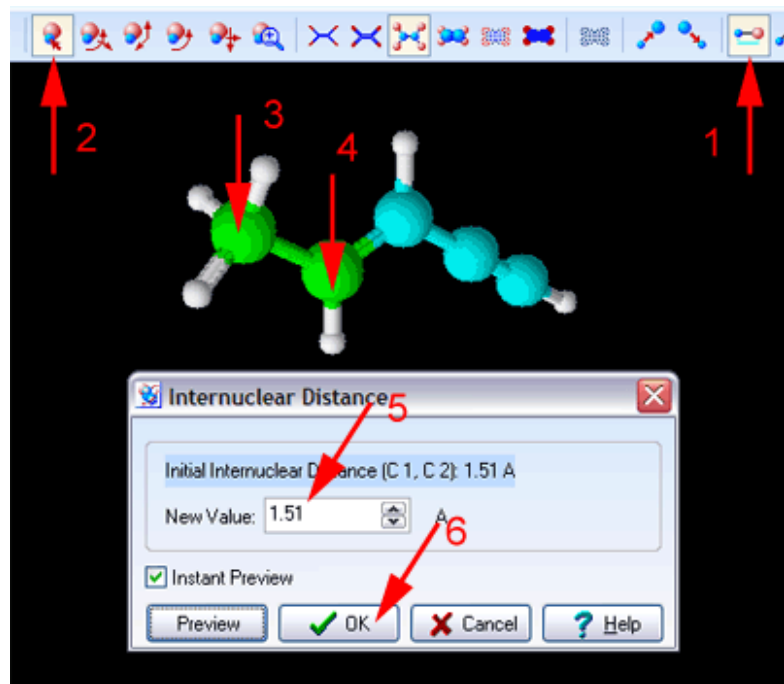
Heraf kan du slutte at konfigurationen omkring en dobbeltbinding er plan.



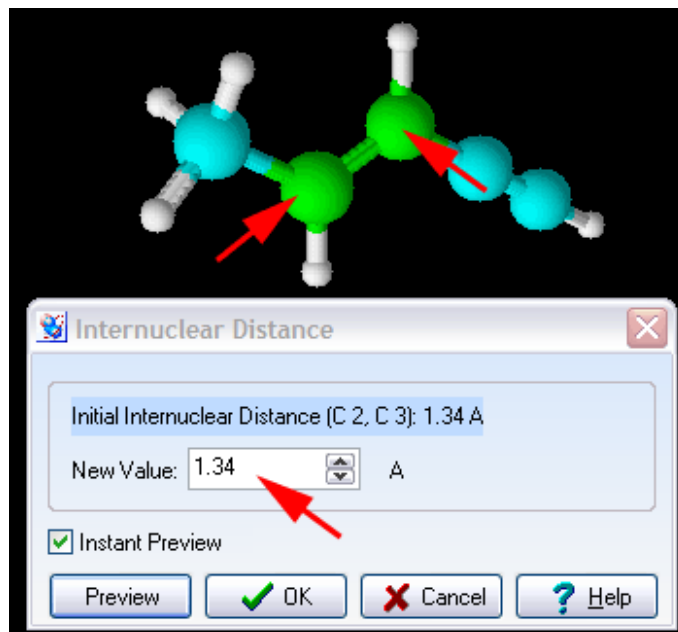
- **Tryk Bond Length** (1)
- **Tryk Select Atoms** (2)
- **Klik** på de 2 viste atomer (3 -4)
- **Bemærk** afstanden mellem de afmærkede atomer på 1,5 Å

Enheden Å er 1 Aangstrøm, som er

0,0000000001m eller en 10 milliardene del af en meter eller en 10 millionte del af en millimeter.

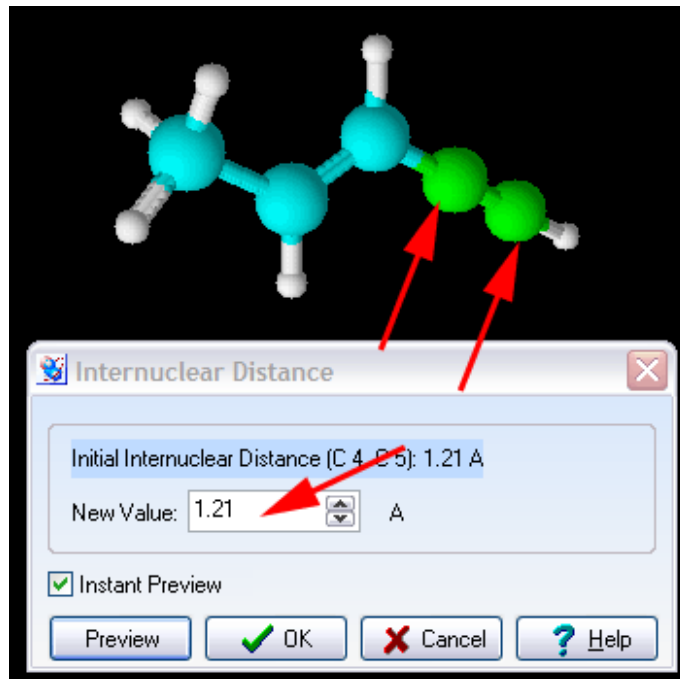


- **Find** på tilsvarende måde længden af dobbeltbindingen
- **Bemærk** afstanden mellem de afmærkede atomer på 1,3 Å



- **Find** på tilsvarende måde længden af triplebindingen
- **Bemærk** afstanden mellem de afmærkede atomer på 1,2 Å

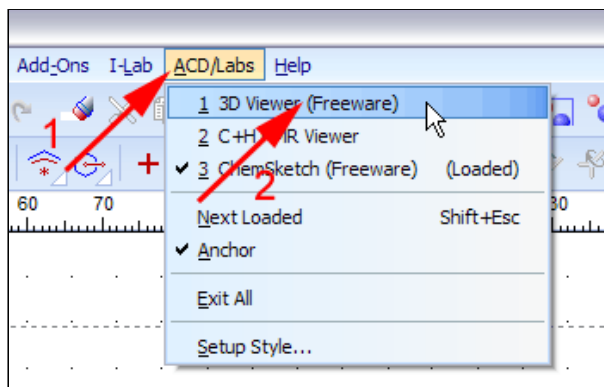
Du kan konkludere at jo stærkere en binding er, desto tættere knytter den atomerne.



## Animation

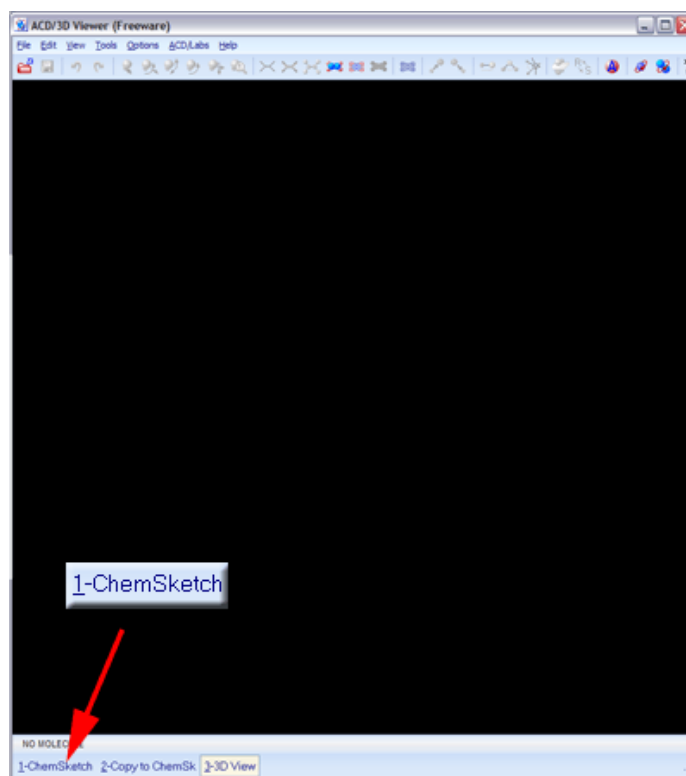
I denne øvelse lærer du at fremstille en 3D animeret GIF-illustration, der fx kan indsættes i en PowerPoint eller på en webside.

- **Tryk ACD/Labs** (1)
- **Vælg 3D Viewer** (Freeware) (2)



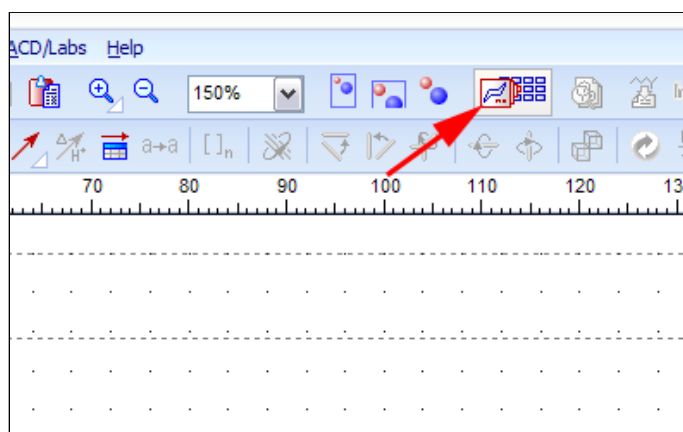
Herved åbner programmet **3D Viewer**.

- **Tryk 1-ChemSketch**

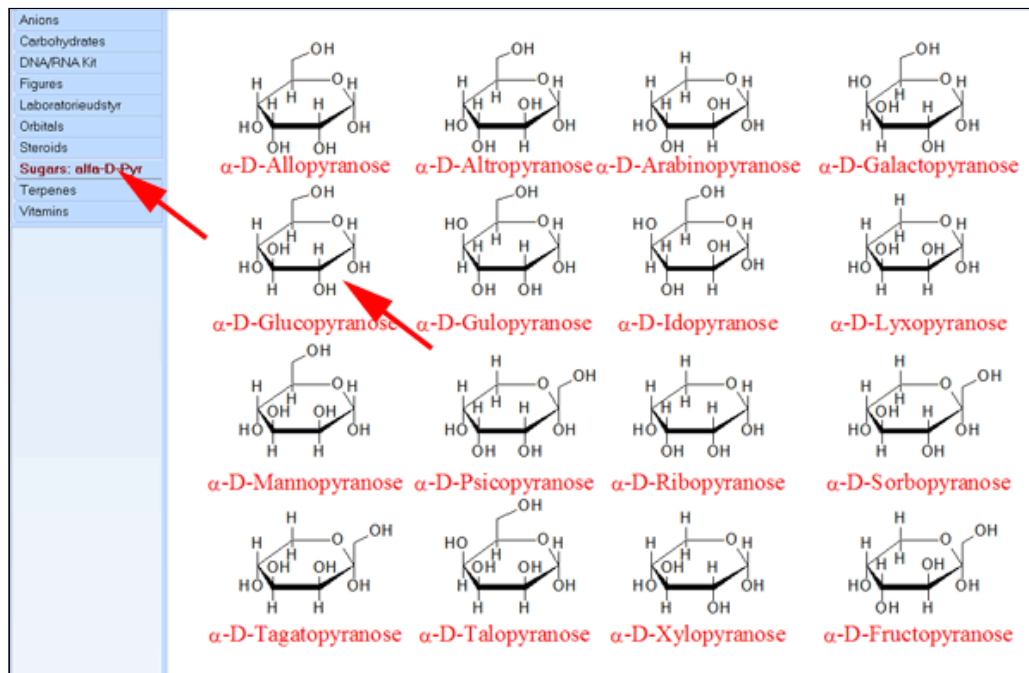


Så er du tilbage i ChemSketch

- **Tryk Template Window**

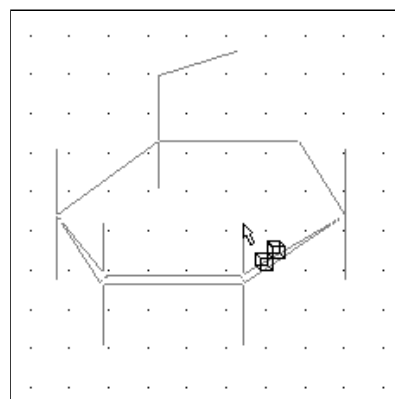


- **Tryk Sugars: alfa-D-Pyr**
- **Tryk  $\alpha$ -D-Glucopyranose**



Markøren skifter udseende og der vises en kontur af molekylet.

- **Klik** i dokumentet

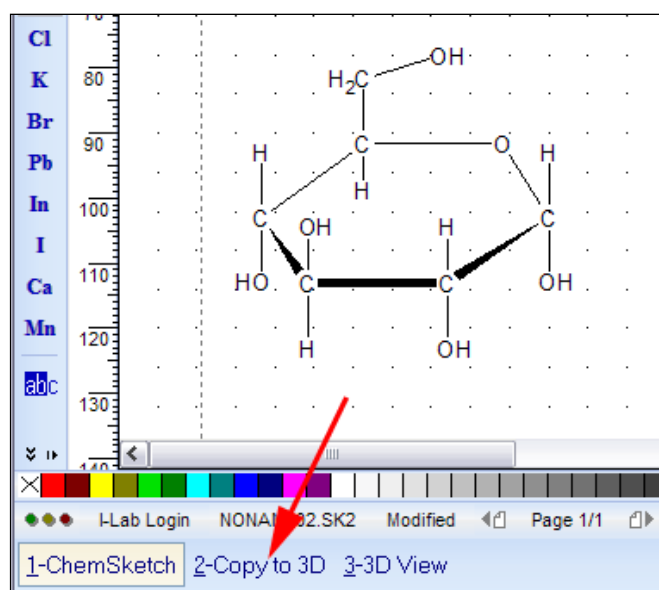


Her er formelen for  $\alpha$ -D-Glucopyranose

- **Højreklik**

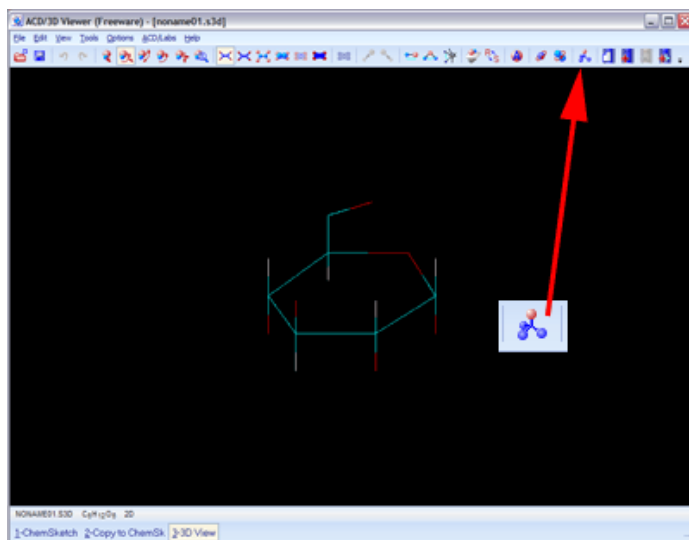
Markøren bliver normal igen

- **Tryk 2-Copy to 3D**

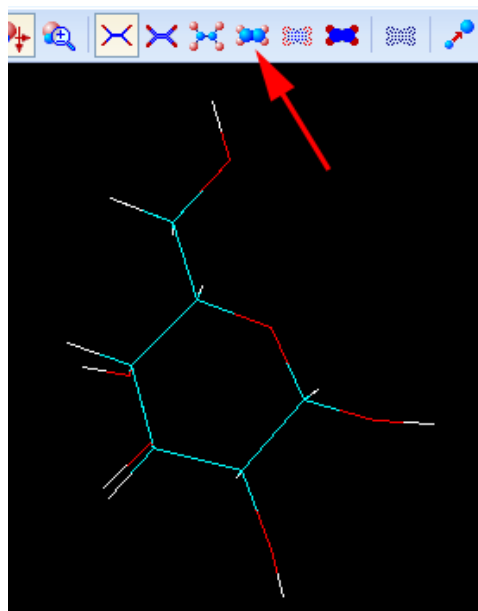


Nu vises molekylet som Wireframe.

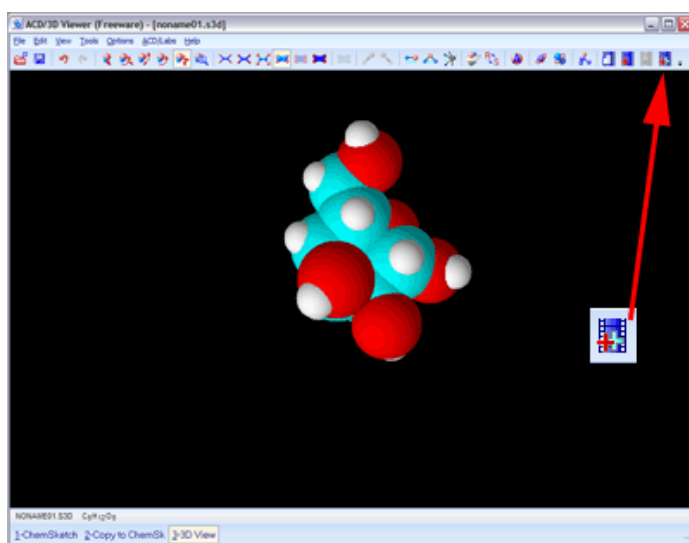
- **Tryk 3D-Optimization**



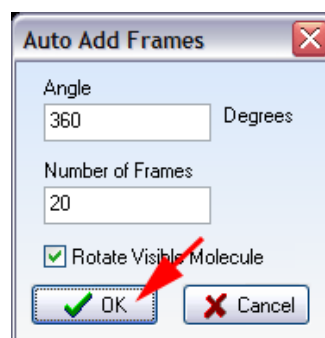
- **Tryk Spacefill**



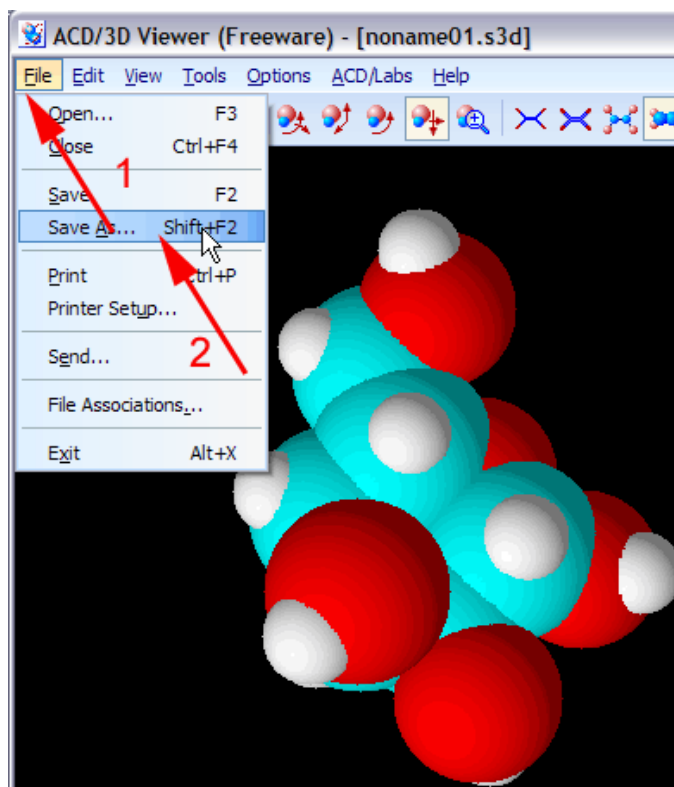
- **Tryk Auto add Frames**



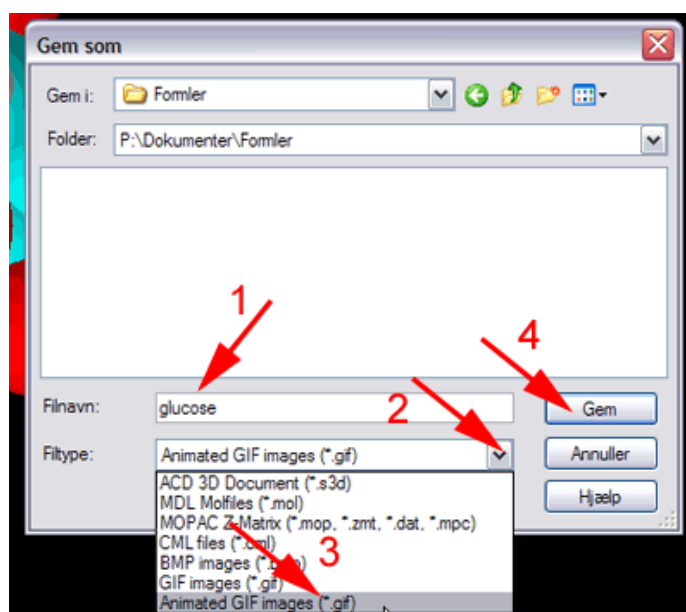
- Tryk OK

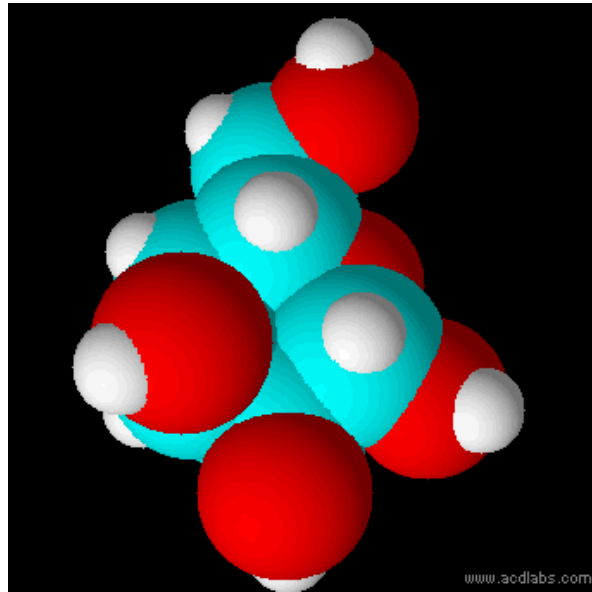


- Vælg File (1)
- Vælg Save As... (2)



- Skriv Glucose (1)
- Vælg Filtype (2)
- Vælg Animatet GIF images (\*.gif) (3)
- Tryk Gem (4)





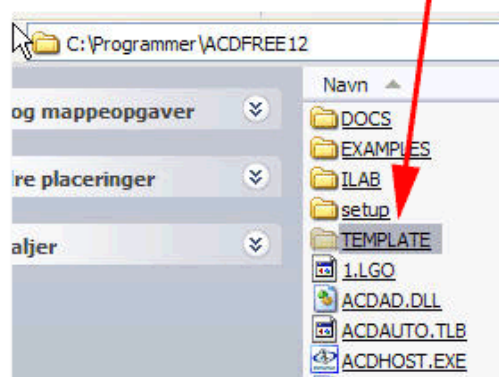
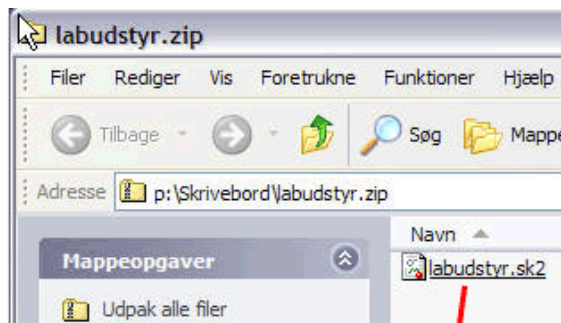
## Forsøgsopstillinger

I dette modul lærer du opbygge forsøgsopstillinger i ChemSketch's tegnemodul.

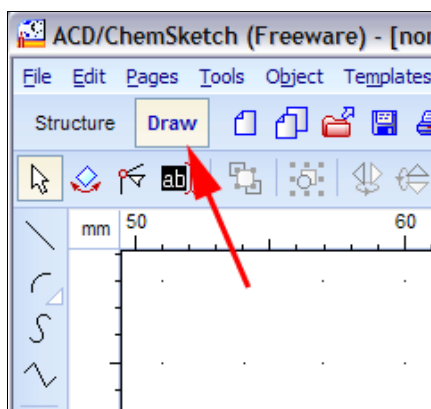
Frantz W. S. Pedersen, Syddansk Universitet, Odense har lavet en skabelon med detaljerede tegninger af laboratorieudstyr. Skabelonen er til fri afbenyttelse og kan hentes nederst på denne side:

[SchroppKemiskeLeksikon](#).

- **Flyt** filen **labudstyr.sk2** fra zip-mappen til til mappen Template i din ChemSketch-mappe på din PC

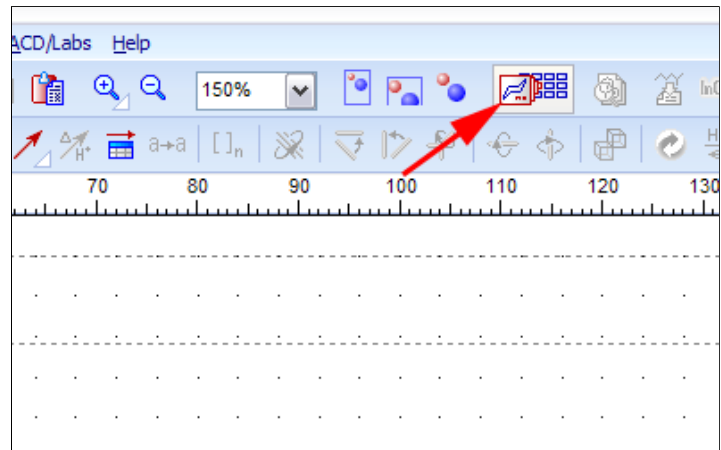


- **Tryk Draw**

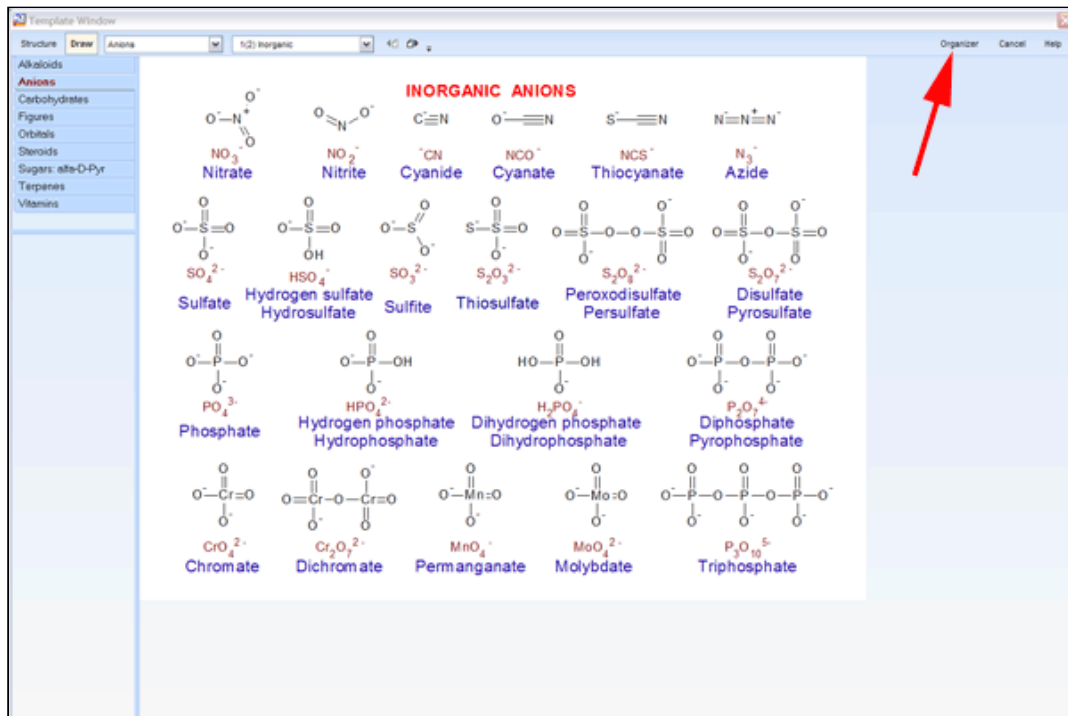


- **Tryk Template Window**

Herved fremkommer et bibliotek over færdige molekyler, ioner og kemiske figurer.



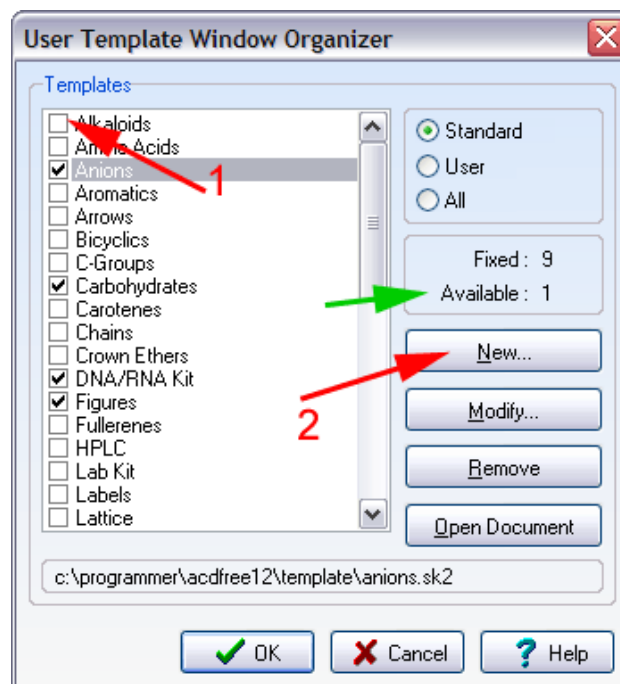
- **Tryk Organizer**



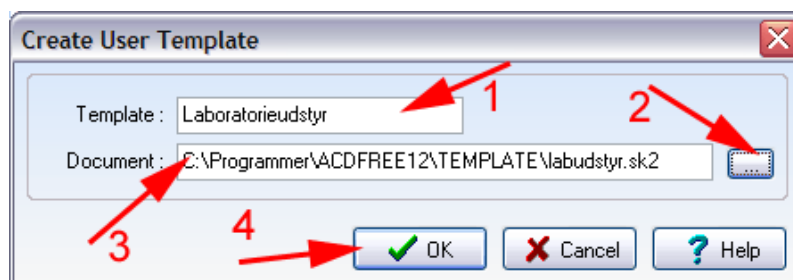
ChemSketch har som standard plads til 10 templates. For at du kan inddrag **labudstyr.sk2** skal ud fjerne en afmærkning.

- **Fjern Alkaloider** (1)
- **Tryk New** (2)

Herved fremkommer et boksen **Create User Template**.

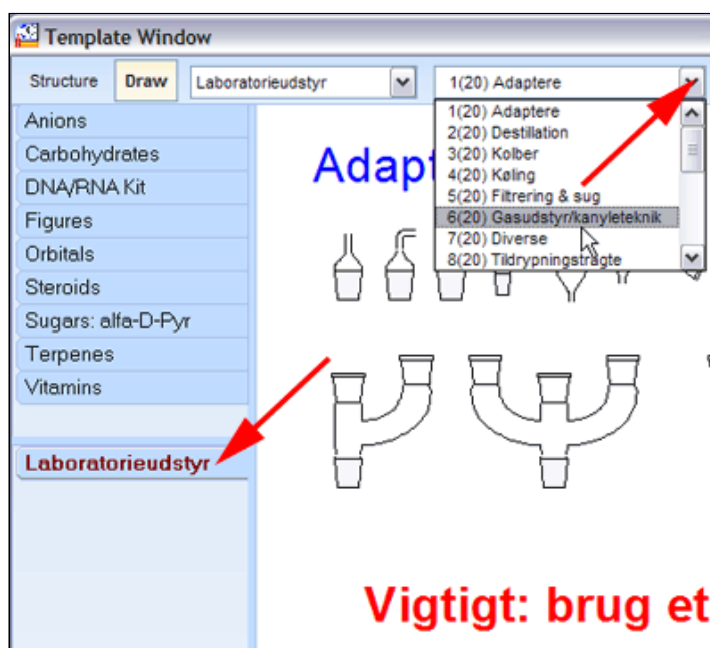


- **Skriv Laboratorieudstyr** i feltet **Template** (1)
- **Lokaliser Labudstyr.sk2** (2 - 3)
- **Tryk OK** (4)



- **Tryk Laboratorieudstyr**
- **Fold** listen ud

Her ses at **Laboratorieudstyr** består af 20 sider med udstyret grupperet efter funktion.

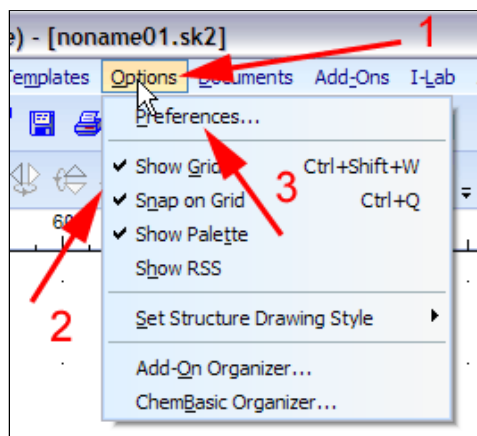


Med de rigtige indstillinger kan du opnå, at de forskellige komponenter

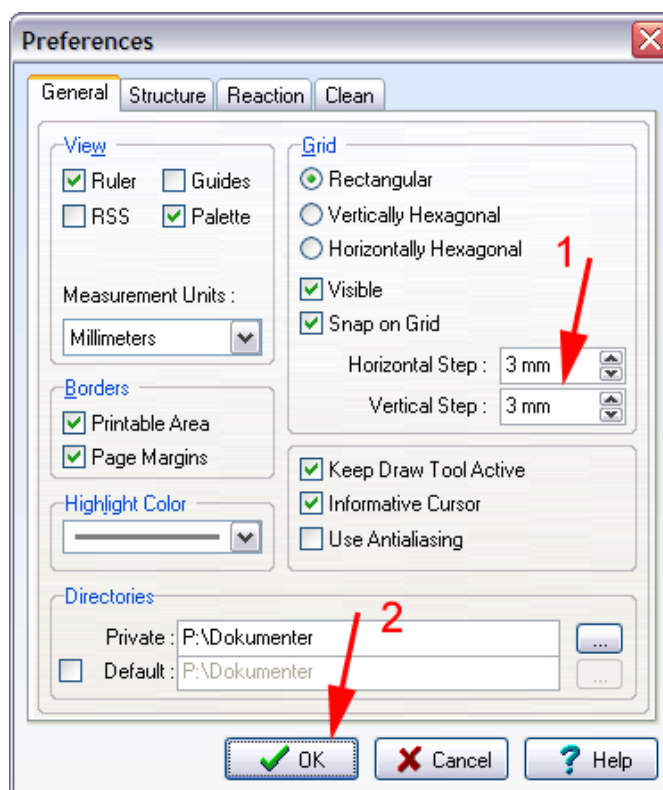
"snapper" til hinanden når du anbringer dem i dokumenter. Det kan fx betyde, at en prop kommer til at sidde midt i halsen på en kolbe og i den rigtige højde.

- **Tryk Options** (1)
- **Afmærk Show Grid** og **Snap on Grid** (2)
- **Tryk Preferences...** (3)

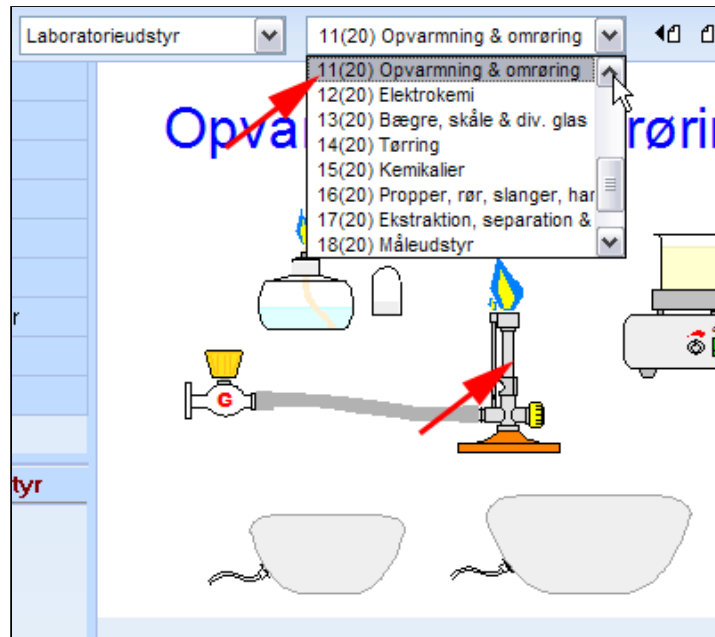
Herved fremkommer boksen **Preferences**.



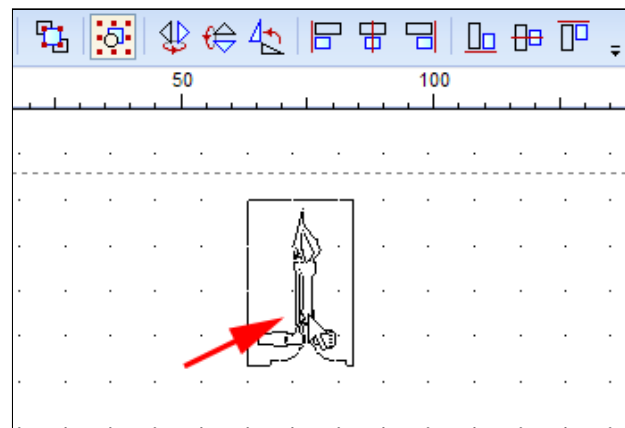
- **Vælg 3 mm** begge steder (1)
- **Tryk OK** (2)



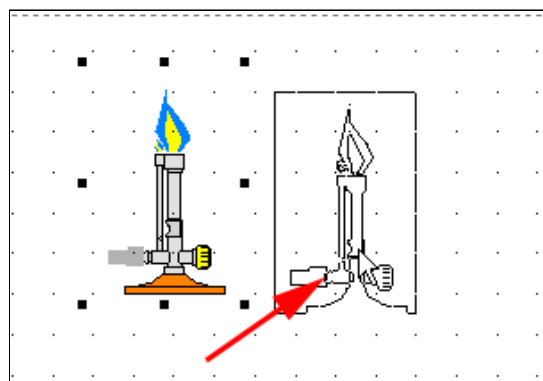
- **Vælg Opvarmning & omrøring** i listen
- **Klik** på **Bunsenbrænder**



- **Klik** et passende sted i dokumenter



- **Højreklik** et sted i dokumenter



Væsken i kolben skal være pink farvet.

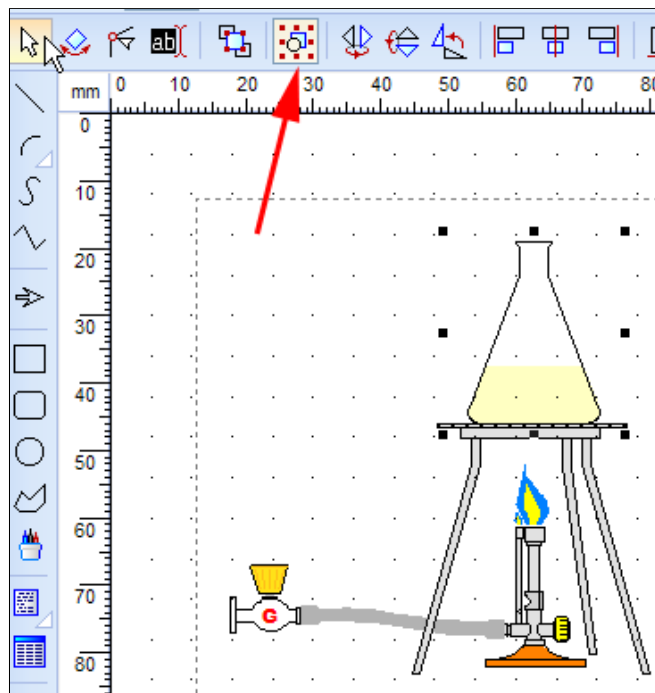
- **Klik** på kolben så den markeres

Knappen **Group** er trykket ind - det betyder, at kolben består af

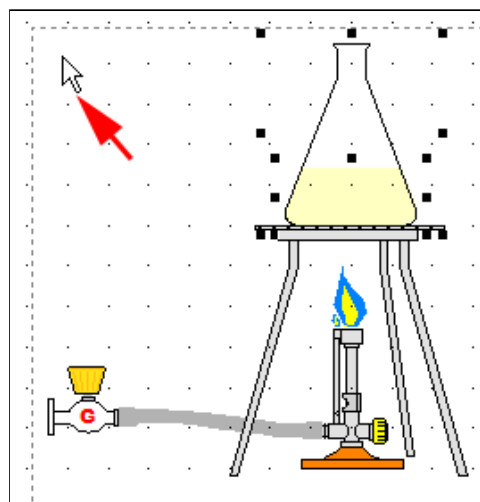
grupperede objekter

- **Tryk Group** ud

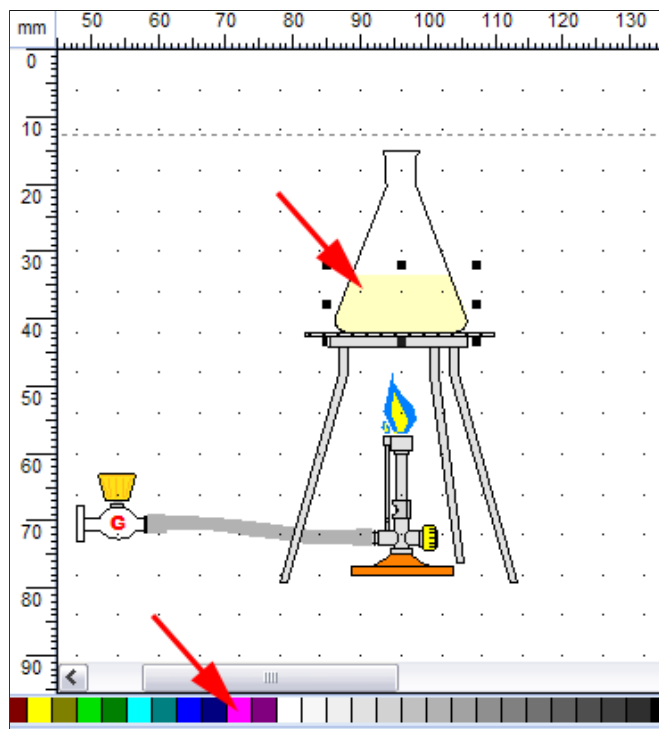
Herved opdeles kolben i kolbe og indhold.



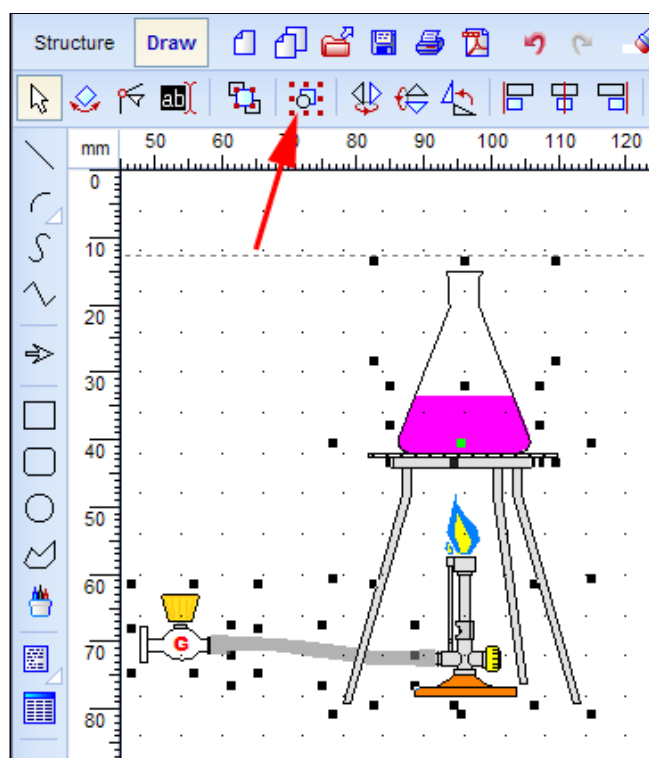
- **Klik** et sted i dokumenter for at fjerne markeringerne



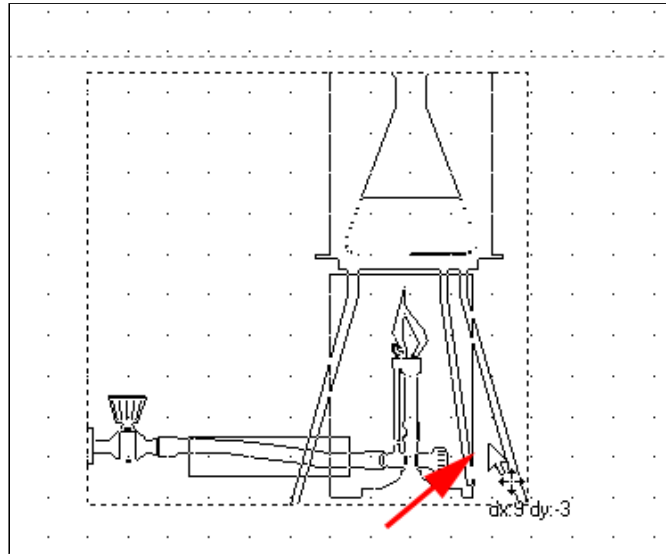
- **Klik** på **indholdet** for at markere det
- **Klik** på **pink** farve



- **Marker hele opstillingen** ved at trække diagonalt over den med musen
- **Tryk Group**



Nu er hele opstillingen ét objekt, der kan flyttes samlet.



## Opgaver

---

### Simple cycloalkaner

Tegn og navngiv simple ringsluttede alkaner med hhv. 3, 4, 5 og 6 C-atomer.  
(Husk "Clean Structure")

Tip: *En simpel ringsluttet alkan kan tegnes ved først at tegne en alkan og derpå forbinde de to endestillede C-atomer.*

[Simple Cycloalkaner løsning](#)

---

### Cycloalkaner

Tegn og navngiv alle mulige ringsluttede alkaner med 6 C-atomer.  
(Husk "Clean Structure")

Tip: *En ringsluttet alkan kan tegnes ved først at tegne en alkan og derpå forbinde 2 C-atomer som ikke er naboer.*

[Cycloalkaner med 6 C-atomer løsning](#)

---

### Pentener

Tegn og navngiv alle alkener med 5 C-atomer og 10 H-atomer.  
(Husk "3D Optimization" og "Clean Structure")

[Alkener Løsning](#)

---

### Nogle Butan- og Propan-oler

Tegn og navngiv alle mulige ikke ringsluttede butanoler med én OH-gruppe  
(Husk "Clean Structure")

Tegn og navngiv alle mulige ikke ringsluttede propanoler med to OH-grupper  
(Husk "Clean Structure")

Tip: *Aldrig to OH-grupper på samme C-atom i stabile forbindelser*

[Nogle Butan- og Propan-oler Løsning](#)

---

### HIO<sub>4</sub>

Tegn strukturformlen for HIO<sub>4</sub>

Hvad er navnet?

[HIO4 Løsning](#)

---

### K<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub>

Tegn formler for ionerne i K<sub>2</sub>HPO<sub>4</sub>

Hvad er navnet for saltet?

[K2HPO4 Løsning](#)

---

### MnO<sub>4</sub><sup>-</sup>

Tegn strukturformlen for MnO<sub>4</sub><sup>-</sup>

Tip: *Brug +værktøjet til at justere ladningen på Mn og -værktøjet til at justere ladningen på O*

[MnO4- Løsning](#)

---

## Reaktion

Opskriv og afstem reaktionsskemaerne for forbrænding af ethanol og methanol!

[Reaktion Løsning](#)

---

## Projektforslag

[Wikipedia, den frie encyklopædi](#)

### Fedstoffer og sundhed

[Eksempler på fedstoffer](#)

1. Hvad et fedtstof?
2. Hvad er mættede- og umættede fedtsyrer?
3. Hvad bestemmer et fedtstofs smeltepunkt?
4. Hvorfor hydrogenerer man planteolier
5. Hvad er trans-fedtsyrer?
6. Hvad har trans-fedtsyrer med sundhed at gøre?

### Bisphenol A

1. Søg på *Bisphenol A* i [InfoMedia](#)
2. Søg på *Bisphenol A* på Wikipedia
3. Tegn *Bisphenol A* med ChemSketch
4. Hvad er IUPAC-navnet for *Bisphenol A* med ChemSketch
5. Hvad bruges *Bisphenol A* til ?
6. Søg på *polycarbonate*
7. Tegn lidt *polycarbonate* med ChemSketch
8. Hvad bruges *polycarbonate* til?
9. Er der ligheder mellem formler for thyroxid, østrogen, testosteron og *Bisphenol A*