

IKT i kemiundervisningen - i gymnasiet og hf

Uddannelsesstyrelsens temahæfteserie nr. 8 - 1999

Undervisningsministeriet

Uddannelsesstyrelsen

1999

IKT i kemiundervisningen- i gymnasiet og hf

Udgivet af Undervisningsministeriet, Uddannelsesstyrelsen,
Område for de gymnasiale uddannelser.

Publikationen indgår i Uddannelsesstyrelsens temahæfteserie som nr 8 - 1999
og under teamet informations- og kommunikationsteknologi (ikt) i uddannelse
og undervisning

ISBN: 87-603-1428-1

ISBN: 87-603-1430-3 (internet)

1. udgave, 1 oplag, marts 1999

Omslag: Kontrapunkt A/S

Tryk: Centraltrykkeriet i Skive A/S
ISO 14001 miljøcertificeret

Pris: 130 kr inkl. moms

Bestilles (UVM 6- 235) hos:
Undervisningsministeriet

Strandgade 100 D
1401 København K

Fax: 3392 5219

E-mail: jan.alfredsson@uvm.dk

Tlf: 3392 5220

Forord

Intentionen med hæftet "IKT i kemiundervisningen - i gymnasiet og hf" er at give kemilærerne eksempler på korte og længere forløb, som er baseret på IKT. Der er eksempler på konkrete forløb til samtlige niveauer i kemiundervisningen, og der er eksempler på forløb såvel inden for det obligatoriske pensum som til valgfrie forløb. Materialet udgør en god inspirationskilde og kan være et nyttigt arbejdsredskab i det daglige arbejde, hvor det stadig kan være vanskeligt for mange at inddrage IKT i undervisningen.

De enkelte, konkrete undervisningsforløb i hæftet er udarbejdet af kemilærere, som var inviteret til at deltage i et produktionskursus i oktober 1998. Formålet med produktionskurset var at udarbejde undervisningsforløb, som fokuserede på brug af IKT såvel i den daglige undervisning som ved eksamen. Hæftets formål er at samle erfaringerne fra disse forløb, der efterfølgende blev udarbejdet af kursusedtagerne og redigeret af IKT-gruppen, der er debatforum for fagkonsulenten i kemi.

I hæftet er der givet eksempler på, hvorledes materialet kan indgå både ved mundtlig og ved skriftlig eksamen. Der er eksempler på eksamensspørgsmål, og der er eksempler på og forslag til opgaver, som kunne indgå i en skriftlig eksamen i kemi på højt niveau. Vi håber, at dette hæfte kan inspirere kemilærere til at gennemføre forsøg, som tager de udfordringer op, der bliver peget på i dette hæfte.

Bemærk, at der altid skal søges om dispensation til at gennemføre eksamen med brug af computer, hvad enten det drejer sig om en computer med bestemte indlagte programmer eller brug af Internettet. I et af afsnittene i hæftet er der givet eksempler på, hvorledes brugen af den grafiske lommeregner kan udnyttes ved opgaveløsning.

Produktionskurset og dette hæfte er blevet til i et tæt samarbejde med Kemilærerforeningen, og der vil ske en løbende opdatering af de anviste links på kemis hjemmeside.

Inge Kaufmann, fagkonsulent i kemi, GYA

Bilag mv. til *IKT i kemiundervisningen* kan frit hentes fra kemis hjemmeside:
<http://www.ke.gymfag.dk>

Arbejdsgruppen, som har udarbejdet dette hæfte, bestod af følgende kemilærere:

Helge Blom Andersen	Kolding Amtsgymnasium og HF-Kursus
Søren Hauge Andersen	Esbjerg Statsskole
H C Jensen	Frederikssund Gymnasium
Knud Ole Reffstrup	Odense Katedralskole
Preben Albertsen	Ringkøbing Amtsgymnasium
Vibeke Axelsen	Midtfyns Gymnasium
Arne Ebbesen	Rødkilde Amtsgymnasium
Bo Weinkouff Hansen	Svendborg Gymnasium
Jan Geertsen	Sct. Knuds Gymnasium
John Thomas Jacobsen	Dronninglund Gymnasium
Helge Mygind	Varde Gymnasium
Torben Wamsler	Ordrup Gymnasium
Keld Nielsen	VUC i Roskilde
Per Bøgeholdt	Ribe Katedralskole
Annette Nyvad	Thisted Gymnasium og HF-kursus
Paul Thulstrup	Aarhus Katedralskole
Lise Lotte Enevold Hansen	Viby Amtsgymnasium og HF
Tine Spanggård	Mulernes Legatskole
Leif Striegler	Birkerød Gymnasium og HF
Finn Sørensen	Amtsgymnasiet i Paderup
Andreas Vedel	Vesthimmerlands HF og VUC
Tove Eriksen	Amtsgymnasiet i Roskilde
Inge Kaufmann	Fagkonsulent kemi

Bidragene til hæftet er blevet redigeret af IKT-gruppen, så afsnittene samlet fremtræder som en mere ensartet helhed.

IKT gruppen består af:

Helge Blom Andersen
Søren Hauge Andersen
H C Jensen
Knud Ole Reffstrup

Indholdsfortegnelse

Elever laver kemiweb.....	9
Hvad er formålet?.....	9
Eksamen.....	13
Redoxkemi på Internettet – et undervisningsforløb i 1.g.....	15
Indledende overvejelser	15
Søgning på Internet	15
Grundlæggende begreber og teknikker i redoxkemi	17
Redoxreaktioner i hverdagen	18
Eksperimentelt arbejde med brug af Internettet.....	19
Pædagogiske og fagdidaktiske aspekter af et internetforløb.....	22
Om at gemme kildemateriale på lokal harddisk	23
Elementær organisk kemi med <i>ChemSketch</i>	25
Overblik over <i>ChemSketch</i>	25
Alkaner – formler, navne og isomeri.....	28
Alkener og alkyner	30
Undervisningsforløb med alkener og alkyner.....	31
Forløb om arener	32
Alkoholer.....	34
ChemSketch og eksamen	36
Bilag 1: Maskinkrav, download, installering og start af ChemSketch.....	37
Bilag 2: Vejledning til laboratorieudstyrskabelon	39
Bilag 3A: Side 1 af ChemSketchfilen <i>Meyer2.sk2</i>	40
Bilag 3B: Side 1 af ChemSketch-filen <i>LabUdstyr.sk2</i>	41
Aminosyrer og carbohydrater med <i>ChemSketch</i>	42
Om brugen af <i>ChemSketch</i>	42
Undervisningsforløb om aminosyrer	44
Carbohydrater.....	49
Eksamen.....	53
Visualisering med <i>Weblab Viewer Lite</i>	54
Hvad er <i>WeblabViewer Lite</i> ?.....	54
Brugerfladen i <i>Weblab Viewer Lite</i>	55
Eksamen.....	54
Aspirin krydret med Internet og <i>HyperChem</i>	64
Søgning efter molekylstrukturen på Internet.....	64
Visualisering og beregning med <i>HyperChem</i>	65
Supplerende materiale om aspirin	68
Eksamen.....	69

Syrebasetitrering - simulation og datafangst	71
Det teoretiske forarbejde.....	71
Datafangst.....	74
Simulering af pH-titreringskurve fra datafangst.....	76
Eksamen.....	78
Beregning af pH ved hjælp af Ti-83	80
Model for protolyseligevægt.....	80
pH program til Ti-83 lommeregner	81
Arbejdsopgaver med besvarelse.....	84
Eksamen.....	85
NMR- og IR-spektroskopi som valgfrit emne	86
Hvor hentes NMR-, IR- og MS- spektre?	86
<i>HNMR-viewer</i> og <i>CNMR-viewer</i>	87
<i>gNMR</i>	95
Organic Chemistry Online	101
Infrared Spectroscopy Tutorial and Reference (<i>IR Tutor</i>).....	103
Proton NMR Basics and Reference (<i>NMR Tutor</i>).....	103
Udklipning af spektre og anden grafik med <i>Screen Rip32</i>	104
Web-baserede opgaver.....	104
Spektroskopiopgaver, der lægger op til brug af computer.....	108
Spektroskopiopgaver, som kan løses ved hjælp af Databog fysik kemi	111
Eksamen.....	116
Analyse af farvestoffblanding ved spektrofotometri og regneark	117
Brugervejledning	117
Teorien bag regnearket.....	118
Ideeer til brug af regnearket	119
Elektroniske bilag.....	119
Eksamen.....	119

Elever laver kemiweb

Arne Ebbesen, Lise Lotte E. Hansen, Leif Søren Striegler og Torben Wamsler

Hvad er formålet?

Synliggørelse af elevernes arbejde

Problemer vedrørende elevrapporter er beskrevet og analyseret i mange artikler om skrivepædagogik, som er offentliggjort i de senere år. Et af problemerne omkring elevers manglende motivation kan være, at rapporter i højere grad skrives til læreren end til en person på elevernes eget faglige niveau. Hvis elevernes produkter blev lettere tilgængelige, fx ved at blive offentliggjort på Internettet, ville elevers interesse for hinandens arbejde stimuleres.

Evne til kritisk at sortere og udvælge information

Internettet er overvejende uensureret; det indeholder såvel gode som dårlige kemiemner, og der er ingen garanti mod fejl i indlæg på Internettet. Det stiller skrappe krav til elevernes kritiske sans. Størstedelen af den information, man finder, må kasseres af forskellige årsager. Eleverne skal derfor lære at sortere og udvælge nyttig kemisk information. Denne evne kan de udvikle gennem øvelse i takt med, at deres faglige niveau udbygges. Følgende spørgsmål bør indgå under evaluering af et webbaseret produkt:

- hvorfor har I valgt at bruge netop denne webside?
- er websiden kemisk relevant og korrekt?
- hvilke fordele og ulemper ser I ved denne webside?

Eleverne kan nemt komme ud i grænseområder for deres viden. Men selv om de kommer på gyldende grund, tror vi på, at de er i stand til at gennemskue påstande som: *havvand indeholder sodium og klorin* ! (fra en webside om havvand).

Måltrettet søgning

At surfe kan være sjovt, men tidskrævende. Det er en udbredt opfattelse, at Internettet lokker surfer med det hurtige *kick* og derved modarbejder fordybelse og engagement. En anden holdning er, at surferiet overvinder blokeringer og kan bruges som en idemaskine i starten af et projektarbejde. At surfe på Internettet minder på denne måde lidt om den frie association. Som den frie association bør følges op af en efterfølgende strukturering, bør surferiet suppleres med egentlig måltrettet søgning. Det er nødvendigt at sætte eleverne i gang med at finde nogle ganske bestemte oplysninger på Internettet, så de derved opøves i den *måltrettede* søgning, som er en nødvendighed for at kunne bruge Internettet effektivt. Måske er man så heldig, at eleverne får en oplevelse af, at deres egne ideer tager form?

Variation i undervisningen gennem web-produktion

Der er en sidegevinst i, at elever laver deres eget web – nemlig at de bruger et medie med nogle nye muligheder. Det kan virke både igangsættende og inspirerende og styrke indlæringen ved at appellere til elevtyper med sans for det visuelle og for det sproglige. Det er også stimulerende, at faget

kemi på denne måde følger med tidens signaler. Eleverne oplever, at kemi er en videnskab, som er i stadig vækst og udvikling.

Et kemi-web *kan* udbygges på mange måder, fx med tæller og animationer. Man skal dog være meget bevidst om tidsforbruget. Webet kan udbygges til også at omfatte mellem- og højniveau og danne basis for en fast kemi-web på den enkelte skole, men det kræver ressourcer til den løbende vedligeholdelse.

Kemi-web om eddikesyre

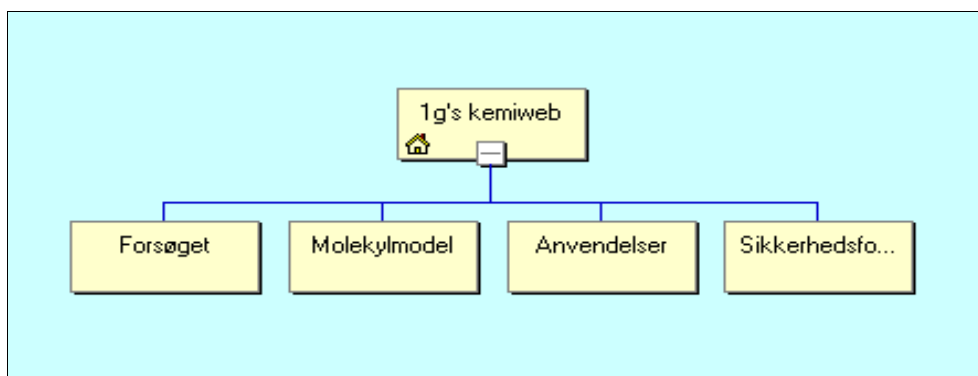
Forudsætninger

Det forudsættes, at eleverne har været igennem et introduktionskursus i tekstbehandling og har gennemført et minikursus i fremstilling af websider. Tidsforbruget anslås til 1 lektion til eksperimentelt arbejde og 1/2 dag til efterbehandlingen. Produktion af websider er velegnet som arbejdsopgave til en blokdag. Det eksperimentelle arbejde kan nemt indgå i 1.g pensum.

Dette konstruerede eksempel viser, hvordan et elevprodukt opbygget omkring eddikesyre kunne se ud. Strukturen i eksemplet fremgår af figur 1. Eleverne starter arbejdet ud fra en skabelon svarende til figur 1. Skabelonen kan udbygges, men man kan også fravælge dele. Indholdet i de fem sider er antydnet på de følgende figurer. Indholdet må til enhver tid afhænge af situationen. Læreren vælger, hvor meget af indholdet der bør ligge i skabelonen fra begyndelsen. Webet indeholder links til såvel egne som fremmedproducerede websider. På mellem- og højniveau i 2.g og 3.g er der flere muligheder for spændende opgaver.

Kemi-web om eddikesyre findes på webadressen

<http://www.kolding-gym.dk/kemiweb>



figur 1

Herunder følger en kort oversigt over indholdet på de fem sider. Hvor hjemmesiden fylder mere end skærbilledet, er der kun vist et udsnit af siden.

- forsøget: figur 3 - 7
- molekylmodel: figur 12 - 14
- anvendelser: figur 8 - 11
- sikkerhedsforskrifter: figur 15 - 17



figur 2



figur 3

Lagereddike

Eddikesyre har formelen CH_3COOH . Eddikesyre bruges blandt andet i husholdningen til afkalkning af f.eks. kaffemaskiner. Når eddikesyre anvendes under betegnelsen eddike betragtes det som et almindeligt levnedsmiddel. Eddike har en konserverende virkning og anvendes desuden for at give en sur smag f.eks. i dressing, mayonaise, aiselage og mange andre former for levnedsmidler. Koncentreret eddikesyre (seddike) er ætsende, men den koncentration der findes i lagereddike og i fødevarer, er så lav at der ikke er nogen sundhedsmæssige problemer. Koncentreret eddikesyre kaldes seddike da dens smeltepunkt ligger ved 18°C , og derfor i lidt kølige rum foreligger på fast form (iskrystaller).

Lagereddike!
Aaauugh... sure show

figur 4



figur 5

[Tilbage](#)

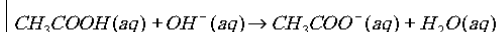
Her ses egne **forsøgsresultater**:

$\text{M}(\text{CH}_3\text{COOH})$	=	60,05 g/mol
$\rho(\text{lagereddike})$	=	1,0 g/mol
$c(\text{NaOH})$	=	0,100 M
$V(\text{prøve})$	=	2,0 mL
$V(\text{ækv})$	=	16,05 mL

figur 6

Syre-basetitrering

Til at bestemme indholdet af en syre i en given opløsning, bruger man en syre-basetitrering. Man kunne f.eks. lave en titrering af eddikesyre med natriumhydroxid, hvorunder følgende reaktion forløber:



Da vi bliver ved med at tilsætte base, vil der snart ikke være mere syre tilbage, og på et eller andet tidspunkt vil vi lige nøjagtigt have brugt eddikesyren op. Dette punkt kaldes ækvivalenspunktet, og det kan bestemmes ved at lave en kolorimetrisk titrering, hvilket er en titrering ved hjælp af en pH-indikator, som i dette tilfælde er phenolphthalein. Omkring ækvivalenspunktet vil pH stige meget for hver dråbe, der tilsættes, og det er

figur 7



figur 8

Som grundregel kan det anbefales, at man først prøver med lidt fra husholdningens normale varesortiment, der også er betragtelig billigere end deciderede produkter til kalk- og rustaflejninger.

Prøv med husholdningseddike
Prøv først med husholdningseddike og "knofedt". Er der tale om lidt sværere kalk- og rustaflejninger kan man gå over til eddikesyre 32% eller saltsyre 30%. Disse kemikalier er meget stærke sager og skal helst undgås for ens egen og miljøets skyld.

Hvis de kalk- og rustaflejninger, der forefindes på saniteten, er af den rigtig grove art, kan man kontakte den lokale VVS-installatør, der kan skaffe produkter af blandinger af organisk og uorganisk syre. Det kan eksempelvis være BD-Clean og Antibak Cleaner. Også her skal man dog være opmærksom på, at de så sandelig ikke er helt "uskyldige". De er ætsende og skal skylles grundigt efter med vand.

occurring amino acids (L-Aspartyl-L-phenylalanine methyl ester)

Acresulfame K

Non nutritive sweeteners. About 200 times as sweet as sucrose. Ace-k is a more stable sweetener than aspartame and presumably

that you may have noticed when a freshly cut apple is exposed.

Nitrites

Potassium and more commonly sodium nitrite are used in the curing of meats. They are used to fix the red color, to inhibit microorganisms and to aid

Acetic acid, the acid found in vinegar (3%) used as a preservative in ketchup, mayonnaise etc.

Many of the additives used in the processing of food are safe however a few such as the nitrates and nitrites are cause for serious concern.

Hosted by **SunSITE Denmark**

Mortens Opskriftsamling

eddike

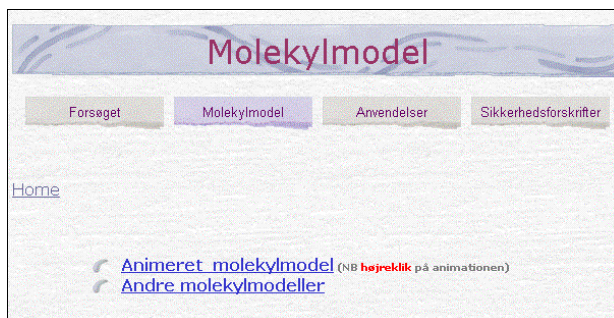
["Ejner Sild"](#)
[Afkalknings](#)
[Agerkålssalat](#)
[Amerikansk Laks](#)
[Amerikansk Laks med hvidt](#)
[Anetinsild](#)
[Artikobånd med smør](#)

[Ostetost med smør](#)
[Panderist](#)
[Panderist](#)
[Panderist](#)
[Panderist](#)
[Panderist](#)
[Panderist](#)
[Panderist](#)

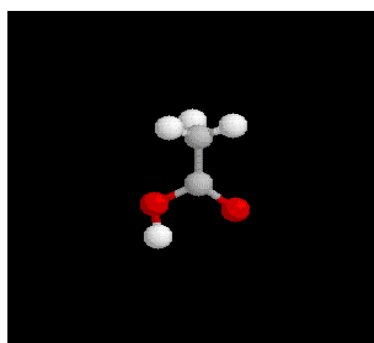
figur 9

figur 10

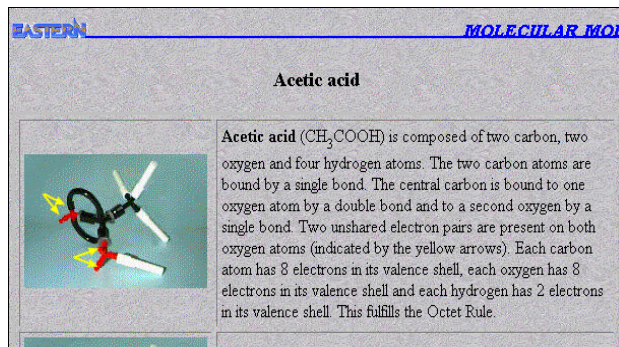
figur 11



figur 12



figur 13



figur 14



figur 15

Sidst opdateret: 06/10/98
Husholdning

Bilag til pjecen [Grøn rengøring](#)

Oversigt over rengøringsmidler

- [Brun sæbe \(krystalsæbe\)](#)
- [Eddike \(husholdningseddike\)](#)
- [Eddikesyre, 32%](#)
- [Kalkfjerningsmiddel \(surt\)](#)
- [Klorholdigt rengøringsmiddel](#)
- [Opvaskemiddel](#)
- [Skuremiddel, skurepulver](#)
- [Sæbespån](#)
- [Toiletrensning](#)
- [Universalrengøringsmiddel](#)
- [Vaskeplejemiddel / natursæbe](#)

figur 16

HHMI LABORATORY SAFETY

LCSS: ACETIC ACID

Substance	Acetic acid (Ethanoic acid) CAS 64-19-7
Formula	CH ₃ COOH
Physical Properties	Colorless liquid bp 118 °C, mp 17 °C Miscible in water (100 g/100 mL)

figur 17

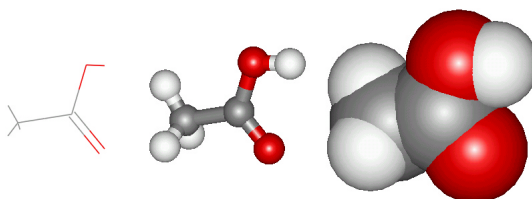
Eksamen

Et kemiweb kan bruges som indfaldsvinkel til et eksamensspørgsmål. Det er dog vigtigt i denne forbindelse at fastholde det kemiske indhold og undgå, at eksamensspørgsmålet omhandler Internettet og fremstilling af websider.

Læreren sørger for, at websiderne findes på skolens server, og at de er tilgængelige for eleverne herfra. Hvis websider indgår i eksamenspensum, skal eleverne have en papirudskrift af disse sider.

Forudsætning for at benytte et kemi-web til eksamen må være, at man har forbindelse til skolens netværk fra både forberedelseslokale og eksamenslokale. Da websider på Internettet hele tiden ændres eller sågar nedlægges, må læreren sikre sig, at de relevante websider er tilgængelige for eleverne til eksamen. Det kan gøres ved at gemme hele webet på fx skolens server, hvilket kan gøres med programmet *Sitesnag*. På side 23 er beskrevet hvorledes man gemmer kildemateriale på lokal hard-disk ved brug af dette program.

Man kan overveje at søge om gruppeeksamen i forbindelse med et sådant web-projekt.



Eksempler på eksamensspørgsmål

Eddikesyre-projekt

Du skal kort redegøre for følgende emner:

- Bestemmelse af ethansyres masseprocent
- Hvad er en syre og en base?

Du skal endvidere redegøre for et udvalg blandt følgende kemi-relevante elementer på klassens kemiweb:

- Hvilke links fandt du/gruppen relevante og hvorfor ?
- Hvorledes vurderer du kvaliteten af de anvendte link set fra en kemifaglig synsvinkel?
- På kemiwebbet er der links til sider med forskellige molekylemodeller. Hvad kan du udlede af sådanne modeller ?
- På kemiwebbet er der links til sider med forskellige anvendelser af ethansyre. Redegør for teorien for hvorledes ethansyre fjerner kalken i et toilet!

Eddikesyre-projekt

Du skal kort redegøre for følgende emner:

- Hvad forstås ved pH?
- Hvad er en titrerkurve ?

Du skal endvidere redegøre for et udvalg blandt følgende kemi-relevante elementer på klassens kemiweb:

- Hvilke links fandt du/gruppen relevante og hvorfor?
- Hvorledes vurderer du kvaliteten af de anvendte link set fra en kemifaglig synsvinkel?
- På kemiwebbet er der links til sider med forskellige formler for ethansyre. Hvorledes kan du slutte dig til hvilket hydrogenatom, der er det "sure"?
- På kemiwebbet er der links til sider med forskellige anvendelser af syrer. Hvorfor kan det være nødvendigt, at anvende en blanding af uorganiske og organiske syrer, når der skal fjernes grove kalk- og rustaflejringer på sanitet?

Redoxkemi på Internettet – et undervisningsforløb i 1.g

Vibeke Axelsen, Bo Weinkouff Hansen og Finn Sørensen

Indledende overvejelser

Det undervisningsforløb, som omtales her, er nemt at gå til, selv om man ikke før har anvendt Internettet eller computere i kemiundervisningen, men et vist elementært kendskab til computere og Internettet forudsættes dog (tænd og sluk kursus).

Det faglige mål er, at eleverne bliver fortrolige med begreberne oxidation og reduktion. De bliver i stand til at afstemme reaktionsskemaer for redoxprocesser ved brug af oxidationstrin, og de stifter bekendtskab med redoxkemi såvel i laboratoriet som ude i "det virkelige liv". Indholdet er traditionelt, men undervisningsmaterialet skal findes på Internettet.

Forløbet består af tre dele. Først skal eleverne lære grundlæggende begreber og teknikker. Herefter skal de finde frem til nogle anvendelser af redoxkemi i hverdagen, og endelig skal de finde informationer, som sætter dem i stand til at løse en eksperimentel opgave.

Vi forestiller os ikke, at forløbet bliver én lang computersession. Undervejs vil der komme variation i form af opsamling, mundtlig fremlæggelse, opgaveregning og elev- og demonstrationsforsøg.

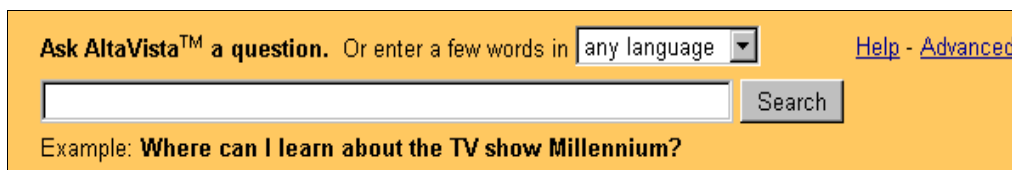
Der kan være stor forskel på såvel elevernes kendskab til Internettet som deres kemiske viden. Det vil derfor være oplagt at udnytte undervisningsdifferentiering i forløbet. Alle skal opfylde minimumskravene, men der vil være mange ekstra udfordringer at finde på Internettet for interesserede elever, der gerne vil nå længere.

Udover at give eleverne rutine i at navigere på Internettet kan forløbet stimulere elevernes interesse både for kemi og for anvendelse af Internettet i kemiundervisningen, så de på senere tidspunkter vil søge informationer på Internettet af egen drift. Det vil være oplagt at lave det skriftlige arbejde i html-format og lægge undervisningsmaterialet på en webserver. Der er også den mulighed, at elevernes produkter samles på en hjemmeside for hele klassen.

Søgning på Internet

Der er i princippet to muligheder. Man kan bruge en søgemaskine eller lade andre gøre arbejdet for sig – dvs. bruge nogle links som andre har fundet. Meget taler for den sidste mulighed. På kemis hjemmeside findes mange udmærkede links, og nogle af dem fører frem til sider om redoxkemi. Vi vælger dog at bruge en søgemaskine. Det er tit den mest direkte vej til relevante sider, og så tjener det yderligere det formål, at eleverne lærer at bruge søgemaskiner.

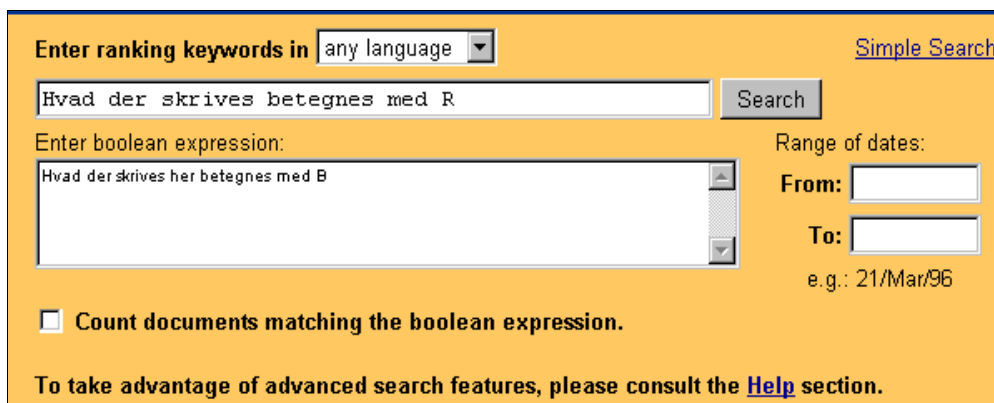
Vi anvender udelukkende søgemaskinen *AltaVista* (www.altavista.com), men andre søgemaskiner ville sikkert være lige så gode. Søgmaskiner som *Exite* og *Kvasir* har samme struktur som AltaVista, men vi foretrækker, at eleverne bliver fortrolige med én søgemaskine, før de kaster sig over andre søgemaskiner kan være lunefulde! AltaVista har en god hjælpesektion, som med fordel kan udskrives.



Ask AltaVista™ a question. Or enter a few words in any language [Help](#) - [Advanced](#)

Example: **Where can I learn about the TV show Millennium?**

Det sprog, der anvendes på de fleste relevante hjemmesider, er engelsk, og man skal bruge engelske søgeord som *redox*, *oxidation*, *reduction*, *electrons*, *balancing*, *laboratory* osv. Simpel søgning på et eller flere af disse ord returnerer et uoverkommeligt antal links. Vi anvender derfor avanceret søgning i AltaVista (klik på ordet **Advanced**) og indtaster søgeord i følgende søgeformular:



Enter ranking keywords in any language [Simple Search](#)

Enter boolean expression:

Range of dates:

From:

To:

e.g.: 21/Mar/96

☐ Count documents matching the boolean expression.

To take advantage of advanced search features, please consult the [Help](#) section.

I det efterfølgende kommer forslag til søgestrengene, der giver et rimeligt lille antal links. Vi benytter notationen **R** for, hvad der skrives i feltet *Enter ranking keywords in* og notationen **B** for, hvad der skrives i feltet *Enter boolean expression*.

Internettet ændrer sig hele tiden, og søgemaskiner bliver løbende ændret (forbedret?). Det er derfor under alle omstændigheder nødvendigt at afprøve søgestrengene, før eleverne sættes til at bruge dem.

Eleverne kan gemme bogmærker på disketter. Her beskrives fremgangsmåden i MS Internet Explorer. Tilsvarende funktioner findes i Netscape.

Overføring af bogmærker fra Internet Explorers *Foretrukne* til diskette:

- **Vælg Foretrukne** | **Arranger foretrukne...**
- **Hold Ctrl**-tasten nede og **marker** bogmærker med musen
- **Højreklik** på markerede bogmærker | **Vælg Overfør til... 3,5"-diskette (A)**

Overføring af bogmærker fra diskette til *Foretrukne*:

- **Vælg Foretrukne** | **Arranger foretrukne...** | 3,5"-diskette (A)
- **Højreklik** på markerede bogmærker | **Tryk Flyt** | **Vælg Yndlingssteder** | **Tryk OK**.

Bogmærker er nyttige, forudsat de besøgte websider ikke ændres for hurtigt. Hvis websiderne ændres eller måske direkte nedlægges, vil bogmærkerne ikke være til nogen hjælp. Det vil i sådanne tilfælde være nødvendigt at gemme websiderne lokalt på diskette eller harddisk. I det afsluttende afsnit om eksamen omtales mere detaljeret, hvilke muligheder der er.

Grundlæggende begreber og teknikker i redoxkemi

Hvis eleverne søger på må og få, kan de bruge megen tid uden at finde relevante dokumenter. Den første del af forløbet er derfor meget styret. Målet er at give eleverne indtryk af søgeteknikken, og de får ikke adresser udleveret til at begynde med.

Eleverne prøver at søge med en eller flere af følgende søgestrengene:

B: *oxidation NEAR reduction NEAR links*

B: *oxidation NEAR reduction NEAR "basic concepts"*

B: *oxidation NEAR reduction NEAR teaching*

R: *"basic concepts"* **B:** *title:redox*

R: *balancing* **B:** *title:redox*

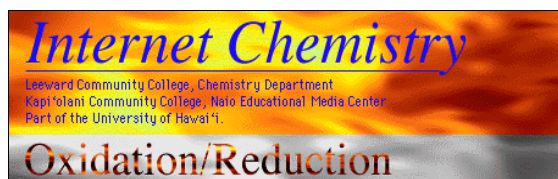
R: *redox* **B:** *"chemistry resources" AND redox*

Når et søgeresultat har ført frem til en side, er det en god ide at søge i den indlæste side efter et nøgleord for at vurdere, om siden er relevant.

- **Vælg Rediger | Søg**(på denne side)...

Søg fx på *oxidation*. Ved at se på den sammenhæng, ordet *oxidation* optræder i, kan man som regel hurtigt vurdere, om siden er relevant.

Anbefalede webadresser:



http://naio.kcc.hawaii.edu/Chemistry/redox_title.html

Webstedet indeholder et programmeret undervisningsforløb i elementær redoxkemi. Her kan man lære meget. De grundlæggende begreber og teorien gennemgås grundigt, og der er links til en lang række *interaktive opgaver*. Brugeren kan i eget tempo veksle mellem teori, og opgaver som tester forståelsen. Vær dog opmærksom på, at afstemning af redoxreaktionsskemaer bygger på *halvreaktioner* i langt højere grad, end der er tradition for i Danmark.



<http://www.erols.com/merosen>

Siden er meget flot og indeholder en lang række links om redoxkemi. Afstemning af redoxreaktionsskemaer foregår i overensstemmelse med den danske tradition. Der er mange udfordringer for interesserede elever, fx elektrokemi med flotte illustrationer.



<http://agt.net/public/alariv/nelson.htm>

Siden som er ret lang er bygget op som indholdsfortegnelse til en kemibog. Søg efter fx *reduction* for at komme hurtigt frem til det relevante kapitel, hvor der er en række links, både til elementært stof og til højere niveauer.

Redoxreaktioner i hverdagen

Efter det indledende arbejde skal eleverne søge informationer på Internettet om redoxreaktioner i hverdagen. Søgningerne skal udmøntes i et mundtligt elevoplæg om det valgte emne samt et skriftligt arbejde i form af et resume. Denne anden del af forløbet *Redoxkemi på Internettet* kan udmærket bruges særskilt som supplement til en traditionel gennemgang af redoxkemi eller som valgfrit emne.

Søgning

Måske har eleverne allerede i første del af forløbet set henvisninger til redoxreaktioner i hverdagen i deres søgning efter teori og træningsopgaver. I givet fald ved de, hvor de skal søge og kan udtænke en god søgestreng. Hvis eleverne ikke har fundet egnet materiale, kan de sættes i gang med "*advanced*" søgning i AltaVista med følgende søgestreng:

B: *everyday NEAR redox*

Søgestrengen returnerer et overskueligt antal links (december 1998: 33 links). Blandt de første 10 links finder man henvisninger til sider med bl.a. foto-oxidation (brilleglas som skifter farve i sollys), korrosion og tørbatterier. Disse sider er undersider stammende fra føromtalt *Internet Chemistry* (se afsnit 3), som flere elever sikkert har besøgt under første del af forløbet. På *Internet Chemistry* findes flere eksempler af både biologisk og kemisk interesse: Blegemidler, fotosyntesen, nitrogen reduktion og oprensning af metaller, for blot at nævne nogle. En indlæst side kan indeholde links til andre relevante sider. For at få et hurtigt overblik kan eleverne søge i siden efter ordet *everyday*. Søgningen vil vise de links, hvor ordet "everyday" direkte forekommer i link-beskrivelsen.

Blandt de første 10 links finder man henvisning til

<http://www.geocities.com/Athens/Acropolis/5364/E2-REDOX.html>.

På adressen finder man omtale af elektrokemiske elementer (forskellige tørbatterier, brændselsceller, genopladelige batterier osv) samt eksempler på korrosion, og hvordan korrosion undgås.

Ved brug af funktionen Søg(på denne side)... får eleverne i alle tilfælde noget materiale at arbejde videre med, men ved at anvende Søg(på denne side)... på ordet *everyday* kan man desværre få sorteret brugbare videregående links fra, fordi ordet *everyday* ikke forekommer direkte i beskrivelsen. Det vil derfor altid være en god ide at lade eleverne gennemse nogle flere sider fra det oprindelige søgeresultat.

Efterbehandling af søgeresultater

Eleverne læser nu de sider igennem, som de har valgt. Da teksterne oftest er skrevet på engelsk, er det en god ide (en nødvendighed?) at inddrage faget engelsk i projektet. Eleverne skriver en noteside på dansk, hvor de giver et kort resume, som skal indeholde reaktionsskemaer og gerne figurer hentet fra internetsider. Notesiden skal indeholde en beskrivelse af søgeproceduren (søgemaskine og søgestreng) samt adresser til de sider, hvorfra oplysningerne er hentet. Hvis notesiderne skal samles til en fælles hjemmeside for klassen, er det en fordel at gemme dem i html-format, se afsnittet: *Tekniske forhold vedrørende elektroniske rapporter*. Det er tanken, at elevernes sider desuden skal indgå som en del af den rapport, de skriver over det eksperimentelle forløb.

Eksperimentelt arbejde med brug af Internettet

Demonstrationsforsøg

Internettet er en inspirationskilde med hensyn til demonstrationsforsøg. Der er muligt at hente nye variationer af traditionelle forsøg samt inspiration til forsøg, som ikke traditionelt indgår i dansk kemiundervisning.

Som eksempel kan nævnes eksperimentet *Mineralisches Chamäleon* fra det tyske *Experiment des Monats* (november 1998).

<http://www.uni-ulm.de/uni/fak/natwis/sroel/exp/edm1198.html>

Der er tale om en variant af et klassisk forsøg til demonstration af mangans forskellige oxidationstrin. Websiden indeholder en fuld beskrivelse af forsøget og giver forslag til reaktionsskemaer for de viste reaktioner.

Forsøget passer fint ind i forløbet på dette sted, hvor der foretages opsamling af elevernes udbytte af den grundlæggende redoxkemi. Lav fx et mindre gruppearbejde med krav om angivelse af oxidationstal og opskrivning af afstemte reaktionsskemaer.

Experiment des Monats er værd at besøge en gang om måneden. Der er links til tidligere måneders forsøgsbeskrivelser.

Eleveeksperimenter

Som opfølgning af de første to afsnit i internetforløbet kan eleverne stilles over for en problemformulering af følgende type:

Du skal kvantitativt analysere en jernholdig forbindelse ud fra en redoxreaktion. Der vil være flere problemer at løse:

- at bestemme formelen for et hydratiseret jern(II)salt
- at bestemme indholdet (i masse%) af jern i en forbindelse
- at bestemme renheden af en jernforbindelse
- at bestemme koncentrationen af jern(II)-ioner i en opløsning vha. redoxtitrering. Indholdet af jern skal angives i masse-%.

I laboratoriet vil der fx være følgende emner til analyse/rådighed: jern(II)sulfat $\cdot xH_2O$, ståluld, jernpiller eller andet jernholdigt materiale.

Ved søgning efter metoder eller forskrifter på Internettet skal eleverne finde eksempler på reaktioner, der kan anvendes til løsning af problemstillingen. Det primære er i første omgang at finde et eller flere oxidationsmidler, som kan anvendes i reaktion med jern(II)-ioner. Nogle websider indeholder meget detaljerede laboratorieprocedurer, andre beskriver måske kun metodikken. Nogle elever finder ganske givet frem til anvendelse af permanganation, andre til dichromation. Begge metodikker vil kunne findes i forskellige variationer, dels i forbindelse med indstilling af kaliumpermanganat og dels i forbindelse med indikatoranvendelse ved dichromat-metoden.

Efterbehandling af internetsøgning

Eleverne har gemt og sikkert også udskrevet de valgte websider. Deres opgave er derpå at udforme en vejledning på dansk, som kan anvendes i laboratoriet ved løsning af den eksperimentelle opgave. Eleverne skal beskrive hele det eksperimentelle forløb

- hvorledes bringes jernholdige emner i opløsning som jern(II)-ioner?
 - hvorledes fastlægges koncentrationen af permanganat eller dichromat?
 - hvorledes fastlægges ækvivalenspunktet?
 - hvorledes beregnes de anvendte stofmængder, og hvorledes skal resultater beregnes?
 - hvilket apparatur/udstyr skal anvendes?
 - hvilke risikoforhold kan tænkes og hvilke hensyn tages hertil. Hvorledes håndteres affald?
- På Internettet findes websteder med information om disse forhold .

Forløbet lægger op til høj grad af differentieret undervisning og stor selvstændighed ved efterbehandling. Arbejdet foregår som en skriveproces. Det vil være naturligt, at gruppernes forslag afleveres på elektronisk form til læreren, som kommenterer og drøfter forslaget med de enkelte grupper. Derpå gendistribueres vejledningen. Det vil også være naturligt, at det endelige produkt bliver tilgængeligt på klassens webside. Når produktet er endeligt godkendt af læreren, går eleverne i laboratoriet og udfører de pågældende eksperimenter.

Rapporter over de udførte eksperimenter skal afleveres på elektronisk form og i de enkelte rapporter skal der indgå billeder eller tegninger. Tegninger af laboratorieudstyr kan nemt tegnes vha. programmet ChemSketch. Grafisk materiale hentet fra Internettet kan anvendes i rapporten, hvis der anføres præcis kildeangivelse.

Det er vigtigt, at eleverne med egne formuleringer beskriver *formål*, *udstyr* og *procedure* grundigt. Desuden skal rapporterne naturligvis indeholde beregninger, kommentarer mv.

Det er særdeles vigtigt, at rapporterne indeholder kildeangivelser og referencer. De internetadresser, som eleverne har hentet inspiration fra, skal være anført. For at lette arbejdet kan det tidligere omtalte oplæg om hverdagskemi kan indgå som indledning (teoriafsnit) til rapporten, hvorved alt materialet fra eleverne/grupperne samles i ét dokument.

Rapporterne vil være forskellige både med hensyn til indhold og omfang, og de bør af hensyn til de øvrige grupper lægges på klassens webside. Her får læreren et arbejde at udføre - en proces, der kan kombineres med retning af rapporterne. Læreren kommentarer kan tilføjes det elektroniske dokument, inden det lægges ind på klassens hjemmeside.

Forslag til søgning på eksperimentelt stof

Eleverne har sandsynligvis allerede fundet nogle links til eksperimenter under de første delforløb med redoxkemi. Selv om det ikke måtte være tilfældet, vil eleverne på dette tidspunkt være betydeligt mere sikre i søgefunktionerne og også mere målrettede, da de vil gå efter nogle af de kendte links.

Lad eleverne prøve sig frem med nogle af nedenstående søgestrengene i AltaVista:

R: *redox titration iron*

B: *redox NEAR titration NEAR iron*

B: *reduction NEAR oxidation NEAR "lab activities"*

B: *experiment NEAR iron NEAR reduction NEAR oxidation*

B: *"Determination of iron" NEAR redox*

Det kan anbefales at se nærmere på følgende webadresser:

<http://chemweb.chem.fsu.edu/editors/tvickers/Fe/dichroma.htm>

- en kort, men alligevel detaljeret vejledning

<http://lamb.chem.ucsb.edu/EXPT6B.html> (permanganat)

- inkluderer indstilling af permanganat

http://willow.uml.edu/www/Chemistry_Dept/CHEMLAB/16.HTM

- inkluderer indstilling af permanganat

<http://www.people.virginia.edu/~roa2s/2114-expt05.html>

- her anvendes dichromat og diphenylaminsulfonat som redoxindikator

<http://hydrogen.chem.cmu.edu/09-101/labs/redox/Redox.html>

- en grundig vejledning. Her anvendes dichromat og diphenylaminsulfonat som redoxindikator

<http://www.geocities.com/CapeCanaveral/Hall/1443/iron.html>

- Der anvendes dichromat. En omfangsrig side med beskrivelse af jernanalyse i blandt andet jern-oxid-forbindelser.

Der kan anvendes såvel R- som B-søgestrengene eller kombinationer heraf i søgningen. Selv små forskelle i søgestrengene kan give meget forskellige søgeresultater. Skrives søgestrengen *Determination iron redox* i **Ranking**-feltet, får man ca. 600.000 hits, hvoraf de mest relevante heldigvis står forrest. Skrives søgestrengen *Determination of iron near redox* derimod i **Boolean**-feltet, får man kun 12 hits. Her mangler desværre nogle af de mest anvendelige. Hvis man udvider søgningen ved at skrive *Determination NEAR iron NEAR redox* i **Boolean**-feltet, får man 22 hits - altså lidt flere muligheder.

Tekniske forhold vedrørende elektroniske rapporter

Der er mindst arbejde forbundet med at lægge elevprodukterne som tekstbehandlingsdokumenter i en mappe på skolens lokalnetværk. Dokumenterne er derefter tilgængelige for eleverne lokalt og kan åbnes på velkendt måde i tekstbehandlingsprogrammet. Det næste skridt ville være at gøre tekstdokumenterne tilgængelige fra skolens webserver. Webbrowserne kan konfigureres, så de viser dokumentet integreret i en webside. Hvis brugeren ikke har denne mulighed, kan dokumentet hentes til lokal harddisk og åbnes i tekstbehandleren.

Der er lidt mere arbejde forbundet med det næste trin, som er at aflevere rapporten i html-format. Eleverne vil i den forbindelse have brug for at kende den grundlæggende teknik til at udforme html-dokumenter (formatering, indsætning af grafik og tabeller), og de vil få brug for at håndtere såvel tekstfiler som grafikfiler. Den nemmeste måde er, at lade Word eller Wordperfect konvertere dokumenterne til html-format. Der er markante forskelle mellem html-dokumenter og sædvanlige tekstdokumenter: I tekstdokumentet er alle billeder, tegninger, kemiske formler og ligninger integrerede objekter i dokumentet, og alt gemmes i én fil. Ved konvertering til html-dokument bliver de nævnte objekter gemt i filer for sig selv. Specielt skal man være opmærksom på, at integrerede formler og ligninger bliver konverteret til grafikbilleder, som ikke længere kan redigeres i kildeprogrammet (ChemSketch og Equation Editor). Gemmes en rapport som html-dokument på diskette, skal grafik-filerne også gemmes på disketten. Ved konvertering til html-format sker der ofte lidt ændringer i opsætningen af dokumentet, og der kan ofte gå tid med manuel efterbehandling, inden det hele står pænt igen.

Deciderede web-editorer som fx MS Frontpage kan automatisere produktion af websider. Anvendes Microsoft Explorer 4.x eller er Windows 98 installeret, har man adgang til Frontpage Express, som er en begrænset udgave af Frontpage. Der må henvises til lokal datavejledning mht. sådanne programmer og mht., hvorledes dokumenterne anbringes på webserveren.

Pædagogiske og fagdidaktiske aspekter af et internetforløb

Generelt

Det beskrevne forløb er et bud på, hvordan undervisning i et velkendt fagområde kan udføres på anden vis - med nye indgange, undervisningsformer og ændret pædagogik i forhold til gængs praksis.

Som omtalt i indledningen er der bevidst valgt forløb i 1.g og obligatorisk stof.

Det kunne være fristende at vælge mere utraditionelle emner, end det her valgte. Men skal man anvende det nye medie, er det vigtigt, at dette netop betragtes som en ny variation til kendt stof.

Det vil også kunne gavne eleverne senere, fx i forbindelse med de skriftlige opgaver, at der tidligt er trænet i anvendelsen af Internettets muligheder.

Anvendelse af Internettet giver imidlertid også anledning til fagdidaktiske overvejelser og pædagogiske strøtanker. Nettet i sig selv omtales ofte som "anarkistisk". Dette kan man i undervisningen tage til sig som en mulighed for at såvel dyrke undervisningsdifferentiering som til at fremme elevernes ansvar for egen læring.

Omfanget af kildematerialer kan være meget stort. Det bør derfor være et krav, at eleverne træner i angivelse af kilder. Således vil det under hele forløbet være vigtigt, at eleverne har papir og skriverejskab ved siden af computeren, så de vænnes til at opfatte computeren som en "underviser", hvis fremlæggelser der tages noter til.

En del af eleverne vil blokere i de første timer af forløbet på grund af sproget, som generelt er engelsk. Som forløbet skrider frem vil eleverne dog vænne sig til de engelske begreber og erfare, at fagordene ikke er så forskellige fra dansk. Det kan måske være en ide at lade eleverne lave en gloseliste. Samarbejde med faget engelsk kan som tidligere nævnt anbefales.

Det må være op til den enkelte lærers temperament, om der skal ske styring med hensyn til søgningerne, eller der skal gives frit løb. Forskellige forhold kan blokere elevernes arbejde, og fx medvirke til at de glemmer at gemme siderne som "foretrukne" eller "bogmærke". Læreren bør altså overveje, om der skal styres i starten af forløbet og gives frit derefter. Af hensyn til en eventuel eksamen vil dette være en god ide (se næste afsnit).

Nogle elever kan have svært ved at håndtere det selvstændige element i forløbet. Specielt i starten skal man som lærer være meget opmærksom på disse elever og hjælpe dem på rette spor.

Hele forløbet vil kunne dække valgfrit emne i 1.g. Vi skønner, at forløbet vil vare ca. 2 måneder, inklusiv tid til eksperimenter - både demonstrationsforsøg, mindre elevforsøg og et rapportforsøg. Man kan spare tid ved at begrænse emnet til én eller to dele af forløbet.

Eksamen

Efter forløbet står man overfor en række overvejelser mht. eksamenssituationen:

Eleverne skal i forberedelsestiden have adgang til materiale anvendt i undervisningen. Det vil sige, at der bør være en computer til stede i forberedelseslokalet. Den må efter gældende bestemmelser ikke være koblet på Internettet og skal være rensset for andet stof. I modsat fald kræves en forsøgsansøgning.

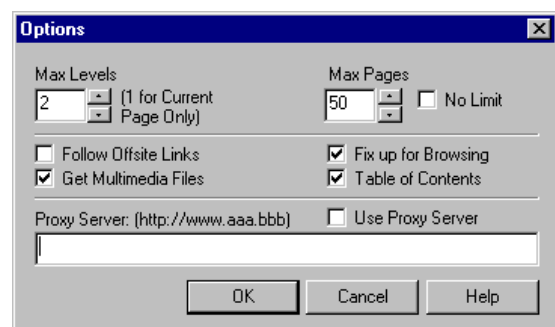
Hvis eleverne skal kunne vise brug af internetsider, må det anbefales, at man beder eleverne aflevere en diskette, hvorpå de anvendte sider er gemt (fx ved brug af programmet *Sitesnag*, som omtales nedenfor), eller at læreren får en papirudskrift af de sider, som eleverne har anvendt. Papirudskrifterne kan anvendes i nødstilfælde i en eksamenssituation, hvor computeren er gået ned.

Vi finder det relevant, at eleverne har adgang til en computer i forberedelsestiden, men under eksaminationen har det ikke den store mening at bruge tid ved computeren. Det må indgå i eksaminationen, at eleverne fortæller om søgningerne, hvordan og hvorfor en side er valgt og anvendt.

Om at gemme kildemateriale på lokal harddisk

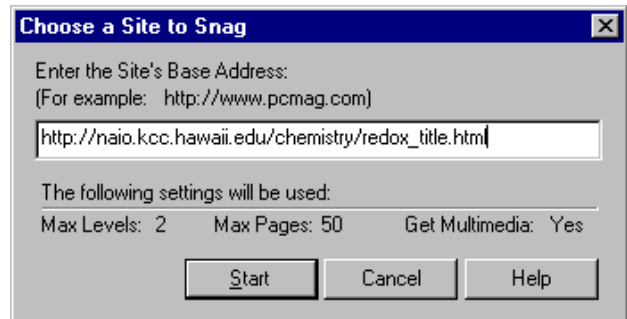
Programmet *Sitesnagger* kan findes ved en simpel søgning på *Sitesnag* i en søgemaskine. Programmet fungerer bedst, hvis det installeres lokalt på den maskine, hvor man ønsker at lægge kildematerialet. Installation på et fællesdrev frarådes. *Sitesnag* kan hente og gemme websider og underliggende websider inklusiv multimediefiler (grafik, video, lyd mm) i en mappe på lokal harddisk. Links og ankerpunkter i websiderne tilpasses automatisk, så de fungerer, når websiderne senere browses fra lokal harddisk. Mappen med webkomplekset kaldes et *project*.

- *Hent* websider til lokal harddisk:
- **Start Sitesnagger | vælg Project | New | Indtast** et projektnavn fx redox1
- **Vælg Project | Options | Max levels**
Normalt kan *levels* begrænses til 2-3 niveauer.
- **Tryk OK**

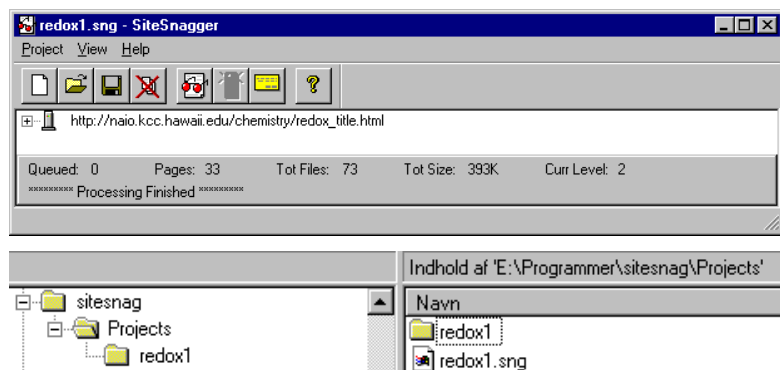


Projektet kan godt gå hen og blive større, end en diskette kan rumme. Men eksempelvis vil http://naio.kcc.hawaii.edu/chemistry/redox_title.html med 2 niveauer - og det vil sige alt det indledende redoxkemi - fylde ca. 400 kB.

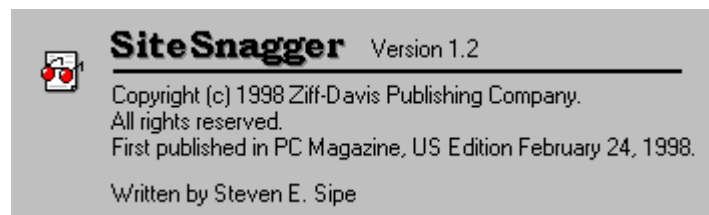
- **Aktiverer Sitesnagging:**
- **Vælg Project | Snag a site ...**
- **Indtast webadresse** i adressefeltet
- **Tryk Start** og vent på afslutning



Sitesnagger gemmer automatisk en indeksfil *redox1.sng* i **mappen projects**, som findes i den mappe, hvor sitesnag.exe er installeret. De hentede websider gemmes i **mappen redox1**.



Indeksfilen *redox1.sng* benyttes af sitesnagger selv og er ikke nødvendig, når websiderne skal betragtes i en webbrowser. Mappen *redox1* med websiderne kan kopieres til en diskette. Kildesamlingen kan så transporteres og anvendes af elever som lærebogsmateriale uden hensyn til opkobling til Internet. Eleverne vil nu kunne demonstrere søgning, søgeresultat, kilder mv. evt. ved eksamen uden at bekymre sig om opkobling, ændrede websider mv.



Elementær organisk kemi med *ChemSketch*

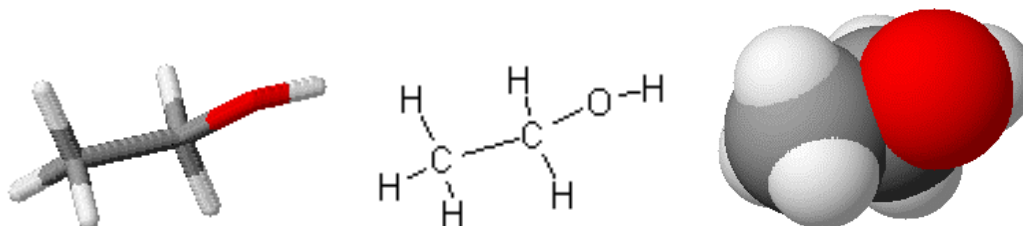
Andreas Vedel, Keld Nielsen og Poul Thulstrup

Indledning

På de følgende sider præsenteres et meget brugervenligt og yderst anvendeligt program til kemiundervisning (se bilag 1 for teknisk information). Teksten er først og fremmest rettet til læreren og er tænkt som inspiration. Det primære formål er at skitsere anvendelser af programmet i forbindelse med organisk kemi på C- og B-niveau.

Hvorfor er ChemSketch anvendeligt i kemiundervisningen?

- Programmet kan supplere molekylbyggesæt. Det indeholder flotte 3D-effekter og kan bruges til at variere undervisningen. Programmet indeholder et tegnemodul, der kan benyttes ved udarbejdelse af undervisningsmateriale og elevrapporter
- Programmet er velegnet på alle niveauer i gymnasiet og hf. Det er brugervenligt og kan anvendes af eleverne i deres eget tempo
- Programmet er freeware og kan hentes fra Internettet (se bilag 1). Elever og lærere må installere programmet på egen computer

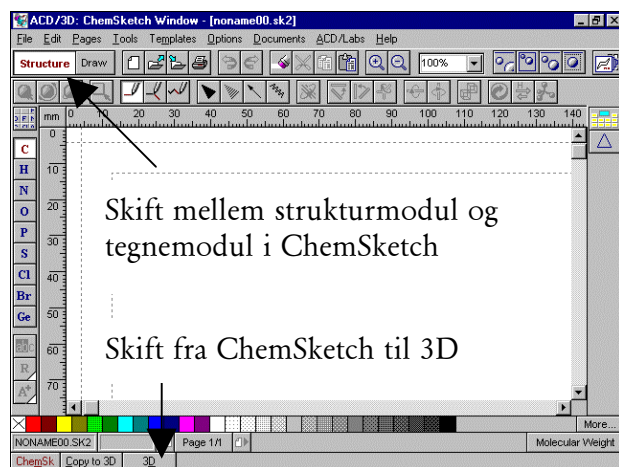


Overblik over *ChemSketch*

Afsnittet er tænkt som en kort introduktion til ChemSketch. En utålmodig førstegangsbruger kan nøjes med at læse dette afsnit og så prøve sig frem med programmet. De efterfølgende afsnit indeholder nogle ideer og forslag til anvendelse af ChemSketch.

I ChemSketch kan brugeren tegne strukturformler og overføre dem til 3D-billeder. Der findes skabeloner (i programmet kaldet *templates*) med tegninger af mere komplekse molekyler, som fx aminosyrer, carbohydrater og DNA fragmenter. Nye skabeloner, som udvikles løbende af programmets brugere, kan hentes fra ACD's hjemmeside (Advanced Chemical Development).

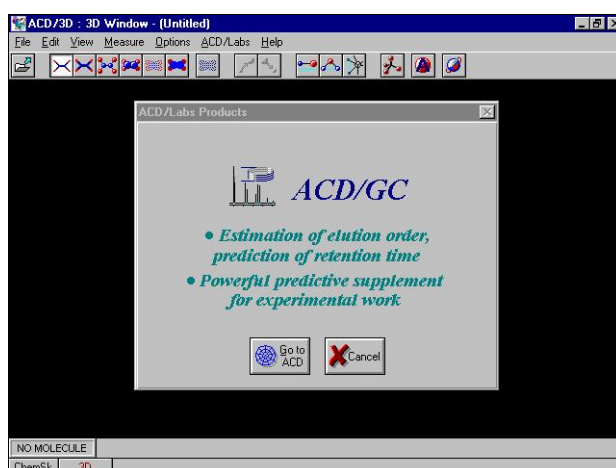
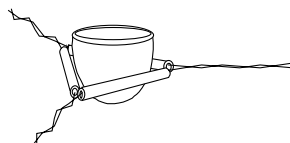
Programdelen ChemSketch indeholder et strukturmodul og et tegnemodul (se figur 19). 3D-viewer er et selvstændigt program (se figur 20).



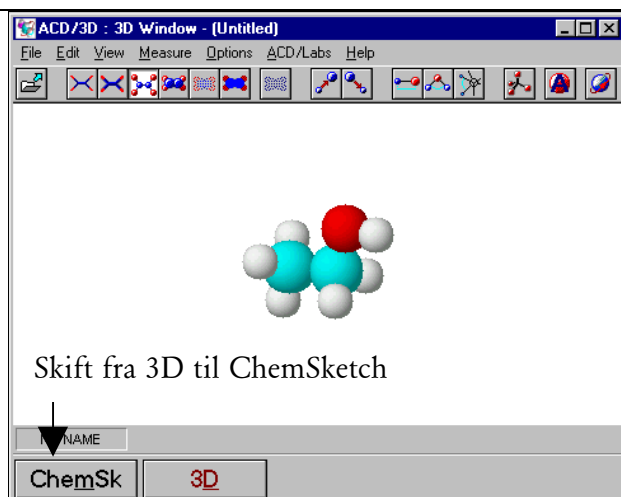
figur 19. ChemSketch med aktivt strukturmodul. For at skifte til 3D-vieweren trykkes på knappen 3D.

Tegnemodulet i ChemSketch

I tegnemodulet kan man tegne linier, pile, kurver, kasser, cirkler og tekstbobler samt skrive tekst og manipulere disse billedelementer. Man kan på denne måde skabe en baggrundstegneflade for molekylstrukturer, der tegnes i strukturmodulet. Tegninger kan eksporteres i forskellige filformater eller kopieres til andre windowsprogrammer gennem Windows klippebord. Strukturer og tegninger kan gemmes og anvendes som skabeloner. Stud scient. Frantz W. S. Pedersen, Syddansk Universitet, Odense har fx lavet en skabelon med detaljerede tegninger af laboratorieudstyr. Skabelonen er til fri afbenyttelse og kan hentes fra kemis hjemmeside (<http://ke.gymfag.dk>) sammen med en vejledning (se bilag 2).



figur 18. Ved start af ChemSketch afvikles en reklame for ACDs produkter. Efter 10 sekunder bliver *Cancel*-knappen aktiv, og man kan stoppe reklamen.



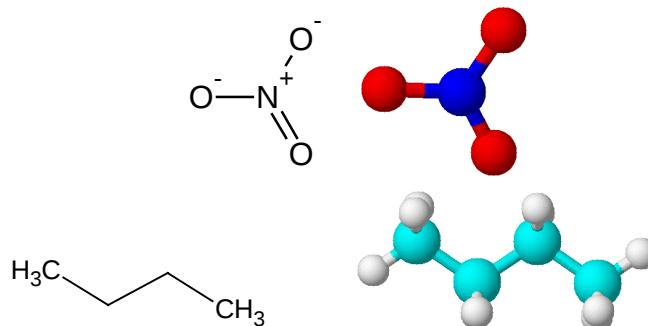
figur 20. 3D-viewer. For at aktivere tegneprogrammet trykkes på knappen *Chemsk*.

Strukturmodul i ChemSketch

I strukturmodul tegnes kemiske strukturer, og der er mulighed for at gemme og hente strukturer som filer af typen *.sk2. Desuden kan man importere filer af forskellige andre typer, og der findes strukturskabeloner, som kan anvendes ved opbygning af strukturer.

For at tegne molekyler som HNO_3 eller ioner som NO_3^- må man anvende formelle ladninger i strukturen (se figur 21).

Det går nemmere at tegne carbonhydri- der og simple organiske molekyler, hvor bindingsforholdene er enklere.



figur 21. Tegning og 3D-model.

I standardindstillingen viser ChemSketch ikke alle atomer. Visning af alle atomer indstilles sådan:

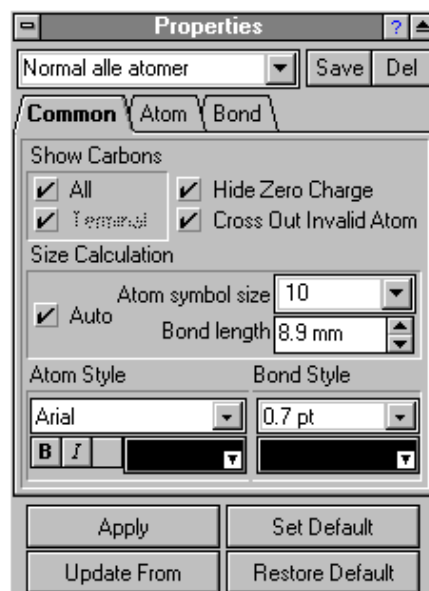
- **Vælg** menuen **Tools | Structure Properties**

Dialogvinduet på figur 22 fremkommer.

- **Sæt** flueben ved **Show Carbons | Tryk Apply**

Indstillingen gælder nu for strukturer, som var markerede forinden og for senere tegnede strukturer. Hvis indstillingen skal være *standardindstilling* i ChemSketch, definerer man den som en *typografi*.

- **Skriv** Normal alle atomer | **Tryk Save** | **Tryk Set Default**



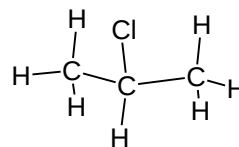
figur 22.

Når molekylets strukturformel er tegnet i strukturmodul, kan formelen overføres til en 3D-optimeret tegning i strukturmodul:

- **Tryk**  | og **Markér** molekylet med musen
- **Tryk**  **3D optimization**

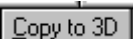
Strukturen kan roteres:

- **Tryk**  eller  og **Træk** med musen



figur 23. Tegning af 2-chlorpropan efter 3D-optimering i strukturmodul.

For at få den fulde 3D-effekt må man overføre strukturen til 3D-viewer:

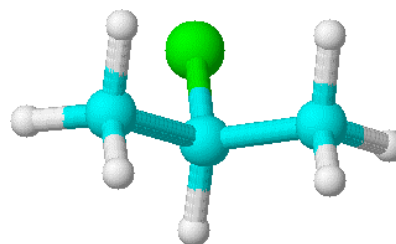
- **Markér** struktur | **Tryk** 

Strukturen overføres til 3D-viewer.

- **Tryk**  for at 3D-optimere strukturen

Strukturen kan vendes og drejes vha. musen:

- **Tryk**  for at autorotere modellen



figur 24. Model af 2-chloropropan i 3D-viewer.

Man kan overføre flere markerede strukturer fra strukturmodul i ChemSketch til 3D-viewer. Strukturerne bør da *forinden én for én* være udsat for 3D-optimering i strukturmodul og være pænt arrangeret på tegnefeltet. Det er bedst at udføre 3D-optimering i 3D-viewer med et molekyle ad gangen.

Alkaner – formler, navne og isomeri

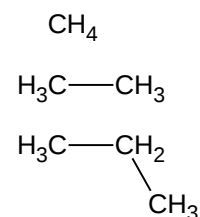
Opgaverne kan stilles til elever som første gang skal anvende ChemSketch.

Opgave 1

- **Vælg** strukturmodul i ChemSketch: **Tryk**  **Draw**

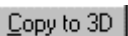
Hvis knapperne ikke allerede er aktive: **Tryk**  og 

- **Klik** på tegnefladen. Den kondenserede strukturformel for methan, CH₄, tegnes
- **Klik** på C-atomet i formlen for methan
- **Klik** på et C-atom i formlen for ethan



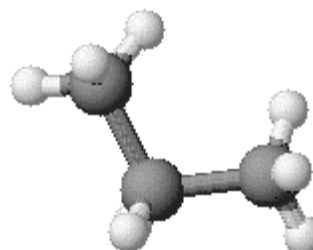
figur 25. Methan, ethan og propan.

Nu skulle der gerne være tegnet strukturformler for methan, ethan og propan.

- **Markér** propanmolekylet med musen
- **Tryk**  | **Tryk**  for at overføre strukturen til 3D-viewer
- **Tryk**       i knappanel eller **højreklik** på modellen og vis modellen på forskellig måde (pinde-, stav-, kalotmodel).

Molekylet kan roteres ved hjælp af musen:

- **Klik og træk** med musen

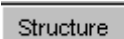


figur 26. Model af propan i 3D-viewer.

Opgave 2

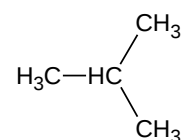
- **Vælg** strukturmodulet i ChemSketch: *Tryk*  

Hvis knapperne ikke allerede er aktive: *Tryk*  og .

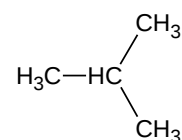
- **Tegn** formler for butan, pentan, hexan, heptan, octan, nonan og decan
- **Vælg** tegnemodulet i ChemSketch: *Tryk*  
- *Tryk*  | *Klik* i tegnefeltet ved en formel | *Indtast* molekylets systematiske navn i tekststruden
- **Arranger** strukturformler og navne pænt på siden og **udskriv** siden

Opgave 3

Forgrenede alkaner tegnes ud fra en uforgrenet strukturformel.



- **Tegn** formelen for propan. *Klik* på det midterste C-atom i propan

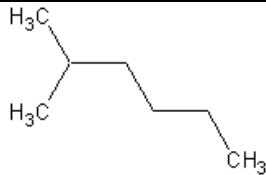
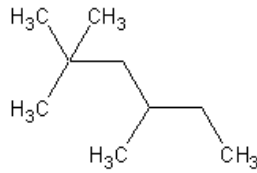
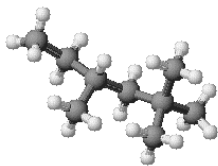
Nu skulle der gerne være tegnet en formel for 2-methylpropan – se figur 27.  figur 27. 2-methylpropan

- **Tegn** strukturformel for pentan og alle isomerer til pentan

Læreren kan forberede opgaver og gemme dem som ChemSketch filer. Eleverne kan så hente opgaverne fra skolens filserver, besvare opgaverne og gemme besvarelsen under et andet navn (se bilag 3). Hvis opgaverne gemmes som tekstdokumenter (Word eller lignende), kræver det en lille omvej: Strukturformlerne tegnes i ChemSketchs strukturmodul og kopieres via klippebordet til tekstdokumentet. Opgave 4 er blevet til på denne måde.

Opgave 4

Tegn strukturformlen eller navngiv stoffet

Navn	Struktur
	
4-ethyldecan	
	
	

Alkener og alkyner

Dobbelt- og tripelbindinger i ChemSketch

Det er nemt at lave dobbelt- eller tripelbinding mellem C-atomer: Et klik på en enkeltbinding ændrer bindingen til dobbeltbinding. Et klik på en dobbeltbinding ændrer den til tripelbinding. Et klik på tripelbinding ændrer den til enkeltbinding.

- **Vælg** strukturmodulet. **Tegn** ethan, ethen og ethyn på samme tegneflade

For at vise alle C-H bindinger vælges *3D Optimization* efterfulgt af *Clean Up*:

- **Marker** ethan | **tryk**  og **tryk** . Udfør det samme for ethen og ethyn

Denne procedure giver pæne 2D strukturformler, hvor alle bindinger ses. Men disse strukturer bør ikke overføres til 3D-viewer, hvilket følgende vil vise:

- **Marker** alle tre strukturer i tegnefeltet og **tryk Copy to 3D**

Bemærk, at alle tre strukturer er plane, og at dobbeltbinding og tripelbinding ikke vises eksplicit i 3D-viewer.

Sådan vises realistiske strukturer i 3D-viewer:

- **Vælg** strukturmodulet. **Marker** ethan og **tryk** på . Udfør det samme for ethen og ethyn

Når molekylerne derpå overføres til 3D-viewer (eventuelt samtidigt) ses realistiske rumlige strukturer for de tre molekyler. Man skal dog gøre sig klart, at de viste geometrier er beregnede og kan afvige en del fra eksperimentelt bestemte geometrier. Endvidere bør det bemærkes, at 3D-optimering ikke fungerer på strukturer, som indeholder andet end C, H, N, O, S, F, Cl, Br og I.

Bindingsvinkler og bindingslængder

I ChemSketchs 3D-viewer er det muligt at måle bindingsvinkler og bindingslængder i molekyler.

- **Tegn** methylcyclobutan og **overfør** tegningen til 3D-viewer. **Optimer** strukturen

Måling af bindingslængden mellem atomer:

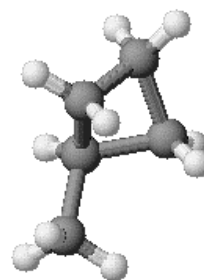
- **Tryk**  og **klik** på to naboatomer

Atomerne farvemarkeres og nederst i skærbilledet ser man bindingslængden.

Måling af bindingsvinklen mellem 3 atomer:

- **Tryk**  og **klik** på tre atomer, der definerer en bindingsvinkel

Man ser bindingsvinklen nederst i skærbilledet.



figur 28. Methylcyclobutan i 3D-viewer.

Distance(C 5, C 2) = 1.5303 Å

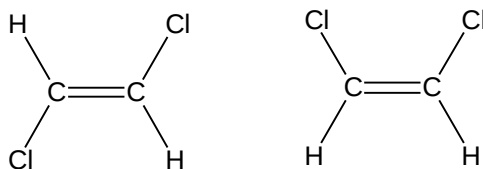
BondAngle(C 2, C 1, C 4) = 81.683 Deg

Undervisningsforløb med alkener og alkyner

Det forudsættes, at eleverne har haft en første introduktion til ChemSketch og er introduceret til umættede carbonhydrider. Læreren kan som indledning tegne nogle molekyler, som hentes ind i 3D-viewer. I fællesskab afgøres, om der findes dobbelt- eller tripelbindinger og hvorvidt der er tale om cis-trans-isomeri eller ej. Derefter kan eleverne arbejde med følgende opgaver.

Opgave 5

- *Tegn* ethenmolekylet
- *Vælg Tools | 3D Optimization | Vælg Tools | Clean Structure*
- *Markér* molekylet og *kopier* det én gang til tegnefladen
- *Tryk*  og erstat H-atomer i molekylerne, så disse to strukturer fremkommer:



Hvilken form for isomeri er der tale om? Navngiv molekylerne.

- *Markér* et molekyle ad gangen og *3D-optimer* molekylet. *Overfør* molekylet til 3D-viewer. Hvordan ser man i 3D-viewer, at der er tale om en dobbeltbinding mellem to C-atomer?

Opgave 6

- *Tegn* et carbonhydrid, der indeholder én dobbeltbinding, og som består af mindst 5 C-atomer. *Overfør* strukturen til 3D-viewer og *3D-optimer* der. *Rotér* modellen, så den ses under en pæn vinkel og *vælg Edit | Copy*. Gå tilbage til ChemSketch og indsæt kopien i tegnefeltet ved 2D-tegningen af carbonhydridet: *Vælg Edit | Paste. Indsæt en tekstboks* i tegnefeltet (se opgave 2) og *indtast* molekylets systematiske navn i tekstboksen
- *Tegn* et carbonhydrid der indeholder én tripelbinding, og som består af mindst 5 C-atomer. Gør derefter som anført ovenfor

Opgave 7

- *Tegn* molekylerne hexa-2,4-dien og hexa-3,4-dien. Hvor stor er vinklerne mellem C-atomerne i de to molekyler?

Opgave 8

- *Tegn* et carbonhydrid, der indeholder mindst 5 C-atomer, og overfør det til 3D-viewer. *Optimer* 3D-strukturen. *Bestem* bindingslængder og bindingsvinkler mellem udvalgte C- og H-atomer. *Diskuter* eventuelle store afvigelser fra de forventede bindingslængder og bindingsvinkler

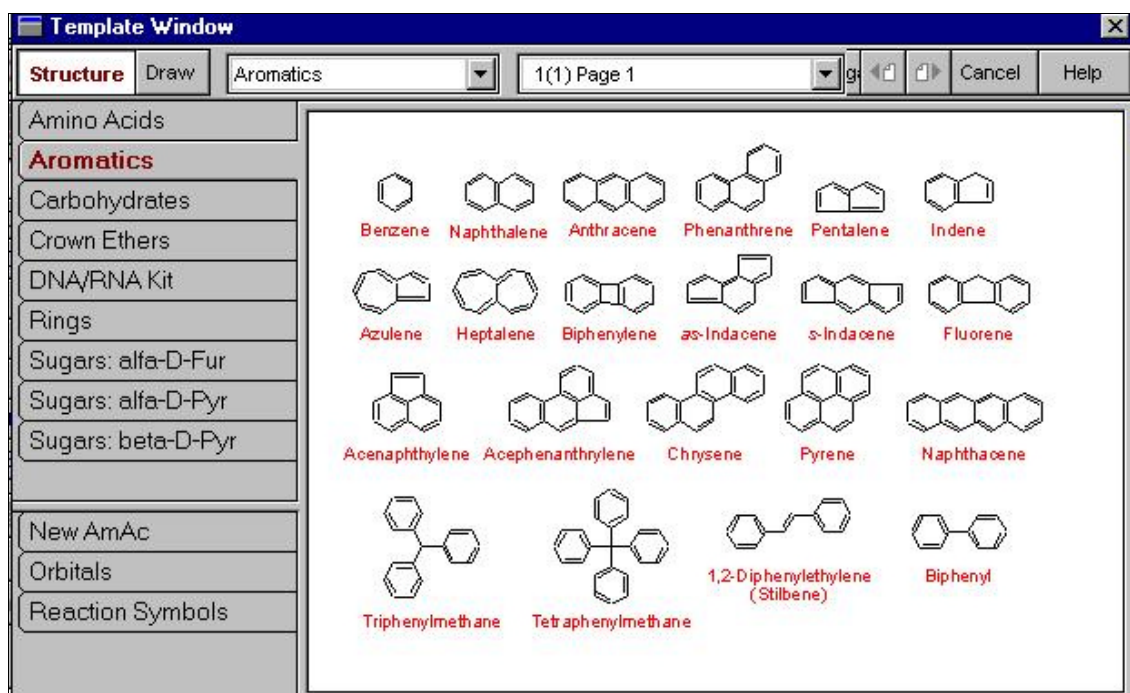
Opgave 9

- *Tegn* carbonhydriderne butan, but-2-en og but-2-yn. Hvad er bindingsvinklerne mellem C-atomerne i de enkelte molekyler? Er der afvigelser fra det, vi ville forvente?

Forløb om arener

Nedenstående er en skitse til forløb for elever, der er lidt mere erfarne i at bruge ChemSketch. Opgaverne er tillige mere fagligt krævende end opgaverne ovenfor.

- *Vælg* menuen **Templates** | menuen **Template Window** | stoftypen **Aromatics**
- *Klik* på benzene (benzen på dansk). Se figur 29



figur 29. Template Window.

- *Klik* i tegnefeltet for at afsætte en benzenring
- *Højreklik* for at ophæve valget af benzenring
- *Vælg* menu **Tools** | **Show Aromaticity** - hvad iagttager du?
- *Vælg* menu **Hide Aromaticity** - hvad iagttager du?

Diskutér hvorfor tegneprogrammet kan vise benzenmolekylet på to måder!

Vises molekylet også på to måder i 3D-viewer ?

Undersøg om naphthalenmolekylet og toluenmolekylet kan vises på to måder!

Ethylbenzen

- **Tegn** ethylbenzenmolekylet. **Overfør** strukturen til 3D-viewer og **optimer** strukturen der
- **Mål** bindingsvinklerne omkring C-atomerne i ringen
- **Mål** bindingslængderne (C-C og C-H) i ringen og i sidekæden

Hvilke oplysninger giver bindingslængderne om styrken af C-C bindingerne i ringen og C-C bindingerne i sidekæden ?

Hvilke oplysninger giver bindingslængderne om styrken af C-H bindingerne i ringen og C-H bindingerne i sidekæden ?

Kan du forklare de bindingsforhold, som 3D-modellen viser ?

Xylen

Navnet xylen dækker over tre isomere *stoffer*, der alle tre er *dimethylbenzener*.

- **Tegn** 3D-formler for de tre molekyler og navngiv dem

De tre former kaldes også *o*-xylen, *m*-xylen og *p*-xylen. Find ud af, hvad forkortelserne *o*, *m* og *p* står for, og hvordan de svarer til de systematiske navne.

Phenol

Phenol er et andet navn for hydroxybenzen. Phenol er ikke en alkohol, da hydroxygruppen er bundet direkte til benzenringen.

- **Tegn** phenolmolekylet

Styren

Når man fjerner et hydrogenatom fra benzenmolekylet, bliver der en gruppe med formelen $-C_6H_5$ tilbage. Denne gruppe kaldes phenylgruppen. Phenylgruppen indgår i mange vigtige molekyler, fx i *styren*, der har det systematiske navn *phenylethen*.

- **Tegn** styrenmolekylet

Styren kan ved additionspolymerisation polymeriseres til *polystyren*, der er bindemidlet i glasfiber, og som også bruges til en lang række af andre plastprodukter.

- **Tegn** en trimer af styren (en trimer er et molekyle, der fremkommer, når tre styrenmolekyler adderes til hinanden)

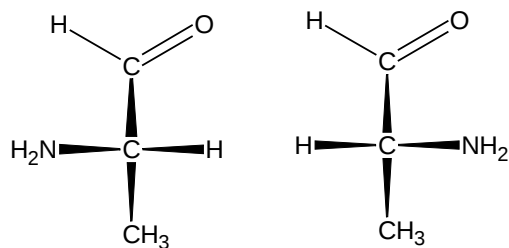
Phenylalanin

Phenylgruppen forekommer også i aminosyren *phenylalanin*, hvis systematiske navn er 2-amino-3-phenylpropansyre. Aminogruppen er $-NH_2$.

- **Tegn** phenylalaninmolekylet.

Phenylalanin udviser spejlbilledisomeri. Begrund hvorfor.

- **Kopier** formelen for phenylalanin, så du har to udgaver. Alaninmolekylet er vist her i de to stereoisomere former. Bindinger fra C-atom nr. 2 er tegnet på en særlig måde for at antyde, at de lodrette bindinger går ind i papiret og de vandrette ud af papiret set fra C-atom nr. 2. Roter dine to phenylalaninmolekyler og lav øvrige rettelser, så du får de to spejlbilledformer.



Kun L-formen forekommer i naturen. Hvilken af tegningerne svarer til L-phenylalanin?

I almindelighed bruger man R,S-nomenklatur i stedet for D,L-nomenklatur. Undersøg eventuelt sammenhængen mellem R,S-nomenklatur og D,L-nomenklatur for phenylalanins vedkommende.

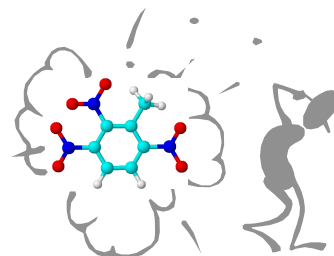
Sprængstoffer

TNT (2,4,6-trinitrotoluen) er et vigtigt sprængstof.

- **Tegn først** toluen

Nitrogruppen -NO_2 hentes fra *Table of Radicals*

- **Klik**  og **klik** på -NO_2 gruppen i Table of Radicals
- **Peg** på et C-atom i toluen og **klik** nitrogruppen på plads
- **Bind** yderligere to nitrogrupper til toluen og sluk for "NO₂-skyggen" med **højreklik**
- **Tegn** TNT-molekylet færdigt og **3D-optimer** det



Også picrinsyre (2,4,6-trinitrophenol) har været anvendt som sprængstof.

- **Tegn** picrinsyre

Benzylalkohol og oxidationsprodukter

Benzylradikalet fremkommer ved at fjerne ét af hydrogenatomerne fra methylgruppen i toluen. Benzylalkohol kan ved forsigtig oxidation omdannes til benzaldehyd, som giver mandelessens (kendes fx fra mazarinkager og marcipanefteligninger) den karakteristiske lugt. Benzaldehyd kan oxideres videre til benzoesyre, der er et meget anvendt konserveringsmiddel i fødevarer (E 210).

- **Tegn** benzylalkoholmolekylet
- **Markér** benzylalkoholmolekylet og **kopier** det to gange. Lav den første kopi om til **benzaldehyd**. Lav den anden kopi om til **benzoesyre**
- **Skift** til tegnemodulet, arranger de tre molekyler på en vandret linie og tilføj Oxidation → mellem molekylerne.

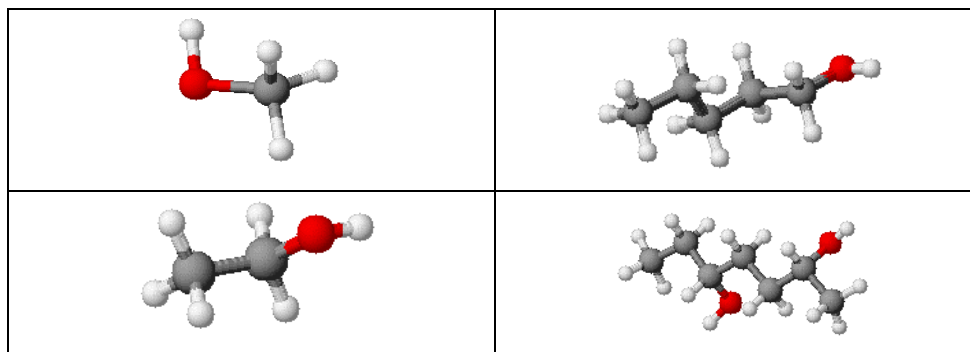
Alkoholer

- **Tegn** 2D- og 3D-strukturer for methanol, ethanol, pentan-1-ol og heptan-2,5-diol (se figur 30)

Hvilke af ovennævnte alkoholer er helt blandbare med vand?

Hvilke af ovennævnte alkoholer har de højeste kogepunkter?

Er nogle af disse alkoholer divalente?



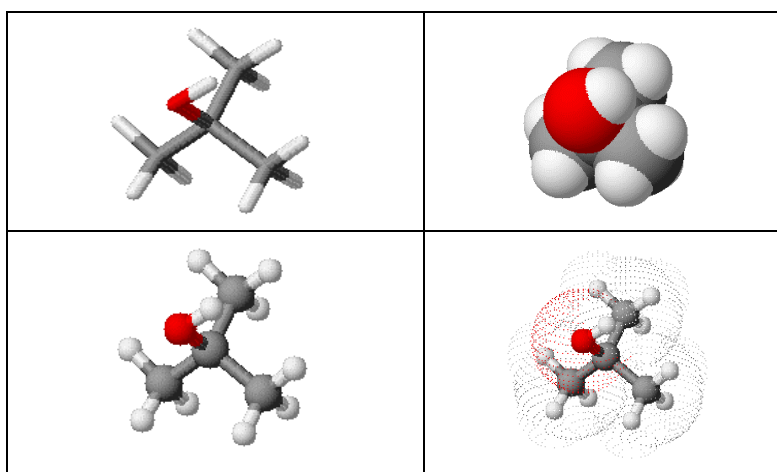
figur 30

- **Tegn** 3D-struktur for den carboxylsyre, ethanol kan oxideres til.
Hvad hedder denne syre?
- **Tegn** formelen for 2-butanol og tegn formelen for det molekyle, som dannes ved en mild oxidation af 2-butanol.
Hvad hedder det dannede stof?

Alkoholers kogepunkter

I figur 31 er vist nogle forskellige strukturer. Strukturerne er tegnet i strukturmodulet, én for én 3D-optimeret og derpå overført til 3D-viewer.

Forskellige modelfremstillinger af strukturerne er valgt vha. knappenel. Kan også vælges med **højreklik**.



figur 31

Opgave 10

Hvilke af 3D-visningerne i figur 31 er velegnede i en diskussion af stoffers kogepunkter?

- **Tegn** strukturformlen for pentan-1-ol, 2-methylbutan-2-ol og 2,2-dimethylpropan-2-ol. Vælg en passende 3D-visning. Diskutér hvilket af de 3 stoffer, der har det højeste kogepunkt. Kontroller svaret ved opslag i Databog fysik kemi.

ChemSketch og eksamen

Hvis ChemSketch har været brugt i undervisningen, kan det også indgå i en eksamination. Dog er det naturligvis de kemiske aspekter og ikke det tekniske arbejde med at tegne molekylerne, der skal eksamineres i. Det betyder, at læreren på forhånd må sikre sig, at molekyler, der skal diskuteres under eksaminationen, er tilgængelige på computeren i eksaminationslokalet. Hvis det givne spørgsmål indeholder bilag med molekylstrukturer, bør de også foreligge på computeren i forberedelseslokalet. Det skal dog ikke afholde eksaminanden fra selvstændigt at bygge strukturer i ChemSketch i forberedelsestiden, hvis hun vil det. I forhold til et traditionelt molekylbyggesæt har ChemSketch flere fordele:

- det kan være tilgængeligt for eleverne på alle tidspunkter - også derhjemme
- det er muligt at skifte mellem molekylers 2D-struktur og 3D-struktur

Forslag til mundtlige eksamensspørgsmål i *Kemi - HF tilvalg*

Som det fremgår, er der lagt vægt på valgfrihed mht. at benytte ChemSketch. Det eksperimentelle spørgsmål er udeladt af pladshensyn, og fordi ChemSketch primært har interesse i det teoretiske spørgsmål.

Spørgsmål 1
<i>Teoretisk emne: Alkoholer</i> Stikord du evt. kan benytte i gennemgangen - forskellige typer af alkoholer - navngivning - alkoholars opløselighed - kemiske egenskaber - eliminationsreaktioner med alkoholer - fremstilling af en alkohol
Du skal inddrage vedlagte figur i din gennemgang <i>Eller</i> anvende computerprogrammet ChemSketch i din gennemgang.

Spørgsmål 2
<i>Teoretisk emne: Carbonhydrider</i> Stikord du evt. kan benytte i gennemgangen - eksempler på mættede og umættede carbonhydrider - navngivning af mættede og umættede carbonhydrider - strukturisomeri og cis-trans-isomeri - forbrænding af carbonhydrider - substitutions-, additions- og eliminationsreaktioner
Computerprogrammet ChemSketch kan inddrages i din gennemgang.

Bilag 1: Maskinkrav, download, installering og start af ChemSketch

ChemSketch er et program udviklet af ACD (Advanced Chemistry Development). Det kan hentes fra ACD's hjemmeside

www.acdlabs.com. Følg henvisningen fra menupunktet **Free Stuff**.

ChemSketch kan afvikles på PC'ere med et af følgende systemer:

Windows 3.1 eller 3.11 | Windows 95/98 | Windows NT (3.51 eller 4.0)

Programmet kræver 9 MB diskplads til installation og minimum 8 MB RAM (16 MB anbefales).

Fra hjemmesiden kan der også hentes skabeloner og vejledninger til ChemSketch samt adskillige andre kemiprogrammer. Udsnit af skærbillede fra november 1998:

Download:

Structure Drawing Applet 1.30 - New!

ChemFolder 3.6 Evaluation Version - New!

NMR Viewer 3.5 Freeware - New!

ACD Software for Bruker Users - New!

ChemSketch Freeware

Patch Updates to all ChemSketch Freeware Users:

ChemSketch templates

ChemSketch User's Guide

ACD/ChemSketch (SK2) file format description - New!

Goodies for ChemSketch - New!

ChemBasic for ChemSketch

ChemSketch 1.0 Freeware

3D Viewers for ISIS/Base and ISIS/Draw

Demo Movies

The ACD Screen Saver

Download kræver, at man registreres (bl.a. med e-mailadresse) hos ACD, og at man accepterer ACD's licensbetingelser. Der er følgende muligheder (skærbillede november 1998):

Download & Installation Instructions

The software has been compressed into a single self-extracting file (CHSK35.EXE). Once file transfer is complete, locate the downloaded file using Windows Explorer and then double click on it, or choose "Run" from the file menu, to begin the installation procedure.

File name: CHSK35.EXE, size: 4,483,339 bytes.

Requires 9 MB of hard disk space for installation

The ChemSketch User's Guide:

File name: CHSK_DOCS.EXE, size: 416,594 bytes.

Requires 3.6 MB of hard disk space.

Note: Please install to a folder which is different from that of any other ACD software you might have.

If you have a not-so-state-of-the-art modem

Slow modems could be quite frustrating, especially if you are trying to download huge files from the Internet. The last thing you want is a file transfer that stops at 85%, after hours of waiting.

To remedy this, we have divided the file above into four parts. Once all four have been downloaded, place them into a temporary directory on your hard drive, and run the self-extracting file (CHEMSK35.EXE). This process will unite the four files into one executable file (CHSK35.EXE) which you will then need to run in order to finally install the software.

Please note: If you were successful in downloading the first file above, you **do not** need to download these four files.

	File Name	Size
Part One	CHEMSK35.EXE	1,456,440 bytes
Part Two	CHEMSK35.E01	1,456,400 bytes
Part Three	CHEMSK35.E02	1,456,400 bytes
Part Four	CHEMSK35.E03	137,878 bytes
User's Guide	CHSK_DOCS.EXE	416,594 bytes

Tip til start af programmet

Start vha. genvejsikon  Genvejen starter programmet 3D-viewer, der starter ChemSketch automatisk. Man kan så straks gå til tegnemodulet, idet 10 sekunders reklamen for ACD afvikles i 3D-viewerens vindue. Genvejsikon  starter ChemSketch alene.

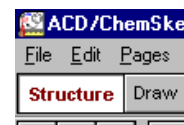
Bilag 2: Vejledning til laboratorieudstyrsskabelon

Installationsvejledning

Efter at have udpakket LabUdstyr.zip har du fået denne vejledning og et dokument til ChemSketch fra ACD. Dokumentet indeholder tegninger af laboratorieudstyr, dvs. de "byggeklodser" som bruges ved fremstillingen af illustrationer af laboratorieopstillinger, fx til øvelsesvejledninger.

Det er meningen, at dokumentet LabUdstyr.sk2 skal installeres som en skabelon. Fremgangsmåden er:

- *Flyt* dokumentet LabUdstyr.sk2 til mappen **Template** i din *ChemSketch*-mappe.
- *Start* ChemSketch.
- *Sørg* for at knappen **Structure** er aktiv.
- *Vælg* menupunktet **Templates** → **Template Organizer...**
- *Tryk* på **New...** i dialogboksen.
- *Skriv* Labudstyr i feltet **Template**.
- *Browse* frem til filen \Template\LabUdstyr.sk2, så den står i feltet **Document**. Klik på **OK**.
- *Sæt* flueben ved **Labudstyr** i listen. *Klik* på **OK**.
- *Tryk* på knappen **Draw** i værktøjslinien.



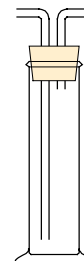
Nu er du klar til at bruge templatens (skabelonen):

- *Tryk* template-knappen .
- *Vælg* Labudstyr i listen til venstre.

Nu ser du en af de fire sider templatens består af.

Du kan skifte mellem siderne øverst i dialogboksen.

- *Find* vaskeflasken og klik på den. *Venstreklik* og *højreklik* et sted i dokumentvinduet.
- *Marker* objektet og *tryk* Ungroup-knappen ud. Objektet falder fra hinanden i to naturlige dele som kan benyttes hver for sig. En lang række af objekterne har denne egenskab - så prøv dig frem !



Når objekterne skal sættes nøjagtigt sammen (f.eks. slibudstyr), er det en fordel at arbejde i 400%.

- *Slå* Snap on Grid fra i menuen **Options**, så du har fuld kontrol over placeringen af de enkelte objekter.

Til sidst et lille hint til brugen af "gummislanger".

Slangen er tegnet som en gruppe af 4 elementer; dvs. at du efter at have valgt den og have trykket på , kan flytte enderne hen, hvor de skal være. Selve slangen består af 2 Bezier-kurver, hvis længde og form kan redigeres, når du har valgt .



Bilag 3A: Side 1 af ChemSketchfilen Meyer2.sk2

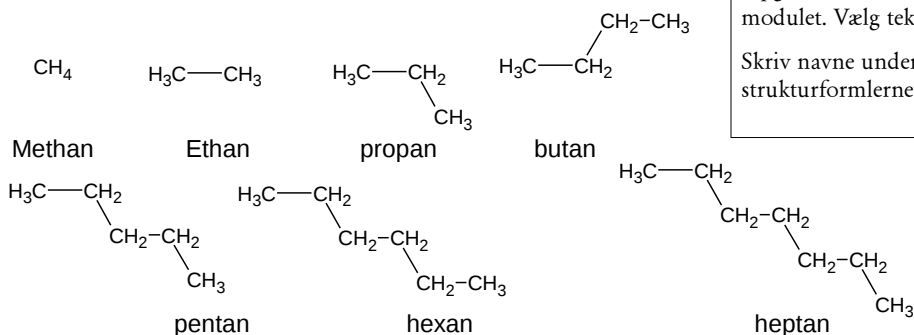
Chemsketch-opgave, som besvares i Structure modulet. Der er to sider i opgaven.

GEM straks denne opgave under ET ANDET NAVN. Navnet skal begynde med dine login-initialer. Gem i mappen kemi/aflevering på fællesdrevet.

Når besvarelsen er færdig, gemmer du filen igen og lukker den. Derefter kan du sende filen med din besvarelse til din lærer som attachment til e-mail.

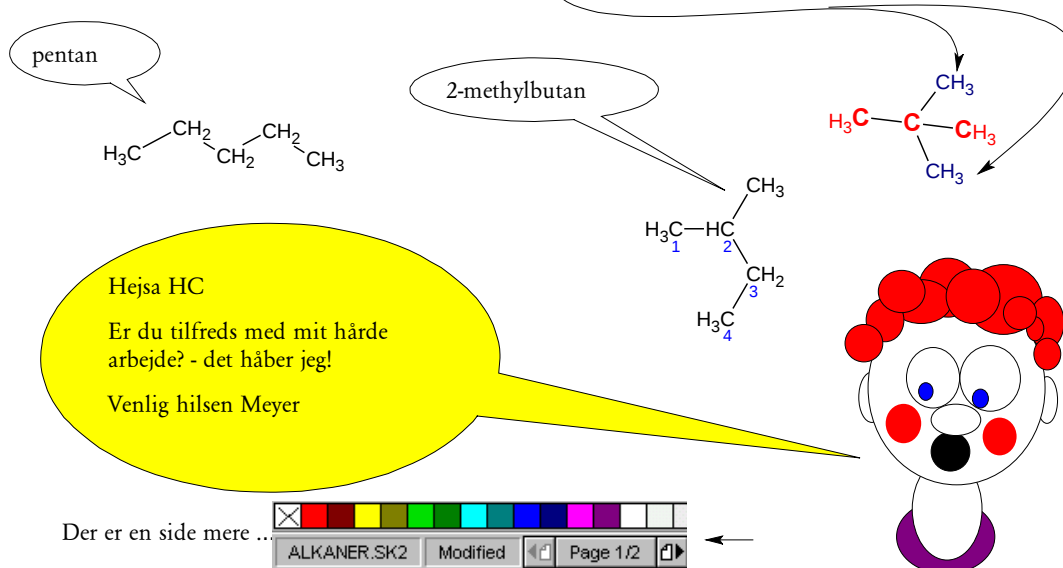
Molekyler bestående af carbon og hydrogen kaldes carbonhydrider. De er råmateriale for den kemiske produktion af plast og meget andet. Desuden er de en vigtig energikilde. Carbonhydrider med enkeltbindinger kaldes **alkaner**.

Opgave 1: Tegn strukturformler for uforgrenede alkaner med fra 1 C-atomer til 7 C-atomer.



Opgave 2: Skift til DRAW modulet. Vælg tekst-værktøjet: Skriv navne under strukturformlerne

Opgave 3: Der findes tre forskellige strukturer svarende til formelen C₅H₁₂. Fænomenet kaldes strukturisomeri. Tegn de tre strukturer. Et af de tre molekyler har navnet 2-methylbutan, et andet har navnet 2,2-dimethylpropan. Skriv disse navne ud for de pågældende strukturer.

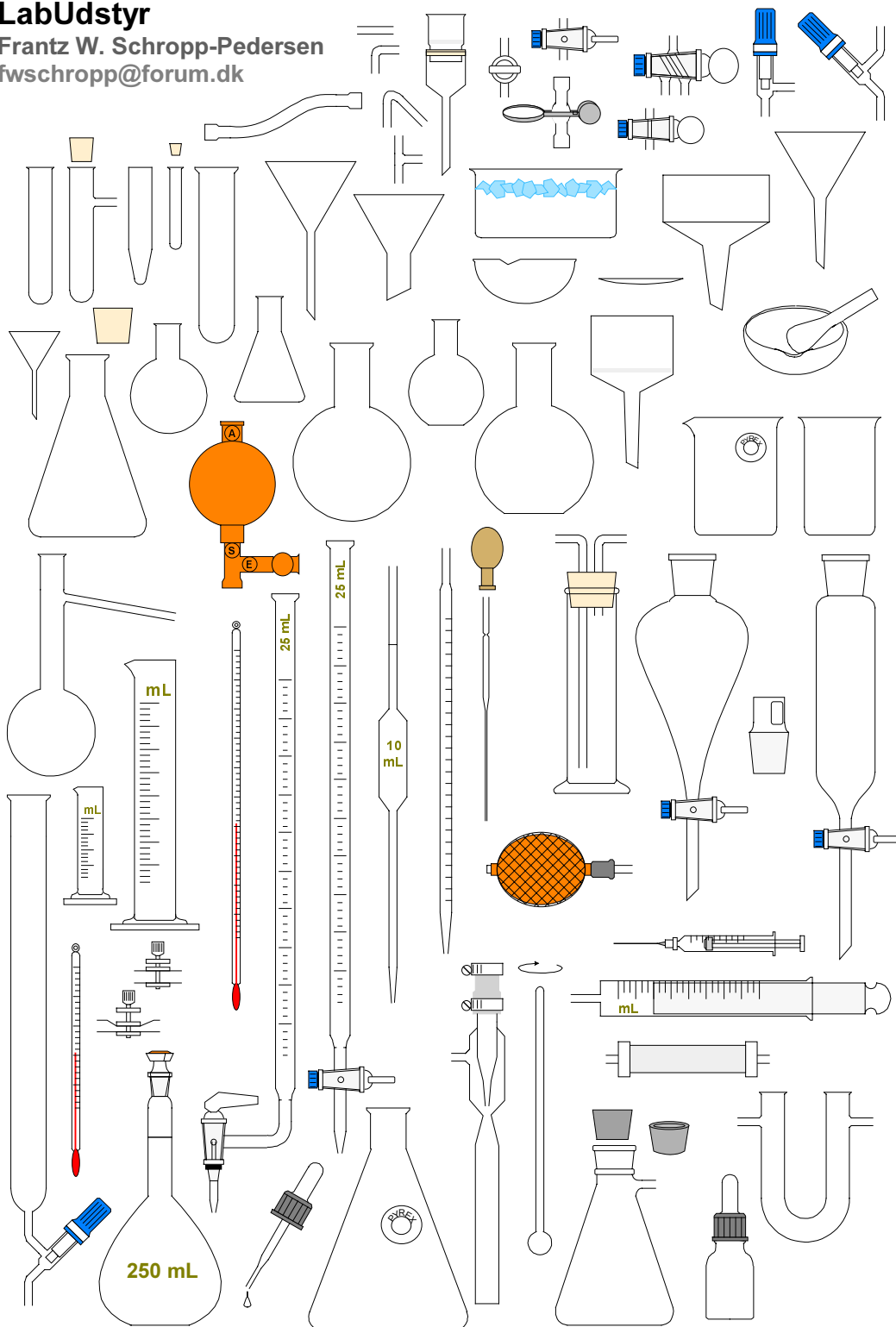


(Side 2 er ikke vist i bilag 3A)

Bilag 3B: Side 1 af ChemSketch-filen *LabUdstyr.sk2*

LabUdstyr

Frantz W. Schropp-Pedersen
fwschropp@forum.dk



Aminosyrer og carbohydrater med ChemSketch

Søren Hauge Andersen og Knud Ole Reffstrup

Om brugen af ChemSketch

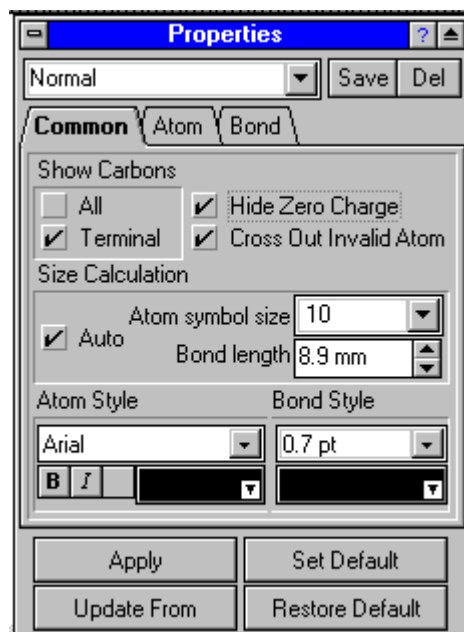
ChemSketch fra ACD er et kemisk orienteret tegneprogram, som kan hentes via Internettet fra webadressen <http://www.acdlabs.com>. Programmet er gratis, men du skal registreres som bruger ved at oplyse e-mailadresse, navn og postadresse til ACD. Se indlægget *Elementær organisk kemi med ChemSketch* (bilag 1) for tekniske detaljer vedrørende programmet. Den indbyggede hjælp i ChemSketch er fremragende. Desuden kan du hente meget instruktive animerede *ChemSketch tutorials* fra ACD's websted.

Hvis du vil vise alle C-atomer og H-atomer i strukturformler, skal du først indstille programmet til det, da dette ikke er standard:

- **Marker** tegnede molekyler, hvis indstillingen skal gælde for dem
- **Vælg Tools | Structure Properties**
- **Sæt** flueben **ShowCarbons | All**
- **Tryk Apply**

Tegnes herefter molekyler, vil alle C- og H-atomer blive vist i strukturformlen.

Hvis dette skal være standardindstilling i ChemSketch, skal du definere en **ny typografi** i stedet for *Normal*, kald fx den nye typografi for *Alle C og H*. Derefter skal du **klikke** på **Set Default**



Sådan gemmer du din molekylmodel

For at gemme en molekyleformel, som er lavet i ChemSketch, skal du **vælge File | Save**. Molekylet bliver gemt som en fil i ChemSketch's eget filformat (.sk2) og kan senere åbnes i ChemSketch.

Hvis du vil anvende modellen i andre programmer, skal du gemme i et filformat (fx MDL MOL-file), som kan genkendes i andre programmer. Her skal du anvende *export*-funktionen:

- **Vælg File | export | File format: MDL MOL-file (*.mol)**

3D-visning

3D-viewer kan startes fra ChemSketch. Det gøres på følgende måde:

- **Vælg ACD/Labs | 1 3D Viewer**

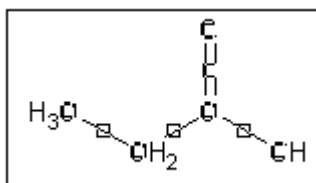
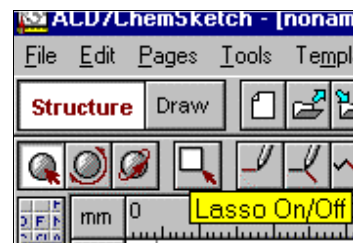
Du kan skifte mellem at vise en strukturformel i tegnefeltet i ChemSketch og en rumlig model af molekylet i 3D-viewer. Når begge programmer er indlæst, optræder to knapper nederst til venstre i ChemSketch's vindue (se *Indsættelse af rumlig strukturformel*). De kan bruges til skift mellem programmerne.

Tip: Hvis du først starter 3D-viewer (SHOW3D.EXE), bliver ChemSketch automatisk startet. Det omvendte er ikke tilfældet.

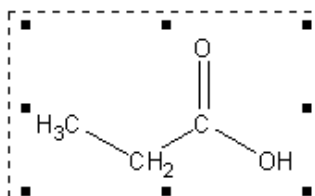
Sådan indsættes molekylmodellen i tekstbehandlingsprogram

Indsættelse af stregformel (2D)

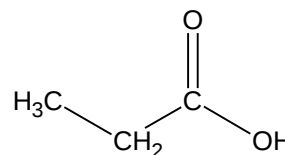
Øverste venstre hjørne af værktøjslinien skal have dette udseende inden du markerer stregformler. Bemærk de to knapper, der er trykket ind. Herefter markerer du modellen ved at trække med venstre museknap hen over det ønskede. Kopier på sædvanlig vis til udklipsholderen.



Markering i Structure Mode



Markering i DRAW Mode

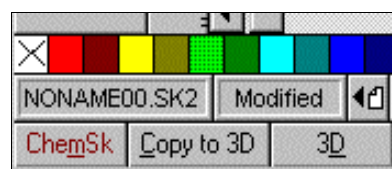


Kopieret til tekstdokument

Indsættelse af rumlig molekylmodel (3D)

- **Tegn** først en strukturformel (fx propansyre).
- **Sørg** for, at **3D-viewer** er aktiv (**Menuen ACD/Labs | 3D-viewer**)
- Vend evt. tilbage til ChemSketch

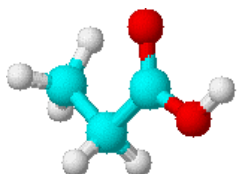
I nederste venstre hjørne har du følgende knapper. Ved at trykke på **Copy to 3D** overføres det aktuelle molekyle til 3D-vieweren.



For at få de rigtige rumlige forhold og for at hydrogenatomerne kan vises i 3D-modellen, skal denne 3D optimeres. Dette gøres ved at aktivere knappen **3d-Optimize**. Ikonet er et lille *tetraeder*.



For at skifte til hvid baggrundsfarve i 3D aktiveres **Set colors**. (Knappen med et A). Her **vælges** baggrundsfarven **hvid**.



- **Vælg** Edit | Copy

Molekylmodellen fra 3D viewer er nu anbragt i udklipsholderen og kan indsættes i tekstdokumentet. Du ser resultatet her til venstre.

Du kan lave en 3D-optimering i ChemSketch's strukturmodul. Programmet beregner og viser en 3D-stregmodel. Du skal dog stadig gennem en 3D-optimering i 3D-viewer. Vieweren kan tilsyneladende ikke overtage resultaterne fra strukturmodul.

Undervisningsforløb om aminosyrer

I det følgende gives et oplæg til at anvende ChemSketch til et undervisningsforløb om aminosyrer.

Stereoisomeri

En 2-aminosyre kan findes i to *stereoisomere* former (undtagen den simpleste aminosyre glycin). De naturligt forekommende aminosyrer er alle *L-aminosyrer*, hvis rumlige struktur ses til højre. R betegner en *sidekæde*, der varierer ganske meget fra aminosyre til aminosyre.

Den anden form (L-formens spejlbillede) kaldes en *D-form*. Her har H-atomet og aminogruppen på carbonatom nr. 2 byttet plads.

L og D er afledt af latin:

L fra *laevus* = venstre, D fra *dexter* = højre

Aminosyrestrukturer er tilgængelige i ChemSketch som færdige formler:

- **Vælg strukturmodul** i ChemSketch. Sæt programmet til at *vise alle C- og H-atomer* (se *Om brugen af ChemSketch*).
- **Vælg Templates | Template Window** (eller tast *F5*)

Alternativ:

- **Klik** på ikonen yderst til højre i værktøjslinien
- **Vælg** i Template vinduet



Sørg for, at siden *1(2) Molecules* vises. Der er to sider i skabelonen, og den anden side indeholder såkaldte C-radikaler, hvor aminosyren har en fri binding på OH-gruppens plads i carboxylsyregruppen.

Vælg fx aminosyren *tyrosin*. **Klik** et vilkårligt sted i **molekylformlen**. Det er her ligegyldigt, om en binding eller et atom er markeret. Klikket fører tilbage til tegnefeltet i ChemSketch, hvor du ser en 'molekylskygge', der følger med musen. **Placer** molekylet på siden med et enkelt **klik**. Skabelonen eller skyggen er dog stadig med, så du kan afsætte flere kopier af det samme molekyle, men det skal du ikke gøre nu, så **luk** skabelonen med et **højreklik**.

- **Markér** molekylet (ikke nødvendigt, hvis det er det eneste på tegnefladen)
- **Vælg ACD/Labs | 3D Viewer** (med mindre programmet er aktiveret)
- **Kopier** molekylet til 3D viewer. **Brug** knappen *Copy to 3D* nederst til venstre i skærbilledet

I 3D vieweren ses et molekylskelet uden H-atomer, og nederst til venstre teksten: *Not 3d-optimized*.

- **Foretag 3D optimering** (klik på det lille tetraeder).

Programmet beregner en rumlig struktur for molekylet. Under denne proces, der godt kan tage tid på langsomme computere, vrides "molekylet" på plads, og til slut vises molekylet med H-atomer.

- **Rotér** molekylet, så du kan se, om en D- eller en L-form er blevet dannet. Det kan du se ved at anbringe carboxylsyregruppen øverst og sidekæden bagud (sidekæden betegnes med R i den almindelige formel for en aminosyre).

Tip: Det kan være en fordel, at slippe strukturformlen (løfte pegefingern fra museknappen) nu og da. Flyt musen til et nyt sted og tag fat igen.

Du kan ikke på forhånd vide, om 3D optimeringen ender med en D- eller en L-form, men du kan lave den anden stereoform på følgende måde:

- **Vælg** ChemSketch **tegnemodul** med strukturformlen for den tegnede aminosyre
- **Klik** på **Flip left to right** 
- **Tryk** **Copy to 3D**-knappen og **3D-optimizer** molekylmodellen i 3D-viewer.
- **Rotér** strukturformlen, så du kan konstatere, om du har lavet den spejlbilledisomere form af aminosyren.

OPGAVE 1

I et tekstbehandlingsprogram skal du fremstille en tabel og placere D- og L-former af udvalgte aminosyrer i tabellen over for hinanden. De skal placeres, så det tydeligt fremgår, at der tale om spejlbilledisomere. Det vil være en god ide at forsyne hvert billede med aminosyrens navn (incl. D- eller L-). (Se *Indsættelse af rumlig strukturformel* om brug af klippebord og baggrundsfarve)

Aminosyrernes syrebase-egenskaber

Aminosyrerne indeholder to grupper med syrebase-egenskaber: *aminogruppen* ($-\text{NH}_2$), der har *basekarakter*, og *carboxylsyregruppen* ($-\text{COOH}$), der har *syrekarakter*. Da de to grupper sidder tæt ved hinanden, kan der ske en protonoverførsel fra carboxylsyregruppen til aminogruppen, altså inden for selve molekylet. Reaktionsproduktet kaldes en *amfoion*. Der er tale om en ligevægt, som ligger langt mod højre til fordel for amfoionen.

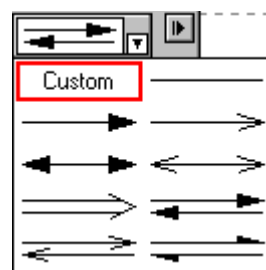
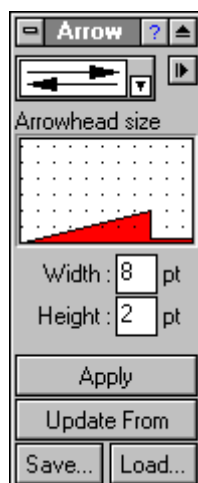
Ved brug af ChemSketch skriver du reaktionsskemaet for denne ligevægt således:

- **Vælg** en **aminosyre**, fx serin
- **Vælg** **strukturmodul** i ChemSketch. **Placer** to kopier af **molekylet** ud for hinanden på en tom side. Sørg for plads til en reaktionspil mellem dem
- **Tryk** **pil-ikonet** i skærmens venstre side



Du får nu adgang til en pil-værktøjskasse:

- **Klik** på den lille **nedad-pil** for at få adgang til at vælge pil-type.
- **Vælg** en **dobbelt-pil** (reaktionspil)

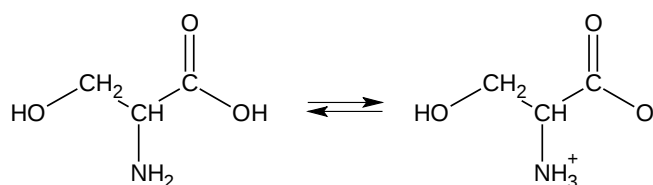


- **Indsæt** den valgte **reaktionspil** mellem de to aminosyremolekyler ved at holde venstre muse-tast nede og **trække en lille firkant** ud. Heri fremkommer så den ønskede reaktionspil.

I strukturmodulet ser du i værktøjsbjælken til venstre på skærmen en ikon.



- **Lad musen hvile på A⁺** et øjeblik og se teksten: **Increment (+) Charge** (forøg (+) ladning). Markøren bliver til et + inde på tegnefladen. **Klik** på A⁺ (men klik uden for den lille hvide trekant - den prøver vi lige om lidt).
- **Klik** på det **atom**, der modtager protonen ved protonoverførslen (altså basen). Atomsymbolet forsynes med et ⁺ og et hydrogenatom bliver tilføjet.
- **Klik** nu på den lille hvide trekant i A⁺-ikonen:
- **Vælg A⁻ (Decrement (-) Charge)**
- **Klik** med minus-markøren på det **atom**, der afgiver protonen ved protonoverførslen. Atomsymbolet forsynes med et ⁻, og et hydrogenatom fjernes fra atomet.



Det skulle gerne ende med at se således ud:

Aminosyre

Amfoion

Tip: Hvis du vil have de to strukturformler og reaktionspilen til at stå 'pænt' i forhold til hinanden, så kan du i **Draw Mode** markere alle tre objekter ved at trække en kasse uden om dem med musen. Vælg først den hvide pil til venstre på værktøjsbjælken for at kunne markere objekterne.



Når alle tre objekter er markeret (vist med sorte håndtag), klikker du på ikonen vist til højre. De markerede objekters centre bliver lagt på linie. Du kan i Draw Mode slå de tre objekter sammen til ét objekt, så bliver det nemmere at flytte eller kopiere. **Vælg Object | Group** (eller tast Ctrl+G).



Peptidbinding og peptider

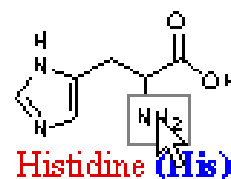
Peptidbindingen dannes, når carboxylsyregruppen i én aminosyre reagerer med 2-aminogruppen i en anden aminosyre under vandfraspaltning (en kondensationsreaktion). Produktet kaldes et *peptid*. Et dipeptid indeholder to aminosyrer bundet sammen med en peptidbinding, et tripeptid tre aminosyrer osv. Rækkefølgen af aminosyrerne i et peptid angives ved at anvende aminosyrernes forkortede navne (hver aminosyre har en tre-bogstavskode, der er anført sammen med aminosyren på aminosyreskabelonen i ChemSketch). Du starter fra den frie 2-aminogruppe (den N-terminale ende) og slutter med carboxylsyregruppen (den C-terminale ende).

Tripeptidet sammensat af alanin, histidin og phenylalanin betegnes: $H_2N\text{-ala-his-phe-COOH}$. Dette tripeptid skal konstrueres i ChemSketch:

- **Husk** at arbejde i **Structure Mode**. Begynd på et nyt dokument: **Vælg File | New**
- **Vælg aminosyreskabelonen** og **klik** på **alaninmolekylet** på skabelonsiden
- **Placér** molekylet på tegnefladen og **luk** skabelonen med et højreklik

Nu skal aminosyren histidin bindes til alanin. I alanin skal aminogruppen være fri (alanin sidder i den N-terminale ende). Det betyder, at *aminogruppen fra histidin skal danne peptidbinding med carboxylsyregruppen fra alanin*.

- **Vælg aminosyreskabelonen**. **Klik** på **N-atomet** i histidins 2-aminogruppe. Det bevirker, at netop dette atom (N) bliver bindingpunkt, når "molekylskyggen" klikkes ind på et andet atom på tegnefladen.

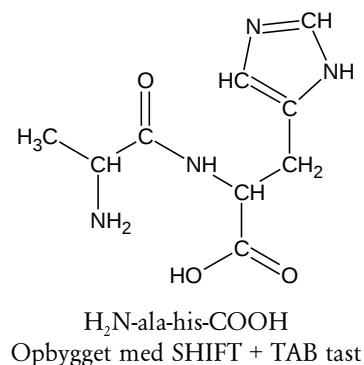
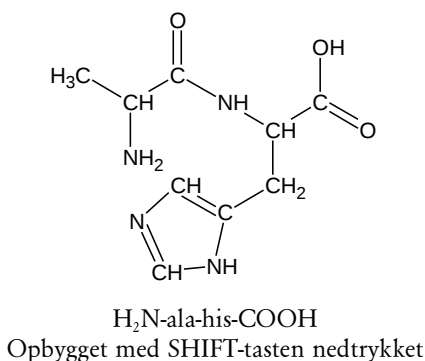


Aminogruppens N-atom i histidin skal nu bindes til C-atomet i alanins carboxylsyregruppe, og OH-gruppen skal forsvinde.

Hvis der klikkes på OH-gruppen, bliver histidin bundet til alanin, men ikke med en peptidbinding (atomerne i bindingen bliver C-O-N og ikke C-N). **Prøv** det – og **fortryd** efterfølgende med et klik på den blå 'fortryd-pil'.

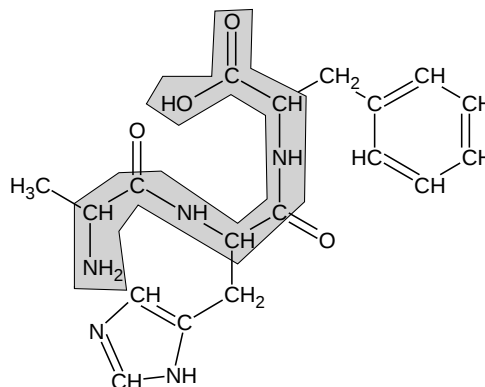
Peptidbindingen tegnes rigtigt ved at **SHIFT-klikke** på **OH-gruppen** (hold SHIFT-tasten nede medens du klikker). Nu skulle C-atomet fra carboxylsyregruppen i alanin være blevet bundet til N-atomet fra histidin. De to molekyler er blevet koblet sammen ved en *kondensationsreaktion*.

TIP: Skyggebilledet fra Template-vinduet kan vendes ved hjælp af **TAB**-tasten, og derved kan man få lavet de to viste udgaver af det samme dipeptid (histidinmolekylet roteres om bindingen til aminogruppen):



- **Tilføj** nu den sidste aminosyre, **phenylalanin**, på tilsvarende måde.

Når strukturen er tegnet færdig, kan peptid-kæden fremhæves. Det kan fx gøres som vist her. Herved træder sidekæderne meget tydeligere frem.



Sådan fremhæves peptid-kæden

I ChemSketch vælges **Draw Mode**, når den ønskede struktur er tegnet.

Med tegneredskabet **Polygon** tegnes en sammenhængende polygon rundt om peptidkæden ved at placere ankerpunkter: **Klik, bevæg** musen til næste **ankerpunkt** og **klik, bevæg** musen til næste **ankerpunkt** og **klik** osv. Tegning afsluttes med **højreklik**.



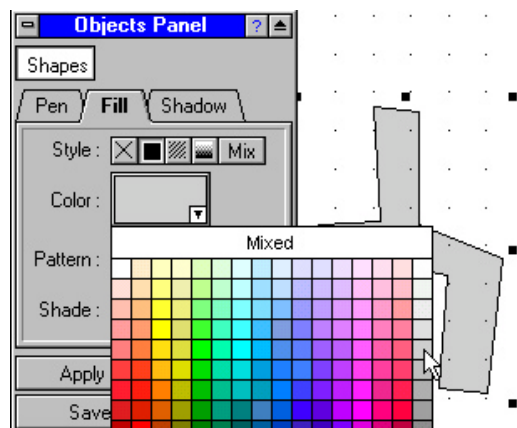
- **Tryk** markeringspil  | **Dobbeltklik** på tegneobjektet (den netop tegnede polygon) så **Objects-panel** åbnes.
- **Vælg** faneblad **Fill** | **Tryk Style Solid** (knap med sort firkant trykkes ind).
- **Klik** ved Color på **den lille pil** nedad og **vælg** udfyldningsgrad på 18% gray. (af hensyn til gengivelse i sort/hvid)
- **Tryk Apply**

Indstillinger gælder for markerede objekter. Hvis ingen objekter er markerede, bliver indstillinger gemt som standardindstillinger.

En kedelig grå figur dækker nu den flotte strukturformel. Flyt polygonen bag ved strukturformlen:

- **Vælg Object** | **Send to Back**

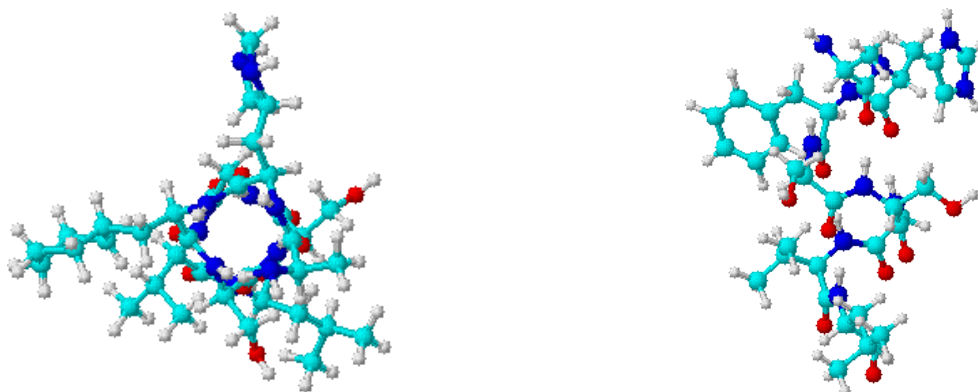
Det kan være nyttigt at samle strukturformel og baggrunden til ét objekt. **Marker** dem begge og **tast Ctrl+G**



Polypeptider forekommer ofte i en skrue- eller spiralforn, hvor nabovindinger af spiralen fastholdes af hydrogenbindinger mellem N-H i én vinding og C=O i en over- eller underliggende vinding. De forskellige sidekæder på aminosyrerne peger alle mod skruens eller spiralens yderside. Forekomster af aminosyren *cystein* i et polypeptid kan medføre dannelse af *disulfid-bindinger* mellem forskellige steder på peptidkæden, så kæden fastholdes i en bestemt foldning eller struktur.

Figuren herunder viser octapeptidet $H_2N\text{-ala-his-phe-ser-ser-gly-val-leu-COOH}$, som antager en spiralstruktur. Til venstre er peptidet drejet, så du kigger ned gennem spiralen. Til højre er det samme molekyle drejet 90° opad mod papirets top, så spiralens akse ligger i papirets plan.

Selv med et 3D-billede er det vanskeligt at se spiralstrukturen på det sidste billede. Octapeptidet findes i en 3D-optimeret form i filen OCTAPEP.MOL.



Filen OCTAPEP.MOL kan åbnes i **3D-viewer** ved at vælge:

File | Import... eller via **Import from Mol-file** knap



Selv om der nu står *Not 3d-optimized* i statuslinien, er der ingen grund til at gennemføre en 3D-optimering. 3D-viewer er med et molekyle af denne størrelse tæt ved grænsen for sin formåen, og man risikerer efter længere tids beregning en melding om, at molekylet er for komplekst.

Carbohydrater

I det følgende gives der et oplæg til brug af ChemSketch som supplement i et undervisningsforløb om carbohydrater. Det bliver hurtigt uhensigtsmæssigt at anvende traditionelle molekylbyggesæt i denne sammenhæng. Modeller af den størrelse bliver hurtigt skrøbelige, og kuglerne falder fra hinanden. Fokus flyttes derved væk fra det væsentlige, nemlig at opnå en forståelse af den rumlige opbygning.

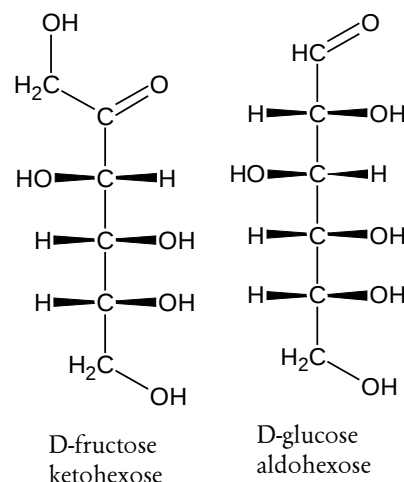
Carbohydrater optræder oftest som ringformede molekyler eller kæder af ringe. Afhængigt af om molekylerne består af én, to eller flere ringe, opdeler man carbohydraterne i mono-, di- og polysaccharider.

Fischer-projektioner

Carbohydrater findes hovedsageligt på ringform, men det er lettest at se på den åbne form først.

Carbohydrater inddeles i to hovedgrupper af molekyler; *ketoser* og *aldoser*. Ketoser indeholder altid en oxogruppe (en keton) på carbonatom nr. 2 og aldoser indeholder altid en oxogruppe (et aldehyd) på carbonatom nr. 1. D-fructose er et eksempel på en *ketohexose*. Betegnelsen *hexose* kommer af, at molekylet indeholder ialt seks carbonatomer. D-glucose er en *aldohexose*.

Det ses på strukturformlen for D-fructose, at molekylet indeholder tre *asymmetriske* carbonatomer. Dette betyder, at D-fructose blot er én af i alt otte stereoisomere ketohexoser (fire stereopar). Tilsvarende er D-glucose blot én blandt seksten aldohexoser (otte stereopar).



Det store antal stereoisomere former er årsagen til, at man traditionelt ikke anvender systematiske navne for carbohydrater.

Betegnelsen **D** henviser til, at OH-gruppen på det *nederste* asymmetriske carbonatom sidder til *højre* (på latin *dexter*). Sidder OH-gruppen til *venstre* (på latin *laevus*) er det en **L**-form.

De to strukturformler herover er tegnet med ChemSketch på følgende måde:

- **Bring** ChemSketch i **Structure Mode** og indstil til at **vise alle C- og H-atomer**.
- **Vælg Templates | Template Window** (eller **tast F5** eller **tryk** )

I **Template Window** vælger du således:



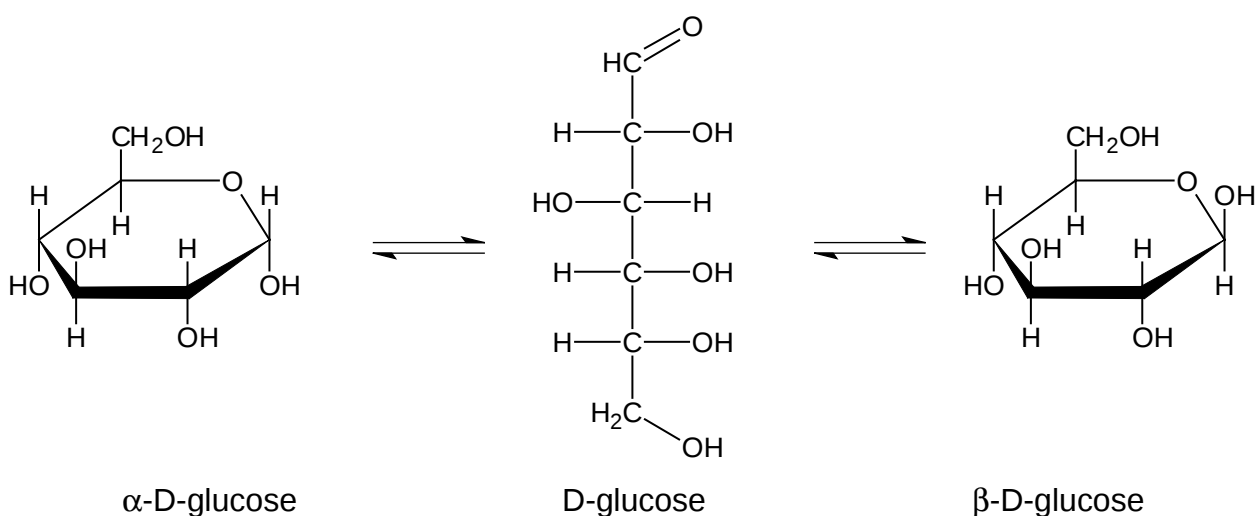
Molekylerne ovenfor er tegnet i en kombination af *Fischer-projektion* og *tre-dimensional strukturformel*. Du kan også vælge at tegne molekylerne i traditionel Fischer-projektion.

OPGAVE 2

I et tekstbehandlingsprogram skal du fremstille en tabel med de i alt fire carbohydrater (på D-form), som er stereoisomere med D-fructose. Skriv navnene på molekylerne nedenunder.

Ringstrukturer

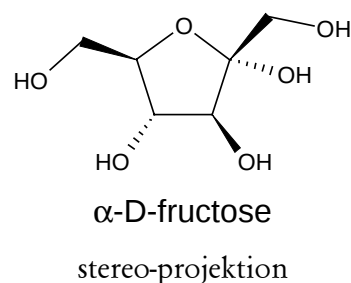
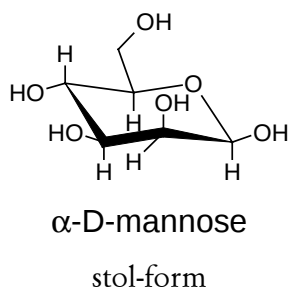
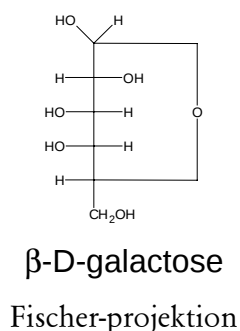
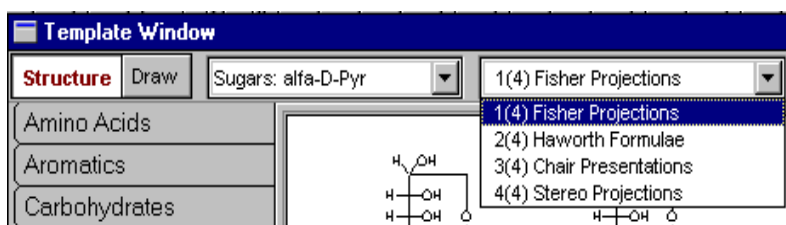
Som nævnt tidligere forekommer carbohydrater stort set udelukkende på ringform. Enten som *furaner* (femringe) eller som *pyraner* (seksringe). Når ringslutningen foregår, opstår der to nye muligheder for stereoisomeri, en α -form og en β -form.



De to ringformer herover er begge tegnet som såkaldte Haworth-formler.

Med ChemSketch er der mulighed for at tegne ringene på fire forskellige måder:

Fisher-projektion, Haworth-formel, stol-form og stereo-projektion.

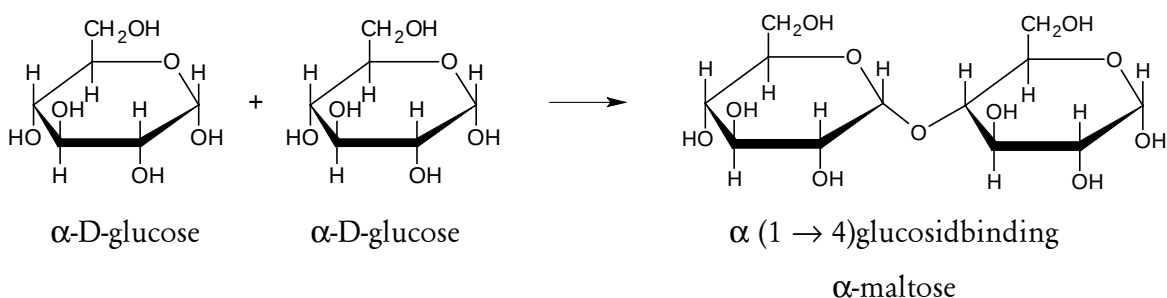


OPGAVE 3

Prøv at tegne det samme monosaccharid i flere forskellige præsentationer. Kopier molekylerne til 3D og undersøg, om 3D visningerne bliver ens.

Glucosidbindinger

De naturligt forekommende saccharider er opbygget enten som *disaccharider*, eller som *polysaccharider*. Både di- og polysaccharider er opbygget af monosaccharid-enheder, som er bundet sammen med *glucosidbindinger*. I princippet er dette sket via en række kondensationsreaktioner, hvorved glucosidbindingerne dannes samtidig med vandfraspaltning. Et eksempel på et kendt disaccharid er *maltose* (maltsukker), som er opbygget af to D-glucose enheder. Normalt er maltose tegnet således:



Men maltose kan også tegnes med ChemSketch på en anden måde, hvorved der kan opnås en bedre rumlig forståelse. I ChemSketch's tegnevindue startes en ny tegning:

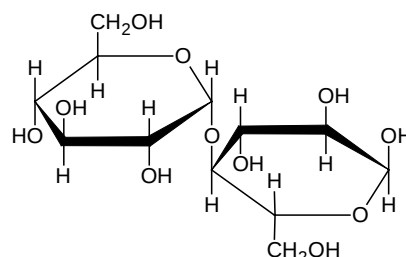
- **Vælg File | New.** Der arbejdes i **Structure Mode**
- **Vælg Template-vinduet | SUGARS: α -D-Pyr | Haworth-formel**
- **Klik** på **α -D-glucopyranose**, som vi også kalder α -D-glucose
- **Klik** på molekylet på tegnefladen og luk template med et **højreklik**.
- **Vælg Template | SUGARS: α -D-Pyr | Haworth-formel**
- **Klik** OH-gruppe (nr 4) i **α -D-glucopyranose**
- **SHIFT-klik** på O-atomet i OH-gruppe på C nr. 1 i glucose på tegnefladen

Herved får du følgende billede på tegnefladen:

For at se maltosemolekylet i 3D skal du først ekspandere de to CH_2OH -grupper.

- **Vælg Tools | Expand Shorthand Formulae.**

Så bliver alle bindinger synlige. **3D-optimer** og **COPY TO 3D**. Du kan evt. 3D-optimere igen. Hvordan ser resultatet ud?



OPGAVE 4

Fremstil på tilsvarende måde modeller af disacchariderne *lactose* (mælkesukker) og *saccharose* (rørsukker). Prøv at overføre modellerne til 3D-viewer.

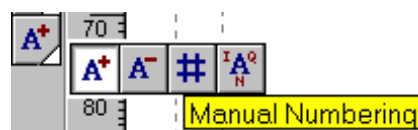
OPGAVE 5

Fremstil en mini-poly-saccharose med fx 7 - 8 glucoseenheder. Regnearbejdet ved 3D optimering tager denne gang lidt længere tid.

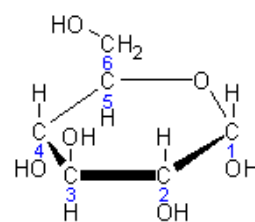
Nummerering af atomer i en strukturformel

Atomerne i en strukturformel kan få tilføjet numre:

- **Hent α -D-glucopyranose** ind på tegnefladen fra skabelonen og **vælg Tools | Expand Shorthand Formulae**.
- **Klik** i den lille **hvide trekant** nederst til højre i A^+ , og **klik** i **nummertegnet** (*Manual numbering*). Vælg OK i dialogboksen.



Markøren bliver til et lille nummertegn, og der tilføjes et **fortløbende nummer** til de **atomer**, du *klikker* på. C-atomerne i α -D-glucopyranose har numre som vist på figuren til højre.



Eksamen

Carbohydrater indgår i kernestoffet på mellem- og højt niveau. Desuden indgår aminosyrer og proteiner i kernestoffet på højt niveau. Programmet ChemSketch kan inddrages i eksamen, hvis der på forhånd er søgt om tilladelse hertil, og hvis eleverne har adgang en computer med programmet i såvel forberedelseslokalet som i eksamenslokalet.

Eksempel på eksamensspørgsmål

Carbohydrater

Forklar hvad et carbohydrate er. Omtal desuden mono-, di- og polysaccharider og herunder glucosidbindinger. Ved hjælp af programmet ChemSketch skal du redegøre for den rumlige opbygning af carbohydrater, og herunder specielt stereoisomeri.

Du kan desuden vælge at omtale eller demonstrere følgende:

Forskellige projektionsformer, påvisning af carbohydrater, eksempler på forekomster og anvendelser af carbohydrater, opløselighed, hydrokolloider.....

Visualisering med *Weblab Viewer Lite*

Hans Christian Jensen

Hvad er *WeblabViewer Lite*?

Programmet WeblabViewer Lite kan indlæse filer med molekylstrukturer og vise billeder af molekylers rumlige struktur. Billedet kan skaleres, roteres og translateres, og der kan vælges mellem forskellige fremvisningsmåder. Grafikken er fremragende. Det er nemt, hvis inputfilen indeholder de nødvendige oplysninger, at udvælge dele af molekylet med henblik på at analysere detaljer i dette. Det er specielt nyttigt, når det drejer sig om analyse af store biomolekyler. Man kan udvælge og navngive dele af molekylet, og disse oplysninger bliver husket til næste gang, hvis man gemmer filen i Weblab Viewers eget filformat. Disse muligheder gør Weblab Viewer interessant for kemiundervisningen.

Weblab Viewer Lite hentes på Internetadressen

<http://www.msi.com/download/viewer/lite/index.html>

Læs licensbetingelserne før programmet hentes. Foruden programmet kan man hente en samling af molekyler, som indeholder et udvalg af store og små molekyler, uorganiske som organiske. Der er også eksempler på krystalstrukturer i samlingen.



Hvad *WeblabViewer Lite* kan?

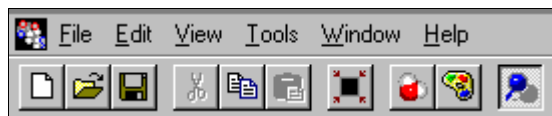
Man kan ikke konstruere nye molekyler i WeblabViewer Lite, og programmet kan ikke automatisk optimere en given struktur. Dette er kun muligt i Pro versionen, som koster omkring 300 US\$. I Lite versionen er det dog muligt manuelt at ændre en indlæst struktur og gemme ændringerne. Det er også muligt at have mange molekyler gemt i samme fil, og filen kan fungere som en skabelon, hvorfra man udvælger det molekyle, man aktuelt er interesseret i at arbejde med. Man må forholde sig kritisk til de indlæste koordinatfiler. Mange strukturer er beregnede strukturer med de fejl og forbehold, som ligger i de anvendte modelleringsprogrammer. Nogle filformater indeholder kildehenvisninger, som kan studeres, hvis filen indlæses i en teksteditor.

Molekylkoordinater gemmes desværre i flere forskellige filformater. WeblabViewer kan læse de mest betydende filformater og gemme i de mest betydende filformater foruden i sit eget filformat *.msv, men kan også gemme filerne i andre formater. Programmet kan læse koordinatfiler genereret med ChemSketch 3.5 eller ISIS Draw. De nævnte formateditorer kan hentes fra Internettet. Henvisning hertil findes på kemis hjemmesider <http://www.ke.gymfag.dk>.

I det følgende omtales arbejde med filerne VAND1.MOL, INSULIN.PDB og DNA2HC.MSV. Filerne kan hentes blandt de elektroniske bilag til IKT-hæftet på adressen www.ke.gymfag.dk/IKT.

Brugerfladen i *WebLab Viewer Lite*

- *Hold* musen stille over værktøjsknapperne og *læs* den korte forklaring på den gule note. Brug eventuelt menupunktet **Help**
- Pilemarkør til markering
- Rotation af hele billedet: **Klik** og *træk*. Rotation af markering: **Ctrl+Klik** og *træk*
- Translation af hele billedet: **Klik** og *træk*. Translation af markering: **Ctrl+Klik** og *træk*
- Zoom
- Drej omkring en binding. En binding og to nabobindinger skal være markeret. *Se Help | Torsion*

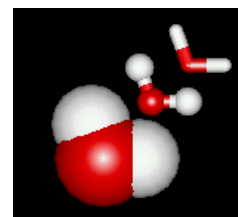
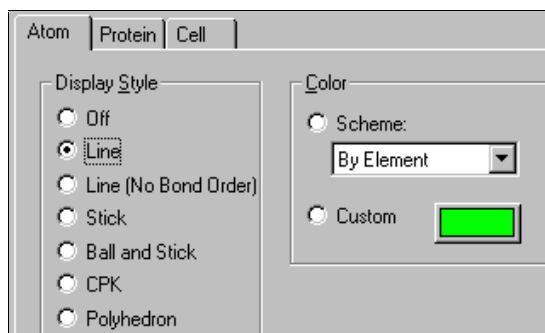


Genvejstaster

- **Ctrl+Z**: Fortryd og gå bagud i handlingskæden
- **Ctrl+Y**: Fortryd og gå fremad i handlingskæden

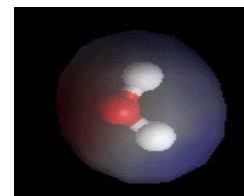
Visning af vandmolekyle

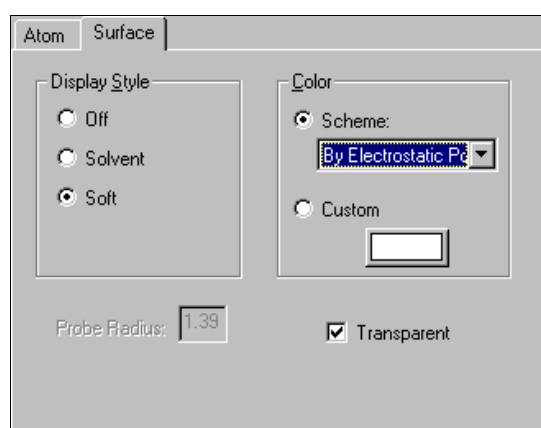
- *Åbn* filen **vand1.mol**. Husk at *vælg* filtype ***.mol**
- *Markér* et molekyle og *tryk*  eller *højreklik* på et molekyle og *vælg* Display Style



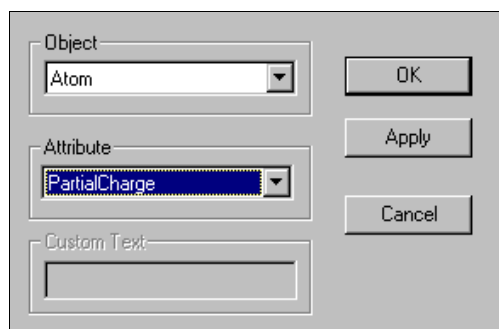
Molekylerne vises her som pind-, kugle og pind- og kalotmodel (CPK)

- *Markér* vandmolekylet
- *Vælg*: Tools | Surfaces | Add
- *Højreklik* på overfladen og *vælg* Display Style | Surface
- *Markér* Soft (se næste side)
- *Markér* Transparent (se næste side)





- *Markér* molekylet
- *Vælg*: Tools | Labels | Add
- *Udfyld* dialogboks som vist:

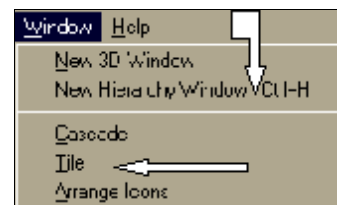


Insulin

I »Brookhaven Protein Databank« kan man hente proteinstrukturer, som er bestemt ved røntgenkrystallografi. Strukturerne er gemt i filformatet *.PDB, som er defineret af Protein Databank Brookhaven. Den her anvendte fil INSULIN.PDB stammer dog ikke fra Brookhaven Protein Databank men fra en eksempelsamling af molekylfiler, som er hentet fra samme webadresse som WeblabViewer Lite. Molekylstrukturen er sandsynligvis beregnet.

- *Åbn* filen **insulin.pdb**
- *Vælg* Window | New Hierarchy Window
- *Vælg* Window | Tile

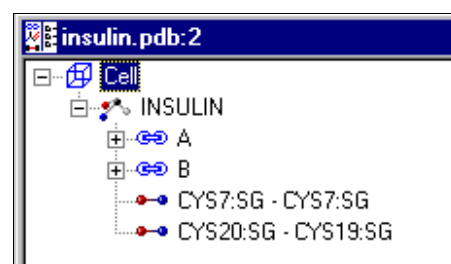
3D-vinduet og hierarki-vinduet vises nu side om side.



Hierarki-vindue

Insulin består af 2 proteinkæder benævnt A og B. Aminosyrelisten ekspanderes ved at klikke på + tegnet ved A.

To bindinger mellem cystein-molekyler er specielt fremhævet i listen



Hierarkivindue: Aminosyrer i kæde A er markeret.

- *Ekspander* listen
- *Klik* på første aminosyre
- *Flyt* markøren til sidste aminosyre
- *Shift + klik* på sidste aminosyre

Object	Name	ID	Type
AminoAcid	GLY1	1	Glycine
AminoAcid	ILE2	2	Isoleucine
AminoAcid	VAL3	3	Valine
AminoAcid	GLU4	4	GlutamicAcid
AminoAcid	GLN5	5	Glutamine
AminoAcid	CYS6	6	Cysteine
AminoAcid	CYS7	7	Cysteine
AminoAcid	ALA8	8	Alanine
AminoAcid	SER9	9	Serine
AminoAcid	VAL10	10	Valine
AminoAcid	CYS11	11	Cysteine
AminoAcid	SER12	12	Serine

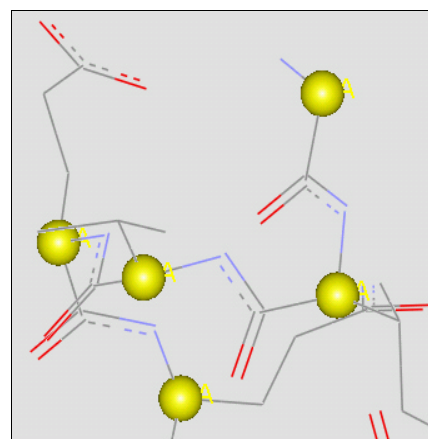
C-alfa atomer er markeret på billedet. Det er C-atomerne, som er naboer til peptidbindingerne:
-CA-CONH-CA-CONH-CA-CONH-CA osv.

- *Vælg* Edit | Select

☐ All of element

☒ By name

- *Tryk* Select og Close
- *Vælg* View | Display Style | Faneblad Atom | Ball and Stick



Man forenkler strukturen ved at tegne rette linier mellem C-alfa atomerne. Herved fremkommer kædens *CA linie*. Det er proteinkædens »rygrad«. På den sidder aminosyrernes sidekæder. De kaldes *residuer*.

Vise *CA linien*:

- **Vælg Edit | Select All**
- **Vælg Display Style | Protein | Ca Stick**

Ikke vise Residuerne:

- **Vælg Display Style | Atom | Off**

Vise *CA linien som Ribbon*:

- **Vælg Display Style | Protein | Ribbon**

Hele A kædens CA linie. Man ser 2 områder, som er spiralsnoet (alfa-helix). De er forbundet af et ikke-snoet stykke af kæden.

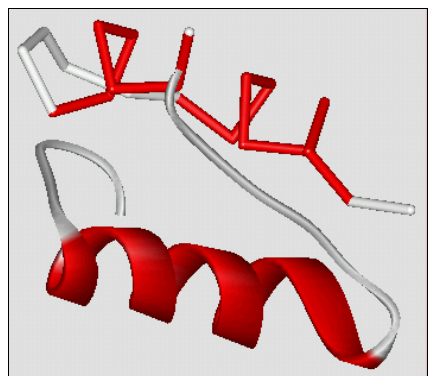
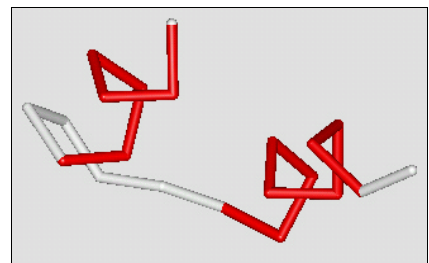
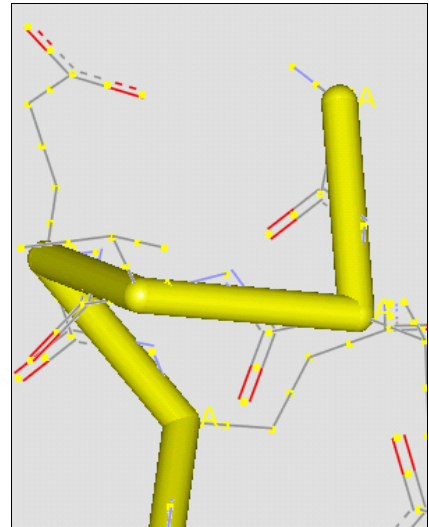
Områderne er farvet forskelligt.

- **Markér** kæden
- **Vælg Display Style | Protein | Color Scheme | By Secondary Type**

A kædens CA vist som **Stick**.

B kædens CA er vist som **Solid Ribbon**.

B kæden har en alfaspiral og et langt stykke, som ikke er snoet i spiral.



Hydrogenbindinger i insulin

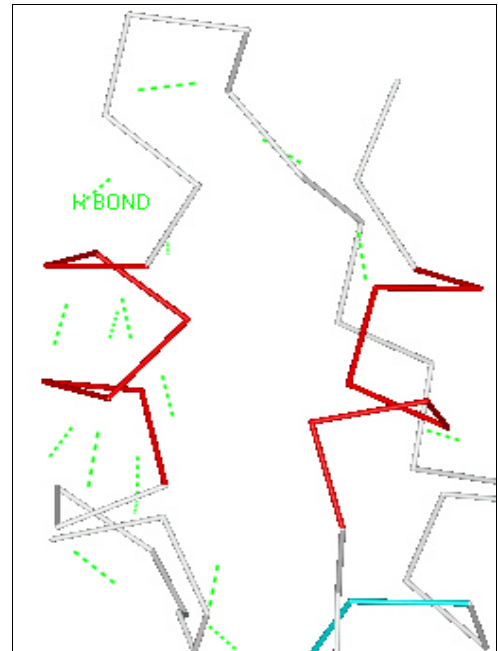
Den indlæste struktur fra INSULIN.PDB indeholder ikke information om H-atomer. H-atomer kan tilføjes til strukturen således:

- **Vælg Edit | Select**



- **Tryk på Select.** Gentag for O- og S-atomer.
- **Vælg Tools | Hydrogens | Add**

På billedet ses stabiliserende hydrogenbindinger vist med stiptet grøn linie. På en af bindingerne er der sat en label med teksten **H BOND**.

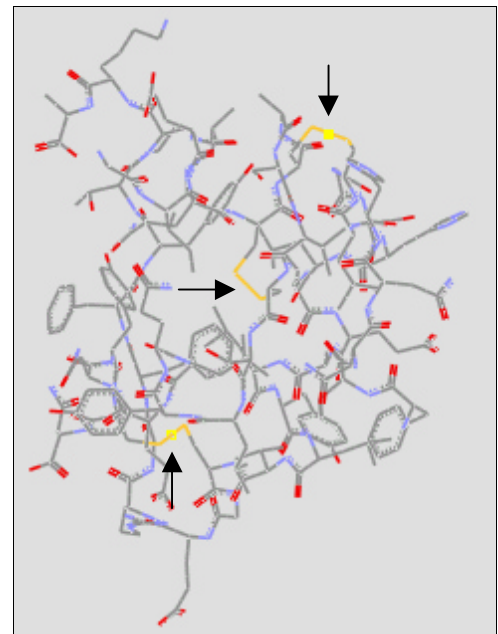
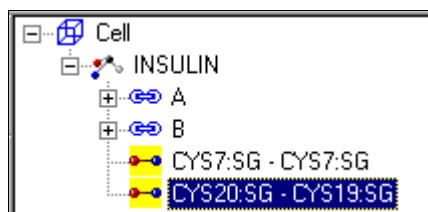


Cystein og svovlbroer i insulin

Start med visning af insulin i **Display Style Line**:

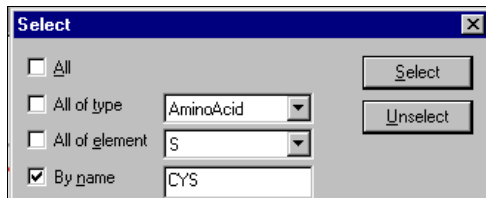
- **Vælg Edit | Select All** (genvejstast Ctrl+A)
- **Vælg View | Display Style** (genvejstast Ctrl+D) |
Vælg Faneblad Atom | Line |
Vælg Faneblad protein | Off
- **Vælg Fjern** markering (*klik* udenfor markering)

I 3D vinduet kan man se tre svovlbroer vist med gul streg. To af svovlbroerne kan markeres ved at klikke på listen i hierarkivinduet.



Find alle cysteinenheder i insulin:

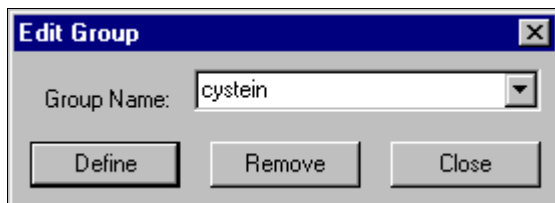
- **Vælg Edit | Select**
- **Udfyld** dialogboksen
- **Tryk Select | Close**



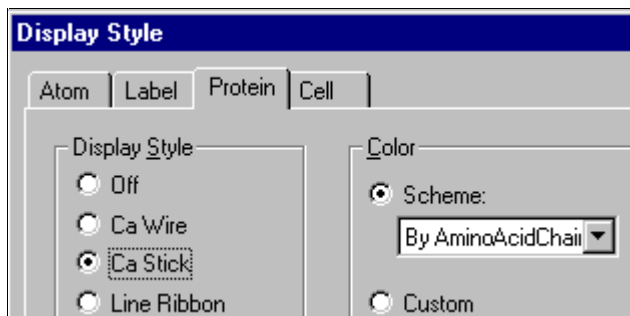
- **Vælg View | Display Style | Ball and Stick**

Man ser cysteinenheder som **Ball and Stick**.

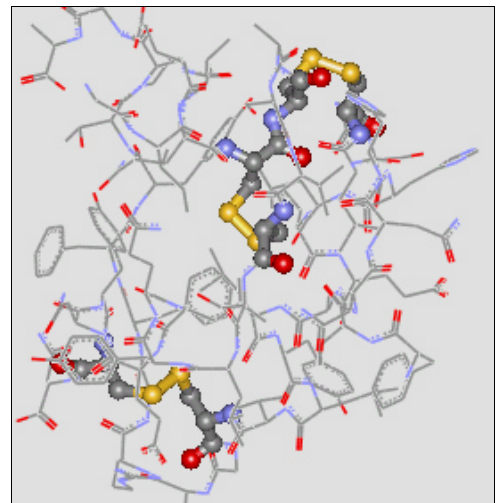
- **Vælg Edit | Group** og **udfyld** dialogboksen



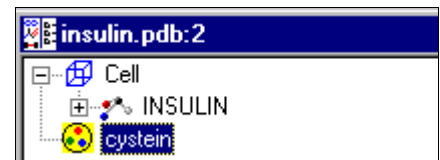
- **Tryk Define**
- **Markér** A kæden og B kæden
- **Tast Ctrl+D | Udfyld** dialogboksen



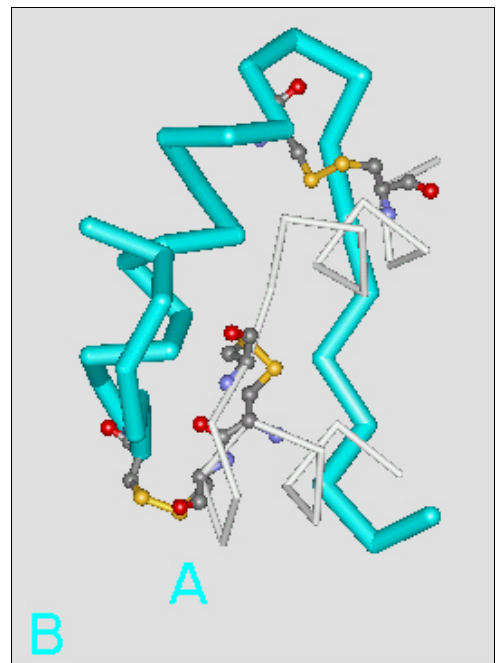
- **Hierarkivindue | Markér** gruppen cystein
- **Tast Ctrl+D | Ball and Stick | OK**
- **Rotér** molekylet og **iagttag** 2 svovlbroer mellem A og B kæden samt en intern svovlbro i A kæden.



Cysteinenheder som **Ball and Stick**.



Alle cysteinenheder er defineret som en gruppe.



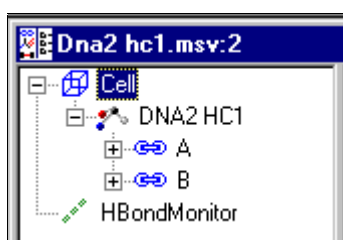
Nukleotider i DNA

- *Åbn* filen DNA2 HC1.MSV
- *Vælg* Window | New Hierarchy Window
- *Vælg* Window | Tile

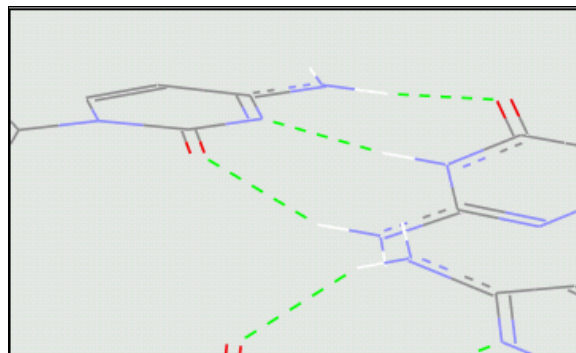
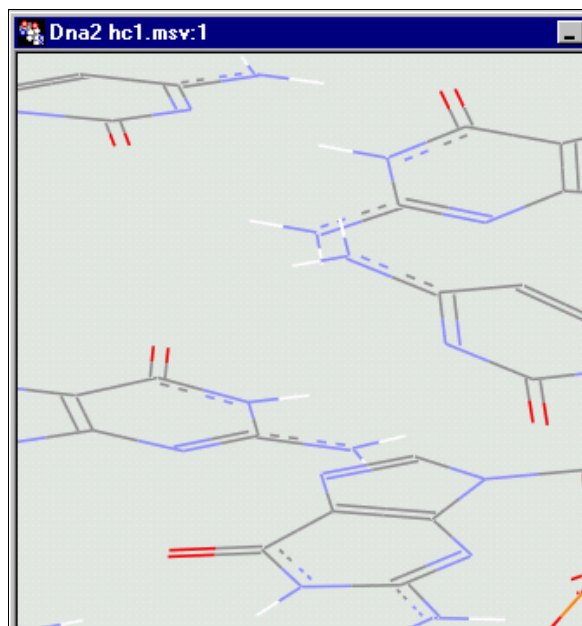
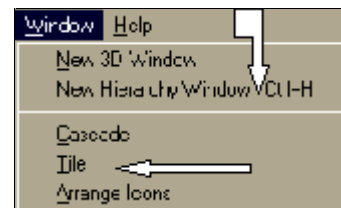
3D vinduet og hierarki-vinduet vises nu side om side.

De fleste hydrogenatomer i strukturen vises ikke. Men de H-atomer, der er knyttet til N, O og S, vises fordi de kan indgå i hydrogenbindinger.

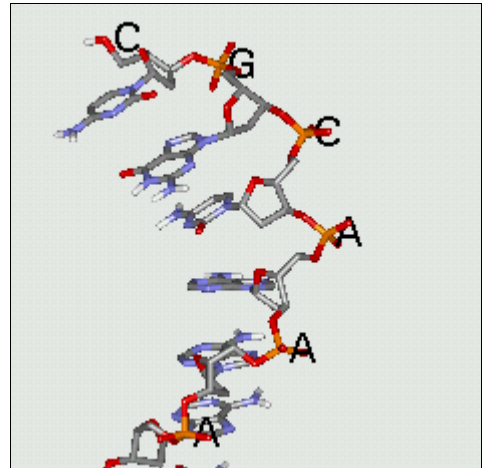
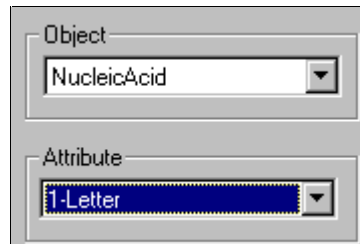
Hierarki-vinduet:



- *Klik* på for at ekspandere A kæden
- *Klik* på for at markere en kæde
- *Klik* uden for for at slette markering
- *Højreklik* i hierarki-vinduet for at vælge markering af alle P-atomer vha. en dialogboks
- *Klik* på HBondMonitor for at markere »hydrogenbindinger« mellem kæderne
- *Vælg* Tools | Monitors | Remove for at slette visning af markerede hydrogenbindinger. *Se* ændringen i 3D vindue
- *Tast* Ctrl+Z for at fortryde sletning af hydrogenbindinger
- *Tast* Ctrl+Y for at igen at slette hydrogenbindinger

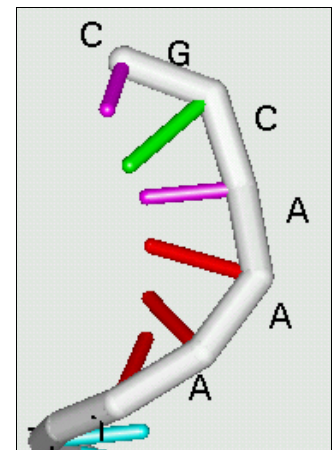


- Hierarkivindue | *Markér A kæden*
- *Tryk* . *Vælg Atom* | Off (A kæden vises ikke)
- Hierarkivindue | *Markér B kæden*
- 3D vindue | *Højreklik* | Display Style | Atom | Stick
- *Vælg Tools* | Labels | Add

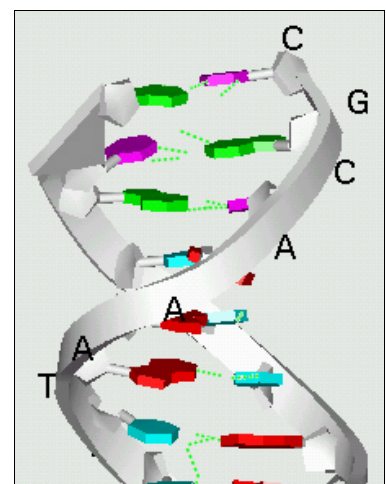


- *Klik* uden for markeringen for at fjerne markeringen.

- *Markér B kæden.*
- *Vælg Display Style*
- Faneblad Atom | Off
- Faneblad RNA/DNA | Ladder

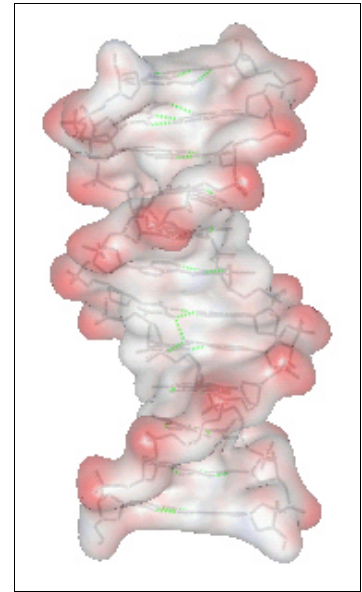


- *Vælg Edit* | Select All (genvej: Ctrl+A)
- *Vælg Display Style* | RNA/DNA | Rings
- *Vælg Tools* | Monitors | HBond
- *Prøv* nu:
- *Vis* det hele i Ladder-visning
- *Sæt labels* på begge kæder



DNA molekylets »overflade«

- *Tast* Ctrl+A
- *Tast* Ctrl+D
- *Vælg* Tools | Monitors | Remove
- *Vælg* Tools | Labels | Remove
- *Vælg* Tools | Surfaces | Add



Eksamen

Aminosyrer og proteiners struktur indgår i kernepensum på mellem- og højniveau i kemi. Programmet WeblabViewer Lite giver eleven nye muligheder for at fremstille sin viden om proteiners rumlige struktur. Under nuværende eksamensregler skal der søges om tilladelse til at bruge PC ved mundtlig eksamen. Eleverne skal have arbejdet selvstændigt med programmet, og der skal være adgang til programmet i såvel forberedelseslokale som eksaminationslokale. Herunder er der givet et eksempel på et eksamensspørgsmål.

Aminosyrer og proteinet insulin

Forklar hvad en aminosyre er og omtal peptidbinding. Forklar hvad der menes med et proteins primære struktur. Ved brug af programmet WeblabViewer Lite og filen insulin.pdb skal du redegøre for den rumlige struktur af insulinmolekylet (sekundær, tertiær og kvarternær struktur).

Du kan vælge at komme ind på nogle af følgende punkter:

C-alfa linie, alfahelix, A og B kæde

Svovlholdig aminosyre og svovlbroer

Hydrogenbindings betydning for fastholdelse af et proteins rumlige struktur

Hydrofobe og hydrofile aminosyrer

Eller hvad der ellers er relevant for emnet.....

Aspirin krydret med Internet og *HyperChem*

Jan Geertsen, Helge Mygind og Tine Spanggaard

Indledning

Aspirin (acetylsalicylsyre) er et af de gængse emner i kemiundervisningen. Emnet kan udbygges ved at anvende søgninger på Internet og ved at bruge programmet *HyperChem Lite*. Enkelte dele af rutinerne fra afsnittet "Molekylære beregninger med programmet *HyperChem*" fra den første IKT-bog genopfriskes i simple tegne- og præsentations-øvelser, der især koncentrerer sig om molekylvisualisering. Desuden præsenteres mere avancerede beregninger på forskellige fastlåste geometrier af aspirinmolekylet. Det vil forhåbentligt øge forståelsen af forbindelsers tredimensionelle struktur.

Aspirin er valgt som udgangspunkt, men materialet er skrevet med henblik på at inspirere til søgninger og beregninger på andre forbindelser. Øvelserne forudsætter kendskab til *HyperChem*s præsentations- og beregningsmetoder, som relativt hurtigt kan tilegnes - eventuelt ved gennemarbejdning af de simple øvelser fra den første IKT-bog. Niveaumæssigt egner emnet sig fortrinsvis til mellemniveau og højniveau, men enkelte dele af materialet kan også inddrages i undervisningen på obligatorisk niveau. Computerøvelserne er tilpasset Lite-versionen af *HyperChem*, da denne udgave er økonomisk overkommelig at anskaffe.

Søgning efter molekylstrukturen på Internet

Undervisningsforløbet kunne tage sit udgangspunkt i en syntese af aspirin, hvorefter man kunne bestemme forskellige fysiske og kemiske data for det fremstillede stof, foretage renhedskontrol osv. I tilknytning hertil kunne man søge supplerende oplysninger på Internet (omtales senere). Det forudsættes, at man skal beskæftige sig mere indgående med den rumlige struktur af molekylet. Denne del af forløbet kan tage sit udgangspunkt i en søgning efter molekylstrukturen på Internet.

Inden man begynder at søge efter molekylstrukturen, skal man have *Chime* installeret som plug-in til sin browser, se under *Internet* på Kemis hjemmeside <http://ke.gymfag.dk>.

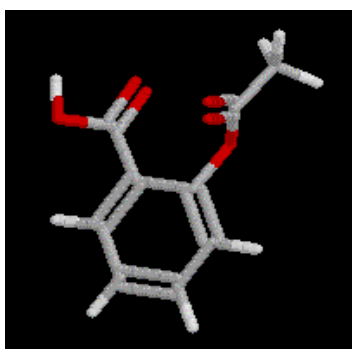
Søgemaskinen

<http://chemfinder.camsoft.com> er velegnet til kemisøgninger. En søgning på *aspirin* giver bl.a. stoffets molekylformel, strukturformel og nogle fysiske data for stoffet. Desuden får man en lang række relevante links.

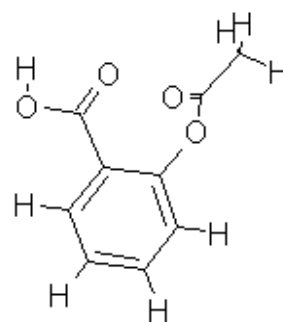
Et af disse links fører frem til *3D Molecular Modeling Homepage of Tokyo University of Pharmacy and Life Science* på webadressen:

<http://triton.ps.toyaku.ac.jp/~dobashi/english/index.html>.

Her kan man vælge *Structures*, hvorefter man søger på aspirin. Det giver en molekylmodel af aspirin som vist på figur 32. Bemærk, at benzenringen er angivet med dobbeltbindinger.



figur 32



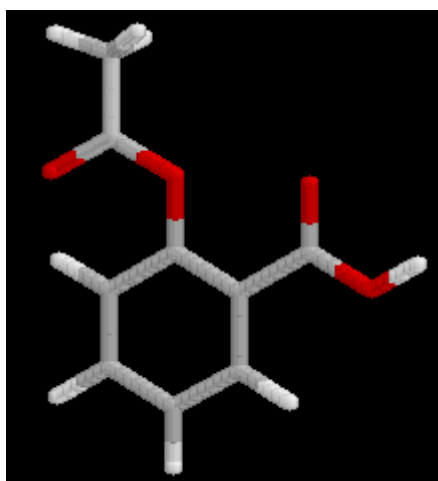
figur 33

Chime giver en række muligheder for at arbejde med modellen. Hvis man højreklikker på den, får man en menu med en række valg. Man kan fx lave modellen om til en kalotmodel, man kan rotere den osv. Man kan også vælge at gå over til 2D. Når modellen vender, som vist på figur 32, får man i to dimensioner det resultat, som ses på figur 33.

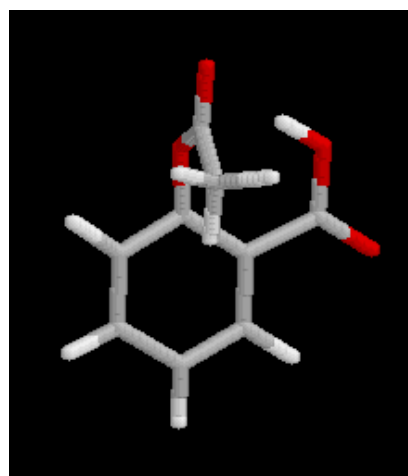
Man får også mulighed for at gemme modellen på sin egen computer i det såkaldte mol-format ved at vælge **File | Save Molecule As...** Gem filen på diskette (filnavn: 'aspirin.mol'). Denne fil skal senere indlæses i *HyperChem* og bruges i den modelleringsøvelse, som beskrives nedenfor.

En anden nyttig database findes på hjemmesiden for Computer-Chemie-Centrum på Erlangen-Nürnberg Universitet <http://vermeer.organik.uni-erlangen.de/>. Vælg *Services*. På næste side vælges *The NCI enhanced Database Browser*. Her er det nemmeste at søge ved hjælp af CAS-nummeret, som for aspirin er 50-78-2. Det giver to hits, som begge er aspirin. Dobbeltklik på et af de to anførte NSC-numre. På den side, der kommer frem, vælges PDB som *Format*, hvorefter der trykkes på *Retrieve*. Hvis man højreklikker på modellen og vælger **Display | Sticks**, får man det billede, der er vist på figur 34. PDB-filen kan gemmes på egen computer og eventuelt senere indlæses i *HyperChem*.

Bemærk, at den rumlige struktur på figur 34 er forskellig fra strukturen på figur 32. Det illustrerer, at strukturer, man finder på Internet, ikke nødvendigvis er eksperimentelt bestemte strukturer. På figur 35 ses endnu et eksempel (<http://www.bris.ac.uk/Depts/Chemistry/MOTM/aspirin/aspirin.htm>).



figur 34



figur 35

Visualisering og beregning med *HyperChem*

I denne øvelse bygges en model af aspirinmolekylet. Modellen geometrioptimeres og undersøges nærmere med hensyn til bindingsafstande og bindingsvinkler.

Modelbygning af aspirin

Tegn først en strukturformel for aspirin. Derefter laves en model af molekylet i *HyperChem* på følgende måde:

- **Dobbeltklik** på *Draw*-knappen, hvorved periodesystemet fremkommer på skærmen

- **Klik** på C-atomet og anbring det nødvendige antal carbonatomer i arbejdsfeltet
- **Klik** på O-atomet og anbring det nødvendige antal oxygenatomer i arbejdsfeltet
- **Træk** bindingerne mellem atomerne ved at holde venstre museknap nede, mens atomerne bindes sammen med enkeltbindinger. **Dobbeltklik** på den ene af de seks enkeltbindinger i benzenringen, hvorved ringen gøres aromatisk. De to dobbeltbindinger mellem carbon og oxygen laves ved et ekstra klik på de pågældende bindinger.
- **Vælg Build | Add Hydrogens** for at sætte hydrogenatomerne på
- **Vælg Build | Model Build** for at få et fornuftigt startgæt på molekylets struktur
- **Gem** resultatet på diskette til senere brug (filnavn : 'aspirin.hin')

Den model af aspirin, som programmets modelbyggefacilitet har lavet, kan undersøges nærmere.

- **Klik** på *Select*-knappen og **markér** en binding ved at klikke på den

Nederst på statuslinien aflæses bindingslængden i enheden Ångstrøm. Markeringen kan fjernes igen ved at højreklikke på bindingen. Bindingsvinkler bestemmes ved at markere to bindinger. Endelig kan der angives torsionsvinkler. En torsionsvinkel er en vinkel mellem to planer. Hvis man vælger at markere 3 bindinger, eksempelvis bindingerne i benzenringen mellem C1-C2, C2-C3 og C3-C4, er den torsionelle vinkel lig med vinklen mellem bindingen C1-C2 og C3-C4, hvis man betragter molekylet langs C2-C3 bindingen. Denne vinkel bør være 0 grader, idet benzenringen er plan, hvilket kan ses, når molekylmodellen roteres på skærmen.

Som nævnt kan man fjerne en markering ved at højreklikke på den. Man kan fjerne alle markeringer på én gang ved at højreklikke i det tomme område uden for modellen.

Man kan vælge forskellige visualiseringsmuligheder i *HyperChem*. Det sker på følgende måde:

- **Vælg Display | Rendering...**

Prøv de forskellige muligheder.

Man har nu en konformation af aspirin, som kan anvendes som udgangspunkt for en *beregning* af molekylets geometri. Med *HyperChem* er det muligt at foretage en sådan undersøgelse ved anvendelse af en række iterative programmer, som systematisk varierer på modellens struktur og herved søger efter den laveste energi. Under strukturoptimeringen varieres samtlige bindingsafstande og vinkler, indtil programmet finder bunden af "energibrønden" og herefter kan præsentere den optimerede geometri.

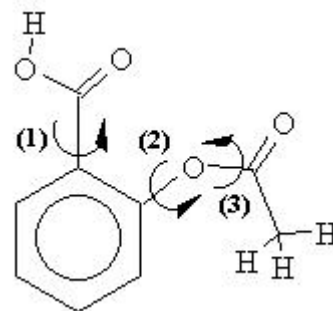
Det er værd at bemærke sig, at et sådant beregningsresultat bør følges op af en kritisk bedømmelse, idet der ikke nødvendigvis er opnået konvergens til det ønskede *globale* energiminimum. Såfremt udgangsgeometrien er meget forskellig fra den "bedste" geometri, er der mulighed for, at programmet har fundet et *lokalt* minimum, hvor beregnede værdier for bindingslængder og vinkler måske ligger langt fra de eksperimentelle resultater. Bemærk, at programmet ikke har mulighed for at angive, om det opnåede minimum er globalt. Der er heller ikke indbyggede mekanismer, som gør det muligt for programmet at finde løsningen uden for et eventuelt lokalt minimum. De nævnte problemer i forbindelse med fastlæggelse af molekylers struktur gælder ikke blot for *HyperChem*, men er generelt kendetegnende for programmer til teoretisk strukturbestemmelse.

Simpel systematisk undersøgelse af energivariationen

Til illustration af de oven for diskuteret forhold vedrørende minima kunne man undersøge energiforholdene af de mulige konformere på baggrund af systematisk tilrettelagte beregninger. Eksempelvis kunne molekylets energi beregnes ved drejning om hver binding i 10 graders intervaller fra 0-360 grader.

Det vil give 36 beregninger for hver binding. Med hensyn til aspirin må man som følge af symmetrierne forvente de mest markante variationer ved rotation om bindingerne (1), (2) og (3) på figur 36, hvilket svarer til $36^3 = 46656$ beregninger !

De 36 energier svarende til rotation om binding (2) kan nu beregnes og afbildes.

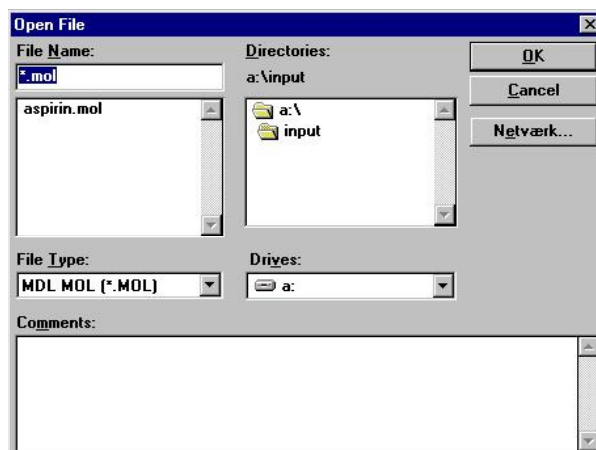


figur 36

- **Indlæs** den lagrede mol-fil fra disketten
- **Vælg File | Open...** og sæt filtypen til MDL MOL (*.MOL), se figur 37
- **Vælg** filnavnet 'aspirin.mol' og **klik** på OK

Som det vil fremgå af skærbilledet, er ringen ikke tegnet korrekt, idet den som tidligere nævnt er forsynet med tre dobbeltbindinger.

- **Klik** på knappen *Draw* og fjern herefter den ene bindingsstreg i hver dobbeltbinding ved at højreklikke med musen
- **Dobbeltklik** nu på den ene af de seks enkeltbindinger, hvorefter det ønskede aromatiske ringsystem fremkommer

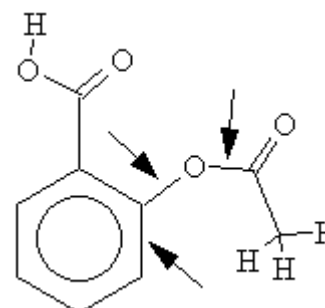


figur 37

Byg en model af molekylet med et molekylbyggesæt (benzenringen kan laves med tre dobbeltbindinger). Under beregningerne nedenfor indstilles molekylmodellen, således at den (med tilnærmelse) viser den struktur, som man aktuelt regner på.

De 36 beregninger kan foretages på følgende måde:

- **Vælg Setup | MM+**
- **Tryk Select** og **markér** de tre bindinger, som er angivet med pile på
- **Vælg Edit | Set Bond Torsion...** og indtast den ønskede torsionsvinkel (start med 0 grader)
- **Afmarkér** de tre valgte bindinger med højre musetast
- **Vælg Compute | Single Point**
- **Aflæs** og **nedskriv** den beregnede energi (svarende til den valgte torsionsvinkel)



figur 38

- *Gå til* punkt 2 (*Tryk Select*) og *gentag* proceduren med næste torsionsvinkel
- *Afbild* herefter de beregnede energier som funktion af torsionsvinklen og diskuter udseendet af den fremkomne graf. Lav molekylmodeller, som viser de rumlige strukturer, der hver især svarer til et energiminimum på grafen. Prøv at forklare, at strukturer med torsionsvinkler i området omkring 180 grader må være så ustabile.

Iterativ beregning af energien

Som det fremgår af ovenstående, vil det være utroligt tidskrævende at gennemføre en simpel systematisk undersøgelse, såfremt samtlige vinkler og bindingslængder medtages i variationen.

I en *iterativ* beregning udfører programmet på egen hånd samtlige variationer. Herved beregnes minimumsenergien og den tilhørende optimerede struktur.

Indlæs modelbyggerens resultat fra disketten (filnavn : 'aspirin.hin'). Optimeringen af geometrien kan foretages på følgende måde:

- **Vælg Setup | MM+**
- **Vælg Compute | Geometry Optimization...** Under "Termination condition" sættes gradienten til 0.01 kcal/(Å mol), hvorefter der trykkes på OK.

Følg med på skærmen, mens strukturen ændres. Når beregningen er færdig, vises "**Convergence YES**" på statuslinien nederst. Sammenlign den beregnede, optimerede version af aspirinmolekylet med de tidligere billeder, som blev hentet fra Internet.

Supplerende materiale om aspirin

Som nævnt kan man finde mange oplysninger om aspirin på Internet. En søgning på AltaVista på *aspirin* gav 63530 hits, så her er brug for en mere målrettet søgning. I stedet for at bruge en generel søgemaskine som AltaVista kan man som nævnt med fordel bruge *Chemfinder* (<http://chemfinder.camsoft.com>). Nedenfor gives eksempler på, hvad en surftur på nettet kan indbringe.

Aspirin har været "Molecule of the Month" på Bristol University. Siden giver produktionsmetoden m.m. (<http://www.bris.ac.uk/Depts/Chemistry/MOTM/aspirin/aspirin.htm>).

På <http://www.asn-linz.ac.at/schule/chemie/aspro.htm> findes en øvelsesvejledning på engelsk til laboratoriefremstilling af aspirin ud fra salicylsyre og eddikesyreanhydrid. Samme sted findes en oversigtsartikel på tysk "100 Jahre Acetylsalicylsäure".

<http://www.wonderdrug.com> ligner en reklameside for firmaet Bayer. Her kan man finde oplysninger om forskellige aspirin-præparater. På <http://www.fda.gov/opacom/catalog/aspirin.html> kan man læse om virkningen af aspirin i en artikel skrevet af FDA (Food and Drug Administration, USA). Et højere fagligt niveau nås på

<http://cti.itc.virginia.edu/~cmg/Demo/pdb/cycos/cycos.html>. Det er et eksempel på en interaktiv *Chime*-tutorial, hvor man kan aktivere forskellige trykknapper undervejs.

På http://chrom.tutms.tut.ac.jp/JINNO/DRUGDATA/07acetylsalicylic_acid.html kan man finde UV-spektrum og pK_a . Og sådan kan man fortsætte næsten i det uendelige.

Eksamen

Anvendelse af IKT i den daglige undervisning må efterhånden forventes at sætte sig spor i spørgsmålene til mundtlig eksamen. Når aspirin-emnet opgives til eksamen, kan man stille spørgsmål, hvor eksaminanden får mulighed for at inddrage IKT-delen, fx:

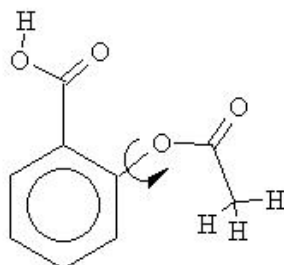
Aspirin – struktur og fremstilling

Præsenter strukturformlen for aspirin og redegør for molekylets rumlige opbygning. Herunder kan du inddrage resultaterne fra øvelsen med *HyperChem*. Desuden omtales syntesen af aspirin, og du kan forklare, hvordan man kan kontrollere produktets renhed. Hvorfor er det vigtigt, at produktet er meget rent?

Bilag

Beregnet energi for aspirin ved drejning af torsionsvinkel fra 0-360 grader

(se afsnittet Simpel systematisk undersøgelse af energivariationen)



<i>Torsionsvinkel</i> grader	<i>Energi</i>	<i>Torsionsvinkel</i> grader	<i>Energi</i>
0	39,71	190	412,49
10	39,81	200	196,64
20	34,59	210	85,55
30	32,02	220	48,08
40	30,70	230	36,14
50	30,31	240	32,36
60	30,40	250	31,27
70	30,66	260	31,03
80	30,93	270	30,99
90	31,13	280	30,89
100	31,52	290	30,70
110	32,66	300	30,51
120	36,60	310	30,54
130	50,08	320	31,15
140	95,55	330	32,82
150	230,89	340	35,68
160	453,96	350	38,69
170	690,09	360	39,71
180	649,38		

Syrebasetitrering - simulation og datafangst

Helge Blom Andersen

Idé

I det følgende beskrives et forløb, der omhandler titrerkurver i syrebasekemi. Forløbet har tre faser.

- Et teoretisk forarbejde
- Datafangst
- Simulering af titrerkurven

Som basis for arbejdet anvendes programmet pH. Programmet kan tegne titrerkurver for syrer, baser og blandinger af polyprote syrer, og det kan vise omslagsområder for indikatorer. Programmet indeholder desuden et opgavemodul, hvor elevernes færdigheder i analyse af titrerkurver testes.

Det teoretiske forarbejde

Programmet anvendes til forarbejdet på følgende måde:

- **Vælg Vindue | Nyt.** Herved åbnes en boks (se figur 39) hvor du kan vælge titrand: Syre, blanding af syrer eller base. Eller du kan vælge at få opgaver i analyse af titrerkurver
- **Vælg** titrering af syre

pH - programmet kan tegne titrerkurver for mono-, di- og triprote syrer. Hvis syren er monoprot (fx HCl(aq)) angives kun den første pK_s -værdi. De to øvrige pK_s -værdier sættes af programmet til 20, hvilket betyder, at syren i praksis er monoprot. Hvis du ønsker at simulere titrerkurver for di- eller triprote syrer, skal du selv indsætte de rigtige værdier for pK_2 og pK_3 .



figur 39

- **Udfyld** boksen (se figur 40) med pK_s/pK_b og koncentrationer for Syren og Basen
- **Tryk** . Herved fremkommer en teoretisk titrerkurve. Overflødige titrerkurver fjernes ved tryk på 
- **Skift** mellem en lille (20 mL) og en stor burette (40 mL) ved tryk på 
- **Tryk**  for at vise en eller flere indikatorers omslagsintervaller
- **Se** også **menuen Hjælp** - her kan du søge hjælp om vigtige begreber vedrørende titrerkurver

Syren	
pK_{s1}	0,00
pK_{s2}	20,00
pK_{s3}	20,00
Totalkoncentration (M)	0,10000
Rumfang (mL)	10,00

Basen	
pK_b	0,00
Totalkoncentration (M)	0,10000

figur 40

Opgaver vedrørende monoprote syrer

1. Find pK_s for NaOH(aq) i Databog fysik kemi.
2. I pH-programmet skal du i samme grafserie tegne titrerkurver for 10 mL 0,10 M monoprot syre titreret med 0,10 M NaOH. Start med $pK_{sl} = 0$ og derefter andre kurver med $pK_{sl} = 1, 2, 3, \dots, 10$. Lad billedet blive stående på skærmen og løs nedenstående opgaver skriftligt. Husk at begrunde alle svar!
 - a. Hvor på en titrerkurve kan du aflæse ækvivalenspunktet?
 - b. Hvor på en titrerkurve for en svag syre kan du aflæse pK_s -værdien?
 - c. Angiv den øvre grænse for pK_s for en syre, der kan titreres med 0,10 M NaOH.
3. Brug pH-programmet til at indtegne omslagsintervaller for indikatorerne: methylorange, methylrødt, bromthymolblåt, phenolphthalein. Hvilke indikatorer finder du egnede ved titrering en syre med en pK_s , som har en pK_s -værdier der er mindre end 1? Samme spørgsmål til syrer med pK_s -værdierne 5 og 7.
4. Tag en papirudskrift af det skærbillede, du har nu.
 - a. Giv en beskrivelse af forskelle og ligheder mellem titrerkurven for den stærke syre og titrerkurver for de svage syrer.
 - b. Prøv at give en forklaring på titrerkurvens forløb: Hvorfor ændres pH-værdien lidt i nogle områder, og hvorfor ændres den meget i andre. (Hjælp: Du kan starte med at undersøge $[H_3O^+]$, $[OH^-]$, $[HA]$ og $[A^-]$ og deres relative ændringer som følge af basetilsætning.)
 - c. Betragt titrerkurverne for hhv. en stærk og en svag syre. Redegør for pufferegenskaber i relation til opløsningernes sammensætning i karakteristiske områder af titrerkurverne.
5. I en ny grafserie skal du ved hjælp af pH-programmet tegne titrerkurver for 10 mL HCl(aq) titreret med NaOH. Start med $c(HCl) = 1,0$ M og lav en titrerkurve med $c(NaOH) = 1$ M. Lav derefter andre kurver hvor titrator og titrand har samme koncentration. Brug koncentrationerne 10^{-1} M, 10^{-2} M, $\dots, 10^{-6}$ M. Indtegn i samme graf en titrerkurve for en syre med $pK_s = 5,5$, $c(\text{syre}) = 0,1$ M og $c(NaOH) = 0,1$ M.
 - a. Hvad er forskellen på titrerkurven for en stærk syre med en lille koncentration som er titreret med en stærk base med samme koncentration, og for en svag syre med en forholdsvis stor koncentration ($c = 0,1$ M), der titreres med en stærk base med samme koncentration?
 - b. Karakteriser pufferegenskaberne i de to typer opløsninger.

Opgaver vedrørende polyprote syrer

6. Find pK_s -værdierne for oxalsyre og phosphorsyre i Databog fysik kemi
7. På hver sin graf skal du ved hjælp af programmet tegne titrerkurver for 5 mL 0,10 M af hver af de nævnte syrer titreret med 0,100 M NaOH.
8. Lad programmet indtegne nogle indikatorer med omslagsintervaller, der passer til de enkelte ækvivalenspunkter.
9. Tag en printerudskrift af begge titrerkurver. De skal bruge i det efterfølgende laboratoriearbejde.

10. Undersøg ved brug af programmet, hvad der er den mindste differens mellem pK_{s1} og pK_{s2} for en divalent syre, hvis den skal kunne titreres potentiometrisk som divalent syre med tydelige ækvivalenspunkter. (Sæt $pK_{s1} = 1$ i denne undersøgelse).
11. Forklar forløbet af titrerkurven for phosphorsyre, idet du opskriver reaktionsskemaer for kurvens forskellige afsnit. Hvorfor kan phosphorsyre ikke titreres som en trivalent syre?

Sammenfatning

Giv en sammenhængende beskrivelse af den viden, du har tilegnet dig om syrer, indikatorvalg, titrerkurver og pufferegenskaber. Besvarelsen bør indledningsvis forklare, hvad en titrerkurve er, og herefter give en sammenkædning af spørgsmålene 2, 3, 4, 5, 10 og 11 med tilhørende svar således, at besvarelsen kommer til at fremtræde som en sammenhængende helhed.

Ekstra træningsopgaver

Når du er færdig med ovenstående opgaver, kan du træne dine færdigheder i analyse af titrerkurver på pH-programmets opgavemodul. Her genererer programmet tilfældige titrerkurver, og du skal ved analyse af titrerkurven beregne titrandens koncentration og angive protolyttens styrke.

Efterbehandling af forarbejdet

Inden den tilegnede viden skal afprøves i praksis er det vigtigt, at resultaterne af forarbejdet bliver diskuteret på klassen. Herefter sammenskriver eleverne deres besvarelser til et sammenhængende resumé, der kan tjene som en opgaveaflevering.

Tidsforbruget til forarbejdet i skoletiden fordeler sig med ca. 2 lektioner til arbejdet ved computerne og 2 lektioner til plenumgennemgangen.

Datafangst

Laboratoriearbejdet i forbindelse med titrerkurver kan udføres som en manuel titrering, eller det kan udføres ved elektronisk dataopsamling.

Det beskrevne forløb omhandler fremstilling af en titrerkurve for titrering af Coca Cola med Adact som interface mellem pH-meter/autoburette og computer. Softwaren, der styrer Adactmodul, er programmet Ada-kemi.

Dette eksperiment er et godt eksempel på anvendelse af computer i et eksperimentelt fag, idet der både er tale om en egentlig dataopsamling gennem computerens registrering af pH og en styring af eksperimentet ved, at computeren gennem Adactmodul styrer autotitratorens tilsætning af titrator til titranden. Herved adskiller dette eksperiment sig fra hovedparten af datafangstek eksperimenter i kemi, idet der i disse som regel kun sker en registrering af en kemisk størrelse som funktion af tiden.

Undersøgelse af Coca Cola

Forsøgets formål

At foretage en kvalitativ og kvantitativ undersøgelse af indholdet af syre i Coca Cola (Det skal være en Cola, der ikke er sukkerfri).

Forsøgets udførelse

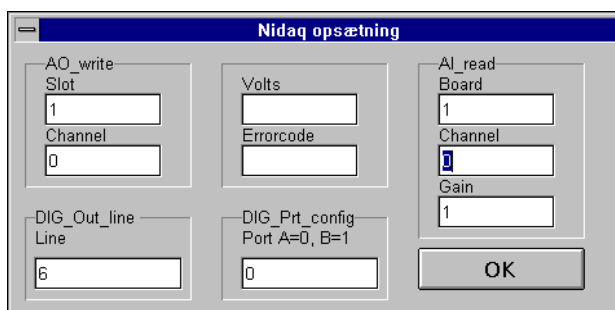
- **Kalibrer** pH-metret – gerne på to puffere – for eksempel pH = 4 og pH = 10
- **Start** programmet **Adakemi** | **Vælg Titrering** | **Vælg menuen Opsætning** | **Nidaq**

Herved fremkommer boksen Nidaq opsætning (se figur 41). I den her definerede opsætning ses, at det analoge signal (fra pH-metret) skal læses på Channel 0.

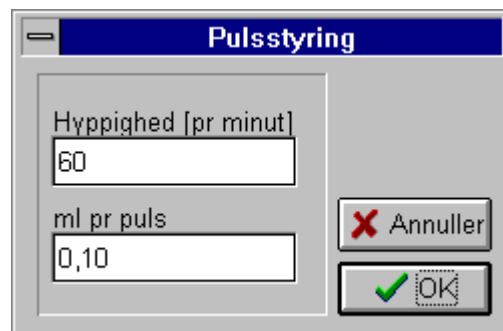
- **Tilslut** pH-metrets skriverudgang til Adactsystemets Analoge Input modul **ACH0** (Analog Channel 0)
- **Tjek** at **Thermocouple input** er slået fra (kontakten er til venstre)

I figur 41 ses, at det digitale outputsignal (til autoburetten) skal tages fra Line 6.

- **Tilslut** autoburetten til Adactsystemets relæboks PA6 (rød og blå bøsning)
- **Vælg** menuen **Opsætning** | **Pulsstyring**
- **Kontrollér** at doseringen fra autoburetten er 0,10 mL pr. puls, og hyppigheden er 60 pr. minut



figur 41



figur 42

Under datafangsten kortslutter computeren kortvarigt de to poler i relæboksen, hvorved titratoren afgiver en dosis.

- **Vælg** menuen **Opsætning | Akser**
- **Kontrollér** at mV min og mV max i figur 43 er i overensstemmelse med antal mV pr. pH-enhed for pH-metret (kan som regel aflæses bag på pH-metret. I dette tilfælde giver pH-metret 100 mV pr. pH-enhed)
- **Ret** evt. endepunktet for titreringen (mL slut)
- **Tryk OK**

Nu er opstillingen klar til brug.

figur 43

- **Afmål** godt 100 mL Cola i en 250 mL konisk kolbe - skvulp den (uden prop), indtil væsken er skumfri. Afmål ved hjælp af målekolbe 100,0 mL "skumfri" Cola. Denne hældes i en porcelænskål og koges i ca. 10 minutter
- **Overfør** den kogte Cola kvantitativt til målekolben. Skyl porcelænskålen med en smule demineraliseret vand og overfør dette til kolben. Afkøl kolben og efterfyld til strengen
- **Afpipettér** 20,00 mL af den udkogte Cola til et 100 mL bægerglas, som er anbragt på en magnetomrører.
- **Opspænd** pH-elektroden i et stativ og anbring den i opløsningen
- **Fyld** autoburetten med 0,010 M NaOH og anbring afløbsrøret i titranden
- **Start** omrører og tryk Start i Adakemi-vinduet på computeren

Når titreringen er afsluttet:

- **Vælg** menuen **Fil | Eksportér ascii | med komma** (hvis Windows på computeren er sat op til at bruge decimalkomma - se figur 44)
- **Angiv** et filnavn og giv filen ekstension **txt** (for eksempel cola.txt)
- **Vælg** menuen **Fil | Gem** (for en sikkerheds skyld)

Hermed er det eksperimentelle afsluttet.

figur 44

Simulering af pH-titreringskurve fra datafangst

- *Anbring* disketten med datafilen fra datafangsten i diskettedrevet
- *Åbn* programmet pH
- *Vælg* Vindue
- *Vælg* Nyt
- *Vælg* Titring af blanding af syre (se figur 45)
- Tryk  
- *Vælg* dataform for Syre2: Stofmængde
- Tryk  (40 mL burette)
- *Vælg* Målepunkter (se figur 46)
- *Vælg* Læs fra fil

Nu fremkommer boksen Åbn (se figur 47)

- *Dobbelklik* på filen fra datafangsten. Nu plottes målepunkterne fra datafangsten
- *Studér* titrerkurven. Er syren mono-, di- eller triprot?
- *Før* markøren til titrerkurvens første ækvivalenspunkt og aflæs det tilhørende volumen i boksen under titrerkurven – se figur 48
- *Beregn* syrens totalkoncentration ud fra første ækvivalenspunkt
- *Udfør* en omhyggelig analyse af titrerkurven med hensyn til ækvivalenspunkternes placering. Kunne der evt. være en anden syre til stede?

Hvis analysen viser, at der er en ekstra syre til stede, skal du gå frem på følgende måde:

- *Multipliser* første ækvivalensvolumen med 2. *Beregn* forskellen mellem dette rumfang og andet ækvivalenspunkt. *Anvend* denne forskel til at beregne koncentrationen af den anden syre

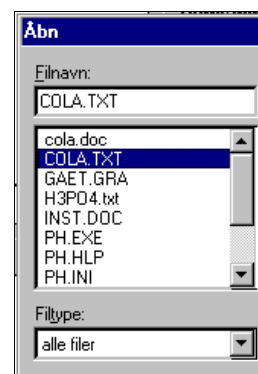
Nu kan simuleringen af titrerkurven starte. Først gennemføres simuleringen, som om titranden kun indeholder Syre1.



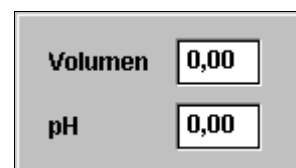
figur 45



figur 46



figur 47



figur 48

- *Udfyld* boksen (se figur 49) med alle koncentrationer for Syre1 og Basen. Gæt på pK_s -værdi(er) for syren.
- *Tryk* . Herved fremkommer en teoretisk titrerkurve
- *Simulér* flere titrerkurver med forskellige værdier af pK_s , indtil bedst mulig overensstemmelse opnås, hvad angår den første del af titrerkurven

Hvis du har formodning om, at titranden indholder en blanding af syrer, kan du arbejde videre.

- *Ret* pK_s og Rumfang for Syre2
- *Forsæt med at justere* data indtil bedst mulig overensstemmelse opnås

Syre1	
pK_{s1}	0,00
pK_{s2}	20,00
pK_{s3}	20,00
Totalkoncentration (M)	0,10000
Rumfang (mL)	10,00

Basen	
pK_b	0,00
Totalkoncentration (M)	0,10000

Syre2	
pK_{s1}	20,00
pK_{s2}	20,00
Totalkoncentration (M)	
Rumfang (mL)	
Stofmængde (mmol)	0,00000

figur 49

Det videre arbejde og informationssøgning på Internettet

- Aflæs varedeklarationens E-numre på flasken
- Søg på E-numre på Internettet for eksempel på adressen: <http://wbtd15.biozentrum.uni-wuerzburg.de/projekte/biotech/food/lz/lz7/lz7a.htm>
- Hvilke stoffer findes der i Cola'en? Find ADI-værdi for de deklarerede stoffer
- Beregn massen af de enkelte syrer i en flaske Cola ved brug af resultaterne fra titreringen
- Beregn, hvor mange Cola'er du kan tåle at drikke pr. dag uden at overskride ADI-værdien
- Undersøg i E-nummerlisten hvilke andre anvendelser der er for de fundne stoffer
- Søg yderligere oplysninger om stofferne på <http://www.chemfinder.camsoft.com>. Studér strukturformlerne
- Opskriv reaktionsskemaer for titratorens reaktioner med hver af syrerne i titranden
- Sammenlign titrerkurven med simuleringen. Overvej mulige årsager til, at overensstemmelsen måske ikke helt er, som du kunne ønske dig
- Fremstil en kunstig Cola, der indeholder syrerne i de koncentrationer, som du har analyseret dig frem til. Titrér den og simulér titrerkurven som beskrevet ovenfor.

Eksamen

Følgende forslag til et eksamensspørgsmål på mellem- eller højt niveau inden for emnet syrebasetitrering forudsætter, at der er givet tilladelse til anvendelse af computer til mundtlig eksamen i kemi.

Eleven skal have adgang til en pc i forberedelseslokalet, hvorpå pH-programmet er installeret og denne pc eller en tilsvarende skal være tilgængelig under eksaminationen.

Herunder er der givet to eksempler på eksamensspørgsmål i kemi, hvor følgende kriterier er anvendt:

Eksamensspørgsmålet indeholder en klar overskrift, som er en afgrænsning af området.

Eksamensspørgsmålet er så skarpt tilskåret og så enkelt formuleret, at eksaminanden ikke tvinges til at bruge ekstra tid på fortolkningen af det.

Eksamensspørgsmålet er formuleret bredt.

Eksamensspørgsmålet tager udgangspunkt i et konkret emne, hvori eksaminanden skal kunne trække hovedlinier på passende kort form. Under denne fremlæggelse er eksaminanden bundet af spørgsmålets formulering og indhold.

Eksamensspørgsmålet indeholder en valgfri afdeling, hvor eksaminanden selv kan vælge blandt nogle foreslåede underemner, eller selv finde passende eksempler/emner, der holder sig inden for overskriftens rammer.

Titrekurver

Benyt pH-programmet til at tegne teoretiske titrekurver for monoprote syrer med forskellig styrke titreret med 0,1 M NaOH.

Følgende to punkter skal herefter behandles kortfattet og i hovedtræk

Definition af begrebet ækvivalenspunkt og hvorledes dette kan benyttes til at bestemme koncentrationen af titranden.

Titrekurvernes forløb som følge af titrandens sammensætning under titreringen

I forlængelse heraf skal du redegøre for nogle af følgende emner:

Valg af indikatorer

Pufferegenskaber belyst ud fra titrandens sammensætning

Hvorledes en titrering udføres i praksis

Titrekurver for baser titreret med stærk syre

Titrekurver for flerprote syrer

.....eller hvad du selv finder relevant for emnet.

Simulering af en eksperimentel titrerkurve

*På disketten ligger filen **cola.txt**. Hent denne fil ind i pH-programmet.*

Følgende to punkter skal herefter behandles kortfattet og i hovedtræk

En analyse af titrerkurven

En demonstration af hvorledes titrerkurven kan simuleres ved brug af pH-programmet

I forlængelse heraf kan du redegøre for nogle af følgende emner:

Hvorledes datafangsten udføres i praksis

ADI-værdi

Hvorledes massen af syrerne i colaen bestemmes

Carbonsyre

Pufferegenskaber

Titrandens sammensætning under titreringen

..... eller hvad du selv finder relevant for emnet.

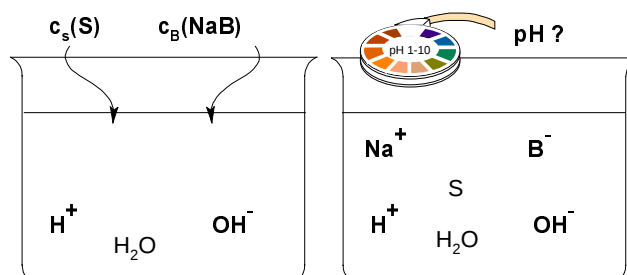
Beregning af pH ved hjælp af TI-83

Hans Christian Jensen

Formelsamling KEMI indeholder 7 formler til beregning af pH eller pOH. Formlerne er approksimationsformler med hver deres anvendelsesområde. Det var en fornuftig situation dengang, de regnetekniske hjælpemidler var begrænsede. Det er ikke tilfældet i dag, hvor enhver elev på matematisk linie skal anskaffe en programmerbar lommeregner med grafisk panel. Så måske er tiden inde til at overveje, om der er andre veje i behandlingen af syrebaselige vægte. Et beskedent program til TI-83 kan beregne pH i de fleste tilfælde, uden at brugeren skal igennem en udvælgelsesprocedure for at vælge den rigtige approksimationsformel. Man kan indvende, at netop denne udvælgelse forudsætter en kemisk viden og forståelse, som vil gå tabt ved brug af lommeregnerprogram. Men det er ingeniørligt sikkert, at eleven tænker de tanker, vi ønsker, når den rigtige approksimationsformel skal vælges. Brugen af lommeregnerprogram har sin styrke i, at eleven ser forskellige problemstillinger (forskellig syrestyrke, syre, base, blanding af syre og base, meget stor fortynding) blive løst med den samme løsningsmodel af lommeregneren. Hvis eleven er aktivt med i opstillingen af løsningsmodellen og selv taster programmet ind, kommer de fundamentale kemiske love forhåbentligt mere i fokus.

Model for protolyselige vægt

En syre S og dens korresponderende base B⁻ opløses i vand. Basen B⁻ er tilsat som natriumsaltet NaB. Når ligevægt har indstillet sig, er der to positivt ladede ioner og to negativt ladede ioner i opløsningen samt syren S.



Det kemiske system er beskrevet ved fem ligninger:

Elektrisk neutral opløsning: (1) $[Na^+] + [H^+] - [B^-] - [OH^-] = 0$

Vands autoprotolyse: (2) $K_v = [H^+] \cdot [OH^-]$

Syrens protolyselige vægt: $S + H_2O \rightleftharpoons B^- + H_3O^+$

(3) $K_s = ([H^+] \cdot [B^-]) / [S] \Rightarrow [S] = [B^-] \cdot [H^+] / K_s$

Stofbevarelse: (4) $c_s + c_b = [S] + [B^-]$

(5) $[Na^+] = c_b(NaB) = c_B$
idet B⁻ er tilsat som natriumsaltet NaB

Aktuelle koncentrationer udtrykkes ved $[H^+]$ og protolysekonstanter:

$$(6) \quad K_v = [H^+] \cdot [OH^-] \Rightarrow [OH^-] = \frac{K_v}{[H^+]}$$

$$(7) \quad K_s = \frac{[H^+][B^-]}{[S]} \Rightarrow [S] = \frac{[H^+][B^-]}{K_s}$$

$$(8) \quad c_s + c_b = [S] + [B^-] \Rightarrow c_s + c_b = \frac{[H^+][B^-]}{K_s} + [B^-] \Rightarrow [B^-] = \frac{c_s + c_b}{1 + \frac{[H^+]}{K_s}}$$

$$(9) \quad [Na^+] = c_b$$

Ved indsættelse i ligning (1), som udtrykker at opløsningen er elektrisk neutral, fås

$$(10) \quad f[H^+] = c_s + [H^+] - \frac{c_s + c_b}{1 + \frac{[H^+]}{K_s}} - \frac{K_v}{[H^+]} = 0$$

Den aktuelle koncentration af H^+ i opløsningen er løsning til denne ligning. Løsningen findes ved at gætte en pH-værdi og beregne $f([H^+])$. Hvis $f([H^+]) > 0$ var pH-gættet for lavt ($[H^+]$ for stor), næste pH-gæt skal være højere. Hvis $f([H^+]) < 0$ var pH-gættet for højt, næste gæt skal være lavere.

pH program til Ti-83 lommeregner

Programvariable

Kemisk størrelse	K_v	pK_s	K_s	pH-gæt	Øvre grænse for pH	Nedre grænse pH
Programvariabel	V	F	K	G	O	U
Kemisk størrelse	c_s	[S]	c_b	[B]	Basebrøk	
Programvariabel	S	AS	B	AB	A	

TI-83 programkode

Program:PH	:If C>0
:ClrHome	:Then
:10 [^] (-14)→V	:E/(S+B)→A
:-1→U	:Else
:15 →O	:0→A
:Input "PKS: ",F	:End
:10 [^] (-F)→K	:ClrHome
:Input "CS: ",S	:Output(1,1,"PKS:")
:Input "CB: ",B	:Output(1,6,F)
:Repeat O-U ≤ 0.005	:Output(2,1,"CS:")
:(O+U)/2→G	:Output(2,6,S)
:10 [^] (-G)→H	:Output(3,1,"CB:")
:If B+H-((S+B)/(1+H/K)+V/H)≤ 0	:Output(3,6,B)
:Then	:Output(4,1,"AS:")
:G→O	:Output(4,6,Round(X,8))
:Else	:Output(5,1,"AB:")
:G→U	:Output(5,6,Round(E,8))
:End	:Output(6,1,"PH:")
:End	:Output(6,6,Round(G,2))
:(S+B)/(H+K)→C	:Output(7,1,"ALFA:")
:C*K→E	:Output(7,6,Round(A,4))
:C*H→X	

Programafprøvning

Efter indtastning af programmet bør man teste, at det regner rigtigt. Tre første rækker er inddata til programmet. Sidste fire rækker er resultater.

Rent vand: pK_s -værdien er ligegyldig, men en værdi skal indtastes. Her indtastes $c_s = 0$ og $c_b = 0$;	Svag syre: Her indtastes syrens data (pK_s og c_s) og $c_b = 0$	Svag base: Korresponderende syres pK_s indtastes og syrens koncentration sættes lig nul.	Puffer
PKS: 14.00	PKS: 5.00	PKS: 5.00	PKS: 4.76
CS: 0	CS: .05	CS: 0	CS: .1
CB: 0	CB: 0	CB: .05	CB: .1
AS: 0	AS: .04929985	AS: 7.1E-6	AS: .09980212
AB: 0	AB: 7.0015E-4	AB: .0499929	AB: .10019788
PH: 7	PH: 3.15	PH: 8.85	PH: 4.76
ALFA: 0	ALFA: .014	ALFA: .9999	ALFA: .501

Løsningseksempel

Inddata er $c_s = 0,20$ M og $pK_s = 5$ samt $c_b = 0$ M. Programmet beregner pH-gæt = $(O+U)/2$. Der gættes 11 gange indtil $\Delta pH < 0,01$. Grænsen kan ændres i programkoden.

O	U	pH-gæt	Hvad skal det næste gæt være?
15	-1	7	$f([H^+]) < 0$, næste pH-gæt lavere
7	-1	3	$f([H^+]) < 0$, næste pH-gæt lavere
3	-1	1	$f([H^+]) > 0$, næste pH-gæt højere
3	1	2	$f([H^+]) > 0$, næste pH-gæt højere
3	2	2.5	$f([H^+]) > 0$, næste pH-gæt højere
3	2.5	2.75	$f([H^+]) > 0$, næste pH-gæt højere
3	2.75	2.875	$f([H^+]) < 0$, næste pH-gæt lavere
2.875	2.75	2.8125	$f([H^+]) > 0$, næste pH-gæt højere
2.875	2.8125	2.8438	$f([H^+]) > 0$, næste pH-gæt højere
2.875	2.8438	2.8594	$f([H^+]) < 0$, næste pH-gæt lavere
2.8594	2.8438	2.8516	Stop fordi $\Delta pH < 0,01$: pH = 2,85

Arbejdsopgaver med besvarelse

En svag syre ($pK_s = 4,76$) opløses i vand. Udfyld tabellen og kommenter resultaterne.

cs / M	pH	Basebrøk	Formel S-15 i formelsamling
0.1	2.89	.0132	
0.001	3.91	.1238	
0.00001	5.15	.7116	
0.0000001	6.79	.9908	
0.00000000001	7	.9942	

Syrestyrke og pH

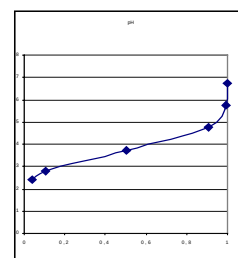
Beregn pH i syreopløsningerne. Alle syrer formelle koncentration er 0,05 M

pK_s	"syrens styrke"	pH	basebrøk
-3	Stærk	1.3	.9999
0	middelstærk	1.32	.9547
2	middelstærk	1.75	.3579
5	svag	3.15	.014
8	svag	4.65	4E-4
12	meget svag	6.61	0

Puffersystem

Beregn pH i blanding af methansyre ($pK_s = 3,75$) og natriummethanoat. Udfyld tabellen. Sammenlign formel koncentration og aktuel koncentration. Afbild pH som funktion af basebrøk.

c_s / M	c_b / M	[S] / M	[B] / M	Basebrøk	pH
0.1	0.0001	.095943	.004157	.0415	2.39
0.1	0.01	.09852	.01148	.1044	2.82
0.1	0.1	.09955	.10045	.5022	3.75
0.01	0.1	.009919	.100081	.9098	4.75
0.001	0.1	9.91E-4	.100009	.9902	5.75
0.0001	0.1	.1	9.9E-5	.999	6.75



Protolysegrad

Hvilken syre har den største protolysegrad: Dichlorethansyre i 0,01 M opløsning eller ethansyre i 0,00001 M opløsning?

Syres formelle koncentration

Salpetersyring ($pK_s = 3,35$) opløses i vand. Hvad er syrens formelle koncentration hvis syren er 15 % protolyseret?

Gæt nr	1	2	3	4	5
c_s / M	0.1	0.01	0.015	.016	.017
Basebrøk	.0649	.1908	.1392	.1526	.1503

Eksamen

Det faglige indhold i den beskrevne model falder inden for pensum på mellem- og højniveau i kemi. Man kan vælge, at bruge model og program som supplement til den traditionelle undervisning i syrebase-ligevægte. Fremstillingen kan uden videre indgå som et projekt i pensum til mundtlig eksamen. Men det kan betyde, at syrebase-ligevægte og hvad dermed er forbundet, optager for stor en del af undervisningstiden på bekostning af andre emner. Det taler for at nedtone den traditionelle behandling af stoffet til fordel for den beskrevne metode. Dette valg føres lettest ud i livet på mellemniveau, hvor eksamen er mundtlig. På højniveau kunne man nemt komme i konflikt med skriftlig eksamen. Det vil kræve en mere vidtgående inddragelse af grafisk lommeregner i det daglige skriftlige arbejde end her antydnet, før der til skriftlig eksamen kan stilles rimeligt brede opgaver. Det vil i øvrigt nok i længden være regnearket, som der her skal satses på.

Eksempel på spørgsmål til mundtlig eksamen

Syrebase ligevægte

Forklar hvorledes man definerer en syres styrke.

Gør rede for de kemiske love, som ligger til grund for at opstille en matematisk model til beregning af pH i en opløsning af syre eventuelt blandet med korresponderende base.

Du kan derefter vælge at anvende lommeregnermodellen på nogle af følgende problemstillinger:

Hvorledes har fortynding af ethansyreopløsning indflydelse på opløsningens pH og på ethansyres protolysegrad?

Beregning af pH i et puffersystem. Fortynding af et puffersystem.

Beregning af pH i blanding af 0,05 M oxalsyre og 0,05 M natriumoxalat.

Beregning af pH i 0,02 M NH_3

Eller hvad der ellers er relevant for emnet

NMR- og IR-spektroskopi som valgfrit emne

Preben Albertsen, Per Bøgeholdt, Tove Eriksen og Annette Nyvad

Introduktion

I dette afsnit beskrives anvendelsen af forskellige edb-programmer i forbindelse med et valgfrit forløb på højniveau (evt. mellemniveau) om spektroskopi. Hovedvægten er lagt på NMR-spektroskopi, men IR-spektroskopi indgår også i mindre omfang i forløbet. Specielt i forbindelse med identifikation af ukendte forbindelser er det en stor fordel, at man anvender begge typer spektre i processen.

Det forudsættes, at eleverne i starten af dette undervisningsforløb lærer grundlæggende teori om NMR- og IR-spektroskopi. Her kan man benytte forskelligt materiale fx:

- Erik Strandgaard Andersen: *Spektroskopiske metoder - en elementær indføring*, Gyldendal.
- Materialet, som Syddansk Universitet Odense bruger til deres Efterårslaboratorium, er til fri afbenyttelse. Materialet kan hentes fra kemis hjemmeside på følgende adresse: www.ke.gymfag.dk

Introduktionen kan med fordel kombineres med eller erstatte arbejde med nogle af de neden for nævnte programmer.

På baggrund af denne elementære indføring i spektroskopiske metoder forventes eleverne nu at være i stand til at tolke simple spektre. I det følgende beskrives anvendelsen af forskellige programmer, der med fordel kan inddrages i forbindelse med tolkning af spektre og identifikation af ukendte stoffer. Sidst i kapitlet findes en række opgaver i tolkning af NMR- og IR-spektre. Det drejer sig om følgende tre kategorier af opgaver:

- Web-baserede opgaver, hvor der ydes interaktiv hjælp til tolkningen. Opgavernes webadresse er angivet i teksten.
- Opgaver, der lægger op til brug af et eller flere af de programmer, der introduceres i dette kapitel.
- Opgaver, der kan løses udelukkende ved brug af *Databog fysik kemi*.

Hvor hentes NMR-, IR- og MS- spektre?

IR og MS spektre kan hentes direkte fra:

<http://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser.htm>

HNMR- og CNMR-spektre kan mod betaling beregnes i ACD's Interactive lab:

<http://www.acdlabs.com>

På kemis hjemmeside www.ke.gymfag.dk kan man endvidere gratis hente beregnede H NMR- og C NMR-spektre fra ACD, for et udvalg af de organiske forbindelser som findes i Databog fysik kemi. NMR-spektrene er pakkede i filen *work2.zip* (1,5Mb). Når filen er hentet, skal den udpakkes ved hjælp af fx *WinZip*, som er sharewareprogram. I det følgende antages, at udpakningen sker til et katalog med navnet *Work2*. WinZip-programmet kan hentes mange steder. Se fx henvisninger på sektornettet, adresse: <http://www.snet.uvm.dk/gym/teknik.htm>

Filerne er navngivet efter sidetal og nummer i Databog fysik kemi (7. udgave). Filen 104_08.hsp er således H NMR-spektret af benzen. Filen 104_08.csp er C NMR-spektret af benzen. Spektrene kan ses med programmerne *HNMR-viewer* eller *CNMR-viewer*, som omtales i næste afsnit.

HNMR-viewer og CNMR-viewer

Disse programmer kan vise henholdsvis H NMR- og C NMR-spektre, som er beregnet hos ACD. De beregnede spektre kan sammenlignes med eksperimentelle spektre og således fx være med til at af- eller bekræfte, om man har fremstillet det forventede stof. Eventuelle urenheder i det fremstillede stof vil ligeledes kunne påvises i spektret.

Anvendelse af programmerne giver en god øvelse i fortolkning af NMR spektre.

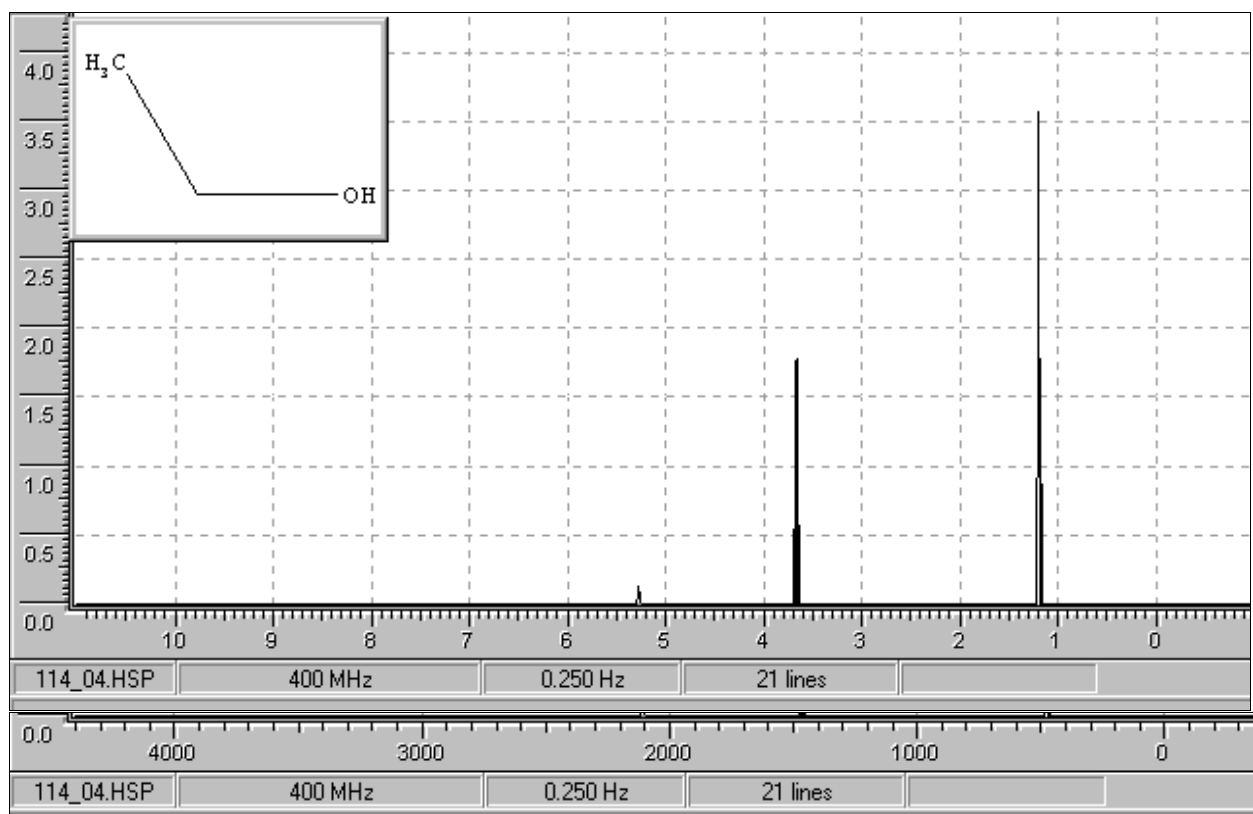
NMR-viewerne (især CNMR-vieweren) giver brugeren mulighed for at ændre på forskellige parametre, således at programmerne giver en god simulering af interaktiv spektrometerkørsel.

Installation af programmerne

Filerne **H-NMRv30.exe** og **C-NMR26.exe** fra ACD kan hentes fra kemis hjemmeside. Programmerne er til Win95 eller NT. De hentede filer er installationsprogrammer. De skal kun udføres én gang. Derefter er de egentlige programmer installeret, og der er lavet genveje, som kan bruges til at starte programmerne.

HNMRviewer. Fremvisning af beregnede spektre

- **Vælg Spectrum | Open...** . I dialogboksen *Load spectrum* åbnes hsp-undermappen i mappen work2. Man kan nu vælge det stof fra databogen, som man ønsker at se H NMR-spektret af, fx ethanol, der er stof nr. 4 på side 114 i databogen, dvs. har filnavnet: 114_04.hsp. Programmet viser nu det beregnede H NMR-spektrum ved en spektrometerfrekvens på 400MHz.

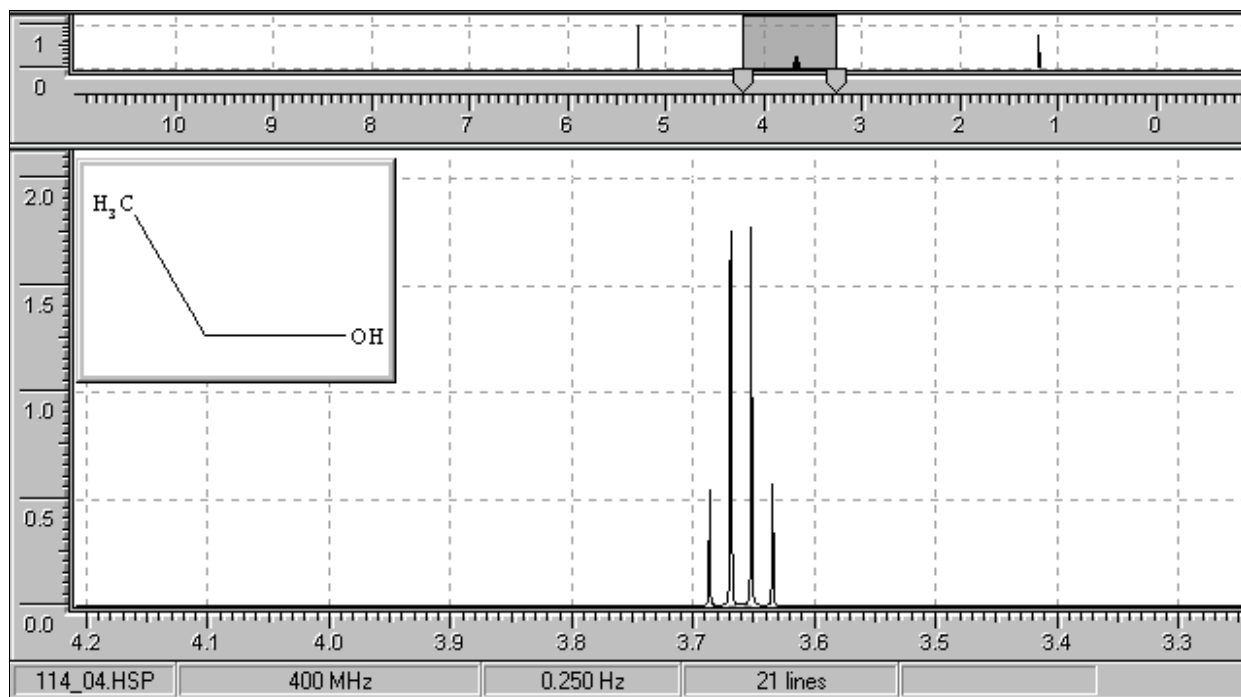


figur 50

Spektret vises i fuld skala med kemiske skift fra -1 til 11 ppm. Ved en spektrometerfrekvens på 400 MHz svarer det til en frekvensskala for kemiske skift fra -400 til 4400 Hz .

Koblingsmønsteret

Som det fremgår af spektret, er det vanskeligt at se koblingsmønsteret. Programmet giver mulighed for at zoome ind på udvalgte områder i spektret ved at trykke på højre musetast og, med venstre musetast holdt nede, trække hen over det valgte område (alternativt anvende værktøjsknappen eller **Tools | Zoom In**).

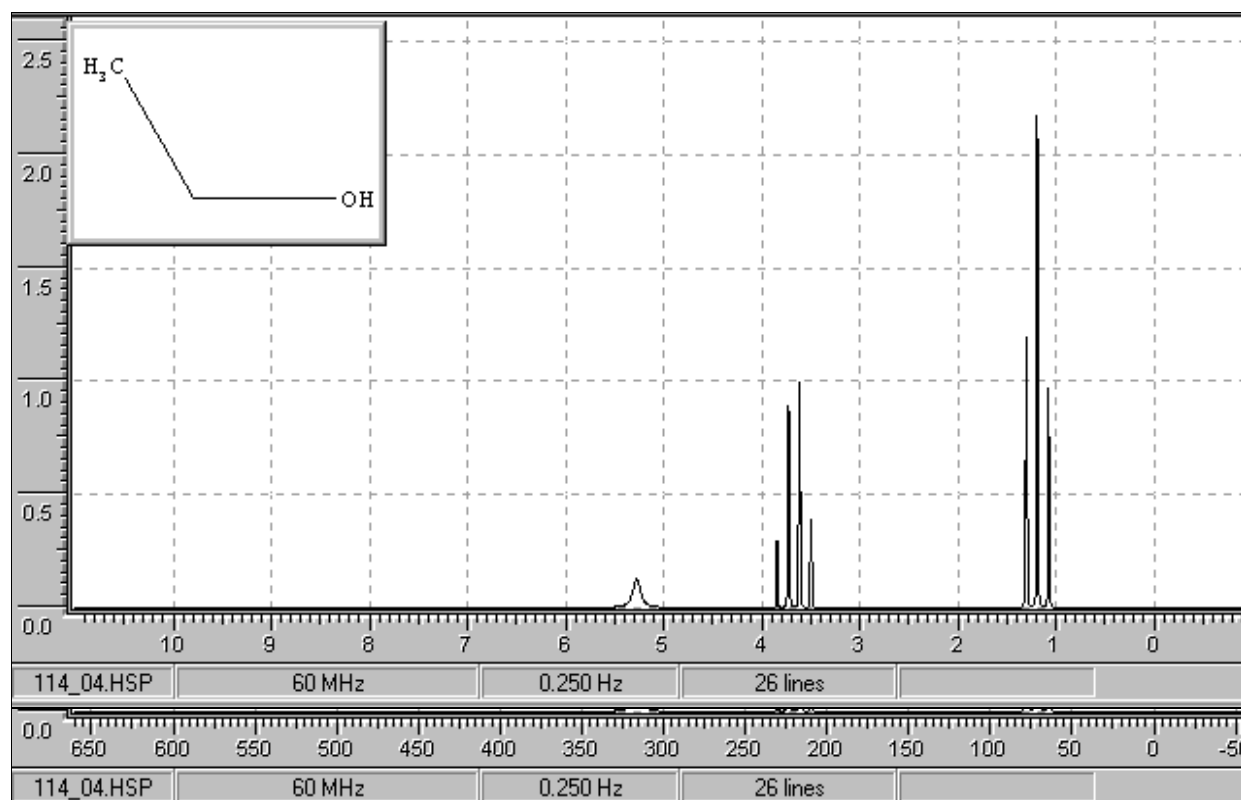


figur 51

Øverst ses spektret i fuld ppm skala med en markering af det valgte område. Nedenunder ses det "ind-zoomede" spektrum for det udvalgte område. Koblingsmønsteret i den valgte top ses nu tydeligt.

Kemiske skift i ppm er naturligvis uafhængige af den valgte spektrometerfrekvens.

I modsætning hertil er kemiske skift i MHz ligefrem proportionale med spektrometerfrekvensen. En almindelig anvendt spektrometerfrekvens er 60 MHz. Man kan vælge denne spektrometerfrekvens ved at trykke på **400 MHz** på statuslinien, indtaste 60 MHz, og trykke på **Recalc**.

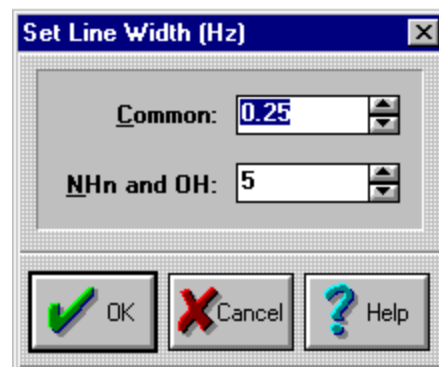


figur 52

Koblingskonstanter er uafhængige af den anvendte spektrometerfrekvens. Derfor ser man en tydeligere opsplitning af toppene, når man anvender en lavere spektrometerfrekvens.

Linjebredde

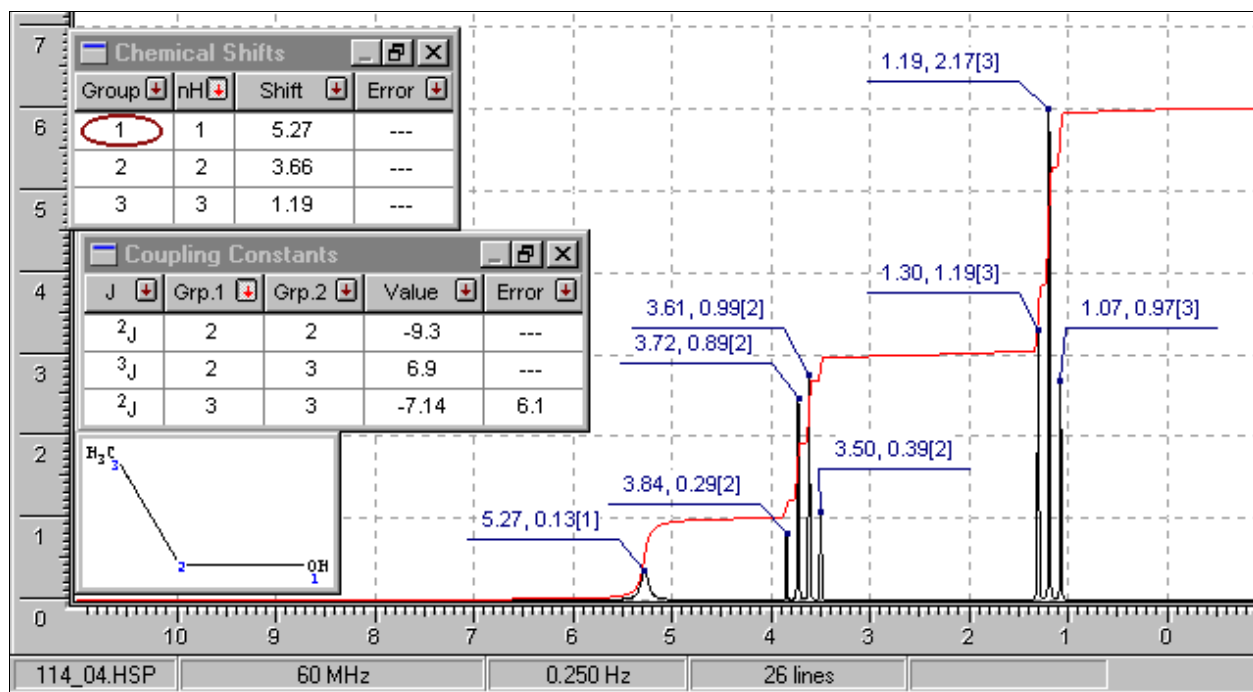
Det er muligt at ændre på linjebredden generelt eller specielt for OH-grupper og NH-grupper (ekskl. amider), der kan lave exchangeaktioner, og som derfor i et eksperimentelt spektrum vil give brede toppe uden koblingsmønstre. Ved tryk på **0.250 Hz** i statuslinjen (eller **Option | Line Width...** i menuen) fremkommer en dialogboks, hvor de ønskede linjebredder kan indtastes.



figur 53

Angivelse af data

Ved at trykke på **Show** kan man nu få vist diverse data vedrørende spektret: **Chemical Shifts**, **Line Intensities**, **Group Numbering**, **Integral Curve**, **Structure Window**, **Table of Chemical Shifts**, **Table of Coupling Constants**.



figur 54

Ved at køre musen henover spektret kan man direkte se sammenhængen mellem spektrets data og strukturformlen.

Opløsningsmidlet

ACD-spektrene er beregnet under den antagelse, at stofferne er opløst i aprotiske, upolære, ikke aromatiske opløsningsmidler (fx CCl4, CDCl3). Hvis man ønsker at sammenligne et beregnet spektrum med et eksperimentelt bestemt spektrum, som er optaget med stoffet opløst i andre typer opløsningsmidler, kan man tilpasse spektret ved at indtaste korregerede skiftværdier i **Chemical shifts tabellen** og trykke på **Recalculate** spektrum i værktøjslinjen.

Simulering ved indtastning af tabelværdier for kemisk skift og koblingskonstanter

Tabelmaterialet kan hentes på kemis hjemmeside www.ke.gymfag.dk/ikt

- **Vælg Tools | Simulations....** Herved fremkommer en dialogbox, hvor antallet af kemisk forskellige protoner i molekylet, de tilhørende kemiske skift og koblingskonstanter indtastes.

Her ses indtastede omtrentlige værdier for ethanolmolekylet. Mere præcise data kan evt. fås fra eksperimentelle spektre.

Simulation Data

Frequency (MHz): 60 Groups count 3 ☒ Strong Coupling

	1	2	3	4	5	6	7	8
Protons in group:	1	2	3					
Chemical shifts (PPM):	5	3	1					
Coupling constants (Hz):								
1		0	0					
2			7					
3								
4								
5								
6								
7								

OK Cancel ? Help Load Save

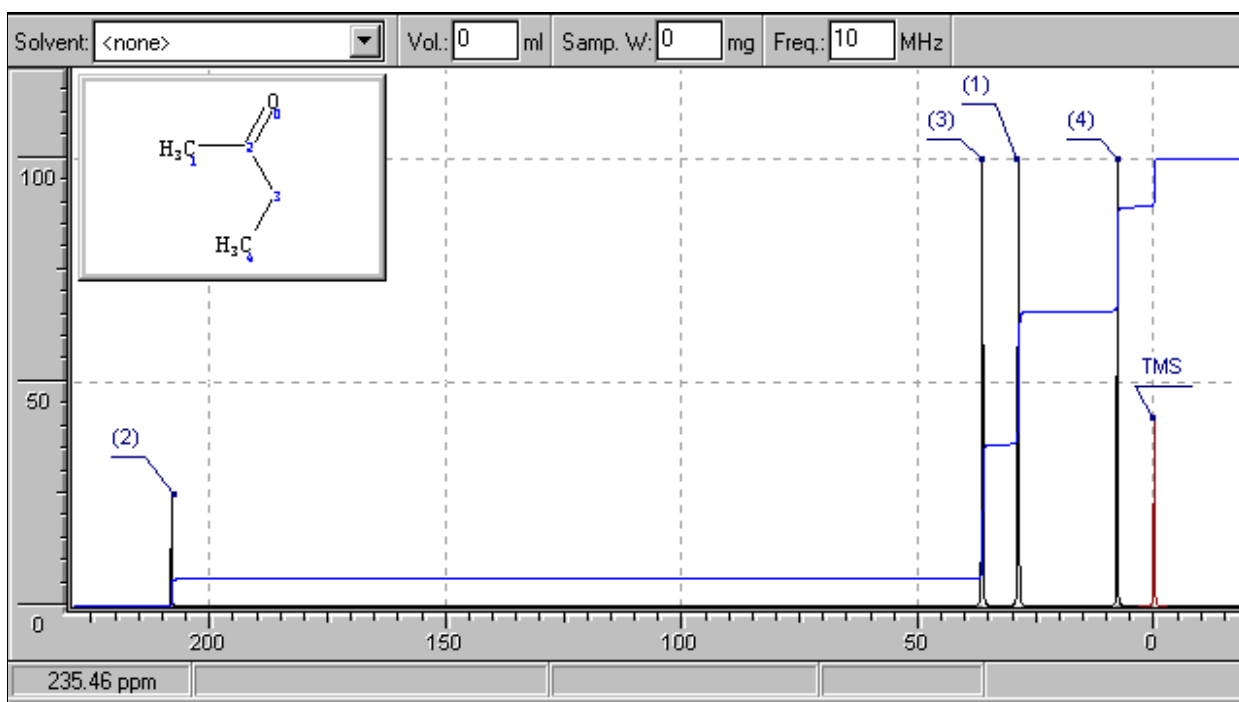
figur 55

De simulerede spektre kan gemmes (*tryk Save*) og hentes igen (*tryk Load*).

CNMR-viewer. Fremvisning af beregnede protondekoblede C NMR-spektre

Vælg **Spectrum | Open...** . I dialogboksen "Load spectrum" åbnes **csp**-undermappen i mappen **work2**. Man kan nu vælge det stof fra databogen, hvis spektrum man ønsker at se. Fx er butanon stof nr. 29 på side 118 i databogen, dvs. C NMR-spektret er 118_29.csp. Programmet viser nu det beregnede C NMR-spektrum med en spektrometerfrekvens på 40 MHz i fuld skala fra -5 til 220 ppm.

Man kan vælge en ny spektrometerfrekvens inden for området 10-1000 MHz. Vælg frekvensen 10 MHz og klik et vilkårligt sted i spektret. Spektret omregnes nu svarende til den nye spektrometerfrekvens.



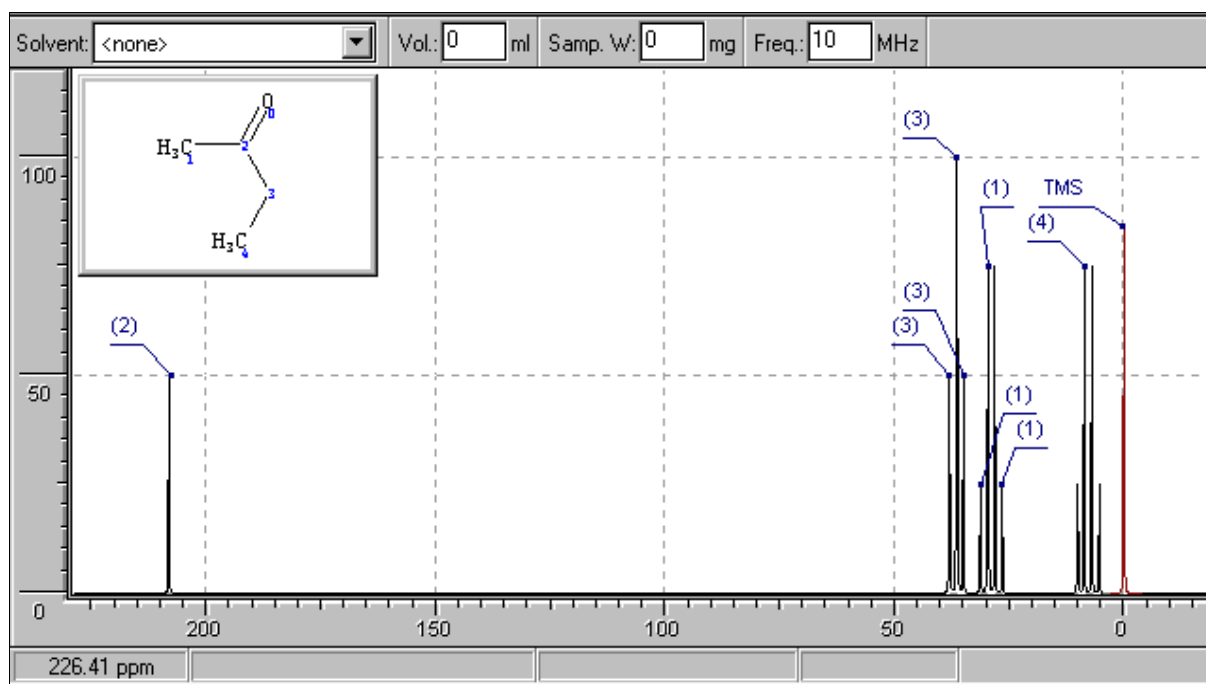
figur 56

Da den relative hyppighed af ^{13}C isotopen kun er 1.1%, ses der ingen kobling mellem nabostillede C-atomer. Derimod er der en kraftig kobling mellem nabostillede ^{13}C og ^1H atomer, (koblingskonstanten J er på 100-250 Hz, altså af samme størrelsesorden som forskellen i kemisk skift for de forskellige ^{13}C atomer). For at gøre spektret enkelt at fortolke, vælger man derfor at dekode til alle ^1H atomer ved at anvende dobbelt resonans. Herved opnår man, at toppene for de enkelte ^{13}C atomer optræder som singlets. Toppen ved 0.00 ppm er TMS signalet. I værktøjslinjen kan man vælge at få vist integralkurven, men som det fremgår af spektret, er intensitetsfordelingen ikke ligefrem proportional med antallet af C-atomer, der er repræsenteret ved de forskellige toppe. Kvaternære C-atomer og C-atomer, der ikke er bundet til H-atomer, vil oftest optræde med væsentligt lavere intensitet end de tilsvarende primære, sekundære og tertiære C-atomer. Man kan derfor ikke anvende integralkurven til protondekoblede C NMR-spektre. Der kan skelnes mellem de forskellige typer C-atomer ved at vælge de forskellige C-subspektre (Tools | C-subspectra...).

Simuleret spektrometerkørsel

CNMR-vieweren kan give brugeren en illusion af at operere med et egentligt spektrometer, idet programmet giver mulighed for at vælge mellem forskellige måder at optage et ^{13}C -spektrum på. Udover det traditionelle dekodelede ^{13}C -spektrum, kan fx Off-resonans eller J-modulation give spektre, der bidrager med yderligere information i identifikationsarbejdet.

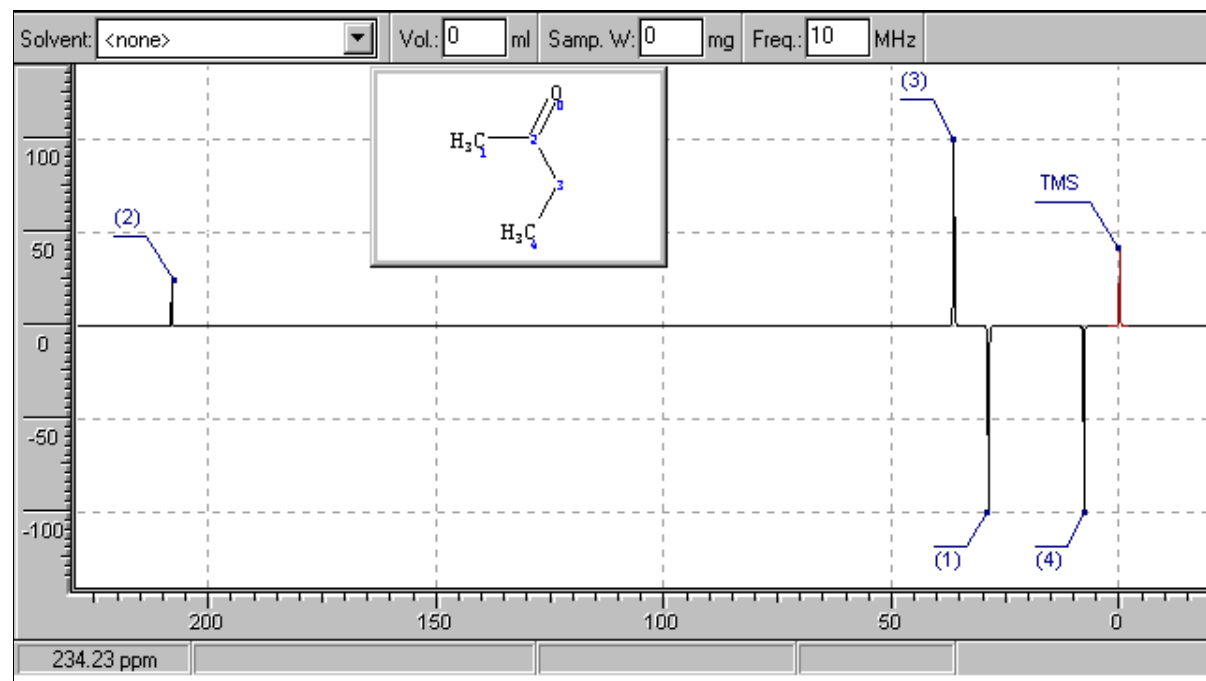
Off-resonans er en teknik, hvor ^{13}C - ^1H koblingen reduceres til en brøkdel af dens faktiske værdi, og generelt fjernes langtrækkende kobling. I CNMR-vieweren bliver ^{13}C - ^1H koblingen reduceret til 16 Hz. Herved begrænses omfanget af overlap mellem de forskellige opslittede toppe, og fortolkning af spektret bliver meget nemmere. Udfra koblingsmønstret kan man let afgøre, om de forskellige C-atomer er primære, sekundære, tertiære eller kvaternære.



figur 57

Hvis koblingsmønsteret ikke ses tilstrækkeligt tydeligt, kan man som beskrevet i afsnittet om HNMR-vieweren ændre på spektrometerfrekvensen eller zoome ind på udvalgte områder af spektret.

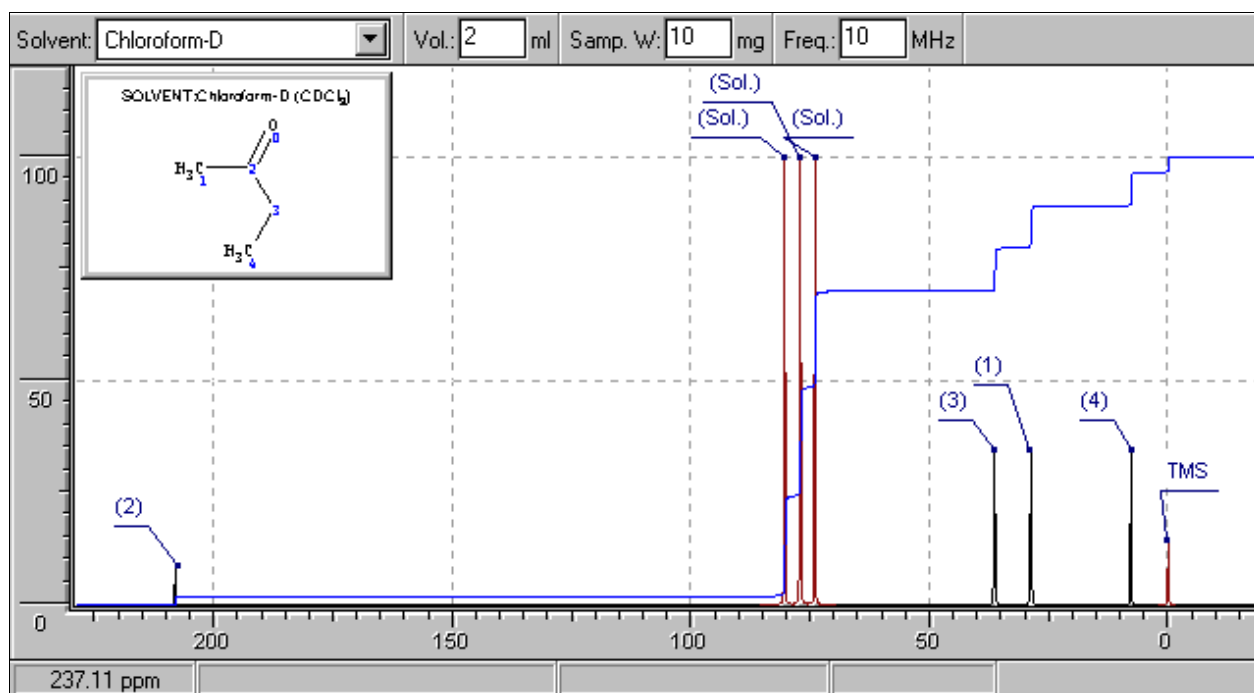
J-modulation er en teknik, hvor toppe, der hidrører fra CH_3 - og CH -grupper peger nedad, mens toppe fra CH_2 - og C -grupper peger opad.



figur 58

Opløsningsmidlet

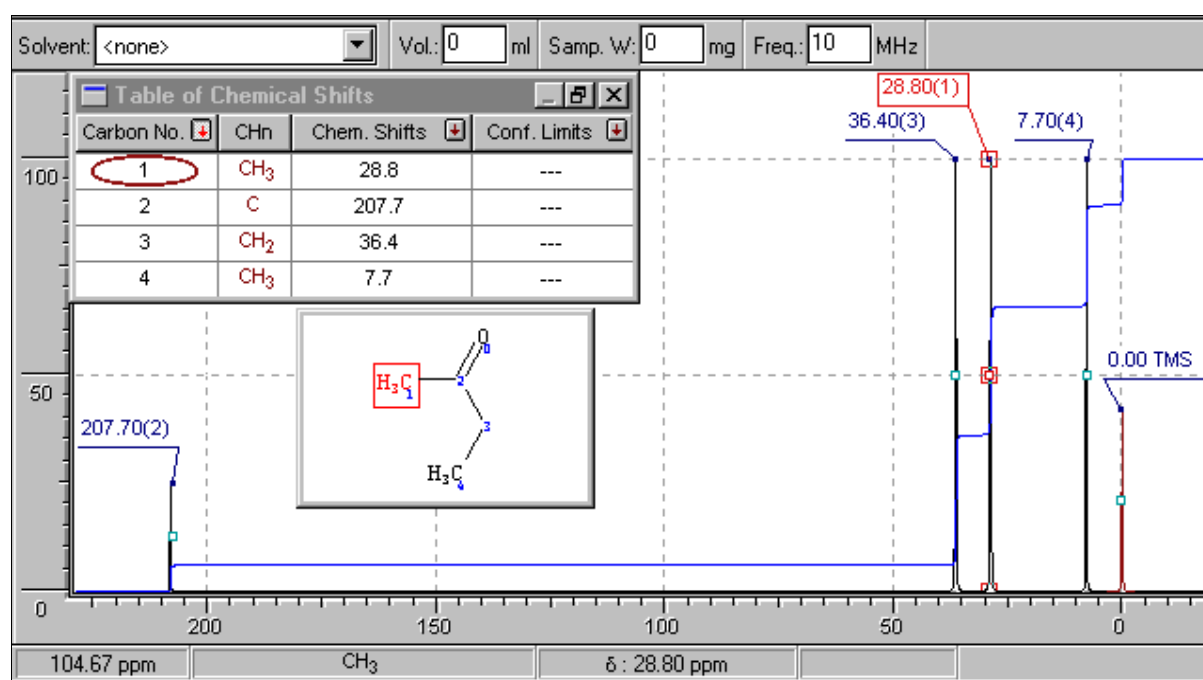
I eksperimentelle ^{13}C -spektre vil opløsningsmidler, der indeholder C-atomer, give anledning til toppe i ^{13}C -spektret. For hurtigt at kunne afgøre hvilke toppe i det eksperimentelle spektrum, der skyldes opløsningsmidlet, kan man i CNMR-vieweren specificere opløsningsmidlet, dets volumen og stoffets masse. Ved klik et vilkårligt sted i spektret eller ved tryk på Enter vises det genberegnete spektrum inklusiv opløsningsmidlets toppe med en intensitetsfordeling i overensstemmelse med den valgte stofkoncentration. CNMR-vieweren korrigerer ikke for opløsningsmidlets indflydelse på de kemiske skift i stoffet.



figur 59

Angivelse af data:

Ved at trykke på **Show** kan man vælge at få vist diverse data i spektret: **Chemical Shifts**, **Carbon Numbering**, **Integral Curve**, **Confidence Limits**, **Structure Window** og **Table of Chemical Shifts**.



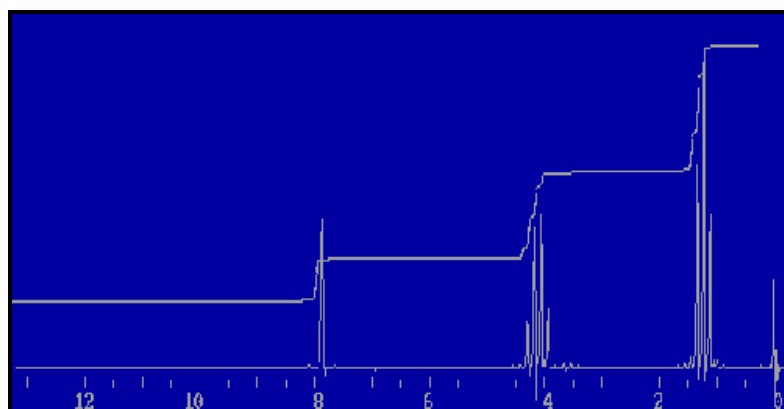
figur 60

gNMR

gNMR er et program til simulering af NMR spektre udgivet af Cherwell Scientific Publishing. En demoudgave af programmet kan hentes fra: <http://www.cherwell.com/gnmr/>. Demoudgaven er en kopi af gNMR med nogle få undtagelser: det er ikke muligt at udskrive, gemme eller kopiere data til klippebordet.

Denne gennemgang dækker den almindeligste anvendelse af gNMR og er tænkt som en hjælp til begyndere, der skal i gang med at bruge programmet. Det er ikke en fuldstændig gennemgang af programmet med alle dets muligheder, i så fald henvises der til den medfølgende on-line tutorial og hjælpefilerne samt evt. manualen, der følger med ved køb af programmet.

Vi vil i det følgende simulere spektret for methansyreethylester $\text{HCOOCH}_2\text{CH}_3$. I figur 61 ses et spektrum af methansyreethylester, som er optaget med et Varian EM360 NMR-spektrometer.



figur 61

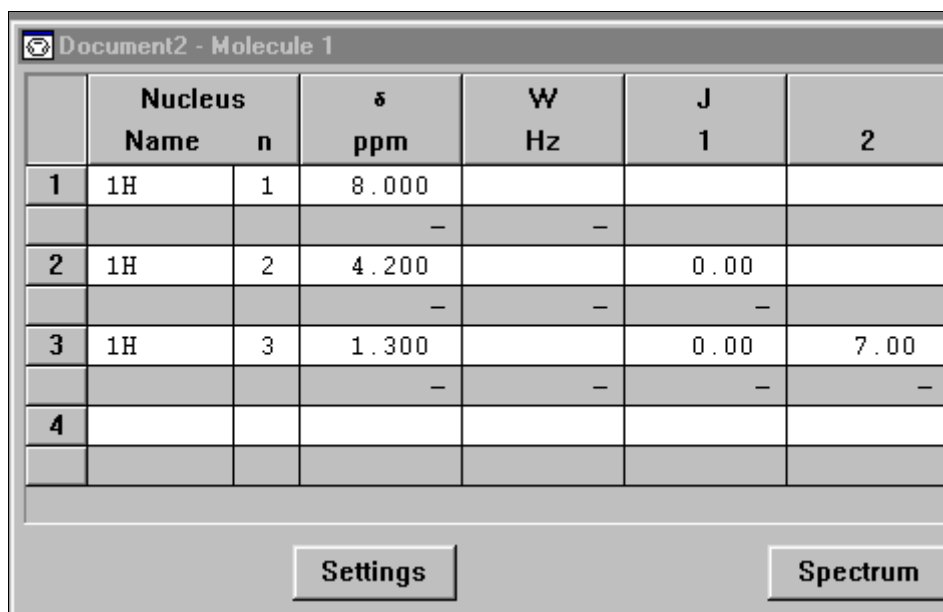
Nye data kan indsættes i gNMR på to måder for at kunne foretage en simulation:

Simulation **uden** strukturformel, hvor man indsætter data om molekylet direkte i en tabel.

Simulation **med** strukturformel, hvor man importerer en strukturformel fra et kemisk tegneprogram, fx ChemSketch 3.5

Simulation uden strukturformel

Data om methansyrethylester-molekylet skal indtastes. Efter at gNMR-programmet er startet, fremkommer et *Welcome Window*, her klikkes **Cancel**. Derefter vælges **File|New**, og et tomt "Molecule Window" fremkommer. "Molecule Window" ligner et regneark; det har kolonner til indtastning af kerner, skift, koblingskonstanter, etc. Første kolonne indeholder navnet på den kerne, ^1H , som skal benyttes – den står der allerede. Flyt til næste kolonne med piletasterne. Her indtastes antal ækvivalente kerner. I tredje kolonne indtastes det kemiske skift. Værdierne fås fra en tabel over kemiske skift, eller de kan som her hentes fra det eksperimentelle spektrum. Fjerde kolonne kan indeholde individuelle liniebredder. Denne kolonne springes over, da der anvendes samme liniebredde i hele spektret. Resten af *Molecule Window* er en matrix med koblingskonstanter. For eksempel skal feltet i række 3 og kolonne 2 indeholde J_{23} , koblingskonstanten mellem kerne 2 og 3. Værdierne fås fra en tabel over koblingskonstanter. Når tabellen er udfyldt, skal den se ud som vist i figur 62.

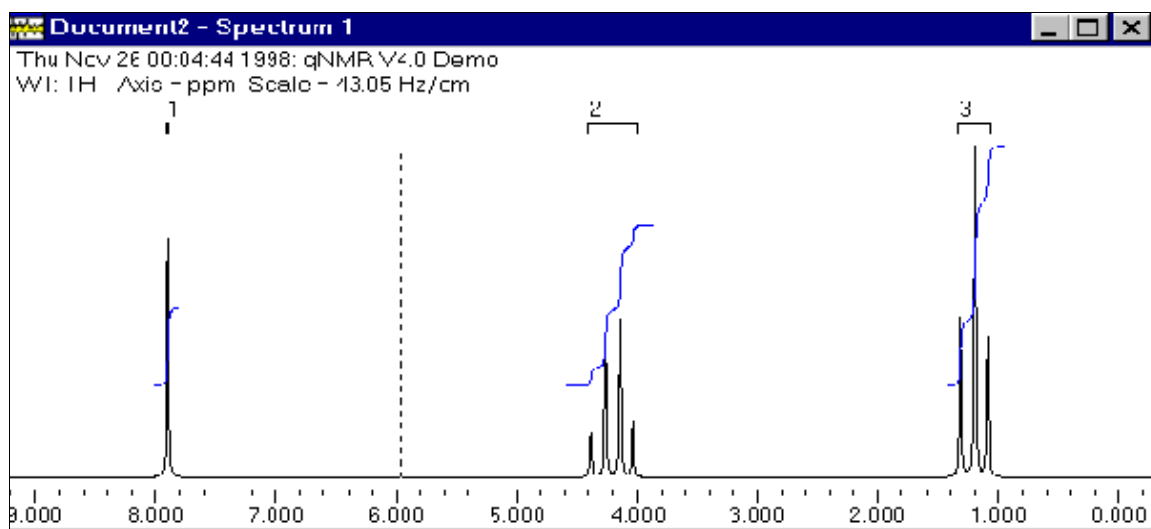


	Nucleus Name	n	δ ppm	W Hz	J 1	2
1	^1H	1	8.000			
			–	–		
2	^1H	2	4.200		0.00	
			–	–	–	
3	^1H	3	1.300		0.00	7.00
			–	–	–	–
4						

Settings Spectrum

figur 62

Spektrometerets frekvens skal ændres, da frekvensen for gNMR er forvalgt til 100 MHz, men spektret i figur 61 er optaget med et 60 MHz spektrometer. Vælg derfor **Settings|File**. I dialogboxen sættes frekvensen nu til 60 MHz. **Klik OK**. Spektret kan nu ses, **klik Spectrum**. I *Spectrum Window* fremkommer nu det beregnede spektrum af methansyrethylester. Integralkurven kan tilføjes på følgende måde: **Klik** med højre museknap på *Spectrum window*, **vælg Integrate**. Spektret skulle nu se ud som vist i figur 63.



figur 63

Bemærk overensstemmelsen med det eksperimentelle spektrum i figur 61. Det er en god øvelse at prøve at ændre på forskellige parametre (kemisk skift, koblingskonstanter og spektrometerfrekvens) og se hvilken virkning, det har på spektret. Man kan ændre i kemisk skift og koblingskonstanterne interaktivt på følgende måde: **Vælg Molecule Window, anbring** markøren i det felt, der ønskes ændret, **klik Edit| Interactive xx**. Der fremkommer en dialogbox, der gør det muligt interaktivt at ændre parameterens værdi og straks se virkningen i spektret (hvis der er plads til både *Molecule Window* og *Spectrum Window* på skærmen). Liniebredden kan ændres interaktivt ved at klikke med højre museknap på *Spectrum Window*, **vælg Interactive Width**.

Simulation med strukturformel

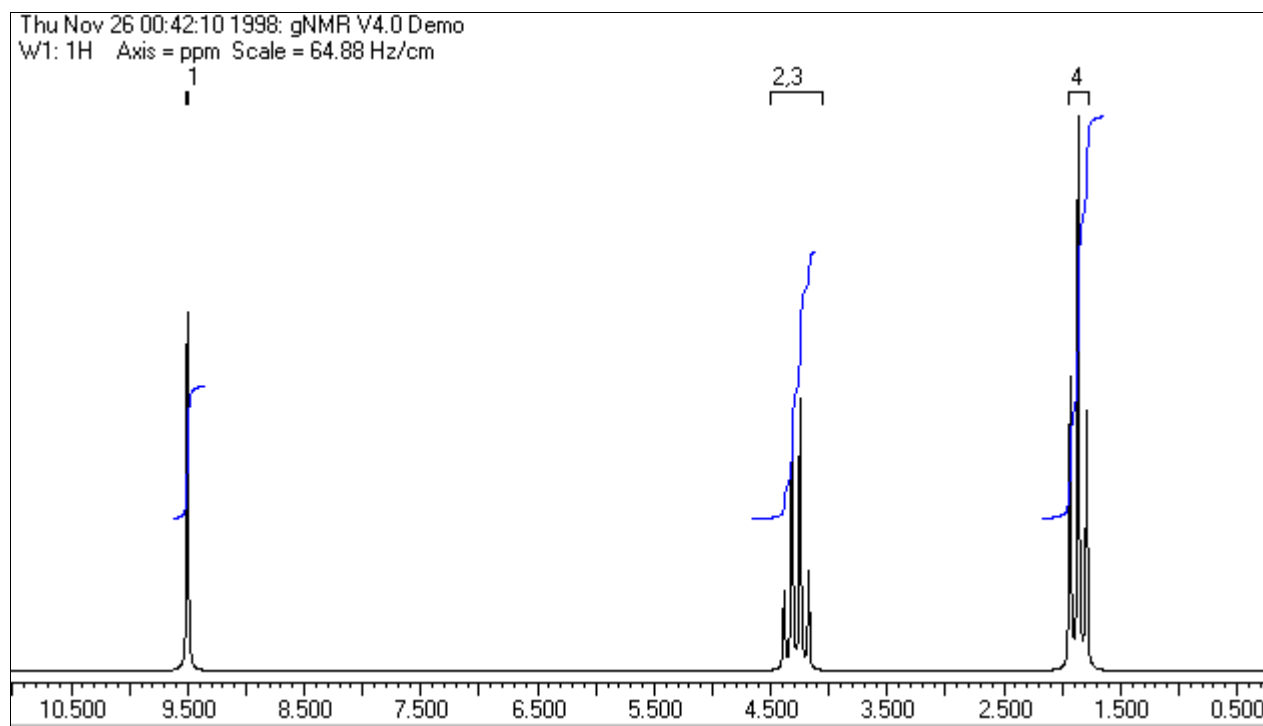
Som en alternativ metode til den ovenstående kan gNMR bruge et molekyles strukturformel til beregning af spektroskopiske parametre. Molekylet tegnes i et andet program, fx ChemSketch 3.5. Spektret for methansyreethylester skal igen simuleres. Det antages, at strukturformlen for molekylet er tegnet i ChemSketch 3.5 og eksporteret som en MDL-MOL fil. I gNMR importeres filen, **vælg File|Import|MDL-MOL**. I fil-dialogvinduet vælges MOL-filen. Derefter fremkommer *Import Struktur* vinduet; der ønskes ikke noget specielt, så **klik OK**. gNMR vil prøve at bestemme kemisk skift og koblingskonstanter ved brug af en database med kemisk skift samt simple additionsregler. Når programmet er færdig fremkommer *Molecule Window*, som vist i figur 64.

	Nucleus Name	n	δ ppm	W Hz	J 1	J 2
1	1H	1	9.500			
2	1H	1	4.277		0.00	
3	1H	1	4.277		0.00	-16.00

figur 64

Man skal betragte resultatet som en første tilnærmelse, idet der kan være nogen afvigelse, men metoden er et nyttigt udgangspunkt til produktion af data, som let kan ændres. Klik **Spektrum**. Uden at der er foretaget ændring i data, fremkommer spektret, som vist i figur 65.

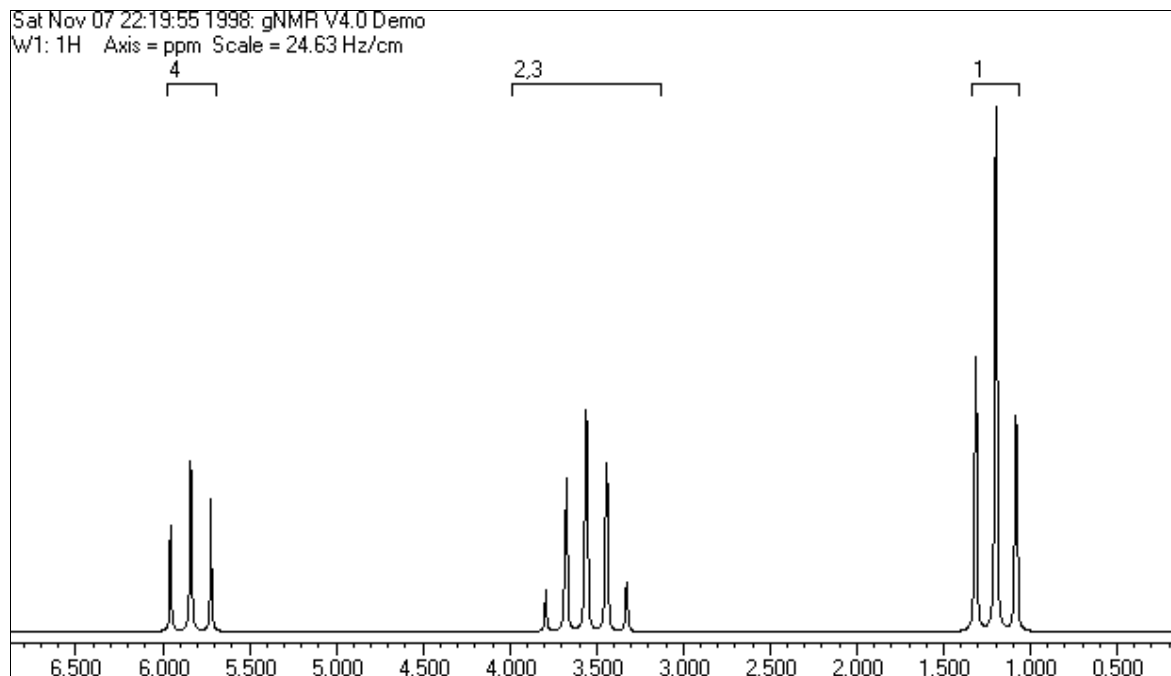
Der er her nogen afvigelse i kemisk skift, men erfaringen viser, at gNMR bestemmer rimelige data ud fra strukturformlen. Foretag evt. ændringer i kemisk skift og *klik Recalculate*.



figur 65

Exchangereaktioner

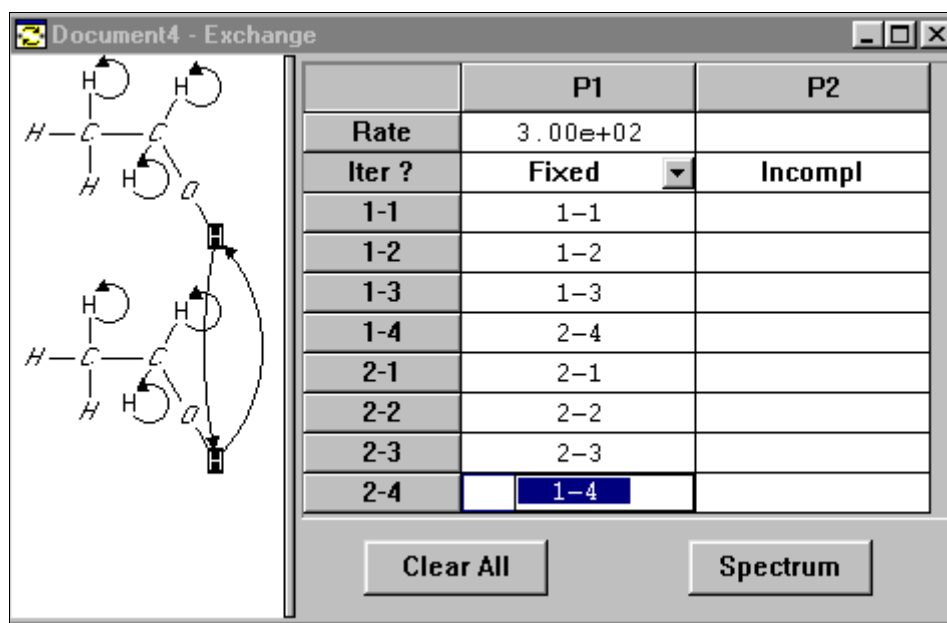
I figur 66 ses ethanolspektret beregnet af gNMR på grundlag af en strukturformel tegnet i Chem-Sketch 3.5. Som man kan se, er der kobling mellem protonen i OH-gruppen og protonerne i CH₂-gruppen, derfor fås multiplerne, som vist i figur 66.



figur 66

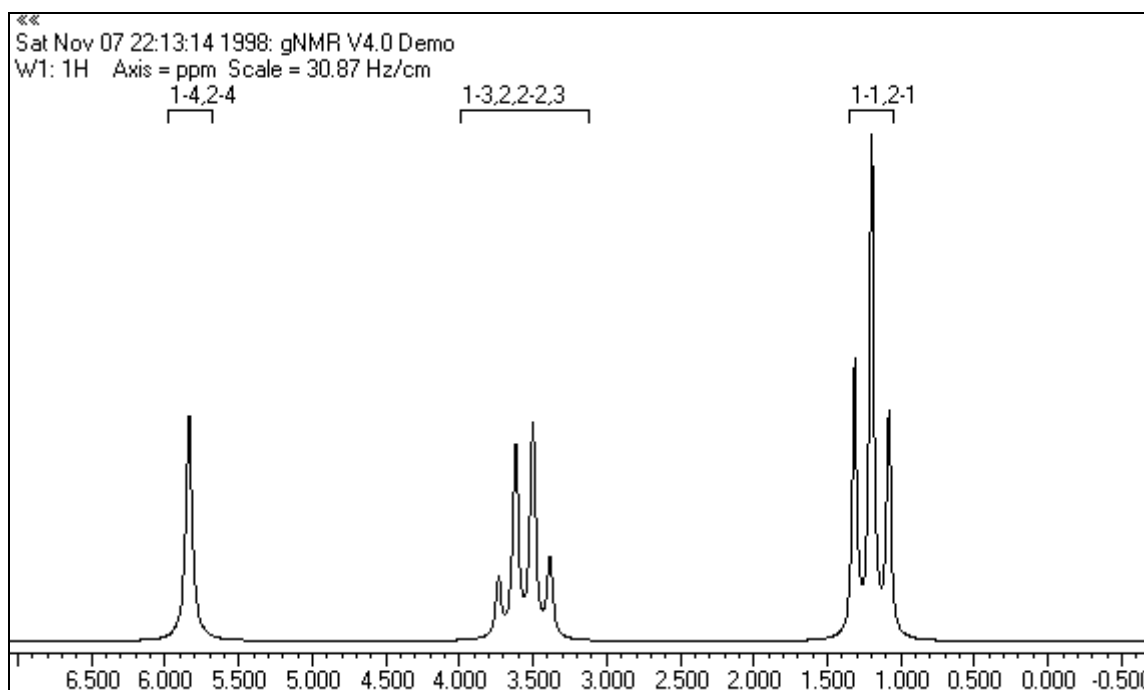
For at kunne forklare hvorfor protonen i hydroxygruppen normalt ses som en singlet, er man nødt til at tage hensyn til exchangereaktioner. Under normale forhold vil der være tilstrækkelig med sure urenheder til stede i opløsningen til at katalysere hurtig udskiftning af hydroxyprotonen. Protonen er ikke ved oxygenatomet længe nok til at koble med protonerne i CH₂-gruppen.

gNMR kan tage hensyn til intermolekylære exchangereaktioner på følgende måde. **Importer** først et ethanolmolekyle, **Filer|Import. Find** filen i fil-dialogvinduet. **Vælg Molecule|New|Molecule2**. Derefter importeres endnu et ethanolmolekyle på samme måde som det første. **Vælg Molecule|Exchange** for at åbne *Exchange Window*. De to strukturer er vist til venstre i figur 67, til højre skal exchangedata indtastes. Læg mærke til at protonerne er nummereret på følgende måde: 1-1 betyder proton 1 på molekyle 1; 2-3 betyder proton 3 på molekyle 2. En hurtig måde at indtaste exchangedata på er at klikke på protonen i OH-gruppen og derefter, med shift-tasten holdt nede, klikke på protonen i OH-gruppen i det andet molekyle. **Skriv +** for at fuldføre permutationen. **Indtast 300** i *Rate* boksen og **tryk Return**. Indholdet i boksen nedenunder skifter til *Fixed*, som viser, at de nødvendige data er indtastet. *Exchange Window* vil derefter se ud, som vist i figur 67.



figur 67

Tryk Spectrum eller **Recalculate** for at se virkningen af exchangereaktionen. Derefter fremkommer spektret, som vist i figur 68. Foretag evt. ændring af rate for at se virkningen. Beregningerne kan godt tage lang tid afhængig af computeren.



figur 68

Organic Chemistry Online

Organic Chemistry Online CD-ROM with Workbook af Paul R. Young, University of Illinois at Chicago. Arbejdsbogen er på 206 sider.

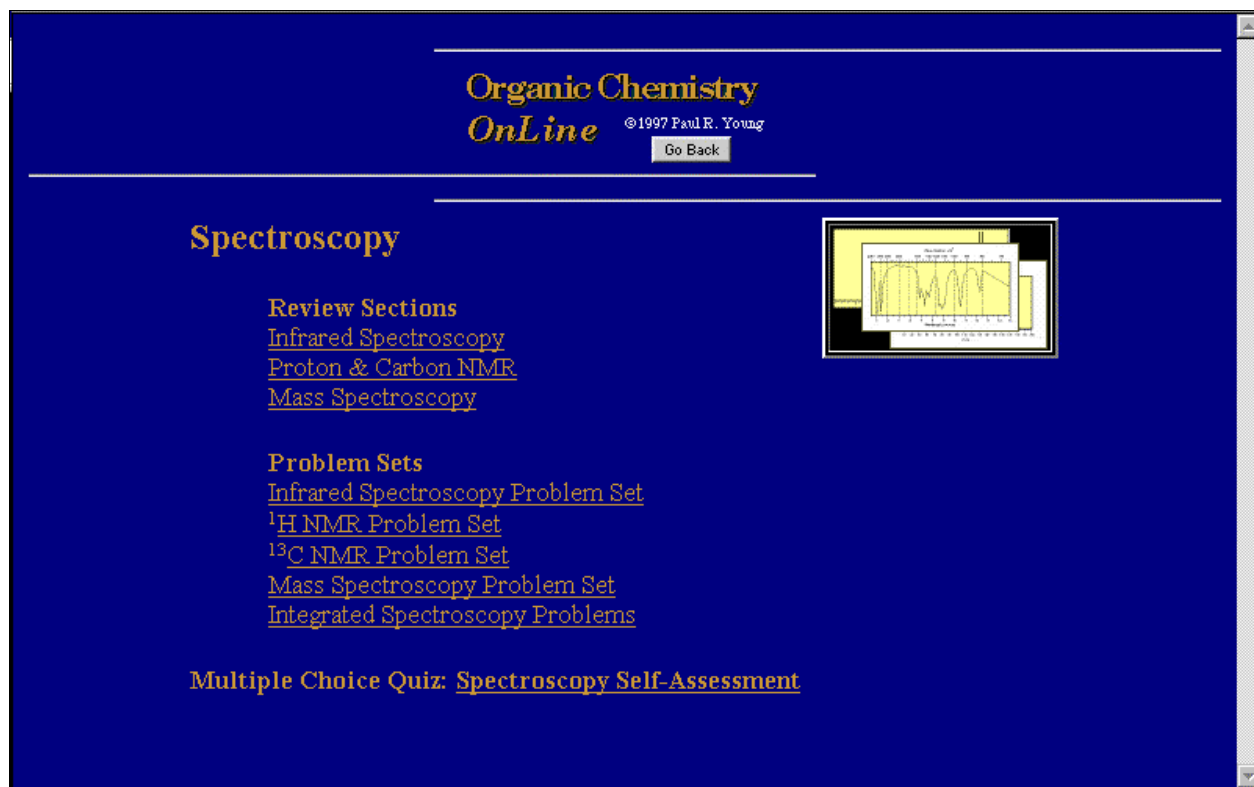
Published by Brooks/Cole, 1999. ISBN 0-534-35787-3.

Kan bestilles online: www.thomson.com Pris: US \$ 21.95 (ult. 1998).

CD-ROM og arbejdsbog indeholder uafhængige moduler om 17 forskellige emner inden for organisk kemi. Et af modulerne handler om spektroskopi (IR, ^1H NMR, ^{13}C NMR, og MS) og giver mulighed for at arbejde interaktivt med spektroskopiske problemstillinger. Der er selvstændige forløb inden for hver af de spektroskopiske metoder, men der er også forløb, hvor de 4 forskellige spektroskopiske metoder integreres. Spektroskopiafsnittet afsluttes med en quiz.

Et udvalg af disse forløb er tilgængelig på webadressen: <http://homework.chem.uic.edu/next.htm> Vælg stor eller lille skærm og vælg derefter spektroskopimodulet. Her findes en kort beskrivelse af teorien bag de forskellige spektroskopiske metoder samt opgaver, der giver en god øvelse i fortolkning af de forskellige former for spektre. Spektrene er gjort interaktive. Ved at klikke på interessante toppe får man hjælp til fortolkningen.

Klip fra Online-udgaven (CD-ROM) vises på figur 69 og figur 70.



figur 69 Spectroscopy med Review Sections, Problem Sets og Multiple Choice Quiz

Problem #1: The molecular formula for an unknown compound is C_3H_8O . Data for the 1H NMR, ^{13}C NMR, infrared and mass spectra for this compound are available by clicking on the buttons below, use the "Return" button to return to this screen. Help with the interpretation of each spectrum is available and you can review background and selected correlation tables by clicking on the links in the MENU above. Using the spectral and analytical information provided, determine the structure for this compound.

Analysis Infrared 1H NMR ^{13}C NMR Mass Structure

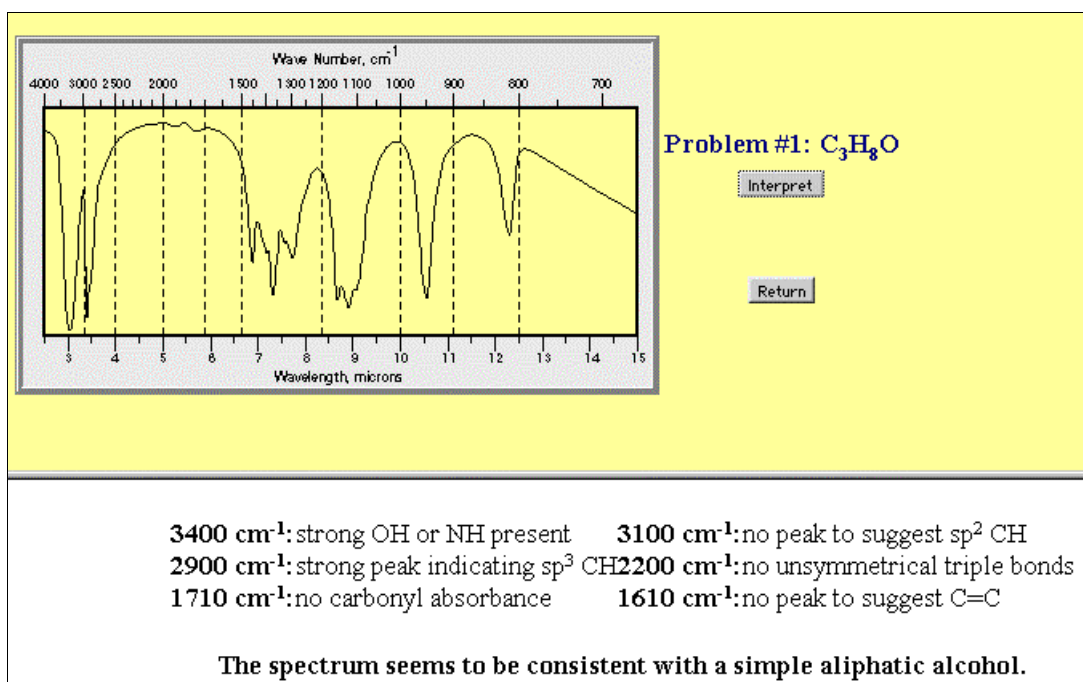
Next

C_3H_8O : MW = 60.1

From the molecular formula, the compound has "no [degrees of unsaturation](#)" (no double bonds, carbonyls or rings).

figur 70

En opgave giver en bruttoformel samt mulighed for at se forskellige spektre for stoffet. Yderligere oplysninger om stoffet kan fås fra *Analysis* (se figur 70).



figur 71

I figur 71 ses billedet efter tryk på knappen *Infrared*. Hjælp, der vises i det nederste felt, kan fås ved at klikke på en top eller på *Interpret*, som der er klikket på her.

Infrared Spectroscopy Tutorial and Reference (*IR Tutor*)

Infrared Spectroscopy Tutorial and Reference er et undervisningsprogram i IR-spektroskopi. Programmet er lavet af Charles B. Abrams, Colombia University i samarbejde med PERKIN ELMER. På adressen <http://www.columbia.edu/cu/chemistry/edison/IRTutor.html> findes yderligere oplysninger om programmet samt mulighed for at hente en demo af programmet. Programmet er delt op i 3 hovedafsnit: *Introduction*, *Theory of Spectroscopy* og *Interpretation of Spectra*. Hvert hovedafsnit er igen inddelt i et antal underafsnit, hvor man kan klikke sig frem gennem afsnittets sider.

I *Introduction* gives en oversigt over de grundlæggende principper i spektroskopi, herunder en gennemgang af IR-spektrometret, både et klassisk instrument og et moderne (Fourier Transform).

I *Theory of Spectroscopy* omtales, hvordan lys absorberes af molekyler. Både den klassiske model af et toatomigt molekyle og den kvantemekaniske model beskrives. Desuden forklares mere komplicerede vibrationer af molekylerne: vand, carbondioxid og pentan.

Interpretation of Spectra er det centrale afsnit i programmet. IR-spektrene for 13 stoffer bliver gennemgået i detaljer. Sammenhæng mellem absorptionslinier i spektrene og molekylets vibrationer bliver vist på en meget illustrativ måde.

Programmet gør i høj grad brug af interaktiv grafik og avancerede computeranimationer, og det er derfor velegnet til at give en forståelse af grundlæggende principper i IR-spektroskopi.

Proton NMR Basics and Reference (*NMR Tutor*)

Proton NMR Basics er et undervisningsprogram i NMR-spektroskopi fra Journal of Chemical Education Software. Programmet er lavet af C. S. Judd, J. D. Morrisett, M. V. Chari og J. L. Browning Houston Community College System, Houston. *Proton NMR Basics* er en multimedie-tutor, som findes på CD-ROM.

På adressen http://jchemed.chem.wisc.edu/JCESoft/Issues/Series_SP/SP11/prog1-SP11.html kan man få yderligere oplysninger om programmet.

NMR Tutor er inddelt i fire afsnit: *Introduction*, *The Instrument Room*, *The Classroom* og *The Laboratory*.

I *Introduction* gives et eksempel på, hvordan man bruger NMR-spektroskopi til at bestemme et ukendt stof.

I *The Instrument Room* gives dels en gennemgang af den generelle teori for NMR-spektroskopi og dels vises, hvordan man betjener instrumentet. Der er desuden en detaljeret gennemgang af instrumentets opbygning. Grafik og animationer bliver i høj grad brugt til at underbygge forklaringerne.

I *The Classroom* forklares, hvilken sammenhæng der er mellem molekylets struktur og NMR-spektret ud fra 6 stoffer (propan-2-ol, ethansyre-methylester, benzen, ethansyre-ethylester, propanon og propensyre-methylester). Atomere, der er ansvarlige for resonanstoppe, bliver fremhævet i en 3-D molekyllmodel samtidig med toppen. Der er mulighed for at rotere 3-D modellen.

I *The Laboratory* gives der en introduktion til den forskningsmæssige anvendelse af NMR inden for biokemi og medicin. Der vises, hvordan NMR-spektroskopi bruges til at studere proteinenzymet ribonuclease.

Programmet giver en illustrativ indføring i NMR-spektroskopi og er et udmærket supplement til almindelige tekstbøger. Den digitale video, der viser betjeningen af NMR-spektrometeret, kompenserer i nogen grad for manglen på et rigtigt instrument.

Udklipning af spektre og anden grafik med *Screen Rip32*

Spektre, molekylformler og anden grafik kan overføres til et tekstbehandlingsprogram med programmet *Screen Rip32*.

Programmet kan hentes som freeware: <http://members.aol.com/progency/index.html>.

- *Åbn* det program, der skal klippes fra. Hvis du vil indsætte klippene direkte i dit tekstbehandlingsprogram, skal det også være åbnet. Ellers kan udklippene fra *Screen Rip32* gemmes som billedfiler.
- *Åbn* programmet *Screen Rip32*.
- **Vælg CaptureImage | Grab Rectangular Area** (der er andre muligheder for at udvælge en hel skærm eller dele heraf – se programmets hjælp).

Nu forsvinder *Screen Rip32* vinduet automatisk, og næste gang der trykkes på musen, starter udklipningen. Vinduet, der skal klippes fra, skal derfor være aktivt. Hvis det ikke er aktivt, så gør det aktivt ved at klikke i det med musen.

- **Hold** venstre museknap nede og træk musen henover arealet, der skal klippes. Slip museknappen. Nu ligger det klippede areal i *Screen Rip32*.
- **Vælg Edit | Copy** eller **Ctrl+C**. **Gå til det sted** (i tekstbehandlingsprogrammet), hvor udklippet skal sættes ind. **Brug Rediger | Sæt ind** eller **Ctrl+V**.

Web-baserede opgaver

Små interaktive opgaver i tolkning af H NMR-spektre

I dette afsnit vil vi kort introducere proceduren for arbejdet med små opgaver i tolkning af simple H NMR-spektre. Opgaverne ligger på en webside, hvor eleverne direkte og interaktivt kan arbejde med tolkningen.

Opgaverne kan anvendes i forbindelse med et undervisningsforløb om spektroskopiske metoder. Forudsætningerne for at løse opgaverne er, at eleverne har fået gennemgået den grundlæggende teori inden for H NMR-spektroskopi, og at de er blevet fortrolige med tolkning af simple spektre. Det vil sige, at eleverne skal være bekendt med betydningen af det kemiske skift og baggrunden for toppenes opsplitning i multipler. Herudover skal eleverne være i besiddelse af tabelværdier for kemiske skift (og eventuelt koblingskonstanter), fx fra *Databog fysik kemi* eller fra en tabel der ligger på websiden.

Opgaverne er konstrueret, så de kan håndteres direkte fra en internetbrowser (Internet Explorer eller Netscape), og de er placeret på følgende adresser:

<http://www.ke.gymfag.dk/ikt/spektro1/>

<http://www.ke.gymfag.dk/ikt/spektro2/>

Har man startet sin browser og skrevet ovennævnte adresse i adressefeltet, dukker følgende startbillede op:

Øvelsesopgaver i tolkning af ¹H-NMR-spektre

Det skulle være muligt at identificere stoffernes struktur helt eller delvist ud fra deres molekylformel og NMR-spektrum.

Et forslag til strukturformel kan kontrolleres på en af følgende måder:

- Ved at se om stoffet er med i den samling af NMR-spektre, der ligger på Kemis hjemmeside.
- Ved at tegne molekylet i programmet ChemSkets3.5, exportere det som en mol-fil til programmet gNMR, hvor der beregnes et NMR-spektrum. Sammenlign derefter de to spektre.
- Ved at tegne molekylet i ChemSkets3.5 og dernæst sende det til ACD-lab's beregner af NMR-spektre.

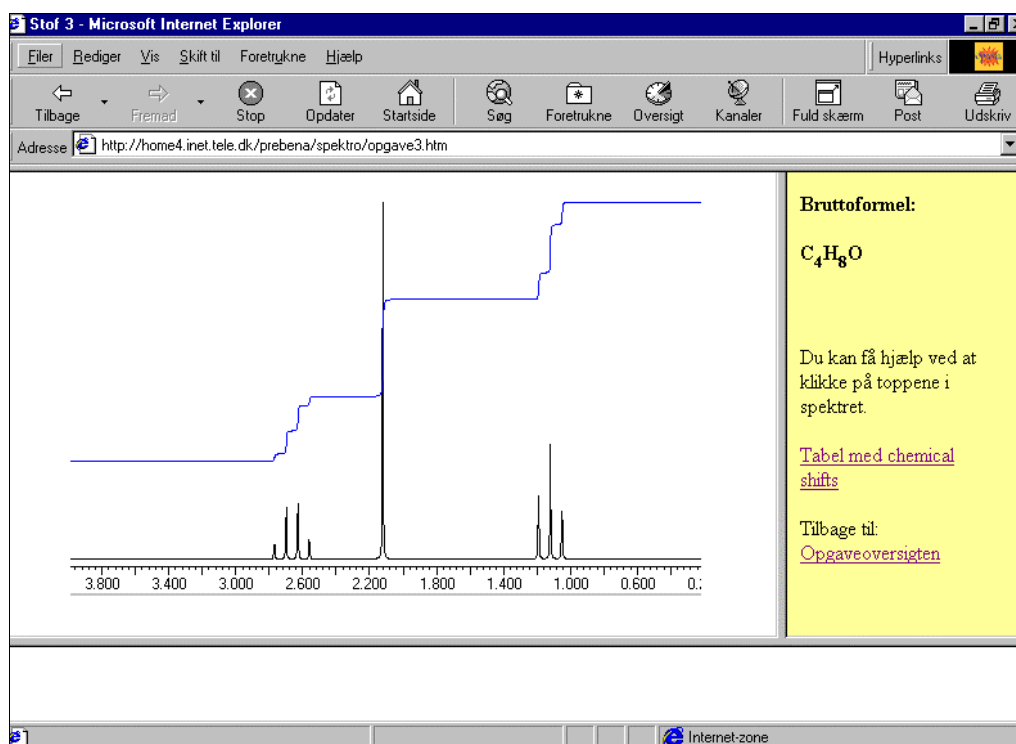
Opgave 1	Opgave 2	Opgave 3
Opgave 4	Opgave 5	Opgave 6
Opgave 7	Opgave 8	

figur 72

Herfra kan man klikke sig ind på de otte øvelsesopgaver. Det anbefales at starte med de lavest nummererede opgaver.

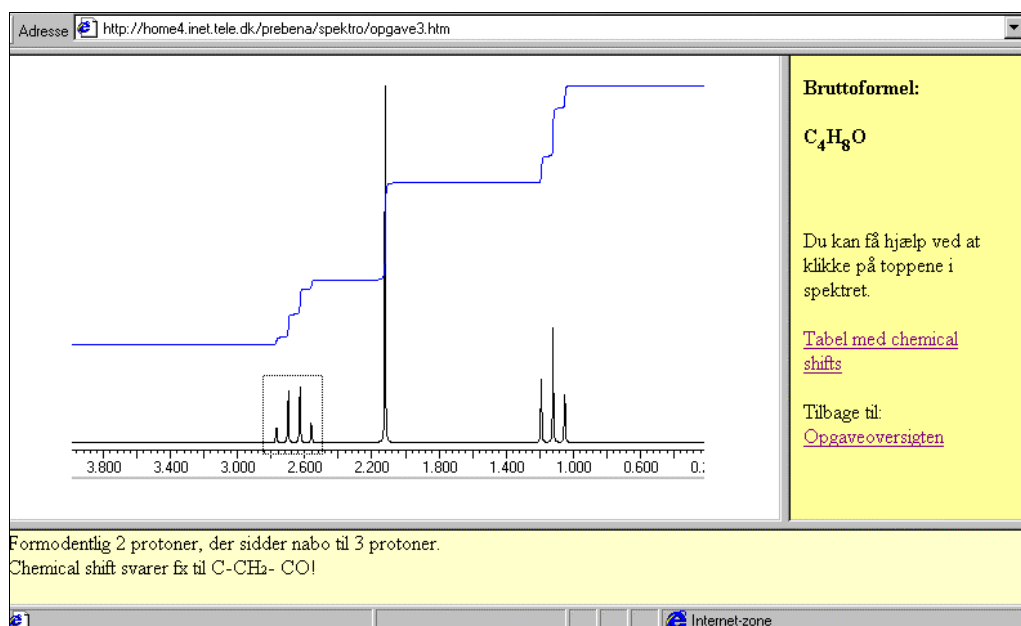
Fra opgaverne er der genveje tilbage til siden med opgaveoversigten.

Når en opgave er valgt, bliver der vist et skærmbillede af følgende type:



figur 73

Man har i dette billede mulighed for at få hjælp til tolkningen af H NMR-spektret ved at placere markøren på en af toppene og klikke med venstre museknap. Efter denne procedure dukker en lille hjælpetekst op i sidens nederste vindue.



figur 74

Det er tanken, at eleverne ved selvstændigt arbejde skal forsøge at tolke spektrene. Det betyder, at de, med baggrund i stoffets strukturformel og de informationer spektrene giver, skal foreslå en strukturformel for det pågældende stof.

Den tabel med værdier for chemical shifts (kemiske skift) - som findes på websiden - dækker stort set behovet for information til løsning af opgaverne.

Når eleverne har et bud på en strukturformel, har man følgende muligheder for at kontrollere resultatet:

- Ved at se om stoffet er med i den samling af NMR-spektre, der ligger på kemis hjemmeside. På startsideen er der links til kemis hjemmeside, hvorfra man kan hente H NMR-spektre (samt C NMR-spektre) for en lang række af stoffer i Databog fysik kemi. H NMR-spektrene kan kun ses i programmet HNMR-viewer 3.0, der kan hentes hjem fra ACDs hjemmeside (se ovenfor).
- Ved at tegne molekylet i ChemSketch 3.5, exportere det som en mol-fil til simulatoren gNMR, hvor NMR-spektret så beregnes. En vejledning i brugen af ChemSketch 3.5 findes i et andet kapitel i dette hæfte, og en instruktion i brugen af gNMR findes i teksten ovenfor.
- Ved at tegne molekylet i ChemSketch 3.5 og sende det til ACD beregner af NMR-spektre. (Det koster dog penge at få dette arbejde udført.)

På websiden er der desuden reference til en samling på ca. tyve opgaver, hvor der både er H NMR- og IR-spektrum for det pågældende stof. Disse opgaver er beskrevet i det efterfølgende afsnit.

Identifikation af organiske forbindelser ud fra molekylformel, IR- og NMR-spektrum

Ved identifikation af organiske stoffer ved hjælp af spektroskopi bruger man ofte en kombination af forskellige former for spektre. I denne opgave, som findes på kemis hjemmeside, skal man bestemme stoffets strukturformel, når man kender dets molekylformel, IR-spektrum og H NMR-spektrum. Stofferne er anbragt i en tabel, se figur 75. Der er i øjeblikket 18 stoffer. Opgaver mærket med "L" er forholdsvis lette opgaver. Henvisning til opgaverne findes på side 104.

Identifikation af organiske forbindelser ud fra molekylformel, IR- og HNMR-spektre.			
Information om opgaverne.			
Stof 1L.	C_8H_{10}	Vis IR-spektrum	Vis NMR-spektrum
Stof 2L.	C_7H_8O	Vis IR-spektrum	Vis NMR-spektrum
Stof 3L.	C_6H_6O	Vis IR-spektrum	Vis NMR-spektrum
Stof 4L.	C_3H_8O	Vis IR-spektrum	Vis NMR-spektrum
Stof 5L.	$C_7H_8O_2$	Vis IR-spektrum	Vis NMR-spektrum

figur 75

Første søjle angiver nummeret på stoffet, og anden søjle angiver stoffets molekylformel. Ved at klikke på feltet i tredje søjle ses stoffets IR-spektrum, og ved at klikke på feltet i fjerde søjle ses dets H-NMR-spektrum. Denne tekst fremkommer ved at kikke på [Information om opgaverne](#).

IR-spektrene er fremstillet med en IR-simulator for instrumentet Perkin Elmer Model 1310 IR-spektrometer. Analyserne er i væskefase i natriumchloridkrystal. NMR-spektrene er fremstillet med en *NMR-Simulator* for Varian EM360 NMR-spektrometer ved frekvensen 60 MHz. Simulatorerne er lavet af Paul Schatz, University of Wisconsin, Madison og forhandles af firmaet Falcon:

<http://www.falconsoftware.com>

Da der er tale om eksperimentelle data, kan man komme ud for støj og evt. toppe fra urenheder.

Tolkningen af spektrene er i nogen grad gjort interaktiv ved, at der er indlagt "hot-spots" på spektrene, dvs. at man kan klikke på visse dele af spektrene og få oplysninger som hjælp til opklaring af stoffernes struktur. Hvis man klikker på IR-spektret et vilkårligt sted, får man oplysning om de strukturer, der giver anledning til absorption i det pågældende område (området har en bredde på ca. 200 cm^{-1}). Foruden oplysning om struktur angives det nøjagtige absorptionsinterval i cm^{-1} , intensitet og evt. form. På NMR-spektrene kan man klikke på de resonanstoppe, der er i spektret. Man får da oplysning om strukturer, der giver resonans ved toppens kemiske skift eller tæt ved (ca. 0,5 ppm). Der er mulighed for at veksle mellem IR-spektret og NMR-spektret, ligesom man kan vende tilbage til startsiden med opgaverne. De oplysninger, man kan få interaktivt, svarer nogenlunde til oplysningerne i Databog fysik kemi. I nogle tilfælde kan det være nødvendigt at søge oplysninger i større tabelværker, sådanne findes på kemis hjemmeside.

Et forslag til strukturformel kan kontrolleres ved at sammenligne det ukendte stofs spektrum med spektre af kendte stoffer. Det kan gøres på følgende måde:

- H NMR-spektret kan man sammenligne med et simuleret spektrum af forslaget til strukturformel. Strukturformlen kan tegnes i ChemSketch 3.5 og eksporteres som MOL-fil. Derefter kan filen importeres i NMR-simulatoren gNMR eller sendes til ACD beregner af NMR-spektre. Man kan også benytte den samling af spektre, der ligger på kemis hjemmeside.
- IR-spektre kan hentes fra <http://webbook.nist.gov/chemistry/form-ser.htm>.

Spektroskopiopgaver, der lægger op til brug af computer

Her følger 3 opgaveeksempler. Opgaverne kan løses ved hjælp af tabeller i *Databog fysik kemi* samt tabeller placeret på kemis hjemmeside. Endvidere anvendes programmer, som omtalt i teksten ovenover.

Opgave 1

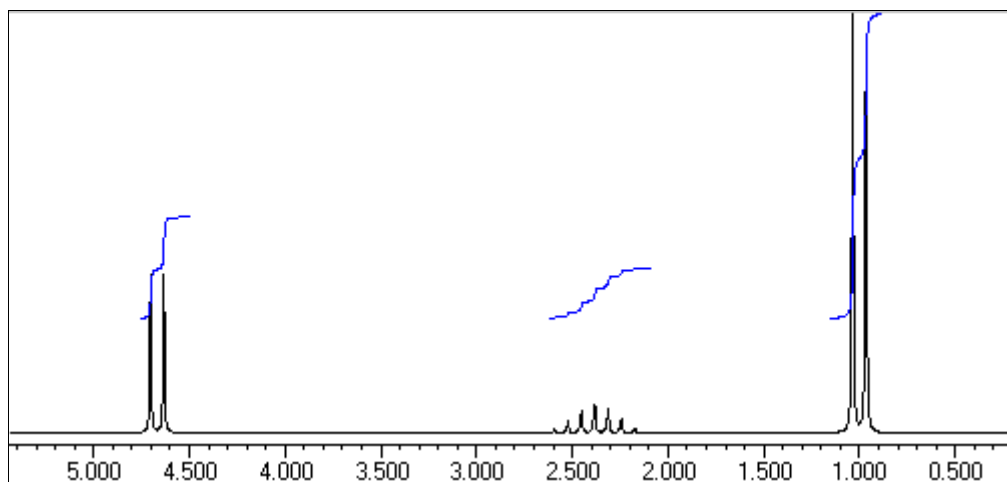
Et organisk stof analyseres ved en elementaranalyse. Stoffet viser sig udelukkende at indeholde C, H og N. Ved fuldstændig forbrænding af 0,7560 g af stoffet blev der dannet 1,6880 g CO₂ og 1,0368 g H₂O.

- Beregn stoffets empiriske formel.

Ved massespektroskopi bestemmes stoffets molare masse til 59,13 g/mol.

- Bestem stoffets molekylformel.
- Tegn de mulige strukturformler af stoffet.

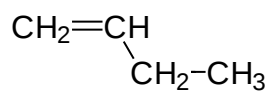
Nedenstående figur 1 viser stoffets ¹H NMR-spektrum.



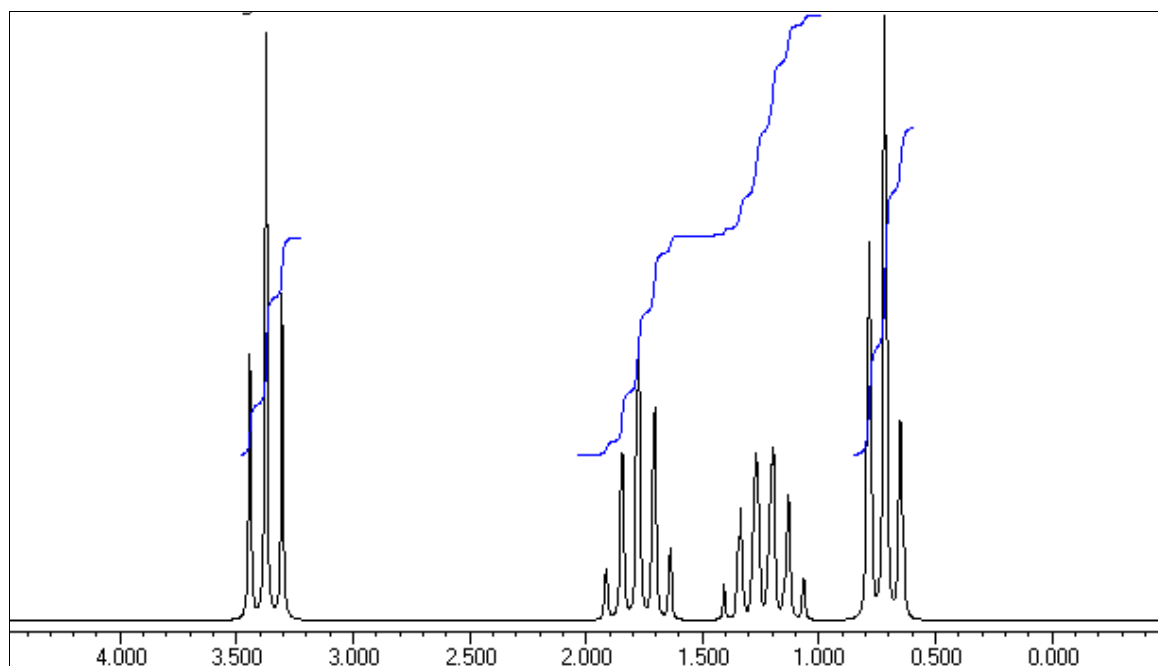
figur 1. ¹H-NMR-spektret af stoffet. Aksen angiver kemisk skift i ppm. Integralkurver er indtegnet.

- Bestem forholdet mellem antallet af H-atomer i de forskellige grupper af kemisk ækvivalente H-atomer og kommenter beliggenheden af disse.
- Forklar koblingsmønsteret i NMR-spektret og identificer stoffet.
- Tegn stoffets strukturformel i ChemSketch og beregn stoffets H NMR-spektrum i gNMR programmet.

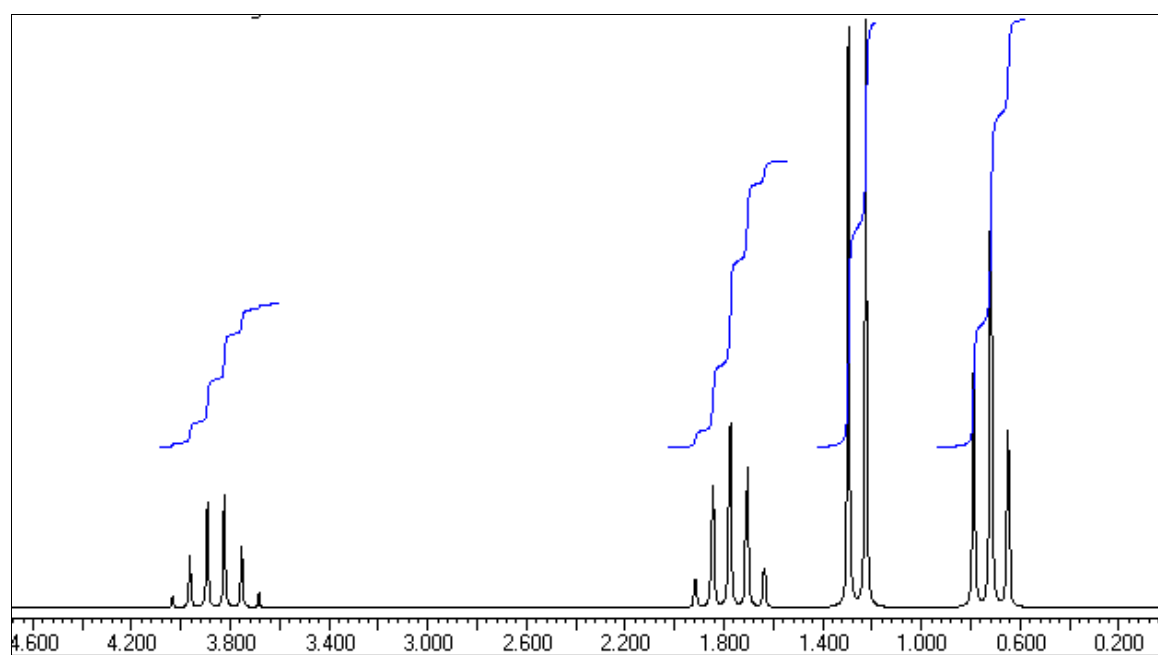
Opgave 2



Stoffet but-1-en reagerer med hydrogenchlorid, og danner to stoffer A og B. De to produkter adskilles, og der optages ^1H NMR-spektre af A og B.



figur 1. ^1H -NMR-spektrum af stof A. Aksen angiver de kemiske skift i ppm. Integralkurver er indtegnet.



figur 2. ^1H -NMR-spektrum af stof B. Aksen angiver de kemiske skift i ppm. Integralkurver er indtegnet.

- Identificer A og B idet du inddrager integralkurver, kemiske skift og koblingsmønstre i de to ^1H NMR-spektre i din argumentation.
- Kontroller dit svar ved at tegne A og B i ChemSketch og få beregnet ^1H NMR-spektrene i gNMR programmet.
- Gør rede for hvilket af de to stoffer du forventer, der dannes mest af.

Opgave 3

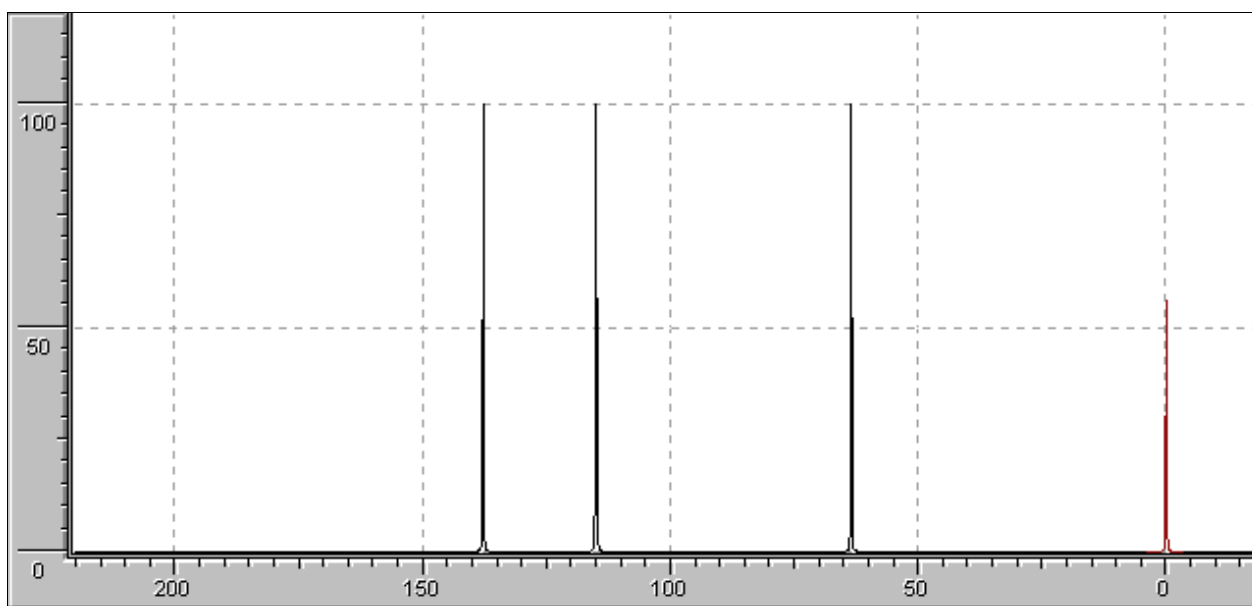
Et organisk stof indeholder kun C, H og O.

Ved massespektroskopi bestemmes stoffets molare masse til 58,09 g/mol.

Stoffets kemiske egenskaber:

- reagerer neutralt i vandig opløsning
- affarver bromvand
- oxideres af kaliumdichromat i sur væske, oxidationsproduktet reagerer surt i vandig opløsning

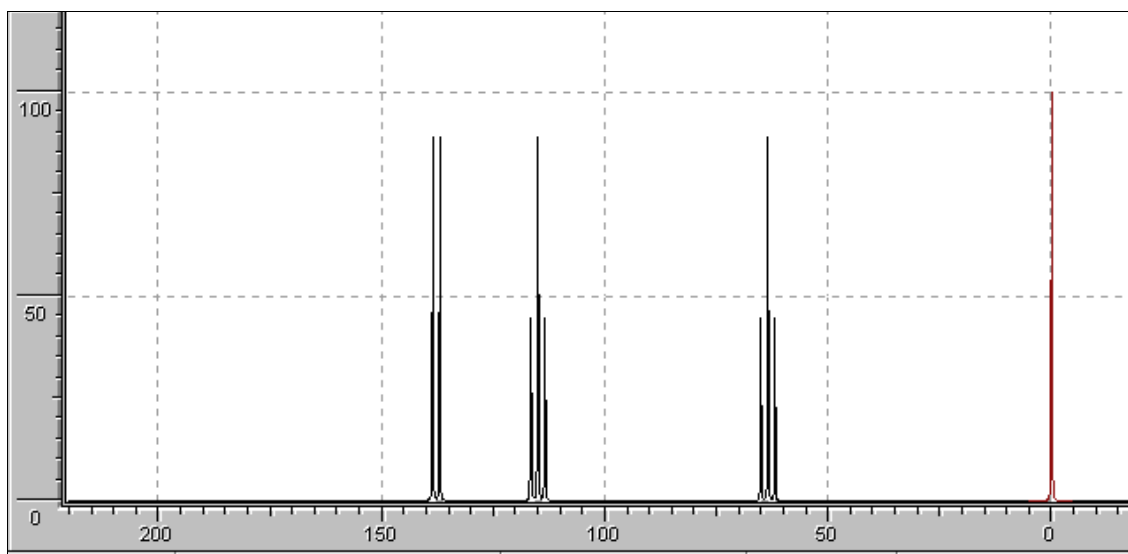
I figur 1 vises det protondekoblede ^{13}C NMR-spektrum af stoffet.



figur 1. Det protondekoblede ^{13}C NMR-spektrum af stoffet. De kemiske skift er angivet i ppm. Signalet ved 0 ppm skyldes TMS.

a. Anfør antallet af C-, H- og O-atomer i molekylet.

I figur 2 vises off-resonans ^{13}C NMR-spektret af stoffet.



figur 2. Off-resonans ^{13}C NMR-spektret af stoffet. De kemiske skift er angivet i ppm. Signalet ved 0 ppm skyldes TMS.

- b. Gør rede for hvor mange H-atomer de forskellige C-atomer er bundet til.
- c. Gør rede for C-atomernes hybridisering.
- d. Gør rede for hvilken funktionel gruppe stoffet indeholder.
- e. Tegn stoffets strukturformel.
- f. Brug HNMR-vieweren til at vise ^1H NMR-spektret af stoffet.
- g. Forklar det komplicerede koblingsmønster i stoffets ^1H NMR-spektrum.

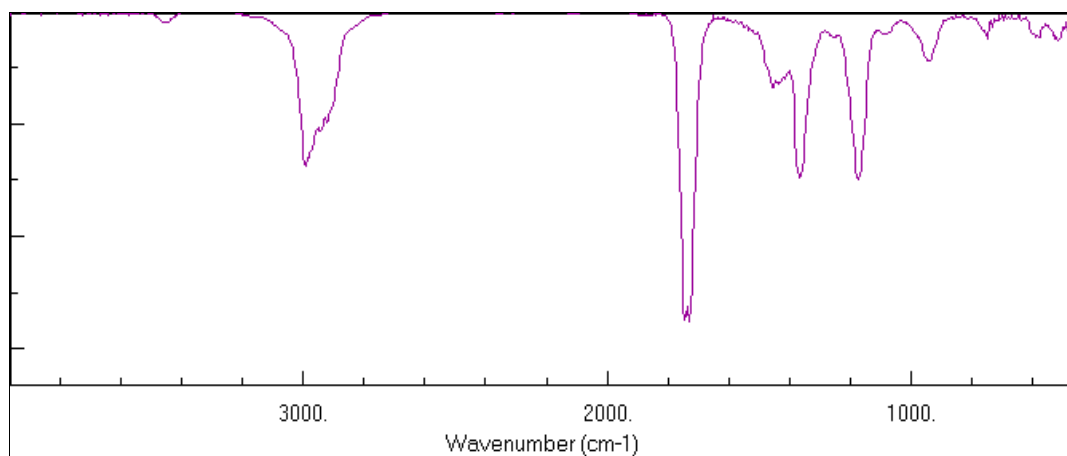
Spektroskopiopgaver, som kan løses ved hjælp af Databog fysik kemi

Her følger 3 opgaveeksempler. Flere opgaver af denne type ligger på kemis hjemmeside – se side 104.

Opgave 1

Et organisk stof indeholder i masseprocent 66,7% C og 11,1% H.

Stoffet har følgende IR- og ^1H NMR-spektre:



figur 1. IR-spektrum.



figur 2. NMR-spektrum. Kemisk skift i ppm. Integraler er indtegnet.

Ifølge stoffets massespektrum er den molare masse 72 g/mol.

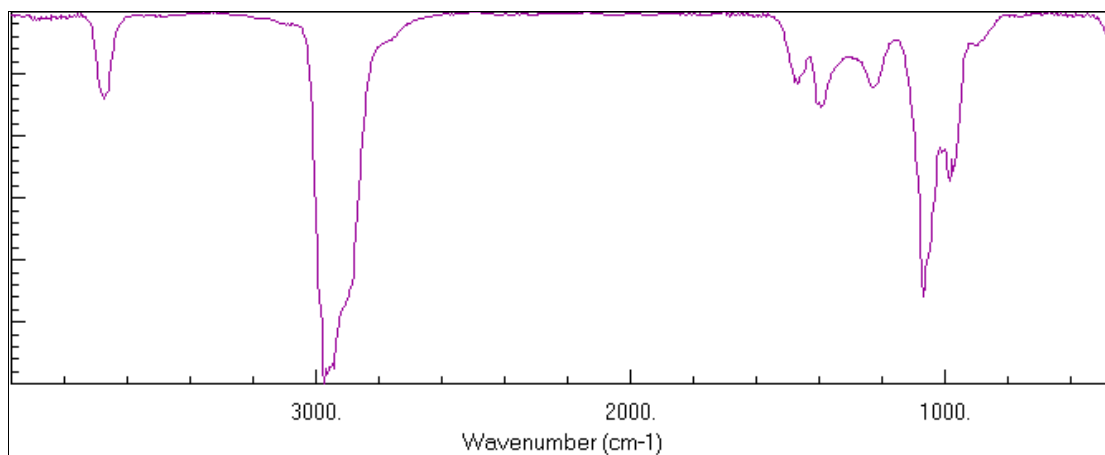
- Opskriv stoffets molekylformel.
- Forklar ud fra IR-spektret, hvilke vibrationer der er i stoffet.
- Forklar hvilke oplysninger ^1H NMR-spektret giver om stoffet.

Det vides endvidere, at stoffet har et kogepunkt på 80 °C, samt at det ikke kan oxideres af Tollens reagens.

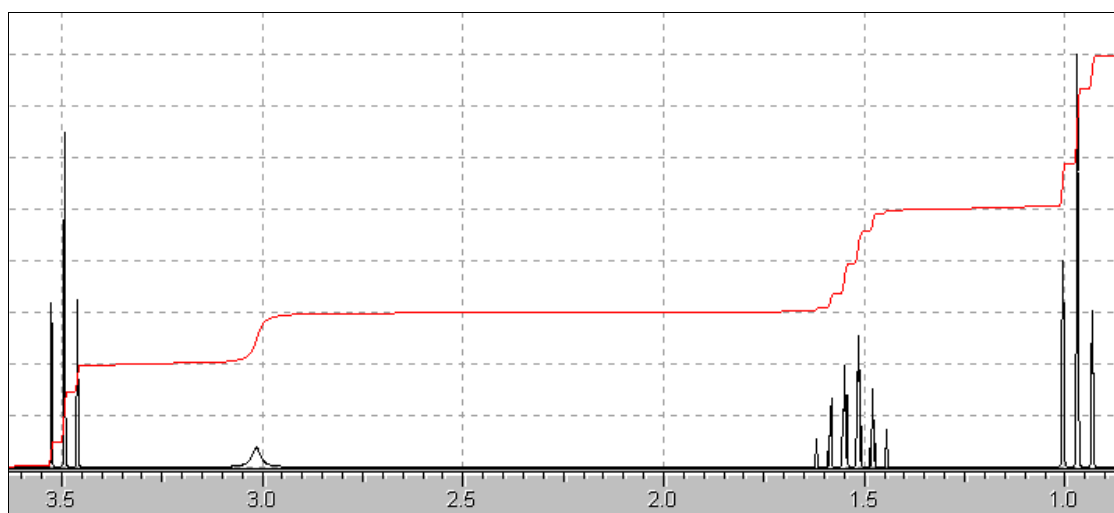
- Opskriv stoffets strukturformel og navn.

Opgave 2.

Nedenfor vises IR- og ^1H NMR-spektret af det organiske stof $\text{C}_a\text{H}_b\text{O}_c$.



figur 1. IR-spektrum.



figur 2. NMR-spektrum. Kemisk skift i ppm. Integraler er indtegnet.

- Beskriv hvilke oplysninger IR-spektret giver om molekylet. Opskriv herunder både en funktionel gruppe, som molekylet indeholder, samt en det ikke indeholder.
- Ved fuldstændig forbrænding af 1,503 g stof fås 3,301g CO_2 og 1,801g H_2O . Opskriv stoffets molekylformel.
- Stoffet kan oxideres af $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$ i sur opløsning, idet der dannes Cr^{3+} -ioner samt et aldehyd. Opskriv strukturformel og navn for selve stoffet, samt for det aldehyd der dannes.
- Opskriv og afstem reaktionsskemaet for den omtalte redoxreaktion.
- Forklar ^1H NMR-spektrrets udseende.

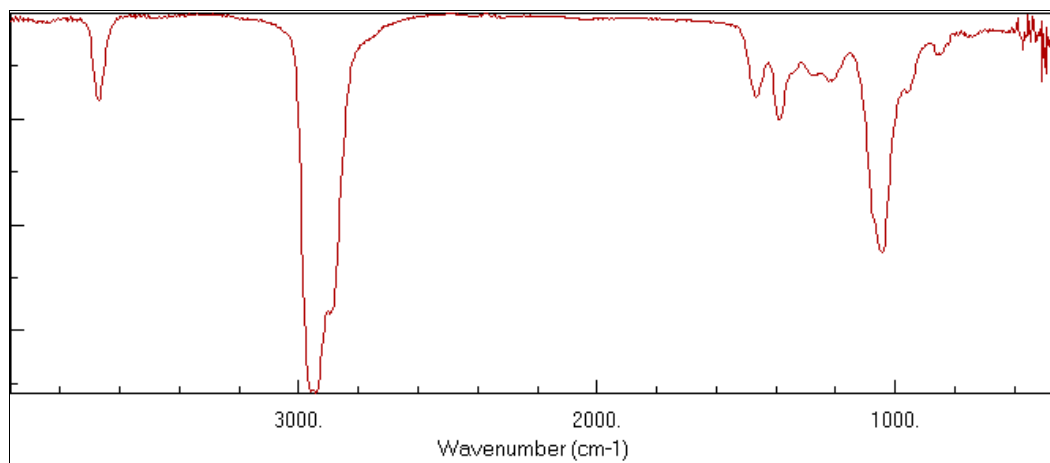
Opgave 3.

Isomere butanoler.

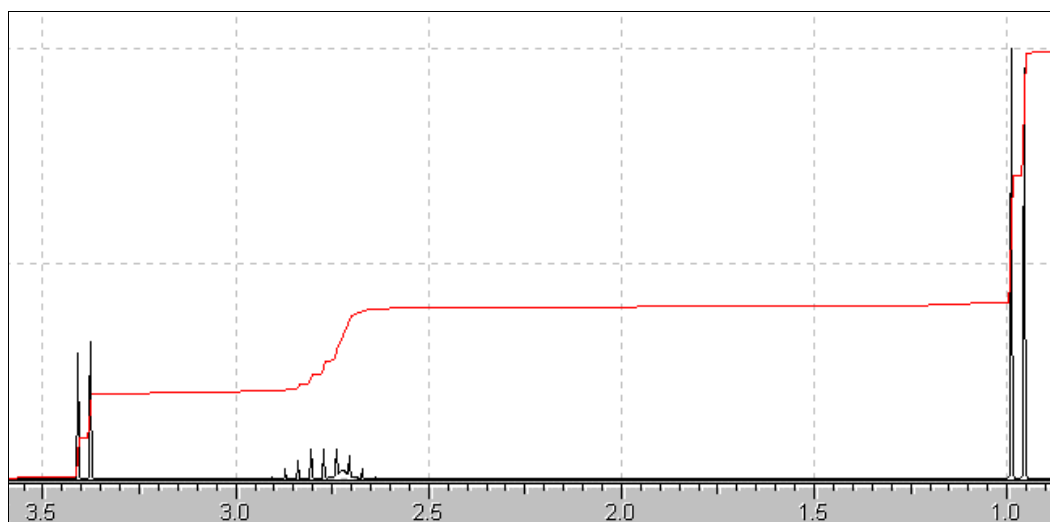
- a. Opskriv strukturformler og systematiske navne for de 4 isomere butanoler.

Nedenfor vises IR-spektret for et af de isomere molekyler, samt ^1H NMR-spektre for 2 andre af de isomere butanoler.

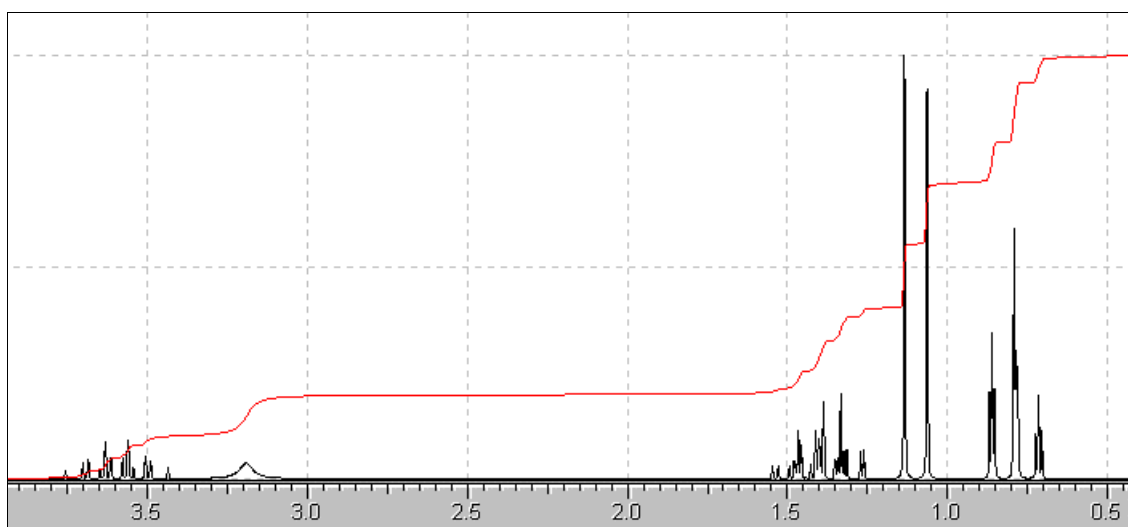
- b. Forklar IR-spektrrets udseende.
Er det muligt at afgøre, hvilken af de isomere, der har det viste IR-spektrum?
- c. Hvilken af de 4 isomere vil have det simpleste NMR-spektrum?
Hvordan vil dette spektrum se ud?
- d. Forklar de 2 viste NMR-spektre idet kemisk skift, koblingsmønster og integraler omtales.
Hvilke 2 isomere har de viste spektre?



figur 1. IR-spektrum.



figur 2. NMR-spektrum. Kemisk skift i ppm. Integraler er indtegnet.



figur 3. NMR-spektrum. Kemisk skift i ppm. Integraler er indtegnet.

Eksamen

Eksempel på eksamensspørgsmål i NMR-spektroskopi i tilknytning til kapitlet: *NMR- og IR-spektroskopi som valgfrit område.*

Forudsætninger:

I forberedelseslokalet har eleven adgang til de sædvanlige hjælpemidler. Herudover er der adgang til en computer, der er forsynet med følgende programmer: *HNMR-viewer*, *CNMR-viewer*, *ChemSketch 3.5* og *gNMR*.

I tilfælde af at det ikke lykkes for eleven at finde frem til strukturen for molekylet, ligger der filer på computeren (under anonymiserede navne, som kun er kendt af læreren). Filerne kan bruges i fortsættelsen med simuleringen i *gNMR*.

¹H-NMR-spektroskopi

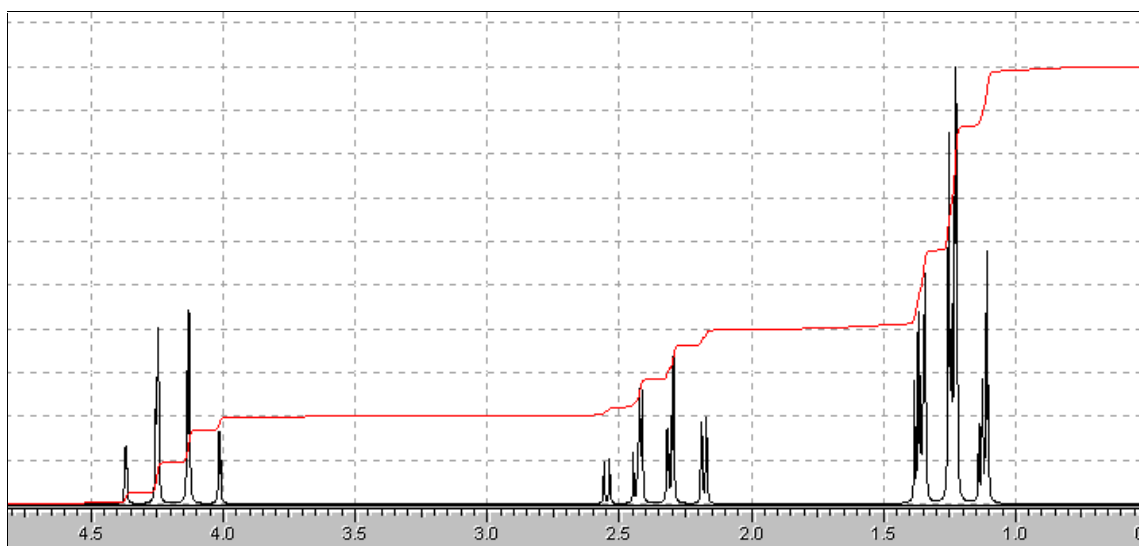
På vedlagte **figur 1** findes ¹H-NMR-spektret for et stof med molekylformlen C₅H₁₀O₂ og det systematiske navn ethylpropanoat.

Der ønskes en gennemgang af de overvejelser, du skal gøre for at forklare stoffets strukturformel ud fra spektret.

Du skal herunder forklare begreberne integralkurve, kemisk skift og finstrukturopsplitning.

Under eksaminationen kan du demonstrere en simulation af et NMR-spektrum for det pågældende stof med programmet *gNMR*.

(Husk, at du først er nødt til at tegne strukturformlen i *ChemSketch 3.5* og importere strukturen i *gNMR*-programmet som en mol-fil.)



Figur 1: ¹H-NMR-spektrum for ethylpropanoat

Analyse af farvestofblanding ved spektrofotometri og regneark

John Thomas Jacobsen

Indledning

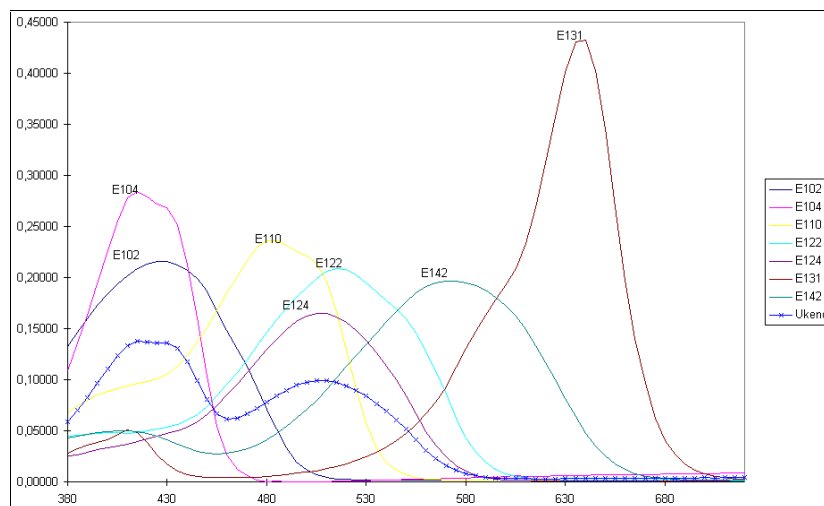
Regnearket *E_farver.xls* indeholder data og spektre for syv forskellige farvestoffer med E-numre. Ved hjælp af arket kan man identificere to farvestoffer, der indgår i en blanding, og bestemme deres koncentration.

Brugervejledning

Åbn regnearket *E_farver.xls* og **vælg** fanebladet Data.

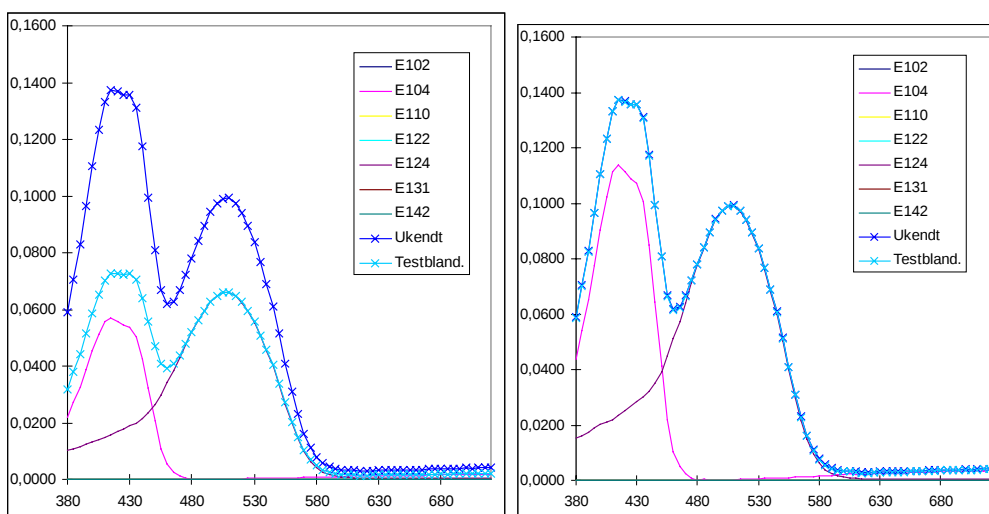
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q	R
1	Analyse af en farvestofblanding ved spektroskopi og regneark									Indtast formodet koncentration (1 -10 mg/L) for farvestoffer								
2	Bølgelængde	Spektraldata for E-nr farver, c = 5 mg/L							0102010401100122012401310142									
3	nm	E102	E104	E110	E122	E124	E131	E142		0	1	0	0	2	0	0	Ukendt Testbland.	
4	720	0,00184	0,00895	0,00180	0,00193	0,00073	0,00227	0,00128		0,0000	0,0018	0,0000	0,0000	0,0003	0,0000	0,0000	0,00420,0021	
5	715	0,00162	0,00866	0,00175	0,00192	0,00087	0,00286	0,00127		0,0000	0,0017	0,0000	0,0000	0,0003	0,0000	0,0000	0,00420,0021	
6	710	0,00185	0,00848	0,00188	0,00206	0,00085	0,00407	0,00140		0,0000	0,0017	0,0000	0,0000	0,0003	0,0000	0,0000	0,00410,0020	
7	705	0,00177	0,00832	0,00180	0,00193	0,00070	0,00561	0,00144		0,0000	0,0017	0,0000	0,0000	0,0003	0,0000	0,0000	0,00390,0019	
Data Rene og Ukendt																		

Man kan se spektrene for de rene farvestoffer og spektret for blandingen ved at vælge fanebladet *Rene* og *ukendt*. Ved at sammenligne de rene farvestoffers spektre med blandingens spektrum (kurven markeret med kryds), kan man få en ide om, hvilke farvestoffer blandingen indeholder.



► Data Rene og Ukendt

I to af cellerne fra J2 til P2 (svarende til netop de to aktuelle farvestoffer) indtaster brugeren de to farvestoffers formodede koncentrationer. De andre farvestoffers koncentrationer skal fortsat være nul. Regnearket adderer de to farvestoffers absorbanse og viser den resulterende absorbanse i kolonne R (overskrift *Testblanding*). Indtastning af formodede koncentrationer gentages, indtil kurverne *Ukendt* og *Testblanding* er sammenfaldende. Så er farvestofferne i blandingen identificeret, og deres koncentrationer i blandingen er bestemt.



a) ikke sammenfald

b) sammenfald af Ukendt og testblanding

Teorien bag regnearket

Beregningerne i regnearket bygger på *Lambert-Beers Lov*:

$$A = [X] \cdot \epsilon(X)_\lambda \cdot l$$

Hvor

A er absorbansen ved bølglængde λ

$[X]$ er den aktuelle koncentration af stof X

$\epsilon(X)_\lambda$ er en stofkonstant, den molare ekstinktionskoefficient, som er afhængig af bølglængde

l er lysvejens længde gennem opløsningen

Lambert-Beers lov udtrykker proportionalitet mellem absorbans og aktuell koncentration. I regnearket beregnes en opløsnings absorbans A ved et givet farvestofindhold ud fra en målt absorbans A_s ved "standardindholdet" 5 mg/L.

$$A_x = \frac{A_s(5 \text{ mg/L})}{5 \text{ mg/L}} \cdot c(x)$$

Indeholder en blanding to farvestoffer, X og Y, kan blandingens absorbans, ved en vilkårlig bølglængde, udtrykkes som en sum af stoffernes absorbanser ved denne bølglængde.

$$A_{\text{blanding}} = A_x + A_y = \frac{A_s(5 \text{ mg/L})}{5 \text{ mg/L}} \cdot c(X) + \frac{A_s(5 \text{ mg/L})}{5 \text{ mg/L}} \cdot c(Y)$$

Blandingens absorbans beregnes som en vægtet sum af de enkelte farvestoffers absorbans. Vægtfaktorerne $c(X)$ og $c(Y)$ er blandingens aktuelle indhold (i mg/L) af farvestoffer. I regnearket foregår denne beregning i kolonnerne J til P. Blandingens absorbans summeres i kolonne R og kan umiddelbart sammenlignes med blandingens målte absorbans, som står i kolonne Q.

	A	B	C	D		J	K		Q	R
1	Analyse af en farvestofblanding ved spektroskopi									
2	Bølgelængde	Spektraldata for E				0	1		Sammenlign disse	
3	nm	E102	E104	E110		E102	E104		Ukendt	Testbland.
4	720	0,00184	0,00895	0,00180		=B4/5*J\$2	=C4/5*K\$2		0,0042	=SUM(J4:P4)
5	715	0,00162	0,00866	0,00175		=B5/5*J\$2	=C5/5*K\$2		0,0042	=SUM(J5:P5)
6	710	0,00185	0,00848	0,00188		=B6/5*J\$2	=C6/5*K\$2		0,0041	=SUM(J6:P6)

Ideer til brug af regnearket

Man kan overføre absorbansdata fra en dataopsamling til kolonnen *Ukendt*. Man skal så være opmærksom på, at målingerne foretages ved de samme bølgelængder som i regnearket. Absorbansmålinger på blanding og rene farvestoffer bør være lavet med det samme spektrofotometer. Regnearket kan bruges til en elevøvelse, hvor eleverne manuelt måler absorbanser af fx en vingummiopløsning. De indtaster deres resultater i *Ukendt*-kolonnen og bruger regnearket til at bestemme arten og indholdet af farvestoffer i vingummien. Opløsninger kan passende laves med en koncentration på 5 mg/L.

Elektroniske bilag

Regneark i Excel 5.0 format kan hentes fra kemis hjemmeside <http://ke.gymfag.dk>. Filen *E_farver.xls* er beskrevet i dette indlæg. Yderligere findes *E_farver2.xls* og *E_farver3.xls*, hvor den ukendte blanding indeholder to andre af de mulige farvestoffer. Endelig findes *E_farver6.xls*, hvor farvestoffernes koncentrationer ikke er pæne runde tal. Regnearksfilerne er ikke beskyttede, og brugere kan frit rette i dem efter behag.

Eksamen

Ved skriftlig studentereksamen har der været stillet opgaver med en problemstilling, der ligner den i regnearket. Den traditionelle løsningsstrategi er opstilling af to ligninger med to ubekendte; ligningerne kan løses, hvis man for eksempel kender de molare ekstinktionskoefficienter for de to absorberende stoffer ved to forskellige bølgelængder. Regnearket illustrerer en mere direkte løsningsstrategi over for den kemiske problemstilling: Hele spektre lægges til grund for besvarelsen, og løsningsmodellen fokuserer på det fundamentale princip, at absorbansen er en additiv størrelse og proportional med indholdet af absorberende stof. Det kan tænkes, at denne forenkling af problemstillingens matematiske aspekter vil være til fordel for eleverne.

Det er meget ønskeligt, at der indhøstes erfaringer omkring anvendelse af nye regnetekniske hjælpemidler ved skriftlig eksamen i kemi. Umiddelbart synes der at være naturlige anvendelser af regneark inden for områder som kemisk ligevægt (herunder syrebase ligevægte), reaktionskinetik og problemstillinger som den forelagte i dette indlæg (store datamængder).

Det er håbet, at dette indlæg kan inspirere til forsøgsansøgninger. En overkommelig forsøgsmodel kunne være, at lade anvendelse af regneark indgå i en del af en af de tre opgaver, som traditionelt stilles til eksamen i kemi.