

Kursussite: [www.plan-k.dk/webkemi](http://www.plan-k.dk/webkemi)

## Oplæg til tematisk arbejde

Tænk på et aktuelt kemisk/biokemisk miljøemne (fx Nitrat og Nitrit, Nitrogenoxid, Nitrogenoxid, Nitrogenoxid)  
Alternativt kan du afprøve emnet om Bisphenol A og kildevand

- Søg *Bisphenol A* på [Google](#)
  - Er det en farbar vej? - Vurdér antal links
- Søg på *Bisphenol A kildevand* i [InfoMedia](#) (Dagblade - Alle år)
  - Hvad er problemet?
  - Hvad siger politikerne?
- Søg Bisphenol A på [Wikipedia](#) (både engelsk og dansk). Hvor stor er vandopløseligheden? Hvad hedder stoffet også?
- Tegn Bisphenol A i ChemSketch
  - Find IUPAC-navn med ChemSketch
  - Sæt formel og 3D-figur i et Worddokument eller en PowerPoint - brug evt. [srip32.exe](#)
- Gem 3D-strukturen som animeret gif.
  - Læg billedet i en PowerPoint eller på en webside
- Find CAS-nummer
  - Find klassificering og mærkning for det rene [stof](#)
- Hvad siges om grænseværdien (Søg fx på *grænseværdi ppm bisphenol a*)
  - [Miljøstyrelsen Bilag D3 –Stofprofil for bisphenol A](#)
  - [Bisphenol A er under mistanke for kromosomskader](#)
- Hvad der [plastik](#) ?
  - Hvad er monomer og polymer?
- Hvad er [Polycarbonat](#)?
  - Termoplast eller hærdeplast og hvad betyder det?
- Hvorfor er der Bisphenol A i drikkevandsflasker og sutteflasker?
- Søg *Polycarbonate* på [Wikipedia](#) (både engelsk og dansk)
- Tegn Reaktionen mellem Fosgen og Bisphenol A i ChemSketch og fortsæt så der fremkommer en lille kæde (bl.a. Syre-base-reaktion)
- [Hvad siger plastindustrien om Bisphenol A](#)
- Søg i [Miljø og Sundhed](#)
- Overvej hvorledes du vil tilrettelægge et tematisk forløb med dine elever
  - Hvad skal elevernes produkter indeholde?
  - Hvorledes skal elevernes produkter præsenteres?
  - Indgår elementer af emnet i [Fælles mål?](#)
- Påbegynd et undervisningsmateriale til et projektforbud!

---

## ChemSketch og skabeloner

- Indsæt [labudstyr.sk2](#) i ChemSketch som beskrevet i [vejledn.pdf](#). Prøv at "oprette" en lille forsøgsopstilling.
- Tegn et stykke apparatur som du bruger i din undervisning

# Elementær organisk kemi med *ChemSketch*

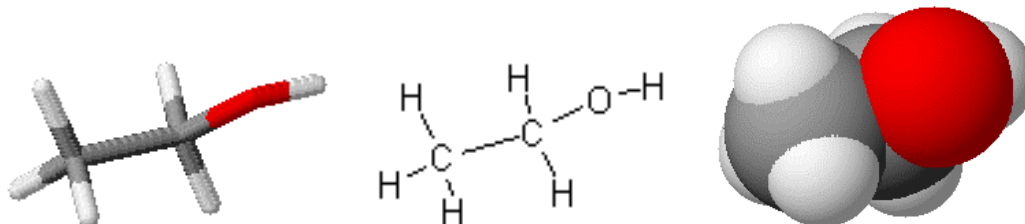
*Andreas Vedel, Keld Nielsen og Poul Thulstrup*

## 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

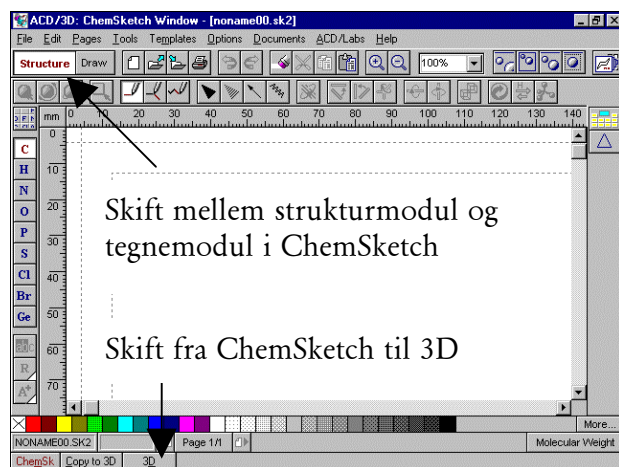


## Overblik over *ChemSketch*

*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).

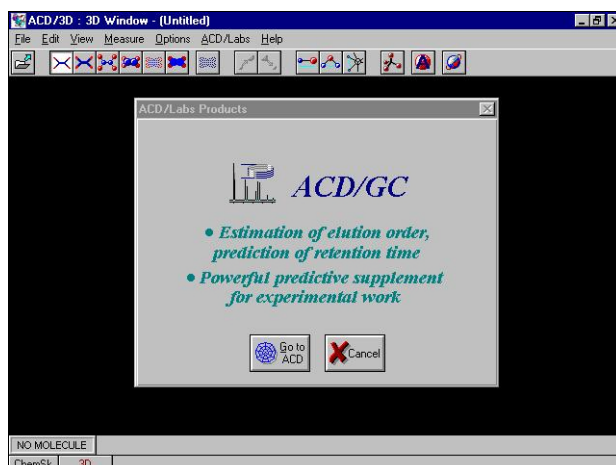
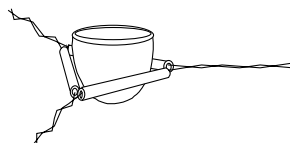
Programdelen ChemSketch indeholder et strukturmodul og et tegnemodul (se figur 19). 3D-viewer er et selvstændigt program (se figur 20).



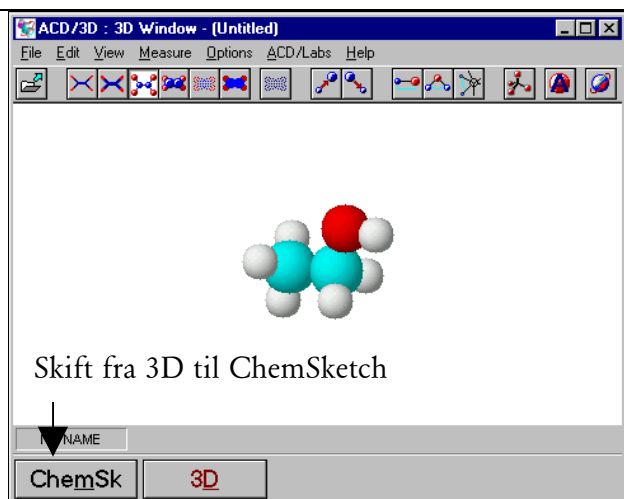
figur 19. ChemSketch med aktivt strukturmodul. For at skifte til 3D-vieweren trykkes på knappen 3D.

## 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.



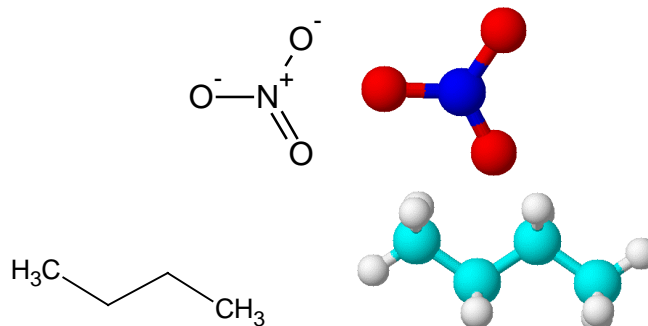
figur 20. 3D-viewer. For at aktivere tegneprogrammet trykkes på knappen *Chemsk*.

## 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  $\text{HNO}_3$  eller ioner som  $\text{NO}_3^-$  må man anvende formelle ladninger i strukturen (se figur 21).

Det går nemmere at tegne carbonhydrider 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:

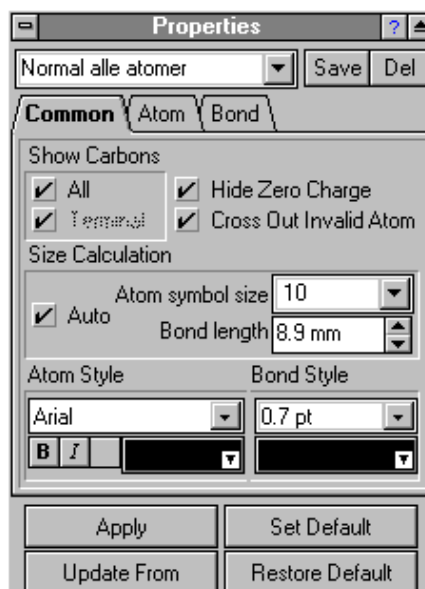
- **Vælg** menuen **Tools | Structure Properties**

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**



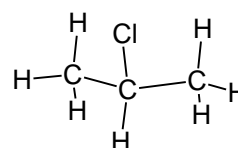
figur 22.

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**

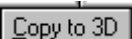
Strukturen kan roteres:

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



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


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

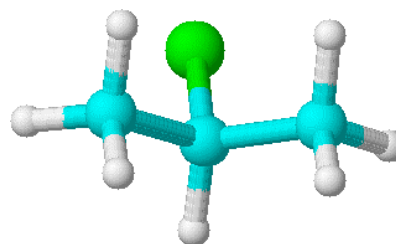
- **Markér** struktur | **Tryk** 

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-chlorpropan i 3D-viewer.



Man kan overføre flere markerede strukturer fra strukturmodulet i ChemSketch til 3D-viewer. Strukturerne bør da *forinden én for én* være udsat for 3D-optimering i strukturmodulet 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

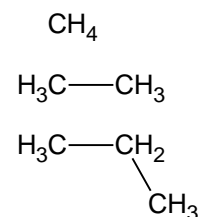
*Opgaverne kan stilles til elever som første gang skal anvende ChemSketch.*

### Opgave 1

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


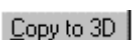

Hvis knapperne ikke allerede er aktive: **Tryk**  og 

- **Klik** på tegnefladen. Den kondenserede strukturformel for methan, CH<sub>4</sub>, tegnes
- **Klik** på C-atomet i formlen for methan
- **Klik** på et C-atom i formlen for ethan



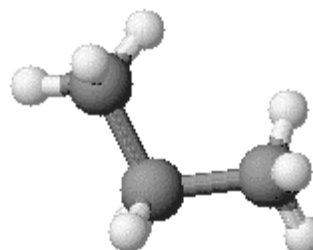
figur 25. Methan, ethan og propan.

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

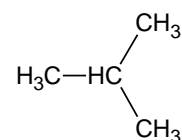
- *Vælg* strukturmodulet i ChemSketch: *Tryk* **Structure** **Draw**

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

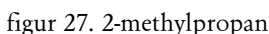
- *Tegn* formler for butan, pentan, hexan, heptan, octan, nonan og decan
- *Vælg* tegnemodulet i ChemSketch: *Tryk* **Structure** **Draw**
- *Tryk* **abc** | *Klik* i tegnefeltet ved en formel | *Indtast* molekylets systematiske navn i tekststruden
- *Arranger* strukturformler og navne pænt på siden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

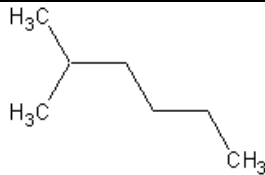
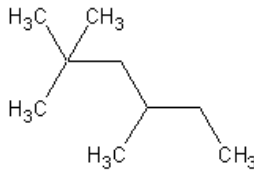
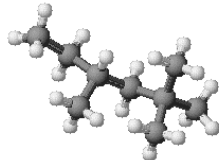
Nu skulle der gerne være tegnet en formel for 2-methylpropan – se figur 27. 

- *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

<i>Navn</i>	<i>Struktur</i>
	
4-ethyldecane	
	
	

## 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:*

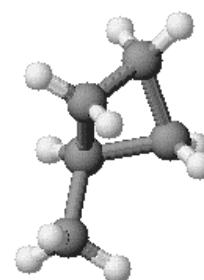
- **Tryk**  og **klik** på **to naboatomer**

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

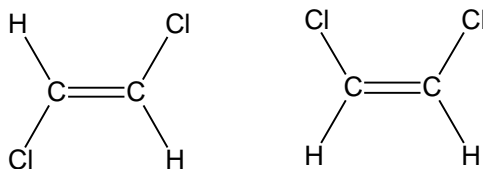
BondAngle(C 2, C 1, C 4) = 81.683 Deg

## Undervisningsforløb med alkenener 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 tripebindinger 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 tripebinding, 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



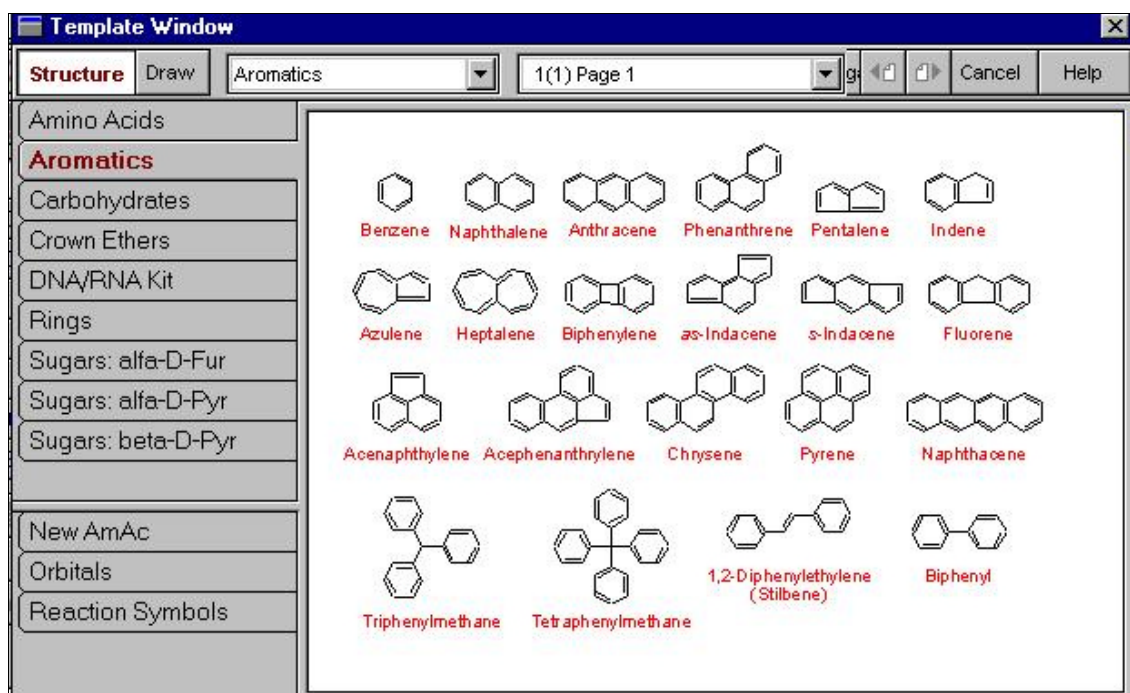
## Opgave 9

- *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 **T**emplates | menuen **T**emplate **W**indow | stofypen **A**romatics
- *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 **T**ools | **S**how **A**romaticity - hvad iagttager du?
- *Vælg* menu **H**ide **A**romaticity - 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)

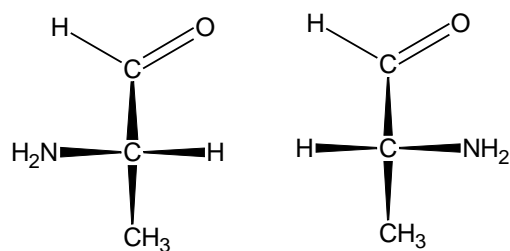
## Phenylalanin

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** formlen 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.

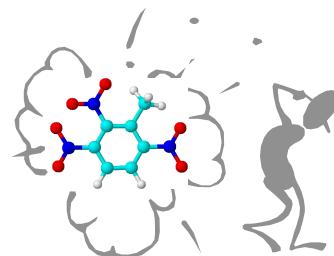
### Sprængstoffer

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

- **Tegn først** toluen

Nitrogruppen  $-\text{NO}_2$  hentes fra *Table of Radicals*

- **Klik**  og **klik** på  $-\text{NO}_2$  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 "NO<sub>2</sub>-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.

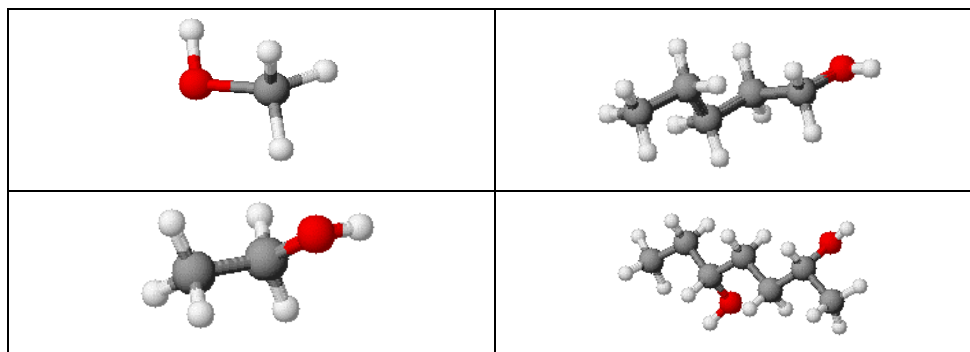
### Alkoholer

- **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?



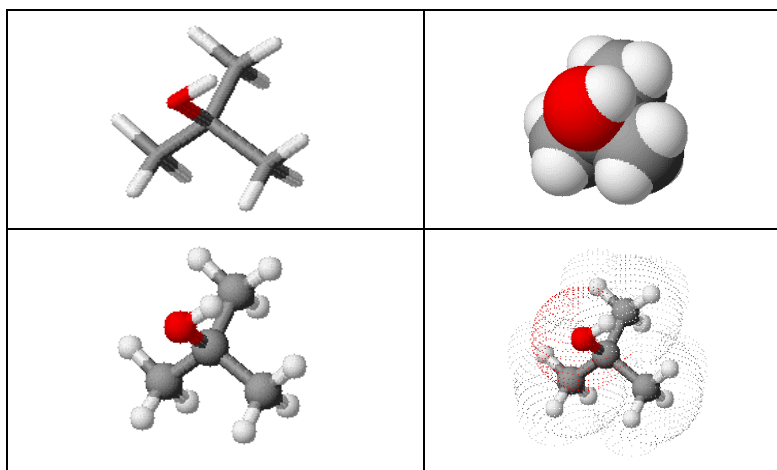
figur 30

- *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. Kontrollér 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.

<b>Spørgsmål 1</b>
<i>Teoretisk emne: Alkoholer</i> <b>Stikord</b> <i>du evt. kan benytte i gennemgangen</i> <ul style="list-style-type: none"><li>- forskellige typer af alkoholer</li><li>- navngivning</li><li>- alkoholors opløselighed</li><li>- kemiske egenskaber</li><li>- eliminationsreaktioner med alkoholer</li><li>- fremstilling af en alkohol</li></ul>
<b>Du skal inddrage vedlagte figur i din gennemgang</b> <i>Eller</i> <b>anvende computerprogrammet ChemSketch i din gennemgang.</b>
<b>Spørgsmål 2</b>
<i>Teoretisk emne: Carbonhydrider</i> <b>Stikord</b> <i>du evt. kan benytte i gennemgangen</i> <ul style="list-style-type: none"><li>- eksempler på mættede og umættede carbonhydrider</li><li>- navngivning af mættede og umættede carbonhydrider</li><li>- strukturisomeri og cis-trans-isomeri</li><li>- forbrænding af carbonhydrider</li><li>- substitutions-, additions- og eliminationsreaktioner</li></ul>
<b>Computerprogrammet ChemSketch kan inddrages i din gennemgang.</b>

## 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](http://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.

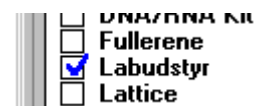
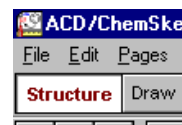
## Bilag 2: Vejledning til laborieudstyrsskabelon

### Installationsvejledning


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



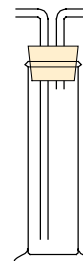
#### Nu er du klar til at bruge templatens (skabelonens):

- *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

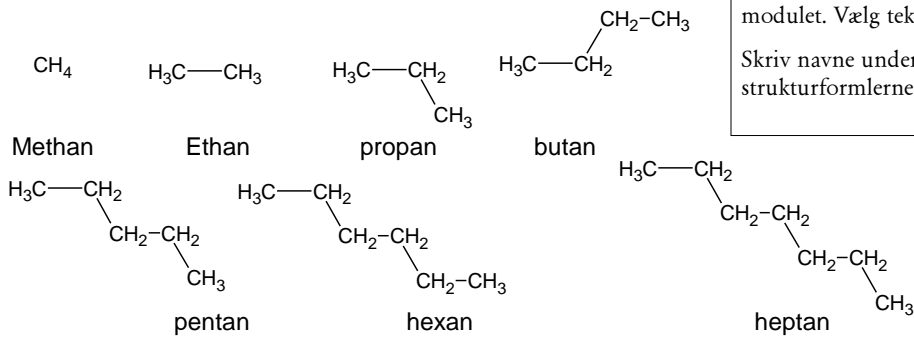
Chemsketch-opgave, som besvares i Structure modulet. Der er to sider i opgaven.

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**.

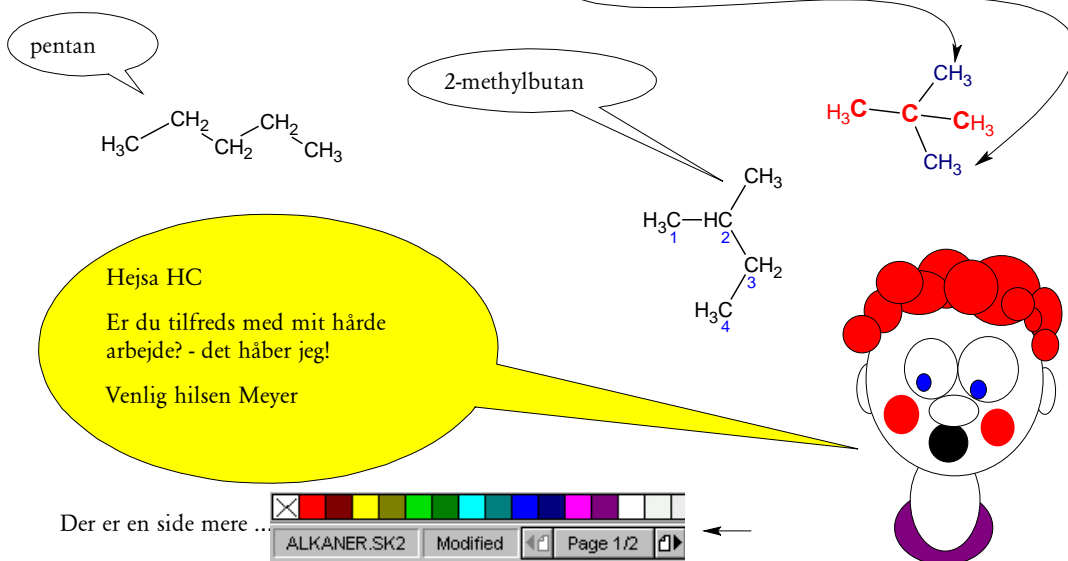
Opgave 1: Tegn strukturformler for uforgrenede alkaner med fra 1 C-atomer til 7 C-atomer.



Opgave 2: Skift til DRAW modulet. Væg tekst-værktøjet:

Skriv navne under strukturformlerne

Opgave 3: Der findes tre forskellige strukturer svarende til formlen C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>. 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.

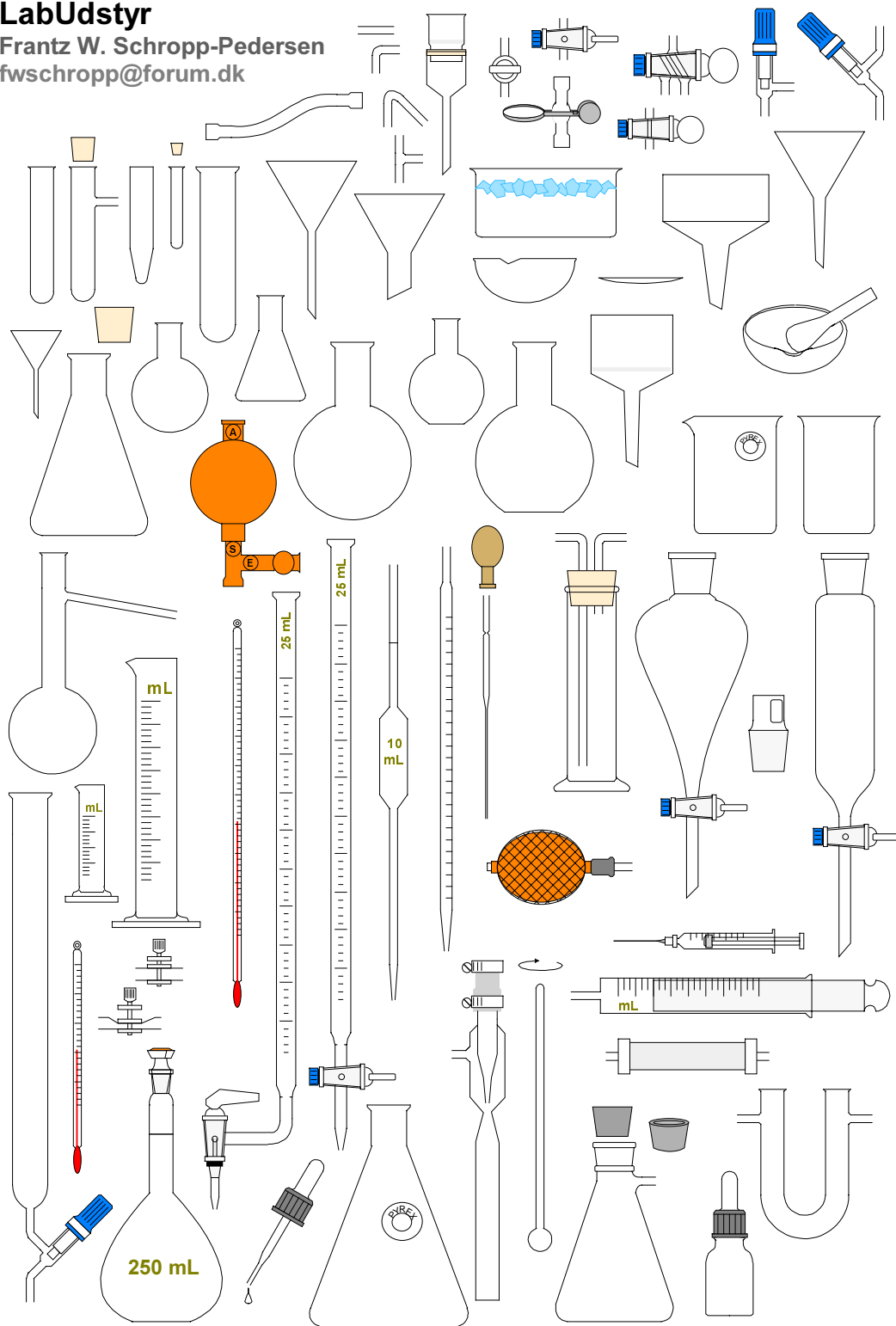


(Side 2 er ikke vist i bilag 3A)

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

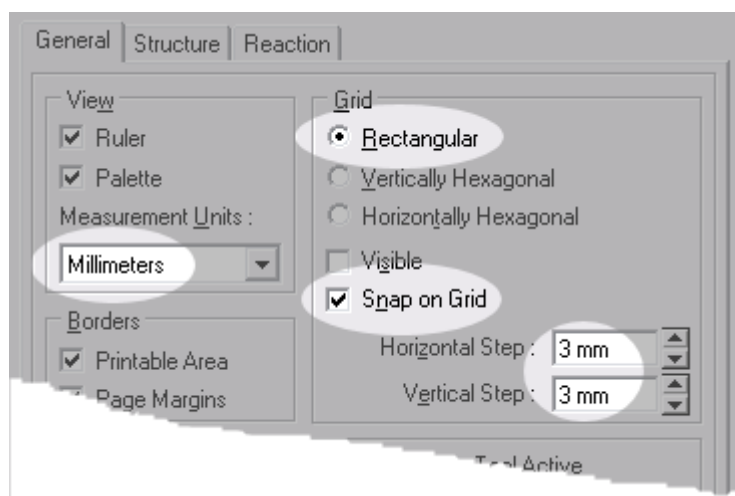
### LabUdstyr

Frantz W. Schropp-Pedersen  
fwschropp@forum.dk





## Installationsvejledning

- Udpak (unzip) den hentede fil (labudstyr.zip). Hvis du mangler et 'udpakke-program' kan du hente det gratis 7-Zip (<http://www.7-zip.org>).
- Flyt skabelon-dokumentet (labudstyr.sk2) vha. Windows Stifinder til mappen Template i din ChemSketch-mappe.
- Start ChemSketch.
  
- Vælg menupunktet Templates > Template Organizer...
- Tryk på New... i dialogboksen.
- Skriv Labudstyr i feltet Template.
- Brows 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 (den skal være aktiv!).
- Vælg menupunktet Options > Preferences... og udfyld dialogen sådan her:



- Klik på OK.

Nu er du klar til at bruge den installerede skabelon.

- Tryk på template-knappen .
- Vælg skabelonen ved at klikke på fanebladet Labudstyr til venstre.
- Efter at have klikket på den ønskede tegning i skabelonen, kan den indsættes i dit dokument med et venstre-klik. Du kan indsætte flere eksemplarer med yderligere venstre-klik.
- Afbryd indsættelse med et højre-klik.
- Husk at mange af tegningerne er sammensat af to eller flere logiske dele som kan benyttes og/eller modificeres hver for sig. Sammensatte tegninger skilles ad med værktøjet .
- For at redigere f.eks. indholdet i en kolbe, kan det være nødvendigt at slå 'Snap on Grid' fra i menuen 'Options'.

Rigtig god fornøjelse