

# Bygga molekylmodeller

Detta är en övning som går ut på att bygga molekylmodeller med hjälp programmet eChem.

Börja med att hämta hem och installera eChem. Du finner detta program under adressen:

<http://hi-ce.org/sciencelaboratory/echem/download.html>

## Alkaner

Starta eChem. Klicka på rutan *Construct* och skriv in ett namn på den molekyl du vill skapa. Skriv "metan".

Nu kommer det en ruta där man kan välja atomer. Klicka på *C* och därefter den övre vänstra varianten av kolatomer ( $sp^3$ ). Klicka en gång i konstruktionsfönstret och det kommer fram en kula med fyra "pinnar". Om du har muspekaren i fönstret, håller vänster musknapp nertryckt samtidigt som flyttar musen så kan du vrida och vända på kulan.

Vrid så att de fyra pinnarna syns. Klicka på *H* för att välja väte. Klicka därefter på ändarna av pinnarna. Här kommer nu sättas väteatomer. Du har nu byggt en metan molekyl. Undersök den från olika håll och jämför med strukturformeln.

Spara modellen. Klicka på *File* i menyraden och därefter *Save molecule as..* Döp filen till metan.alc.

Nästa uppgift är att bygga en etanmolekyl.

Klicka på *File* i menyraden och välj *New molecule*. Döp molekyl till etan. Klicka på *Atoms, C*. Välj  $sp^3$  –kolet och placera kolet i konstruktionsfönstret. Koppla samman en kolatom till den befintliga genom att klicka längst ut på någon av kolets pinnar. Fyll på med väteatomer på de tomma pinnarna på samma sätt som då metanmolekyl byggdes. (Ett snabbt sätt att fylla på med väteatomer på lediga bindningar är att klicka på *Extras* och därefter *Fill in hydrogens*. Jämför den skapade modellen med strukturformeln.

I de nu skapade modellerna är atomerna av samma storlek och bindningarna överdrivna i längd för att vara tydliga. Ett annat sätt, som bättre stämmer med verkligheten, är att visa så kallade kalottmodeller. Klicka på *Visualize*, välj i blädderfönstret ner till höger *Space Fill*.

Spara etan molekyl under namnet etan.alc.

Fortsätt på samma sätt som ovan att bygga och undersöka propan, butan, pentan. Glöm inte att spara molekylerna med filattributet .alc

Lägg märke till den i strukturformlerna raka kolkedjan och jämför denna med hur den ser ut i molekylmodellerna.

Alkanerna hexan, heptan, oktan och nonan finns färdiga och kan hämtas från blädderfönstret i konstruktionsfönstret välj *Open a file...* I katalogen *Samples* finns ett antal färdiga molekyler. Hämta hem oktan.

## Halogenalkaner

Halogenalkan är en alkan där en eller flera väteatomer har bytts ut mot en halogen (fluor, klor, brom eller jod).

Uppgiften är att bygga en monokloretan- och en dikloretanmolekyl.

Välj *Build a new molecule...* i blädderfönstret eller File i menyraden. Kalla molekyl *kloretan*. Bygg en metanmolekyl men ersätt en av väteatomerna med en kloratom. Vrid och vänd på molekyl för att övertyga dig om att det inte spelar någon roll vilken väteatom som ersatts med en kloratom.

Bygg en ny etanmolekyl men här skall två väteatomer ersättas av kloratomer. Kalla molekyl *1,1-dikloretan* och placera båda klorerna på samma kolatom.

Bygg en liknande molekyl som du kallar *1,2-dikloretan* där det sitter ett klor på vardera kolatomen.

Nu ska du jämföra de två olika molekylerna. Klicka på *Visualize* och *Views*. Välj 2 Views. Lägg in de båda varianterna i varsitt fönster och jämför. Observera att kring en enkelbindning så råder full vridbarhet dvs du kan rotera den ena kolatomen i förhållande till den andra

Uppgift: Hämta fram oktanmolekyl och försök avgöra hur många olika monokloroktaner som kan åstadkommas genom att byta ett väteatom mot en kloratom i molekyl. Skicka in svaret till din lärare med hjälp av e-post.

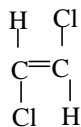
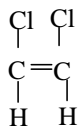
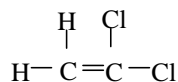
## Alkener

Bygg en etenmolekyl. Gå till väga på samma sätt som tidigare men då du skall välja kolatom skall du nu välja den som heter  $sp^2$ . Då den andra kolatomen skall kopplas till den första kan klicka på den bindning som är en dubbelbindning. Fyll därefter på med väteatomer.

Propen byggs på samma sätt som eten, men den tredje kolatomen skall väljas som ett  $sp^3$  kol (skall ha fyra enkelbindningar).

## Halgonalkener

Uppgiften är att bygga de tre dikloretenerna



Döp dem till 11dikloreten, cis12dikloreten resp trans12dikloreten.

Öppna fyra fönster i *Visualize* och lägg in de tre olika modellerna och jämför. Kring en dubbelbindning råder ingen vridbarhet utan denna är stel. Är de tre molekylerna identiska?

### Alkyner

I alkyner (ändelsen –an i alkanen är utbytt –yn) delar två kolatomer på tre elektronpar.

Uppgiften är att bygga en etyn- och en propynmolekyl. Börja med etynmolekylen. Som kolatom skall du välja den vänstra av de två kolatomer som heter sp. Då du skall koppla på den andra kolatomen skall du klicka på trippelbindningen. Fyll därefter på med väteatomer på de tomma platserna.

Då du skall bygga propynmolekylen kan du med fördel utgå från etynmolekylen du nyss skapade. Radera en av väteatomerna och ersätt detta med ett sp<sup>3</sup>-kol, dvs ett med fyra olika bindningsriktningar. Komplettera med väteatomer.