

Lífrænar sameindir. Bygging og nöfn.


Kveikið á tölvunni og ræsið forritið ChemSketch og vinnið eftirfarandi æfingar


Alkanar – formúlur, nöfn og hverfur

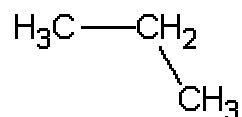
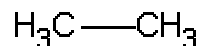
Æfing 1

- Veldu „structure“ í ChemSketch: Smelltu



Ef hnapparnir eru ekki þegar virkir: Smelltu 


og 



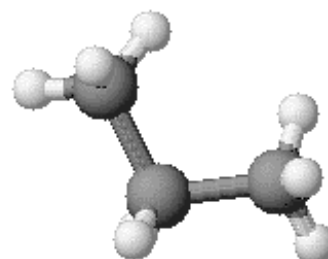
Metan, etan og própan.

- Smelltu á teikniflötinn. Þá kemur fram byggingarformúla metans, CH_4 ,
- Smelltu á C-atómið í formúlu metans
- Smelltu á C-atóm í formúlu etans
- Merktu própansameindina með músinni með því að draga ferning um hana.

- Smelltu  Smelltu  til að flytja byggingarformúlu yfir í þrívídd.

- Smelltu  á hnappastiku eða **hægrismelltu** á myndflötinn til að fá mismunandi þrívíddarform. Með músinni má snúa sameindunum

- Haltu **vinstri hnappi niðri** og dragðu fram og aftur.





Líkan af própani í þrívídd.

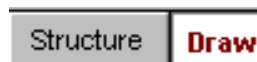
Æfing 2


- Veldu strukturham í ChemSketch: Smelltu



- Ef hnapparnir eru ekki þegar virkir: Smelltu  og .
- Teiknaðu formúlur butans, pentans, hexans, heptans, octans, nónans og dekans

- Veldu teikniham í ChemSketch: Smelltu

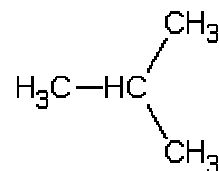


- Smelltu  Smelltu á teikniflötinn við formúluna | Lyklaðu inn nafn sameindar við allar sameindirnar.
- Hagræddu byggingarformúlu og nafni skipulega á flötinn prentaðu skjalið.

Æfing 3

Greinótta alkana má teikna út frá alkönum án greina.

- Teiknaðu formúlu própans. Smelltu á mið kolefnisatóm própansameindarinnar.



2-metýlprópan.

Nú á að vera komin formúla 2-metýlprópan – sjáðu mynd 10.

- Teiknaðu byggingarformúlur efna með sameindaformúluna C_5H_{12} .

Æfing 4

Teiknaðu byggingarformúlur og gefðu eftirfarandi efnum nafn.

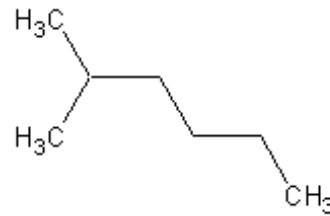
1. Veldu **Structure** **Draw** og síðan

The screenshot shows the ChemSketch software interface. The 'Structure' menu is open, and the 'Draw' option is highlighted. A ruler is visible at the top of the workspace. The text 'Nú á þessi hnappur að vera virkur' (Now this button is active) points to the 'Draw' button. Below this, the text 'Dragðu línu frá öðrum enda sameindarinnar og smelltu síðan á [circular arrow icon] hnappinn þá fæst hringsamband eða hring-nonan' (Drag a line from the other end of the molecule and click the [circular arrow icon] button then a ring compound or ring-nonane is formed) is displayed. The workspace contains a skeletal structure of n-pentane (labeled H₃C and CH₃) and a skeletal structure of cyclooctane (an eight-membered ring). The status bar at the bottom shows 'NONAME01.SK2 Modified Page 1/1 Fragments: 1 C₉H₂₀ FW: 128.255'.

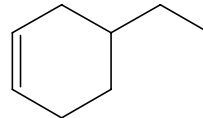
Teiknið byggingu

1-metýl-hringhexen

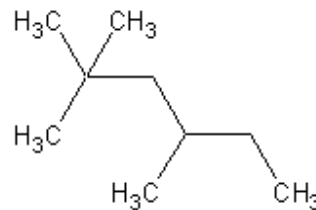
Gefið nafn



4-etyldekan



Bensen



Alkenar og alkynar. Tví- og þrítengi með ChemSketch.


Auðvelt er að mynda tví- og þrítengi milli C-atóma: Þegar smellt er á eintengi breytist það í tvítengi og þegar smellt er á tvítengi breytist það í þrítengi. Smellur á þrítengi breytir því í eintengi.

- **Veldu** strukturham.
- **Teiknaðu** á sama teikniflöt etan, eten og etyn.

Til að sýna öll C-H tengin á að velja 3D structure Optimization úr tools og þar á eftir Clean structure:

- **Merktu** etan | smelltu á  og smelltu á . Gerðu það sama fyrir eten og etyn

Nú koma fram tvívíðar byggingarformúlur, þar sem öll tengi sjást. Þessi form eru ekki flutt óbreytt yfir í þrívídd eins og sjá má á eftirfarandi:

- **Merktu** allar byggingarformúlurnar og **smelltu á Copy to 3D**
- **Taktu** eftir að allar byggingarformúlurnar eru í plani og að tví og þrítengi sjást ekki.
- Raunveruleg þrívíddarbygging kemur fram með eftirfarandi:
- **Veldu** strukturham. **Merktu** etan og **smelltu** á . Gerðu það sama fyrir eten og etyn.

Æfing 5

Teiknaðu byggingarformúlur efnanna:


- | | | |
|-------------------------|-------------------------|--------------------|
| a) 4-etyl-2-methylhexan | f) 2-klóróbútan | j) Bútanal |
| b) 1,2-díbrómóeten | g) 1,1-díbrómóeten | k) Hringhexan |
| c) Hringbútan | h) 2,3-pentandíól | l) Metýlprópen |
| d) 2-pentanon | i) 2-metýl-1,3-bútadíen | m) 2-metýl-1-hexen |
| e) 3-etyl-1-penten | | n) Própansýra |
| | | o) Etýlprópýleter |

Tengihorn og lengd tengja

Í ChemSketchs 3D-viewer er hægt að mæla horn milli tengja og lengd tengja í sameind.

- **Teiknaðu** metýlhringbutan og **flyttu** í 3D-viewer. "**Optimizer**" hagræddu sameindinni í minnstu orkustöðu.

Mæling á lengd tengja á milli atóma:

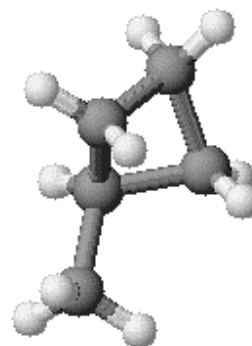
- **Smelltu** á  og **smelltu** á **atóm** sem eru hlið við hlið.

Atómin skipta um lit og neðst á skjánum má lesa lengd tengis.

Mæling á lengd tengis á milli þriggja atóma:

- **Smelltu** á  og **smelltu** á **þrjú atóm** sem mynda tengihorn.

Neðst á skjánum má lesa tengihornið.

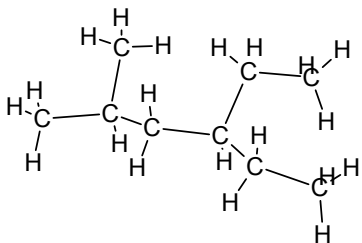


Mynd 11. Metýlhringbutan í þrívídd.

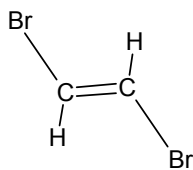
Distance(C 5, C 2) = 1.5303 Å

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

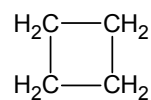
□



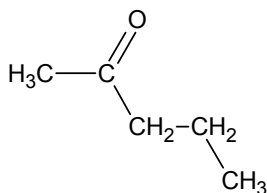
4-etyl-2-metylhexan



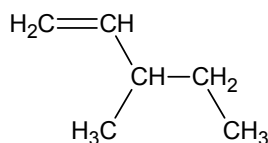
1,2-dibrómóeten



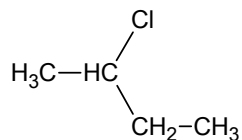
Hringbútan



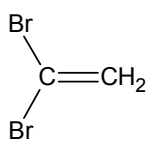
2-pentanon



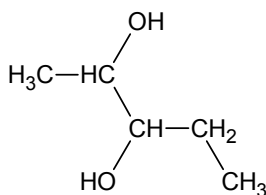
3-etyl-1-penten



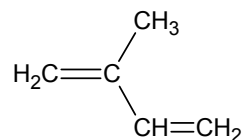
2-klóróbútan



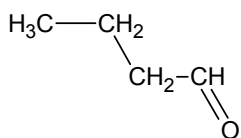
1,1-dibrómóeten



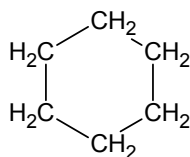
2,3-pentandiól



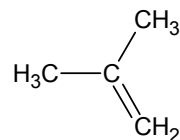
2-metyl-1,3-bútadién



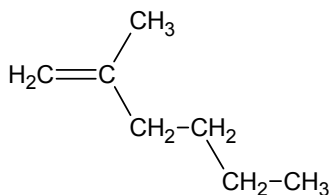
Bútanal



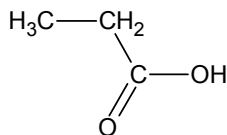
Hringhexan



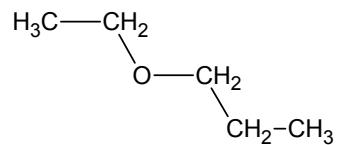
Metýlprópen



2-metyl-1-hexen



Própanσύra



Etýlprópýleter