

# Molekylmodeller

## Om generelle modeltyper og kemiske modeller

En videnskabelig model er kendetegnet ved at være en forsimplet gengivelse af virkeligheden, mens den samtidig er brugbar til at anskueliggøre viden. Opgaven her skal træne den generelle forståelse af hvad en 'model' er, og den skal introducere forskellige typer som modeller kan karakteriseres ud fra. Samtidig skal opgaven træne opbygningen af nogle af de kemiske molekyler der er almindelige i os selv og i vores omgivelser.

Materialer:

Molekylebyggesæt til organiske molekyler

1. Find i molekylebyggesættet to hvide kugler og forbind dem med en pind.  
En **skalamodel** betyder at den er forsimplet ved ikke at have den samme størrelse, som det den er model for. Fx kan man vise et forslag til et nybyggeri vha. en mindre papirmodel eller en plantegning. I et molekylebyggesæt er molekylemodellerne større end de virkelige kemiske stoffer. Kuglerne er hver især model for et 'atom' – og atomerne holdes sammen i *kemiske forbindelser* vha. *bindinger*. I molekylebyggesæt er bindinger modelleret som pinde e.l. der kan stikkes ind i kuglerne. Den forbindelse I her har dannet en model af, hedder dihydrogen eller  $H_2$ , og stoffet kaldes på dansk også 'frit brint'.
2. Find hhv. en kugle der er hvid, rød, gul, blå, sort og lilla. Tæl antallet af huller i hver af de seks typer kugle – og dermed hvor mange bindinger de hver især kan danne til andre atomer.

En **ikonisk model** er en forsimplicering af virkeligheden ved at dele af modellen er fremhævet, eller at den er udstyret med symboler. Farverne på kuglerne i molekylebyggesættet er symbol for at de hver er model for ét af de kemiske grundstoffer.

## Opgave Del A

## Opgave Del A

Figur 1: Sammenhængen mellem farve, grundstof og bindingsantal i organiske molekylemodeller. I andre forbindelser kan bindings-tallet være anderledes.

Farve	Grundstof (kemisk symbol)	Antal bindinger
Hvid	hydrogen (H)	
Rød	oxygen (O)	
Gul	svovl (S)	
Blå	nitrogen (N)	
Sort	carbon (C)	
Lilla	phosphor (P)	

Farvesymbolerne i molekylebyggesæt er vist i figur 1, og ved hvert grundstof er i parentes vist det kemiske symbol der også bruges for grundstoffet. Udfyld selv kolonnen med 'Antal bindinger'.

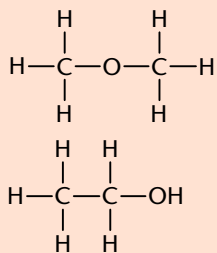
3. Fremstil vha. molekylebyggesættet en model af en kemisk forbindelse hvor der indgår 1 oxygen- og 2 hydrogen-atomer, og hvor alle kuglernes huller er med i en binding (har en pind). Forbindelsen I så har bygget, hedder på dansk 'vand', men den kemiske betegnelse vil være dihydrogenoxid eller  $H_2O$ .  $H_2O$  kaldes også for en *stofmodel* for vand da den viser, hvilke atomer forbindelsen indeholder, og hvor mange der er af hvert atom. Hvordan viser man i stofmodellen  $H_2O$ , hvor mange hydrogenatomer den indeholder?  
En stofmodel kan også kaldes en *kemisk formel*. Stoffet med den kemiske formel  $H_2O_2$  (hydrogenperoxid) kaldes på dansk 'brintoverilte', og det bruges både som bakteriedræber og som blegemiddel. Vis, ved at bygge dem, forskellen på hhv.  $H_2O_2$ ,  $H_2 + O_2$ ,  $H_2O$  og  $2 H_2O$ .
4. Find to oxygenmodeller og forbind dem med to bindinger der skal modelleres vha. særlige, bøjelige pinde. Dette kaldes en *dobbeltbinding*. Stoffet her hedder dioxygen,  $O_2$  eller på dansk blot 'ilt'. Ilt udgør ca. 20 % af luften omkring os og er nødvendigt for en stor del af de levende organismer.

De særlige pinde i dioxygenmodellen viser at det undertiden er nødvendigt at bruge særligt tilpassede modelementer for at modellere optimalt. Der optræder undertiden også en *tripelbinding* – dvs. at der er tre bindinger mellem to atomer. Byg fx med molekylebyggesæt forbindelsen der ligger bag den kemiske formel  $N_2$ . Dette stof hedder dinitrogen og på dansk 'frit kvælstof'. Det udgør 79% af luften omkring os, men meget få levende organismer kan bruge det til noget.

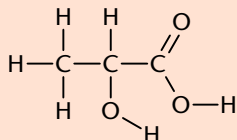
5. S sammensæt en forbindelse med 1 carbonatom og 2 oxygenatomer. I molekylebyggesætmodeller må de særlige bøjelige bindingspinde altid kun bruges til dobbelt- eller trippelbindinger. Denne forbindelse hedder carbondioxid og kaldes på dansk også 'kultveilt', 'kuldioxid', eller man bruger blot den kemiske formel:  $CO_2$ . Stoffet findes som 0,03% af luften omkring os, og det dannes som affaldsstof i bl.a. menneskekroppen og udskilles i udåndingsluften. Det er derudover kendt som en drivhusgas – dvs. det bidrager til global opvarmning. Et *molekyle* er en kemisk forbindelse der er kendetegnet ved at indeholde en bestemt type af bindinger, som kaldes *elektronparbindinger* ('kovalente bindinger'). Hvor mange elektronparbindinger indgår i molekylet carbondioxid? Molekylebyggesætmodeller adskiller sig fra bl.a. stoffmodeller ved at være tredimensionelle – en 3D-model kaldes også for en **rumlig model**.
6. Byg en rumlig model for molekylet med den kemiske formel  $C_2H_6O$  – husk at alle kuglernes huller skal indgå i én af modellens bindinger.

Når molekyler består af mange atomer, kan de ikke længere karakteriseres præcist vha. kemiske formler. Der er to mulige molekylebyggesætmodeller for  $C_2H_6O$ , men man kan så skriftligt skelne mellem dem ved at bruge en modeltype der kaldes en

## Opgave Del A



Figur 2: Strukturformel for hhv. dimethylether (øverst) og ethanol (nederst).



Figur 3. Strukturformel for mælkesyre.

*strukturformel* – hvor man med streger viser hvilke atomer der har bindinger med hinanden.

Se på figur 2 der viser de to mulige strukturformler for  $C_2H_6O$ . Den ene forbindelse kaldes kemisk for ethanol. Det er dette stof der skaber virkningen fra øl, vin og spiritus, og det hører til den stofklasse der kaldes 'alkohol'. Alle alkoholer er karakteriseret ved den funktionelle gruppe -O-H. Den anden forbindelse er dimethylether. Hvilken af de to stoffer passer med den rumlige model I tidligere byggede?

- Byg som rumlig model stoffet med strukturformlen vist i figur 3. Stoffet kaldes på dansk 'mælkesyre', og det dannes som midlertidigt affaldsstof i bl.a. menneskers muskler når musklerne ikke forsynes godt med ilt via blodet, og energiforsyningen derfor må foregå vha. *gæring*. Også andre dyr og visse bakterier danner mælkesyre som affaldsstof.

*Organisk kemi* omhandler stoffer hvor carbon er det centrale atom i den kemiske opbygning – det kan være få eller ofte rigtig mange carbonatomer sat sammen (i lange kæder eller i komplekse molekyler). Begrebet *organisk stof* bruges dog som biologiidtryk kun om stoffer der indgår som byggesten i levende væsener. Grundstofferne vist i figur 1 er dem der er mest benyttet i biologiske organiske stoffer, men generelt opstillet består organiske stoffer af flere carbonatomer med især hydrogen bundet til sig. Oxygen indgår i mange organiske funktionelle grupper som fx =O, -OH eller -COOH, mens N, P og S kun er en del af ganske specielle stoftyper i menneskekroppen og andre levende væsener.

Byg en model af stoffet methan der er opbygget af 1 carbon- og 4 hydrogen-atomer. Methan produceres af visse levende væsener som affaldsstof – fx udskilles det vha. køers og måske dine egne prutter. Methan er meget brandbart. Hører methan ind under 'organisk kemi', og er det også et biologisk 'organisk stof'? Nævn én repræsentant mere for hver betegnelse.

## Opgave Del A

8. Byg vha. figur 4 en model for stoffet ethansyre. Det-te stof kaldes også for 'eddikesyre' – det indgår i hus-holdningseddike og dannes som affaldsstof af visse bakterier.

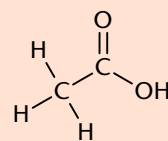
I tekster benytter man sig ofte af en *sammentrukket strukturformel* hvor man, i stedet for at skrive antallet af hvert atom samlet, skriver dem i grupper, der viser, hvilke der er bundet til hinanden. Ethanol's strukturformel skrives på den måde som  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ . Gør rede for hvad modellen derved gør tydeligt. Skriv den sammentrukne strukturformel for ethansyre.

Gruppen  $-\text{COOH}$  kaldes også for en *organisk syregruppe*, og den er altid opbygget med et dobbeltbundet oxygen. Find og markér den organiske syregruppe på mælkesyreformlen i figur 3.

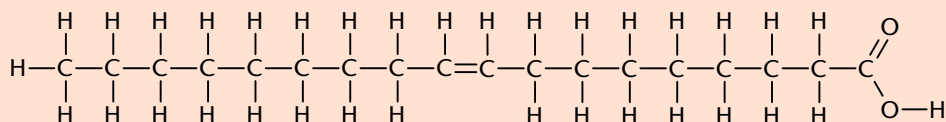
9. Byg vha. figur 5 en rumlig model for stoffet oliesyre. Lange kæder af carbon med kun hydrogen bundet gør at det er et stof, der har svært ved at blive opløst i vand. Forbindelsen kaldes for et 'fedtstof' (lipid). Oliesyre hører nærmere bestemt til stofklassen 'fedtsyrer' – de indeholder meget energi (fx som kost), og de indgår i opbygningen af alle levende væsener (fx i cellemembraner). Fastlæg ud fra navnet og figur 5 hvad der kendetegner en fedtsyre.

I en strukturformel som  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{COOH}$  af palmitinsyre, er modellen yderligere komprimeret ved at parenteser viser at gruppen  $-\text{CH}_2-$  gentages her i alt 14 gange. Tegn en sammentrukket strukturformel for oliesyre.

En anden ekstra forsimpning af en strukturmodel er en *zigzagformel*. Den gælder for organiske stoffer på den måde at der sidder carbon i hver vinkel eller ende

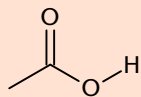


Figur 4. Strukturformel for ethansyre.

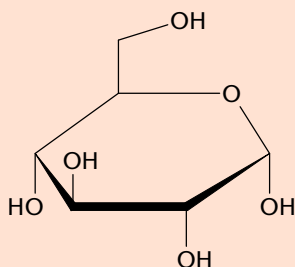


Figur 5. Strukturformel for oliesyre.

## Opgave Del A



Figur 6. Zigzagformel for ethansyre.



Figur 7: Zigzagformel for glucose.

der ikke viser et andet grundstof. Det er desuden altid sådan at hvis der ikke er vist andet i modellen, så er det hydrogen der er bundet til hvert carbonatoms ledige bindingssteder. Repetér hvor mange bindinger carbon har.

Figur 6 viser en zigzagformel for ethansyre. Sammenlign den med figur 4. Tegn selv zigzagformler for hhv. palmitinsyre og oliesyre.

10. Byg en rumlig model af stoffet glucose der er vist som zigzagformel i figur 7.

Glucose kaldes på dansk for 'druesukker', og det er den centrale energikilde for os selv og de fleste andre organismer. Stoffet tilhører den kemiske stofklasse carbohydrater der på dansk også kaldes for 'kulhydrater'. Opskriv ud fra figur 7 den kemiske formel for glucose.

Glucose bruges ofte som **analogimodel** for alle organiske stoffer. En analogimodel er en repræsentant for en gruppe – som er fælles om én eller flere egenskaber. Hvilke egenskaber ved organiske stoffer er repræsenteret i glucose? Nævn egenskaber ved organiske stoffer som glucose mangler?

## Om flere kemiske modeller

## Opgave Del B

11. Byg 6 CO<sub>2</sub>-molekyler og 6 molekyler H<sub>2</sub>O.

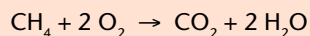
En kemisk reaktion betyder at kemiske stoffer omdannes til andre. Når man viser en kemisk reaktion som model, opskrives det som et *reaktionsskema*. Fx kan forbrænding af methan skrives som reaktionsskema som vist i figur 8.

Pilen viser overgangen fra før til efter, og på venstre side vises hvilke molekyler der var før reaktionen, mens højre side af pilen viser hvilke molekyler der dannes efter reaktionen. Det er dog helt grundlæggende sådan i kemiske reaktioner at atomer ikke omdannes til andre grundstoffer, og at antallet af atomer ikke ændres. Derfor skal der være samme antal af hvert grundstof på begge sider af pilen.

Fotosyntese er navnet på en kemisk reaktion hvor energi indbygges i det organiske stof glucose. I fotosyntese reagerer 6 carbondioxid med 6 vand (og lysenergi), og derved dannes 1 glucosemolekyle. Derudover dannes der dioxygen som affald, og fotosyntese er derved baggrunden for at der findes dioxygen i Jordens atmosfære. Fotosyntesens største betydning er dog at den fanger energi ind i organiske stof, så det er til rådighed for forskellige livsformer inkl. mennesket. Brug de byggede molekylemodeller til at afgøre hvor mange O<sub>2</sub>-molekyler der dannes ved forbrænding af 1 glucosemolekyle. Opskriv herudfra reaktionsskemaet for fotosyntese (lysenergi skrives over reaktionspilen).

12. Byg 1 glucose- og 6 O<sub>2</sub>-molekyler.

Mange organiske stoffer kan reagere med dioxygen og omdannes til andre stoffer – en reaktion med dioxygen kaldes generelt for en *forbrænding*. Nedbrydes det organiske stof fuldstændigt kaldes det for *respiration*, og i fx mennesker sker det som en forbrænding. Når 1 glucosemolekyle forbrændes fuldstændigt, skal der bruges 6 O<sub>2</sub>-molekyler, og der dannes som affaldsstoffer kun carbondioxid og dihydrogenoxid.

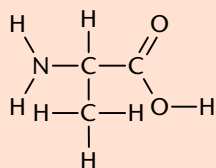


Figur 8: Reaktionsskema for forbrænding af methan.

## Opgave Del B

Opskriv herudfra et reaktionsskema for respiration af glucose vha. dioxygen.

13. Nedbrydningen af organiske stoffer, fx glucose, i levende væsener frigiver energi som organismen kan leve af. Ved respiration frigives energi der så lagres i et andet stof: ATP. Opbygningen af ATP sker kemisk ved en reaktion mellem stofferne  $P_i$  og ADP. Tilføj reaktionen til jeres reaktionsskema for respiration. Hvilken betydning har det at respiration af glucose vha. dioxygen ofte bruges som analogimodel for en-hver respiration af organisk stof?
14. Byg en rumlig model af strukturmodellen vist i figur 9. Næst efter C, H og O er nitrogen (N) det mest udbredte grundstof i biologiske organiske stoffer og dermed i jer selv. Først og fremmest fordi det indgår i stofklassen *amino*syre. Stoffet I nu har modelleret, er en aminosyre der hedder alanin.



Figur 9. Strukturformel for aminosyren alanin.

Alle aminosyrer indeholder tre bestemte funktionelle grupper der sidder på et centralt carbonatom – sæt ring på figur 9 om hver af grupperne:

- COOH (organisk syregruppe)
- NH<sub>2</sub> (aminogruppe)
- H (hydrogen)

Den fjerde binding på det centrale carbonatom kan være til én af en række bestemte grupper der netop er forskellen på de enkelte aminosyrer. Den fjerde gruppe kaldes aminosyrens *sidekæde* – alanin er netop karakteriseret ved at være en aminosyre med en CH<sub>3</sub>-gruppe som sidekæde. Omdan den byggede alaninmodel til at vise aminosyren glutamin der er karakteriseret af sidekæden: -CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-COOH.

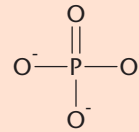
15. Prøv at modellere stoffet fosfat der består af 1 centralt phosphoratom og 4 oxygenatomer bundet dertil. Da de lilla kugler i molekylebyggesæt viser, at P har 5 bindingssteder, er det ikke muligt at bygge fosfat uden at der er ubrugte bindingssteder – de sidder



## Opgave Del B

på de bundne oxygenatomer. Figur 10 viser at en ledig binding her fører til en negativ ladning, og phosphats stofformel skrives derfor:  $\text{PO}_4^{3-}$ . '3-' opløftet efter atomantallene angiver altså stoffets ladning. Her 3 negative ladninger pga. de 3 ledige bindingssteder.

Phosphor indgår i organiske stoffer som phosphat der bindes som gruppe til andre dele via netop de ledige bindingssteder. Phosphat findes desuden som 'ion' – dvs. som selvstændigt stof med ladning på. Fx findes phosphationer i jord og vand, og planter optager dem igennem rødderne og bruger dem som en byggesten – bl.a. til at danne stoffet ATP der findes hos de fleste levende væsener og kan indeholde energi. Hører phosphat under organisk kemi? Er det et biologisk organisk stof?



Figur 10. Strukturformel for ionen phosphat.

16. Ioner der optages og bruges som byggesten i fx planter, kaldes *næringssalte*. Nitrogen indgår også i nogle næringsalte. Opstil strukturformler for hhv. nitrat ( $\text{NO}_3^-$ ) og ammonium ( $\text{NH}_4^+$ ). Plusladningen opstår her ved at der er bundet et ekstra hydrogen ift. nitrogens normale bindingsantal.
17. Svovl har i organiske stoffer 2 bindingssteder, men kan i andre forbindelser danne 6 bindinger. Opstil følgende svovlholdige molekyler vha. mindst én formel/model – og afgør desuden hvilke af dem der er biologisk organiske stoffer:

$\text{H}_2\text{S}$	Dihydrogensulfid eller på dansk 'svovlbrinte'. Kan bruges af visse bakterier som energikilde, og frigives af andre bakterier som affaldsstof. Giftig for de fleste levende organismer.
$\text{SO}_4^{2-}$	Sulfat. Næringssalt. Ionen kan desuden af visse bakterier bruges i stedet for ilt til at udføre respiration – som affaldsstof dannes så også dihydrogensulfid. Bakterier der bruger dihydrogensulfid som energikilde, danner sulfat som affaldsstof.

## Opgave Del B

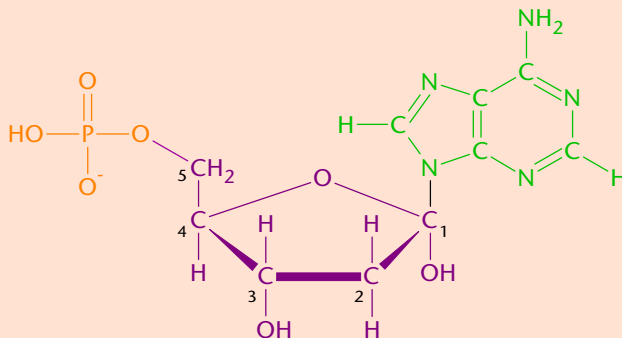
Cystein     Aminosyre med sidekæden  $-\text{CH}_2\text{-SH}$ .

Methionin     Aminosyre – find via opslag ud af hvilken sidekæde der kendetegner methionin.

18. Flere aminosyrer kan sættes sammen i lange kæder og kaldes så for et *peptid* eller et *protein*. *Makromolekyler* er betegnelsen for store molekyler der, ligesom fx proteiner, er sammensat af mange af den samme underdel.

Som model for et protein bruges ofte en perlekæde hvor hver af de cirkelformede perler er et symbol for en aminosyre. Tilsvarende kan man danne et makromolekyle ved at sætte flere glucosemolekyler i kæde. Så tegnes modellen hvor hvert led i kæden er en sekskant. Se på strukturmodellen for glucose (figur 7) og find frem til hvorfor glucose symboliseres med en sekskant.

Figur 11. Nucleotid.



19. På figur 11 er vist en model af stofklassen *nucleotid*. Sæt ringe om hvor på modellen der indgår andre grundstoffer end C, H og O.

Der findes naturligt flere forskellige nucleotider, og de kan i forskellige rækkefølger sættes sammen til makromolekyler. Se på figur 11 og overvej hvorfor man kan bruge et L som symbol for et nucleotid.

## Opgave Del B

20. Makromolekylet RNA kan modelleres som LLLLLLLLLLLLLLLLLL. Den del af nucleotiderne der stikker frit opad her på modellen, er den gruppe der indeholder nitrogen, og den kaldes derfor også for en *N-holdig base*. I den nederste, vandrette del er nucleotiderne bundet sammen som kæde. Er makromolekyler opbygget af nucleotider, negativt ladede?
21. Figur 12 viser en model af et forkortet eksempel på makromolekylet DNA. I både RNA og DNA indgår der flere forskellige nucleotider. En af forskellene er sammensætningen af den N-holdige base, og det kan i makromolekylemodeller skelnes ved at nucleotiderne har forskellige farver eller ved at sætte et bogstav på: A, T, G, C, U. Brug nucleotider som L-symboler til ud fra figur 12 at tegne en model af DNA's makromolekulære opbygning.

Figur 12. DNA-molekyle med farvet angivelse af de fire mulige N-holdige baser:  
Rød = T (thymin)  
Grøn = A (adenin)  
Orange = C (cytosin)  
Blå = G (guanin)  
Bølgestreger symboliserer at modellen er et udsnit.

