

## Indhold

Hvordan får man vist alle C- og H-atomer i en kemisk struktur? .....	3
Indstilling for C-atomer.....	3
Indstilling for H-atomer .....	3
Hvordan tegnes en dobbelt- eller tripel binding mellem to atomer? .....	4
Hvordan tegnes en aromatisk ring? .....	4
Hvordan tegnes et stof, som indeholder en funktionel gruppe? .....	4
Hvordan rettes op på en "skæv" tegning af en struktur? .....	4
Hvordan man se om, der er tegnet for mange bindinger til et atom?.....	5
Hvordan flyttes en strukturformel?.....	5
Hvordan roteres en strukturformel? .....	5
Hvordan kopieres en tegning til fx Word?.....	5
Hvordan kan man få vist en struktur, som ikke vises, når MarvinSketch filen åbnes? .....	6
Hvordan bestemmes en forbindelses molarmasse? .....	6
Hvordan bestemmes en forbindelses molekylformel? .....	6
Hvordan bestemmes en forbindelses sammensætning i masseprocent? .....	6
Hvordan bestemmes en forbindelses navn?.....	7
Hvordan tegnes en kemisk strukturformel ud fra et kendt navn? .....	7
Hvordan sættes lone pairs på en strukturformel? .....	7
Hvordan ændres en strukturformel, så man kan se ladninger i forbindelsen?.....	8
Hvordan laves en boks med navn, molekylformel mm? .....	8
Hvordan bestemmes en $pK_s$ værdi ved hjælp af Marvin Sketch? .....	8
Hvordan tegnes et fordelingsdiagram for en syre ved hjælp af Marvin Sketch? .....	9
Hvordan vises <i>cis-trans</i> isomere forbindelser? .....	9
Hvordan vises spejlbillede isomere forbindelser?.....	10
Hvordan kan man markere et asymmetrisk C-atom i en forbindelse? .....	10
Hvordan ændres farverne på de viste atomer i en forbindelse? .....	11
Hvordan kan man markere et bestemt område i en kemisk forbindelse?.....	11
Hvordan skriver man en tekst ved en kemisk forbindelse? .....	11
Hvordan laves en graf for $\log D$ 's afhængighed af pH? .....	12
Hvordan bestemmes $P$ (fordelingskonstanten)?.....	12
Hvordan bestemmes H-donor henholdsvis H-acceptorer i en forbindelse?.....	13
Findes der skabeloner i MarvinSketch med strukturformler, som kan hentes? .....	13
Hvordan kan en tredimensionel struktur af et molekyle vises i MarvinSketch?.....	13
Følgende er primært relevant for kemi A.....	14
Hvordan laves et H-NMR spektre af en forbindelse? .....	14

I det følgende gives nogle tips til brugen af Marvin Sketch. Version 23 er den benyttede version i eksemplerne, men de enkelte tips kan også bruges i andre versioner. Endvidere er materialet benyttet i forbindelse med en PC - det er ikke afprøvet på en Mac, så der kan være steder, hvor menuer mm ser lidt anderledes ud, hvis man er Mac bruger. Håbet er at følgende liste med tricks og tips kan hjælpe eleverne i deres brug af Marvin Sketch som et it-redskab, der skal give eleverne en bedre kemisk forståelse uden at ende som "trykke-på-knapper-kompetence". Endvidere vil det forhåbentlig være muligt at udvide listen, hvis der er flere faciliteter, som bør beskrives.

### **Forskellige versioner af menuerne**

I MarvinSketch kan menuerne præsenteres på lidt forskellige måder. Fx er navngivning af tegnede strukturer placeret lidt forskellige steder, afhængigt af version for "menuerne", der vælges. De to vigtigste versioner af menuerne kaldes i MarvinSketch "Marvin" og "Marvin v5.0". Nedenfor er omtalt, hvordan man kan skifte mellem de to repræsentationer af menuerne.

***I dette dokument er valgt "Marvin", medmindre andet er angivet***, fordi dette er "default" ved standardinstallationen af MarvinSketch

*Skift fra "Marvin" til "Marvin v5.0" for opbygning af menupunkter:*

Vælg menupunktet **View**

I undermenuen vælges herefter **Editor Style**, og herefter vælges **Marvin v5.0** for at få den anden opbygning af menupunkter frem.

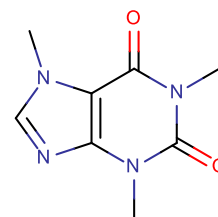
*Skift fra "Marvin v5,0" til "Marvin" for opbygning af menupunkter:*

Vælg menupunktet **View**

I undermenuen vælges herefter **Configurations**, og herefter vælges **Marvin** for at få den anden opbygning af menupunkter frem.

## Hvordan får man vist alle C- og H-atomer i en kemisk struktur?

Du kan sommetider have brug for at kunne se alle C- og H-atomer i en strukturformel. Det gøres på to forskellige steder for C- og H-atomer. Her er en beskrivelse af, hvorledes man gør: først for C-atomer og dernæst for H-atomer. Udgangspunktet er en strukturformel for coffein, som ses til højre.



### Indstilling for C-atomer

I hovedmenuen vælges **Edit**

I menu vælges sidste punkt **Preferences**.

Nu åbnes en undermenu.

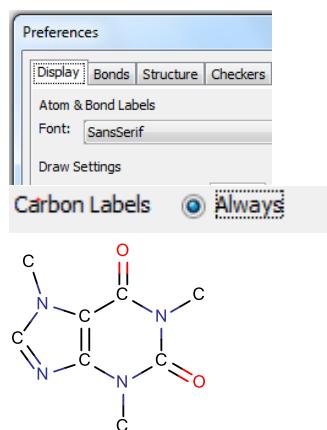
Vælg undermenuen **Structure**.

Under punktet "Carbon Labels" kan man nu vælge den ønskede indstilling. Default er "At straight angles and at implicit H atoms".

Vælges "**Always**" vises alle C-atomer.

Klik herefter på OK.

Alle C-atomer vises nu på strukturformlen.



Hvis man ønsker at fjerne muligheden for at vise C-atomerne igen, så vælges "**Never**" i menuen "Structure", som beskrevet ovenfor. Indstilling gælder, indtil man ændrer denne.

### Indstilling for H-atomer

Der findes to måder, som kan benyttes til at vise H-atomerne i en strukturformel. Den ene viser H-atomerne i en "komprimeret" form ved C-atomerne, fx CH<sub>3</sub>. Den anden metode viser alle bindinger mellem C- og H-atomer.

*Visning af implicitte H-atomer i "komprimeret" form*

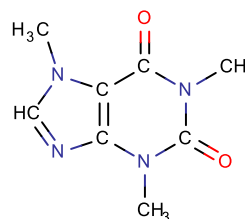
En forudsætning for at vise H-atomerne er, at C-atomerne er vist i strukturformlen, se ovenfor.

I hovedmenuen vælges **View**.

I menuen vælges punktet **Implicit Hydrogens**

Nu åbnes en undermenu.

Vælg i undermenuen **On All**. Herefter vises alle H-atomer. Der findes også andre mulige indstillinger. Man kan fjerne H-atomerne igen ved at vælge **Off**. Indstilling gælder, indtil man ændrer denne.



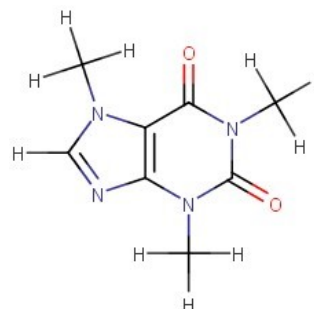
*Visning af implicitte H-atomer i alle bindinger*

I hovedmenuen vælges **Structure**

I menu vælges punktet **Add**

I undermenuen vælges **Explicit Hydrogens**

Man kan stille tilbage ved at vælge menupunktet **Remove**, og derefter **Explicit Hydrogens**.



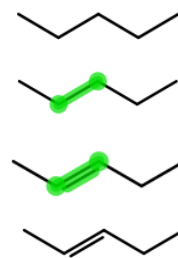
## Hvordan tegnes en dobbelt- eller tripel binding mellem to atomer?

Hvis man ønsker at tegne en strukturformel, som indeholder en dobbelt- eller tripelbinding mellem to atomer, fx to C-atomer, kan man gøre følgende:

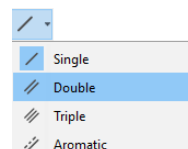
Tegn strukturformlen uden den ønskede dobbelt- eller tripelbinding. Placer musen, så den peger oven på enkeltbindinger, der skal ændres til en dobbelt- eller tripelbinding.

Klik på bindingen. Herved fremkommer en markeret dobbeltbinding (hvis man skal have en tripelbinding, klikkes en gang til).

Man kan klikke flere tilstrækkeligt mange gange, kommer man tilbage til enkeltbindingen.



En måde er at vælge den ønskede type binding i menuen for bindinger, og derefter klikke på den enkeltbinding, som skal ændres.



## Hvordan tegnes en aromatisk ring?

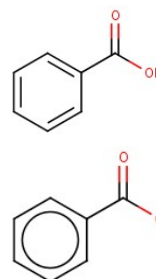
Hvis man har en strukturformel, hvor man ønsker at tegne en aromatisk ring i stedet for standardindstillingen (Kekulé form), kan dette gøres ved følgende fremgangsmåde:

I hovedmenuen vælges **Structure**

I menu vælges punktet **Aromatic Form**

I undermenuen vælges **Convert to Aromatic Form**

Man kan stille tilbage ved at vælge menupunktet **Kekulé to Aromatic Form**



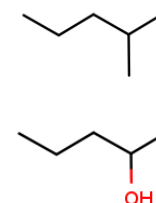
## Hvordan tegnes et stof, som indeholder en funktionel gruppe?

En måde er følgende:

Først tegnes en strukturformlen for en carbonhydrid, som danner C-skelettet bag det ønskede stof. Der skal sættes en ekstra binding til et C-atom, der hvor den funktionelle gruppe skal være.

Herefter vælges, på menuen til højre, symbolet for atomet, som skal udskiftes fx O.

Klik herefter på C-atomer, som skal udskiftes med det andet atom. Skal der være en dobbeltbinding til C-atomet, klikkes en gang til på bindingen.

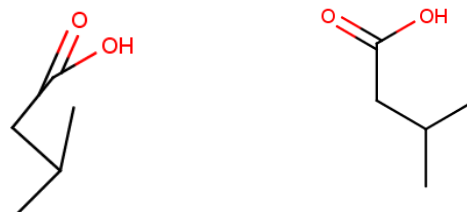


## Hvordan rettes op på en "skæv" tegning af en struktur?

Når man har tegnet en struktur, kan den til tider se "underlig" ud.

Hvis man ønsker at have en "pæn" præsentation, kan man få dette ved at bruge genvejstasten **ctrl-2** eller i hovedmenuen at vælge **Structure**, og derefter

**Clean 2D**. I undermenuen vælges nu **Clean and Arrange in 2D** (eller bare Clean in 2D).




## Hvordan man se om, der er tegnet for mange bindinger til et atom?

MarvinSketch viser, hvis der er for mange bindinger tegnet til et atom. Fx hvis der er mere end fire bindinger til et C-atom eller mere end to til et O-atom. I MarvinSketch aftegnes et lyserødt område rundt om et atom, hvortil der er for mange bindinger. I eksempler er vist, at det ikke kun gælder for C-atomer, men også for andre atomer, fx oxygen. Et passende antal bindinger i molekylet fjernes.

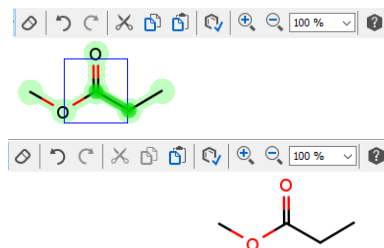


## Hvordan flyttes en strukturformel?


Vælg  i menulinjen, og hold venstre musetast nede. Marker rundt om strukturen.

Før musen ind over strukturformlen, indtil der ses et blåt kvadrat i strukturformlen (se eksemplet til højre).

Flyt med musen, indtil strukturformlen er i den position, som ønskes. Herefter slippes musetasten, og strukturen vises i den nye position.

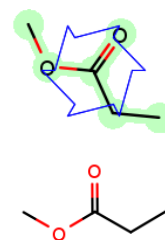


## Hvordan roteres en strukturformel?

Vælg  i menulinjen, og hold venstre musetast nede. Marker rundt om strukturen.


Før musen ind over strukturformlen, indtil der ses et "tandhjul" (se eksemplet til højre).

Drej med musen, indtil strukturformlen er i den position, som ønskes. Herefter slippes musetasten, og strukturen vises i den nye position.



## Hvordan kopieres en tegning til fx Word?

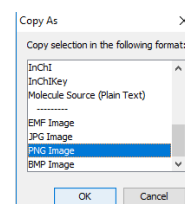
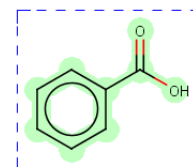
Oftentimes vil man gerne overføre en tegning af en struktur til fx et Word dokument. Det kan gøres på flere måder. Her vises en, hvor strukturen gemmes som en png-grafikfil i Word dokumentet. Det er ikke muligt at åbne grafikfilen i MarvinSketch igen, hvis man ønsker at ændre strukturformlen.

Vælg  i menulinjen, og hold venstre musetast nede. Marker rundt om strukturen.

I hovedmenuen vælges **Edit** og herefter **Copy As ...** (man kan også bruge genvejen ctrl-k). Herved kommer en menu.

I menu vælges det ønskede format, som filen skal kopieres som. I eksemplet er valgt grafikformatet PNG.

Strukturen kan nu kopieres ind i Word dokumentet, ved i Word dokumentet at benytte fx ctrl-v eller indsæt kopi.

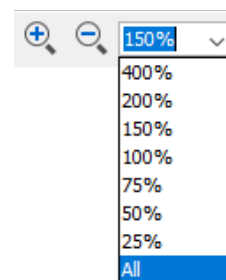


## Hvordan kan man få vist en struktur, som ikke vises, når MarvinSketch filen åbnes?

Under tiden ses det ud til, at en MarvinSketch fil er tom, når man åbner filen. Det vil sige, at der ikke vises en tegning af en strukturformel på skærmen.

Oftentimes skyldes det ikke, at dokumentet er tomt, men at tegning findes uden for området, der er vist på skærbilledet. Hvis denne situation opstår, kan man prøve følgende.

Vælg **Zoom Level** vælges **All**. Herefter vises strukturformlen i stor forstørrelse i midten af skærbilledet. Man kan herefter ændre på størrelsen ved at benytte Zoom Out (henholdsvis Zoom In).



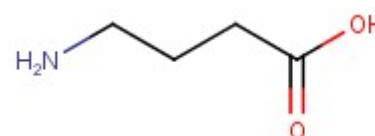
## Hvordan bestemmes en forbindelses molarmasse?

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Elemental Analysis**

I undermenuen sættes flueben ved **Molecular weight**

Tryk på **OK**



Elemental Analysis

Molecular weight: 103,121

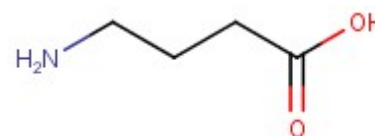
## Hvordan bestemmes en forbindelses molekylformel?

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Elemental Analysis**

I undermenuen sættes flueben ved **Formula**

Tryk på **OK**



Elemental Analysis

Formula: C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub>

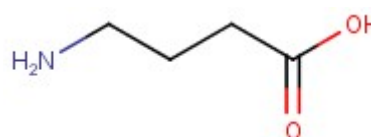
## Hvordan bestemmes en forbindelses sammensætning i masseprocent?

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Elemental Analysis**

I undermenuen sættes flueben ved **Composition**

Tryk på **OK**



Elemental Analysis

Composition: C (46.59%), H (8.80%), N (13.58%), O (31.03%)

## Hvordan bestemmes en forbindelses navn?

I hovedmenuen vælges **Structure**

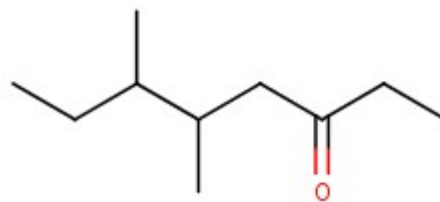
I menu vælges punktet **Generate Name**

Der fremkommer herefter en undermenu, hvor der kan vælges mellem

i) **Generate preferred IUPAC Name**

ii) **Generate traditional Name**

iii) **Retrieve CAS registry Number**



5,6-dimethyloctan-3-one

(engelsk navn, som skal omsættes til dansk)

De to første valgmuligheder giver navne på den kemiske forbindelse, se eksemplet til højre. I det konkrete tilfælde er de to navne ens. Det gælder dog ikke for alle kemiske forbindelser. Andre navne kan i øvrigt også være acceptable - MarvinSketch giver kun en mulighed for et systematisk navn til en forbindelse. Husk at navne skal omdannes til dansk navne. Dvs. i det viste tilfælde 5,6-dimethyloctan-3-on.

Den tredje valgmulighed kan give stoffets CAS-nummer. Normalt skal dette ikke benyttes, så oftest kan fluebenet i menuen fjernes, hvorved eventuelle fejlbeskeder omkring CAS nummer undgås.

Navnet kommer også frem, hvis man benytter indstillingen i "Analysis Box". Se nedenfor under punktet "Hvordan laves en boks med navn, molekylformel mm".

## Hvordan tegnes en kemisk strukturformel ud fra et kendt navn?

For en del kemiske forbindelser vil det være muligt ud fra navnet at få dannet en kemisk strukturformel.

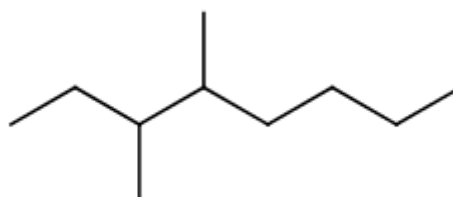
I hovedmenuen vælges **Structure**

I menu vælges punktet **Name to Structure**

Der fremkommer herefter en boks, hvori man kan skrive det kemiske navn, og derefter trykkes på **Import**.

Det er også muligt at få boksen frem ved at bruge "Ctrl+Shift+N".

Eksempel: Navnet 3,4-dimethyloctan indtastes i boksen under **Name to Structure**. Herefter trykkes på Import, og strukturen fremkommer



Undertiden kan danske navne bruges. Hvis ikke dette kan lade sig gøre, kan man prøve med navnet på engelsk fx skal der nogle gange bare tilføjes et "e" i enden af navnet.

Det er også muligt at bruge "traditionelle" navne, ikke kun systematiske navne. Fx kan man indtaste coffein i boksen (det hedder i øvrigt caffein på engelsk).

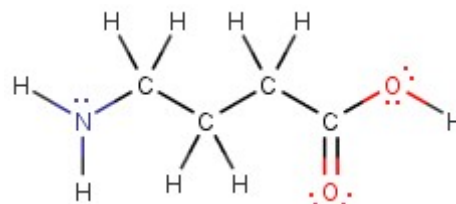
## Hvordan sættes lone pairs på en strukturformel?

Lone pairs (elektronpar, der ikke indgår i bindingen til et andet atom) kan vises på en strukturformel. Det er typisk relevant for forbindelser, som indeholder oxygen- eller nitrogenatomer.

I hovedmenuen vælges **View**

I menu vælges punktet **Advanced**

I undermenuen vælges herefter **Lone pairs**



## Hvordan ændres en strukturformel, så man kan se ladninger i forbindelsen?

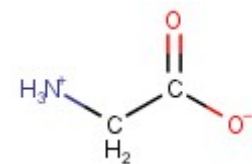
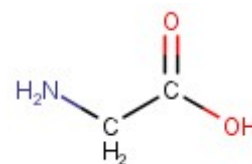
For en carboxylsyre (-COOH) eller en amin (fx en primær amin C-NH<sub>2</sub>) vil man undertiden gerne tegne den korresponderende base henholdsvis korresponderende syre. Det kan gøres på følgende måde:


Først tegnes molekylet.

I den horisontale menu til venstre vælges **+**, hvis man vil øge ladningen (svarer til at binde et ekstra H-atom til det valgte atom). Hvis man vil mindske ladningen vælges **-** (svarer til at fjerne et H-atom).

Herefter klikkes på det atom, som skal have ændret ladning.

Hvis man vil fjerne ladningen igen, så vælges den modsatte ladning, og der klikkes på atomet igen.



Det er muligt at flytte på ladningens placering. Vælg  i menulinjen. Klik nu på ladningen med venstre musetast. Hold denne nede, mens der flyttes på ladningen til dets nye position.

## Hvordan laves en boks med navn, molekylformel mm?

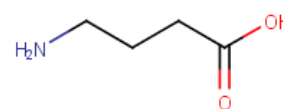
I hovedmenuen vælges **Structure**

I menu vælges punktet **Place Analysis Box**

Man kan også bruge **"Ctrl+I"**.

Indholdet i boksen kan stilles under Edit/Preferences - vælg herefter Analysis Box.

Husk at navne skal omdannes til dansk navne. Dvs. i det viste tilfælde 4-aminobutansyre.



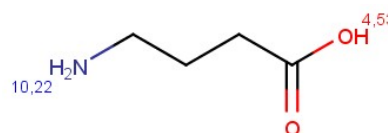
Name: 4-aminobutanoic acid  
Molecular weight: 103,12  
Formula: C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>NO<sub>2</sub>  
Traditional name: gamma(amino)-butyric acid

## Hvordan bestemmes en pK<sub>s</sub> værdi ved hjælp af Marvin Sketch?

Man kan ved hjælp af MarvinSketch bestemme

**beregne** syrestyrkeeksponenter, pK<sub>s</sub>, for en syre, fx en carboxylsyre. Tilsvarende vil det også være muligt at bestemme basestyrkeeksponenter, pK<sub>b</sub>, for en base, fx en amin. Dog skal man være opmærksom på, at for en base angives den beregnede pK<sub>s</sub> værdi for den korresponderende syre til basen.

I MarvinSketch er en syregruppe markeret med rødt, mens en base vises med blå farve. I eksemplet til højre er carboxylsyrens pK<sub>s</sub> beregnet til 4,53, og aminens korresponderende pK<sub>s</sub> værdi 10,22. Derved bliver basens pK<sub>b</sub> værdi 3,78. På engelsk betegnes pK<sub>s</sub> med pK<sub>a</sub> (a for acid).



Man skal dog være opmærksom på, at værdierne er beregnede og ikke eksperimentelt bestemt, og derfor kan variere en del fra tabelværdier, som fx findes i Databogen fysik kemi. Hvis det er muligt at benytte eksperimentelt bestemte værdi, som fx givet i Databogen fysik kemi, bør disse foretrækkes. Men kan sådanne eksperimentelle værdier ikke umiddelbart bestemmes, kan man benytte de beregnede fra MarvinSketch. Nogle gange kommer MarvinSketch med pK<sub>s</sub> værdier for funktionelle grupper, som vi i gymnasiesammenhæng betragter, som ikke havende syre-base egenskaber. Fx hydroxygruppen i en alkohol (pK<sub>s</sub> over 14). Man bør se bort fra denne type beregnede værdier ved brug i gymnasiesammenhæng.

### Bestemmelse af en syres pK<sub>s</sub> værdi

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Protonation**

I undermenuen vælges herefter **pKa**

Herved fremkommer en menu "pKa Options".

Klik på Ok. Nu vises strukturformlen med en

### Bestemmelse af en bases pK<sub>b</sub> værdi

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Protonation**

I undermenuen vælges herefter **pKa**

Herved fremkommer en menu "pKa Options".

Klik på Ok. Nu vises strukturformlen med en



angivelse af  $pK_s$  med rødt.

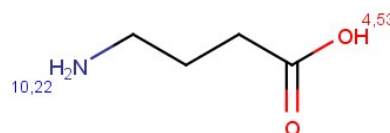
I menuen kan man indstille området inden for  $pK_s$ -værdierne skal findes.

Minimal basic pKa	-2
Maximal acidic pKa	11

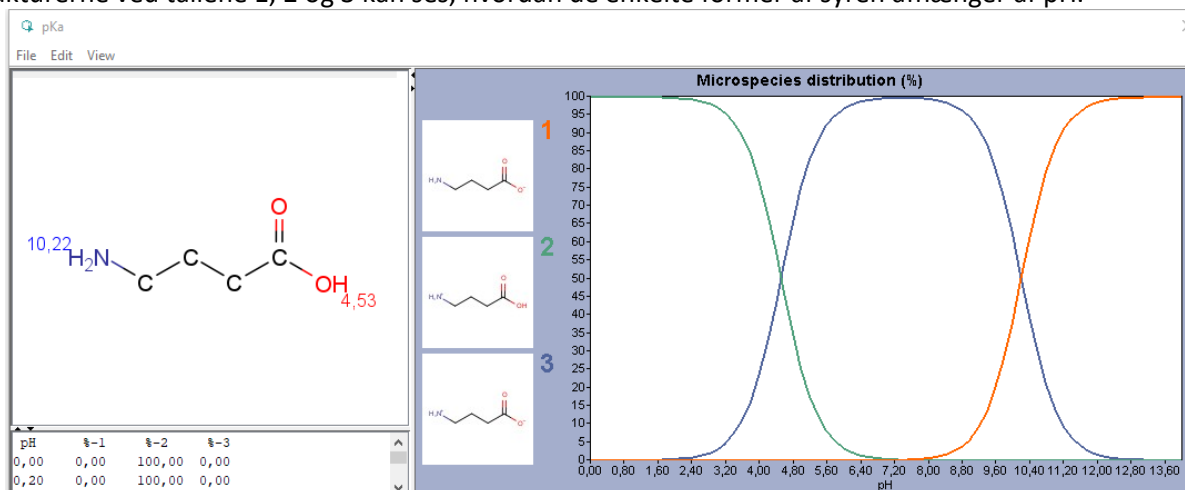
angivelse af  $pK_s$  for den korresponderende syre med blå. Herefter benyttes formler til beregning af  $pK_b = 14,00 - pK_s$ .

## Hvordan tegnes et fordelingsdiagram for en syre ved hjælp af Marvin Sketch?

I et fordelingsdiagram for en syrer (evt polyhydrone syrer) vises molbrøker for de forskellige former af syren som funktion af pH. Dvs. i fordelingsdiagrammet kan aflæses det relative indhold af en bestemt form af syren ved en bestemt pH-værdi. For monohydrone syrer vil dette svare til et bjerrumdiagram, men dette gælder ikke for polyhydrone syrer.

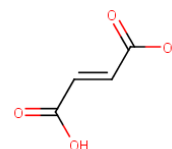


Fordelingsdiagrammet tegnes i MarvinSketch ved i menuen at vælge **Calculations**, og i undermenuen **Protonation**. Der fremkommer da en ny menu, og der vælges **pKa**. Herved fremkommer en boks, som vist i eksemplet nedenfor. Fordelingsdiagrammet ("microspecies distribution (%)") er vist til højre. Ved at klikke på strukturerne ved tallene 1, 2 og 3 kan ses, hvordan de enkelte former af syren afhænger af pH.



## Hvordan vises *cis-trans* isomere forbindelser?

Hvis man har en kemiske forbindelse, som kan udvise *cis-trans* isomeri, dvs. stereoisomeri omkring en C=C-binding, er det muligt at dels finde dets isomere forbindelse og dels dets systematiske navn. Med hensyn til navngivning benytter MarvinSketch E/Z-navngivning (systematisk navngivning ifølge IUPAC). Navngivningen sker på almindeligvis, se ovenfor.



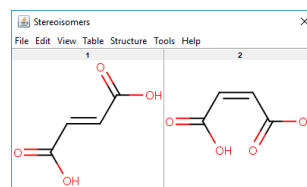
Ovenstående forbindelses traditionelle navn er fumarsyre (på engelsk: fumaric acid). Dets systematiske navn er: (2E)-but-2-endisyre (på engelsk: (2E)-but-2-enedioic acid)

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Isomers**

I undermenuen vælges **Stereoisomers**

I menuboksen, som fremkommer, vælges **double bond stereo isomers**.



Forbindelsen til højre hedder (2Z)-but-2-endsyre (traditionelt navn er maleinsyre)

## Hvordan vises spejlbillede isomere forbindelser?

Hvis man har en kemiske forbindelse, som kan udvise spejlbilledisomeri (også kaldet optisk isomeri), dvs. stereoisomeri omkring et asymmetrisk C-atom, er det muligt at dels finde dets isomere forbindelse og dels dets systematiske navn. Med hensyn til navngivning benytter Marvin Sketch R/S-navngivning (systematisk navngivning ifølge IUPAC). Navngivningen sker på almindeligvis, se ovenfor.


I hovedmenuen vælges **Calculations**


I menu vælges punktet **Isomers**

I undermenuen vælges **Stereoisomers**

I menuboksen, som fremkommer, vælges **tetrahedral stereo isomers**.

I MarvinSketch benyttes følgende symboler til at vise den rumlige opbygning omkring det asymmetriske C-atom (der er tale om en normal standard for at vise den rumlige opbygning):

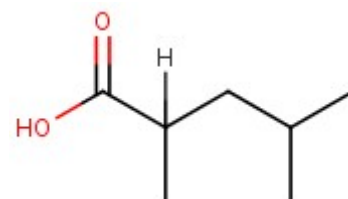
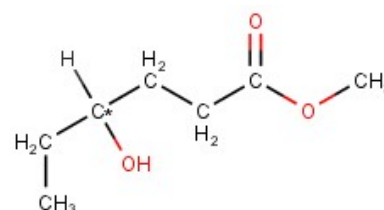
Symbolet  angiver en kemisk binding, som peger ud mod betragteren af den kemiske struktur, dvs. peger ud af "skærmens" plan.

Symbolet  angiver en kemisk binding, som peger væk fra betragteren af den kemiske struktur, dvs. peger ind i "skærmens" plan.

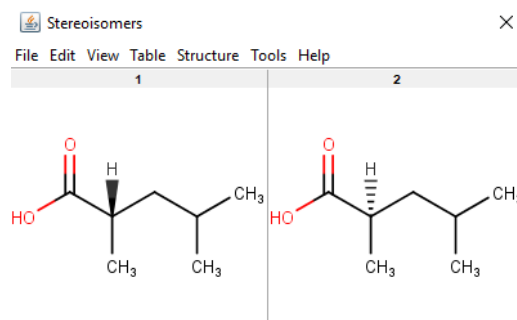
Hvis man selv ønsker at tegne en kemisk binding med en af symbolerne ovenfor, så kan man vælge disse under menupunktet for bindinger i menuen i venstre side af skærmbillede.

## Hvordan kan man markere et asymmetrisk C-atom i en forbindelse?

Et asymmetrisk C-atom (kiralt center) i en kemisk forbindelse kan angives ved en \* ud for det pågældende C-atom. Det gøres ved at skrive en "tekst" med tegnet \* og sætte det ved C-atomet. Hvordan man skriver teksten "\*" fremgår af "Hvordan skriver man en tekst ved en kemisk forbindelse".



Ovenstående forbindelses systematiske navn er 2,4-dimethylpentansyre (på engelsk: 2,4-dimethylpentanoic acid). C-2 er et asymmetrisk C-atom.



Forbindelsen til højre hedder (2S)-2,4-dimethylpentansyre og til venstre (2R)-2,4-dimethylpentansyre.

## Hvordan ændres farverne på de viste atomer i en forbindelse?

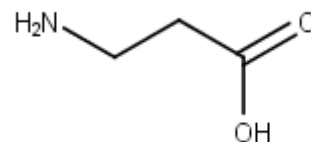
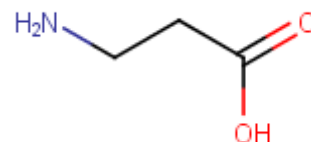
Det er muligt at skifte farver på atomerne i en forbindelse. Fx kan man sætte alle farverne til "sort". Som udgangspunkt vises grupper omkring oxygenatomer med rødt og omkring nitrogen med blå.

I hovedmenuen vælges **View**

I menu vælges punktet **Colors**

I undermenuen vælges **Monochrome**. Herved vises atomerne/atomgrupperne med sort.

Farverne kan fås igen ved at vælge **CPK** i undermenuen.



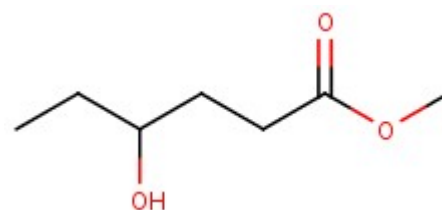
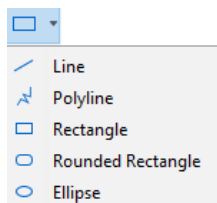
## Hvordan kan man markere et bestemt område i en kemisk forbindelse?

Hvis man ønsker at markere et bestemt område i en kemisk forbindelse, fx en funktionel gruppe, kan det gøres ved at tegne en "ring" omkring området. Det er muligt at skifte farver på "ringen", fx hvis man har flere funktionelle grupper, som skal markeres i forbindelsen.

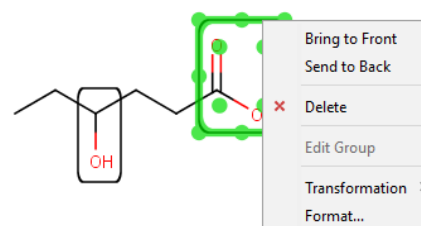
I menuen i venstre side af skærbillede vælges knappen for tegning af rektangler mm. Når menuen foldes ud, ses forskellige geometriske figurer, som kan benyttes til markering på den kemiske struktur.

Vælg fx "Rounded Rectangle"

Hold musen nede og træk figuren ud rundt om det område, som ønskes markeret.

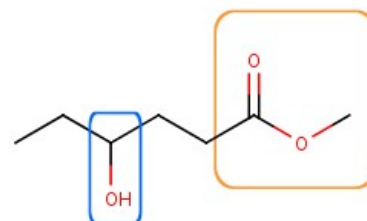


Man ønsker at markere de to funktionelle grupper i molekylet



Hvis rammens farve eller tykkelse ønskes ændret, højre klikkes på rammen, således at der fremkommer en "grøn" markering af rammen. Der fremkommer nu en menu, hvor "Format" vælges, og herefter fremkommer menuen "Graphics Object Properties":

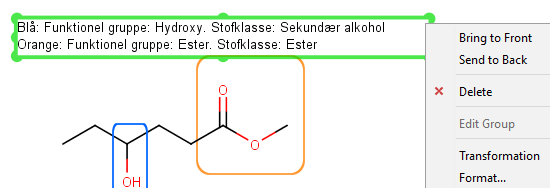
- Outline: benyttes til at ændre rammens farve eller tykkelse
- Background: benyttes til at ændre den geometriske figurs baggrundsfarve. Hvis man ændrer baggrundsfarven, kan man benytte "Send to Back" og "Bring to Front" for at få den visning af det markerede område, som ønskes.



## Hvordan skriver man en tekst ved en kemisk forbindelse?

Hvis man ønsker at skrive en tekst i forbindelse med en kemisk struktur, vælges knappen **T** (text) i menuen i venstre side af skærbillede. Herefter markeres det område, hvori man ønsker at skrive sin tekst, og derefter skrives teksten inde i feltet.

Man kan ændre på skrifttype, størrelse og farve ved at køre musen over tekstfeltet til man ser en "grøn ramme". Herefter højre klikkes, således man får en



Man ønsker at angive de to funktionelle grupper og tilhørende stofklasser i molekylet

menu frem. I denne vælges "Format". I den fremkomne menu "Graphics Object Properties" kan man herefter ændre de ønskede størrelser i forbindelse med teksten.

## Hvordan laves en graf for logD's afhængighed af pH?

Man kan få en beregnet graf for **fordelingsforholdet D** (eller egentlig  $\log(D)$  - titalslogaritmen) afhængighed af pH.

$$D = \frac{c_A(\text{octan-1-ol})}{c_A(\text{aq})}$$

Man skal være opmærksom på, at der ikke er tale om en eksperimentelt bestemt sammenhæng, men om en simulation/beregning af sammenhængen.

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Partitioning**

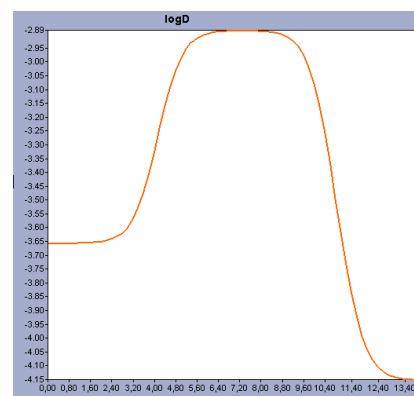
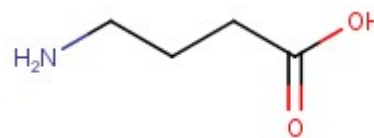
I undermenuen vælges **logD**

Herved fremkommer en menu "logD Options".

Klik på Ok.

Nu vises et vindue "logD" med grafen, samt data, som evt. kan kopieres til et regneark.

Ved brug af fanebladet "Display Options" i menuen "logD Options" kan pH-interval for grafen angives.



## Hvordan bestemmes P (fordelingskonstanten)?

Man kan få en beregnet værdi for fordelingskonstanten  $P$  for en forbindelse i et tofase system (fordeling mellem octan-1-ol og vand).

$$P = \frac{[A](\text{octan-1-ol})}{[A](\text{aq})}$$

Hvis en kemisk forbindelse kan være på forskellige former (fx en carboxylsyre), så kan det være en fordel at tegne den "ladet form", da MarvinSketch både vil beregne for den "uladet" og den "ladet" form af molekylet. Fordelingskonstanten  $P$  kaldes også for lipofiliteten og benævnes også med  $K_f$ .

MarvinSketch beregner ikke direkte  $P$ , men titalslogaritmen til  $P$ .

Man skal være opmærksom på, at der ikke er tale om en eksperimentelt bestemt sammenhæng, men om en simulation/beregning af sammenhængen.

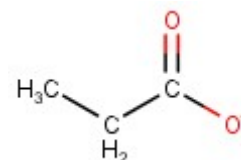
I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Partitioning**

I undermenuen vælges **logP**

Herved fremkommer et nyt vindue med forbindelsen. LogP kan aflæses i øverst venstre hjørne i vinduet til venstre. Hvis forbindelsen findes i en "uladet" og en "ladet" form, vil der være flere værdier, se evt. eksemplet til højre.

I vinduet kan man i øvrigt se, hvordan forskellige dele af molekylet/ionen bidrager til den samlede logP værdi.



Propanoat, korresponderende base til propansyre.

logP

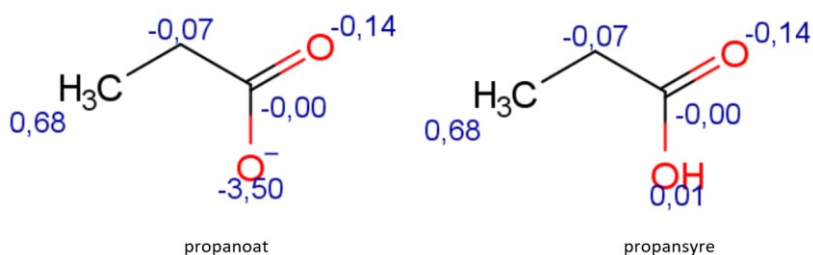
logP of ionic species = -3,05  
logP of nonionic species = 0,48

$$\log P_{\text{ionisk forbindelse}} = \log \left( \frac{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-](\text{octan-1-ol})}{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-](\text{aq})} \right) = -3,05$$

$$P_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-} = 10^{-3,05} = 0,000891$$

$$\log P_{\text{nonionisk forbindelse}} = \log \left( \frac{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}](\text{octan-1-ol})}{[\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}](\text{aq})} \right) = 0,48$$

$$P_{\text{CH}_3\text{CH}_2\text{COOH}} = 10^{0,48} = 3,02$$



## Hvordan bestemmes H-donor henholdsvis H-acceptorer i en forbindelse?

Man kan få Marvin Sketch til at vise grupper, som er henholdsvis hydrogen-donor og hydrogen-acceptor til hydrogenbindinger. Donorgrupper vises med blåt og angives ved D, og acceptorgrupper vises med rødt og angives ved A.

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **Other**

I undermenuen vælges **H Donor/Acceptor**. Der efter trykkes på OK. Herved vises atomerne/atomgrupperne med de omtalte farver og symboler, se eksemplet til højre.

H Bond Donor/Acceptor

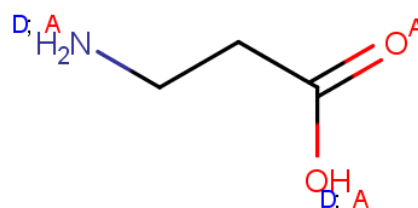
File Edit

Donor count = 2

Donor sites = 3

Acceptor count = 3

Acceptor sites = 5



## Findes der skabeloner i MarvinSketch med strukturformler, som kan hentes?

I MarvinSketch findes en længere række af kemiske skrukturer, som kan benyttes som skabelon til at tegne ud fra. Listen er lang, og omfatter blandt andet carbonhydrid ringe, aromatiske forbindelser, heterocykler, carbohydrater, aminosyrer, DNA/RNA's baser og vitaminer.

Skabeloner med sådanne grundstrukturer findes ved hjælp af menupunktet: **Insert, Templates**. Herefter fremkommer en menu, hvor man kan vælge en grundstruktur til sine videre tegninger.

## Hvordan kan en tredimensionel struktur af et molekyle vises i MarvinSketch?

Hvis man ønsker at se en tredimensionel struktur af et molekyle, kræver det indstillingen "Marvin v5.0" (se side 2 for, hvordan der veksles mellem to indstillinger "Marvin" og "Marvin v5.0").

Først omstilles til "Marvin v5.0" (ses side 2).

Søg for, at alle atomer vises, både C- og H-atomer. Se tidligere, hvordan dette gøres.

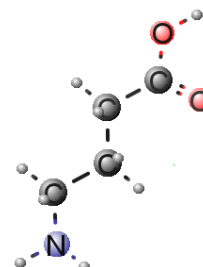
I hovedmenuen vælges **View**

I menu vælges punktet **Open MarvinView3D**

Herefter åbner et nyt vindue, hvor struktur ses og kan roteres (grafikken er ikke speciel god).

MarvinView

File Edit View Tools Pages Help

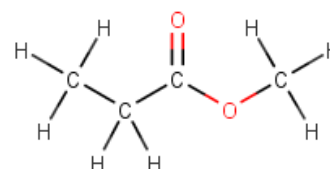


## Følgende er primært relevant for kemi A

### Hvordan laves et H-NMR spektre af en forbindelse?

MarvinSketch kan lave "beregnete/simulerede"  $^1\text{H}$ -NMR spektre, dvs. ud fra en kemisk struktur kan man få opstillet et  $^1\text{H}$ -NMR med kemiske skifte, koblingsmønster, integraler mm. Der er således ikke tale om "eksperimentelt målte" spektre, men beregnede, og der kan selvfølgelig være forskel på eventuelle eksperimentelle spektre og de ved MarvinSketch bestemte. Det er vigtigt at have forståelse for forskellige indstillinger i MarvinSketch, som man kan lave, for at få en god overensstemmelse mellem et eventuelt givet  $^1\text{H}$ -NMR spektre, og det man selv er kommet frem til. Her gives de vigtigste muligheder.

Første skridt er at lave en tegning af den kemiske struktur. Her kan det, udelukkende for at få overblik over H-atomernes placering, være en fordel at lave en strukturformel, som viser alle C- og H-atomer i molekylet (se overfor for hvordan dette gøres).

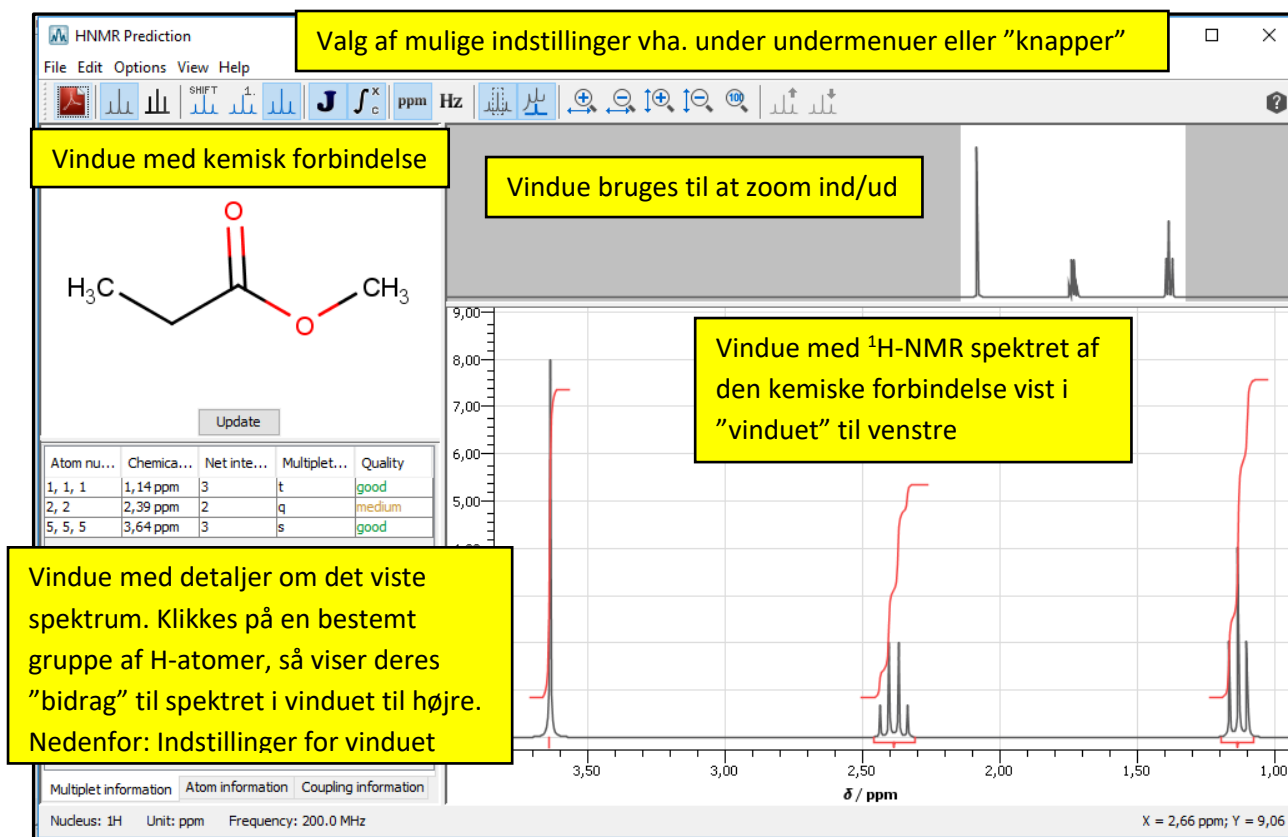


Herefter fås  $^1\text{H}$ -NMR spektret ved:

I hovedmenuen vælges **Calculations**

I menu vælges punktet **NMR**

I undermenuen vælges **HNMR**. Når der trykkes på HNMR, åbnes et nyt vindue med et HNMR spektrum af det tegnede molekyle.



Viser valg af vigtige paramter for det viste  $^1\text{H}$ -NMR spektrum. Læg især mærke til den valgte "Frequency". Det viste spektrum afhænger en del af valget af "NMR Prediction Frequency", se under menuen "Options".

Ved hjælp af den øverste menu kan vælges forskellige indstillinger. Især er "NMR Prediction Frequency" en vigtig indstilling for visning af det konkrete spektrum (se under Options). Nogle af de vigtigste indstillinger kan også foretages ved bruge af "knapperne" under menulinjen. Her omtales nogle vigtige.

**Hvordan vises/fjernes "integralerne" på spektret?**

Integralerne er vist med rødt på spektret. Man kan få vist/fjernet integralerne i menupunktet View/Integral Curve eller benytte knappen:

**Hvordan skiftes mellem "ppm" og "Hz" på x-aksen?**

Man kan ændre enheden for det kemiske skifte på x-aksen ved i menupunktet View/Measurement unit; ppm eller Hz. Eller ved at benytte knapperne:



Normalt benyttes **ppm**.

**Hvordan skiftes mellem at vise af spin-spin koblingsmønsteret henholdsvis ikke at vise dette?**

Man kan ændre visning af spin-spin kobling i menupunktet Options/Spin-Spin coupling. Eller ved at benytte knappen:



Normalt er spin-spin koblingen aktiveret.

**Hvordan ændres "NMR prediction frequency"?**

Man kan ændre frekvensen for "apparatet" ved at vælge menupunktet Options/NMR prediction frequency. Herved fremkommer en liste af muligheder gående fra 60 MHz til 1000 MHz. Ovenstående spektrum er vist ved 200 MHz.