



Jakso 4 Molekyylien avaruusrakenne ja stereoisomeria

- ❖ Jakson tavoitteet, opetusvinkkejä, ajankäyttö
- ❖ Tutki ja kokeile!
 - **Työ 11. Molekyylimalleja tietokoneella**
- ❖ Kertaustestejä
- ❖ Kaavioita ja kuvapohjia
- ❖ Oppikirjan laskutehtävien ratkaisut



Jakson tavoitteet, opetusvinkkejä, ajankäyttö

Jakson 4 tavoitteena on (OPS:n mukaisesti) syventää orgaanisten aineiden rakenteiden mallintamista. Jaksossa hyödynnetään tietoa atomin ulkoelektronirakenteesta (tuttu jo peruskoulusta ja KE1-kurssilta) ennustettaessa sidosten avaruudellista suuntautumista ja molekyylien muotoa (luku 4.1).

Molekyylien kolmiulotteisia rakenteita mallinnetaan erilaisin piirto-ohjelmin ja muovisin molekyylimallein. Opiskelijoille tulee korostaa, että rakennekaavoissa sidoskulmat tulee merkitä oikein. Tämä tarkoittaa, että hiiliatomeista, joiden välillä on kaksoissidos, sidokset suuntautuvat noin 120 asteen kulmiin. Eniten epätarkkuuksia tulee juuri sellaisten molekyylien tai molekyylinosien sidoskulmissa, joissa on hiiliatomien välinen kaksoissidos. Neljä yksinkertaista sidosta hiiliatomista osataan jo peruskoulussa opittujen mallien perusteella piirtää oikein. Samoin hiiliatomeista, joiden välillä on kolmoissidos, sidokset osataan piirtää tasaisesti hiiliatomien molemmille puolille (lineaarinen molekyylinosa).

Sidoskulmien oikeata merkitsemistä tarvitaan jakson lopussa, kun harjoitellaan stereoisomeerien mallintamista erilaisilla rakennekaavoilla. Oletettavaa on, että opiskelijoilta vaaditaan kolmiulotteisen rakenteen oikeaa mallintamista (= piirretyissä rakennekaavoissa sidoskulmat oikein) myös yo-kokeessa.

Luvussa 4.2 esitellään stereoisomerian eri lajit. Nykyisin ei enää puhuta niinkään avaruusisomeriasta, vaan stereoisomeriasta. Lisäksi stereoisomerian jaottelussa on käytössä käsitteet konformaatio- ja konfiguraatioisomeria (jonka alle *cis-trans*-isomeria kuuluu).

Cis-trans-isomeerien nimeämistä varten on esitetty myös *E/Z*-etuliitteiden käyttö, joka on IUPAC:in suositusten mukainen yleispätevä tapa erottaa sellaiset konfiguraatioisomeerit toisistaan. Optisten isomeerien nimeämissäännöt voivat perustua joko niin sanottuun absoluuttiseen konfiguraatioon, jota varten tarvitsee muistaa substituenttien prioriteettisäännöt. Koska säännöstä on sen verran monimutkainen, eikä sitä ole otettu esim. taulukkokirjaan, ei optisten isomeerien nimeämistä kannata erityisesti korostaa. Oppikirjassa on esitetty vain polarimetrisen mittaukseen perustuva isomeerien nimeämistapa (merkinnät l- ja d-).

OPS:n sisältöjen mukaisesti jaksossa käsitellään myös stereoisomeerien ominaisuuksia. Opiskelijan tulee ymmärtää, että stereoisomeereilla on samat kemialliset ominaisuudet (sama funktionaalinen ryhmä), mutta jotkut fysikaaliset ominaisuudet (esim. kiehumis- tai sulamispiste) tai aineen vesiliukoisuus voivat poiketa. Erot voidaan selittää molekyylien kolmiulotteisen rakenteen vaikutuksella yhdisteen poolisuuteen. Jaksossa 5 esitellään tarkemmin, mikä merkitys molekyylien kolmiulotteisella rakenteella on solutasolla.

Ajankäyttö: 2 oppituntia (75 min)

3 oppituntia (45 min)



Tutki ja kokeile!

Työ 11. Molekyyylimalleja tietokoneella



Työn tavoitteet	Työn toteutus ja ajankäyttö	Arviointi
<p>Tutustutaan johonkin molekyylimallinnusohjelmaan / piirto-ohjelmaan.</p> <p>Harjoitellaan ohjelman käyttöä ja selvitetään, mitä toimintoja ohjelma sisältää.</p> <p>Harjoitellaan, kuinka mallinnusohjelmalla laaditut molekyylit voidaan liittää osaksi tekstitiedostoa.</p>	<p>Opiskelijat lataavat työssä käytettävän ilmaisen ohjelman omalle koneelleen ja hyödyntävät sitä itsenäisesti.</p> <p>Mikäli käytetään ChemSketchiä, opettaja voi jakaa alla olevan suomenkielisen ohjeistuksen niille, jotka sitä tarvitsevat.</p> <p>Ajankäyttö: 1 oppitunti (vaihtoehtoisesti itsenäinen suoritus, joka on osa kurssisuoritusta)</p>	<p>Opettaja voi arvioida opiskelijan aktiivisuutta ja onnistumista oppitunnin aikana sekä työhön liittyvän kirjallisen raportin joko sanallisesti tai numeerisesti.</p>

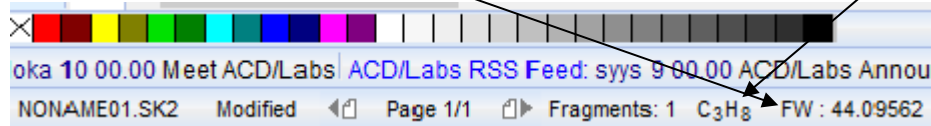
ChemSketch-ohjelman yksinkertaiset käyttöohjeet (ohjelmaversiolle 2015)

a) Piirto-osa

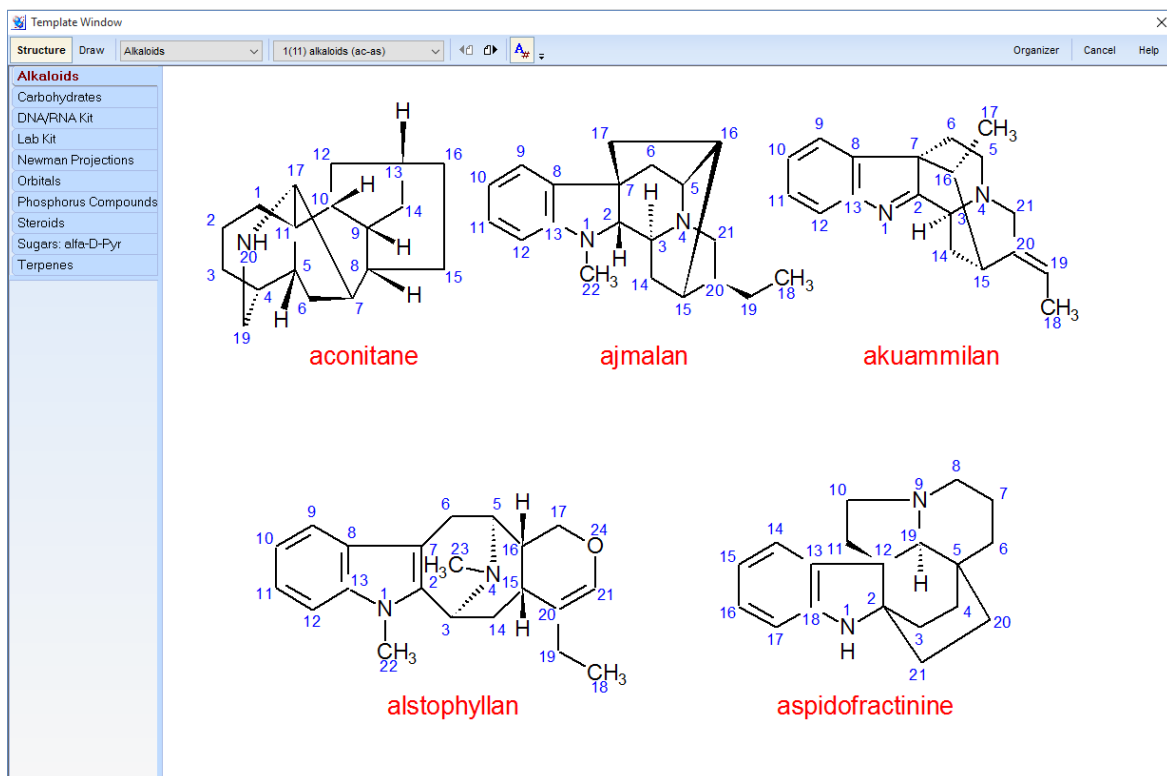
- Käynnistä ohjelma valitsemalla Käynnistä-valikosta *ACDlabs Freeware 2015* ⇒ *ChemSketch*.
- Yksinkertaisinta on piirtää hiilivetyjä: Valitse hiili vasemmalla sijaitsevasta valikosta ja klikkaa työtilaa. Voit kasvattaa hiiliketjua painamalla hiiren vasemman näppäimen ensimmäisen hiilen kohdalla alas ja siirtämällä kohdistinta johonkin suuntaan. Vapauta näppäin tämän jälkeen. Jos hiiliketjussa on kolme tai useampia hiiliatomeja, vain päätyhiilet jäävät näkyviin.
- Yksinkertaisen sidoksen voi muuttaa kaksois- tai kolmoissidokseksi napauttamalla hiirellä sidosviivaa.
- Syklisiä hiilivetyjä saat piirrettyä vetämällä sidokset hiiren avulla renkaaksi.
- Jos tarvitset muita alkuaineita, valitse ne vasemmalla olevasta alkuainepalkista.

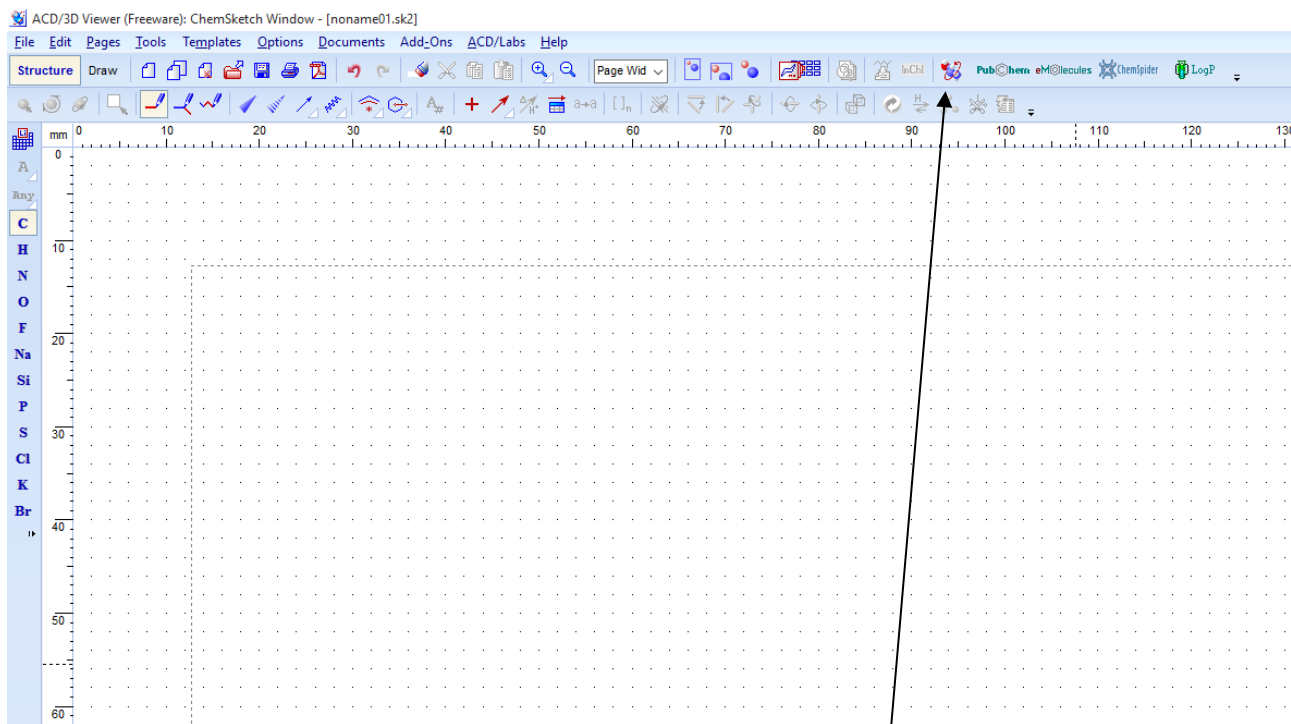



- Piirrettyjä molekyylin osia voi pyyhkiä pyyhekumi-työkalulla .
- Molekyyliä tai niiden osia valitaan valintatyökalulla .
- Piirtotilan alareunan tilariviltä näkyy piirrettävän yhdisteen molekyylikaava ja suhteellinen molekyyli massa (FW = formula weight).



- Painamalla F5 aukeaa ikkuna (Template Window), jossa on joidenkin yhdisteiden valmiita rakennekaavoja ja erilaisia piirrosobjekteja (esimerkiksi laboratoriovälineitä).

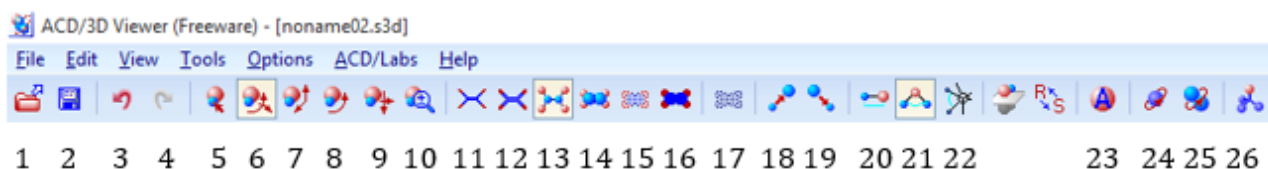




- Molekyyli kopioidaan 3D-mallinnusosaan painikkeella .

b) Mallinnusosa 3D-Viewer

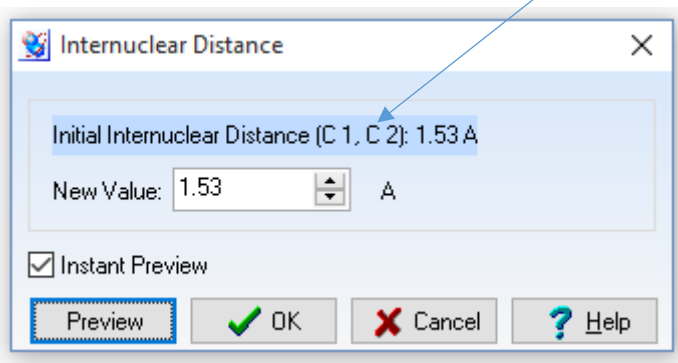
- Mallinnusosan keskeisiä toimintoja ovat



- 1 = avaa tallennetun molekyylin
- 2 = tallentaa mallinnetun molekyylin
- 3 = kumoaa edellisen toiminnon
- 4 = toistaa edellisen toiminnon
- 5 = valitsee yksittäisen atomin
- 6 = pyörittää molekyyliä hiiren avulla joka suuntaan
- 7 = pyörittää molekyyliä hiiren avulla kahteen suuntaan
- 8 = pyörittää molekyyliä vain yhteen suuntaan
- 9 = siirtää hiiren avulla molekyylin paikkaa näytöllä

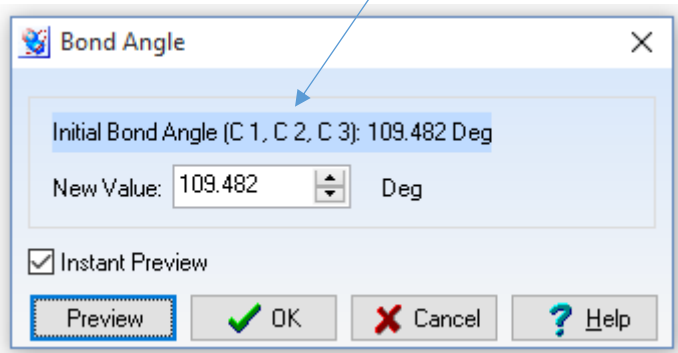


- 10 = suurentaa tai pienentää hiiren avulla molekyyliä
- 11 = rautalankamalli (molekyylin sidokset näkyvät viivoina)
- 12 = tikkumalli (molekyylin sidokset näkyvät tikkuina)
- 13 = pallotikkumalli (molekyylin atomit näkyvät palloina ja sidokset tikkuina)
- 14 = pallomalli (molekyylin atomit näkyvät toisiinsa liittyneinä palloina)
- 15 = pistemalli (sama kuin edellä mutta pisteillä esitettynä)
- 16 = levymalli (näyttää pallomallin kaksiulotteisena)
- 17 = piste-sidosmalli (yhdistää pistemallin malleihin 7-9)
- 18 = kasvattaa atomikoko (toimii vain pallotikkumallissa)
- 19 = pienentää atomikoko (toimii vain pallotikkumallissa)
- 20 = mittaa kahden atomin välisen sidospituuden (internuclear distance).



Valitse kaksi atomia hiirellä. Sidospituus näkyy uudessa ikkunassa yksikössä Å (= 10⁻¹⁰ m).

21 = mittaa kolmen atomin välisen sidoskulman asteina (bond angle).



Valitse kolme atomia hiirellä. Sidoskulmaa voi muuttaa valintaikkunasta.



22 = mittaa kahden sidoksen välisen torsiokulman.

Valitse neljä atomia hiirellä. Torsiokulmaa voi muuttaa valintaikkunasta.

23 = määrittää käytettävät värit

24 = pyörittää molekyyliä automaattisesti

25 = pyörittää molekyyliä vaihtaen välillä pyörimissuuntaa ja muuttaa molekyylin mallia

26 = laskee ja piirtää molekyylin energeettisesti edullisimman muodon.



Kertaustestejä

Opitun testausta

Linkki Kahoot testiin:

<https://play.kahoot.it/#/k/936efb63-2f7c-4d61-8d98-52daa22bfff0>



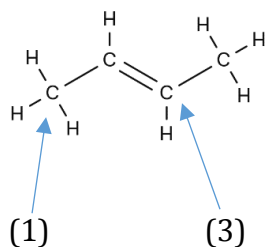
Mooli 2 - Jakso 4. Molekyylien avaruusrakenne ja stereoisomeria

- testi 1

Nimi: _____ Pisteet: ____/14 p

Vastaa tehtäviin 1-8 merkitsemällä, onko väittämä oikein (O) vai väärin(V) tai valitse oikeat vaihtoehdot ympäröimällä ne. Täydennä tehtävät 9-10. Saat käyttää apuna taulukkokirjaa ja laskinta.

1. 2-buteenimolekyylissä (rakennekaava ohessa) hiiliatomista (1) lähtevien sidosten sidoskulmat ovat pienempiä kuin hiiliatomista (3) lähtevien sidosten sidoskulmat. _____



2. Sykloheksaani on lineaarinen molekyyli. _____

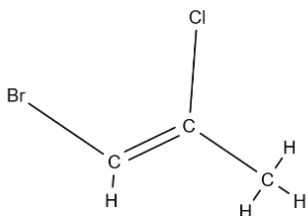
3. Etanolimolekyylissä kaikkien atomien väliset sidoskulmat ovat noin 109,5°. _____

4. Oktaanilla esiintyy sekä runko- että konformaatioisomeriaa. _____

5. *Cis-trans*-isomeriaa esiintyy kaikilla orgaanisilla yhdisteillä, joissa on hiiliatomien välinen kaksoissidos. _____



6. Tarkastele oheista rakennekaavaa.



- a) Yhdisteellä esiintyy konformaatioisomeriaa.
- b) Kuvassa on esitetty yhdisteen E-isomeeri.
- c) Molekyylissä on yksi asymmterinen hiiliatomi.
- d) Yhdiste on poolinen.

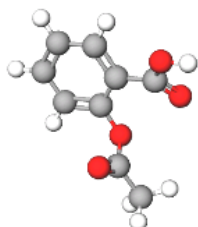
7. Ohessa on esitetty erään hiilivedyn rakennekaava viivakaavalla.



- a) Kyseessä on *cis*-heks-2-eeni.
- b) Kyseessä on *cis*-heks-3-eeni.
- c) Kyseessä on *trans*-heks-2-eeni.
- d) Kyseessä on *trans*-heks-3-eeni.



8. Oheinen malli kuvaa kipulääkkeenä tunnetun aspiriinin vaikuttavan aineen, asetyylisalisyylihapon, molekyyliä.



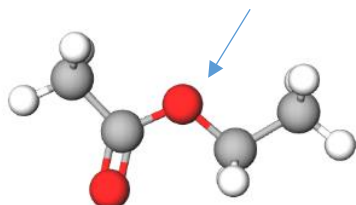
Mallin perusteella

- a) yhdiste on aromaattinen.
- b) yhdiste on optisesti aktiivinen.
- c) yhdisteellä esiintyy konfiguraatioisomeriaa.
- d) yhdisteessä on 8 sp^2 -hybridisoitunutta hiiliatomiä.

9. Esitä yhdisteen $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH}$ rakennekaava siten, että siinä näkyy sidosten avaruudellinen suuntautuminen. Merkitse rakennekaavaan asymmetrinen hiiliatomi. (2p)

10. Täydennä vastaukset alla esitetyn molekyylimallin perusteella. (4p)

- a) yhdisteryhmä: _____.
- b) sp^2 -hybridisoituneiden hiiliatomien lukumäärä: _____.
- c) funktioisomeerin nimi: _____.
- d) siduskulmat nuolella merkitystä atomista (noin): _____.





Mooli 2 - Jakso 4. Molekyylien avaruusrakenne ja stereoisomeria

- testi 1

Oikeat ratkaisut:

1. O

2. V

3. V

4. O

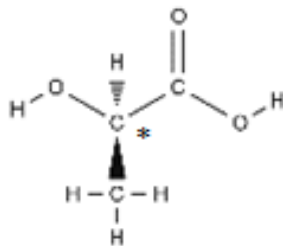
5. V

6. a), d)

7. d)

8. a), d)

9.



10.

a) esteri

b) yksi

c) butaanihappo

d) 105°



Mooli 2 - Jakso 4. Molekyylien avaruus rakenne ja stereoisomeria

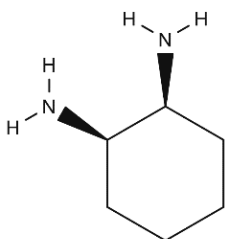
- testi 2

Nimi: _____ Pisteet: ____/12 p

Vastaa tehtäviin 1-8 merkitsemällä, onko väittämä oikein (O) vai väärin(V) tai valitse oikeat vaihtoehdot ympäröimällä ne. Täydennä tehtävät 9-12. Saat käyttää apuna taulukkokirjaa ja laskinta.

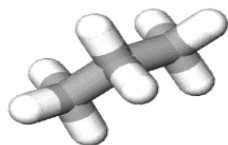
1. 1-kloori-pent-1-eenillä esiintyy *cis-trans*-isomeriaa. _____

2. Oheinen rakennekaava esittää kyseisen yhdisteen *cis*-isomeeriä. _____



3. Optisesti aktiivisten aineiden isomeerit voidaan tunnistaa spektrofotometrillä. _____

4. Oheisen molekyyylimallin mukaisella yhdisteellä esiintyy konformaatioisomeriaa. _____



5. *Cis*-1,2-difluorieteenimolekyylisiin muodostuu pysyvä dipoli. _____

6. Alaniini on pienin optisesti aktiivinen aminohappo. Alaniinin eri optisilla isomeereillä on samanlaiset kemialliset ominaisuudet. _____



7. Millä seuraavista yhdisteistä esiintyy optista isomeriaa?

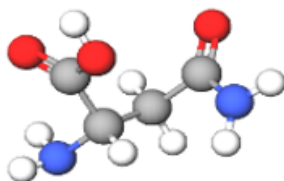
- a) $\text{CH}_3\text{CHBrCH}_3$
- b) $\text{CH}_2\text{BrCHBrCH}_3$
- c) $\text{CH}_2\text{BrCHBrCH}_2\text{Br}$
- d) $\text{CH}_3\text{CH}(\text{Br})\text{CH}_2\text{CH}_3$

8. Erään halogeeniyhdisteen molekyylikaava on $\text{C}_4\text{H}_7\text{Cl}$. Tämän perusteella

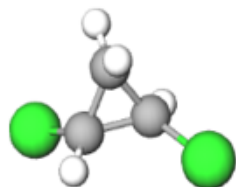
- a) yhdiste voi olla avoketjuinen, tyydyttynyt yhdiste, jolla esiintyy *cis-trans*-isomeriaa.
- b) yhdiste voi olla syklinen, tyydyttynyt yhdiste, jolla esiintyy *cis-trans*-isomeriaa.
- c) yhdiste voi olla avoketjuinen, tyydyttymätön yhdiste, jolla esiintyy *cis-trans*-isomeriaa.

9. Optisesti aktiivisten aineiden isomeerejä kutsutaan

10. Kuinka monta asymmetristä hiiliatomia on oheisessa molekyyliässä? _____.



11. Nimeä oheinen yhdiste. Vihreät atomit kuvaavat klooriatomeja.



12. Seosta, jossa on yhtä paljon optisesti aktiivisen aineen kumpaakin isomeeriä, kutsutaan



Mooli 2 - Jakso 4. Molekyylien avaruusrakenne ja stereoisomeria

- testi 2

Oikeat ratkaisut:

1. 0

2. 0

3. V

4. 0

5. 0

6. 0

7. b), d)

8. c)

9. peilikuvaisomeereiksi / enantiomeereiksi

10. yksi

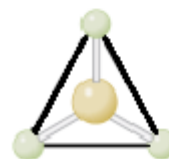
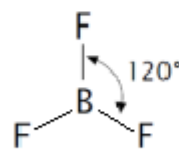
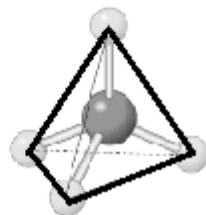
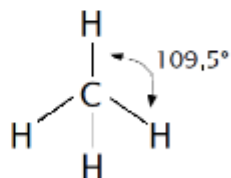
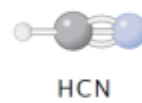
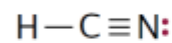
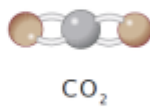
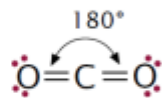
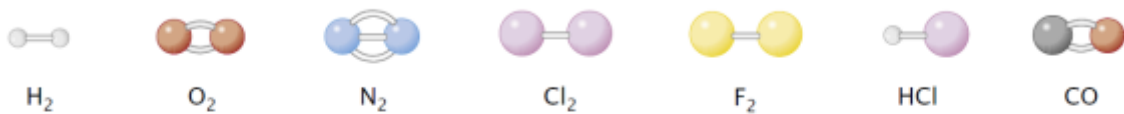
11. *Trans*-1,2-dikloorisyklopropani

12. raseemiseksi seokseksi



Kaavioita ja kuvapohjia

SIDOSTEN AVARUUDELLINEN SUUNTAUTUMINEN JA MOLEKYYLIEN MUOTO



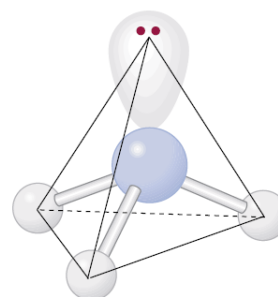
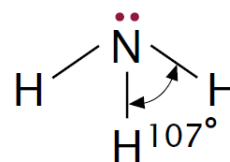
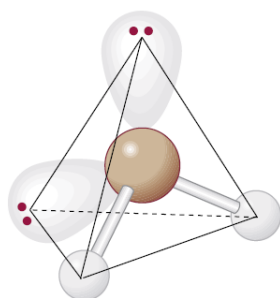
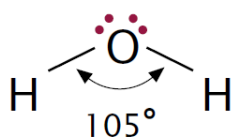


MOLEKYyliEN GEOMETRIA JA SIDOSTEN SUUNTAUTUMINEN

Keskusatomista lähtevien sidosten määrä	Sidosten suuntautuminen	Molekyylin muoto	Mallin mukaiset sidoskulmat
2		lineaarinen	180°
3		tasokolmio	120°
4		tetraedri	109,5°
5		trigonaalinen bipyramidi	90° 120°
6		oktaedri	90° 90°

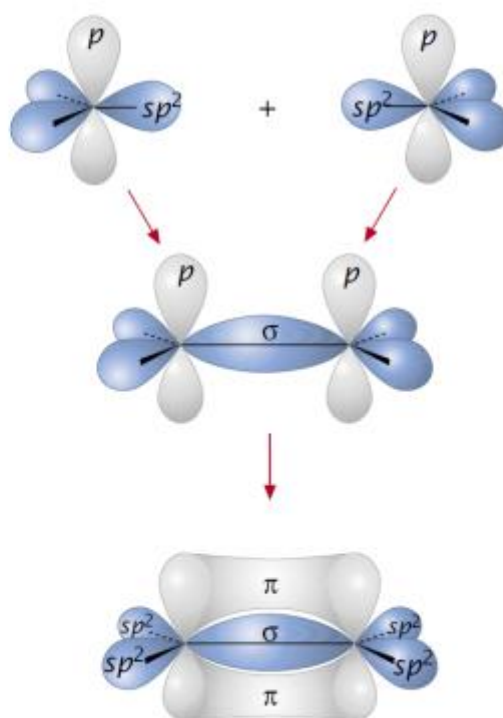


VAPAIEN ELEKTRONIPARIEN VAIKUTUS MOLEKYYLIN MUOTOON



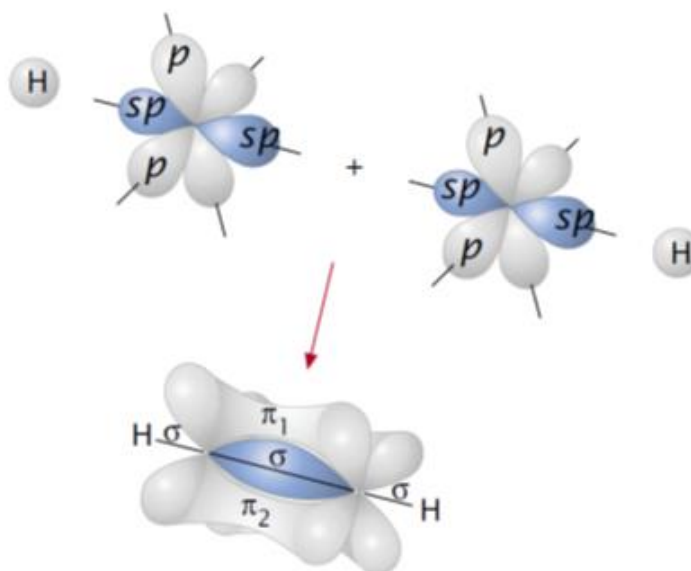


ORBITAALIEN YHTEENSULAUTUMINEN ETEENIMOLEKYYLISSÄ



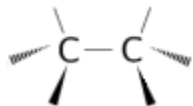
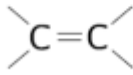
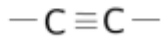


ORBITAALIEN YHTEENSULAUTUMINEN ETYYNIMOLEKYYLISSÄ



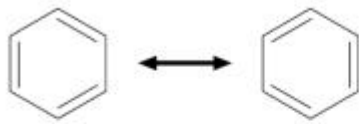


YHTEENVETO HIILEN HYBRIDISAATIOISTA JA MUODOSTUVISTA SIDOKSISTA

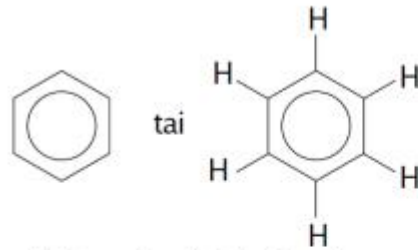
	sp ³ - hybridi- saatio	sp ² - hybridi- saatio	sp- hybridi- saatio
hiilen ulkoelektronirakenne	2(sp ³) ⁴	2(sp ²) ³ 2p ¹	2(sp) ² 2p ²
ulkoelektronien lukumäärä hybridisoituneilla orbitaaleilla	4	3	2
ulkoelektronien lukumäärä hybridisoitumattomilla orbitaaleilla	0	1	2
hiiliatomien välinen sidos	σ	σ + π	σ + 2π
sidoksen merkintä hiiliatomien välillä	C – C	C = C	C ≡ C
sidoskulmat	109,5° 	120° 	180° 



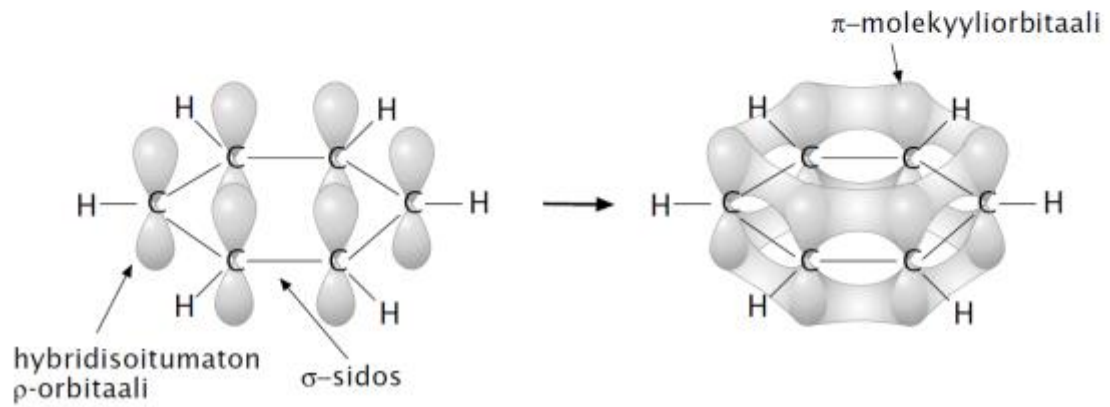
Bentseenirenkaan sidosten mallintaminen



Kekulé'n malli

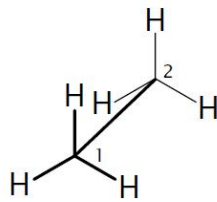
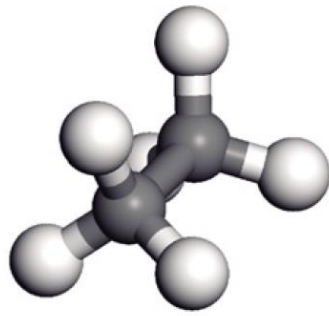


Elektronien delokalisaatio

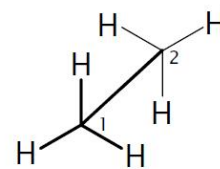
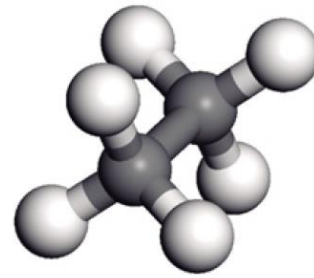




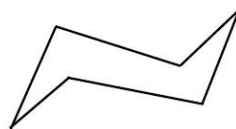
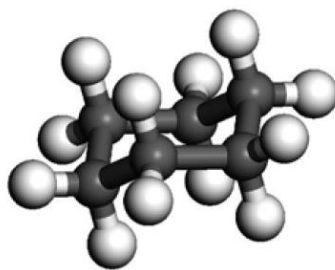
KONFORMAATIOISOMERIA



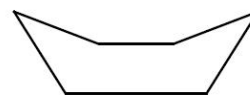
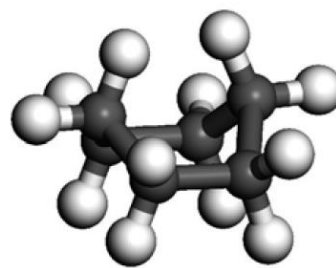
kohdakkain



lomittain



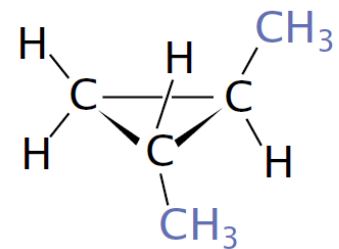
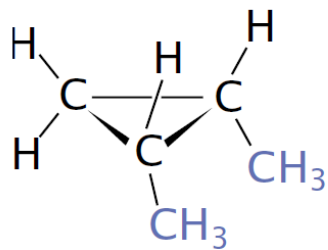
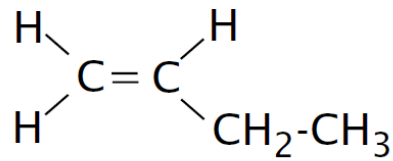
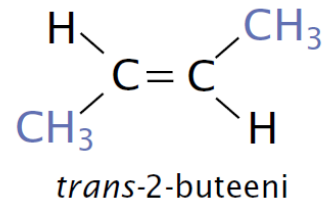
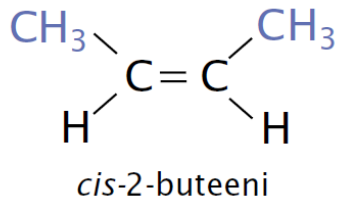
tuolimuoto



venemuoto

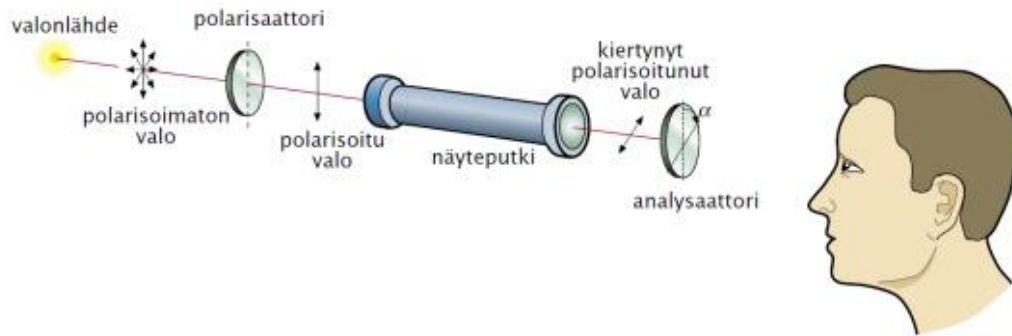


cis-trans-ISOMERIA

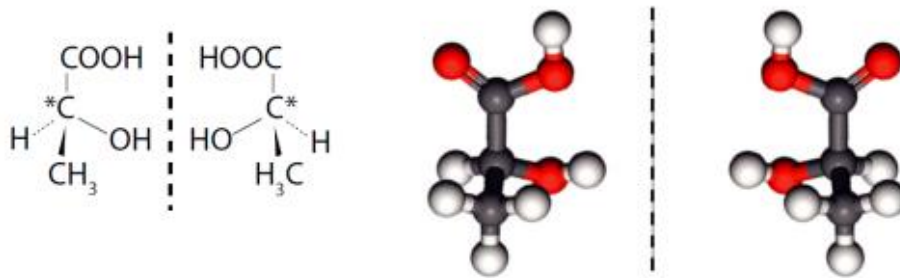




OPTINEN ISOMERIA



MAITOHAPON OPTISET ISOMEERIT





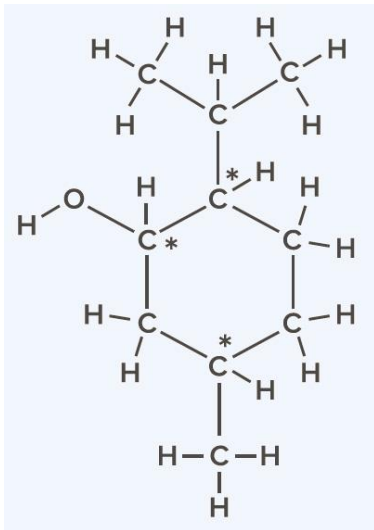
Jakso 4 Molekyyliden avaruus rakenne ja stereoisomeria – laskutehtävien ratkaisut

4.2 Orgaanisten yhdisteiden stereoisomeria

4.15

Ratkaisu:

a)



b) Molekyylikaava on C₁₀H₂₀O.

c) Tyydyttynyt, syklinen, alkoholi.

d) Hydroksyyliiryhmä -OH.

e) Kyllä esiintyy, sillä mentolimolekyylissä on yksinkertaisia C-C-sidoksia, jotka voivat kiertyä ja taipua.



f) Mentolimolekyylissä on kolme asymmetristä hiiliatomia (merkitty kohtaan a) tähdellä).

g)

$$m(\text{mentoli}) = 30 \text{ mg} = 0,030 \text{ g}$$

$$M(\text{mentoli}) = 156,260 \text{ g/mol}$$

$$n(\text{mentoli}) = ?$$

Ratkaistaan kysytty mentolin ainemäärä suureyhtälöstä $n = \frac{m}{M}$, josta

$$n(\text{mentoli}) = \frac{0,030 \text{ g}}{156,260 \text{ g/mol}} = 1,920 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \approx 1,9 \cdot 10^{-4} \text{ mol}.$$



4.3 Stereoisomeerien erilaisia ominaisuuksia

4.22

Ratkaisu:

$$m(\text{maitohappo}) = 145 \text{ mg} = 0,145 \text{ g}$$

$$M(\text{maitohappo}) = 90,078 \text{ g/mol}$$

$$V(\text{liuos}) = 50 \text{ ml} = 0,050 \text{ l}$$

$$c(\text{liuos}) = ?$$

Ratkaistaan maitohapon ainemäärä suureyhtälöstä $n = \frac{m}{M}$, josta

$$n(\text{maitohappo}) = \frac{0,145 \text{ g}}{90,078 \text{ g/mol}} = 1,6097 \cdot 10^{-3} \text{ mol.}$$

Ratkaistaan kysytty konsentraatio suureyhtälöstä $c = \frac{n}{V}$, josta

$$c(\text{maitohappo}) = \frac{1,6097 \cdot 10^{-3} \text{ mol}}{0,050 \text{ l}} = 0,03219 \text{ mol/l} \approx 0,032 \text{ mol/l.}$$

Jos liuokset yhdistettäisiin, syntyisi seos, jossa on kumpaakin optista isomeeriä yhtä paljon eli kyseessä olisi raseeminen seos. Polarimetrisessä mittauksessa ei havaittaisi mitään, sillä raseemisen seoksen tasopolarisoidun valon tason kääntökulma on 0° .