

Molekylmodeller

Fra strukturformel til tredimensjonal rom – forstå molekylers form og funksjon

KM3 – Naturvitenskapelige praksiser og tenkemåter

■ Da en lukt reddet et liv – historien om fenylketonuri

I 1934 la den norske legen Ivar Asbjørn Følling merke til en merkelig, søtlig lukt fra to søsken med alvorlig utviklingshemming. Han analyserte urinen og oppdaget en ukjent syre – fenylpyruvat. Det var bevis på at en genetisk feil hindret kroppen i å bryte ned aminosyren fenylalanin. Sykdommen fikk hans navn: Føllings sykdom, i dag kalt PKU (fenylketonuri). En enkel diett – nesten uten fenylalanin – var nok til å forhindre hjerneskade. I dag screenes alle nyfødte i Norge med en blodprøve på hælen.

Historien viser hvordan molekylstruktur – selve formen på et enkelt molekyl – kan bety forskjellen mellom et normalt liv og alvorlig sykdom.

Hva er et molekyl?

Et **molekyl** er den minste enheten av et stoff som beholder stoffets kjemiske egenskaper. Det dannes når to eller flere atomer bindes sammen ved å dele elektroner – en såkalt kovalent binding. Det enkleste molekylet vi kjenner er H_2 (hydrogen), der to hydrogenatomer deler ett elektronpar. Det mest kjente er trolig H_2O (vann).

Atomer binder seg fordi de streber etter å fylle sitt ytterste elektronskall – det vi kaller oktettregel. Karbon (C) mangler fire elektroner og kan danne fire bindinger. Nitrogen (N) mangler tre og danner tre. Oksygen (O) mangler to og danner to. Hydrogen (H) mangler ett og danner én binding. Disse fire atomene utgjør grunnsteinene i nesten all biokjemi.

■ Nøkkelbegreper

Molekyl: to eller flere atomer bundet sammen

Kovalent binding: deling av elektronpar mellom atomer

Oktettregel: atomer streber etter 8 elektroner i ytterste skall

Strukturformel: tegning som viser bindingene mellom atomene

3D-modell: fysisk eller digital fremstilling av molekylets romlige form

Molekylenes romlige form

Molekyler er ikke flate – de har en tredimensjonal form som styres av VSEPR-modellen (Valence Shell Electron Pair Repulsion). Elektronpar frastøter hverandre og ønsker å komme så langt fra

hverandre som mulig. Dette gir karakteristiske former.

Tabell 1: Molekylformer etter VSEPR-modellen

Molekyl	Formel	Form	Vinkel	Eksempel
To binding, 0 frie par	AB	Lineær	180°	CO, BeCl
Tre binding, 0 frie par	AB	Trigonal plan	120°	BF, SO
Fire binding, 0 frie par	AB	Tetraedrisk	109,5°	CH, CCl
Tre binding, 1 fritt par	ABE	Trigonal pyramidal	107°	NH
To binding, 2 frie par	ABE	Vinkelbøyd	104,5°	H ₂ O

Formen til et molekyl avgjør dets egenskaper. Vann er vinkelbøyd (104,5°) fordi oksygen har to frie elektronpar. Denne asymmetrien gjør vann polart – med en liten negativladning mot oksygen og positiv mot hydrogenene. Det er grunnen til at vann er et utmerket løsemiddel og kan danne hydrogenbindinger.

■ Linus Pauling og det feilaktige DNA-et

I 1953 publiserte kjemikeren Linus Pauling – som hadde vunnet Nobelpris for sin teori om kjemiske bindinger – en modell for DNA-strukturen. Han foreslo en trippelhelix med fosfatgruppene på innsiden. Det var feil.

Watson og Crick, som brukte røntgendiffraksjonsdata fra Rosalind Franklin, viste at DNA er en dobbeltheliks med fosfatene på utsiden og baseparene på innsiden. Geometrien stemte perfekt – basene adenin-tymin og guanin-cytosin har nøyaktig riktig form og størrelse til å passe mot hverandre med hydrogenbindinger. Molekylgeometri var nøkkelen til å forstå livets kode.

Typer molekylmodeller

Kule-pinne-modeller

Den klassiske kule-pinne-modellen bruker fargeede kuler for atomer (sort = C, hvit = H, rød = O, blå = N, gul = S) og pinner for bindinger. Fordelen er at den viser bindingsmønsteret tydelig. Ulempen er at den overdriver avstanden mellom atomene – i virkeligheten er atomene mye tettere pakket.

Kalottmodeller (CPK)

Kalottmodeller (Corey-Pauling-Koltun) viser atomene som overlappende sfærer med riktige relative størrelser. De gir et realistisk bilde av molekylets faktiske volum og overflate. Brukes mye i biokjemi for å vise hvordan proteiner og DNA ser ut romlig.

Digitale modeller

Programmer som Avogadro, MolView.org og GeoGebra 3D lar deg bygge og rotere molekyler digitalt. Du kan bytte mellom kule-pinne, kalott og trådmodell, måle bindingslengder og -vinkler, og animere vibrasjonsmoder. I SkapLab bruker vi MolView som er gratis og nettbasert.

Tabell 2: Sammenligning av molekylmodell-typer

Modelltype	Viser	Viser ikke	Best for
Strukturformel (2D)	Bindinger og atom-type	Romlig form	Kjemireaksjoner
Kule-pinne (3D)	Form og bindinger	Reelt volum	Lære geometri
Kalott (CPK)	Volum og overflate	Enkeltbindinger	Biokjemi
Digital modell	Alt over + rotasjon	Ingenting	Dybdelæring

Viktige biomolekyler

Vann – H₂O

Vann er kanskje jordens viktigste molekyl. Den vinkelbøyde geometrien gir polart molekyl, som muliggjør hydrogenbindinger. Disse gjør at vann har uvanlig høyt kokepunkt (100°C), høy varmekapasitet og er et universelt løsemiddel. Uten vannets spesielle egenskaper – et direkte resultat av molekylgeometri – ville liv på Jorda vært umulig.

Karbondioksid – CO₂

CO₂ er lineært: O=C=O med 180° vinkel. Selv om C=O-bindingen er polar, kansellerer de to polære bindingene hverandre fordi de peker i nøyaktig motsatte retninger. Dermed er CO₂ upolart sett – og løser seg dårlig i vann under normale forhold. Ved høyt trykk (som i brus) løser det seg som karbonsyre.

Glukose – C₆H₁₂O₆

Glukose er cellens viktigste energikilde. I vandig oppløsning finnes det som en seksring (pyranoseform). Strukturen har fem C-atomer og ett O-atom i ringen, med hydroksylgrupper (-OH) på sidene. Disse OH-gruppene danner hydrogenbindinger med vann – det er grunnen til at sukker løser seg godt. Under celleånding brytes glukose ned til CO₂ og H₂O med frigjøring av energi lagret i ATP.

■ Farger i molekylmodeller (konvensjon)

Svart (C): karbon – grunnlaget for all organisk kjemi

Hvit (H): hydrogen – det vanligste atomet i biomolekyler

Rød (O): oksygen – viktig i vann, sukker og fettsyrer

Blå (N): nitrogen – finnes i aminosyrer, DNA-baser og klorofyll

Gul (S): svovel – viktig i proteiner (disulfidbindinger)

Oransje (P): fosfor – i DNA, RNA og ATP

Isomerer – samme formel, ulik form

To molekyler kan ha nøyaktig samme kjemiske formel – men helt ulik romlig oppbygging. Disse kalles **isomerer**. Butanol ($C_4H_{10}O$) finnes for eksempel i fire ulike strukturelle former med svært forskjellige egenskaper. Enda mer fascinerende er **enantiomerer**: speilbilder av hverandre som ikke kan legges over hverandre.

■ *Thalidomid-katastrofen – da speilbildet drepte*

På 1950-60-tallet ble legemidlet thalidomid gitt til gravide mot svangerskapskvalme. Molekylet finnes i to former – speilbilder av hverandre (enantiomerer). Den ene formen lindret kvalme. Den andre forårsaket alvorlige fosterskader – tusenvis av barn ble født uten armer eller bein.

Tragedien viste verden at molekylers tredimensjonale form kan bety liv og død. I dag testes alle nye legemidler for begge enantiomerer separat. Historien om thalidomid var starten på moderne farmakologisk sikkerhetstesting.

■ Forsøk

■ **Forsøk 1: Bygg molekyler med modellsett**

Mål: Forstå bindingsgeometri ved å fysisk konstruere vanlige molekyler.

Utstyr: Molekylmodellsett (kule-og-pinne), alternativt marshmallows og tannpikere.

Fremgangsmåte:

→ Bygg H_2O (vann): ett oksygenatom med to hydrogenatomer. Mål vinkelen – skal være $\sim 104,5^\circ$.

→ Bygg CH_4 (metan): ett karbonatom med fire hydrogenatomer. Merk den tetraedriske formen.

→ Bygg NH_3 (ammoniakk): ett nitrogenatom med tre hydrogen. Sammenlign med CH_4 .

→ Bygg CO_2 : ett karbondiatom med to oksygenatomer. Bekreft at det er lineært (180°).

→ Tegn strukturformelen for hvert molekyl ved siden av modellen.

Forventet resultat: Du ser at vinkelene avviker fra det 'symmetriske' – frie elektronpar tar mer plass enn bindinger.

■ Forsøk 2: Molekylmodeller i MolView

Mål: Bruke digitalt verktøy til å undersøke 3D-strukturen til biomolekyler.

Utstyr: Datamaskin/nettbrett med internett. Nettstedet: molview.org

Fremgangsmåte:

- Åpne molview.org. Skriv 'water' i søkefeltet og klikk Enter.
- Bytt mellom 'Stick', 'Ball and Stick' og 'Van der Waals' visning.
- Søk deretter etter 'glucose' og 'caffeine'. Beskriv formen.
- Klikk 'Tools' → 'Measure angle'. Mål O-H-O-vinkelen i vann.
- Søk etter 'DNA' og zoom inn på baseparene. Finn hydrogenbindingene.

Forventet resultat: Du ser tydelig forskjell i kompleksitet fra H₂O til DNA. Alle former følger VSEPR-prinsippet.

■ Forsøk 3: Polaritet og løselighet

Mål: Undersøke sammenhengen mellom molekylopolaritet og løselighet.

Utstyr: Vann, matolje, saltbiter, sukker, farget sprittusj, tre begerglass.

Fremgangsmåte:

- Hell like mye vann og olje i to glass. Observer at de ikke blandes.
- Tilsett en teskje sukker i glasset med vann. Rør – løser det seg?
- Tilsett en teskje sukker i glasset med olje. Observer.
- Ta et stykke farget sprittusj og slipp i vann. Observer fargestoffet.
- Diskuter: hva sier dette om molekylopolaritet og 'like løser like'?

Forventet resultat: Polære stoffer (sukker) løser seg i polært vann. Upolær olje løser seg ikke i vann.

■ Oppgaver

■ Oppgave 1 (basis)

Hva er et molekyl? Forklar med egne ord og gi to eksempler fra hverdagen.

■ Oppgave 2 (basis)

Tegn strukturformelen for vann (H₂O) og metan (CH₄). Hvilke vinkler har de?

■ Oppgave 3 (basis)

Hva viser en kule-pinne-modell? Hva viser en kalottmodell? Hva er forskjellen?

■ Oppgave 4 (middels)

Forklar VSEPR-modellen med egne ord. Bruk NH₃ som eksempel og forklar hvorfor molekylet er pyramideformet, ikke flatt.

■ Oppgave 5 (middels)

CO₂ inneholder polære C=O-bindinger, men er likevel upolartt. Forklar hvorfor geometri spiller inn.

■ Oppgave 6 (middels)

Hva er isomerer? Finn et eksempel og forklar hvorfor to isomerer kan ha svært ulike egenskaper.

■ Oppgave 7 (avansert)

Thalidomid-skandalen handlet om enantiomerer. Undersøk begrepet kiralt senter og forklar med en tegning hva som skiller de to formene av thalidomid.

■ Oppgave 8 (avansert)

Vann har uvanlig høyt kokepunkt sammenlignet med andre små molekyler (H_2S koker ved -60°C). Bruk molekylgeometri og hydrogenbindinger til å forklare dette.

■ Oppsummering

Viktige punkter fra dette kapitlet:

- Et molekyl er den minste enheten av et stoff – dannet ved kovalente bindinger.
- Molekylgeometri styres av VSEPR-modellen: elektronpar frastøter hverandre.
- Vanlige former: lineær (CO_2), vinkelbøyd (H_2O), tetraedrisk (CH_4), pyramidal (NH_3).
- Formen avgjør polaritet, løselighet, kokepunkt og biologisk funksjon.
- Modelltyper: strukturformel, kule-pinne, kalott og digitale modeller – ulike bruksområder.
- Isomerer og enantiomerer viser at samme formel kan gi radikalt ulike stoffer.
- Eksempler: vann (polaritet $\rightarrow$ løsemiddel), glukose (energi), DNA (dobbeltheliks).