

2 KRESLÍME MOLEKULY UHLÍKOVÝCH

<i>Tematický celok / Téma</i>	<i>ISCED / Odporúčany ročník</i>
Organická chémia Uhlíkové, stereochemie	ISCED 3 / 3.ročník Kreslíme molekuly uhlíkových
Ciele	
Študentom nadobúdané vedomosti a zručnosti	Študentom rozvíjané spôsobilosti
Vytvoriť predstavy o štruktúre molekúl uhlíkových v podobe 3D modelov. Naučiť sa kresliť uhlíkové v programe ChemSketch a vytvárať animácie. Zoznámiť sa s rôznymi spôsobmi znázorňovania štruktúr molekúl - guľôčkové, kalotové a tyčinkové modely. Vytvoriť predstavy o väzbových dĺžkach, uhloch.	Navrhnuť model. Skonstruovať model podľa zadania. Aplikovať modelovacie postupy na nové problémy. Zručnosť riešiť problémy, kriticky myslieť. Navrhnuť iné využitia programu v praxi. Zručnosti spojené s rozvojom myslenia a učenia.
Požiadavky na vstupné vedomosti a zručnosti	
Poznať typy vzorcov organických zlúčenín. Zaradiť danú organickú zlúčeninu na základe jej konštitučného vzorca medzi alkány, alkény, alkadiény, alky, arény, nasýtené a nenasýtené uhlíkové, zlúčeniny s acyklickým (rozvetveným a nerozvetveným) a cyklickým reťazcom. Homologický rad, homologický vzorec, alkyl, cykloalkyl, aryl. Väzbovosť atómov prvkov.	
Riešený didaktický problém	
<p>Malá priestorová predstavivosť študentov má za následok, že je pre nich veľmi náročné prevádzať dvojrozmerný obraz do podoby 3D modelov a orientovať sa v usporiadaní atómov v molekulách. Preto je dôležité, aby sa študent zoznámil s priestorovým usporiadaním praktickou formou a mohol jednotlivé štruktúry vnímať viacerými zmyslami.</p> <p>V akom programe kresliť vzorce organických zlúčenín, písať chemické reakcie, kresliť aparatury na realizáciu chemických pokusov? Ako si predstaviť 3D modely organických zlúčenín? Prečo majú izoméry rôzne vlastnosti?</p> <p>ACD/ChemSketch je kvalitný nástroj na kreslenie rôznych chemických štruktúr zlúčenín, rovníc, aparatur a vzorcov. Vytvorené štruktúry je možné jednoducho vytlačiť alebo exportovať do formátu PDF, WMF, BMP, TIFF a ďalších. Program spolupracuje i s formátmi podobných programov napr. MOL, SKC, RXN, CHM a ďalšími.</p>	
Dominantné vyučovacie metódy a formy	Príprava učiteľa, pomôcky a chemikálie
<ul style="list-style-type: none"> • Interaktívna ukážka, riadené, nasmerované bádanie, diskusia • Individuálna práca, práca vo dvojiciach 	<ul style="list-style-type: none"> • Stavebnice modelov zlúčenín • Počítač + program ChemSketch (freeware), dataprojektor • Pracovný list
Diagnostika splnenia vzdelávacích cieľov	
<p>Protokol na sledovanie pokroku študenta.</p> <p>Úlohy na kreslenie derivátov uhlíkových.</p>	

KRESLÍME MOLEKULY UHLÍKOVODÍKOV

Úvod

Nenahraditeľným pomocníkom všetkých učiteľov chémie i študentov, ktorí sa chémiu učia je program ChemSketch. Tento program je možné využiť na kreslenie chemických vzorcov, reakcií, aparátúr a pod. Program sa ľahko ovláda, k dispozícii je aj veľká databáza už vytvorených zlúčenín a obrázkov. Ak s programom začínate, odporúčame naštudovať krátky sprístupnený manuál. ChemSketch pracuje v dvoch základných prostrediach: Structure a Draw, ktoré môžeme prepínať tlačidlami, ktoré sú umiestnené v ľavom hornom rohu obrazovky. V prostredí Structure môžeme kresliť chemické vzorce (štruktúry) a reakčné schémy, v prostredí Draw grafické objekty (napr. aparatúry). Pracovné prostredie je zložené z prvkov ktoré sú v režime Structure/Draw podobne usporiadané: Menu, Hlavná nástrojová lišta, Nástrojová lišta Structure/Draw, Nástrojová lišta atómov/ na kreslenie, Nástrojová lišta substituentov, Farebná paleta. Metodika je súčasťou metodík zameraných na kreslenie vzorcov a modelov organických zlúčenín. Metodický list spracovaný na základe metódy EU.

2.1 Priebeh výučby

Evokácia

Program môžete získať napr. z nasledujúcich stránok:

Stránka spoločnosti ACD/Labs. <http://www.acdlabs.com>

Stránka Slunečnice.cz: <http://www.slunecnice.cz/sw/acd-chemsketch/>

Pred samotnou realizáciou hodiny je vhodné si overiť, či inštalácia freewareprogramov je na školských počítačoch dovolená administrátorom školskej počítačovej siete.

Inštalácia programu, oboznámenie sa s obrazovkou.

ACD/ChemSketch pracuje v dvoch módoch **Structure** a **Draw**, prepínaných tlačidlami na hlavnej lište vľavo hore.



V móde **Structure** je možné kresliť chemické vzorce a v móde **Draw** využívať grafiku ACD/ChemSketch.

Uvedomenie si významu

Študentov naučiť:


- Kresliť atómy a väzby (jednoduché, dvojité, trojité, koordináčne, nedefinované), rôzne označenie, ale i polyméry.
- Preklápať nakreslené molekulové štruktúry.
- Vybrať, otáčať a meniť veľkosť nakreslených štruktúr.
- Vytvárať 3D modely štruktúr.
- Uchovať štruktúru ako súbor, dokument alebo tlač.



Kreslenie atómov, väzieb, molekúl

Kreslenie väzieb a atómov je hlavnou aktivitou v ACD/ChemSketch.

Uistite sa, že ste v móde **Structure** (tlačidlo Structure je "stlačené") aby ste mohli pokračovať:

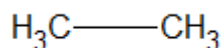


Nástroj normálneho kreslenia Draw Normal  je predvolenou možnosťou, ktorá je vybraná v okamihu, keď je program otvorený. V tomto móde môžete ľahko nakresliť normálne či vetvené reťazce a zamieňať atómy inými z periodickej tabuľky prvkov.

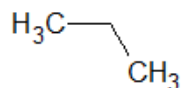
Uistite sa, že ste zvolili nástroj **Draw Normal**  na lište štruktúr a že ste na lište atómov (vľavo) vybrali atóm **uhlíka**  v **Nástrojovej lište atómov**.

Kliknutím ľavým tlačidlom do pracovného priestoru sa vykreslí **CH₄**. Kliknutím na iné miesto pracovného priestoru sa nakreslí ďalšia molekula **CH₄**.

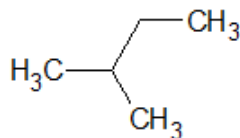
Ďalším kliknutím na už existujúcu molekulu a potiahnutím myši sa pridá **–CH₃** skupina a vznikne so štandardnými dĺžkami väzieb.



Ak kliknete na **–CH₃** skupinu reťazec sa predĺži

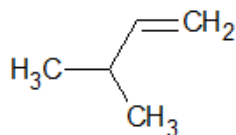


V prostredí **Draw Normal** po kliknutí na neoznačený atóm sa vykreslí

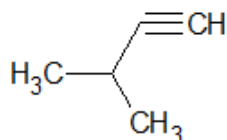


Kreslenie dvojítých a trojitých väzieb

Kliknutím na vybranú väzbu sa vytvorí **dvojité väzba**.



Druhým kliknutím na túto väzbu vznikne **trojitá väzba**.

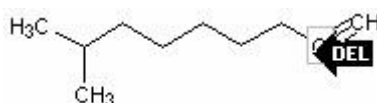


Ďalším kliknutím na túto väzbu vznikne najprv dvojité a potom jednoduchá väzba.

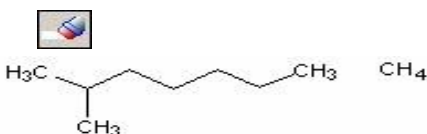
Vymazanie atómov

Na hlavnej lište kliknite na gumu **Delete**

Potom kliknite na atóm tak, ako je znázornené na obrázku:



Molekula sa zmení nasledovne:



Ak kliknete na nástroj späť - **Undo**, vrátite sa o krok späť.

Ak držíte stisnutú klávesu **Ctrl** a kliknete nástrojom **Delete**, vymažete iba daný atóm a koncový atóm pripojený ku molekule ostane zachovaný.

Zobrazovanie atómov uhlíka a atómov vodíka

Ak potrebujeme vytvoriť racionálny konštitučný vzorec uhľovodíka so zobrazením všetkých atómov uhlíka, označíme nástrojom **Select/Move** danú molekulu, zvolíme si v menu voľbu **Tools - Structure properties**, v časti **Show Carbon** zaklikneme **All** a potvrdíme. Ak chceme zobraziť všetky atómy vodíka, zvolíme v menu **Tools** a **Add Explicit Hydrogens**.

Nepretržité kreslenie

Ak prejdete do režimu Nepretržitého režimu kreslenia (**Draw Continuous**, ikona a **Draw Chains**




) môžete si kreslenie zjednodušiť.

V prípade ikony **Draw Continuous** si vyberiete atóm **C** a klikneme na dve voľné miesta pracovnej plochy. Vznikne molekula metánu, potom etánu, propánu, butánu atď. Aby boli dĺžky všetkých jednoduchých väzieb rovnaké a molekula uhľovodíka súmerná, môžeme použiť funkciu **Clean Structure**

na nástrojovej lište programu .



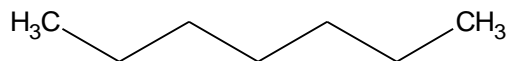
Ak kliknete na ikonu **Draw Chains** , stačí kliknúť na pracovnú plochu a potiahnuť myšou. Na obrazovke sa nám objaví uhľovodíkový reťazec, údaj s počtom atómov uhlíka v molekule sa objavuje pri kurzore myši.



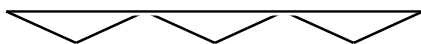
Kreslenie cyklických štruktúr


Cyklickú štruktúru cyklohexánu vytvoríte na základe nasledovného postupu:

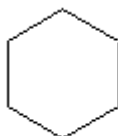
vytvorte molekulu hexánu



spojte prvý a posledný atóm uhlíka




následne stlačíte ikonu **Clean Structure**  na nástrojovej lište, čím sa optimalizujú všetky väzbové dĺžky a uhly, v našom prípade nám vznikne molekula cyklohexánu.



Ak chcete vytvoriť molekulu benzénu či cykloalkénu/cykloalkínu, postupujte obdobne ako pri vytváraní násobných väzieb alifatických uhľovodíkov.

Označenie, premiestnenie, kopírovanie a vymazanie štruktúry

Pomocou tlačítka **Select/Move**  môžete vybrať príslušnú štruktúru označením myšou a následne ju premiestniť, skopírovať (Ctrl+C, Ctrl+V) alebo vymazať. Na vymazanie možno použiť aj označenie molekuly a tlačidlo Delete na klávesnici.

Kreslíme 3D štruktúry

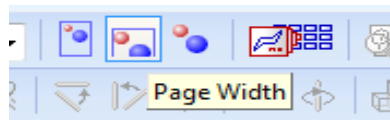
Spustíte program **3D Viewer** (umiestnené na Hlavnej lište pod heslom **ACD/Labs**).

V spodnej časti obrazovky nájdete 3 základné režimy tohto programu (**1-ChemSketch, 2-Copy To 3D, 3-3D Viewer**).

Zvoľte možnosť 1.

Vytvorte modely animovanej molekuly metánu a uložte ho

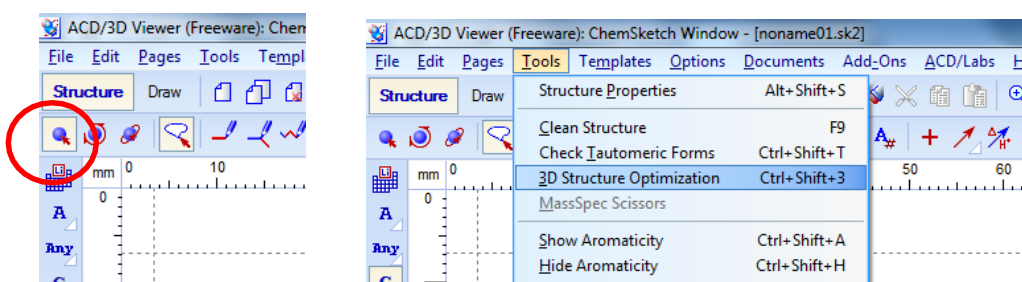
Zvoľte zobrazenie stránky **Page Width**.



V ľavom panelu prvku zvolíte atóm uhlíka C.

Ľavým tlačidlom myši kliknete na plochu. Objaví sa vzorec metánu CH₄.


Označte vytvorený vzorec a zvoľte v menu **Tools 3D Structure Optimization**.

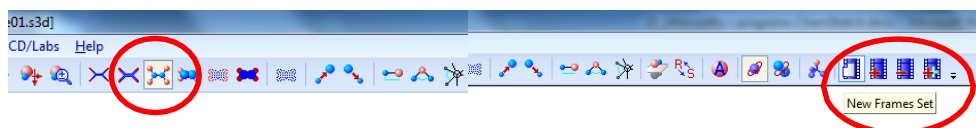


Označte v molekule atóm vodíka a skúste s ním otočiť. Objaví sa čiastočne priestorové usporiadanie molekuly metánu.

Zvoľte v spodnej časti obrazovky režim **2-Copy To ChemSketch**, typ molekuly **Balls and Sticks**. Teraz môžete molekulou pohybovať a sledovať jej priestorové usporiadanie.

Môžete si všimnúť aj to, že v programe sú jednotlivé atómy farebne odlišené: atómy uhlíka sú svetlomodré, atómy vodíka biele, atómy kyslíka červené, atómy dusíka tmavomodré a pod.

Program umožňuje aj meniť farbu atómov jednotlivých prvkov, aby vyhovovala štandardnému značeniu (funkcia **Set Colors** ).



Na vytvorenie animácie zvolíte **New Frames Set**  a **Auto Add Frames** .

Nakoniec animovaný obrázok uložte ako typ Animated GIF Images ako metan.gif skúste animáciu spustiť (ak nie je iná možnosť, tak napr. v programe PowerPoint).

ÚLOHA 2.1 – RIEŠTE!



Vytvorte a uložte animácie molekúl uhľovodíkov uvedených v tabuľke do priloženej tabuľky.

Názov uhľovodíka	Molekulový vzorec
metán	CH ₄
etán	C ₂ H ₆

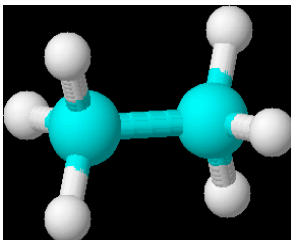
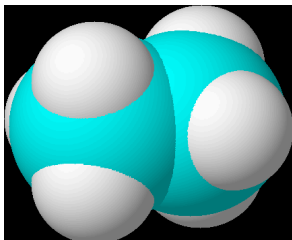
pentán	C ₅ H ₁₂
etén	C ₂ H ₄
acetylén	C ₂ H ₂
cyklohexán	C ₆ H ₁₂

CH ₄	C ₂ H ₆	C ₅ H ₁₂
C ₂ H ₄	C ₂ H ₂	C ₆ H ₁₂

ÚLOHA 2.2 – RIEŠTE!



Zobrazte ďalšie formy zlúčenín uvedených v tabuľke na základe príkladu etánu.

Sumárny vzorec	Skupinový vzorec	Štruktúrny vzorec	Guľôčkový model	Kalotový model
C_2H_6	CH_3CH_3	$ \begin{array}{c} H & H \\ & \\ H-C & -C-H \\ & \\ H & H \end{array} $		
C_2H_4	CH_2CH_2			
$C_2H_4O_2$	CH_3COOH			
C_4H_6	$CH_2CHCHCH_2$			
C_2H_2O	$CHCOH$			
C_2H_6O	CH_3OCH_3			
H_2O	H_2O			
CH_3N	$NHCH_2$			
C_7H_8O	$C_6H_4CH_2OH$			

Rozvoj	Dôkaz
<p>Aké boli ciele mojej práce/k čomu smerovali?</p> <p>Čo som sa naučil/a?</p> <p>K čomu mi to môže pomôcť?</p> <p>Čo by som sa chcel/a o tejto téme ešte dozvedieť?</p> <p>S kým môžem spolupracovať s cieľom zlepšiť svoju prácu?</p> <p>Ako som použil/a svoje schopnosti kritického myslenia pri riešení zadaných úloh?</p>	