

5 KRESLÍME MOLEKULY LÁTKOV V ŽIVÝCH ORGANIZMOCH

<i>Tematický celok / Téma</i>	<i>ISCED / Odporúčany ročník</i>
Látky v živých organizmoch Sacharidy, nukleové kyseliny	ISCED 3 / 3.ročník Kreslíme molekuly látok v živých organizmoch
Ciele	
<i>Študentom nadobúdané vedomosti a zručnosti</i>	<i>Študentom rozvíjané spôsobilosti</i>
Oboznámiť sa s prácou v programe ChemSketch. Vytvoriť predstavy o štruktúre látok v živých organizmoch. Nakresliť molekuly látok v živých organizmoch. Porozumieť tvorbe štruktúrnych vzorcov a modelov molekúl sacharidov a nukleotidov. Vytvoriť animáciu modelov základných molekúl.	Navrhnuť model. Skonstruovať model. Navrhnuť alternatívne riešenia problému. Aplikovať modelovacie postupy na nové problémy. Zručnosti spojené s rozvojom myslenia a učenia.
Požiadavky na vstupné vedomosti a zručnosti	
<p>Poznať chemickú štruktúru sacharidov, nukleových kyselín a ATP. Poloacetálový hydroxyl, O- a N-glykozidová väzba, optická izoméria. Redukujúce a neredukujúce sacharidy. Identifikovať chirálne atómy uhlíka vo vzorci monosacharidu, porovnať molekuly monosacharidov, disacharidov a polysacharidov. Typy vzorcov monosacharidov: Fischerove vzorce, cyklické formy - Tollensove poloacetálové vzorce a Haworthove vzorce. Nukleotid, ribonukleotid, deoxyribonukleotid.</p>	
Riešený didaktický problém	
<p>Na pochopenie biochemických procesov prebiehajúcich v živých organizmoch je nesmierne dôležité poznať štruktúru prírodných látok a jej dopad na reaktivitu. Medzi najvýznamnejšie prírodné látky patria sacharidy a nukleové kyseliny. Na upevnenie vedomostí o ich štruktúre z hodín základnej chémie môže veľmi dobre poslúžiť program ChemSketch, v ktorom nemusíme dané molekuly vykresľovať atóm po atóme, ale môžeme využiť aj hotové databázy, ktoré sú k dispozícii. Táto metodika nadväzuje na ďalšie zo série metodík, preto umožňuje študentom aplikovať aj poznatky z predchádzajúcej práce s programom.</p> <p>ACD/ChemSketch je kvalitný nástroj na pohodlné kreslenie rôznych chemických štruktúr, rovníc, aparátov 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
Vyučovacie metódy: Interaktívna ukážka, riadené, nasmerované bádanie, výklad, diskusia Organizačné formy: Individuálna práca, práca vo dvojiciach	Počítač + program ChemSketch (freeware), dataprojektor Pracovný list
Diagnostika splnenia vzdelávacích cieľov	
Sumatívne hodnotenie - Úlohy na kreslenie látok v živých organizmoch, kontrola správnosti riešení. Lístok pri odchode.	

KRESLÍME MOLEKULY LÁTKO V ŽIVÝCH ORGANIZMOCH

Úvod

Metodika je súčasťou metodík Kreslenie organických molekúl v programe ChemSketch.

5.1 Priebeh výučby

Motivácia:

Teraz sa naučíme ako sa dajú využívať ďalšie aplikácie v tomto programe. Naučíme sa využívať šablóny, ktoré tento program obsahuje, aby sme nemuseli kresliť zložité štruktúry od začiatku, ako sa kreslia štruktúrne vzorce sacharidov, nukleotidov a iných molekúl látok v živých systémoch.

Evokácia:

Učiteľ má preopakovať so študentmi poznatky o štruktúre a vlastnostiach sacharidov, nukleotidov a ďalších molekúl látok v živých organizmoch a musí poznať riešenia pracovného listu. Vhodné je vopred študentov upozorniť, ktoré poznatky je potrebné si zopakovať.

1. Poznatky, ktoré je potrebné so študentmi zopakovať – sacharidy.
2. Rozdelenie sacharidov z chemického hľadiska (hydroxyaldehydy, hydroxyketóny).
3. Rozdelenie sacharidov podľa funkčnej skupiny (aldózy, ketózy).
4. Podľa počtu atómov uhlíka v molekule (triózy, terózy, pentózy atď.).

Na molekule glyceraldehydu zopakovať čo je chirálna atómu uhlíka – ak má molekula glyceraldehydu vo svojej štruktúre na atóme uhlíka naviazané štyri rôzne substituenty, takýto atóm uhlíka sa nazýva chirálny - asymetrický. Chirálna zlúčenina glyceraldehydu má dva stereoizoméry, ktoré nazývame enantioméry. Tento druh izomérie sa nazýva optická izoméria (prepojenie na tému Izoméria).

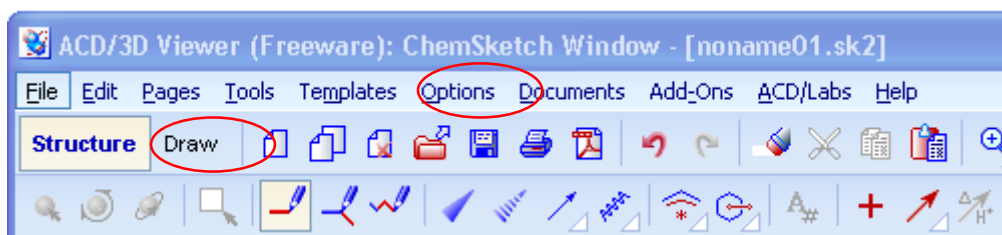
Potrebné je na konkrétnom príklade (glukóza, fruktóza) zopakovať aj pravidlá prepisu Fischerových vzorcov sacharidov na Tollensove a Haworthove cyklické vzorce. Pripomenúť, že atóm uhlíka, na ktorom je naviazaný novovzniknutý poloacetálový hydroxyl v cyklickej forme sa nazýva anomérny atóm uhlíka a α - a β - forma toho istého sacharidu sú si navzájom anoméry.

1. Disacharidy - vznik O-glykozidovej väzby v molekule disacharidu.
2. Poznatky, ktoré je potrebné so študentmi zopakovať - nukleové kyseliny.
3. Rozdelenie nukleových kyselín podľa chemického zloženia (ribonukleové a deoxyribonukleové kyseliny, aký je rozdiel medzi ribózou a deoxyribózou).
4. Typy dusíkatých báz v nukleových kyselinách (pyrimidínové a purínové) a ich výskyt v nukleových kyselinách.
5. Rozdelenie nukleotidov podľa druhu dusíkatých báz (adenínové, guanínové, cytozínové a tymínové).

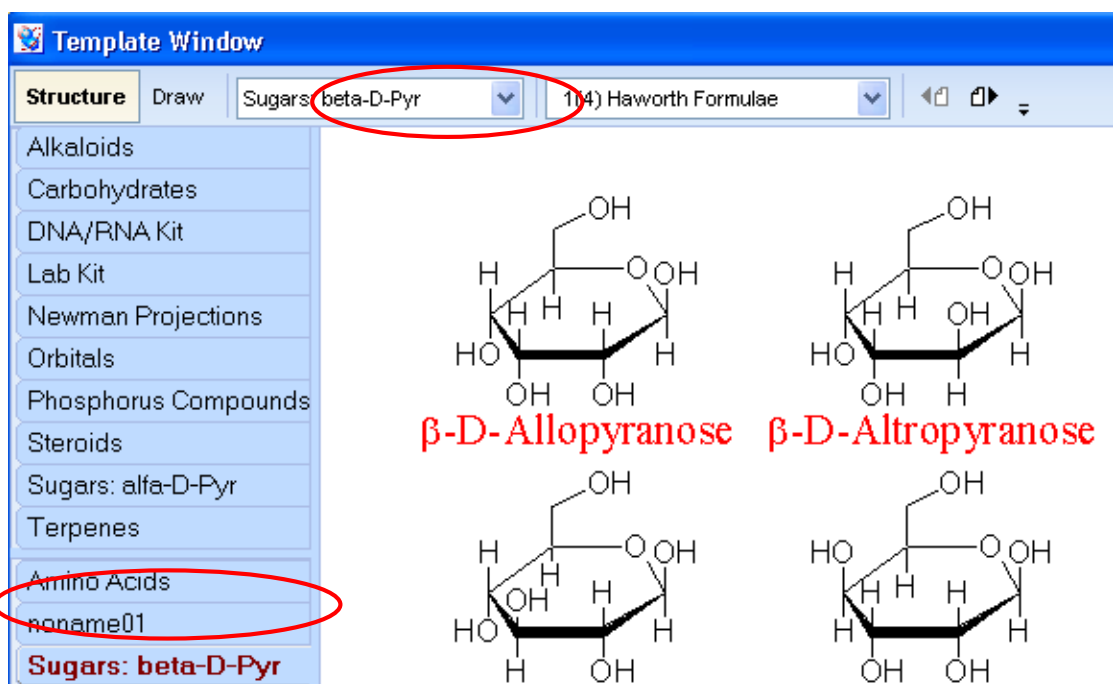
6. Rozdelenie nukleotidov podľa sacharidovej zložky (ribonukleotid, deoxyribonukleotid).
7. Rozdiel medzi nukleotidom a nukleozidom (adenozín, guanozín, cytidín, uridín a tymidín).
8. Makroergické zlúčeniny - adenosíntrifosfát (ATP) a adenosíndifosfát (ADP). Makroergická väzba.
9. Typy väzieb v nukleotidoch - esterová väzba, N-glykozidová väzba.

Kreslíme štruktúrne vzorce monosacharidov

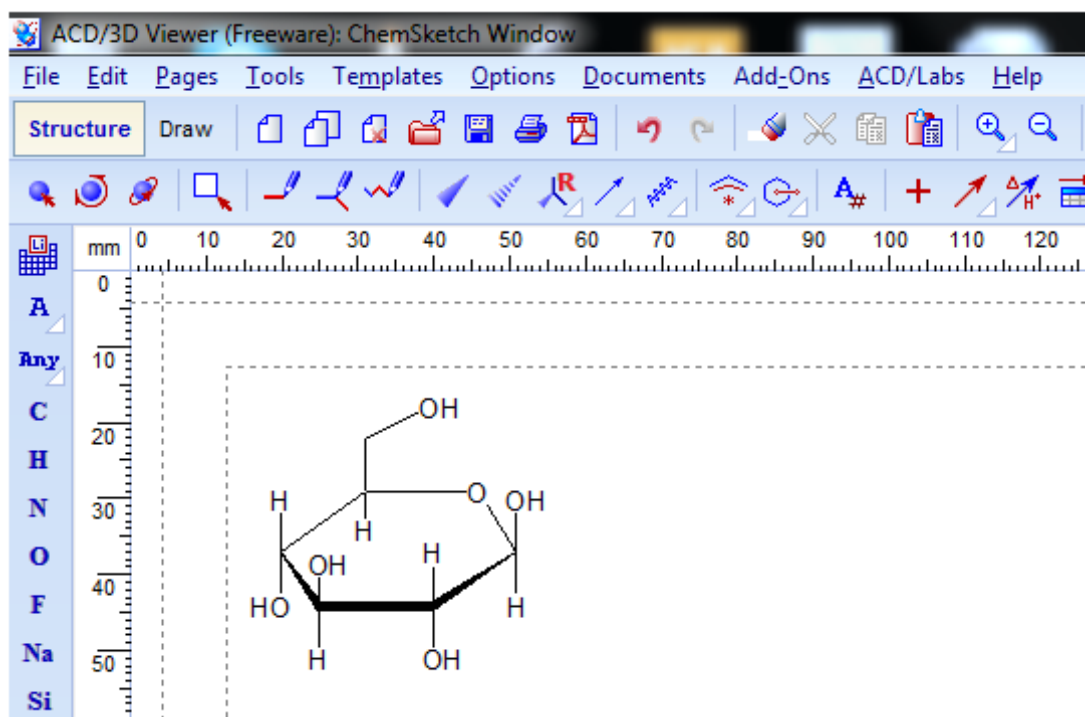
Vzorce monosacharidov vytvoríte tak, že v prostredí Structure si zvolíte v menu Templates (Šablóny) a využijete databázu vložených molekúl. Nakreslite molekulu β -D-glukopyranózy.



V ponuke **Template Window** - na ľavej strane (alebo v hornom okne) si zvolíte, ktoré vzorce chcete nakresliť (môžete kresliť α -formu, alebo β -formu sacharidov, prípadne pyranózovú - furanózovú formu). V našom prípade kliknite na Sugars: β -D-pyr. Môžete si vybrať, aké vzorce budete vytvárať: Tollensove - vyberieme z ponuky *Fisher projection*, Haworthove - *Haworth projection*, Haworthove perspektívne vzorce (stoličkové konformácie) - *Chair presentation*, alebo stereoprojekciu vzorcov (používa sa zriedkavo) - *Stereo Projection*. To si zvolíte v okne vpravo. Ak chcete klasické Fischerove vzorce, zvolíte si v menu **Templates** položku Carbohydrates.



Z tejto ponuky a záložky Sugars: beta-D-pyr, kliknete na β -D-glukopyranózu a prenesiete ju kliknutím na plochu ChemSketch.



β -D-glukopyranóza

Kreslíme štruktúrne vzorce disacharidov - tvorba glykozidovej väzby

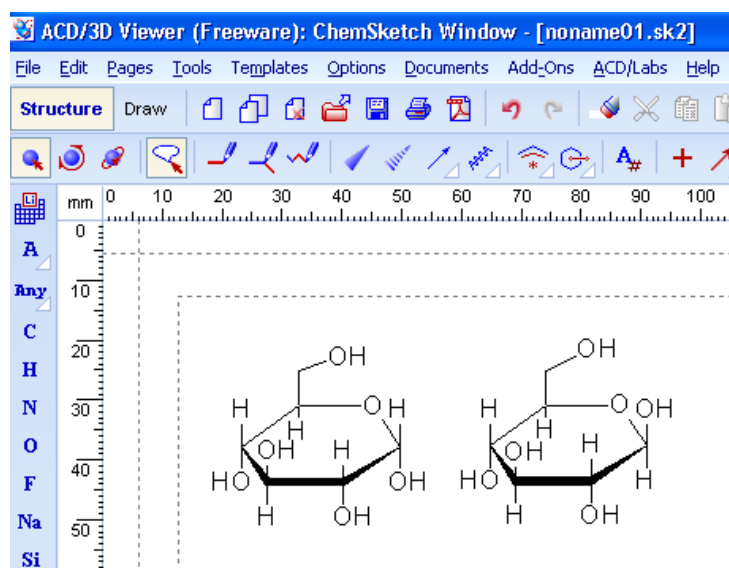
ÚLOHA 5.1 – RIEŠTE!



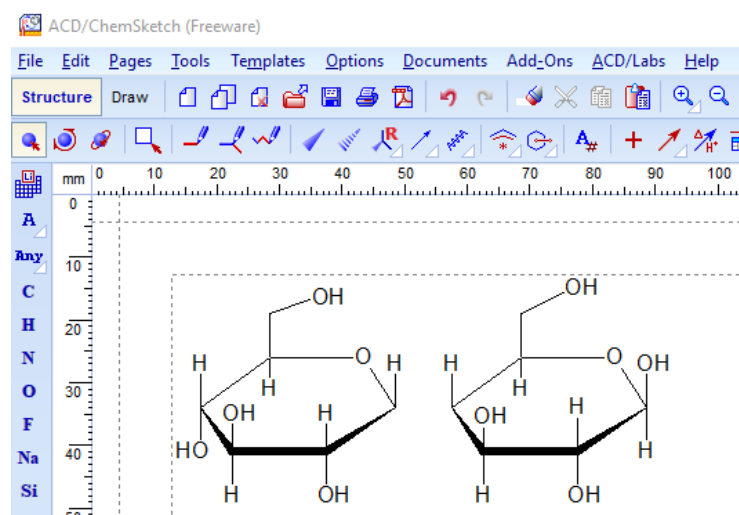
Nakreslite štruktúrny vzorec β -maltózy

Molekula β -maltózy sa skladá z molekuly α -D-glukopyranózy a z molekuly β -D-glukopyranózy. Glykozidová väzba $\alpha(1\rightarrow4)$ vzniká reakciou poloacetálového hydroxyly α -D-glukopyranózy a hydroxylovej skupiny na štvrtom atóme uhlíka β -D-glukopyranózy. Pri tvorbe disacharidu použite Haworthove vzorce.

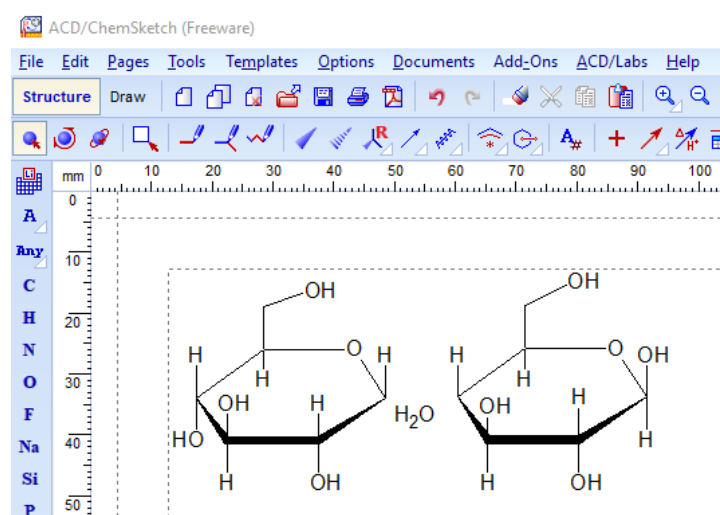
1. Začnete kresliť ako v predchádzajúcom prípade. Tvorbu vzorcov disacharidov realizujte v mode Structure. Z ponuky Templates, Template window si vyberte záložku Sugars: alfa-D-Pyr a vyberte si α -D-glukopyranózu. Kliknite na štruktúru a preneste ju na plochu ChemSketch. Potom si znovu zvolíte Sugars a vyberte si β -D-glukopyranózu zo záložky beta-D-Pyr. Preneste ju kliknutím vedľa α -D-glukopyranózy vpravo.



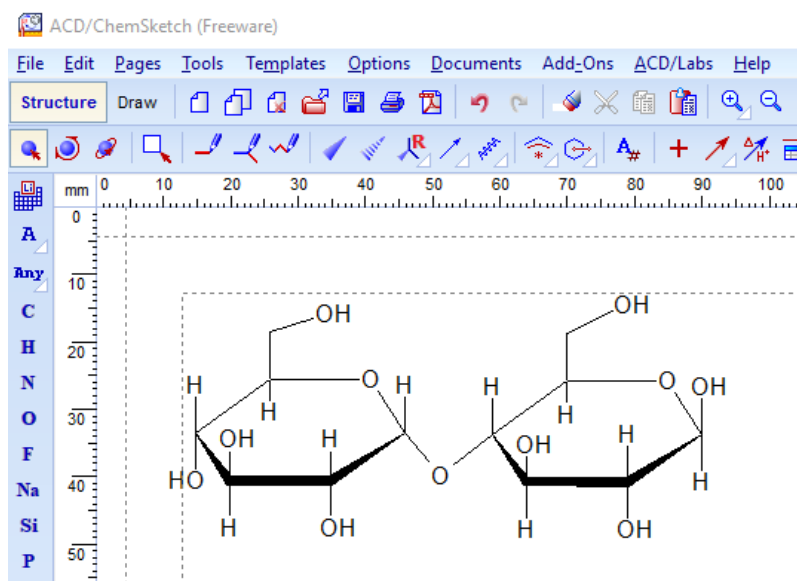
2. Vymažte poloacetálový hydroxyl na α -D-glukopyranóze a hydroxyl na štvrtom atóme uhlíka β -D-glukopyranózy.



3. Kliknite na tlačidlo atómu kyslíka a nakreslite medzi nimi molekulu vody.

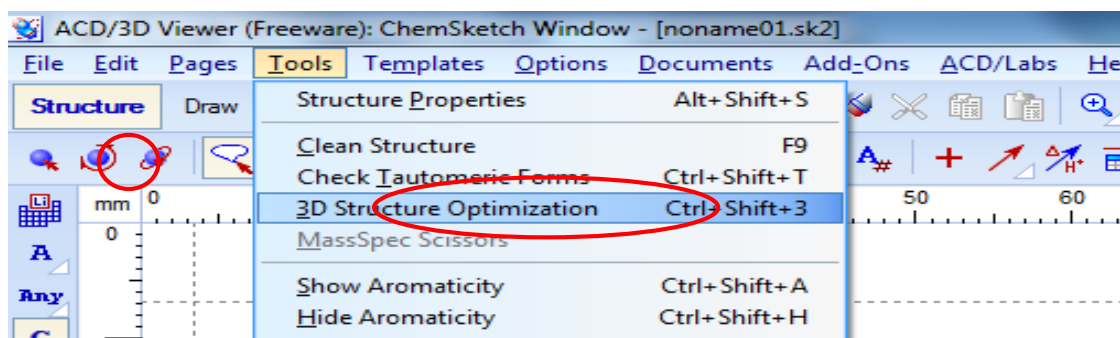


4. Spojte väzbou s atómom kyslíka 1. atóm uhlíka na α -D-glukopyranóze a štvrtý atóm uhlíka na β -D-glukopyranóze.



- Pri tvorbe molekuly sacharózy, laktózy atď. treba potom situovať molekuly monosacharidov nad seba a postupovať nasledovne:
 Vymažte príslušné hydroxylové skupiny na molekulách monosacharidov.
 Kliknúť na atóm kyslíka a na pôvodnom mieste nakresliť presne v pravom uhle nové hydroxylové skupiny s dlhšou väzbou C-O.
 Kliknúť na tlačidlo **Select/Move** a posúvať jednu z molekúl tak, až sa novovytvorené hydroxylové skupiny prekryjú a vytvorí sa glykozidová väzba.
- Pri tvorbe N-glykozidovej väzby v molekulách nukleotidov postupovať takto:
 Vymažte poloacetálový hydroxyl na β -anoméri príslušnej pentózy.
 Kliknite na atóm uhlíka a kolmo dole vykreslite dlhú väzbu.
 Kliknite na tlačidlo **Select/Move** a posúvajte molekulou bázy tak, aby sa vzniknutá $-\text{CH}_3$ skupina prekryla s 1. atómom uhlíka na molekule pentózy. Vytvorí sa N-glykozidová väzba.
- Pri tvorbe nukleotidov a nukleozidov DNA a RNA je možné využiť aj hotové šablóny v záložke **DNA/RNA Kit**, ktoré už obsahujú príslušnú pentózu s naviazaným zvyškom kyseliny trihydrogenfosforečnej.

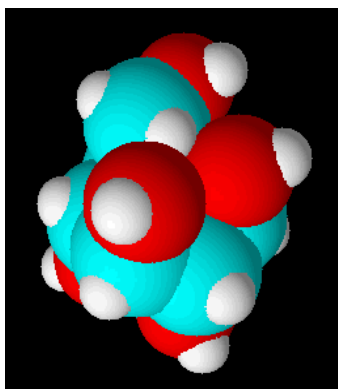
5. Na vytvorenie 3D štruktúry označte vytvorený vzorec a zvolte v menu Tools 3D optimalizáciu.



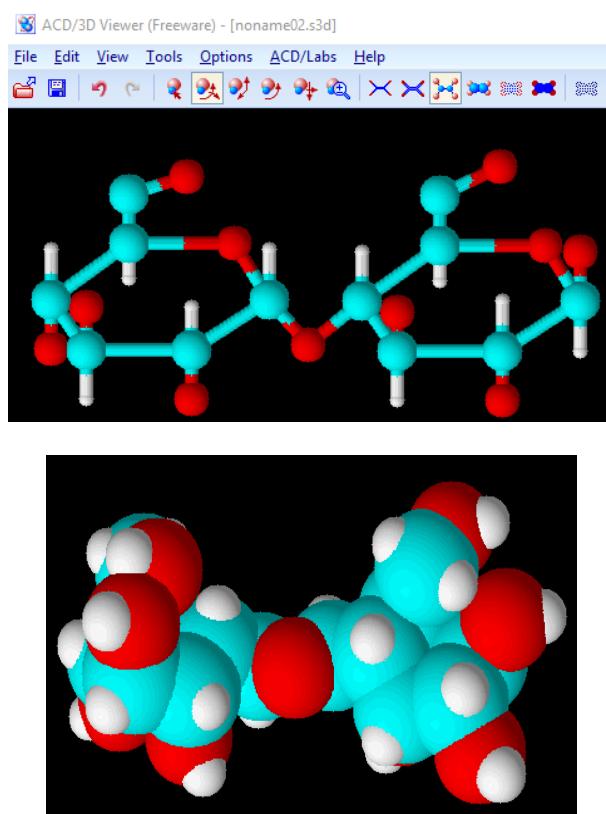
6. Zvoľte v spodnej časti obrazovky režim **2-Copy To ChemSketch**, typ molekuly **Balls and Sticks**. Teraz môžete molekulou pohybovať a sledovať jej priestorové usporiadanie.

7. Na vytvorenie animácie zvoľte **New Frames Set** a **Auto Add Frames** a nakoniec animovaný obrázok uložte ako *betaglukopyranoza.gif* (*Obr. 5.1*).

8. Podobne si môžete nakresliť oligosacharidy (disacharidy *Obr. 5.2*, trisacharidy, tetrasacharidy atď.) až polysacharidy.



Obr. 5.1 3D molekula β -D-glukopyranózy: kalotový model (vlastný zdroj)



Obr. 5.2 3D molekula β -maltózy: guľôčkový a kalotový model (vlastný zdroj)

Reflexia:

Sumatívne hodnotenie: spoločná kontrola správnosti riešenia úloh a diskusia, porovnávanie výsledkov a použitých postupov.

Je možné v závere využiť aj prostriedok hodnotenia nazvaný „**lístok pri odchode**“, kde žiaci napíšu:

1. 3 veci, ktoré sa na hodine naučili,
2. 2 veci, ktoré boli zaujímavé,
3. 1 otázku, ktorú stále majú.

ÚLOHA 5.2 – RIEŠTE!



Nájdite Fischerove vzorce týchto monosacharidov.

- a) α -D-glukopyranózy,
- b) β -D-fruktofuranózy.

α -D-glukopyranóza	β -D-fruktofuranóza

ÚLOHA 5.3 – RIEŠTE!

Nájdite štruktúrne vzorce stoličkovej konformácie α -D-glukopyranózy a β -D-glukopyranózy.

ÚLOHA 5.4 – RIEŠTE!

Zobrazte typy vzorcov monosacharidov uvedených v tabuľke.

Názov monosacharidu	Fischerov vzorec	Tollensov vzorec (forma α i β)	Haworthov vzorec (forma α i β)
D-ribóza			
D-galaktóza			
D-manóza			
D-glukóza			
D-fruktóza			

ÚLOHA 5.5 – RIEŠTE!



Vytvorte vzorce a modely disacharidov so sumárnym vzorcom $C_{12}H_{22}O_{11}$ uvedených v tabuľke.

Disacharid	Zloženie	Väzba	Vzorec	Guľôčkový model
sacharóza	α -D-glukopyranóza + β -D-fruktofuranóza	$\alpha(1 \rightarrow 2)$		
laktóza	β -D-galaktopyranóza + α -D-glukopyranóza	$\beta(1 \rightarrow 4)$		
maltóza	α -D-glukopyranóza + α -D-glukopyranóza	$\alpha(1 \rightarrow 4)$		
celobióza	β -D-glukopyranóza + β -D-glukopyranóza	$\beta(1 \rightarrow 4)$		

ÚLOHA 5.6 – RIEŠTE!



Existuje viac než jedna molekula so sumárnym vzorcom $C_3H_6O_3$. Molekuly, ktoré majú rovnaký sumárny vzorec, ale rozdielny štruktúrny vzorec sa nazývajú **štruktúrne izoméry**. Zobraďte a pomenujte všetky izoméry sacharidov so sumárnym vzorcom $C_3H_6O_3$ (berte do úvahy izomériu funkčných skupín aj optickú izomériu).

Sumárny vzorec	Štruktúrny vzorec	Názov	Gulôčkový model	Kalotový model
$C_3H_6O_3$				

ÚLOHA 5.7 – RIEŠTE!



V menu Templates sa nachádza aj záložka **DNA/RNA Kit**. Skúste pomocou ponúkaných šablón vytvoriť vzorce a modely guanozínu, cytozínového deoxyribonukleotidu a adenozíntrifosfátu (ATP). Majte na pamäti, že medzi dusíkatou bázou a pentózou je N-glykozidová väzba.

Názov	Zloženie	Vzorec	Guľôčkový model
guanozín	guanín + ribóza		
cytozínový deoxyribonukleotid	cytozín + deoxyribóza + zvyšok H_3PO_4		
ATP	adenín + ribóza + 3 zvyšky H_3PO_4		

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>	