

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM






ZÁKLADY PRÁCE V CHEMSKETCH

1) ÚVOD DO PŘEDMĚTU

Předmět vychází z nejnovějších přístupů, vyučovacích technik a digitalizace vyučovacího procesu. Přibližuje studentům obsah výuky. Proces učení je dynamičtější a interaktivnější a studenti získávají další pohled na chemické procesy, rozšířený o 3D animaci pomocí programu ChemSketch. V rámci seznámení se s prací v programu by se studenti seznámí

s možnostmi, které program ChemSketch nabízí, naučí se používat klíčové funkce poskytované programem na příkladech struktur různých organických sloučenin. Studenti také využijí program k zobrazení vybavení a laboratorních přístrojů, což je zvláště užitečné při psaní laboratorních protokolů jako výstupů hodin praktické výuky chemie.

2) POPIS POUŽITÝCH NÁSTROJŮ – ChemSketch

- *Draw Normal* je výchozím nástrojem při spuštění programu. V tomto režimu lze snadno kreslit normální nebo rozvětvené řetězce a nahrazovat atomy jinými atomy z periodické tabulky prvků.
- The *Draw Continuous* nástroj je vhodný pro "vlození" nových atomů. S tímto nástrojem lze kreslit vazby pouze z vybraného atomu.
- Kreslení dvojných a trojných vazeb – najetím kurzoru na poslední nakreslenou vazbu (kolem vazby uvidíte obdélník) a následným kliknutím na ni vytvoříme dvojnou vazbu. Kliknutím ještě jednou můžeme nakreslit trojnou vazbu.
- Krok zpět – slouží ke zrušení poslední provedené akce. Pracovní prostor se resetuje přesně na úroveň, ve které byl před poslední změnou.
- Odstranění jednotlivých atomů ("gumování") - S aktivním nástrojem Odstranit () klikněte na atom, který chcete odstranit ze struktury.
- Záměna atomů - Nahrazení atomu novým prvkem, jehož tlačítko není zobrazeno na panelu nástrojů "Atoms toolbar"
- Kreslení vazby mezi dvěma atomy - Lze provést s využitím nástroje Draw Normal () nebo Draw Continuous (). Tažením z jednoho atomu na druhý se mezi nimi nakreslí jedna vazba.
- "Upřesnění" struktury – úprava všech délek a úhlů vazeb
- Úprava popisků atomů - Nástroj Upravit popisek atomu () umožňuje nahradit koncové atomy zkratkami.
- Možnosti rotace molekul
- Kreslení řetězců - Pomocí nástroje *DrawChains* () lze snadno kreslit řetězce libovolné délky pohybem kurzoru.

- Nastavení nábojů a definování aniontů a kationtů
- Jak smazat celou plochu

3) SEZNAM VYBRANÝCH KAPITOL

- Základy práce v softwaru **ChemSketch(Croatia)**
- Koordinační sloučeniny (**Slovenia**)
- Alkany a cykloalkany (**Croatia**)
- Alkeny a Alkyny (**Croatia**)
- Areny (**Macedonia**)
- Alkoholy (**Macedonia**)
- Aldehydy a Ketony (**Slovenia**)
- Biomolekuly (**Czech Republic**)
- Chiralita a Optická Aktivita (**Czech Republic**)
- Kreslení Aparatur (**Czech Republic**)
- Lewisovy vzorce (**Croatia**)

4) ZPRACOVÁNÍ

Vyučovací jednotka: ChemSketch
Název: Základy práce v ChemSketch
Odhadovaný počet hodin: 3

4.1. Teoretický úvod

V rámci této kapitoly se studenti seznámí se základními nástroji potřebnými pro práci v programu ChemSketch. Znalost těchto nástrojů je nezbytná pro úspěšné zvládnutí práce ve všech navazujících kapitolách. Studenti se naučí kreslit jednoduché příklady struktur organických sloučenin, projít různé panely nástrojů (obecné, atomové, strukturální panel nástrojů) a naučí se využívat různé možnosti, které program ChemSketch nabízí.

4.2. Vzdělávací výstupy


V této kapitole se studenti naučí, jak:

- Pomocí nástrojů dostupných v programu ChemSketch nakreslit požadované molekuly organických sloučenin
- Zobrazit struktury molekul organických sloučenin ve třech rozměrech pomocí možnosti 3D prohlížeče
- Používat nástroje pro označení částí molekuly nebo celé molekuly, nástroje pro rotující molekuly a pohybující se molekuly ve 2D a 3D.
- Nakreslit uhlovodíkový řetězec pomocí možností DrawNormal, DrawContinuous, DrawChains
- Odstranit části struktury molekuly nebo celé molekuly


- Nakreslit dvojnou a trojnou vazbu ve sloučenině
- Přidat alkylové skupiny do stávající sloučeniny a změnit typy atomů ve struktuře molekuly
- Zrušit změny provedené v programu
- Optimalizovat strukturu molekuly
- Nakreslit struktury aniontů a kationtů pomocí nástroje pro generování nábojů

4.3. Návod k použití softwaru ChemSketch

a) Ikona *Draw Normal*:

Nástroj *Draw Normal* () je výchozím nástrojem při spuštění programu. S aktivním nástrojem lze snadno kreslit jednoduché nebo rozvětvené řetězce a nahradit atomy uhlíku jinými atomy z periodické tabulky prvků.

Příklad 1 Nakreslete 2-methylpropan a 2-methylbutan využitím nástroje *Draw Normal*. Otočte nakreslenou strukturu vertikálně.

Ujistěte se, že je na panelu nástrojů nastaven režim *Structure* s aktivním nástrojem *Draw Normal* a že je na panelu *Atomy* vybrané tlačítko Uhlík ()

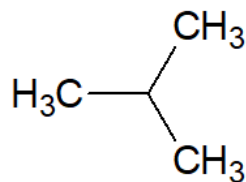
KROK 1 Kliknutím do prázdného místa na pracovní ploše nakreslíte methan CH_4 .

KROK 2 Umístěte ukazatel myši na CH_4 a až uvidíte obdélník kolem vzorce methanu (obrázek 1), kliknutím na něj přidejte methylovou skupinu, čímž vznikne ethan $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$.




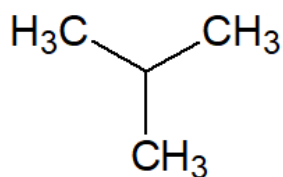
Obrázek 1. Obdélník kolem vzorce methanu.

KROK 3 Pro vytvoření 2-methylpropanu dvakrát klikněte na jednu ze skupin CH_3 (obrázek 2)




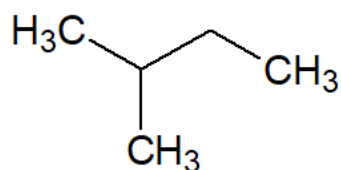
Obrázek 2. struktura 2-methylpropanu

KROK 4 Na panelu nástrojů *Structure toolbar*, klikněte na ikonu *Set Bond Vertically* () , poté kliknutím na spodní vazbu vzorce otočíte strukturu svisle, jak je znázorněno na obrázku 3.



Obrázek 3. Vertikální rotace struktury 2-methylpropanu

KROK 5 Na panelu nástrojů *Structure toolbar*, klikněte na *Draw Normal* () , a následně na pravý krajní atom uhlíku. Tak vznikne vzorec 2-methylbutanu (**obrázek 4**).



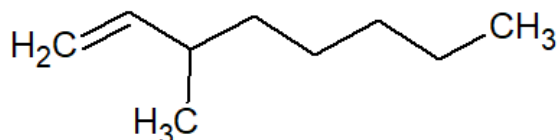
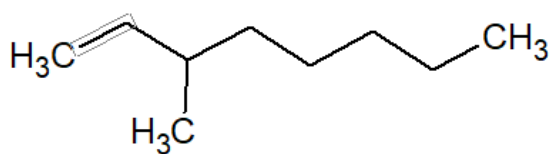
Obrázek 4. Vzorec 2-methylbutanu

Poznámka: Uhlovodíkový řetězec se zvětší pokaždé, když kliknete na atom uhlíku zcela vpravo. Chcete-li řetězec prodloužit vodorovně, stiskněte při klepnutí na atom klávesu **CTRL**.

Kreslení dvojných a trojných vazeb:


Příklad 2 S využitím nástroje *Draw Normal* nakreslete 3-methyl-1-yn a 3-methyl-1-en.

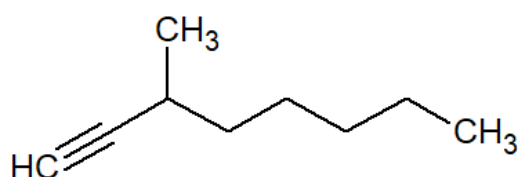
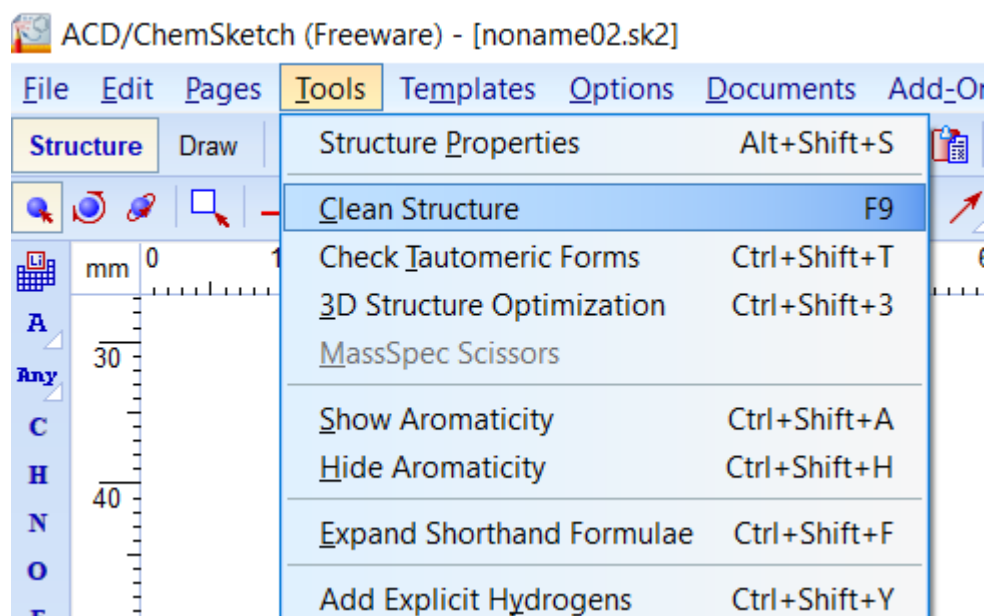
KROK 1 Nakreslete vzorec 3-metyloktanu (**obrázek 5**) a následně najed'te kurzorem na jednoduchou vazbu mezi prvními dvěma atomy uhlíku z uhlovodíkového řetězce (uvidíte obdélník kolem vazby). Kliknutím vytvoříte dvojnou vazbu (**obrázek 6**).



Obrázek 5 Obdélník kolem jednoduché vazby mezi prvními dvěma atomy uhlíku.


Obrázek 6 Vzorec 3-metylokt-1-enu.

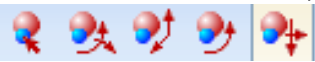
KROK 2 Dalším kliknutím vytvoříte trojnou vazbu (**obrázek 7b**). Označte celou strukturu přetažením vzorce pomocí ikony . Poté klikněte na *Nástroje*, vyberte možnost “*clean structure*”, jak je znázorněno na **obrázku 7a**.

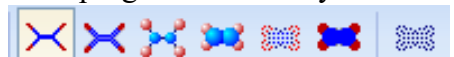


Obrázek 7. a) Možnost smazání struktury


Obrázek 7. b) Vzorec 3-methyl-okt-1-ynu


KROK 3 Kliknutím na možnost Prohlížeč 3D - 3D Viewer () , zobrazte strukturu molekuly 3-methyl-okt-1-ynu trojrozměrně.

KROK 4 Zkuste použít každou z možností otočení, přesunutí a označení molekuly umístěné na horním panelu nástrojů: . Zobrazte molekulu každým ze způsobů, které program nabízí s využitím možností zobrazených na panelu nástrojů:




Kliknutím na kteroukoli z možností se změní způsob zobrazení molekuly 5-ethyl-2,2-

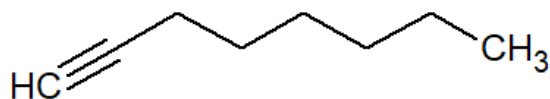
dimethylheptanu. Pro automatické otáčení molekuly klikněte na ikonu . Pro automatickou plynulou změnu z jednoho do druhého režimu zobrazení molekuly s rotací

klikněte na ikonu .

Odstranění jednotlivých atomů:

Příklad 3 Využijte nakreslenou strukturu 3-methyl-okt-1-ynu z příkladu 2 a odstraňte methylskupinu ze struktury pomocí nástroje *Odstranit*. Poté zrušte všechny změny provedené v této struktuře.

KROK 1 Na panelu nástrojů *General toolbar* klikněte na ikonu *Delete* (). Poté klikněte na atom uhlíku z methylové skupiny. Pojmenujte novou molekulu (**obrázek 8**).

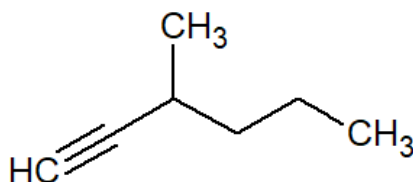


Obrázek 8. Název _____

KROK 2 Vrácení změn provedete kliknutím na *Undo* ().

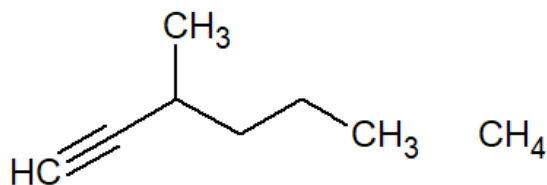
Další možnosti:

KROK 3 Využijte ikonu *Delete*, ale nyní klikněte na další atom uhlíku v řetězci. Smaže se celý zbytek molekuly. Pojmenujte vzorec na **obrázku 9**.




Obrázek 9. Název _____

KROK 4 Vraťte všechny změny. Nyní máte znovu 3-methylokt-1-yn. Zvolte nástroj *Delete* a podržte klávesu CTRL. Klikněte znovu na stejný atom uhlíku. Na **obrázku 10** je patrné, že poslední atom je odstraněn, zatímco koncový atom hlavního řetězce připojený k odstraněnému zůstává.




Obrázek 10. Kombinace CTRL a nástroje *Delete* odstraní předposlední uhlík ze struktury 3-methylokt-1-ynu.

KROK 5 Klikněte na *Undo* () a vraťte změny na **3-methyloktan**.

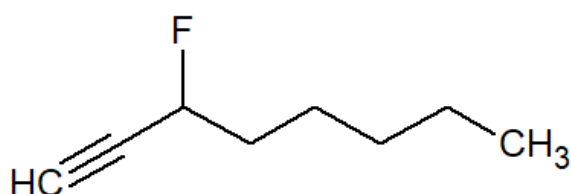
Changing atoms:

Příklad 4 Nahradte atom uhlíku z methylové skupiny 3-methyloktanu atomem fluoru.

KROK 1 Na panelu *Atoms toolbar* označte *Periodic Table* (). Zobrazí se dialogové okno *Periodická tabulka prvků*.

KROK 2 V *Periodic Table of Elements* označte *Fluor* a klikněte na OK. Všimněte si, že tlačítko *Fluor* je nyní aktivní na panelu nástrojů *Atoms toolbar*.

Kliknutím na atom uhlíku z methylové skupiny jej nahradíte atomem fluoru (**obrázek 11**). Pojmenujte tuto sloučeninu..



Obrázek 11. Název _____

Poznámka:

Když vyberete prvky z *Periodic Table of Elements*, odpovídající tlačítka se automaticky přidají do *Atoms toolbar*. Chcete-li tato tlačítka odebrat z pruhu nástrojů *Atomy*, klepněte pravým tlačítkem myši na panel nástrojů *Atomy* a v místní nabídce vyberte příkaz *Reset Toolbar*. V okně se zprávou, které se zobrazí, klepněte na tlačítko *Ano*. Tím se odstraní všechna tlačítka prvků definovaných uživatelem kromě výchozích.

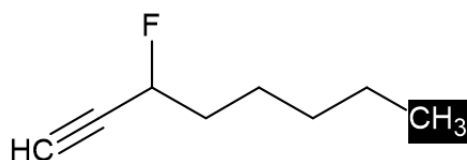
b) Využití nástroje *Draw Continuous* :

S tímto aktivním nástrojem je možné kreslit vazby pouze z vybraného atomu.

KROK 1 Na *Structure toolbar* označte *DrawContinuous* (). Případně můžete stisknutím pravého tlačítka myši zapnout nástroj *DrawContinuous*.

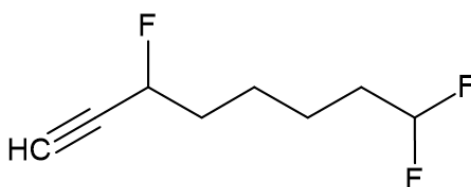
KROK 2 Ujistěte se, že je na panelu nástrojů *Atoms toolbar* stále vybrané tlačítko *Fluor* (*Fluor*). Kliknutím na pravý krajní atom uhlíku v předchozí struktuře (viz **obrázek 12**) jej zvýrazněte:

Ensure that the *Fluorine* button (*Fluorine*) is still selected on *the*. Click the rightmost carbon atom in the previously drawn structure (view **figure 12**) to highlight it:



Obrázek 12. Zvýrazněný koncový atom uhlíku

KROK 3 Opětovným klepnutím vytvoříte atom fluoru namísto vybraného atomu uhlíku. Opakujte kroky 2–3, abyste získali další atom fluoru (**obrázek 13**). Pojmenujte sloučeninu.



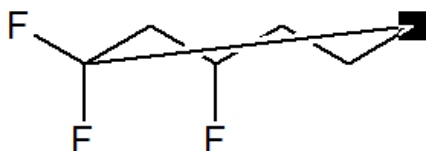
Obrázek 13. Název _____

Kreslení vazeb mezi atomy ve struktuře "čištění":

Příklad 5 Nakreslete jednoduchou vazbu mezi koncovými atomy uhlíku ve struktuře 1,1,3-trifluorhexanu a pak tuto strukturu "vyčistěte". "Vyčistit" nakreslenou strukturu znamená **standardizovat** všechny délky vazeb a vazebné úhly.

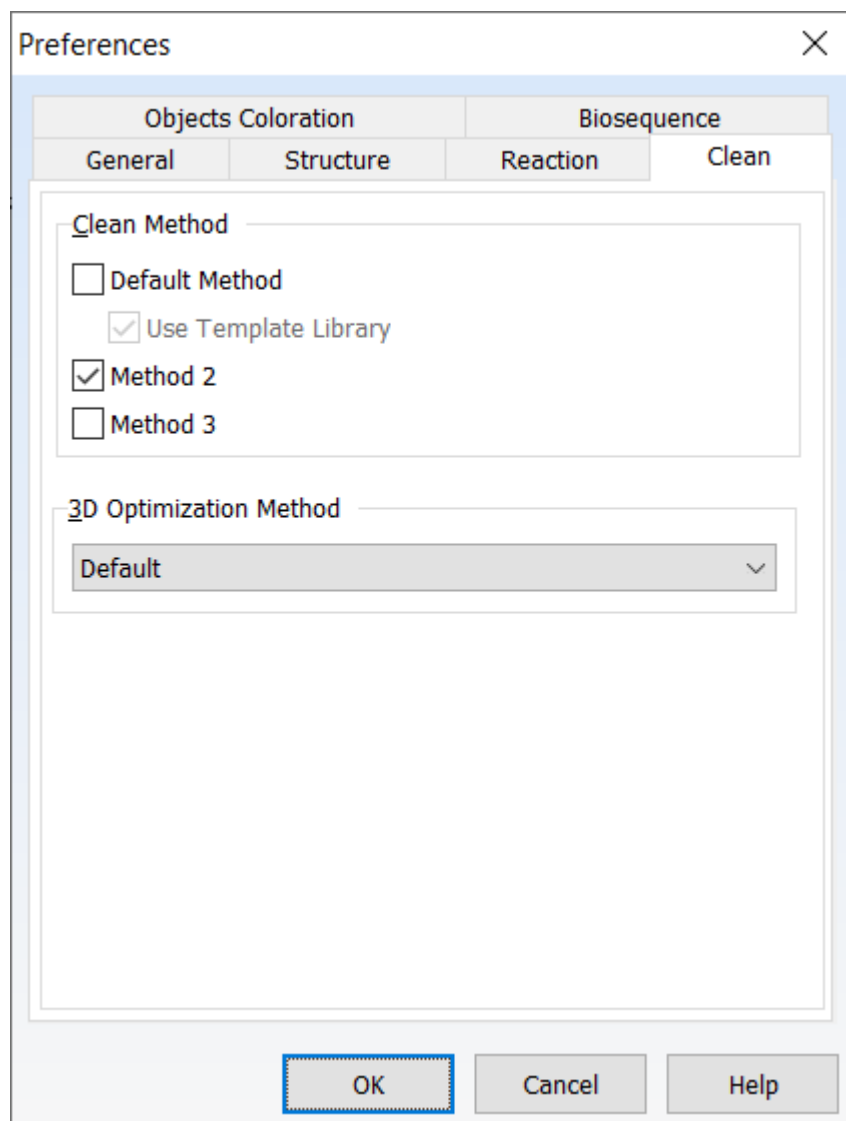
KROK 1 Použijte *Draw Continuous* k zakreslení 1,1,3-trifluorohexanu.

KROK 2 Přetažením z prvního atomu uhlíku ke koncovému mezi nimi vznikne jednoduchá vazba (**obrázek 14**).




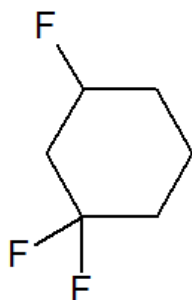
Obrázek 14. Vznik jednoduché vazby tažením mezi koncovými atomy uhlíků.

KROK 3 Z *Options menu* vyberte *Preferences* a následně na kartě *Clean* v dialogovém okně *Preferences*, které se zobrazí, nastavte stejné možnosti (**obrázek 15**).




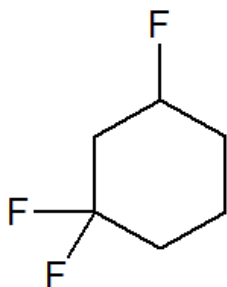
Obrázek 15. Nastavení možností pro "čištění" struktur

KROK 3 Klikněte na OK. Zavře se dialogové okno. V režimu *Structure toolbar* klikněte na *Clean Structure* (). Pokud jste udělali vše správně, měli byste získat strukturu zobrazenou na **obrázku 16**. Pojmenujte tuto sloučeninu.



Obrázek 16. Název _____

KROK 4 Na panelu nástrojů *Structure toolbar* klepněte na tlačítko *Set Bond Vertically* (). Kliknutím na vazbu uhlík-fluor otočte vzorec(**obrázek 17**).




Obrázek 17. Vertikálně otočená struktura

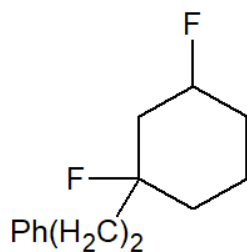
Úprava popisků atomů:

Příklad 6. Nahraďte atom fluoru ze struktury na **obr. 17** skupinou $(\text{CH}_2)_2\text{Ph}$.


Nástroj *Edit Atom Label* tool () umožňuje nahradit koncové atomy zkratkami.

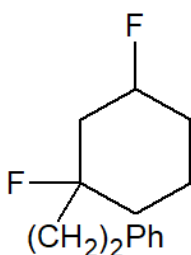
KROK 1 Proveďte následující kroky: Na panelu nástrojů *Atoms toolbar* klikněte na *Edit Atom Label* (). Klikněte na nejspodnější atom fluoru ve struktuře.

KROK 2 Do dialogového okna *Edit Label*, které se následně zobrazí, napište $(\text{CH}_2)_2\text{Ph}$ a klikněte na *Insert*. Zobrazí se popisec v požadované pozici včetně indexů. Struktura je znázorněna na **obrázku 18**. Pojmenujte tuto sloučeninu.



Obrázek 18. Název _____


KROK 3 Na panelu nástrojů *Structure Toolbar* klikněte na ikonu *Change Position* ()
Kliknutím na popisec jej obrátíte (**obrázek 19**).

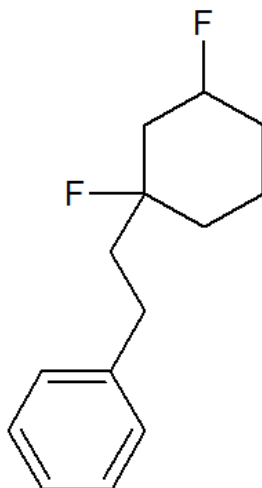


Obrázek 19. Obrácené pořadí atomů ve vložené struktuře


Tip:


Pokud podržíte klávesu SHIFT a kliknete na popisec s aktivním nástrojem *Change Position*, spojovací bod popisku se změní.

KROK 4 Klikněte na *Edit Atom Label* () a na zkratku ve zkráceném zápisu. V dialogovém okně *Edit Label* klikněte na tlačítko *Expand* (Rozbalit), abyste získali strukturu znázorněnou na **obrázku 20**.





Obrázek 20. “Rozbalení” struktury z Obrázku 19.

KROK 5 Kliknutím na možnost Prohlížeč 3D - *3D Viewer* () , zobrazte strukturu molekuly 3-methyl-okt-1-ynu trojrozměrně.

KROK 6 Zkuste použít každou z možností otočení, přesunutí a označení molekuly umístěné na horním panelu nástrojů: . Zobrazte molekulu každým ze způsobů, které program nabízí s využitím možností zobrazených na panelu nástrojů:




Kliknutím na kteroukoli z možností se změní způsob zobrazení molekuly. Pro automatické otáčení molekuly klikněte na ikonu . Pro automatickou plynulou změnu z jednoho do druhého režimu zobrazení molekuly s rotací klikněte na ikonu .


Důležité:

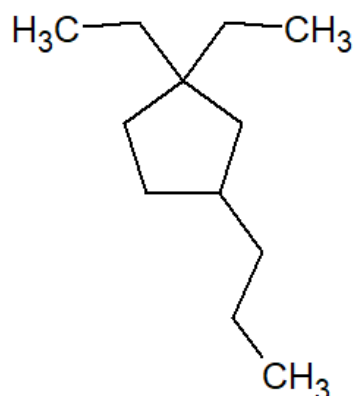
Pouze skupinové zkratky, které nahrazují popisky koncových atomů, lze rozbalit pomocí tlačítka *Expand* (Rozbalit).

Kreslení cyklických struktur

Ke znázornění cyklické struktury využíváme nástroje *DrawChains* () .

Příklad 7. Znázorněte strukturu 1,1-diethyl-3-propylcyclopentanu pomocí nástroje *DrawChain*.



KROK 1 Nakreslete vzorec cyklopentanu a poté na panelu nástrojů *Structure toolbar* klikněte na *DrawChains* (). Najed'te kurzorem na první atom uhlíku, který musí obsahovat dvě ethylové skupiny (dle názvu sloučeniny). Tažením doleva vytvářejte uhlíkový řetězec, dokud počet uhlíků vedle ukazatele myši nedosáhne hodnoty C2. Počet se mění s každým přidaným atomem C (tažením myši) nebo odebráním (tažením myši zpět). Zopakujte postup a přidejte další ethyl na C1 a propyl na C3. Měli byste získat strukturu znázorněnou na **obr. 21**.

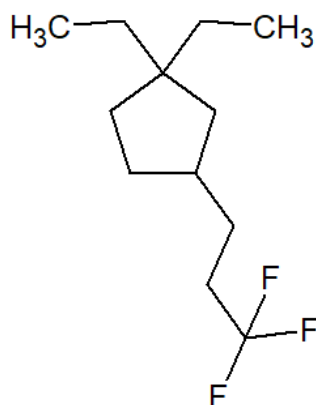


Obrázek 21. Struktura 1,1-diethyl-3-propylcyclopentane



Tip:

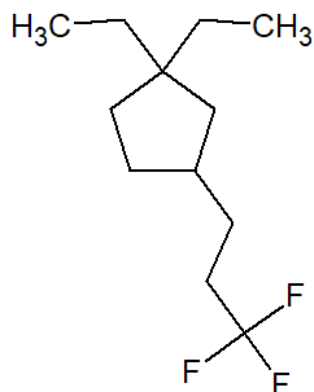
Tažením kurzoru pomocí myši jsou vazby nastaveny pod úhlem 120° . Chcete-li nastavit úhel 180° , podržte při tažení stisknutou klávesu CTRL.

KROK 2 Pomocí nástroje *DrawChains* 1 () klikněte na *Fluor* () a poté tři krát na C3 atom propylové skupiny (**obr. 22**).





Obrázek 22. Substituce atomů H ve struktuře z obr. 21.

KROK 3 V režimu *Structure toolbar* označte ikonu *Select/Move* () , poté vyberte tři vazby na atom fluoru, a klikněte na *Clean Structure* () . Výsledná struktura je znázorněna na obrázku 23. Pojmenujte tuto strukturu.





Obrázek 23. Název _____

KROK 4 Kliknutím na možnost *3D Viewer* () , zobrazte strukturu molekuly 3-methyl-*okt-1-ynu* trojrozměrně.

KROK 5 Zkuste použít každou z možností otočení, přesunutí a označení molekuly umístěné na horním panelu nástrojů: . Zobrazte molekulu každým ze způsobů, které program nabízí s využitím možností zobrazených na panelu nástrojů:

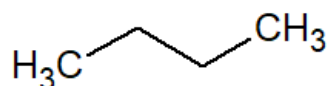


Kliknutím na kteroukoli z možností se změní způsob zobrazení molekuly. Pro automatické otáčení molekuly klikněte na ikonu . Pro automatickou plynulou změnu z jednoho do druhého režimu zobrazení molekuly s rotací klikněte na ikonu .

Nastavení nábojů a nadefinování aniontů a kationtů:

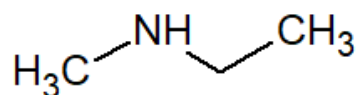
Příklad 8. Nakreslete strukturu butanu a nahraďte druhý atom v řetězci atomem dusíku. Na panelu nástrojů *Atoms toolbar* vyberte *Charges/Radicals*. Nyní lze na atomu dusíku generovat náboj nebo vytvořit radikál.

KROK 1 Na panelu nástrojů *Atoms toolbar* klikněte čtyřikrát na atom uhlíku a nakreslete butan (**obr. 24**).




Obrázek 24. struktura butanu.


KROK 2 Na panelu nástrojů *Atoms toolbar* klikněte na atom dusíku *Nitrogen* a poté na druhý atom základního řetězce (**obr. 25**).

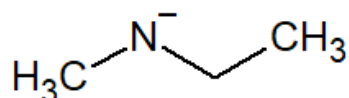


Obrázek 25. N-methylethanamin


KROK 3 Strukturu N-methylethanaminu pětkrát zkopírujte. Postupujte následujícím způsobem: vyberte vytvořenou strukturu kliknutím na prázdné místo na kreslicí ploše v její blízkosti. Využijte funkce CTRL+C a následně vytvořte požadovaný počet kopií několikanásobným stisknutím kláves CTRL+V a kliknutím na pracovní plochu.

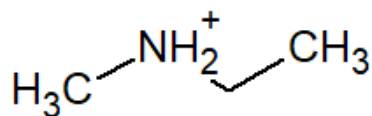
KROK 4 Na panelu nástrojů *Atoms toolbar* klikněte na pravý spodní trojúhelník () pro výběr nástroje *Charges/Radicals*.

KROK 5 Zvolte nástroj *Decrement (-) Charge tool* (). Všimněte si, že ukazatel myši se změní na kurzor. Nyní klikněte na skupinu NH první struktury, aby se z ní stal ethyl-methylazanide anion (obr. 26).



Obrázek 26. ethyl-methylazanid

KROK 6 Kliknutím pravým tlačítkem na pracovní plochu rychle přepnete na nástroj *Increment (+) Charge tool* (). Ukazatel myši se změní na Kurzor. Následným kliknutím na skupinu NH druhé struktury vytvoříte N-methyl(ethan)amoniový kation (obr. 27).

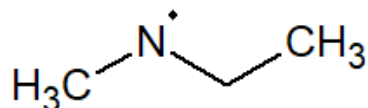


Obrázek 27. Structure of N-methyl(ethan)amoniový kation

Poznámka:

Při použití nástrojů Zvýšení (+) nebo Snížení (-) náboje (*Increment (+) Charge or Decrement (-) Charge*) je zachována správná chemická valence atomu nekovu automatickým přidáním nebo odebráním atomů vodíku. Pokud změníte náboj atomu kovu, změní se v přírůstcích nebo poklesech v souladu s dalším chemicky platným nábojem odpovídajícího iontu. Běžné valence lze nalézt v dialogovém okně Periodická tabulka prvků.

KROK 7 Nyní vberte z nabídky *Charges/Radicals* možnost *Radical* (ukazatel myši se změní na kurzor) a kliknutím na NH skupinu třetí struktury nakreslete volný ethyl(methyl)aminový radikál (obrázek 28).



Obrázek 28. ethyl(methyl)aminový radikál

Čištění pracovního prostoru:

Chcete-li pracovní plochu vyčistit, abyste mohli nakreslit zcela nové stavební objekty, použijte jeden z následujících způsobů:

Příklad: Vytvoření nového dokumentu *ACD/ChemSketch*:

KROK 1 Na panelu nástrojů *General toolbar* klikněte na *New Document*; nebo

KROK 2 Z nabídky *Soubor (File)* vyberte *New*.

Příklad: Přidání nové stránky ve stávajícím dokumentu *ACD/ChemSketch*:

KROK 1 Na panelu nástrojů *General toolbar* klikněte na *New Page*; nebo vyberte z nabídky *Pages* možnost *New*.

Příklad: Smazání stránky v aktuálním dokumentu *ACD/ChemSketch*:

STEP 1 V nabídce *Edit* zvolte *Select All* a následně z nabídky *Edit* vyberte *Delete*; nebo

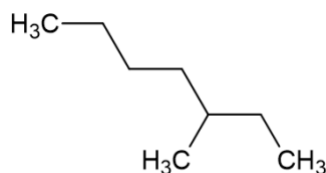
KROK 2 Stisknutím kombinace kláves CTRL+A vyberte všechny objekty na stránce a stiskněte klávesu DELETE; nebo

KROK 3 Na panelu nástrojů *General toolbar* klikněte na tlačítko *Delete*, kliknutím na prázdné místo mimo nakreslené struktury vyberete všechny a potom klepněte na ENTER.

4.4. Příklady úloh

Pro účely školení zopakujeme výše uvedené kroky a nakreslíme některé struktury.

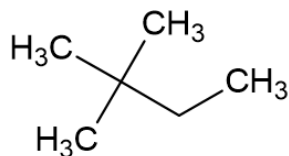
Úkol 1 Pomocí dovedností získaných v *ChemSketch* nakreslete zobrazenou strukturu 3-methylheptanu.



Úkol 2 Zapište racionální vzorce níže uvedených sloučenin:

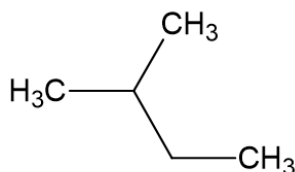
- 2,2-dimethylbutane
- 2-methylpentane

Úkol 3 Nakreslete vzorec uvedené sloučeniny a poté zaměňte jeden atom vodíku podle vašeho výběru atomem fluoru.



Úkol 4

- Nakreslete strukturu následujícího alkanu. Pojmenujte tuto sloučeninu a přidejte trojnou vazbu mezi třetí a čtvrtý atom uhlíku. Pojmenujte výslednou sloučeninu.
- Odstraňte methylovou skupinu ze sloučeniny a pomocí nástroje *DrawChains* přidejte další tři atomy uhlíku do nejdelšího uhlovodíkového řetězce tak, aby trojná vazba byla mezi prvním a druhým atomem uhlíku.
- Přidejte fenylovou skupinu ke třetímu atomu uhlíku.



Úkol 5 Molekulu z předchozí úlohy otočte o 90°..

4.5. Příklady úloh pro ověření znalostí studentů

ÚKOL 1

- Pomocí dovedností získaných v ChemSketch nakreslete strukturu alkanu, která obsahuje 7 atomů uhlíku.
- Přidejte methylovou skupinu ke třetímu atomu uhlíku ve struktuře. Pojmenujte strukturu.
- Přidejte dvojnou vazbu mezi třetím a čtvrtým atomem uhlíku ve struktuře. Pojmenujte strukturu.
- Nahraďte atom uhlíku z methylové skupiny na třetím atomu uhlíku ve struktuře atomem bromu. Pojmenujte strukturu.
- Nahraďte atom bromu ze struktury skupinou CN. Pojmenujte strukturu.
- Použijte nástroj *draw continuous* a nakreslete cyklickou formu sloučeniny z podúlohy. Pojmenujte strukturu.

ÚKOL 2

- Nakreslete pentan a nahraďte druhý atom uhlíku atomem kyslíku.

- B) Vytvořte kation, anion a radikál této struktury změnou náboje na atomu kyslíku.
Pojmenujte struktury.

ZDROJE:

1. ACD/ChemSketch, Version 11.0 for Microsoft Windows, Tutorial Drawing Chemical Structures and Graphical Images

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

ALKANY A CYKLOALKANY

1.) ZPRACOVÁNÍ

Vyučovací jednotka: Uhlovodíky
Název jednotky: Alkany a cykloalkany
Odhadovaný počet hodin: 3

1.1. Teoretický úvod

a) Alkany

- Alkany jsou nejjednodušší skupinou organických sloučenin.
- Jsou vyrobeny z atomů uhlíku a vodíku propojených jednoduchými kovalentními vazbami (délka vazby uhlík-uhlík je kolem 1,54 Å)
- Alkany jsou nasycené uhlovodíky, protože ve své struktuře obsahují pouze jednoduché kovalentní vazby mezi atomy uhlíku a protože ve své struktuře tvoří maximální možný počet vazeb s atomy vodíku.
- Obecný vzorec alkanu je: C_nH_{2n+2} , kde n představuje počet atomů uhlíku.
- Název alkanu se skládá z kořene slova, který je tvořen na základě řeckého čísla (kromě prvních čtyř alkanů) a přípony -an. Řada alkanů s přímým a nerozvětveným řetězcem, jejichž sousední členy se liší jednou methylenovou skupinou ($-CH_2-$), se nazývá homologická řada alkanů. **Tabulka 1** ukazuje homologickou řadu alkanů.

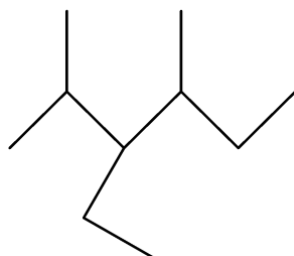
Tabulka 1. Názvy a molekulové vzorce prvních deseti alkanů v homologické řadě

Název alkanu	metha n	ethan	propan	butan	pentan	hexan	heptan	oktan	nonan	dekan
Molekulový vzorec	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	C ₄ H ₁₀	C ₅ H ₁₂	C ₆ H ₁₄	C ₇ H ₁₆	C ₈ H ₁₈	C ₉ H ₂₀	C ₁₀ H ₂₂

- Pokud alkan obsahuje rozvětvený řetězec atomů uhlíku, název se určuje podle nejdelšího řetězce.

- Pokud alkan obsahuje dva řetězce se stejným počtem atomů uhlíku, název se určí podle řetězce, na kterém je navázán větší počet substituentů (atomová skupina nebo atom připojený k hlavnímu (nejdelšímu) uhlovodíkovému řetězci).
- Alkylová skupina nebo alkyl je uhlovodíková skupina, která má alkanovou strukturu s jedním atomem vodíku méně a má příponu -YL. Obvykle se označuje písmenem R.
- Atom uhlíku, ke kterému je alkylová skupina připojena, je označen číslem nebo lokantem, který musí být co nejmenší.
- Pokud uhlovodík obsahuje několik stejných alkylových skupin, je jejich počet označen násobícími předponami (di-, tri-, tetra-, ...), které nezapadají do klasifikace substituentů v abecedním pořadí.
- Pokud existuje několik stejných metod číslování, směr číslování se vybere v abecedním pořadí.

PŘÍKLAD:



3-ethyl-2,4-dimethylhexan

b) Cykloalkany

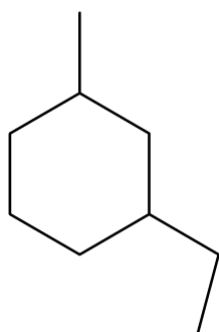
- Cyklické alkany, které obsahují ve své struktuře alespoň jeden kruh.
- Při pojmenování cykloalkanu ve vztahu k alkanu se stejným počtem atomů uhlíku se přidává předpona cyklo-.
- Pokud cykloalkan obsahuje pouze jeden substituent, není nutné psát lokant.
- Cykloalkan je považován za substituent, pokud je počet atomů uhlíku v kruhu menší než počet atomů uhlíku v řetězci.

Pokud je ve struktuře cykloalkanu více než jedna alkylová skupina, kruh by měl být očíslován tak, aby všechny měly alkylové skupiny co nejnížší lokant, a pokud je to možné, alkylová skupina, která je abecedně první, by měla mít nižší číslo.

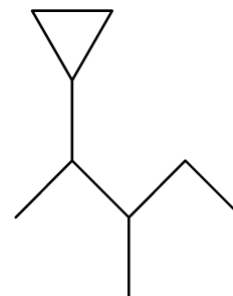
PŘÍKLAD:

a)

b)



1-ethyl-3-methylcyclohexan



2-cyklopropyl-3-methylpentan

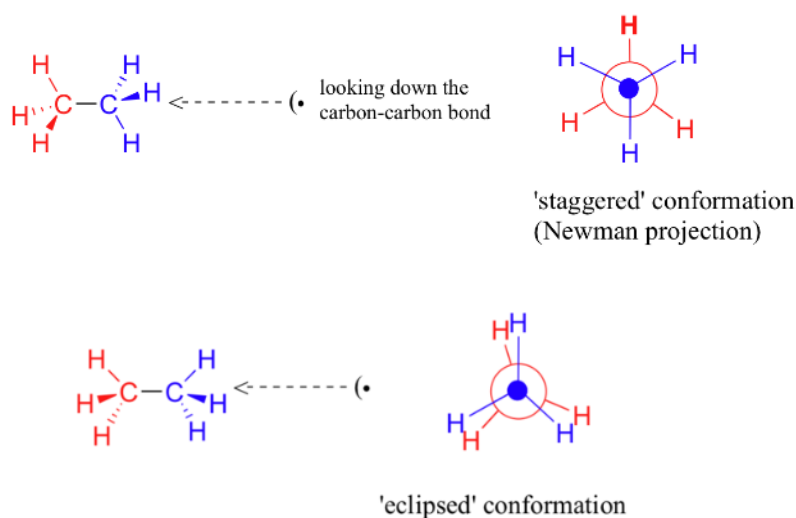
3D struktury molekul mohou být zobrazeny pomocí různých modelů: kuličky a tyčinky, mezník, tyčinky, jak ukazuje **tabulka 2**:

compound	balls and stick	spacefill	sticks
etan			
ciklobutan			
buten			
but-2-in			
kloretan			

Tabulka 2: Molekulové modely

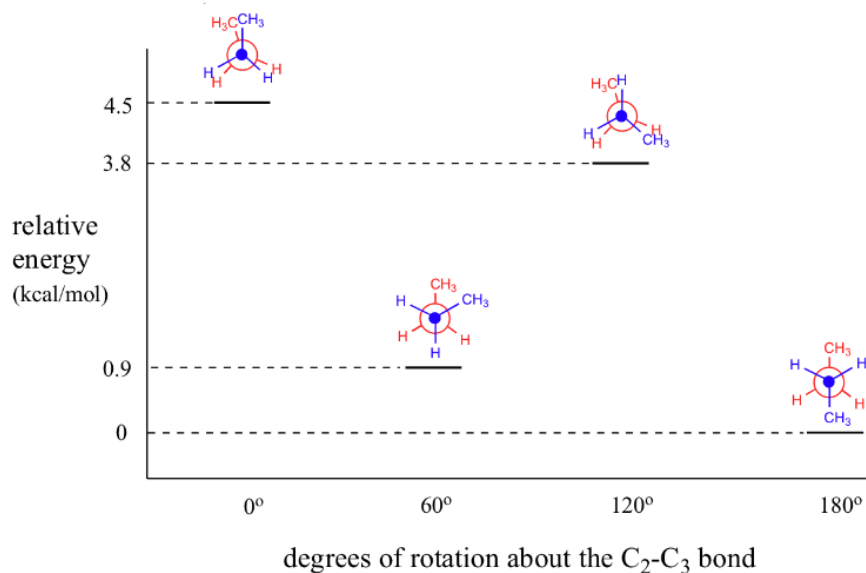
c) Newmanovy projekční vzorce

Newmanovy projekce slouží k lepší vizualizaci různých konformací molekul. V Newmanově projekci se díváme podélně dolů na konkrétní místo. Například v případě molekuly ethanu je vazba, na kterou se díváme, vazba uhlík-uhlík. „Přední“ atom je znázorněn jako tečka a „zadní“ atom jako větší kruh.



Obrázek 1. Newmanovy projekční vzorce (bezzákrytová a zákrytová konformace)

Pokud se podíváme na vazbu C-C tímto způsobem, úhel vytvořený mezi vazbou C-H na předním uhlíku a vazbou C-H na zadním uhlíku se nazývá dihedralní úhel. Nejnižší energetická konformace ethanu, znázorněná na **obrázku 1** výše, se nazývá bezzákrytová nebo antiperiplanární konformace. V tomto typu konformace jsou všechny dihedralní úhly 60° a vzdálenost mezi přední a zadní vazbou CH-H je maximalizována. Po otočení přední skupiny -CH₃ o 60° ve směru hodinových ručiček se molekula dostane do zákrytové nebo synperiplanární konformace s nejvyšší energií. V této konformaci jsou všechny dihedralní úhly 0° (v této Newmanově projekci je nutné vazby mírně rozložit, aby byly všechny stále viditelné). **Obrázek 2** ukazuje relativní energie různých Newmanových konformací.



Obrázek 2 Relativní energie pro různé Newmanovy konformace

1.2. Vzdělávací výstup

- nakreslit různé příklady molekul alkanů a cykloalkanů a prezentovat je se strukturním, kondenzovaným strukturním vzorcem a s skeletálním vzorcem
- vygenerovat název nakreslených molekul alkanů a cykloalkanů v programu ChemSketch
- určit molekulární vzorec nakreslených molekul alkanů a cykloalkanů v programu ChemSketch
- zlepšit zobrazení struktury molekul (úprava délky vazby a úhlů mezi vazbami) pomocí možnosti "*Clean Structure*"
- nakreslit strukturní izomery alkanů a cykloalkanů
- ukázat struktury alkanů a cykloalkanů ve třech rozměrech
- rotovat molekuly alkanů a cykloalkanů ve dvou a třech rozměrech
- změnit způsob zobrazování struktur alkanových a cykloalkanových molekul ve třech rozměrech
- pohybovat molekulami alkanů a cykloalkanů ve 3D a 2D
- určit délky vazeb a vazebné úhly v molekulách alkanů a cykloalkanů
- optimalizovat struktury molekul alkanů a cykloalkanů
- cyklizovat strukturu s přímým řetězcem molekuly alkanu na strukturu odpovídajícího cykloalkanu

- otočit molekulární strukturu ve třech rozměrech za účelem vizuální reprezentace vzorců Newmanovy projekce různých alkanů
- uložit do počítače dvjrozměrnou a trojrozměrnou strukturu požadované molekuly alkanu nebo cykloalkanu

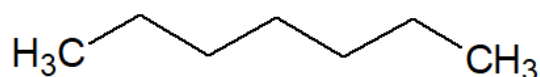
1.3. Instrukce pro používání programu ChemSketch

Příklad 1

Nakreslete molekulu 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu, poté upravte strukturu podle pokynů, vygenerujte její název v programu a určete molekulový vzorec této molekuly, zobrazte jej se skeletálním vzorcem, strukturním a kondenzovaným strukturním vzorcem, zobrazte strukturu molekuly ve třech dimenzích různými způsoby, určete délky vybraných vazeb a konkrétní úhly vazby, optimalizujte molekulu, otáčejte a posunujte ji ve dvou a třech rozměrech, uložte 2D a 3D strukturu do počítače, cyklizujte strukturu do vhodného cykloalkanu a vygenerujte pro tuto molekulu název, určete molekulární vzorec, přeneste do tří rozměrů, uložte 2D i 3D strukturu molekuly.

KROK 1

Zvolte *Draw Normal*. Klikněte na prázdnou oblast v rozhraní. Objeví se struktura molekuly metanu (CH₄). Kliknutím na tento atom uhlíku se vytvoří jednoduchá vazba uhlík-uhlík. Podržením klávesy Ctrl a kliknutím na každý následující atom uhlíku je možné nakreslit uhlovodíkový řetězec sedmi atomů uhlíku znázorněný na **obrázku 1**.

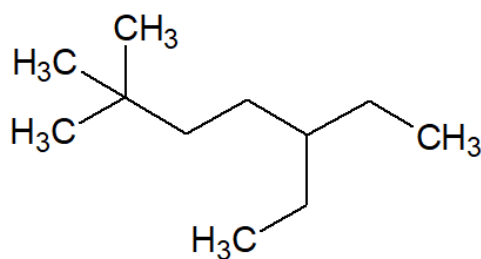


Obrázek 1. Struktura uhlovodíkového řetězce se sedmi atomy uhlíku

KROK 2

Dvojitým kliknutím na druhý atom uhlíku se vytvoří dvě methylové skupiny. Jedno kliknutí na pátý atom uhlíku vytvoří jednu methylovou skupinu, kterou lze kliknutím na atom uhlíku z methylové skupiny rozšířit na ethylovou skupinu.

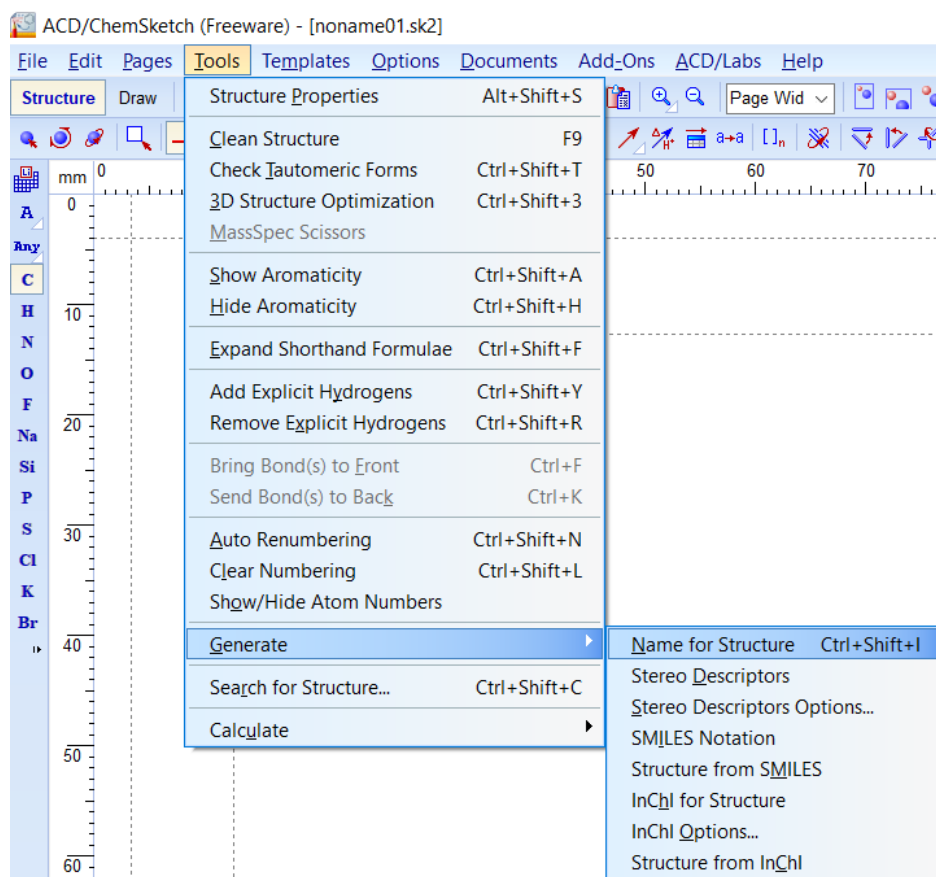
Obrázek 2 ukazuje strukturu molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu.



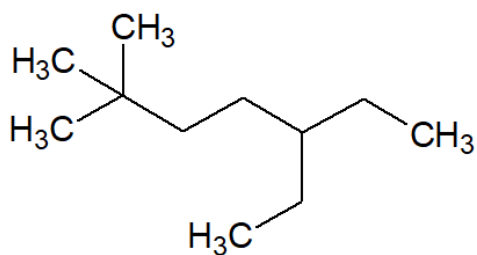
Obrázek 2. Vzorec molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu

KROK 3

Klikněte na *Tools*, vyberte možnost *Generate* a poté klikněte na *Name for structure*. Uvedený postup je znázorněn na **obrázku 3a** a na **obrázku 3b** je znázorněna struktura molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu, pod kterou je napsán její název. Pokud jste nezískali očekávaný název molekuly, opakujte **KROK 1** a **KROK 2**.



a



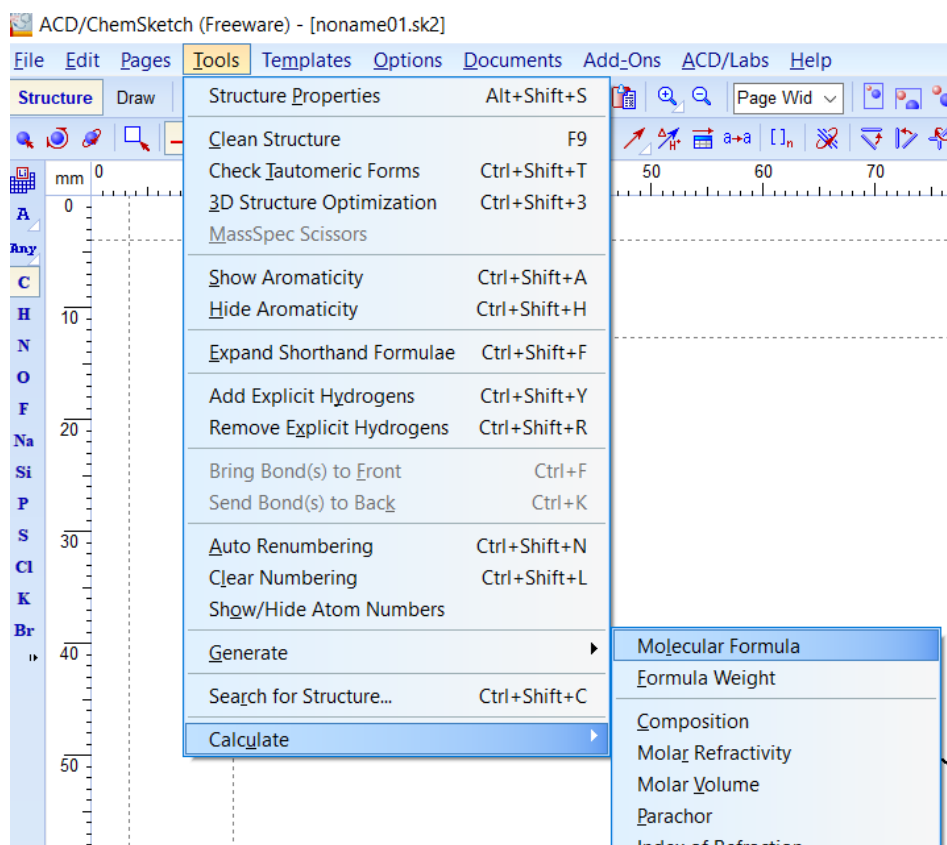
5-ethyl-2,2-dimethylheptane

b

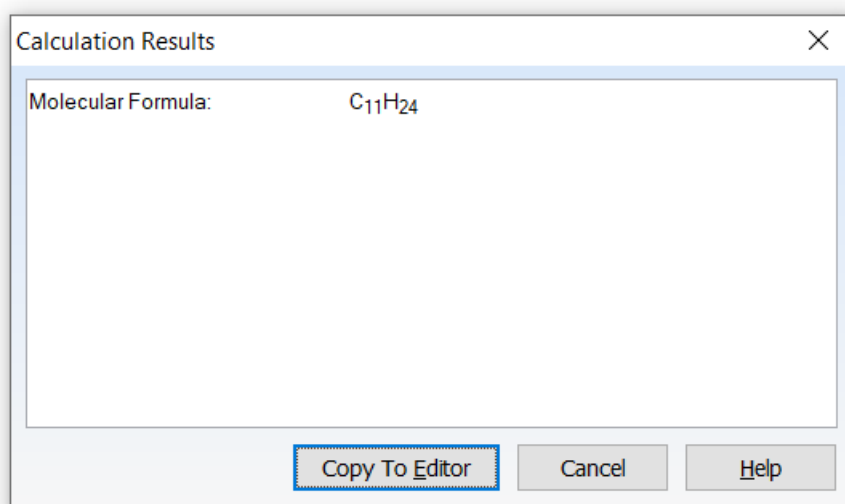
Obrázek 3. a) Postup pro generování názvu molekuly nakreslené v programu ChemSketch,
b) struktura a odpovídající název nakreslené molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu

KROK 4

Klikněte na *Tools*, zvolte *Calculate* a potom klikněte na *Molecular Formula*. Uvedený postup je znázorněn na **obrázku 4a** a na **obrázku 4b** je znázorněn molekulární vzorec 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu, který se po provedení sekvence popsanych možností zobrazí v novém okně. Chcete-li zobrazit molekulový vzorec na listu, který obsahuje strukturu a název nakreslené molekuly, klikněte na *Copy to Editor*.



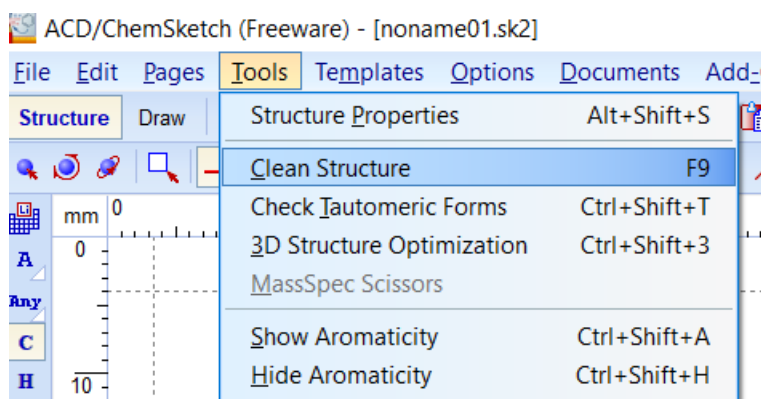
a



b




Obrázek 4. a) Posloupnost akcí pro zobrazení molekulového vzorce 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu, b) Okénko s molekulovým vzorcem molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu.

KROK 5 Pomocí *Tools* a kliknutím na *Clean Structure*, upravte délky a úhly vazeb (**Obrázek 5**).

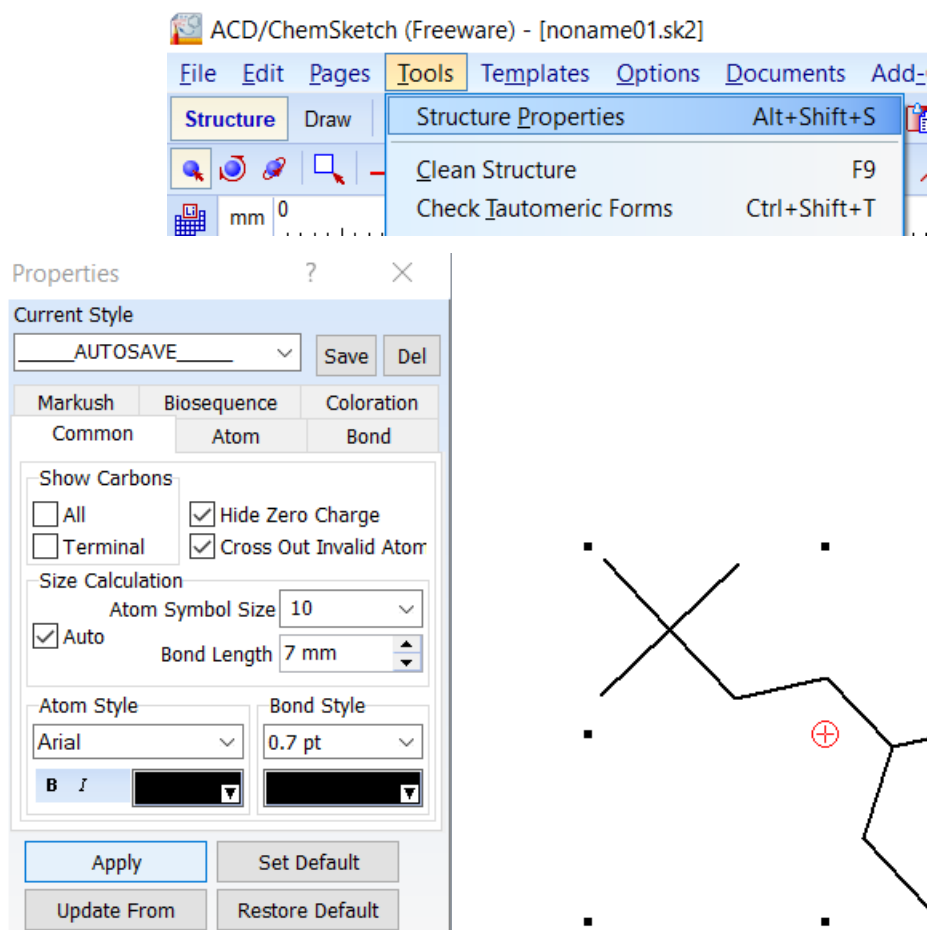


Obrázek 5. Úprava vazebných délek a úhlů v programu ChemSketch

KROK 6A Zobrazte strukturu molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu s kosterním vzorcem, kondenzovaným strukturním vzorcem a strukturním vzorcem.

K úspěšnému provedení je nutné vybrat kliknutím na celou strukturu molekuly  v levém horním rohu rozhraní a poté úpravou způsobu výběru molekuly kliknutím na  čímž se objeví tato ikona: . Přidržením přetáhněte a vyberte celou molekulu.

KROK 6B Klikněte na *Tools* a potom na *Structure Properties*, otevře se okno se všemi požadovanými možnostmi. **Obrázek 6a** ukazuje postup pro otevření okna a **Obrázek 6b** ukazuje možnosti, které je třeba upravit (v *Show Carbons* oddíle, klikněte na *all* a potom *apply*). **Obrázek 6c** ukazuje výslednou strukturu molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu reprezentovanou skeletálním vzorcem.



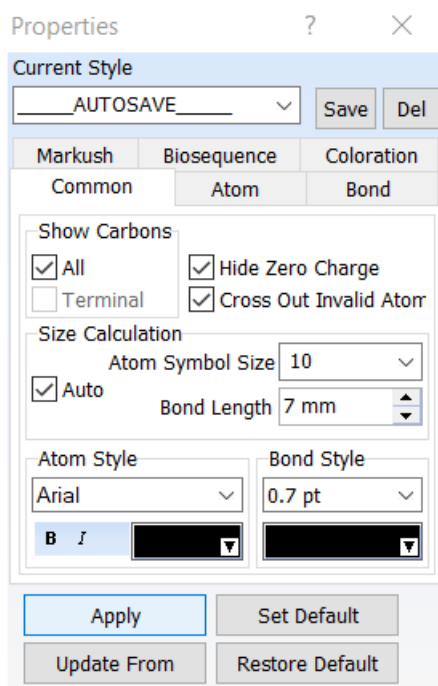
a

b

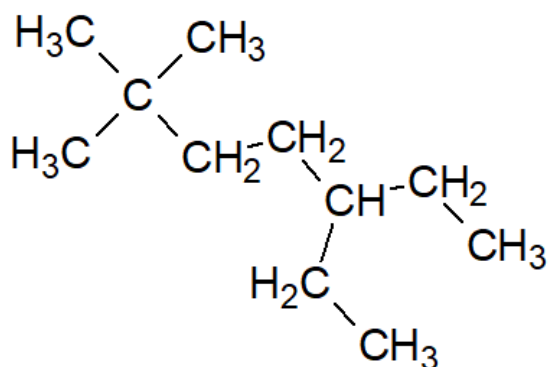
c

Obrázek 6. a) Postup pro otevření okna pro úpravu způsobu zobrazení molekulární struktury, b) okno se všemi možnostmi zobrazení molekulární struktury s vybranými možnostmi pro zobrazení molekulární struktury se skeletálním vzorcem, c) struktura 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu znázorněná skeletálním vzorcem.

KROK 6C Znovu označte molekulu a klikněte na *Tools*, potom na *Structure Properties* a upravte parametry podle **Obrázku 7**.



a

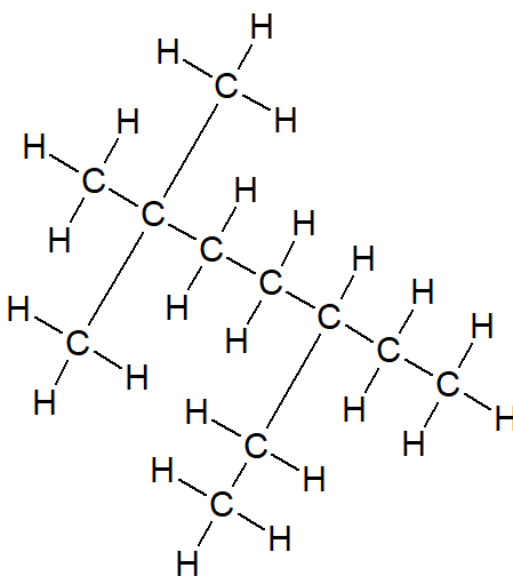
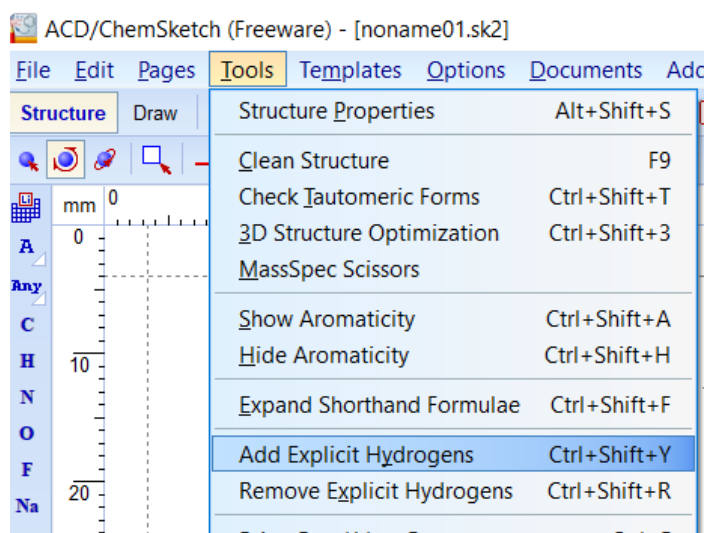


b

Obrázek 7. a) Okno s upravenými parametry pro zobrazení struktury molekuly s kondenzovaným strukturním vzorcem, b) Struktura molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu znázorněná kondenzovaným strukturním vzorcem.

KROK 6D Pro zobrazení struktury molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu se strukturním vzorcem klikněte na *Tools* a potom na *Add Explicit Hydrogens*. Potom použijte možnost *Clean Structure* a editovatujte zobrazenou strukturu (**Obrázek 8a** ukazuje postup zobrazení všech

vazeb uhlík-vodík a **Obrázek 8b** ukazuje strukturní vzorec molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu).



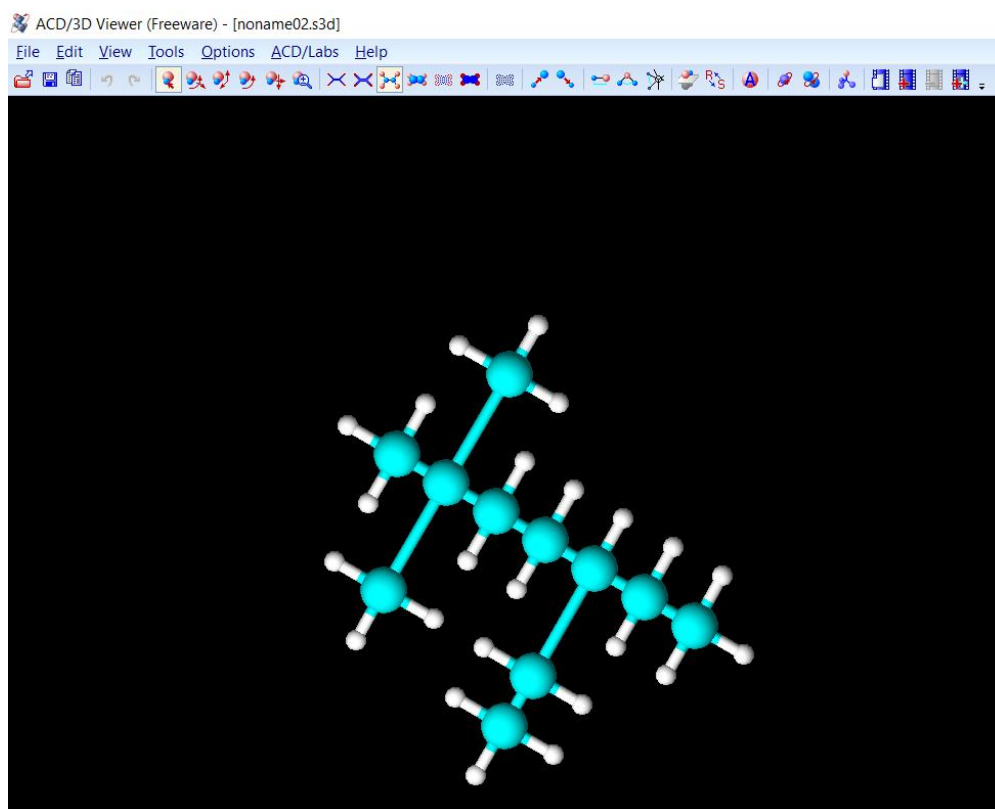
a

b

Obrázek 8. a) Pokyny pro zobrazení všech vazeb uhlík-vodík, b) Strukturní vzorec molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu.

KROK 7 Zobrazte výsledný strukturní vzorec 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu ve třech rozměrech tak, že jej nejprve vyberete a poté klikněte na možnost na panelu nástrojů. Nové okno (3D

Viewer) otevře 3D pohled na molekulu (**Obrázek 9**). Umístěním ikony myši na každý jednotlivý atom se objeví jeho číselné označení podle nomenklatury IUPAC a jeho souřadnice.



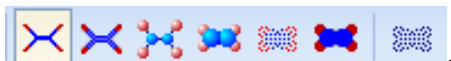
Obrázek 9. 3D struktura molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu.



KROK 8


- Zkuste použít každou z možností otočení, přesunutí a výběru na horním panelu nástrojů:

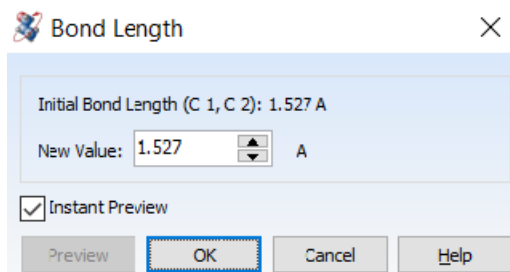


, a poté zobrazte molekulu každým ze způsobů, které program nabízí; možnosti jsou také zobrazeny na panelu nástrojů:




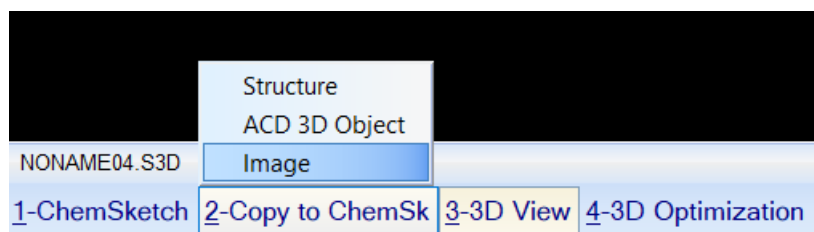
- Kliknutím na kteroukoli z možností se změní způsob zobrazení molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu. Pro automatickou rotaci molekuly .
- Pro automatickou plynulou změnu z jednoho do druhého režimu zobrazení molekul s rotací klikněte na ikonu .

KROK 9 Kliknutím na ikonu určete délku vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku  a kliknutím na první a druhý atom uhlíku. Objeví se nové okno, do kterého se zapíše délka vybrané vazby (**Obrázek 10**). Jakou délku vazby očekáváte? _____.



Obrázek 10. Stanovení délky vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku v molekule 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu.

KROK 10 Kliknutím na ikonu pro 3D optimalizaci () je možné zobrazit molekulární strukturu s mnohem „realističtějšími“ délkami vazeb a vazebnými úhly. Takto upravenou strukturu lze vrátit z trojrozměrného do dvojrozměrného programu ChemSketch kliknutím na *Copy to ChemSketch* a výběrem *Structure option* (**Obrázek 11**) úplně dole v rozhraní. Optimalizovaná struktura molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu se nyní objevuje v ChemSketch.



Obrázek 11. Přesunutí optimalizované 3D struktury do ChemSketch.

KROK 11 Uložte si 2D i 3D struktury molekuly 5-ethyl-2,2-dimethylheptanu na plochu kliknutím *File*, potom *Save As* v okně 3D struktury, napište název struktury, zvolte *Save to*

desktop, a klikněte na *Save*. Opakujte stejný postup pro 2D strukturu v ChemSketch (**Obrázek 12**).

File	Edit	View	Tools
O <u>pen</u> ...			F3
C <u>lose</u>			Ctrl+F4
S <u>ave</u>			F2
Save <u>A</u> s...			Shift+F2
P <u>rint</u>			Ctrl+P
Printer S <u>e</u> tup...			
S <u>e</u> nd...			
File A <u>s</u> sociations...			
E <u>x</u> it			Alt+X

Obrázek 12. Uložení 2D nebo 3D struktury do počítače

ÚKOL 2 Nakreslete 1-ethyl-4,4-dimethylcyklohexan pomocí *Clean Structure* (*Tools* ☐ *Clean Structure*) upravte délky a úhly vazeb a poté proveďte následující akce:

- vygenerováním názvu molekuly zkontrolujte, zda je nakreslená struktura správná.
- určete molekulový vzorec nakreslené molekuly _____
- přeneste tuto strukturu do 3D prohlížeče
- uložte si 2D i 3D struktury do svého počítače.

Příklad 2 Nakreslete molekulu ethanu a poté ji zobrazte ve 3 rozměrech pomocí nástroje *3D Viewer*. Pokuste se otáčet celou molekulou, dokud nedosáhnete polohy ukazující antiperiplanární konformaci ethanu. Podívejte se podélně dolů na vazbu uhlík-uhlík.

1.4. Příklady úloh pro zpracování obsahu výuky

1. Nakreslete všechny strukturní izomery butanu. Napište názvy všech izomerů, vyberte jeden a proveďte s ním následující:

- vygenerujte název
- určete molekulový vzorec
- znázorněte strukturu s kondenzovaným strukturním vzorcem, skeletálním a strukturním vzorcem

- d) upravte strukturu molekuly pomocí *Clean Structure*
- e) zobrazte strukturu molekuly v *3D Viewer*
- f) zobrazte strukturu molekuly v *3D Viewer* pomocí tyčinek a kuliček
- g) optimalizujte molekulu
- h) určete délku vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- i) určete vazebný úhel v kruhu - mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- j) uložte 2D i 3D strukturu molekuly na plochu počítače.

2. Prozkoumejte aplikace alkanů a cykloalkanů v každodenním životě. Vyberte jednu molekulu pro zobrazení v programu ChemSketch. Zapište si do sešitu aplikaci zvolené molekuly v běžném životě. Uložte si optimalizovanou 2D a 3D strukturu těchto molekul do svého počítače.

3. Nakreslete strukturu 1,1,3-trimethylcyklopentanu a poté proved'te následující:

- a) vygenerujte název
- b) určete molekulový vzorec
- c) znázorněte strukturu s kondenzovaným strukturním vzorcem, skeletálním a strukturním vzorcem
- d) upravte strukturu molekuly pomocí *Clean Structure*
- e) zobrazte strukturu molekuly v *3D Viewer*
- f) zobrazte strukturu molekuly v *3D Viewer* pomocí tyčinek a kuliček
- g) optimalizujte molekulu
- h) určete délku vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- i) určete vazebný úhel v kruhu - mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- j) uložte 2D i 3D strukturu molekuly na plochu počítače.

4. Nakreslete molekulu propanu a poté ji zobrazte ve 3 rozměrech pomocí nástroje *3D Viewer*. Pokuste se otáčet celou molekulou, dokud nedosáhnete polohy ukazující antiperiplanární konformaci propanu. Podívejte se podélně dolů na kovalentní vazbu mezi prvním a druhým atomem uhlíku.

1.5. Příklady úloh hodnocení studentů

1. Nakreslete všechny strukturní izomery pentanu. Napište názvy všech izomerů, vyberte jeden a proveďte s ním následující:

a) vygenerujte název

b) určete molekulový vzorec

c) znázorněte strukturu s kondenzovaným strukturním vzorcem, skeletálním a strukturním vzorcem

d) upravte strukturu molekuly pomocí *Clean Structure*

e) zobrazte strukturu molekuly v *3D Viewer*

f) zobrazte strukturu molekuly v *3D Viewer* pomocí tyčinek a kuliček

g) optimalizujte molekulu

h) určete délku vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku

i) určete vazebný úhel v kruhu - mezi prvním a druhým atomem uhlíku

j) uložte 2D i 3D strukturu molekuly na plochu počítače.

2. Nakreslete molekulu butanu a poté ji zobrazte ve 3 rozměrech pomocí nástroje 3D Viewer. Pokuste se otáčet celou molekulou, dokud nedosáhnete polohy ukazující antiperiplanární konformaci butanu. Podívejte se podélně dolů na kovalentní vazbu mezi prvním a druhým atomem uhlíku.

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

ALKENY, ALKYNY

1.) ZPRACOVÁNÍ

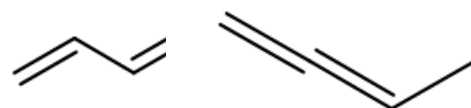
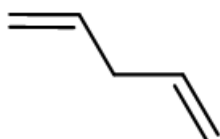
Vyučovací jednotka: Uhlovodíky
Název: Alkeny, alkyny
Odhadovaný počet hodin: 2

1.1. TEORETICKÝ ÚVOD

a) Alkeny

Alkeny jsou nenasycené uhlovodíky, které ve své struktuře obsahují alespoň jednu dvojnou kovalentní vazbu mezi atomy uhlíku. Alkeny obsahují méně atomů vodíku než alkany a jsou tedy nenasycenými uhlovodíky. Obecný vzorec alkenů je: C_nH_{2n} . V obecném vzorci alkenů n - představuje počet atomů uhlíku. Nejjednodušším zástupcem alkenů je ethen, C_2H_4 .

Homologní řada alkenů pokračuje propenem molekulového vzorce C_3H_6 , dále but-1-enem (C_4H_8) atd. Alkeny se objevují jako strukturní izomery a jako stereoizomery počínaje but-1-enem. Cykloalkeny jsou kruhové alkeny obecného vzorce: C_nH_{2n-2} . Alkeny s jednodušší strukturou jsou obecně pojmenovány jako alkany podle pravidel IUPAC pro pojmenování uhlovodíků. Název alkenů se získá přidáním přípony -en ke kořeni, která udává počet atomů uhlíku v molekule. Pořadové číslo za kořenem názvu alkenů označuje polohu dvojných vazeb. V molekulách alkenů se mezi atomy uhlíku mohou vyskytovat dvě nebo více dvojných vazeb. Alkeny se dvěma dvojnými vazbami se nazývají dieny a při pojmenovávání takových sloučenin místo koncovky -en přidáváme koncovku -dien. Dvojně vazby v alkenech se mohou jevit jako izolované (obrázek 1. a)), konjugované (obrázek 1. b)) a kumulované (obrázek 1. c)).



Obrázek 1. a) izolovaná dvojná vazba
c) kumulovaná dvojná vazba

b) konjugovaná dvojná vazba

b) Alkyny

Alkyny jsou nenasycené uhlovodíky a obsahují alespoň jednu trojnou vazbu. Obecný vzorec alkynů je C_nH_{2n-2} .

Alkyny se v přírodě vyskytují ve velmi malém množství. Přírodní alkyny jsou silné jedy nebo mají fungicidní, antibakteriální či protirakovinné účinky.

1.2. Výsledky vzdělávání

v této kapitole se studenti naučí:

- spojovat termín nenasycení s přítomností dvojně vazby mezi atomy uhlíku nakreslit různé příklady molekul alkenů a alkynů a prezentovat je se strukturním, kondenzovaným strukturním vzorcem a kosterním vzorcem
- pro vygenerování názvu dříve nakreslených molekul alkenů a alkynů v programu ChemSketch
- určit molekulární vzorec dříve nakreslených molekul alkenů a alkynů v programu ChemSketch
- zlepšit zobrazení struktury molekul (úprava délky vazby a úhlů mezi vazbami) pomocí možnosti "Čistá struktura"
- nakreslit strukturní izomery alkenů a alkynů
- ukázat struktury alkenů a alkynů ve třech rozměrech
- k rotaci molekul alkenů a alkynů ve dvou a třech rozměrech
- změnit způsob zobrazování struktur alkenových a alkynových molekul ve třech rozměrech
- k pohybu molekul alkenů a alkynů ve 3D a 2D
- k určení délek vazeb a vazebných úhlů v molekulách alkenů a alkynů
- optimalizovat struktury molekul alkenů a alkynů
- uložit do počítače dvourozměrnou a trojrozměrnou strukturu požadované molekuly alkenů a alkynů
- nakreslit strukturní vzorce cykloalkenů

1.3. Instrukce pro používání programu ChemSketch

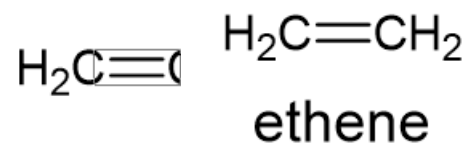
Příklad 1

Nakreslete molekulu ethenu, poté upravte strukturu podle pokynů, vygenerujte její název v programu a určete molekulový vzorec této molekuly, zobrazte ji strukturním a kondenzovaným strukturním vzorcem, zobrazte strukturu molekuly ve třech rozměrech různými způsoby, určete délky vybraných vazeb a konkrétní úhly vazby, optimalizujte molekulu, otáčet a posouvejte ji ve dvou a třech rozměrech, uložte 2D a 3D strukturu do počítače. Nakreslete cykloalken a vygenerujte název pro tuto molekulu, určete molekulární vzorec, přeneste do tří rozměrů, uložte 2D i 3D strukturu molekuly. Poté nakreslete molekulu but-2-in a opakujte všechny kroky podle pokynů.

KROK 1

Vyberte možnost kreslení DrawNormal. Klikněte na prázdnou oblast v rozhraní. Objeví se struktura molekuly metanu (CH₄). Kliknutím na tento atom uhlíku se vytvoří jednoduchá vazba uhlík-uhlík. Nakreslete ethanovou strukturu a pak ukažte na jednoduchou vazbu mezi prvními dvěma atomy uhlíku z uhlovodíkového řetězce (uvidíte obdélník kolem vazby

znázorněné na obrázku 1.a) a poté na ni klikněte, aby vznikla dvojná vazba (obrázek 1 b) a c)).

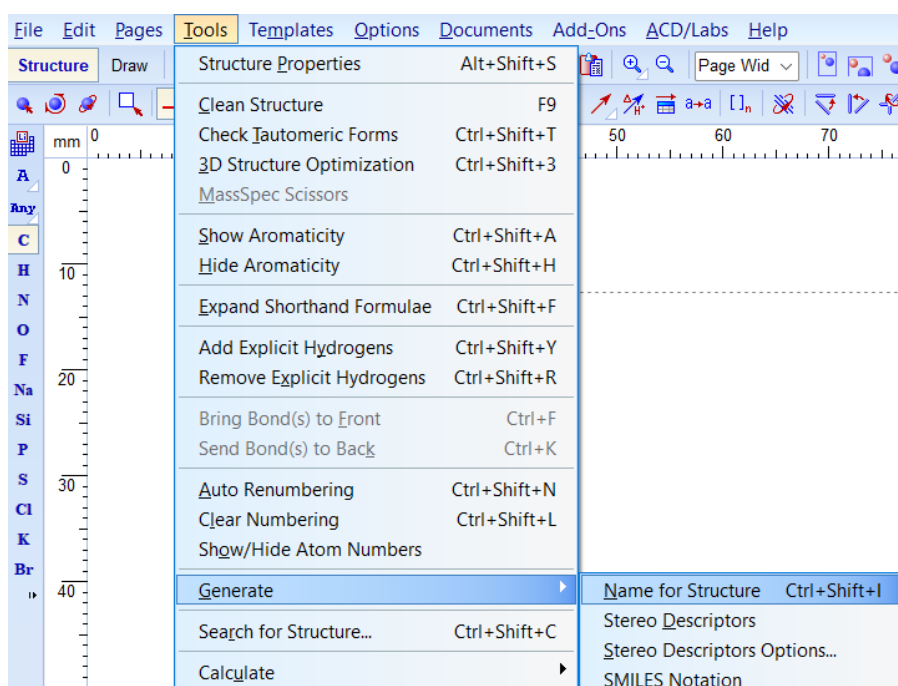


Obrázek 1. a) obdélník okolo vazby

b) dvojná vazba v ethenu

KROK 2

Pojmenování struktury alkenů: Klikněte na nabídku **Nástroje**, vyberte možnost **Generovat** a poté klikněte na **Název struktury**. Uvedený postup je znázorněn na obrázku 2a a na obrázku 2b je znázorněna struktura molekuly ethenu, pod kterou je napsán její název.

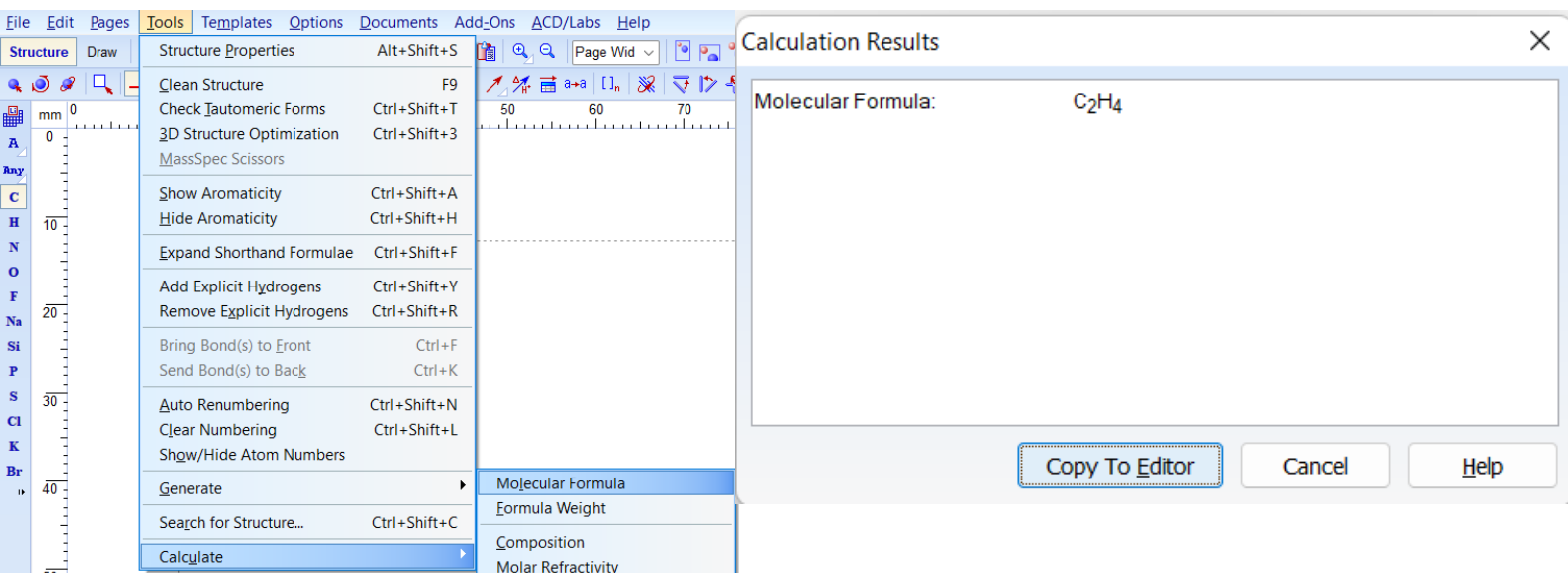


a

Obrázek 2. a) Postup pro generování názvu molekuly nakreslené v programu ChemSketch, **b)** struktura a odpovídající název dříve nakreslené molekuly ethenu.

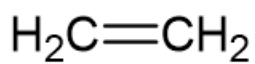
KROK 3

Pomocí nabídky **Nástroje** vyberte možnost *Calculate* a poté klikněte na *Molecular structure* (obrázek 3a). Poté se otevře okno s molekulárním vzorcem (obrázek 3b). Chcete-li zobrazit molekulární vzorec s alkenovou strukturou na pracovním listu, klikněte na *Copy To Editor* (obrázek 3c).



a)

b)



ethene

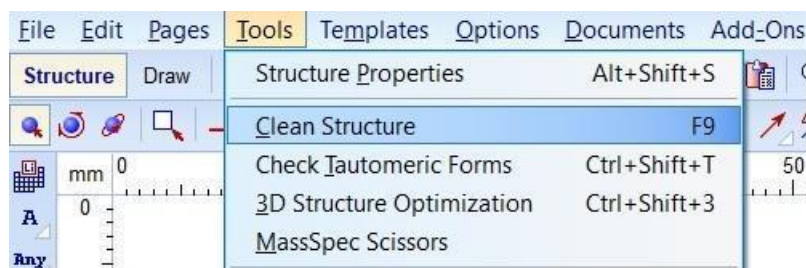
Molecular Formula: C_2H_4

c)

Obrázek 3.a) Posloupnost akcí pro zobrazení molekulárního vzorce ethenu, b) Okno s molekulárním vzorcem molekuly ethenu, c) Molekulární vzorec na pracovním listu

KROK 4

Pomocí možnosti Tools a kliknutím na Clean Structure upravte délky vazby a úhly vazby (obrázek 4)



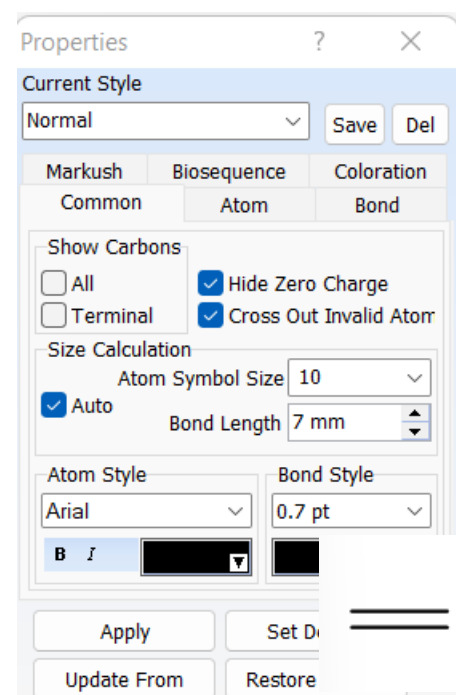
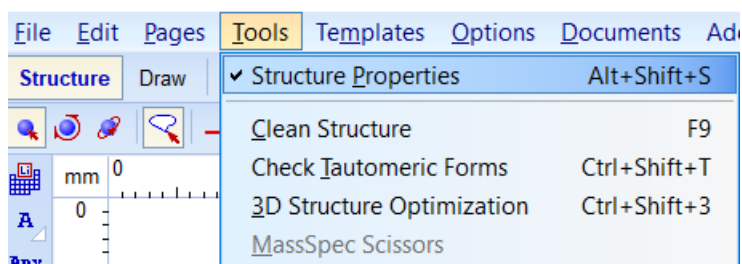
Obrázek 4. Úprava délek a úhlů spojů v programu ChemSketch

KROK 5

Ukažte strukturu molekuly ethenu pomocí kosterního vzorce. Pro úspěšné provedení je nutné vybrat celou strukturu molekuly kliknutím na v levém horním rohu rozhraní a následně upravit způsob výběru molekuly kliknutím na, kterým tato ikona ukazuje: . Při držení kliknutí přetáhněte a vyberte celou molekulu.

Kliknutím na možnost Nástroje a poté na Vlastnosti struktury se otevře okno se všemi požadovanými možnostmi. Obrázek 5a ukazuje postup otevření

a Obrázek 5b ukazuje možnosti, které potřebujete upravit (v sekci Zobrazit uhlíky odklikněte Terminál a poté použijte). Obrázek 5c ukazuje výslednou strukturu molekuly ethenu reprezentovanou kosterním vzorcem.



a)

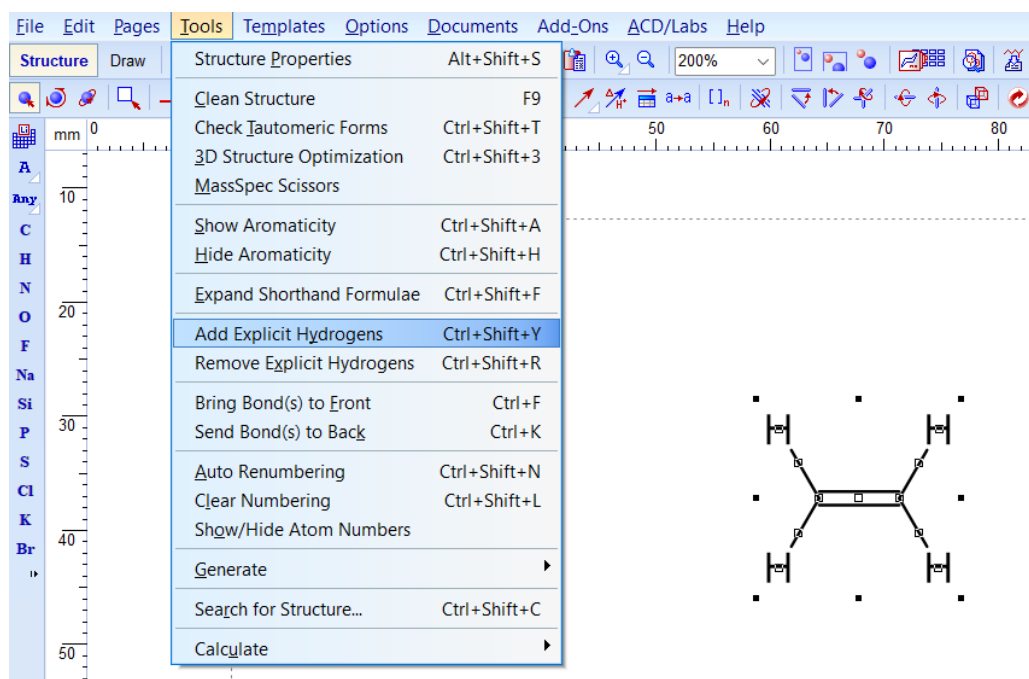
c)

b)

Obrázek 5. a) Postup otevření okna pro úpravu způsobu zobrazení molekulární struktury, b) okno se všemi možnostmi zobrazení molekulární struktury s vybranými možnostmi zobrazení molekulární struktury se skeletovým vzorcem, c) struktura molekula ethenu znázorněná kosterním vzorcem.

KROK 6

Pomocí možnosti Tools vyberte možnost Add Explicit Hydrogens pro zobrazení atomů vodíku na skeletovém vzorci ethenu (obrázek 6a) . Můžete to také ukázat na strukturním vzorci ethenu Obrázek 6b.



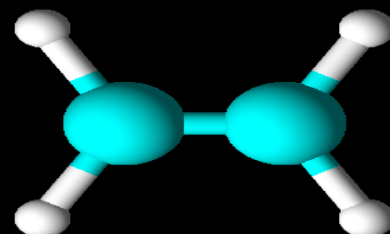
a)

Obrázek 6. a) Pokyny pro zobrazení všech vazeb uhlík-vodík, b) Strukturní vzorec molekuly ethenu

KROK 7

Zobrazte výsledný strukturní vzorec ethenu ve třech rozměrech tak, že jej nejprve vyberete a poté kliknete na možnost na panelu nástrojů. Otevře se nové okno (3D Viewer) s 3D pohledem na molekulu (obrázek 7). Umístěním ikony myši na každý jednotlivý atom se objeví jeho číselné označení podle nomenklatury IUPAC a jeho souřadnice.




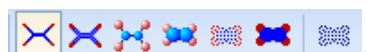


Obrázek 7. 3D struktura molekuly ethenu.

KROK 8

Zkuste použít každou z možností otočení, přesunutí a výběru na horním panelu nástrojů

: , a poté zobrazte molekulu každým ze způsobů, které program nabízí, a možnosti jsou také zobrazeny na panelu nástrojů:



Kliknutím na kteroukoli z možností se změní způsob zobrazení molekuly ethenu. Pro automatickou rotaci molekuly klikněte na ikonu



Pro automatickou plynulou změnu z jednoho do druhého režimu zobrazení molekul s rotací klikněte na ikonu

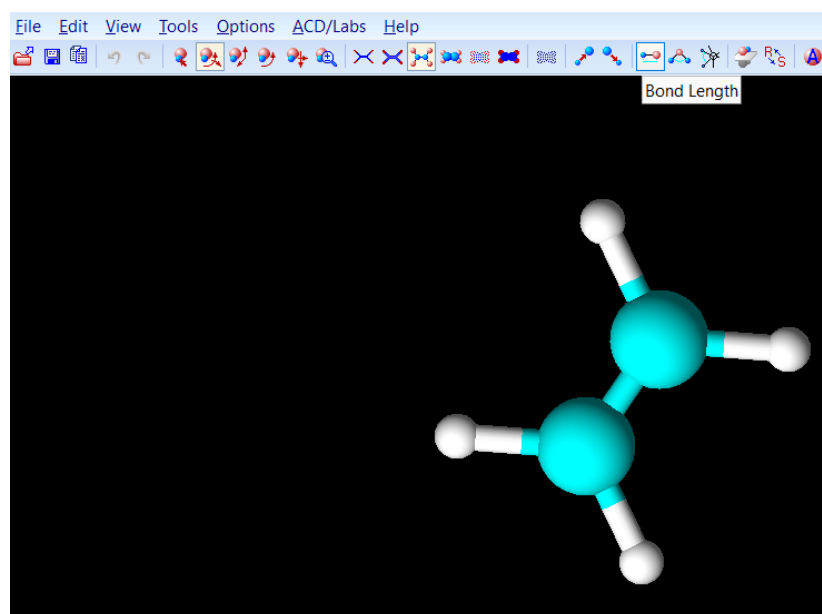


KROK 9

Chcete-li vypočítat nebo změnit vzdálenost mezi dvěma atomy, proveďte následující kroky:

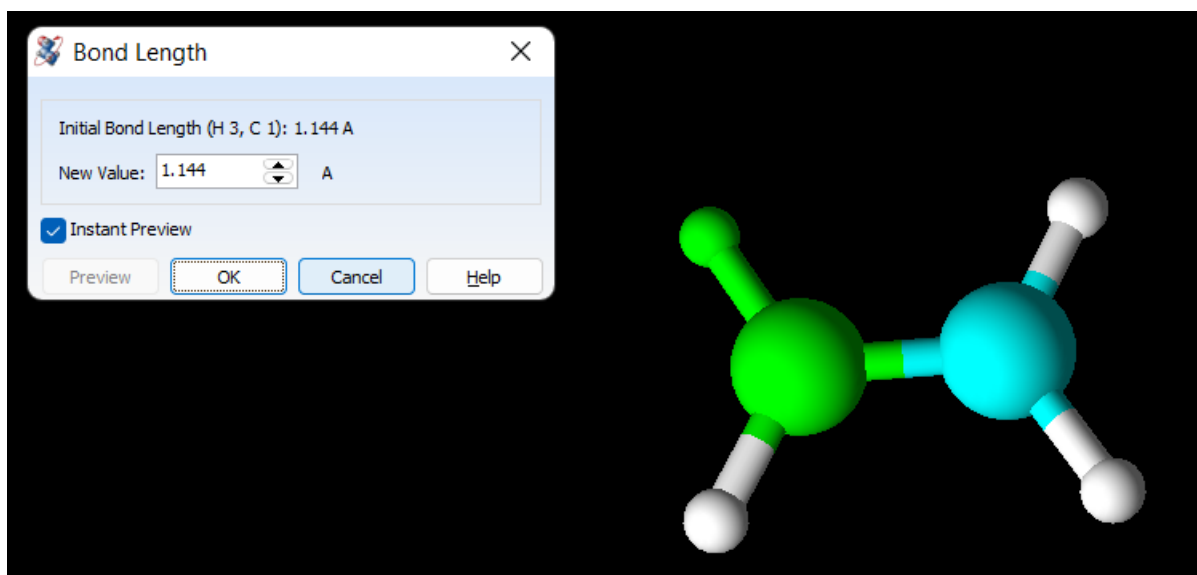
Přepněte do režimu zobrazení Kuličky a tyčinky (na horním panelu nástrojů klikněte na Kuličky a tyčinky) pro lepší zobrazení atomů.

Na horním panelu nástrojů klikněte na Délka vazby (Obrázek 8).



Když jste vybrali možnost *Bond length*, pak ve 3D zobrazení vyberte dva atomy, mezi kterými chcete určit délku vazby.

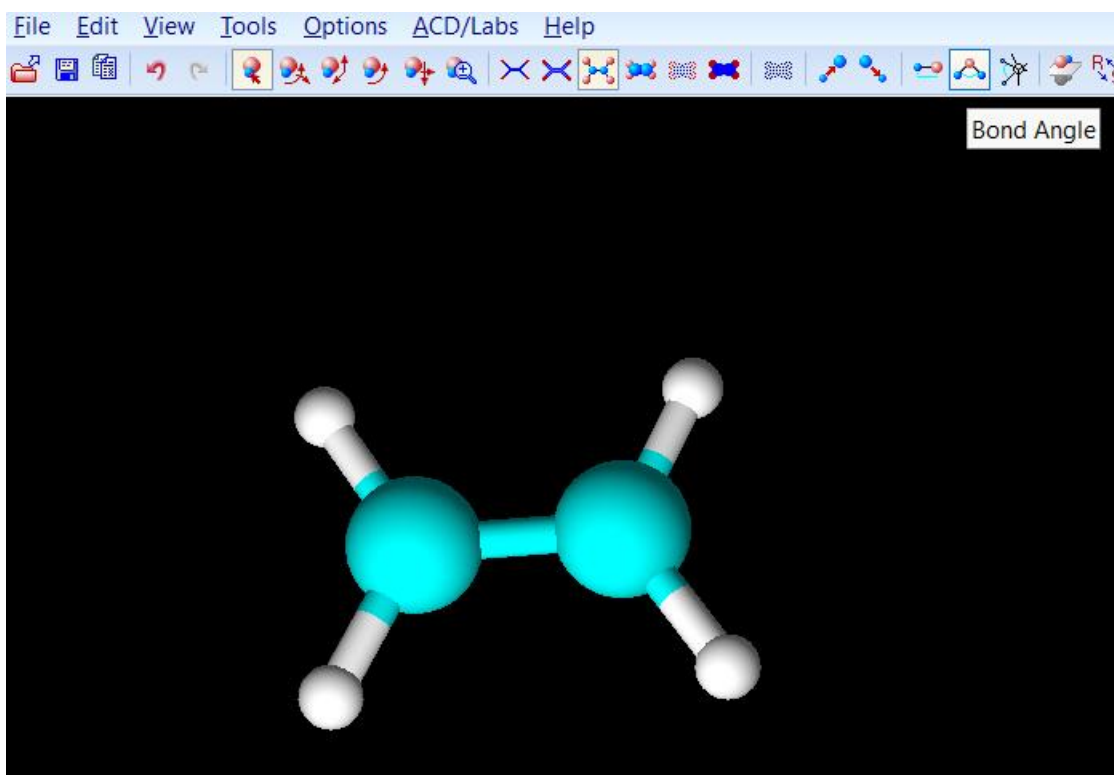
Když jste vybrali dva atomy, mezi kterými chcete určit délku vazby, otevře se nové okno s vypočítanou hodnotou délky vazby (obrázek 9).



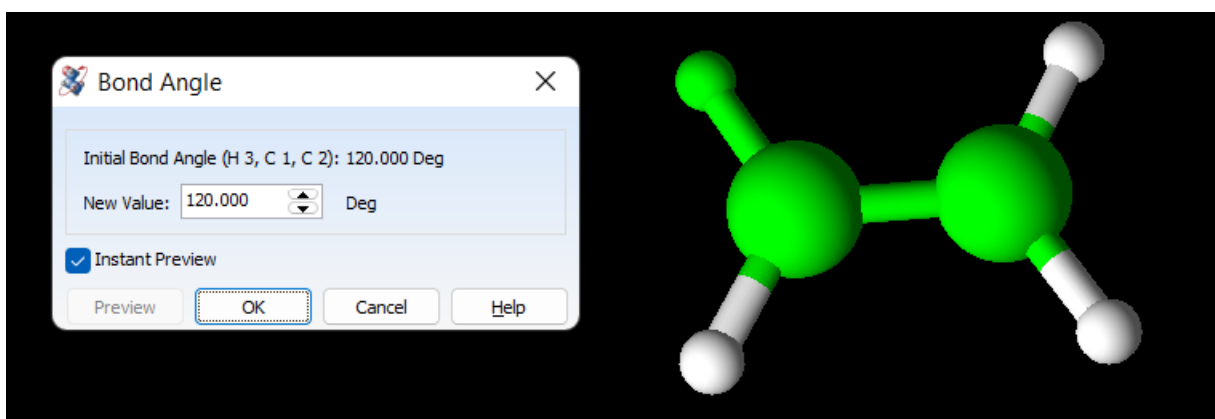
Obrázek 9. Stanovení délky vazby mezi prvním atomem uhlíku a vodíkem v molekule ethenu.

KROK 10

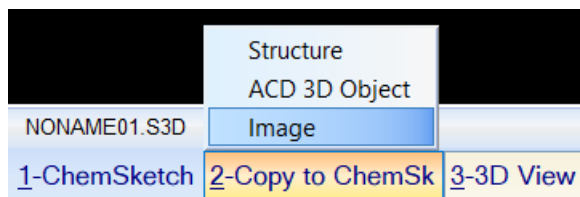
Chcete-li určit úhel vazby, vyberte možnost Úhel vazby na panelu nástrojů (obrázek 10). Poté, abychom mohli určit vazebný úhel mezi dvěma atomy uhlíku, musíme nejprve kliknout na atom vodíku a poté na oba atomy uhlíku. Poté se otevře nové dialogové okno se zobrazenou hodnotou (obrázek 11).



Obrázek 10. Možnost Bond Angle na panelu nástrojů



Obrázek 11. Určete vazebný úhel mezi prvním a druhým atomem uhlíku a 3. atomem vodíku



Obrázek 12. Přesunutí optimalizované 3D struktury do ChemSketch.

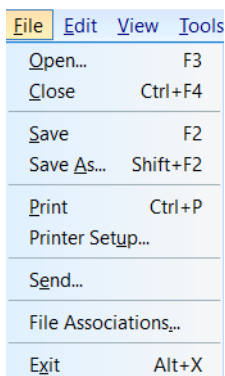
KROK 11

Kliknutím na ikonu pro 3D optimalizaci () je možné znázornit molekulární strukturu s mnohem „realističtějšími“ délkami vazeb a vazebnými úhly. Takto upravenou strukturu lze vrátit ze tří rozměrů do dvou rozměrů programu ChemSketch kliknutím na možnost Copy to ChemSketch a výběrem možnosti Structure (Obrázek 12) úplně dole v rozhraní.

Optimalizovaná struktura molekuly ethenu se nyní objevuje v ChemSketch.

KROK 12

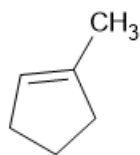
Uložte 2D i 3D struktury molekuly ethenu na plochu kliknutím na Soubor, poté na Uložit jako v okně 3D struktury, zadáním názvu struktury, výběrem možnosti uložit na plochu a kliknutím na Uložit. Opakujte stejný postup pro 2D strukturu v ChemSketch (obrázek 13).



Obrázek 13. Uložení 2D nebo 3D struktury do počítače

KROK 13

Nakreslete molekulu 1-methylcyklopent-1-enu podle dříve naučených kroků (obrázek 14). Poté použijte dříve naučené kroky od 2 do 12 na tomto příkladu.



1-methylcyclopent-1-ene

Obrázek 14. Structurní znázornění molekuly 1-methylcyclopent-1-enu

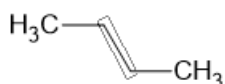
Nakreslete molekulu but-2-inu: Vyberte možnost kreslení DrawNormal. Klikněte na prázdnou oblast v rozhraní. Objeví se struktura molekuly metanu (CH_4). Kliknutím na tento atom uhlíku se vytvoří jednoduchá vazba uhlík-uhlík. Podržením klávesy ctrl a kliknutím na každý následující atom uhlíku je možné nakreslit uhlovodíkový řetězec předních atomů uhlíku zobrazený na obrázku 15.



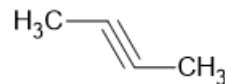
Obrázek 15. Molekula butanu

KROK 14b

Na dříve nakreslené struktuře namiřte ukazatel mezi druhý a třetí atom uhlíku na jednoduché vazbě a dvojitým kliknutím vytvořte trojnou vazbu (uvidíte obdélník kolem vazby znázorněný na obrázku 16.a) a poté na něj klikněte vytvořte trojnou vazbu (obrázek 16.b). a použijte dříve naučené kroky z kroků 2 až 12.



a)



b)

Obrázek 16. a) obdélník kolem vazby, b) molekula But-2-inu

1.4. Příklady úloh pro zpracování obsahu výuky

1. Prozkoumejte na internetu, jak vypadá molekula přírodního kaučuku a zobrazte molekulu v programu ChemSketch. Když znázorníte molekulu přírodního kaučuku, prozkoumejte, jak molekula vypadá ve 3D podobě, a aplikujte naučené funkce v ChemSketch.

1. Nakreslete molekulu 4-methylpent-2-enu a proveďte s ní následující:

- vygenerujte název
- určete molekulový vzorec
- znázorněte strukturu se zhuštěným strukturním vzorcem, kosterním a strukturním vzorcem
- upravte strukturu molekuly pomocí volby Clean Structure
- zobrazte strukturu molekuly v 3D prohlížeči
- zobrazte strukturu molekuly v 3D prohlížeči pomocí tyčinek a kuliček
- optimalizovat molekulu
- určete délku vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- určete vazebný úhel v kruhu - mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- uložit 2D i 3D strukturu molekuly na plochu počítače.
- otevřete 2D strukturu molekuly a vytvořte z ní cyklickou strukturu a vygenerujte její název a molekulový vzorec

2. Prozkoumejte aplikace alkenů a alkynů v každodenním životě. Vyberte jednu molekulu pro zobrazení v programu ChemSketch. Zapište si do sešitu aplikaci zvolené molekuly v běžném životě.

Uložte si optimalizovanou 2D a 3D strukturu těchto molekul do svého počítače.

1.5. Příklady úloh hodnocení studentů

1. Nakreslete molekulu 2-methylpent-1-en-3-ynu a proveďte s ní následující:

- vygenerujte název

- b) určete molekulový vzorec
- c) znázorněte strukturu se zhuštěným strukturním vzorcem, kosterním a strukturním vzorcem
- d) upravte strukturu molekuly pomocí volby Clean Structure
- e) zobrazte strukturu molekuly v 3D prohlížeči
- f) zobrazte strukturu molekuly v 3D prohlížeči pomocí tyčinek a kuliček
- g) optimalizovat molekulu
- h) určete délku vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- i) určete vazebný úhel v kruhu - mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- j) uložit 2D i 3D strukturu molekuly na plochu počítače.
- k) otevřete 2D strukturu molekuly a vytvořte z ní cyklickou strukturu a vygenerujte její název a molekulový vzorec

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

ARENY

1) Zpracování

Vyučovací jednotka: Uhlovodíky
Název: Areny
Odhadovaný počet hodin: 2

4.1. Teoretický úvod

Areny jsou nenasycené aromatické uhlovodíky, deriváty benzenu s jedním nebo více alifatickými radikály. Areny lze v přírodě nalézt v černém uhlí a ropných derivátech, ale lze je získat i elektrofilní substitucí jednoho nebo více atomů vodíku z benzenového jádra. Když je jedna z poloh benzenového kruhu nahrazena jiným atomem nebo atomovou skupinou, sloučenina je monosubstituovaný benzen. Je-li substituentem alkyl, alkenyl nebo alkynylový zbytek, pak touto skupinou sloučenin jsou areny. Mohou být monosubstituované, disubstituované, trisubstituované a polysubstituované obecným vzorcem Ar-R nebo C₆H₅-R, jehož nomenklatura je vytvořena přidáním názvu radikál před slovem benzen.

Když jsou dvě polohy kruhu nahrazeny radikály, sloučenina je disubstituovaný benzen. Pro popis relativních pozic existuje speciální nomenklatura. Při použití toluenu jako příkladu je ortho orientací poloha 1,2; meta je 1,3 a hodnota 1,4 je para pozice, kde je třeba poznamenat, že každá může být dvě ortho a meta pozice, ale pouze jedna para pozice.

Příklad: C₆H₅-CH₃ methylbenzen (toluen) (obrázek 4) a C₆H₅-CH₂-CH₃ ethylbenzen. (Obrázek 5)

Protože atomy vodíku v molekule benzenu jsou ekvivalentní, jsou možné tři izomerní substituované deriváty benzenu: monosubstituované a disubstituované areny.

Příklad: 1,2-dimethylbenzen nebo triviální název o-xylen; 1,3-dimethylbenzen (m-xylen) a 1,4-dimethylbenzen (p-xylen) a C₆H₅-(CH₃)₃ 1,2,3-trimethylbenzen (vicinální izomer); 1,2,4-trimethylbenzen (asymetrický izomer) a 1,2,4-trimethylbenzen (symetrický izomer) (obrázek 7)

Podle typu radikálu rozlišujeme alkybenzeny, alkenylbenzeny a alkynylbenzeny.

Areny se získávají alkylační reakcí Friedel Craftz syntézou.

4.2. Vzdělávací výstupy

V této kapitole se studenti naučí:

- kreslit vzorce arenů
- dát do souvislosti koncept nenasycených a delokalizovaných elektronů (rezonančních struktur) v arenech
- spojit termín nenasycený s přítomností dvojně vazby mezi atomy uhlíku
- nakreslit homologní řadu molekul arenu
- nakreslit strukturální a izomerní vzorce arenů
- pro zobrazení molekuly areny ve 3D zobrazení
- určit názvy arenů
- určit molekulární vzorec různých typů arenů

4.3. Návod k použití softwaru ChemSketch

Úkol 1

Chcete-li nakreslit molekulu benzenu jako základ aromatických arénových sloučenin, prvním krokem je otevřít program ChemSketch a poté je výchozím nástrojem pro spuštění programu nástroj Draw Normal (). Pomocí tohoto nástroje můžete snadno kreslit rovné nebo rozvětvené uhlovodíkové řetězce. Nakreslete molekulu benzenu, ale nejprve se ujistěte, že je na panelu nástrojů Struktura povolen nástroj Draw Normal a že je na panelu nástrojů Atoms vybráno tlačítko Carbon () (obrázek 1). Pak k tomu musíte nejprve kliknout levým tlačítkem myši na atom uhlíku.

Příklad 1:

Nakreslete molekulu benzenu (Obrázek 1.) ;(Obrázek 2. a,b);(Obrázek 3.); (Obrázek 4.); methylbenzen (toluen); a (obrázek 5.) ethylbenzen;


Příklad 2:


Kreslit monosubstituovaný methylbenzen (toluen); vinylbenzen (styren) a isopropylbenzen (kumen); disubstituovaný dimethylbenzen (xylen) a trisubstituované deriváty benzenu (obrázek 6.) pak reprezentují strukturu podle návodu, z programu ChemSketch, vygenerují jejich nomenklaturu, určete molekulové vzorce těchto molekul, znázorněte je pomlčkami, strukturální a kondenzované strukturální vzorce.

Ukažte strukturu molekul ve třech rozměrech různými způsoby, určete délky vybraných vazeb a specifické úhly vazeb, optimalizujte molekuly, rotujte a pohybujte se ve dvou a třech rozměrech a vygenerujte název pro tuto molekulu, určete molekulární vzorec, rolujte ve třech rozměry, zachovávají 2D i 3D struktury molekul.

Kreslení různých typů arenů:

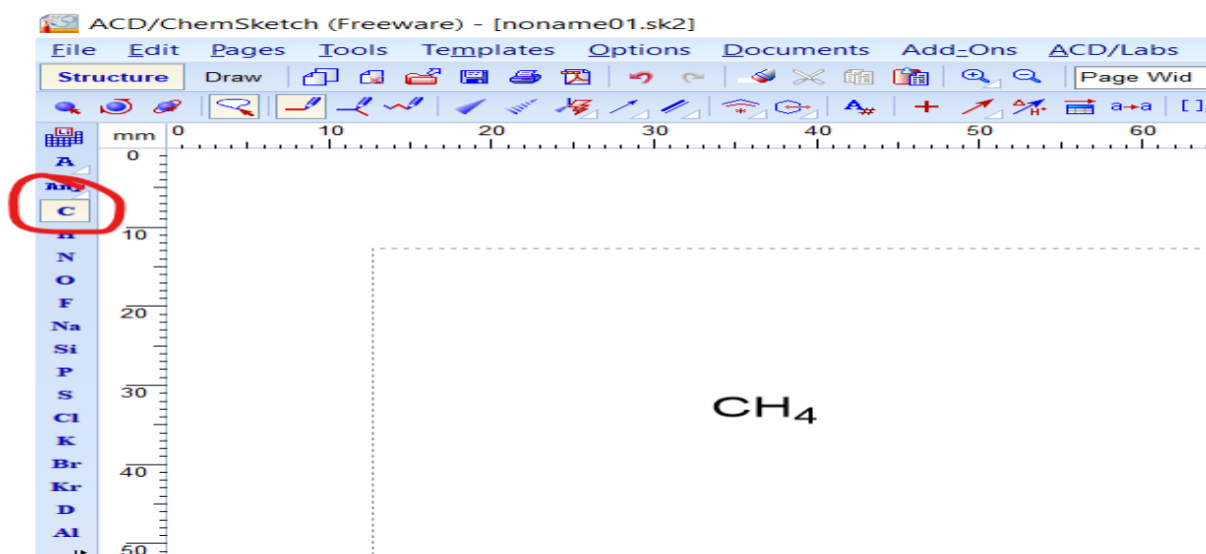
1. **Příklad 1**

Nakreslete molekulu benzenu pomocí nástrojů cyklizace alkanu na cykloalkan z odpovídající struktury programu *ChemSketch* a poté pomocí nástroje *Nakreslit normálu* ()


KROK 1. Prvním krokem k nakreslení molekuly benzenu je klepnutí na nástroj *Nakreslit normálu* na nástrojové liště *Struktura* a výběr tlačítka *Uhlík* na  na nástrojové liště *Atomy* (**obrázek 1**). Poté nakreslete vzorec arény .

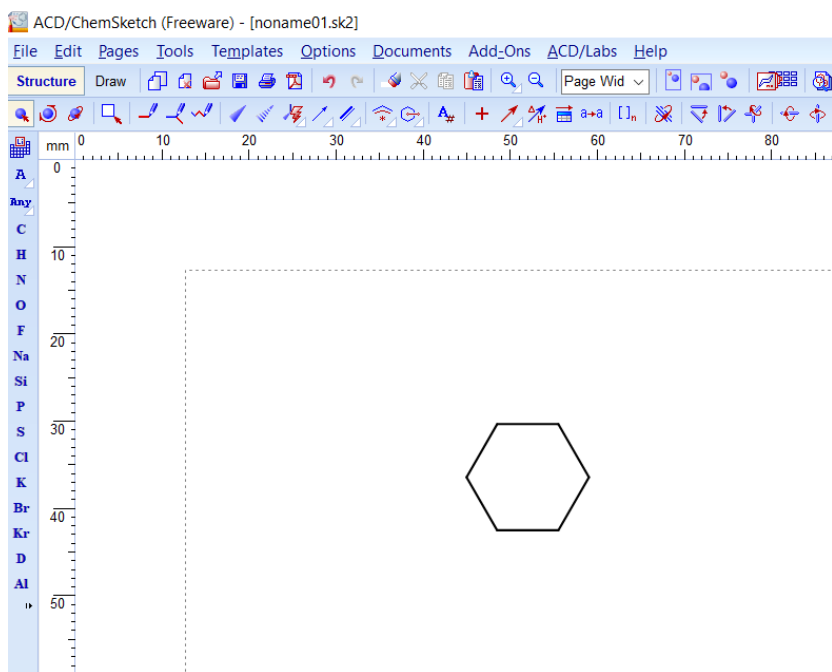
KROK 2. Chcete-li začít kreslit vzorec, musíte kliknout levým tlačítkem myši na počítačovou myš na prázdné místo na ploše a objeví se molekulární vzorec metanu CH₄. (**Obrázek 1**).

KROK 3. Zvýrazněte vzorec CH₄ myší a když uvidíte obdélník kolem vzorce metanu, klikněte na něj a přidejte methylovou skupinu tvořící ethan H₃C-CH₃.



Obrázek 1.

KROK 4. Levým kliknutím myši stiskněte CH₄ a táhněte doprava v kruhu šesti kliknutími pod určitým úhlem, během kterých se objeví další členy sekvence, která uzavírá šestičlenný prstenec, Pro úspěšné provedení je nutné vybrat celou strukturu molekuly kliknutím na v levém horním rohu rozhraní a následně upravit způsob výběru molekuly kliknutím na, kterým tato ikona ukazuje: . Podržte tlačítko, přetáhněte a vyberte celou molekulu, stiskněte tlačítko vyčistit strukturu (**obrázek 2a**), abyste získali pravé úhly ve struktuře cyklohexanu a nakreslili z cyklohexanu správný šestiúhelník (**obrázek 2b**)





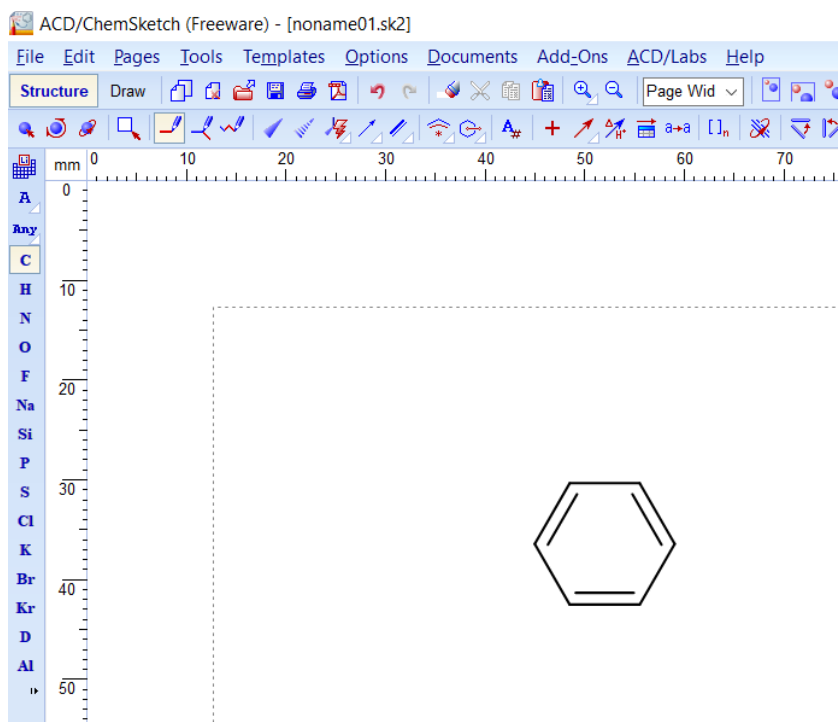
a)

b)

Obrázek 2. a) Nástroj Clean Structure, b) Struktura molekuly cyklohexanu

KROK 5

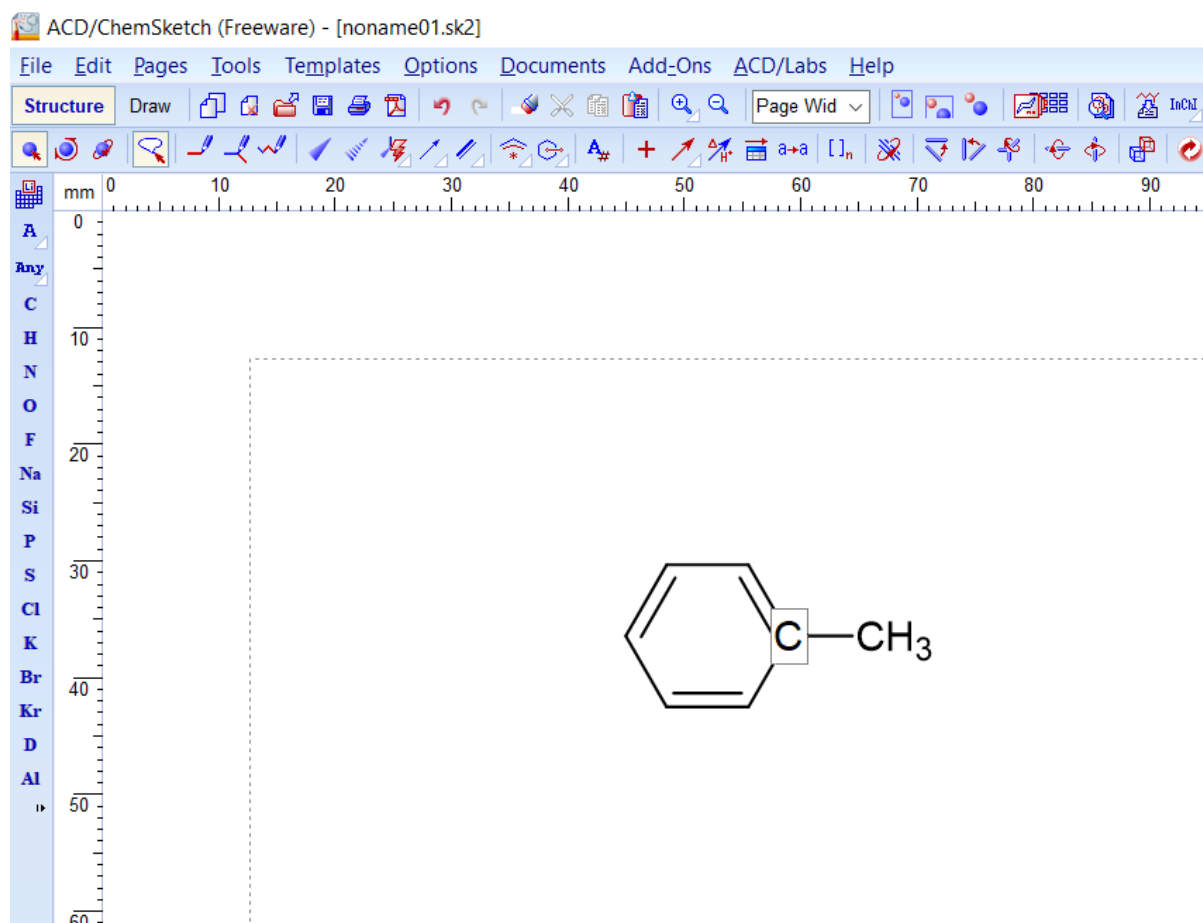
Chcete-li přidat dvojné vazby do benzenového jádra, tlačítko uhlíku () na *panelu nástrojů* a () by měl být zapnutý, poté klikněte levým tlačítkem myši na jednoduché vazby mezi atomy CC, kde se kolem vazby CC objeví obdélník a poté kliknutím na něj je označena dvojná vazba . (**Obrázek 3**)



Obrázek 3. Skeletální vzorec benzenu. C_6H_6

KROK 6

Kliknutím levým tlačítkem myši na kterýkoli roh benzenového šestiúhelníku se zobrazí atom CH, ze kterého (**obrázek 4**) se přetažením mimo jádro benzenu přidá radikál $-CH_3$ (methylová skupina – alkylová skupina) nebo stisknutím levého tlačítka myši a přetažením radikály s vyšším počtem atomů uhlíku.

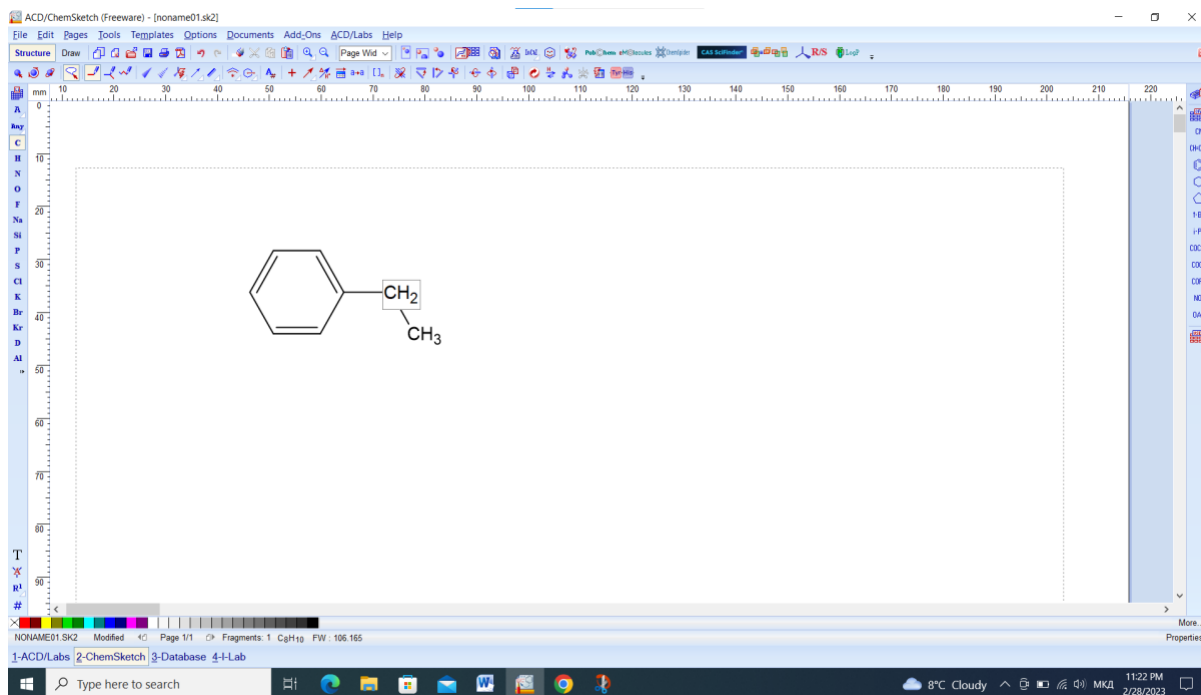


Obrázek 4. Struktura methylbenzenu (toluenu)

KROK 7

Postup přidávání dvojných, trojných vazeb v radikálu (postranním řetězci) je stejný jako při označování dvojných vazeb v cyklickém kruhu, kterým je označen zástupce arenů. (**Obrázek 5**) - ethylbenzen. Korespondence ostatních radikálů v substituovaných arenových derivátech je prováděna tabulkou radikálů, která obsahuje nejčastěji potřebné radikály pro rychlé kreslení struktury, která je umístěna na referenční nástrojové liště umístěné svisle na pravé straně

pracovní plochy. Pomocí sady nástrojů *Náboje/radikály* z *panelu nástrojů Atom* můžete radikál změnit nebo nakreslit.





radicals

Obrázek 5. Konstrukce ethylbenzenu

Příklad 2

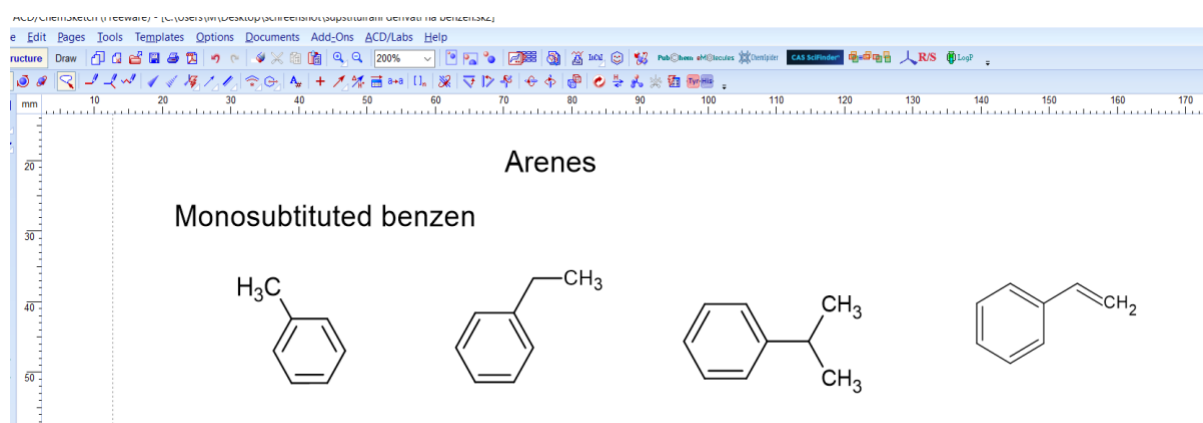
KROK 1 Kreslení derivací disubstituovaného, trisubstituovaného benzenu se provádí stejným způsobem jako monosubstituované deriváty benzenu znázorněné na **obrázcích** 6 a 7 a postup v úloze 1, příklad 1 a kroky 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7.

https://lh3.googleusercontent.com/9P8ERjPRVIAJcD1SxnhWHUWfpobR0kppDunR806gUg45KZ1WR24bIPiJnxishM6-CGyc54gbcpkSVfmxJ4Zk5lBDehp1v98X1V6zgu2kUQNtnxV6s3FpTx_2rtR9DrNBTCvQk7

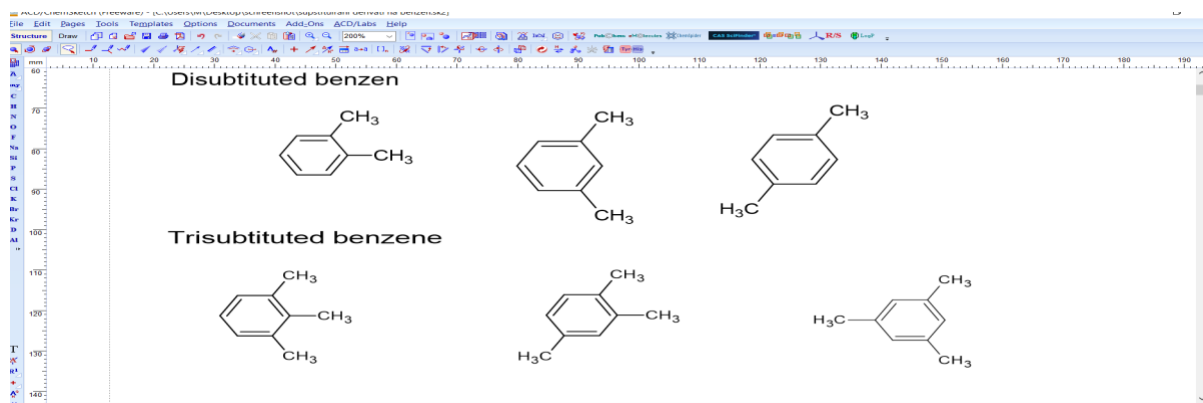
r9N7JHGB1ofB-y(To draw the benzene molecule as the basis of aromatic arene compounds, the first step is to open the *ChemSketch* program, and then the *Draw Normal tool* () is the default tool to start the program. With this tool, you can easily draw straight or branched hydrocarbon chains. Draw the benzene molecule, but first make sure that the *Draw Normal tool* is enabled on the *Structure toolbar* and that the *Carbon button* () is selected on the *Atoms toolbar* (Figure 1)

1. Chcete-li to provést, musíte nejprve kliknout levým tlačítkem myši na atom uhlíku...

Nakreslete strukturu molekuly methylbenzenu (toluenu); ethylbenzenu; isopropylbenzenu (kumenu) a vinylbenzenu (styrenu) (obrázek 6) a struktury izomerů dimethylbenzenu (xylenu) a trimethylbenzenu (obrázek 7).



Obrázek 6. Struktury molekul methylbenzenu (toluenu), ethylbenzenu, isopropylbenzenu (kumenu) a vinylbenzenu (styrenu)

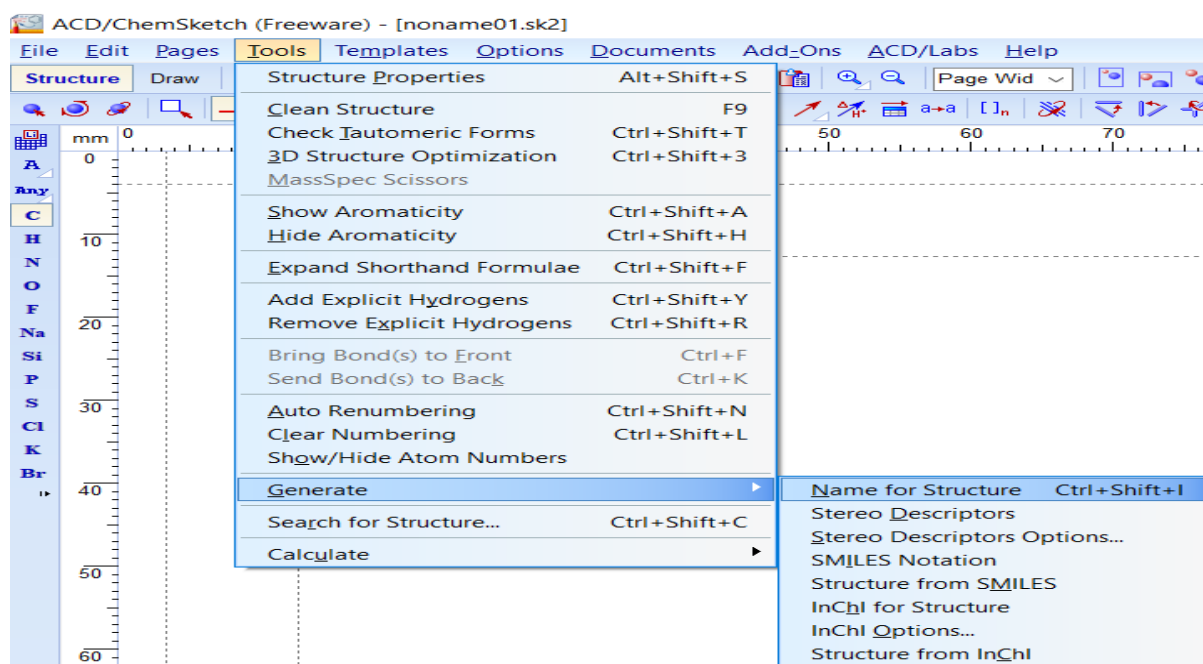


Obrázek 7. Struktury izomerů dimethylbenzenu (xylenu) a trimethylbenzenu


Kreslení derivátů polysubstituovaných arenů se řídí stejným postupem jako kreslení monosubstituovaných a disubstituovaných arenů)

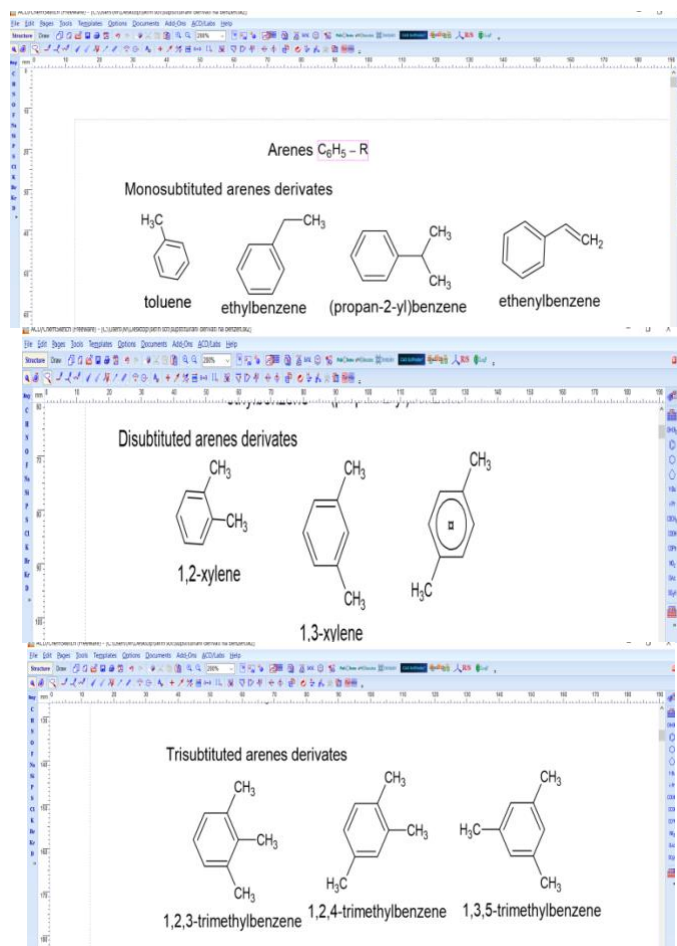
KROK 2

Názvosloví sloučenin odvozených od benzenu může být matoucí, protože aromatická sloučenina může mít více možných názvů (například běžné a systematické názvy), které souvisejí s jejich strukturou, to znamená provést tento postup pro názvosloví arény, klikněte na nabídku *Tools*, vyberte možnost *Generate* a poté klikněte na strukturu názvu. Uvedený postup je znázorněn v (obrázek 8) a poté (obrázek 9a) methylbenzen (toluen); ethylbenzen; isopropylbenzen (kumen); vinylbenzen (styren); (Obrázek 9b) (1,2)-dimethylbenzen triviální xylen; 1,3-dimethylbenzen a 1,4-dimethylbenzen a (obrázek 9c) struktura 1,2,3-trimethylbenzenu; 1,2,4-trimethylbenzenu a 1,3,5-trimethylbenzenu.



Obrázek 8. Generování názvu sloučeniny v programu ChemSketch

Vzhledem k tomu, že existuje několik typů izomerů disubstituovaných a trisubstituovaných derivátů benzenu, měli byste před provedením postupu nomenklatury molekul označit příslušnou molekulu možností () a poté získat přístup k dříve uvedeným možnostem názvosloví molekul z obrázku 8. Měli byste získat názvy všech nakreslených sloučenin, jak je znázorněno na obrázku 9a, b a c.



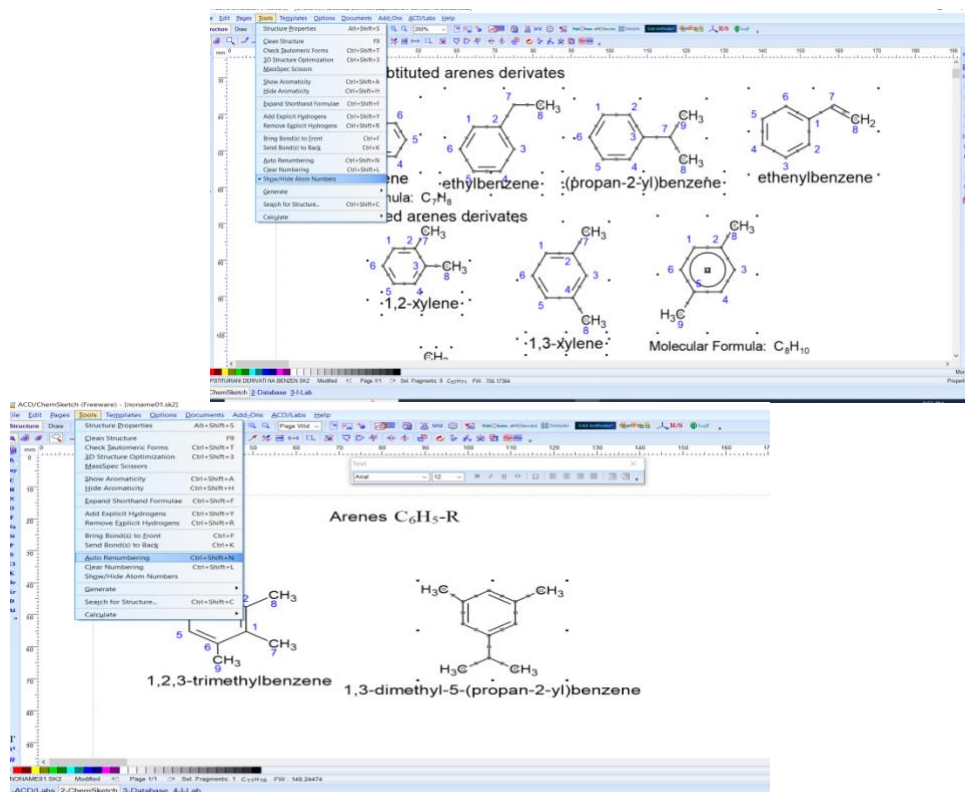
a)

c)

b)

Obrázek 9. a) Názvosloví některých molekul monosubstituovaných arenových derivátů, b) Názvosloví některých molekul derivátů neizolovaných arenů, c) Názvosloví některých molekul trisubstituovaných arenových derivátů

KROK 3 Pomocí nabídky *Tools* vyberte možnost *Calculate* poté klikněte na *Molecular formula*. **Obrázek 10 a** Poté se otevře okno s molekulárním vzorcem. Chcete-li zobrazit molekulární vzorec se strukturou arén s číslováním atomů uhlíku, klikněte na *Tools* a možnost *Show/Hide atomnumbers* nebo automatické přechíslování **Obrázek 10 b**.



a)
b)

Obrázek 10. a,b. Číslování atomů uhlíku v nakreslených molekulách

KROK 4 Vypočítejte molekulární vzorce nakreslených molekul arény

Klikněte na nabídku *Nástroje*, vyberte možnost *Calculate* a poté klikněte na *Molecular formula*. Uvedený postup je znázorněn na **obrázku 11a** a **obrázek 11b** ukazuje molekulární vzorec dimethylbenzenu, který se zobrazí v novém okně po provedení sekvence popsanych možností. Chcete-li zobrazit molekulární vzorec na listu, který obsahuje strukturu a název nakreslené molekuly, klikněte na *Copy to editor*.

The image shows two screenshots from the ChemSketch software interface. The top screenshot displays the 'Tools' menu with the 'Calculate' option selected, which has opened a sub-menu containing 'Molecular Formula', 'Formula Weight', 'Composition', and 'Molar Refractivity'. The bottom screenshot shows the 'Calculation Results' dialog box with the molecular formula C_8H_{10} displayed. In the background of the bottom screenshot, the chemical structure of dimethylbenzene (toluene) is visible, represented as a benzene ring with two methyl groups (H_3C and $-CH_3$) attached at the 1 and 3 positions.

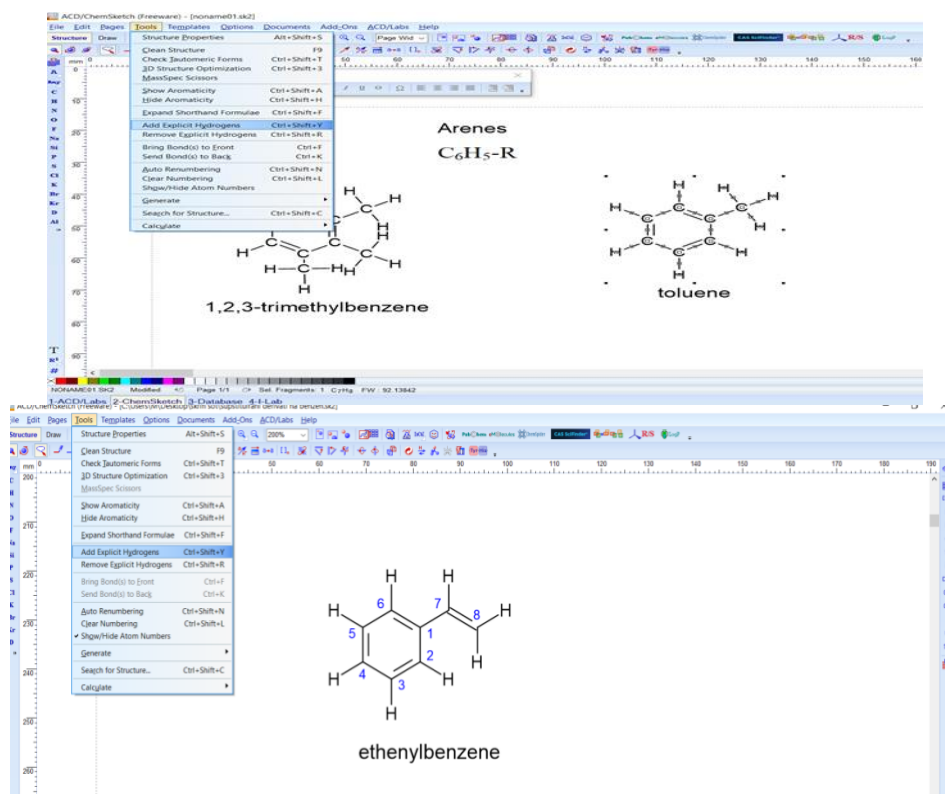
a) b)

Obrázek 11. Sled akcí pro zobrazení molekulárního vzorce dimethylbenzenu
b) Okno s molekulárním vzorcem molekuly dimethylbenzenu

KROK 5 Nakreslení strukturního a kosterního vzorce s přidavkem atomů vodíku

Chcete-li zobrazit strukturu molekuly methylbenzenu (toluenu) s jejím strukturním vzorcem, klikněte na *Tools* a poté na možnost *Add explicit hydrogens*. Poté použijte možnost *Clean structure* k úpravě zobrazené struktury, která zobrazuje postup pro zobrazení všech vazeb uhlík-vodík **Obrázek 12 a**

Pomocí možnosti *Tools* vyberte možnost *Add explicit hydrogens* pro zobrazení atomů vodíku ve skeletovém vzorci ethenylbenzen (vinylbenzen) – styren **Obrázek 12 b**



a)

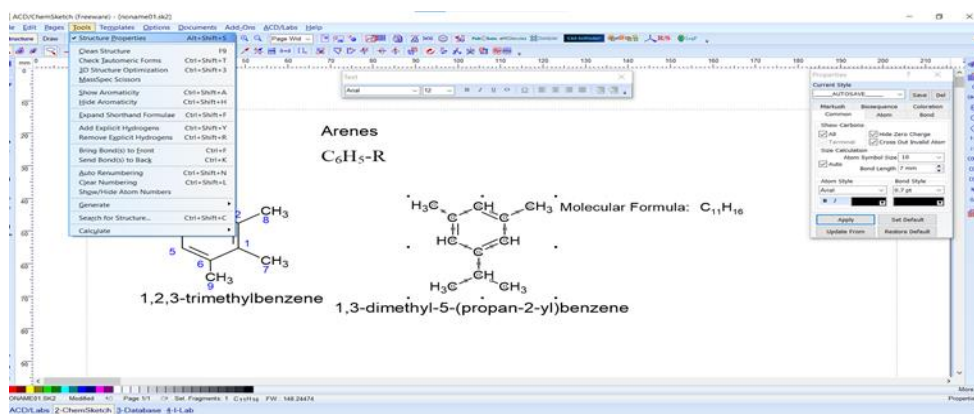
b)

Obrázek 12. a,b. Pokyny pro zobrazení všech vazeb uhlík-vodík skeletový vzorec ethenylbenzen(vinylbenzen)-styrenu a) a strukturní vzorec methylbenzen (toluen) b) se všemi vazbami uhlík-vodík

KROK 6


Kreslení racionálního vzorce 1,3-dimethyl-5-isopropylbenzenu **Obrázek 13**

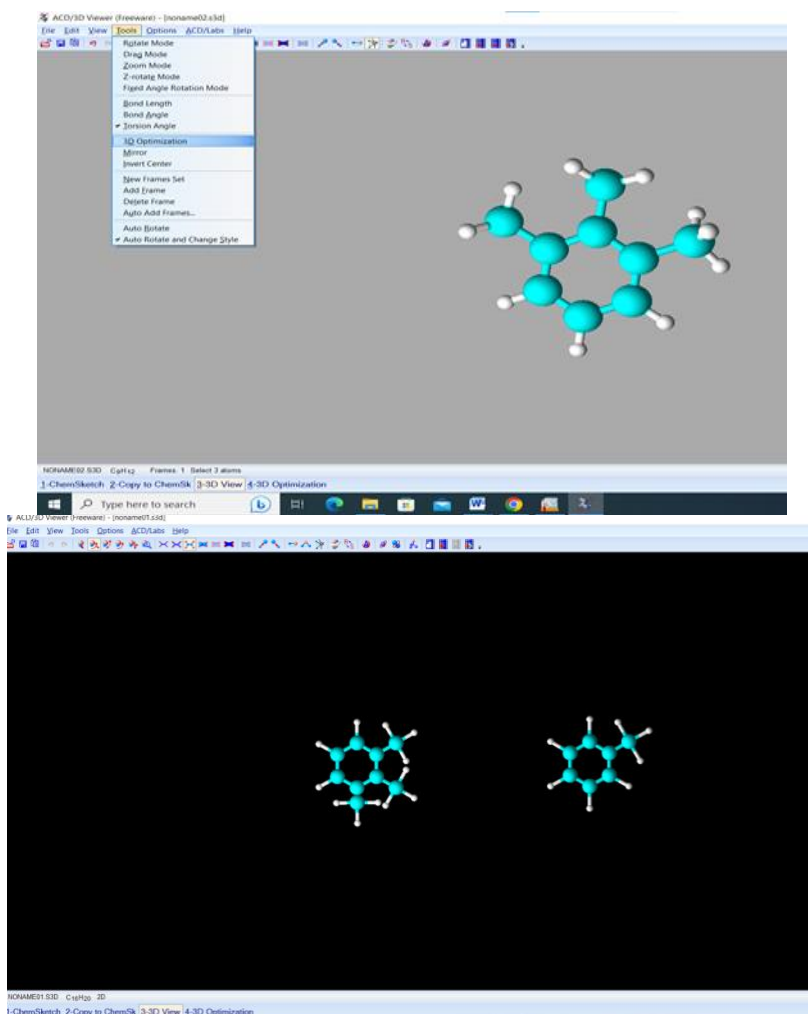
Kliknutím na možnost *Tools* a poté na *Structure properties* se otevře okno se všemi požadovanými možnostmi. Obrázek vlevo ukazuje postup otevření okna a obrázek vpravo ukazuje možnosti, které je třeba upravit (v části *Show carbons* klikněte na vše a poté na použít)




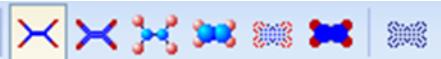
Obrázek 13. Racionální vzorec 1,3-dimethyl-5-isopropylbenzenu

KROK 7

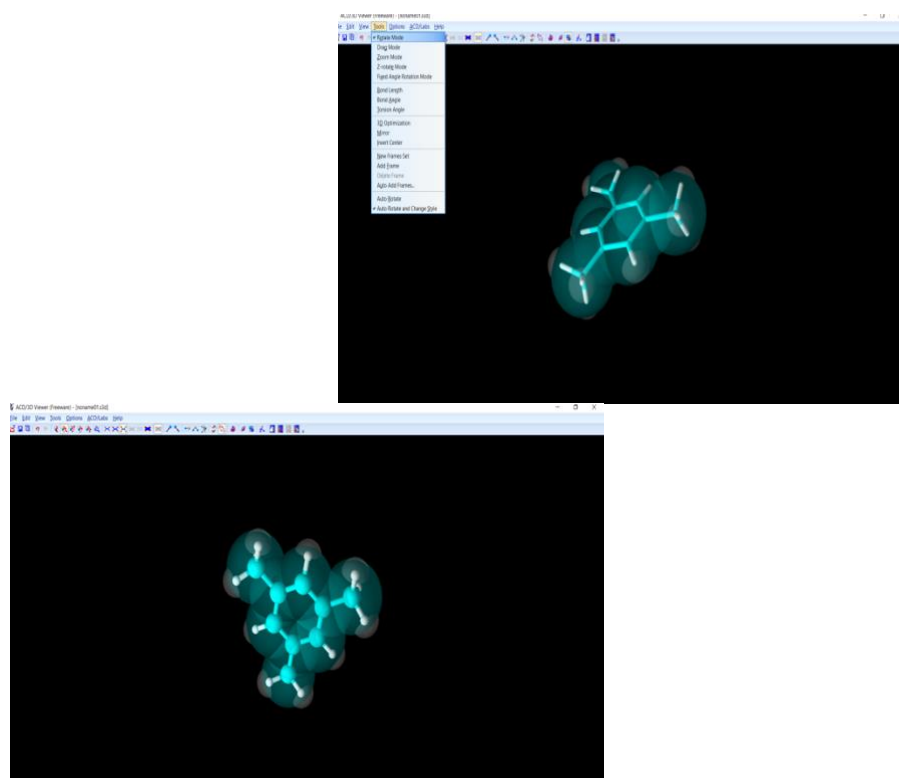
Výsledný strukturní vzorec pro methylbenzen a 1,2,3-trimethylbenzen zobrazíte ve třech rozměrech tak, že jej nejprve vyberete a poté kliknete na možnost  na panelu nástrojů. Otevře se nové okno (*3D viewer*) s 3D pohledem na molekulu **Obrázek 14**. Umístěním ikony myši na každý jednotlivý atom se zobrazí jeho číselné označení podle nomenklatury IUPAC a jeho souřadnice.



Obrázek 14. 3D struktura methylbenzenu a molekuly 1,2,3 trimethylbenzenu
KROK 8 Kliknutím na *Tools* u libovolné možnosti se molekuly zobrazí v několika různých tvarech. Zkuste použít každou z možností otočení, přesunutí a výběru na horním

 panelu nástrojů: , a poté zobrazte molekulu každým ze způsobů, které program nabízí, a možnosti jsou také zobrazeny na panelu nástrojů:  . Chcete-li molekulu automaticky otočit, klikněte na ikonu.

 **Obrázek 15 a,b.**



a)

b)

Obrázek 15. a,b. Rotace molekul molekuly 1,3,5 trimethylbenzenu

4.4. Příklady úloh pro zpracování obsahu výuky

1. Nakreslete všechny strukturální izomery tří methylbenzenu. Napište názvy všech izomerů, poté vyberte jeden a proveďte s ním následující:

1. Nakreslete vzorec molekuly trimethylbenzenu
2. vygenerujte její název v programu a určete molekulární vzorec této molekuly
3. Ukažte to pomocí skeletálního vzorce, strukturálního a kondenzovaného strukturálního vzorce

4. ukazující strukturu molekuly ve třech rozměrech různými způsoby
5. Určete délky vybraných spojníc a konkrétní úhly spojníc
6. Optimalizace molekuly
7. otáčet a posouvat jej ve dvou a třech rozměrech
8. po nakreslení pomocí nástrojů *ChemSketch* dané molekuly z arén dle vašeho výběru uložte 2D a 3D strukturu do počítače
9. určit molekulární vzorec, přepnout na tři rozměry, uložit 2D i 3D strukturu molekuly.

2. V § 2 Prozkoumejte využití arén v každodenním životě. Vyberte jednu molekulu, kterou chcete zobrazit v programu *ChemSketch*. Zapište si do sešitu aplikaci vybrané molekuly v každodenním životě. Uložte optimalizovanou 2D a 3D strukturu těchto molekul do počítače.

4.5. Příklady studentských evaluačních úloh

1. Nakreslete všechny strukturní izomery xylenu. Napište názvy všech izomerů, poté vyberte jeden a proveďte s ním následující:

- a) vygenerovat název
- b) určit molekulární vzorec
- c) zobrazit strukturu pomocí zhuštěného strukturního vzorce, pomlček a strukturního vzorce
- d) upravte strukturu molekuly pomocí volby *Clean structure*
- e) zobrazení struktury molekuly v *3D viewer*
- f) zobrazit strukturu molekuly ve *3D viewer* pomocí tyčinek a míčků
- g) optimalizovat molekulu
- h) uložit 2D i 3D strukturu molekuly do stolního počítače.
- i) otevřít 2D strukturu molekuly a vytvořit z ní cyklickou strukturu a vygenerovat její název a molekulární vzorec

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

LEWISOVY STRUKTURNÍ VZORCE

1) ZPRACOVÁNÍ

Vyučovací jednotka: Lewisovy strukturní vzorce
Název: Lewisovy strukturní vzorce
Odhadovaný počet hodin: 2

1.1. Teoretický úvod

Lewisovy strukturní vzorce představují způsob, jakým jsou atomy vázány v molekule nebo iontu, ve kterých jsou valenční elektrony reprezentovány tečkami představujícími vazebné nebo nevazebné elektronové páry.

Při kreslení Lewisových strukturních vzorců se používají určitá pravidla, vysvětlená níže:

1. Je nutné určit celkový počet valenčních elektronů v molekule nebo iontu.

2. Atomy by měly být uspořádány v „kostře“ molekuly:

- atomy vodíku jsou vždy periferní nebo koncové atomy, protože mohou být vázány pouze jednou kovalentní vazbou

- centrální atom zbytku je ten s nejnižším koeficientem elektronegativity

3. Zbývající atomy by měly být spojeny jednoduchou kovalentní vazbou s centrálním atomem.

Pro toto spojení bylo použito určitého počtu elektronů, které je třeba odečíst od celkového počtu valenčních elektronů. Zbývající valenční elektrony je třeba distribuovat jako nevazebné elektronové páry do oktetů s více elektronegativními atomy.

4. Je nutné zkontrolovat, zda všechny atomy dosáhly příslušné konfigurace vzácných plynů (dublet, oktet). Pokud centrální atom nedosáhl oktetu, pak je nutné vytvořit vícenásobné vazby pomocí nevazebných párů z periferních/periferních atomů, dokud není dosaženo oktetu.

5. Je nutné zkontrolovat, zda počet vazebných párů odpovídá mocenství centrálního atomu.

Teorie odpuzování elektronových párů ve valenčním obalu (VSEPR) je model používaný v chemii k předpovídání geometrie jednotlivých molekul z počtu elektronových párů obklopujících jejich centrální atomy. Teorie VSEPR se používá k predikci uspořádání elektronových párů kolem centrálních atomů v molekulách, zejména jednoduchých a symetrických molekul. Centrální atom je v této teorii definován jako atom, který je vázán ke dvěma nebo více dalším atomům, zatímco koncový atom je vázán pouze k jednomu dalšímu atomu.

1.2. Výstupy vzdělávání

Zobrazte atomy, molekuly nebo ionty s Lewisovými symboly

Popište prostorové uspořádání částic v elementárních látkách a molekul chemických sloučenin pomocí teorie VSEPR.

Vypočítejte vazebný úhel mezi dvěma atomy v uvedených molekulách.

Vizualizujte zobrazené molekuly nebo ionty ve 3D modelu.

Vizualizujte 3D struktury komplexních iontů pomocí hotových šablon z programu

Aplikujte teorii VSEPR při určování prostorového tvaru molekul nebo iontů.

procvičit si používání naučených nástrojů v ChemSketch na uvedených příkladech

pomocí samostatně navrženého příkladu z každodenního života prověřit realizaci vzdělávacích výstupů

1.3. Návod k použití programu ChemSketch

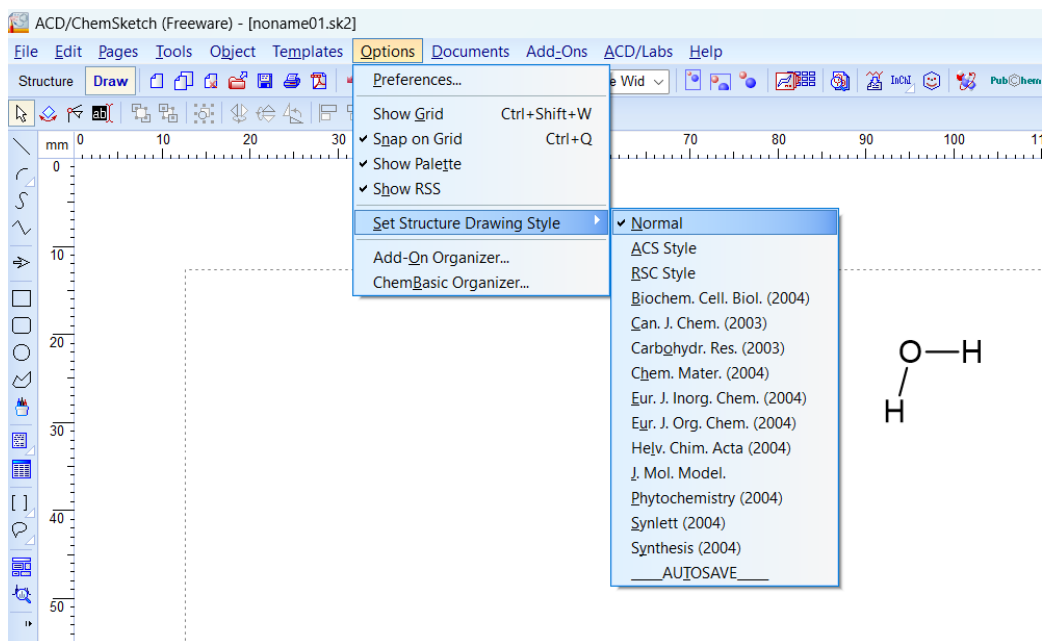
A) Jako první příklad budeme studovat, jak nakreslit Lewisův strukturní vzorec molekuly vody (H_2O)

KROK 1 Na levém panelu nástrojů v Periodické tabulce prvků vyberte atom kyslíku a klikněte do prázdného místa v oblasti kreslení.

(Objeví se molekulární vzorec molekuly vody.)

KROK 2 Je nutné označit výslednou strukturu a poté kliknout na nástroj pro optimalizaci 3D struktury.

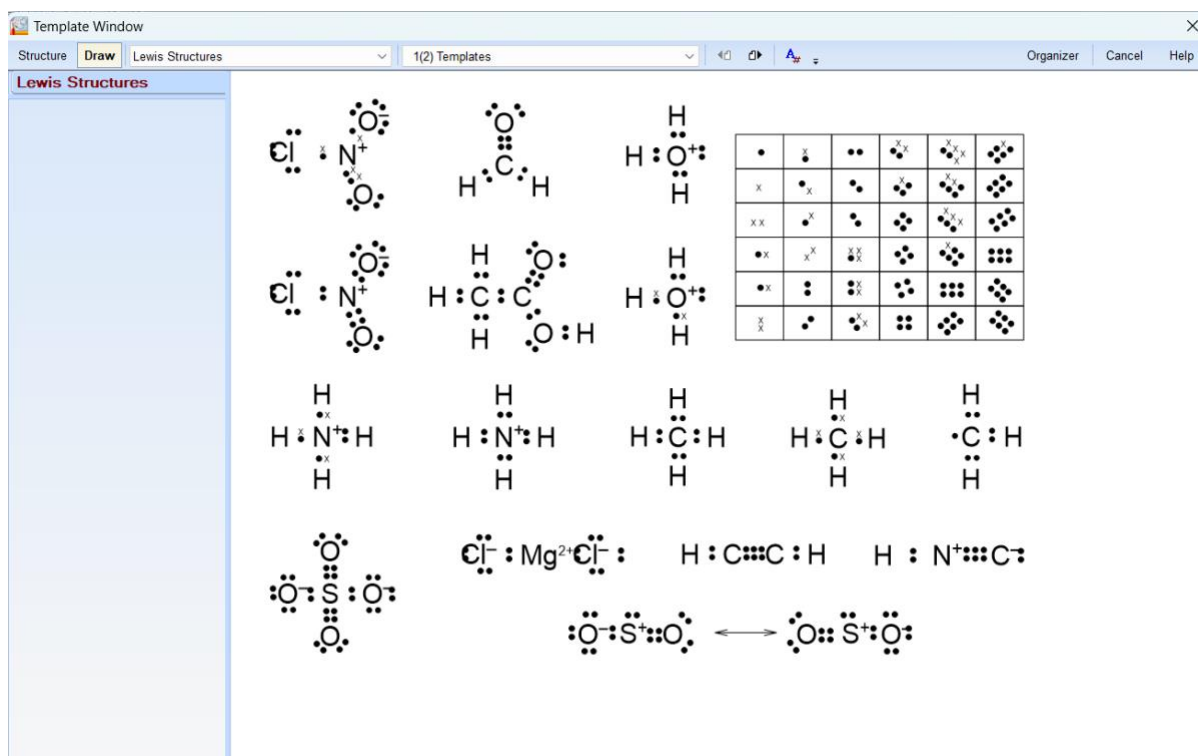
KROK 3 Znovu vyberte strukturu nakreslené molekuly, klikněte na možnosti, poté nastavte strukturu Kreslení a poté klikněte na normální. Uvedený postup je znázorněn na obrázku 1.



Obrázek 1. Optimalizace nakreslené struktury.

KROK 4 Pro lepší přehled o Lewisových strukturních vzorcích můžeme po nakreslení požadované molekuly kliknutím na fit all obrázek zvětšit.

KROK 5 Aby bylo možné nakreslit Lewisův strukturní vzorec molekuly vody, je nutné kliknout na šablony a poté na okno šablon, po kterém se otevře okno s Lewisovými tečkami. Uvedený postup je znázorněn na obrázku 2.

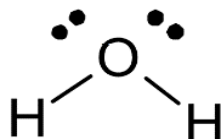


Obrázek 2. Okno pro přidání Lewisových teček do nakresleného pohledu molekuly.

KROK 6 V pravém horním okně musíte vybrat konkrétní způsob zobrazení Lewisových teček a kliknout vedle atomu, ke kterému se připojují.

KROK 7 Volbou výběru můžeme zmenšit přidané Lewisovy tečky, zatímco volbou rotace je můžeme otáčet tak, aby byly umístěny ve správné orientaci vedle atomů.

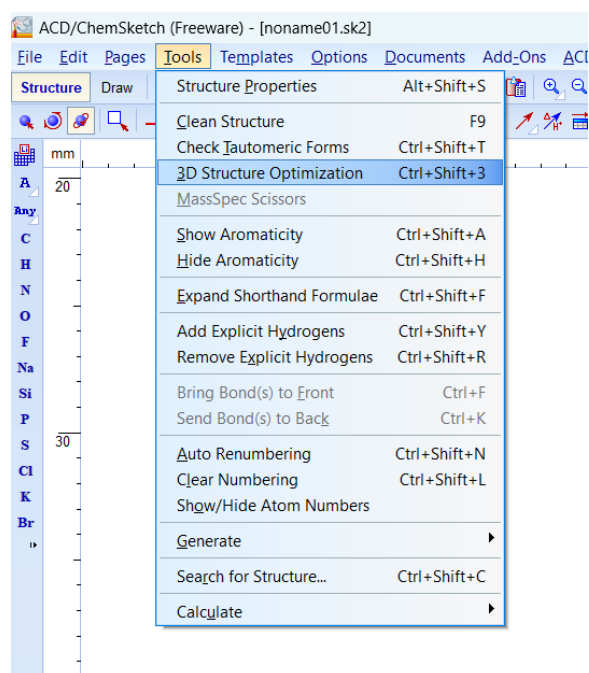
KROK 8 Po těchto krocích jsme získali Lewisův strukturní vzorec molekuly vody. (Obrázek 3.)



Obrázek 3. Lewisův strukturní vzorec molekuly vody.

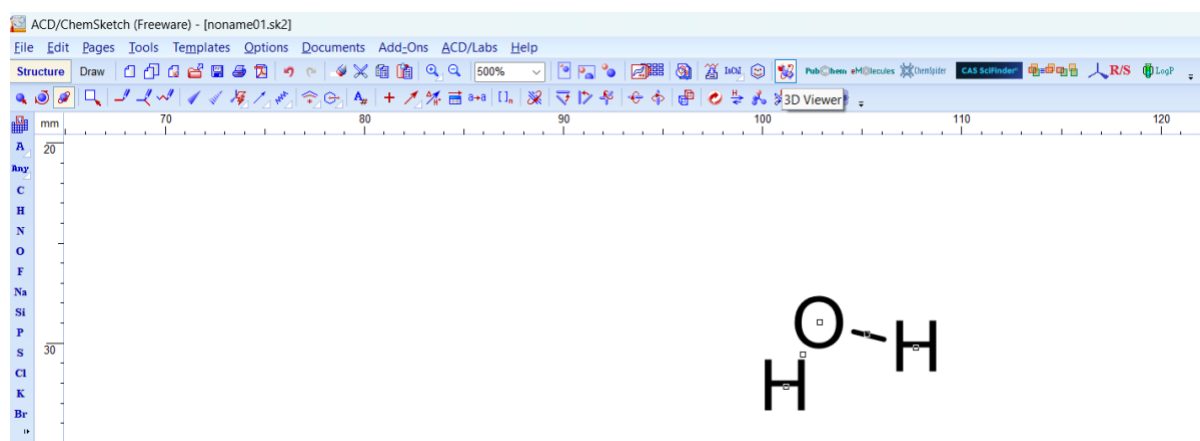
KROK 9 V dalším kroku si ukážeme 3D strukturu molekuly vody. V této části zopakujeme kroky 1–4.

Poté označte nakreslenou molekulu a klikněte na nástroje, poté optimalizaci 3D struktury. Uvedený postup je znázorněn na obrázku 4.



Obrázek 4. Optimizacija nacrtae strukturne formule.

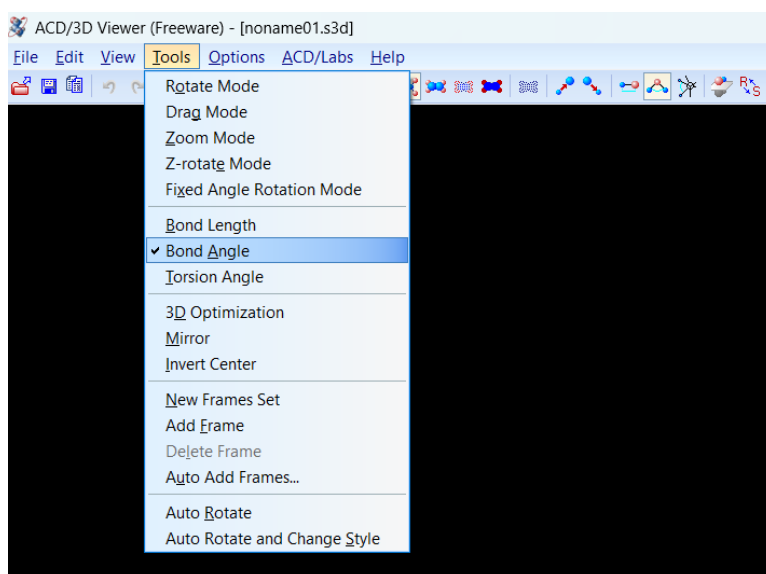
KROK 10 Po provedení nezbytných akcí klikněte na 3D prohlížeč na horním panelu nástrojů. Otevře se nové okno s 3D strukturou molekuly. Uvedený postup je znázorněn na obrázku 5.



Obrázek 5. Přepnutí konstrukce do 3D zobrazení.

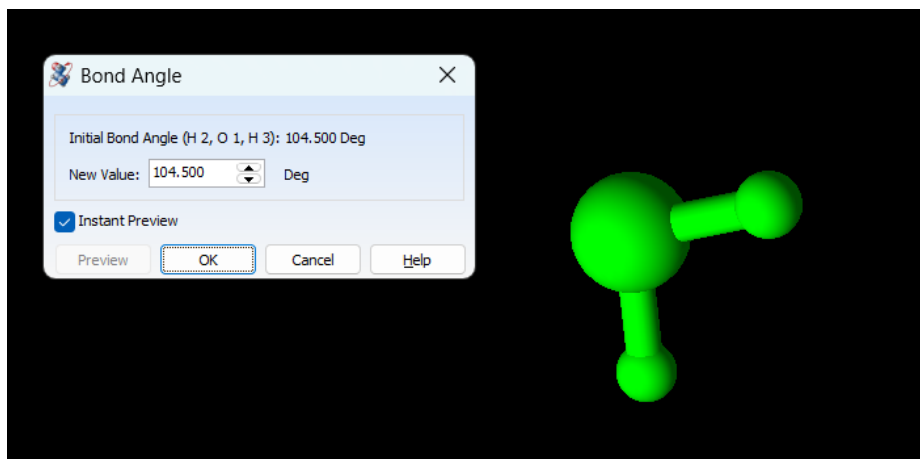
KROK 11 Ve 3D okně lze molekulu otáčet všemi směry a tak studovat prostorovou strukturu samotné molekuly.

KROK 12 Aby bylo možné vypočítat kovalentní úhel mezi dvěma kovalentními vazbami v molekule, je nutné vybrat Úhel vazby. Uvedený postup je znázorněn na obrázku 6.



Obrázek 6. Ilustrace, jak vypočítat kovalentní úhel mezi dvěma kovalentními vazbami v molekule vody.

KROK 13 Poté, co jsme provedli předchozí krok, klikněte nejprve kurzorem myši na atom vodíku (kliknutí na atom změni barvu na zelenou), poté na atom kyslíku a nakonec na druhý atom vodíku. Otevře se okno, které ukáže kovalentní úhel uvnitř molekuly vody.



Obrázek 7. Odečtete hodnoty kovalentního úhlu mezi dvěma kovalentními vazbami.

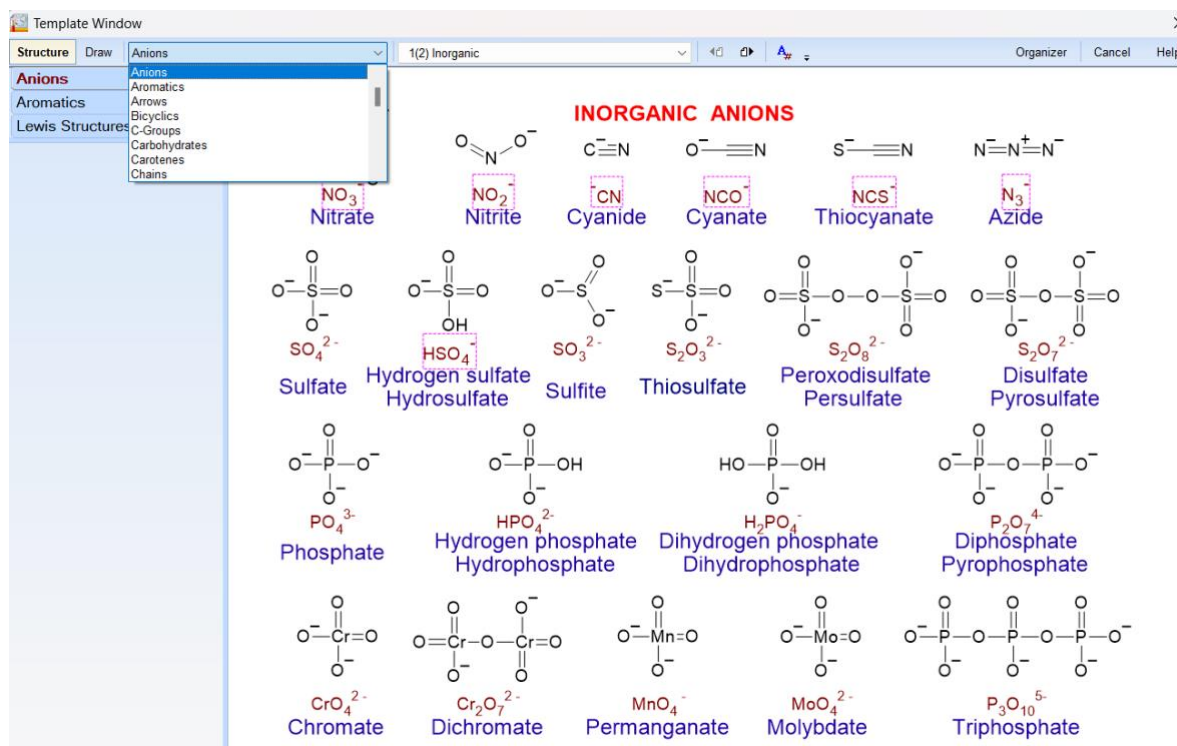
KROK 14 Na základě zobrazené 3D struktury molekuly je pro určení tvaru molekuly nutné znát teorii VSEPR

Stejným způsobem, jak je popsáno u molekuly vody, lze ve výukovém procesu demonstrovat také molekuly metanu a molekuly amoniaku. Pro zobrazení Lewisova strukturního vzorce molekuly vody je nutné provést stejné kroky, jaké jsou vysvětleny v části.

Molekula amoniaku může být reprezentována výběrem atomu dusíku v levé nástrojové liště, kde se nacházejí atomy jednotlivých prvků, zatímco molekula metanu může být reprezentována výběrem atomu uhlíku. Kliknutím na prázdnou oblast programu se zobrazí molekulární vzorec sloučeniny a po výše uvedených krocích k zobrazení molekuly vody lze zobrazit Lewisův strukturní vzorec těchto sloučenin a tyto molekuly lze zobrazit ve 3D struktuře.

B) Jako další příklad budeme studovat, jak nakreslit Lewisův strukturní vzorec SULFÁTOVÉHO ANIONU.

KROK 1 Na horním panelu nástrojů klikněte na šablonu a vyberte okno šablony. Poté se otevře okno, ve kterém v levém poli vybereme anionty pro zobrazovací plochu a v pravém anorganické. Uvedený postup je znázorněn na obrázku 8.

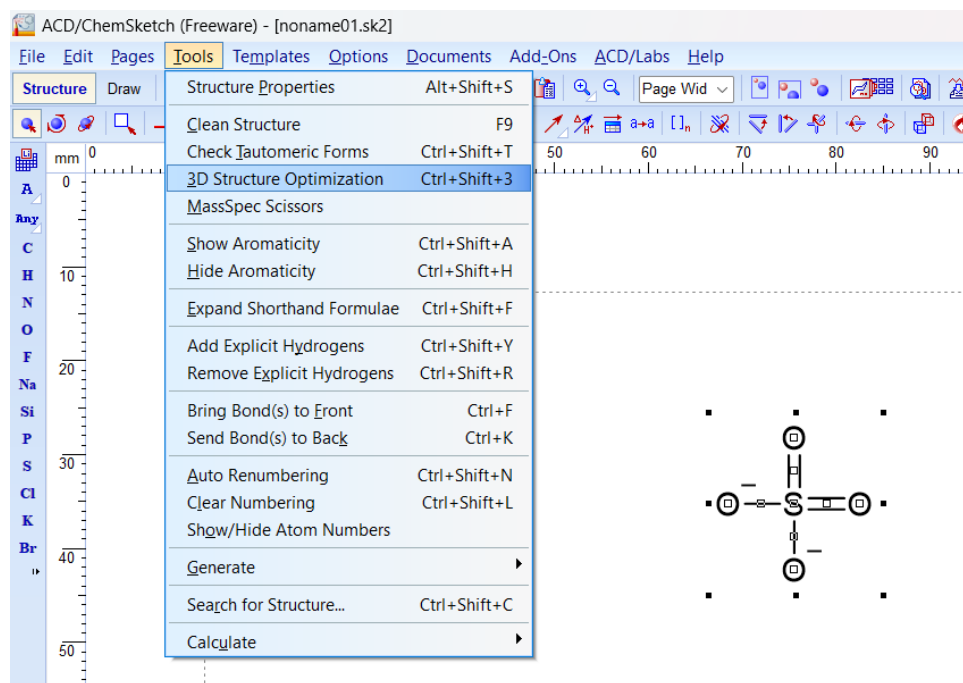


Obrázek 8. Okno s aniontovými šablonami.

KROK 2 Poté, co jsme udělali první krok, ve specifikovaném okně, které se otevřelo, vybereme požadovaný anion, pro který chceme zobrazit strukturní vzorec, v tomto případě je

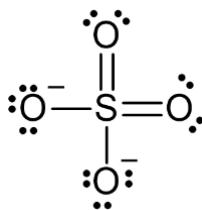
to sulfátový anion. Klikneme na vybraný anion, pak se okno zavře a klikneme na zadaný anion v oblasti kreslení struktury.

KROK 3 Označte nakreslený anion a klikněte na nástroje, poté optimalizaci 3D struktury. Uvedený postup je znázorněn na obrázku 9.



Obrázek 9. Nákres anorganických aniontů.

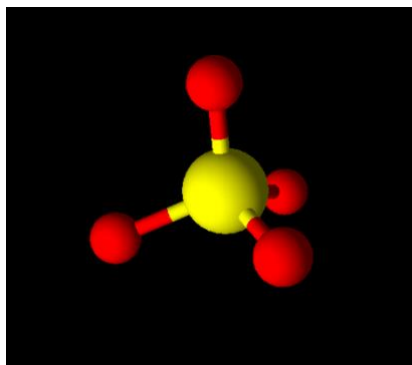
KROK 4 Znázornění Lewisových teček je znázorněno v režimu kreslení Lewisova strukturního vzorce molekuly vody.



Obrázek 10. Lewisův strukturní vzorec síranového aniontu.

KROK 5 Po tomto kroku v nástroji výše klikněte na možnost přepnout nakreslenou molekulu do 3D kliknutím na 3D prohlížeč, který zobrazí 3D strukturu aniontu a prostorové uspořádání atomů v nakresleném aniontu.

Zobrazenou 3D strukturu molekuly lze otáčet všemi směry a studovat tak uspořádání atomů v prostoru.



Obrázek 11. 3D znázornění síranového aniontu.

KROK 6 Kovalentní úhel vysvětlený v předchozích krocích může být určen pro zobrazený anion a tvar může být určen znalostí teorie VSEPR.

1.4. Příklady úloh pro zpracování obsahu výuky

1. Nakreslete Lewisovy strukturní vzorce následujících molekul: oxid uhlíku (IV) a oxid sírový (IV).

- Ukažte tyto molekuly ve 3D struktuře.
- Určete kovalentní úhel s těmito molekulami.
- Určete tvar molekuly se znalostí teorie VSEPR.

2. Nakreslete Lewisovy strukturní vzorce následujících iontů: dusitan a siřičitan.

- Ukažte tyto molekuly ve 3D struktuře.
- Určete kovalentní úhel s těmito molekulami.
- Určete tvar molekuly se znalostí teorie VSEPR.

3. Prozkoumejte a vyberte jednu molekulu, která je nezbytná pro každodenní život člověka. Nakreslete vybranou molekulu v ChemSketch a zobrazte její strukturní vzorec Lewis. Zobrazte vybranou molekulu ve 3D struktuře a studujte její prostorovou strukturu.

1.5. Příklady úloh pro hodnocení přijetí obsahu

4. Nakreslete Lewisův strukturní vzorec kyseliny sírové.

- Ukažte tyto molekuly ve 3D struktuře.

- b) Určete kovalentní úhel s těmito molekulami.
c) Určete tvar molekuly se znalostí teorie VSEPR.

LITERATURA:

ACD/ChemSketch, verze 11.0 pro Microsoft Windows, výukový program kreslení chemických struktur a grafických obrázků

Barić Tominac, M., Habuš, A., Liber S., Vladušić R. (2019): Chemie 1, učebnice chemie pro 1. stupeň střední školy, Záhřeb, Profil Klett

Blagović, B. (2018): Chemie ve výuce, Univerzita v Rijece, Lékařská fakulta

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

CHIRALITA A OPTICKÁ AKTIVITA

1. ZPRACOVÁNÍ

Vyučovací jednotka: Chiralita a optická aktivita
Název: Chiralita a optická aktivita
Odhadovaný počet hodin: 2

4.1. Teoretický úvod

Optická aktivita a chiralita

Optická aktivita souvisí s vnitřním prostorovým uspořádání atomů v molekule. Existují dvojice molekul, které jsou vůči sobě ve stejném vztahu, jako předmět a jeho obraz v zrcadle.

Optická aktivita se vyskytuje u celé řady organických a anorganických komplexních sloučenin. Organické sloučeniny uhlíku jsou nejběžnějšími opticky aktivními látkami. Podmínkou optické aktivity je skutečnost, že na atomu uhlíku jsou vázány čtyři různé substituenty. Takový atom uhlíku se nazývá asymetrický (chirální=chiro = řecky ruka) uhlík (chirální centrum molekuly). Neztotožnitelnost objektu s jeho zrcadlovým obrazem se nazývá chiralita.

Dvojice látek, které obsahují opticky aktivní uhlík a vyskytují se ve dvou formách (předmět–obraz), se nazývá enantiomery, dříve optické antipody. Pokud molekula obsahuje více center chiralit, vzrůstá počet enantiomerů. U struktur s acyklickými řetězci je počet optických antipodů roven 2^n , kde n je počet chirálních center molekuly. Při větším počtu asymetrických atomů mohou být některé izomery jako celek symetrické. Příkladem jsou izomery kyseliny vinné se dvěma identickými centry chiralit v molekule.

Označení enantiomerů

Enantiomery, které stáčí rovinu polarizovaného světla doprava se nazývají pravotočivé a označují se znaménkem +. Enantiomery, které stáčí rovinu polarizovaného světla doleva se nazývají levotočivé a označují se znaménkem -. Ekvimolární směs obou enantiomerů se nazývá racemická směs (racemát) a ke stáčení světla nedochází (příspěvky + a - enantiomeru se kompenzují).

D-; L- enantiomery

Ve velkém počtu případů jsou znaménka rotace pouhou fyzikální konstantou a vztah mezi ní a strukturou je obtížně definovatelný. Z tohoto důvodu byly zavedeny standardy, kterými se jednotlivé konfigurace na asymetrických centrech porovnávají. V chemii cukrů je tímto standardem glycerinaldehyd – jeho pravotočivý antipod byl označen symbolem D- a levotočivý

L-. V chemii aminokyselin a bílkovin je tímto standardem alanin – jeho pravotočivý antipod byl označen symbolem D- a levotočivý L-.

Protože tato symbolika nevyhovovala, dohodli se chemici vyjadřovat absolutní konfiguraci systémů pomocí Cahnova-Ingoldova-Prelogova R,S-systému, podle kterého se každé centrum chiralita označuje separovaně. (R pochází z latinského rectus, pravý; S z latinského sinister, levý).

4.2. Vzdělávací výstupy

- porozumět významu pojmů chiralita, optická aktivita, enantiomery
- určit chirální sloučeninu podle strukturního vzorce
- nakreslit strukturní a funkční vzorce různých chirálních sloučenin
- vytvořit názvy nakreslených sloučenin v programu ChemSketch
- vytvořit molekulové vzorce pomocí programu ChemSketch
- optimalizovat vzorce pomocí funkce “Clean structure” v programu ChemSketch
- nakreslit optické izomery vytvořených sloučenin
- označit centrum chiralita v programu ChemSketch
- skrýt či ponechat všechny atomy ve vzorcích - úplný či zjednodušený strukturní vzorec
- vytvořit 3D náhled vytvořených vzorců
- vytvořit pohled na sloučeniny z různých úhlů
- umět otáčet vytvořenou strukturou
- určit délku vazeb a vazebné úhly pomocí programu ChemSketch
- uložit vytvořené struktury do počítače a na Google disk


4.3. Instrukce pro použití ChemSketch softwaru

Nakreslete vzorec kyseliny mléčné, optimalizujte vytvořenou strukturu. Vygenerujte v programu název sloučeniny, molekulový vzorec, zjednodušený a úplný strukturní vzorec. Označte chirální uhlík pomocí hvězdičky. Vytvořte 3D model dané sloučeniny a naučte se pohybovat a otáčet s ním. Uložte 2D i 3D model vytvořené struktury.


KROK 1

V prostředí *Structure*



vyberte ikonu *Draw Normal*  (pokud jste po spuštění programu nevybrali jinou ikonu **lišty** *Structure*, je ikona *Draw Normal* ve výchozím nastavení vybraná).

KROK 2


Vyberte *atom uhlíku*  v *Nástrojové liště atomů* (také defaultně vybraný).

Kliknutím levým tlačítkem do volného pracovního prostoru se vykreslí **CH₄** (**Obr. 1**).

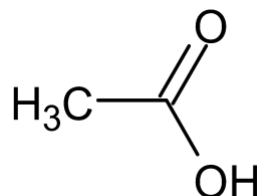


Obrázek 1. Výběr atomu

KROK 3


Table of Radicals (Tabulka substituentů)  v liště substituentů – po jejíž aktivaci můžete vybírat z několika možných substituentů – vyberte karboxylovou skupinu COOH a připojíte k methanu (**Obr. 2**)

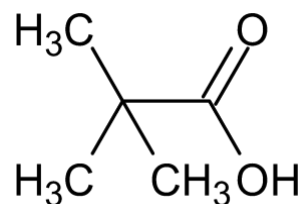
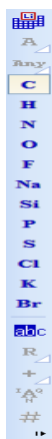
:



Obrázek 2. Výběr substituentu

KROK 4

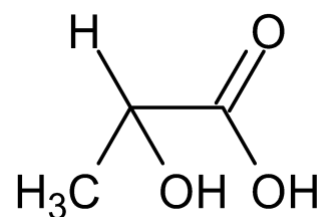
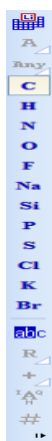
Z nástrojové lišty atomů vyberte  a připojte tři CH₃ skupiny na poslední uhlík vlevo (Obr. 3):



Obrázek 3. Doplnění substituentů


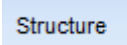


KROK 5

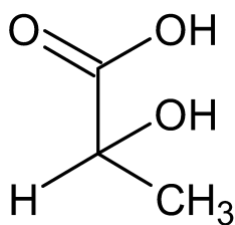
Z nástrojové lišty atomů vyberte postupně **H** a **O** nahraďte 2 skupiny CH₃ za skupinu OH a H (Obr. 4)



Obrázek 4. Doplnění substituentů

KROK 6

Pomocí ikony *Select/Move*  označte vzorec (kliknete do prostoru uvnitř obdélníkové plochy vymezené krajními atomy struktury), přepněte do prostředí *Draw*   a zvolte ikonu  *Rotate 90°* (Otočení o 90°)



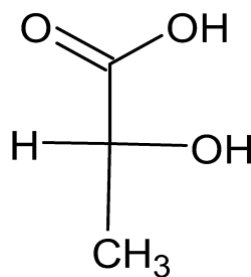
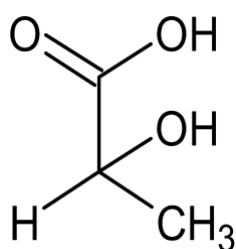
Obrázek 5. Otočení vzorce

KROK 7

Znovu přepněte do prostředí *Structure*

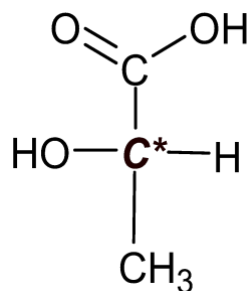
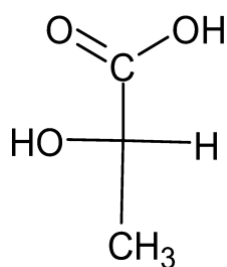
Structure Draw

Postupným kliknutím na skupinu OH, H a CH₃ posuňte skupiny do potřebné polohy (**Obr. 6**)
kyselina D –mléčná (D-2-hydroxypropanová kyselina)




Obrázek 6. Úprava struktury

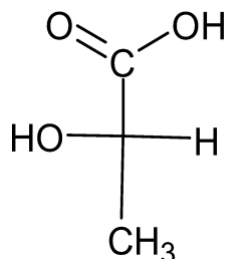
Enantiomery označujeme podle orientace charakteristické skupiny (hydroxy) na asymetrickém uhlíku (**Obr. 7**), Označení –mléčná (L-2-hydroxypropanová)



Obrázek 7. Označení enantiomerů


KROK 8

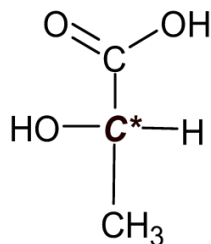
Volbou v *Menu Tools – Generate – Name for Structure* (či volbou ikony  v hlavní liště) dojde k pojmenování struktury v angličtině podle nomenklatury IUPAC (**Obr. 8.**) - (2-hydroxypropanoic acid)



Obrázek 8. Vytvoření názvu struktury

KROK 9

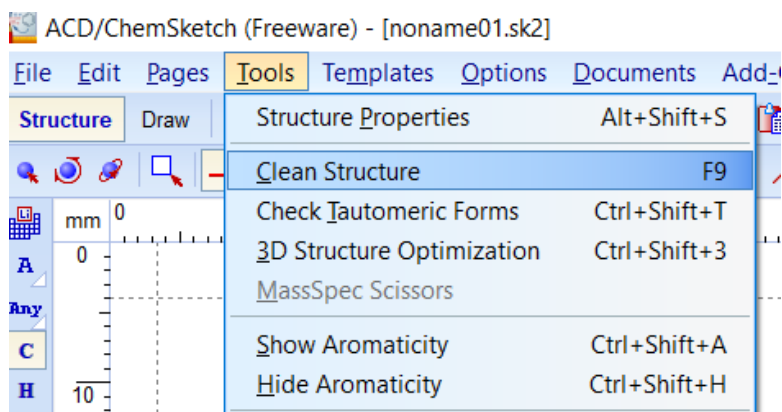
Pokud je třeba označit chirální uhlík, v liště atomů vyberte ikonu *Edit Atom Label* , klikněte na chirální centrum (uhlík), objeví se tabulka *Edit Label*, v ní vyberte, případně запиšte C* a zvolte *Insert* (**Obr. 9**)



Obrázek 9. Označení asymetrického uhlíku



KROK 10

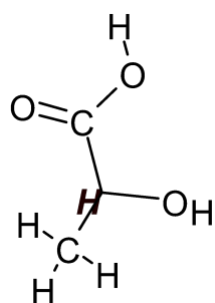
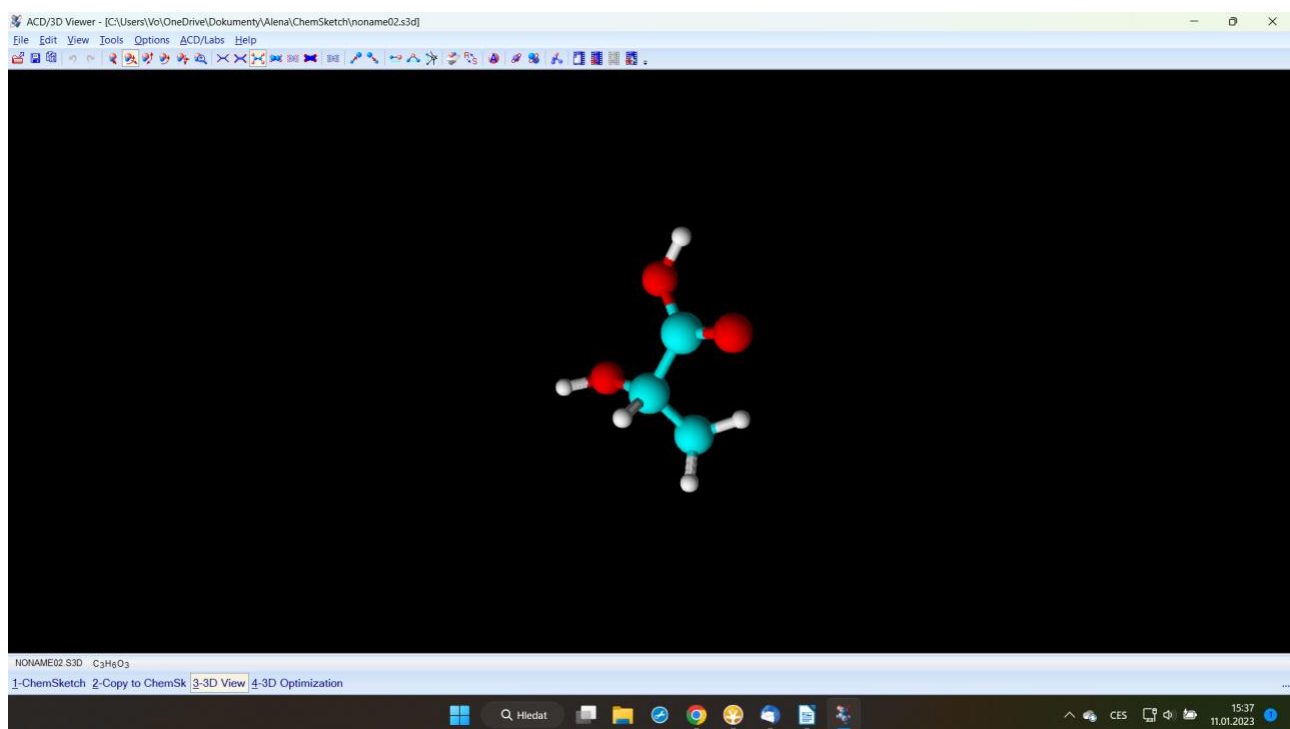
Vytvořené vrorce lze optimalizovat pomocí funkce “*Clean structure*” (**Obr. 10**)



Obrázek 10. Optimalizace vzorce

KROK 11

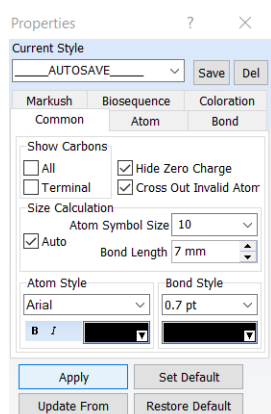
Aplikace **3D Viewer** slouží k vizualizaci chemických struktur v 3D prostoru. Otevřete ji z nabídky v horní liště *ACD/Labs*. V levém dolním rohu se nachází tlačítka, která umožní přechod mezi aplikacemi ChemSketch a 3D Viewer. Vyberte nakreslenou strukturu a optimalizujte ji pro 3D vizualizaci pomocí tlačítka *3D Optimization*: . Vyberte optimalizovanou strukturu a pomocí tlačítka **3D Viewer**  vpravo nahoře v **hlavní liště** přepokopírujte strukturu do **3D Vieweru** (**Obr. 11**)



Obrázek 11. Vzorec ve 3D prostoru

KROK 12

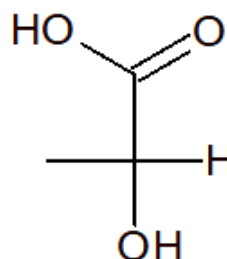
V nakresleném vzorci lze skrýt či ponechat všechny atomy ve vzorcích - úplný či zjednodušený strukturní vzorec. V hlavní liště vyberte *Tools* a následně *Structure Properties* - zobrazí se tabulka - v ní vyberte podle vzoru - **Obr. 12a**. Pokud se budete chtít vrátit k původnímu vzorci - zaškrtněte možnost *All* a zvolte *Apply*.



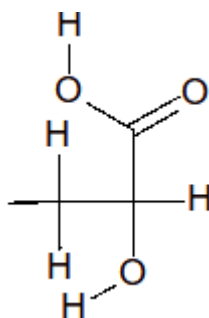
Obrázek 12b. Výběr vlastností

Obrázek 12a. Zjednodušený strukturní vzorec

Pokud byste chtěli zobrazit všechny vodíky v molekule, liště *Tools* a následně *Add Explicit Hydrogens* (**Obr. 12c**) a následně *Remove Explicit Hydrogens*.
























zvolte v hlavní liště **12c**). Zpět se






Obrázek 12c. Úplný strukturní vzorec

KROK 13



Vyzkoušejte různé způsoby zobrazení molekuly v 3D Vieru.

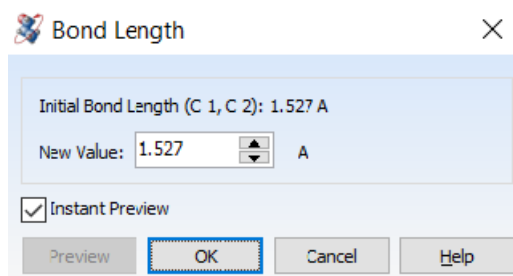
Vyberte ikonu *3D Viewer* . Vyzkoušejte různé zobrazení vazeb volbou na ikony                    , vyzkoušejte automatickou rotaci molekuly kliknutím na

ikonu  a další možné rotace . Pro plynulou změnu z jednoho do druhého režimu molekul s rotací klikněte na ikonu .



KROK 14

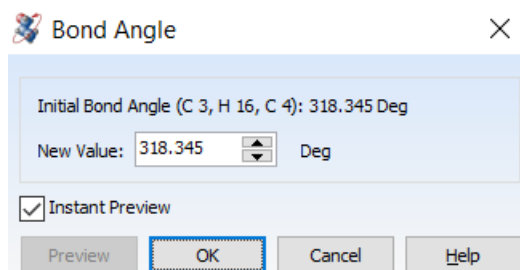
Určení vazebného úhlu a délky vazby

Určení délky vazby: ve 3D Vieru (ikona ) klikněte na ikonu  a klikněte na atomy, mezi kterými chcete zjistit délku vazby - objeví se okno, ve kterém je zapsána délka vybrané vazby (**Obr. 13**).



Obrázek 13. Určení délky vazby

Určení vazebného úhlu: ve 3D Vieru (ikona ) klikněte na ikonu  a klikněte na atomy, mezi kterými chcete zjistit vazebný úhel - objeví se okno, ve kterém je zapsán vazebný úhel (**Obr. 14**).



Obrázek 14. Určení vazebného úhlu

KROK 15

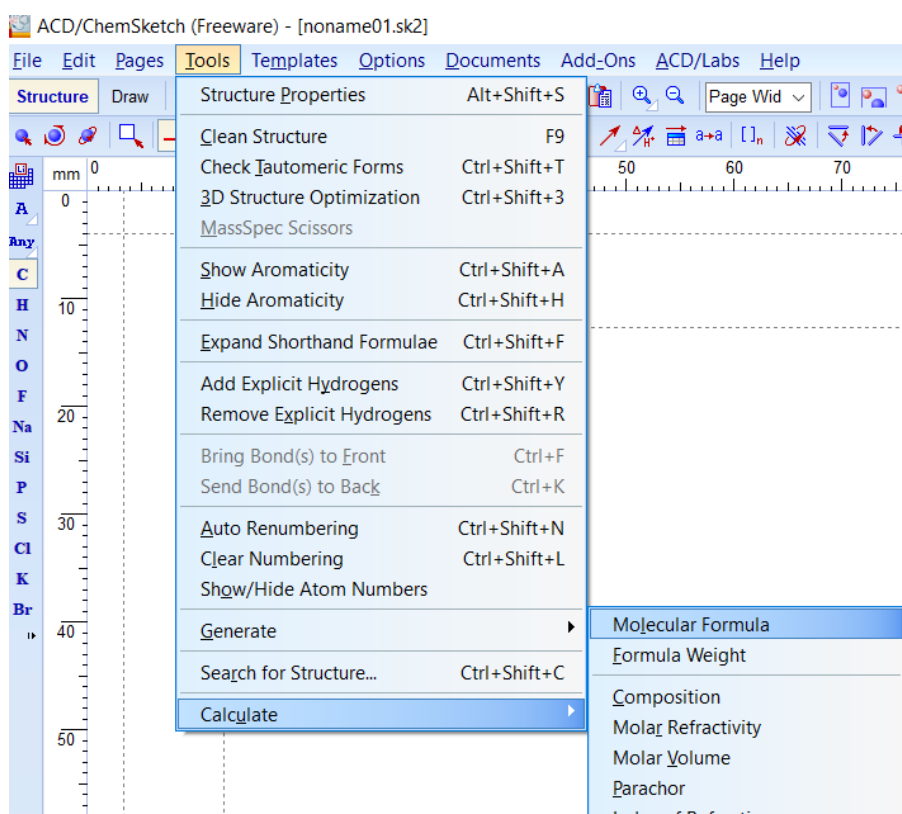
Vytvoření molekulového vzorce a ostatních parametrů sloučeniny

Vyberte *Tools* a následně *Calculate* - vyberte *Molecular Formula*.

Chcete-li zobrazit molekulární vzorec na listu, který obsahuje strukturu a název nakreslené molekuly, klikněte na Kopírovat do editoru (*Copy to Editor*). Dále z nabídky můžete vybrat další položky - molární hmotnost, (**Obr. 15**).

Molecular Formula: C₃H₆O₃

Formula Weight: 90.07794



Obrázek 15. Vytvoření molekulového vzorce

KROK 16

Uložení vytvořené struktury do počítače a na Google disk.

4.4. Příklady úloh pro zpracování obsahu výuky

Vyhledejte informace o výskytu chirálních sloučenin v přírodě, jejich vztahu k metabolismu základních látek a jejich využití v běžném životě.

Vytvořte druhý optický izomer kyseliny mléčné podle stejných instrukcí.

Určete:

- název sloučeniny
- molekulový vzorec
- vytvořte úplný a zjednodušený molekulový vzorec
- optimalizujte vzorec pomocí “clean structure”
- vytvořte 3D model
- vytvořte náhledy z různých úhlů
- určete délku vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- určete vazebný úhel mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- uložte 2D a 3D strukturu

Vyhledejte informace o proteinogenních aminokyselinách.

4.5. Příklady úloh pro hodnocení studentů

Vytvořte vzorce L a D serinu a určete:

- název sloučeniny
- molekulový vzorec
- vytvořte úplný a zjednodušený molekulový vzorec

- optimalizujte vzorec pomocí “clean structure”
- vytvořte 3D model
- vytvořte náhledy z různých úhlů
- určete délku vazby mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- určete vazebný úhel mezi prvním a druhým atomem uhlíku
- uložte 2D a 3D strukturu

Zdroj: Mareček, A., Honza, J. Chemie pro čtyřletá gymnázia 3 díl. 1. vyd. Olomouc: Nakladatelství Olomouc 2000. 250 s. ISBN 80-7182-057-1

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

ALKOHOLY

1.) Zpracování

Učební jednotka: Organické sloučeniny
Název jednotky: Alkoholy
Předpokládaný počet hodin: 2

1.1 Teoretický úvod

Alkoholy jsou hydroxylové alifatické deriváty organických sloučenin, v nichž jsou na uhlovodíky vázány jedna nebo více hydroxylových skupin.

Alkoholy lze rozdělit do kategorií podle různých kritérií:

- Podle typu radikálu, na který je hydroxylová skupina vázána, se rozlišují alifatické alkoholy, aromatické alkoholy a fenoly;
- Podle typu atomu uhlíku, na který je hydroxylová skupina vázána, existují primární alkoholy, sekundární alkoholy a terciární alkoholy;
- Podle počtu hydroxylových skupin ve struktuře mohou být alkoholy monohydroxy, dihydroxy a trihydroxy.

Metody získávání alkoholů jsou známy již od starověku procesem kvašení hroznového cukru, což je nejstarší metoda získávání alkoholů. S technologickým rozvojem a rostoucím uplatněním je bylo možné získávat několika dalšími postupy, z nichž tzv. katalytickým procesem se alkoholy průmyslově vyrábí hydratací alkenů, v laboratorních podmínkách se připravují nukleofilní substitucí a dalšími metodami.

Oběcný vzorec alkoholů je R-OH nebo Ar-CH₂-OH, kde je jakýkoli alifatický radikál navázán na hydroxylovou skupinu nebo aromatickou sloučeninu, kde hydroxylová skupina není přímo navázána na aromatický kruh, ale na postranní radikál.

Hydroxylová skupina (-OH) je funkční skupinou alkoholů a fenolů.

Názvosloví alkoholů podle IUPAC se tvoří z názvu (základu) uhlovodíku přidáním přípony -OL nebo podle triviálních názvů jako glykol, ethanol, glycerol atd.

Alkoholy se často pojmenovávají pomocí názvu radikálu v jejich struktuře a zvláště slova "alkohol". Užívány jsou také triviální názvy. Existuje také radikálové názvosloví, podle kterého se nejprve čte název radikálu a poté hydroxylové skupiny jako "alkohol".

Alkoholy jsou pro svou velkou rozmanitost a vlastnosti velkou a velmi důležitou skupinou sloučenin. Nejznámější a nejdůležitější zástupci z alkoholů jsou methanol, ethanol, glykol a glycerol.

Název alkoholu	Metanol (Metylalkohol)	Etanol (Etylalkohol)	Propanol (Propyl alkohol)	Butanol (Butyl alkohol)	Etan-1,2- diol (Glykol)	Propan- 1,2,3-triol (Glycerol)	Benzyl Alkohol
Vzorec	CH ₄ O	C ₂ H ₆ O	C ₃ H ₈ O	C ₄ H ₁₀ O	C ₂ H ₆ O ₂	C ₃ H ₈ O ₃	C ₇ H ₈ O

Při pojmenovávání alkoholů se nejdelší uhlovodíkový řetězec čísluje vždy z té strany, kde má skupina -OH nižší hodnotu. Pokud jsou v alkoholu různé substituenty, jsou pojmenovány v abecedním pořadí.

Alkoholy nemohou mít dvě skupiny -OH na stejném atomu uhlíku, ale na každém atomu C uhlovodíkové skupiny může být více než jedna skupina -OH, a pak je přípona diol, triol atd. je příklad $\text{CH}_2(\text{OH})-\text{CH}_2(\text{OH})$ etan-1,2-diol (glykol), $;\text{CH}_2(\text{OH})-\text{CH}(\text{OH})-\text{CH}_2(\text{OH})$ propan-1,2,3-triol (glycerol)

Alkoholy mohou být nasycené a nenasycené, alifatické a aromatické.

1.2. Vzdělávací výstup

V této kapitole se studenti naučí:






- nakreslit různé příklady molekul alkoholu a prezentovat je pomocí strukturního, kondenzovaného strukturního vzorce a pomocí kosterního vzorce.
- generovat názvy dříve nakreslených molekul alkoholu v programu ChemSketch.
- určit molekulový vzorec dříve nakreslených molekul alkoholu v programu ChemSketch.
- optimalizovat zobrazení struktury molekul (úprava délky vazeb a mezivazbových úhlů) pomocí možnosti "Clean Structure" (čistá struktura).
- nakreslit strukturní izomery alkoholu
- zobrazit struktury alkoholu ve třech rozměrech
- otáčet molekuly alkoholu ve dvou a třech rozměrech
- změnit způsob zobrazení struktur molekul ve třech rozměrech
- pohybovat molekulami alkoholu ve 3D a 2D.
- optimalizovat struktury molekul alkoholu
- uložit do počítače dvourozměrnou a trojrozměrnou strukturu požadované molekuly alkoholu

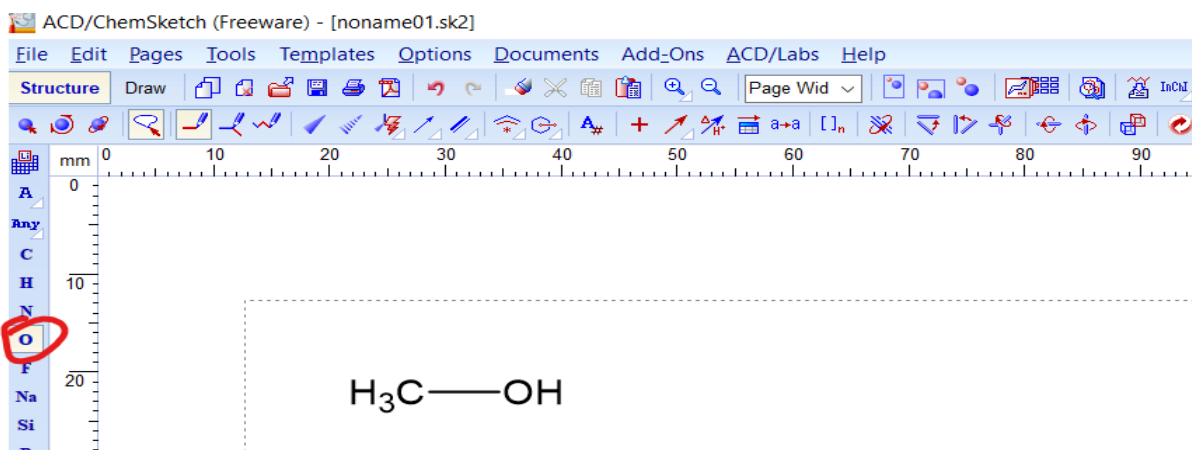
1.3. Návod k použití programu ChemSketch

Kreslení různých typů alkoholů:

Příklad 1: Kreslení monohydroxy, dihydroxy a trihydroxy alkoholů pomocí nástroje "Draw normal tool".


KROK 1.

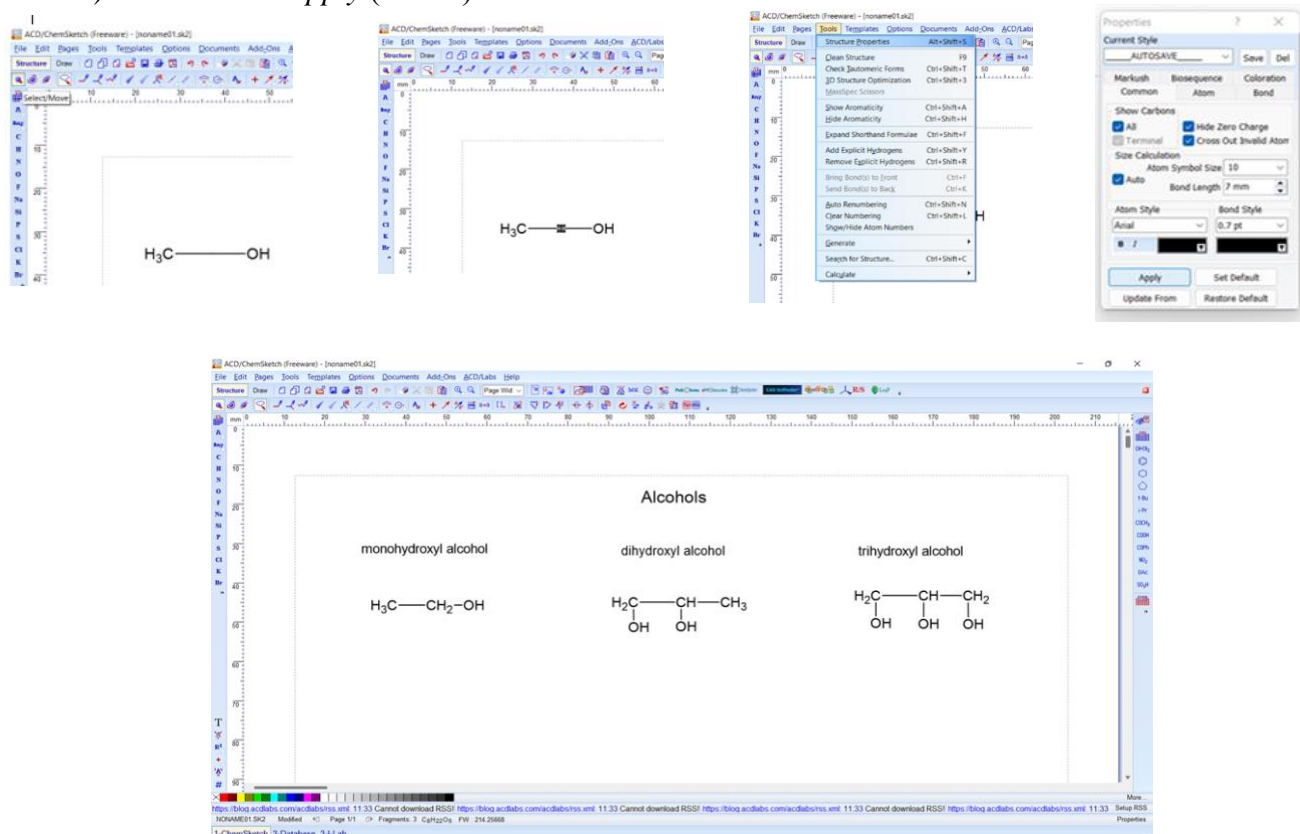
Kreslení monohydroxy, dihydroxy a trihydroxy alkoholů lze provést pomocí tlačítka  z panelu nástrojů. Na strukturním panelu nástrojů klepněte na tlačítko . Poté, abyste mohli začít kreslit, musíte klepnout na pracovní prostor, přičemž se objeví CH_4 . Kliknutím levým tlačítkem myši na CH_4 a tažením doprava vytvoříte řetězec dvou atomů uhlíku $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$. Abychom mohli nakreslit alkohol, potřebujeme skupinu -OH, kterou přidáme tlačítkem Oxygen  z panelu nástrojů pro atomy. Stejnou technikou kliknete levým tlačítkem myši na pravý CH_3 a tažením doprava přidáte hydroxylovou skupinu. Vytvoření skupiny -OH. (Obrázek 1) To, abyste nakreslili správnou strukturu alkoholu, stisknutím tlačítka vyberete celou strukturu kliknutím na ikonu  a tažením po celé struktuře. Poté klepněte na tlačítko *Tools* (Nástroje) a vyberte možnost "*Clean structure*"  (Čistá struktura).



(Obrázek 1.) - struktura metanolu

KROK 2.

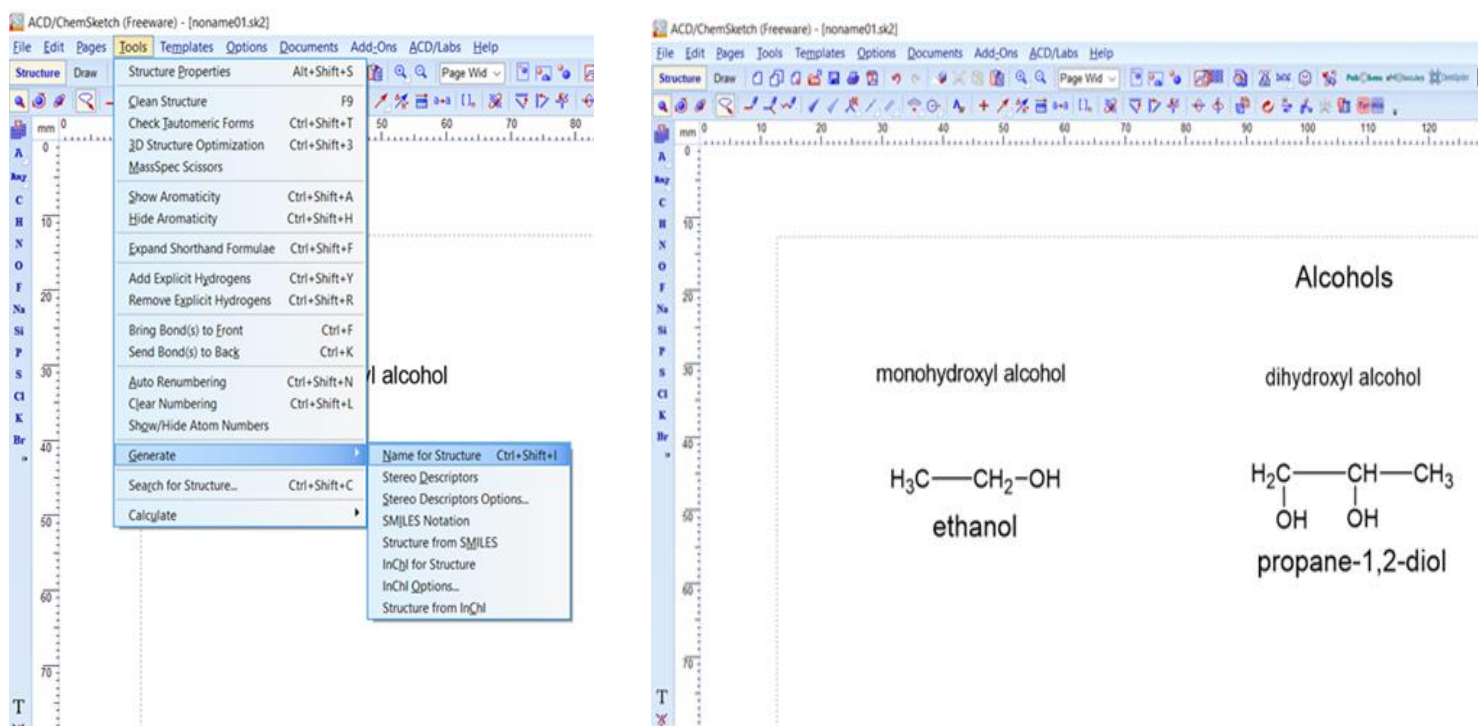
Chcete-li však nakreslit druhý člen sekvenční uhlovodíků, v tomto případě CH_2 , musíte jej vybrat pomocí tlačítka . (Obrázek 2 a, b) Poté kliknete na nabídku *Tools* (Nástroje) z panelu nástrojů *Menu* a poté na *Structure Properties* (Vlastnosti struktury). Zobrazí se okno *Properties* (Vlastnosti), ve kterém je třeba vybrat *All* (Vše) v přihrádce *Show Carbons* (Zobrazit uhlovodíky) a kliknout na *Apply* (Použít). (Obrázek 2 c, d). Zobrazí se okno *Properties* (Vlastnosti), ve kterém je třeba vybrat *All in the compartment* *Show Carbons* (Všechny uhlíky v sekci) a kliknout na *Apply* (Použít).



(Obrázek 2. a,b,c,d,f)- Struktura monohydroxyl, dihydroxyl and trihydroxyl alkoholů

KROK 3.


Generování názvu pro alkoholy se provádí v nabídce *Tools* (Nástroje) na panelu nástrojů *Menu*, poté zvolíte *Generate* (Generovat) a v další nabídce kliknete na *Name for Structure* (Název pro strukturu). (Obrázek 3 a b)

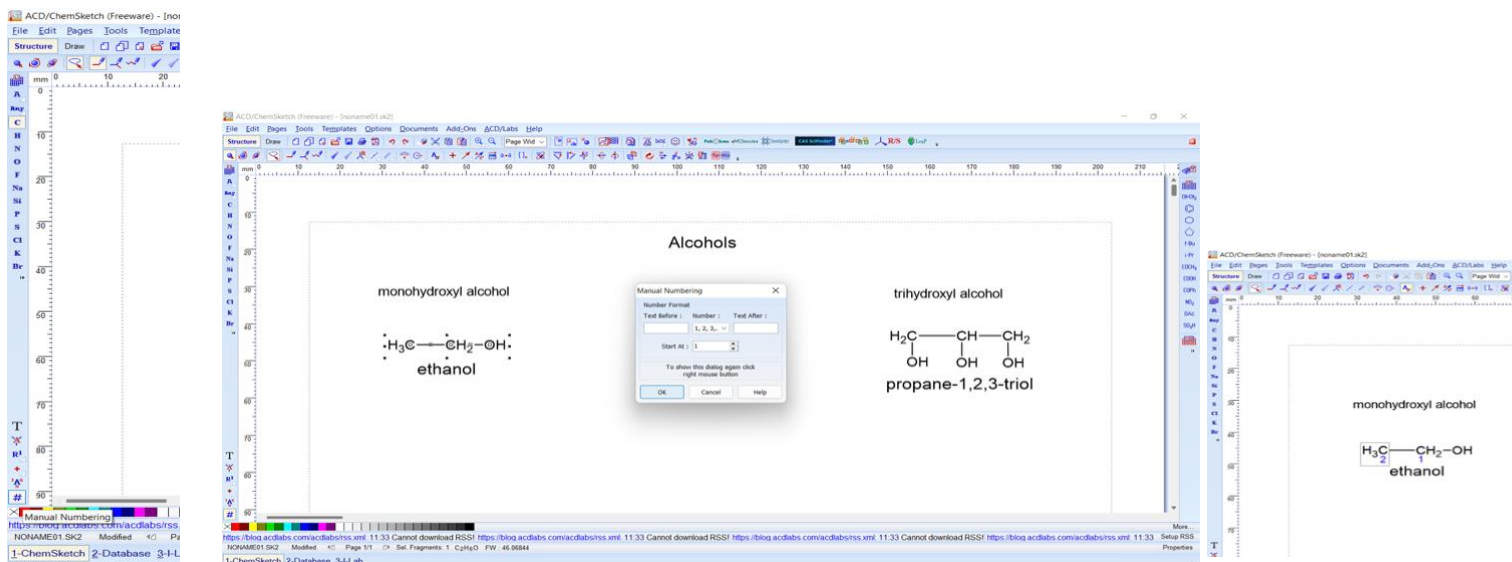


(Obrázek 3.)

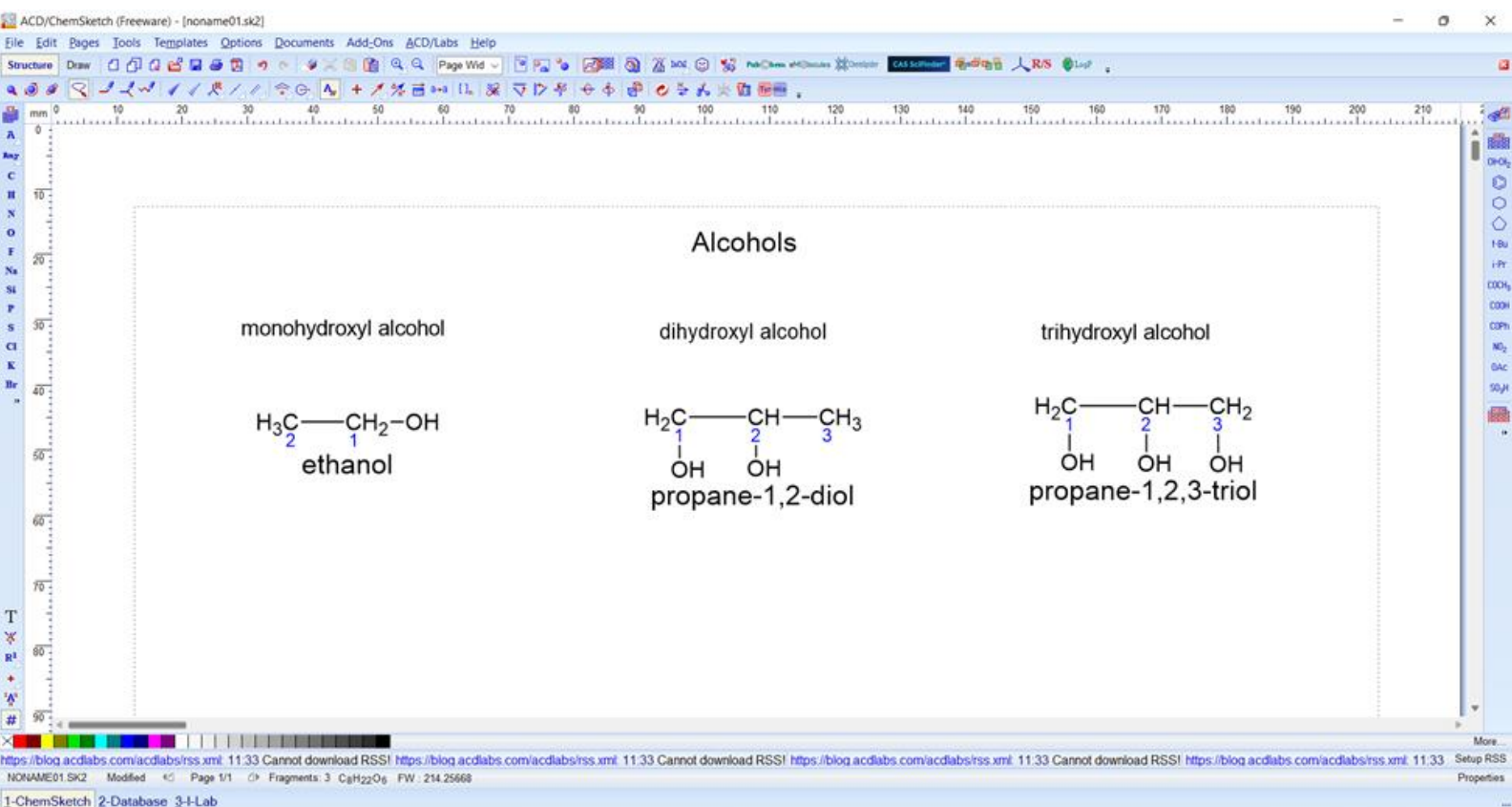
- a) postup pro generování názvu molekul nakreslených v programu ChemSketch.
 b) struktura a příslušný název dříve nakreslených vzorců molekul alkoholu... ethanolu, propan-1,2-diolu a propan-1,2,3-triolu.

KROK 4.

Chcete-li očíslovat atomy uhlíku v sekvenci uhlovodíků, musíte vybrat celou strukturu alkoholu  a poté kliknout na tlačítko # (Manual Numbering) (Obrázek 4 a), aby se zobrazilo okno Manual Numbering, a poté kliknout na tlačítko OK. (Obrázek 4 b) Poznámka: Číslování uhlovodíkového řetězce začíná od atomu uhlíku, který je nejbližší hydroxylové skupině!



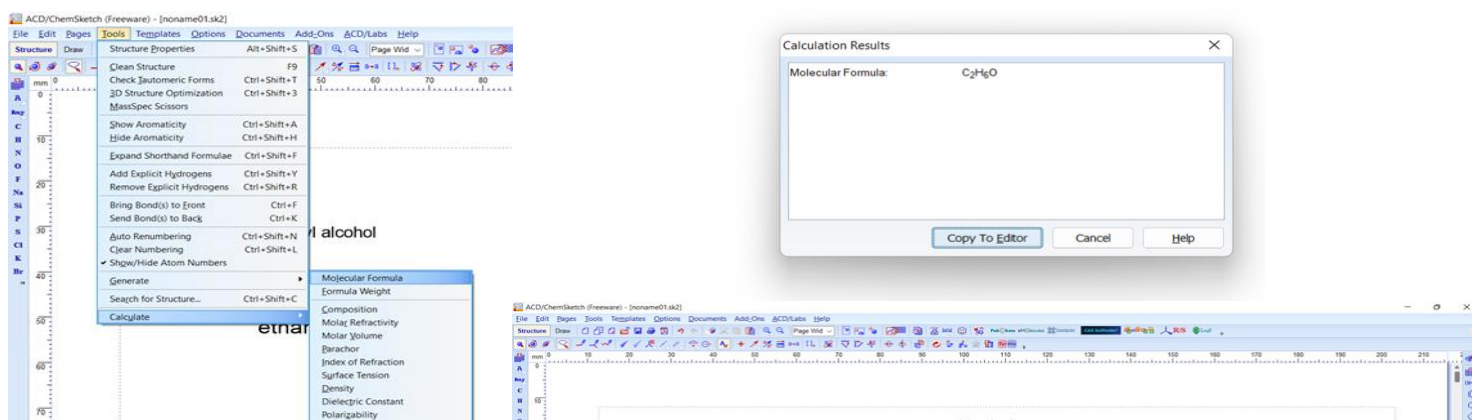
(Obrázek 4. a,b,c) číslování atomů uhlíku v uhlovodíkovém řetězci ethanolu



(Obrázek 5.) - Číslování atomů uhlíku v uhlovodíkovém řetězci ethanolu, propan-1,2-diolu a propan-1,2,3-triolu

KROK 5.


Molekulový vzorec struktury určíme pomocí Tools - Calculate - Molecular Formula (Obrázek 6 a), načez se zobrazí okno Calculation Results (Výsledky výpočtu). (Obrázek 6 b) Aby se molekulový vzorec objevil na pracovní ploše, je třeba kliknout na Kopírovat do editoru.

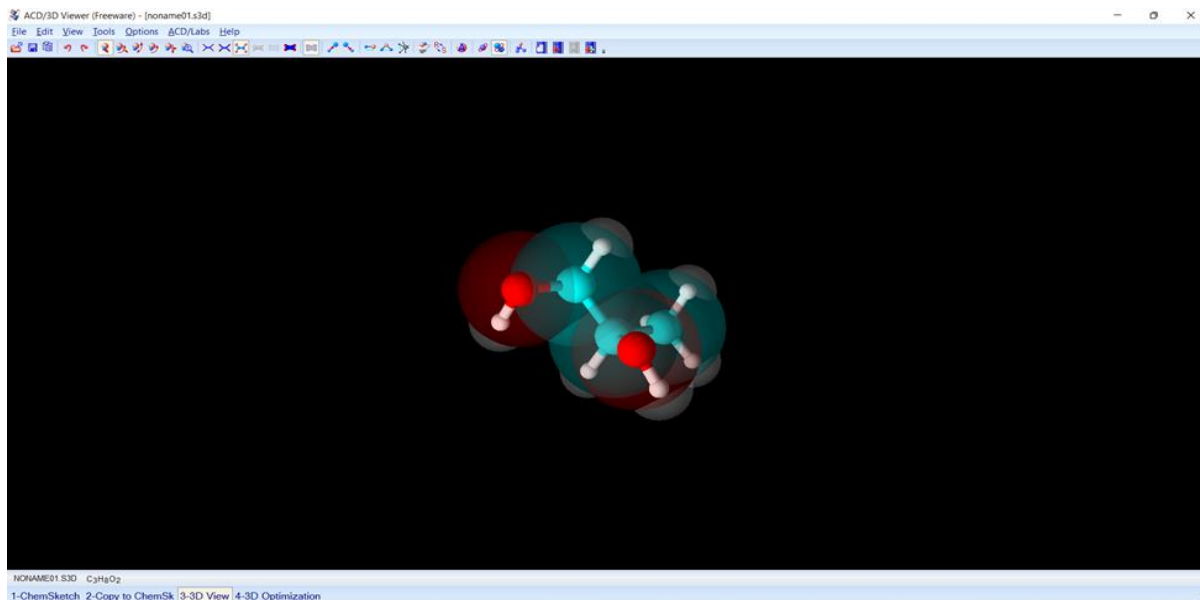


(Obrázek 6.) - sekvence akcí pro zobrazení molekulových vzorců etanolu a); okno s molekulovým vzorcem molekuly etanolu b) okno racionálních a molekulových vzorců etanolu, propan-1,2-diolu a propan-1,2,3-triolu c)

KROK 6.

Rozpoznejte výsledný strukturní vzorec ve třech rozměrech

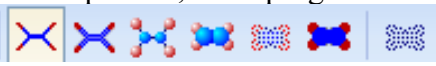
Pro zobrazení struktury ve 3D zobrazení je třeba kliknout na tlačítko , po jehož stisknutí se zobrazí nové okno s 3D zobrazením molekuly.



(Obrázek 7. - propan-1,2-diol)

Zkuste použít všechny možnosti otáčení, přesouvání a výběru na horním panelu nástrojů:



, a poté zobrazte molekulu každým ze způsobů, které program nabízí, a možnosti jsou zobrazeny také na panelu nástrojů: 

Kliknutím na některou z možností se změní způsob zobrazení molekuly propan-1,2-diolu. Pro automatické otáčení molekuly klikněte na ikonu .

Pro automatickou průběžnou změnu z jednoho režimu zobrazení molekuly na jiný s rotací klikněte na ikonu .

1.4. Příklady úloh pro zpracování obsahu výuky

- 1) Napište vzorec alkoholu hexan-2-ol. Po jeho nakreslení proveďte následující kroky:
 - zobrazte všechny části posloupnosti, a to vhodným postupem, nikoli pouze první a poslední člen;
 - proveďte očíslování posloupnosti (přičemž je třeba dávat pozor, z které strany číslování začíná);

- pojmenujte alkohol;
- určete jeho molekulový vzorec;
- vytvořte 3D zobrazení.
- využijte dovednosti získané v programu ChemSketch, přidejte ke třetímu atomu uhlíku ve struktuře hexan-2-olu další hydroxylovou skupinu. Strukturu pojmenujte.
- přidejte dvojnou vazbu mezi třetí a čtvrtý atom uhlíku ve struktuře alkoholu hexan-2-ol. Pojmenujte strukturu.

2) Prozkoumejte online použití (metanolu) metylalkoholu v každodenním životě. Nakreslete molekulu metanolu v programu ChemSketch. Zapište si do sešitu a počítače uplatnění této molekuly, její kladné a záporné vlastnosti v každodenním životě. Nakreslete 3D zobrazení metanolu (methylalkoholu) v programu ChemSketch s využitím následujících nástrojů. Optimalizovanou 2D a 3D strukturu těchto molekul uložte do počítače.

1.5. Příklady hodnotících úloh pro žáky

Napište vzorec alkoholu hexan-2-ol, hex-5-en-3-ol. Po jeho nakreslení proveďte následující kroky:

- zobrazte všechny části posloupnosti, a to vhodným postupem, nikoli pouze první a poslední člen;
- proveďte očíslování posloupnosti (přičemž je třeba dávat pozor, z které strany číslování začíná);
- pojmenujte alkohol;
- určít jeho molekulový vzorec;

LITERATURA:

ACD/ChemSketch, verze 11.0 pro Microsoft Windows, Výukový program Kreslení chemických struktur a grafických obrázků.

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

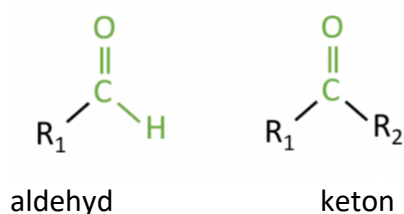
ALDEHYDY A KETONY

1.) ZPRACOVÁNÍ

Vyučovací jednotka: Kyslíkaté deriváty organických sloučenin
Název jednotky: Aldehydy a ketony
Odhadovaný počet hodin: 2

1.1. Teoretický úvod

Aldehydy a ketony jsou organické sloučeniny, které mají karbonylovou funkční skupinu (C=O). Pokud je karbonylová skupina situována na konci řetězce, je sloučeninou aldehyd a pokud je umístěna uprostřed řetězce, je to keton.



Atom kyslíku v karbonylové skupině je mnohem elektronegativnější než atom uhlíku. Karbonylová skupina je tedy polární povahy.

Systém nomenklatury IUPAC přiřazuje aldehydům charakteristickou příponu -al.

Charakteristická přípona přiřazená ketonům je -on. Poloha karbonylové skupiny je obvykle dána číslem umístění.

Oxidací primárních alkoholů vznikají aldehydy a oxidací sekundárních alkoholů ketony.

Aldehydy lze snadno oxidovat za vzniku karboxylových kyselin. Ketony jsou velmi odolné vůči oxidaci.

K rozlišení mezi aldehydem a ketonem lze použít slabá oxidační činidla jako Fehlingovo a Tollensovo činidlo.

Aldehydy a ketony se používají v chemickém průmyslu jako rozpouštědla, výchozí materiály nebo činidla pro jiné sloučeniny. V přírodě jsou aldehydy a ketony často kombinovány s jinými funkčními skupinami, jako je vanilin, hormony nebo sacharidy. Často se používají jako éterické oleje.

1.2. Vzdělávací výstup

- nakreslit různé příklady acyklických a cyklických aldehydů a ketonů
- ukázat strukturu aldehydů a ketonů pomocí molekulárních, strukturních, kondenzovaných strukturních vzorců a pomlček
- pojmenovat aldehydy a ketony podle nomenklatury IUPAC nebo vygenerovat název v programu ChemSketch
- určit molekulární vzorec dříve nakreslených aldehydů a ketonů v programu ChemSketch
- zobrazit 3D modely molekul aldehydů a ketonů nakreslené ve 2D pomocí ChemSketch a otočit je
- zlepšit zobrazení struktury aldehydů a ketonů pomocí funkce Clean Structure
- uložit do počítače dvourozměrnou a trojrozměrnou strukturu aldehydů a ketonů
- zlepšit digitální dovednosti pomocí webového prohlížeče k nalezení dalších příkladů aldehydů a ketonů

1.3. Instrukce pro používání programu ChemSketch

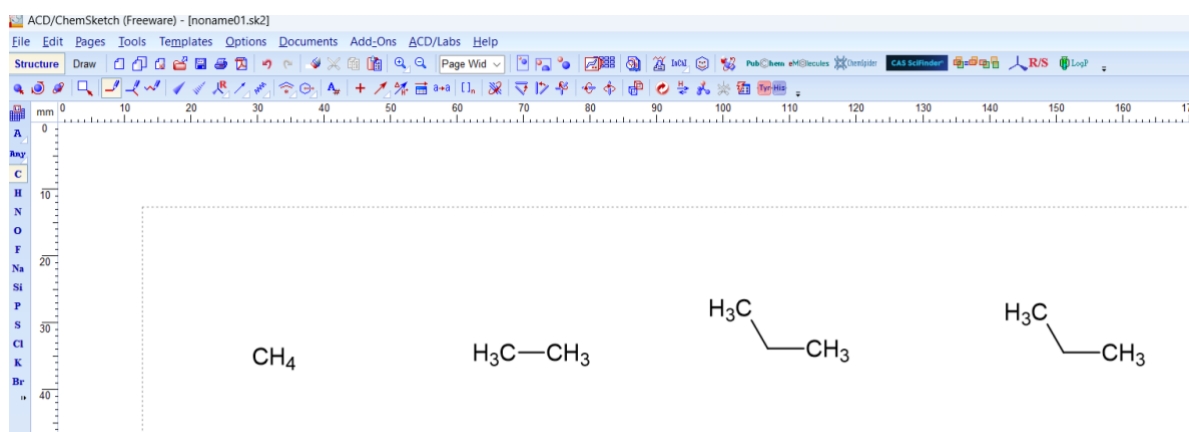
Příklad 1

Methanal, ethanal, propanal, propan-2-on

Nakreslete molekuly methanal, ethanal, propanal a propan-2-onu, abyste viděli rozdíl mezi aldehydovou a ketonovou skupinou C=O. Vyčistěte strukturu a generujte názvy. Proveďte 3D optimalizaci a vytvořte 3D modely. Otočte je.

KROK 1

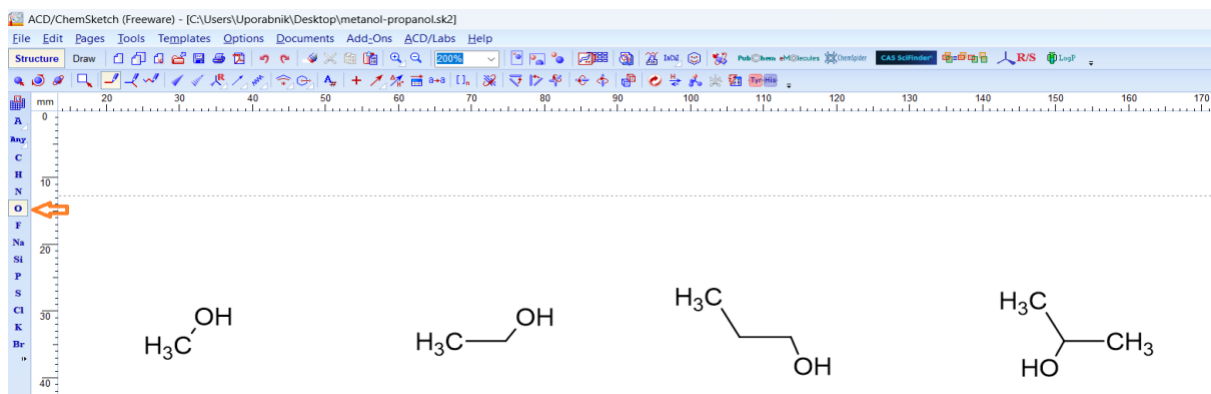
Nakreslete metan, etan a dvě molekuly propanu, jak je znázorněno na obrázku 1. Použijte režim Structure a možnost DrawNormal. Klikněte na prázdnou oblast a objeví se CH₄. Kliknutím na tento atom uhlíku se vytvoří jednoduchá vazba uhlík-uhlík. Podržením klávesy Ctrl a kliknutím na každý následující atom uhlíku je možné nakreslit uhlovodíkový řetězec tří atomů uhlíku.



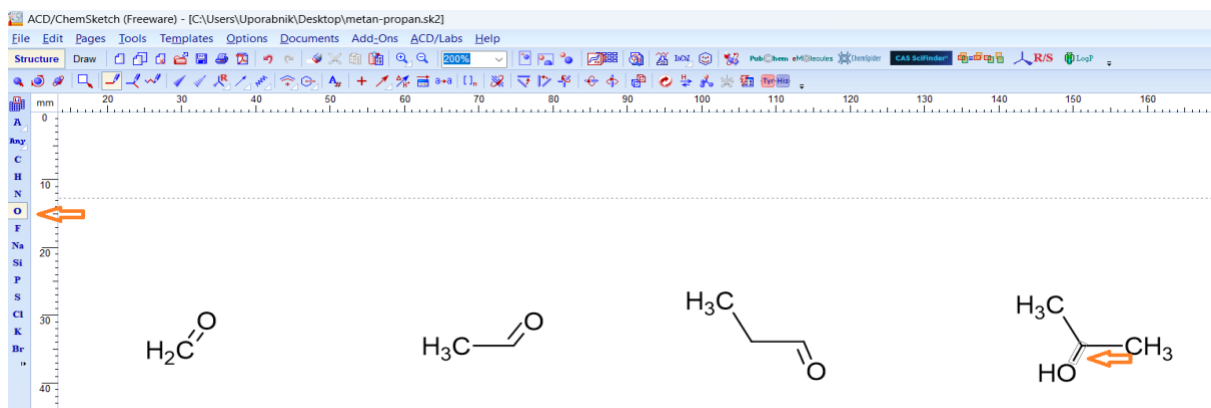
Obrázek 1. Struktura methanu, ethanu, propanu

KROK 2

Klikněte na O (kyslík) na levém panelu nástrojů *Toolbar*. Klikněte na první atom C v metanu, etanu a prvním propanu a táhněte myš. Objeví se OH skupina (obrázek 2a). Klikněte na druhý atom C v druhé molekule propanu a tažením myši vytvořte OH skupinu. Klikněte na vazbu C-OH v každé struktuře. Skupina C=O se zobrazí, jak je znázorněno na obrázku 2b.



a

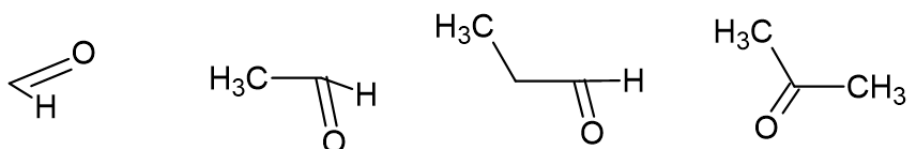
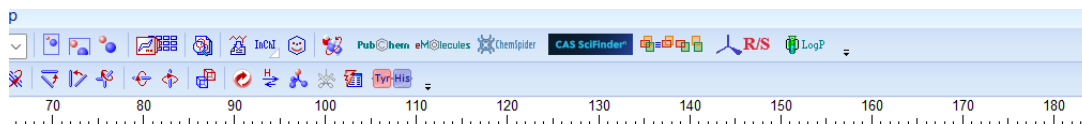


b

Obrázek 2. a) vytváření C-OH vazby, b) vytváření C=O vazby

KROK 3

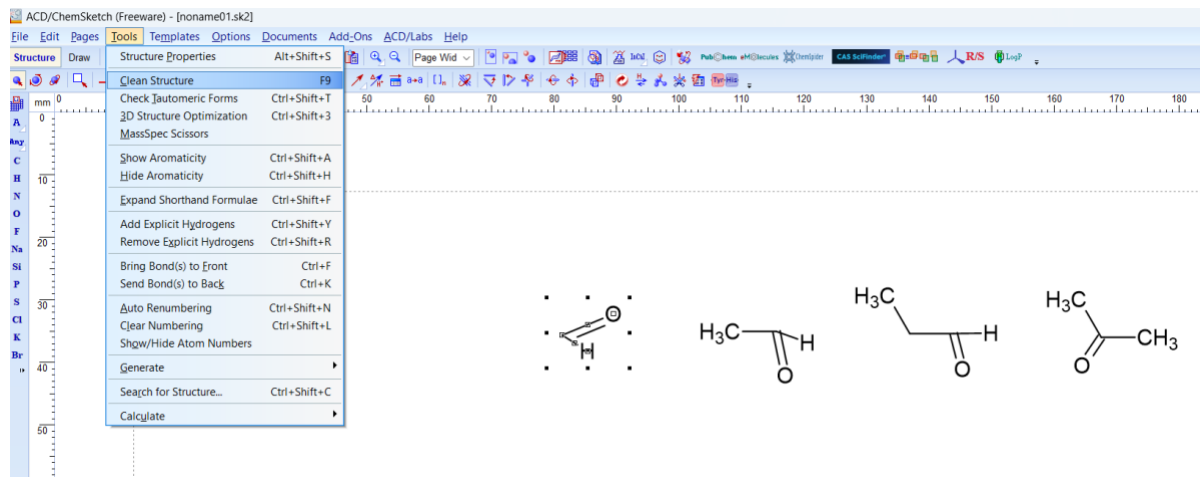
Klikněte na atom H na levém panelu nástrojů *Toolbar* a klikněte na atom C skupiny C=O a tažením myši vytvořte skupinu CHO v prvních třech strukturách (obrázek 3).



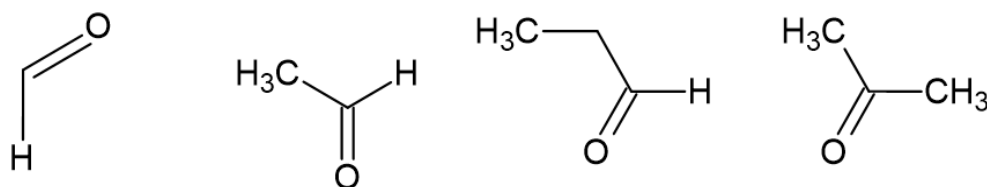
Obrázek 3. tvoření CHO skupiny

KROK 4

Vyberte první strukturu pomocí *Lasso* a poté použijte volbu *Nástroj* a vyberte *Clean Structure* (obrázek 4a). Udělejte totéž se všemi strukturami, abyste získali struktury na obrázku 4b.



a

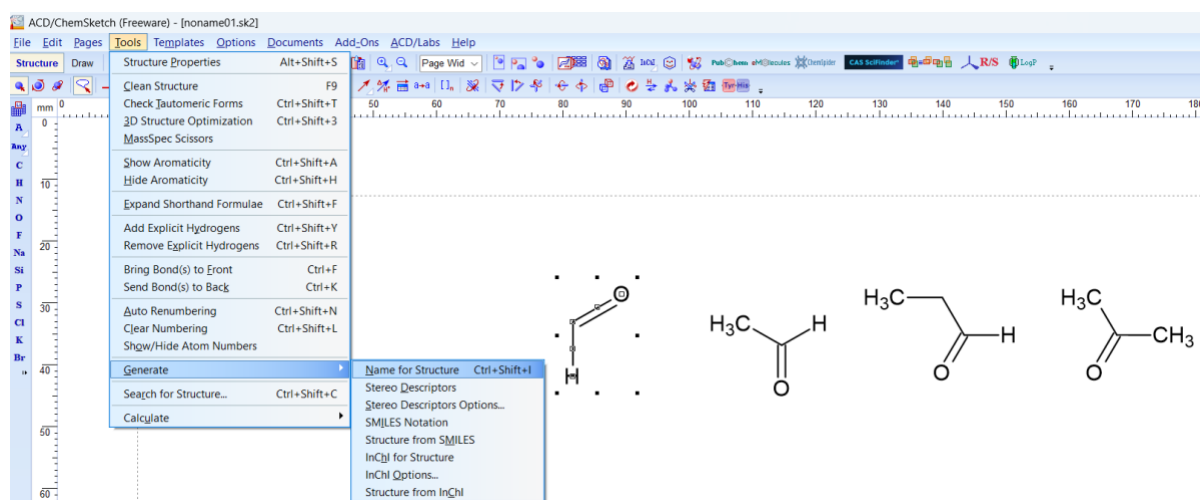


b

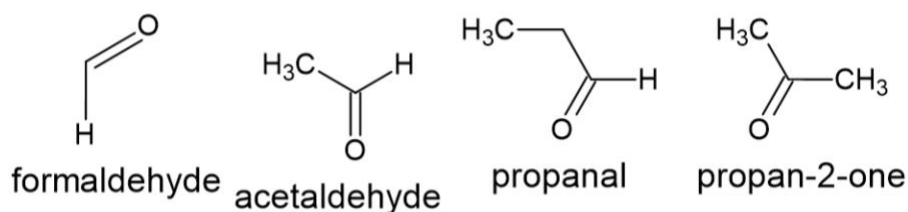
Obrázek 4. a) jednotlivé struktury, b) upravená struktura.

KROK 5

Použijte *Lasso* a vyberte první nakreslenou strukturu. Klikněte na nabídku *Tools*, vyberte *Generate* a poté *Name for Structure*, jak je znázorněno na obrázku 5a. Udělejte totéž se všemi strukturami, abyste získali jejich jména (obrázek 5b).



a

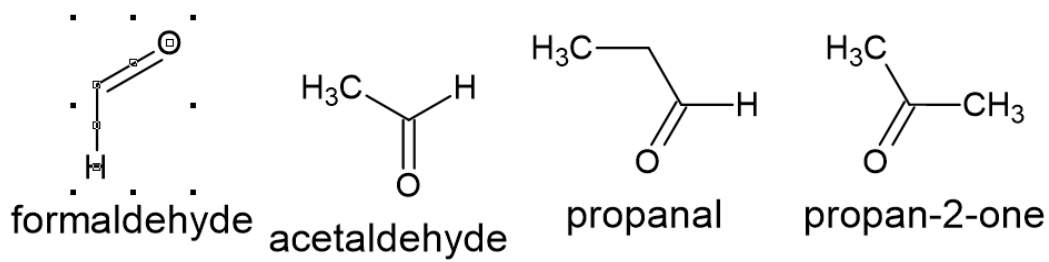
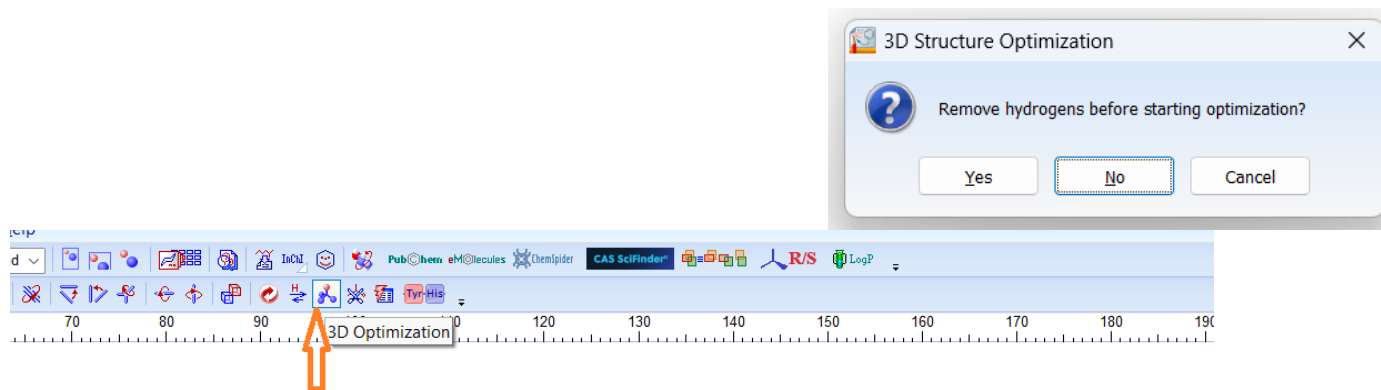


b

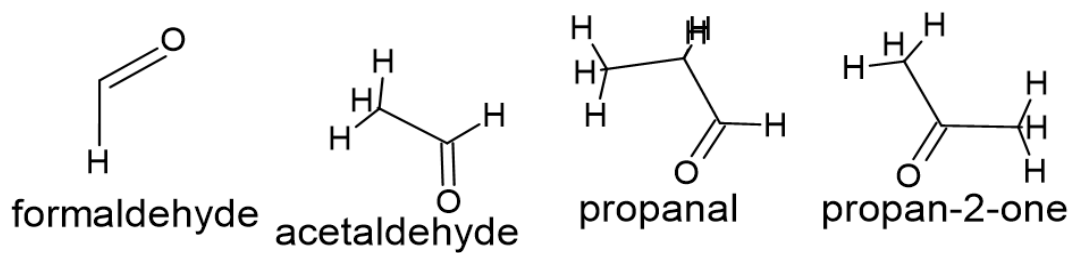
Obrázek 5. a) název struktury, b) pojmenování struktury

KROK 6

Pro 3D optimalizaci vyberte každou z nakreslených struktur a použijte ikonu 3D optimalizace, jak je znázorněno na obrázku 6a. Zobrazí se okno na obrázku 6b. Vyberte ne. Obrázek 6c ukazuje struktury po 3D optimalizaci.



b

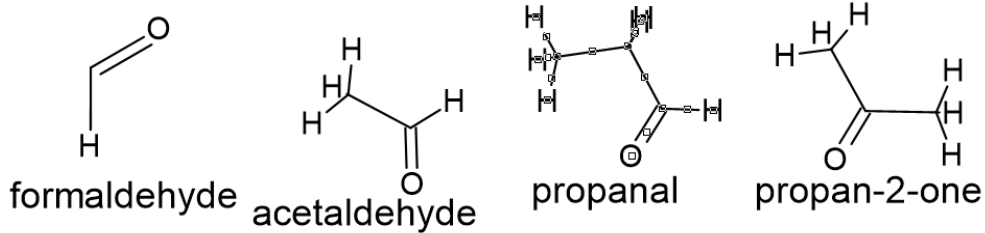
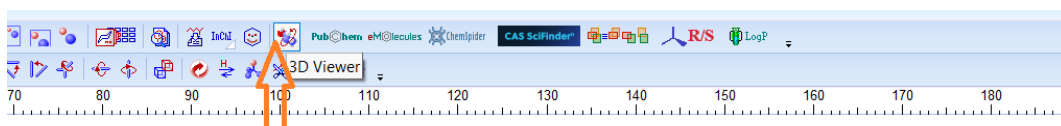


c

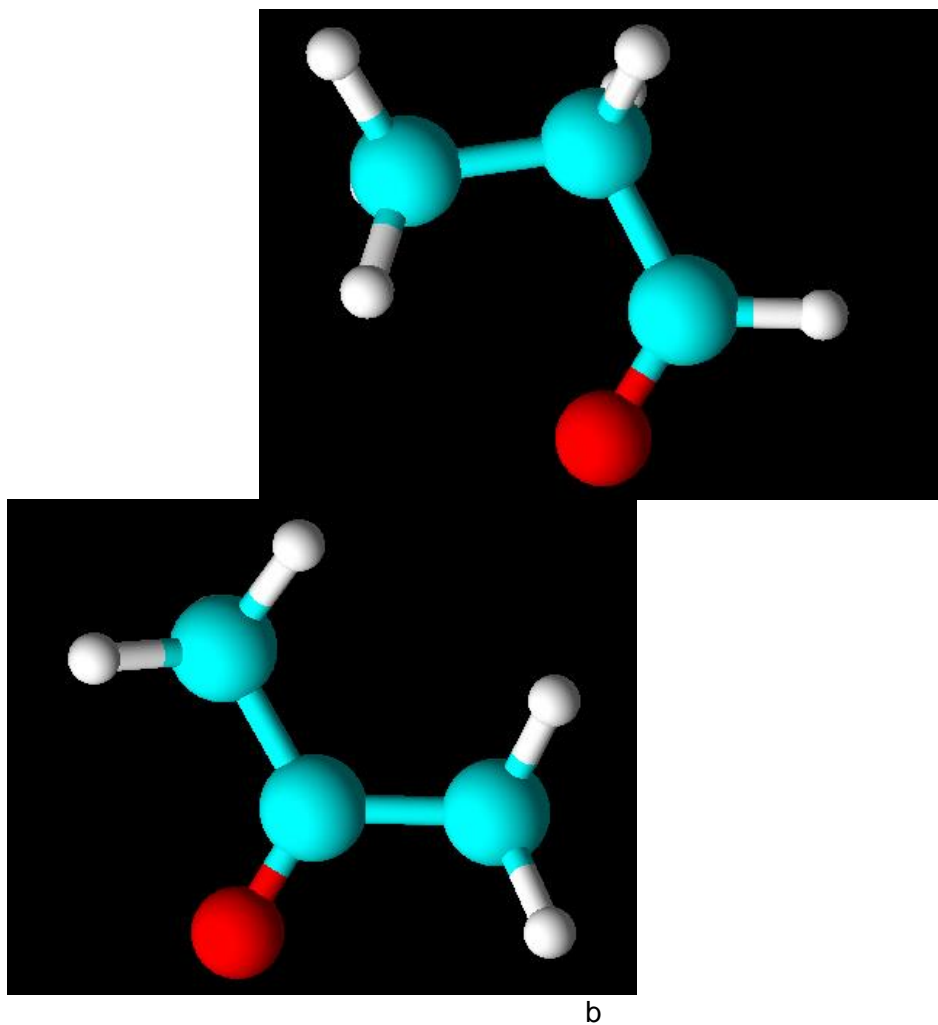
Obrázek 6. a) 3D optimalizace vybrané struktury, b) zobrazené okno, c) 3D optimalizované struktury metanal, ethanal, propanal a propan-2-onu

KROK 7

Vyberte nejprve propanal a poté propan-2-on. Použijte tlačítko *3D Viewer*, jak je znázorněno na obrázku 7a. Objeví se nové okno s 3D pohledem. Můžete otočit strukturu a změnit její vzhled, abyste viděli rozdíl mezi aldehydovou a ketonovou karbonylovou skupinou.



a



c

Obrázek 7. a) Tvorba 3D modelu

b) 3D Model molekuly propanalu, c) 3D Model 3D Model molekuly propan-2-on

KROK 8

Uložte strukturu molekuly a 3D modely kliknutím na Soubor (File) a poté na Uložit jako (Save as).

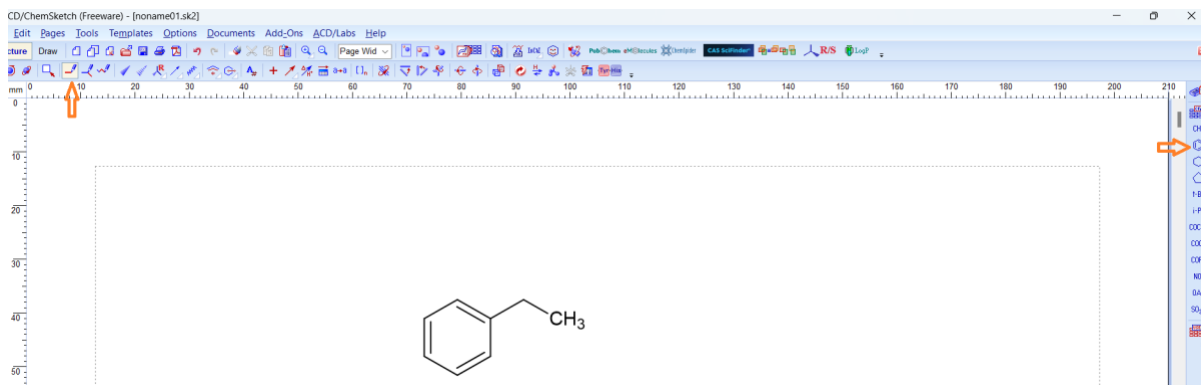
Příklad 2

Nakreslete molekulu fenylethanalu. Fenylethanal voní jako šerík a hyacint. Vyčistěte strukturu, vytvořte název a molekulární vzorec a zobrazte jej ve třech rozměrech.

KROK 1


Na pravé straně panelu nástrojů (*Radicals Toolbar*) a klikněte na benzen a poté klikněte na prázdnou oblast. Objeví se struktura benzenu. Kliknutím na libovolný atom uhlíku vytvoříte

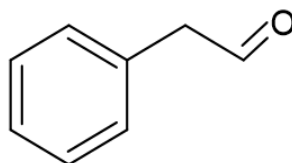
skupinu CH₃, dalším kliknutím vytvoříte ethylovou skupinu. Nakreslená struktura je ethylbenzen, jak je znázorněno na obrázku 1.



Obrázek 1. Ethylbenzen.

KROK 2

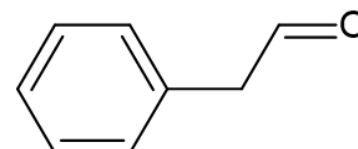
Klikněte na O (kyslík) na levém panelu nástrojů *Toolbar*. Klikněte na *Draw Normal* () , a poté klikněte na poslední atom uhlíku a přidejte vazbu. Kliknutím na vazbu C-OH získáte karbonylovou skupinu jako na obrázku 2.



Obrázek 2. Vznikl benzen s ethylovou a karbonylovou skupinou.

KROK 3

Vyberte první strukturu pomocí *Lasso* a poté použijte volbu *Nástroj* a vyberte *Clean Structure* (obrázek 3a), abyste získali vyčištěnou strukturu na obrázku 3b.



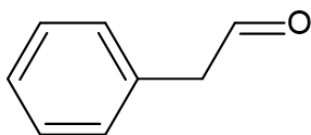
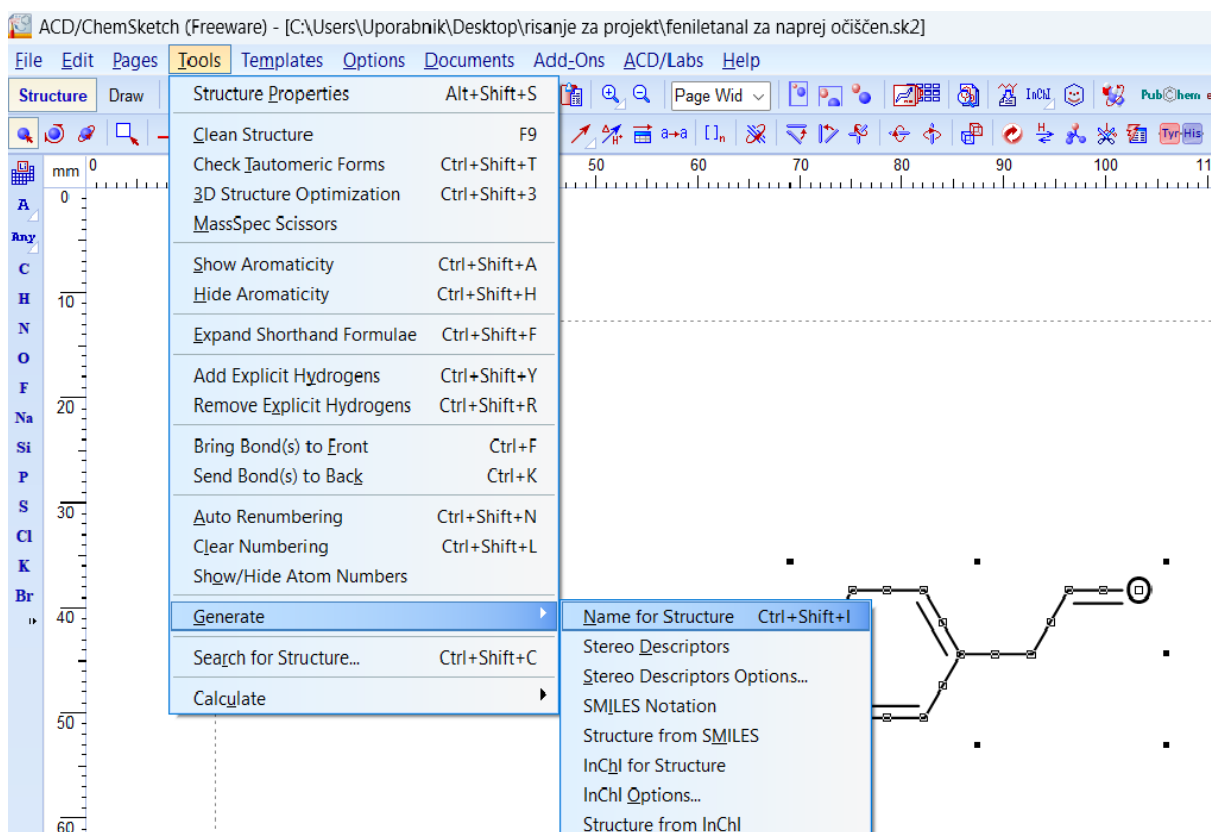
a

b

Obrázek 3. a) původní struktura, b) upravená struktura.

KROK 4

Použijte *Lasso* a vyberte první nakreslenou strukturu. Klikněte na nabídku *Tools*, vyberte *Generate* a poté *Name for Structure*, jak je znázorněno na obrázku 4a a 4b.



phenylacetaldehyde

a

b

Obrázek 4. a) Vytvoření názvu pro strukturu, b) nakreslená a pojmenovaná struktura.

KROK 5

Použijte laso a vyberte *Drawn structure*. Klikněte na nabídku *Tools*, vyberte možnost *Calculate* a poté klikněte na *Molecular Formula* (obrázek 5a). Objeví se nové okno s molekulárním vzorcem. Zvolte *Copy to Editor* (obrázek 5b), abyste získali molekulární vzorec, jak je znázorněno na obrázku 5c.

ACD/ChemSketch (Freeware) - [C:\Users\Uporabnik\Desktop\risanje za projekt\feniletanal za naprej očiščen.sk2]

File Edit Pages Tools Templates Options Documents Add-Ons ACD/Labs Help

Structure Draw Structure Properties Alt+Shift+S

mm 0

0 10 20 30 40 50 60

50 60 70 80 90 100 110

Clean Structure F9
 Check Automeric Forms Ctrl+Shift+T
 3D Structure Optimization Ctrl+Shift+3
 MassSpec Scissors
 Show Aromaticity Ctrl+Shift+A
 Hide Aromaticity Ctrl+Shift+H
 Expand Shorthand Formulae Ctrl+Shift+F
 Add Explicit Hydrogens Ctrl+Shift+Y
 Remove Explicit Hydrogens Ctrl+Shift+R
 Bring Bond(s) to Front Ctrl+F
 Send Bond(s) to Back Ctrl+K
 Auto Renumbering Ctrl+Shift+N
 Clear Numbering Ctrl+Shift+L
 Show/Hide Atom Numbers
 Generate
 Search for Structure... Ctrl+Shift+C
 Calculate

Molecular Formula
 Formula Weight
 Composition
 Molar Refractivity
 Molar Volume
 Parachor
 Index of Refraction
 Surface Tension

phenylacetaldehyde

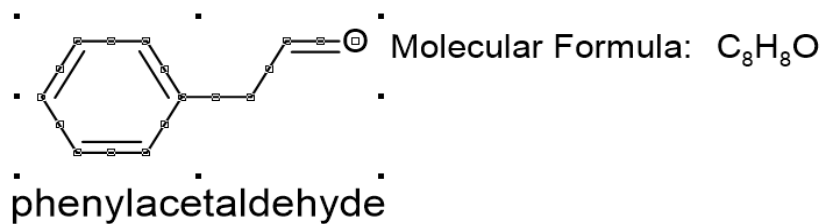
Calculation Results

Molecular Formula: C₈H₈O

Copy To Editor Cancel Help

a

b

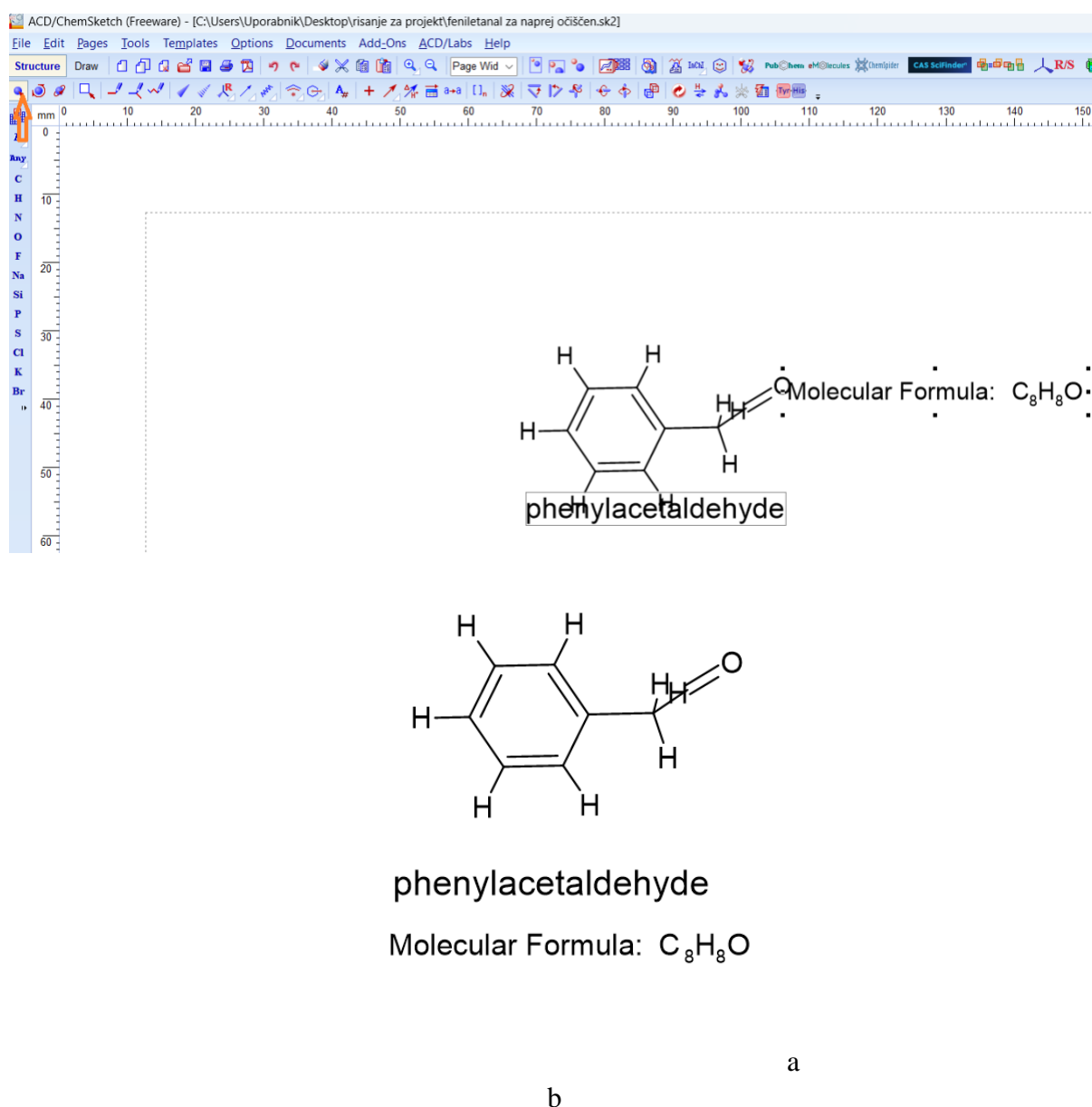


c

Obrázek 5. a) Vytvoření molekulárního vzorce, b) Zobrazení molekulárního vzorce, c) Zobrazení molekulárního vzorce.

KROK 6

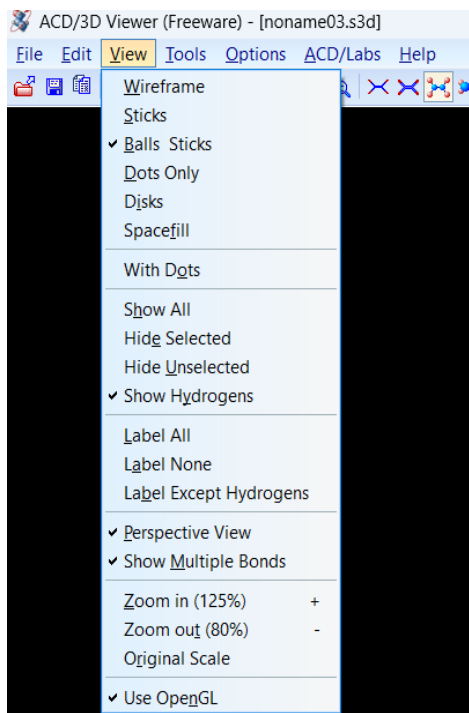
Pro 3D optimalizaci vyberte nakreslenou strukturu pomocí *Lasso* a poté klikněte na ikonu 3D optimalizace jako u příkladu 1. Pro přesun názvu a molekulárního vzorce použijte tlačítko *Select/Move* a pouze přesuňte prostor s názvem a vzorcem, jak je znázorněno na Obrázcích 6a a 6b.



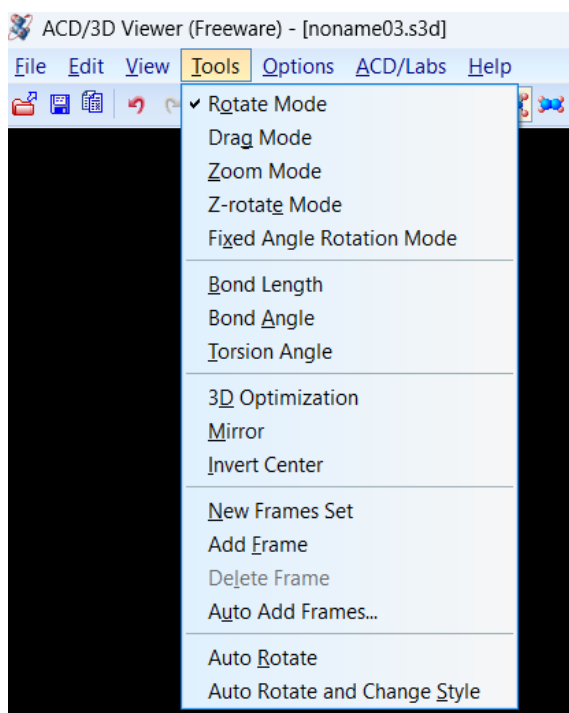
Obrázek 6. a) a b) Název a molekulární vzorec z 3D optimalizovaného vzorce.

KROK 7

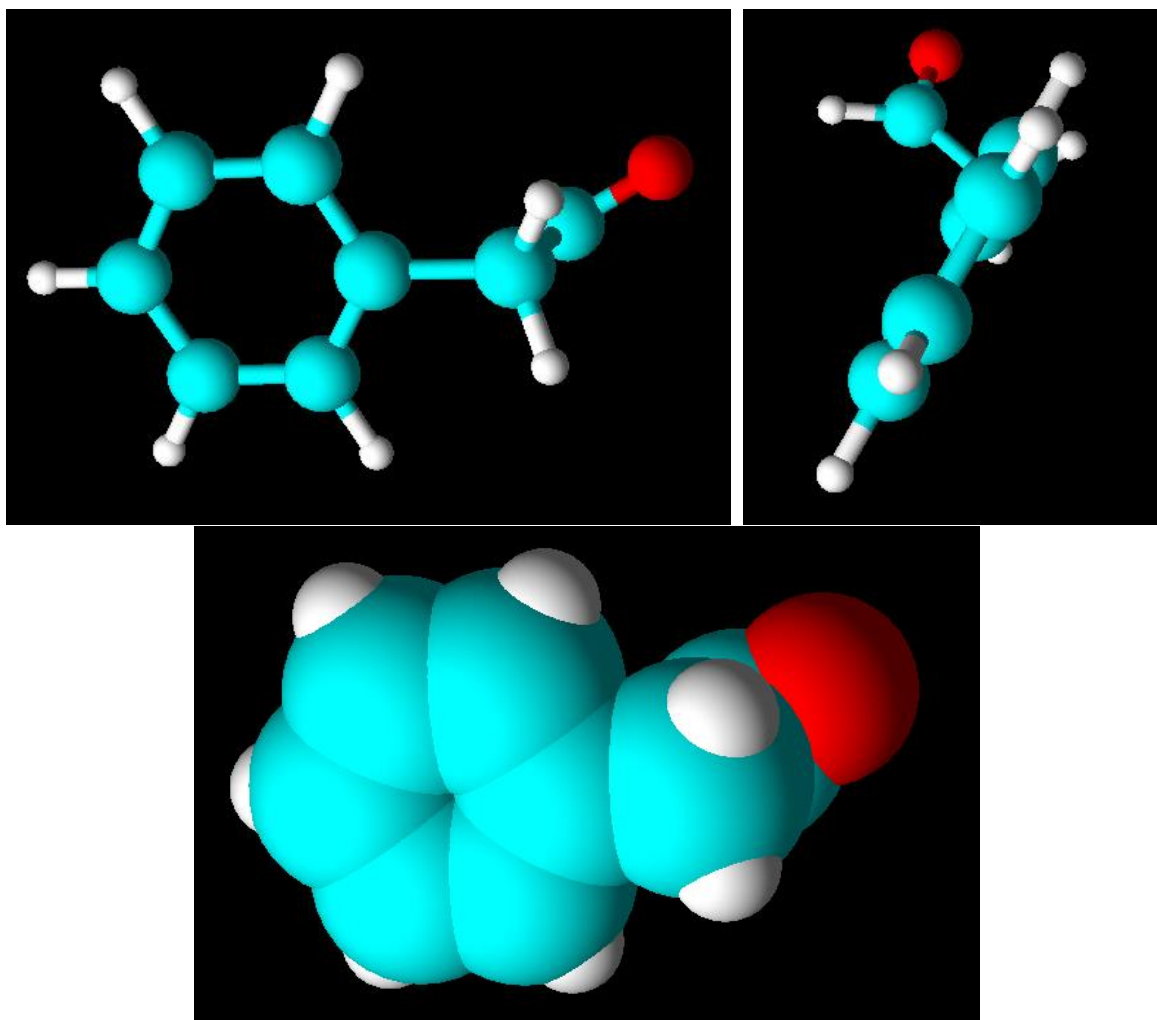
Přeneste strukturu do 3D prohlížeče (*Viewer*). Otočte strukturu a použijte různé způsoby zobrazení molekuly fenylethanalu. Některé z nich jsou znázorněny na obrázcích 7a-7e.



a



b



e

c

d

Obrázek 7. a-e) Různé způsoby zobrazení modelů fenylethanalu.

KROK 8

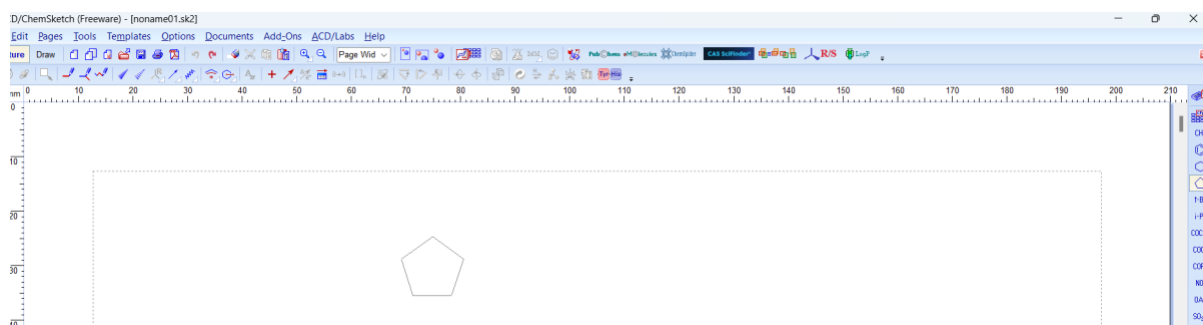
Uložte strukturu molekuly a 3D modely kliknutím na Soubor (File) a poté na Uložit jako (Save as).

Příklad 3

Nakreslete molekulu cyklopentan-1,3-dionu. Zobrazte jej pomocí skeletárního, strukturálního a molekulárního vzorce.

KROK 1

Na pravé straně panelu nástrojů (*Radicals Toolbar*) klikněte na cyklopentan a poté klikněte na prázdnou oblast. Struktura cyklopentanu bude vypadat jako na obrázku 1.

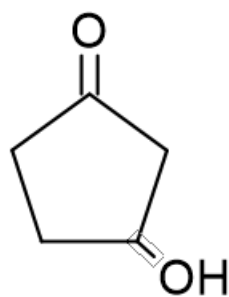
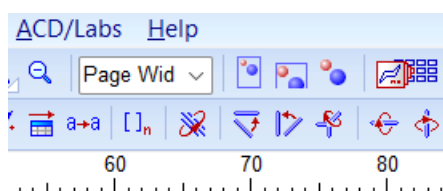
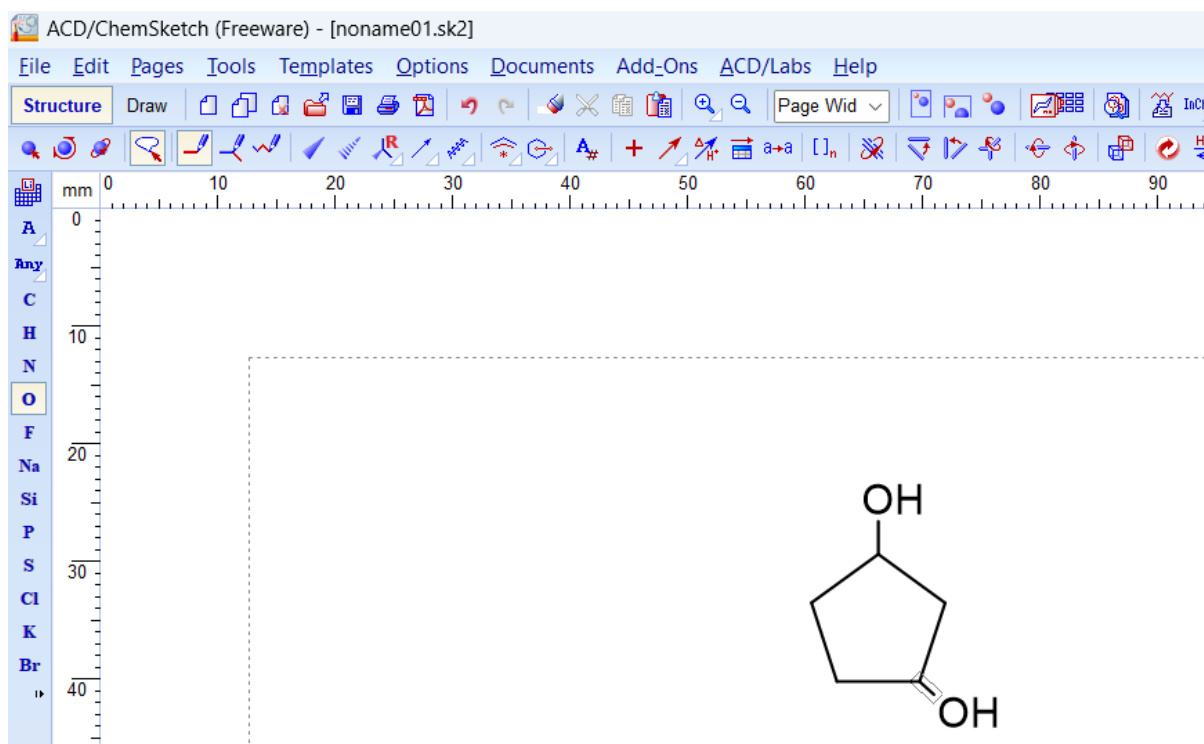


Obrázek 1: cyclopentan

KROK 2

Vyberte O na levém panelu nástrojů a vytvořte vazbu na libovolném atomu uhlíku a totéž udělejte na třetím atomu uhlíku pomocí myši (obrázek 2a).

Kliknutím na vazby C-OH získáte karboxylovou skupinu (obrázek 2b).



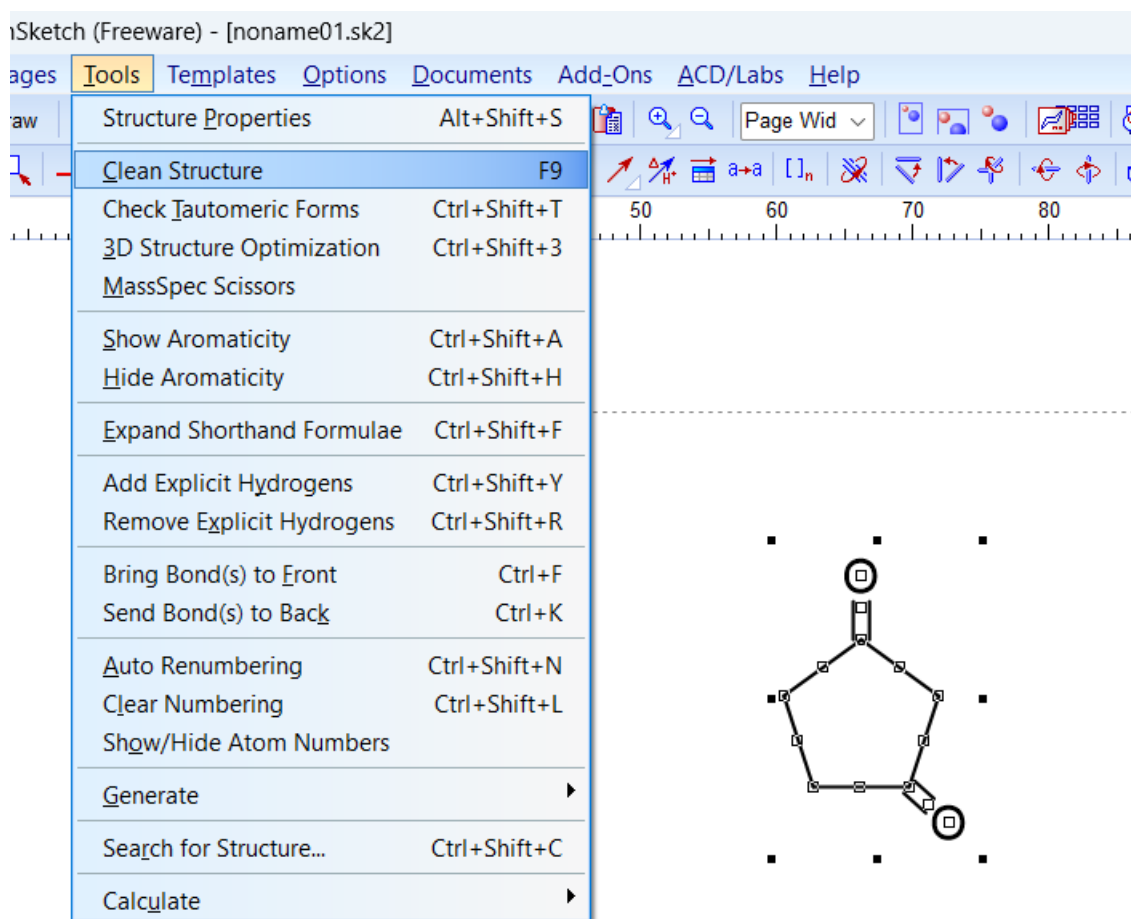
b

a

Obrázek 2. a) vytvoření C-OH vazby, b) vytvoření C=O vazby

KROK 3

Upravte strukturu výběrem struktury pomocí *Lasso* a kliknutím na možnost *Tools Clean Structure* (obrázek 3a) nebo pomocí ikony *Clean Structure*. Skeletní vzorec cyklopentan-1,3-dionu bude vypadat jako na obrázku 3b.



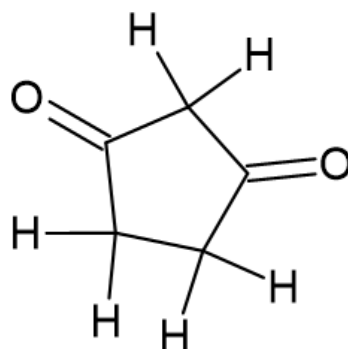
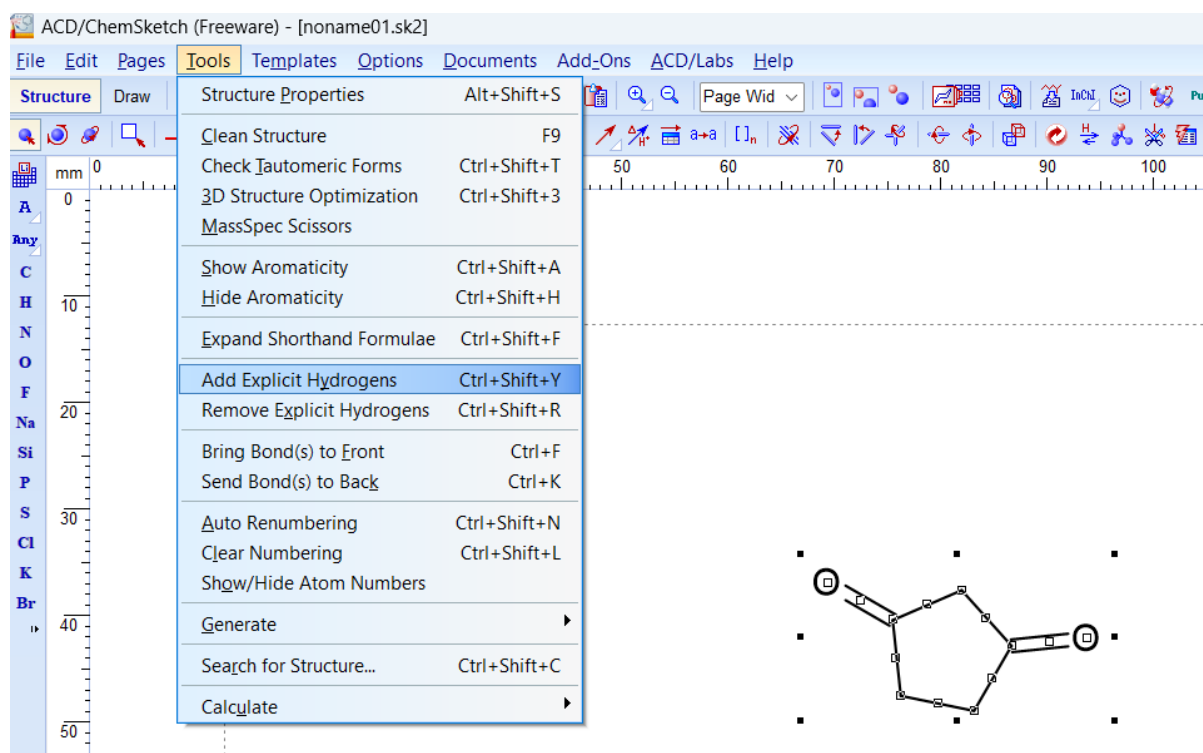
a

b

Obrázek 3. a) Struktura cyklopentan-1,3-dionu, b) Upravená struktura cyklopentan-1,3-dionu.

KROK 4

Chcete-li zobrazit nakreslený skeletární vzorec se strukturním vzorcem, klikněte na *Tools* a vyberte možnost *Add Explicit Hydrogens* (obrázky 4a a 4b). Vyberte strukturu pomocí *Lasso*, klikněte na *Tools* a poté *Structure Properties* (obrázek 4c). Objeví se nové okno. Zaškrtněte *All* v části *Show Carbons* a poté klikněte na *Apply*, jak je znázorněno na obrázku 4d, abyste získali strukturní vzorec (obrázek 4e).



a

b

ACD/ChemSketch (Freeware) - [noname01.sk2]

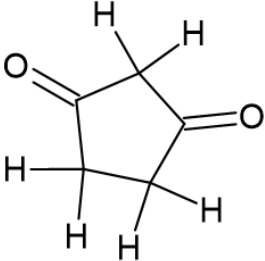
File Edit Pages Tools Templates Options Documents Add_Ons ACD/Labs Help

Structure Draw Structure Properties Alt+Shift+S

mm 0 10 20 30 40 50

Structure Properties menu:

- Clean Structure F9
- Check Automeric Forms Ctrl+Shift+T
- 3D Structure Optimization Ctrl+Shift+3
- MassSpec Scissors
- Show Aromaticity Ctrl+Shift+A
- Hide Aromaticity Ctrl+Shift+H
- Expand Shorthand Formulae Ctrl+Shift+F
- Add Explicit Hydrogens Ctrl+Shift+Y
- Remove Explicit Hydrogens Ctrl+Shift+R
- Bring Bond(s) to Front Ctrl+F
- Send Bond(s) to Back Ctrl+K
- Auto Renumbering Ctrl+Shift+N
- Clear Numbering Ctrl+Shift+L
- Show/Hide Atom Numbers
- Generate
- Search for Structure... Ctrl+Shift+C
- Calculate



Properties ? X

Current Style AUTOSAVE Save Del

Markush Biosequence Coloration

Common Atom Bond

Show Carbons

All Hide Zero Charge

Terminal Cross Out Invalid Atom

Size Calculation

Atom Symbol Size 10

Auto Bond Length 7 mm

Atom Style Arial

Bond Style 0.7 pt

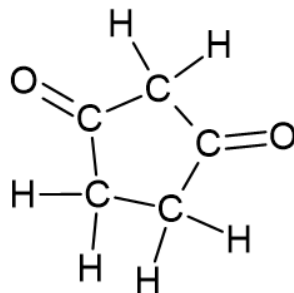
B

Apply Set Default

Update From Restore Default

c

d

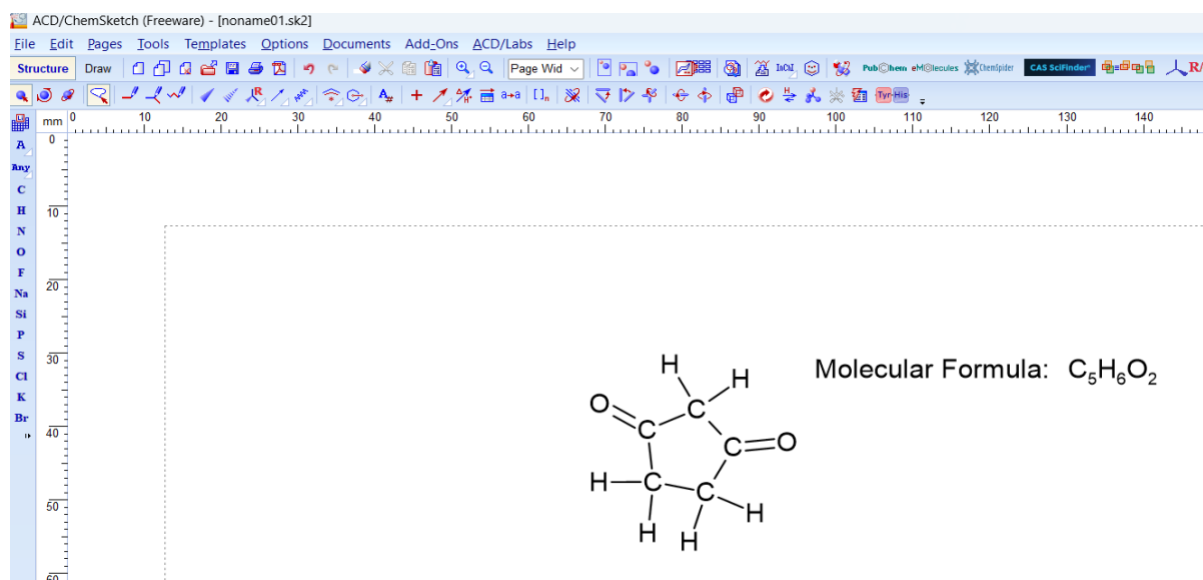


e

Obrázek 4. a) Přidání expl. vodíků, b) Přidány expl.vodíky, c) Změna vlastností struktury, d) Zobrazení uhlíků pro vytvoření strukturního vzorce, e) Strukturní vzorec pentan-1,3-dionu

KROK 5

Vytvořte molekulární vzorec pomocí *Tools*, *Calculate* a poté *Molecular formula* jako v příkladu 2.



Obrázek 5. Strukturní a molekulární vzorec cyklopentan-1,3-dionu

KROK 6

Přeneste strukturu do 3D prohlížeče. Otočte strukturu a použijte různé způsoby jejího zobrazení.

KROK 7

Uložte strukturu molekuly a 3D modely kliknutím na Soubor (File) a poté na Uložit jako (Save as).

1.4. Příklady úloh pro zpracování obsahu výuky

Nakreslete jeden z cis/trans izomerů citralu (3,7-dimethylocta-2,6-dienal), složky esenciálního oleje z citronové trávy.

Vyčistěte strukturu.

Vygenerujte název a určete molekulární vzorec.

Zobrazte jej v 3D prohlížeči a otočte jej.

Uložte strukturu molekuly a 3D model.

1.5. Příklady úloh pro hodnocení studentů

Nakreslete molekuly butandial a 5-methylheptan-2,4-dion.

Vyčistěte strukturu.

Vygenerujte název a určete molekulární vzorec.

Zobrazte jej v 3D prohlížeči a otočte jej.

Uložte strukturu molekuly a 3D model.

Prohledejte internet a najděte příklady aldehydů a ketonů ke kreslení, generujte názvy a molekulární vzorce v ChemSketch, zobrazte je v 3D prohlížeči.

LITERATURA

A. Smrdu: Snov in spremembe 3, II. izdaja, Jutro, 2010;

A. Smrdu: Kemijo razumem, kemijo znam 3, Naloge iz kemije za 3. letnik gimnazije, II. Izdaja, Jutro, 2020;

A. Kornhauser: Organska kemija II, 11.izdaja, DZS, 2000

M.Tišler: Sporočilnost molekul, DZS, 1998

Predmetni izpitni katalog za splošno maturo iz kemije, RIC, 2021

www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/virttxtjml/aldket1.htm

www.unacademy.com/content/cbse-class-12/study-material/chemistry/uses-of-aldehydes-and-ketones/

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

BIOMOLEKULY

1. ZPRACOVÁNÍ

Vyučovací jednotka: Biomolekuly
Název jednotky: Biomolekuly
Odhadovaný počet hodin: 2

1.1. TEORETICKÝ ÚVOD

- Biomolekuly jsou látky, které produkují a využívají organismy.
- Biomolekuly mají různou strukturu a funkce. 4 hlavní skupiny biomolekul jsou sacharidy, lipidy, proteiny a nukleové kyseliny.
- Sacharidy představují hlavní zdroj energie pro organismy.
- Lipidy mají různé funkce jako např. zdroj energie nebo výstavba biologických membrán.
- Bílkoviny mají také mnoho typů struktur a funkcí. Podílí se např. na výstavbě svalů, fungují jako protilátky, najdeme je mezi hormony a v neposlední řadě fungují jako enzymy.
- Nukleové kyseliny mají zásadní význam při přenosu genetické informace.

1.2. VÝSTUPY VZDĚLÁVÁNÍ JEDNOTLIVÝCH KAPITOL

- nakreslit různé typy monosacharidů pomocí Fischerových a Haworthových vzorců
- používat názvosloví sacharidů
- psát chemickými rovnicemi reakce sacharidů
- psát vzorce “D” a “L” optických izomerů
- uložit v chemsketch soubory

1.3. NÁVOD K POSTUPU ZÁPISU VZORCŮ

Příklad 1

Nakreslete vzorec molekuly D-glucosy pomocí Fischerova vzorce.

KROK 1

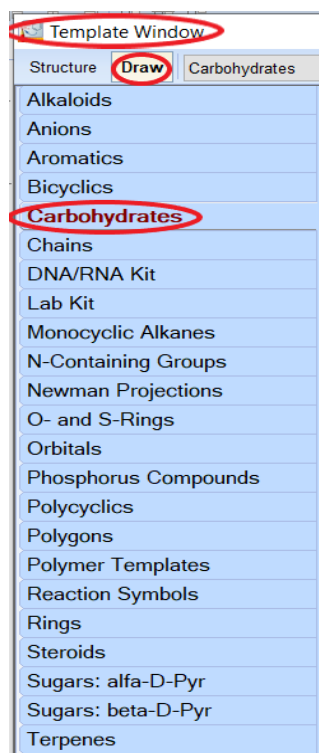
Začněte v režimu *Structure*, klikněte na *Templates* (Obrázek 1).



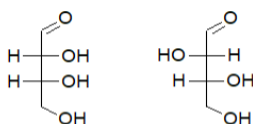
Obrázek 1. režim *structure - templates*

KROK 2

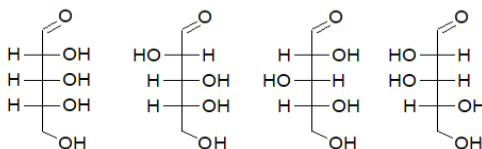
Otevřete *Template window*, režim *draw* klikněte na *carbohydrates* a označte vzorec *D-glucose* a kliknutím umístěte do otevřeného souboru.



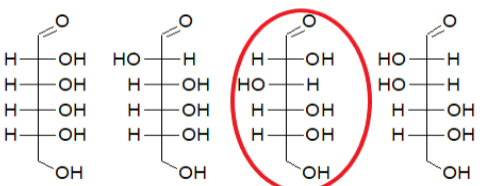
Aldoses



D-Erythrose D-Threose

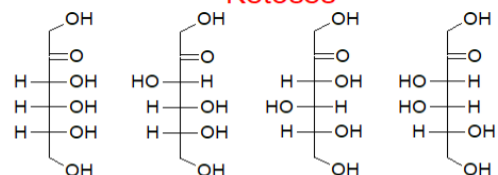


D-Ribose D-Arabinose D-Xylose D-Lyxose

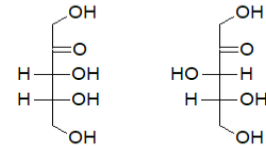


D-Allose D-Altrose D-Glucose D-Mannose

Ketoses



D-Psicose D-Fructose D-Sorbose D-Tagatose

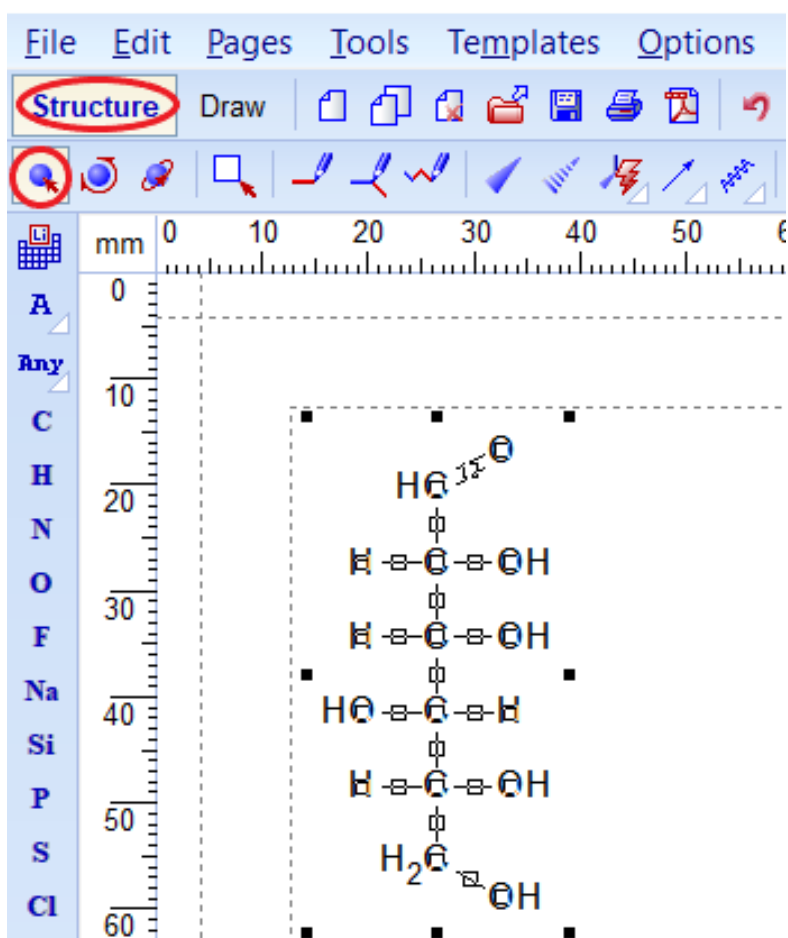


D-Ribulose D-Xylulose

Obrázek 2. Vybrat *Carbohydrates* a strukturu glukosy

KROK 3

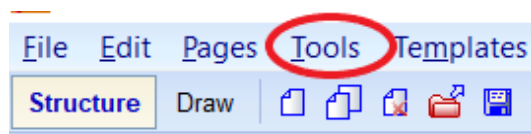
V modulu *structure* označte vzorec (**Obrázek 3**).



Obrázek 3. Označení ikony Struktury

KROK 4

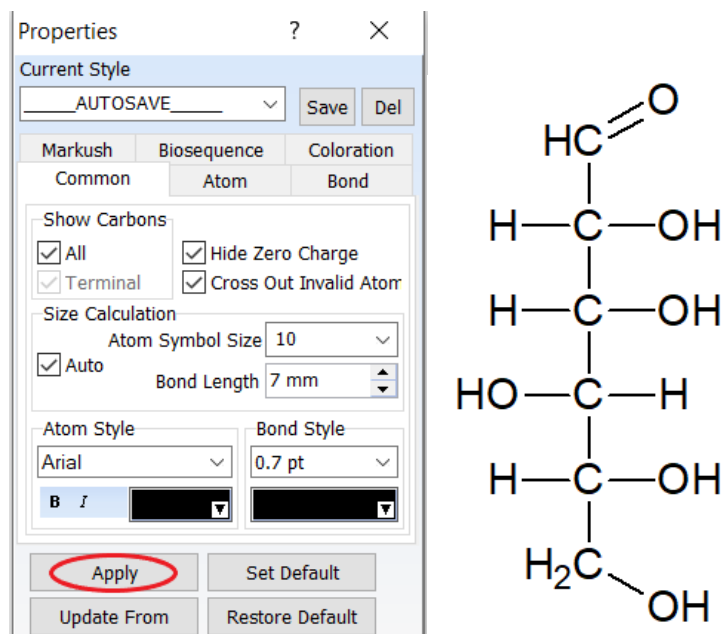
Rozbalte na liště záložku *Tools* (**Obrázek 4**) a vyberte *Structure properties*, zatrhněte *All* (**Obrázek 5**).



Obrázek 4. Označit *Tools*

KROK 5

Všechny atomy ve Fischerově projekci zobrazíte stisknutím tlačítka *Apply* (Obrázek 5).



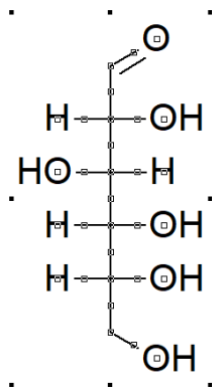
Obrázek 5. Nastavení struktury a Fisherova vzorce pro D – glukózu

Příklad 2

Vygenerujte název struktury.

KROK 1

Nakreslete molekulu využitím modulu *Structure*.



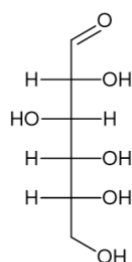
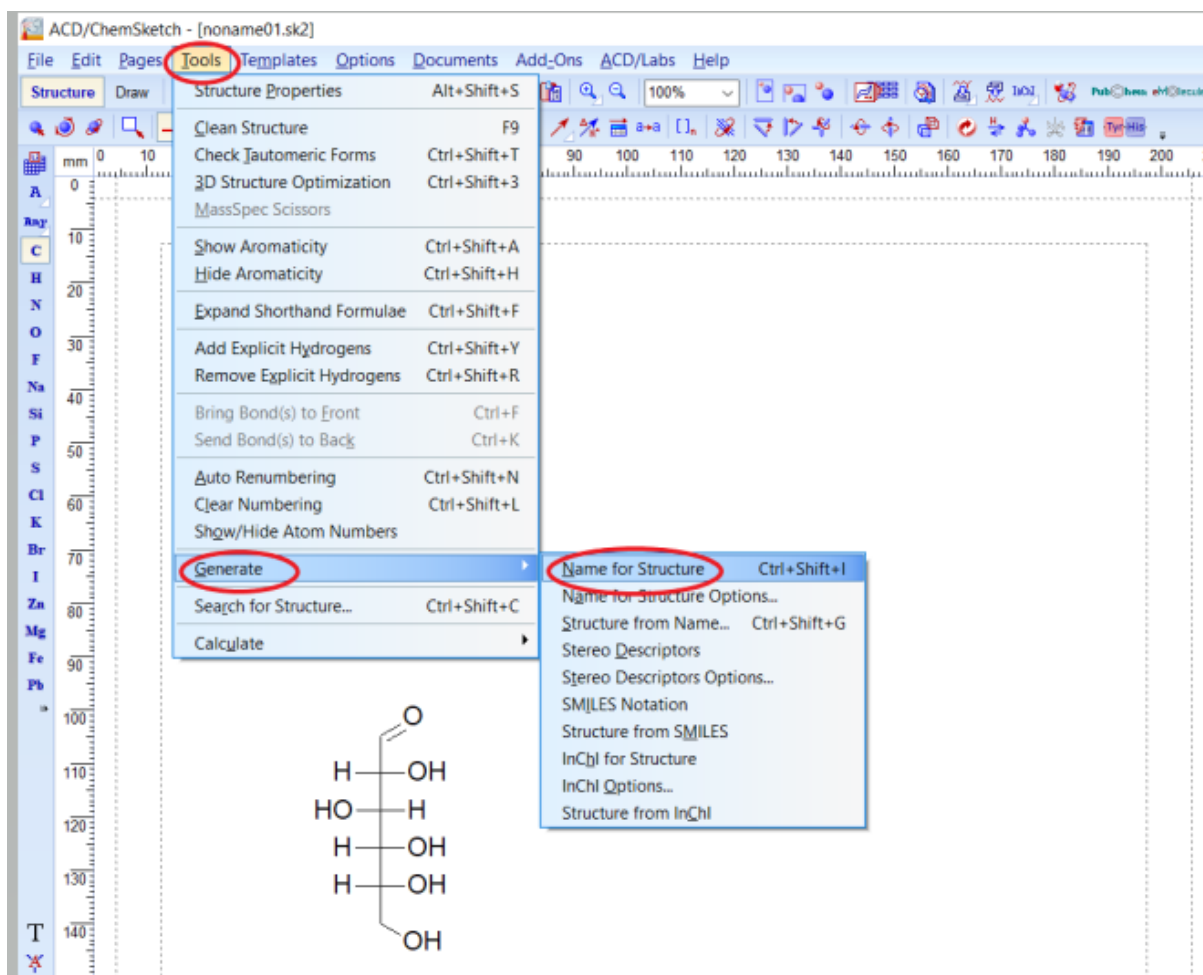
Obrázek 8. Struktura D – glukózy

KROK 2

Klekněte na *Tools*.

Vyberte *Generate*.

Vyberte možnost *Name for the structure* (Obrázek 8).



2,3,4,5,6-pentahydroxyhexanal
(D-Glukose)

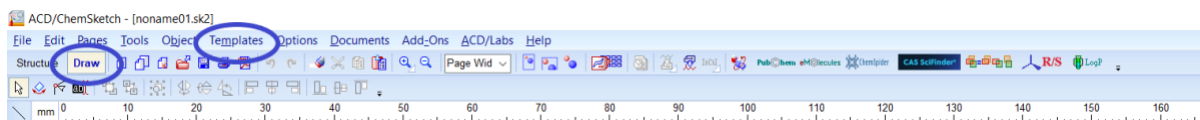
Obrázek 8. Postup pro vytvoření názvu struktury

Příklad 3

Nakreslete molekulu glukosy a vygeneruj název v Haworthově projekci.

KROK 1

Začněte v modulu *draw*, klikni na *templates* (Obrázek 9).



Obrázek 9. Kliknout na ikonu kreslení

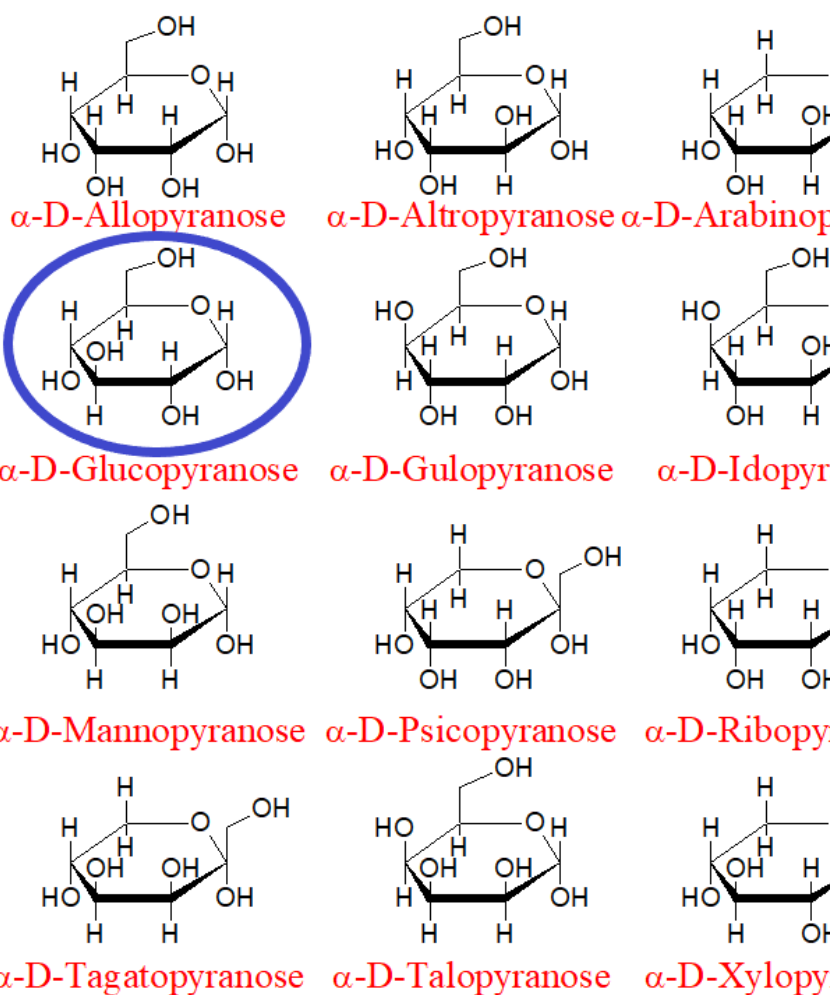
KROK 2

Otevřete *template window*, v režimu *draw* vyber *Sugars: alfa-D-Pyr* (Obrázek 10a).

Označte vzorec *α-D-glucopyranose* a vložte do otevřeného souboru (Obrázek 10b).



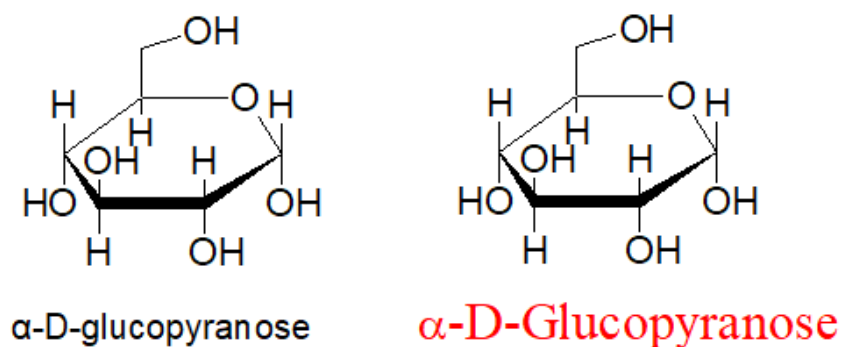
Obrázek 10a. Výběr alfa-D-Pyr



Obrázek 10b. Výběr α -D-glucopyranosy

KROK 3

Název můžete buď vygenerovat analogicky jako u Fischerova vzorce, nebo lze využít název uvedený pod strukturou.



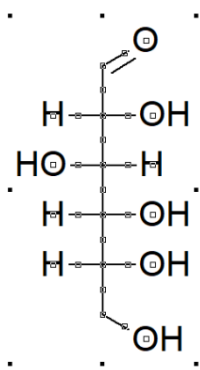
Obrázek 11. α -D-glucopyranosa

Příklad 3

Zjistěte vybrané vlastnosti D-glukosy.

KROK 1

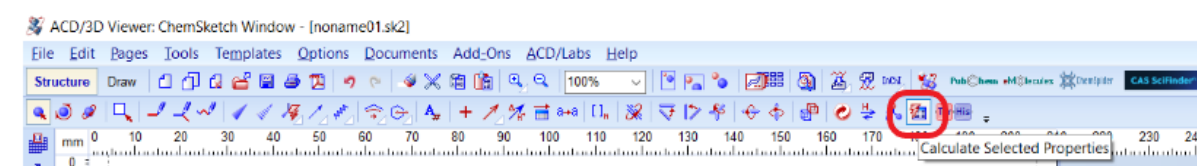
Nakreslete molekulu D-glukosy v modulu “structure”, klikněte na libovolné místo v dokumentu pro označení struktury.



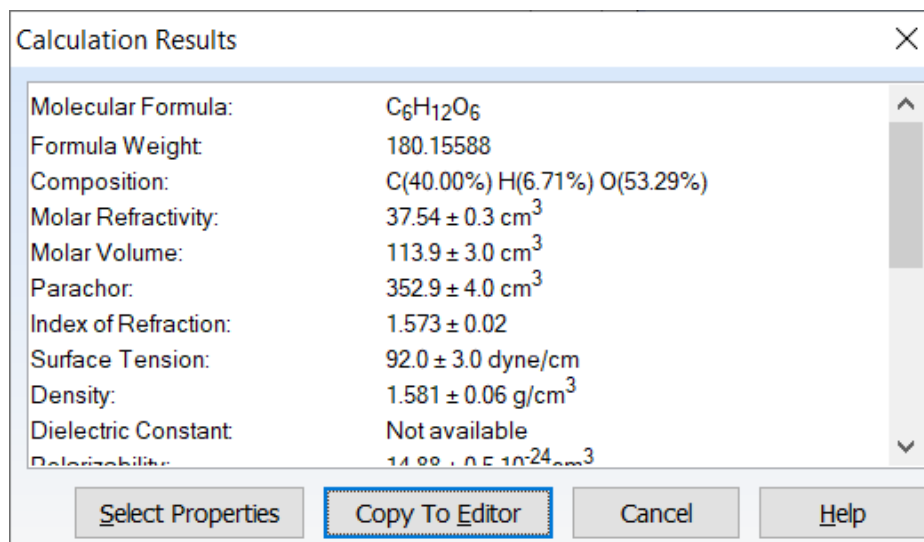
Obrázek 12. D-glukosa

KROK 2

Rozbalte na liště ikonu “Calculate Selected Properties” (Obrázek 13 a 14).



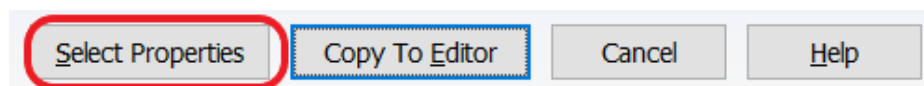
Obrázek 13. Postup pro zobrazení vlastností struktury



Obrázek 14. Vlastnosti struktury

KROK 3

Vyberte *Select Properties* (**Obrázek 15**).



Obrázek 15. Výběr vlastností

KROK 4

Klikněte na *unselect all* a vyberte požadované vlastnosti, poté dejte "ok" (**Obrázek 16**).

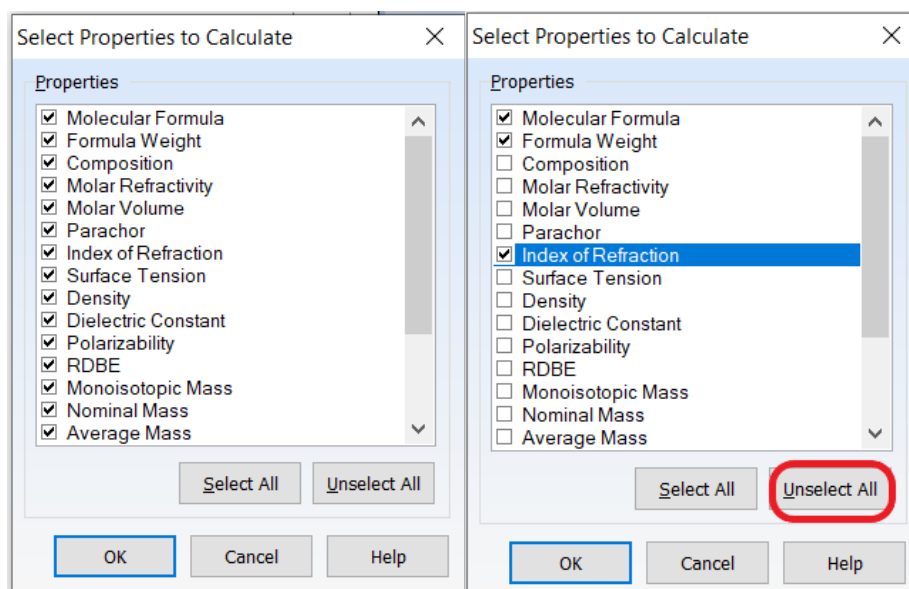
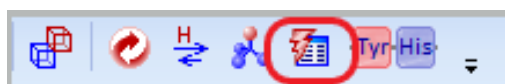


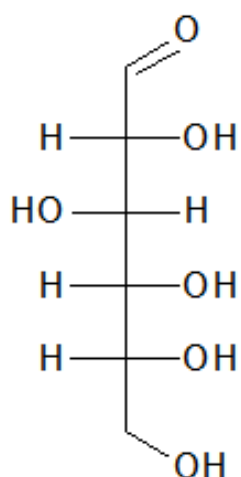
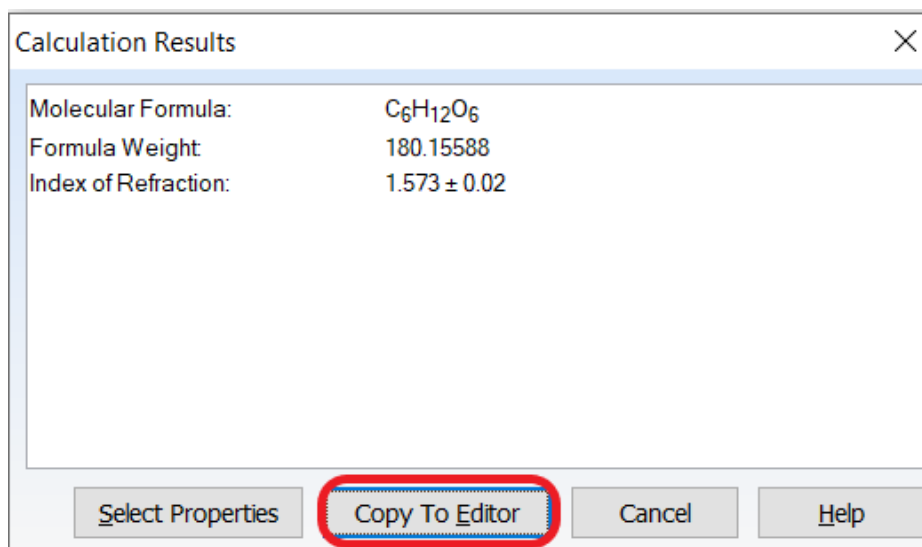
Figure 16. Výběr správných vlastností

KROK 5

Klikněte na *Copy to editor* (**Obrázek 17 a 18**).



Obrázek 17. Kopírovat



Molecular Formula: C₆H₁₂O₆
Formula Weight: 180.15588
Index of Refraction: 1.573 ± 0.02

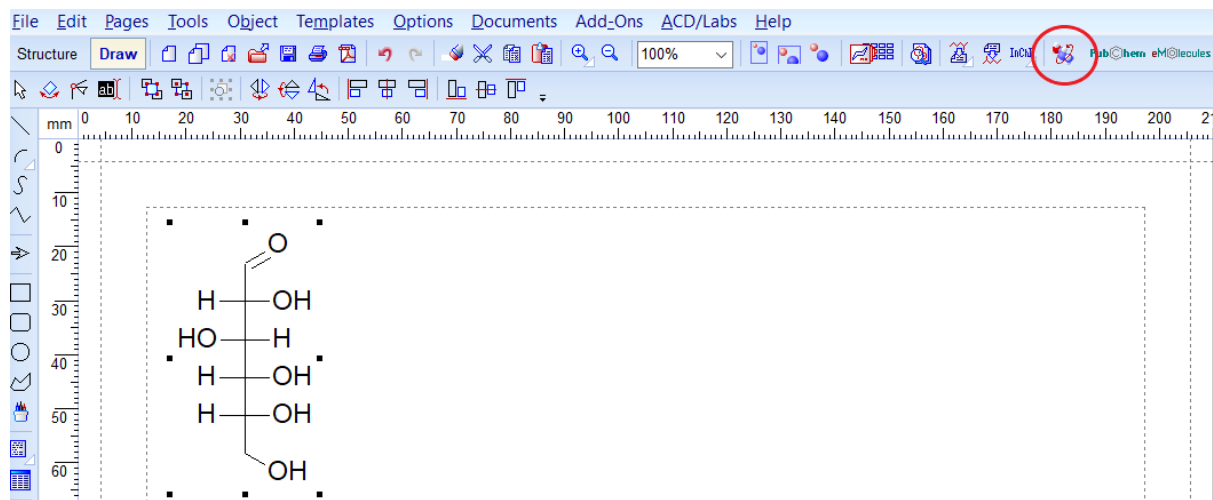
Obrázek 18. Kopírování vybraných vlastností

Příklad 3

Preved'te molekuly D-glucosy a α -D-glucopyranosy do 3D struktury.

KROK 1

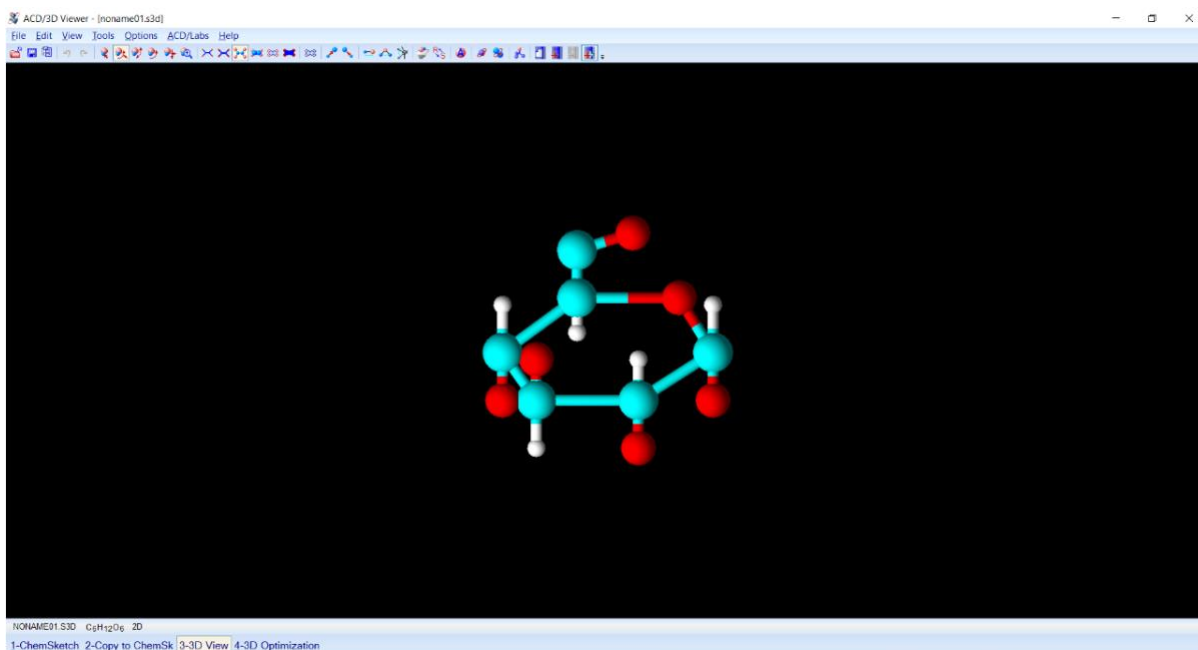
Označte Fischerův vzorec a klikni na *3D-viewer* (**Obrázek 19**).



Obrázek 19. 3D-zobrazení

KROK 2

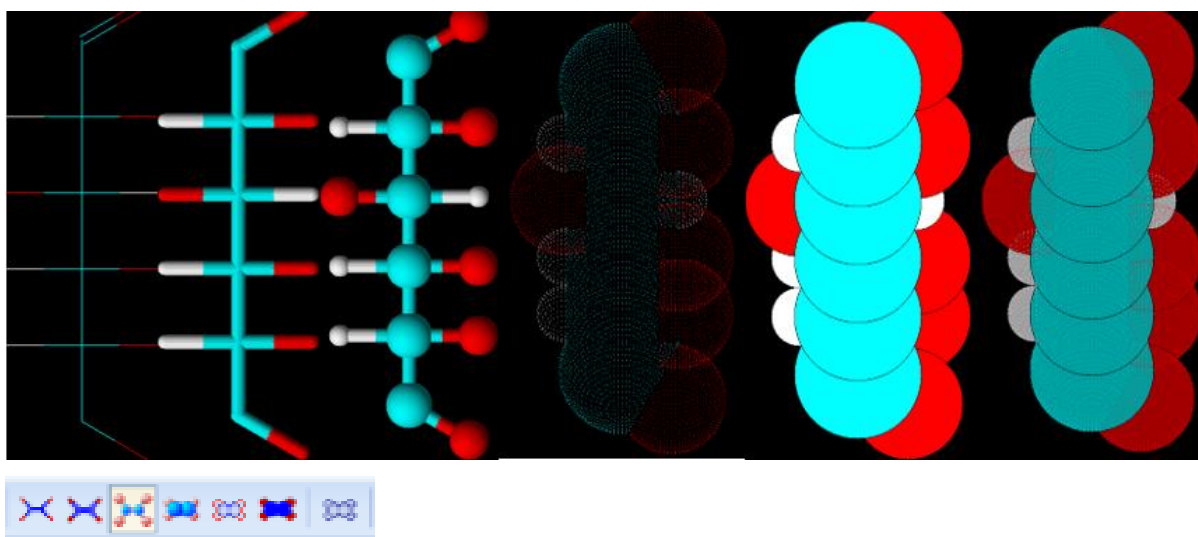
Označte Haworthův vzorec a klikni na *3D-viewer* (**Obrázek 19**).



Obrázek 20. Haworthův vzorec D-glukosy

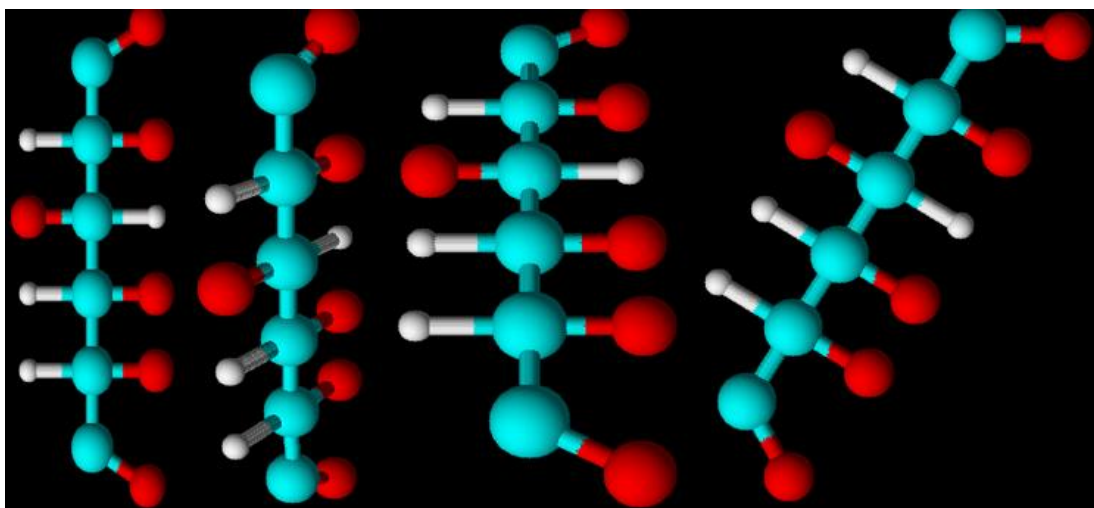
Příklad 4

Použijte různé ikony pro vyjádření délek vazeb a atomů (**Obrázek 21**)



Obrázek 21. Druhy 3D-zobrazení

Použijte různé ikony pro vyjádření rotace molekul v prostoru (**Obrázek 23**)



Obrázek 23. Různé úhly zobrazení

1.4 ÚLOHY K PROCVIČENÍ

Vyhledejte na internetu, jak vypadá molekula fruktosy a nakreslete ji v programu ChemSketch nejprve ve Fischerově, poté v Haworthově projekci. Aplikujte na molekule fruktosy možnosti vyjádření ve 3D a způsoby rotace vazeb.

1. Na molekule fruktosy vyřešte cvičení

- a) запиšte dva typy struktur ve 2D
- b) označte Fischerův a Haworthův vzorec
- c) upravte strukturu molekul náhradou funkčních skupin nebo atomů
- d) vygenerujte názvy molekul
- e) znázorněte molekuly ve 3D prohlížeči
- f) vyjádřete možnosti rotace atomů a vazeb
- g) vyhledejte, molekulový vzorec, molární hmotnost and index lomu fruktosy

2. Vyberte z nabídky jednu molekulu monosacharidu, znázorněte v ChemSketch, vyjádřete pomocí 3D prohlížeče a vyhledejte v informačních zdrojích možnosti využití a výskyt v běžném životě. Soubor uložte do počítače.

1.5 PŘÍKLAD HODNOCENÍ PRÁCE STUDENTŮ

Prozkoumejte na internetu, jak vypadá molekula galaktózy, a zobrazte molekulu v programu ChemSketch. Když jste reprezentovali molekulu galaktózy, prozkoumejte, jak molekula vypadá ve 3D formě, a aplikujte naučené funkce v ChemSketch.

1. Nakreslete galaktózu pomocí šablon a proveďte s ní následující:

- a) nakreslete dva typy monosacharidových struktur
- b) označte Fischerovy a Haworthovy vzorce
- c) upravte strukturu molekuly výměnou atomů a funkčních skupin
- d) vygenerujte název původních struktur
- e) zobrazte strukturu molekuly v 3D prohlížeči
- f) znázorněte molekulu pomocí ikon všech druhů rotací a ikon pro vyjádření délek vazeb
- g) najděte molekulový vzorec, molární hmotnost a index lomu

2. Zapište si do sešitu biologický význam galaktózy a její zdroje (výskyt).

Zdroj: Mareček, A., Honza, J. Chemie pro čtyřletá gymnázia 3 díl. 1. vyd. Olomouc: Nakladatelství Olomouc 2000. 250 s. ISBN 80-7182-057-1

Zdroj: Paulová, H., Dostál, J., Králíková, M., Peš, O., Slanina, J., Táborská, E. and Tomandlová, M. Biochemie pro nelékařské zdravotnické obory, vydání 1. Brno: Nakladatelství: Masarykova univerzita 2021. 154 s. ISBN 978-80-210-9858-9

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

KOORDINAČNÍ SLOUČENINY

1. ZPRACOVÁNÍ

Vyučovací jednotka: Přechodné kovy
Název jednotky: Koordinační sloučeniny
Předpokládaný počet hodin: 2

1.1. Teoretický úvod

Koordinační sloučeniny, také známé jako koordinační komplexy, jsou sloučeniny sestávající z centrálního kovového iontu (také známého jako koordinační centrum) obklopeného skupinou ligandů. Ligandy jsou anionty nebo neutrální molekuly, které mohou darovat pár nebo páry elektronů a které jsou navázány na kovový iont prostřednictvím koordinačních kovalentních vazeb. Ligandy mohou být monodentátní, bidentátní nebo polydentátní. Kovalentní koordinační vazba je kovalentní vazba, ve které jeden atom z vazby (donorový atom) dodává oba elektrony. Tento typ vazby se liší od normální kovalentní vazby, ve které každý atom dodává jeden elektron.

Komplexy mohou být neutrální nebo nabité. Když je komplex nabitý, je stabilizován sousedními protiiionty.

Pokud má iont dříve popsanou komplexní strukturu, nazývá se komplexní iont, ale pokud neexistuje žádný čistý náboj (pokud existuje interakce mezi kationtem a komplexním aniontem, komplexním kationtem a aniontem nebo komplexním kationtem a aniontem), pak se nazývá koordinační sloučenina.

Koordinační číslo je počet donorových atomů vázaných k centrálnímu atomu/iontu kovu.

Mnoho koordinačních sloučenin má odlišné geometrické struktury. Dvě běžné formy jsou čtvercová rovinná, ve které jsou čtyři ligandy uspořádány v rozích hypotetického čtverce kolem centrálního atomu kovu, a oktaedrická, ve které je uspořádáno šest ligandů, čtyři v rovině a po jednom nad a pod rovinou.

Koordinační sloučeniny mají schopnost vykazovat izomerii, což je existence různých sloučenin se stejným chemickým vzorcem, ale různým uspořádáním ligandů kolem kovového iontu. To vede k různým fyzikálním a chemickým vlastnostem, díky čemuž jsou koordinační sloučeniny užitečné v různých aplikacích, včetně katalyzátorů, pigmentů a terapeutických činidel.

Kromě izomerie vykazují koordinační sloučeniny často zajímavé barevné, magnetické a reaktivní vlastnosti, a tak hrají zásadní roli v mnoha oblastech chemie a mají širokou škálu praktických aplikací.

Některé příklady

Molekulový vzorec	Název	Ligand	Koordinační číslo	Geometrická struktura
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	Kation diaminstříbrný (I)	NH_3	2	Lineární
$[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$	Anion tetrakyanozinečnatý (II)	CN^-	4	Tetraedrální
$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$	Anion tetrakyanonikelnatý (II)	CN^-	4	Čtvercový rovinný
$[\text{PtCl}_6]^{2-}$	Anion hexachlorplatičitý (IV)	Cl^-	6	Oktaedrální
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	Kation hexaamminkobaltitý (III)	NH_3	6	Oktaedrální
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$	Komplex diamminedichloroplatnatý (II)	NH_3, Cl^-	4	Čtvercový rovinný Cis trans izomer

1.2. Výsledky vzdělávání

V této kapitole se student naučí:

- nakreslit různé příklady koordinačních iontů a sloučenin a ukázat je structuralism vzorcem.
- ukázat struktury koordinačních sloučenin ve 2D
- pro zobrazení 3D modelů koordinačních sloučenin nakreslených ve 2D pomocí možnosti programu 3D Viewer
- určit koordinační číslo a geometrii koordinačních sloučenin
- určit možné geometrické izomery koordinačních sloučenin.
- určit koordinační číslo a tvar nakreslené koordinační sloučeniny
- ukázat strukturu koordinačních sloučenin ve třech rozměrech
- otáčet koordinační struktury ve dvou a třech rozměrech
- změnit trojrozměrné zobrazení struktury koordinačních iontů

- posouvat struktury koordinačních sloučenin ve 2D a 3D
- určit/opravit délky vazeb a úhly vazeb v koordinačních iontech
- optimalizovat strukturu koordinační sloučeniny
- uložit do počítače dvourozměrnou a trojrozměrnou strukturu požadovaného koordinačního iontu nebo sloučeniny.

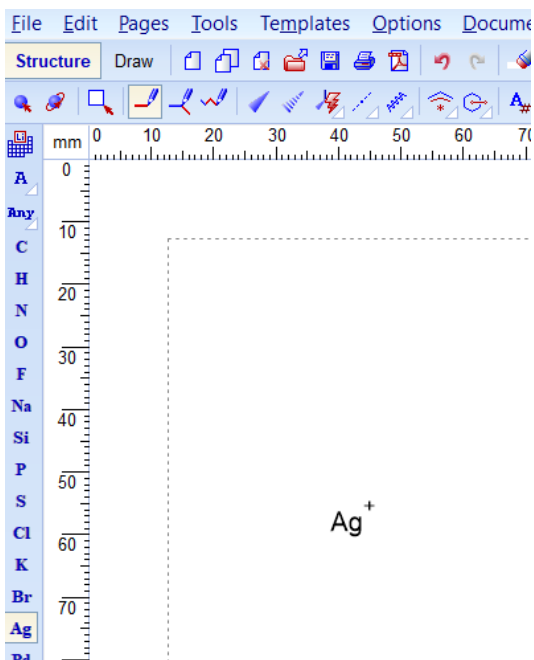
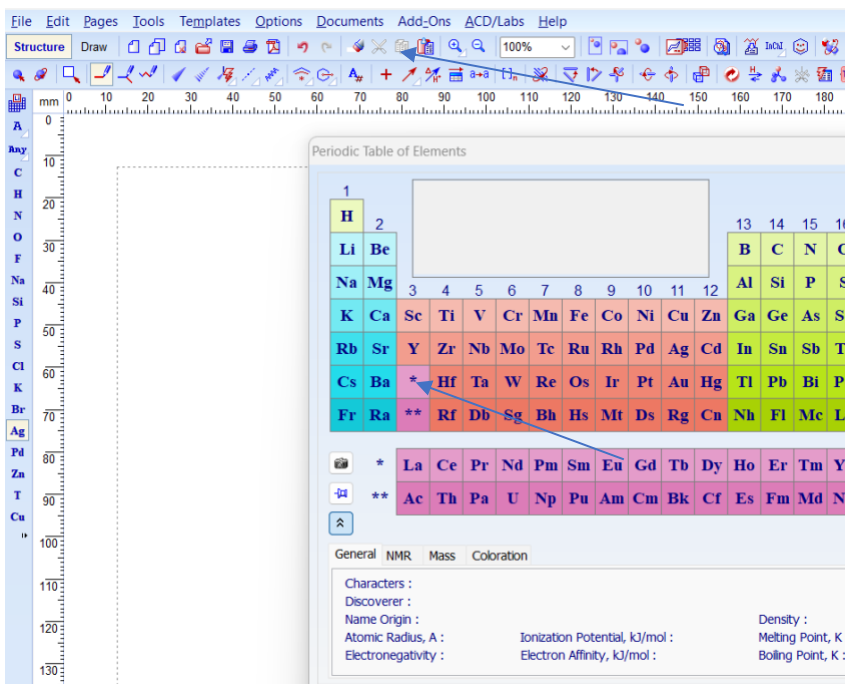
1.3. Návod k použití programu ChemSketch

Příklad 1

Nakreslete $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ zobrazte strukturu iontu ve třech rozměrech různými způsoby, určete vazebné úhly ...

KROK 1

Vyberte režim *Struktura*. Vyberte Ag z levého panelu nástrojů nebo vyberte *Periodickou tabulku* (panel nástrojů vlevo) a vyberte Ag a klikněte na prázdnou oblast stránky. (**Obrázek 1a a 1b**). Při prvním použití prvku ho musíte vybrat z periodické tabulky, později se objeví na levé straně panelu nástrojů.



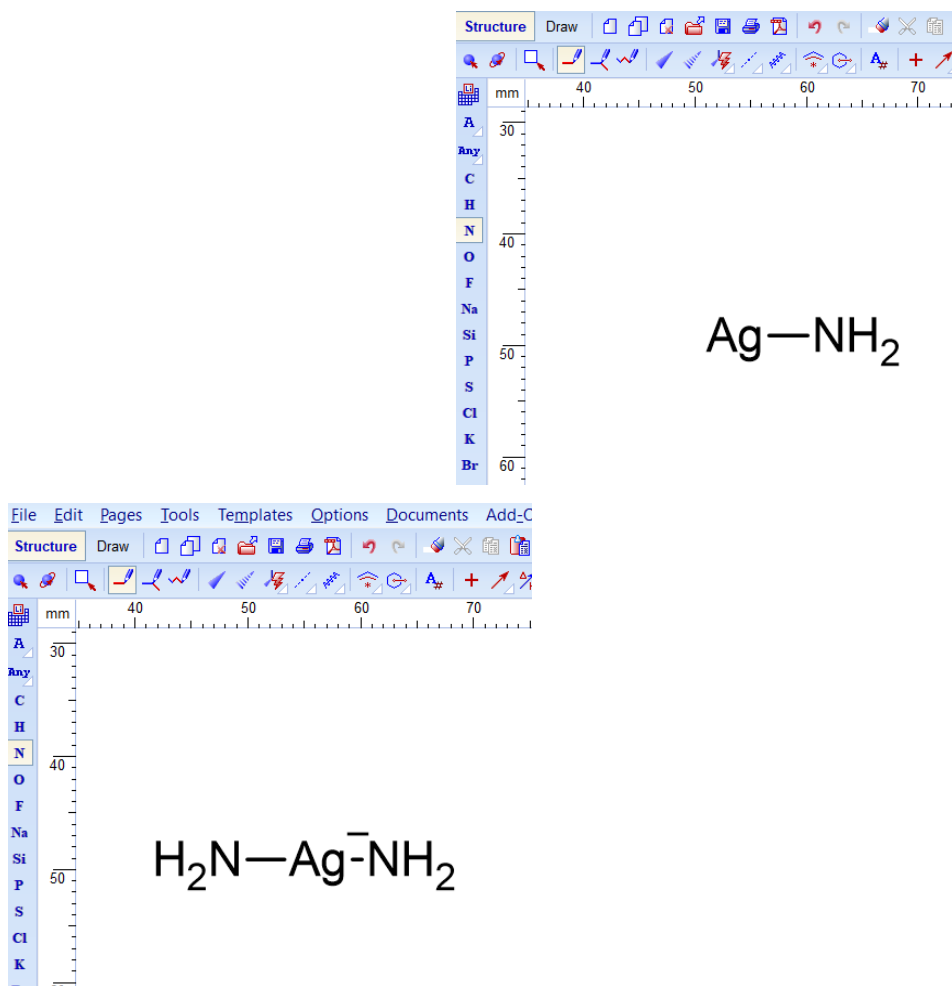
a

b

Obrázek 1. a) *Výběr požadovaného prvku, b) Výběr Ag*

KROK 2

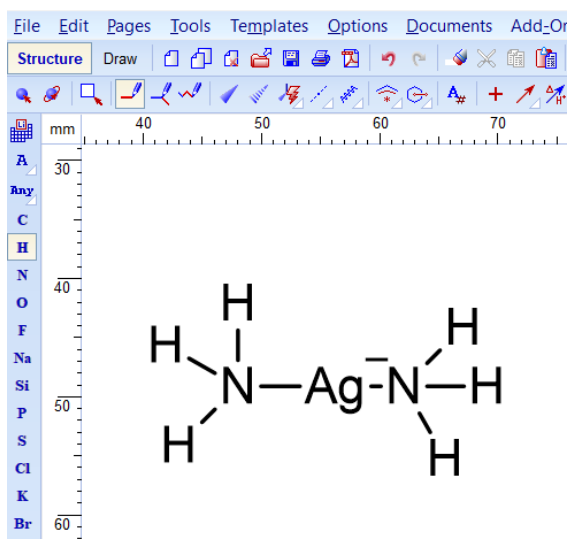
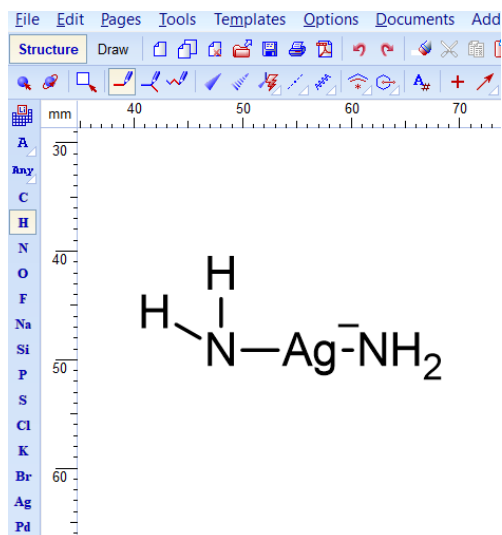
Vyberte možnost *DrawNormal*, vyberte N z levého panelu nástrojů (nebo z periodické tabulky) a nakreslete vazbu na každou stranu Ag. **Obrázek 2**



Obrázek 2. Kresba Ag-N vazba.

KROK 3


Nakreslete tři N-H vazby (dusík-vodík) na každém N. **Obrázek 3 a a 3 b**). Opakujte s jiným atomem N.

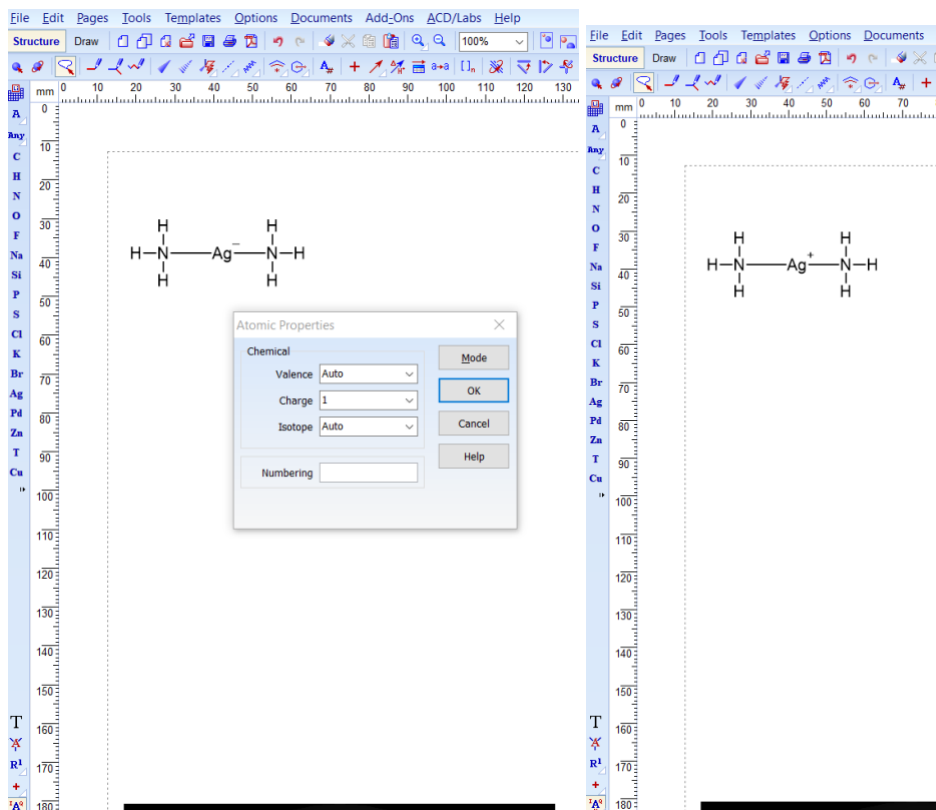


Obrázek 3. Kresba vazeb N-H

KROK 4

Přiřazení správného náboje pro Ag.


Vyberte  (*Chemické vlastnosti atomu*), klikněte na Ag a změňte náboj. Klepněte na tlačítko *OK* (Obrázek 4).



Obrázek 4: Výběr

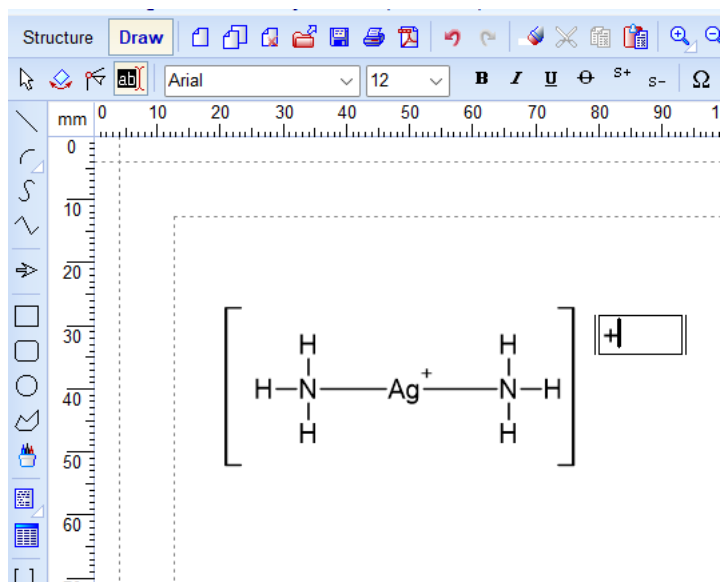
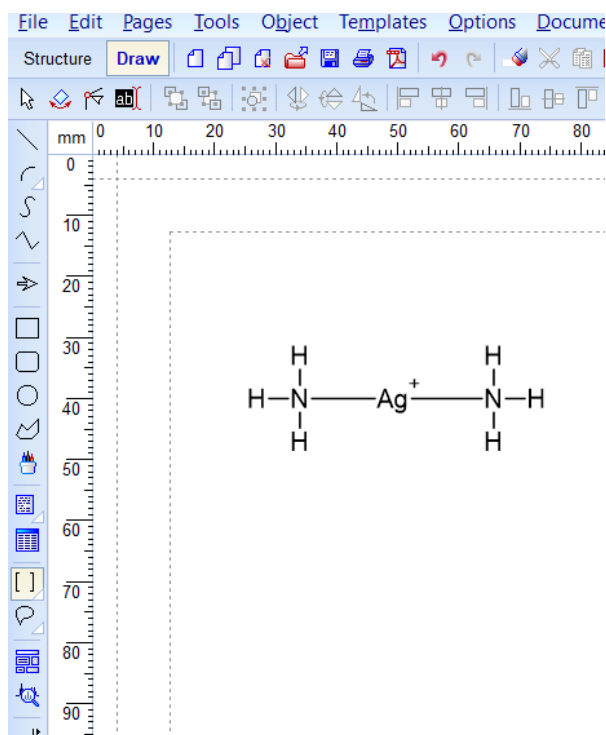
správného náboje pro Ag

KROK 5

Musíme přidat závorky a náboje. Přepněte do režimu kreslení (*Draw*) a vyberte závorky .

Obrázek 5 a. Pro přidání náboje vyberte  v režimu *Draw* a přidejte náboj.

Obrázek 5b




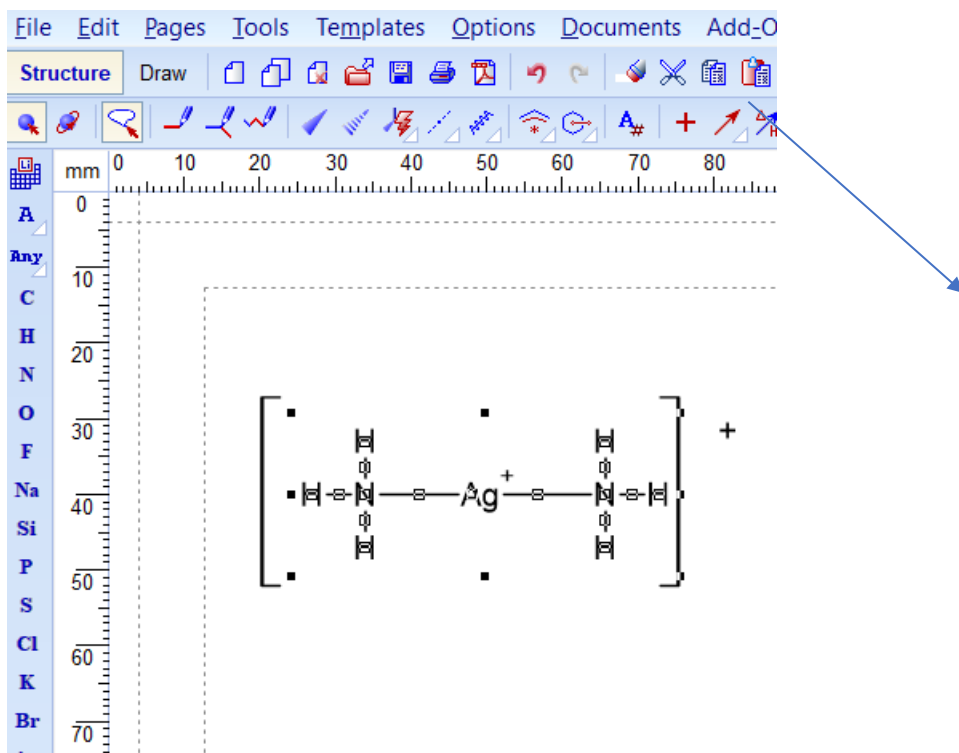
a

b

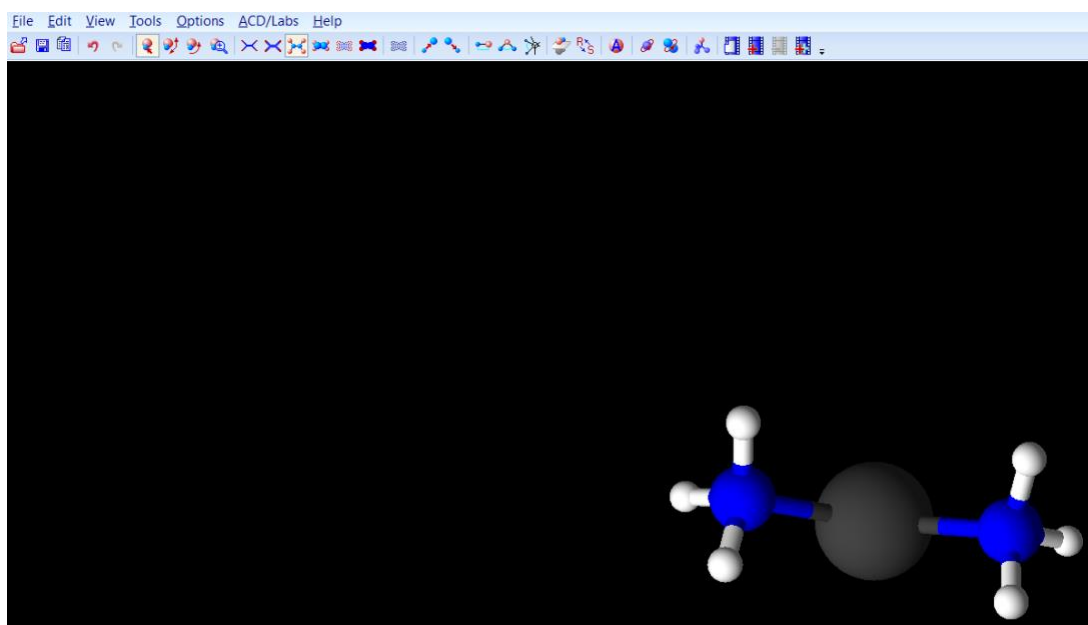
Obrázek 5. a) Přidání závorek, b) Přidání náboje

KROK 6

Zobrazte strukturu ve 3D tak, že ji nejprve vyberete a poté kliknete na možnost  na horním panelu nástrojů. Otevře se nové okno s 3D pohledem na konstrukci (**Obrázek 6 a**) a **b**).




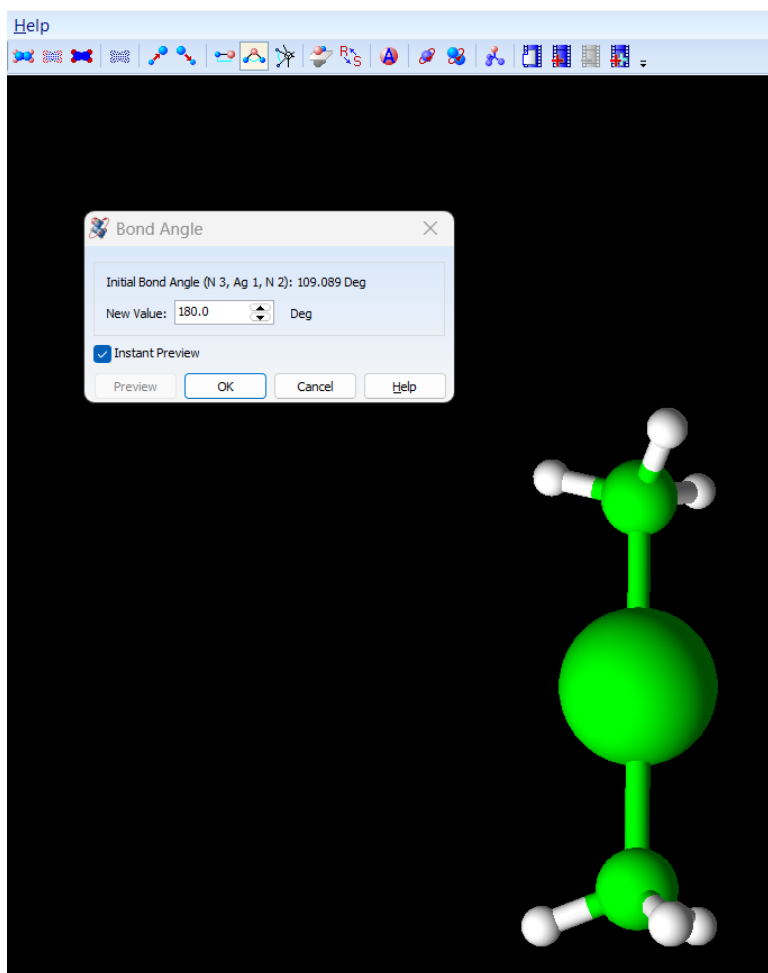
Obrázek 6. a) Výběr struktury



Obrázek 6. b) Struktura ve 3D

KROK 7

Chcete-li zobrazit nebo změnit úhel vazby mezi dvěma atomy, vyberte možnost  (*bond angle*). Abychom určili vazebný úhel mezi atomy dusíku, musíme kliknout na atom dusíku (který změní barvu na zelenou) než na stříbro a další atom dusíku. Otevře se okno se zobrazenou hodnotou. Můžeme změnit hodnotu na správnou. **Obrázek 7.**



Obrázek 7. Určení úhlu vazby

KROK 8


Zkuste použít každou z možností otočení, přesunutí a výběru na horním panelu nástrojů:




, poté zobrazte strukturu každým ze způsobů, které program nabízí.

Možnosti se také zobrazí na panelu nástrojů:

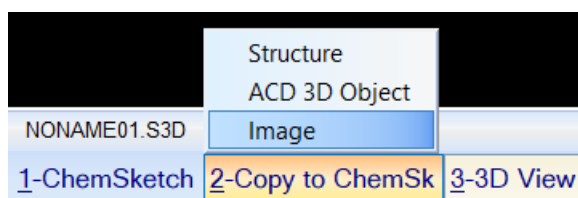
kliknutím na kteroukoli z možností se změní způsob zobrazení iontu. Pro automatickou rotaci

iontu klikněte na ikonu .

Pro automatickou plynulou změnu z jednoho do druhého režimu zobrazení struktury s rotací klikněte na ikonu .

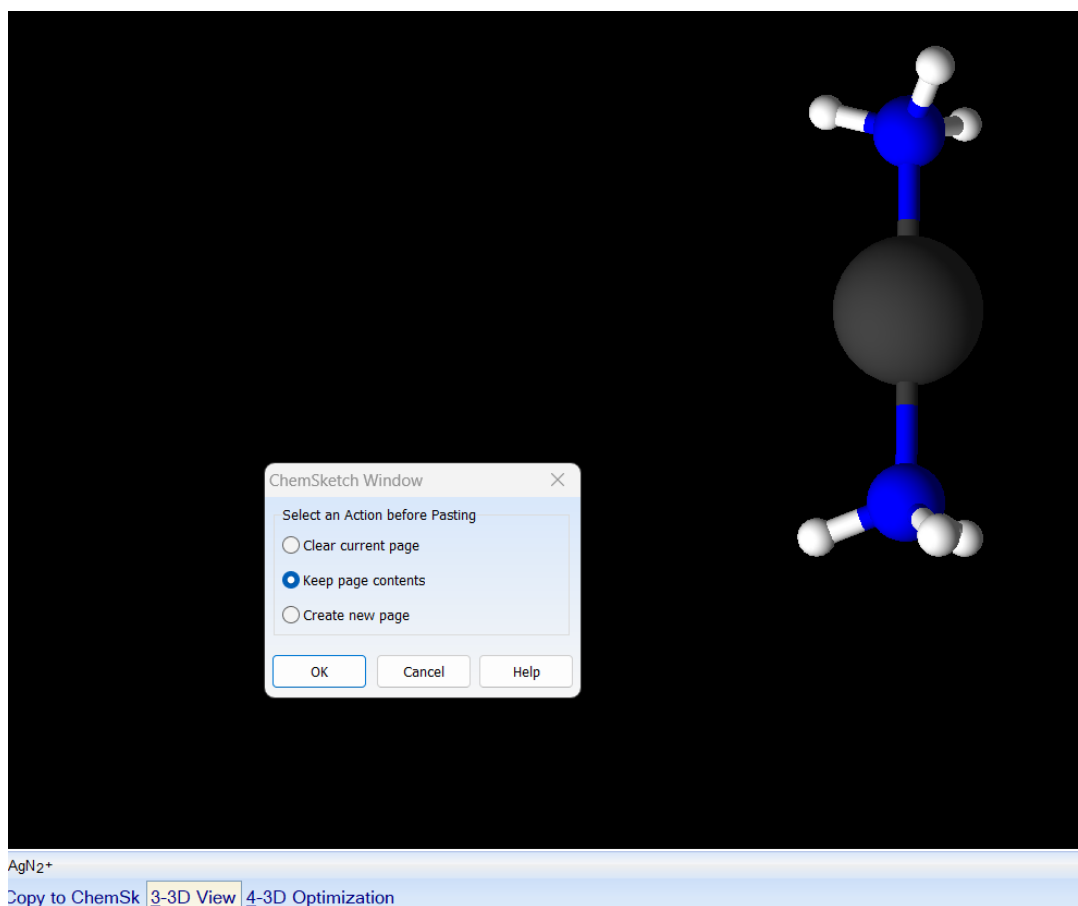
KROK 9

Nyní můžeme vrátit upravenou strukturu do programu ChemSketch kliknutím na možnost Copy to ChemSketch a výběrem možnosti *Structure* (**Obrázek 8**) úplně dole v rozhraní. Optimalizovaná struktura se nyní objevuje v ChemSketch.



Obrázek 8. Přesunutí optimalizované 3D struktury do ChemSketch

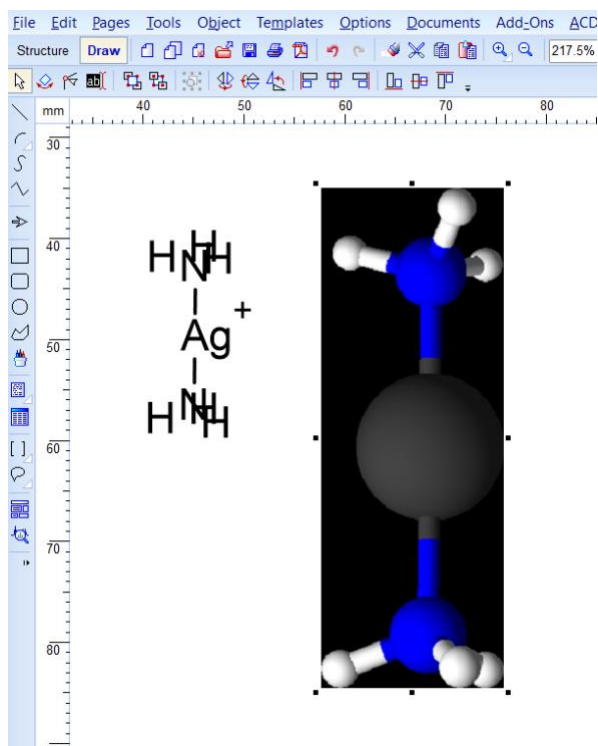
Pokud zvolíme *Copy to ChemSketch* a poté vybereme *Image* (**Obrázek 9 a** ab)), můžeme zkopírovat 3D strukturu do *ChemSketch*.



Obrázek 9. a) Kopírování struktury do Chem Sketch

KROK 10

Uložte 2D i 3D struktury na plochu kliknutím na *File* a poté na *Save As*.



Obrázek 9. b) Kopírování struktury

Příklad 2

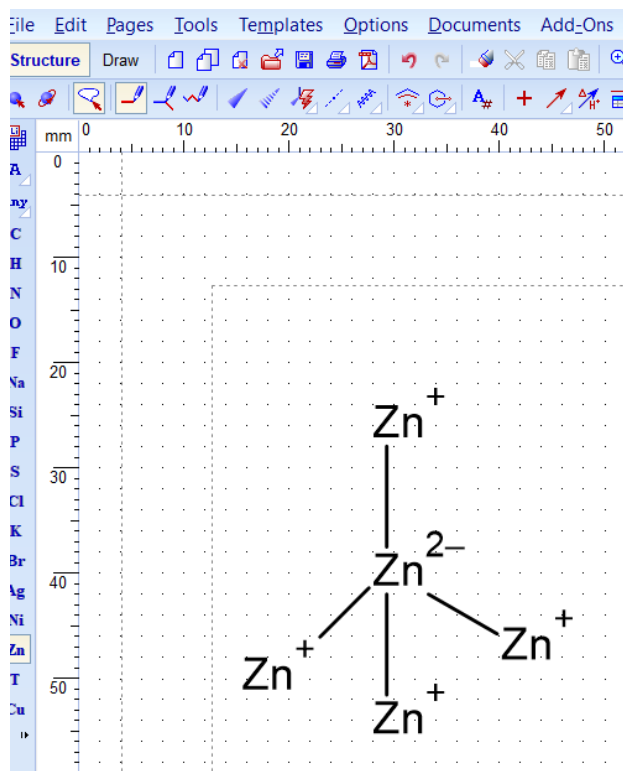
Nakreslete $[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$. Struktura je čtyřstěn.

Nakreslete strukturu podle dříve naučených kroků (Obrázky 1 až 9). Poté použijte dříve naučené **KROKY (STEPS)** od 1 do 9 na tomto příkladu.

KROK 1

Začněte s režimem Structure a vyberte *DrawNormal*.

Vyberte Zn z Periodické tabulky (panel nástrojů vlevo) a vložte jej. Nakreslete čtyřstěnnou strukturu (**Obrázek 10**).



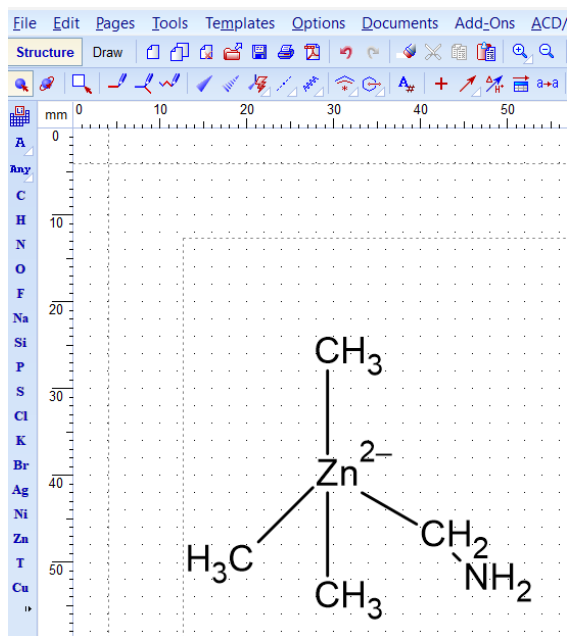
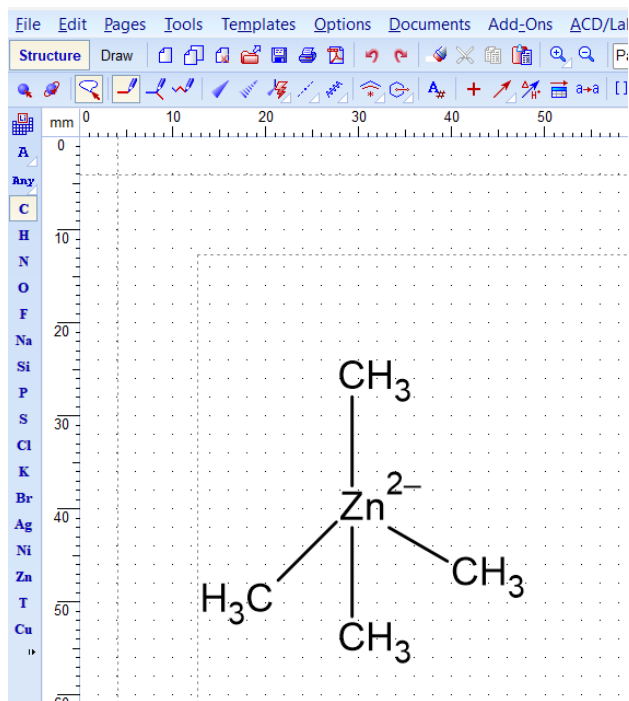
Obrázek 10. Kreslení čtyřstěnu

KROK 2

Zaměňte čtyři atomy Zn (kromě centrálního) za skupinu CN. Nejprve vyberte C z levého panelu nástrojů a nahraďte Zn. (**Obrázek 11a**).

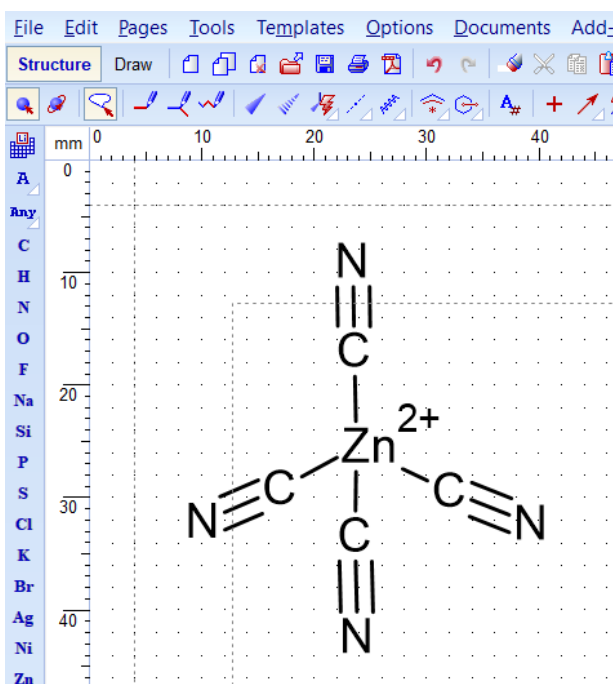
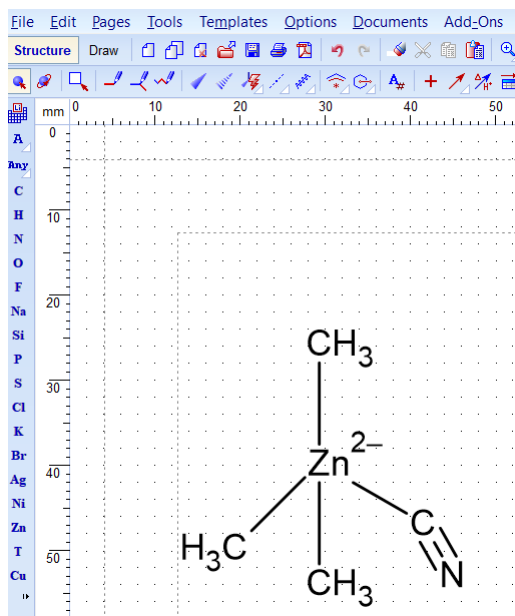
KROK 3

Poté vyberte N a nakreslete trojnou vazbu (ukážte na vazbu, kolem vazby se objeví obdélník, poté klikněte na trojnou vazbu) na atom C. (**Obrázek 11 b**), **c a d**). Přidejte také správný náboj na Zn.



a

b



c



d

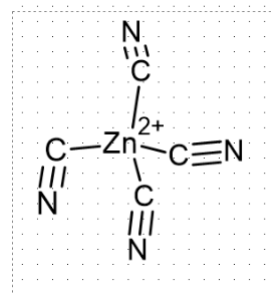
Obrázek 11. Kreslení skupiny KN – sled akcí a) až d)

KROK 4

Použijte tlačítko *Select/Move* () a upravte délku a polohu vazby. **Obrázek 11 d).**

KROK 5

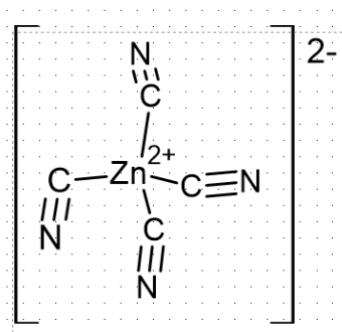
Chcete-li získat lepší strukturu, použijte možnost 3D optimalizace . Předem vyberte strukturu pomocí  a proveďte optimalizaci (**Obrázek 12.**)



Obrázek 12. Struktura po 3D optimalizaci

KROK 6

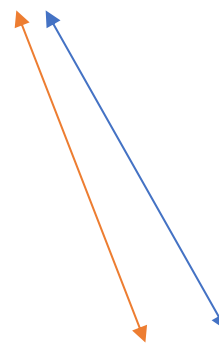
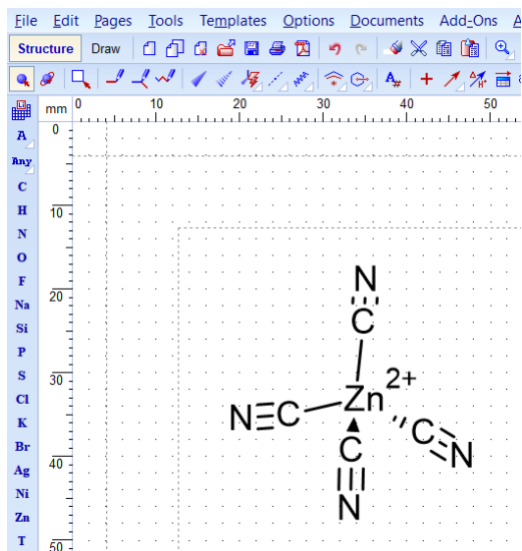
Přidejte závorky a vložte náboj komplexního iontu. Viz příklad 1. **Obrázek 13.**



Obrázek 13. Struktura se závorkami a náboji

Je také možné použít stereo vazby místo běžných vazeb, jak je znázorněno na **obrázku 14.**

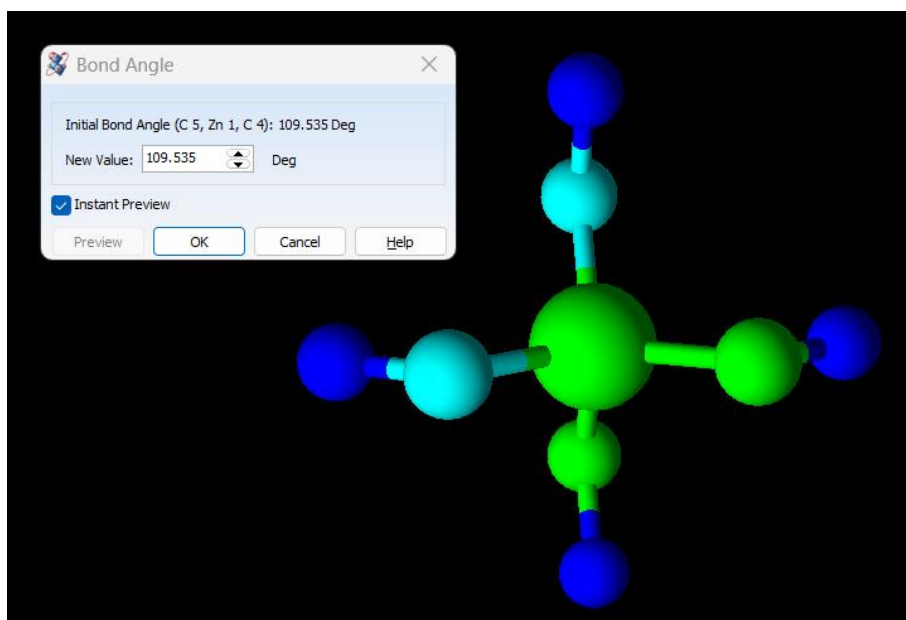
Klikněte na ikonu  na složené vazbě. Opakujte s další vazbou. Použijte ikonu .



Obrázek 14. Struktura se stereo vazbami

KROK 7

Prezentace struktury ve 3D, jak je znázorněno na **obrázku 15**. Viz příklad 1.



Obrázek 15. 3D Struktura a vazebný úhel

KROK 8

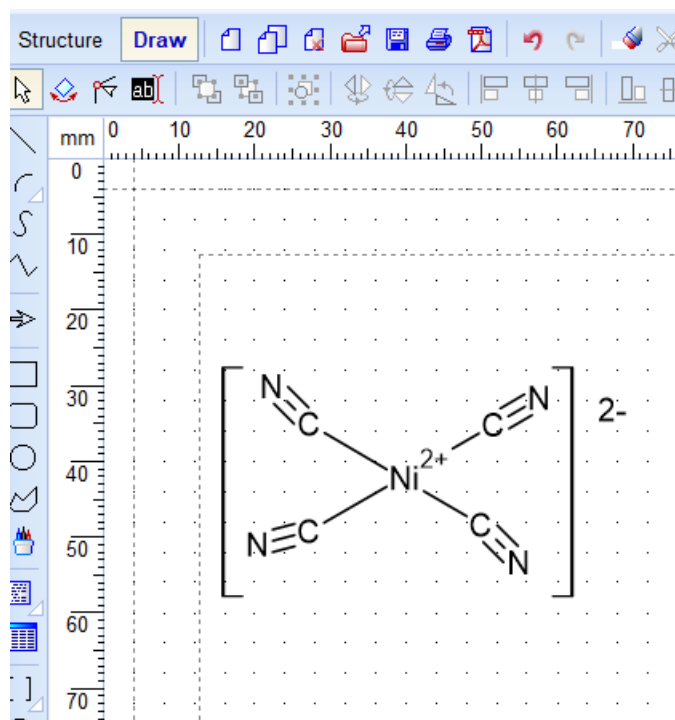
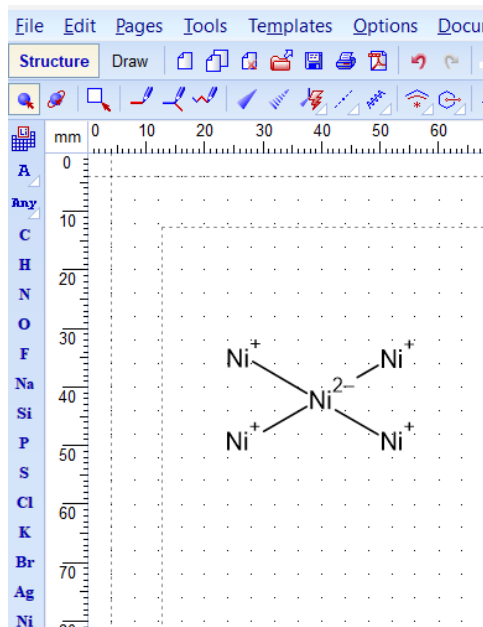
Otáčení struktury (viz **krok 8, příklad 1 1**).

Příklad 3

Nakreslete $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$. Struktura je čtvercová rovinná.

KROK 1

Začněte s režimem Structure a vyberte *DrawNormal*. Postupujte podle kroků z příkladu 1.



Obrázek 16. první krok $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$

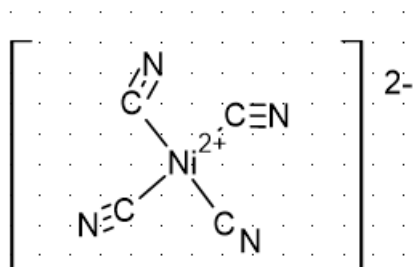
Obrázek 17. Struktura před úpravou

KROK 2

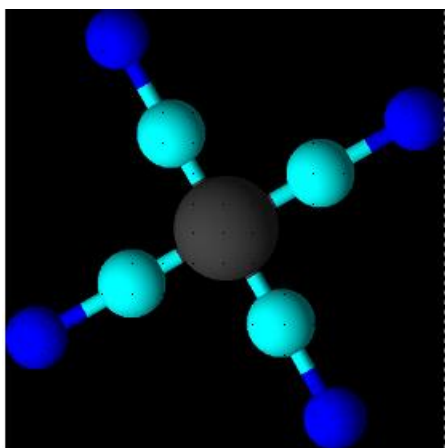
Změňte atomy Ni za skupinu CN jako v příkladu 2. **Obrázek 17.**

KROK 3

Struktura po úpravě – použijte možnost čisté struktury a možnost 3D optimalizace **Obrázek 18 a 19.**



Obrázek 18. Struktura po optimalizaci



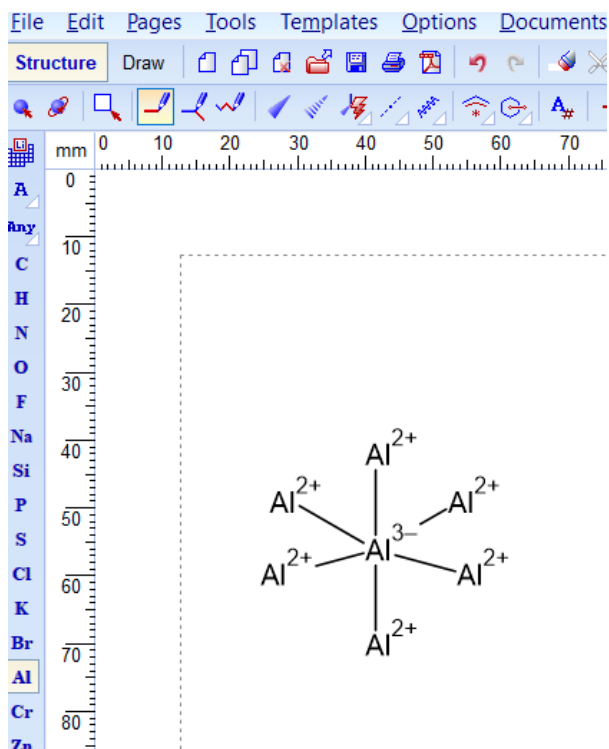
Obrázek 19. 3D model

Příklad 4 (volitelný)

Nakreslete $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$. Struktura je oktaedr. Využijte kroky v příkladech **1 a 2.**

KROK 1

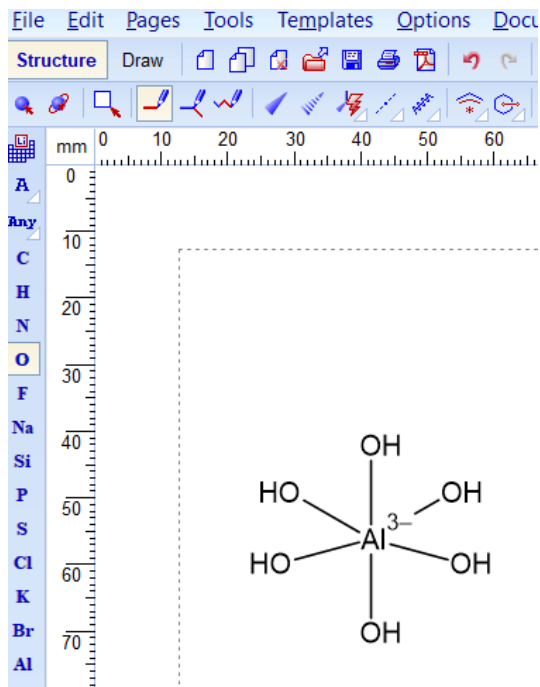
Nakreslete oktaedrickou strukturu. **Obrázek 20.**



Obrázek 20. Oktaedrická struktura

KROK 2

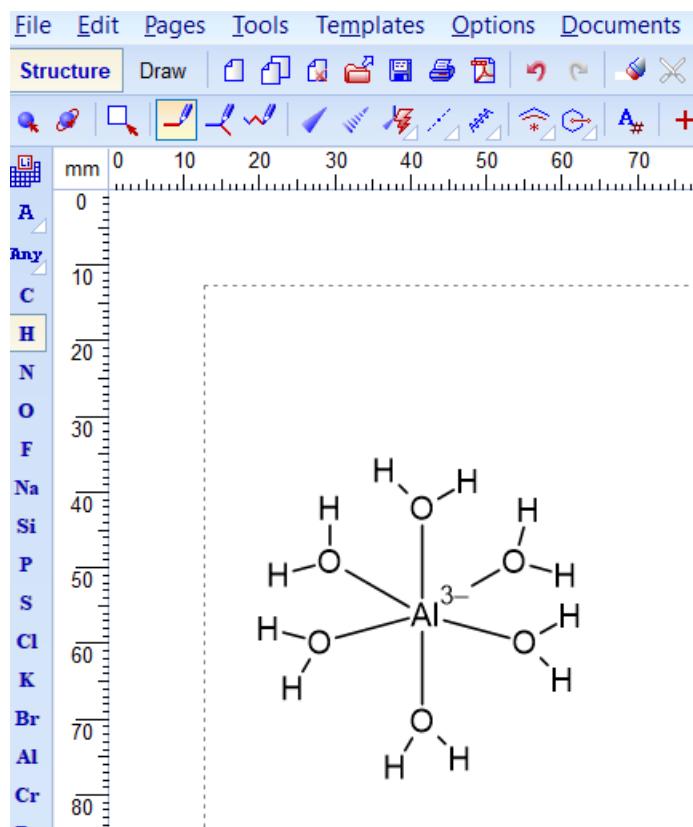
Vyberte atom kyslíku a nahraďte 6 atomů hliníku (všechny kromě centrálního). Obrázek 21.



Obrázek 21. Náhrada atomů Al atomy O

KROK 3

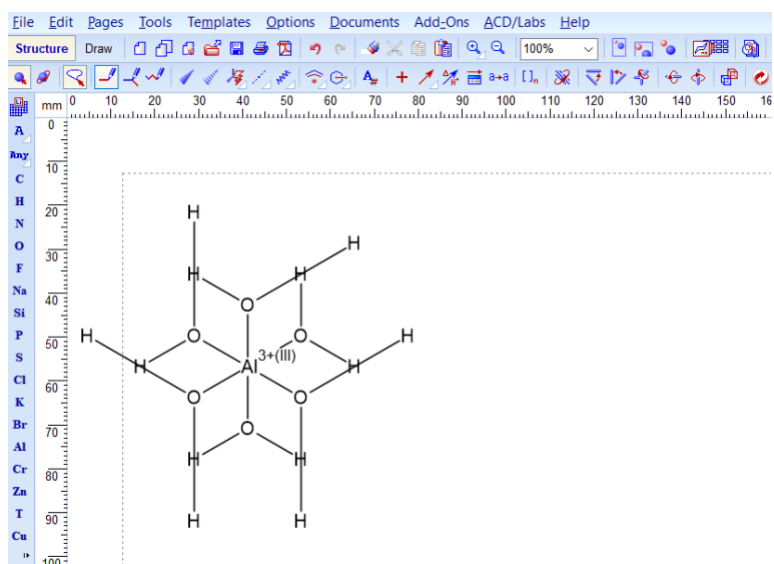
Vyberte atom vodíku (H) a nakreslete dva na každý atom kyslíku. **Obrázek 22.**



Obrázek 22. Přidávání atomů vodíku


KROK 4

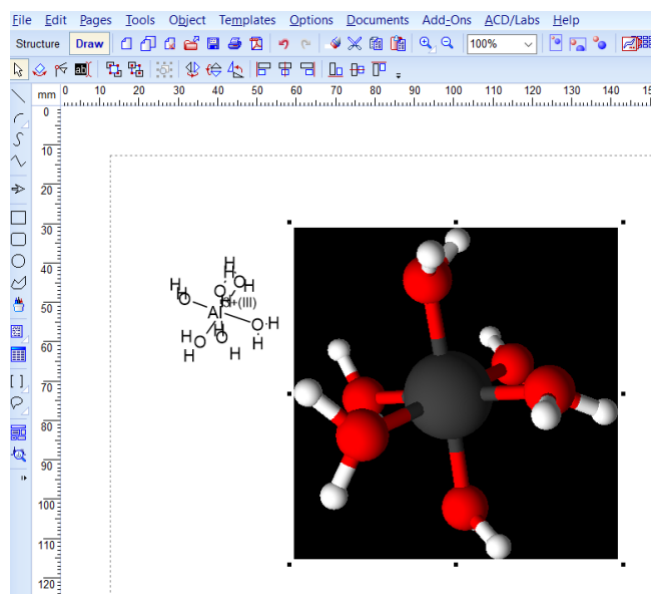
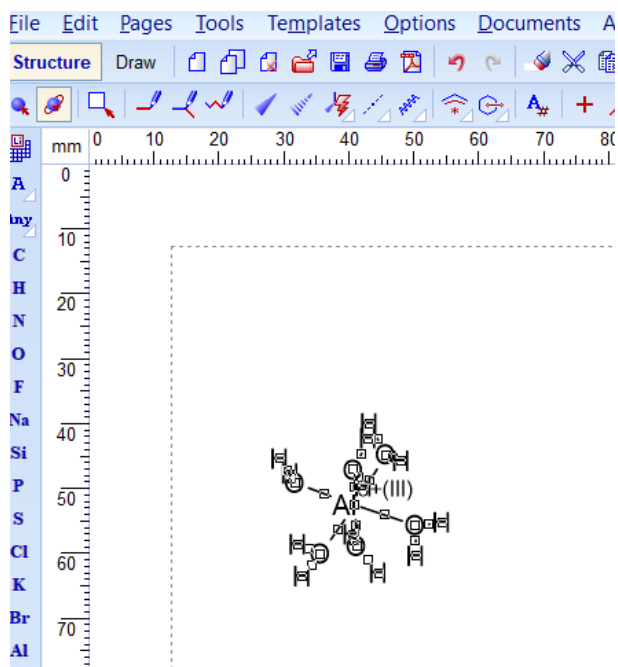
Výběr správného náboje pro hliník. Vyberte vlastnosti atomu (panel nástrojů na levé straně) a změňte náboj. **Obrázek 23.**



Obrázek 24. Struktura po úpravě

KROK 6

Zobrazte výslednou strukturu trojrozměrně tak, že ji nejprve vyberete a poté kliknete na možnost  na panelu nástrojů. Otevře se nové okno (*3D Viewer*) s 3D pohledem na molekulu. **Obrázek 25 a) a b).**



a

b

Obrázek 25. a) a b) Optimalizace a 3D struktura

1.4. Příklady úloh pro zpracování obsahu výuky

1. Najděte příklad barevného koordinačního iontu. Nakreslete ho. Popište jeho strukturu a uveďte koordinační číslo. Uveďte typ ligandu (monodentátní nebo...)

Poté tuto sloučeninu znázorněte ve 3D, optimalizujte ji a uložte.

2. Prozkoumejte aplikace koordinačních sloučenin v každodenním životě. Vyberte jednu molekulu pro zobrazení v programu ChemSketch. Zapište si do sešitu aplikaci zvolené sloučeniny v každodenním životě.

Uložte si optimalizovanou 2D a 3D strukturu těchto molekul do svého počítače.

3. Nakreslete příklad bidentátního ligandu, například 1,2-diaminethandichloroplatina(II)

1.5.Příklady úloh - hodnocení studentů

1.Nakreslete následující sloučeninu: $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$ a její geometrický izomer. Pojmenujte oba izomery a typ ligandů a proveďte s nimi následující:

- a) zobrazte strukturu sloučeniny v *3D prohlížeči*.
- b) zobrazte strukturu sloučeniny v 3D prohlížeči pomocí tyčí a míčků.
- c) určete vazebný úhel mezi atomy.
- d) uložte 2D i 3D strukturu sloučeniny na plochu počítače.

2. Nakreslete následující sloučeninu $[\text{AuCl}_2\text{Br}_2]^-$. Určete, zda má tento ion geometrické izomery. Pokud existují, nakreslete je a zobrazte strukturu v *3D prohlížeči*.

Literatura

A. Smrdu: Snov in spremembe 2, III. izdaja, Jutro, 2012

F.Lazarini, J.Brenčič, Splošna in anorganska kemija, 3. izdaja 2. natis, FKKT, 2014

Predmetni izpitni katalog za splošno maturo iz kemije, RIC, 2021

www.britannica.com/science/coordination-compound, pridobljeno _____

J. C. Kotz, P. Treichel: Chemistry and Chemical Reactivity, 3rd edition, Harcourt College Pub, 1995

UČITELSKÝ MANUÁL – ChemDM

NÁKRES APARATUR

1. ZPRACOVÁNÍ

Vyučovaná jednotka: Nákres aparatur
Název jednotky: Nákres aparatur
Odhadovaný počet hodin: 1

1.1. Teoretický úvod

Odpařování je děj, při kterém dochází k přeměně kapalného skupenství na plynné. Toho se využívá např. při vysoušení pevné látky, při oddělování kapaliny z roztoku v tzv. odparkách.

Rotační vakuová odparka je laboratorní zařízení sloužící k rychlému odpaření většího množství rozpouštědla a získání pevné nebo netěkavé kapalné látky v něm rozpuštěné.

Vakuové odparky jsou komplexní laboratorní nástroje sestavené z chladiče, destilační baňky, kondenzační baňky, motoru, který otáčí destilační baňku, držáku k polohování aparatury a vodní lázně s elektrickým ohřevem. Sníženého tlaku je dosaženo připojením zdroje stabilního vakua. Rotační vakuová odparka se využívá především pro jednoduchou i zpětnou destilaci, krystalizaci, sušení, odpařování či zahušťování.



Obrázek 1. Rotační vakuová odparka

2. Vzdělávací výstup

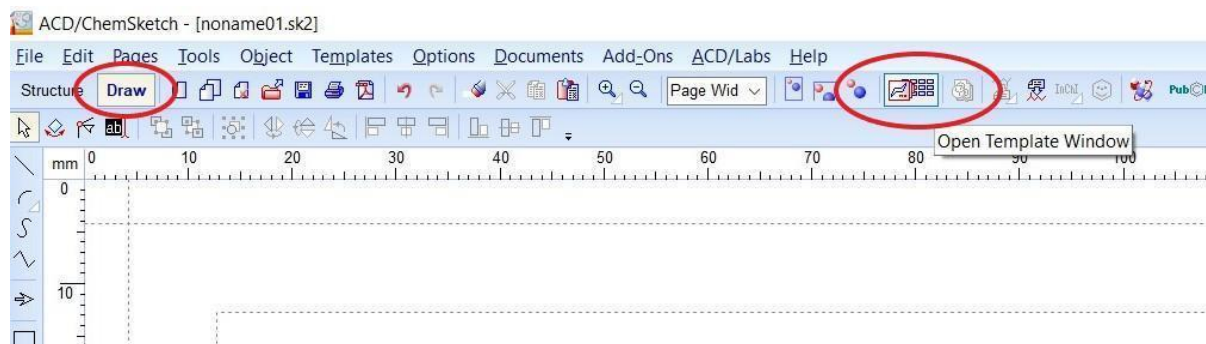
- návrh aparatury vakuové rotační odparky
- práce s jednotlivými částmi aparatury
- úprava, otočení, překlopení a zarovnání objektu
- vkládání a upravování popisků
- uložení vytvořeného schématu do PC
- úprava uloženého schématu

3. Pokyny pro použití softwaru ChemSketch

Pro vkládání obrázků je nutné v programu přepnout na mód “*Draw*”

Open Template window

Switch to “*Draw*” mode



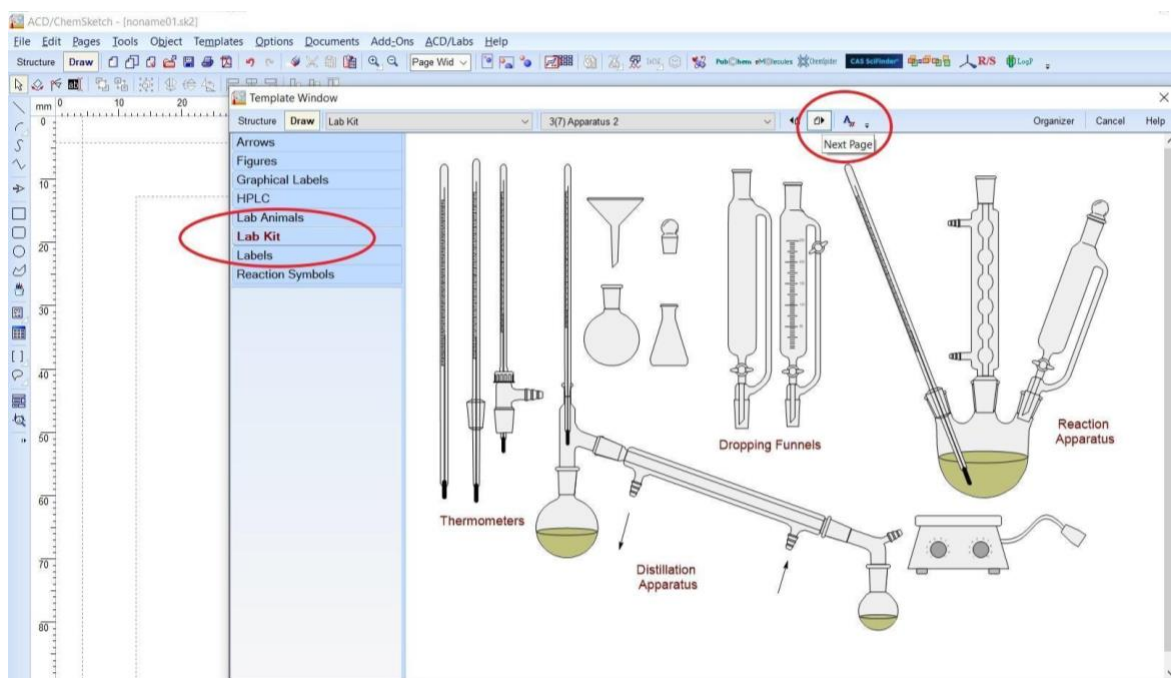
Obrázek 2. První krok v ChemSketch (lab kit)

lab Kit - výstřižek, možnost posouvat se pomocí šipek v sedmistránkové nabídce

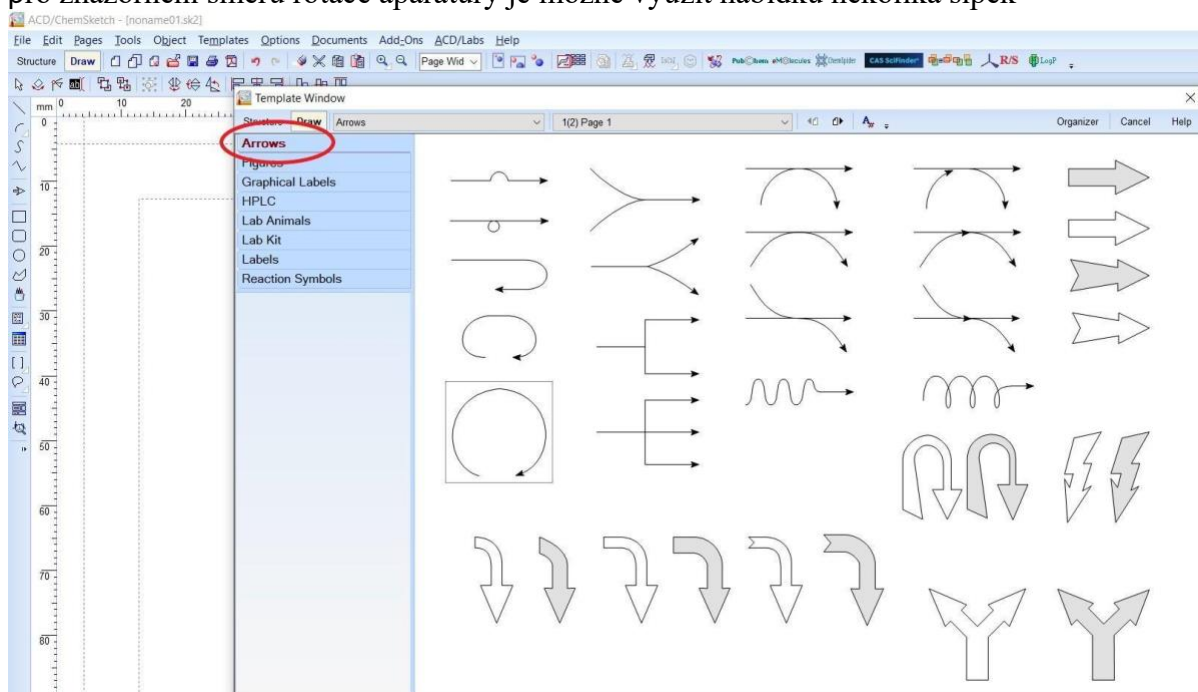
Použijte “*lab Kit*” - možnost výběru z několika stránek

Vybereme si nádoby, které potřebujeme k sestavení dané aparatury, začínáme s baňkami s kulatým dnem, splash guard, chladič grahamův, reducing adapter

ESC aby se odstranil zvolený objekt

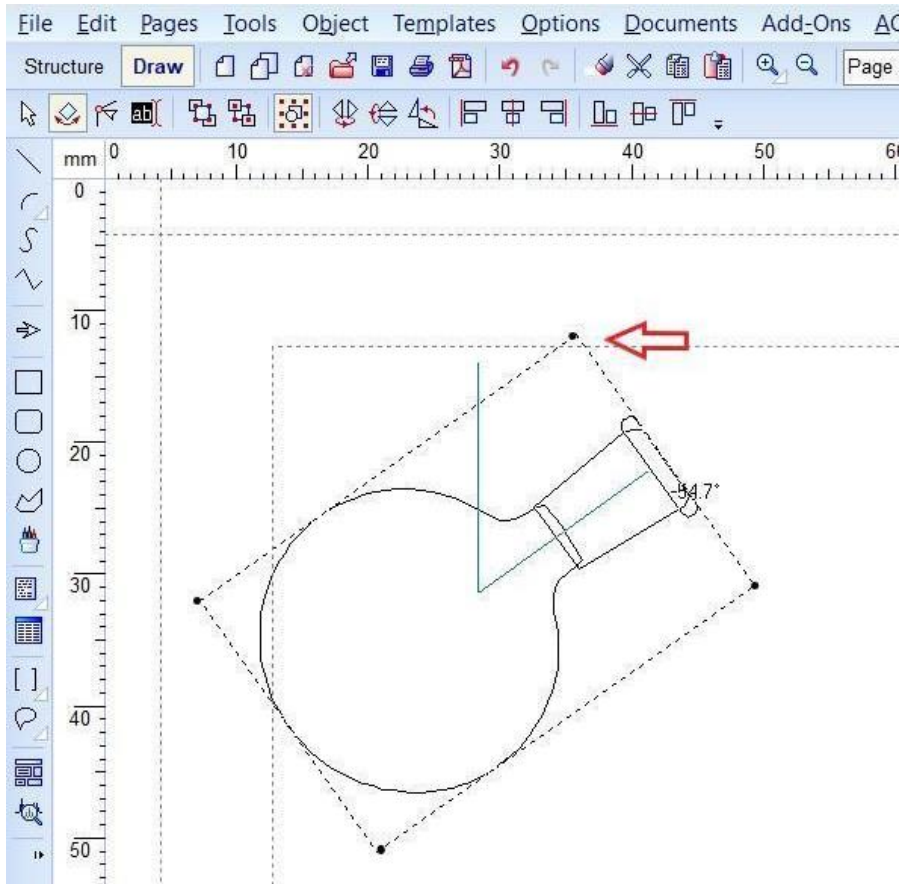
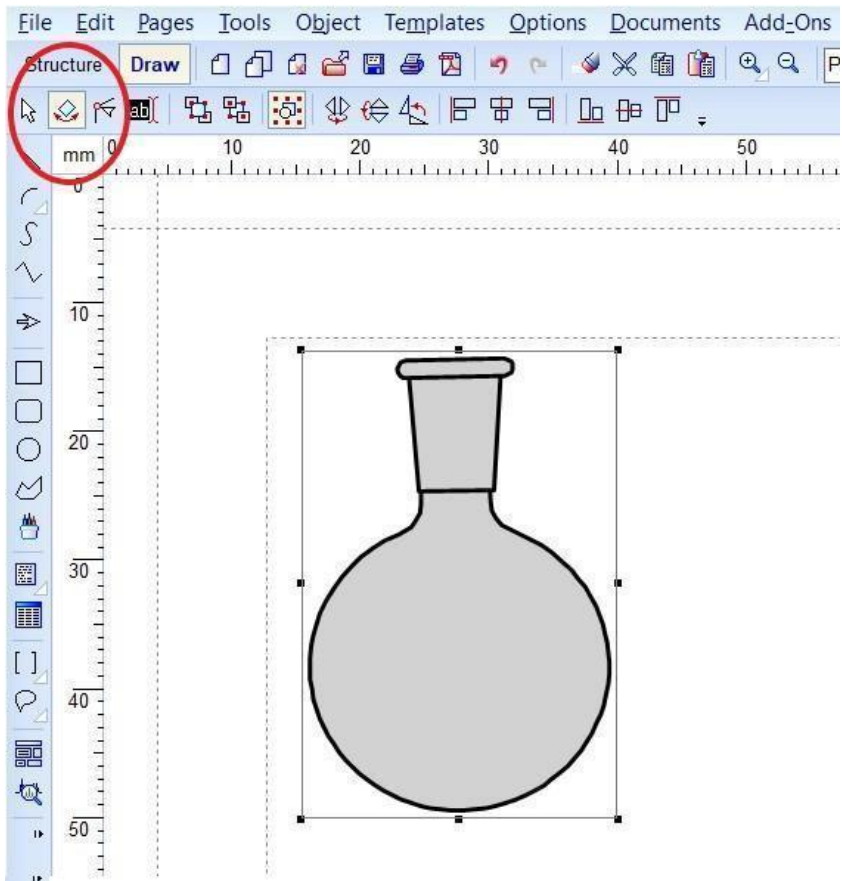


Obrázek 3. Lab kit pro znázornění směru rotace aparatury je možné využít nabídku několika šipek



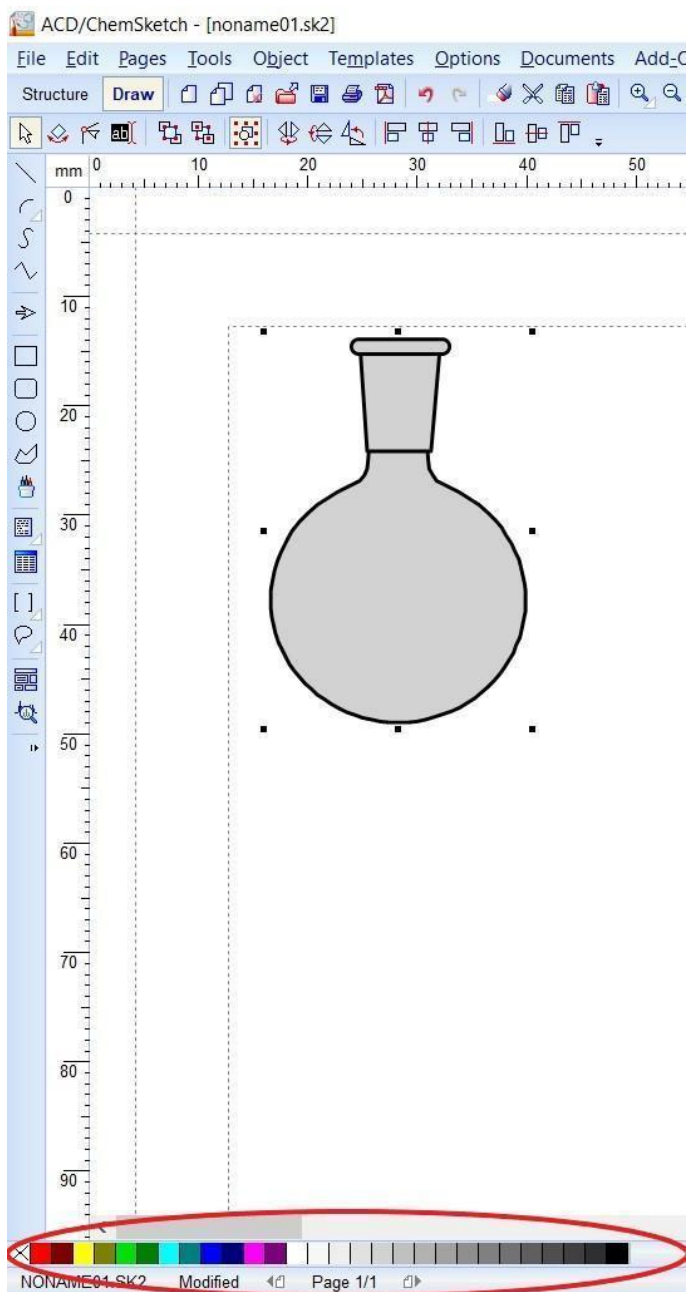
Obrázek 4. Šipky

Otáčení či překlopení vybraného objektu je možné pomocí funkce v levém horním rohu,



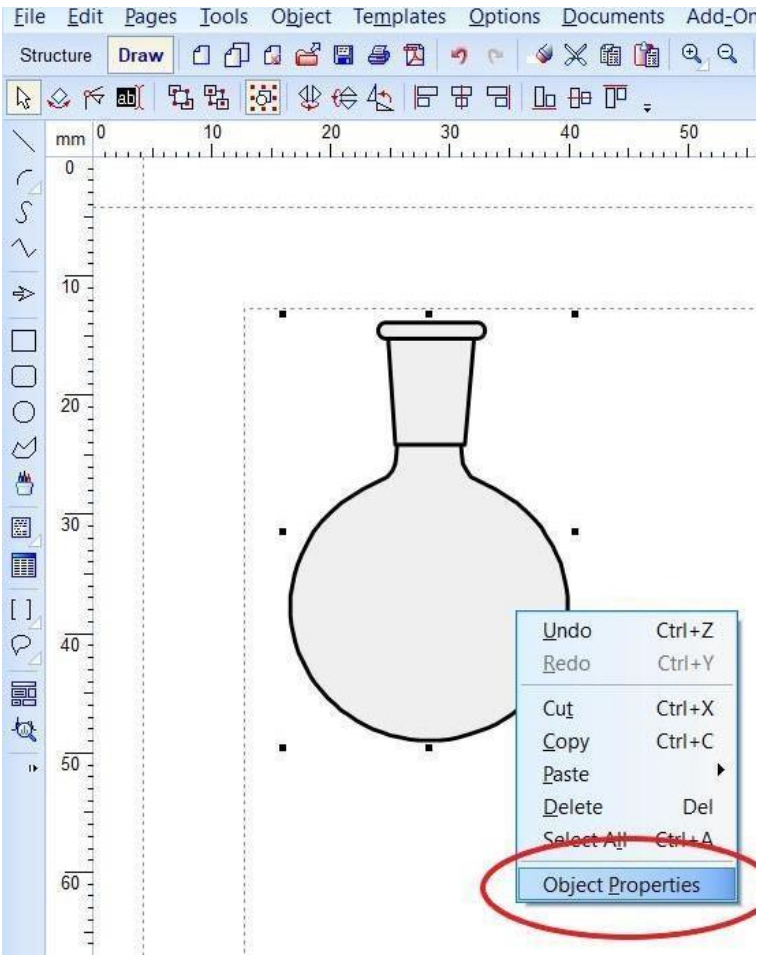
Obrázek 5. Otočení / převrácení vybraného objektu

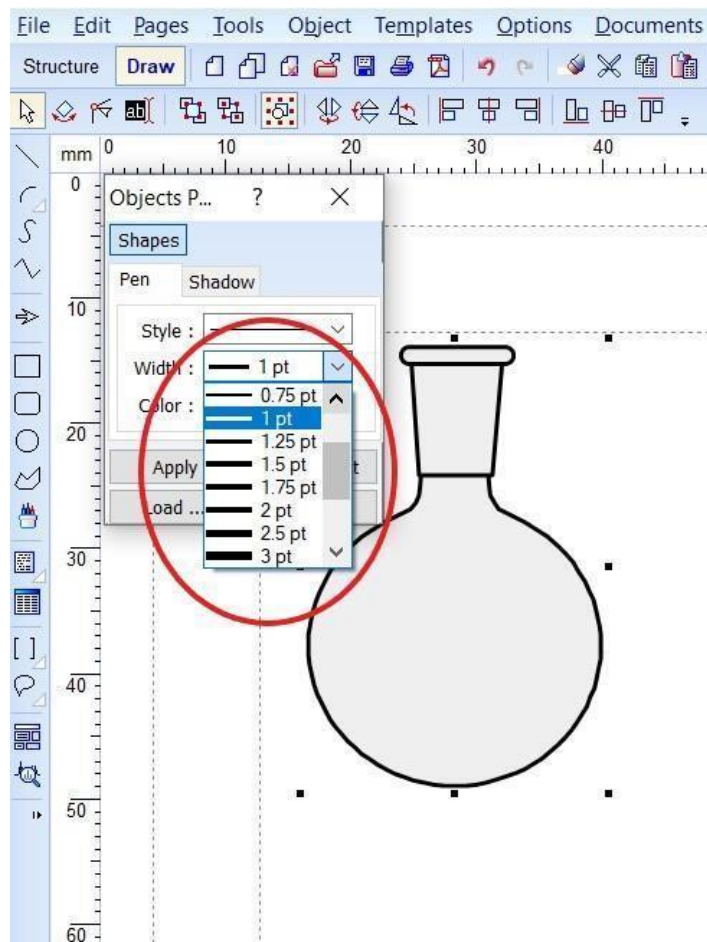
Pro změnu barvy plochy vybraného objektu je možné využít barevnou paletu, která se nachází v levé části dolního stavového řádku.



Obrázek 6. Změna barvy

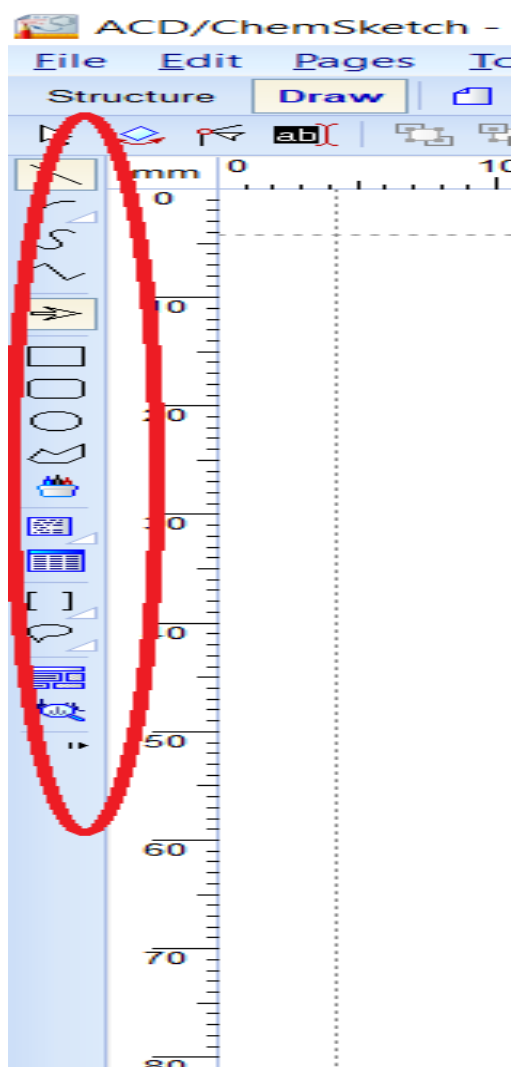
Pokud klikneme pravým tlačítkem na vybraný objekt, objeví se nabídka, co s vybraným objektem chceme udělat. Pokud zvolíme položku Object Properties, můžeme měnit barvu obrysových čar či její tloušťku a provedení (plná čára, přerušovaná).





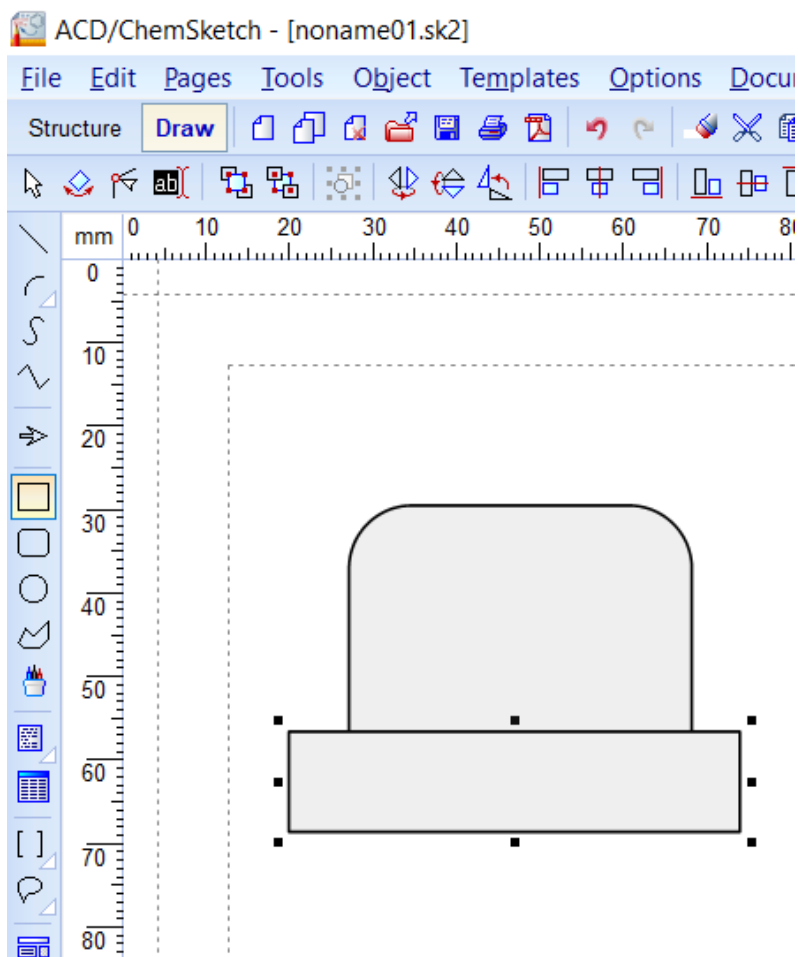
Obrázek 7. Změna vybraných vlastností obrázku

pro části aparatury, které nejsou normalizované a tedy je nenajdeme v nabídce (např. stojany, držáky...) lze jejich znázornění provést pomocí geometrických tvarů v nabídce postranní lišty.

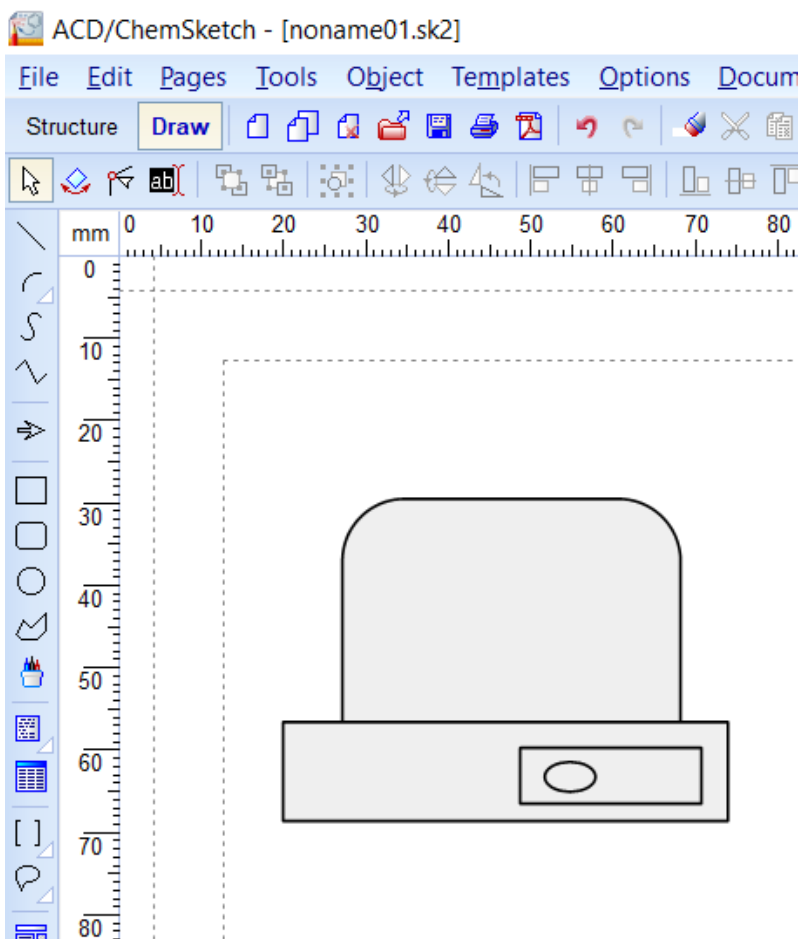


Obrázek 8. Postranní lišta v ChemSketch

Vložením jednoduchých tvarů lze sestavit např. vodní lázeň, kterou najdeme i v návrhu naší aparatury. i u takto vložených objektů a tvarů je možné měnit barvu a tloušťku čáry.



Obrázek 9. Vytvoření nestandardních objektů v ChemSketch



V rámci tvoření protokolů je nutné i vložení názvů jednotlivých objektů, které tvoří aparaturu. Postup je jednoduchý - ze stejné nabídky a stejným způsobem jako laboratorní nádobí, nebo můžeme vložit textové pole a název dopsat ručně.

ACD/ChemSketch - [noname01.sk2]

File Edit Pages Tools Object Templates Options Documents Add-Ons ACD/Labs Help

Structure Draw [Icons] Page Wid [Icons] PubChem eM

mm 0 10 20

0 10 20 30 40 50 60 70

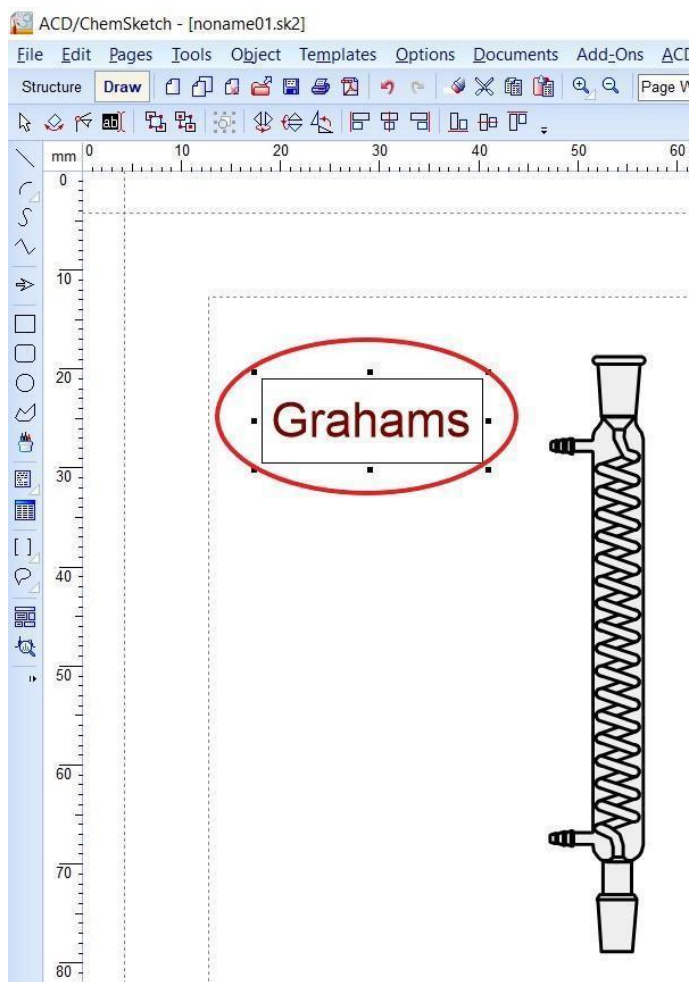
Template Window

Structure Draw Lab Kit 5(7) Adapters & Condensers

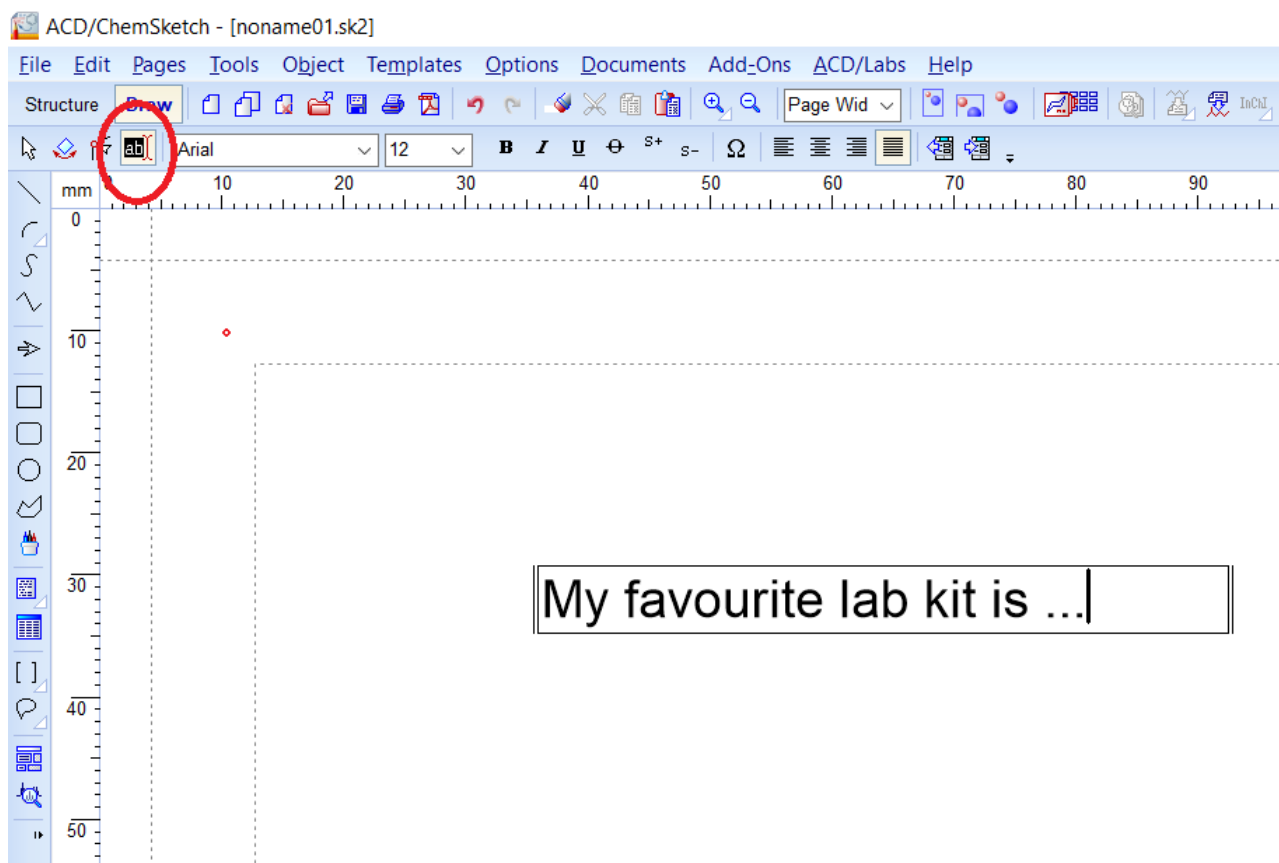
Arrows
Figures
Graphical Labels
HPLC
Lab Animals
Lab Kit
Labels
Reaction Symbols

Condensers

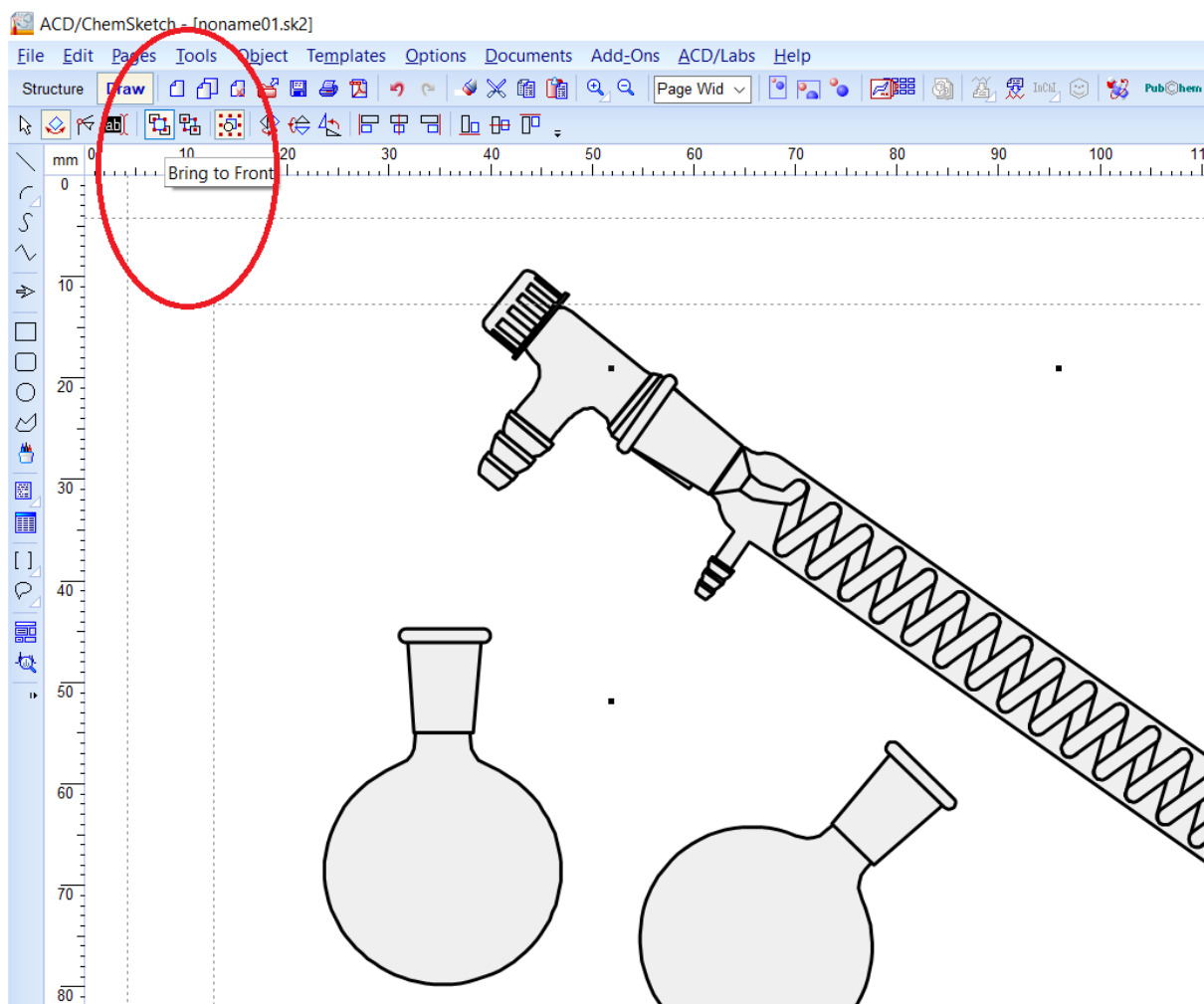
Grahams West Allihn Liebig Ro Evapor



Obrázek 10. Výběr názvů objektů

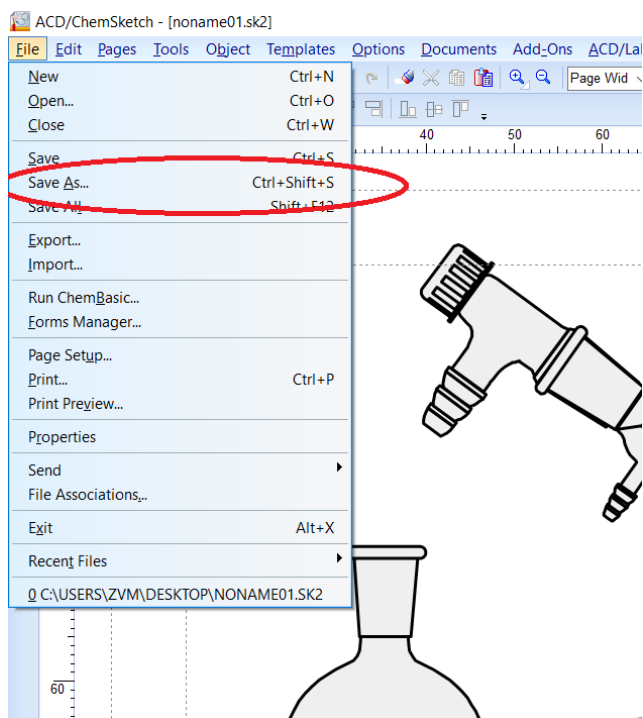


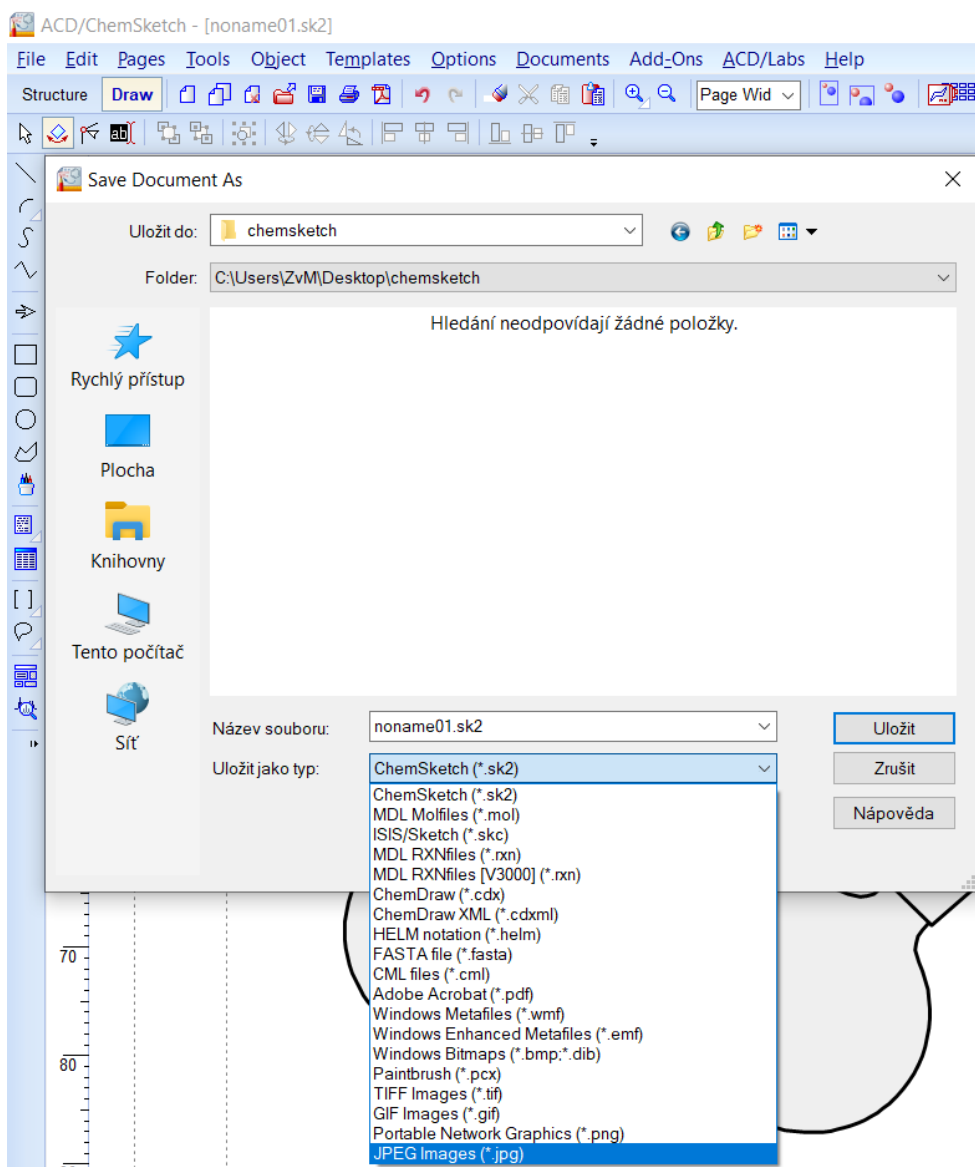
Jednotlivé položky, ze kterých tvoříme aparaturu je možné přesunout do popředí nebo pozadí, podle momentálních preferencí. Používáme tlačítko Bring to Front, popř. send to Back.



Obrázek 11. Posouvání objektem

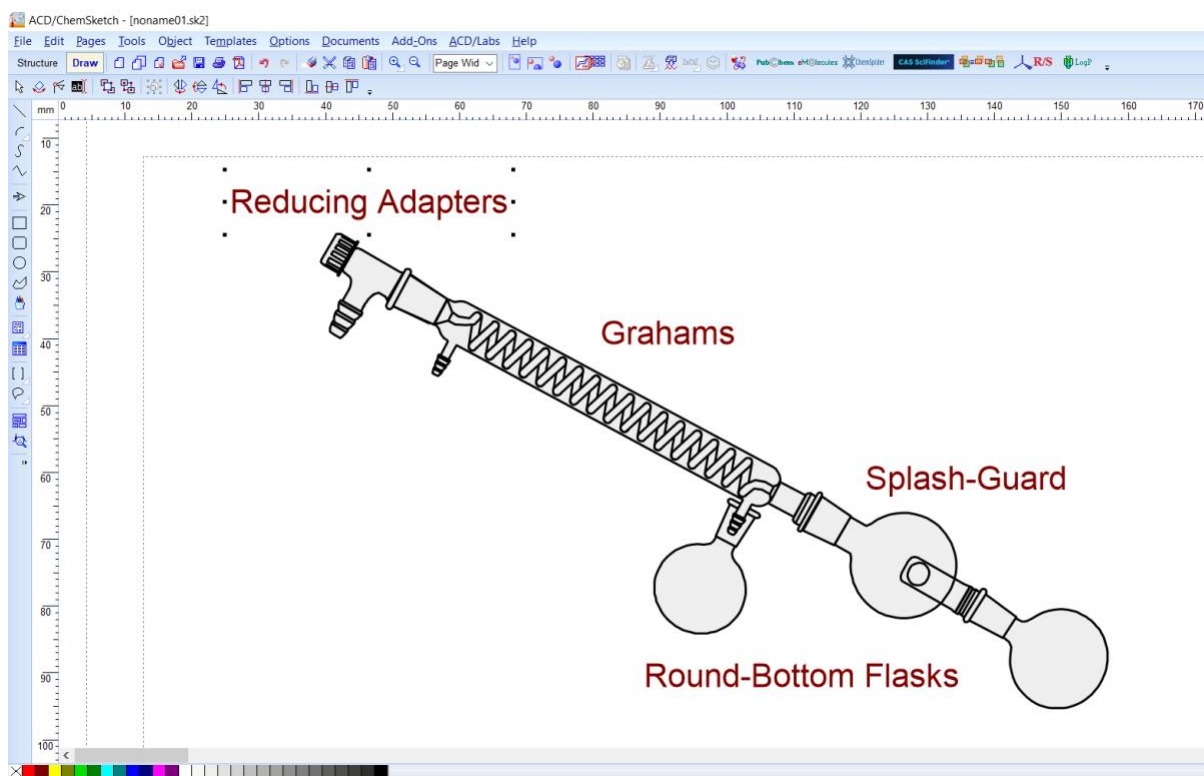
uložení práce je možné několika způsoby - pro další upravení je nutné práci uložit jako pracovní sešit ChemSketch *.sk2, pro využití např. do protokolu můžeme práci uložit ve formátu např. jpg



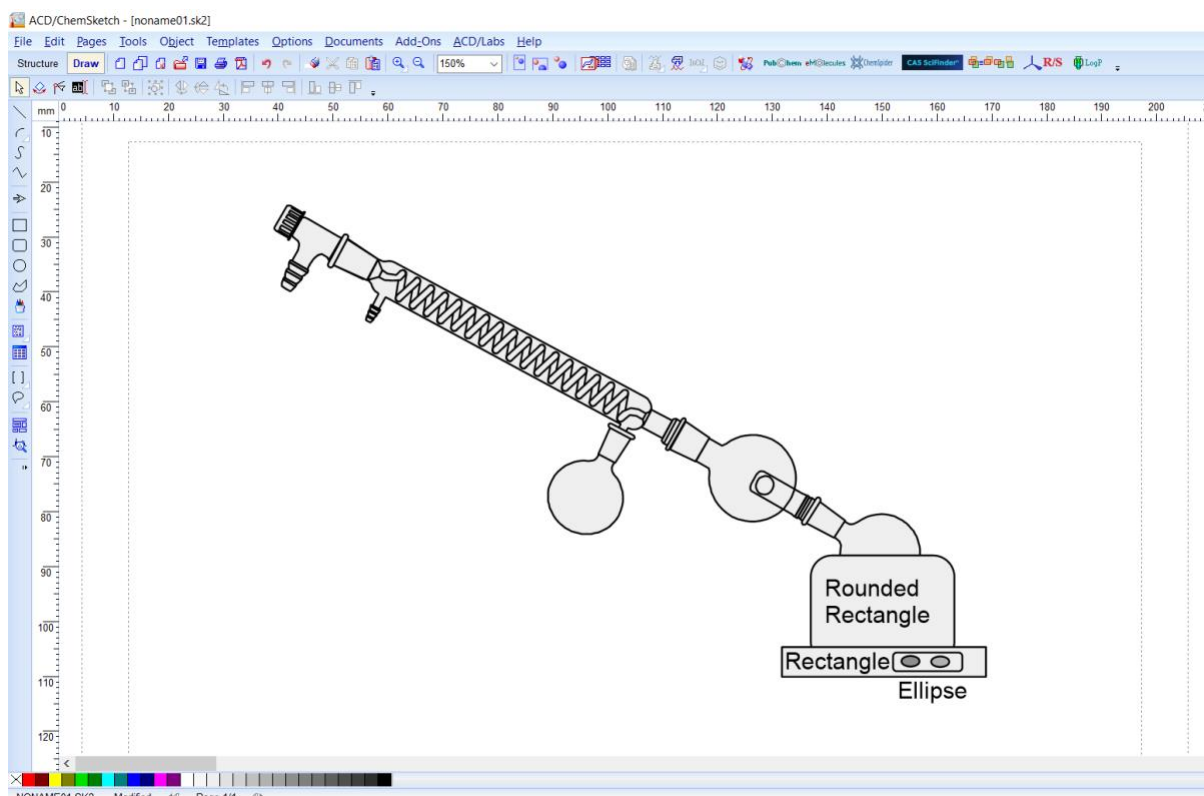


Obrázek 12. Možnosti uložení objektu v ChemSketch

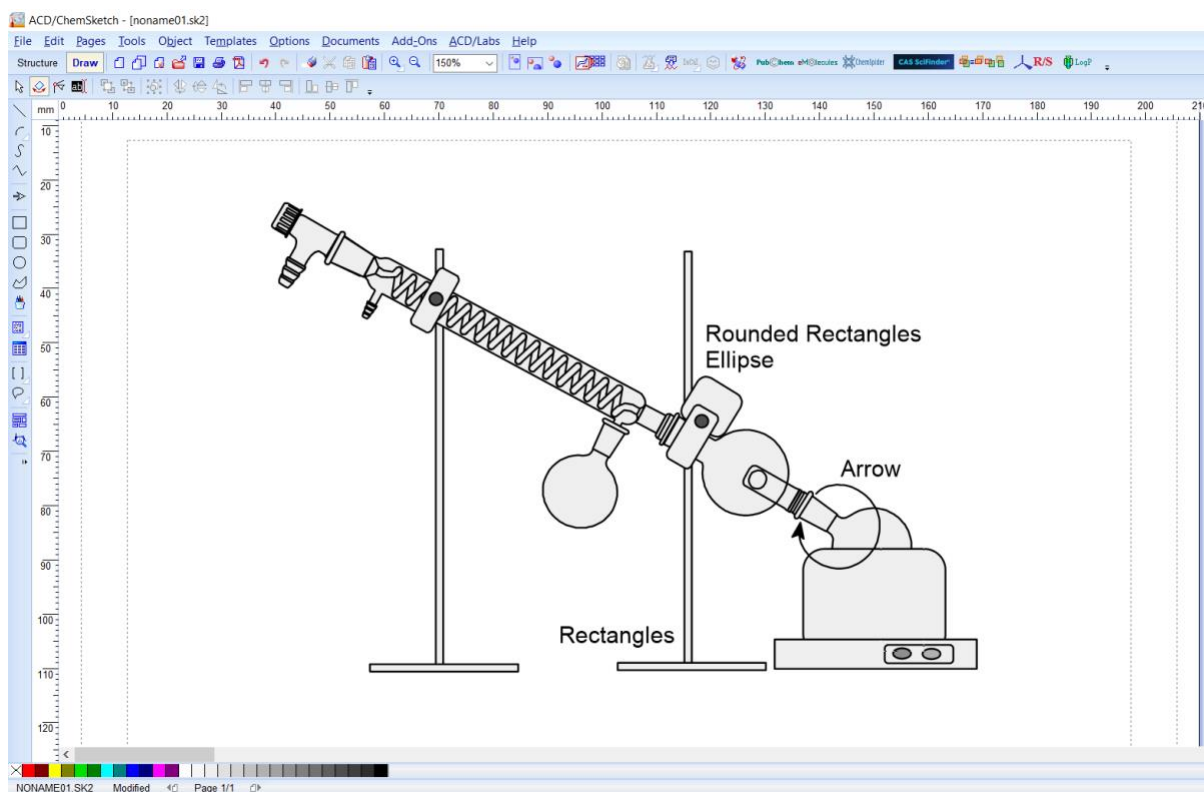
Sestavení rotační odparky



Obrázek 13. Laboratorní sklo pro sestavení vakuové rotační odparky

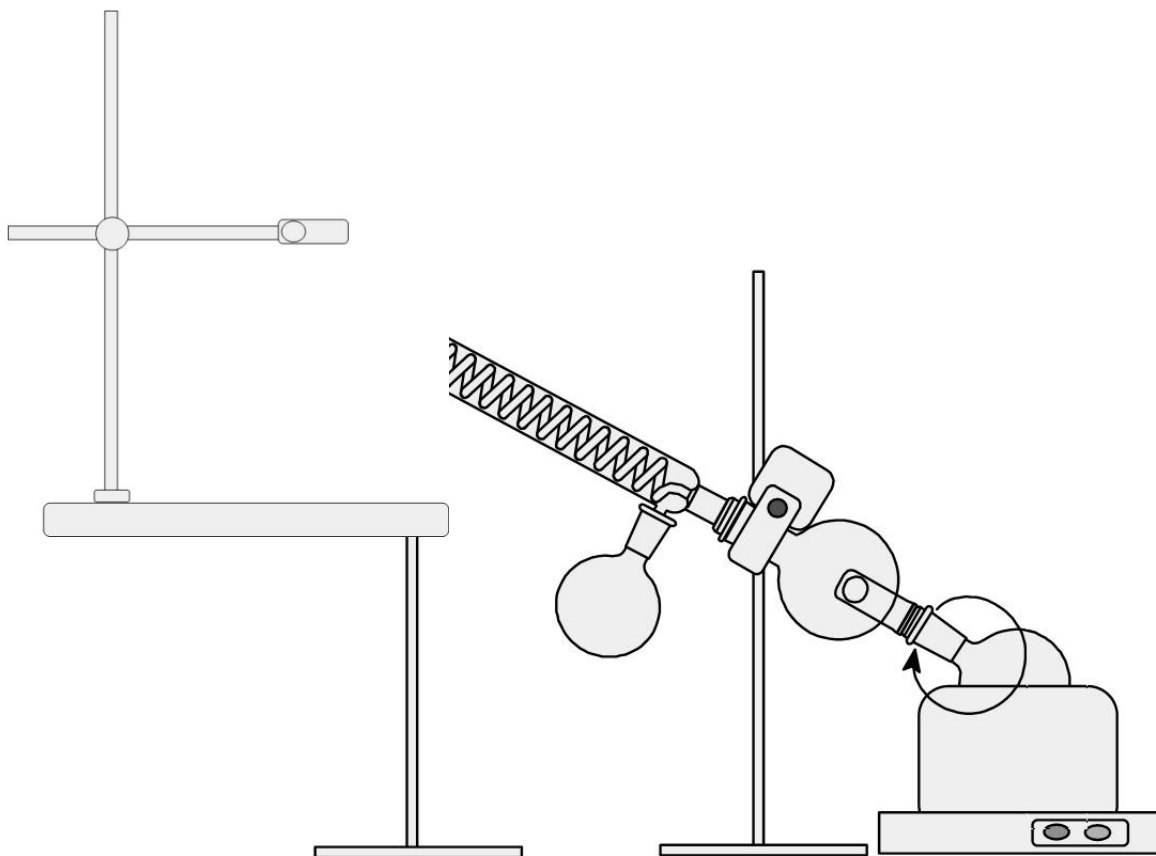


Obrázek 14. Příprava vodní lázně pro vývoj vodní páry



Obrázek 15. Finální schema rotační vakuové odparky

Finální podoba navržené aparatury rotační odparky.



Obrázek 16. Konečný vzhled rotační vakuové odparky

Další příklad:

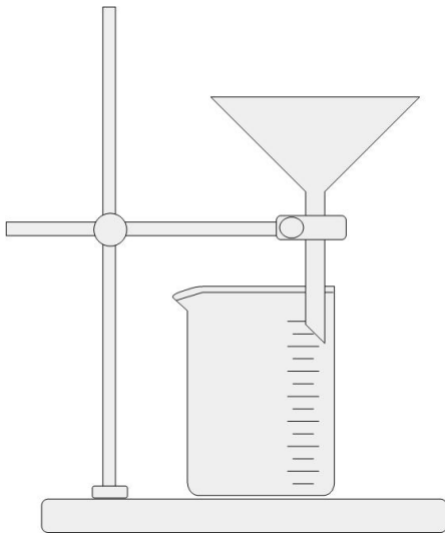
Filtrační aparatura

- 1 Vyberte stojan
- 2 Přidejte klemu podle obrázku 17

Obrázek 17. Stojan a klema pro filtrační aparaturu

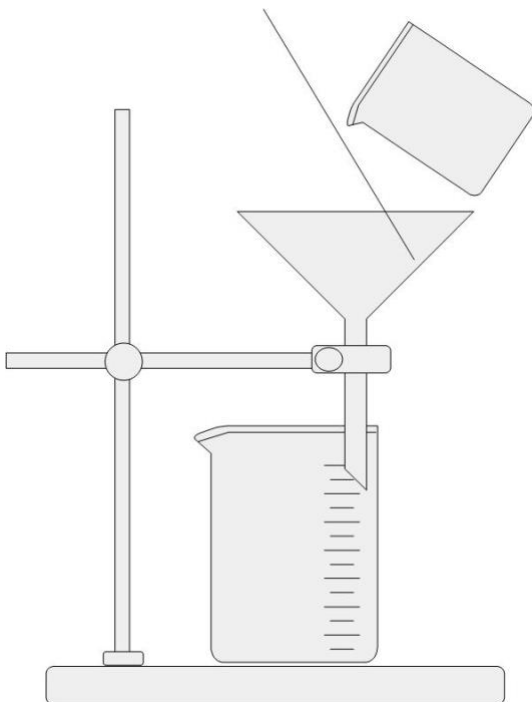
3 Poté umístíte filtrační nálevku na konec klemy

4 Umístíte nálevku a pod ni kádinku - viz obr.18



Obrázek 18. Umístění filtrační nálevky a kádinky

5 Nakonec umístíte kádinku a skleněnou tyčinku nad filtrační nálevku ve správném úhlu - obr.19



Obrázek 19. Umístění kádinky a skleněné tyčinky nad filtrační nálevku

4. Příklady úkolů pro zpracování obsahu výuky

Najděte průmyslové využití destilačních kolon při zpracování ropy. Zaměřte se na technologii, zkuste si představit jednotlivé části průmyslového zpracování ropy a pomocí programu Chems sketch nakreslete část procesu zpracování ropy.

Jednotlivé díly destilační kolony umístěte na volnou stránku programu Chems sketch a zkuste jednotlivé díly pojmenovat.

Poté všechny díly spojte a úhledně zarovnejte.

Výsledek své práce porovnejte se zadáním a výsledek konzultujte s lektorem.

5. Návrhy úkolů pro žáky

Vytvořte a navrhnete jednoduchou destilační aparaturu.

Pojmenujte jednotlivé části technologického schématu a vysvětlete jejich princip a použití při destilaci.

Sestavte a srovnajte všechny díly.

Popište proces destilace a prodiskutujte výsledky své práce se svým lektorem.