






ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ - ChemDM

1) ВОВЕД ВО ПРЕДМЕТОТ

Предметот се заснова на најновите пристапи и наставни техники, а дигитализацијата на наставниот процес ги доближува учениците до наставните содржини. Процесот на учење е подинамичен и поинтерактивен, а на учениците им се дава сосема поинаков увид во хемиските процеси кои ќе „оживеат“ во 3Д со користење на програмата ChemSketch. Како дел од запознавањето со работата во програмата, студентите ќе се запознаат со сите можности што ги нуди програмата ChemSketch, ќе научат да ги користат клучните функции предвидени со програмата на примери на структури на различни органски соединенија. Исто така, учениците ќе ја користат програмата за прикажување на опрема и лабораториски апарати, што е особено корисно за нив кога запишуваат белешки за време на редовните часови по хемија.

2) ОПИС НА КОРИСТЕНИ АЛАТКИ– ChemSketch

- Алатката *НормалноЦртање* е стандардна алатка кога се стартува програмата. Кога оваа алатка е активна, може лесно да нацртате нормални или разгранети синџири и да ги замените нацртаните атоми со други атоми од Периодниот систем на елементи.
- Алатката *НепрекинатоЦртање* е многу погодна за „никнување“ на нови атоми. Забележете дека кога оваа алатка е активна, може да цртате врски само од избраниот атом.
- Цртање двојни и тројни врски – со покажување на последната нацртана врска (ќе видите правоаголник околу врската), а потоа со кликување на неа правите двојна врска. Со кликување уште еднаш можеме да нацртаме тројна врска.
- Дејства за откажување - ова ќе го откаже последното извршено дејство и ќе го ресетира работниот простор на точно она што бил пред вашата последна промена.
- Бришење поединечни атоми - со активна алатка *Избриши* () , кликнете на атомот што сакате да го избришете од структурата.
- Промена на атоми - за да замените атом со нов елемент чие копче не е прикажано на *Лентата со алатки Атоми*

- Цртање врска помеѓу два атома - кога е избрана алатката *НормалноЦртање* () или *НепрекинатоЦртање* (), со влечење од еден атом кон друг се повлекува една врска меѓу нив
- Структура „Чистење“ – за „чистење“ на нацртаната структура со стандардизирање на сите должини и агли на врската
- Уредување на ознаки на атоми – Алатката *Уреди ознаки на атоми* () ви овозможува да ги замените терминалните атоми со стенографски кратенки.
- Ротирачки структурни фрагменти
- Цртање синцири – Со користење на алатката *Цртање Синцр* (), лесно можете да нацртате синцири со која било должина едноставно со влечење.
- Поставување полнежи и дефинирање на анјони и катјони
- Чистење на работниот простор – доколку сакате да го исчистите работниот простор за да ги нацртате вашите структури од почеток

3) СПИСОК НА ИЗБРАНИ ПОГЛАВЈА

- Основи на работа во ChemSketch софтвер (**Хрватска**)
- Координативни соединенија (**Словенија**)
- Алкани и циклоалкани (**Словенија**)
- Алкени и алкини (**Хрватска**)
- Арени (**Македонија**)
- Алкохоли (**Македонија**)
- Алдехиди и кетони (**Словенија**)
- Биомолекули (**Република Чешка**)
- Хиралност и оптичка активност (**Република Чешка**)
- Апарати за цртање (**Република Чешка**)

- Луис структури (Хрватска)

РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна единица: Basics of Working in ChemSketch Software
Наслов на тема:
Предвиден број на часови:

4.1. Теоретски вовед во поглавјето

Како дел од ова поглавје, учениците ќе ги научат основните алатки потребни за работа во програмата ChemSketch. Познавањето на овие алатки е неопходно за постигнување образовни резултати на сите следни наставни единици. Учениците ќе научат да цртаат едноставни примери на структурите на органските соединенија, да поминат низ различни ленти со алатки (општа лента со алатка, лента со алатки за атоми, структури) и да научат различни опции кои програмата ChemSketch може да ги понуди.

4.2. Образовни резултати од избраното поглавје


Во ова поглавје, учениците ќе научат како да:

- ги користат алатките достапни во програмата ChemSketch за да ги нацртаат саканите молекули на органски соединенија
- ја прикажат структурата на молекулите на органските соединенија во три димензии користејќи ја опцијата *3D Прегледувач*
- ги користат алатки за означување на делови од молекул или цел молекул, алатки за ротирање на молекули и движење на молекули во 2D и 3D.
- нацртаат јаглевороден синџир користејќи ги опциите *НормалноЦртање*, *НепрекинатоЦртање*, *ЦртањеСинџир*
- избришат делови од структурата на молекулот или целиот молекул користејќи ја опцијата *Избриши*
- нацртаат двојна и тројна врска во соединение


- додадат алкилни групи на постоечкото соединение и да ги променат типовите на атоми во структурата на молекулот
- да ги откажат промените направени во програмата
- ја оптимизираат структурата на молекулот
- нацртаат структурите на анјоните и катјоните со помош на алатката за генерирање полнеж

4.3. Инструкции за користење на ChemSketch софтверот за избрани поглавја

а) Користење на алатката *Нормално цртање*:

Алатката *НормалноЦртање* () е стандардна алатка кога се стартува програмата. Кога оваа алатка е активна, можете лесно да нацртате нормални или разгранети синцири и да ги замените нацртаните атоми со други атоми од Периодниот систем на елементи.

Пример 1. Нацртајте 2-метилпропан и 2-метилбутан со помош на алатката *Нормално цртање*. Завртете ја нацртаната структура вертикално.

Проверете дали е алатката *Нормално цртање* е овозможена на *Лентата со алатки Структура* и дека копчето Јаглерод () е избрано на *Лентата со алатки Атоми*.

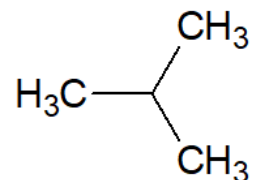
ЧЕКОР 1 Кликнете на празен простор за да нацртате метан CH_4 .

ЧЕКОР 2 Посочете на CH_4 и кога ќе видите правоаголник околу формулата за метан (**Слика 1**), кликнете на него за да додадете метил група со што се создава етан $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$.




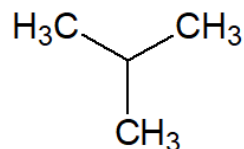
Слика 1. Правоаголник околу формулата за метан.

ЧЕКОР 3 Кликнете двапати на една од групите CH_3 за да нацртате 2-метилпропан прикажан на **Слика 2**.




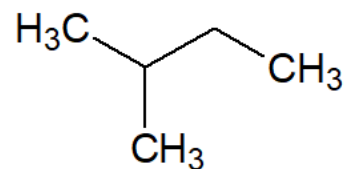
Слика 2. Структура на 2-метилпропан

ЧЕКОР 4 На *Лентата со алатки Структура*, кликнете на *Постави ја врската вертикално* () , а потоа кликнете на долната врска на структурата за да ја ротирате вертикално како што е прикажано на **Слика 3**.



Слика 3. Вертикално ротирана структура на 2-метилпропан

ЧЕКОР 5 На *Лентата со алатки Структура*, кликнете *НормалноЦртање* () , а потоа кликнете на најдесниот јаглероден атом за да нацртате 2-метилбутан (**Слика 4**).



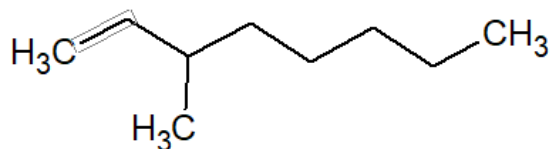
Слика 4. Структура на 2-метилбутан

Забелешка: Јагледородниот синцир ќе се зголемува секогаш кога ќе кликнете на најдесниот јаглероден атом. За да го проширите синцирот хоризонтално, притиснете CTRL кога ќе кликнете на атомот.

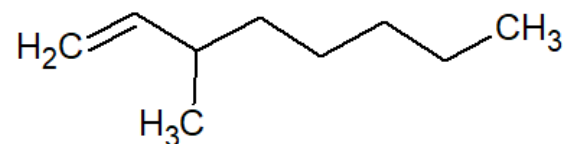
Цртање двојни и тројни врски:

Пример 2 Нацртајте 3-метилокт-1-ен и 3-метилокт-1-ин користејќи ја алатката *НормалноЦртање*.


ЧЕКОР 1 Нацртајте структура 3-метилоктан (Слика 5) и потоа посочете кон единечната врска помеѓу првите два јаглеродни атоми од јагледородниот синцир (ќе видите правоаголник околу врската), а потоа кликнете на неа за да направите двојна врска (Слика 6).

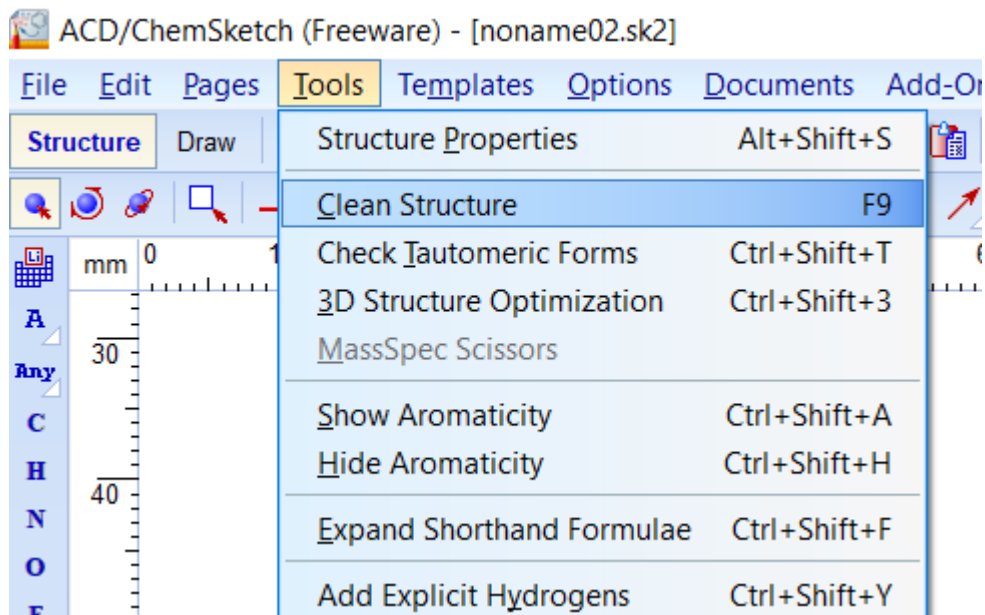


Слика 5. Правоаголник околу единечната врска помеѓу првите два јаглеродни атоми од јагледородниот синцир.

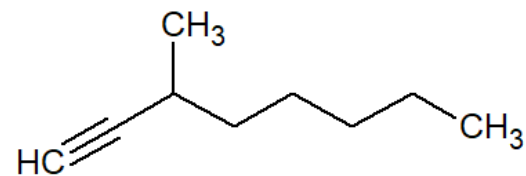


Слика 6. Структура на 3-метилокт-1-ен

ЧЕКОР 2 Кликнете таму повторно за да направите тројна врска. Изберете ја целата структура со кликување на иконата  и влечење околу целата структура. Потоа, кликнете на *Алатки* и изберете ја опцијата „чиста структура“ како што е прикажано на Слика 7а и Слика 7б.



Слика 7. а) Опција за структура за чистење



б) Структура на 3-метил-окт-1-ин

ЧЕКОР 3 Со кликување на опцијата *3D Прегледувач* () , прикажете ја структурата на молекулот 3-метил-окт-1-ин во три димензии.

ЧЕКОР 4 Обидете се да ја користите секоја од опциите за ротирање, преместување и означување на молекулите лоцирани на горната лента со алатки:




, а потоа прикажете го молекулот на секој од начините што ги нуди програмата, а опциите се прикажани и на лентата со алатки:




Со кликување на која било од опциите се менува начинот на кој се прикажува молекулот 5-етил-2,2-диметилхептан. За автоматско ротирање на

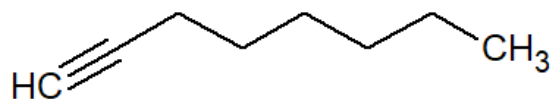
молекулот, кликнете на иконата  . За автоматско континуирано менување од еден во друг режим на прикажување на молекулот со ротација,

кликнете на иконата  .

Бришење на поединечни атоми:

Пример 3 Користете ја нацртаната структура на 3-метилокт-1-ин од примерот 2 и отстранете ја метил групата од структурата со помош на алатката *Избриши*. Потоа вратете ги сите промени направени на таа структура.

ЧЕКОР 1 На *Опитата лента со алатки*, кликнете *Избриши* (). Кога е активна алатката *Избриши*, кликнете на јаглеродниот атом од метил групата. Именувајте го добиеното соединение прикажано на **Слика 8**.

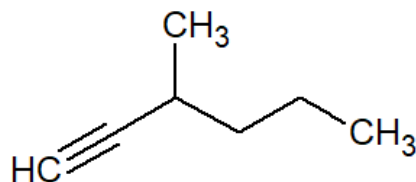


Слика 8. Структура на _____

ЧЕКОР 2 На *Опитата лента со алатки*, кликнете *Врати назад* () за да ги вратите промените.

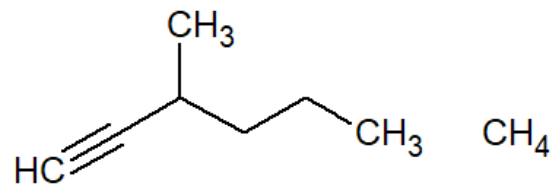
Дополнителни алатки:

ЧЕКОР 3 Повторно користете ја алатката *Избриши*, но сега кликнете на последниот, но еден јаглероден атом од главниот синџир. Забележете дека целата етил-група е отстранета од структурата на 3-метилоктан. Именувајте го добиеното соединение прикажано на **Слика 9**.




Слика 9. Структура на _____

ЧЕКОР 4 Вратете ги назад сите промени и кога повторно ќе имате 3-метилокт-1-ин, изберете ја алатката *Избриши* и притискајќи на копчето CTRL, повторно кликнете на истиот јаглероден атом. Како што можете да видите на **слика 10**, последниот атом е отстранет, додека терминалниот атом на главниот синџир прикачен на избришаниот сега е задржан на страницата.



Слика 10. Комбинирање на CTRL и алатката за бришење за да се избрише последниот, но еден јаглерод од структурата на 3-метилокт-1-ин.

ЧЕКОР 5 Кликнете на *Врати назад* () за да ги вратите назад промените и да се вратите на структурата на 3-метилоктан.

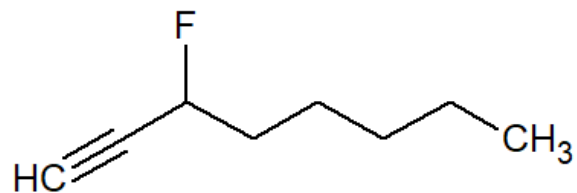
Промена на атомите:

Пример 4 Заменете го јаглеродниот атом од метил групата од 3-метилоктан со атом на флуор.

ЧЕКОР 1 На *Лентата со алатки Атоми*, кликнете на *Периоден систем* () за да се прикаже полето за дијалог Периоден систем на елементи.

ЧЕКОР 2 Во *Периодниот систем на елементи*, кликнете *Флуор*, а потоа кликнете ОК. Забележете дека копчето *Флуор* сега е активно на *Лентата со алатки Атоми*.

Кликнете на јаглеродниот атом од метил-групата за да го замените со атомот на флуор за да ја добиете структурата прикажана на **Слика 11**. Именувајте го соединението.




Слика 11. Структура на _____

Белешка:

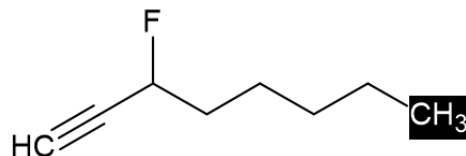
Кога избирате елементи од *Периодниот систем на елементи*, соодветните копчиња автоматски се додаваат во *Лентата со алатки за атоми*. За да ги отстраните овие копчиња, кликнете со десното копче на *Лентата со алатки Атоми* и изберете *Ресетирајте ја лентата со алатки* од менито. Во полето за пораки што ќе се појави, кликнете Да. Ова ќе ги отстрани сите копчиња за елементи дефинирани од корисникот освен стандардните.

в) Користење на алатката *Непрекинато цртање*:

Кога оваа алатка е активна, можете да цртате врски само од избраниот атом.

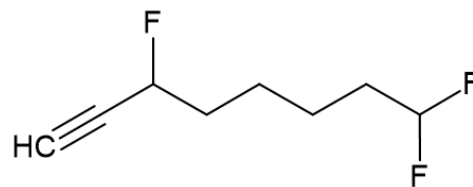
ЧЕКОР 1 На *Лентата со алатки Структура*, кликнете (*Непрекинато Цртање* ). Алтернативно, можете да го притиснете десното копче на глумчето за да ја вклучите алатката *Непрекинато Цртање*.

ЧЕКОР 2 Осигурајте се дека копчето *Флуор* (Флуор) е сè уште избрано на *Лентата со алатки Атоми*. Кликнете на најдесниот јаглероден атом во претходно нацртаната структура (види **Слика 12**) за да го истакнете:



Слика 12. Истакнат последен јаглероден атом во структура

ЧЕКОР 3 Кликнете повторно за да се појави флуор од избраниот јаглероден атом. Повторете ги чекорите 2-3 за истиот јаглероден атом да се појави од вториот атом на флуор (**Слика 13**). Именувајте го добиеното соединение.



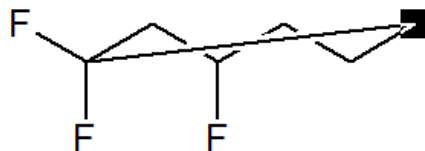
Слика 13. Структура на _____

Цртање врски помеѓу атомите и структурата „Чистење“:

Пример 5 Нацртајте единечна врска помеѓу крајните јаглеродни атоми во структура од 1,1,3-трифлуорохексан и потоа „исчистете ја“ таа структура. Да се „исчисти“ нацртаната структура значи стандардизирање на сите должини и агли на врската.

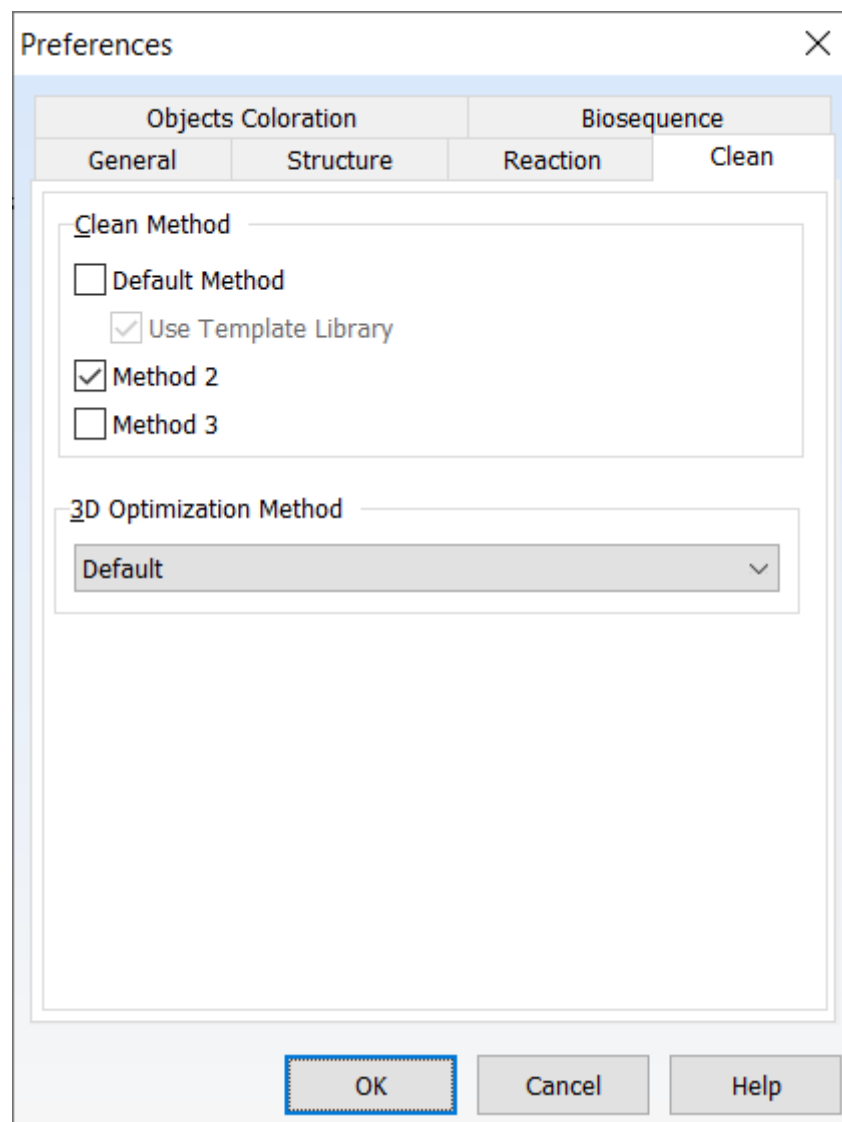
ЧЕКОР 1 Користете ја алатката *НепрекинатоЦртање* и нацртајте 1,1,3-трифлуорохексан.

ЧЕКОР 2 Со влечење од еден атом до друг се повлекува единствена врска меѓу нив. Кога алатката *НепрекинатоЦртање* е активна (или цртај нормално), посочете кон крајниот јаглерод и влечете до друг терминален јаглерод за да добиете единечна врска помеѓу тие јаглеродни атоми (**Слика 14**).




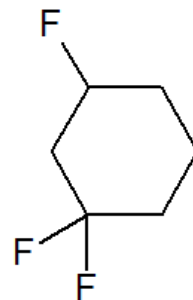
Слика 14. Повлекување од еден терминален јаглерод до друг за да се нацрта единечна врска меѓу нив

ЧЕКОР 3 Од менито *Опции*, изберете *Преференци*, а потоа, на прозорчето *Исчисти* од полето за дијалог *Преференци* што ќе се појави, поставете ги истите опции како што е прикажано на **слика 15**.




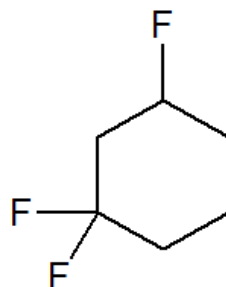
Слика 15. Поставување опции за структури за „чистење“

ЧЕКОР 3 Кликнете ОК за да го затворите полето за дијалог. На *лентата со алатки Структура*, кликнете *Исчисти структура* (). Доколку сте направиле се како што треба, треба да ја добиете структурата прикажана на **слика 16**. Именувајте го соединението.



Слика 16. Структура на _____


ЧЕКОР 4 На *лентата со алатки Структура*, кликнете *Постави врска вертикално* () , а потоа кликнете на врската јаглерод-флуор за да ја ротирате структурата (**Слика 17**).




Слика 17. Вертикално ротирана структура на _____

Уредување ознаки на атоми:

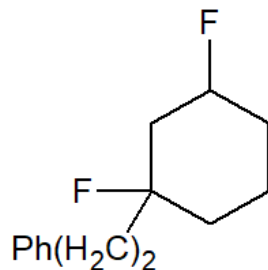
Пример 6. Заменете го атом на флуор од структурата прикажана на **Слика 17** со $(\text{CH}_2)_2\text{Ph}$ група и проширете ја таа нотација.

Алатката *Уреди ознака на атом* () ви овозможува да ги замените терминалните атоми со стенографски кратенки.

Користејќи ја структурата исчистена во претходниот дел, направете ги следните чекори:

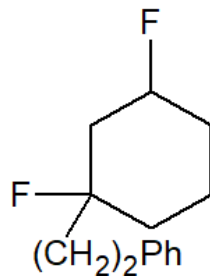
ЧЕКОР 1 На *лентата со алатки Атоми*, кликнете *Уреди ознака на атом* () , а потоа кликнете на најдолниот атом на флуор на нацртаната структура.

ЧЕКОР 2 Во полето за дијалог *Уреди ознака* што се појавува, напишете $(\text{CH}_2)_2\text{Ph}$, и кликнете *Вметни*. Забележете дека ознаката е вметната во саканата позиција и индексите автоматски се запишуваат. Структурата што треба да ја добиете со вметнување на таа ознака е прикажана на **слика 18**. Именувајте го соединението.



Слика 18. Структура на _____ добиена со вметнување на саканата нова ознака во саканата позиција.


ЧЕКОР 3 На лентата со алатки *Структура*, кликнете *Промени позиција* () , а потоа кликнете на ознаката за да ја превртите како што е прикажано на слика 19.

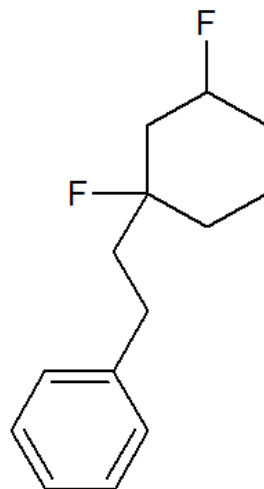


Слика 19. Превртена ознака на претходната структура (прикажана на **слика 18**)

Совет:

Ако задржите SHIFT и кликнете на ознаката со активна алатката *Промени позиција*, точката на поврзување на ознаката ќе се смени.

ЧЕКОР 4 Кликнете на *Уреди ознака на атом* () и кога алатка е активна, кликнете на добиената стенографија. Во полето за дијалог *Уреди етикета*, кликнете *Прошири* за да ја добиете структурата прикажана на **Слика 20**.



Слика 20. Проширена ознака на структура прикажана на Слика 19.

ЧЕКОР 5 Со кликување на опцијата *3D Прегледувач* () , прикажете ја структурата на добиениот молекул во три димензии.


ЧЕКОР 6 Обидете се да ја користите секоја од опциите за ротирање, преместување и означување на молекулите лоцирана на горната лента со алатки:



, а потоа прикажете ја структурата на молекулот на секој од начините што ги нуди програмата, додека опциите се исто така

прикажани и на лентата со алатки: .

Со кликување на која било од опциите се менува начинот на кој се прикажува структурата на молекулите. За автоматска ротација на молекулот,


кликнете на иконата . За автоматско континуирано менување од еден во друг режим на прикажување на молекулот со ротација, кликнете на

иконата .


Важно:

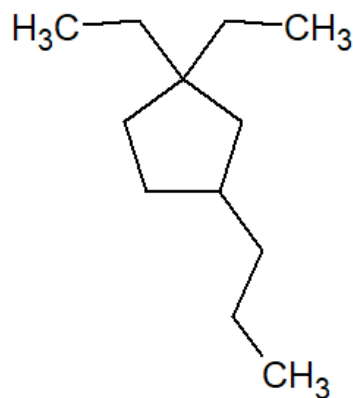
Само групните кратенки кои ги заменуваат ознаките на терминалните атоми може да се прошират со користење на копчето *Прошири (Прошири)*

Цртање низи

Со помош на алатката *Нацртај низа* () , можете лесно да цртате низи во која било должина едноставно со влечење.

Пример 7. Нацртајте структура на 1,1-диетил-3-пропилциклопентан со користење на алатката *Цртање низа*.



ЧЕКОР 1 Нацртајте циклопентан, а потоа на *лентата со алатки Структура*, кликнете *Цртање Синџир* () , и посочете го првиот јаглероден атом кој треба да содржи две етил-групи (врз основа на името на соединението). Повлечете лево за да создадете јаглероден синџир додека јаглеродниот бројач што се наоѓа покрај покажувачот на глумчето не достигне C2. Имајте предвид дека бројачот се менува со секој додаден јаглерод (при влечење напред) или отстранет (при влечење назад). Повторете ја истата постапка за да нацртате друга етил група на првиот јаглероден атом и да нацртате една метил група на третиот јаглероден атом. „Исчистете ја“ таа структура. Треба да ја добиете структурата прикажана на **Слика 21**.

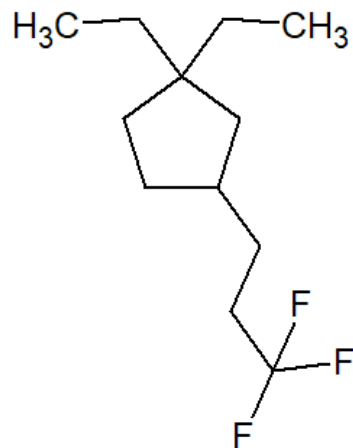


Слика 21. Структура на 1,1-диетил-3-пропилциклопентанpentane


Совет:

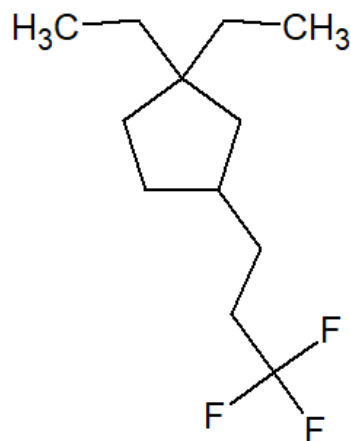
При влечење, врските на синџирот се поставуваат под агол од 120° една до друга. За да ги поставите врските под агол од 180°, држете го CTRL додека влечете.

ЧЕКОР 2 Со сè уште активна алатката *Цртање Синџир* () , на *лентата со алатки Атоми*, кликнете *Флуор* () , а потоа кликнете на третиот јаглерод од пропил групата три пати за да се појават три атоми на флуор **Слика 22**).



Слика 22. Додавање атоми на флуор во структурата прикажана на **Слика 21**.

ЧЕКОР 3 На *лентата со алатки Структура*, кликнете *Избери/Премести* () , потоа изберете ги овие три врски на атоми на флуор и кликнете *Исчисти структура* () . Добиената структура е прикажана на **Слика 23**. Именувајте ја структурата.



Слика 23. Структура на _____

ЧЕКОР 4 Со кликување на опцијата *3D Прегледувач* () , прикажете ја структурата на добиениот молекул во три димензии.


ЧЕКОР 5 Обидете се да ја користите секоја од опциите за ротирање, преместување и означување на молекули лоцирана на горната лента со алатки:



, а потоа прикажете ја структурата на молекулот на секој од начините што ги нуди програмата, додека опциите исто така се

прикажани и на лентата со алатки: .


Со кликување на која било од опциите се менува начинот на кој се прикажува структурата на молекулот. За автоматска ротација на молекулот,

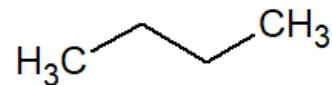
кликнете на иконата . За автоматско континуирано менување од еден во друг режим на прикажување на молекулот со ротација, кликнете на

иконата .

Поставување полнежи и дефинирање на анјони и катјони:

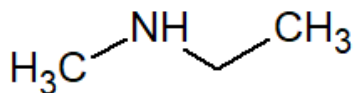
Пример 8. Нацртајте структура на бутан и потоа заменете го вториот јаглероден атом со атом на азот. Користете сет на алатки *Полнежи/Радикали* од лентата со алатки *Атоми* за да го промените полнењето на азот или да формирате радикал.

ЧЕКОР 1 На *лентата со алатки Атоми*, кликнете Јаглерод (проверете дали алатката *НормалноЦртање* () е активна), а потоа кликнете четири пати на истата точка од работниот простор за да ја нацртате структурата на бутан прикажана на **слика 24**.




Слика 24. Структура на бутан.


ЧЕКОР 2 На *лентата со алатки Атоми*, кликнете *Азот*, а потоа кликнете на вториот јаглероден атом (од лево кон десно) за да го замените со азотниот како што е прикажано на **слика 25**.

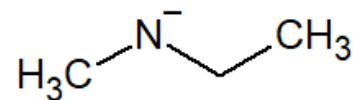


Слика 25. Структура на N-метилетанамин


ЧЕКОР 3 Во работниот простор додадете уште пет дупликати на нашата структура N-метилетанамин. Тоа можете да го направите на следниов начин: изберете ја креираната структура со кликување на празен простор во областа за цртање во близина на неа. Притиснете CTRL+C за да ја копирате на *Таблата со исечоци*. Залепете го потребниот број на копии со притискање на CTRL+V и кликување во работниот простор.

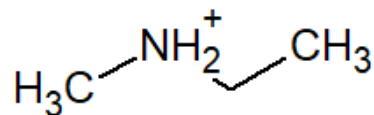
ЧЕКОР 4 На *лентата со алатки Атоми*, кликнете на долниот десен триаголник на () за да го проширите сетот алатки *Полнења/Радикали*.

ЧЕКОР 5 Изберете ја алатката *Намалување (-) на полнење* () (забележете дека покажувачот на глумчето се претвора во курсор), а потоа кликнете на групата NH од првата структура за да ја направите ањон на етилметилазанид (**Слика 26**).



Слика 26. Структура на етилметилазанид ањон.

ЧЕКОР 6 Кликнете со десното копче во работниот простор за брзо да се префрлите на алатката *Зголемување (+) на полнење* () (покажувачот на глумчето се претвора во курсор), а потоа кликнете на групата NH од втората структура за да ја направите N-метилетанаминиум катјон (**Слика 27**).

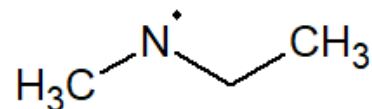


Слика 27. Структура на N-метилетанаминиум катјон

Белешка:

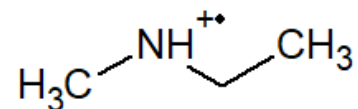
При користење на алатките за *Зголемување (+)* или *намалување (-) на полнење*, соодветната хемиска валентност на неметалниот атом се зачувува со автоматско додавање или отстранување на атоми на водород. Доколку го промените полнењето на металниот атом, тој се менува во зголемувања или намалувања во согласност со следното хемиски валидно полнење на соодветниот јон. Заедничките валенции може да се најдат во полето за дијалог на *Периодниот систем на елементи*.

ЧЕКОР 7 Од алатките *Полнења/Радикали*, изберете *Радикал* (покажувачот на глумчето се претвора во курсор) и кликнете на NH групата од третата структура за да нацртате слободен радикал на етилметиламин (**Слика 28**)



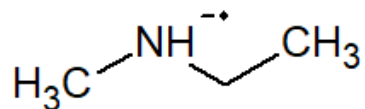
Слика 28. Структура на радикалот етилметиламин

ЧЕКОР 8 Кликнете со десното копче во работниот простор за брзо префрлување на покажувачот на глумчето во курсор и кликнете на групата NH од четвртата структура за да го нацртате диметиламинскиот радикален катјон (Слика 29)



Слика 29. Структура на катјон на радикалниот етилметиламин

ЧЕКОР 9 Следниот десен клик во работниот простор ќе го префрли покажувачот на глумчето во курсор; кликнете на NH групата од петтата структура за да се нацрта диметиламинскиот радикален анјон (Слика 30).



Слика 30. Структура на етилметиламин радикален анјон

Чистење на работен простор:

Доколку сакате да го исчистите работниот простор за да ги нацртате вашите структури од почеток, користете еден од следниве начини:

Пример: Создадете нов празен документ *ACD/ChemSketch*:

ЧЕКОР 1 На лентата со алатки *Општо*, кликнете *Нов документ*; или

ЧЕКОР 2 Од менито *Датотека*, изберете *Ново*.

Пример: Додајте нова празна страница на тековниот документ *ACD/ChemSketch*:

ЧЕКОР 1 На лентата со алатки *Општо*, кликнете *Нова страница*; или од менито *Страници*, изберете *Ново*.

Пример: Исчистете ја активна страница во тековниот *ACD/ChemSketch* документ:

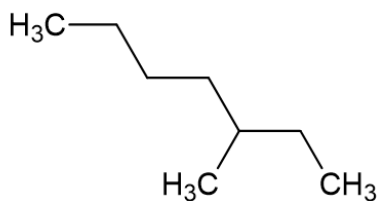
ЧЕКОР 1 Од менито *Уреди*, изберете *Избери ги сите*, а потоа, од менито *Уреди*, изберете *Избриши*; или

ЧЕКОР 2 Притиснете CTRL+A за да ги изберете сите објекти на страницата, а потоа притиснете *Избриши*; или на *лентата со алатки Општо*, кликнете *Избриши*, кликнете на празен простор подалеку од нацртаните структури за да ги изберете сите, а потоа кликнете на изборот.

4.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

Со цел да се повежба, да ги повториме горните чекори и да нацртаме некои структури.

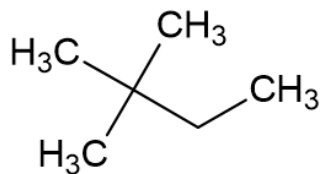
Задача 1 Користејќи ги вештините научени во ChemSketch, нацртајте ја прикажаната структура на 3-метилхептан.



Задача 2 Напишете ги кондензираните структурни формули на горенаведените соединенија:

- 2,2-диметилбутан
- 2-метилпентан.

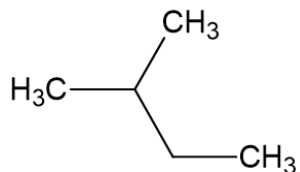
Задача 3 Нацртајте ја следната структурна формула на соединението, а потоа променете еден атом на водород по ваш избор со атом на флуор.



Задача 4 а) Нацртај ја следнава структура на алкан. Именувајте го соединението и додадете тројна врска помеѓу третиот и четвртиот јаглероден атом. Именувајте го добиеното соединение.

б) Избришете ја метил-групата од соединението и со помош на алатката *Цртање Синцири* додадете уште три јаглеродни атоми на најдолгиот јаглеводороден синцир така што тројната врска ќе биде помеѓу првиот и вториот јаглероден атом.

в) Додадете фенилна група на третиот јаглероден атом.



Задача 5 Во претходниот пример, користете ја функцијата за двојна врска.

4.5. Пример задачи за оценување на учениците

ЗАДАЧА 1

- А) Користејќи ги вештините научени во ChemSketch, нацртајте ја структурата на алканот што содржи 7 јаглеродни атоми.
- Б) Додадете метил група на третиот јаглероден атом во структурата. Именувајте ја структурата.
- В) Додадете двојна врска помеѓу третиот и четвртиот јаглероден атом во структурата. Именувајте ја структурата.
- Г) Заменете го јаглеродниот атом од метил-групата на третиот јаглероден атом во структурата со атом на бром. Именувајте ја структурата.
- Д) Заменете го атом на бром од структурата со CN група. Именувајте ја структурата.
- Ѓ) Користете алатка за непрекинато цртање и нацртајте циклична форма на соединението од подзадачата. Именувајте ја структурата.

ЗАДАЧА 2

- А) Нацртајте пентан и заменете го вториот јаглероден атом со атом на кислород.
- Б) Направете катјон, анјон и радикал од оваа структура менувајќи го полнежот на атомот на кислород. Именувајте го анјонот, катјонот и радикалот.

ЛИТЕРАТУРА:

1. ACD/ChemSketch, верзија 11.0 за Microsoft Windows, Упатство за цртање хемиски структури и графички слики

ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM
АЛКАНИ И ЦИКЛОАЛКАНИ

1.) РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна единица: Јаглевороди
Наслов на темата: Алкани и циклоалкани
Предвиден број на часови: 3

1.1. Теоретски вовед

а) Алкани

- Алканите се наједноставната група на органски соединенија.
- Тие се изградени од атоми на јаглерод и водород меѓусебно поврзани со единечни ковалентни врски со должината на врската јаглерод-јаглерод од 1,54 Å
- Алканите се заситени јаглевороди бидејќи во својата структура содржат само единечни ковалентни врски меѓу јаглеродните атоми и затоа во својата структура формираат максимален можен број врски со атоми на водород.
- Општата формула на алканот е: C_nH_{2n+2} , каде што n го претставува бројот на јаглеродни атоми.
- Името на алканот се образува од коренот на зборот, кој се формира врз основа на грчките броеви (освен првите четири алкани кои имаат тривијални називи) и наставката **-ан**. Низа од неразгранети алкани чии соседни членови се разликуваат по една метиленска група (-CH₂-) се нарекува хомологна низа на алкани. **Табела 1** ја прикажува хомолошката низа на алкани.

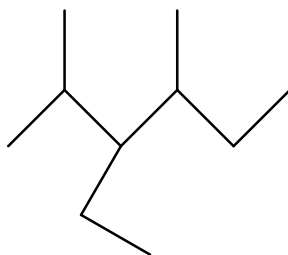
Табела 1. Имиња и молекуларни молекулски формули на првите десет алкани во хомологната низа.

Име на алканот	метан	етан	пропан	бутан	пентан	хексан	хептан	октан	нонан	декан
----------------	-------	------	--------	-------	--------	--------	--------	-------	-------	-------

Молекулска формула	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
-----------------------	-----------------	-------------------------------	-------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	---------------------------------

- Доколку алканот содржи разгранета низа на јаглеродни атоми, името на алканот се одредува според бројот на јаглеродни атоми од најдолгата јаглеводородна низа.
- Доколку алканот содржи две јаглеводородни низи со ист број јаглеродни атоми, името на алканот се определува според јаглеводородната низа на кој се сврзани поголем број супституенти (атоми или атомски групи сврзан за главната (најдолга) јаглеводородна низа).
- Алкилна група или алкил радикал е јаглеводородна група која има алканска структура со еден водороден атом помалку од основното соединение со наставка -ИЛ која се додава на основата од јаглеводородот. Се означува со буквата R.
- Јаглеродниот атом за кој е сврзана алкилната група е означен со број или локант кој мора да биде што е можно помал во нумерирањето на најдолгата јаглеводородна низа.
- Ако јаглеводородот содржи неколку исти алкилни групи, нивниот број се означува со претставка (ди-, три-, тетра-, ...) што означува колку исти супституенти се сврзале за основната низа кои не влегуваат во класификацијата на супституентите по азбучен ред.
- Ако има неколку различни супституенти на нумерирање, насоката на нумерирање се избира по азбучен ред.

Пример:



3-етил-2,4-диметилхексан

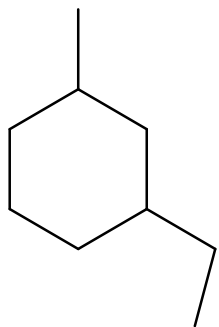
б) Циклоалкани

- Циклични алкани кои во својата структура содржат барем еден прстен.
- При именување на циклоалкан во однос на алкан со ист број јаглеродни атоми се додава префиксот цикло-.

- Доколку циклоалканот содржи само еден супституент, не е потребно да се напише локант.
- Циклоалканот се смета за супституент ако бројот на јаглеродни атоми во прстенот е помал од бројот на јаглеродни атоми во низата.
 - Доколку има повеќе од една алкилна група во структурата на циклоалканот, прстенот треба да се нумерира на начин на кој сите алкилни групи би биле со најмал можен број и доколку е можно, алкилната група која по азбучен ред е прва треба да добие помал број.

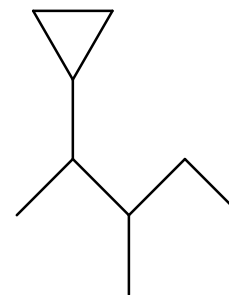
Пример:

а)



1-етил-3-метилциклохексан

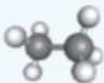
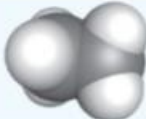











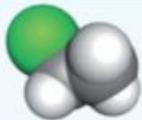

б)



2-циклопропил-3-метилпентан

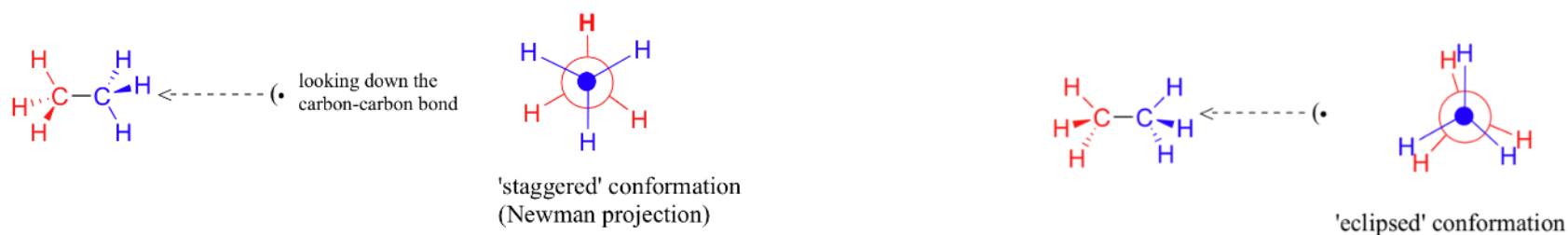
3D структурите на молекули може да се прикажат со различни модели: топчиња и стапчиња, полнење, стапчиња како што е прикажано во **табела 2:**

Табела 2: Молекуларни модели

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

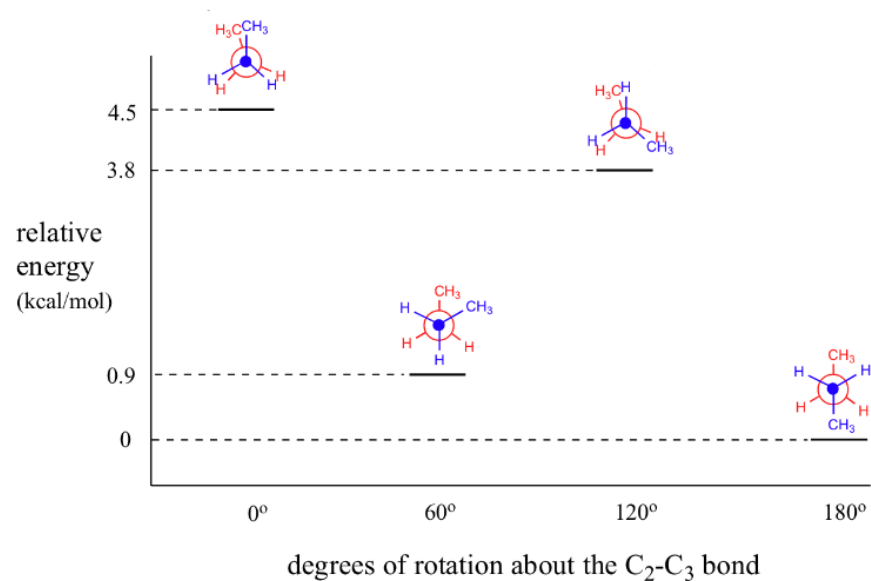
в) Њуманови проекциони формули

Њуманови проекциони формули се користат за подобра визуелизација на различни конформации на молекули. Во Њумановата проекција, гледаме надолжно надолу по должината на хемиската врска. На пример, во случајот со молекулата на етан, врска што ја разгледуваме е врска јаглерод-јаглерод. „Предниот“ атом е прикажан како точка, а „задниот“ атом како поголем круг.



(Слика 1) Њуманови проекциони формули
(скалеста и затемнета конформација)

Доколку ја гледаме врска С-С на овој начин, аголот формиран помеѓу врска С-Н на предниот јаглерод и врска С-Н на задниот јаглерод се нарекува диедрален агол. Најниската енергетска конформација на етанот, прикажана на слика 1 погоре, се нарекува скалеста или антиперипланарна конформација. Во овој тип на конформација сите диедрални агли се 60° и растојанието помеѓу предните и задните врски С-Н е максимално. По ротирање на предната - CH_3 група за 60° во насока на стрелките на часовникот, молекулата доаѓа во највисоко енергетско затемнување или синперипланарна конформација. Во таа конформација, диедралните агли се сите 0° (потребно е малку да се поместат врските во оваа Њуманова проекција, така што сите се уште се видливи). Слика 2 ја прикажува релативната енергија на различни конформации на Њуман.



(Слика 2) Релативните енергии за различни Њумови конформации

1.2. Образовни резултати

- да црта различни примери на молекули на алкани и циклоалкани и да ги претстави со структурна, рационална и скелетна формула.
- да генерира имиња на претходно нацртани молекули на алкани и циклоалкани во програмата *ChemSketch*
- да ја определи молекуларната формула на претходно нацртаните молекули на алкани и циклоалкани во програмата *ChemSketch*
- да се подобри приказот на структурата на молекулите (приспособување на должината на врската и аглите на меѓусебните врски) користејќи ја опцијата „Исчисти структура“
- да црта структурни изомери на алканите и циклоалканите
- да ги прикажува структурите на алканите и циклоалканите во три димензии
- да ротира молекули на алкани и циклоалкани во две и три димензии
- да го менува начинот на прикажување на структурите на молекулите на алкани и циклоалкани во три димензии
- да ги ротира молекулите на алкани и циклоалкани во 3D и 2D
- да определува должини на врски и агли на врски во молекули на алкани и циклоалкани

- да ги оптимизира структурите на молекулите на алканите и циклоалканите
- да ја циклизира праволиниската структура на молекулот на алканот во структурата на соодветниот циклоалкан
- да ја ротира молекуларната структура во три димензии со цел визуелно да ги претстави формулите за проекција на Њуман на различни алкани
- да ја зачува во компјутер дводимензионалната и тродимензионалната структура на саканиот молекул на алкан или циклоалкан

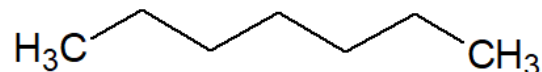
1.3. Инструкции за користење на програмата ChemSketch

Пример 1

Нацртајте ја молекулата 5-етил-2,2-диметилхептан, потоа уредете ја структурата според упатствата, генерирајте го нејзиното име во програмата и определете ја молекуларната формула на тој молекул, прикажете ја со скелетна формула, структурна и кондензирана структурна формула, прикажете ја структурата на молекулот во три димензии на различни начини, одредете ги должините на избраните врски и специфичните агли на врската, оптимизирајте го молекулот, ротирајте го и преместете го во две и три димензии, зачувајте ги 2D и 3D структурите во компјутер, циклизирајте ја структурата во соодветниот циклоалкан и генерирате име за тој молекул, определете ја молекуларната формула, префрлете ја во три димензии, зачувајте ја и 2D и 3D структурата на молекулот.

ЧЕКОР 1

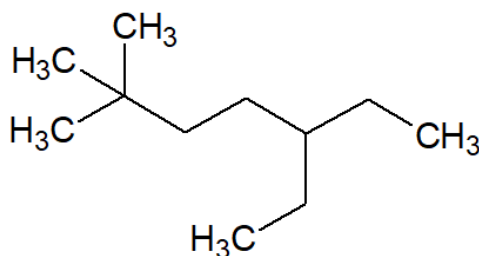
Изберете ја опцијата *НормалноЦртање*. Кликнете на празно место на интерфејсот. Ќе се појави структурата на молекулот на метанот (CH₄). Со кликување на тој јаглероден атом се создава единечна врска јаглерод-јаглерод. Со притискање на копчето ctrl и кликување на секој следен јаглероден атом, можно е да се нацрта јаглеводородниот синцир од седум јаглеродни атоми прикажани на **Слика 1**.



Слика 1. Структура на јаглеводороден синцир од седум јаглеродни атоми

ЧЕКОР 2

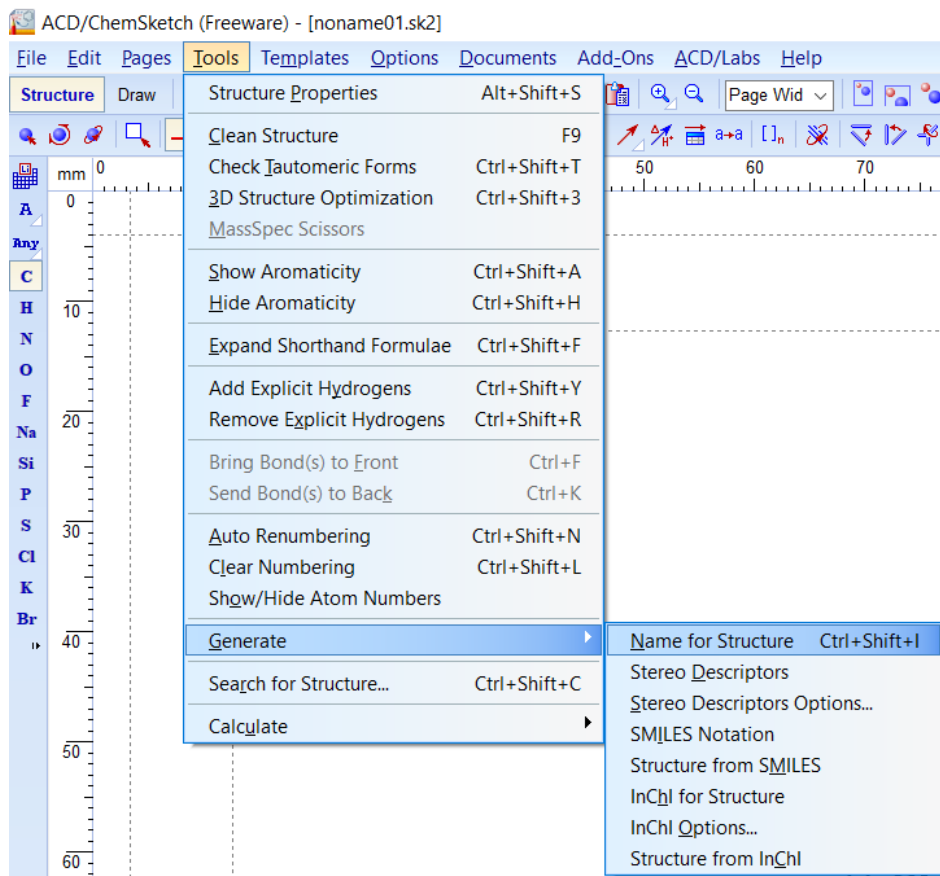
Со двоен клик на вториот јаглероден атом се создаваат две метил групи. Еден клик на петтиот јаглероден атом создава една метил група, која може да се прошири во етил група со кликување на јаглеродниот атом од метил групата. **Слика 2** ја покажува структурата на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан.



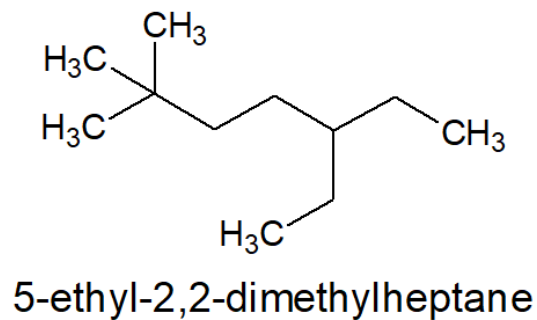
Слика 2. Структура на молекул на 5-етил-2,2-диметилхептан

ЧЕКОР 3

Кликнете на менито *Алатки*, изберете ја опцијата *Генерирај* и потоа кликнете на *Име на структура*. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 3а**, а на **Слика 3б** е прикажана структурата на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан под која е напишано неговото име. Ако не го добивте очекуваното име на молекулот, повторете ја постапката од **ЧЕКОР 1** и **ЧЕКОР 2**.



a

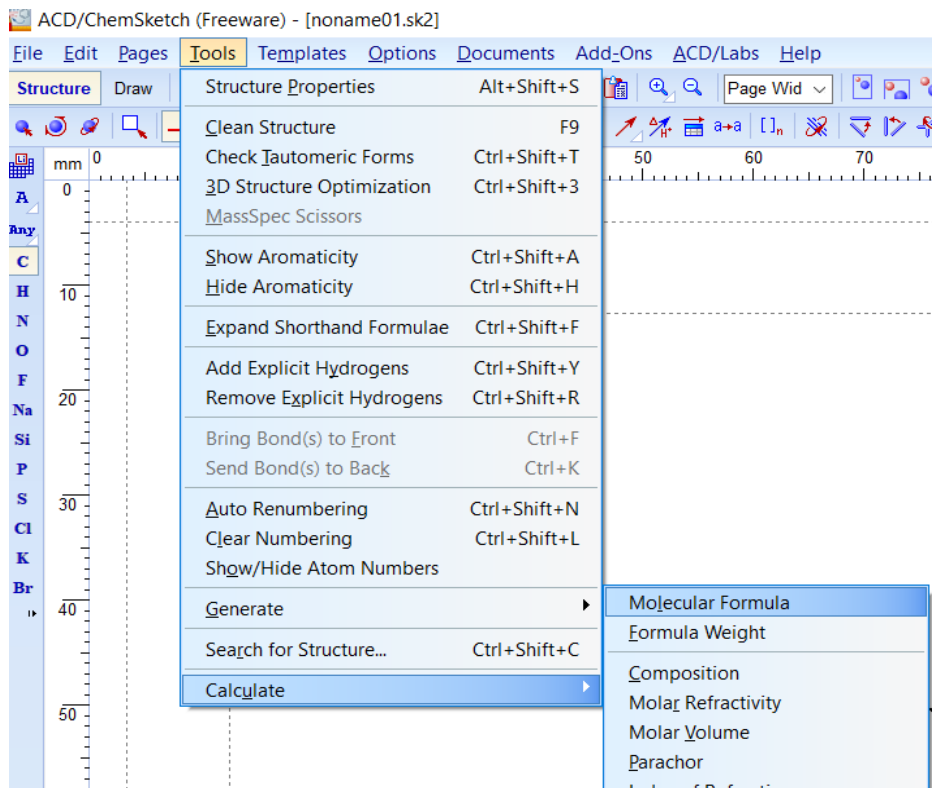


b

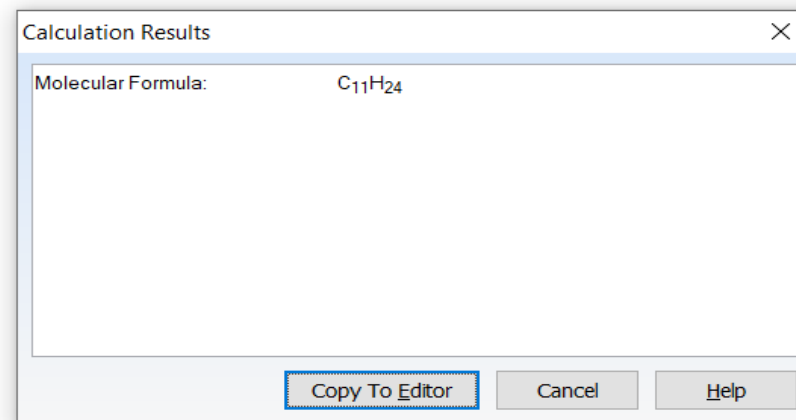
Слика 3. а) Постапката за генерирање на името на молекулот нацртана во програмата ChemSketch,
 б) структурата и соодветното име на претходно нацртаниот молекул 5-етил-2,2-диметилхептан.

ЧЕКОР 4

Кликнете на менито *Алатки*, изберете ја опцијата *Пресметај* и потоа кликнете на *Молекулска формула*. Споменатата постапка е прикажана на (Слика 4а), а на (Сликата 4б) е прикажана молекуларната формула на 5-етил-2,2-диметилхептан, која е прикажана во нов прозорец по извршувањето на низата од опишаните опции. За да се прикаже молекуларната формула на работниот лист, кој ја содржи структурата и името на нацртаниот молекул, кликнете на *Копирај во уредувач*.



а

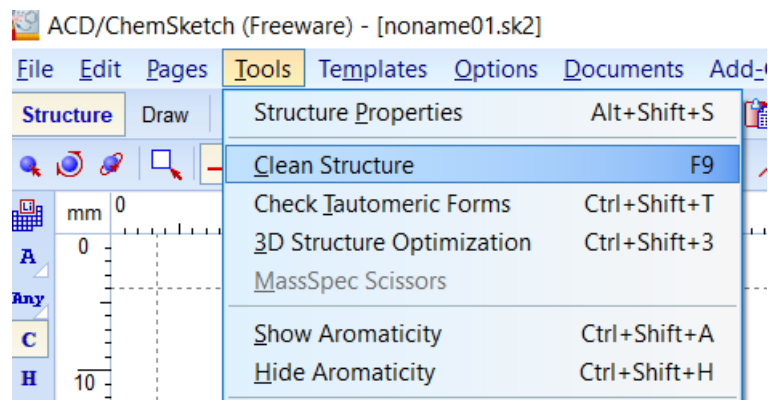


б




Слика 4. а) Низа на дејства за прикажување на молекуларната формула на 5-етил-2,2-диметилхептан,

б) Прозорец со молекуларната формула на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан.

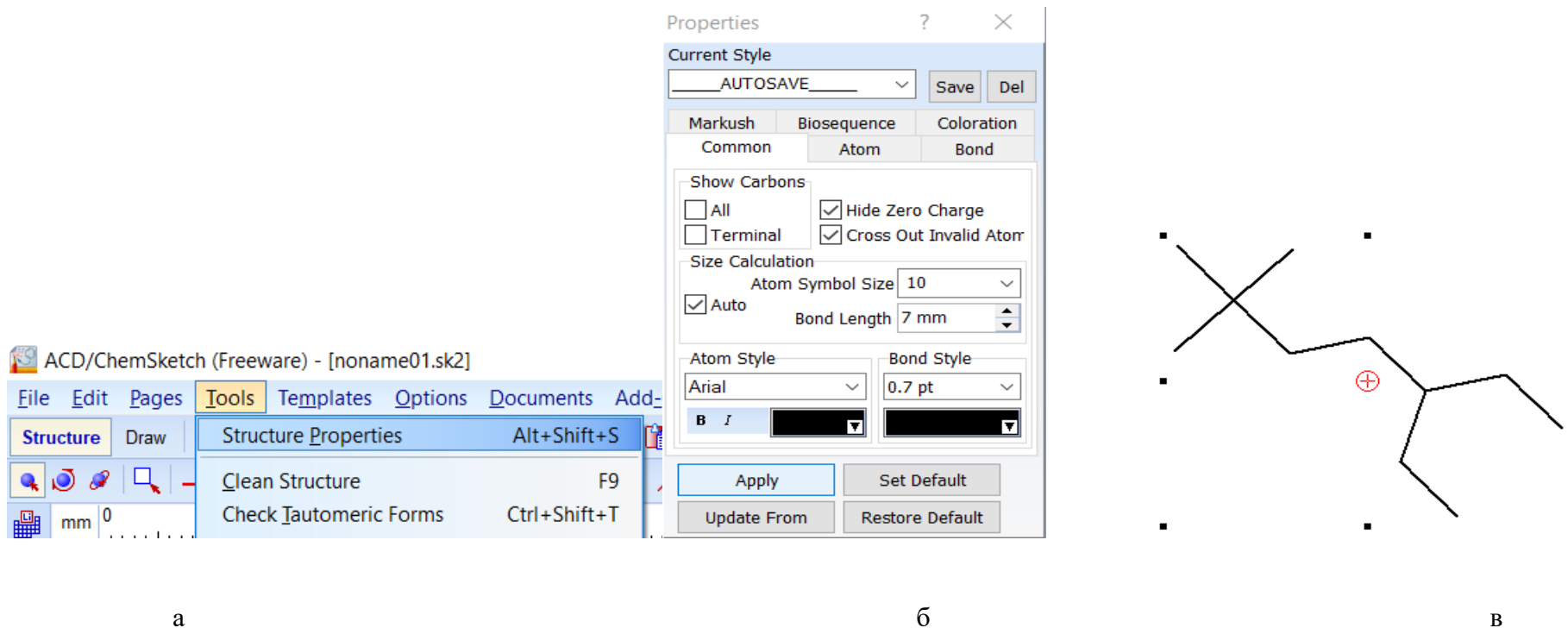
ЧЕКОР 5 Со опцијата *Алатки* и кликување на *Исчисти структура*, прилагодете ги должините и аглиите на врската (**Слика 5**).



Слика 5. Прилагодување на должините и аглиите на поврзување во програмата ChemSketch

ЧЕКОР 6А Прикажете ја структурата на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан со скелетна формула, кондензирана структурна формула и структурна формула. За успешно да се направи тоа, потребно е да се избере целата структура на молекулот со кликување на  во горниот лев агол на интерфејсот, а потоа прилагодување на начинот на избор на молекулот со кликување на  при што се појавува оваа икона: . Додека го држите кликувањето, повлечете и изберете го целиот молекул.

ЧЕКОР 6Б Со кликување на опцијата *Алатки*, а потоа на *Својства на структура*, се отвора прозорец со сите посакувани опции. **Слика 6а** ја прикажува постапката за отворање на прозорецот, а **Слика 6б** ги прикажува опциите што треба да ги приспособите (во делот *Прикажи јаглерод*, кликнете на *Сите* и потоа *Примени*). **Слика 6в** ја прикажува добиената структура на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан претставена со скелетната формула.



а

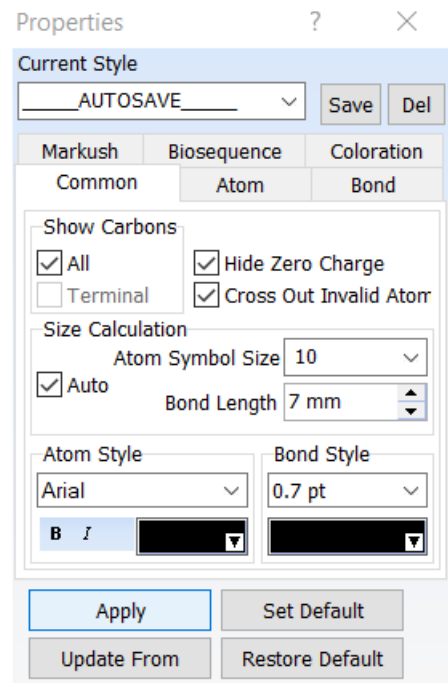
б

в

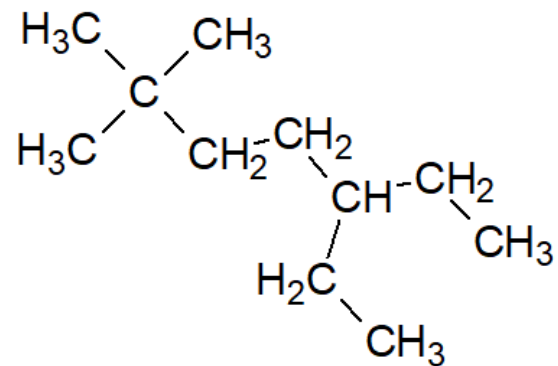
Слика 6. а) Постапка за отворање на прозорец за прилагодување на начинот на прикажување на молекуларната структура,

б) прозорец со сите опции за прикажување на молекуларната структура со избрани опции за прикажување на молекуларната структура со скелетна формула, в) структурата на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан прикажана со скелетна формула.

ЧЕКОР 6В Изберете го молекулот повторно, кликнете на *Алатки*, потоа на *Својства на структура* и прилагодете ги параметрите според **Слика 7**.



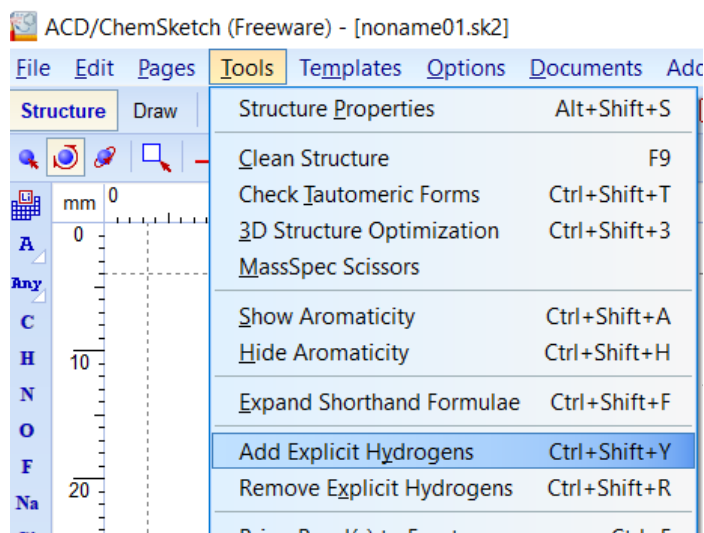
a



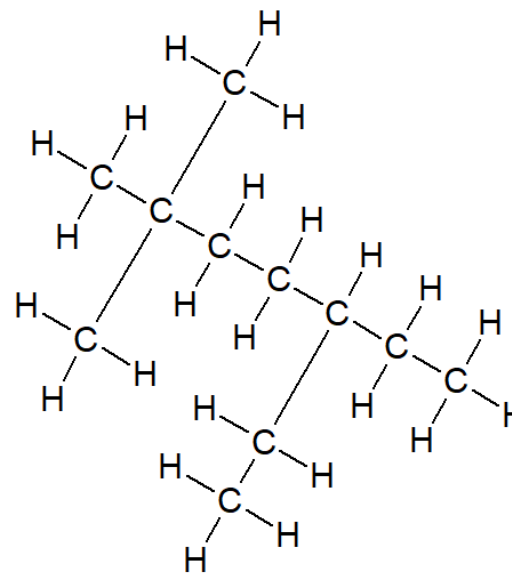
б

Слика 7. а) Прозорец со прилагодени параметри за прикажување на структурата на молекулот со кондензирана структурна формула,
 б) Структура на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан прикажана со кондензирана структурна формула.

ЧЕКОР 6Д За да се прикаже структурата на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан со структурната формула, кликнете на *Алатки*, а потоа на опцијата *Додај експлицитни хидрогени*. После тоа, користете ја опцијата *Исчисти структура* за да ја уредите прикажаната структура (Слика 8а ја прикажува постапката за прикажување на сите јаглерод-водородни врски и Слика 8б ја прикажува структурната формула на молекулот 5-етил-2,2-диметилхептан).




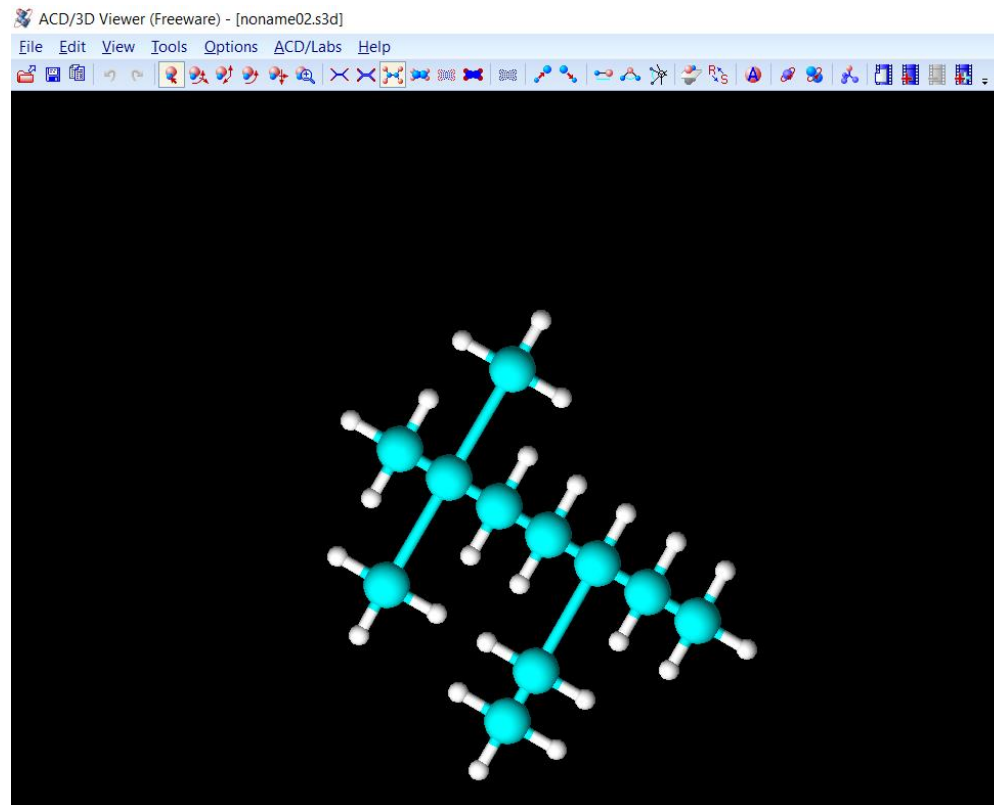
а



б


Слика 8. а) Инструкции за прикажување на сите јаглерод-водородни врски, б) Структурна формула на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан.

ЧЕКОР 7 Прикажете ја добиената структурна формула на 5-етил-2,2-диметилхептан во три димензии така што прво ќе ја изберете, а потоа ќе кликнете на опцијата  на лентата со алатки. Ќе се отвори нов прозорец (*3D Прегледувач*) со 3D приказ на молекулот (**Слика 9**). Со позиционирање на глумчето на секој поединечен атом, се појавува неговата нумеричка ознака според номенклатурата IUPAC и нејзините координати.





Слика 9. 3D структура на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан.


ЧЕКОР 8

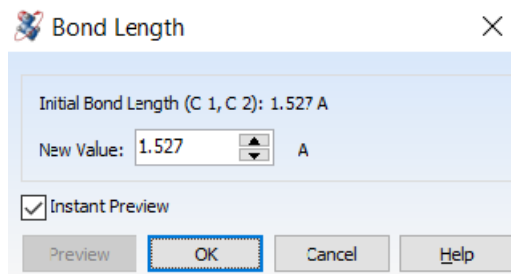
- Обидете се да ја користите секоја од опциите за ротирање, преместување и избирање на горната лента со алатки: , а потоа прикажете го молекулот на секој од начините што ги нуди програмата, а опциите се прикажуваат и на лентата со алатки:




- Со кликување на која било од опциите се менува начинот на кој се прикажува молекулот 5-етил-2,2-диметилхептан. За автоматско ротирање на молекулот, кликнете на иконата. .

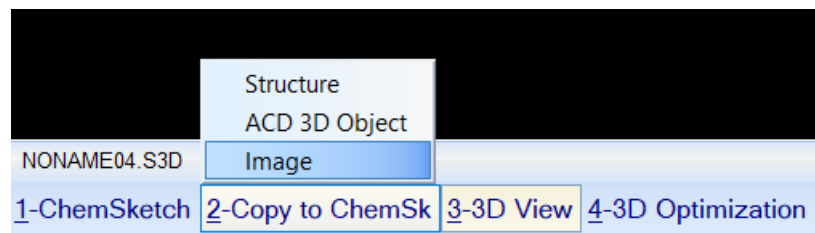
- За автоматско континуирано менување од еден во друг режим на прикажување на молекул со ротација, кликнете на иконата .

ЧЕКОР 9 Одредете ја должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом со кликување на иконата  и со кликување на првиот и вториот јаглероден атом. Ќе се појави нов прозорец во кој ќе се биде напишана должината на избраната врска (**Слика 10**). Која должина на врската ја очекувате? _____.



Слика 10. Определување на должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглеродни атоми во молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан.

ЧЕКОР 10 Со кликување на иконата за 3D оптимизација () можно е да се прикаже молекуларната структура со многу „пореални“ должини и агли на врската. Вака уредената структура може да се врати од тридимензионални во две димензии на програмата ChemSketch со кликување на опцијата *Копирај во ChemSketch* и со избирање на опцијата *Структура* (**Слика 11**) на самото дно од интерфејсот. Оптимизираната структура на молекулот на 5-етил-2,2-диметилхептан сега се појавува во ChemSketch.



Слика 11. Преместување на оптимизираната 3D структура во ChemSketch.

ЧЕКОР 11 Зачувајте ги и 2D и 3D структурите на молекулот 5-етил-2,2-диметилхептан на работна површина со кликување *Датотека*, потоа *Зачувај како* во прозорецот за структура на 3D, внесување име за структурата, избирање на опцијата за *зачувај на работната површина*, и кликнете *Зачувај*. Повторете ја истата постапка за 2D структурата во ChemSketch (**Слика 12**).

File	Edit	View	Tools
Open...			F3
Close			Ctrl+F4
Save			F2
Save As...			Shift+F2
Print			Ctrl+P
Printer Setup...			
Send...			
File Associations...			
Exit			Alt+X

Слика 12. Зачувување на 2D или 3D структура во компјутер

ЗАДАЧА 2 Нацртајте 1-етил-4,4-диметилциклохексан со користење на опцијата НормалноЦртање. Користете ја опцијата *Исчисти структура* (*Алатки* *Исчисти структура*) за да ги прилагодите должините и аглиите на поврзување, а потоа направете ги следните дејства:

- со генерирање на име на молекулот проверете дали нацртаната структура е точна.
- определете молекуларна формула на нацртаниот молекул _____
- пренесете ја таа структура на 3D Прегледувач
- зачувајте ги и двете, 2D и 3D структури во вашиот компјутер.

Пример 2 Нацртајте го молекулот на етанот и потоа прикажете го во 3 димензии со помош на алатката 3D Прегледувач. Обидете се да го ротирате цел молекул додека не ја добиете позицијата што покажува антиперипланарна конформација на етанот. Гледајте по должина надолу на врската јаглерод-јаглерод.

1.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

1. Нацртајте ги сите структурни изомери на бутанот. Напишете ги имињата на сите изомери, потоа изберете еден и направете го следново:

- а) генерирајте име
- б) определете ја молекуларната формула
- в) прикажете ја структурата со кондензирана структурна формула, скелетна и структурна формула
- г) уредете ја структурата на молекулата со опцијата *Исчисти структура*
- д) прикажете ја структурата на молекулот во *3D Прегледувач*
- ѓ) прикажете ја структурата на молекулот во *3D Прегледувач* користејќи стапчиња и топчиња
- е) оптимизирајте го молекулот
- ж) определете ја должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом
- з) определете го аголот на врската во прстенот - помеѓу првиот и вториот јаглероден атом
- с) зачувајте ги и двете, 2D и 3D структурата на молекулот на работната површина на компјутерот.

2. Истражете ја примената на алканите и циклоалканите во секојдневниот живот. Изберете една молекул за прикажување во програмата ChemSketch. Запишете ја во тетратка примената на избраниот молекул во секојдневниот живот. Зачувајте ја оптимизираната 2D и 3D структура на овие молекули во компјутер.

3. Нацртајте структура на 1,1,3-триметилциклопентан и потоа направете го следново:

- а) генерирајте го името
- б) определете ја молекулската формула
- в) прикажете ја структурата со рационална формула, скелетна и структурна формула
- г) уредете ја структурата на молекулот со опцијата *Исчисти структура*
- д) прикажете ја структурата на молекулата во *3D Прегледувач*
- ѓ) прикажете ја структурата на молекулата во *3D Прегледувач* користејќи стапчиња и топчиња
- е) оптимизирајте го молекулата

ж) определете ја должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом

з) определете го аголот на врската во прстенот - помеѓу првиот и вториот јаглероден атом

с) зачувајте ги и двете, 2D и 3D структурата на молекулата на работната површина на компјутерот.

4. Нацртајте молекула на пропан и потоа прикажете ја во 3 димензии со помош на алатката 3D *Гледач(Viewer)* Обидете се да ја ротирате целата молекула додека не ја добиете позицијата што покажува антиперипланарна конформација на пропан. Погледнете по должината надолу ковалентна врска помеѓу првиот и вториот јаглеродни атоми.

1.5. Примери на задачи за оценување на учениците

1. Нацртајте ги сите структурни изомери на пентанот. Напишете ги имињата на сите изомери, потоа изберете еден и направете го следново:

а) генерирајте име

б) определете ја молекулската формула

в) прикажете ја структурата со рационална формула, скелетна и структурна формула

г) уредете ја структурата на молекулата со опцијата *Исчисти структура*

д) прикажете ја структурата на молекулата во 3D *Прегледувач*

ѓ) прикажете ја структурата на молекулата во 3D *Прегледувач* користејќи стапчиња и топчиња

е) оптимизирајте го молекулата

ж) определете ја должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом

з) определете го аголот на врската во прстенот - помеѓу првиот и вториот јаглероден атом

с) зачувајте ги и двете, 2D и 3D структурата на молекулата на работната површина на компјутерот.

2. Нацртајте молекула на бутан и потоа прикажете го во 3 димензии со помош на алатката 3D *Прегледувач*. Обидете се да го ротирате целата молекула додека не ја добиете позицијата што покажува антиперипланарна конформација на бутанот. Погледнете по должината на ковалентната врска помеѓу првиот и вториот јаглероден атом.

ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM
АЛКЕНИ ЈАГЛЕВОДОРОДИ

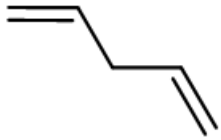
1.) РАЗРАБОТКА НА ТЕМАТА

Наставна единица: Алкени Јаглеводороди
Наслов на тема: Алкени и алкини
Предвиден број на часови:2

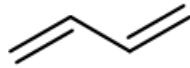
1.1. Теоретски вовед

а) Алкени

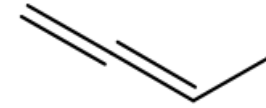
Алкените се незаситени јаглеводороди кои содржат најмалку една двојна ковалентна врска помеѓу јаглеродните атоми во нивната структура. Алкените содржат помалку атоми на водород од алканите и затоа се незаситени јаглеводороди. Општата формула на алкен е: C_nH_{2n} . Во општата формула на алкените, n - го претставува бројот на јаглеродни атоми. Наједноставниот претставник на алкени е етен, C_2H_4 . Хомологната серија на алкени продолжува со пропен со молекуларна формула C_3H_6 , потоа бут-1-ен (C_4H_8), итн. Алкените се појавуваат како структурни изомери и како стереоизомери почнувајќи со бут-1-ен. Циклоалкените се прстенести алкени со општа формула: C_nH_{2n-2} . Алкените со поедноставна структура генерално се именувани како алкани, според правилата за именување на јаглеводородите на IUPAC. Името на алкените се добива со додавање на суфиксот -ен на коренот, што го означува бројот на јаглеродни атоми во молекулот. Секвенцискиот број по коренот на името на алкенот ја означува положбата на двојната врска. Во молекулите на алкените, може да се појават две или повеќе двојни врски помеѓу јаглеродните атоми. Алкените со две двојни врски се нарекуваат диени, а при именување на таквите соединенија наместо наставката -ен ја додаваме наставката -диен. Двојните врски во алкените може да се појават како изолирани (Слика 1. а)), конјугирани (Слика 1. б)) и кумулирани (Слика 1. в)).



Слика 1. а) изолирана двојна врска



б) конјугирана двојна врска



в) кумулирана двојна врска

б) Алкини

Алкините се незаситени јаглеводороди и содржат најмалку една тројна врска. Општата формула на алкините е C_nH_{2n-2} .

Алкините се појавуваат во природата во многу мал број. Природните алкини се силни отрови или имаат фунгицидни, антибактериски или антиканцерогени ефекти.

1.2. Образовни резултати

Во ова поглавје, учениците ќе научат:

- да го поврзат поимот незаситеност со присуството на двојна врска помеѓу јаглеродните атоми
- да нацртаат различни примери на молекули на алкени и алкини и да ги претстават со структурна, кондензирана структурна формула и со скелетна формула
- да генерираат име на претходно нацртани молекули на алкени и алкини во програмата ChemSketch
- да одредат молекуларна формула на претходно нацртани молекули на алкени и алкини во програмата ChemSketch
- да ја подобрат застапеноста на структурата на молекулите (приспособување на должината на врската и аглиите на меѓусебните врски) користејќи ја опцијата „Исчисти структура“
- да цртаат структурни изомери на алкени и алкини
- да ги прикажат структурите на алкени и алкини во три димензии
- да ги ротираат молекулите на алкени и алкини во две и три димензии

- да го промени начинот на прикажување на структурите на молекулите на алкени и алкини во три димензии
- да ги движат молекули на алкени и алкини во 3D и 2D
- да ги определат должините на врските и агли на врската во молекулите на алкени и алкини
- да ги оптимизираат структурите на молекулите на алкени и алкини
- да ја зачуваат во компјутер дводимензионалната и тродимензионалната структура на саканиот молекул на алкен и алкин
- да цртаат структурни формули на циклоалкените

1.3. Инструкции за користење на програмата ChemSketch

Пример 1

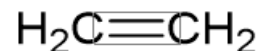
Нацртајте молекул на етен, потоа изменете ја структурата според упатствата, генерирајте го името во програмата и определете ја молекуларната формула на тој молекул, прикажете ја со скелетна формула, структурна и кондензирана структурна формула, прикажете ја структурата на молекулот во три димензии на различни начини, одредете ги должините на избраните врски и специфичните агли на врската, оптимизирајте го молекулот, ротирајте го и преместете го во две и три димензии, зачувајте ги 2D и 3D структурите во компјутерот. Повлечете го циклоалкенот и генерирајте име за тој молекул, определете ја молекуларната формула, префрлете во три димензии, зачувајте ја и 2D и 3D структурата на молекулот. Потоа нацртајте го молекулот бут-2-ин и повторете ги сите чекори како што е наведено.

ЧЕКОР 1

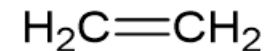
Изберете ја опцијата Нормално цртање. Кликнете на празно место во интерфејсот. Ќе се појави структурата на молекулот на метан (CH₄). Со кликување на тој јаглероден атом се создава единечна врска јаглерод-јаглерод. Нацртајте ја структурата на етанот и потоа посочете ја единечната врска помеѓу првите два јаглеродни атоми од јаглеводородниот синџир (ќе видите правоаголник околу врската прикажан на слика 1.а)), а потоа кликнете на неа за да направите двојна врска (Слика 1 .б) и в)).



Слика 1. а) правоаголник околу врската



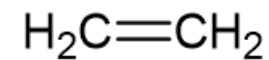
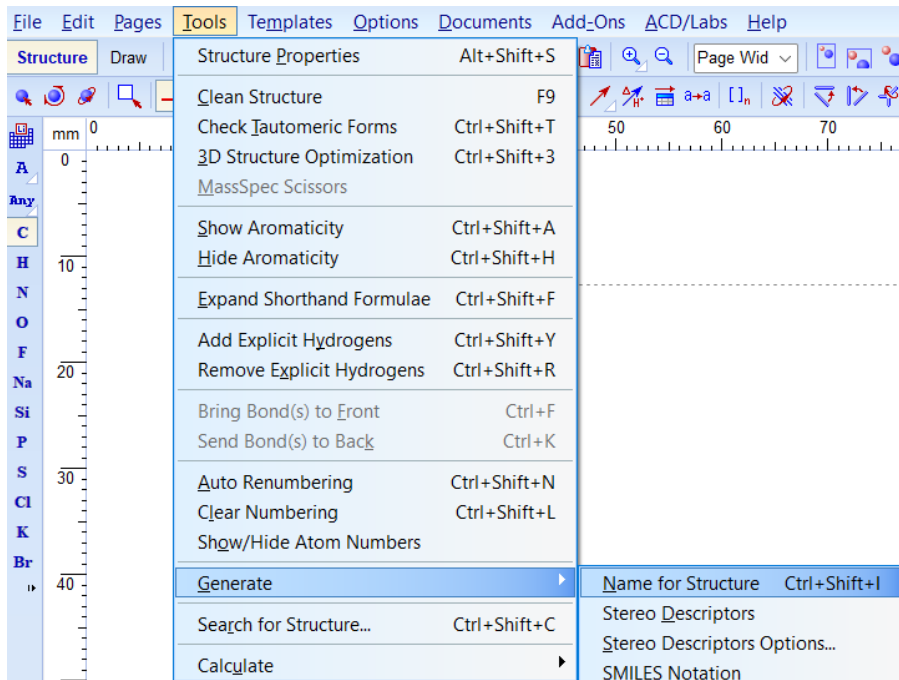
б) двојна врска во етен



в) двојна врска во етен

ЧЕКОР 2

Именување на структурата на алкен: Кликнете на менито *Алатки*, изберете ја опцијата *Генерирај* и потоа кликнете на *Име за структура*. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 2а**, а на **Слика 2б** е прикажана структурата на молекулот на етенот под која е напишано неговото име.



ethene

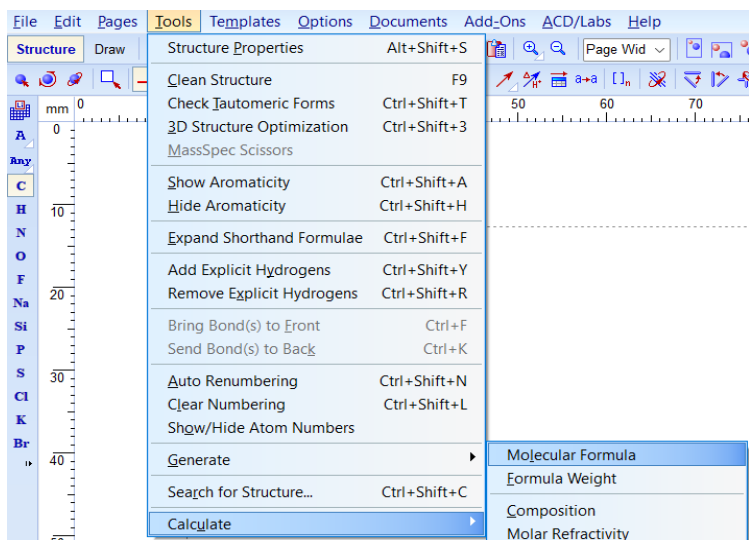
б)

а)

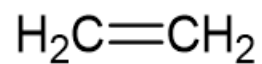
Слика 2. а) Постапка за генерирање на име на молекул нацртан во програмата ChemSketch,
б) структурата и соодветното име на претходно нацртаниот молекул на етен.

ЧЕКОР 3

Користејќи го менито *Алатки*, изберете ја опцијата *Пресметај* и потоа кликнете на *Молекуларна формула* (Слика 3а). Потоа, ќе се отвори прозорец кој ја прикажува молекуларната формула (Слика 3б). За да се прикаже молекуларната формула со структурата на алкен на работниот лист, кликнете на *Копирај во уредник* (Слика 3в).



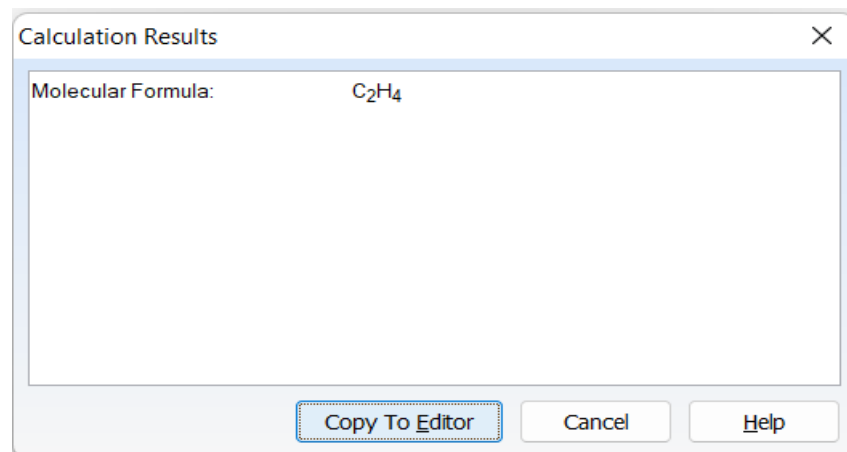
а



ethene

Molecular Formula: C_2H_4

в

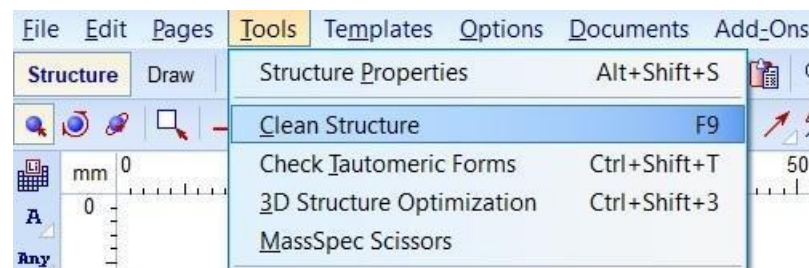


б

Слика 3. а) Низа на дејства за прикажување на молекуларната формула на етенот, б) Прозорец со молекуларната формула на молекулот на етенот, в) Молекуларна формула на работниот лист




ЧЕКОР 4

Користејќи ја опцијата *Алатки* и кликување на *Исчисти структура*, прилагодете ги должините и аглите на врската (**Слика 4**)

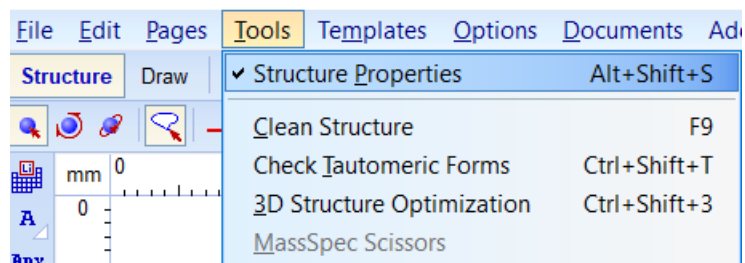


Слика 4. Прилагодување на должините на врските и аглите на поврзување во програмата ChemSketch

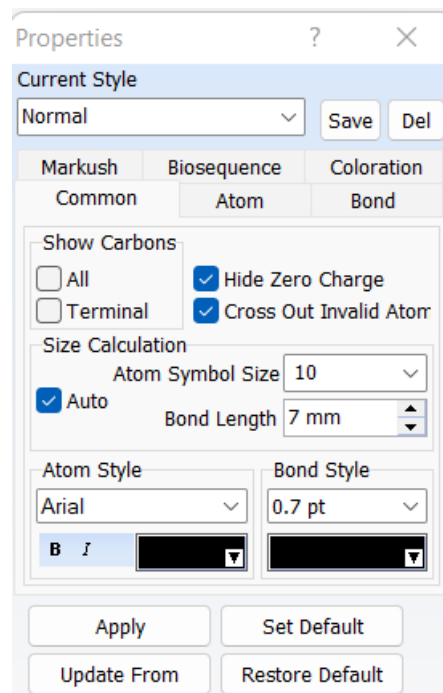
ЧЕКОР 5

Прикажете ја структурата на молекулот на етенот со скелетна формула. За успешно да се направи тоа, потребно е да се избере целата структура на молекулот со кликување на  во горниот лев агол на интерфејсот, а потоа прилагодување на начинот на избор на молекулот со кликување на  со што оваа икона покажува: . Додека го држите кликувањето, повлечете и изберете го целиот молекул.

Со кликување на опцијата *Алатки*, а потоа на *Својства на структура*, ќе се отвори прозорец со сите посакувани опции. **Слика 5а** ја прикажува постапката за отворање на прозорецот, а **Слика 5б** ги прикажува опциите што треба да ги прилагодите (во делот *Прикажи јаглерод*, откликнете на *Терминален* и потоа *примени*). **Слика 5в** ја прикажува добиената структура на молекулот на етен претставена со скелетна формула.



a)



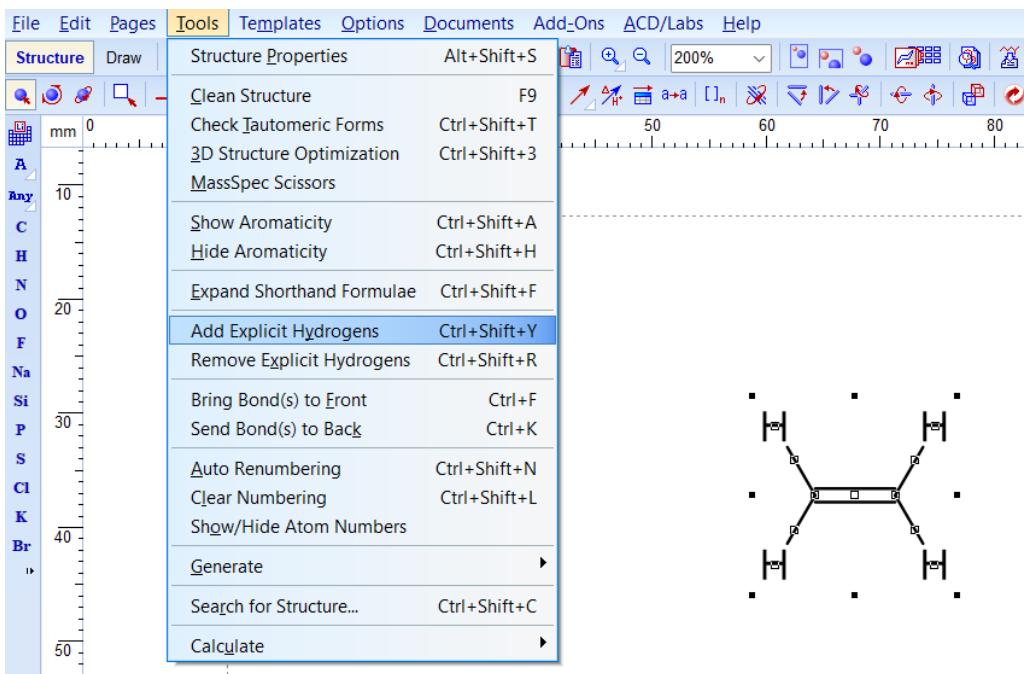
б)

в)

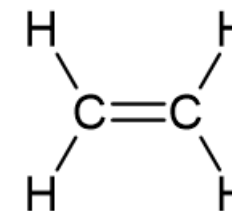
Слика 5. а) Постапката за отворање на прозорецот за прилагодување на начинот на прикажување на молекуларната структура, б) прозорецот со сите опции за прикажување на молекуларната структура со избрани опции за прикажување на молекуларната структура со скелетна формула, в) структурата на молекулот на етенот прикажана со скелетната формула.

ЧЕКОР 6

Користејќи ја опцијата *Алатки*, изберете ја опцијата *Додај експлицитни водородни* за атомите на водород да се прикажат на скелетната формула на етен (Слика 6а). Исто така можете да го прикажете на структурната формула на етенот Слика 6б.




а)

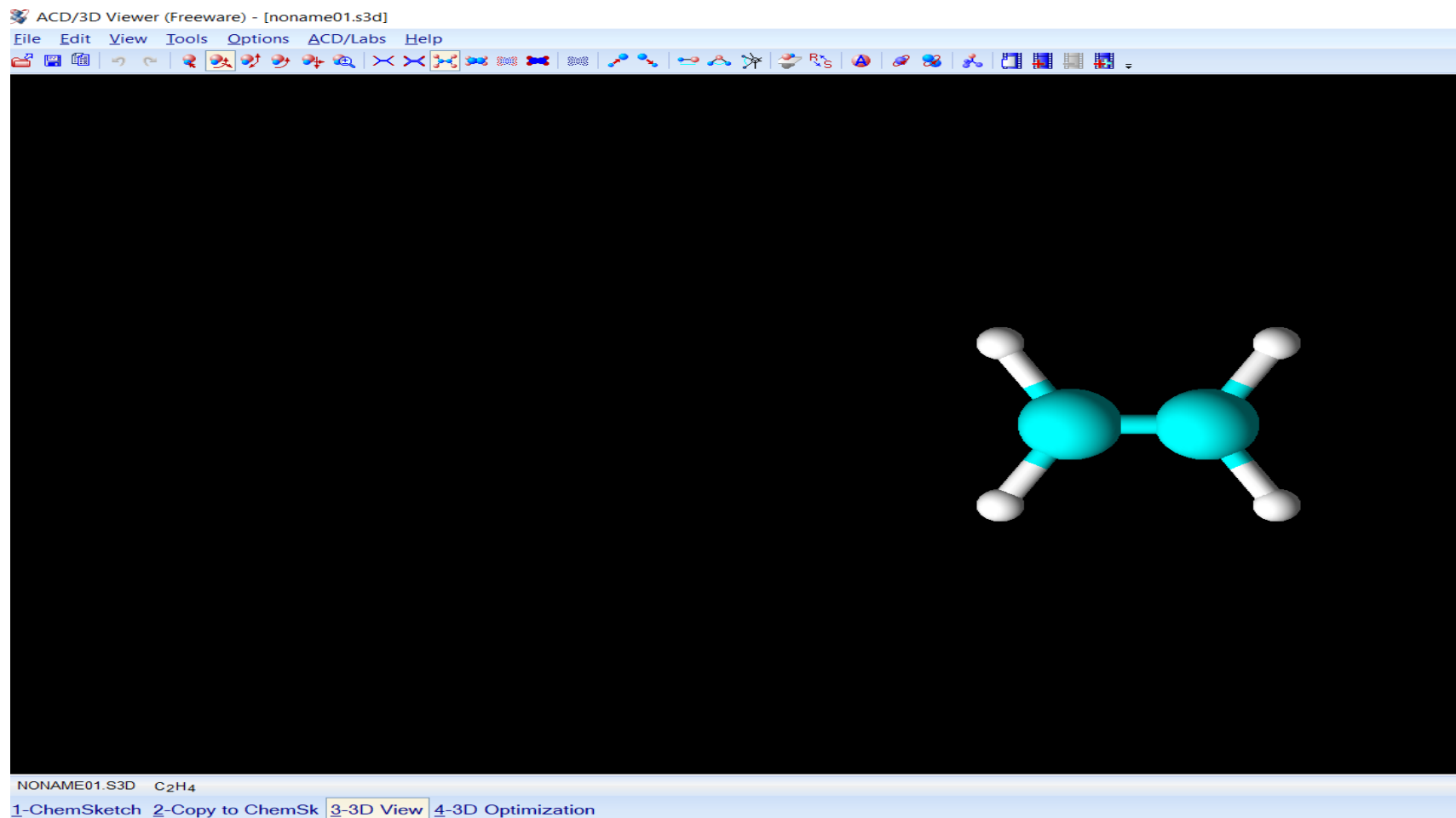


б)

Слика 6. а) Упатство за прикажување на сите јаглерод-водородни врски, б) Структурна формула на молекулот на етенот.


ЧЕКОР 7


Прикажете ја добиената структурна формула на етен во три димензии прво со нејзино избирање и потоа кликување  на лентата со алатки. Ќе се отвори нов прозорец (3D Прегледувач) со 3D приказ на молекулот (Слика 7). Со поставување на глумчето на секој поединечен атом, се појавува неговата нумеричка ознака според номенклатурата IUPAC и нејзините координати.





Слика 7. 3D структура на молекулот на етенот.

ЧЕКОР 8

Обидете се да ја користите секоја од опциите за ротирање, преместување и избирање на горната лента со алатки: , а потоа прикажете


го молекулата на секој од начините што ги нуди програмата, а опциите се прикажани и на лентата со алатки: .

Со кликување на која било од опциите се менува начинот на кој се прикажува молекулата на етенот. За автоматска ротација на молекулот, кликнете на иконата .

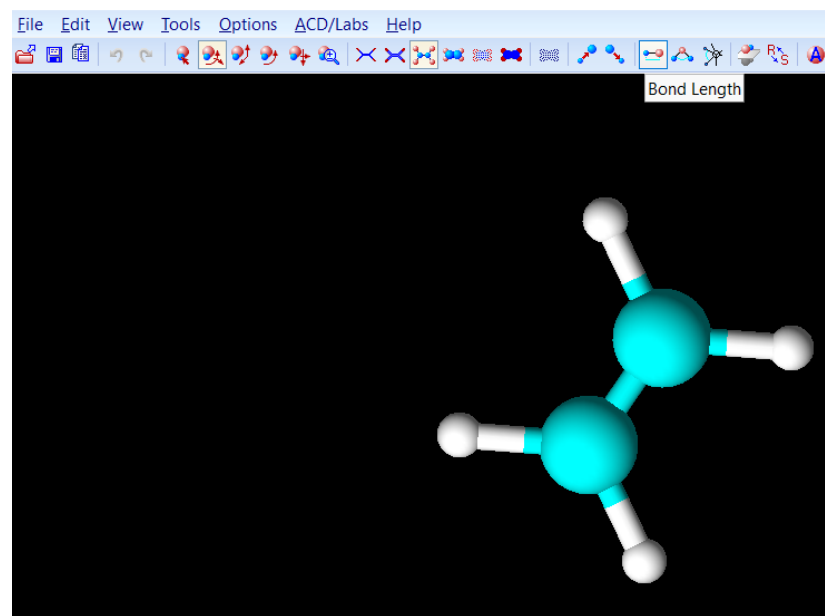
За автоматско континуирано менување од еден во друг режим на прикажување на молекулот со ротација, кликнете на иконата .

ЧЕКОР 9

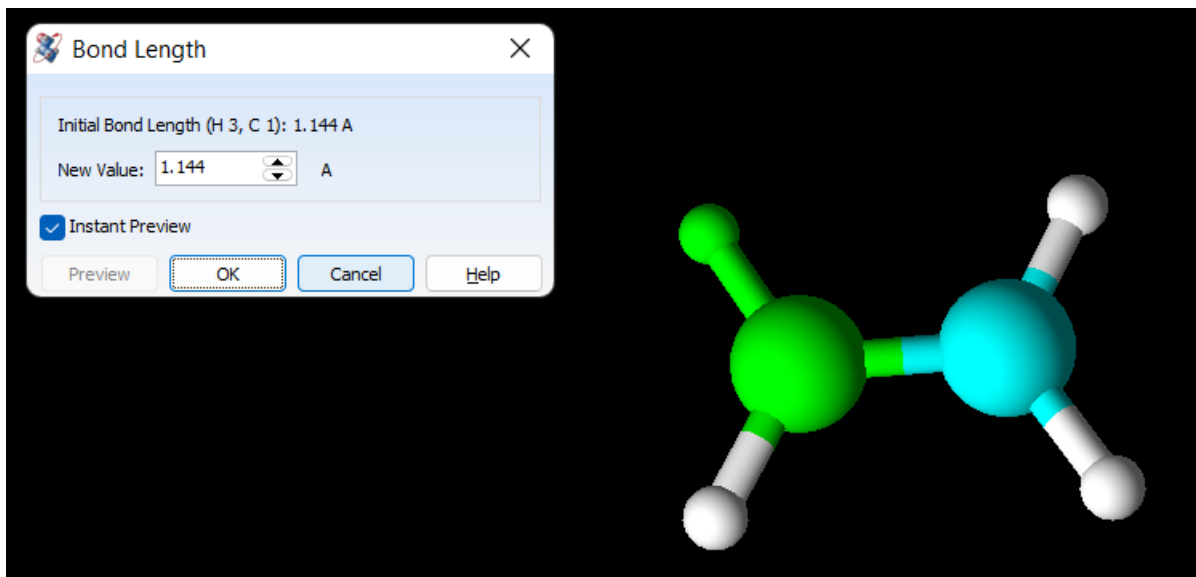
За да го пресметате или промените растојанието помеѓу два атома, направете ги следниве чекори:

Префрлете се на режимот за приказ на топки и стапчиња (на горната лента со алатки, кликнете Топки и стапчиња)  за подобар приказ на атомите.

На горната лента со алатки, кликнете  Должина на врска (Слика 8).



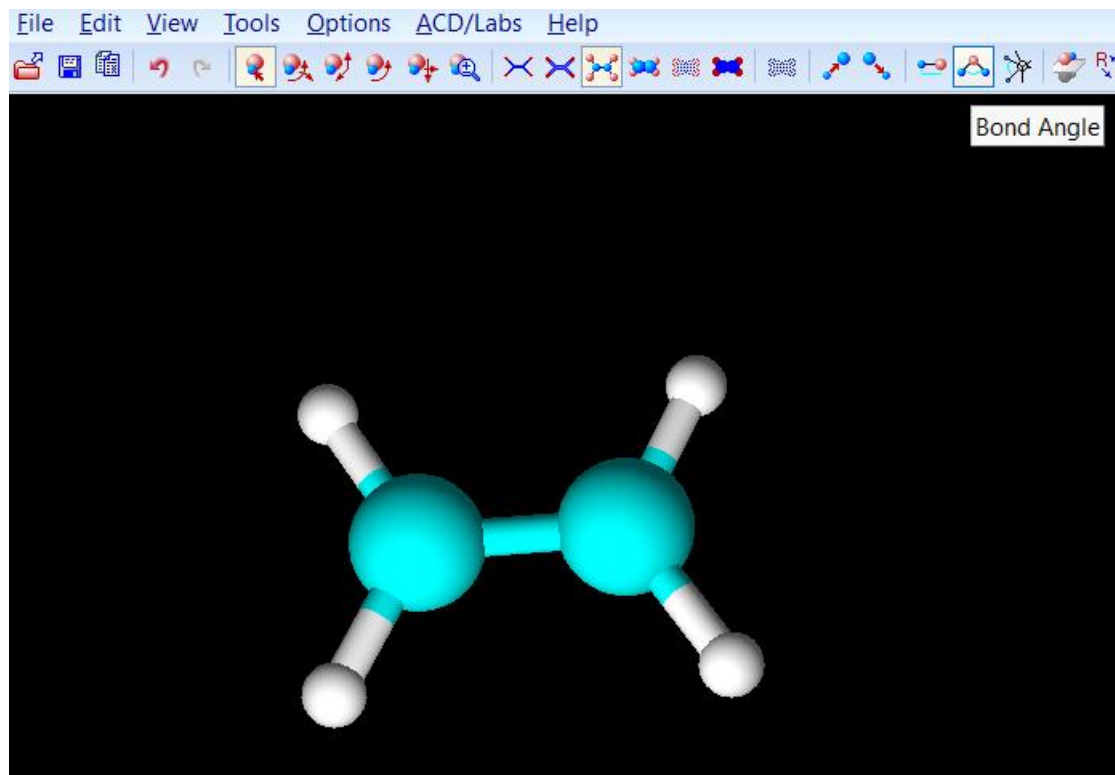
Кога ќе ја изберете опцијата Должина на врската, потоа во 3D приказот, изберете ги двата атома помеѓу кои сакате да ја одредите должината на врската. Кога ќе изберете два атома помеѓу кои сакате да ја одредите должината на врската, ќе се отвори нов прозорец со пресметаната вредност на должината на врската (Слика 9).



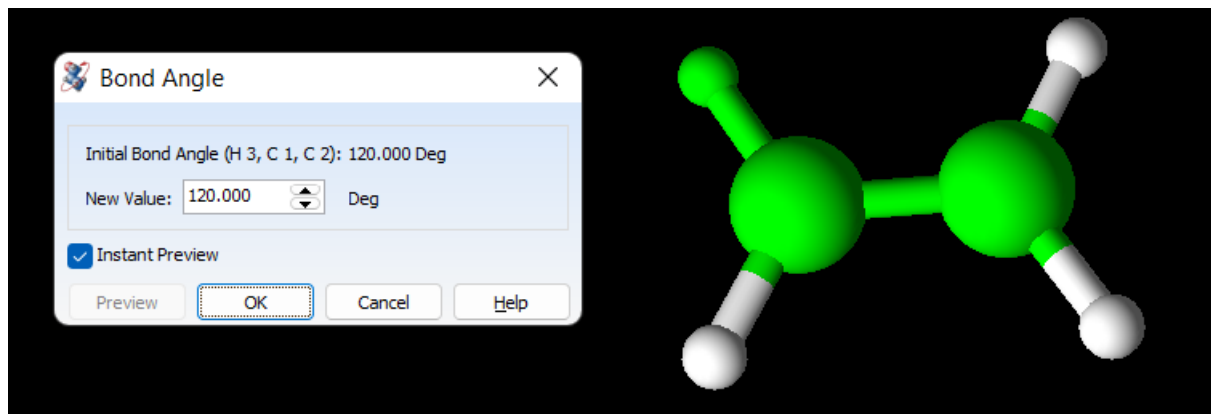
Слика 9. Определување на должината на врската помеѓу првиот јаглероден атом и водородот во молекулот на етенот.

ЧЕКОР 10

За да го одредите аголот на врската, изберете ја опцијата *Агол на врска* на лентата со алатки (Слика 10). Потоа, за да го одредите аголот на врската помеѓу два јаглеродни атоми, прво мора да кликнете на атомот на водород, а потоа на двата јаглеродни атоми. Потоа ќе се отвори нов дијалог прозорец со прикажаната вредност (Слика 11).



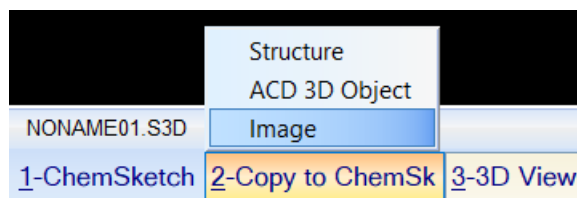
Слика 10. Опција *Агол на врска* на лентата со алатки



Слика 11. Определете го аголот на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом и третиот атом на водород

ЧЕКОР 11

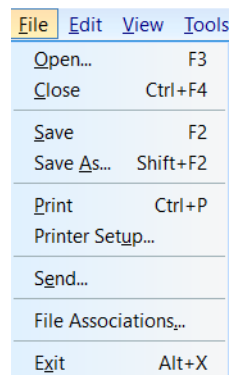
Со кликување на иконата за 3D оптимизација (🔍) можно е да се прикаже молекуларната структура со многу пореални должини и агли на врската. Вака уредената структура може да се врати од тридимензии во две димензии на програмата ChemSketch со кликување на опцијата *Копирај во ChemSketch* и избирање на опцијата *Структура* (Слика 12) на самото дно од интерфејсот. Оптимизираната структура на молекулот на етен сега се појавува во ChemSketch.



Слика 12. Преместување на оптимизираната 3D структура во ChemSketch.

ЧЕКОР 12

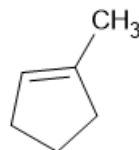
Зачувајте ги 2D и 3D структурите на молекулот на етен на вашата работна површина со кликување на *Датотека*, потоа *Зачувај како* во прозорецот за 3D структура, внесете иерете ја опцијата за зачувување на работната површина и кликнете Зачувај. Повторете ја истата постапка за 2D структурата во ChemSketch (**Слика 13**).



Слика 13. Зачувување на 2D или 3D структура на компјутер

ЧЕКОР 13

Нацртајте молекул 1-метилциклопен-1-ен следејќи ги претходно научените чекори (Слика 14). Потоа применете ги претходно научените чекори од 2 до 12 на овој пример.



1-methylcyclopent-1-ene

Слика 14. Структурно претставување на молекулот 1-метилциклопент-1-ен

ЧЕКОР 14а

Нацртајте го молекулот бут-2-ин: изберете ја опцијата *Нормално цртање*. Кликнете на празно место на интерфејсот. Ќе се појави структурата на молекулот на метан (CH₄). Со кликување на тој јаглероден атом се создава единечна врска јаглерод-јаглерод. Со држење на копчето **ctrl** и кликување на секој следен јаглероден атом, може да се нацрта јаглеводородниот синцир на предните јаглеродни атоми прикажани на **Слика 15**.

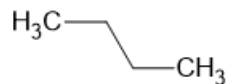


Figure 15. Молекул на бутан

ЧЕКОР 146

На претходно нацртаната структура, насочете го покажувачот помеѓу вториот и третиот јаглероден атом на единечната врска и кликнете двапати за да направите тројна врска (ќе видите правоаголник околу врската прикажан на **Слика 16.а**), а потоа кликнете на него за направите тројна врска (**Слика 16.б**). и применете ги претходно научените чекори од чекорите 2 до 12.



Слика 16. а) правоаголник околу врската, б) молекул на бут-2-ин

1.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

1. Истражувајте на интернет како изгледа молекул од природна гума и прикажете го молекулот во програмата ChemSketch. Кога ќе претставите молекул од природна гума, истражете како истиот изгледа во 3D форма и применете ги научените функции во ChemSketch.

2. синтетичка гума

3. хромофори

1. Нацртајте го молекулот на 4-метилпент-2-ен и направете го следново:

а) генерирајте име

б) определете ја молекуларната формула

в) прикажете ја структурата со кондензирана структурна формула, скелетна и структурна формула

г) уредете ја структурата на молекулот со опцијата *Исчисти структура*

- д) прикажете ја структурата на молекулот во *3D прегледувачот*
 - ѓ) прикажете ја структурата на молекулот во *3D прегледувачот* користејќи стапчиња и топчиња
 - е) оптимизирајте го молекулот
 - ж) определете ја должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом
 - з) определете го аголот на врската во прстенот - помеѓу првиот и вториот јаглероден атом
 - с) зачувајте ја и 2D и 3D структурата на молекулот на работната површина на компјутерот.
 - и) отворете ја 2D структурата на молекулот и направете циклична структура од неа, генерирајте го нејзиното име и молекуларната формула
2. Истражете ја примената на алкените и алкините во секојдневниот живот. Изберете една молекул за прикажување во програмата ChemSketch. Запишете ја во тетратка примената на избраниот молекул во секојдневниот живот. Зачувајте ја оптимизираната 2D и 3D структура на овие молекули во _____ вашиот _____ компјутер.

1.5. Примери на задачи за оценување на учениците

1. Нацртајте молекул на 2-метилпент-1-ен-3-ин и направете го следново:
- а) генерирајте име
 - б) определете ја молекуларната формула
 - в) прикажете ја структурата со кондензирана структурна формула, скелетна и структурна формула
 - г) уредете ја структурата на молекулот со опцијата *Исчисти структура*
 - д) прикажете ја структурата на молекулот во *3D прегледувачот*
 - ѓ) прикажете ја структурата на молекулот во *3D прегледувачот* користејќи стапчиња и топчиња
 - е) оптимизирајте го молекулот
 - ж) определете ја должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом
 - з) определете го аголот на врската во прстенот - помеѓу првиот и вториот јаглероден атом
 - с) зачувајте ја и 2D и 3D структурата на молекулот на работната површина на компјутерот.
 - и) отворете ја 2D структурата на молекулот и направете циклична структура од неа, генерирајте го нејзиното име и молекуларната формула



ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM

1) ВОВЕД ВО ПРЕДМЕТОТ

Со оглед на зголемената застапеност на информатичката технологија, целта е да се олесни, подобри и усоврши знаењето на учениците и наставниот кадар од областа на структурата и реакциите на органските соединенија, нивното значење, примената во секојдневниот живот и практиката преку информативни апликации од кои едена од нив е софтверот ChemSketch.

2) ОПИС НА КОРИСТЕНИ АЛАТКИ– ChemSketch

3) ЛИСТА НА ИЗБРАНИ ПОГЛАВЈА

- Основи на работа во софтверот **ChemSketch (Хрватска)**
- Комплексни соединенија (**Словенија**)
- Алкани и циклоалкани (**Хрватска**)
- Алкени и алкини (**Хрватска**)
- Арени (**Македонија**)
- Алкохоли (**Македонија**)
- Алдехиди и кетони (**Словенија**)

- Биомолекули (Република Чешка)
- Хиралност и оптичка активност (Република Чешка)
- Апаратура за цртање (Хрватска)
- Луисови структури (Хрватска)

4.РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна целина: Арени
Име на наставната единица: Арени-номенклатура, изомерија, добивање и својства на арениите
Предвиден број наставни часови: 2

4.1. Теоретски вовед во поглавјето

Арениите се незаситени ароматични јаглеродороди, деривати на бензен со еден или повеќе алифатични радикали. Арениите можат да се најдат во природата во камен јаглен и нафтени деривати, но тие можат да се добијат и со електрофилна замена на еден или повеќе атоми на водород од јадрото на бензенот. Кога една од позициите на бензенскиот прстен е заменета со друг атом или атомска група, соединението е моносупституиран бензен. Кога супституентот е алкил, алкенил или алкинил радикал, тогаш оваа група на соединенија се арени. Тие можат да бидат моносупституирани, дисупституирани, трисупституирани и полисупституирани со општата формула $Ar-R$ или C_6H_5-R чија номенклатура се формира со додавање на името на радикалот пред зборот бензен.

Кога две од позициите на прстенот се заменуваат со радикали, соединението е дисупституиран бензен. Постои посебна номенклатура за опишување на релативните позиции. Користејќи го толуенот како пример, орто ориентацијата е позицијата 1,2; мета е 1,3, а вредноста 1,4 е пара позиција каде што се забележува дека може да има две орто и мета позиции секоја, но само една пара позиција.

Пример: $C_6H_5-CH_3$ метилбензен (толуен) (Слика 4) и $C_6H_5-CH_2-CH_3$ етилбензен. (Слика 5)

Бидејќи атомите на водород во молекулата на бензенот се еквивалентни, можни се три изомерни супституирани деривати на бензен: моносупституирани и дисупституирани арени.

Пример: $C_6H_5-(CH_3)_2$ 1,2-диметил бензен или тривијално име о-ксилен; 1,3-диметил бензен (м-ксилен) и 1,4-диметил бензен (п-ксилен) и $C_6H_5(CH_3)_3$ 1,2,3-триметил бензен (вистинален изомер); 1,2,4-триметил бензен (асиметричен изомер) и 1,2,4-триметил бензен (симетричен изомер) (Слика 7)

Во зависност од видот на радикалот, можеме да разликуваме алкилбензен, алкенилбензен и алкинилбензен.

Арените се добиваат со реакција на алкилација, синтеза на Фридел Крафтц.

4.2. Образовни резултати од избраното поглавје

Во ова поглавје учениците ќе научат:

нацртајте различни примери на арени и презентирајте ги со структурна, рационална формула и скелетна формула.

- Нацртајте различни примери на арени и презентирајте ги со структурна, рационална формула и скелетна формула. Да цртаат формули на арени

- Генерираат имиња на претходно нацртани молекули од арени молекули во програмата ChemSketch

делокализирани електрони (резонантни структури) во арените

- Подобрување на приказот на молекулската структура (приспособете ги должините на врските и аглиите на меѓусебните врски) користејќи ја опцијата

Чиста структура

- Да се ротираат молекулите на арени во две и три димензии

- Да се промени тродимензионалниот приказ на структурата на молекулите.

Да црта структурни и изомерни формули на арените

- Да се прикажат молекулите на арени во 3D приказ



- Да се пренесат молекулите на арени од 2D во 3D

- Да ги определат должините на врските и аглиите, да ја извежбаат употребата на научените алатки во ChemSketch на дадените примери користејќи

независно дизајниран пример од секојдневниот живот за проверка на реализацијата на образовните резултати.

4.3. Инструкции за користење на софтверот ChemSketch за избраното поглавје

Задача 1.

За да се нацрта молекулата на бензен како основа на ароматичните соединенија на арен, првиот чекор е да се отвори програмата ChemSketch, а потоа алатката Draw Normal () е стандардната алатка за стартување на програмата. Со оваа алатка, можете лесно да нацртате прави или разгранети јаглеродородни низи. Нацртајте ја молекулата на бензен, но прво проверете дали е овозможена алатката Draw Normal на лентата со алатки Structure и дека копчето Carbon () избрано на лентата со алатки Atoms (Слика 1).

Потоа за да го направите ова, прво треба да кликнете со левото копче на компјутерскиот глушец на јаглеродниот атом.

Пример 1.


Нацртајте молекула на бензен (Слика 1); (Слика 2 а, б); (Слика 3); (Слика 4); метилбензен (толуен); и (Слика 5) етилбензен;


Пример 2.

Да се нацрта моносупституиран метилбензен (толуен); винилбензен (стирен) и изопропилбензен (кумен); дисупституиран диметилбензен (ксилен) и трисупституирани деривати на бензен (Слика 6) потоа ја претставуваат структурата според инструкциите, од програмата ChemSketch, ја генерираат нивната номенклатура, ги одредуваат молекуларните формули на тие молекули, ја прикажуваат со црточки, структурни и кондензирани структурни формули.

Покажете ја структурата на молекулите во три димензии на различни начини, определете ги должините на избраните врски и специфичните агли на врската, оптимизирајте ги молекулите, ротирајте и движете се во две и три димензии и генерирајте име за таа молекула, одреди ја молекуларната формула, скролувајте во три димензии, ги зачува и 2D и 3D структурите на молекулите.

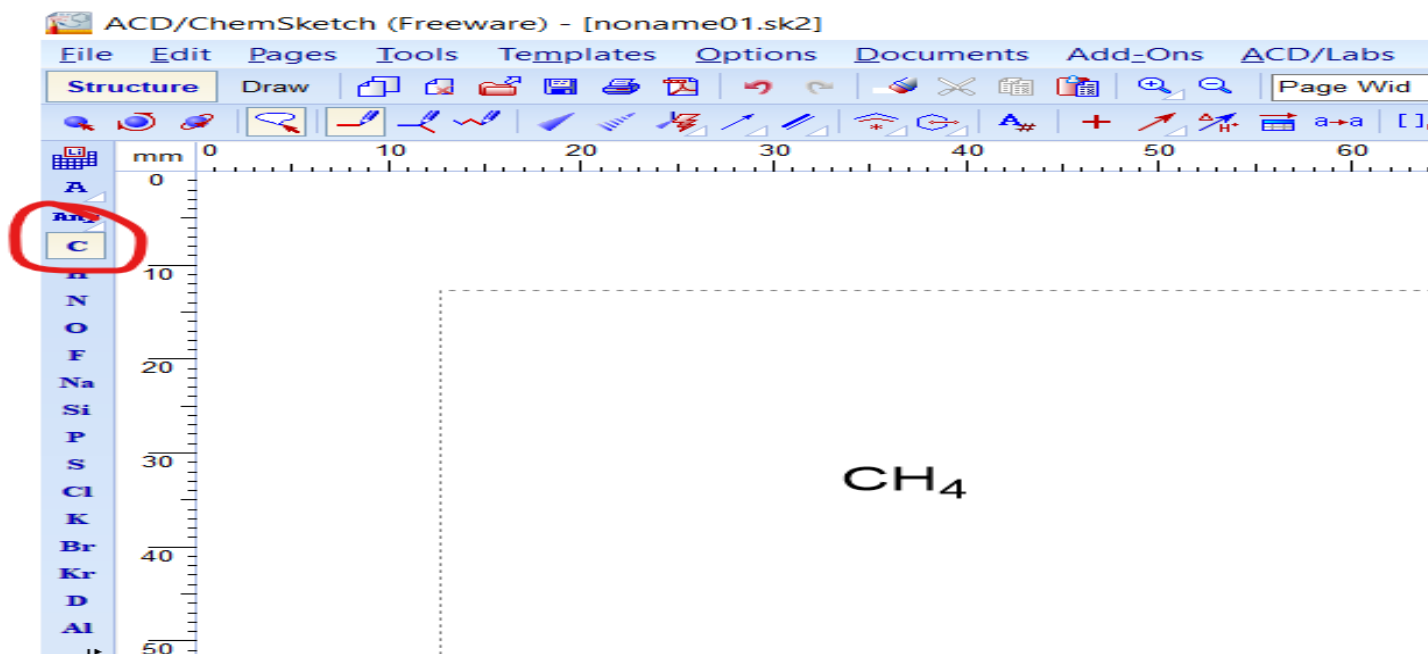
Цртање различни типови на арени:

Нацртајте молекула на бензен користејќи ги алатките за циклизација од алкан во циклоалкан од соодветната структура на програмата ChemSketch, а потоа алатката *Нормално цртање* () .





ЧЕКОР 1. Првиот чекор за цртање на молекулата на бензен кликнете на алатката *Нормално цртање* на лентата со алатки *Структура* и изберете го копчето *Јаглерод*  од лентата со алатки *Атоми* (Слика 1). Потоа се цртаат формули на арениите .

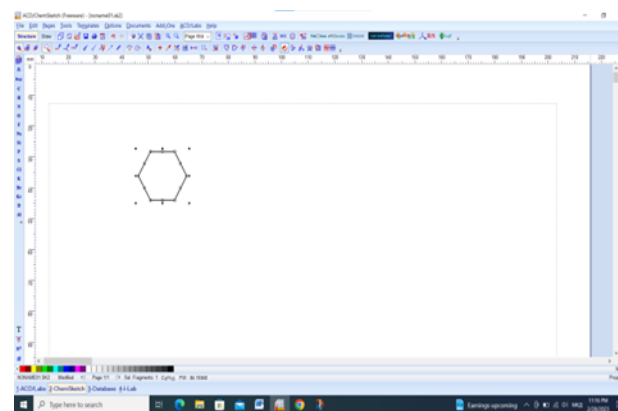
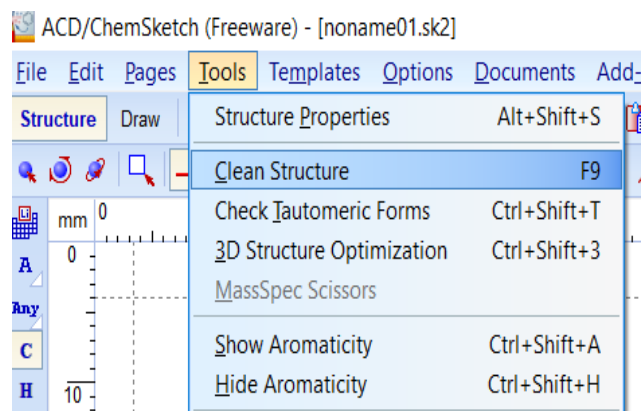
ЧЕКОР 2. За да започнете со цртање на формулата, треба да кликнете со левото копче на компјутерскиот глушец на празен простор од работната површина и ќе се појави молекулската формула на метан CH_4 . (Слика 1)

ЧЕКОР 3. Означете ја формулата CH_4 со глумчето и кога ќе видите правоаголник околу формулата за метан, кликнете на него за да додадете метил група која исцртува етан $\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$. (Слика 1).



Слика 1. Цртеж за прикажување на јаглеродородна низа



ЧЕКОР 4. Со лев клик на глумчето, притиснете на CH_4 влечете надесно во круг со шест кликувања под одреден агол во круг, при што ќе се појават следните членови на низата, со што се затвора шестчлениот прстен. За да се направи тоа успешно, потребно е да се избере целата структура на молекулата со кликување во горниот лев агол на интерфејсот , а потоа да се прилагоди начинот на избор на молекулата со кликување на оваа икона  која се покажува после лев клик на иконата . Додека држите на лев клик од маусот на компјутерот, повлечете и изберете ја целата молекула, притиснете го копчето за чиста структура () (Слика 2 а,б) за да добиете правилен агол во структурата на циклохексан т.е. за да го нацртате точниот шестоаголник од циклохексан.

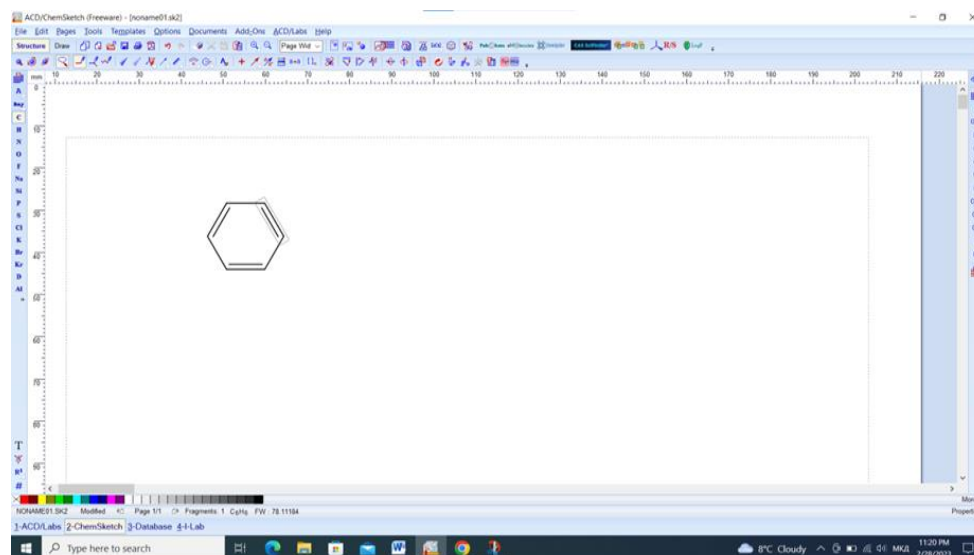


а)

б)

(Слика 2 а, б) (Чиста структура, прилагодување на должините и аглите за поврзување на циклохексан).

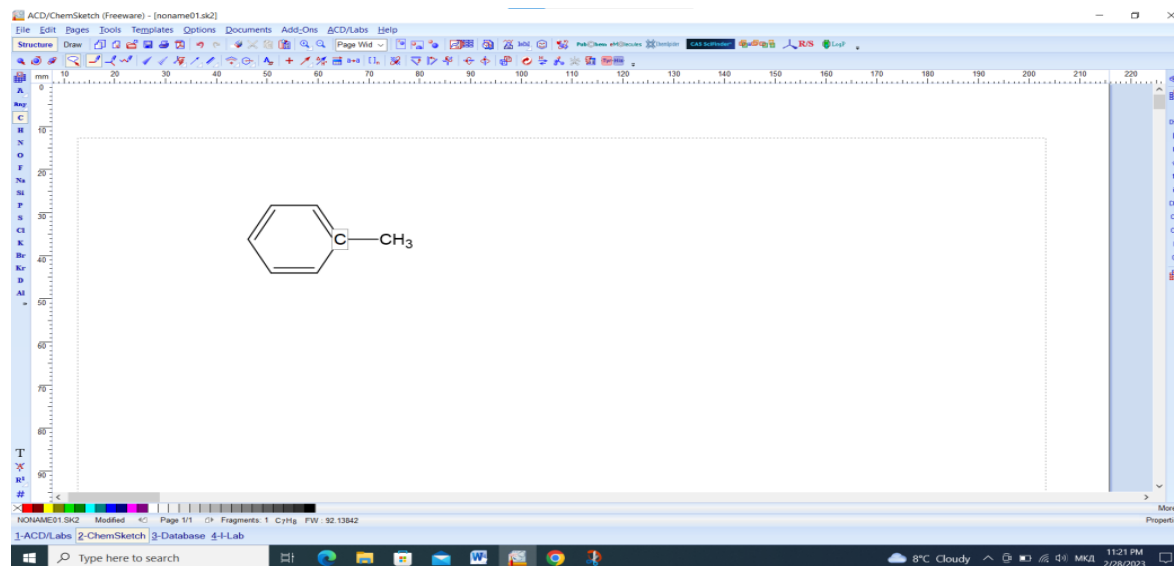
ЧЕКОР 5. За да додадете двојни врски во јадрото на бензенот, треба да се вклучи копчето за јаглерод () на лентата со алатки и (), потоа кликнете со левото копче на единечните врски помеѓу атомите C-C, каде што се појавува правоаголник околу врската C-C и потоа со кликување на него се означува двојна врска. (Слика 3)



(Слика 3). Скелетна формула на бензен. C_6H_6

ЧЕКОР 6.

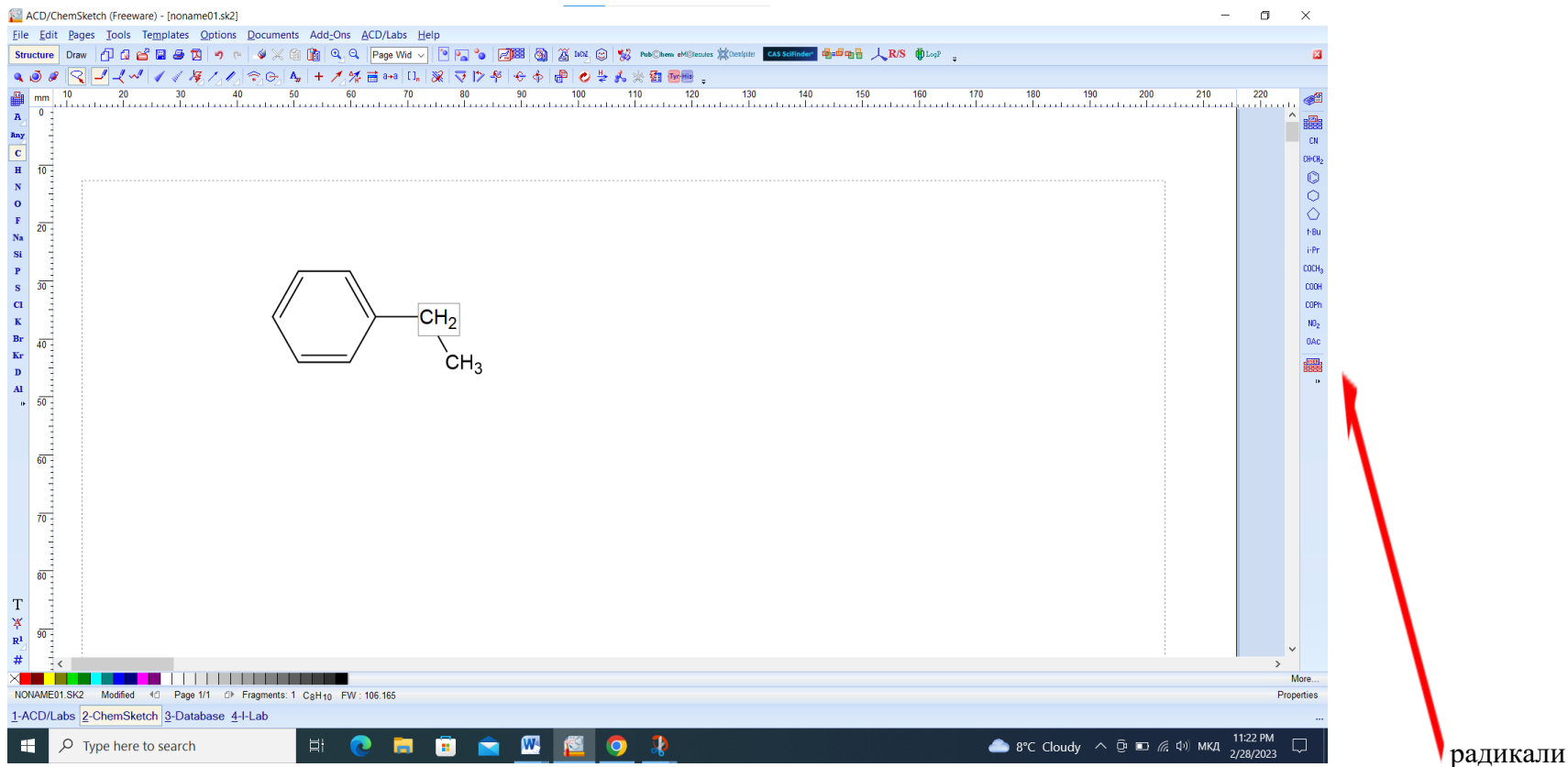
Со лево кликување на кој било агол од шестоаголникот на бензенот се прикажува СН атомот од кој (Слика 4), со влечење надвор од јадрото на бензенот, се додава радикал $-CH_3$ (метил група – алкилна група) или со притискање на левиот клик на глумчето и влечење, радикали со поголем број на јаглеродни атоми.



Слика 4. (Структура на метилбензен)
(толуен)

ЧЕКОР 7.


Постапката за додавање двојни, тројни врски во радикалот (страничната низа) е иста како и при означувањето на двојните врски во цикличниот прстен со кој е назначен претставник на арените. (Слика 5) - етилбензен. Кореспонденцијата на другите радикали во супституираните деривати на арили се врши преку табелата на радикали која ги содржи најчесто потребните радикали за брзо цртање на структурата која се наоѓа на референтната лента со алатки поставена вертикално на десната страна од работниот простор. Користете го множеството алатки *Полнеж/Радикали* од лентата со алатки *Атом* за да промените или нацртате радикал.




Слика 5. Структура на молекулата на етилбензен

Пример 2

ЧЕКОР 1. Обидете се да ги нацртате моносупституираните деривати на бензен прикажани на слика 6 и дисупституирани и трисупституирани деривати на бензен прикажани на слика 7. Нацртајте го горенаведеното на начин опишан во **ЧЕКОРИТЕ 1-7** од **примерот 1**.

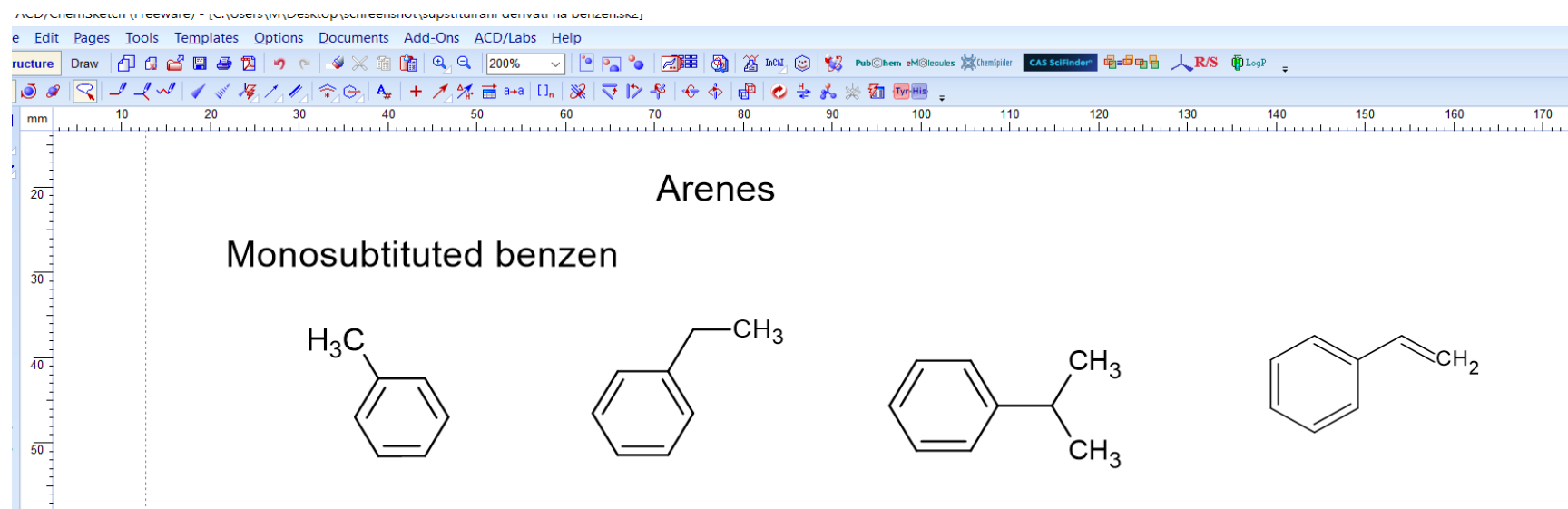
За да се нацрта молекулата на бензен како основа на ароматичните соединенија на арен, првиот чекор е да се отвори програмата *ChemSketch*, а потоа алатката *Нормално цртање* () е стандардната алатка за стартување на програмата. Со оваа алатка, можете лесно да нацртате прави или разгранети

јаглеводородни низи. Нацртајте ја молекулата на бензен, но прво проверете дали е овозможена алатката *Нормално цртање* на лентата со алатки

Структура и дека копчето *Carbon* () е избрано на лентата со алатки *Атоми* (**Слика 1**)

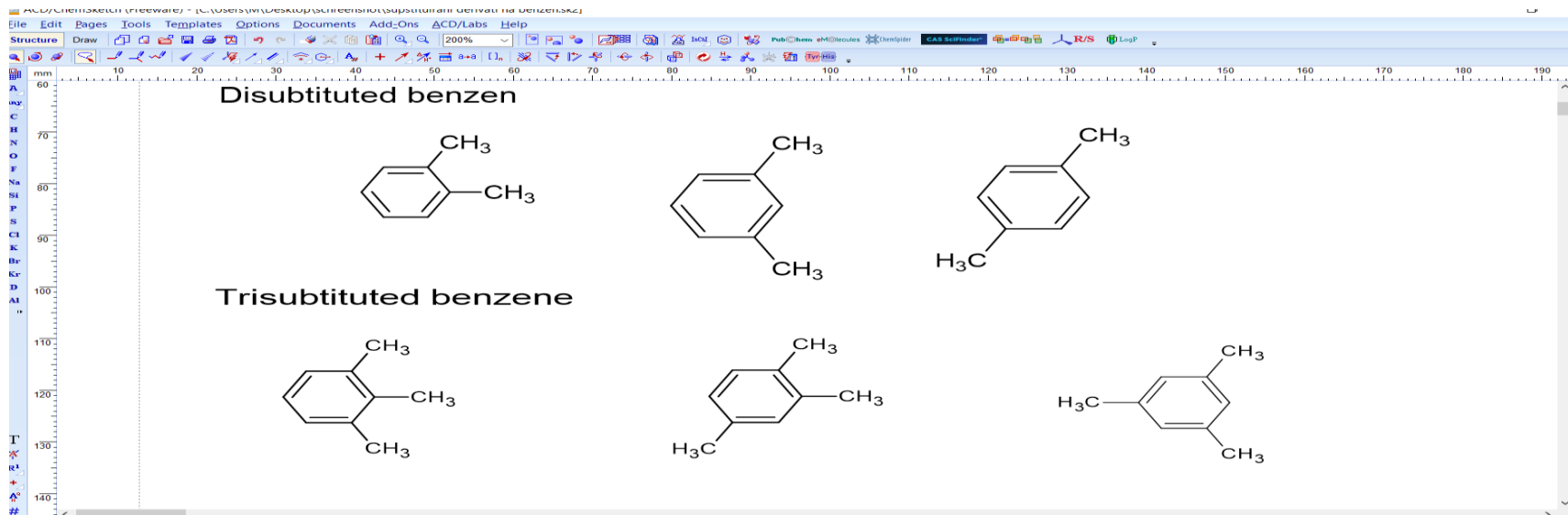
• Потоа за да го направите ова, прво треба да кликнете со левото копче на компјутерскиот глушец на јаглеродниот атом...

Нацртајте молекула на метилбензен (толуен); етилбензен; изопропилбензен (кумен); винилбензен (стирен)-(Слика 6)



Слика 6.(Молекулекулски структури на моносупституирани деривати на бензен)

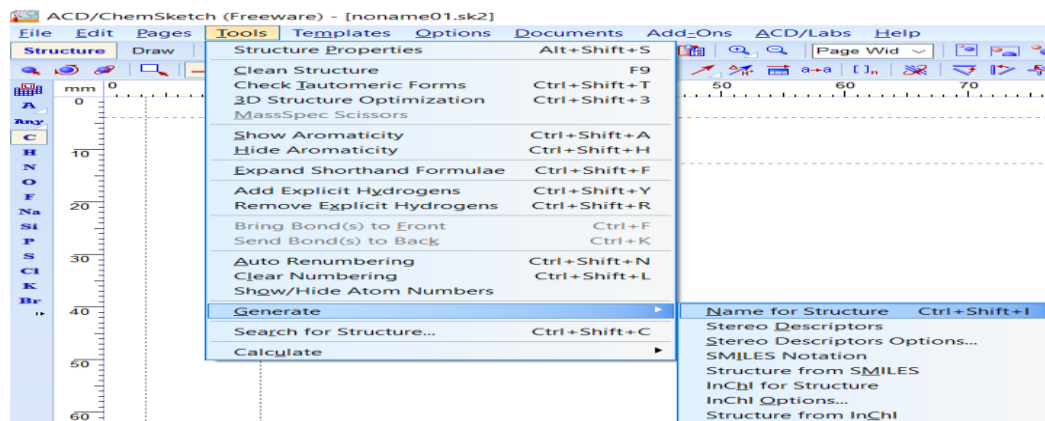
Цртање на структура на изомерите диметилбензен (ксилен); триметилбензен (**Слика 7**)




Слика 7. Молекулскии структури на деривати на дисупституиран и трисупституиран бензен

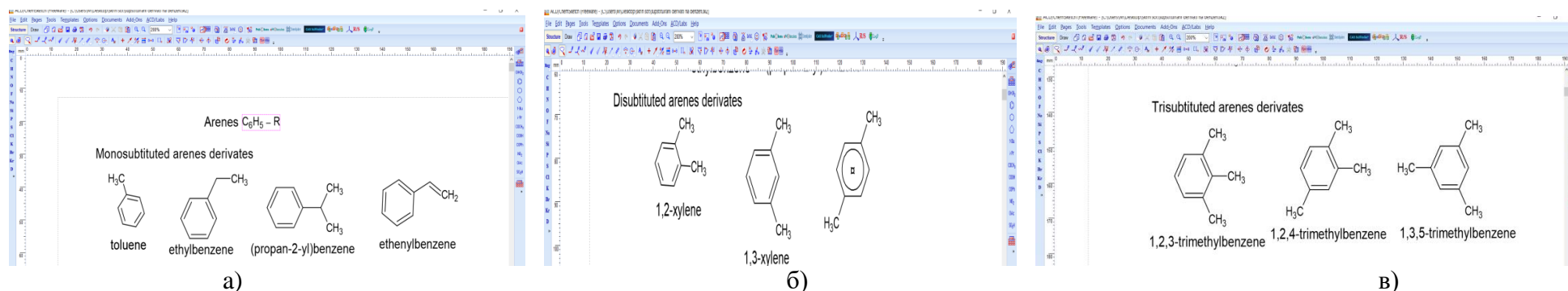
ЧЕКОР 2.

Именување на структурата на арентите: За да ја извршите оваа постапка кликнете на менито *Алатки*, изберете ја опцијата *Генерирај* и потоа кликнете на *Именувај структура*. Споменатата постапка е прикажана на (Слика 8), а потоа (Слика 8 а) метилбензен (толуен); етилбензен; изопропилбензен (кумен); винилбензен (стирен) ;(Слика 8 б) (1,2)-диметил бензен тривијален ксилен; 1,3-диметил бензен и 1,4-диметил бензен и структурата (Слика 8 в) на 1,2,3-триметил бензен.



Слика 8. Генерирање на имиња на нацртани соединенија

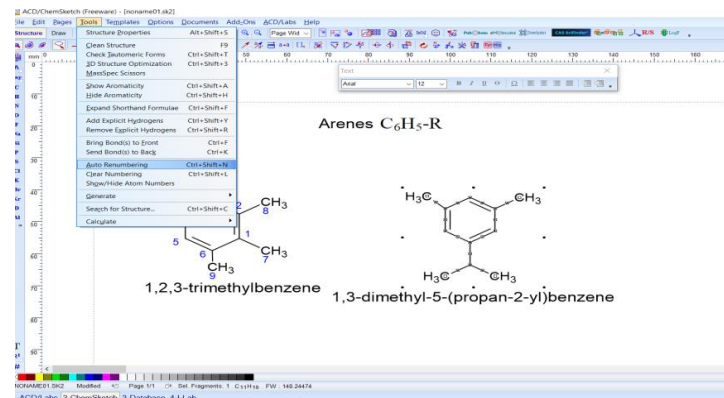
Бидејќи постојат неколку типови на изомери на деривати на дисупституиран и трисупституиран бензен, пред да се изврши постапката за номенклатура на молекулите, треба да се означи соодветната молекула со опцијата () и потоа да се пристапи до претходно дадените опции за номенклатура на молекули од (Слика 9 а,б,в)



Слика 9 а, б, в. Генерирани имиња на моносупституирани деривати на бензен, б) генерирани имиња на деривати на дисупституиран бензен, в) генерирани имиња на трисупституирани деривати на бензен

ЧЕКОР 3.

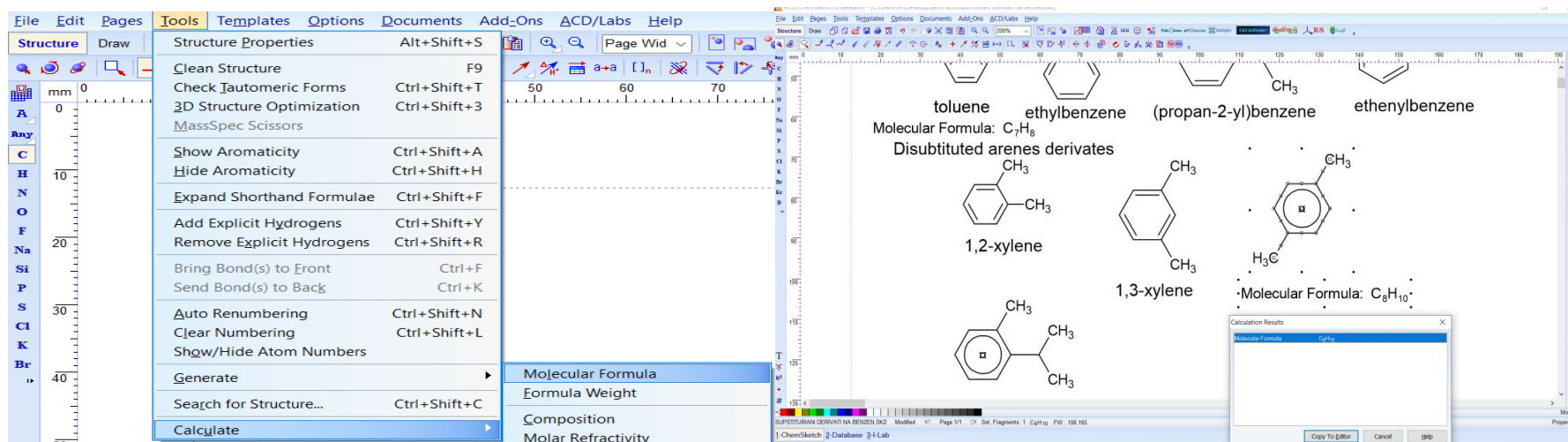
За да ги нумерирате атомите на јаглеродот во структурата на соединението, изберете Алатки, потоа *Прикажи/Скриј* ги атомските броеви. (Слика 10)



Слика 10. Нумерирање на јаглеродните атоми во нацртаните молекули

ЧЕКОР 4

Означете една од нацртаните структури и изберете *Алатки*, потоа *Пресметај* и на крајот *Молекуларна формула*, која ќе ја генерира молекулската формула на избраното соединение (Слика 11а). Молекулската формула на избраното соединение се прикажува во нов прозорец. За да се прикаже молекулската формула на работниот лист, кој ја содржи структурата и името на избраната структура на молекулата, изберете *Копирај во уредувач*. (Слика 11б)



а)

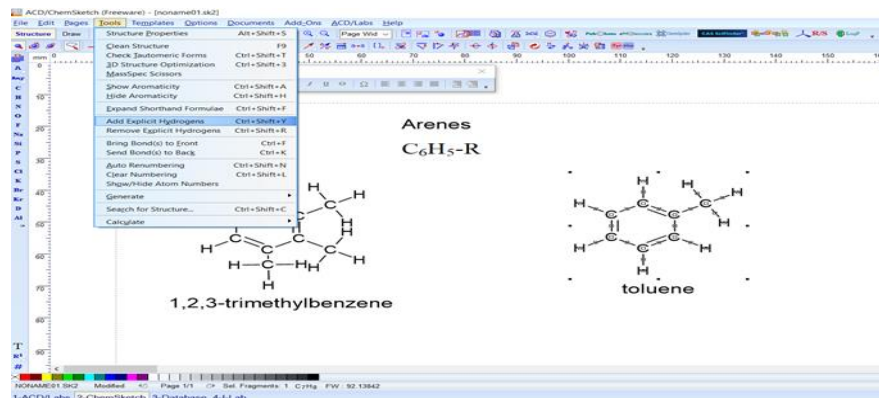
б)

Слика 11

а) Низа на дејства за пресметување на молекуларната формула на избраната структура на соединение, б) прозорец со пресметаната молекуларна формула на структурата на избраното соединение..

ЧЕКОР 5

За да се прикаже структурата на молекулата на метилбензен (толуен) со структурната формула, изберете *Алатки*, потоа *Додај експлицитни водородни атоми*. Потоа, изберете *Clean Structure* за да ја уредите прикажаната структура и во алатката *Tools*,а со кликување на *Structure Properties* ќе се отвори нов прозорец во делот *Show Carbons* каде ќе ја изберете ја опцијата *all* (Слика 12).

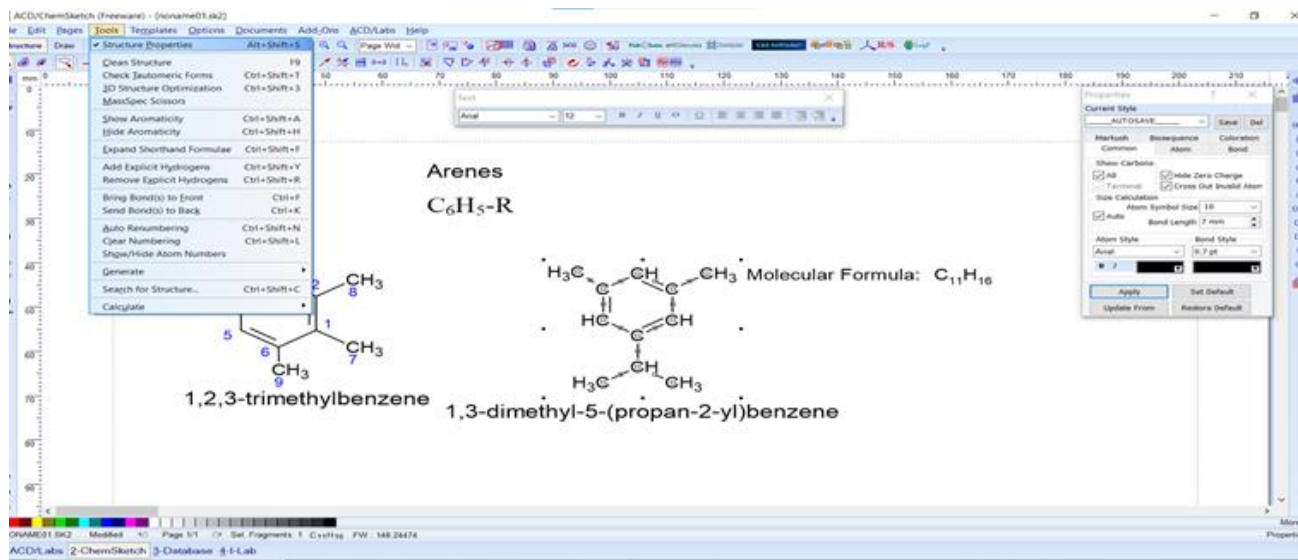


Слика 12

Структурна формула на молекула на метилбензен (толуен)


ЧЕКОР 6

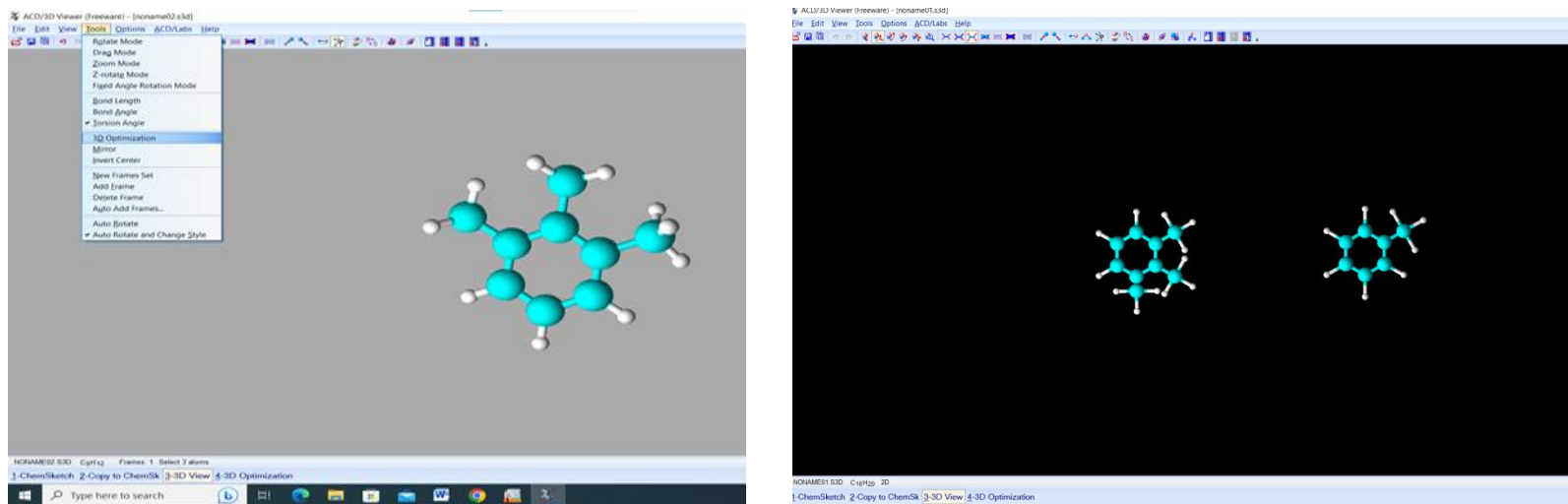
Повторете ја претходно опишаната постапка за прикажување на структурната формула на молекулата користејќи го примерот на 1,3-диметил-5-изопропилбензен (Слика 13).



Слика 13. Рационалната формула на 1,3-диметил-5-изопропилбензен

ЧЕКОР 7

Прикажете ја добиената структурна формула за метилбензен и 1,2,3 три метилбензен во три димензии со прво избирање и потоа кликување на опцијата  на лентата со алатки. Ке се отвори нов прозорец (*3D Прегледувач*) со 3D приказ на молекулата (**Слика 14**). Со позиционирање на иконата на глумчето на секој поединечен атом, се појавува неговата нумеричка ознака според номенклатурата IUPAC и нејзините координати.



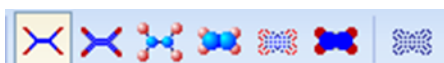
Слика 14. 3D структура на молекулата на метилбензен и 1,2,3 триметилбензен


ЧЕКОР 8

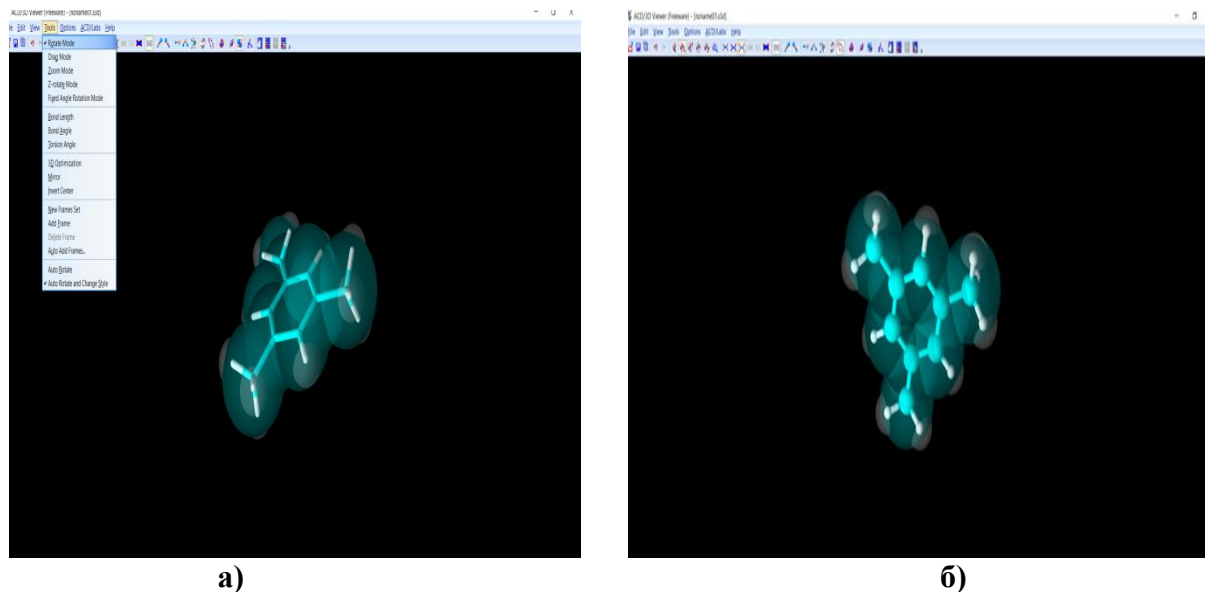
Повторете го процесот на прикажување на тродимензионалната структура на молекулата користејќи го примерот на молекулата 1,3,5-триметилбензен..Обидете се да ја користите секоја од опциите за *ротирање*, *преместување* и *избирање* на горната лента со алатки:



, а потоа прикажете ја молекулата на секој од начините што ги нуди програмата, а опциите се прикажани и на лентата со алатки:



.За автоматско ротирање на молекулата, кликнете на иконата . (Слика 15 а, б)



Слика 15

Презентација на тродимензионалната структура на молекулата 1,3,5-триметилбензен со помош на стапчиња

(а) користење на стапчиња и топчиња

(б) презентација на структурата од два различни агли поради користење на можноста за ротирање на структурата на молекулата во просторот..

4.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

1. Нацртајте ги сите структурни изомери на триметил бензен. Напишете ги имињата на сите изомери, потоа изберете еден и направете го следново:

- нацртајте ја формулата на молекулот на триметилбензен
- да го генерира неговото име во програмата и да ја определи молекуларната формула на таа молекула
- прикажи го со скелетна формула, структурна и кондензирана структурна формула
- прикажување на структурата на молекулот во три димензии на различни начини
- да ги определи должините на избраните врски и специфичните агли на врски
- оптимизирање на молекулот
- ротирајте и поместете го во две и три димензии
- по цртање со алатките *ChemSketch* дадените молекули од арените по ваш избор ги зачувуваат 2D и 3D структурата на компјутерот
- определи ја молекуларната формула, префрли на три димензии, зачувај ја и 2D и 3D структурата на молекулот.

2. Истражете ја примената на арените во секојдневниот живот. Изберете една молекула за прикажување во програмата ChemSketch. Запишете ја во вашата тетратка примената на избраната молекула во секојдневниот живот. Зачувајте ја оптимизираната 2D и 3D структура на овие молекули на вашиот компјутер.

4.5. Примери на задачи за оценување на учениците

1. Нацртај ги сите структурни изомери на ксилен. Напишете ги имињата на сите изомери, потоа изберете еден и направете го следново:

а) генерирајте го името

б) определи ја молекуларната формула

в) прикажете ја структурата со молекулска формула, рационална и структурна формула

г) уредете ја структурата на молекулата со опцијата *Исчисти структура*

д) прикажување на структурата на молекулата во *3D прегледувачот*

ѓ) прикажете ја структурата на молекулот во *3D прегледувачот* користејќи стапчиња и топчиња

е) оптимизирање на молекулот

ж) зачувајте ја и 2D и 3D структурата на молекулот на десктоп компјутерот.

з) отворете ја 2D структурата на молекулата и направете циклична структура од неа и генерирајте го нејзиното име и молекуларна формула.

ЛИТЕРАТУРА::

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

ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM

Луисови формули

1. РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна единица: Луисови формули
Наслов на тема: Цртање Луисови формули
Предвиден број на часови: 2

1.1. Теоретски вовед

Луисови формули се начини на поврзување на атомите во молекулот со точки што претставуваат заеднички парови на електрони или неспарени електрони.

При цртање на Луисови формули, се користат одредени правила кои се објаснети подолу:

1. Неопходно е да се одреди вкупниот број на валентни електрони во молекулата или јонот.

2. Атомите треба да бидат распоредени во „скелетот“ на молекулот:

- атомите на водород се секогаш периферни или екстремни атоми бидејќи можат да се врзат само со една ковалентна врска

– централниот атом од преостанатите е оној чиј коефициент на електронегативност е најнизок

3. Останатите атоми треба да се врзат со една ковалентна врска со централниот атом. За ова поврзување се користени одреден број електрони кои треба да се одземат од вкупниот број на валентни електрони. Останатите валентни електрони треба да се распределат како несврзувачки електронски парови до октетот со атоми со поголема електронегативност.

4. Потребно е да се провери дали сите атоми постигнале соодветна конфигурација на благороден гас (дублет, октет). Ако централниот атом не достигнал октет, тогаш потребно е да се формираат повеќе врски со помош на несврзувачки електронски парови од периферни атоми додека не се достигне октетот.

5. Потребно е да се провери дали бројот на електронски парови од централниот атом одговара на валентноста на централниот атом.

Теоријата за одбивање на електронски парови на валентната обвивка (VSEPR) е модел кој се користи во хемијата за да се предвиди геометријата на поединечните молекули од бројот на електронски парови што ги опкружуваат нивните централни атоми. Теоријата VSEPR се користи за да се предвиди распоредот на електронски парови околу централните атоми во молекулите, особено едноставните и симетрични молекули. Централниот атом во оваа теорија се дефинира како атом кој е поврзан со два или повеќе други атоми, додека терминалниот атом е поврзан само со еден друг атом.

1.2. Образовни резултати

1. Прикажи атоми, молекули или јони со Луисовите формули
2. Објаснете го просторниот распоред на честичките во елементарните супстанции и молекулите на хемиските соединенија со примена на теоријата на VSEPR.
3. Пресметајте го аголот на поврзување помеѓу два атома во нацртаните молекули.
4. Визуелизирајте 3D структури на сложени јони користејќи готови шаблони од програмата
5. Применете ја VSEPR теоријата при одредување на просторниот облик на молекулите или јоните.
6. Вежбајте ја употребата на научените алатки во ChemSketch на дадени примери

7. Користејќи независно дизајниран пример од секојдневниот живот за проверка на реализацијата на образовните резултати
8. Именувајте органски и неоргански соединенија со помош на програмата за скица.

1.3. Инструкции за користење на програмата ChemSketch

А) Како прв пример, ќе проучиме како да нацртаме Луисова формула на молекулата од водата (H₂O)

ЧЕКОР 1 На левата лента со алатки во *Периодниот систем на елементи*, се избира атом на кислород и се кликува на празен простор во областа за цртање. (Ќе се појави молекулската формула на молекулата од вода)

ЧЕКОР 2 Неопходно е да се означат добиената структура, а потоа да кликнете на *алатки* и *оптимизација на 3D структура*.

ЧЕКОР 3 Повторно ја означуваме структурата на нацртаниот молекул, кликуваме на *опции*, потоа ја поставуваме *структурата Стил на цртање* и потоа кликуваме *нормално*. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 1**.

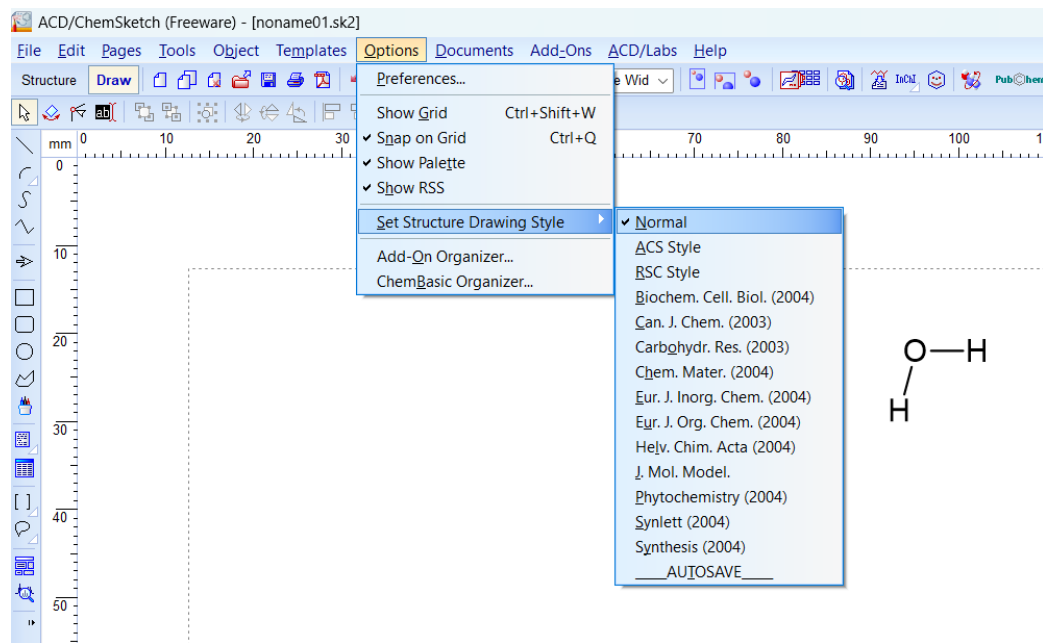
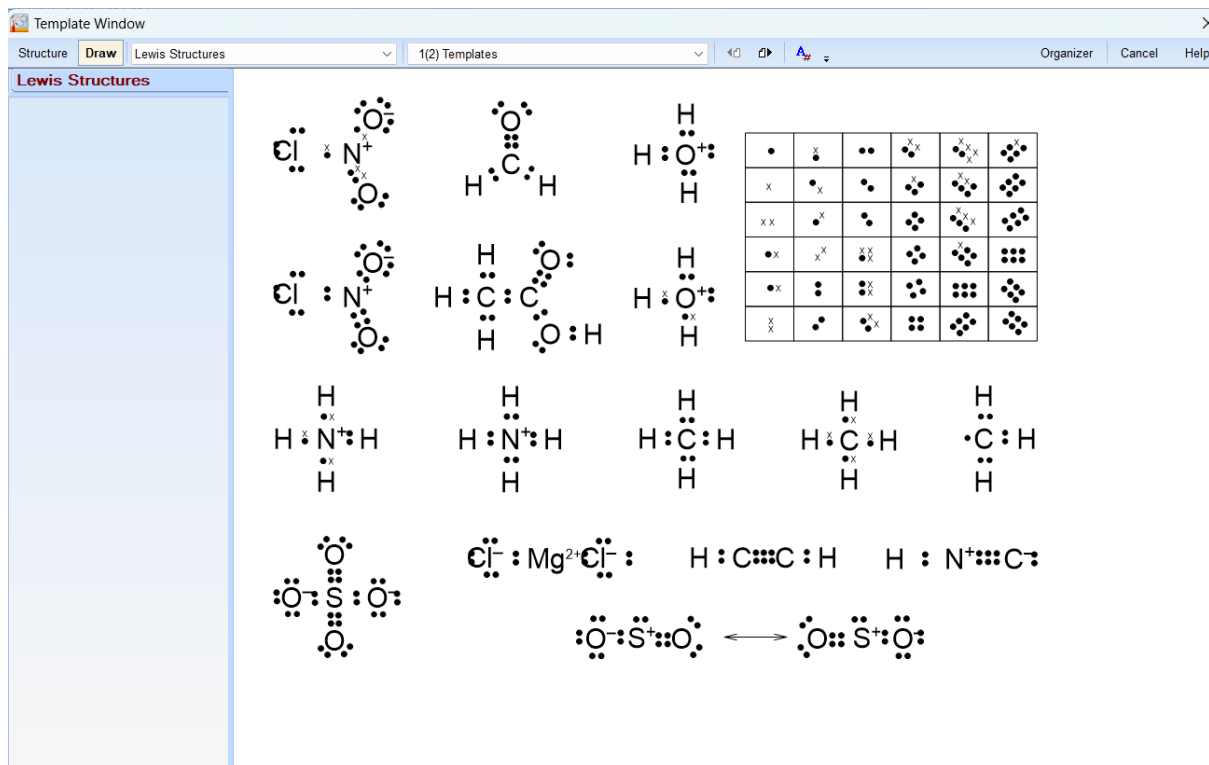


Figure 1. Оптимизација на нацртаната структура.

ЧЕКОР 4 За подобар преглед на Луисовите формули штом ќе го нацртаме саканиот молекул, можеме да кликнеме на *вклопи се* за да ја зголемиме сликата.

ЧЕКОР 5 За да се нацрта Луисовата формула од молекулата на вода, потребно е да се кликне на *шаблоните*, а потоа на *прозорецот со шаблони*, по што отвораме прозорец со Луисови точки. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 2**.

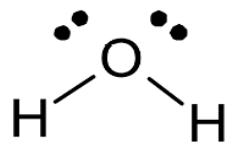


Слика 2. Прозорец за додавање Луисови точки на приказот на нацртаниот молекул.

ЧЕКОР 6 Во горниот десен прозорец, треба да изберете специфичен начин на прикажување на точките на Луис и да кликнете веднаш до атомот што го спојуваат.

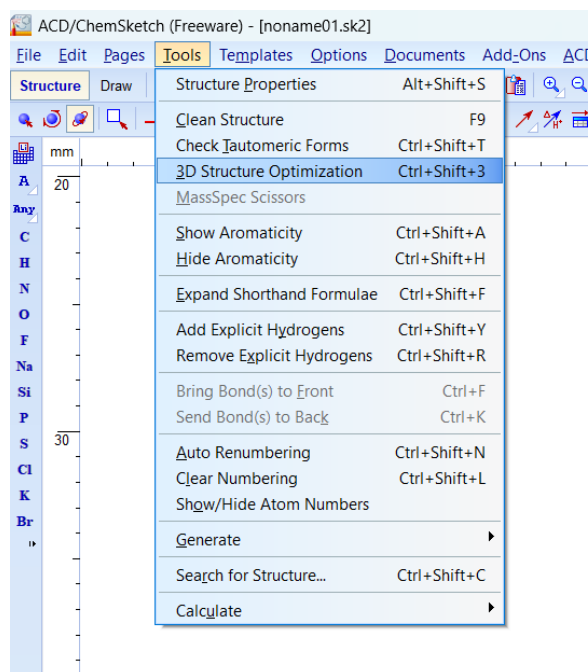
ЧЕКОР 7 Со *опцијата за селекција*, можеме да ги намалиме додадените точки на Луис, додека со *опцијата ротација* можеме да ги ротираме за да бидат поставени во правилна ориентација до атомот.

ЧЕКОР 8 Следејќи ги овие чекори добивме Луисова формула од молекулата на вода



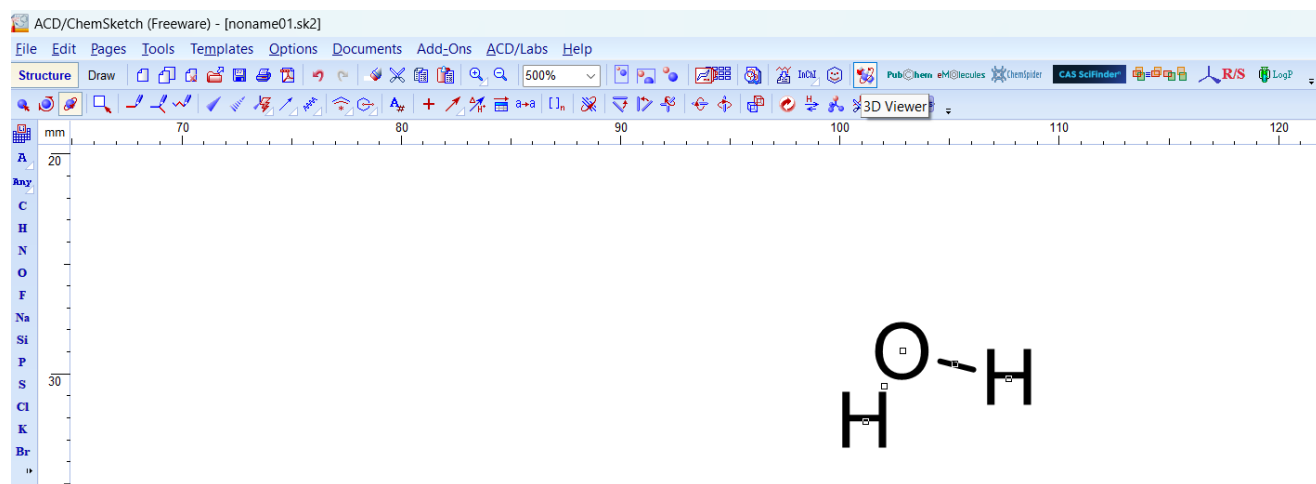
Слика 3. Луисова структура на молекул на вода.

ЧЕКОР 9 Во следниот чекор, ќе ја прикажеме 3D структурата на молекулата на водата. Во овој дел, ќе ги повториме чекорите 1-4. Потоа, ја означуваме нацртаната молекула и кликуваме на *алатки* и потоа *оптимизација на 3D структура*. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 4**.



Слика 4. 3D оптимизација на нацртаната структурата.

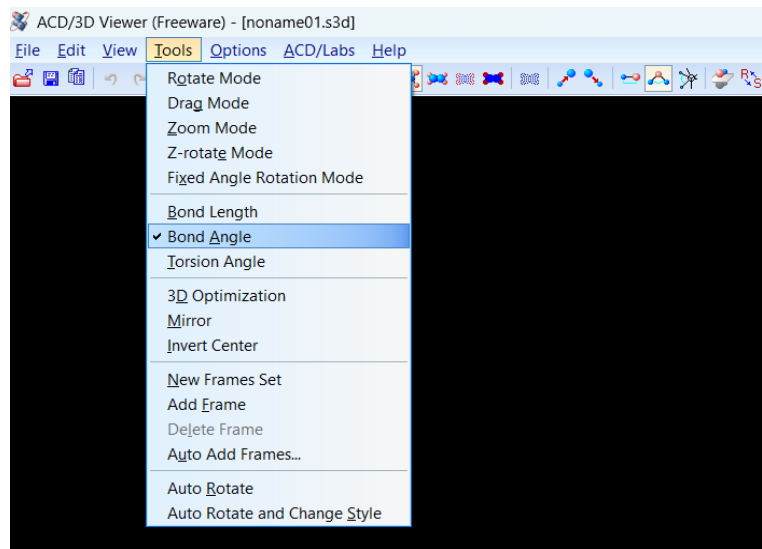
ЧЕКОР 10 Откако ќе ги направиме потребните дејства, на горната лента со алатки кликуваме *3D прегледувач*. Ќе се отвори нов прозорец со 3D структура на молекулот. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 5**.



Слика 5. Префрлување структура на 3D приказ.

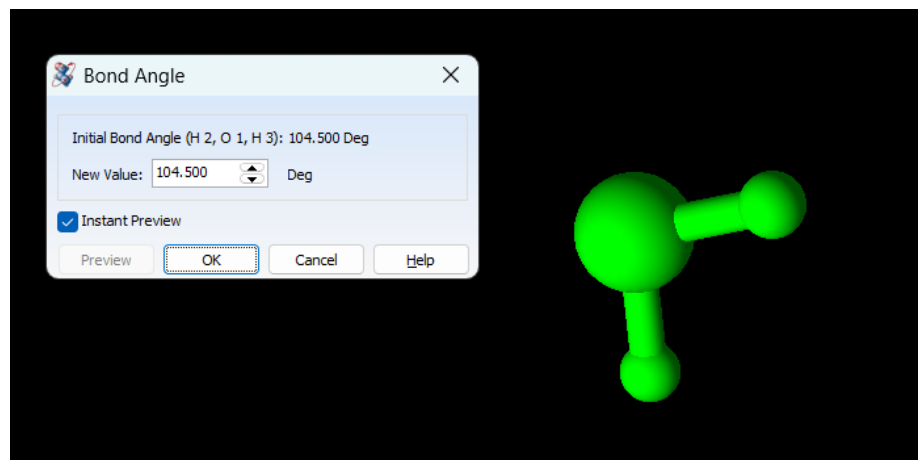
ЧЕКОР 11 Во 3D прозорец, молекулот може да се ротира во сите правци и на тој начин да се проучува просторната структура на молекулата..

ЧЕКОР 12 Со цел да се пресмета аголот помеѓу две ковалентни врски во една молекула, потребно е да се избере опцијата **Агол на поврзување**. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 6**.



Слика 6. Презентација за начинот на пресметување на аголот помеѓу две ковалентни врски во молекулата на вода.

ЧЕКОР 13 Откако ќе го направиме претходниот чекор, со покажувачот на глумчето потребно е прво да кликнеме на атомот на водород (за да ја промени бојата во зелена) потоа на атомот на кислород и на крај на вториот атом на водород. Ќе ни се отвори прозорец кој ќе го прикаже аголот меѓу ковалентните врски во молекулата на водата.



Слика 7. Читање на вредност на аголот помеѓу две ковалентни врски.

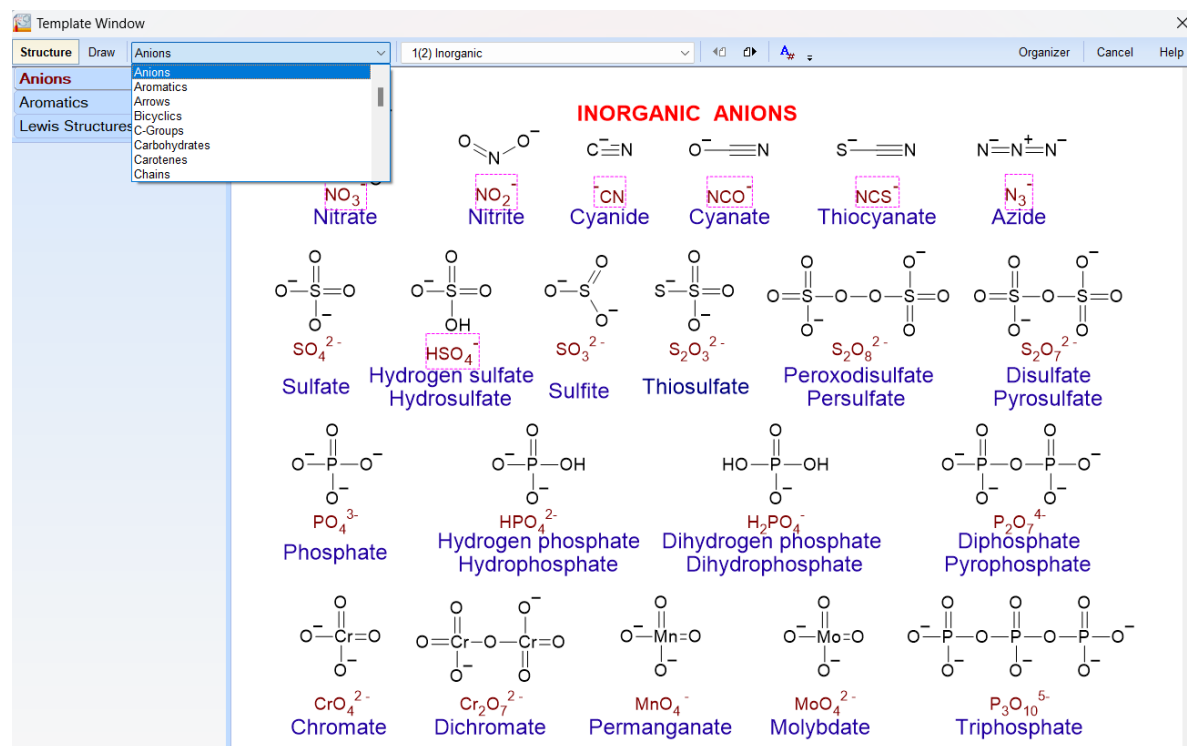
ЧЕКОР 14 Врз основа на претставената 3D структура на молекулот, потребно е да се знае VSEPR теоријата за да се одреди обликот на молекулот.

На ист начин како што е опишано за молекулата на вода, молекулите на метан и молекулите на амонијак исто така може да се прикажат во наставниот процес. Неопходно е да се следат истите чекори кои се објаснети во презентацијата за Луисова формула на молекулата на вода.

Молекулот на амонијак може да се претстави со избирање на азотни атоми во левата лента со алатки на која се наоѓаат атомите на поединечните елементи, додека молекулот на метан може да се претстави со избирање на атоми на јаглерод. Со кликување на празното простор на програмата се прикажува молекуларската формула на соединението, а следејќи ги горенаведените чекори за прикажување на молекулата на водата, може да се прикаже Луисова формула на овие соединенија и овие молекули да се прикажат во 3D структура .

Б) Како втор пример, ќе проучиме како да ја нацртаме структурната формула на СУЛФАТЕН АНИОН.

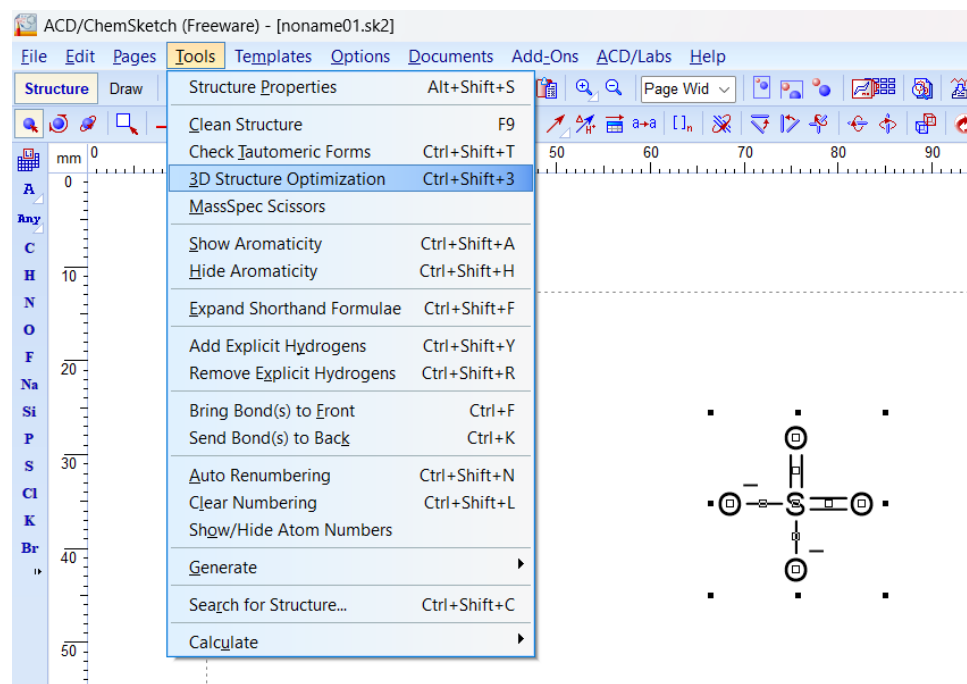
ЧЕКОР 1 Во горната лента со алатки, кликувате на *шаблонот* и го избирате *прозорецот на шаблонот*. После тоа, се отвора прозорец во кој избираме анјони за областа за прикажување во левото поле и во десното поле избираме неоргански. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 8**.



Слика 8. Прозорец со неоргански анјонски шаблони

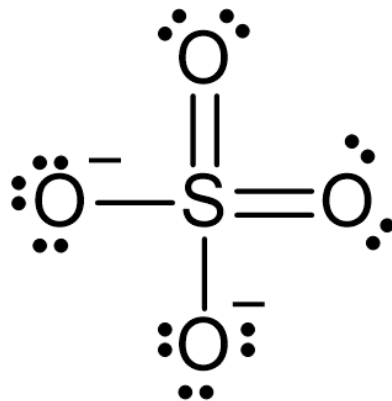
ЧЕКОР 2 Откако го направивме првиот чекор, во наведениот прозорец што се отвори го избираме саканиот анјон чија структурна формула сакаме да ја прикажеме, во овој случај тоа е сулфатниот анјон. Кликуваме на избраниот анјон, потоа прозорецот се затвора и кликуваме на наведениот анјон до делот за цртање структури.

ЧЕКОР 3 Го означуваме нацртаниот анјон и кликуваме *алатки* и потоа *3D оптимизација на структурата*. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 9**.



Слика 9. Цртање неоргански анјони

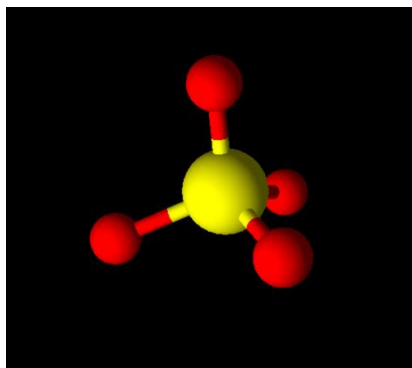
ЧЕКОР 4 Презентираната структурна формула е Луисова формула на начин кој е објаснет во цртање Луисови формули на молекулата на вода.



Слика 10. Луисова формула на сулфатен анјон

ЧЕКОР 5 После тој чекор, во горната алатка се кликнува на опцијата за префрлување на нацртаната молекула во 3D приказ - *3D прегледувач* кој ја прикажува 3D структурата на анјонот и просторниот распоред на атомите во нацртаниот анјон.

Презентираната 3D структура на молекулот може да се ротира во сите правци и на тој начин да се проучува распоредот на атомите во вселената.



Слика 11. 3D приказ на сулфатен анјон

ЧЕКОР 6 Презентируваниот молекул може да се определи со ковалентен агол, а со познавање на VSEPR теоријата може да се одреди обликот.

1.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

1. Нацртајте ги структурните формули на Луис на следните молекули: јаглерод(IV) оксид и сулфур(IV) оксид

а) Прикажете ги овие молекули во 3D структура

б) Определете го аголот меѓу ковалентните врски во овие молекули

в) Одредете ја формата на молекулата со примена на теоријата на VSEPR.

2. Нацртајте Луисови формули на следните јони: нитрит и сулфит.

а) Прикажете ги овие јони во 3D структура

б) Одредете го ковалентниот агол со овие јони

в) Определете ја формата на јоните со познавање на теоријата на VSEPR.

3. Истражувајте и одберете една молекул кој е од суштинско значење за секојдневниот живот на човекот. Нацртајте го избраниот молекул во Chemsketch и покажете ја Луисова формула. Претставете го избраниот молекул во 3D структура и проучете ја нејзината просторна структура.

1.5. Примери на задачи за оценување на учениците

4. Нацртајте Луисова формула на сулфурна киселина.

а) Прикажете ги овие молекули во 3D структура

б) Определете го аголот меѓу ковалентни врски во овие молекули

в) Одредете ја формата на молекулата со познавање на теоријата на VSEPR.

ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM
ХИРАЛНОСТ И ОПТИЧКА АКТИВНОСТ

1. РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна единица: Хиралност и оптичка активност
Наслов на тема: Хиралност и оптичка активност
Предвиден број на часови: 2

1.1. Теоретски вовед

Хиралност и оптичка активност

Оптичката активност е поврзана со внатрешниот просторен распоред на атомите во молекулата. Постојат парови на молекули кои се во ист однос меѓу себе како предмет и лик(неговата рефлексija) во огледало.

Оптичката активност се јавува во широк опсег на органски и неоргански комплексни соединенија. Органските јаглеродни соединенија се најчестите оптички активни супстанции. Услов за оптичка активност е фактот што четири различни супституенти се прикачени на јаглеродниот атом. Таквиот јаглероден атом се нарекува асиметричен (хирален = хирос = од грчки јазик - рака) јаглерод (хирален центар на молекулот). Некомпатибилноста на објектот со неговата огледална слика се нарекува хиралност.

Паровите на супстанции кои содржат оптички активен јаглерод и се јавуваат во две форми (објект-слика) се нарекуваат енантиомери, претходно оптички антиподи.

Доколку молекулата содржи повеќе центри на хиралност, бројот на енантиомери се зголемува.

За структури со ациклични синцири, бројот на оптички антиподи е еднаков на $i=2^n$, каде што i е број на изомери, а n е бројот на хирални центри во молекулите. Со поголем број на асиметрични атоми, некои изомери може да бидат симетрични како целина. Пример се изомерите на винската киселина со два идентични центри на хиралност во молекулот.

Означување на енантиомери

Енантиомерите кои ја вртат рамнината на планарно поларизираната светлина надесно се нарекуваат декстрогири и се означени со знак +.

Енантиомерите кои ја свртуваат рамнината на планарно поларизираната светлина налево се нарекуваат левогири и се означени со знакот -. Еквивалентната смеса на двата енантиомери се нарекува рацемска смеса (рацемат) и не ја прекршува планарно поларизираната светлина (еднакви делови на + и - енантиомери се компензираат).

D-; L-енантиомери

Во голем број случаи, знаците на ротација се само физичка константа, а односот помеѓу неа и структурата тешко се дефинира. Поради оваа причина, беа воведени стандарди со кои се споредуваат поединечни конфигурации на асиметрични центри.

Во хемијата на шеќери, овој стандард е глицералдехид - неговиот декстрогир антипод е означен со симболот D-, а левогирот со L-.

Во хемијата на аминокиселините и протеините, овој стандард е аминокиселината аланин - неговиот декстрогиран антипод означен со симболот D-, а левогиран антипод со L-.

Бидејќи оваа нотација не одговарала, хемичарите се согласиле да ја изразат апсолутната конфигурација на системите користејќи го системот Кан-Инголд-Прелог R,S, според кој секој центар на хиралност е назначен посебно.

(R доаѓа од латински *rectus*, десно; S од латински *sinister*, лево).

Извор: Mareček, A., Honza, J. Хемија за четиригодишни средни училишта, том 3. 1во издание Olomouc: Nakladatelství Olomouc 2000. 250 стр. ISBN 80-7182-057-1

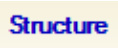

1.2. Образовни резултати


- да се опише концептот на хиралност, оптичка активност, енантиомери
- да се определи хиралноста на соединението според неговата структурна формула
- да се нацртаат структурни и скелетни формули на различни хирални соединенија
- да се генерираат имиња на нацртани соединенија во *ChemSketch*
- да се генерираат молекуларни формули на соединенија
- да се оптимизираат формулите со користење ја функцијата *Исчисти структура* во програмата *ChemSketch*
- да се нацртаат оптичките изомери на формираните соединенија
- да се означат центарот на хиралитет во структурата на соединението
- да се прикаже структурата на хиралните соединенија во три димензии

- да се набљудуваат структури на соединенија од различни агли
- да ја ротирање и поместување на нацртаната структура во 2D и 3D
- да се определат должините на врските и аглиите на врската на различните хирални соединенија
- да се зачуваат креираните 2D и 3D структури во компјутер и на Google Drive


1.3. Инструкции за користење на програмата ChemSketch

ЧЕКОР 1

Во работниот простор *Структура*  

изберете ја опцијата *Нормално цртање*  (иконата Draw Normal е стандардно избрана освен ако не сте избрале друга икона на лентата за Структура по стартувањето на програмата).

ЧЕКОР 2


изберете го јаглеродниот атом  на *лентата со алатки на атом* (исто така стандардно избран).

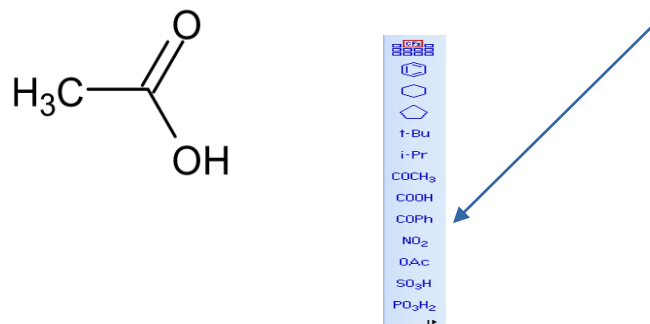
Лев клик во слободниот работен простор за да се прикаже CH₄ (**Слика 1**).



Слика 1. Избор на атом


ЧЕКОР 3

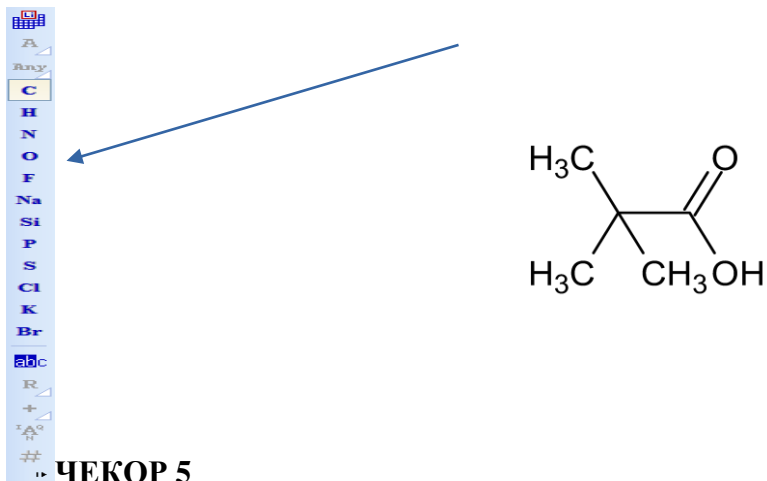
Табела на радикали  на лентата за супституенти – по активирањето, која можете да ја изберете од неколку можни супституенти – изберете ја карбоксилната група - COOH и поврзете се со метан (Слика 2.)



Слика 2. Избор на супституент

ЧЕКОР 4

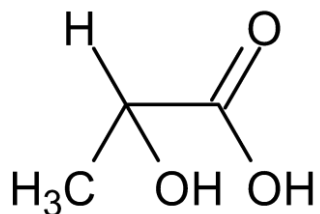
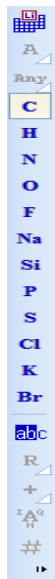
Од лентата со алатки на атом изберете  и поврзете три CH₃ групи со последниот јаглерод лево (Слика 3.):



Слика 3. Додавање на супституенти


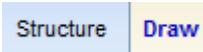

ЧЕКОР 5

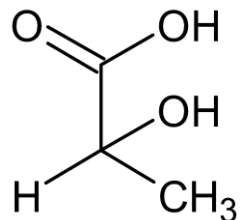
Од лентата со алатки на атом, изберете Н и О за возврат, заменете ги 2 групи CH_3 за групата OH и H (Слика 4.)



Слика 4. Додавање на супституенти

ЧЕКОР 6

Со помош на иконата *Избери/Премести*  означете ја формулата (кликнете на просторот во правоаголникот дефиниран од најоддалечените атоми на структурата), изберете го работниот простор *Цртање*  и изберете ја  иконата *Ротирај 90°* (ротација за 90°) (Слика 5.)



Слика 5.

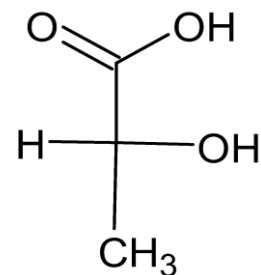
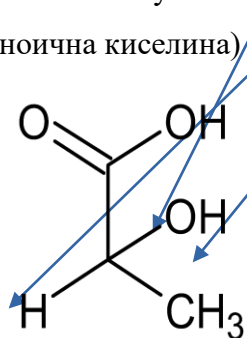
ЧЕКОР 7

Изберете го работниот простор *Структура*

Structure

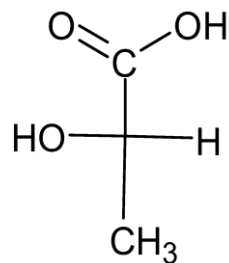
Draw

Со последователно кликување на групата OH, H и CH₃ преместете ги групите во потребната положба (Слика 6.) – D-млечна киселина (D-2-хидроксипропаноична киселина)




Слика 6. Прилагодување на структурата

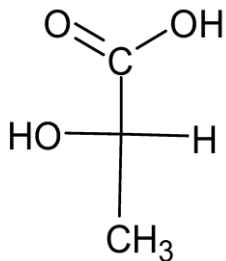
Енантиомерите се означени според карактеристичната група (хидрокси) ориентација на асиметричниот јаглерод (Слика 7.) - L-млечна киселина (L-2-хидроксипропаноична киселина)



Слика 7. Означување на енантиомери


ЧЕКОР 8

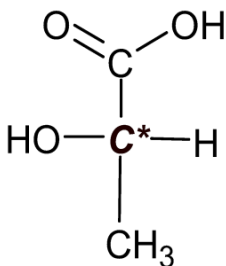
Изберете *Мени Алатки – Генерирај – Име на структура* (или изберете ја иконата  на главната лента со алатки) - името на англиската структура ќе се генерира според номенклатурата IUPAC (Слика 8.) - (2-hydroxupropoanic acid)



Слика 8. Име на структурата

ЧЕКОР 9

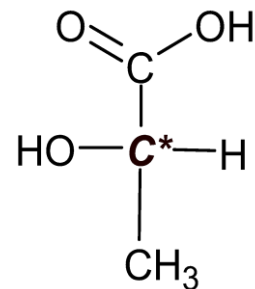
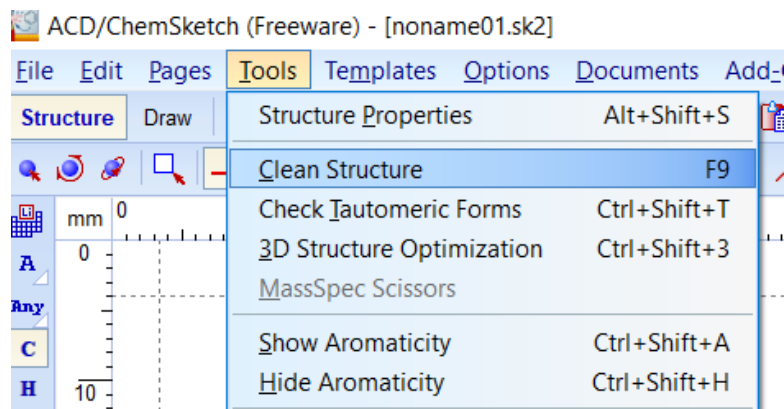
Ако треба да се означи хирален јаглерод, изберете ја иконата *Уреди ознака на атом*  на лентата со алатки на атом, кликнете на хиралниот центар (јаглерод), ќе се појави табела *Уреди ознака*, изберете или напишете во неа C* и изберете *Вметни* (Слика 9.)



Слика 9. Означување на асиметричен јаглерод

ЧЕКОР 10

Создадените структури може да се оптимизираат со помош на функцијата *Исчиста структура*



Слика 10. Оптимизација на формула

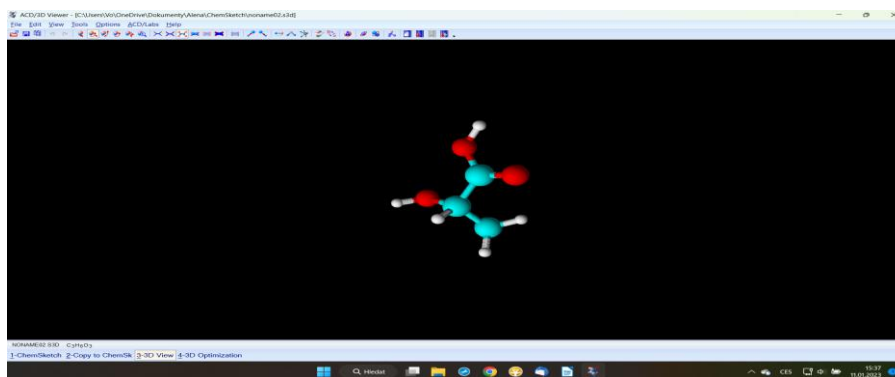
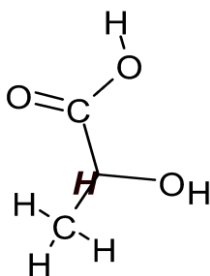
ЧЕКОР 11

Апликацијата *3D Прегледувач* се користи за визуелизација на хемиски структури во 3D простор. Активирајте ја во менито во горната лента *ACD/Labs*. Во долниот лев агол има копчиња за префрлање помеѓу апликациите ChemSketch и 3D Прегледувач. Изберете ја нацртаната структура и оптимизирајте ја со 3D визуелизација користејќи ја иконата *3D Оптимизација*.



Изберете ја оптимизираната структура и користејќи ја иконата *3D Прегледувач*

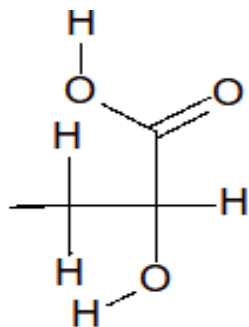
во горната десна страна на главната лента, копирајте ја структурата во *3D Прегледувач* (Слика 10, 11)



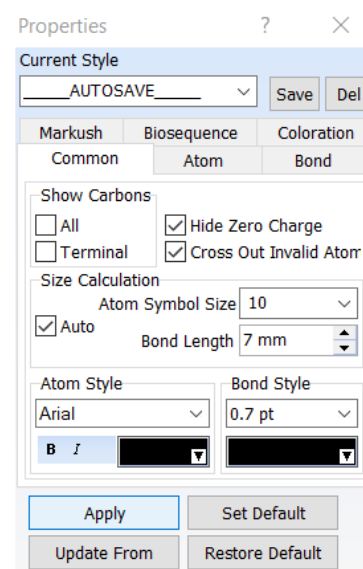
Слика 11. Формула во 3D простор

ЧЕКОР 12

Во нацртаната формула, можете да ги скриете или задржите сите атоми во формулата - креирајте целосна или поедноставена структурна формула. Во главната лента, одберете *Алатки – Својства на структура* (како што е прикажано на **Слика 12а**). Доколку сакате да се вратите на оригиналната формула - кликнете на опцијата *Сите* и иконата *Примени*.

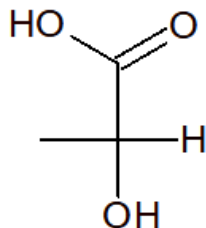


Слика 12а. Поедноставена структурна формула



Слика 12б. Моментален стил


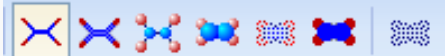



За да ги прикажете сите водороди во молекулот, изберете *Алатки* во главната лента и - *Додадете експлицитни хидрогени* - **Слика 12в**. За да се вратите, кликнете на *Алатки* и *Отстрани експлицитни хидрогени*.



Слика 12в. Целосно структурна формула


ЧЕКОР 13

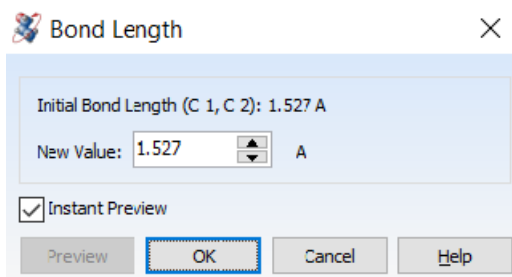
Обидете се на различни начини да го прикажете молекулот во 3D Прегледувач.

Кликнете на иконата *3D Прегледувач* . Прикажете ги врските на различни начини со кликување на иконите , обидете се со автоматско ротирање на молекулите со кликување на иконата  и други можни ротации. . Кликнете на иконата . Кликнете на иконата за непречено менување од режимите на молекулот со ротација.

ЧЕКОР 14

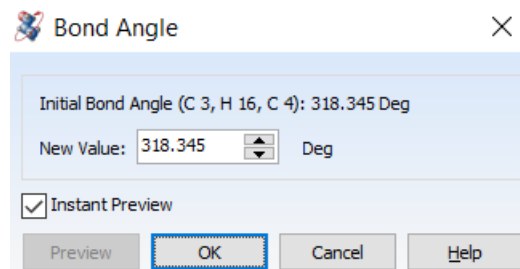
Определување на аголот и должината на врската

Определување на должината на врската: кликнете на *3D Прегледувач*  и потоа  кликнете на атомите помеѓу кои сакате да ја одредите должината на врската - прозорецот ја прикажува должината на избраната врска (**Слика 13**)



Слика 13. Должина на врска

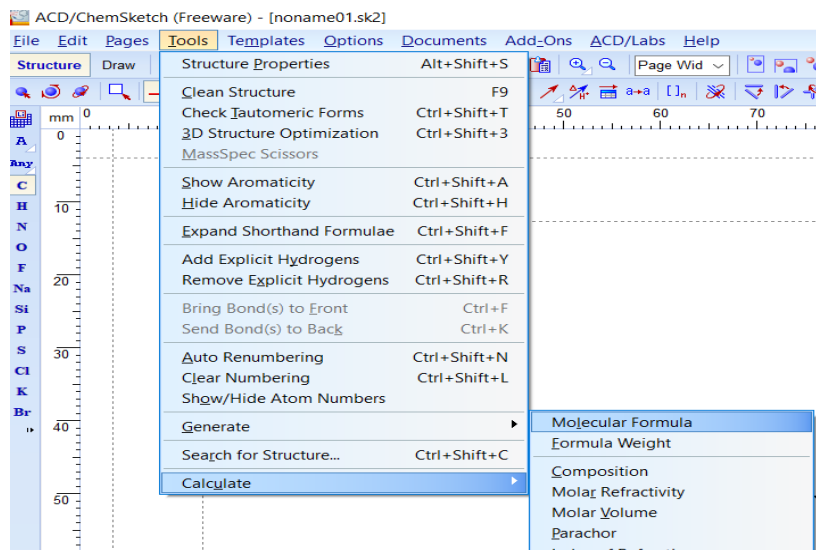
Определување на аголот на врската: кликнете на *3D Прегледувач*  потоа  и кликнете на атомите помеѓу кои сакате да го одредите аголот на врската - прозорецот го прикажува аголот на врската (**Слика 14**).



Слика 14. Агол на врска

ЧЕКОР 15

Создавање молекуларна формула и својства на друго соединение. Изберете *Алатки - Пресметај - Молекуларна формула*. За да ја прикажете молекуларната формула на нов лист со структурата и името на нацртаниот молекул, кликнете на *Копирај во уредувач*. Исто така можете да изберете и други ставки од менито - моларна маса, ... (Слика 15)



Молекуларна формула: $C_3H_6O_3$
 Формула за тежина: 90.07794

Слика 15. Создавање молекуларна формула

ЧЕКОР 16

Зачувајте ја креираната структура на вашиот компјутер и на Google Drive.

1.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

Побарајте информации за појавата на хирални соединенија во природата, нивната врска со метаболизмот на основните супстанции и нивната употреба во секојдневниот живот. Направете го другиот оптички изомер на млечна киселина следејќи ги истите упатства.

Наведете:

- име на соединението
- молекулска формула
- креирајте целосна и поедноставена молекуларна формула
- оптимизирајте ја формулата со „исчисти структура“
- креирајте 3D модел
- креирајте прегледи од различни агли
- определете ја должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом
- определете го аголот на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом

Пребарајте информации за протеиногени аминокиселини.

1.5. Примери на задачи за оценување на учениците

Создадете ги формулите на L и D серинот и определете:

- име на соединението
- молекулската формула
- креирајте целосна и поедноставена молекулска формула
- оптимизирајте ја формулата со „исчисти структура“
- креирајте 3D модел
- креирајте прегледи од различни агли
- определете ја должината на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом
- определете го аголот на врската помеѓу првиот и вториот јаглероден атом



ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM

1) ВОВЕД ВО ПРЕДМЕТОТ

Со оглед на зголемената застапеност на информатичката технологија, целта е да се олесни, подобри и усоврши знаењето на учениците и наставниот кадар од областа на структурата и реакциите на органските соединенија, нивното значење, примената во секојдневниот живот и практиката преку информативни апликации од кои едена од нив е софтверот ChemSketch.

2) ОПИС НА КОРИСТЕНИ АЛАТКИ – ChemSketch

3) ЛИСТА НА ИЗБРАНИ ПОГЛАВЈА

- Основи на работа во софтверот ChemSketch (Хрватска)
- Комплексни соединенија (Словенија)
- Алкани и циклоалкани (Хрватска)
- Алкени и алкини (Хрватска)
- Арени (Македонија)
- Алкохоли (Македонија)
- Алдехиди и кетони (Словенија)

- Биомолекули (Република Чешка)
- Хиралност и оптичка активност (Република Чешка)
- Апаратура за цртање (Хрватска)
- Луисови структури (Хрватска)

4. РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна целина: Органски соединенија
Име на наставната единица: Алкохоли
Предвиден број наставни часови: 2

4.1. Теоретски вовед во поглавјето

Алкохолите се хидроксилни алифатични деривати на органски соединенија во кои јагледородните атоми се поврзани со една или повеќе хидроксилни групи.

Алкохолите може да се категоризираат според различни критериуми:

- Според видот на радикалот со кој се врзува хидроксилната група, постојат алифатични алкохоли, ароматични алкохоли и феноли;
- Според видот на јаглеродниот атом со кој е врзана хидроксилната група, постојат примарни алкохоли, секундарни алкохоли и терциерни алкохоли;
- Според бројот на хидроксилни групи во нивната структура, алкохолите можат да бидат монохидрокси, дихидрокси и трихидрокси.

Методите за нивно добивање познати се уште од античко време преку процесот на ферментација од шеќер од грозје како најстар метод за добивање на алкохоли, а подоцна со технолошки развој и зголемената примена можат да се добијат со повеќе различни процеси, меѓу кои каталитичкиот процес за индустриско производство со хидратација на алкените и добивање во лабораториски услови со нуклеофилна супституција и други методи.

Општата формула на алкохолите е R-OH или Ar-CH₃-OH каде што било кој алифатичен радикал е прикачен на хидроксилна група или ароматично соединение каде што хидроксилната група не е директно поврзана со ароматичниот прстен, туку со страничниот радикал.

Хидроксилната група (-OH) е функционална група на алкохоли и феноли. Номенклатурата на алкохолите според IUPAC се формира од името (основата) на јагледородот со додавање на наставката -ОЛ или според тривијални имиња како гликол, етанол, глицерол итн.

Честопати алкохолите се именуваат со користење на името на радикалот во нивната структура и посебно зборот „алкохол“. Во употреба се и тривијални имиња.

Поради нивната голема разновидност и својства, алкохолите се голема и многу важна група на соединенија. Најпознати и најважни претставници од алкохолот се метанол, етанол, гликол и глицерол.

Name of alcohol	Methanol (Methyl alcohol)	Ethanol (Ethyl alcohol)	Propanol (Propyl alcohol)	Butanol (Butyl alcohol)	Ethane-1,2-diol (Glycol)	Propane-1,2,3-triol (Glycerol)	Benzyl Alcohol
molecular formulas	CH₄O	C₂H₆O	C₃H₈O	C₄H₁₀O	C₂H₆O₂	C₃H₈O₃	C₇H₈O

При именувањето на алкохолите, се означува најдолгата јаглеродородна низа и секогаш се нумерира од страната каде што групата -ОН има помала вредност, а во претставката се запишуваат супституентите. Доколку има различни супституенти во алкохолот, тие се именувани по азбучен ред.

- Алкохолите не можат да имаат две -ОН групи на ист јаглероден атом, но може да има повеќе од една -ОН група на секој С атом од јаглеродородната низа, а потоа се додава наставката диол, триол итн.
- **Пример** CH₂(ОН)- CH₂(ОН) етан-1,2-диол или (гликол); CH₂(ОН)-CH(ОН)-CH₂(ОН) пропан-1,2,3-триол (глицерол)...
- Алкохолите можат да бидат заситени и незаситени; алифатични и ароматични

4.2. Исходи од изучувањето на наставната единица






Во ова поглавје учениците ќе учат

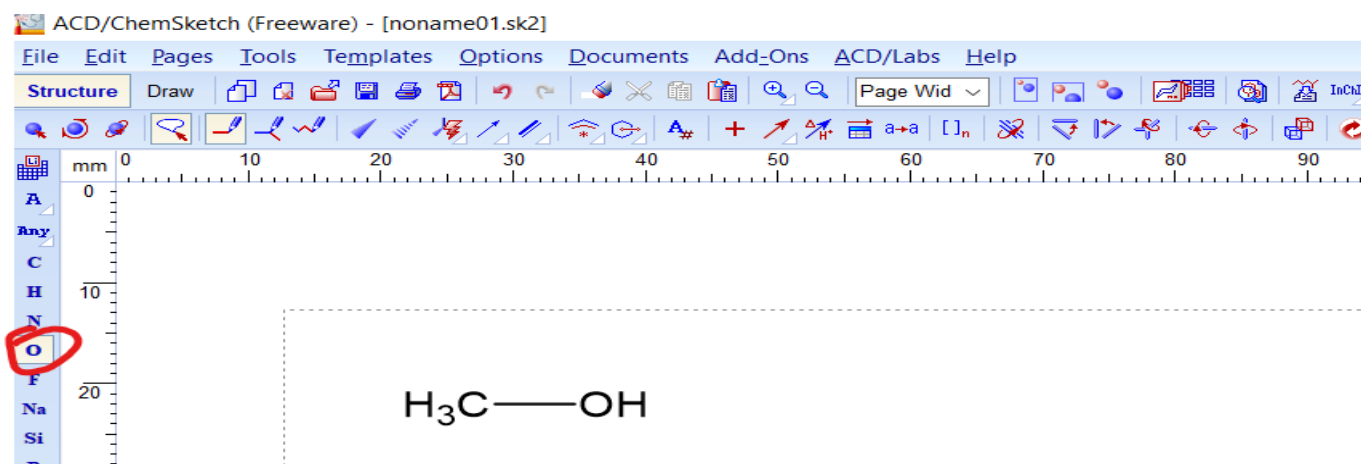
- Користење на софтверот *ChemSketch* за цртање различни примери на алкохоли прикажани преку молекулски, структурни, рационални и стерео формули
- Користење на опцијата на *ChemSketch* за именување на алкохоли по *IUPAC* номенклатура и тривијални имиња
- Користење на опцијата *ChemSketch* за одредување на молекулска формула од претходно презентираниите молекули на алкохоли
- Да се нацртаат структурни изомери на алкохоли во програмата *ChemSketch*
- Да ги ротира и движи молекулите на извлечените алкохоли во две или три димензии
- Да се прикажат молекулите на алкохол во 3D приказ

4.3. Инструкции за користење на софтверот ChemSketch за избраното поглавје

Цртање различни типови на алкохоли:

Пример 1. Цртање на монохидрокслини, дихидроксилни и трихидроксилни алкохоли користејќи ја алатката *Нацртајте Нормално*.

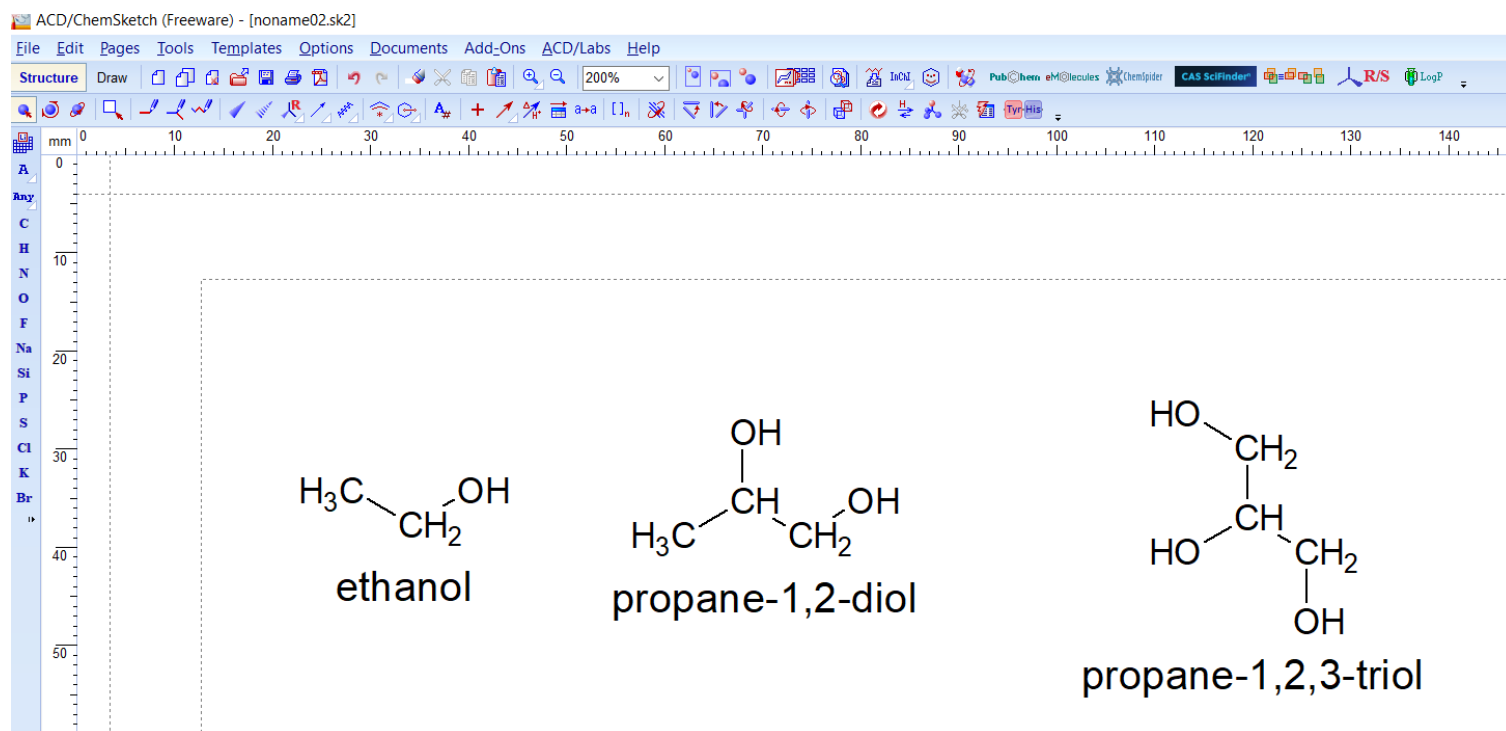
ЧЕКОР 1 Цртањето на монохидрокслини, дихидроксилни и трихидроксилни алкохоли се остварува преку користење на копчето  (*Јаглероден клуч*) од лентата со атоми. Потоа за да се започне со цртање потребно е да се кликне на работната површина при што се појавува CH_4 . Со лев клик од глумчето се притиска на CH_4 и се влече надесно со што ќе се појави следниот член од низата $\text{CH}_3 - \text{CH}_3$. За да добиеме алкохол, потребна ни е $-\text{OH}$ група која се додава преку копчето  (*Охуген*) од лентата со атоми на елементи. На истиот начин како во предходната постапка повторно со лев клик од глумчето се притиска на CH_3 и се влечи надесно при што се додава $-\text{OH}$ група. (Слика 1) За да ја нацртате правилната структура на алкохолот се притиска на копчето , а потоа означете ја целата структура со кликување на иконата  и влечете околу целата структура. Потоа кликнете на *Алатки*, а потоа изберете ја опцијата „чиста структура“ 



(Слика 1) структура на метанол (метил алкохол)



ЧЕКОР 2

Нацртајте ги структурите на молекулите на етанол, пропан-1,2-диол и пропан-1,2,3-триол како што е опишано во ЧЕКОР 1. Во секоја структура, потребно е да се прикажат сите јаглеродни атоми (*Алатки* → *Својства на структурата* → изберете *Изберете ги сите* → *Примени во делот Прикажи јаглерод*) и да се користи опцијата *Чиста структура* Конечно, генерирајте ги имињата на сите три нацртани структури на молекули со избирање *Алатки* и потоа *Генерирајте име за структурата*. Ако ги извршивте сите дејства правилно, треба да ги добиете структурите на молекулите и нивните поврзани имиња прикажани на (Слика 2)

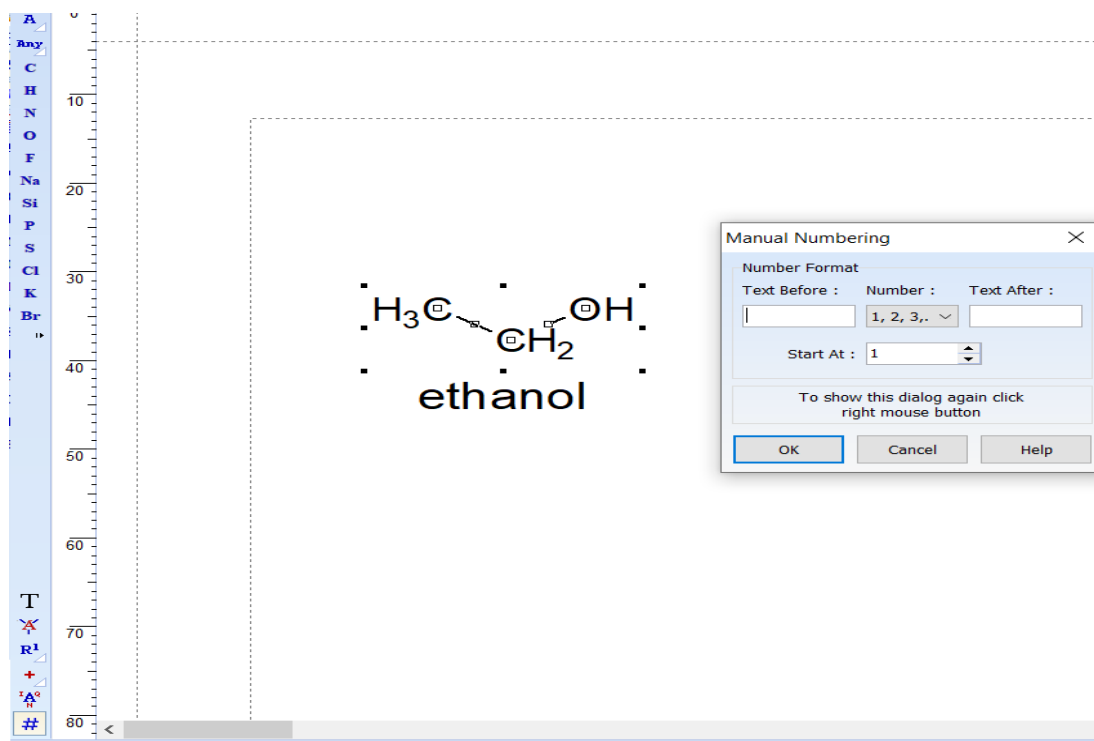


Слика 2. Структури на молекули на етанол, пропан-1,2-диол и пропан-1,2,3-триол и нивните имиња.

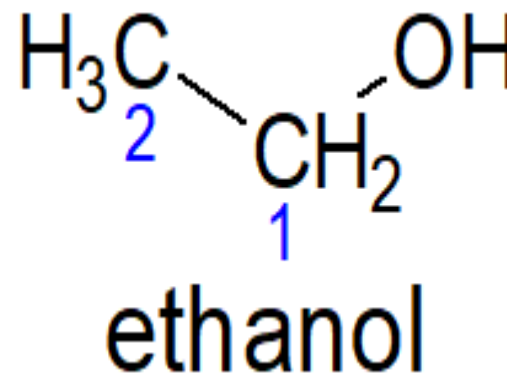
ЧЕКОР 3

За нумерирање на јаглеродните атоми во јаглеводородната низа, потребно е да се истакне целата структура на алкохолот  и потоа да се избере иконата  (*Рачно нумерирање*) (слика 3а) за да се отвори прозорецот *Рачно нумерирање* и да се избере ОК. Со кликување на соодветниот јаглероден атом се појавува бројот 1, а со кликување на вториот јаглероден атом се појавува бројот 2.

Забелешка: Нумерирањето на јаглеводородната низа започнува од јаглеродниот атом најблиску до хидроксилната група! (Слика 3б).



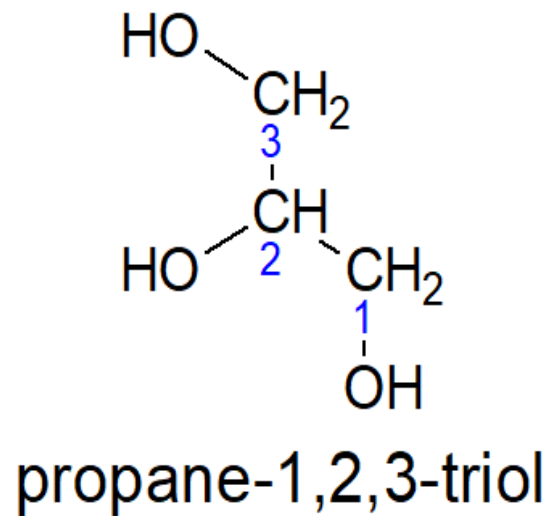
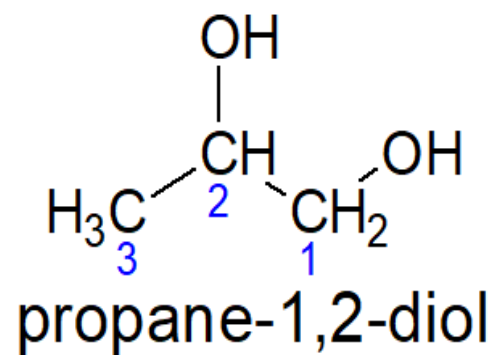
а)



б)

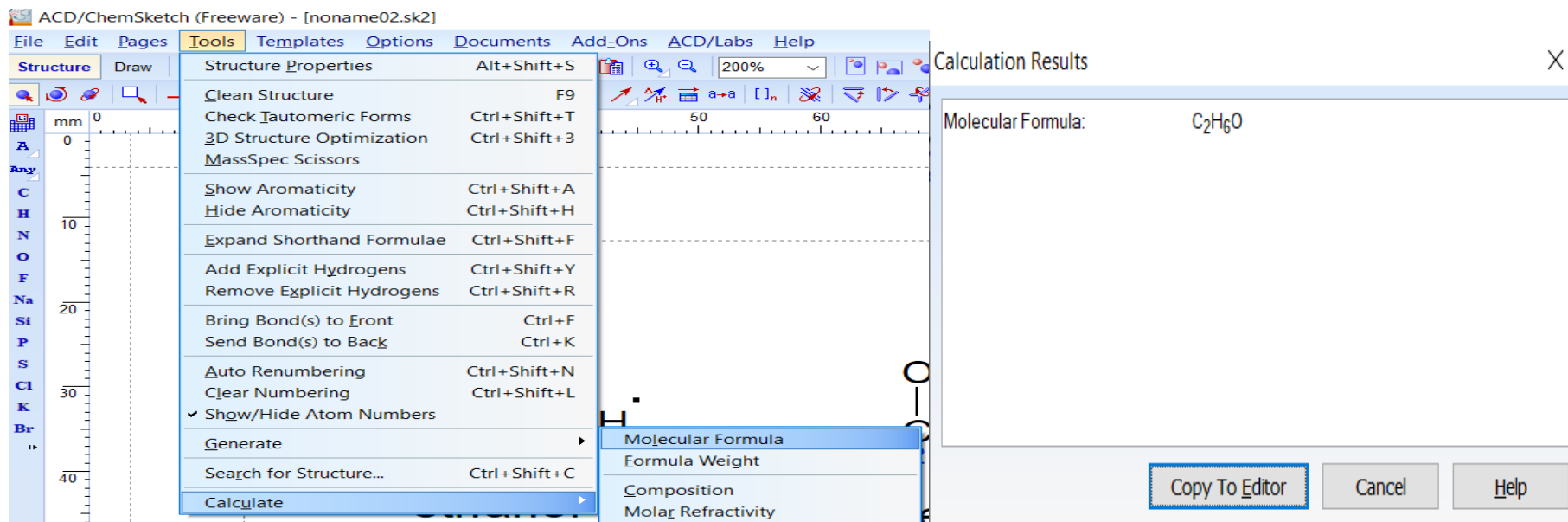
Слика 3. а) Постапка за нумерирање на јаглеродни атоми во етанол
б) Нумерирани јаглеродни атоми во структурата на молекулата на етанол

ЧЕКОР 4 Повторете ја постапката опишана во ЧЕКОР 3 користејќи ги примерите на структурите на молекулите на пропан-1,2-диол и пропан-1,2,3-триол (Слика 4).



Слика 4. Нумерирање на јаглеродни атоми во структурите на молекулите на пропан-1,2-диол и пропан-1,2,3-триол


ЧЕКОР 5. Молекулската формула на нацртаните структури се одредува со избирање *Алатки*, потоа *Пресметај* и *Молекулска формула*. Се појавува прозорецот *Резултати од пресметката* со молекулската формула на избраната структура на молекулата (Слика 5а и 5б). За да може молекулската формула да се појави на работниот простор (Слика 6), потребно е да се избере *Копирај во уредник*.



а)

б)


Слика 5. а) Низа на дејства за прикажување на молекулската формула на етанолот б) прозорец со молекулската формула на етанол

Обидете се да ја користите секоја од опциите за ротирање, преместување и избирање на горната лента со алатки: ), а потоа прикажете ја молекулата на секој од начините што ги нуди програмата, а опциите се прикажани и на лентата со алатки:

().

Со кликување на која било од опциите се менува начинот на кој се прикажува молекулата на пропан-1,2-диол. За автоматска ротација на

молекулата, кликнете на иконата . За автоматско континуирано менување од еден во друг режим на прикажување на молекула со ротација,

кликнете на иконата .

4.4. Пример: задача за обработка на наставна содржина

1) Напишете ја формулата на хексан-2-ол алкохол. Откако ќе се нацрта, направете ги следните чекори:


- Да се прикажат сите делови од низата, користејќи соодветна процедура, а не само првиот и последниот член;
- Да се изврши нумерирање на низата (додека треба да се внимава од која страна започнува нумерирањето);
- Именувајте го алкохолот;
- Да се определи неговата молекуларна формула;
- Да се направи 3D приказ.

- Користејќи ги вештините научени во *ChemSketch*, додадете друга хидроксилна група на третиот јаглероден атом во структурата на хексан-2-ол.

Наведете ја структурата.

- Додадете двојна врска помеѓу третиот и четвртиот јаглеродни атоми во структурата на алкохол на хексан-2-ол. Именувајте ја структурата.

2) Истражете ја онлајн примената на (метанол) метил алкохол во секојдневниот живот. Нацртајте ја молекулата на метанол во програмата *ChemSketch*. Запишете ја во вашата тетратка и компјутер примената на молекулата, нејзините позитивни и негативни својства во секојдневниот живот.

Нацртајте 3D приказ на метанол (метил алкохол) во програмата *ChemSketch* користејќи ги следните алатки . Зачувајте ја оптимизираната 2D и 3D структура на овие молекули на вашиот компјутер.

4.5. Пример: задача за оценување на учениците

Напишете ја формулата на хексан-2-ол алкохол, хекс-5-ен-3-ол. Откако ќе се нацрта, направете ги следните чекори:

- Да се прикажат сите делови од низата, користејќи соодветна процедура, а не само првиот и последниот член;
- Да се изврши нумерирање на низата (додека треба да се внимава од која страна започнува нумерирањето);
- Именувајте го алкохолот;
- Да се определи неговата молекуларна формула
- Да се направи 3D приказ.

ЛИТЕРАТУРА:

ACD/ChemSketch, верзија 11.0 за Microsoft Windows, упатство за цртање хемиски структури и графички слики

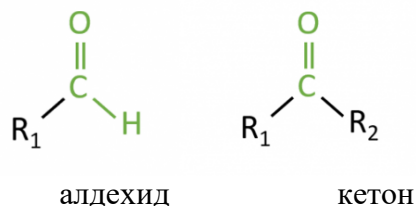
ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM
АЛДЕХИДИ И КЕТОНИ

1.) ЕЛАБОРАЦИЈА НА ТЕМАТА

Наставна единица: Органски кислородни соединенија
Наслов на тема: Алдехиди и кетони
Предвиден број на часови: 2

1.1. Теоретски вовед

Алдехидите и кетоните се органски соединенија кои имаат карбонилна функционална група (C=O). Доколку карбонилната група се наоѓа на примарен јаглероден атом т.е.на крајот или почетокот на јаглеводородната низа, соединението е алдехид, а ако се наоѓа на секундарен јаглероден атом во јаглеводородната низа тоа е кетон.



Атомот на кислород во карбонилната група е многу поелектронегативен од јаглеродниот атом. Затоа карбонилната група е поларна по природа.

Според *IUPAC* интернационалниот систем за номенклатура алдехидите имаат наставка **-al**, која се додава на основата од името на јаглеводородот, а кај кетоните наставката **-on**

При нумерирање на најдолгата јаглевородната низа положбата на карбонилната група се запишува со најмала целобројна вредност. При оксидацијата на примарните алкохоли се добива алдехиди, а при оксидацијата на секундарните алкохоли се добива кетони.

Алдехидите може лесно се оксидираат до карбоксилни киселини, кетоните се многу отпорни на оксидација.

Слабите оксидирачки реагенси Fehling-ов и Tollen-ов реагенс се користат за докажување на алдехиди и кетони.

Алдехидите и кетоните се користат во хемиската индустрија како растворувачи, почетни материјали или реагенси за други соединенија. Во природата, алдехидите и кетоните често се комбинираат со други функционални групи, како во ванилин, хормони или јаглехидрати. Тие често се користат како есенцијални масла.

1.2. Образовни резултати

- да цртаат различни примери на ациклични и циклични алдехиди и кетони
- да се прикаже структурата на алдехидите и кетоните со молекулски, структурни, рационални формули и цртички,
- да ги именуваат алдехидите и кетоните според номенклатурата на IUPAC или да го генерираат името во програмата *ChemSketch*,
- да се одреди молекуларната формула на претходно нацртаните алдехиди и кетони во програмата ChemSketch
- да се прикажат 3D модели на алдехид и кетонски молекули нацртани во 2D со помош на *ChemSketch* и да се ротираат
- да се подобри приказот на структурата на алдехидите и кетоните користејќи ја функцијата *Чиста структура*,
- да се зачува дводимензионалната и тродимензионалната структура на алдехидите и кетоните во компјутерот,
- да се подобрат дигиталните вештини со користење на веб-прелистувач за да се најдат други примери на алдехиди и кетони

1.3. Инструкции за користење на програмата ChemSketch

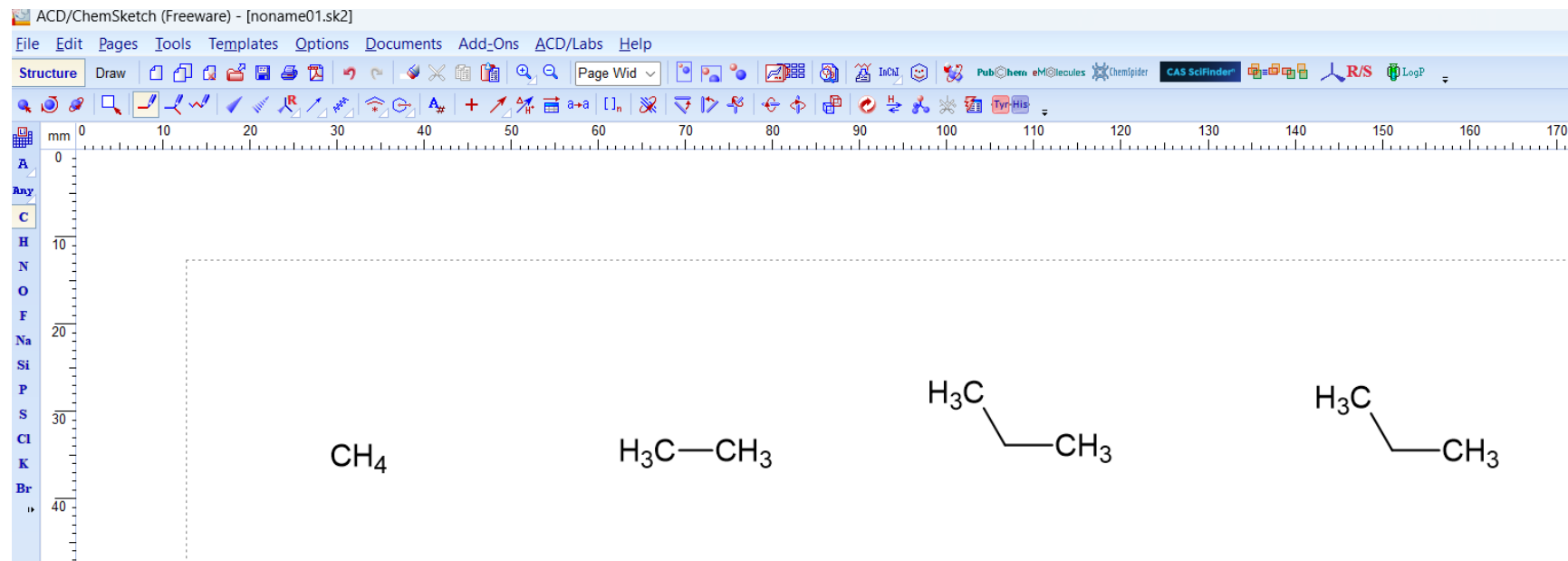
Пример 1

Метанал, етанал, пропанал, пропан-2-он

Нацртајте ги молекулите на метанал, етанал, пропанал и пропан-2-он за да ја видите разликата помеѓу алдехид и кетонска група C=O. Исчистете ја структурата и генерирајте имиња. Направете 3D оптимизација и креирајте 3D модели. Ротирајте ги.

ЧЕКОР 1

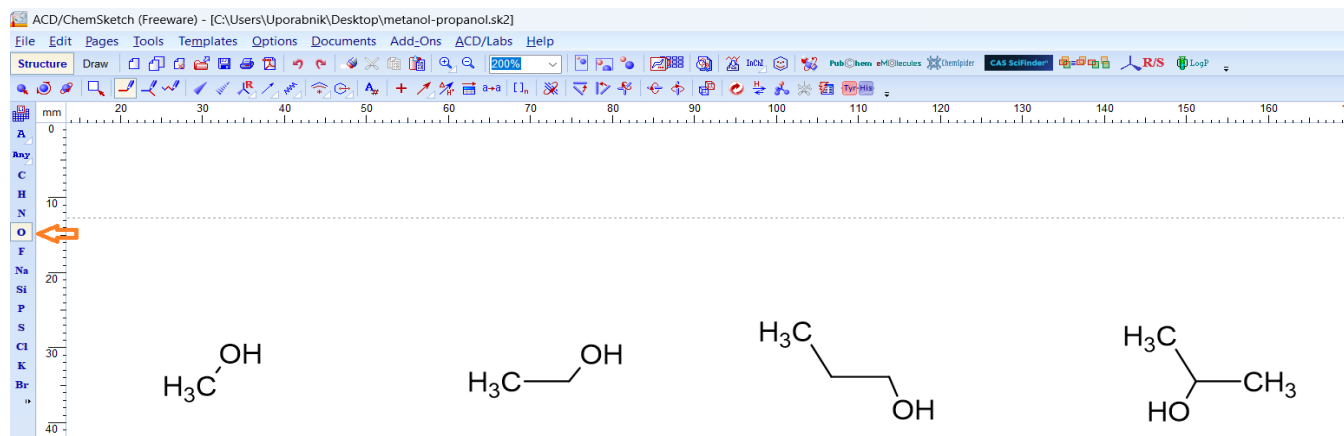
Нацртајте метан, етан и двапати молекул на пропан како што е прикажано на **Слика 1**. Користете *Режим структура* и опцијата *Нормално цртање*. Кликнете на празно место и ќе се појави CH₄. Со кликување на тој јаглероден атом се создава единечна врска јаглерод-јаглерод. Со држење на копчето Ctrl и кликување на секој следен јаглероден атом, може да се нацрта јаглеродородниот синцир од три јаглеродни атоми.



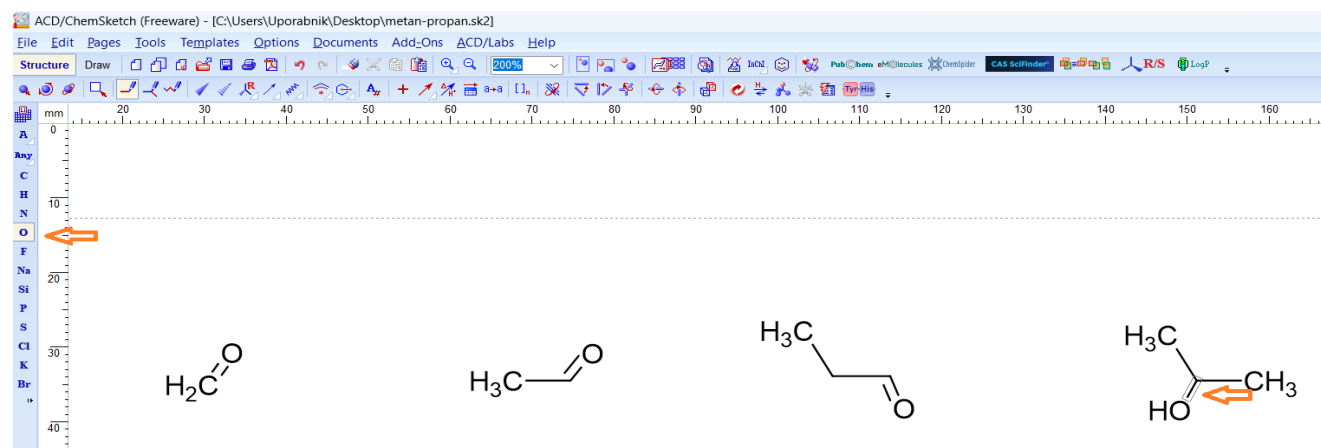
Слика 1. Структура на метан, етан, пропан

ЧЕКОР 2

Кликнете на О (кислород) на левата лента со *Алатки*. Кликнете на првиот атом С во метан, етан и првиот пропан и повлечете со глумчето. Ќе се појави ОН група (Слика 2а). Кликнете на вториот атом С во вториот молекул на пропан и повлечете со глумчето за да создадете -ОН група. Кликнете на врската С-ОН во секоја структура. Ќе се појави групата = С=О како што е прикажано на Слика 2б.



а



б

Слика 2. а) Создавање С-ОН врска, б) создавање С=О врска.

ЧЕКОР 3

Кликнете на атомот Н на левата лента со *Алатки*, кликнете на атомот С од групата С=О и повлечете со глумчето за да креирате СНО група во првите три структури (Слика 3).

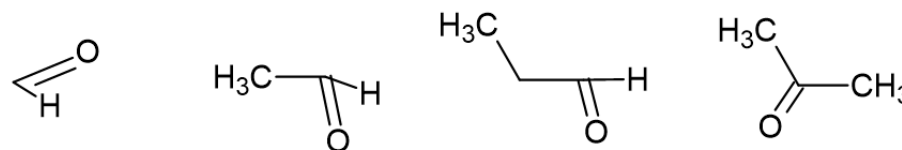
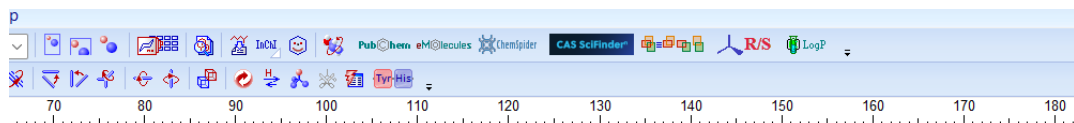
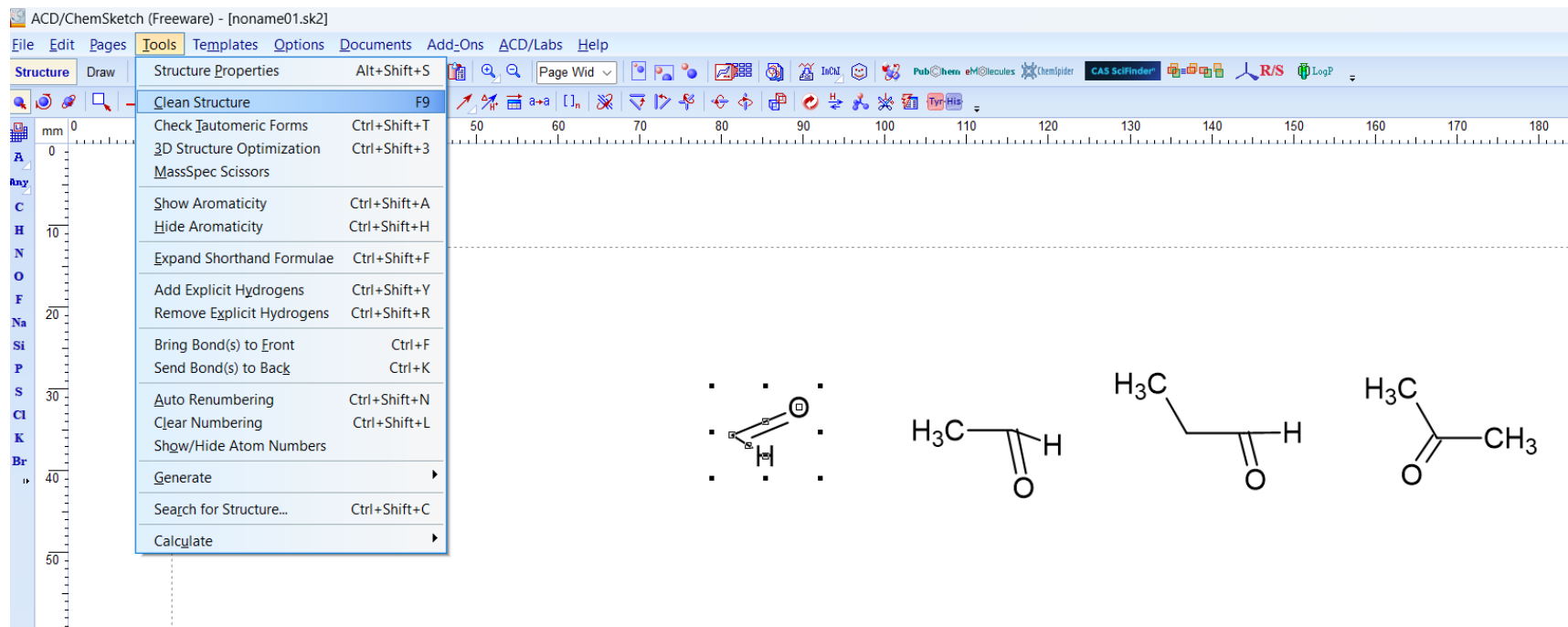


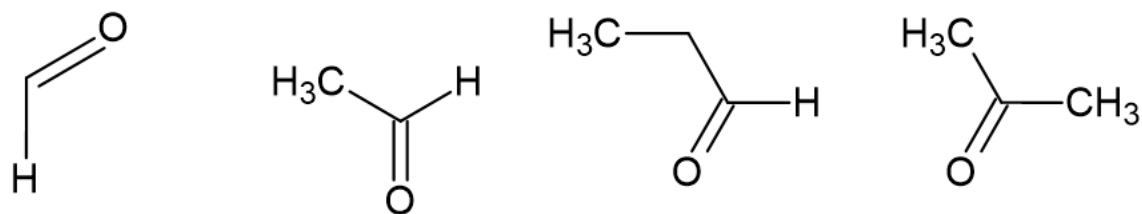
Figure 3. Креирање на група СНО.

ЧЕКОР 4

Изберете ја првата структура со *Ласо*, а потоа користете ја опцијата *Алатки* и изберете *Исчисти структура* (Слика 4а). Направете го истото со сите структури за да ги добиете структурите на Слика 4б.



a

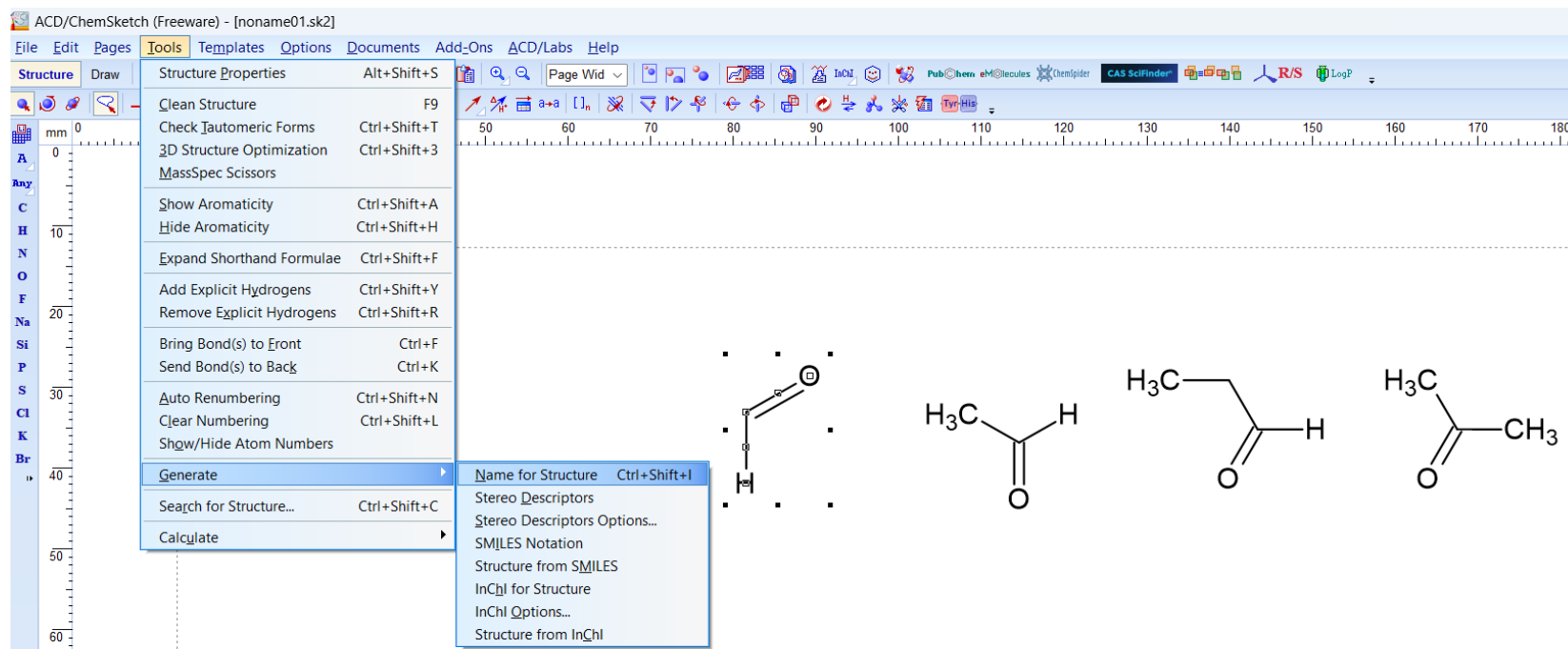


б

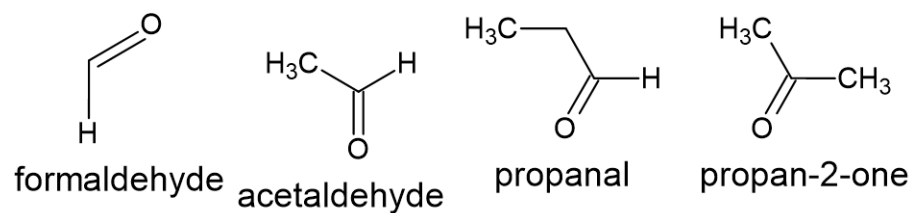
Слика 4. а) Конструкции за чистење, б) исчистени структури

ЧЕКОР 5

Користете ја алатката *Ласо* и изберете ја првата нацртана структура. Кликнете на менито *Алатки*, изберете *Генерирај* и потоа *Име за структура* како што е прикажано на **Слика 5а**. Направете го истото со сите структури за да ги добиете нивните имиња (**Слика 5б**).



a

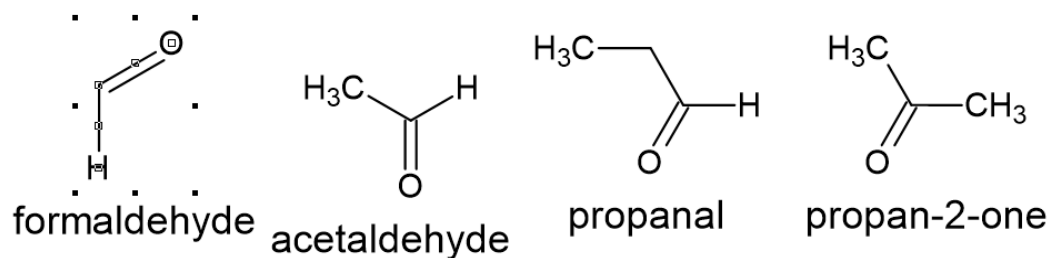
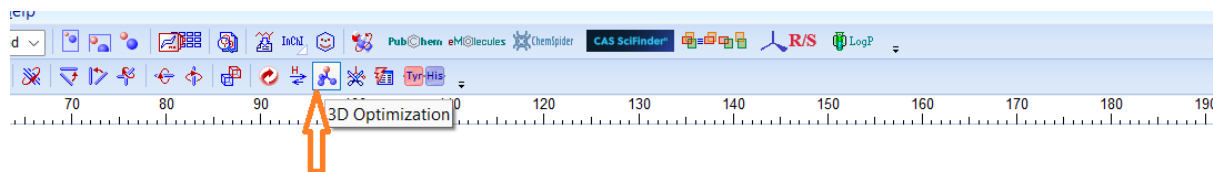


b

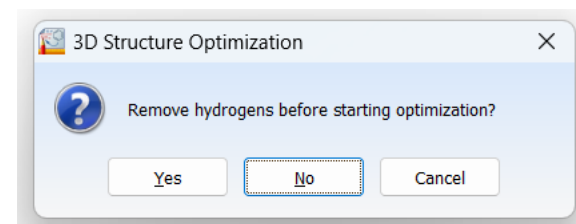
Слика 5. а) Именување на структури, б) Именувани структури

ЧЕКОР 6

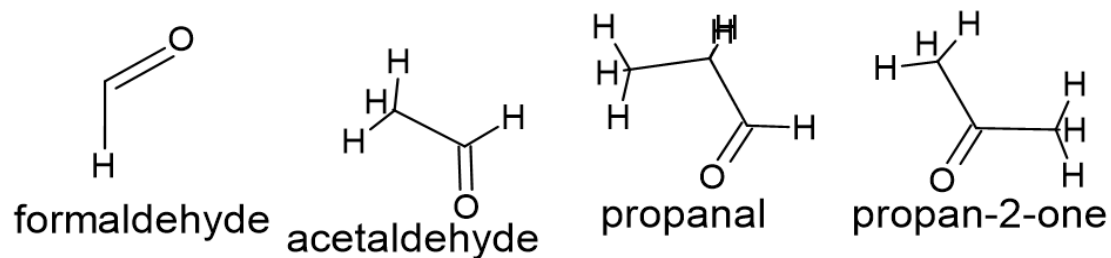
За 3D оптимизација изберете ја секоја од нацртаните структури и користете ја иконата за 3D оптимизација како што е прикажано на **Слика 6а**. Ке се појави прозорец како на **Слика 6б**. Изберете бр. **Слика 6в** покажува структури по 3D оптимизација.



a



б

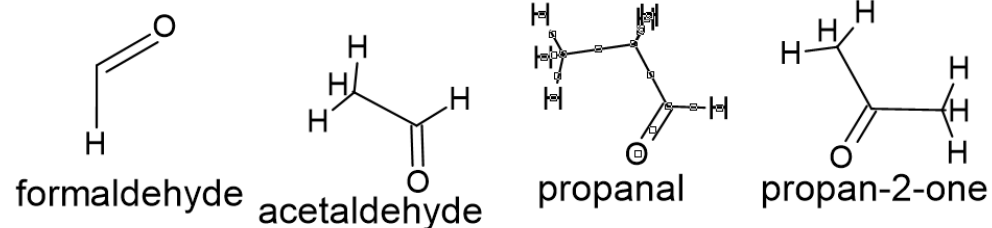
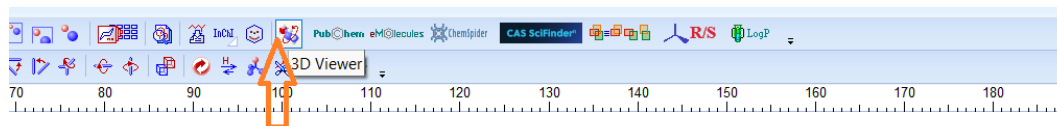


в

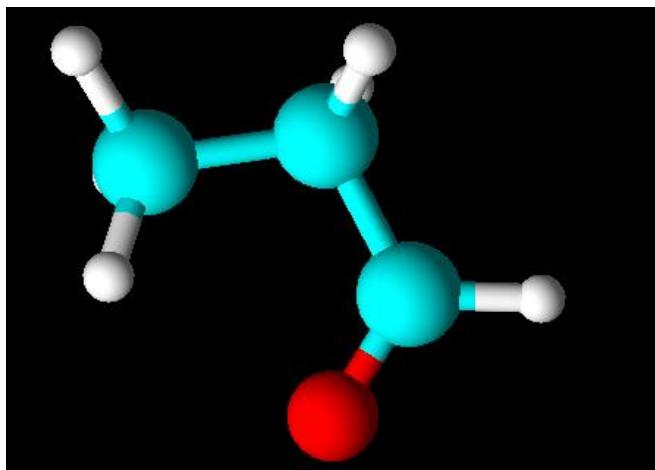
Слика 6. а) 3D оптимизација на избраната структура, б) појавениот прозорец, в) 3D оптимизирани структури на метанал, етанал, пропанал и пропан-2-он

ЧЕКОР 7

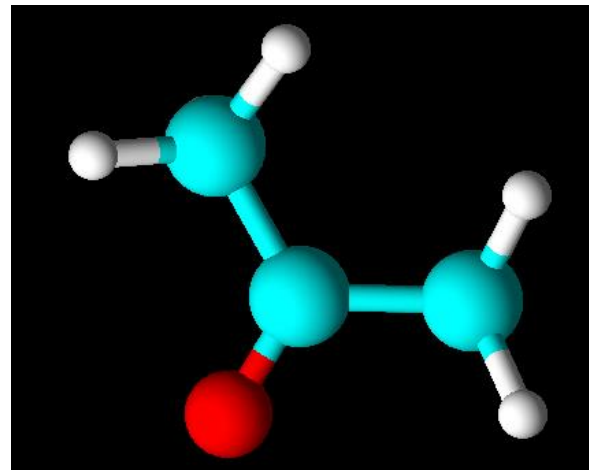
Изберете прво пропанал, а потоа пропан-2-он. Користете го копчето *3D Прегледувач* како што е прикажано на **Слика 7а**. Ке се појави нов прозорец со 3D приказ. Можете да ја ротираете структурата и да го промените нејзиниот изглед за да ја видите разликата помеѓу алдехидната и кетонската карбонилна група.



а



б



в

Слика 7. а) Креирање 3D модел, б) Модел на молекул на пропанал, в) Модел на молекул пропан-2-он.

ЧЕКОР 8

Зачувајте ги структурите и 3D моделите со кликување *Датотека* и потоа *Зачувај како*.

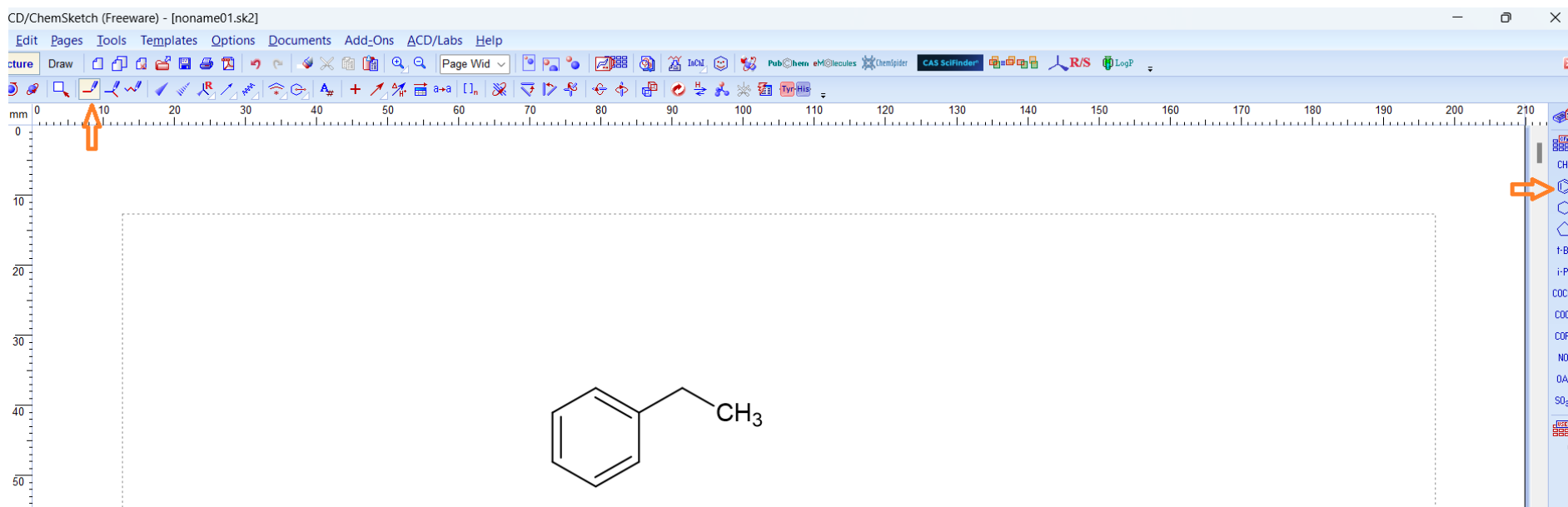
Пример 2

Нацртајте молекул на фенил етанал. Фенил етанал има мирис на јоргован и зумбул. Исчистете ја структурата, креирајте име на молекуларна формула и прикажете ја во три димензии.

ЧЕКОР 1


На десната страна на лентата со алатки (*Лента со алатки за Радикали*) кликнете на бензен и потоа кликнете на празно место. Ќе се појави структурата на бензенот. Кликнете на кој било јаглероден атом за да создадете група CH_3 , кликнете повторно за да создадете етил група, нацртаната структурата

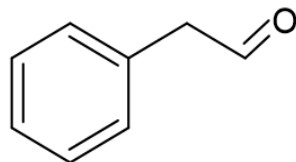
Слика 1.



Слика 1. Етилбензен.

ЧЕКОР 2

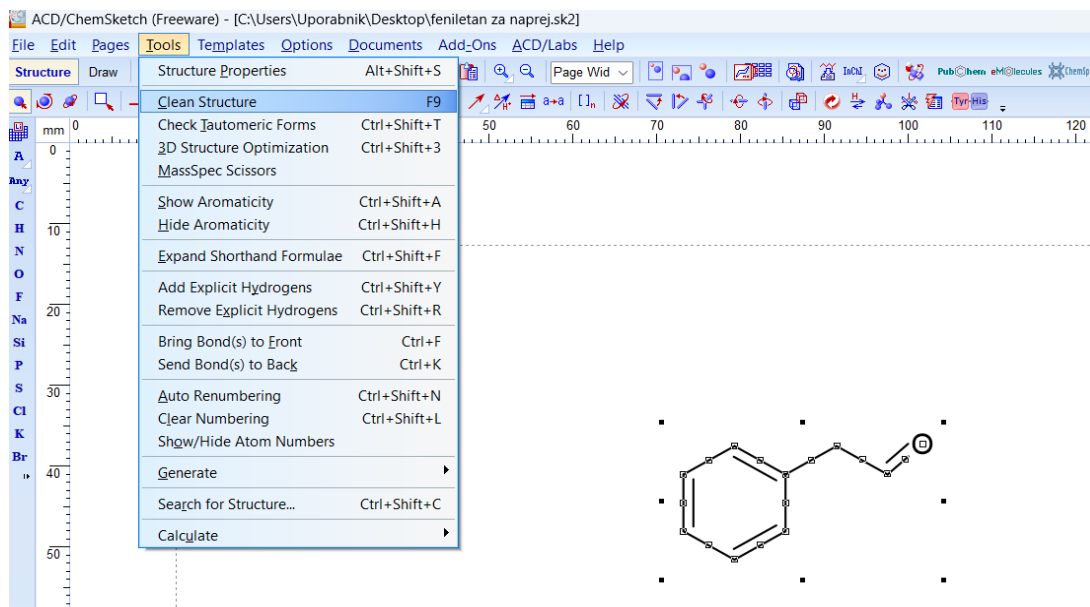
Изберете O на левата страна на алатникот. На лентата со алатки *Структура*, кликнете *Нормално цртање* () , а потоа кликнете на последниот јаглороден атом и додадете врска. Кликнете на врската C-OH за да ја добиете карбонилната група како на **Слика 2**.



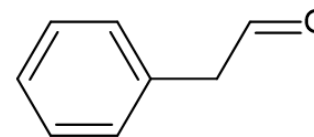
Слика 2. Создаден бензен со етил и карбонилна група.

ЧЕКОР 3

Изберете ја структурата со *Ласо* и потоа користете ја опцијата *Алатки* и изберете *Исчисти структура* како што е прикажано на **Слика 3а** за да добиете исчистена структура на **Слика 3б**.



а

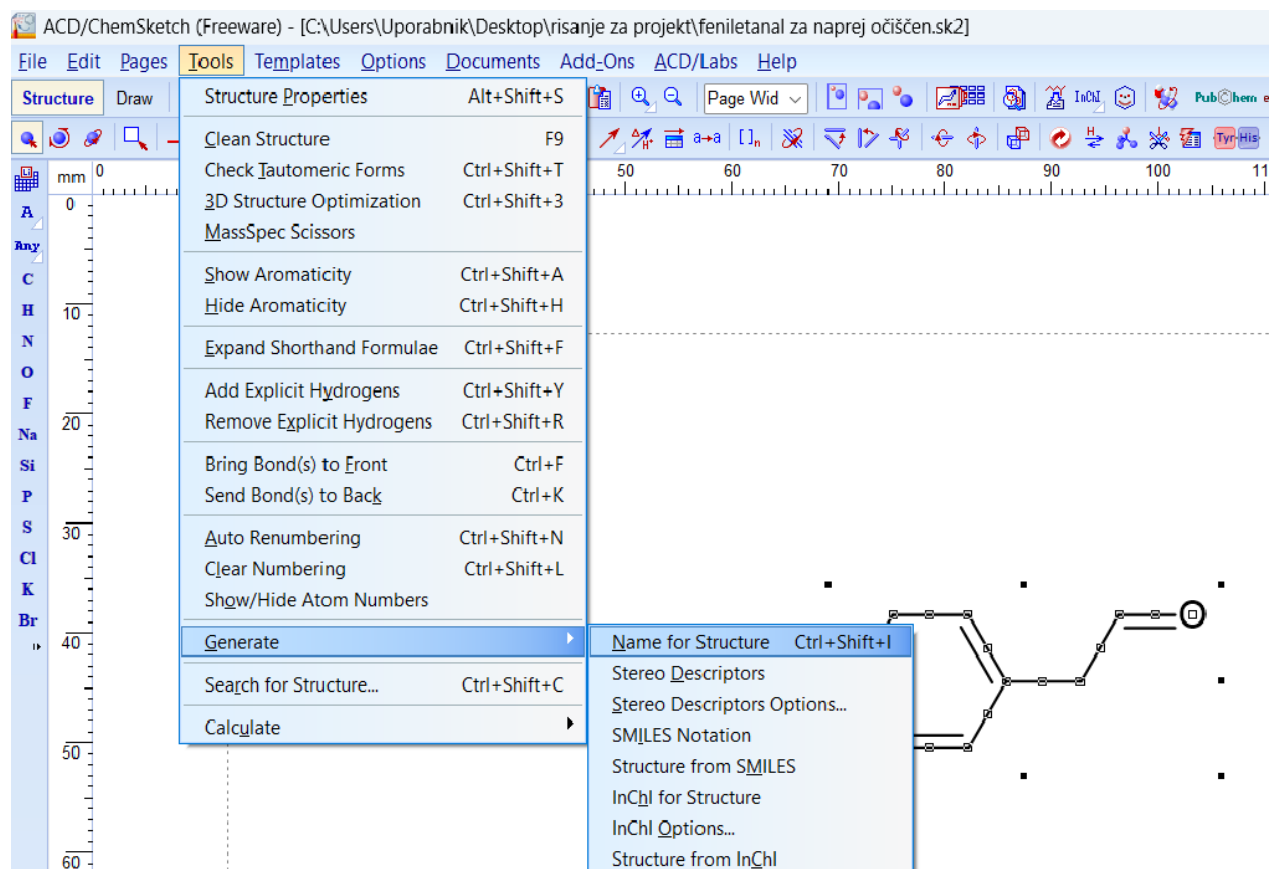


б

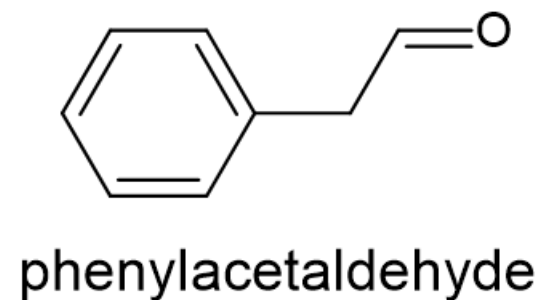
Слика 3. а) Структура за чистење, б) Исчистена структура.

ЧЕКОР 4

Користете ја алатката *Ласо* и изберете ја нацртаната структура. Кликнете на менито *Алатки*, изберете *Генерирај* и потоа *Име за структура* како што е прикажано на **Сликите 4а и 4б**.



а

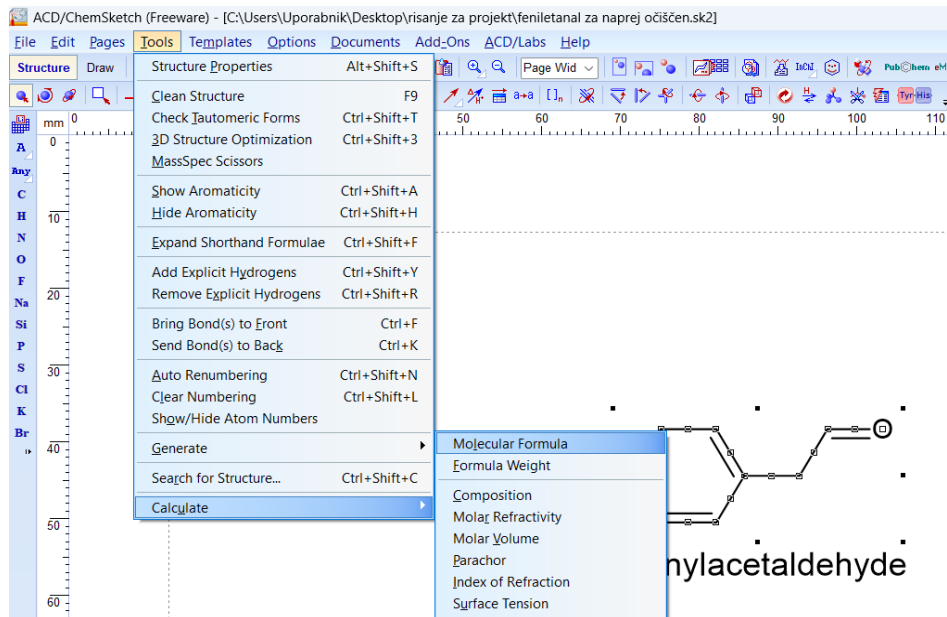


б

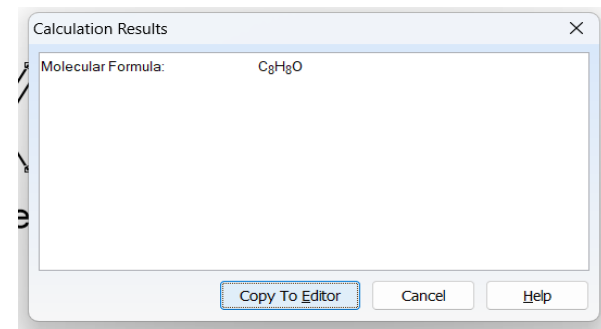
Слика 4. а) Креирање на име за нацртана структура, б) Нацртана и именувана структура.

ЧЕКОР 5

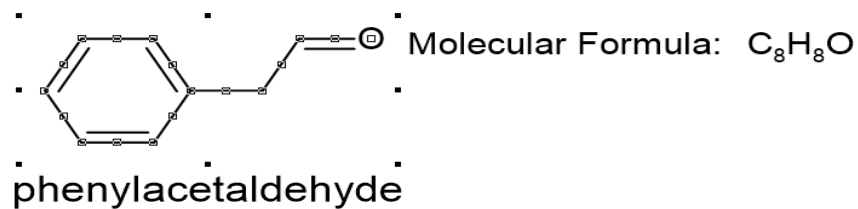
Користете ја алатката *Ласо* и изберете ја нацртаната структура. Кликнете на менито *Алатки*, изберете ја опцијата *Пресметај* и потоа кликнете на *Молекуларна формула* (Слика 5а). Ќе се појави нов прозорец со молекуларна формула. Изберете *Копирај во уредувач* (Слика 5б) за да ја добиете молекуларната формула како што е прикажано на Слика 5в.



a



б

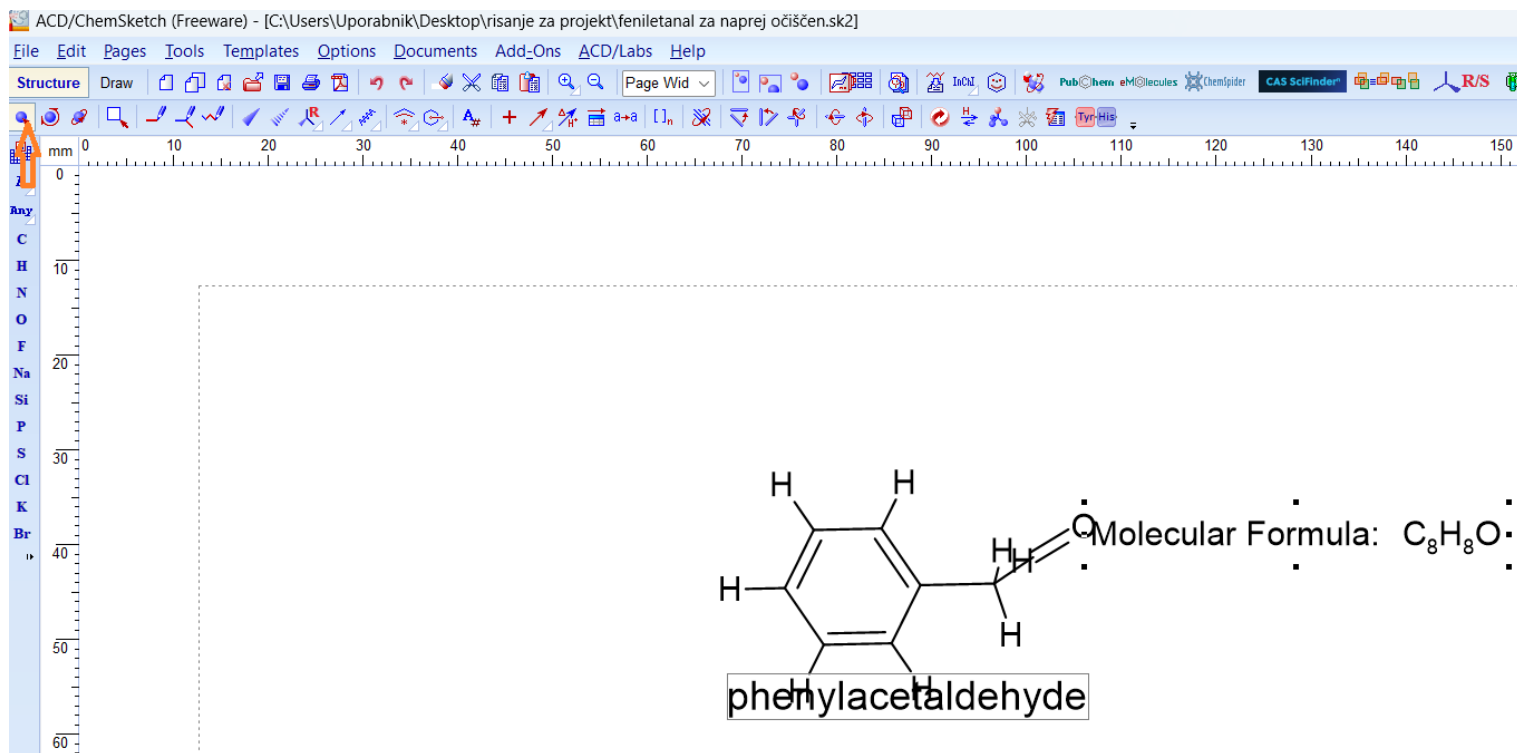


в

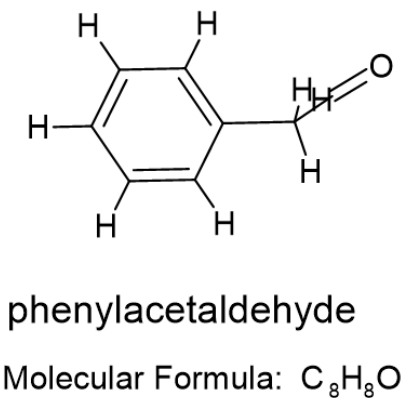
Слика 5. а) Создавање молекуларна формула, б) Прикажување молекуларна формула, в) Приказ на молекуларна формула

ЧЕКОР 6

За 3D оптимизација изберете ја нацртаната структура со алатката *Ласо* и потоа кликнете на иконата за 3D оптимизација како во Пример 1. За поместување име и молекуларна формула користете го копчето *Избери/Премести* и само поместете го просторот со името и формулата како што е прикажано на **Сликите 6а и 6б**.



а

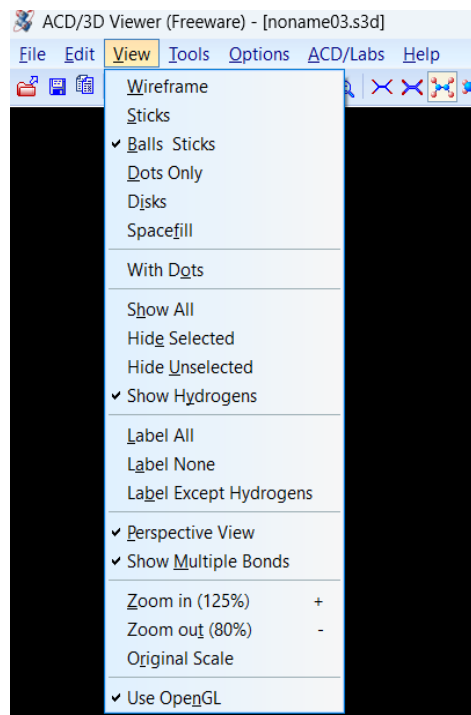


б

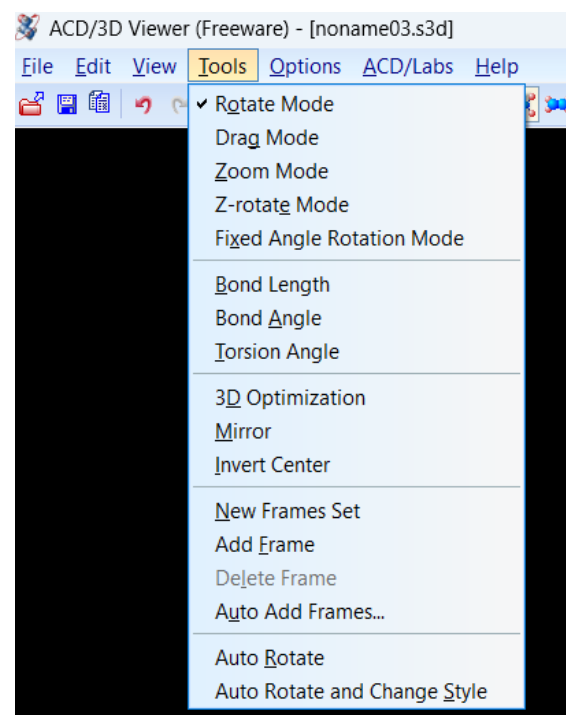
Слика 6. а) и б) Преместување на име и молекуларна формула од 3D оптимизирана формула.

ЧЕКОР 7

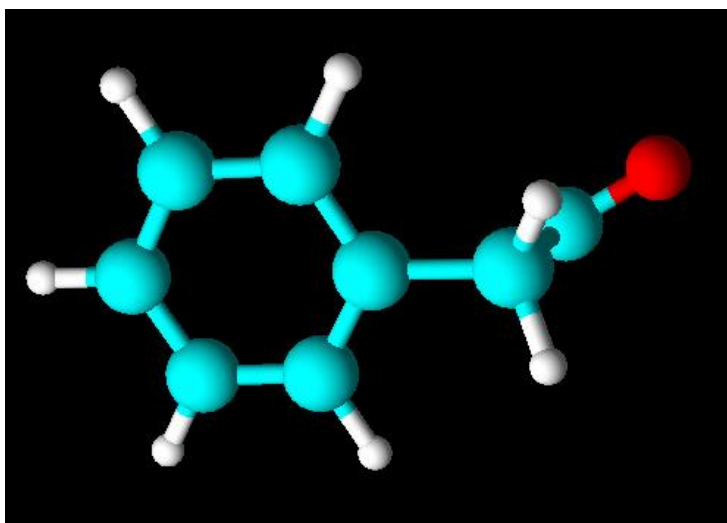
Префрлете ја структурата во *3D Прегледувач*. Ротирајте ја структурата и користете различни начини за прикажување на молекулот на фенил етанал. Некои од нив се прикажани на **Сликите 7а-7д**.



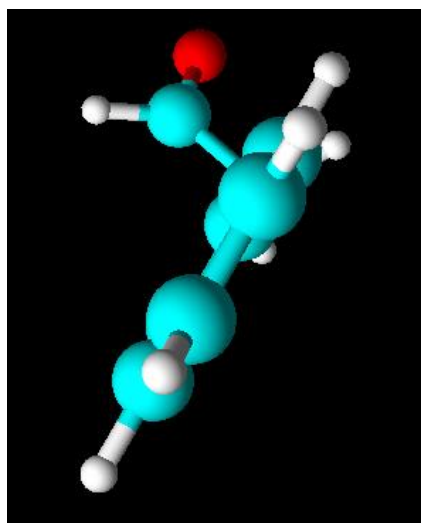
a



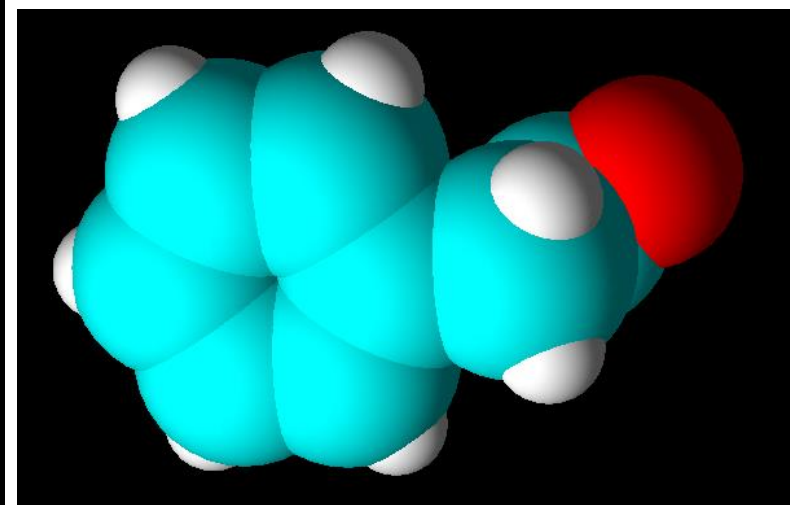
б



в



г



д

Слика 7. а-д) Различни начини на прикажување модели на фенил етанол.

ЧЕКОР 8

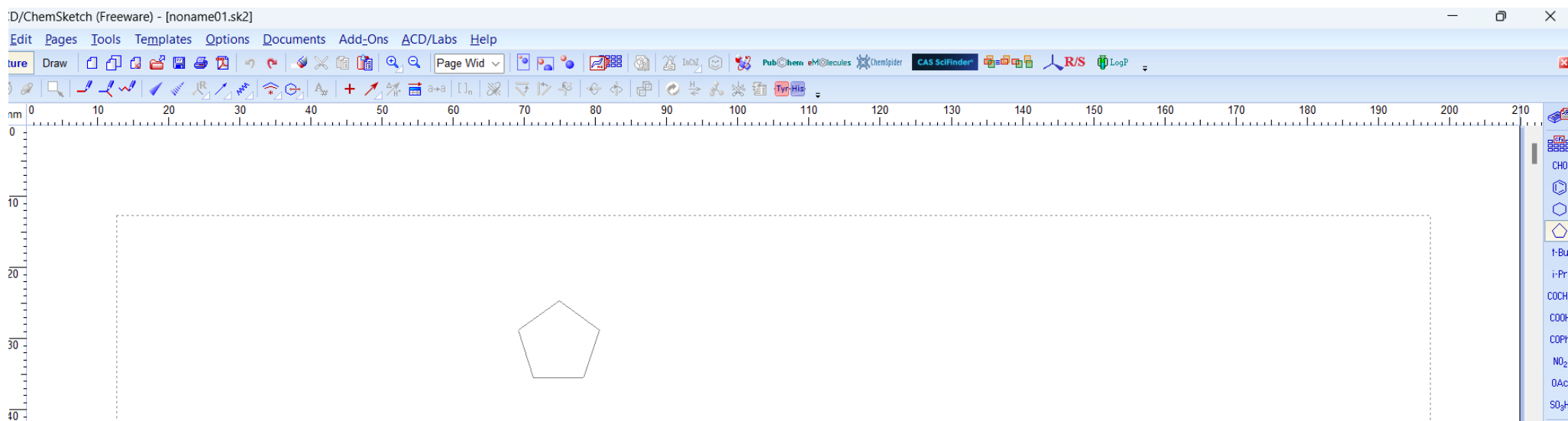
Зачувајте ги структурите и 3D моделите со кликување на *Датотека* и потоа *Зачувај како*.

Пример 3

Нацртај ја молекулата на циклопентан-1,3-дион. Прикажете го со скелетна и рационална формула.

ЧЕКОР 1

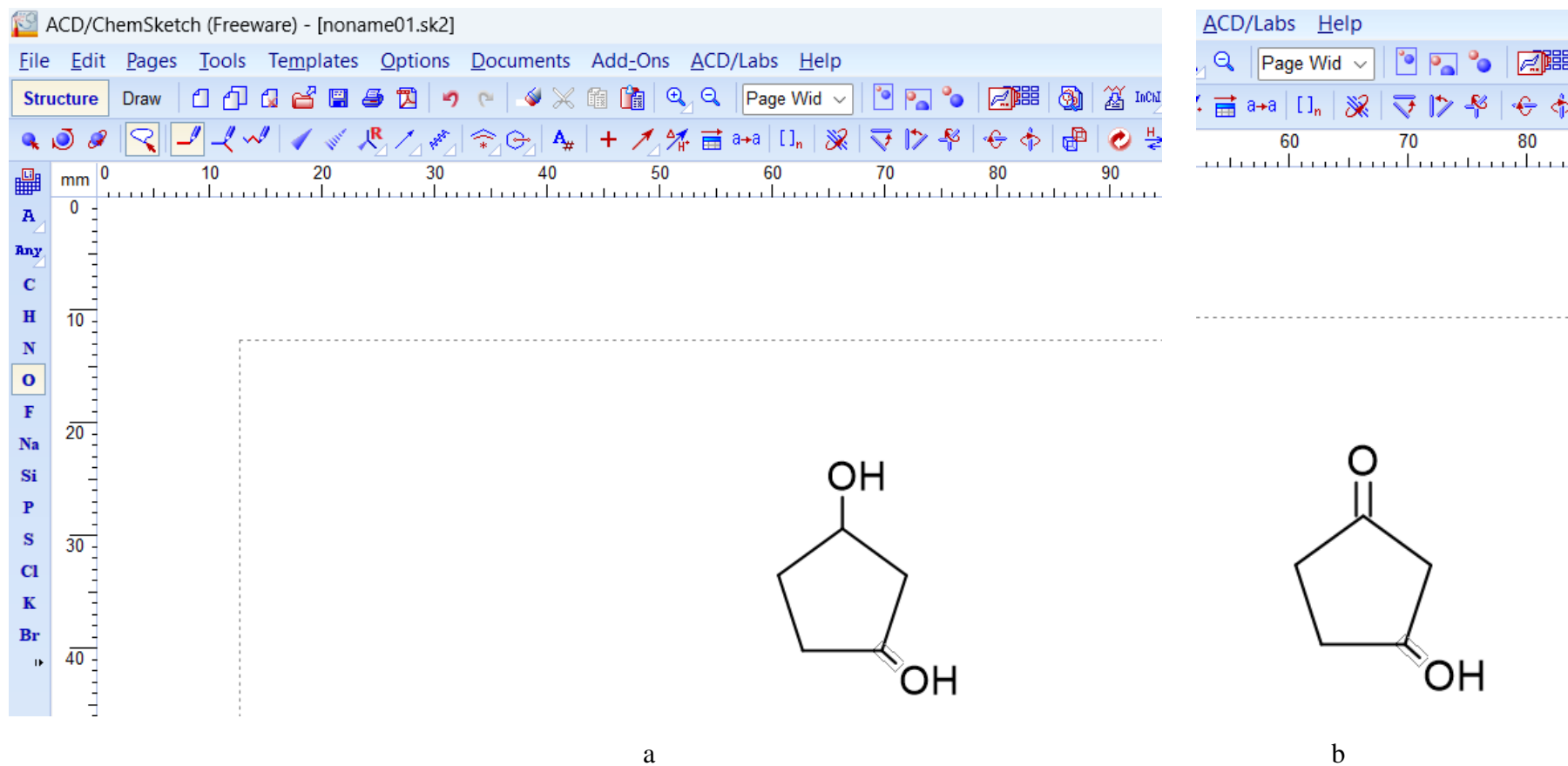
На десната страна на лентата со алатки (*Лента со алатки за радикали*) кликнете на циклопентан и потоа кликнете на празно место. Структурата на циклопентан ќе се појави како што е прикажано на **Слика 1**.



Слика 1: циклопентан

ЧЕКОР 2

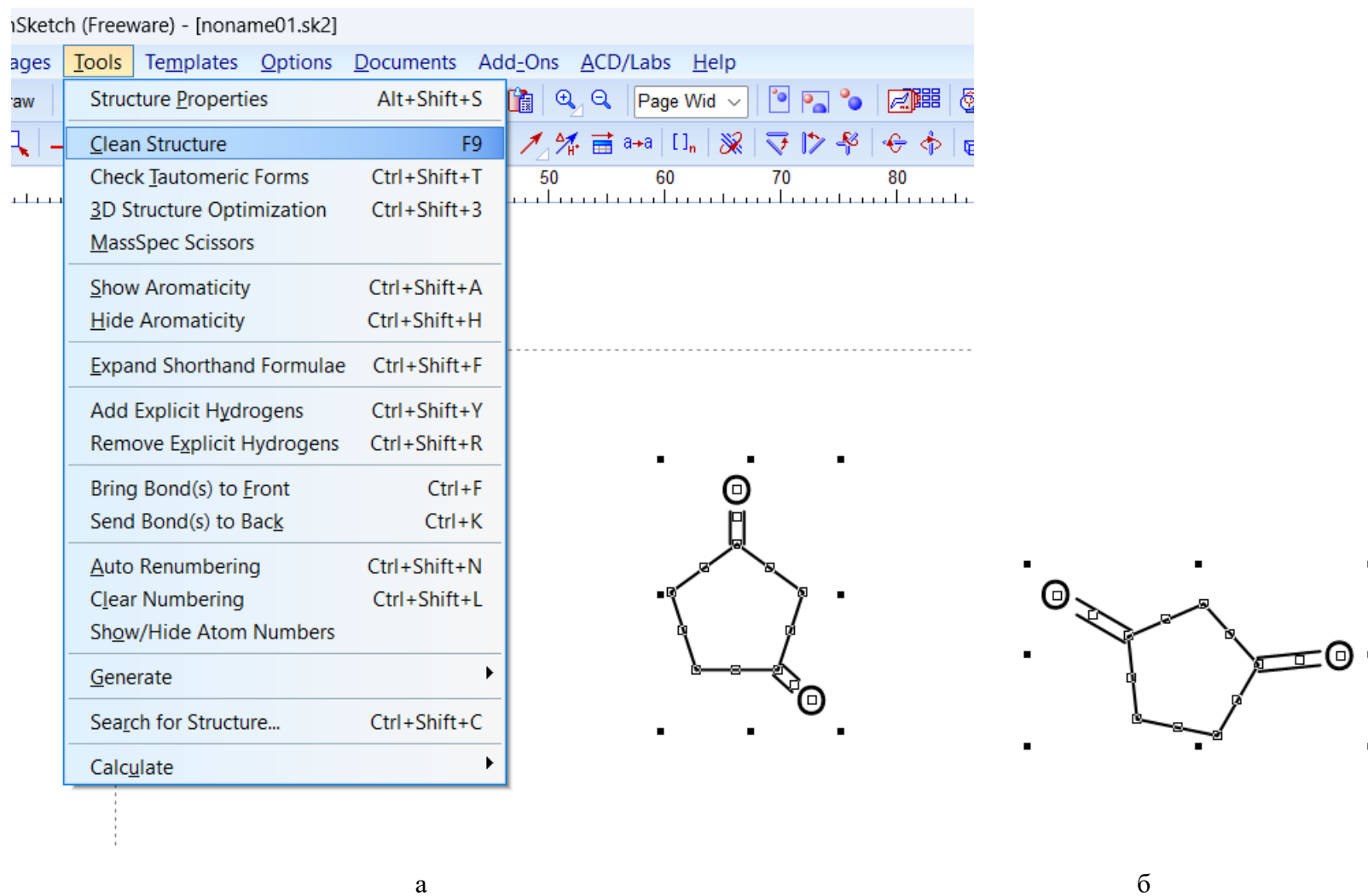
Изберете O на левата лента со алатки и создадете врска на кој било јаглероден атом и направете го истото на третиот јаглероден атом, користете глумче (Слика 2а). Кликнете на C-OH врските за да добиете карбонилна група (Слика 2б).



Слика 2. а) создавање на C-OH врска, б) создавање на C=O врска.

ЧЕКОР 3

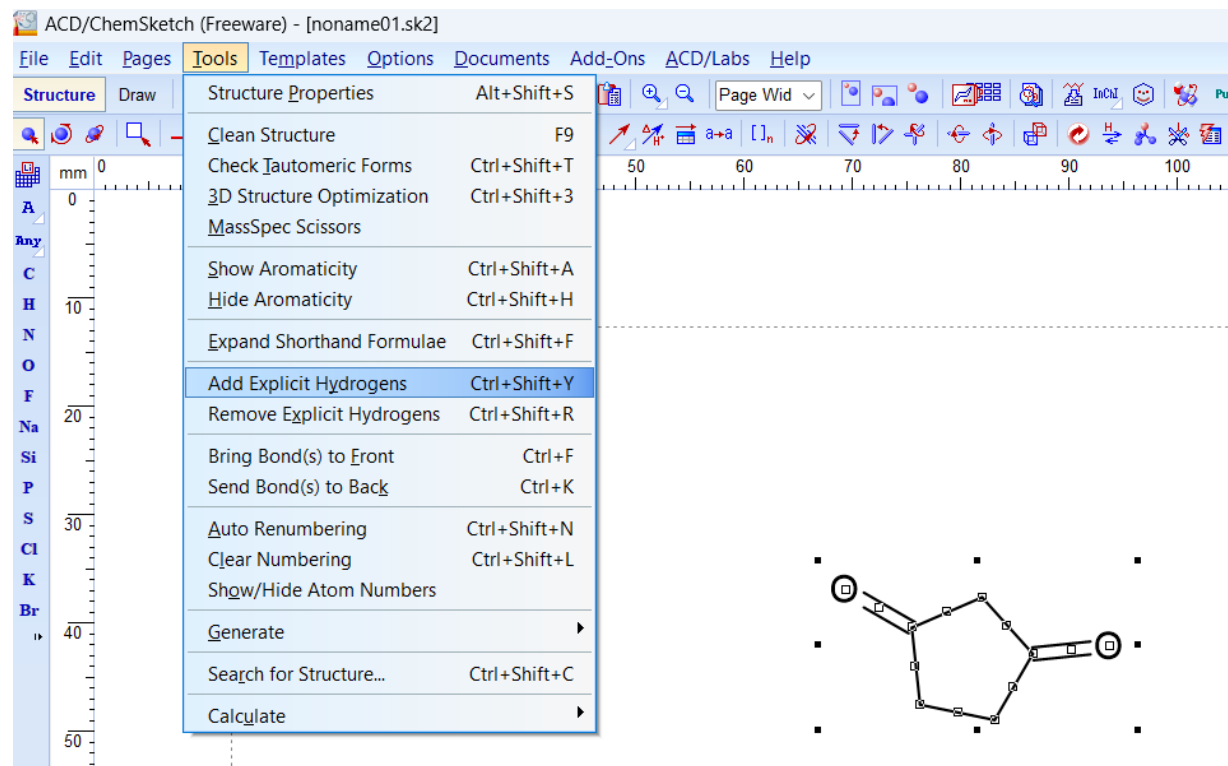
Исчистете ја структурата со избирање структура со алатката *Ласо* и кликување на опцијата *Алатки за чистење на структурата* (Слика 3а) или користејќи ја иконата *Исчисти структура*. Скелетната формула на циклопентан-1,3-дион ќе се појави како што е прикажано на Слика 3б.



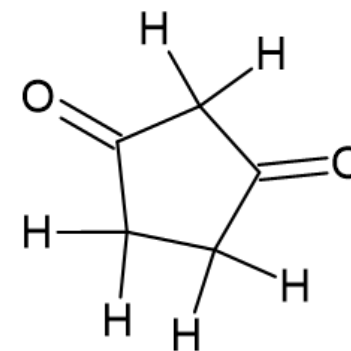
Слика 3. а) Структура за чистење на циклопентан-1,3-дион, б) чиста структура на циклопентан-1,3-дион.

ЧЕКОР 4

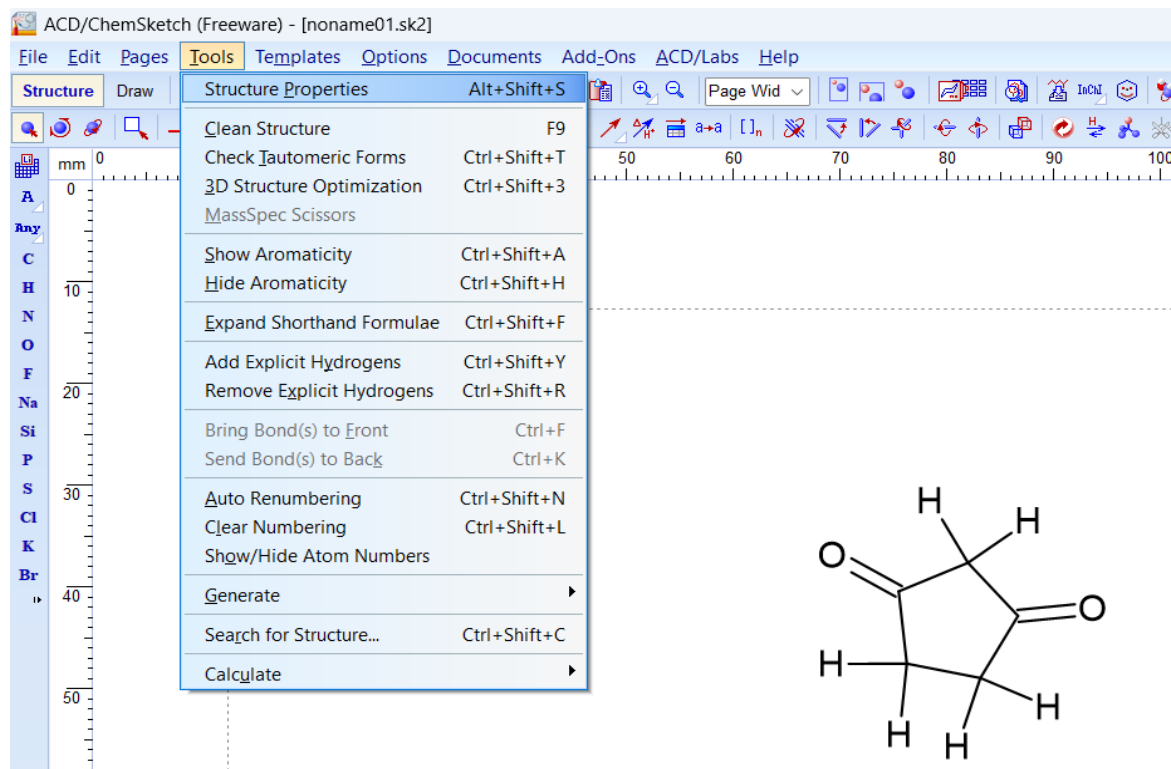
За да се прикаже нацртаната скелетна формула со структурна формула, кликнете на *Алатки* и изберете ја опцијата *Додај експлицитни хидрогени* (Слики 4а и 4б). Изберете ја структурата со *Ласо*, кликнете на *Алатки* и потоа *Својства на структура* (Слика 4в). Ке се појави нов прозорец. Штиклирајте *Сите* во делот *Покажи јаглерод* потоа кликнете *Примени* како што е прикажано на **Слика 4г** за да ја добиете структурната формула (Слика 4д).



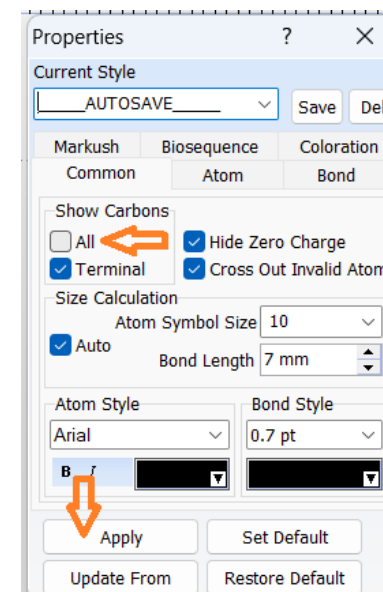
а



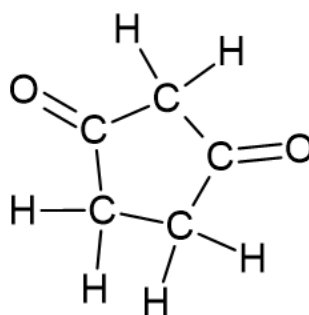
б



В



Г

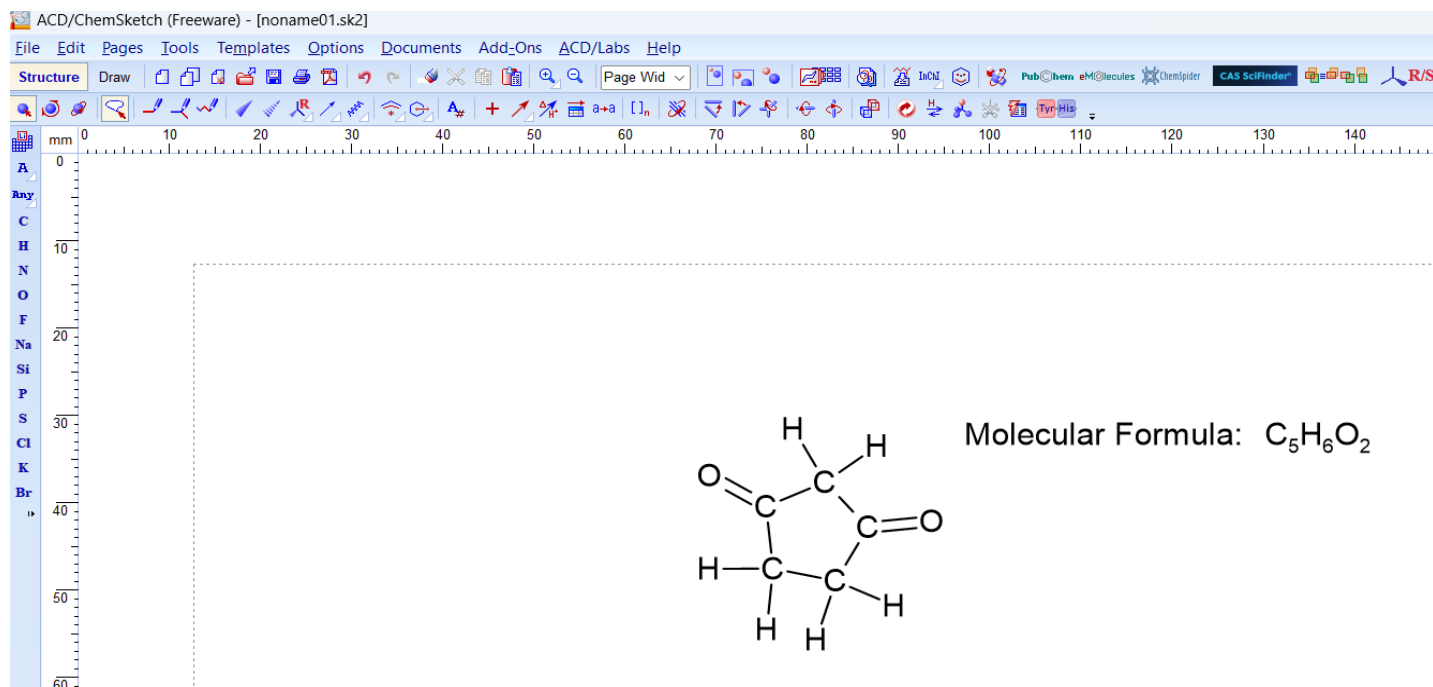


Д

Слика 4. а) Додавање експлицитни водороди, б) Експлицитните водороди се додадени, в) Промена на структурните својства, г) Прикажување јаглерод за да се создаде структурна формула, д) Структурна формула на пентан-1,3-дион

ЧЕКОР 5

Создадете молекулска формула користејќи *Алатки*, *Пресметај* и потоа *Молекулска формула* како во Пример 2.



Слика 5. Структурна и молекулска формула на циклопентан-1,3-дион

ЧЕКОР 6

Префрлете ја структурата во *3D Прегледувач*. Ротирајте ја структурата и користете различни начини за нејзино прикажување.

ЧЕКОР 7

Зачувајте ја структурата и 3D моделите со кликување на *Датотека* и потоа *Зачувај како*.

1.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

Нацртајте еден од цис/транс изомерите на цитрал (3,7-диметилокта-2,6-диенал), компонента на есенцијалното масло од маточина.

Исчистете ја структурата.

Генерирајте го името и определете ја молекулска формула.

Прикажете го во 3D прегледувачот и ротирајте го.

Зачувајте ја структурата и 3D моделот.

1.5. Примери на задачи за оценување на учениците

Бутандиал, 5-метилхептан-2,4-дион

Најдете примери на алдехиди и кетони за цртање, генерирајте имиња и молекулски формули во ChemSketch, прикажете го во 3D прегледувачот.

ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM БИОМОЛЕКУЛИ

1) ВОВЕД ВО ПРЕДМЕТОТ

2) ОПИС НА КОРИСТЕНИ АЛАТКИ – ChemSketch

3) LIST OF SELECTED CHAPTERS

- Основи на работа во софтверот **ChemSketch (Хрватска)**
- - Комплексни соединенија (**Словенија**)
- - Алкани и циклоалкани (**Хрватска**)
- - Алкени и алкини (**Хрватска**)
- - Арени (**Македонија**)
- - Алкохоли (**Македонија**)
- - Алдехиди и кетони (**Словенија**)
- - Биомолекули (**Република Чешка**)
- - Хиралност и оптичка активност (**Република Чешка**)
- - Апаратура за цртање (**Хрватска**)
- - Луисови структури (**Хрватска**)

4. РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна единица: Биомолекули
Наслов на тема: Биомолекули
Предвиден број на часови: 2

4.1. ТЕОРЕТСКИ ВОВЕД ВО ПОГЛАВЈЕТО

Биомолекули, исто така наречени и биолошки молекули, се супстанции кои ги создаваат и користат организмите. Биомолекулите имаат различни структури и функции. Четирите главни типови на биомолекули се јаглехидрати, липиди, протеини и нуклеински киселини. Јаглехидратите се главниот извор на енергија за организмите. Липидите имаат различни функции како форми на енергија или градење биолошки мембрани. Протеините исто така имаат многу структури и функции како што е транспорт на некои важни супстанции, кои функционираат како ензими, градат мускули или делуваат како антитела. Нуклеинските киселини имаат единствена функција за синтеза на протеини и носител на генетски информации.

4.2. ОБРАЗОВНИ РЕЗУЛТАТИ ОД ИЗБРАНОТО ПОГЛАВЈЕ

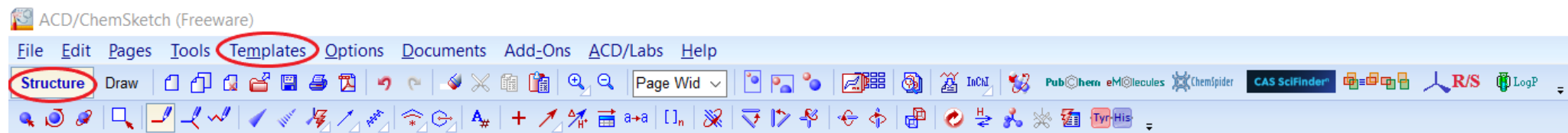
- да нацрта различни примери на молекули на јаглехидрати и да ја претстави нивната структура со формули на Фишер и Хаворт
- да се користи номенклатура на јаглехидратите
- да пишува хемиски реакции на јаглехидрати
- да нацрта „D“ и „L“ формули на јаглехидрати
- да ги зачува во компјутерот молекулите на јаглехидратите

4.3. ИНСТРУКЦИИ ЗА КОРИСТЕЊЕ НА СОФТВЕРОТ CHEMSKETCH ЗА ИЗБРАНОТО ПОГЛАВЈЕ

4.3.1. Како да нацртате молекул на Д-гликоза користејќи ја формулата на Фишер?

ЧЕКОР 1

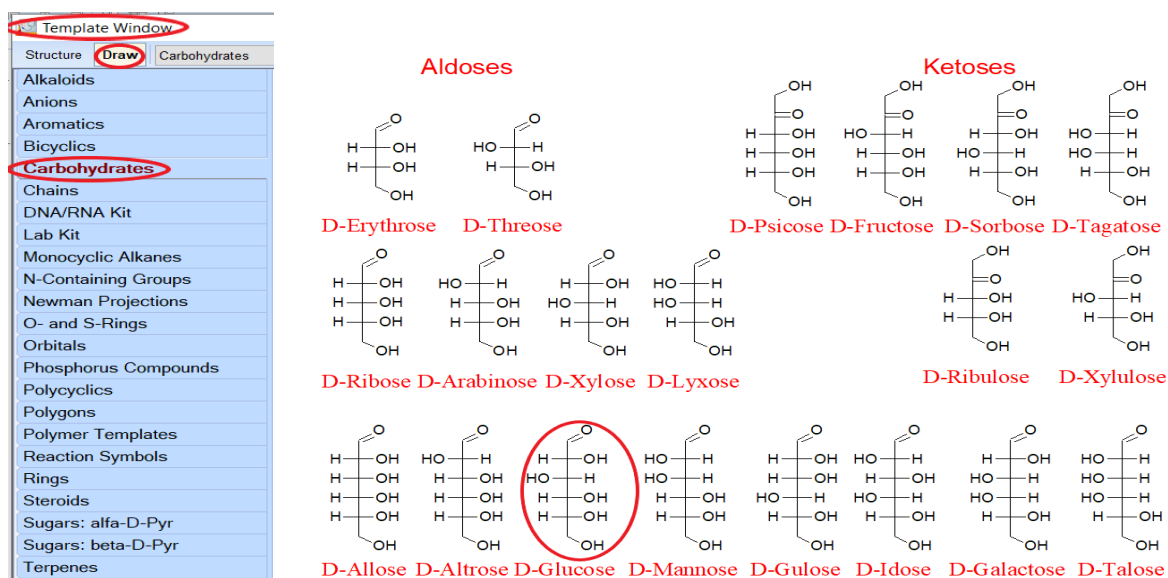
Започнете во модулот *Структура*, кликнете на *Шаблони*



Слика 1. Редослед на дејствување за прикажување шаблони

ЧЕКОР 2

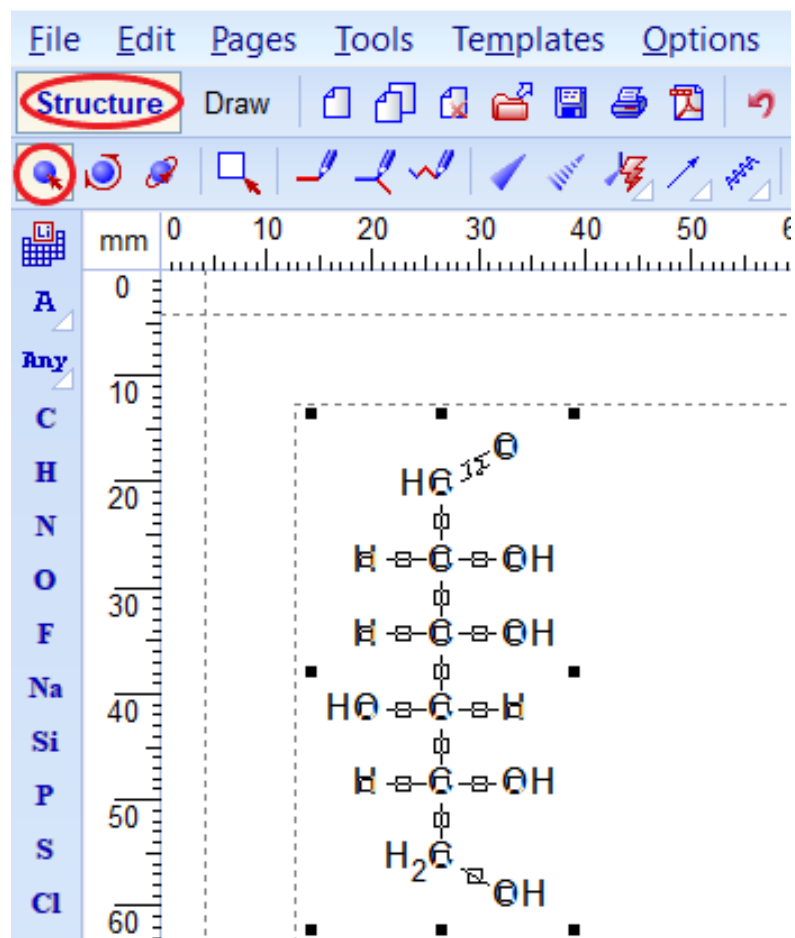
Отворете го прозорецот на шаблонот, вклучете го режимот за *цртање* и кликнете на *јаглехидрати*. Кликнете на формулата за *Д-гликоза* и преместете ја во отворената датотека.



Слика 2. Избирање на структурата на моносахаридите од менито на програмата Chems sketch

ЧЕКОР 3

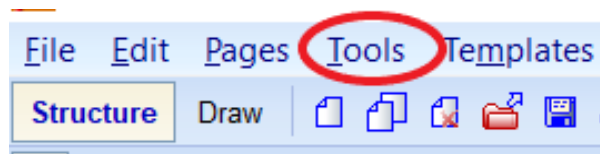
Префрлете се на режим на *структура* и означете ја формулата



Слика 3. Префрлување во режим Структура

ЧЕКОР 4

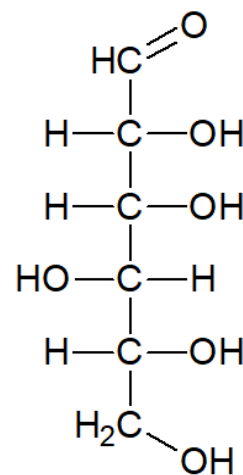
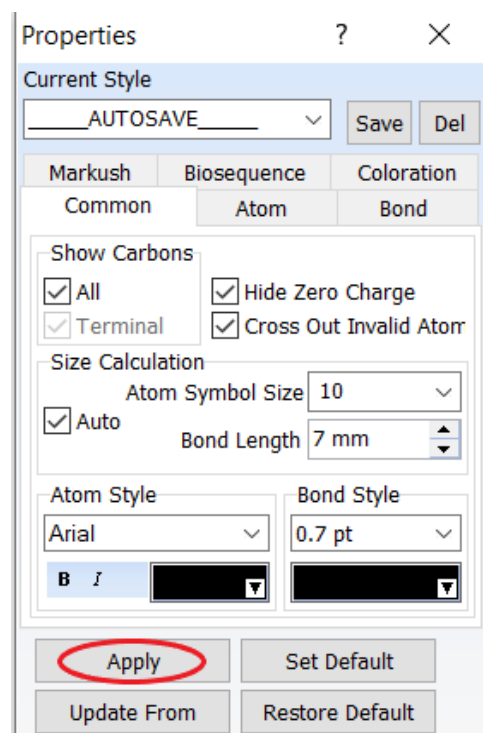
Кликнете на *Алатки* (Слика 5) и изберете својства на структурата префрлете се на *сите*



Слика 4. Редослед на дејствување на својствата на структурата

ЧЕКОР 5

Кликнете на *Примени* за да ја нацртате конечната формула на Фишер со сите атоми

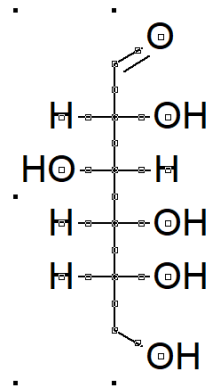


Слика 5. Поставување на структурата и Фишеровата формула за Д - гликоза

4.3.2 Како да го генерирате името на структурата?

ЧЕКОР 1

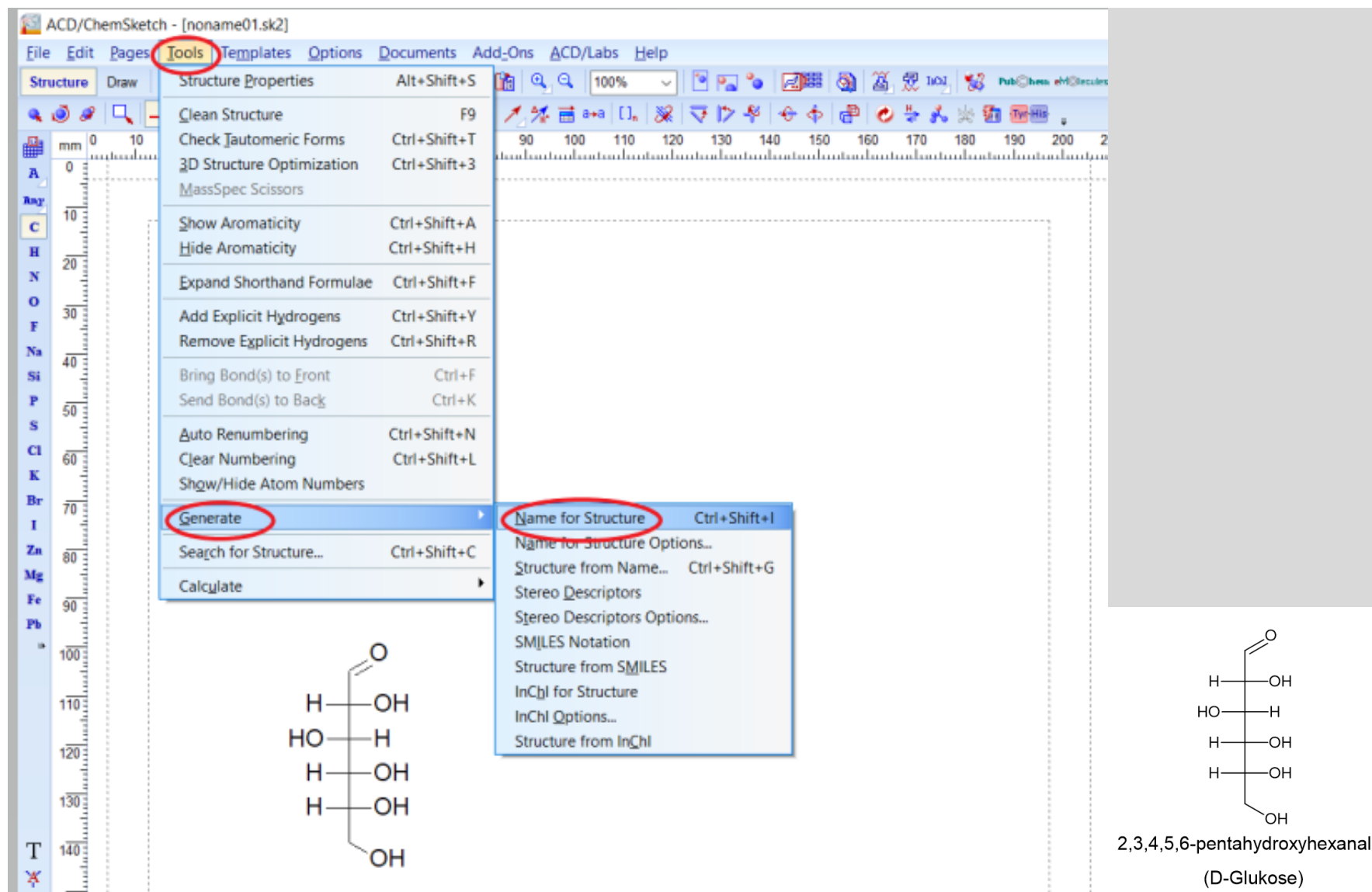
Нацртајте молекул во модулот *Структура*, кликнете на некое место во документот за да ја означите формулата



Слика 6. Структура на D-гликоза

ЧЕКОР 2

Кликнете на *Алатки* и изберете *Генерирај*



The screenshot shows the ChemSketch interface with the 'Tools' menu open. The 'Generate' option is highlighted, and its sub-menu is also open, with 'Name for Structure' selected. The chemical structure of D-glucose is displayed in a Fischer projection. The name '2,3,4,5,6-pentahydroxyhexanal (D-Glucose)' is written below the structure.

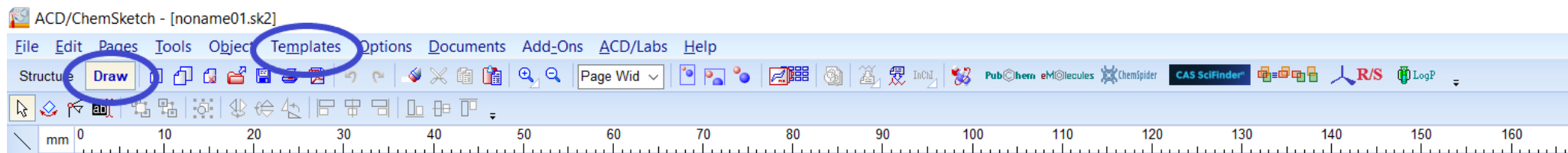
2,3,4,5,6-pentahydroxyhexanal
(D-Glucose)

Слика 7. Редослед на дејства за да се создаде име на структура

4.3.3. Како да нацртате молекул на гликоза и да го генерирате името користејќи ја формулата на Хаворт?

ЧЕКОР 1

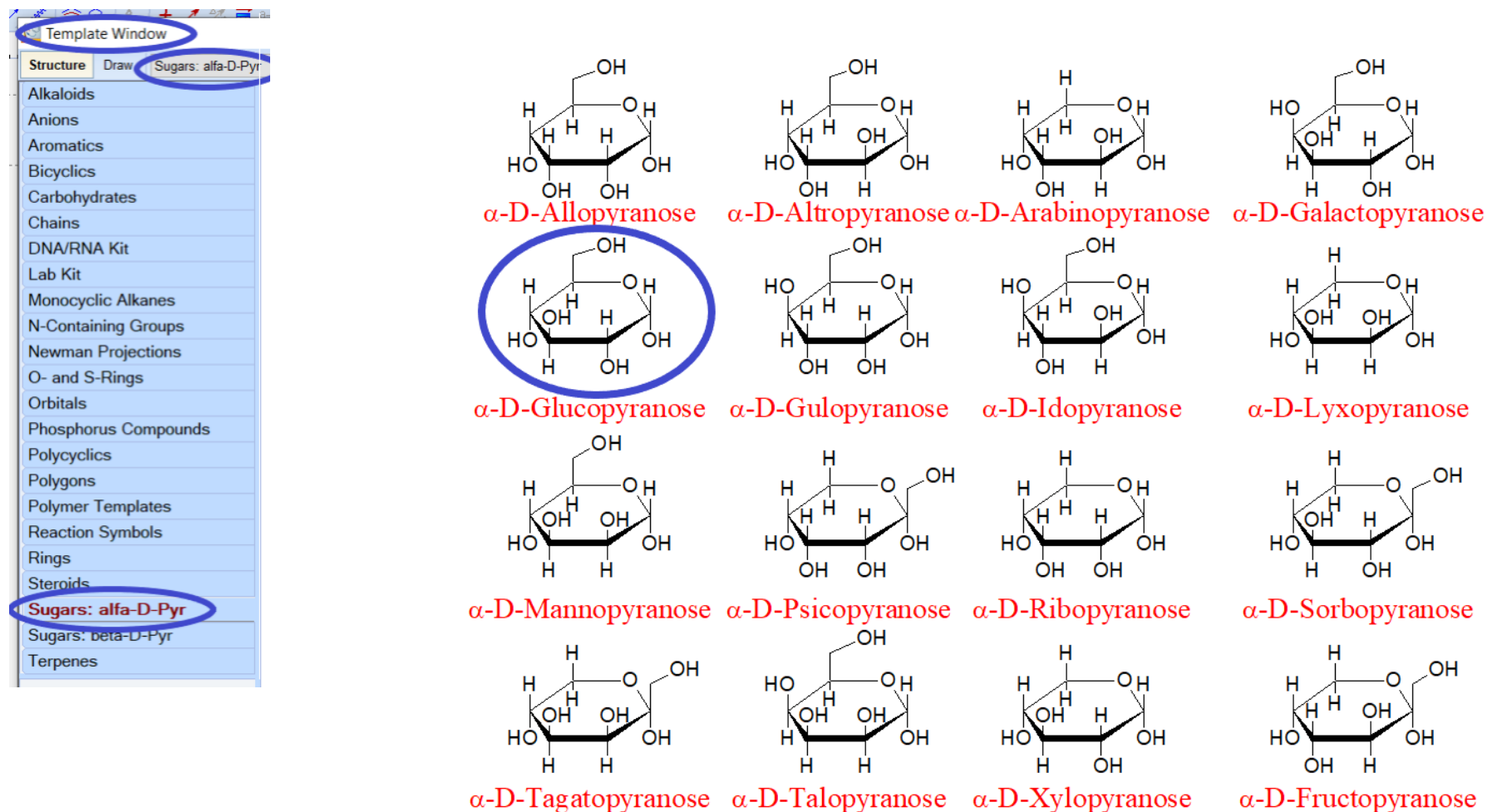
Започнете со модулот *нацртај*, кликнете на *шаблони*



Слика 9. Редослед на дејства за прикажување шаблони

ЧЕКОР 2

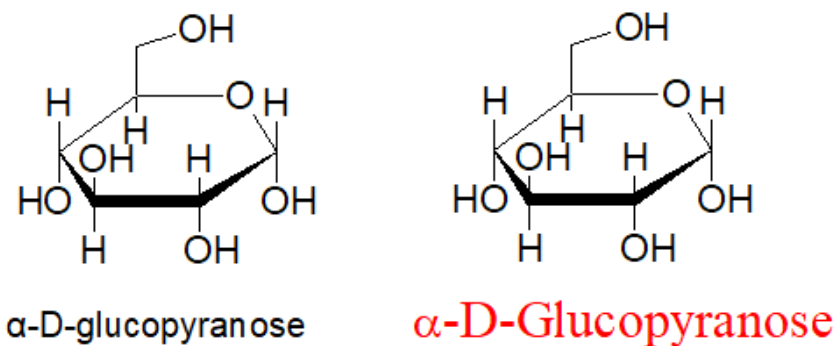
Отворете го прозорецот на шаблонот, префрлете се на режимот за *цртање* и кликнете на Шеќери:alfa-D-Pyr
кликнете на формулата α -D-глюкопираноза и преместете ја во отворената датотека



Слика 9. Избирање на структурата на моносахаридите од менито на програмата Chemsketch

ЧЕКОР 3

За да го генерирате името на структурата може да го користите истиот начин како да генерирате име за структурите на Фишер или можете да кликнете на името под формулата

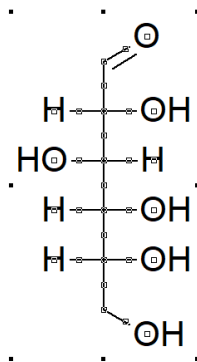


Слика 10. Формула на α -D-глюкопираноза

4.3.4 Како да изберете својства?

ЧЕКОР 1

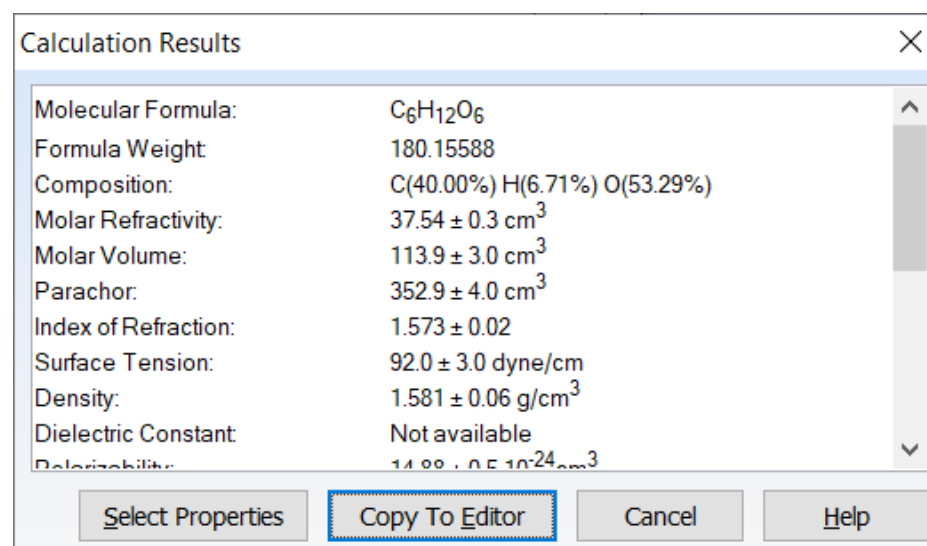
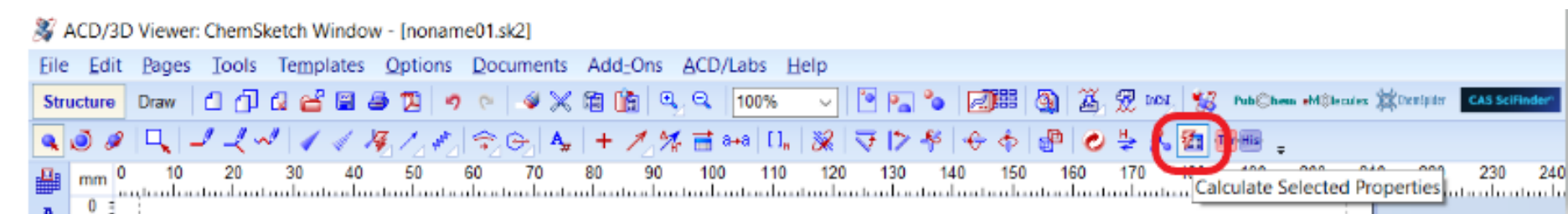
Нацртајте молекул во модулот структура, кликнете на некое место во документот за да ја означите формулата



Слика 11. Структура на D-глицоза

ЧЕКОР 2

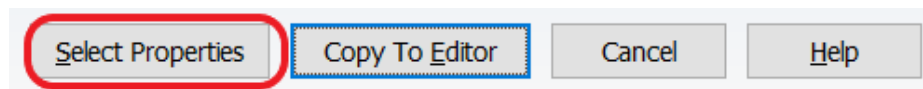
Кликнете на иконата за да изберете *својства*



Слика 12. Редослед на дејствување за избор на својства на структура

ЧЕКОР 3

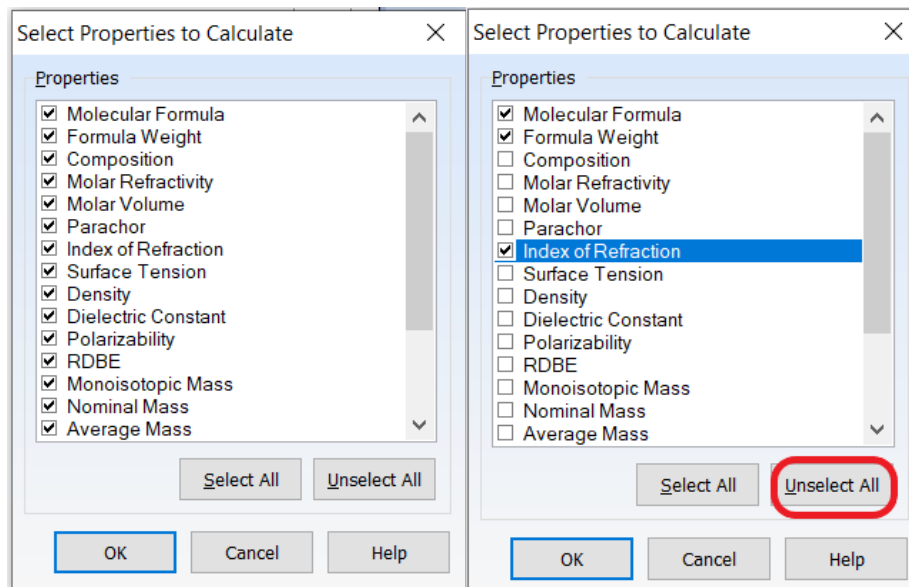
Изберете *Избери својства*



Слика 13. Продолжете со процесот на генерирање својства

ЧЕКОР 4

Кликнете на *отселектирај ги сите* и изберете својства, наместо „ок“



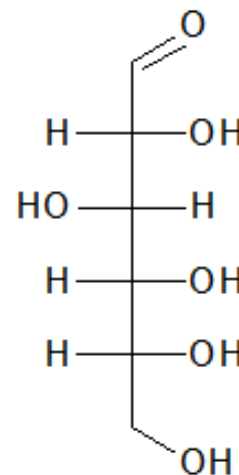
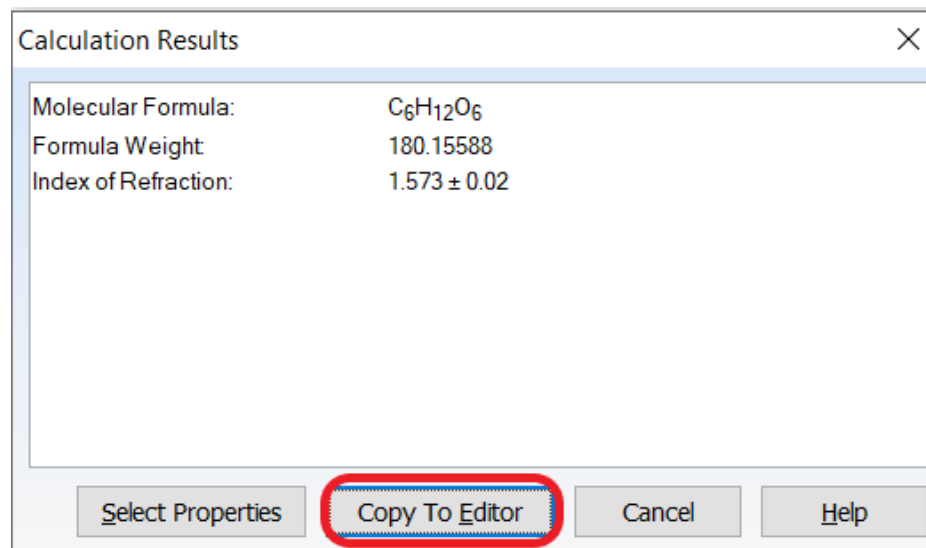
Слика 14. Избор на правилни својства

ЧЕКОР 5

Кликнете на иконата, потоа *Копирај во уредувач* (Слика 18, 19 и 20)



Слика 15. Копирај икона



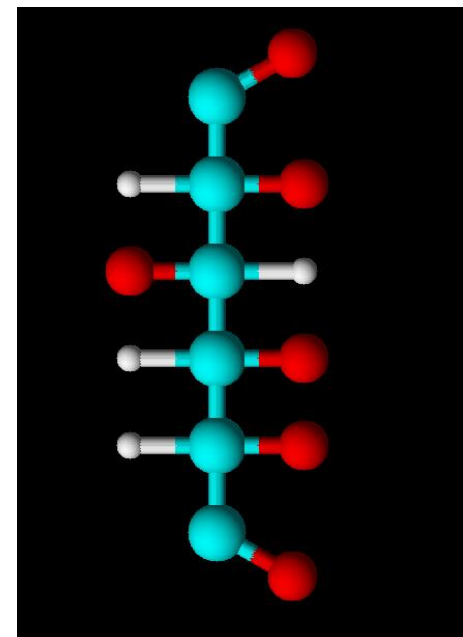
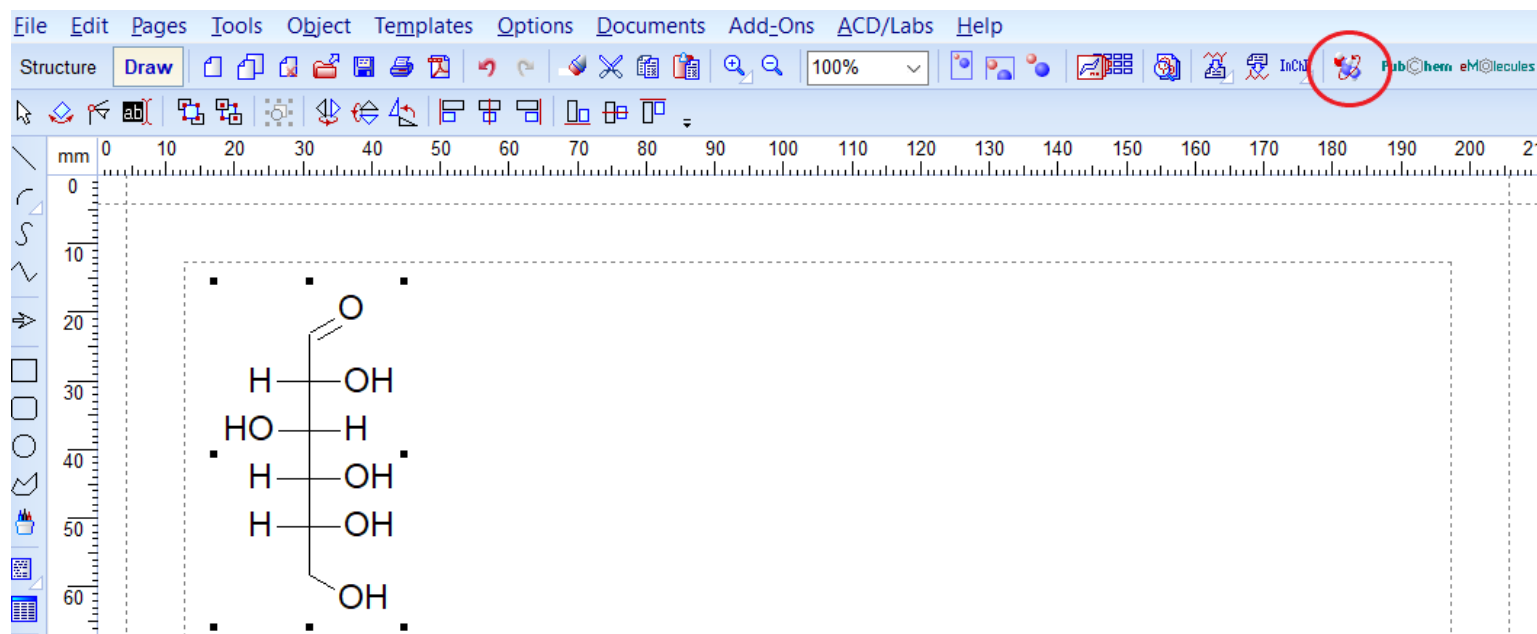
Molecular Formula: C₆H₁₂O₆
Formula Weight: 180.15588
Index of Refraction: 1.573 ± 0.02

Слика 16. Копирање на избраните својства

4.3.6. Префрлете ги молекулите на D-гликоза и α -D-глюкопираноза во 3D структура.

ЧЕКОР 1

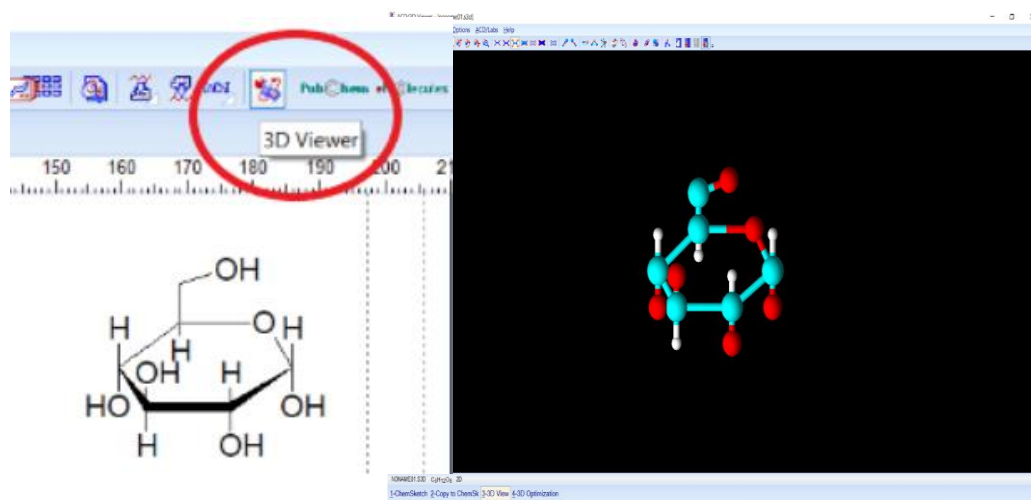
Означете ја формулата на Фишер и кликнете на *3D-прегледувач*



Слика 17. Означување на структура

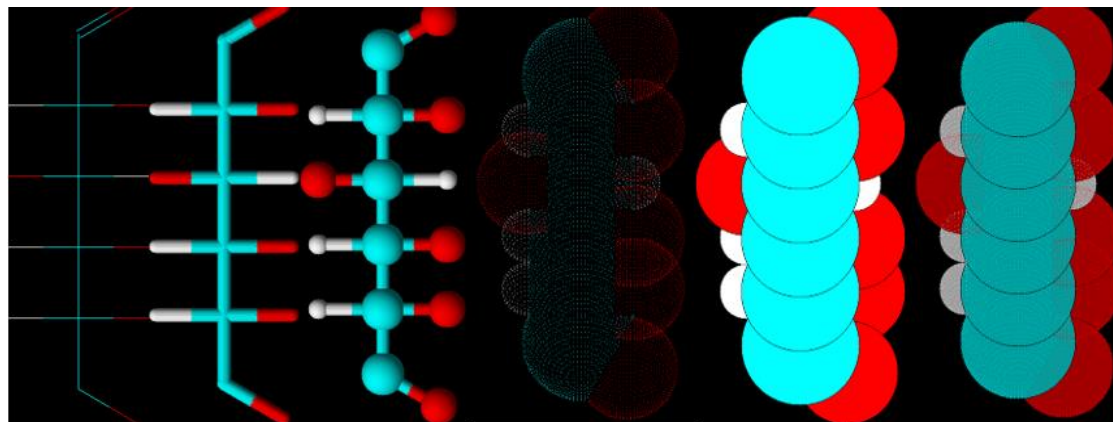
ЧЕКОР 2

Означете ја Хаворт формулата и кликнете на *3D-прегледувачот*



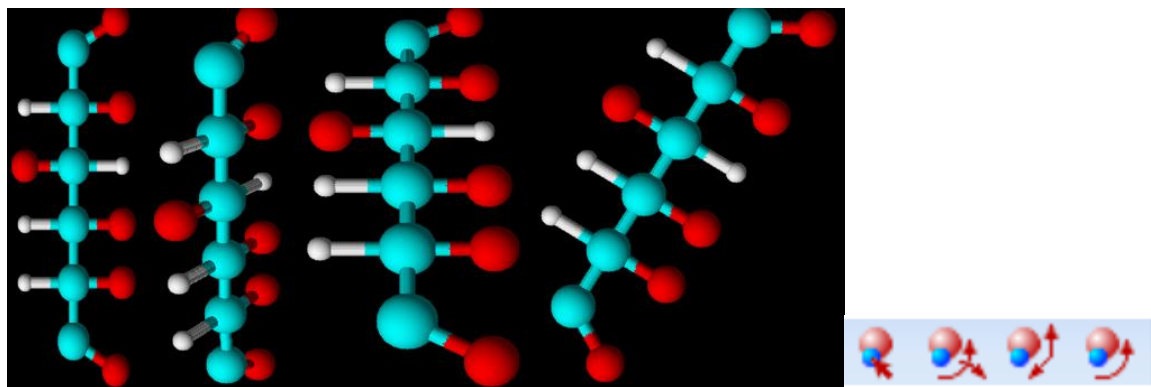
Слика 18. Формулата на Хаворт за Д-гликоза

4.3.7. Користете икони на специфични начини за должини и атоми



Слика 19. Видови формули во 3D модел

4.3.8. Користете икони на сите видови на ротација



Слика 20. Различни агли на моносахариди

1.4 ПРИМЕРИ НА ЗАДАЧИ ЗА ОБРАБОТКА НА НАСТАВНАТА СОДРЖИНА

Истражете на интернет како изгледа молекулот на фруктоза и прикажете го во програмата ChemSketch. Кога ќе претставите молекулот на фруктоза, истражете како изгледа во 3D форма и применете ги научените функции во ChemSketch.

1. Нацртајте ја фруктозата користејќи шаблони и направете го следново:

а) нацртајте два вида структури на јаглехидрати

б) нацртајте ги формулите на Фишер и Хаворт

в) уредете ја структурата на молекулот, вратете ги или променете ги атомите и функционалните групи

г) генерирајте име на структурата

д) прикажете на структурата на молекулот во 3D прегледувачот

ѓ) користете икони за сите видови ротации и икони на специфични начини за должини и атоми

е) најдете молекуларна формула, формула тежина и индекс на прекршување

2. Истражете ги апликациите на биомолекулите. Изберете еден биомолекул за да го прикажете во програмата ChemSketch. Запишете ја во тетратка примената на избраниот молекул во секојдневниот живот и неговите извори (појава). Зачувајте ја 3D структурата на овие молекули на вашиот компјутер.

1.5 ПРИМЕРИ НА ЗАДАЧИ ЗА ОЦЕНУВАЊЕ НА УЧЕНИЦИТЕ

Истражете на интернет како изгледа молекулот на галактоза и прикажете ја молекулата во програмата ChemSketch. Кога ќе го претставите молекулот на галактоза, истражете како изгледа во 3D форма и применете ги научените функции во ChemSketch.

1. Нацртајте ја галактозата користејќи шаблони и направете го следново:

а) нацртајте два вида моносахаридни структури

б) нацртајте ги формулите на Фишер и Хаворт

- в) уредете ја структурата на молекулот, вратете ги или променете ги атомите и функционалните групи
- г) генерирајте име на структурата
- д) прикажете ја структурата на молекулот во 3D прегледувачот
- ѓ) користете икони за сите видови ротации и икони на специфични начини за должини и атоми
- е) најдете молекуларна формула, формула тежина и индекс на прекршување

2. Во тетратка запишете го биолошкото значење на галактозата и нејзините извори (појава).

ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM
КООРДИНАТИВНИ СОЕДИНЕНИЈА

1. РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна единица: Преодни метали
Наслов на тема: Комплексни соединенија
Предвиден број на часови: 2

1.1. Теоретски вовед

Комплексни соединенија, се соединенија што се состојат од централен метален јон (познат и како координативен центар) опкружен со група лиганди. Лиганди се анјони или неутрални молекули кои можат да донираат пар или парови електрони и се врзани за металниот јон преку координатни ковалентни врски. Лигандите можат да се монодентираат, бидентираат или полидентираат. Координатна ковалентна врска е ковалентна врска во која еден атом од врската (атом донор) ги снабдува двата електрони. Овој тип на поврзување е различен од нормалната ковалентна врска во која секој атом обезбедува по еден електрон.

Комплексните соединенија можат да бидат неутрални или наполнети. Кога комплексното соединение е наполнето, тоа се стабилизира од соседните контра-јони.

Ако јонот има претходно опишана сложена структура, тој се нарекува сложен јон, но ако нема нето полнеж (кога има интеракција помеѓу катјон и комплексен анјон, комплексен катјон и анјон или и комплексен катјон и анјон), тогаш тој се нарекува координативно соединение.

Координациски број е бројот на донорски атоми поврзани со централниот метален атом/јон.

Многу комплексни соединенија имаат различни геометриски структури. Две вообичаени форми се квадратно-планарен распоред, каде четири лиганди се распоредени на аглиите на хипотетичкиот квадрат околу централниот метален атом и октаедарски распоред во кој се распоредени шест лиганди, четири во рамнина и по еден над и под рамнината.

Комплексни соединенија имаат способност да покажат изомерија -постоење на различни соединенија со иста молекулска формула, но различни распореди на лигандите околу металниот јон. Ова води до различни физички и хемиски својства, што ги прави комплексните соединенија корисни во различни примени, вклучително и како катализатори, пигменти и терапевтски агенси.

Покрај изомеријата, комплексните соединенија често покажуваат промена на други физички својства: боја, магнетни и реактивност и на тој начин играат клучна улога во многу области од хемијата посебно аналитичката хемија со широк опсег на практични примени.

Примери

Молекуларна формула	Име	Лиганда	Координативен број	Геометриска структура
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	Дијаминесребро (I) јон	NH_3	2	Линеарна
$[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$	Тетрацијаноцинкат (II) јон	CN^-	4	Тетрахедрална
$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$	Тетрацијаноникелат (II) јон	CN^-	4	Квадратно-планарна
$[\text{PtCl}_6]^{2-}$	Хексахлороплатинат (IV) јон	Cl^-	6	Октахедрална
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	Хексааминокобалт (III) јон	NH_3	6	Октахедрална
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$	Диаминедихлороплатинум (II)	NH_3, Cl^-	4	Квадратно-планарна Цис транс изомери

1.2. Образовни резултати

Во ова поглавје учениците ќе научат:

- да нацртаат различни примери на координативни јони и соединенија и да ги прикажат со структурна формула.
- да ги прикажат структурите на комплексните соединенија во 2D
- да прикажат 3D модели на координациони соединенија нацртани во 2D користејќи ја програмската опција 3D Прегледувач
- да се го определат координацискиот број и геометријата на комплексни соединенија
- да определат можни геометриски изомери на комплексни соединенија.
- да го определат координацискиот број и формата на нацртаното комплексно соединеније
- да ја прикажат структурата на комплексни соединенија во три димензии
- да ги ротираат координациските структури во две и три димензии
- да го сменат тродимензионалниот приказ на координациската структурата на јоните
- да ги поместуваат структурите на комплексни соединенија во 2D и 3D
- да ја определат/поправаат должините на врските и аглиите на поврзување во координационите јони
- да ја оптимизираат структурата на комплексно соединеније
- да ја зачуваат во компјутер дводимензионалната и тродимензионалната структура на саканиот координациски јон или соединеније.

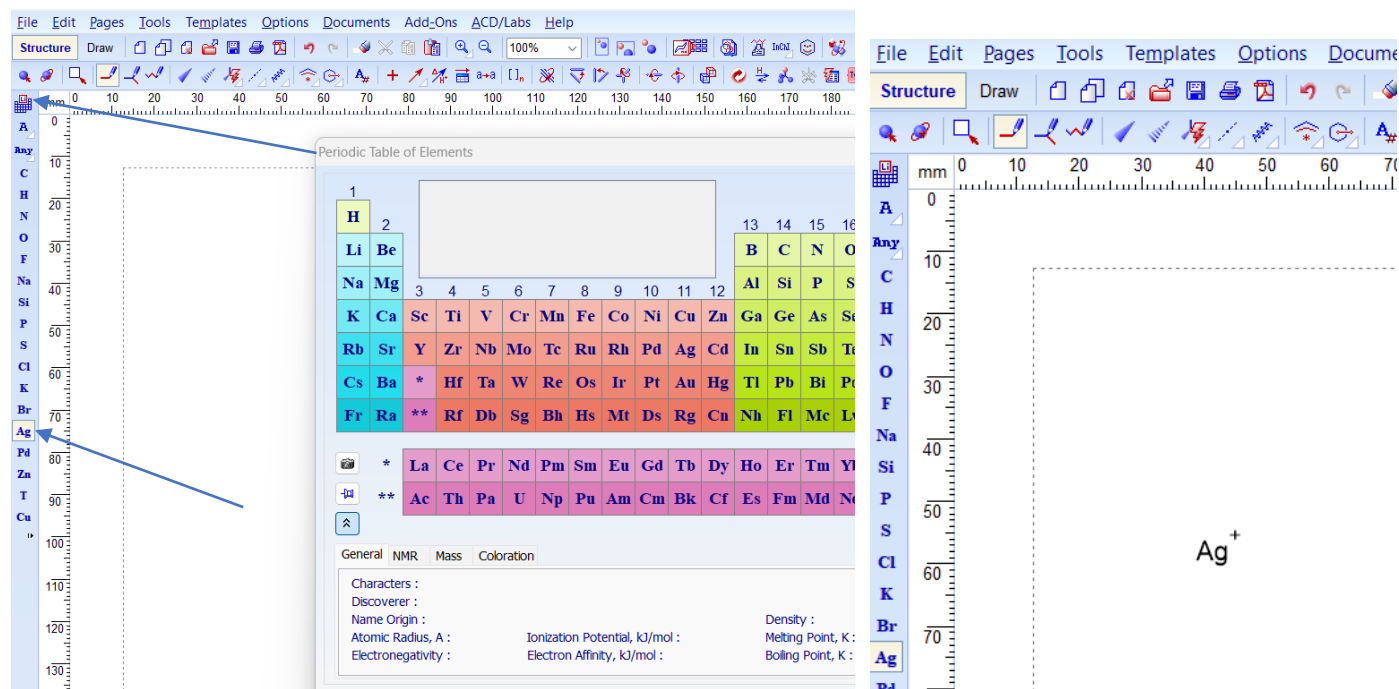
1.3. Инструкции за користење на програмата ChemSketch

Пример 1

Нацртајте $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ прикажете ја структурата на јонот во три димензии на различни начини, определете ги аглиите на врската...

ЧЕКОР 1

Изберете го режимот *Структура*. Изберете Ag од лентата со алатки на левата страна или изберете Периоден систем (левата страна со алатки) и изберете Ag, а потоа кликнете на празно место на страницата. (Слика 1а и 1б). Кога го користите елементот прв пат, треба да го изберете од периодниот систем, додека подоцна тој се појавува на левата страна од лентата со алатки.

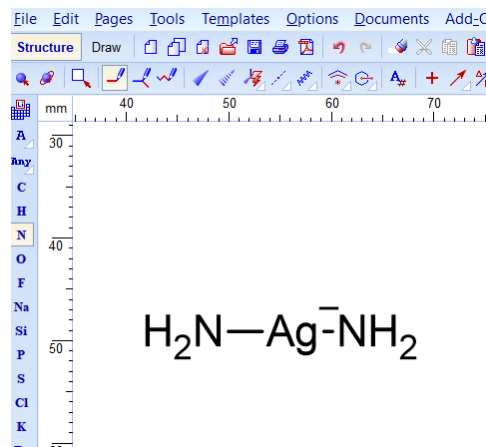
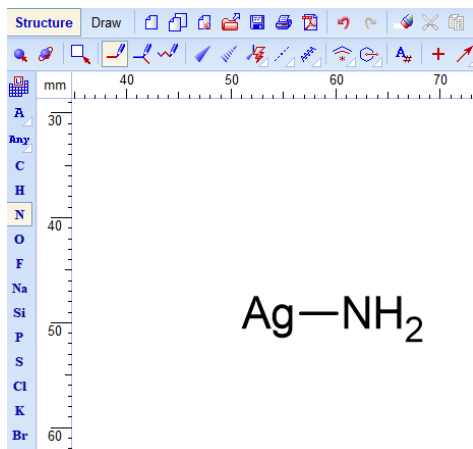


Слика 1. а) Избирање на саканиот елемент

б) Избран Ag

ЧЕКОР 2

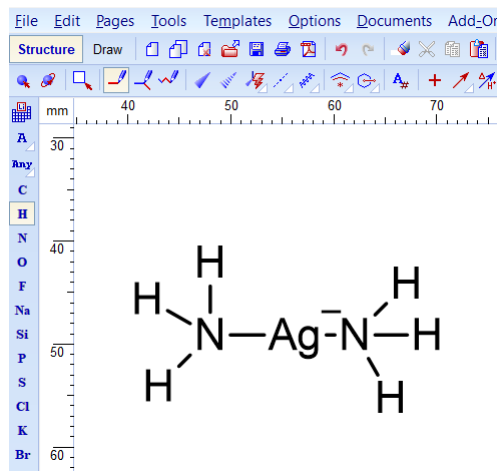
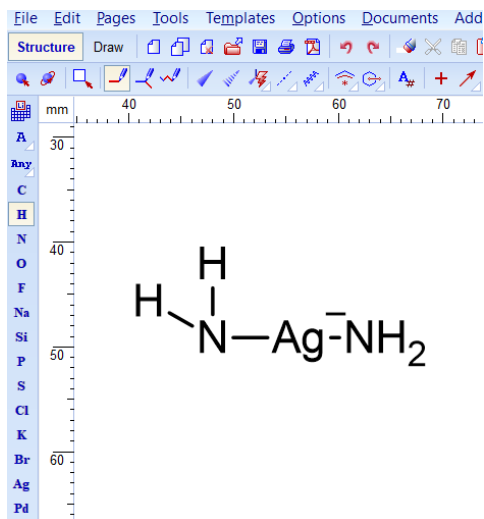
Изберете ја опцијата *НормалноЦртање*, изберете N од левата страна на алатникот (или од периодниот систем) и нацртајте врска на секоја страна од Ag. **Слика 2.**



Слика 2. Цртање на Ag-N врска.

ЧЕКОР 3


Нацртајте три N-H врски (азот-водород) на секој N. **Слика 3 а и 3 б.** Повторете го истото на другиот N атом.

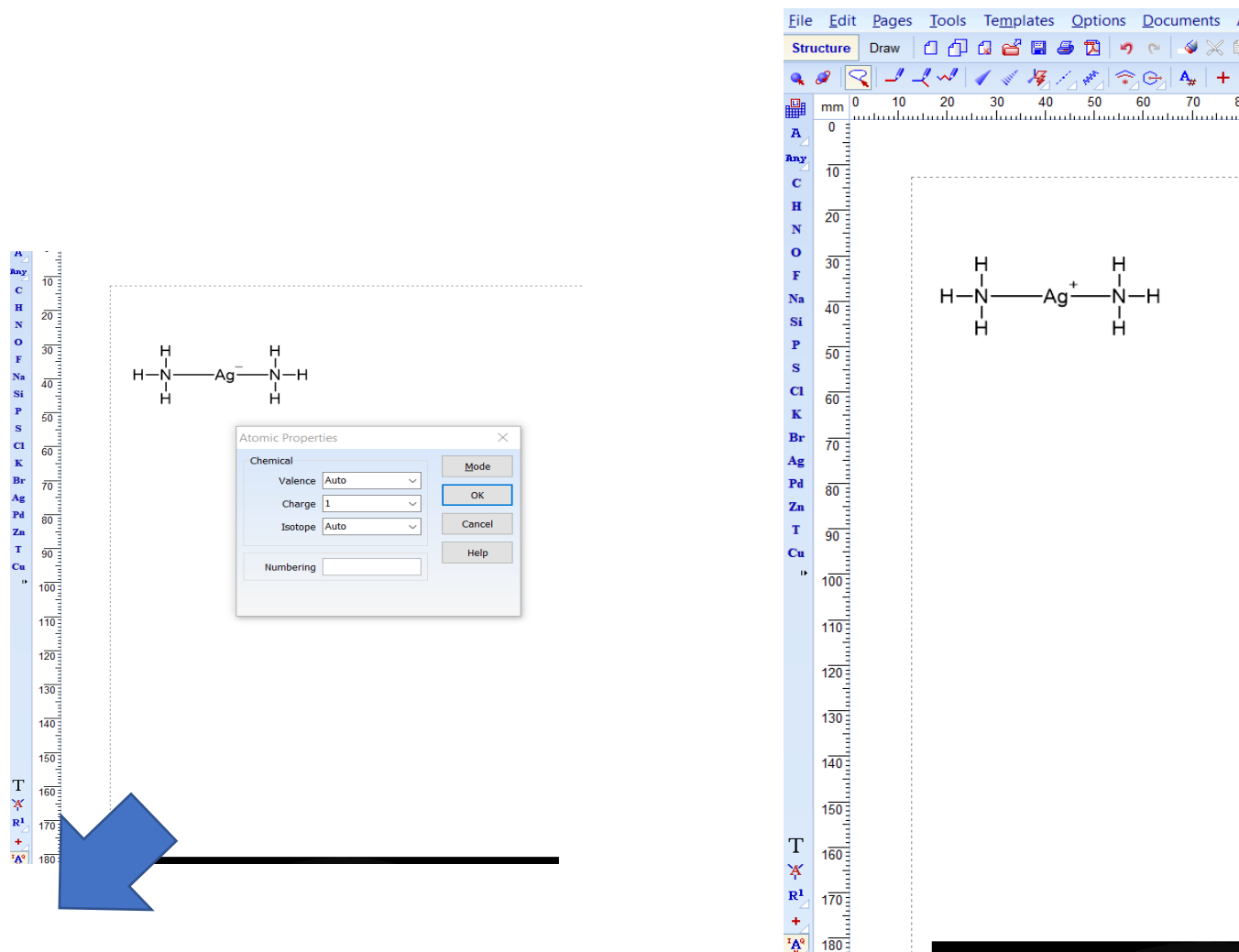


Слика 3. Цртање N-H врски

ЧЕКОР 4

Доделување на соодветно полнење за Ag.



Изберете  (Хемиски својства на атом) кликнете на Ag и сменете го полнењето. Кликнете ОК (Слика 4).

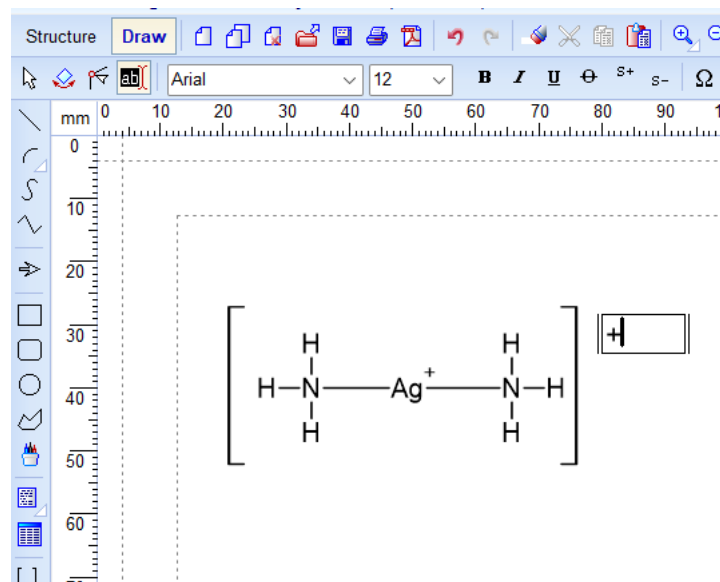
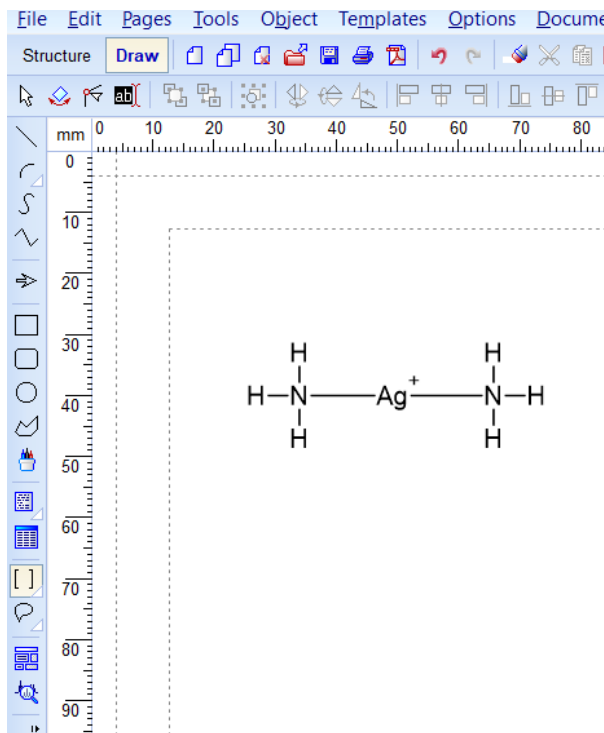


The image shows two screenshots from the ChemDraw software interface. The left screenshot displays the 'Atomic Properties' dialog box for the element Ag. The dialog box has the following fields: 'Valence' set to 'Auto', 'Charge' set to '1', 'Isotope' set to 'Auto', and 'Numbering' set to an empty field. The 'OK' button is highlighted. In the background, a chemical structure is shown with a central Ag atom bonded to two nitrogen atoms, each of which is bonded to two hydrogen atoms. The Ag atom has a negative charge symbol (Ag⁻). A blue arrow points to the 'Charge' field in the dialog box. The right screenshot shows the same chemical structure, but the Ag atom now has a positive charge symbol (Ag⁺), indicating that the charge has been updated from -1 to +1.

Слика 4. Избирање на соодветно полнење за Ag

ЧЕКОР 5


Мораме да додадеме загради и полнење. Префрлете се во *Режим на цртање* и изберете загради . **Слика 5 а.** За додавање полнење, изберете  at *Режим на цртање* и додадете полнење. **Слика 5 б.**

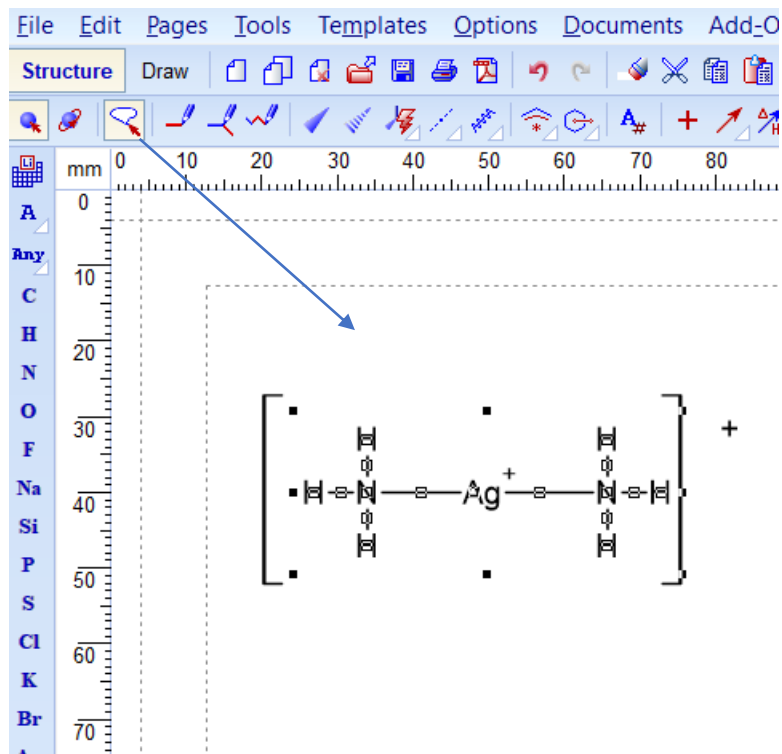


Слика 5а. Додавање загради

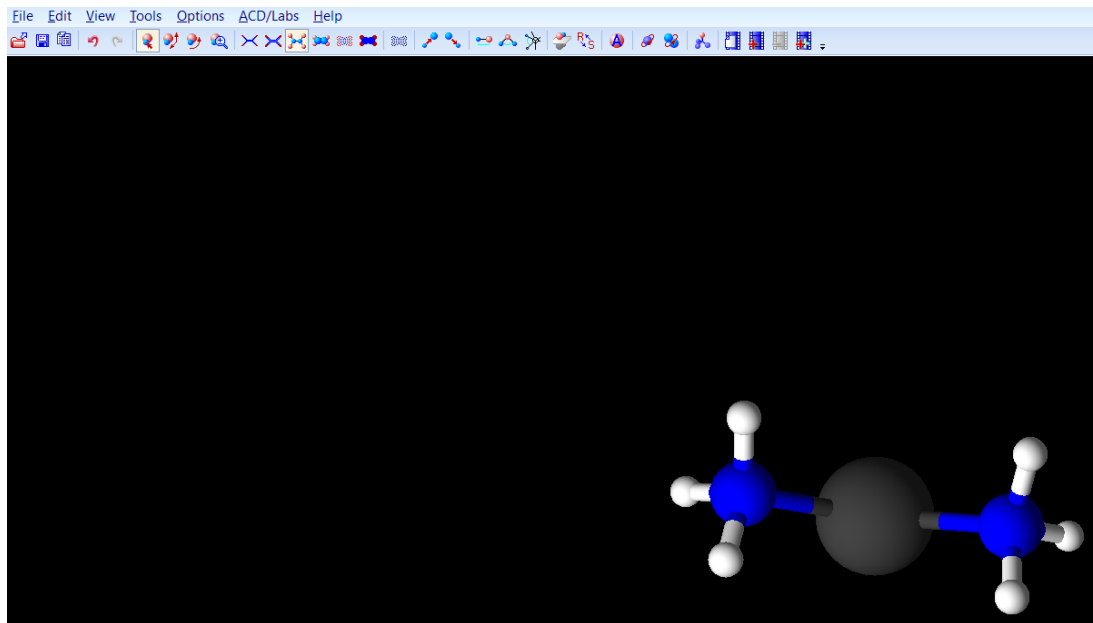
5 б: Додавање на полнење

ЧЕКОР 6

Прикажете ја структурата во 3D, прво со нејзино избирање и потоа со кликување на опцијата  на горната лента со алатки. Ќе се отвори нов прозорец со *3D приказ* на структурата (Слика 6 а) и б)




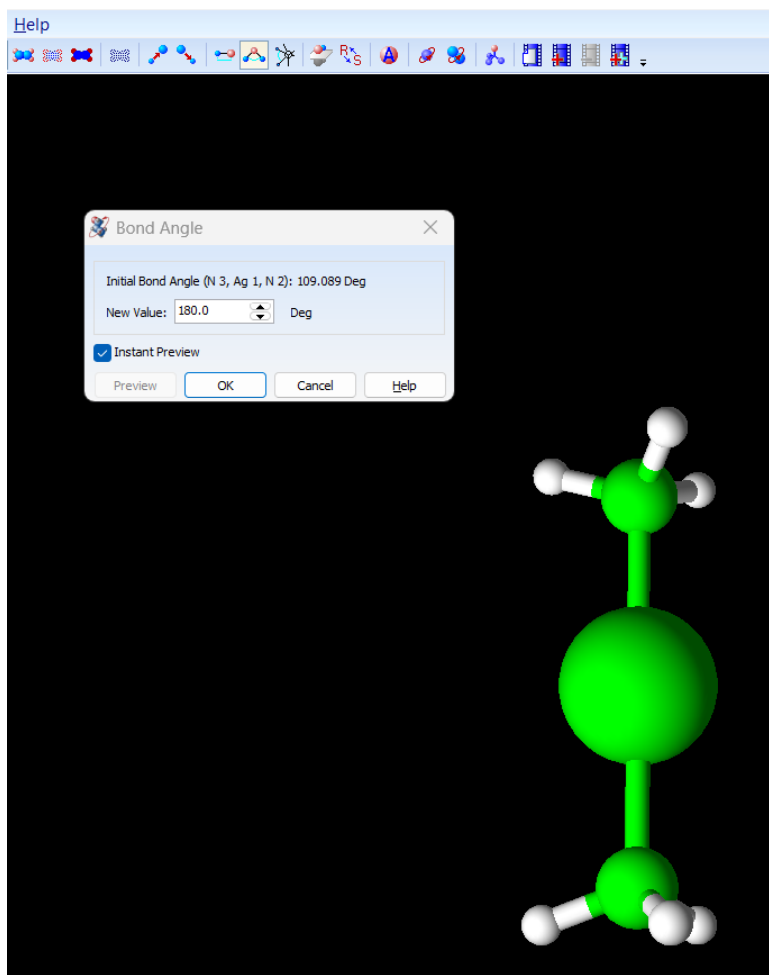
Слика 6 а. Избирање на структурата



Слика 6 б. Структура во 3D режим


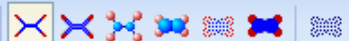
ЧЕКОР 7


За да го видите или промените аголот на врската помеѓу два атома, изберете ја опцијата  (агол на врска). За да го одредиме аголот на врската помеѓу атомите на азот, мора да кликнеме на атомот на азот (кој ја менува бојата во зелена) потоа на среброто и другиот атом на азот. Ќе се отвори прозорец со прикажана вредност. Можеме да ја промениме вредноста во соодветна. **Слика 7.**




Слика 7. Одредување на аголот на врската

ЧЕКОР 8

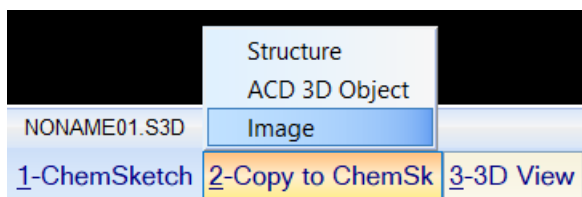
Обидете се да ја користите секоја од опциите за ротирање, преместување и избирање на горната лента со алатки: , а потоа прикажете ја структурата на секој од начините што ги нуди програмата, додека опциите исто така се прикажани и на лентата со алатки: .

Со кликување на која било од опциите се менува начинот на кој се прикажува јонот. За автоматско ротирање на јонот, кликнете на иконата .

За автоматско континуирано менување од еден во друг режим на прикажување на структурата со ротација, кликнете на иконата .

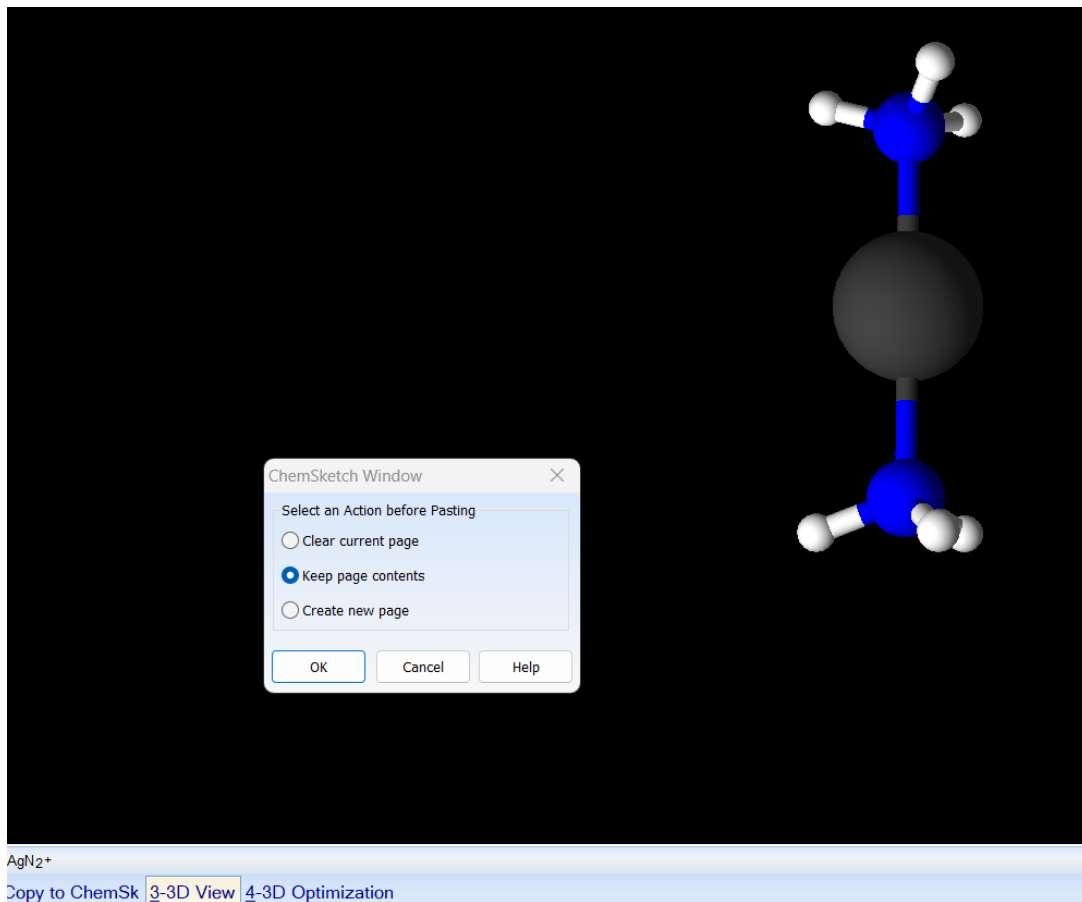
ЧЕКОР 9

Сега можеме да ја вратиме изменетата структура во програмата ChemSketch со кликување на опцијата *Копирај во ChemSketch* и избирање на опцијата *Структура* (Слика 8) на самото дно од интерфејсот. Оптимизираната структура сега се појавува во ChemSketch.



Слика 8. Преместување на оптимизираната 3D структура во ChemSketch

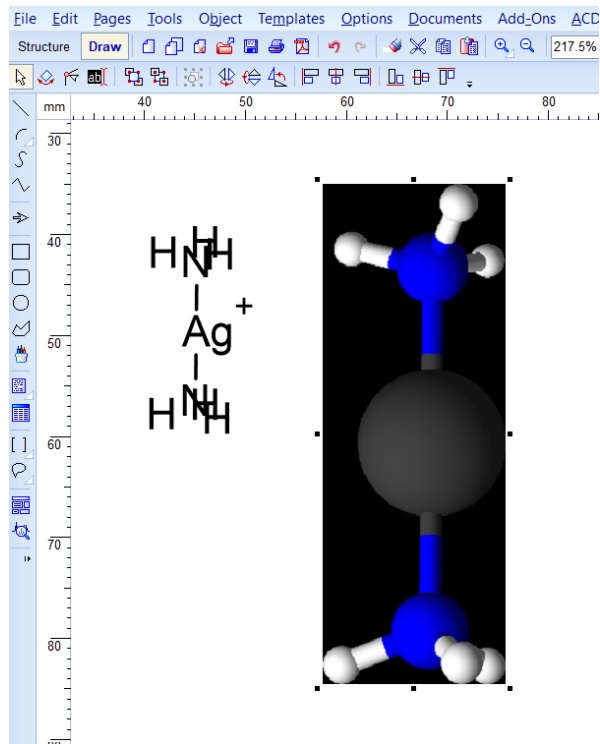
Доколку изберете *Копирај во ChemSketch* и потоа изберете *Слика* (Слика 9 а) и б)) можеме да копираме 3D структура во *ChemSketch*.



Слика 9а. Копирање структура во ChemSketch

ЧЕКОР 10

Зачувајте ги двете структури, 2D и 3D на работна површина со кликување на *Датотека* и потоа *Зачувај како*.



Слика 9б. Копирана структура

Пример 2

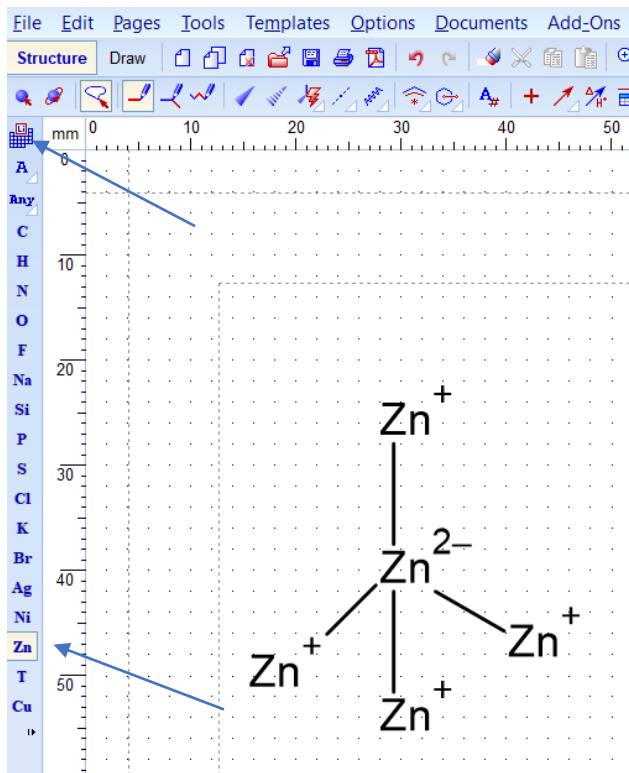
Нацртајте $[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$. Структурата е тетрахедрална.

Нацртајте ја структурата следејќи ги претходно научените чекори (Слики од 1 до 9). Потоа применете ги претходно научените **ЧЕКОРИ од 1 до 9** на овој пример.

ЧЕКОР 1

Започнете со Режимот структура и изберете *НормалноЦртање*.

Изберете Zn од Периодниот систем (левата страна со алатки) и вметнете ја. Нацртајте тетраедарна структура (Слика 10).



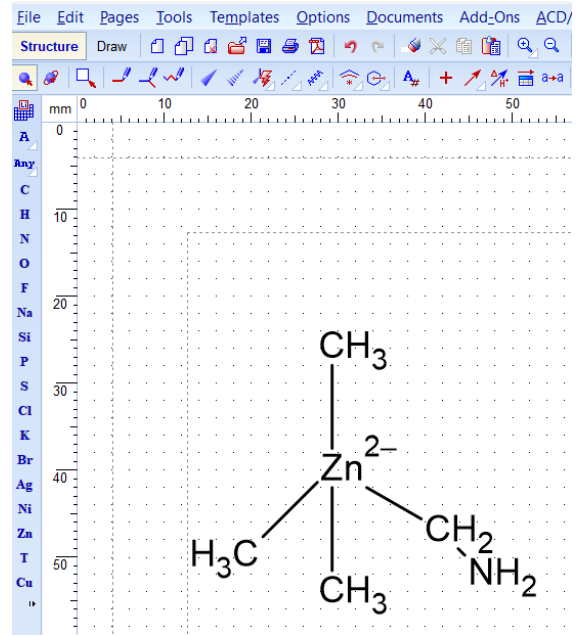
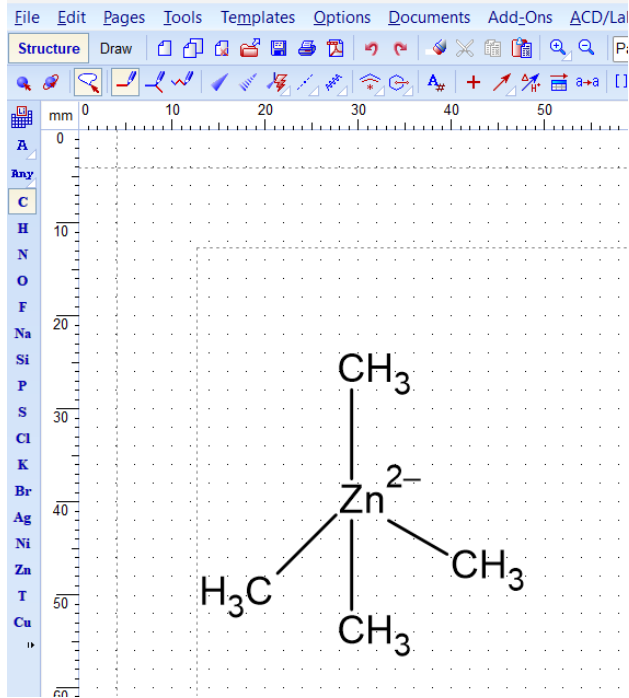
Слика 10: Цртање тетрахедрална структура

ЧЕКОР 2

Променете четири Zn (освен центрлниот) атоми со CN група. Прво изберете C од левата лента со алатки и заменете го Zn. **Слика 11 а).**

ЧЕКОР 3

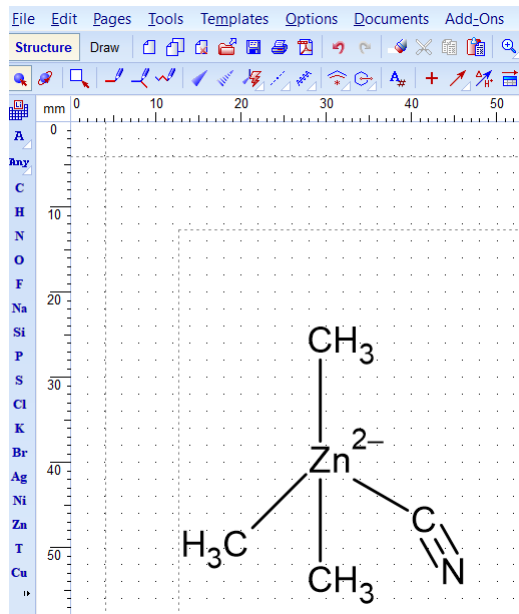
Потоа изберете N и нацртајте тројна врска (посочете кон врската, ќе се појави правоаголникот околу врската, а потоа кликнете на него за да направите тројна врска) на атом C. (**Слика 11 б), в и г).** Додадете и соодветно полнење на Zn.



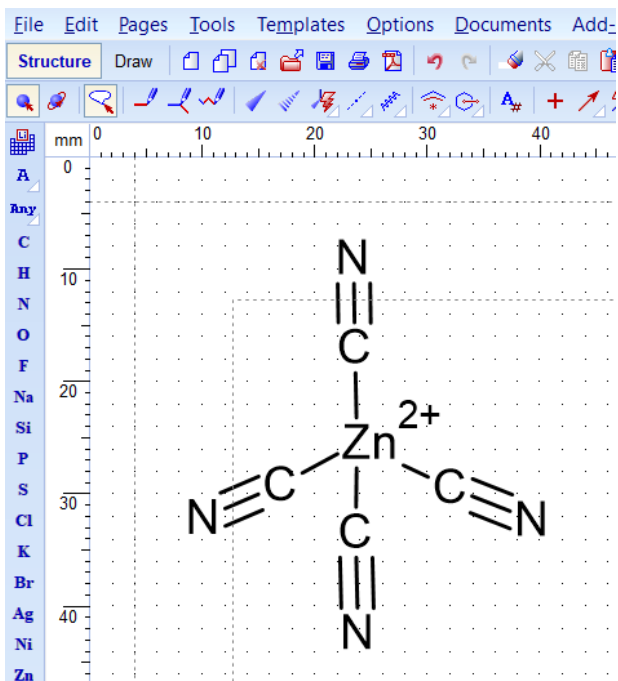
Слика 11. Цртање CN група – низа од дејства:

а

б



В





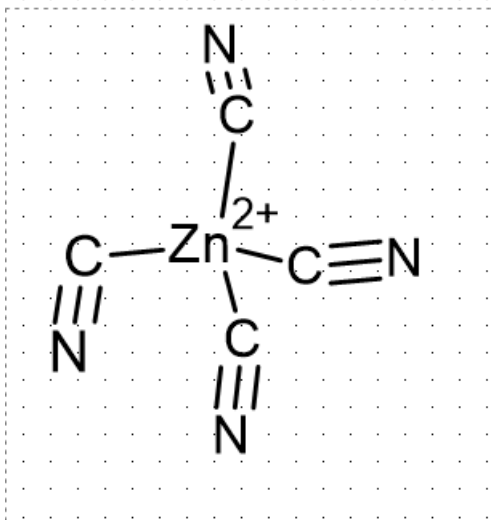
Г

ЧЕКОР 4

Користете го копчето *Избери/Премести* () и прилагодете ја должината и положбата на врската. **Слика 11 г).**

ЧЕКОР 5

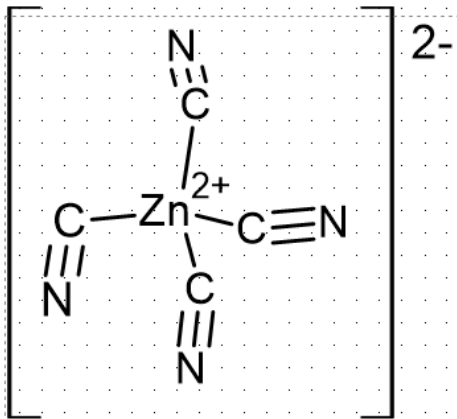
За да добиете подобра структура, користете ја опцијата за *3D оптимизација* () . Претходно изберете структура со  за да направите оптимизација. **Слика 12.**




Слика 12. Структура по 3D оптимизација


ЧЕКОР 6

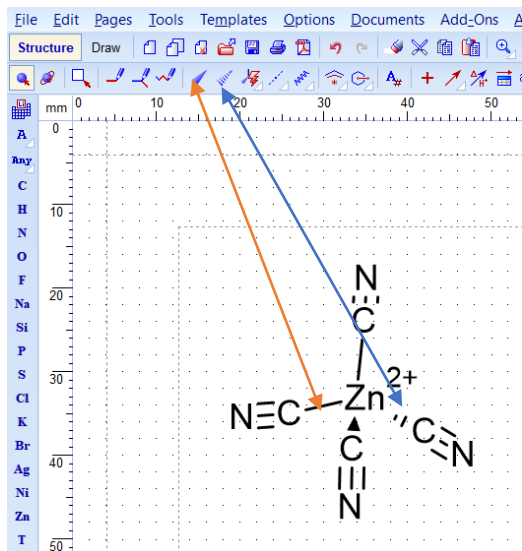
Додадете загради и полнење на координациониот јон. Види пример 1. Слика 13.



Слика 13. Структура со загради и полнење.

Исто така, можно е да се користат стерео врски наместо обични. Како што е прикажано на Слика 14. Кликнете на иконата  и на сложената врска.

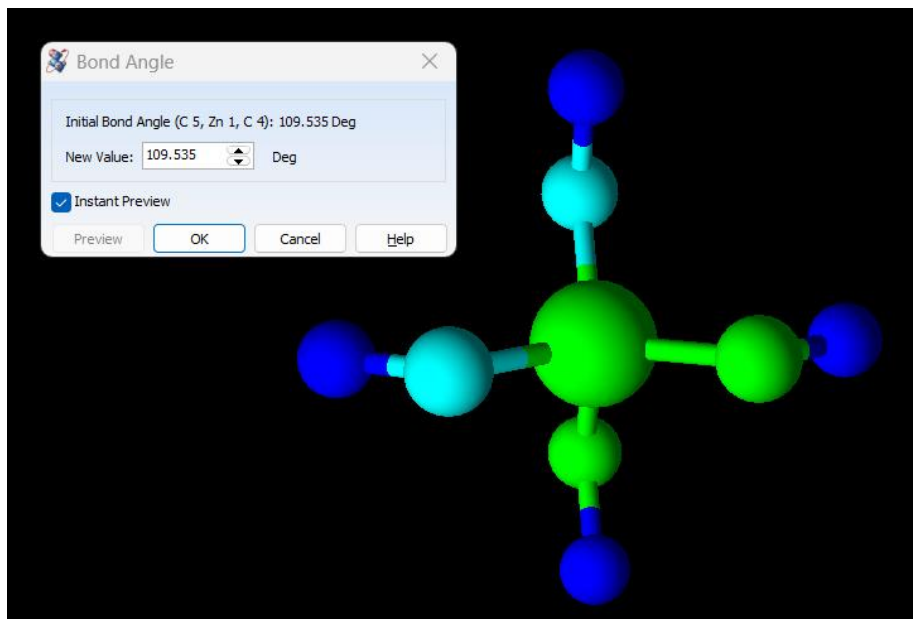
Повторете го истото со другата врска. Користете ја иконата .



Слика 14. Структура со стерео врски

ЧЕКОР 7

Презентирање на структурата во 3D како што е прикажано на Слика 15. Видете го примерот 1.



Слика 15. 3D Структура и агол на врска

ЧЕКОР 8

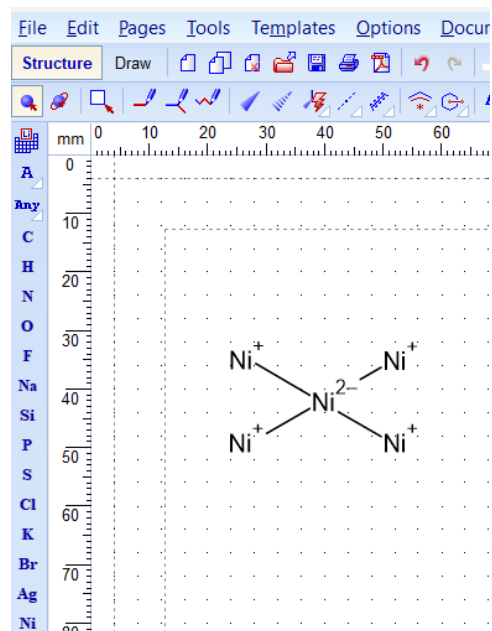
Ротирајте ја структурата (видете **ЧЕКОР 8, пример 1**).

Пример 3

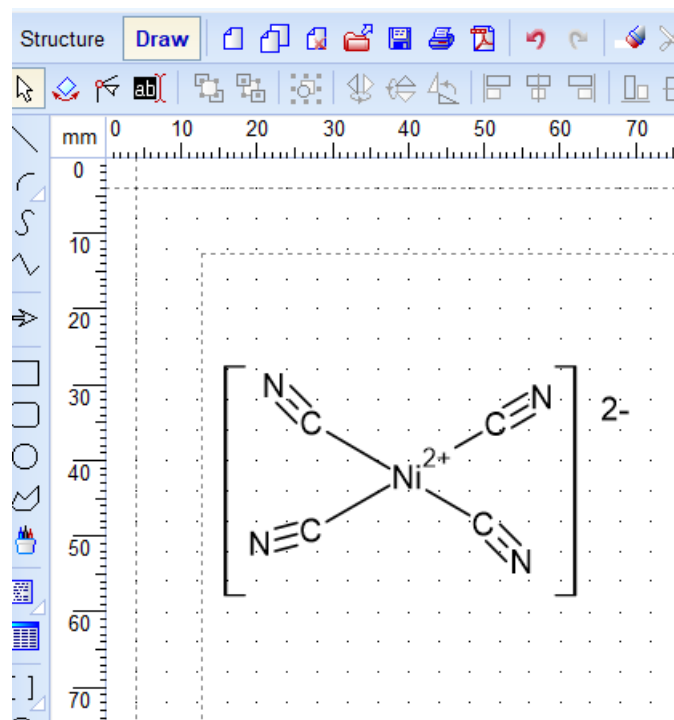
Нацртајте $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$. Структурата е со квадратно–планарен распоред.

ЧЕКОР 1

Започнете со режим Структура и изберете *НормалноЦртање*. Следете ги чекорите од **примерот 1**.



Слика 16. Прв чекор за структурата $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$



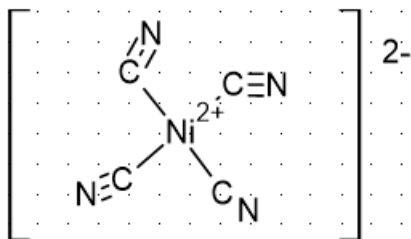
Слика 17. Структура пред уредување

ЧЕКОР 2

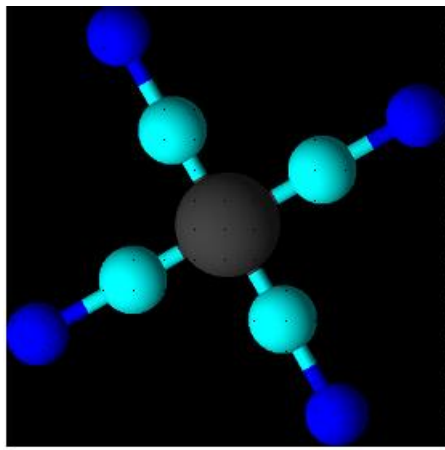
Променете ги атомите на Ni со CN група како на пример 2. **Слика 17.**

ЧЕКОР 3

Структура по уредување - користете ја опцијата чиста структура и опцијата за 3D оптимизација. **Слика 18 и 19.**



Слика 18. Структура по оптимизација



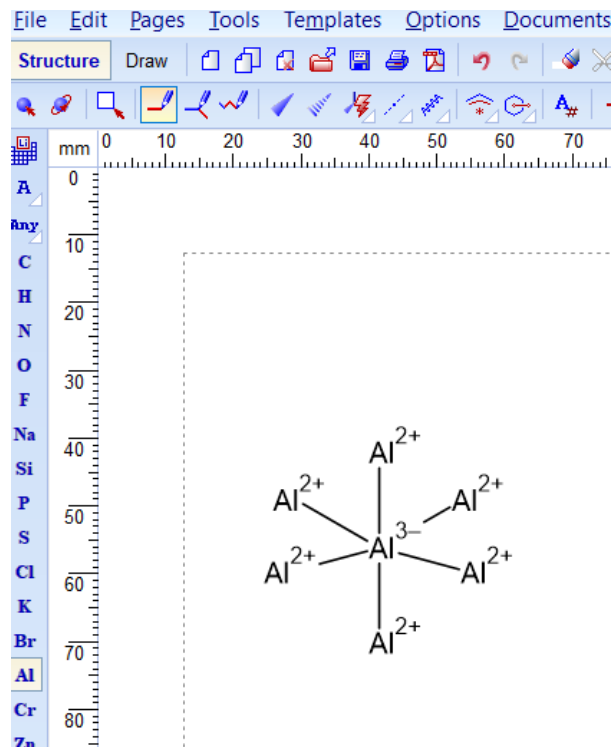
Слика 19. 3D модел

Пример 4 (изборно)

Нацртајте $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$. Структурата е октахедрална. Видете ги чекорите во **пример 1 и 2.**

ЧЕКОР 1

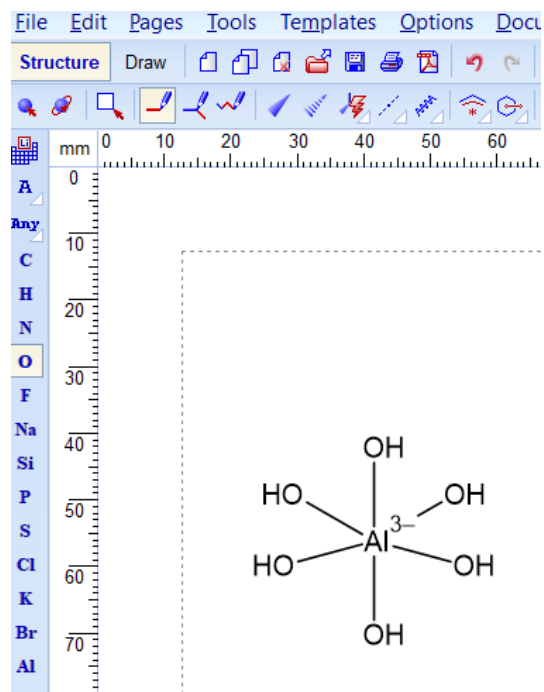
Нацртајте октахедрална структура. **Слика 20.**



Слика 20. Октахедрална структура

ЧЕКОР 2

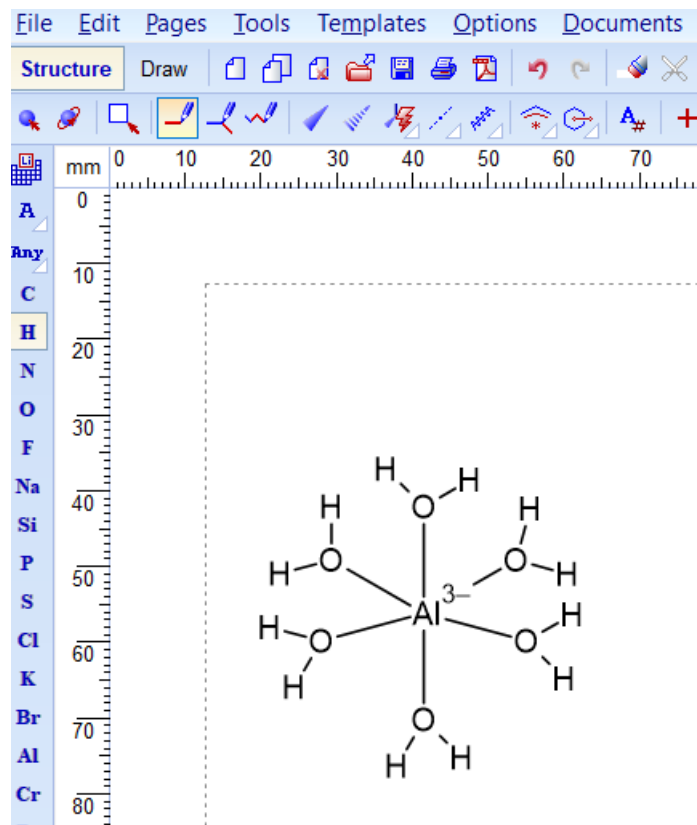
Изберете атом на кислород и заменете 6 алуминиумски атоми (сите освен централниот). **Слика 21.**



Слика 21. Замена на Al со O атоми

ЧЕКОР 3

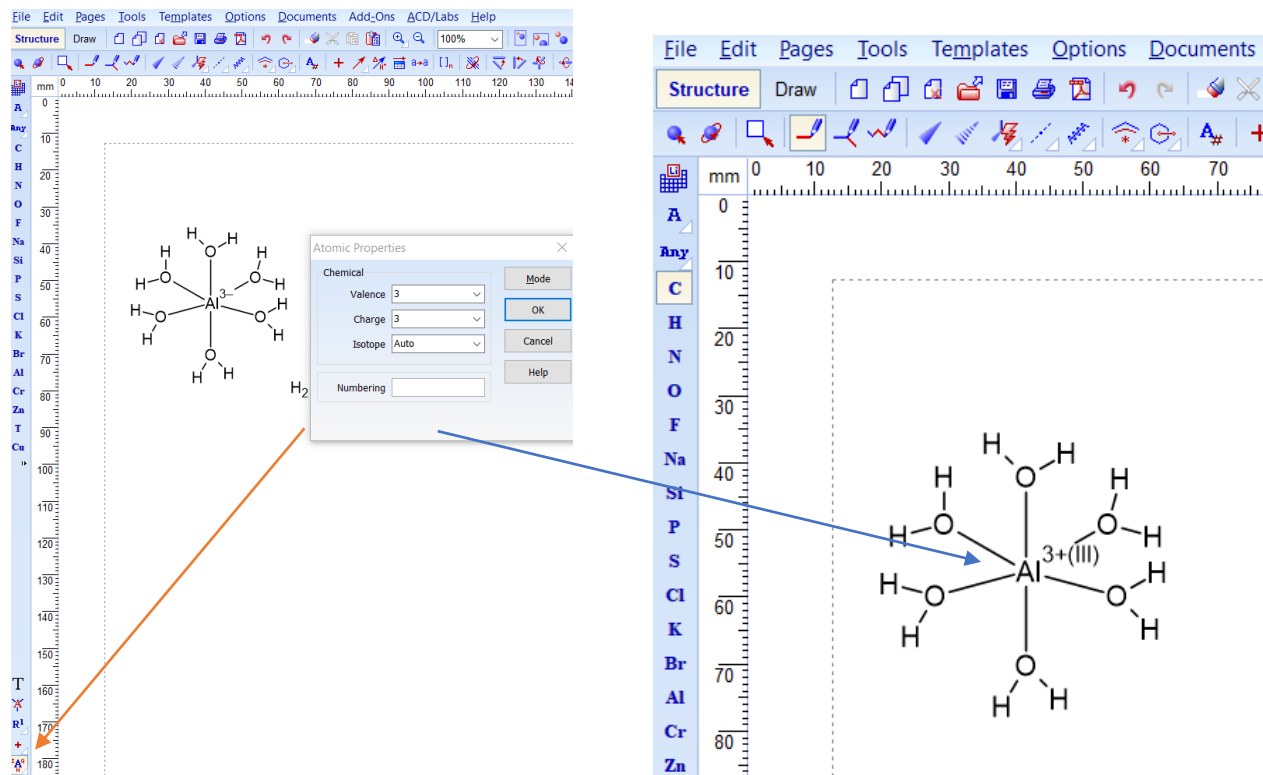
Изберете атом на водород (H) и нацртајте два на секој атом на кислород. **Слика 22.**



Слика 22. Додавање атоми на водород


ЧЕКОР 4

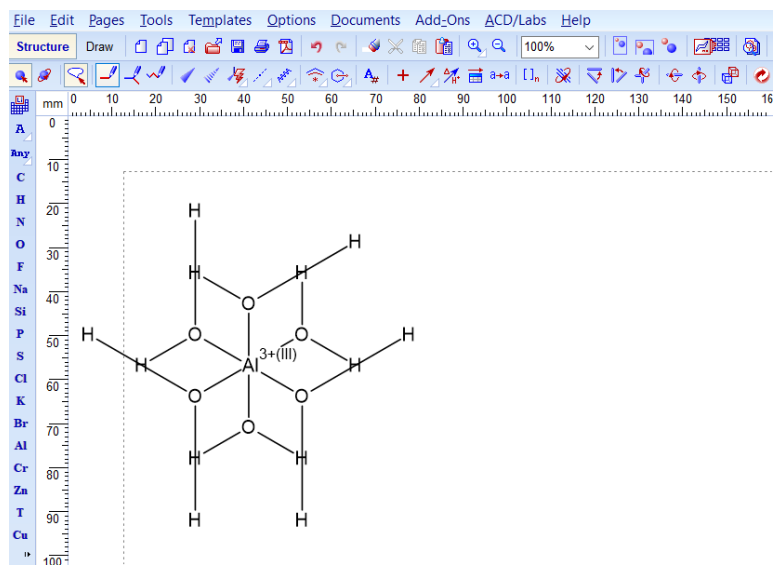
Избирање на соодветно полнење за алуминиум. Изберете својства на атом (лентата со алатки од левата страна) и сменете го полнењето. Слика 23.



Слика 23. Додавање соодветно полнење за Al


ЧЕКОР 5

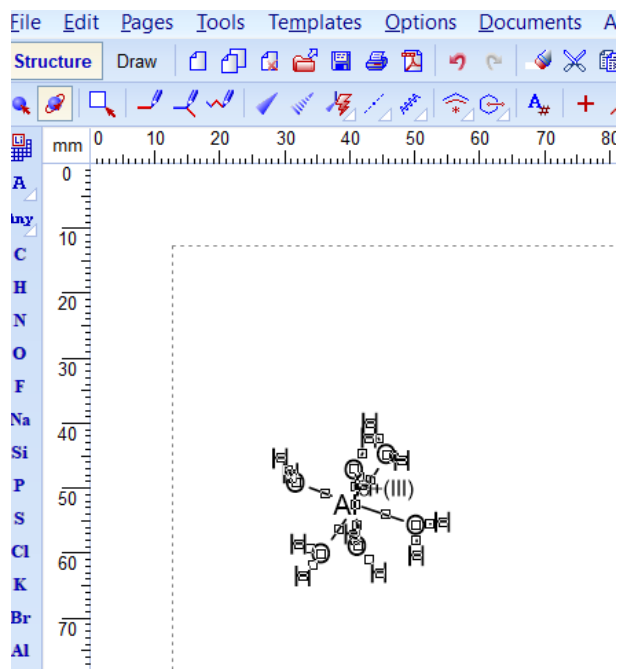
Исчистете ја структурата со користење на . Слика 24.



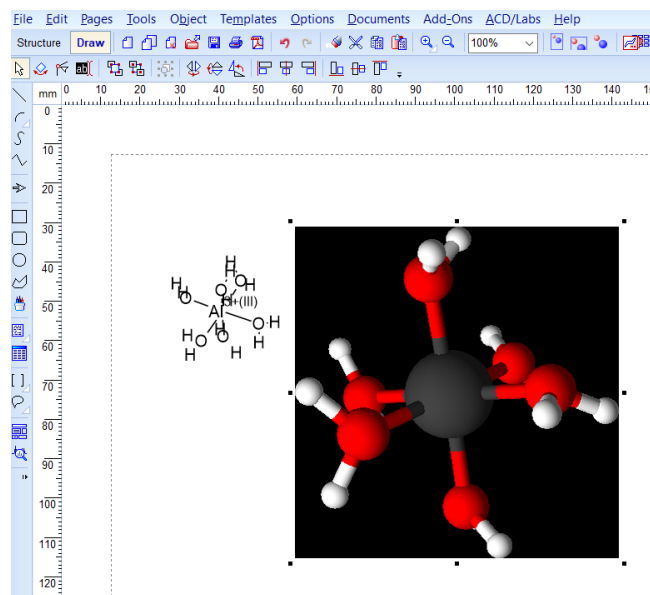
Слика 24. Структура по уредување

ЧЕКОР 6

Прикажете ја добиената структура во три димензии со тоа што прво ќе ја изберете, а потоа ќе кликнете на опцијата  на лентата со алатки. Ќе се отвори нов прозорец (*3D Прегледувач*) со 3D приказ на молекулот. **Слика 25 а) и б).**



a



b

Слика 25 а), б). Оптимизирана и 3Д структура на соединението

1.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

1. Најдете пример за обоен координациски јон. Нацртајте го. Опишете ја неговата структура и дајте го координацискиот број. Наведете го типот на лигандот (монодентат или...). Потоа претставете го ова соединение во 3D, оптимизирајте го и зачувајте го во компјутерот.
2. Истражете ја примената на комплексни соединенија во секојдневниот живот. Изберете една молекула за да го прикажете во програмата ChemSketch. Запишете ја во тетратка примената на избраното соединение во секојдневниот живот. Зачувајте ја оптимизираната 2D и 3D структура на овие молекули во вашиот компјутер.
3. Нацртајте пример за бидентатен лиганд на пример 1,2-диаминетандихлороплатинум(II).

1.5. Примери на задачи за оценување на учениците

1. Нацртајте го следното соединение: $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$ и неговиот геометриски изомер. Именувајте ги изомерите и типот на лигандите и направете го следново:
 - а) прикажете ја структурата на соединението во *3D прегледувачот*.
 - б) прикажете ја структурата на соединението во *3D прегледувачот* користејќи стапчиња и топки.
 - в) определете го аголот на врската помеѓу атомите.
 - г) зачувајте ги и 2D и 3D структурата на соединението на работната површина на компјутерот.
2. Нацртајте го следното соединение $[\text{AuCl}_2\text{Br}_2]^-$. Определи дали овој јон има геометриски изомери. Доколку ги има, нацртајте ги и прикажете ја структурата во *3D прегледувачот*.

ПРИРАЧНИК ЗА НАСТАВНИЦИ – ChemDM ЦРТАЊЕ НА ЛАБОРАТОРИСКИ АПАРАТУРИ

1.) РАЗРАБОТКА НА ИЗБРАНИТЕ ПОГЛАВЈА

Наставна единица: Цртање на лабораториски апаратури
Наслов на тема: Ротационен вакуумски испарувач
Предвиден број на часови: 2

1.1. Теоретски вовед

Испарувањето е процес во кој течната супстанција се трансформира во гасовита. Ова се користи за сушење на цврста супстанција, за одвојување на течност од раствор во таканаречените испарувачи. Ротационен вакуумски испарувач (ротавап) е лабораториска апаратура која се користи за брзо испарување на големо количество растворувач и добивање на цврста или неиспарлива течна супстанција растворена во него. Ротационите вакуумски испарувачи се сложени лабораториски апаратури кои се состојат од кондензатор (ладило), заоблена колба за испарување, колба за примање на дестилатот, погонски мотор, држач за позиционирање на апаратот и електрична грејна бања. За да се постави системот под намален притисок се приклучува вакуумска пумпа. Ротавап првенствено се користи за едноставна вакуумска дестилација, кристализација, сушење, испарување или концентрација на раствори. Вообичаената лабораториска апаратура за ротационен вакуумски испарувач е прикажана на **Слика 1**.



Слика 1. Лабораториски ротавап

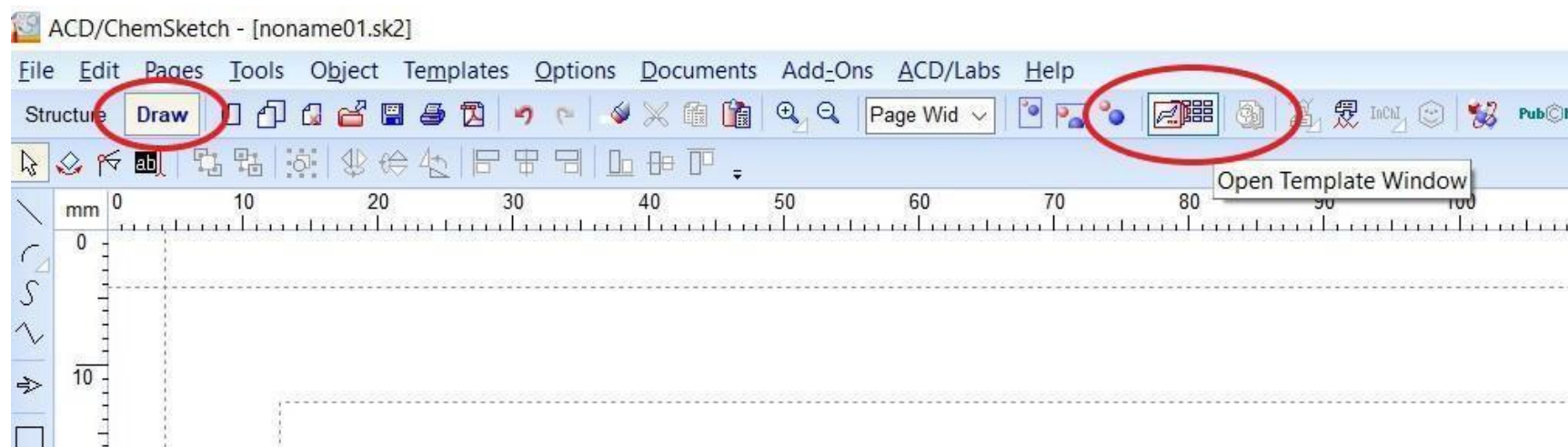
1.2. Образовни резултати

- дизајнирање на вакуум ротациона испарувачка апаратура во ChemSketch програмата.
- уредување, ротирање, превртување и порамнување на предметот
- вметнување и уредување ознаки
- зачувување на креираната шема од апаратурата во компјутер
- уредување на зачуваната шема
- дизајнирање на слични апаратури

1.3. Инструкции за користење на програмата ChemSketch

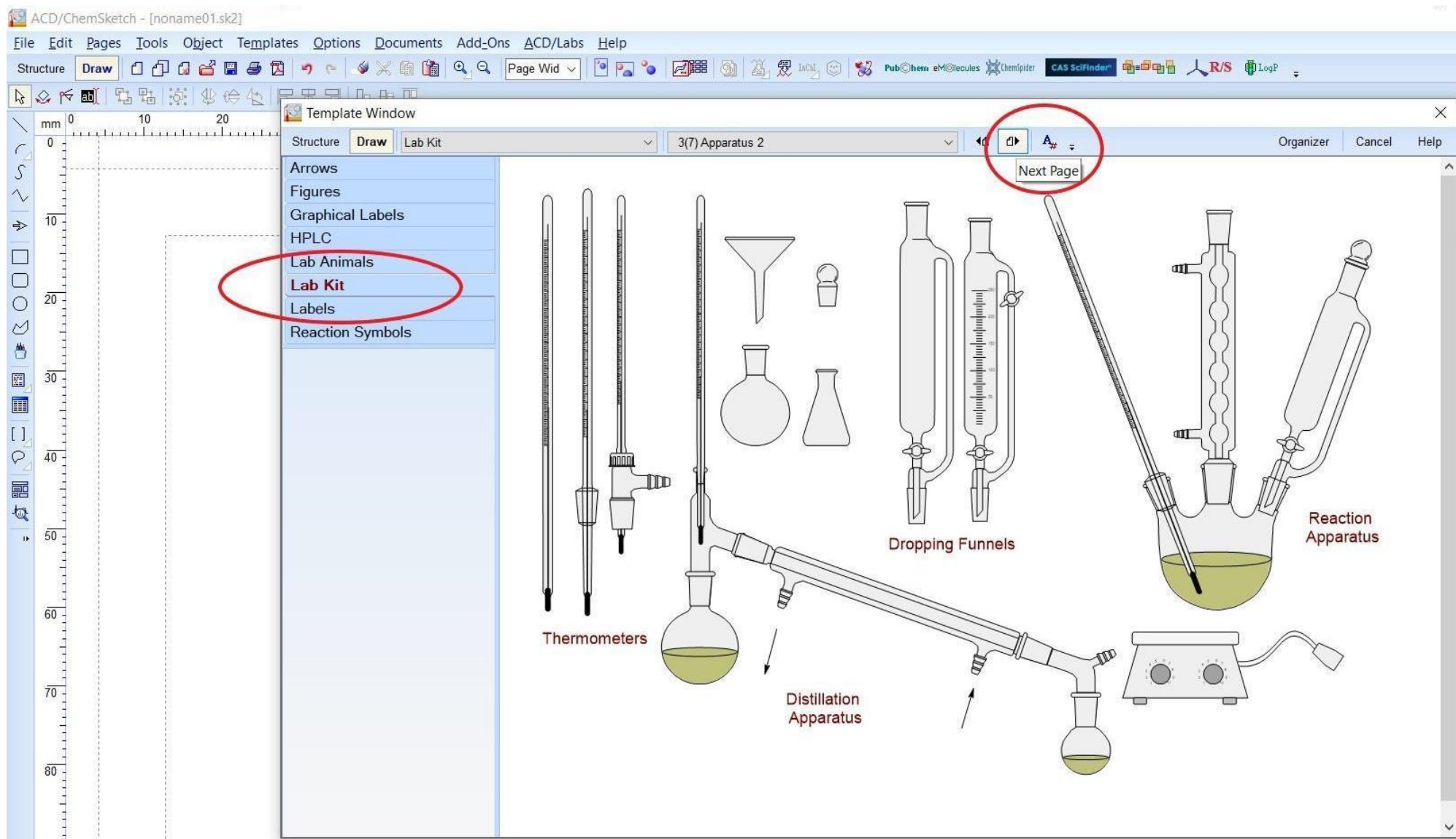
ЧЕКОР 1

Прво ќе се запознаеме со својствата на софтверот. Префрлете се на режимот „Цртање“ и Отвори го прозорецот со шаблон. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 2**.



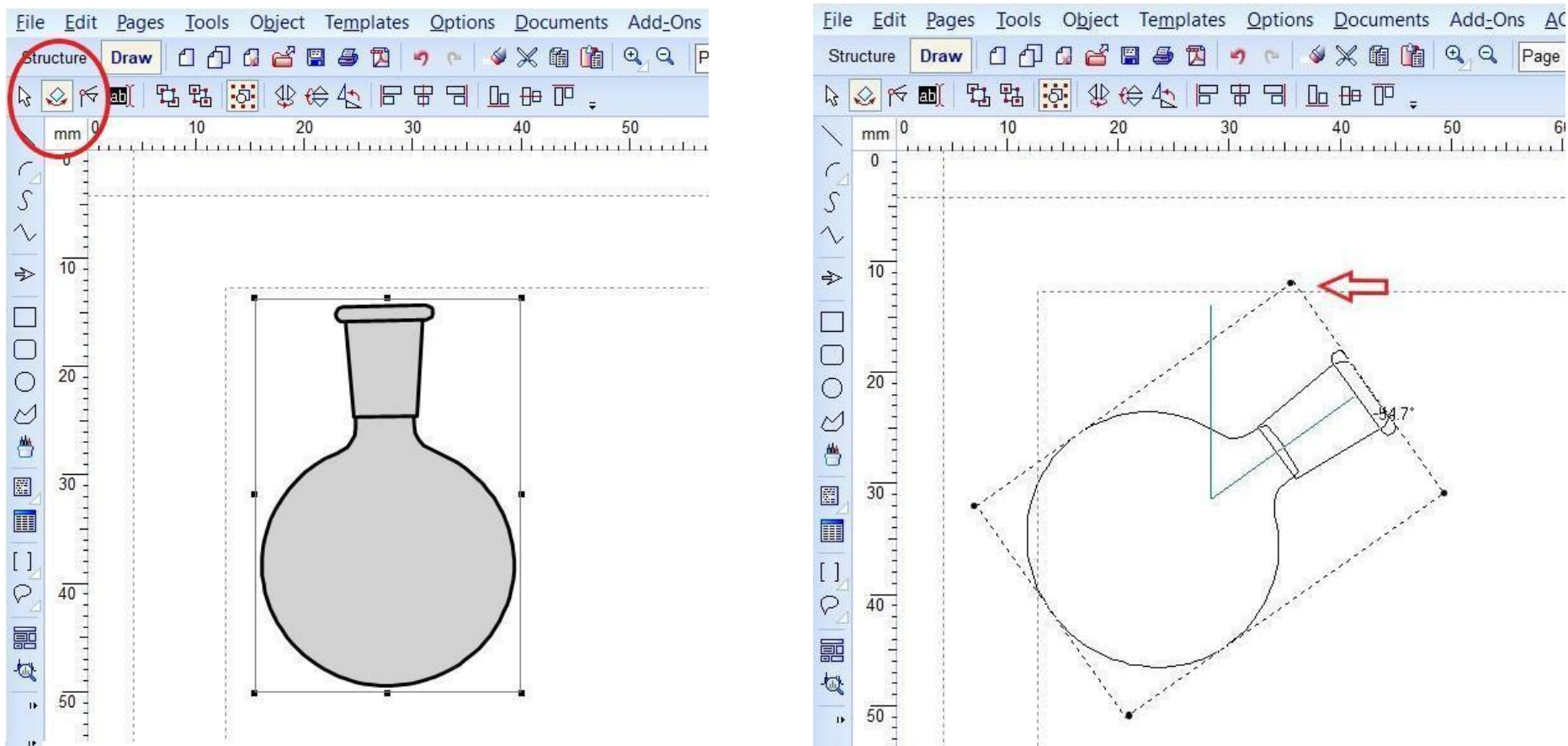
Слика 2. Прв чекор во софтверот ChemSketch (лабораториски комплет)

Во „Лабораторски комплет“ изберете стаклени садови потребни за склопување на избраниот апарат, започнете со колби со заоблено дно, потоа штитник за прскање, кондензатор Греам и редуцирачки адаптер. Користете го копчето ESC за да го отстраните избраниот предмет! (Слика 3) го прикажува изборот на лабораториски комплет и движењето во менито.



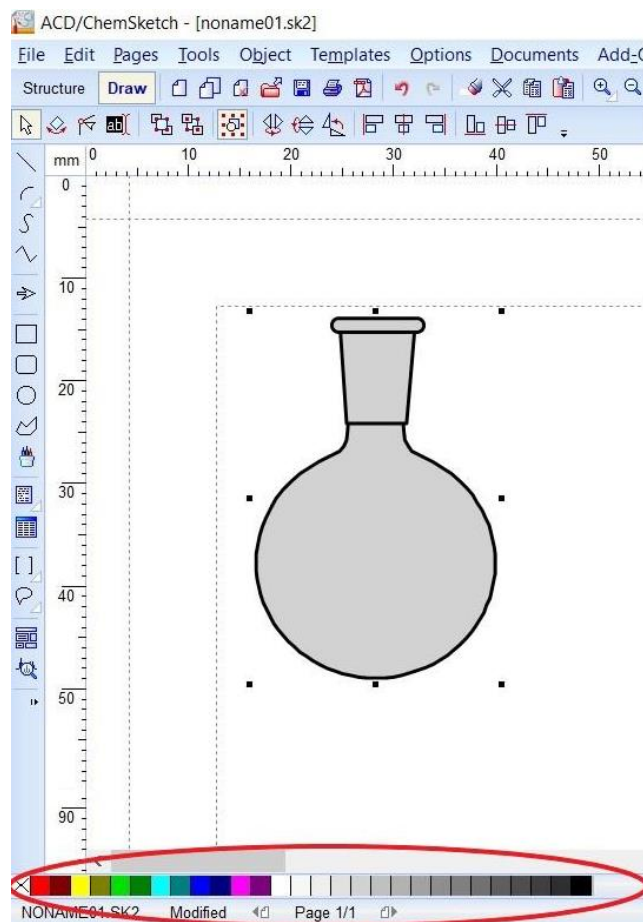
Слика 3. Лабораторски комплет

Ротирање или превртување на избраниот предмет е можно со помош на функцијата во горниот лев агол. **Слика 5** ги прикажува овие опции.



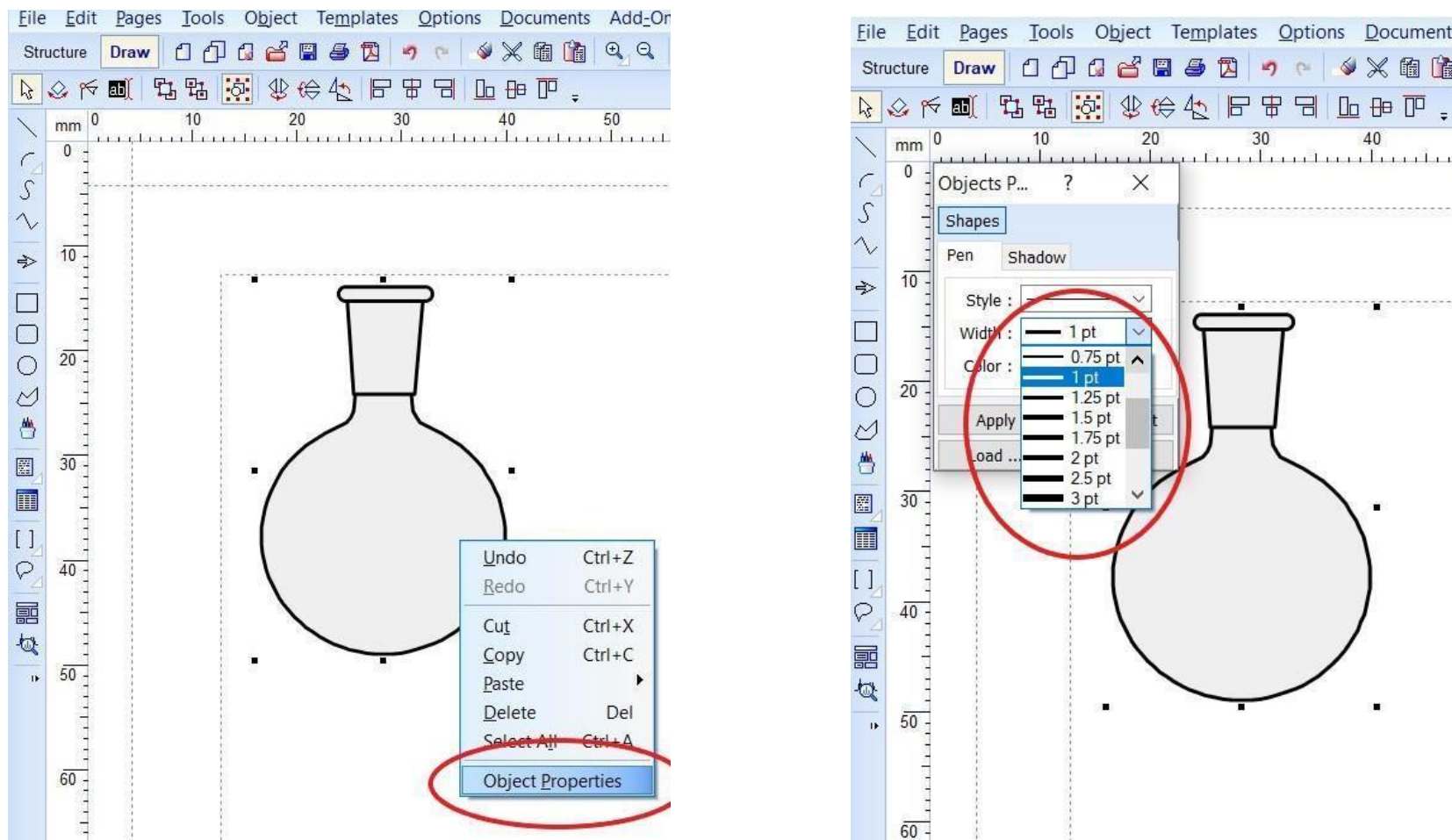
Слика 5. Ротирање или превртување на избраниот предмет

За промена на бојата на површината на избраниот предмет, можно е да се користи палетата на бои, која се наоѓа во левиот дел од долната статусна лента (Слика 6).



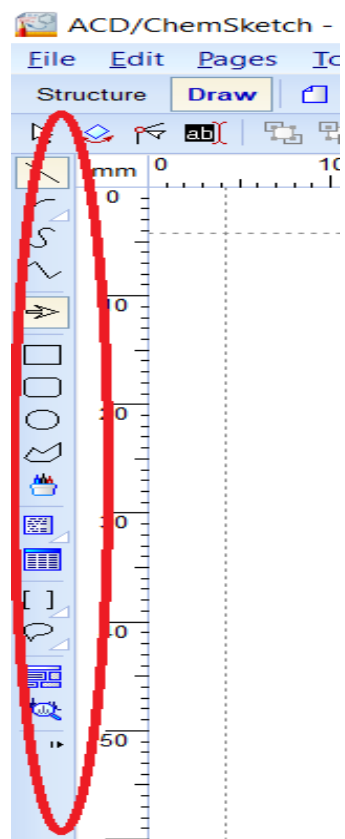
Слика 6. Промена на бојата на површината

Доколку кликнете со десното копче на избраниот предмет, ќе се појави мени што покажува што сакаме да правиме со избраниот предмет. Доколку ја избереме ставката *Својства на прибор*, можеме да ја смениме бојата на линијата на контурата или нејзината дебелина и дизајн (цврста линија, испрекината). Тоа е прикажано на **Слика 7**.



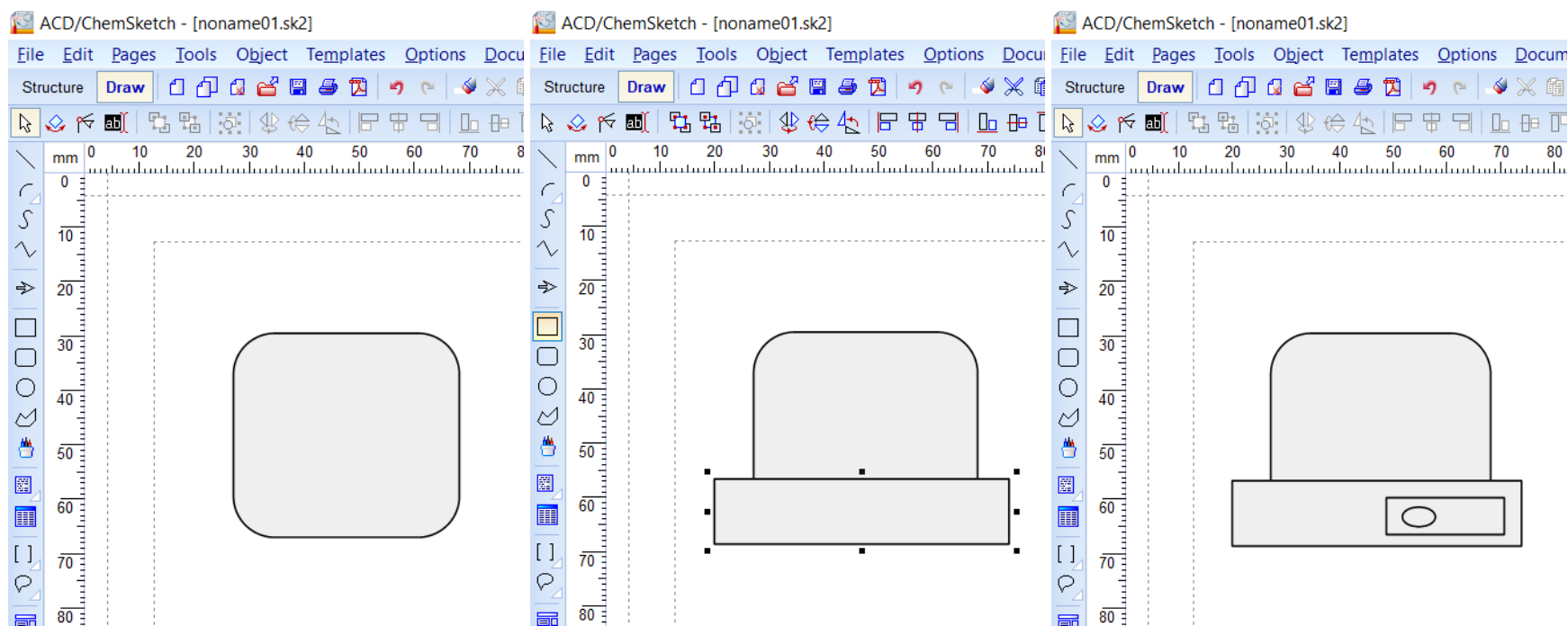
Слика 7. Промена на својствата на предметот

Делови од апаратурата кои не се стандардизирани не можат да се најдат во менито (на пр. сталак, држачи...) може да се претстават со помош на геометриски форми во менито на страничната лента, што е прикажано на **Слика 8**.



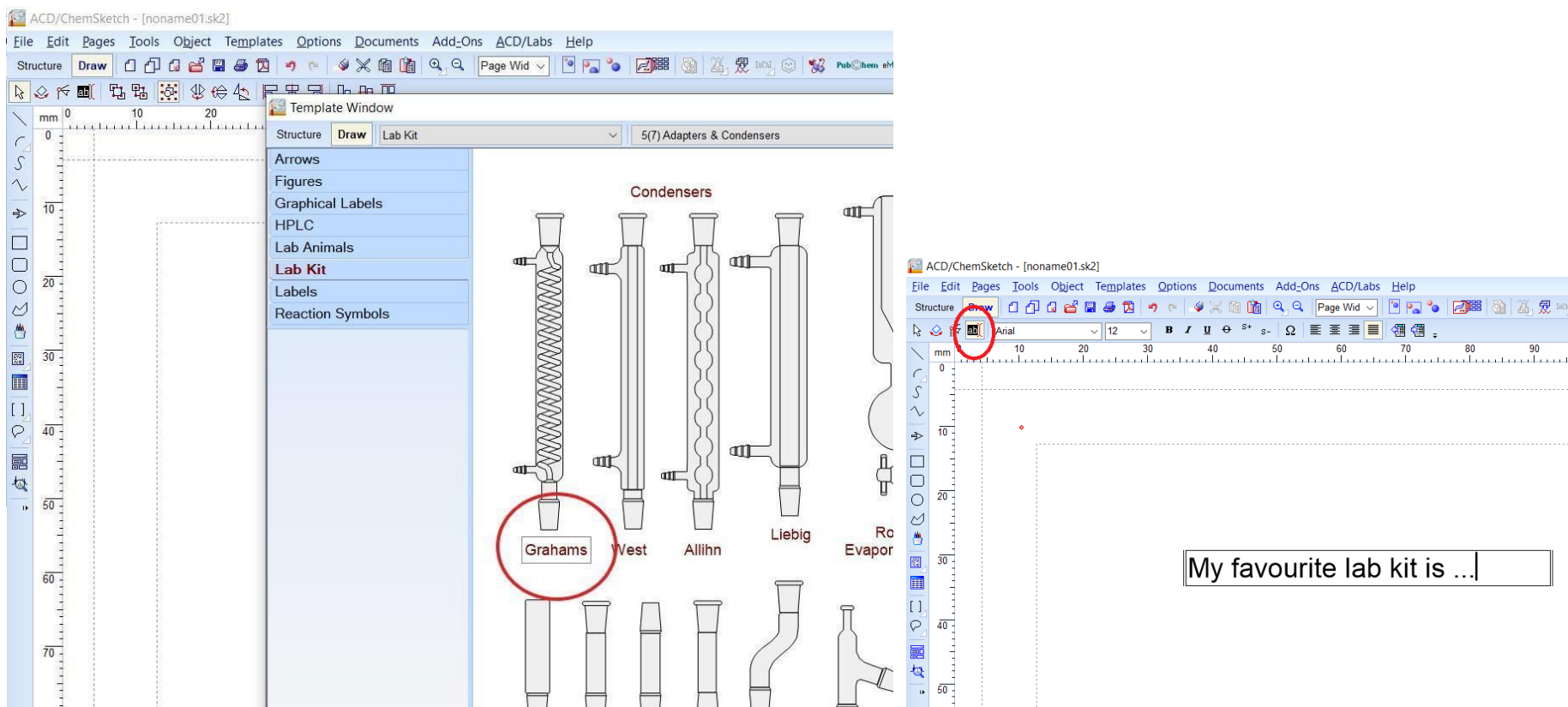
Слика 8. Мени на страничната лента во софтверот ChemSketch

Со вметнување едноставни форми, можете да составите на пример водена бања, која исто така може да се најде во дизајнот на нашата опрема. Исто така, можно е да се сменат бојата и дебелината на линијата за лабораториски прибор и форми вметнати на овој начин - како на **Слика 9**.





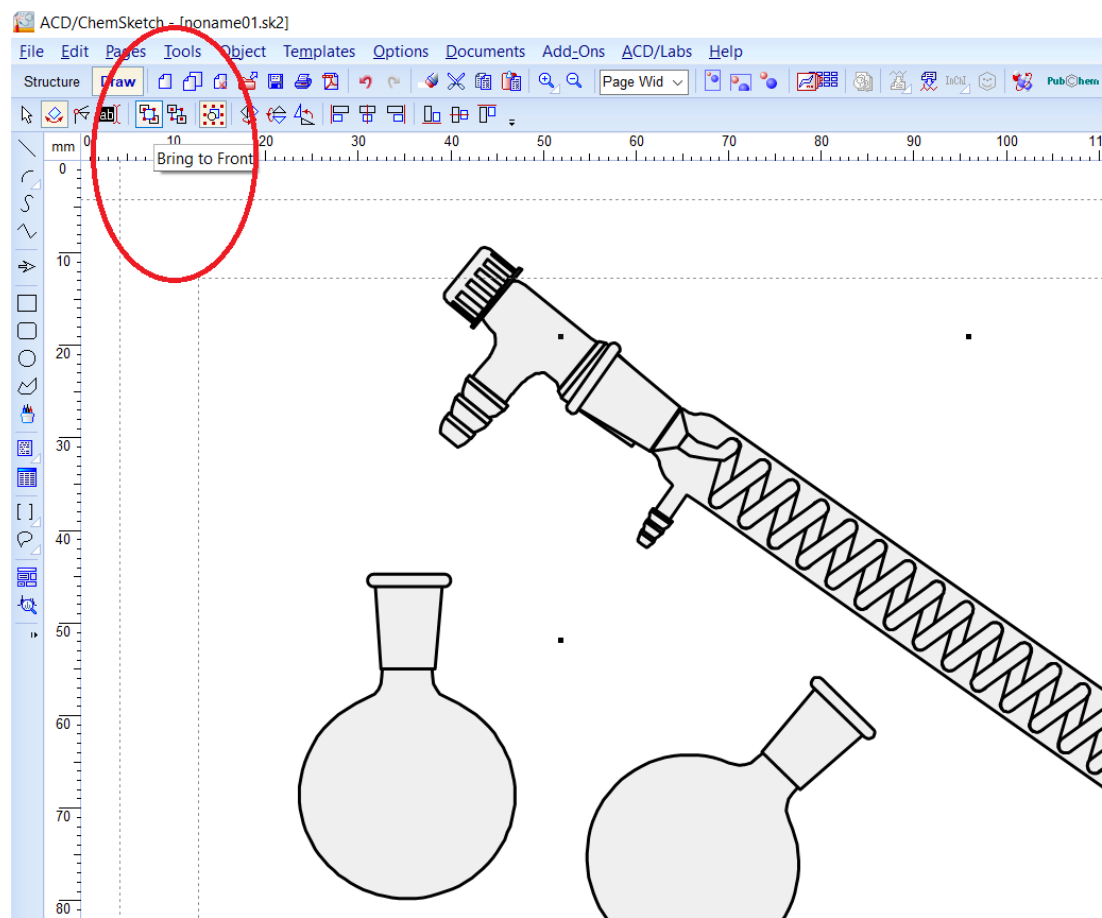
Слика 9. Создавање на нестандартни форми на лабораториски прибор од апаратура

Како дел од креирањето на лабораториски извештаи, неопходно е да се вметнат и имињата на поединечните делови од лабораторискиот прибор што ја сочинуваат апаратурата. Постапката е едноставна - или можеме да го користиме истото мени и на ист начин како што го користиме за лабораториска стакларија или можеме да вметнеме поле за текст и рачно да го додадеме рачно. Споменатата постапка е прикажана на **Слика 10**.



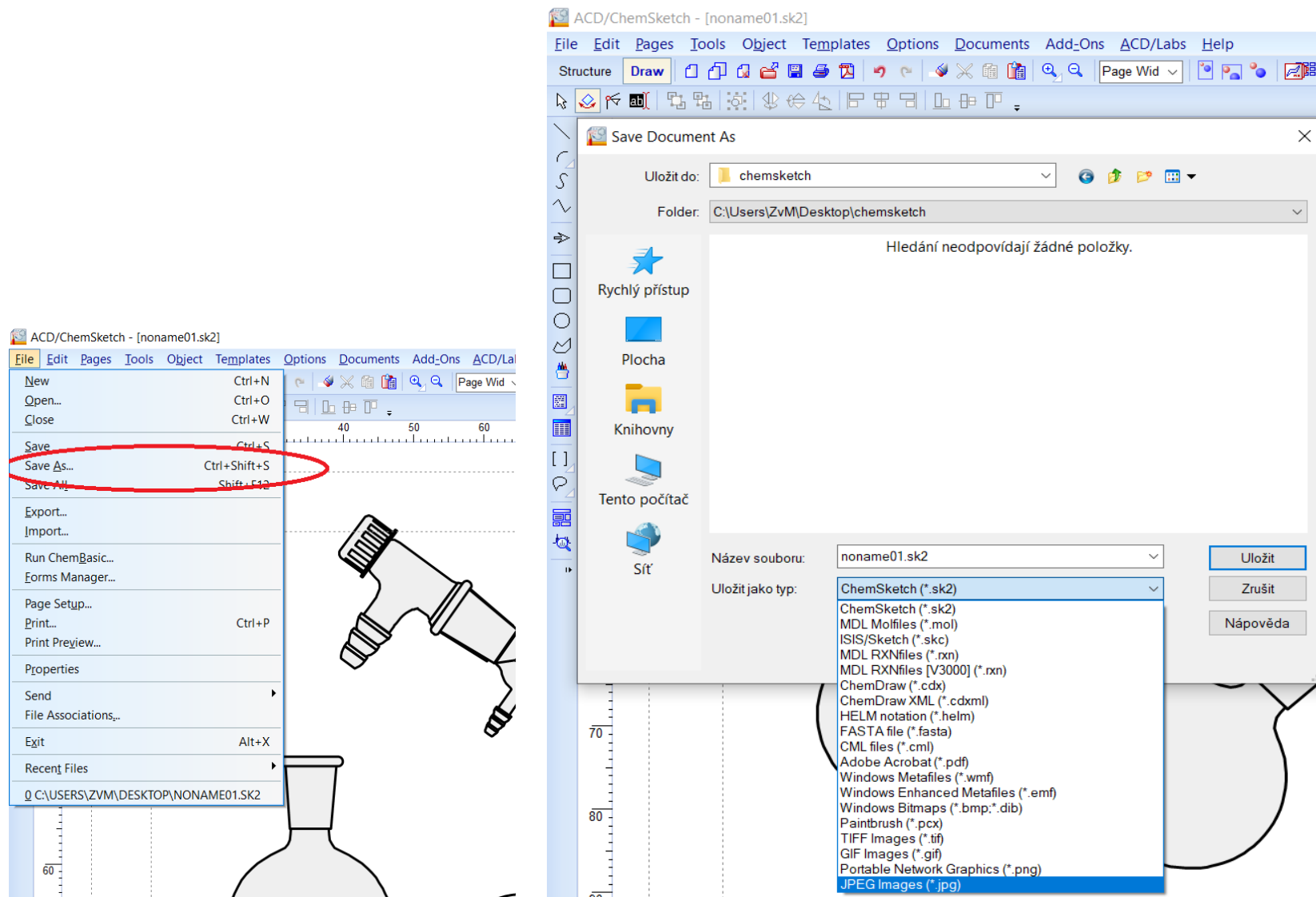
Слика 10. Се внесува името на предметите

Поединечните делови од кои ја подготвуваме апаратурата може да се преместат во преден план или заднина, според тековните преференци. Ги користиме копчињата  Премести напред  или Премести назад како што е прикажано на **Слика 11**.



Слика 11. Преместување на лабораториски прибор во преден план или позадина

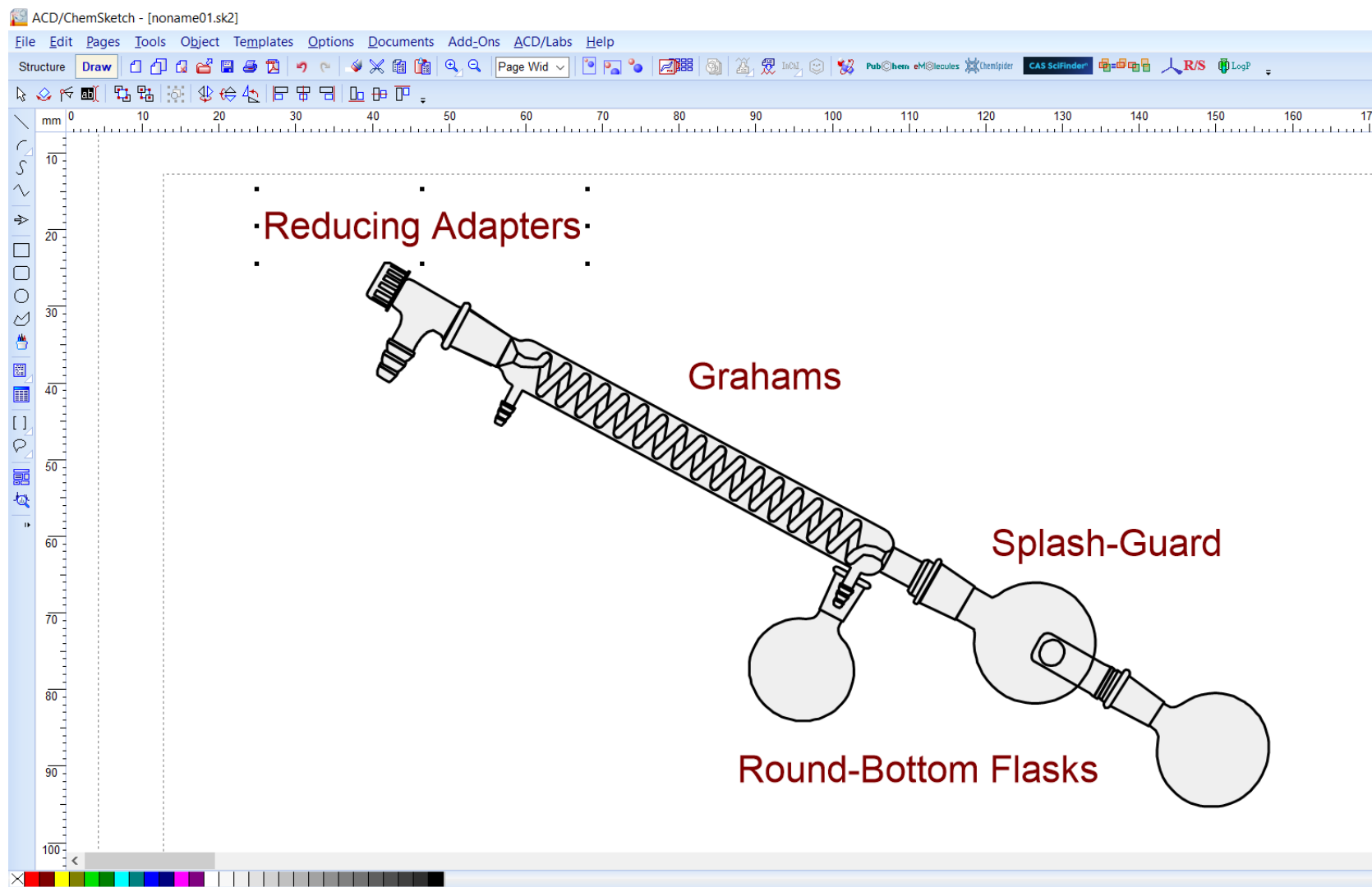
Зачувувањето на подготвената апаратура е можно на неколку начини - за понатамошно уредување потребно е направеното да се зачува како работна книга ChemSketch *.sk2.a за да го користиме на пример во лабораториските извештаи, можеме да ја зачуваме подготвената апаратура во jpg формат – овие опции се споменати на **Слика 12**.



Слика 12. Опции за зачувување проекти во софтверот ChemSketch.

ЧЕКОР 2

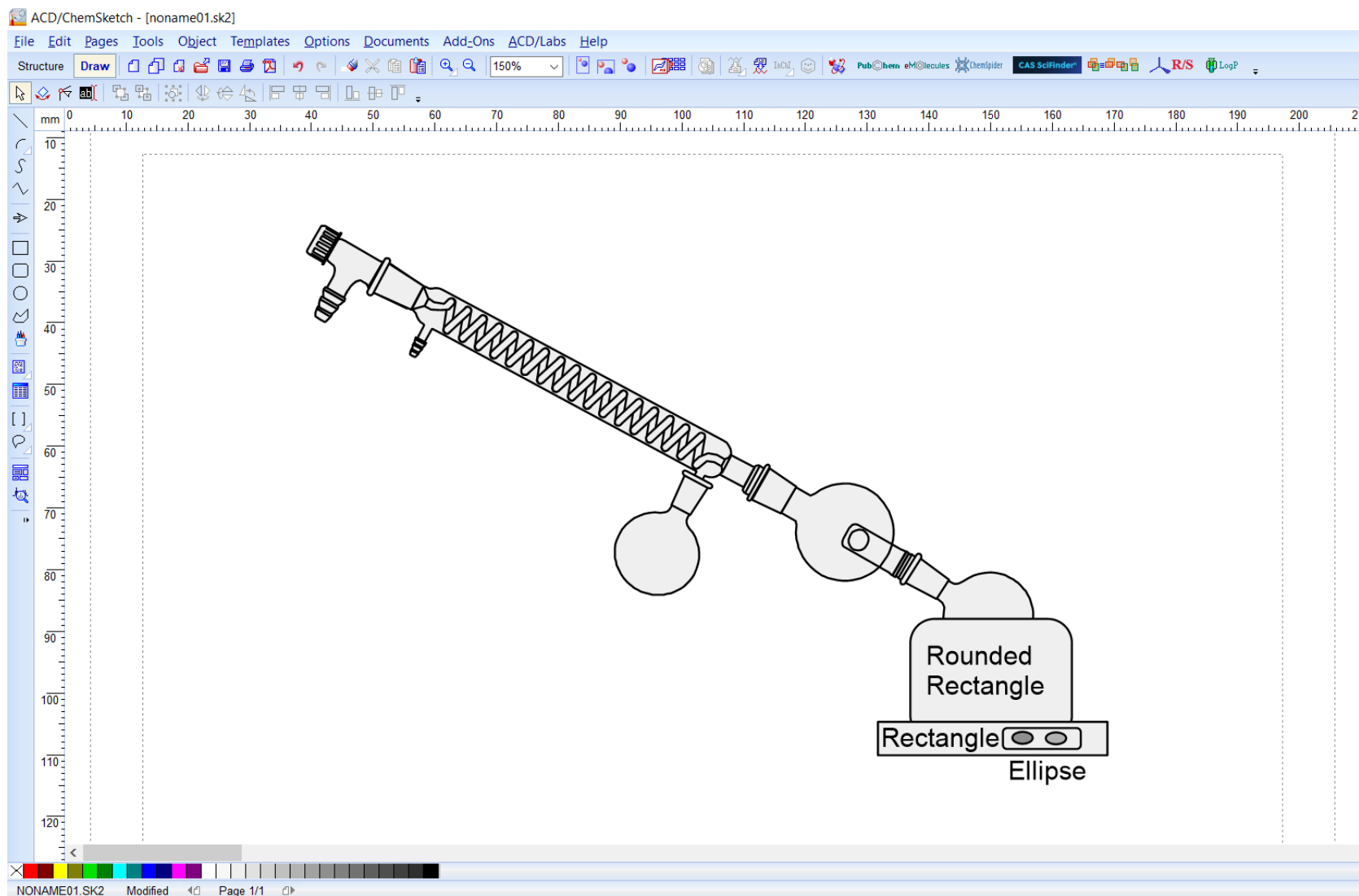
Склопување на ротационен испарувач. Според претходно опишаните чекори, изберете го соодветниот лабораториски комплет и поврзете го како на Слика 13.



Слика 13. Лабораториски комплет кој се користи за создавање на ротационен испарувач

ЧЕКОР 3

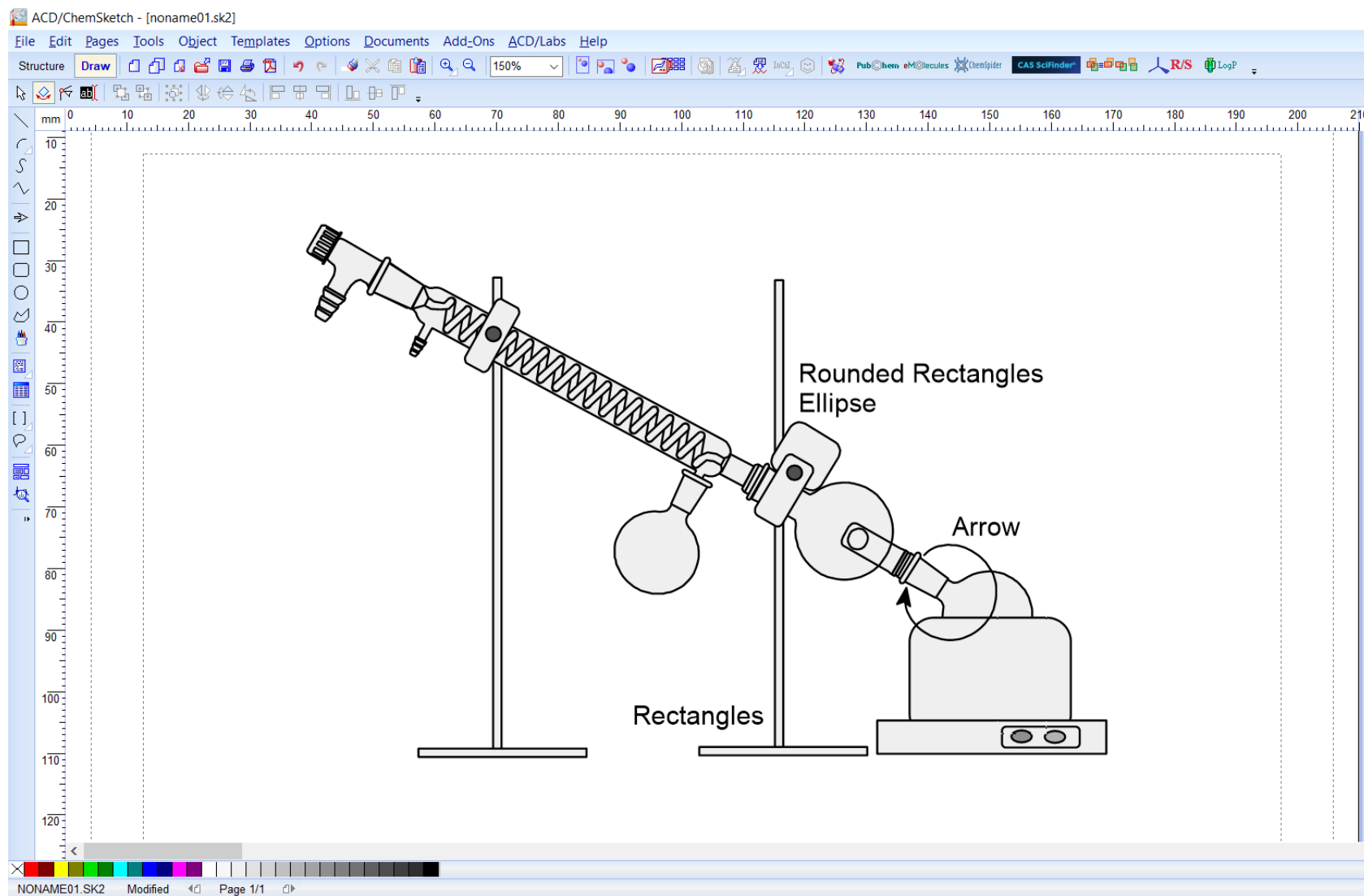
Направете го со помош на страничниот лист прикажан на следната **Слика 14** долниот дел од испарувачот, кој ја прикажува водената бања и нејзината контрола.



Слика 14. Создавање на водена бања за испарувач

ЧЕКОР 4

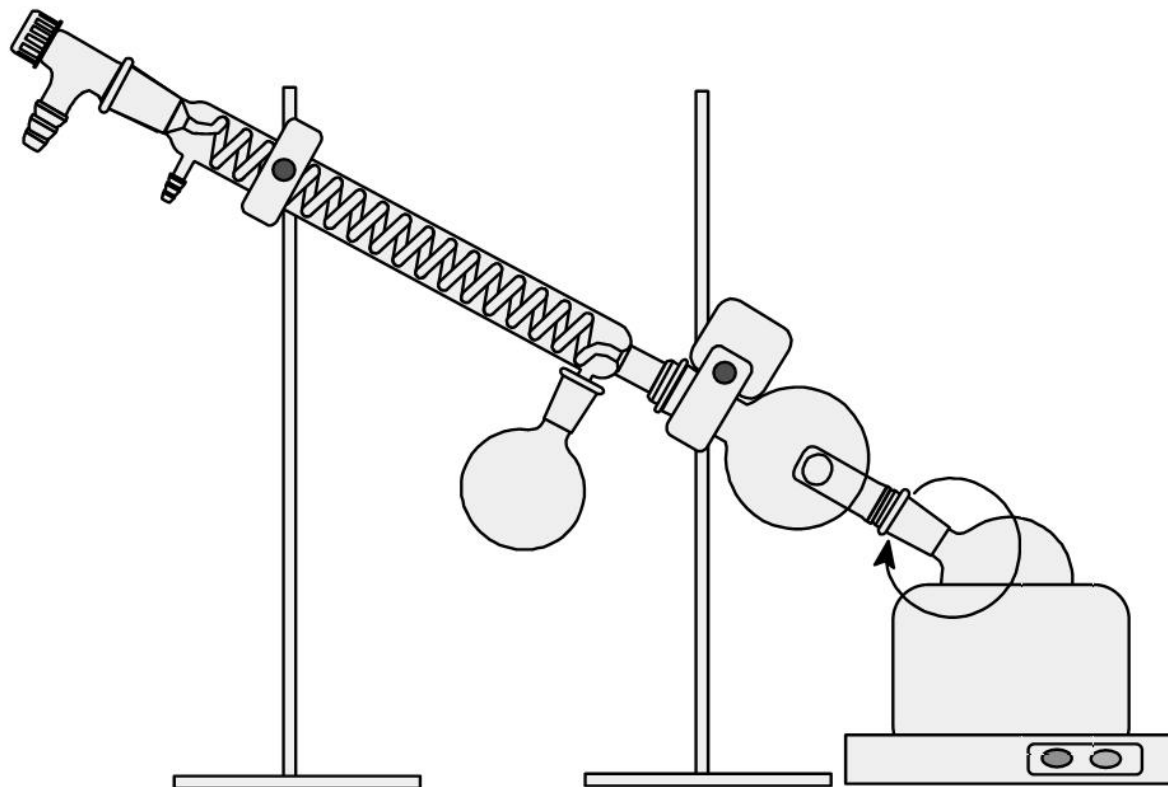
Во следниот чекор, нацртајте го држачот, стакалот и користете ја стрелката за да ја прикажете насоката на движење на ротацијата на испарувачот како на Слика 15.



Слика 15. Комплетирање на шемата на ротационен испарувач со дополнителна опрема

ЧЕКОР 5

Финалниот изглед на дизајнираниот ротационен апарат за испарување е прикажан на **Слика 16**.



Слика 16. Финален изглед на ротациониот испарувач создаден во софтверот ChemSketch

1.4. Примери на задачи за обработка на наставна содржина

Најдете индустриски употреби на дестилаторски колони во преработката на нафта. Фокусирајте се на технологијата, обидете се да ги замислите поединечните делови на индустриската преработка на нафта и користете го Chemsketch за да нацртате дел од процесот на преработка на нафта.

Поставете ги поединечните делови од колоната за дестилација на празна страница од програмата ChemSketch и обидете се да ги именувате поединечните делови.

Потоа поврзете ги сите делови и уредно наредете ги.

Споредете го резултатот од вашата работа со задачата и консултирајте се со резултатот со предавачот.

1.5. Примери на задачи за оценување на учениците

Создадете и дизајнирајте едноставен апарат за дестилација.

Наведете ги поединечните делови од технолошката шема и објаснете го нивниот принцип и употреба при дестилација.

Соберете ги и порамнете ги сите делови.

Опишете го процесот на дестилација и разговарајте за резултатите од работата со наставникот.