






Priručnik za nastavnike – ChemDM

1) UVOD U PREDMET

Predmet se temelji na najnovijim pristupima i tehnikama poučavanja, a digitalizacija nastavnog procesa približava učenicima nastavni sadržaj. Proces učenja je dinamičniji i interaktivniji, a učenici dobivaju potpuno drugačiji uvid u kemijske procese koje će pomoću programa *ChemSketch* „oživjeti“ u 3D. U sklopu upoznavanja s radom u programu, učenici bi upoznali sve mogućnosti koje nudi program *ChemSketch*, naučili koristiti ključne funkcije koje program pruža na primjerima strukture različitih organskih spojeva. Također, učenici će koristiti program za prikaz pribora za laboratorijske vježbe te slaganje aparatura za različite pokuse, što je posebno korisno učenicima prilikom pisanja laboratorijskog dnevnika tijekom redovne nastave kemije.

2) OPIS PROGRAMA – *ChemSketch*

- *DrawNormal* je zadani alat kada se program pokrene. S aktivnim ovim alatom mogu se jednostavno crtati normalni ili razgranati lanci i zamijeniti nacrtani atomi drugim atomima iz periodnog sustava elemenata.
- *DrawContinuous* vrlo je koristan za dodavanje novih atoma u postojeću strukturu molekule. Treba imati na umu da se, kada je ovaj alat aktivan, mogu nacrtati kemijske veze samo s odabranim atomom.
- Crtanje dvostrukih i trostrukih veza – postavljanjem ikone miša na posljednju nacrtanu kemijsku vezu pojavljuje se pravokutnik oko te veze, a zatim se klikom na nju formira dvostruka veza. Još jednim klikom može se nacrtati trostruka veza.
- Poništavanje prethodno napravljenih radnji kako bi se radni prostor vratio na ono što je bilo prije zadnje promjene.
- Brisanje pojedinačnih atoma - Dok je alat *Delete* () aktivan, klikom na pojedini atom moguće ga je izbrisati iz nacrtane strukture
- Promjena vrste atoma - za zamjenu atoma novim kemijskim elementom čija oznaka nije prikazana na alatnoj traci *Atoms toolbar*
- Crtanje veze između dvaju atoma - Kada je odabran alat *DrawNormal* () ili *DrawContinuous* () , klikom na jedan atom i povlačenjem ikone miša do drugog atoma stvara se jednostruka kovalentna veza između njih.
- Korištenje alata *Clean Structure*– za podešavanje svih duljina veze i međuveznih kutova

- Uređivanje načina označavanja atoma - Alat *Edit Atom Label* () omogućuje zamjenu terminalnih atoma skraćenim kraticama.
- Rotiranje strukturnih fragmenata
- Crtanje lanaca - pomoću alata *DrawChains* () mogu se jednostavno nacrtati ugljikovodični lanci bilo koje duljine jednostavnim klikom miša i povlačenjem duž radnog prostora.
- Određivanje naboja i definiranje aniona i kationa
 - Čišćenje radnog prostora kako bi se omogućio prostor za crtanje nove strukture molekule

3) POPIS ODABRANIH NASTAVNIH TEMA

- Osnove rada u *ChemSketch* softveru
- Kompleksni spojevi
- Alkani i cikloalkani
- Alkeni i alkini
- Areni
- Alkoholi
- Aldehidi i ketoni
- Biomolekule
- Kiralnost i optička aktivnost
- Crtanje aparatura
- Lewisove strukturne formule

3) RAZRADA NASTAVNIH TEMA

Nastavna tema: Uvod
Nastavna jedinica: Osnove rada u <i>ChemSketch</i> softveru
Estimated number of hours: 2

4.1. Teorijski uvod u nastavnu temu

U sklopu ove nastavne teme učenici će naučiti osnovne alate potrebne za rad u programu *ChemSketch*. Poznavanje ovih alata nužno je za postizanje odgojno-obrazovnih ishoda svih sljedećih nastavnih jedinica. Učenici će naučiti crtati jednostavne primjere struktura organskih spojeva, proći kroz različite alatne trake (*General Toolbar*, *Atoms Toolbar*, *Structure Toolbar*) i naučiti različite opcije unutar tih alatnih traka koje *ChemSketch* program može ponuditi.


4.2. Odgojno-obrazovni ishodi: Osnove rada u *ChemSketch* programu

U sklopu ove nastavne teme učenici će naučiti:


- koristiti alate dostupne u programu *ChemSketch* za crtanje molekula željenih organskih spojeva
- upotrebljavati alate za označavanje dijelova molekule ili cijele molekule, alate za rotaciju molekula i pomicanje molekula
- prikazati strukture molekula organskih spojeva u tri dimenzije korištenjem opcije *3D Viewer*
- nacrtati ugljikovodični lanac korištenjem opcija *DrawNormal*, *DrawContinuous*, *DrawChains*
- obrisati dijelove strukture molekule ili cijelu molekulu korištenjem opcije *Delete*
- nacrtati dvostruku i trostruku vezu u spoju
- dodati alkilne skupine na postojeći spoj te mijenjati vrste atoma u strukturi molekule
- poništiti promjene učinjene u programu
- optimizirati strukturu molekule
- nacrtati strukture aniona i kationa korištenjem alata za generiranje naboja

4.3. Upute za korištenje *ChemSketch* programa

a) Korištenje alata *DrawNormal*:

Alat *DrawNormal* () je zadani alat kada se program pokrene. S aktivnim ovim alatom mogu se crtati nerazgranati ili razgranati lanci ugljikovodika i zamijeniti nacrtani atomi drugim atomima iz periodnog sustava elemenata.

PRIMJER 1 Nacrtajte 2-metilpropan i 2-metilbutan koristeći alat *DrawNormal*. Okomito zarotirajte nacrtane strukture molekula.

Provjerite je li alat *DrawNormal* omogućen na alatnoj traci *Structure toolbar* i je li ugljik () odabran na alatnoj traci *Atoms toolbar*.

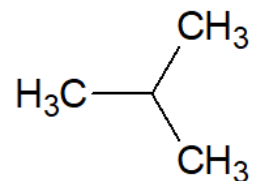
KORAK 1 Kliknite na prazan prostor da nacrtate strukturu molekule metana CH₄.

KORAK 2 Ikonu miša postavite na CH₄ i kada vidite pravokutnik oko formule metana (**slika 1**), kliknite na njega da biste dodali metilnu skupinu i tako nacrtali strukturu molekule etana H₃C—CH₃.



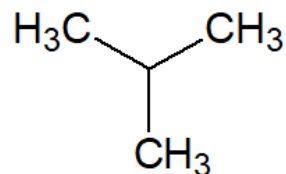
Slika 1. Pravokutnik oko formule metana

KORAK 3 Kliknite dva puta na jednu od -CH₃ skupina kako biste nacrtali strukturu molekule 2-metilpropana prikazanog na **slici 2**.



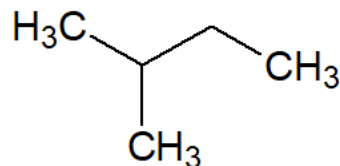
Slika 2. Struktura molekule 2-metilpropana

KORAK 4 Na alatnoj traci *Structure toolbar*, kliknite na *Set Bond Vertically* () , a zatim kliknite na vezu usmjerenu prema dolje kako biste cijelu strukturu zakrenuli kao što je prikazano na **slici 3**.



Slika 3. Zarotirana struktura molekule 2-metilpropana

KORAK 5 Na alatnoj traci *Structure toolbar* kliknite na *DrawNormal* () , a zatim kliknite na krajnji desni atom ugljika kako biste nacrtali strukturu molekule 2-metilbutana (**slika 4**).



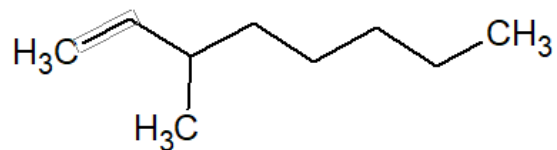
Slika 4. Struktura molekule 2-metilbutana

Napomena: Ugljikovodični lanac će se povećati svaki put kada kliknete krajnji desni atom ugljika. Da biste produžili lanac vodoravno, pritisnite *Ctrl* i držite stisnuto i kada kliknete na atom ugljika.

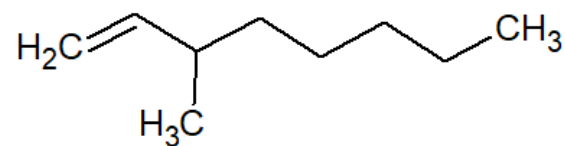
Crtanje dvostrukih i trostrukih veza

Primjer 2 Nacrtajte 3-metilokt-1-en i 3-metilokt-1-in pomoću *DrawNormal*.


KORAK 1 Nacrtajte strukturu molekule 3-metiloktana (**slika 5**) i zatim ikonicu miša postavite na jednostruku vezu između prva dva atoma ugljika iz ugljikovodičnog lanca (vidjet ćete pravokutnik oko veze), a zatim kliknite na nju da napravite dvostruku vezu (**slika 6**).

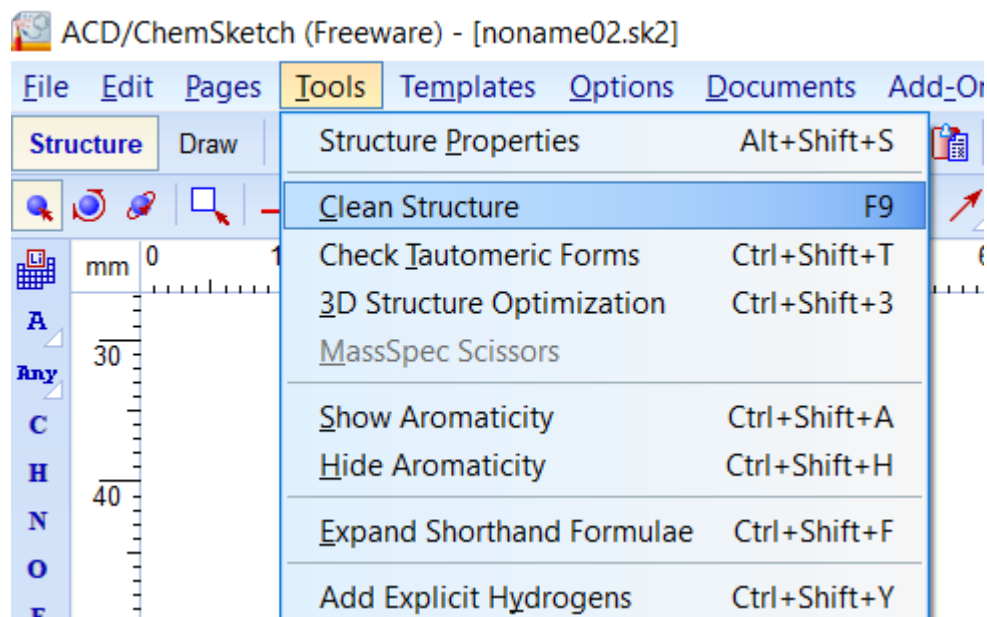


Slika 5. Pravokutnik oko jednostruke veze između prvih dva atoma ugljika

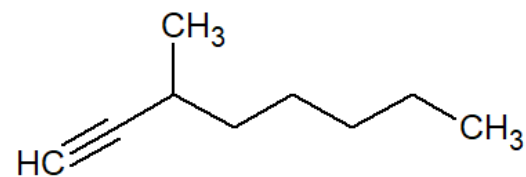


Slika 6. Struktura molekule 3-metilokt-1-en iz ugljikovodičnog lanca.


KORAK 2 Kliknite na prethodno formiranu dvostruku vezu da napravite trostruku vezu. Označite cijelu strukturu klikom na ikonu  i povlačenjem mišem oko cijele strukture. Zatim kliknite *Tools*, a zatim odaberite *Clean Structure* kao što je prikazano na **slici 7a** i **slici 7b**.



Slika 7. a) Alat *Clean Structure*



b) Struktura molekule 3-metil-okt-1-in

KORAK 3 Klikom na *3D Viewer* () prikažite strukturu molekule 3-metil-okt-1-in u tri dimenzije.

KORAK 4 Pokušajte koristiti svaku od mogućnosti rotacije, pomicanja i označavanja molekule koji se nalaze na gornjem dijelu alatne trake:



, a zatim prikažite molekulu na svaki od načina koje program nudi, a mogućnosti su također prikazane na alatnoj traci:



- Klikom na bilo koju od mogućnosti mijenja se način prikaza molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana. Za automatsku rotaciju molekule kliknite na ikonicu

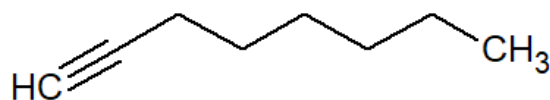


- Za automatsku kontinuiranu izmjenu iz jednog u drugi način prikaza molekule uz rotaciju kliknite na ikonicu

Brisanje pojedinačnih atoma:

Primjer 3 Upotrijebite nacrtanu strukturu 3-metilokt-1-ina iz primjera 2 i obrišite metilnu skupinu iz strukture klikom na *Delete*. Zatim poništite sve promjene napravljene na toj strukturi.

KORAK 1 Kliknite na *Delete* () na alatnoj traci *General toolbar*. Dok je alat *Delete* aktivan, kliknite na ugljikov atom iz metilne skupine. Imenujte dobiveni spoj prikazan na **slici 8**.

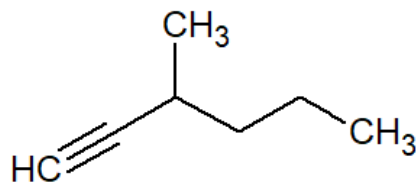


Slika 8. Struktura molekule _____

KORAK 2 Na alatnoj traci *General toolbar*, kliknite *Undo* () kako biste poništili sve promjene.

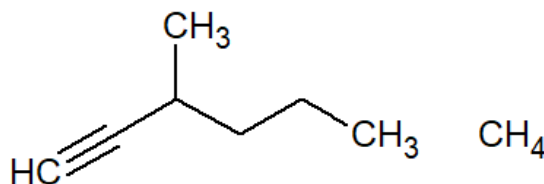
Dodatni alati:

KORAK 3 Ponovno upotrijebite alat *Delete*, ali sada kliknite pretposljednji atom ugljika u glavnom lancu. Sada je etilna skupina uklonjena iz strukture molekule 3-metiloktana. Imenujte nastali spoj prikazan na **slici 9**.




Slika 9. Struktura molekule _____

KORAK 4 Poništite sve promjene i kada opet budete imali strukturu molekule 3-metilokt-1-in, odaberite *Delete* i sada držite pritisnutu tipku *Ctrl* i ponovno kliknite isti atom ugljika. Kao što možete vidjeti na **slici 10**, preposljednji atom je uklonjen dok je terminalni atom ugljika iz glavnog lanca sada odvojen od ostatka spoja.




Slika 10. Kombiniranje tipke *Ctrl* i alata *Delete* zajedno za brisanje preposljednjeg ugljika iz strukture molekule 3-metilokt-1-ina.

KORAK 5 Kliknite *Undo* () da poništite promjene i vratite se na strukturu 3-metiloktana.

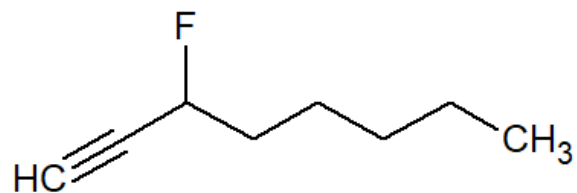
Mijenjanje atoma:

Primjer 4 Zamijenite ugljikov atom iz metilne skupine 3-metiloktana atomom fluora.

KORAK 1 Na alatnoj traci *Atoms toolbar* kliknite *Periodic Table* () za prikaz periodnog sustava elemenata.

KORAK 2 U periodnom sustavu elemenata kliknite na *Fluorine*, a zatim kliknite *OK*. Sada je atom fluora aktivan na alatnoj traci *Atoms toolbar*.

Kliknite atom ugljika iz metilne skupine kako biste ga zamijenili atomom fluora kako biste dobili strukturu prikazanu na **slici 11**. Imenujte taj spoj.




Slika 11. Struktura molekule _____

Napomena:

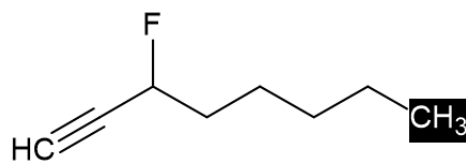
Kada odaberete elemente iz periodnog sustava elemenata, odgovarajući gumbi automatski se dodaju na alatnu traku *Atoms toolbar*. Da biste uklonili ove gumbе s alatne trake *Atoms toolbar*, desnom tipkom miša kliknite alatnu traku *Atoms toolbar* i odaberite *Reset Toolbar* iz izbornika prečaca. U okviru s porukom koji se pojavi kliknite *Yes*. Ovo će ukloniti sve oznake naknadno dodanih kemijskih elemenata osim zadanih.

b) Korištenje alata *DrawContinuous*:

Dok je ovaj alat aktivan, možete povući veze samo iz odabranog atoma.

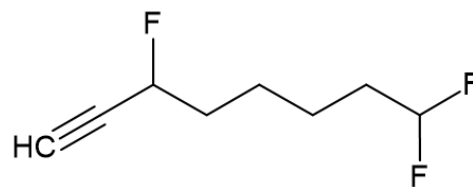
KORAK 1 Na alatnoj traci *Structure toolbar*, kliknite na *DrawContinuous* . Alternativno, možete pritisnuti desnu tipku miša da biste uključili alat *DrawContinuous*.

KORAK 2 Provjerite je li fluor (*Fluorine*) i dalje odabran na alatnoj traci *Atoms toolbar*. Kliknite na krajnji desni atom ugljika u prethodno nacrtanoj strukturi (pogledajte **sliku 12**) da biste ga označili:



Slika 12. Označeni zadnji atom ugljika u strukturi

KORAK 3 Kliknite ponovno na atom ugljika kako bi se formirala kovalentna veza s atomom fluora. Ponovite korake 2 i 3 za isti atom ugljika kako biste formirali još jednu kovalentnu vezu ugljika s drugim atomom fluora (**slika 13**). Imenujte dobiveni spoj.



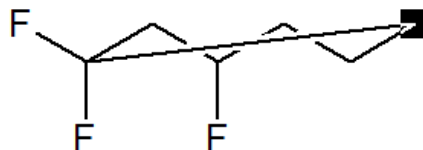
Slika 13. Struktura molekule _____

Crtanje veza između atoma i korištenje alata *Clean Structure*.

Primjer 5 Nacrtajte jednostruku vezu između terminalnih atoma ugljika u strukturi 1,1,3-trifluoroheksana i zatim kliknite *Clean Structure* za tu strukturu. Alatom *Clean Structure* standardiziraju se duljine svih veza i kutova.

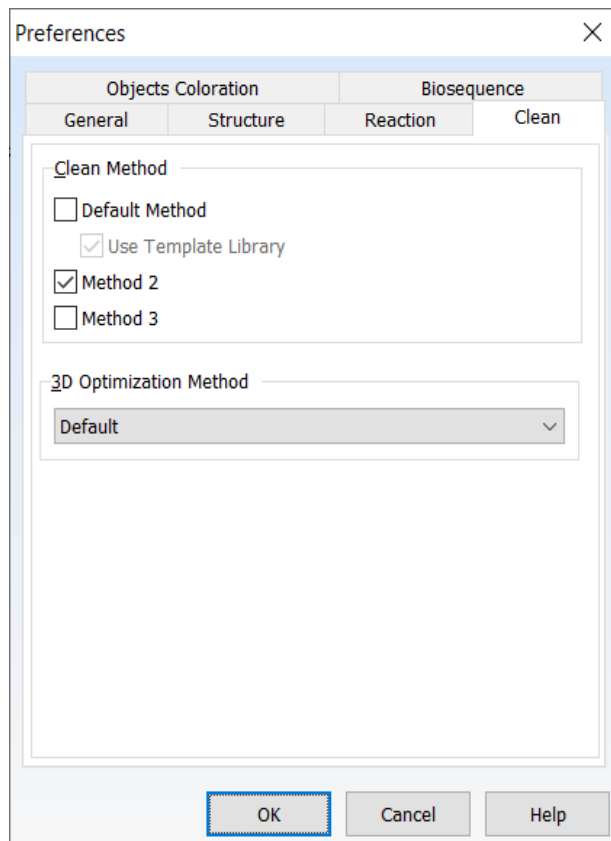
KORAK 1 Kliknite na *DrawContinuous* i nacrtajte 1,1,3-trifluoroheksan.

KORAK 2 Povlačenjem mišem od jednog atoma do drugog stvara se jednostruka veza između njih. S aktivnim alatom *DrawContinuous* (možete nacrtati i s alatom *DrawNormal*), stavite ikonu miša na krajnji atom ugljika i i držanjem klika povucite do drugog terminalnog ugljika da biste dobili jednostruku vezu između tih dvaju atoma ugljika. (slika 14).




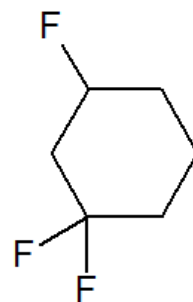
Slika 14. Povlačenje mišem s jednog krajnjeg ugljika na drugi kako bi se stvorila jednostruka veza između njih

KORAK 3 Iz izbornika *Options* odaberite *Preferences*, a zatim na kartici *Clean* prozorčića *Preferences*, koji se pojavi, postavite iste opcije kao što je prikazano na slici 15.




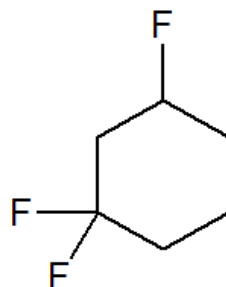
Slika 15. Postavljanje postavki za alat *Clean Structure*

KORAK 3 Kliknite na *OK* kako biste zatvorili prozorčić. Na alatnoj traci *Structure toolbar* kliknite *Clean Structure* (). Ukoliko ste sve korake proveli ispravno, trebali biste dobiti strukturu molekule prikazane na **slici 16**. Imenujte dobiveni spoj.



Slika 16. Struktura molekule _____

KORAK 4 Na alatnoj traci *Structure toolbar*, kliknite na *Set Bond Vertically* () , a zatim kliknite na vezu ugljik-fluor za rotiranje strukture (**slika 17**).




Slika 17. Zarotirana struktura molekule _____

Uređivanje alkilnih skupina:

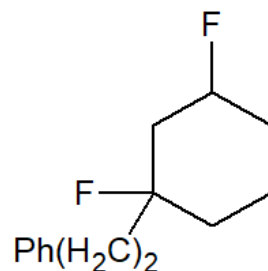
Primjer 6 Zamijenite atom fluora iz strukture prikazane na **slici 17** s $-(\text{CH}_2)_2\text{Ph}$ skupinom i proširite taj zapis.

Alat *Edit Atom Label* () omogućuje zamjenu krajnjih atoma odgovarajućim kraticama.

Koristeći strukturu na kojoj je prethodno provedena mogućnost *Clean Structure*, provedite sljedeće korake:

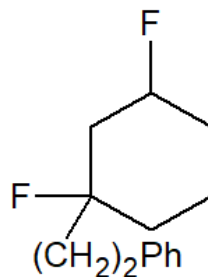
KORAK 1 Na alatnoj traci *Atoms toolbar*, kliknite *Edit Atom Label* () , a zatim kliknite na najdonji atom fluora na nacrtanoj strukturi.

KORAK 2 U dijaloškom okviru *Edit Label* upišite $(\text{CH}_2)_2\text{Ph}$, a zatim kliknite *Insert*. Uočite da je alkilna skupina umetnuta na željeno mjesto i da su brojevi automatski stavljeni u indeks. Struktura koju bi trebali dobiti umetanjem navedene oznake prikazana je na **slici 18**. Imenujte dobiveni spoj.



Slika 18. Struktura molekule _____ dobivene umetanjem nove alkilne skupine na željeno mjesto.


KORAK 3 Na alatnoj traci *Structure Toolbar*, kliknite na *Change Position* () , a zatim kliknite na alkilnu skupinu da biste je preokrenuli kao što je prikazano na **slici 19**.

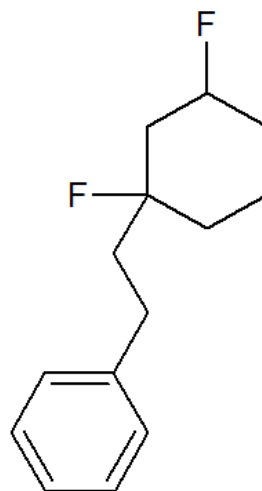


Slika 19. Preokrenuta alkilna skupina u odnosu na strukturu molekule prikazane na slici 18

Savjet:

Ako držite pritisnutu tipku *SHIFT* i kliknete na oznaku s aktivnim alatom za promjenu položaja, točka spajanja naljepnice će se promijeniti.

KORAK 4 Pritisnite *Edit Atom Label* () , a zatim kliknite na prikazanu kraticu. U dijaloškom okviru *Edit Label* kliknite *Expand* da biste dobili strukturu prikazanu na **slici 20**.



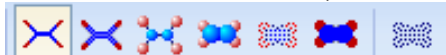
Slika 20. Prošireni prikaz alkilne skupine u odnosu na strukturu molekule prikazane na **slici 19**.

KORAK 5 Klikom na *3D Viewer* () prikažite strukturu dobivene molekule u tri dimenzije.



KORAK 6 Pokušajte koristiti svaku od mogućnosti rotacije, pomicanja i označavanja molekule koji se nalaze na gornjem dijelu alatne trake:



, a zatim prikažite molekulu na svaki od načina koje program nudi, a opcije su također prikazane na alatnoj traci:



. Klikom na bilo koju od mogućnosti mijenja se način prikaza strukture molekule. Za automatsku rotaciju molekule kliknite na

ikonicu  . Za automatsku kontinuiranu izmjenu iz jednog u drugi način prikaza molekule uz rotaciju kliknite na ikonicu .


Važno:

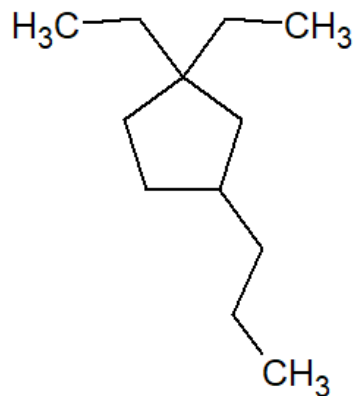
Samo grupne kratice koje zamjenjuju alkilne skupine terminalnih atoma mogu se proširiti pomoću alata *Expand*.

Crtanje ugljikovodičnih lanaca

Korištenjem alata *DrawChains* () možete jednostavno nacrtati ugljikovodične lance bilo koje duljine jednostavnim povlačenjem ikonice miša.

Primjer 7. Nacrtajte strukturu 1,1-dietil-3-propilciklopentan korištenjem alata *DrawChain*.


KORAK 1 Nacrtajte ciklopentan, a zatim na alatnoj traci *Structure toolbar* kliknite *DrawChains* () i ikonu miša postavite na prvi ugljikov atom koji treba sadržavati dvije etilne skupine (na temelju naziva spoja). Povucite ulijevo da biste stvorili ugljikovodični lanac dok brojač ugljika koji se nalazi pored pokazivača miša ne dosegne C2. Imajte na umu da se brojač mijenja sa svakim dodanim atomom ugljika (kada povlačite naprijed) ili uklonjenim (kada povlačite natrag). Ponovite isti postupak da nacrtate drugu etilnu skupinu na prvom ugljikovom atomu i da nacrtate jednu metilnu skupinu na trećem ugljikovom atomu. Kliknite na *Clean Structure*. Trebali biste dobiti strukturu prikazanu na **slici 21**.

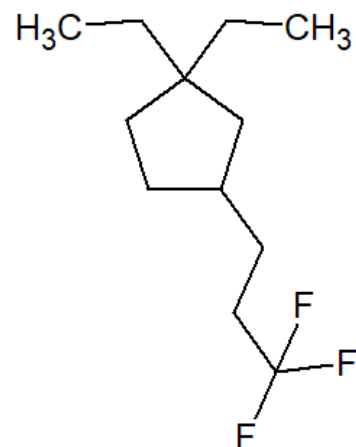


Slika 21. Struktura 1,1-dietil-3-propilciklopentan



Savjet:

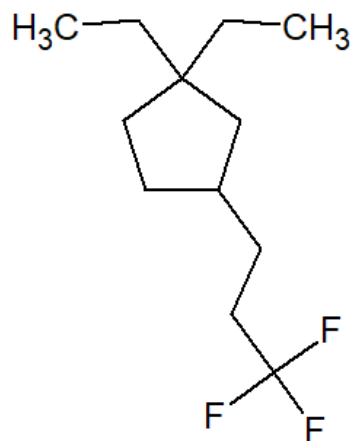
Prilikom povlačenja mišem ugljik-ugljik veze u lancu su međusobno postavljene pod kutom od 120° . Za postavljanje veza pod kutom od 180° , držite *Ctrl* dok povlačite mišem.

KORAK 2 Dok je alat *DrawChains* () još uvijek aktivan, na alatnoj traci *Atoms toolbar* kliknite *Fluorine* (), a zatim kliknite na treći ugljik iz propilne skupine tri puta kako bi se pojavila tri atoma fluora (**slika 22**).




Slika 22. Dodavanje atoma fluora u strukturu molekule prikazane na **slici 21**

KORAK 3 Na alatnoj traci *Structure toolbar*, kliknite na *Select/Move* () , zatim odaberite ove tri veze atoma fluora s atomom ugljika i kliknite *Clean Structure* (). Trebali bi dobiti strukturu prikazanu na **slici 23**. Imenujte dobiveni spoj.



Slika 23. Struktura molekule _____

KORAK 4 Klikom na *3D Viewer* () prikažite strukturu dobivene molekule.

KORAK 5 Pokušajte koristiti svaku od mogućnosti rotacije, pomicanja i označavanja molekule koji se nalaze na gornjem dijelu alatne trake:




, a zatim prikažite molekulu na svaki od načina koje program nudi, a opcije su također prikazane na alatnoj traci:




. Klikom na bilo koju od mogućnosti mijenja se način prikaza strukture molekule. Za automatsku rotaciju molekule kliknite na

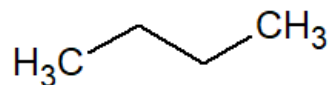


ikonu . Za automatsku kontinuiranu izmjenu iz jednog u drugi način prikaza molekule uz rotaciju kliknite na ikonu .

Određivanje naboja i definiranje aniona i kationa:

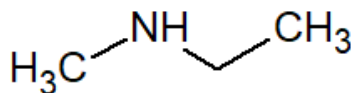
Primjer 8 Nacrtajte strukturu butana i zatim zamijenite drugi atom ugljika s atomom dušika. Upotrijebite skup alata *Charges/Radicals* s alatne trake *Atoms toolbar* za promjenu naboja dušika ili stvaranje radikala.

KORAK 1 Na alatnoj traci *Atoms toolbar*, kliknite na *Carbon* (provjerite da je alat *DrawNormal* () aktivan), a zatim kliknite četiri puta na istu točku radnog prostora kako biste nacrtali strukturu molekule butana prikazanu na **slici 24**.




Slika 24. Struktura molekule butana


KORAK 2 Na alatnoj traci *Atoms toolbar*, kliknite na *Nitrogen*, a zatim kliknite na drugi atom ugljika (s lijeva na desno) kako bi ga se zamijenilo s atomom dušika kao što je prikazano na **slici 25**.

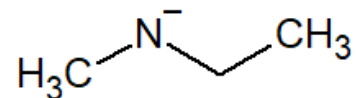


Slika 25. Struktura N-metiletanamin


KORAK 3 Dodajte u radni prostor još pet duplikata strukture N-metiletanamina. To možete učiniti na sljedeći način: odaberite kreiranu strukturu klikom na prazan prostor u području za crtanje blizu nje. Pritisnite *Ctrl+C* da biste ga kopirali u međuspremnik. Zalijepite potreban broj kopija pritiskom na *Ctrl+V* i klikom u radnom prostoru.

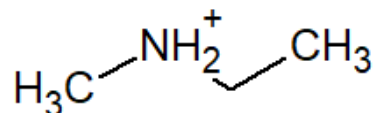
KORAK 4 Na alatnoj traci *Atoms toolbar*, kliknite na donji desni trokut od  kako bi proširili set alata *Charges/Radicals*.

KORAK 5 Odaberite *Decrement (-) Charge* () , a zatim kliknite na NH skupinu na prvoj strukturi kako bi se formirao etilmetilazanidni ion (**slika 26**).



Slika 26. Struktura etilmetilazanidnog iona

KORAK 6 Desnom tipkom miša kliknite unutar radnog prostora kako biste se brzo prebacili na alat *Increment (+) Charge tool* () , a zatim kliknite na NH skupinu druge strukture kako biste je učinili N-metiletanaminijevim kationom (**slika 27**).

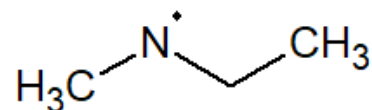


Slika 27. Struktura N-metiletanaminijevog kationa

Napomena:

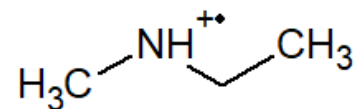
Kada koristite alat *Increment (+) Charge* or *Decrement (-) Charge*, pravilna kemijska valencija atoma nemetala se čuva automatskim dodavanjem ili uklanjanjem atoma vodika. Ako promijenite naboj metalnog atoma, broj atoma vodika se povećava ili smanjuje u skladu s nabojem iona. Uobičajene valencije mogu se pronaći u dijaloškom okviru *Periodic Table of Elements*.

KORAK 7 Iz alata *Charges/Radicals* odaberite *Radical* i kliknite NH skupinu treće strukture za crtanje etilmetilaminskog radikala (**slika 28**)



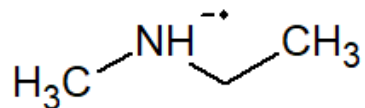
Slika 28. Struktura etilmetilaminskog radikala

STEP 8 Desnom tipkom miša kliknite unutar radnog prostora i kliknite NH skupinu četvrte strukture da nacrtate etilmetilaminski radikalni kation (**Slika 29.**)



Slika 29. Struktura kationskog radikala etilmetilamina

KORAK 9 Kliknite desnim klikom unutar radnog prostora, a zatim kliknite NH skupinu pete strukture da biste nacrtali anion etilmetilaminskog radikala (**Slika 30.**).



Slika 30. Struktura aniona etilmetilaminskog radikala

Čišćenje radnog prostora:

Ako želite očistiti radni prostor kako biste nacrtali svoje strukture ispočetka, upotrijebite jedan od sljedećih načina:

Primjer: Napravite novi prazan *ACD/ChemSketch* dokument:

KORAK 1 Na alatnoj traci *General toolbar* odaberite *New Document*; ili

KORAK 2 U izborniku *File* odaberite *New*.

Primjer: Dodajte novu praznu stranicu trenutnom *ACD/ChemSketch* dokumentu:

KORAK 1 Na alatnoj traci *General toolbar* pritisnite *New Page*; ili iz izbornika *Page* odaberite *New*.

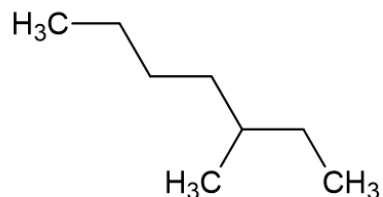
Primjer: Očistite aktivnu stranicu unutar trenutnog *ACD/ChemSketch* dokumenta:

KORAK 1 U izborniku *Edit* odaberite *Select all*, a zatim u izborniku *Edit* odaberite *Delete*; ili

KORAK 2 Pritisnite *Ctrl+A* za označavanje svih struktura, a zatim pritisnite *Delete*; ili na alatnoj traci *General toolbar* kliknite *Delete*, kliknite prazan prostor dalje od nacrtanih struktura kako biste ih sve odabrali, a zatim kliknite odabir.

4.4. Primjeri zadataka za obradu nastavnih sadržaja

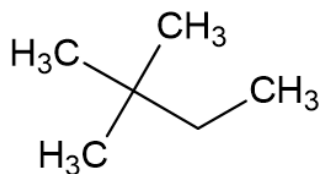
Zadatak 1. Koristeći vještine naučene u programu *ChemSketch*, nacrtajte prikazanu strukturu 3-metilheptana.



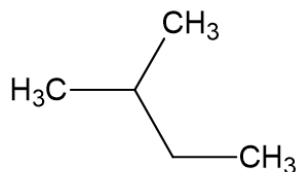
Zadatak 2. Nacrtaj sažete strukturne formule navedenih spojeva:

- 2,2-dimetilbutan
- 2-metilpentan.

Zadatak 3. Nacrtajte sljedeću strukturnu formulu spoja, zatim promijenite jedan atom vodika po vašem izboru atomom fluora.



- Zadatak 4.** a) Nacrtajte sljedeću strukturu alkana. Imenujte taj spoj i prikažite trostruku vezu između trećeg i četvrtog atoma ugljika. Imenujte nastali spoj.
b) Izbrišite metilnu skupinu iz spoja i pomoću alata *DrawChains* dodajte još tri atoma ugljika najdužem lancu ugljikovodika tako da trostruka veza bude između prvog i drugog atoma ugljika.
c) Dodajte fenilnu skupinu trećem ugljikovom atomu.



Zadatak 5. Ponovite postupak iz prethodnog zadatka samo sada prikažite dvostruku vezu između trećeg i četvrtog ugljikova atoma.

4.5. Primjeri zadataka za ocjenjivanje učenika

ZADATAK 1

- A) Koristeći vještine naučene u programu *ChemSketch*, nacrtajte strukturu alkana koji sadrži 7 ugljikovih atoma.
- B) Dodajte metilnu skupinu trećem atomu ugljika u strukturi. Imenujte dobiveni spoj.
- C) Prikažite dvostruku vezu između trećeg i četvrtog ugljikovog atoma u strukturi. Imenujte dobiveni spoj.
- D) Zamijenite ugljikov atom iz metilne skupine na trećem ugljikovom atomu u strukturi s atomom broma. Imenujte dobiveni spoj.
- E) Zamijenite atom broma iz strukture s CN skupinom. Imenujte dobiveni spoj.
- F) Koristite alat *DrawContinuous* i nacrtajte ciklički oblik spoja iz podzadatka. Imenujte dobiveni spoj.

ZADATAK 2

- A) Nacrtajte pentan i zamijenite drugi atom ugljika s atomom kisika.
- B) Napravite kation, anion i radikal ove strukture mijenjajući naboj na atomu kisika. Imenujte taj anion, kation i radikal.

ALKANI I CIKLOALKANI

1.) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna cjelina: Ugljikovodici

Nastavna jedinica: Alkani i cikloalkani

Predviđen broj nastavnih sati: 3

1.1. Teorijski uvod

a) Alkani

- Alkani su najjednostavnija skupina organskih spojeva.
- Građeni su od atoma ugljika i vodika međusobno povezanih jednostrukim kovalentnim vezama (duljina veze ugljik-ugljik je oko 1,54 Å)
- Alkani su zasićeni ugljikovodici jer u svojoj strukturi sadrže samo jednostruke kovalentne veze između ugljikovih atoma i jer u svojoj strukturi ostvaruju maksimalan moguć broj veza s atomima vodika.
- Opća formula alkana je: C_nH_{2n+2} , pri čemu n predstavlja broj ugljikovih atoma.
- Ime alkana sastoji se od korijena riječi koji se tvori na temelju grčkog broja (osim za prva četiri alkana) i nastavka *-an*. Niz ravnolančanih i nerazgranatih alkana čiji se susjedni članovi razlikuju za jednu metilensku skupinu ($-CH_2-$) naziva se homologni niz alkana. U tablici 1 prikazan je homologni niz alkana.

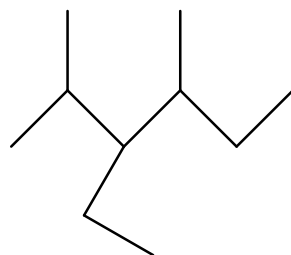
Tablica 1. Nazivi i molekulske formule prvih deset alkana u homolognom nizu.

Naziv alkana	metan	etan	propan	butan	pentan	heksan	heptan	oktan	nonan	dekan
Molekulska formula	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

- Ako alkan sadrži razgranat lanac ugljikovih atoma, ime se određuje prema najduljem lancu.
- Ako alkan sadrži dva lanca s istim brojem ugljikovih atoma, ime se određuje prema lancu na kojemu je vezan veći broj supstituenata (atomska skupina ili atom vezan na glavni (najdulji) ugljikovodični lanac).

- Alkilna skupina ili alkil jest ugljikovodična skupina koja ima strukturu alkan s jednim vodikovim atomom manje i ima nastavak *-IL*. Uobičajeno je alkilnu skupinu označiti slovom R.
- Ugljikov atom na kojemu je vezana alkilna skupina označuje se brojem ili lokantom koji mora biti što manji.
- Ako ugljikovodik sadrži više istih alkilnih skupina, njihov se broj označuje predmetcima (di-, tri-, tetra-, ...) koji ne ulaze u svrstavanje supstituenata abecednim redom.
- Ako postoji više istih načina numeriranja, smjer numeriranja odabire se abecednim redom.

PRIMJER:



3-etil-2,4-dimetilheksan

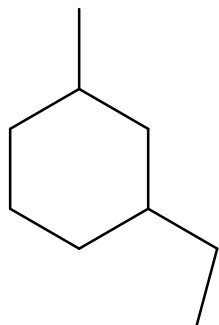
b) Cikloalkani

- Ciklički alkani koji u svojoj strukturi sadrže barem jedan prsten.

- Pri imenovanju cikloalkana u odnosu na alkan s istim brojem ugljikovih atoma dodaje se prefiks *ciklo-*.
- Ako cikloalkan sadrži samo jedan supstituent, nije potrebno pisati lokant.
- Cikloalkan se smatra supstuentom ako je broj ugljikovih atoma u prstenu manji od broja ugljikovih atoma u lancu.
- Ako u strukturi cikloalkana postoji više od jedne alkilne skupine, prsten treba numerirati na način da sve alkilne skupine budu na najmanjem mogućem broju, a ako je moguće, alkilna skupina koja je prva po abecedi treba dobiti manji broj.

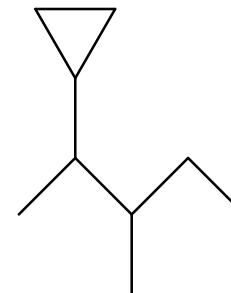
PRIMJERI:

a)



1-etil-3-metilcikloheksan

b)



2-ciklopropil-3-metilpentan

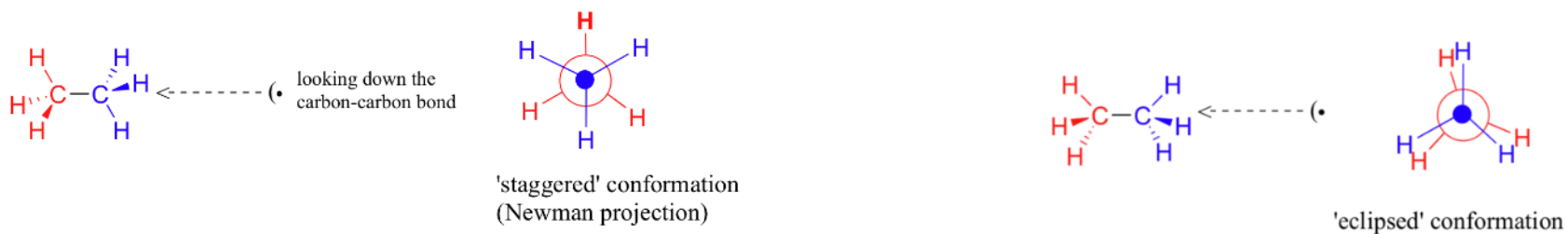
Trodimenzionalne strukture molekula prikazuju se različitim modelima: kuglice i štapići, štapići i kalotni model kao što je prikazano u **tablici 2**:

Tablica 2: Modeli molekula

spoj	model kuglica i štapića	kalotni model	štapićasti model
etan			
ciklobutan			
buten			
but-2-in			
kloretan			

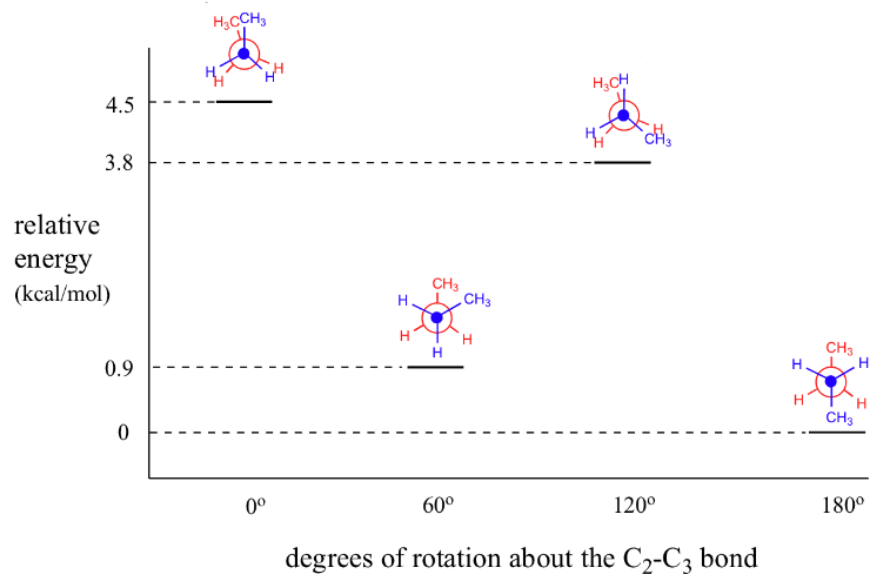
c) Newmanove projekcijske formule

Kako bi se bolje vizualizirale različite konformacije molekule, prikladno je koristiti konvenciju crtanja koja se naziva Newmanova projekcija. U Newmanovoj projekciji, gledamo uzdužno niz određenu vezu od interesa - u ovom slučaju, vezu ugljik-ugljik u etanu. 'Prednji' atom prikazujemo kao točku, a 'stražnji' atom kao veći krug.



Slika 1. Newmanove projekcijske formule (zasjenjena ili sinperiplanarna i zvjezdasta ili antiperiplanarna konformacija)

Gledajući C-C vezu na ovaj način, kut formiran između C-H veze na prednjem ugljiku i C-H veze na stražnjem ugljiku naziva se torzijski kut. Najniža energijska konformacija etana, prikazana na gornjoj slici, naziva se zvjezdasta ili antiperiplanarna konformacija: svi torzijski kutovi su 60° , a udaljenost između prednje i stražnje C-H veze je maksimizirana. Ako se zakrene prednja $-CH_3$ skupina za 60° u smjeru kazaljke na satu, molekula je u najvišoj energijskoj zasjenjenoj ili sinperiplanarnoj konformaciji, gdje su svi torzijski kutovi 0° (potrebno je neznatno pomaknuti veze u Newmanovoj projekciji tako da sve budu i dalje vidljive). **Slika 2** prikazuje relativne energije različitih Newmanovih konformacija.



Slika 2. Relativne energije za različite Newmanove konformacije

1.2. Odgojno-obrazovni ishodi

Učenik će nakon ove nastavne jedinice moći:

- nacrtati različite primjere molekula alkana i cikloalkana i prikazati ih strukturnom, sažetom strukturnom formulom i formulom s veznim crticama.
- generirati nazive prethodno nacrtanih molekula alkana i cikloalkana u programu *ChemSketch*
- odrediti molekulsku formulu prethodno nacrtanih struktura molekula alkana i cikloalkana u programu *ChemSketch*

- podesiti duljine veza i međuveznih kutova na nacrtanim strukturama molekula korištenjem opcije *Clean Structure*
- nacrtati strukturne izomere alkana i cikloalkana
- prikazati strukturu molekula alkana i cikloalkana u tri dimenzije
- rotirati molekule alkana i cikloalkana u dvije i tri dimenzije
- promijeniti način trodimenzionalnog prikaza strukture molekula alkana i cikloalkana
- pomicati molekule alkana i cikloalkana u 3D i 2D
- odrediti duljine veza i međuvezne kutove u molekulama alkana i cikloalkana
- optimizirati strukture molekula alkana i cikloalkana
- proučiti Newmanove projekcijske formule različitih molekula alkana
- spremite na računalo dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu strukturu željene molekule alkana ili cikloalkana

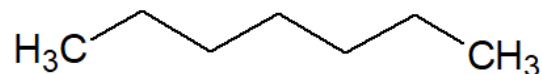
1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

Primjer 1

Nacrtajte molekulu 5-etil-2,2-dimetilheptan, a zatim slijedom uputa uredite strukturu, generirajte njezin naziv u programu i odredite molekulsku formulu te molekule, prikažite ju veznim crticama, strukturnom i sažetom strukturnom formulom, prikažite strukturu molekule u tri dimenzije na različite načine, odredite duljine odabranih veza te određene međuvezne kutove, optimizirajte molekulu, rotirajte ju i pomičite u dvije i u tri dimenzije, spremite 2D i 3D strukturu na računalo, zaciklizirajte strukturu u odgovarajući cikloalkan te toj molekuli generirajte naziv, odredite molekulsku formulu, prebacite u tri dimenzije, spremite i 2D i 3D strukturu molekule.

KORAK 1

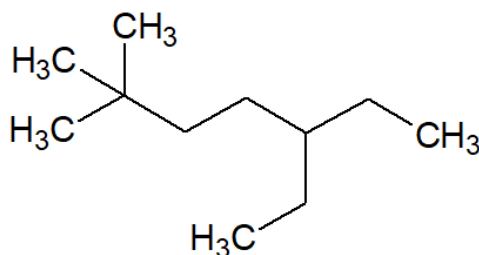
Odaberite opciju crtanja *DrawNormal*. Kliknite na prazno područje u sučelju. Pojavit će se struktura molekule metana (CH_4). Klikom na taj atom ugljika stvara se jednostruka ugljik-ugljik veza. Držanjem tipke *Ctrl* i klikom na svaki sljedeći pojavljeni atom ugljika moguće je nacrtati ugljikovodični lanac od sedam ugljikovih atoma prikazan na **slici 1**.



Slika 1. Struktura ugljikovodičnog lanca od sedam ugljikovih atoma

KORAK 2

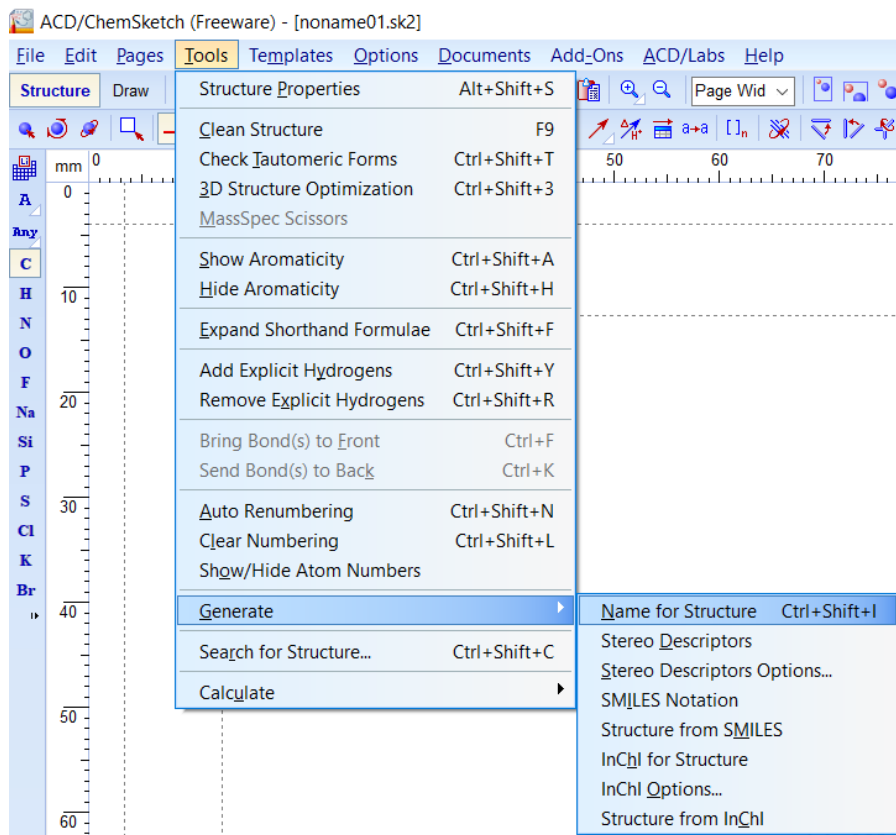
Dvostrukim klikom na drugi ugljikov atom stvaraju se dvije metilne skupine. Jednim klikom na peti atom ugljika stvara se jedna metilna skupina koju je moguće produljiti u etilnu skupinu klikom na ugljikov atom iz metilne skupine. Na **slici 2** prikazana je struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana.



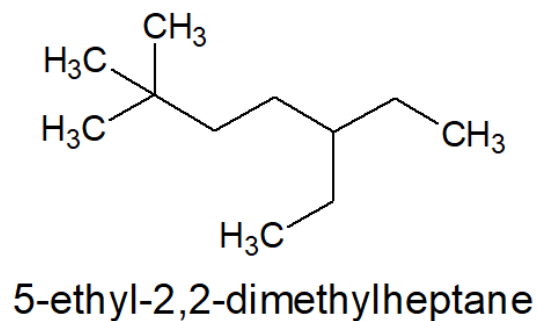
Slika 2. Struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana

KORAK 3

Klikom na izbornik *Tools* odaberite opciju *Generate* i zatim kliknite na *Name for Structure*. Navedeni postupak prikazan je na **slici 3a**, a na **slici 3b** prikazana je struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana ispod koje je napisan njezin naziv. Ukoliko generirani naziv nije u skladu s očekivanim, potrebno je ponoviti postupke opisane u **KORAKU 1 i 2**.



a)

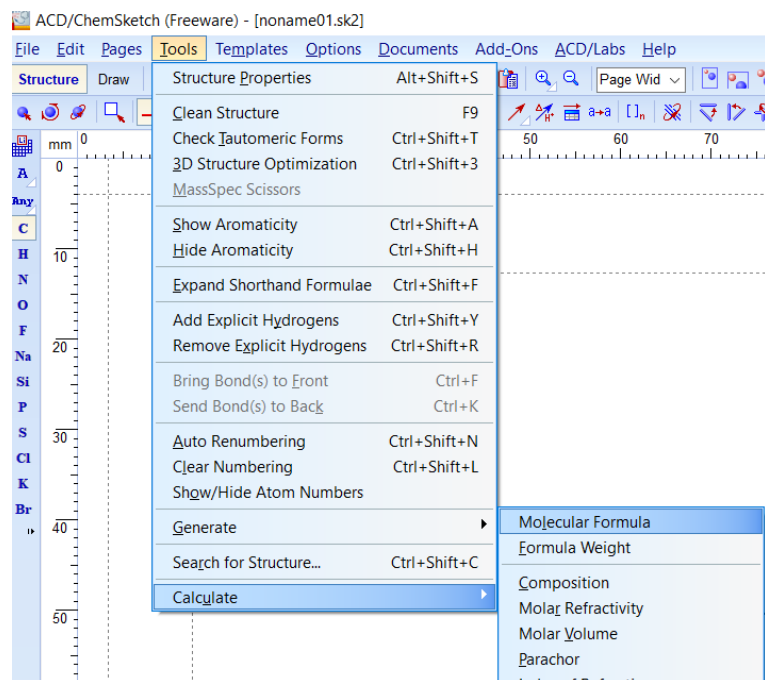


b)

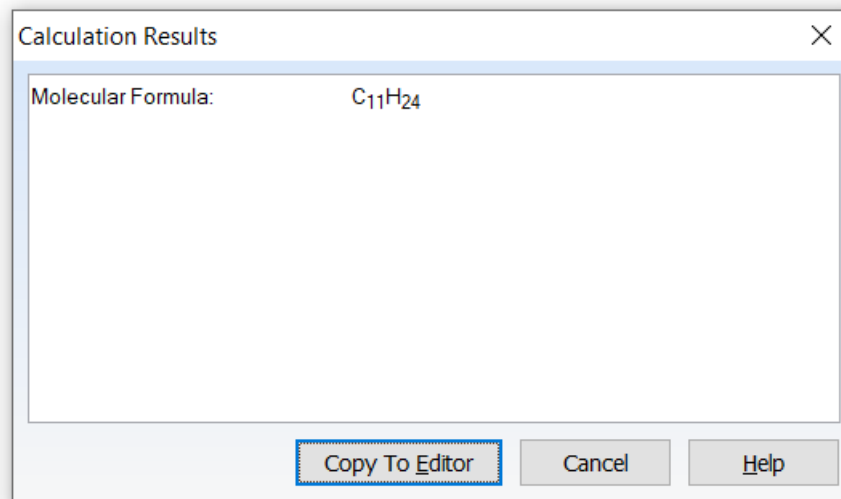
Slika 3. a) Postupak generiranja naziva molekule nacrtane u programu *ChemSketch*, b) struktura i odgovarajući naziv prethodno nacrtane molekule 5-etil-2,2-dimetilheptan.

KORAK 4

Klikom na izbornik *Tools* odaberite opciju *Calculate* i zatim kliknite na *Molecular Formula*. Navedeni postupak prikazan je na **slici 4a**, a na **slici 4b** prikazana je molekulska formula 5-etil-2,2-dimetilheptana koji se slijedom opisanih opcija prikazuje u novom prozorčiću. Za prikaz molekulske formule na radnom listu, na kojem se nalazi struktura i naziv nacrtane molekule, kliknite na *Copy to Editor*.



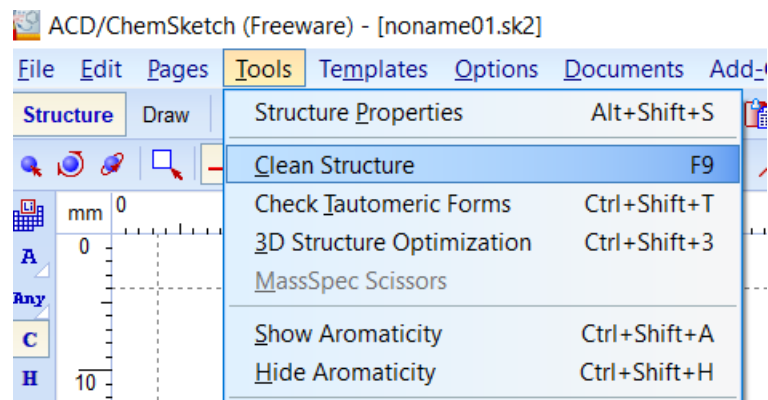
a)



b)




Slika 4. a) Slijed radnji za prikaz molekulske formule 5-etil-2,2-dimetilheptana, b) Prozorčić s molekulskom formulom molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana.

KORAK 5 Koristeći opciju *Tools* i klikom na *Clean Structure* prepravite duljine veza i međuvezne kutove (**slika 5**)

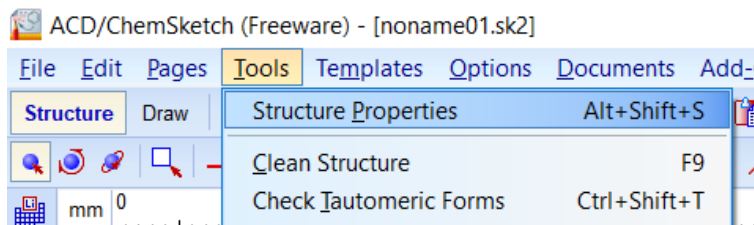


Slika 5. Prepravljanje duljina veza i međuveznih kutova u *ChemSketch* programu

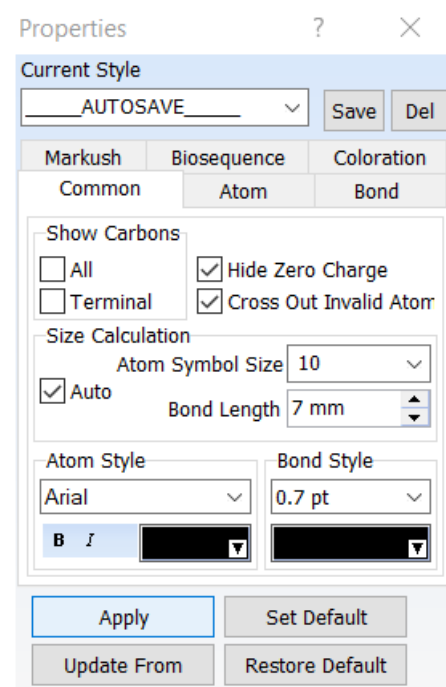
KORAK 6A Prikažite strukturu molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana veznim crticama, sažetom strukturnom i strukturnom formulom.

Da bi to uspješno napravili, potrebno je označiti cijelu strukturu molekule klikom na  u gornjem lijevom kutu sučelja, a zatim podesiti način obilježavanja molekule tako da se klikom na  pojavi sljedeća oznaka: . Uz držanje klika povucite i obilježite cijelu molekulu.

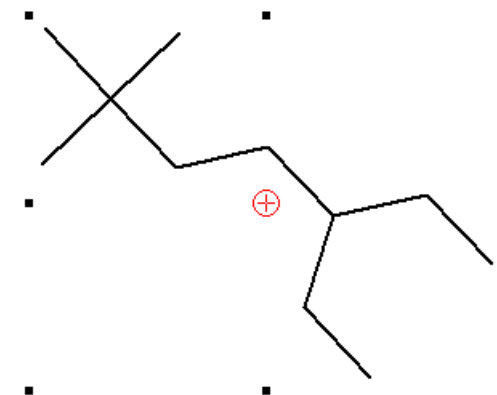
KORAK 6B Klikom na opciju *Tools*, a zatim na *Structure Properties* otvara se prozorčić sa svim željenim mogućnostima. Na **slici 6a** prikazan je postupak otvaranja prozorčića, a na **slici 6b** opcije koje trebate podesiti (u dijelu *Show Carbons*, kliknite na *all* i zatim *apply*). Na **slici 6c** prikazana je dobivena struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana predočena veznim crticama.



a)



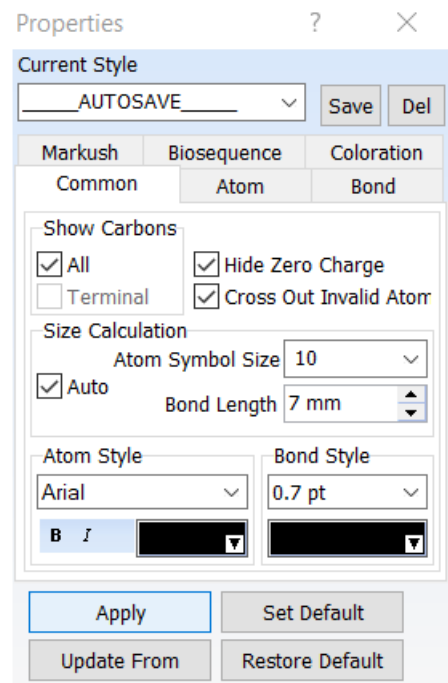
b)



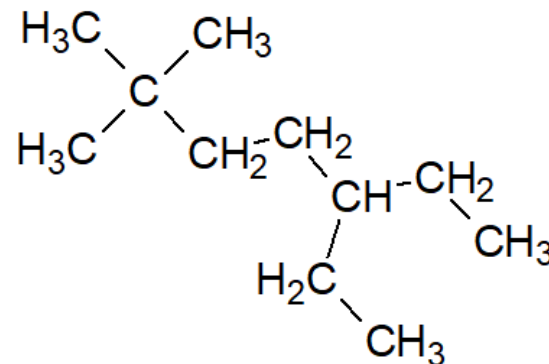
c)

Slika 6. a) Postupak otvaranja prozorčića za podešavanje načina prikaza strukture molekule, b) prozorčić sa svim opcijama prikaza strukture molekule s odabranim opcijama za prikaz strukture molekule veznim crticama, c) struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana prikazana veznim crticama.

KORAK 6C Ponovno označite molekulu, kliknite na *Tools*, a zatim na *Structure Properties* te podesite parametre prema **slici 7**.



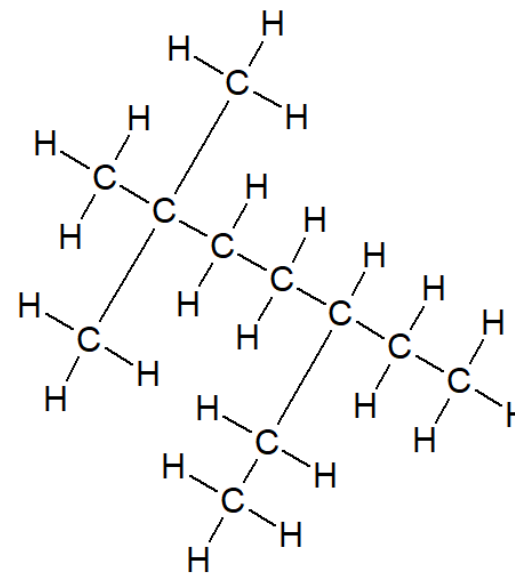
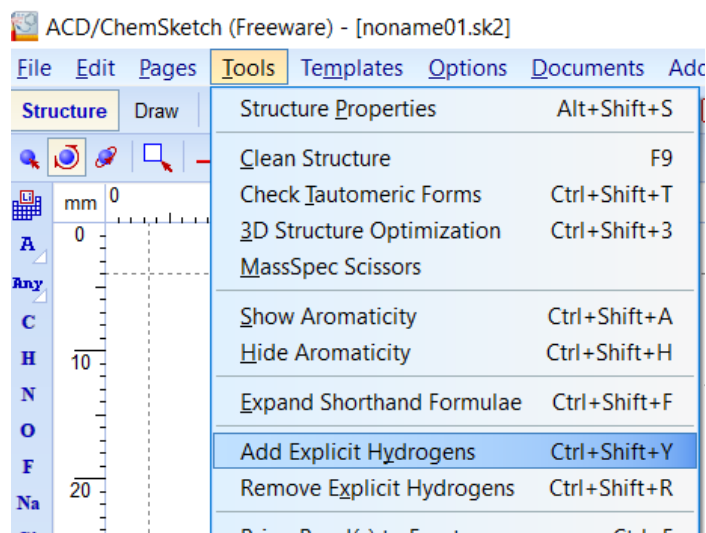
a)



b)

Slika 7. a) Prozorčić s podešenim parametrima za prikaz strukture molekule sažetom strukturnom formulom, b) Struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana prikazana sažetom strukturnom formulom.


KORAK 6D Za prikaz strukture molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana strukturnom formulom kliknite na *Tools*, a zatim na opciju *Add Explicit Hydrogens*. Nakon toga opcijom *Clean Structure* uredite prikazanu strukturu (**Slika 8a** prikazuje postupak za prikaz veza ugljika sa svakim atomom vodika, a **slika 8b** prikazuje strukturnu formulu molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana).

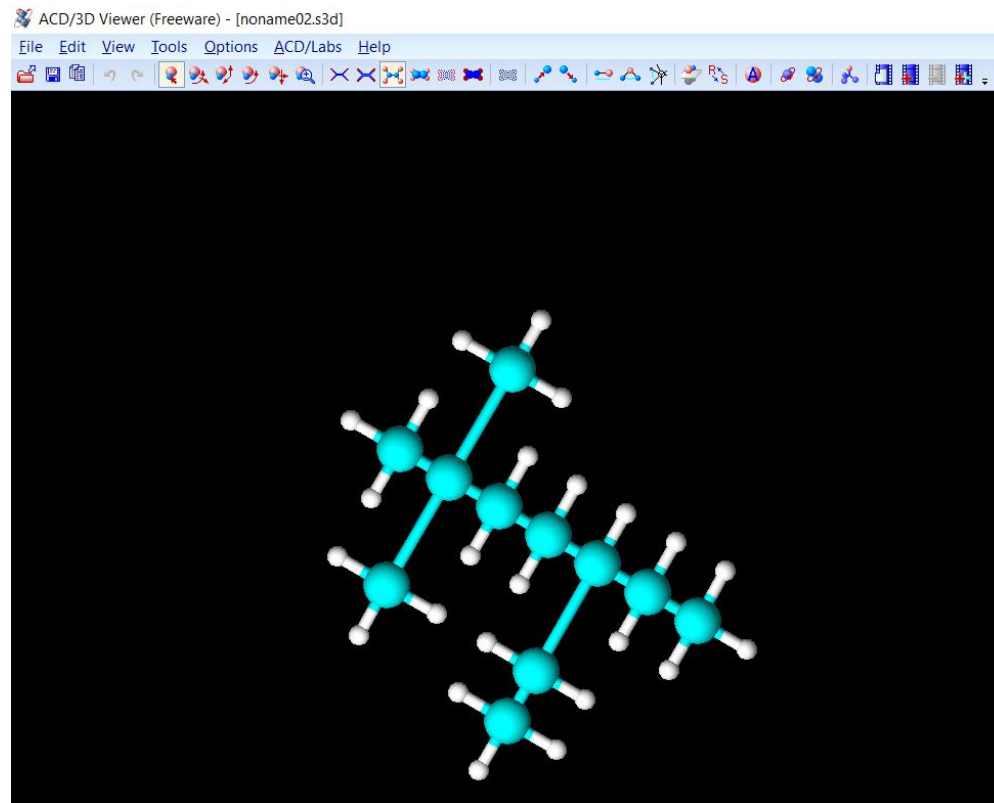


a)

b)


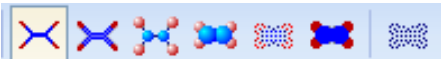


Slika 8. a) Upute za prikaz veza ugljika sa svakim atomom vodika, b) Strukturna formula molekule 5-etil-2,2-dimetilheptan.


KORAK 7 Dobivenu strukturnu formulu 5-etil-2,2-dimetilheptana prikažite u tri dimenzije tako da ju prvo označite, a zatim kliknete na opciju  na alatnoj traci. Otvorit će se novi prozor (*3D Viewer*) s 3D prikazom molekule (**Slika 9**). Pozicioniranjem ikonice miša na svaki pojedini atom pojavljuje se njegova brojčana oznaka sukladno IUPAC-ovoj nomenklaturi te njegove koordinate.

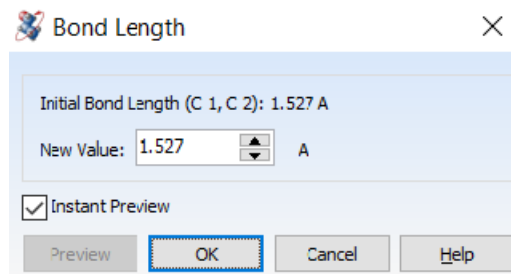


Slika 9. Prikaz 3D strukture molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana.


KORAK 8

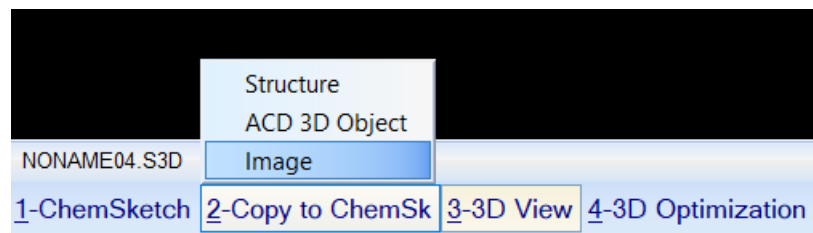
- Pokušajte koristiti svaku od opcija rotacije, pomicanja i označavanja molekule koji se nalaze na gornjem dijelu alatne trake: , a zatim prikažite molekulu na svaki od načina koje program nudi, a opcije su također prikazane na alatnoj traci: .
- Klikom na bilo koju od opcija mijenja se način prikaza molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana. Za automatsku rotaciju molekule kliknite na ikonicu .
- Za automatsku kontinuiranu izmjenu iz jednog u drugi način prikaza molekule uz rotaciju kliknite na ikonicu .

KORAK 9 Odredite duljinu veze između prvog i drugog atoma ugljika klikom na ikonicu  te klikom na prvi i drugi ugljikov atom. Pojavit će se novi prozorčić u kojem će pisati duljina odabrane veze (**Slika 10**). Koju duljinu veze očekujete? _____.



Slika 10. Određivanje duljine veze između prvog i drugog ugljikovog atoma u molekuli 5-etil-2,2-dimetilheptana.

KORAK 10 Klikom na ikonicu za 3D optimizaciju () moguće je prikazati strukturu molekule s mnogo „realističnijim“ duljinama veza i međuveznim kutovima. Tako uređenu strukturu moguće je vratiti iz tri dimenzije u dvije dimenzije programa *ChemSketch* klikom na opciju *Copy to ChemSketch* i odabiranjem opcije *Structure* (**slika 11**) na samom dnu sučelja. Sada se u programu *ChemSketch* pojavljuje optimizirana struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana.



Slika 11. Premještanje optimizirane 3D strukture u programu *ChemSketch*.

KORAK 11 Spremite 2D i 3D prikaz strukture molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana na radnu površinu tako što ćete u prozoru s 3D strukturom kliknuti na *File*, a zatim na *Save As*, upisati naziv strukture, odabrati opciju spremanja na radnu površinu i kliknuti *Spremi*. Isti postupak ponovite i za 2D strukturu u programu *ChemSketch* (Slika 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

Slika 12. Spremanje 2D ili 3D strukture na računalo

ZADATAK 2 Nacrtajte 1-etil-4,4-dimetilcikloheksan koristeći se opcijom *DrawNormal*. Korištenjem prethodno naučene opcije *Clean Structure* (*Tools* ☐ *Clean Structure*) uredite nacrtanu strukturu molekule.

Tako dobivenoj cikličkoj strukturi:

- generiranjem naziva provjerite točnost nacrtane strukture,
- odredite molekulsku formulu _____,
- prebacite ju u 3D Viewer,
- spremite i 2D i 3D strukturu.

Primjer 2 Nacrtajte molekulu etana i zatim je prikažite u 3 dimenzije pomoću alata *3D Viewer*. Pokušajte rotirati cijelu molekulu dok ne dobijete položaj koji pokazuje antiperiplanarnu konformaciju etana. Promatrajte spoj duž ugljik-ugljik veze.

1.4. Primjeri zadatka za obradu nastavnih sadržaja

1. Nacrtajte sve strukturne izomere butana. Napišite nazive svih izomera, a zatim odaberite jedan i s njime odradite sljedeće radnje:

- generirajte naziv,
- odredite molekulsku formulu,
- prikažite strukturu sažetom strukturnom formulom, veznim crticama i strukturnom formulom,
- uredite strukturu molekule opcijom *Clean Structure*,
- prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u,
- prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u pomoću štapića i kuglica,
- optimizirajte molekulu,
- odredite duljinu veze između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- odredite međuvezni kut u prstenu – između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- spremite i 2D i 3D strukturu molekule na Desktop računala.

2. Istražite primjenu alkana i cikloalkana u svakodnevnom životu. Odaberite jednu molekulu koju ćete prikazati u *ChemSketch* programu. Napišite u bilježnicu primjenu odabrane molekule u svakodnevnom životu. Spremite optimiziranu 2D i 3D strukturu te molekule na računalo.

3. Nacrtajte strukturu 1,1,3-trimetilciklopentana, a zatim provedite sljedeće radnje:

- generirajte naziv,
- odredite molekulsku formulu,
- prikažite strukturu sažetom strukturnom formulom, veznim crticama i strukturnom formulom,
- uredite strukturu molekule opcijom *Clean Structure*,
- prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u,
- prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u pomoću štapića i kuglica,
- optimizirajte molekulu,
- odredite duljinu veze između prvog i drugog ugljikovog atoma,

- i) odredite međuvezni kut u prstenu – između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- j) spremite i 2D i 3D strukturu molekule na Desktop računala.

4. Nacrtajte molekulu propana i zatim je prikažite u 3 dimenzije pomoću alata *3D Viewer*. Pokušajte rotirati cijelu molekulu dok ne dobijete položaj koji pokazuje antiperiplanarnu konformaciju propana. Promatrajte spoj duž ugljik-ugljik veze između prvog i drugog ugljikova atoma.

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

1. Nacrtajte sve strukturne izomere pentana. Napišite nazive svih izomera, a zatim odaberite jedan i s njime odradite sljedeće radnje:

- a) generirajte naziv,
- b) odredite molekulsku formulu,
- c) prikažite strukturu sažetom strukturnom formulom, veznim crticama i strukturnom formulom,
- d) uredite strukturu molekule opcijom *Clean Structure*,
- e) prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u,
- f) prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u pomoću štapića i kuglica,
- g) optimizirajte molekulu,
- h) odredite duljinu veze između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- i) odredite međuvezni kut u prstenu – između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- j) spremite i 2D i 3D strukturu molekule na Desktop računala.

2. Nacrtajte molekulu butana i zatim je prikažite u tri dimenzije pomoću alata *3D Viewer*. Pokušajte rotirati cijelu molekulu dok ne dobijete položaj koji pokazuje antiperiplanarnu konformaciju butana. Promatrajte spoj duž ugljik-ugljik veze između prvog i drugog ugljikova atoma.

ALKENI I ALKINI

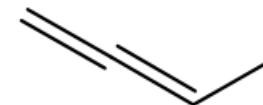
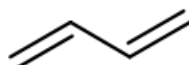
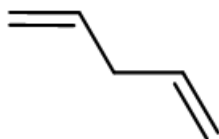
1) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna jedinica: Ugljikovodici
Naziv cjeline: Alkeni i alkini
Predviđeni broj sati: 2

1.1. Teorijski uvod

a) Alkeni

Alkeni su nezasićeni ugljikovodici koji u svojoj strukturi sadrže najmanje jednu dvostruku kovalentnu vezu između ugljikovih atoma. Alkeni sadrže manje atoma vodika od alkana i stoga su nezasićeni ugljikovodici. Opća formula alkena je: C_nH_{2n} . U općoj formuli alkena, n - predstavlja broj ugljikovih atoma. Najjednostavniji predstavnik alkena je eten, C_2H_4 . Homologni niz alkena nastavlja se propenom molekulske formule C_3H_6 , zatim but-1-enom (C_4H_8) itd. Alkeni se pojavljuju kao strukturni izomeri i kao stereoizomeri počevši od but-1-ena. Cikloalkeni su prstenasti alkeni opće formule: C_nH_{2n-2} . Alkeni s jednostavnijom strukturom općenito se nazivaju kao alkani, prema IUPAC pravilima za imenovanje ugljikovodika. Ime alkena dobiva se dodavanjem sufiksa *-en* korijenu koji označava broj ugljikovih atoma u molekuli. Redni broj iza korijena naziva alkena označava položaj dvostruke veze. U molekulama alkena između ugljikovih atoma mogu se pojaviti dvije ili više dvostrukih veza. Alkeni s dvije dvostruke veze nazivaju se dieni, a pri imenovanju takvih spojeva umjesto sufiksa *-en* dodajemo nastavak *-dien*. Dvostruke veze u alkenima mogu se pojaviti kao izolirane (Slika 1. a)), konjugirane (Slika 1. b)) i kumulirane (Slika 1. c)).



Slika 1. a) izolirana dvostruka veza

b) konjugirana dvostruka veza

c) kumulirana dvostruka veza

b) Alkini

Alkini su nezasićeni ugljikovodici i sadrže najmanje jednu trostruku vezu. Opća formula alkina je C_nH_{2n-2} .

Alkini se u prirodi pojavljuju u vrlo malom broju. Prirodni alkini su jaki otrovi ili imaju fungicidno, antibakterijsko ili antikancerogeno djelovanje.

1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

U ovom poglavlju učenici će naučiti:

- nacrtati različite primjere molekula alkena i alkina i prikazati ih strukturnom, sažetom strukturnom formulom i formulom s veznim crticama.
- generirati nazive prethodno nacrtanih molekula alkena i alkina u programu *ChemSketch*
- odrediti molekulsku formulu prethodno nacrtanih molekula alkena i alkina u programu *ChemSketch*
- poboljšati prikaz strukture molekula (podešavanje duljine veze i međuveznih kutova) pomoću opcije *Clean Structure*
- nacrtati strukturne izomere alkena i alkina
- prikazati strukture molekula alkena i alkina u tri dimenzije
- rotirati molekule alkena i alkina u dvije i tri dimenzije
- promijeniti način trodimenzionalnog prikaza strukture molekula alkena i alkina
- pomicati molekule alkena i alkina u 3D i 2D
- odrediti duljine veza i međuvezne kutove u molekulama alkena i alkina

- optimizirati strukture molekula alkena i alkina
- spremi na računalo dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu strukturu željene molekule alkena ili alkina

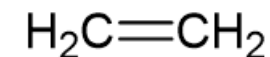
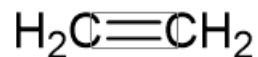
1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

Primjer 1

Nacrtati molekulu etena, zatim urediti strukturu prema uputama, generirati njezin naziv u programu i odrediti molekulsku formulu te molekule, prikazati je veznim crticama, strukturnom i kondenziranom strukturnom formulom, prikazati strukturu molekule u tri dimenzije na različite načine, odrediti duljine odabranih veza i specifične vezne kutove, optimizirati molekulu, rotirati je i pomicati u dvije i tri dimenzije, spremi 2D i 3D strukturu na računalo. Nacrtajte cikloalken i generirajte ime za tu molekulu, odredite molekulsku formulu, prenesite u tri dimenzije, sačuvajte u 2D i 3D strukturu molekule. Zatim nacrtajte molekulu but-2-in i ponovite sve korake prema uputama.

KORAK 1

Odaberite opciju crtanja Draw Normal. Kliknite na prazno područje u sučelju. Pojavit će se struktura molekule metana (CH₄). Klikom na taj atom ugljika stvara se jednostruka veza ugljik-ugljik. Nacrtajte strukturu etana i zatim pokažite na jednostruku vezu između prva dva atoma ugljika iz lanca ugljikovodika (vidjet ćete pravokutnik oko veze prikazane na slici 1.a)), a zatim kliknite na nju da napravite dvostruku vezu (slika 1 .b) i c)).



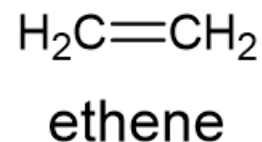
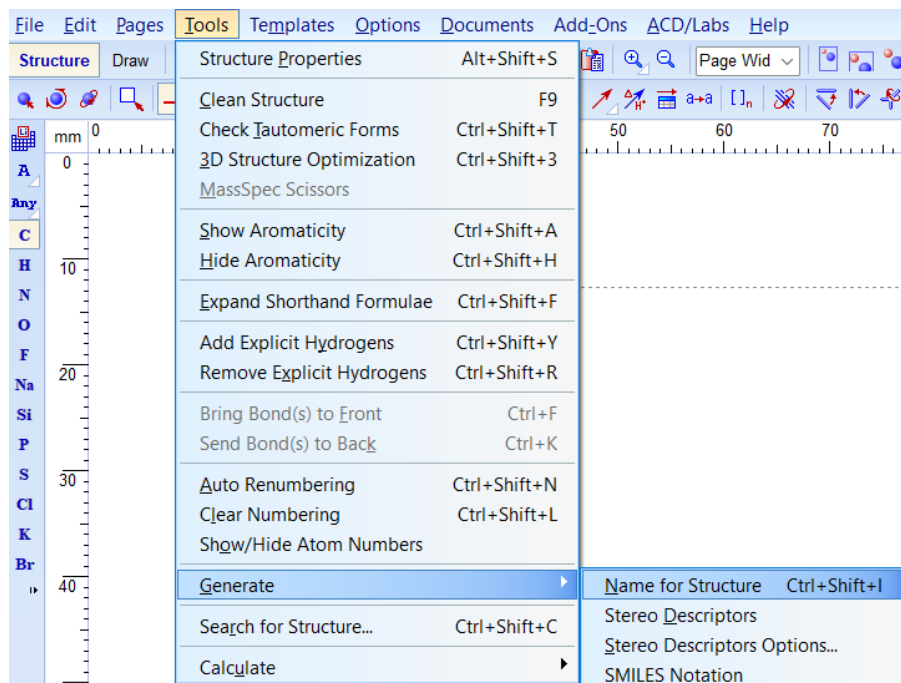
Slika 1. a) pravokutnik oko veze

b) dvostruka veza u etenu

c) dvostruka veza u etenu

KORAK 2

Imenovanje strukture alkena: Kliknite na izbornik izbornika *Tools* odaberite opciju *Generate option* i zatim kliknite na *Name for Structure*. Navedeni postupak prikazan je na **slici 2a** , a na **slici 2b** prikazana je struktura molekule etena ispod koje je ispisano njezino ime.



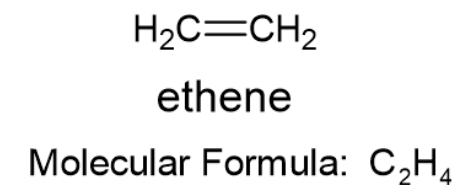
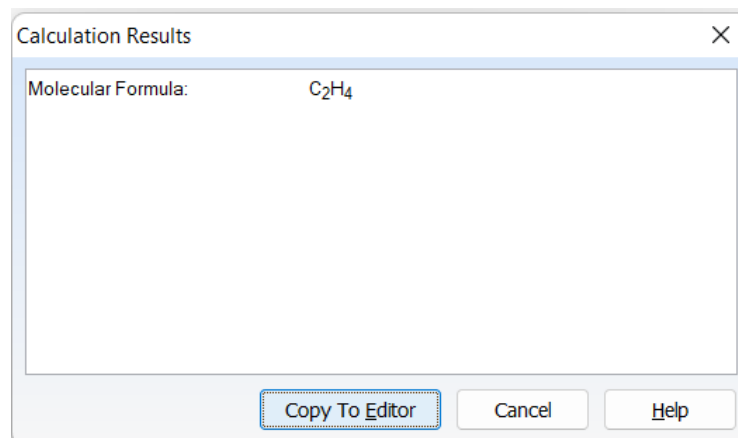
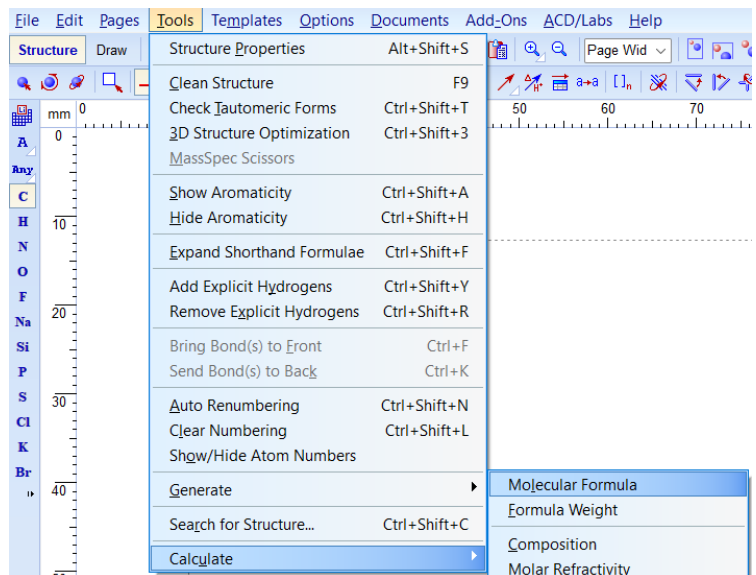
b)

a)

Slika 2. a) Postupak generiranja imena molekule nacrtane u programu *ChemSketch*, b) struktura i pripadajući naziv prethodno nacrtane molekule etena.

KORAK 3

Pomoću izbornika *Tools* odaberite opciju *Calculate*, a zatim kliknite na *Molecular Formula* (**Slika 3a**). Nakon toga otvorit će se prozor s molekularnom formulom (**Slika 3b**). Za prikaz molekularne formule sa strukturom alkena na radnom listu, kliknite na *Copy To Editor* (**Slika 3c**).



a)

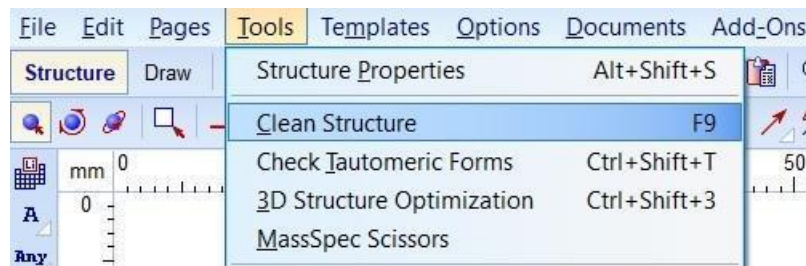
b)

c)

Slika 3.a) Slijed radnji za prikaz molekulske formule etena, b) Prozor s molekularskom formulom molekule etena, c) Molekulska formula na radnom listu




KORAK 4

Korištenje *Tools* opciju i klikom na *Clean Structure* prilagodite duljine veze i međuvezne kutove. (Slika 4.)

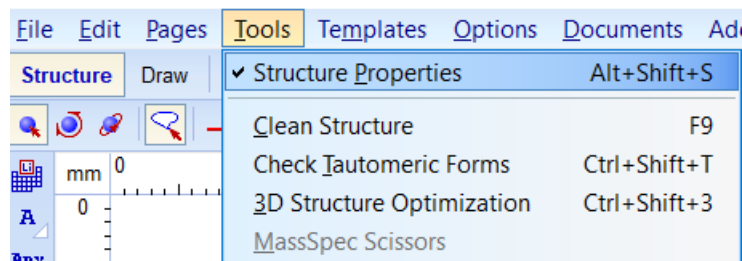


Slika 4. Podešavanje duljina veza i veznih kutova u programu *ChemSketch*

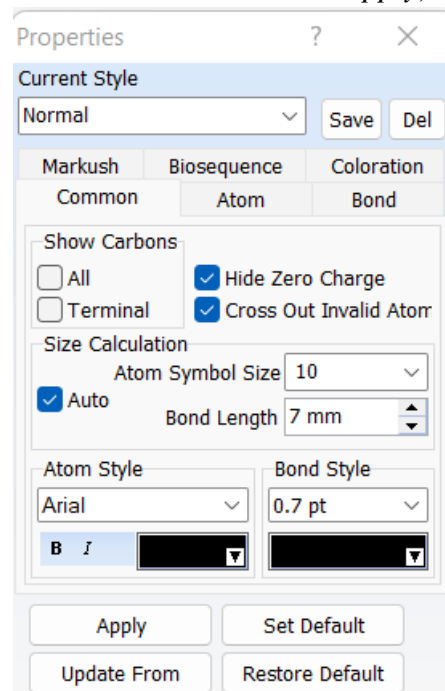
KORAK 5

Prikaži strukturu molekule etena veznim crticama. Da biste to uspješno učinili, potrebno je klikom na označiti cijelu strukturu molekule  u gornjem lijevom kutu sučelja, a zatim podesiti načina odabira molekule klikom na  čime ova ikona prikazuje: . Dok držite klik, povucite i odaberite cijelu molekulu.

Klikom na opciju *Tools*, a zatim na *Structure Properties* otvara se prozor sa svim željenim opcijama. **Slika 5a** prikazuje postupak otvaranja prozora i **Slika 5b** prikazuje opcije koje trebate prilagoditi (u *Show Carbons* odjeljak, kliknite na *Terminal* a zatim *Apply*). **Slika 5c** prikazuje strukturu molekule etena



a)



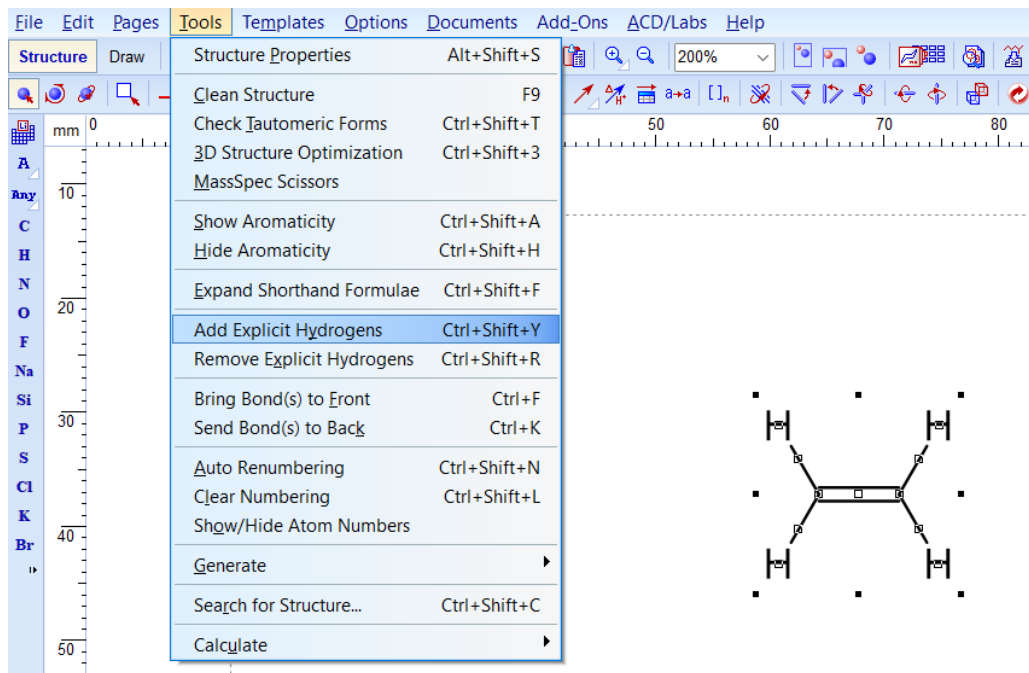
b)

c)

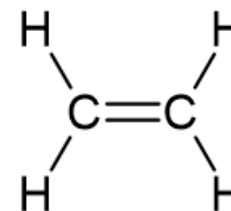
Slika 5. a) Postupak otvaranja prozora za podešavanje načina prikaza strukture molekule, b) prozor sa svim opcijama za prikaz strukture molekule s odabranim opcijama za prikaz strukture molekule sa veznim crticama, c) struktura molekule etena prikazan veznim crticama.

KORAK 6

Pomoću opcije *Tools* odaberite opciju *Add Explicit Hydrogens* za prikaz vodikovih atoma u molekuli etena prikazanu veznim crticama (**Slika 6a**). Možete to prikazati i na strukturnoj formuli etena (**Slika 6b**).



a)



b)

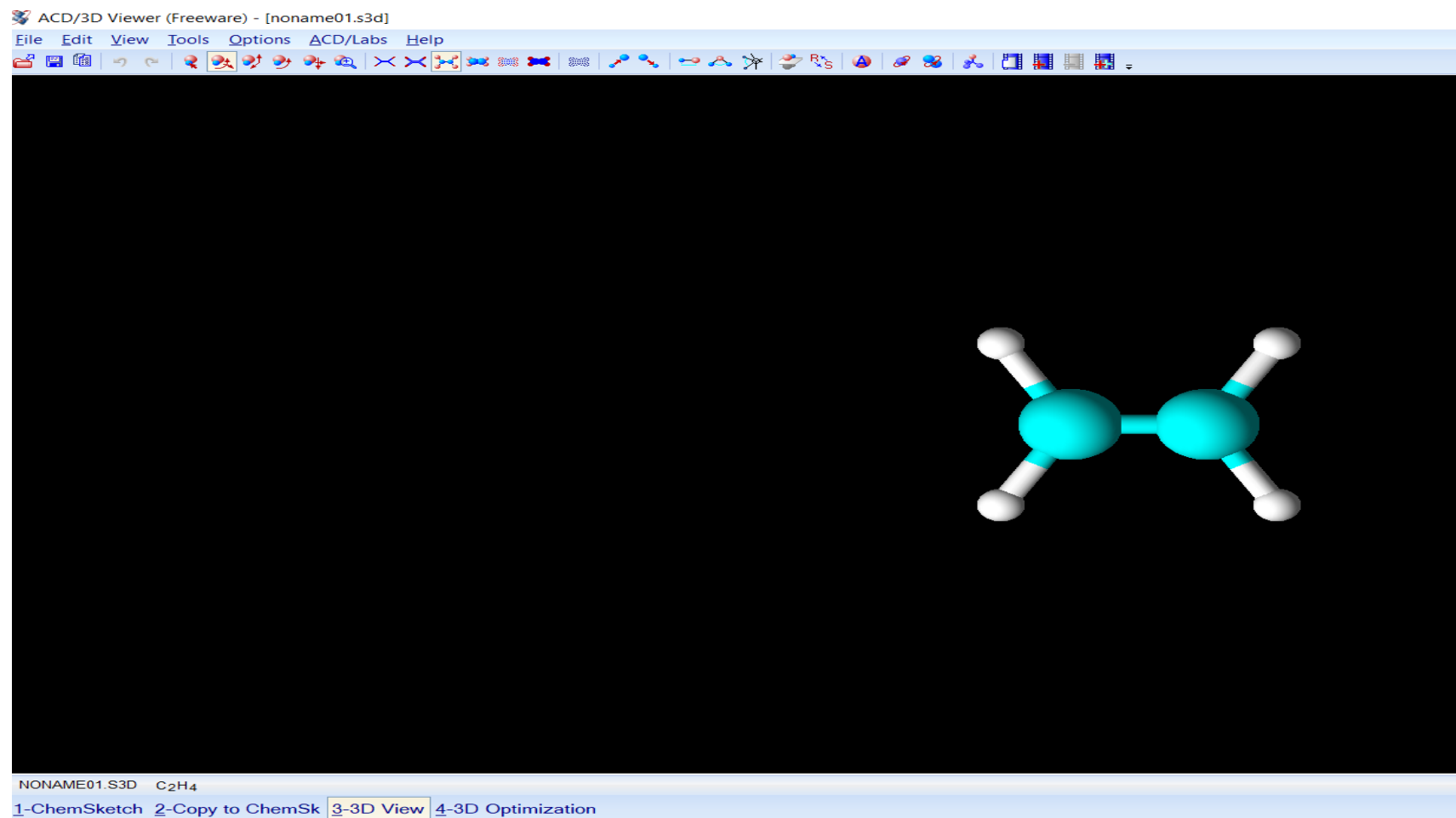
Slika 6. a) Upute za prikaz svih veza ugljik-vodik, b) Strukturna formula molekula etena.

KORAK 7

Prikažite dobivenu strukturnu formulu etena u tri dimenzije tako da je prvo odaberete, a zatim kliknete na opciju na alatnoj traci


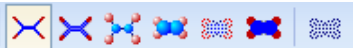



Otvorit će se novi prozor (*3D Viewer*) s 3D prikazom molekule (**Slika 7**). Postavljanjem ikone miša na svaki pojedini atom pojavljuje se njegova brojčana oznaka prema IUPAC nomenklaturi i njegove koordinate.




Slika 7. 3D struktura molekule etena.

KORAK 8


Pokušajte koristiti svaku od opcija rotiranja, premještanja i odabira na gornjoj alatnoj traci: , a zatim prikažite molekulu na svaki od načina koje program nudi, a opcije su također prikazane na alatnoj traci: .


Klikom na bilo koju od opcija mijenja se način na koji je prikazana molekula etena. Za automatsku rotaciju molekule kliknite na ikonu .

Za automatsku kontinuiranu promjenu s jednog na drugi način prikaza molekule s rotacijom kliknite na ikonu .

KORAK 9

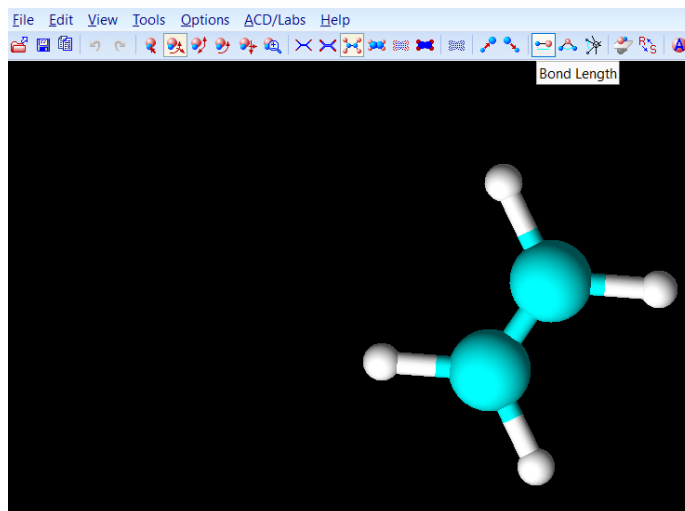
Da biste izračunali ili promijenili udaljenost između dva atoma, učinite sljedeće:

Prebacite se na način prikaza kuglica i štapića (na gornjoj alatnoj traci kliknite kuglice i štapići ) za bolji prikaz atoma.

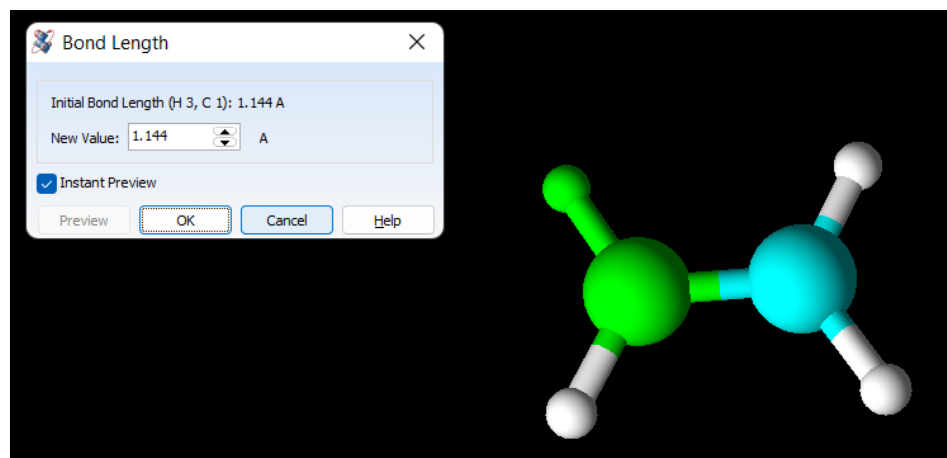
Na gornjoj alatnoj traci kliknite Bond Length() (**Slika 8**).

Kada ste odabrali opciju Bond Length, tada u 3D prikazu odaberite dva atoma između kojih želite odrediti duljinu veze.

Kada odaberete dva atoma između kojih želite odrediti duljinu veze, otvorit će vam se novi prozor s izračunatom vrijednošću duljine veze (**slika 9**).



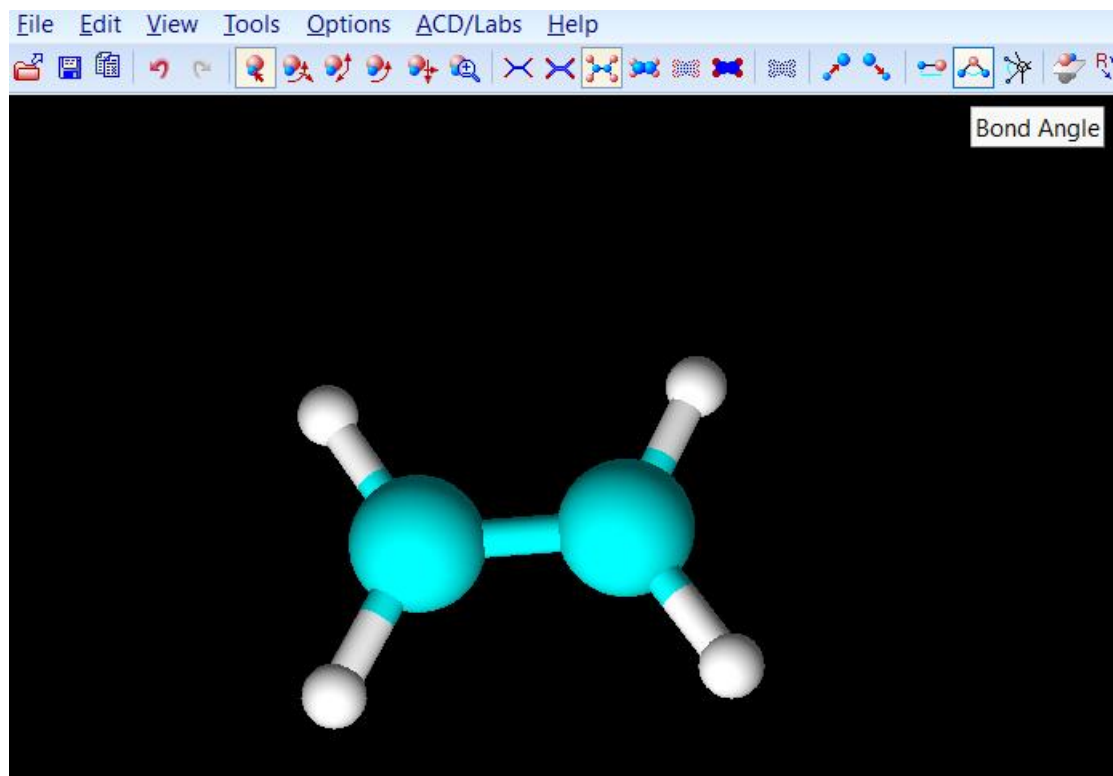
Slika 8. Opcija *Bond Length* – duljina veze



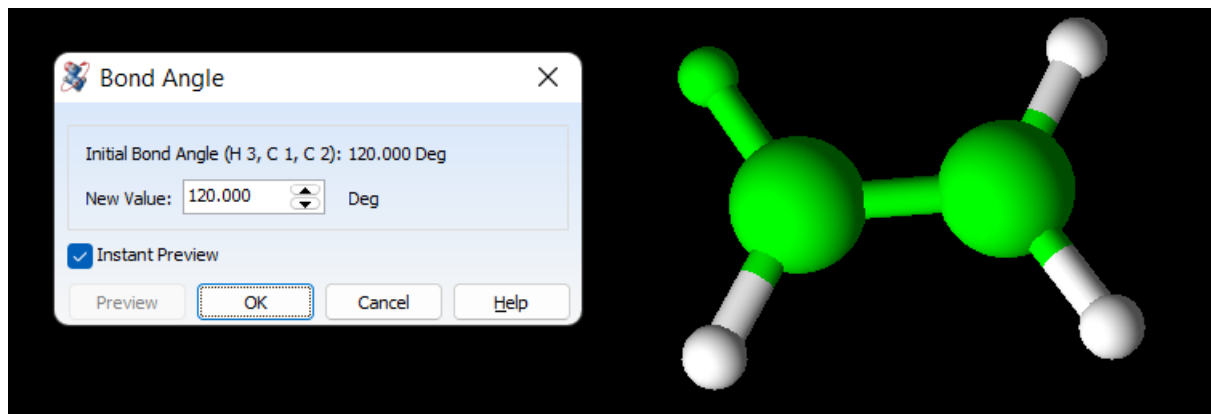
Slika 9. Određivanje duljine veze između prvog atoma ugljika i vodika u molekuli etena.

KORAK 10

Za određivanje kuta veze odaberite opciju *Bond Angle* na alatnoj traci (Slika 10). Zatim, da bismo odredili vezni kut između dva atoma ugljika, prvo moramo kliknuti na atom vodika, a zatim na oba atoma ugljika. Otvorit će se novi dijaloški okvir s prikazanom vrijednošću (Slika 11).




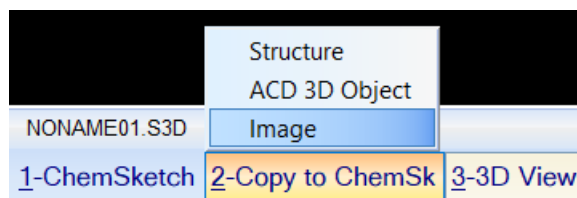
Slika 10 . Opcija *Bond Angle* na alatnoj traci



Slika 11. Određivanje međuveznog kuta između prvog i drugog atoma ugljika i trećeg atoma vodika

KORAK 11

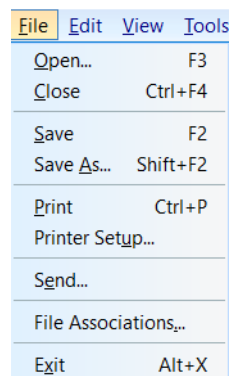
Klikom na ikonu za 3D optimizaciju () moguće je prikazati molekularnu strukturu s puno "realističnijim" duljinama veza i vevnim kutovima. Ovako uređenu strukturu moguće je vratiti iz trodimenzionalnog u dvodimenzionalni program *ChemSketch* klikom na *Copy to ChemSketch* opciju i odabirom opcije *Structure* (**Slika 12**) na samom dnu sučelja. Optimizirana struktura molekule etena sada se pojavljuje u programu *ChemSketch*.



Slika 12 . Premještanje optimizirane 3D strukture u programu *ChemSketch*.

KORAK 12

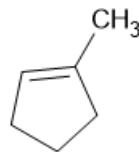
Spremite 2D i 3D strukturu molekule etena na svoju radnu površinu klikom na *File*, zatim *Save As* u prozoru 3D strukture, upišite naziv strukture, odaberite *Save to desktop* opciju i kliknite *Save*. Ponovite isti postupak za 2D strukturu u programu *ChemSketch* (**Slika 13**).



Slika 13. Spremanje 2D ili 3D strukture na računalo

KORAK 13

Nacrtajte molekulu 1-metilciklopent-1-ena prateći prethodno naučene korake (**slika 14**). Zatim primijenite prethodno naučene korake od 2 do 12 na ovom primjeru.

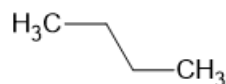


1-methylcyclopent-1-ene

Slika 14. Strukturni prikaz molekule 1-metilciklopent-1-ena

KORAK 14a

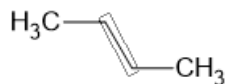
Nacrtajte molekulu but-2-in: odaberite opciju crtanja *DrawNormal*. Kliknite na prazno područje u sučelju. Pojavit će se struktura molekule metana (CH_4). Klikom na taj atom ugljika stvara se jednostruka veza ugljik-ugljik. Držeći pritisnutu tipku *Ctrl* i klikajući na svaki sljedeći ugljikov atom, moguće je nacrtati ugljikovodični lanac od četiri ugljikova atoma prikazan na slici 15.



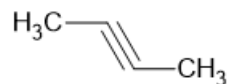
Slika 15. Molekula butana

KORAK 14b

Na prethodno nacrtanoj strukturi, pokažite pokazivač između drugog i trećeg atoma ugljika na jednostrukoj vezi i kliknite dva puta da napravite trostruku vezu (vidjet ćete pravokutnik oko veze prikazane na **slici 16a**), a zatim kliknite na nju da čine trostruku vezu (**slika 16b**) i primijenite prethodno naučene korake od koraka 2 do 12.



a)



b)

Slika 16. a) pravokutnik oko veze, b) But-2-in molekula

1.4. Primjeri zadataka za obradu nastavnog sadržaja

* Istražite na internetu kako izgleda molekula prirodnog kaučuka i prikažite molekulu u programu *ChemSketch*. Kada ste prikazali molekulu prirodne gume, istražite kako molekula izgleda u 3D obliku i primijenite naučene funkcije u programu *ChemSketch*.

1. Nacrtajte molekulu 4-metilpent-2-ena i učinite s njom sljedeće:

- a) generirajte ime,
- b) odrediti molekulsku formulu,
- c) prikažite strukturu sažetom strukturnom formulom, veznim crticama i strukturnom formulom,
- d) uredite strukturu molekule opcijom *Clean Structure*,
- e) prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u,
- f) prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u pomoću štapića i kuglica,
- g) optimizirajte molekulu,
- h) odredite duljinu veze između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- i) otvorite 2D strukturu molekule i napravite cikličku strukturu od nje i generirajte njezino ime i molekularnu formulu,
- j) odredite međuvezni kut u prstenu – između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- k) spremite i 2D i 3D strukturu molekule na radnu površinu računala.

2. Istražite primjenu alkena i alkina u svakodnevnom životu. Odaberite jednu molekulu za prikaz u programu *ChemSketch*. Napišite u svoju bilježnicu primjenu odabrane molekule u svakodnevnom životu.

Spremite optimiziranu 2D i 3D strukturu ovih molekula na svoje računalo.

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

1. Nacrtajte molekulu 2-metilpent-1-en-3-ina i učinite s njom sljedeće:

- a) generirajte ime,
- b) odredite molekulsku formulu,
- c) prikažite strukturu sažetom strukturnom formulom, veznim crticama i strukturnom formulom,
- d) uredite strukturu molekule opcijom *Clean Structure*,
- e) prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u,
- f) prikažite strukturu molekule u *3D Viewer*-u pomoću štapića i kuglica,
- g) optimizirajte molekulu,
- h) odredite duljinu veze između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- i) otvorite 2D strukturu molekule i napravite cikličku strukturu od nje i generirajte njezino ime i molekularnu formulu,
- j) odredite međuvezni kut u prstenu – između prvog i drugog ugljikovog atoma,
- k) spremite i 2D i 3D strukturu molekule na radnu površinu računala.

ARENI

1) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna cjelina: Areni
Nastavna jedinica: Areni-nomenklatura, izomerija, dobivanje i svojstva arena
Predviđen broj nastavnih sati: 2

1.1. Teorijski uvod

Areni su nezasićeni aromatski ugljikovodici, derivati benzena s jednim ili više alifatskih radikala. Areni se u prirodi nalaze u kamenom ugljenu i naftnim derivatima, ali se mogu dobiti i elektrofilnom supstitucijom jednog ili više vodikovih atoma iz benzenske jezgre. Kada je jedan od položaja benzenskog prstena zamijenjen drugim atomom ili atomskom skupinom, spoj je monosupstituirani benzen. Kada je supstituent alkilni, alkenilni ili alkinilni radikal, tada su ova skupina spojeva areni. Mogu biti monosupstituirani, disupstituirani, trisupstituirani i polisupstituirani općom formulom Ar-R ili C₆H₅-R čija se nomenklatura formira dodavanjem imena radikal ispred riječi benzen.

Kada su dva položaja prstena zamijenjena radikalima, spoj je disupstituirani benzen. Postoji posebna nomenklatura za opisivanje relativnih položaja. Koristeći toluen kao primjer, orto orijentacija je položaj 1,2; meta je 1,3, a 1,4 je para položaj gdje je navedeno da mogu postojati dva orto i meta položaja, ali samo jedan para položaj.

Primjer: C₆H₅-CH₃ metilbenzen (toluen) (**slika 4.**) i C₆H₅-CH₂-CH₃ etilbenzen. (**Slika 5.**)

Budući da su atomi vodika u molekuli benzena ekvivalentni, moguća su tri izomerna supstituirana derivata benzena: monosupstituirani i disupstituirani areni.

Primjer: 1,2-dimetil benzen ili trivijalni naziv o-ksilen; 1,3-dimetil benzen (m-ksilen) i 1,4-dimetil benzen (p-ksilen) i C₆H₅-(CH₃)₃ 1,2,3-trimetil benzen (vicinalni izomer); 1,2,4-trimetil benzen (asimetrični izomer) i 1,2,4-trimetil benzen (simetrični izomer) (**Slika 7.**)

Ovisno o vrsti radikala razlikujemo alkilbenzene, alkenilbenzene i alkinilbenzene.

Areni se dobivaju reakcijom alkilacije Friedel Kraftzovom sintezom.



1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

U ovom poglavlju studenti će naučiti:

- nacrtati različite primjere molekula arena i prikazati ih strukturnom, kondenziranom strukturnom formulom i formulom s veznim crticama.
- generirati nazive prethodno nacrtanih molekula arena u programu *ChemSketch*
- odrediti molekulsku formulu prethodno nacrtanih molekula arena u programu *ChemSketch*
- unaprijediti prikaz strukture molekula (podesiti duljine veza i međuveznih kutova) pomoću opcije *Clean structure*
- nacrtati strukturne izomere molekula arena
- prikazati strukturu molekule arena u tri dimenzije
- rotirati molekule arena u dvije i tri dimenzije
- promijeniti način trodimenzionalnog prikaza strukture molekula
- prebaciti molekulu arena iz 2D u 3D
- odrediti duljine veze i međuvezne kutove u molekulama arena
- optimizirati strukture molekula arena
- spremi na računalo dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu strukturu željene molekule

1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

ZADATAK 1

Za crtanje molekule benzena kao osnove aromatskih spojeva arena, prvi korak je otvoriti program *ChemSketch*, a zatim alat *Draw Normal* (). Pomoću ovog alata možete jednostavno nacrtati ravne ili razgranate lance ugljikovodika. Nacrtajte molekulu benzena, ali prvo provjerite je li *Draw Normal* omogućen na alatnoj traci *Structure*, kao i ikona ugljik () odabrana u izborniku *Atoms* (**Slika 1a**). Zatim, da biste to učinili, lijevom tipkom miša kliknite na atom ugljika.

PRIMJER 1

Nacrtajte molekulu benzena, metilbenzena (toluena) i etilbenzena


PRIMJER 2

- Nacrtati primjere monosupstituiranih, disupstituiranih i trisupstituiranih derivata benzena, generirati njihove nazive, odrediti molekulske formule tih molekula te ih prikazati veznim crticama, strukturnom i sažetom strukturnom formulom.
- Prikažite strukturu molekula u tri dimenzije na različite načine, odredite duljine odabranih veza i međuvezne kutove, optimizirajte molekule, rotirajte i pomičite ih u dvije i tri dimenzije.
- spremite 2D i 3D strukturu molekula.

PRIMJER 1

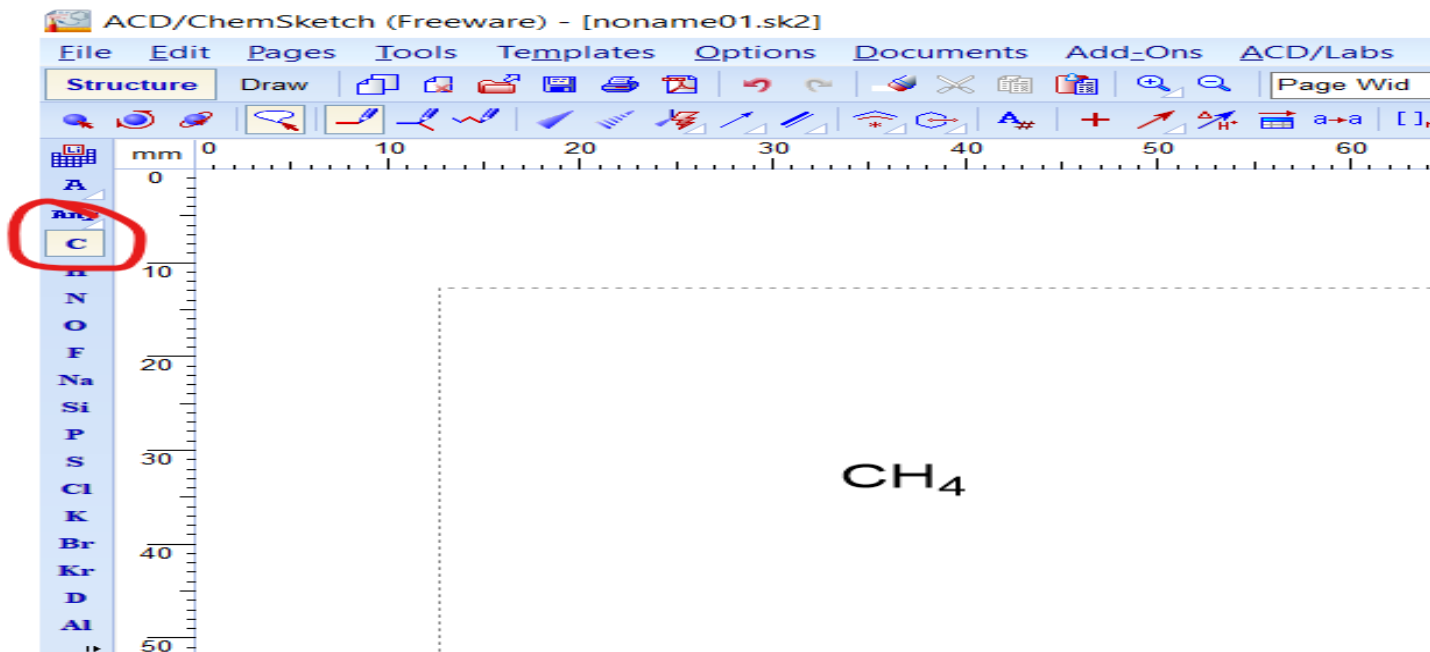
Nacrtajte molekulu benzena pomoću alata za ciklizaciju alkana u cikloalkan iz odgovarajuće strukture programa *ChemSketch*, a zatim odaberite alat *Draw Normal*







KORAK 1 Prvi korak za crtanje molekule benzena je klik na alat *Draw Normal* na alatnoj traci *Structure* i odabir ikone *Carbon*  iz izbornika *Atoms*.

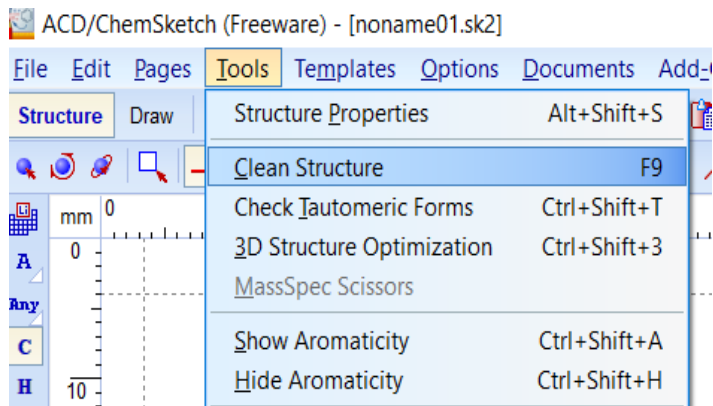
KORAK 2 Za početak crtanja formule potrebno je lijevom tipkom miša računala kliknuti na prazan prostor radne površine i pojavit će se sažeta strukturna formula molekule metana CH₄. (**Slika 1**).

KORAK 3 Označite formulu CH₄ mišem i kada vidite pravokutnik oko formule metana, kliknite na njega da biste dodali metilnu skupinu koja stvara etan H₃C-CH₃.

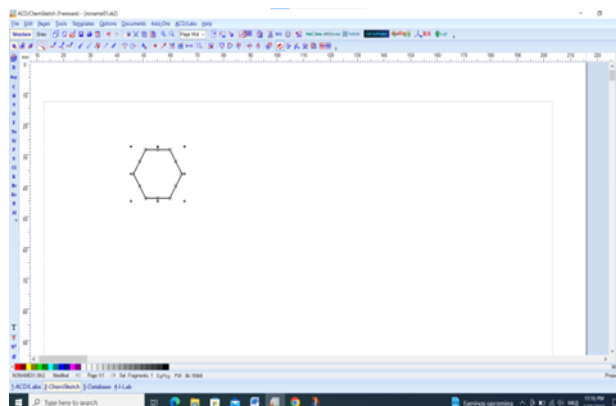


Slika 1. Sažeta strukturna formula molekule metana

KORAK 4 Ljevim klikom miša pritisnite na CH₄ i povucite udesno u krug šest klikova pod određenim kutom, pri čemu će se pojaviti sljedeći članovi niza koji zatvaraju šesteročlani prsten. Potrebno je odabrati cijelu strukturu molekule klikom na  u gornjem lijevom kutu sučelja, a zatim podešavanjem načina odabira molekule klikom na  kojim se prikazuje ova ikona: . Dok držite klik, povucite i odaberite cijelu molekulu, odaberite ikonu *Clean structure* () ili provedite slijed radnji prikazan na **slici 2a** pri čemu se dobiva struktura cikloheksana s podešenim međuveznim kutovima prikazana na **slici 2b**.





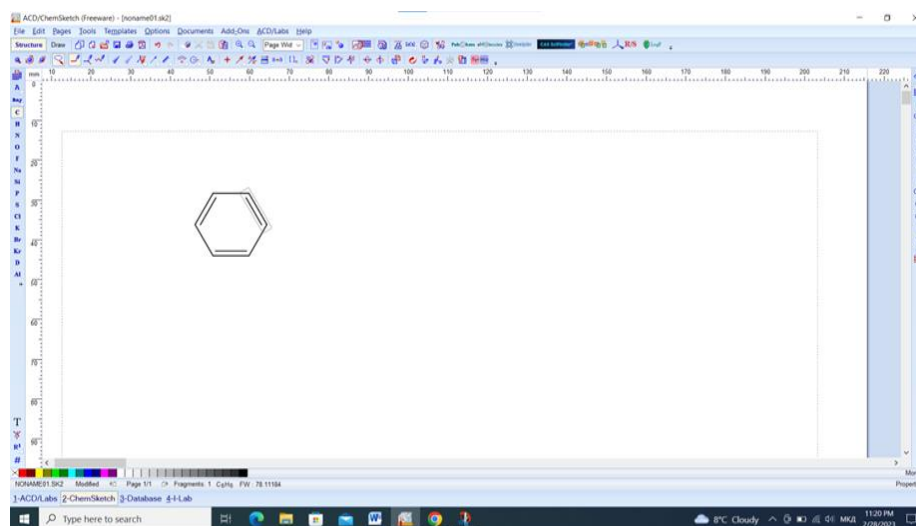
a)



b)

Slika 2. a) korištenje alata *Clean Structure* b) Struktura molekule cikloheksana

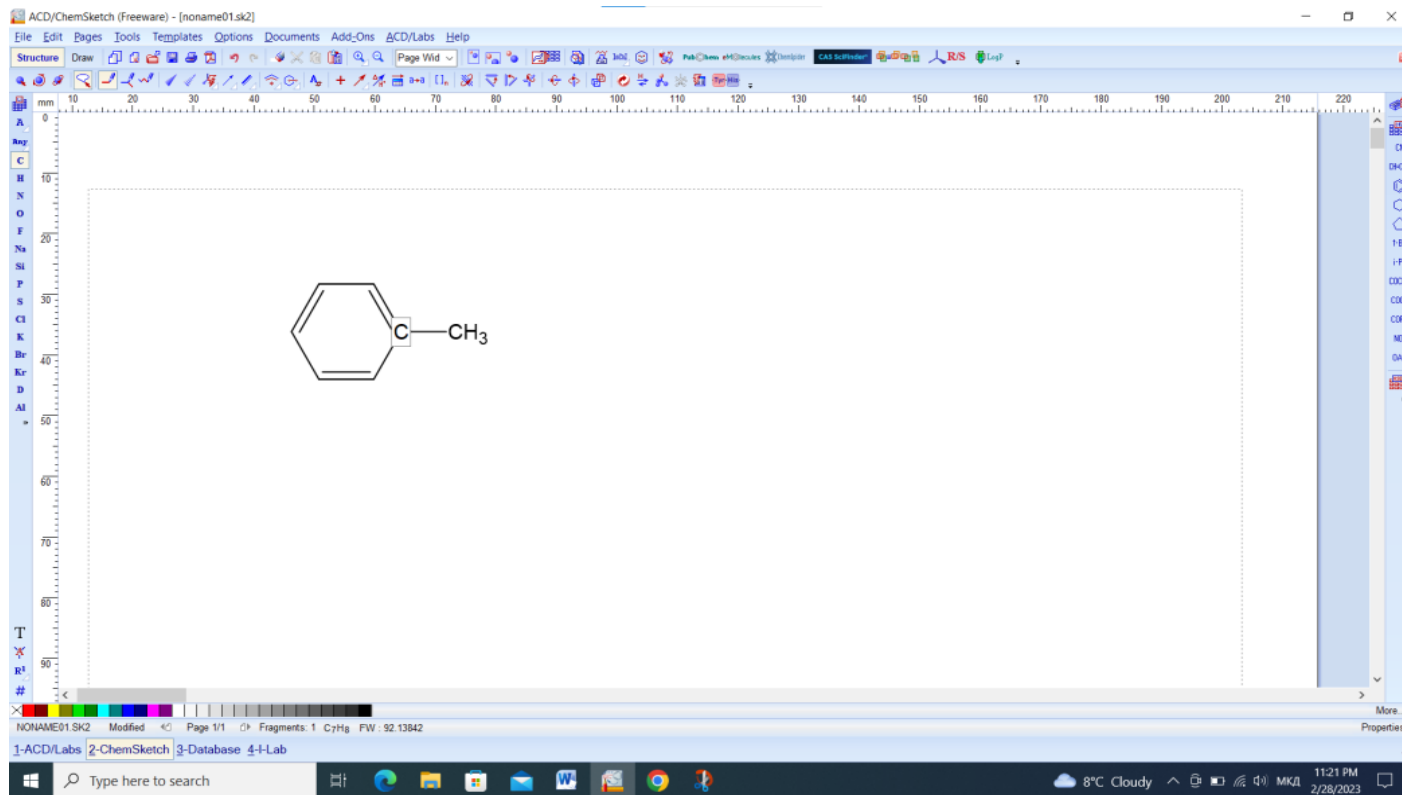
KORAK 5 Za crtanje dvostrukih veza u postojećoj strukturi cikloheksana odaberite ikonu ugljika () na alatnoj traci te način crtanja *DrawNormal* () , a zatim lijevom tipkom miša kliknite na jednostruke ugljik-ugljik veze između prvog i trećeg ugljikovog atoma, trećeg i četvrtog i između petog i šestog. U konačnici dobivate strukturu molekule benzena prikazanu na **slici 3**.



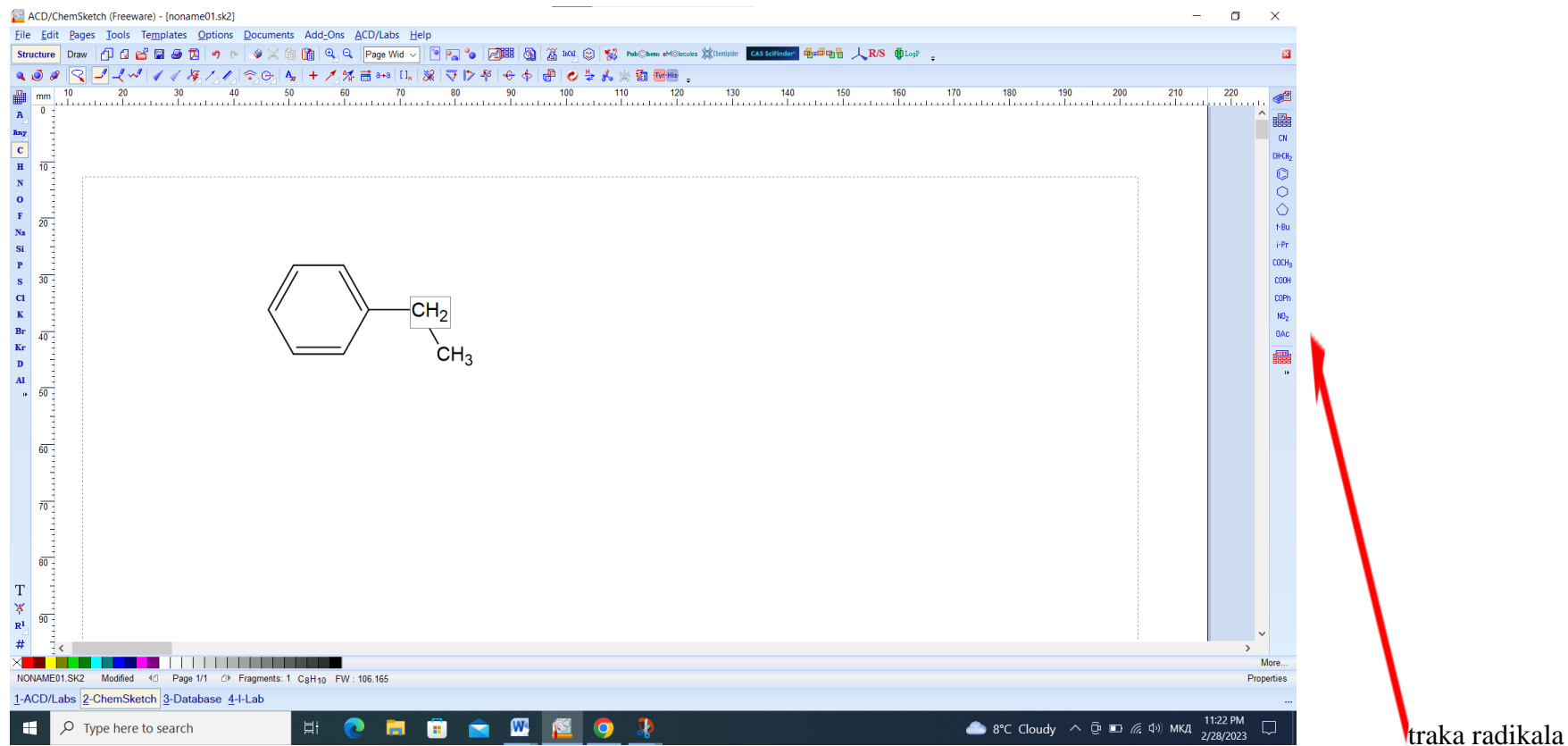
Slika 3. Struktura molekule benzena

KORAK 6

Klikom na bilo koji ugljikov atom u benzenskom prstenu dodajte metilnu skupinu na postojeću strukturu spoja (**slika 4**). Klikom na ugljikov atom iz metilne skupine moguće je nacrtati etilnu skupinu iz metilne (**slika 5**).



Slika 4. Struktura molekule metilbenzena (toluena)



Slika 5. Struktura molekule etilbenzena

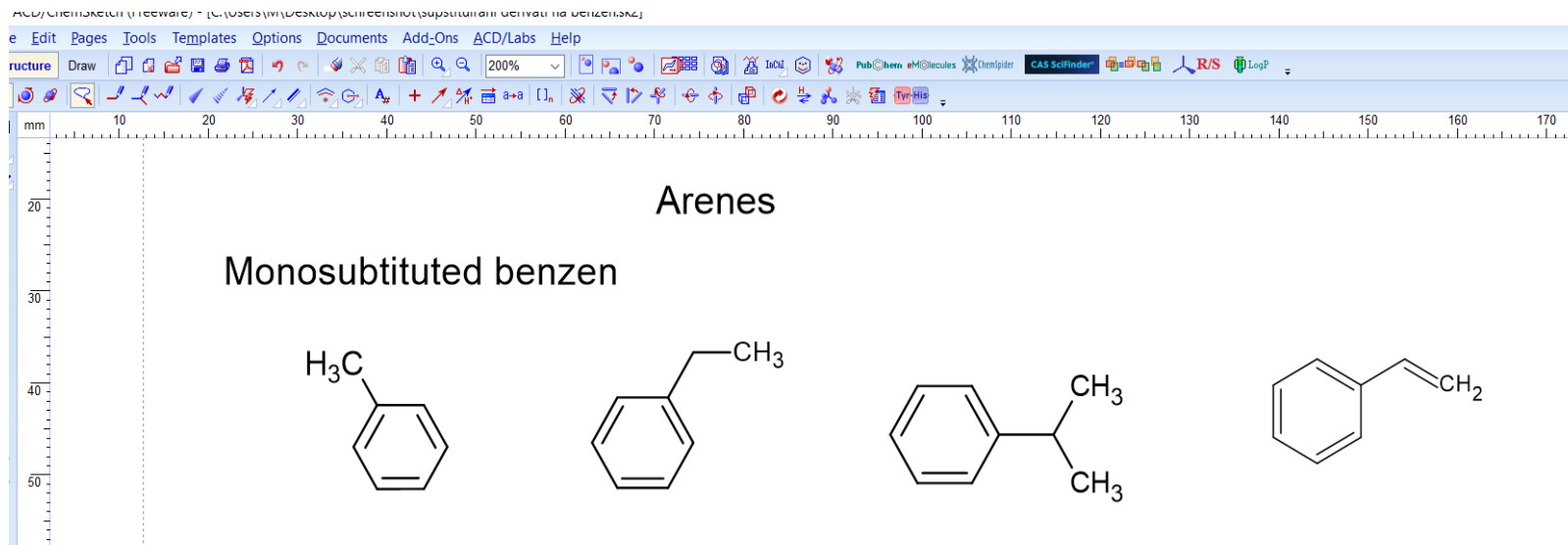
KORAK 7

Na desnoj strani sučelja možete pronaći tablicu radikala (alkilnih skupina) koja sadrži najčešće potrebne radikale (alkilne skupine) za brzo crtanje strukture. Koristite skup alata *Charges/Radicals* iz alatne trake *Atom* za promjenu ili crtanje novih alkilnih skupina.

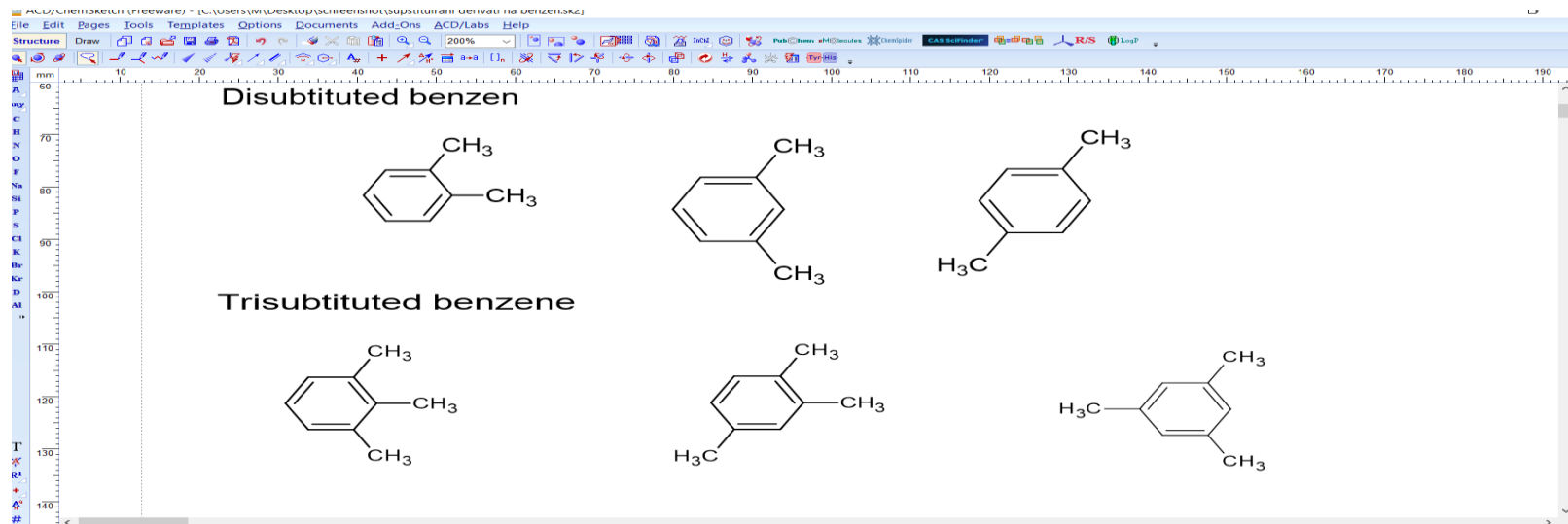
PRIMJER 2

KORAK 1 Pokušajte nacrtati monosupstituirane derivate benzena prikazane na **slici 6** te disupstituirane i trisupstituirane derivate benzena prikazane na **slici 7**.

Navedeno nacrtajte na način opisan u **KORACIMA 1-7 primjera 1**.




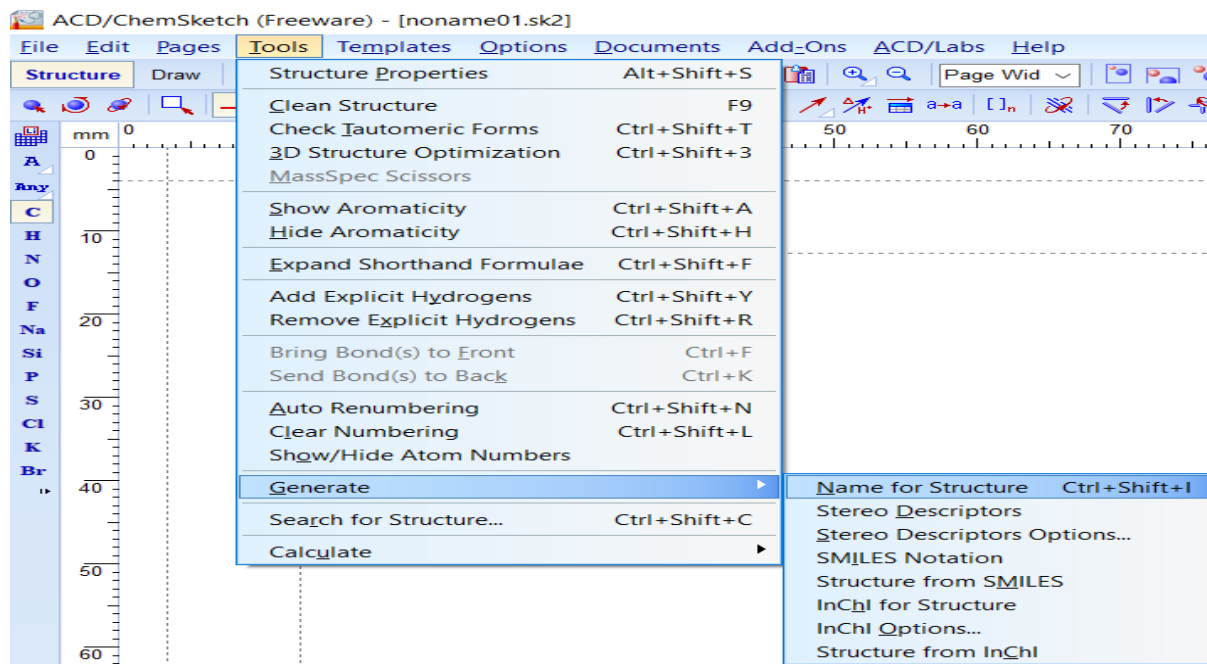
Slika 6. Strukture molekula monosupstituiranih derivata benzena



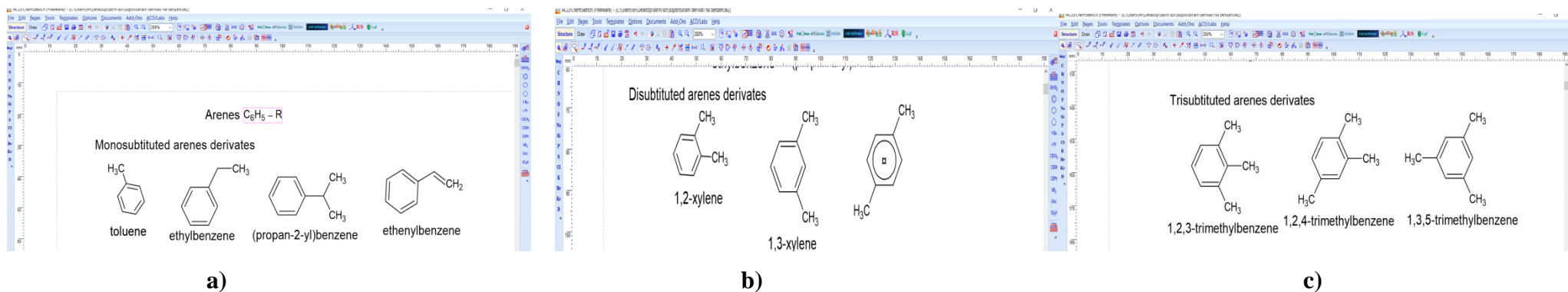
Slika 7. Strukture molekula disupstituiranih i trisupstituiranih derivata benzena

KORAK 2

Aromatski spojevi imaju više različitih naziva koji se koriste za istu molekulu. Razlikuju se sustavni (prema IUPAC nomenklaturi) i trivijalni nazivi (uvriježeni nazivi). Za imenovanje prethodno nacrtanih molekula označite odgovarajuću molekulu odabirom ikone , a zatim odaberite *Tools*, zatim u padajućem izborniku *Generate* i *Name for Structure*. Navedeni postupak prikazan je na **slici 8**, a na **slici 9a** prikazane su strukture nacrtanih molekula te njihovi pripadajući nazivi: metilbenzen (toluen), etilbenzen, izopropilbenzen (kumen), vinilbenzen (stiren), na **slici 9b** 1,2-dimetilbenzen (ksilen), 1,3-dimetilbenzen i 1,4-dimetilbenzen i na **slici 9c** 1,2,3-trimetilbenzen, 1,2,4-trimetilbenzen i 1,3,5-trimetilbenzen.

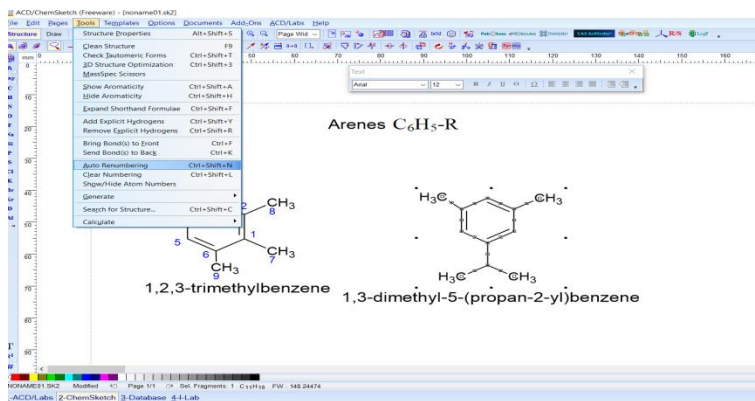


Slika 8. Generiranje naziva nacrtanih spojeva



Slika 9. a) Generirani nazivi monosupstituiranih derivata benzena, b) generirani nazivi disupstituiranih derivata benzena, c) generirani nazivi trisupstituiranih derivata benzena

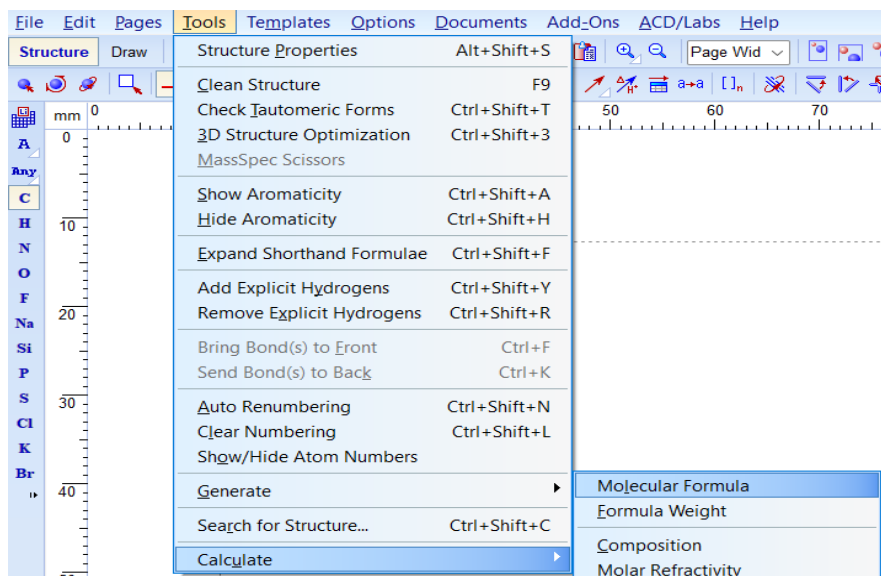
KORAK 3 Za numeriranje atoma ugljika u strukturi spoja odaberite *Tools*, a zatim *Show/Hide Atom Numbers* (slika 10).



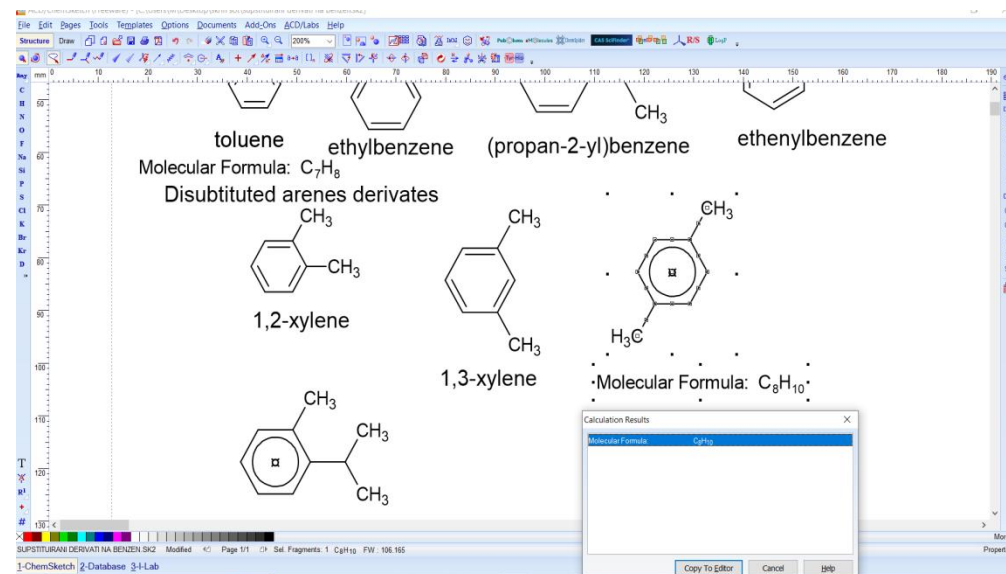
Slika 10. numeriranje ugljikovih atoma u odabranoj nacrtanoj strukturi spoja

KORAK 4

Označite jednu od nacrtanih struktura i odaberite *Tools*, a zatim *Calculate* i u konačnici *Molecular formula* čime ćete generirati molekulsku formulu odabranog spoja (slika 11a). Molekulska formula odabranog spoja prikazuje se u novom prozoru. Za prikaz molekulske formule na radnom listu, koji sadrži strukturu i naziv odabrane strukture molekule, odaberite *Copy to Editor*. (Slika 11b)



a)

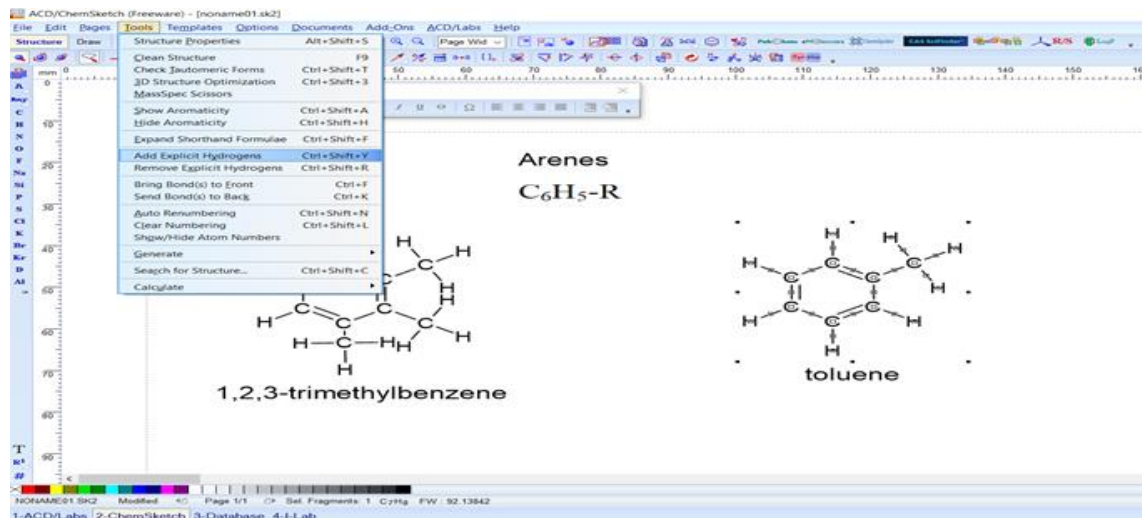


b)

Slika 11. a) Slijed radnji za izračun molekulske formule odabrane strukture spoja, b) prozor s izračunatom molekulskom formulom odabrane strukture spoja

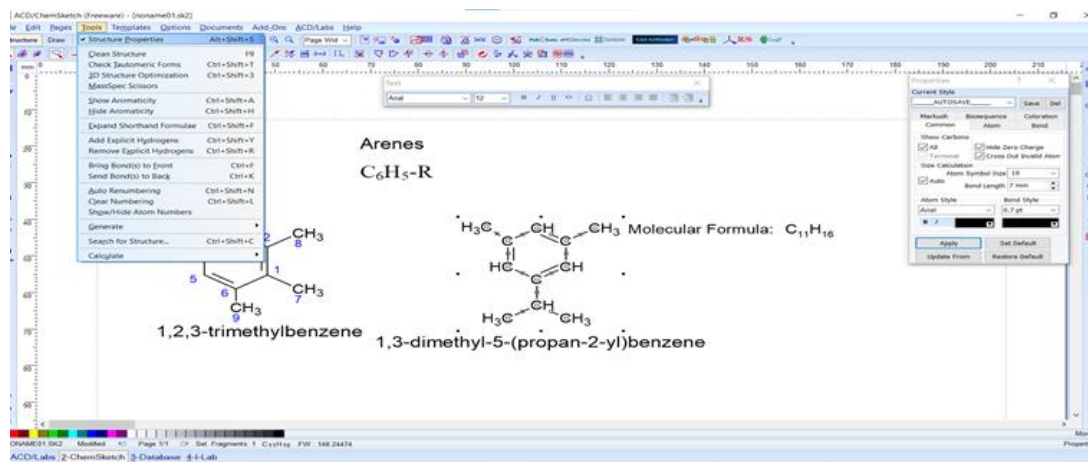
KORAK 5

Za prikaz strukture molekule metilbenzena (toluena) strukturnom formulom, odaberite *Tools*, a zatim *Add Explicit Hydrogens*. Nakon toga odaberite *Clean Structure* za uređivanje prikazane strukture, a zatim ponovno odaberite *Tools* te klikom na *Structure Properties* otvorit će se novi prozor u kojem u dijelu *Show Carbons* odaberite mogućnost *all* (**Slika 12**).




Slika 12. Strukturna formula molekule metilbenzena (toluena)

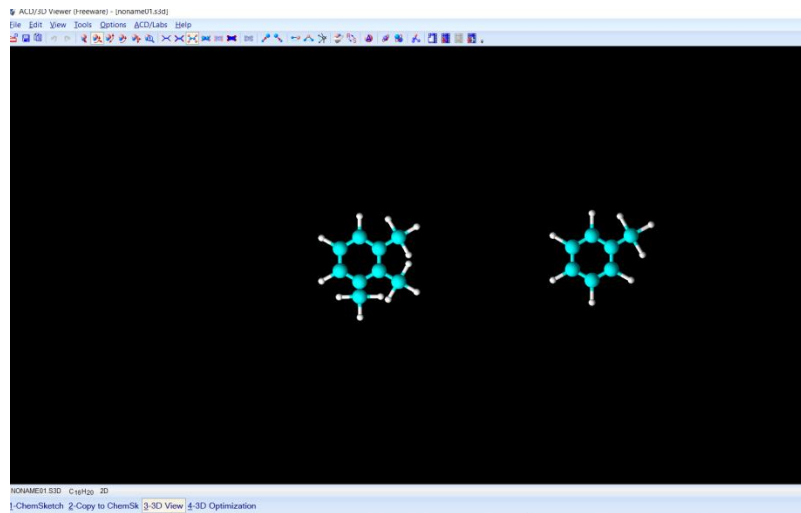
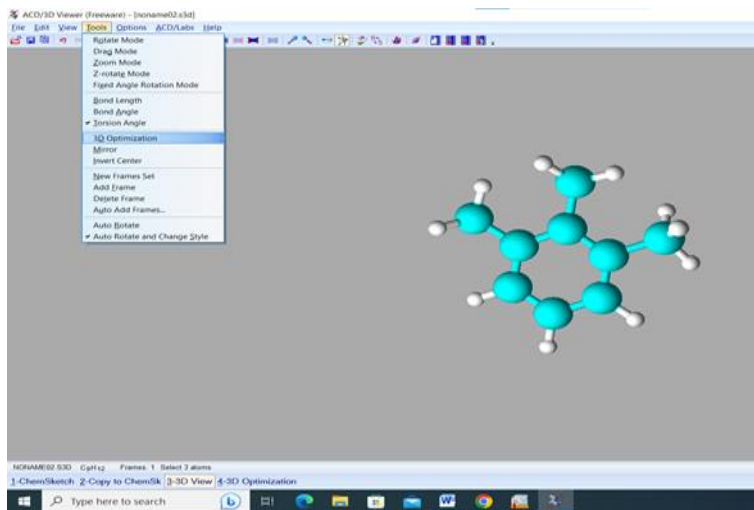
KORAK 6 Ponovite prethodno opisani postupak prikazivanja strukturne formule molekula na primjeru 1,3-dimetil-5-izopropilbenzena (Slika 13)



Slika 13. Strukturna formula 1,3-dimetil-5-izopropilbenzena

KORAK 7

Prikažite strukturne formule metilbenzena i 1,2,3-trimetilbenzen u tri dimenzije tako da prvo označite željene strukture molekula, a zatim odaberete  na alatnoj traci. Otvorit će se novi prozor (*3D Viewer*) s 3D prikazom struktura ovih dviju molekula (**Slika 14**). Postavljanjem ikone miša na svaki pojedini atom pojavljuje se njegova brojčana oznaka prema IUPAC nomenklaturi i njegove koordinate.



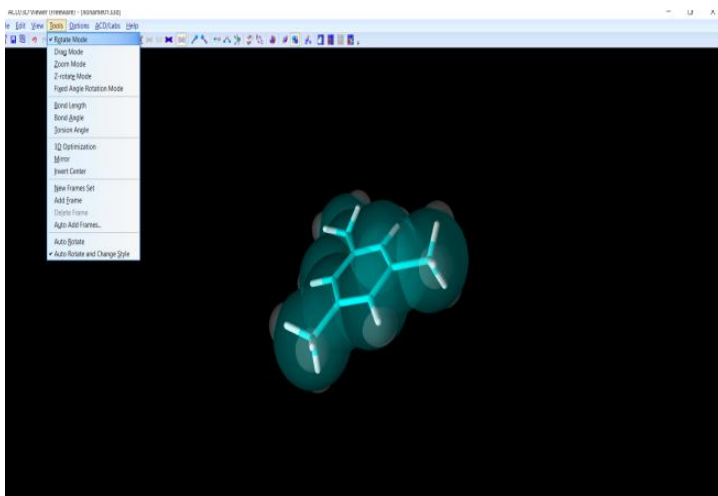
Slika 14. 3D strukture molekula metilbenzena i 1,2,3-trimetilbenzena

KORAK 8 Ponovite postupak prikaza trodimenzionalne strukture molekule na primjeru molekule 1,3,5-trimetilbenzena. Pokušajte koristiti svaku od

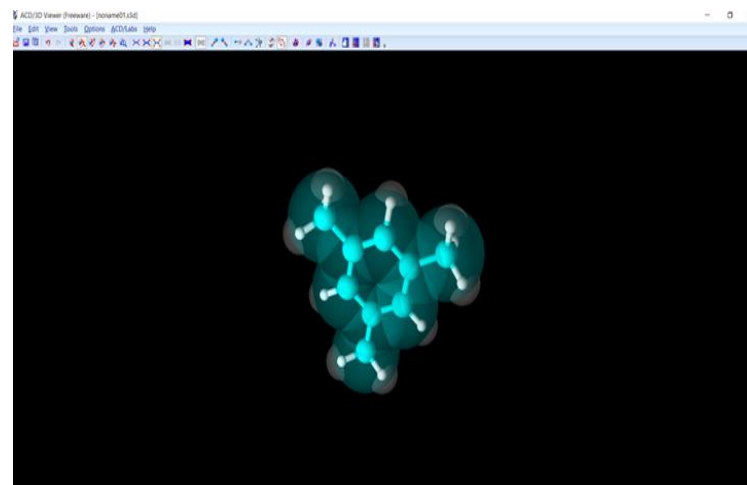
moćnosti rotiranja, pomicanja i odabira struktura molekula ponuđenih na gornjoj alatnoj traci: , a zatim prikažite trodimenzionalne

strukture molekula na svaki od načina koje program nudi, a mogućnosti se također prikazuju na alatnoj traci: . Za automatsko

rotiranje molekula odaberite ikonu  (**Slika 15 a i b**).



a)



b)

Slika 15. Prikaz trodimenzionalne strukture molekule 1,3,5-trimetilbenzena pomoću štapića (a) i pomoću štapića i kuglica (b) te prikaz strukture iz dva različita kuta uslijed korištenja mogućnosti rotacije strukture molekule u prostoru.

1.4. Primjeri zadataka za obradu nastavnog sadržaja

1. Nacrtajte sve strukturne izomere trimetilbenzena. Napišite nazive svih izomera, zatim odaberite jedan i učinite s njim sljedeće:

- nacrtajte formulu molekule trimetilbenzena,
- generirajte naziv u programu i odredite molekulsku formulu te molekule,
- prikažite molekulu formulom veznim crticama, strukturnom i kondenziranom strukturnom formulom,
- prikažite strukture molekule u tri dimenzije na različite načine,
- odredite duljine odabranih veza i specifične kutove veza,

- f) optimizirajte molekulu,
- g) rotirajte molekulu u dvije i tri dimenzije,
- h) spremite 2D i 3D strukturu na računalo.

2. Istražite primjenu arena u svakodnevnom životu. Odaberite jednu molekulu za prikaz u programu *ChemSketch*. Napišite u svoju bilježnicu primjenu odabrane molekule u svakodnevnom životu. Spremite optimiziranu 2D i 3D strukturu odabranih molekula na svoje računalo.

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

1. Nacrtajte sve strukturne izomere ksilena. Napiši nazive svih izomera, zatim odaberi jedan i učini s njim sljedeće:

- a) generirajte naziv molekule,
- b) odredite molekulsku formulu,
- c) prikažite strukturu molekule sažetom strukturnom formulom, formulom veznim crticama i molekulskom formulom,
- d) uredite strukturu molekule opcijom *Clean Structure*,
- e) prikažite strukturu molekule u 3 dimenzije,
- f) prikažite trodimenzionalnu strukturu molekule modelom štapića i kuglica,
- g) optimizirajte molekulu,
- h) spremite 2D i 3D strukturu molekule na računalo.

LEWISOVE STRUKTURNE FORMULE I VSEPR MODEL

1) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna cjelina: Lewisove strukturne formule i VSEPR model
--

Nastavna jedinica: Crtanje Lewisovih strukturnih formula
Predviđen broj nastavnih sati: 2

1.1. Teorijski uvod

Lewisove strukturne formule su prikaz načina vezanja atoma u molekuli ili ionu u kojima se valentni elektroni prikazuju točkicama koje predstavljaju vezne ili nevezne elektronske parove.

Prilikom crtanja Lewisovih strukturnih formula koriste se određena pravila koja su objašnjena u nastavku:

1. Potrebno je odrediti ukupan broj valentnih elektrona u molekuli ili ionu.

2. Atome treba složiti u “kostur” molekule:

– atomi vodika uvijek su periferni ili krajni atomi jer se mogu vezati samo jednostrukom kovalentnom vezom

– središnji atom od preostalih je onaj čiji je koeficijent elektronegativnosti najmanji.

3. Preostale atome treba povezati jednostrukom kovalentnom vezom sa središnjim atomom. Za to povezivanje utrošio se određeni broj elektrona, koji treba oduzeti od ukupnog broja valentnih elektrona. Preostale valentne elektrone potrebno je rasporediti kao nevezne elektronske parove do okteta elektronegativnijim atomima.

4. Potrebno je provjeriti jesu li svi atomi postigli odgovarajuću konfiguraciju plemenitog plina (dublet, oktet). Ako središnji atom nije postigao oktet, tada je potrebno pomoću neveznih parova s perifernog/perifernih atoma formirati višestruke veze do postizanja okteta.

5. Potrebno je provjeriti odgovara li broj veznih parova valenciji središnjeg atoma.

Teorija odbijanja elektronskog para valentne ljuske (VSEPR) model je koji se koristi u kemiji za predviđanje geometrije pojedinih molekula iz broja elektronskih parova koji okružuju njihove središnje atome. VSEPR teorija se koristi za predviđanje rasporeda elektronskih parova oko središnjih atoma u molekulama, osobito jednostavnih i simetričnih molekula. Središnji atom definiran je u ovoj teoriji kao atom koji je vezan za dva ili više drugih atoma, dok je terminalni atom vezan samo za još jedan atom.

1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

- prikazati atome, molekule ili ione Lewisovom simbolikom
- opisati prostorni raspored čestica u elementarnim tvarima i molekulama kemijskih spojeva primjenom VSEPR modela
- izračunati međuvezni kut između triju atoma u prikazanim molekulama
- vizualizirati prikazane molekule ili ione u 3D modelu
- vizualizirati 3D strukture kompleksnih iona koristeći gotove predloške iz programa
- primijeniti VSEPR model pri određivanju prostornog oblika molekula ili iona

1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

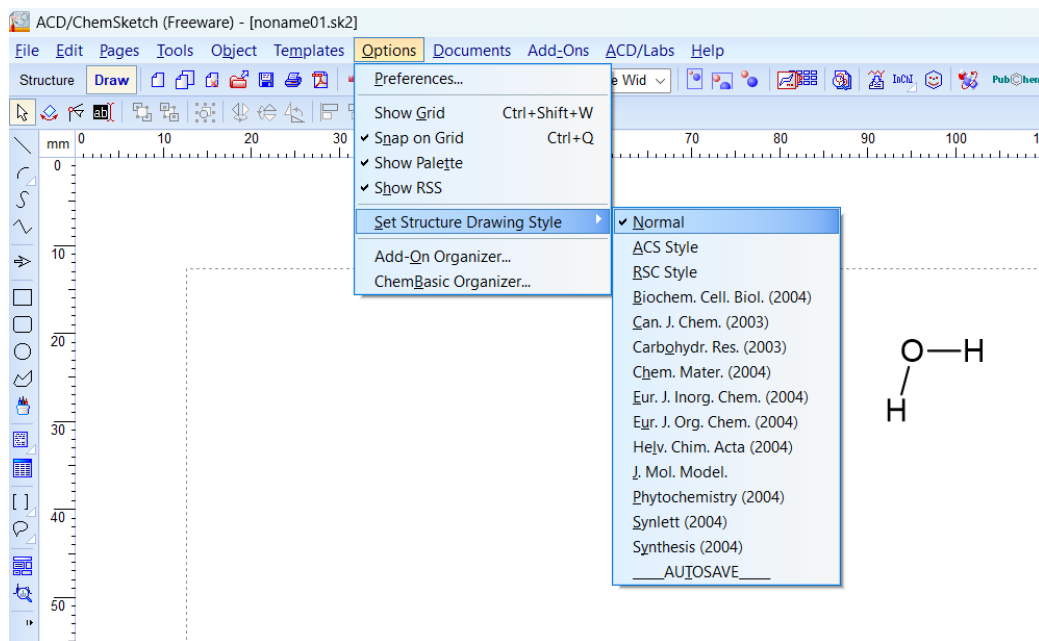
A) Kao prvi primjer proučit ćemo kako nacrtati Lewisovu strukturnu formulu molekule vode (H_2O)

KORAK 1 Na lijevoj alatnoj traci u periodnom sustavu elemenata (*Periodic Table of Elements*) odabire se atom kisika i klikne u prazan prostor unutar područja za crtanje.

(Pojavit će se molekulska formula molekule vode.)

KORAK 2 Potrebno je označiti dobivenu strukturu, zatim kliknuti alat *3D structure optimisation*.

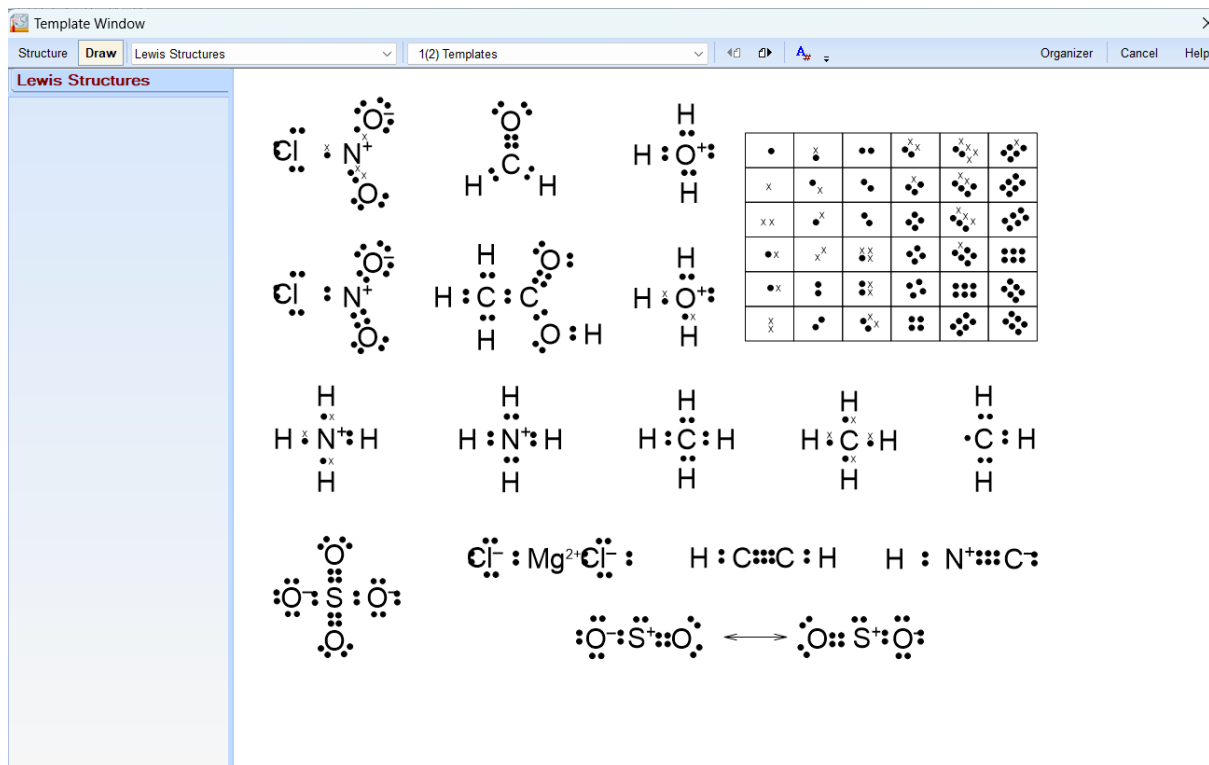
KORAK 3 Ponovno označimo strukturu nacrtane molekule, kliknemo *Options*, zatim postavimo strukturu *Structure Drawing*, a zatim kliknemo *Normal*. Navedeni postupak prikazan je na **slici 1**.



Slika 1. Optimizacija nacrtane strukture.

KORAK 4 Za bolji pregled Lewisovih strukturnih formula, nakon što nacrtamo željenu molekulu, možemo kliknuti *Fit all* kako bismo povećali sliku.

KORAK 5 Da bismo nacrtali Lewisovu strukturnu formulu molekule vode, potrebno je kliknuti na *Templates*, a zatim na *Templates Window* nakon čega otvaramo prozor koji prikazuje Lewisove točkice. Navedeni postupak prikazan je na **slici 2**.

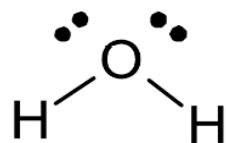


Slika 2. Prozor za dodavanje Lewisovih točkica prikazu nacrtane molekule.

KORAK 6 U gornjem desnom prozoru morate odabrati određeni način prikaza Lewisovih točkica i kliknuti pored atoma kojem se pridružuju.

KORAK 7 S opcijom *Selection Option* možemo smanjiti dodane Lewis točkice, dok ih s *Rotation Option* možemo rotirati tako da budu postavljene u ispravnoj orijentaciji pored atoma.

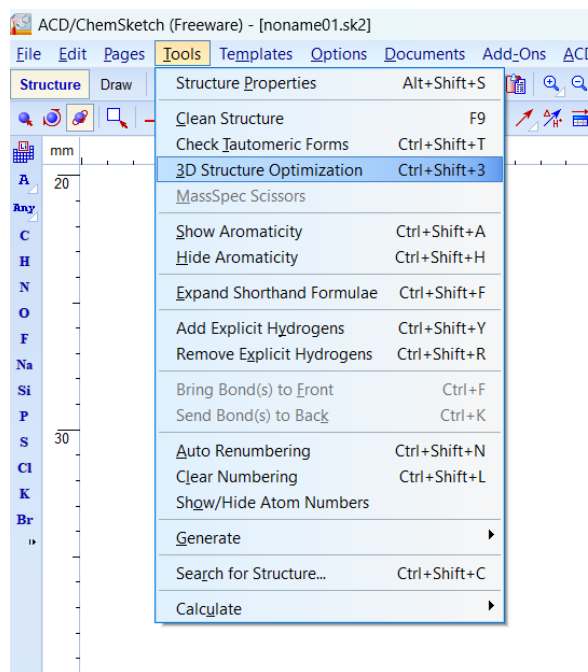
KORAK 8 Slijedeći ove korake, dobili smo Lewisovu strukturnu formulu molekule vode. (**Slika 3.**)



Slika 3. Lewisova strukturna formula molekule vode.

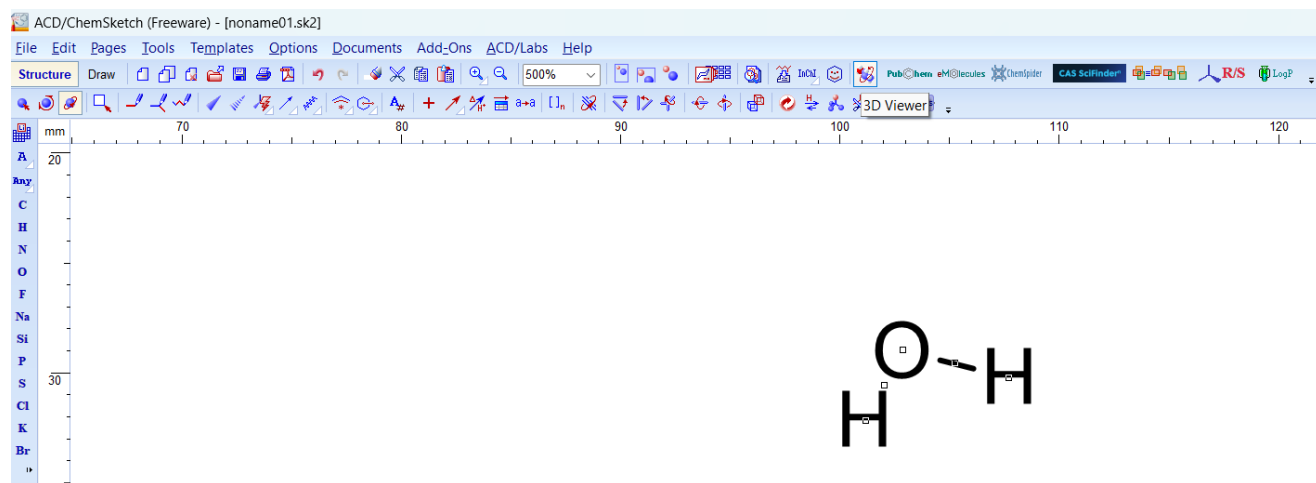
KORAK 9 U sljedećem koraku prikazat ćemo 3D strukturu molekule vode. U ovom ćemo odjeljku ponoviti korake 1-4.

Nakon toga označavamo nacrtanu molekulu i kliknemo *Tools*, a zatim *3D structure optimization*. Navedeni postupak prikazan je na **slici 4**.



Slika 4. Optimizacija nacrtane strukturne formule.

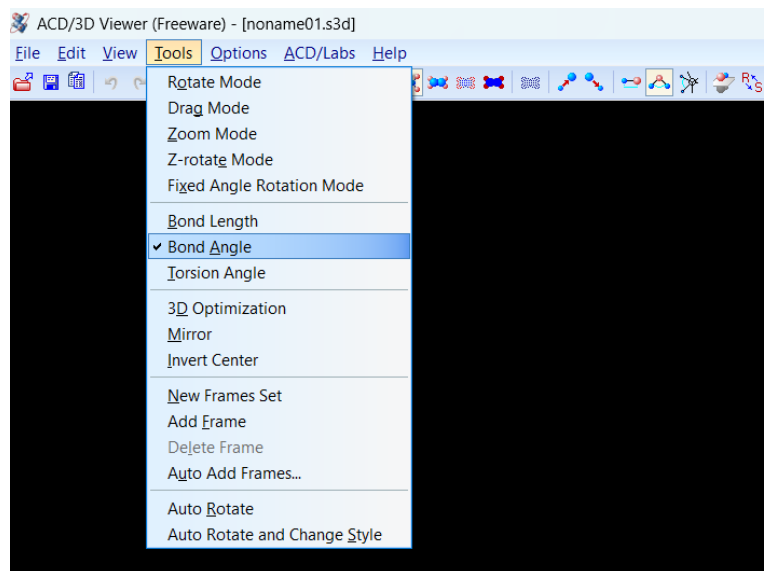
KORAK 10 Nakon što smo izvršili potrebne radnje, na gornjoj alatnoj traci kliknemo *3D viewer*. Otvorit će se novi prozor s 3D strukturom molekule. Navedeni postupak prikazan je na **slici 5**.



Slika 5. Prebacivanje strukture na 3D prikaz.

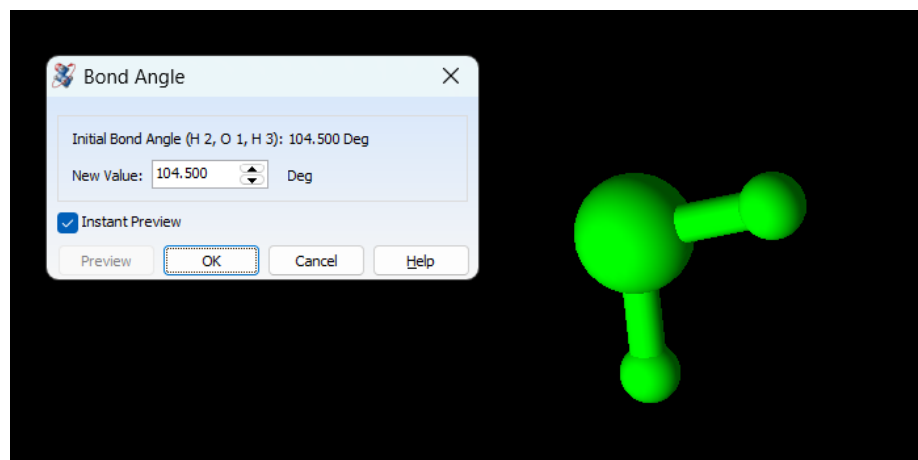
KORAK 11 U 3D prozoru molekula se može rotirati u svim smjerovima i tako se može proučavati prostorna struktura same molekule.

KORAK 12 Da bi se izračunao kovalentni kut između dvije kovalentne veze u molekuli, potrebno je odabrati *Bond Angle*. Navedeni postupak prikazan je na **slici 6**.



Slika 6. Prikaz načina izračuna kovalentnog kuta između dvije kovalentne veze u molekuli vode.

KORAK 13 Nakon što smo napravili prethodni korak, s pokazivačem miša potrebno je prvo kliknuti na atom vodika (klikom na atom mijenja se boja u zelenu), zatim atom kisika i na kraju drugi atom vodika. Otvorit će nam se prozor koji će pokazati kovalentni kut unutar molekule vode.



Slika 7. Očitane vrijednosti kovalentnog kuta između dvije kovalentne veze.

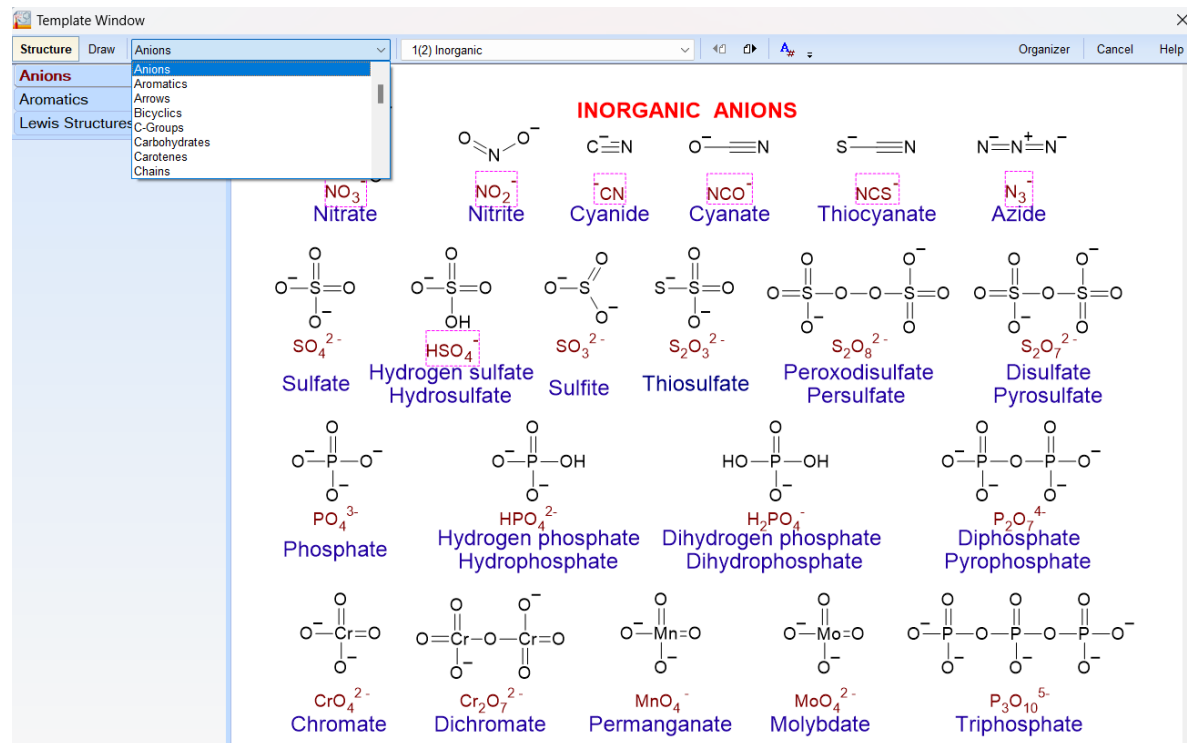
KORAK 14 Na temelju prikazane 3D strukture molekule potrebno je poznavati teoriju VSEPR-a kako bi se odredio oblik molekule

Na isti način kao što je opisano za molekulu vode, molekule metana i molekule amonijaka također se mogu pokazati u nastavnom procesu. Potrebno je slijediti iste korake koji su objašnjeni u odjeljku za prikaz Lewisove strukturne formule molekule vode.

Molekula amonijaka može se predstaviti odabirom atoma dušika u lijevoj alatnoj traci na kojoj se nalaze atomi pojedinih elemenata, dok se molekula metana može predstaviti odabirom atoma ugljika. Klikom na prazno područje programa prikazuje se molekulska formula spoja, a slijedeći gore navedene korake za prikaz molekule vode, može se prikazati Lewisova strukturna formula ovih spojeva i te molekule mogu se prikazati u 3D strukturi.

B) Kao drugi primjer proučit ćemo kako nacrtati Lewisovu strukturnu formulu SULFATNOG ANIONA.

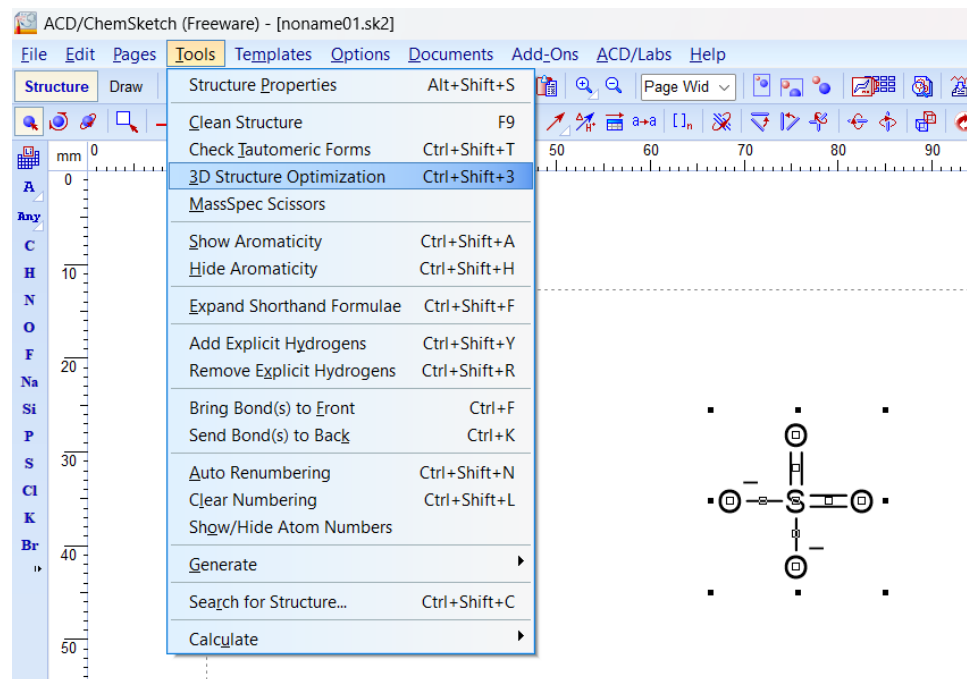
KORAK 1 Na gornjoj alatnoj traci kliknite *Template* i odaberite *Template Window*. Nakon toga otvara se prozor u kojem odabiremo anione za područje prikaza u lijevom polju, a u desnom polju odabiremo anorganske. Navedeni postupak prikazan je na **slici 8**.



Slika 8. Prozor s predlošcima aniona.

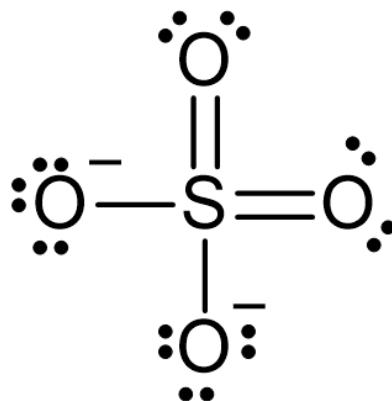
KORAK 2 Nakon što smo napravili prvi korak, u navedenom prozoru koji se otvorio, odabiremo željeni anion na koji želimo prikazati strukturnu formulu, u ovom slučaju to je sulfatni anion. Kliknemo na odabrani anion, zatim se prozor zatvori i klikne na navedeni anion na područje za crtanje struktura.

KORAK 3 Označavamo nacrtani anion i kliknemo *Tools*, a zatim *3D structure optimization*. Navedeni postupak prikazan je na **slici 9**.



Slika 9. Crtanje anorganskih aniona.

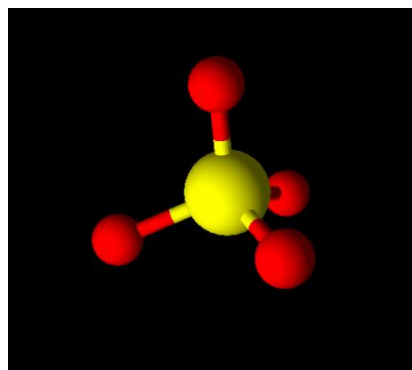
KORAK 4 Prikaz Lewisovih točkica prikazan je u načinu crtanja Lewisove strukturne formule molekule vode.



Slika 10. Lewisova strukturna formula sulfatnog aniona.

KORAK 5 Nakon tog koraka, u gornjem alatu, klikne se opcija prebacivanja nacrtane molekule u 3D klikom na *3D viewer*, koji prikazuje 3D strukturu aniona i prostorni raspored atoma u nacrtanom anionu.

Prikazana 3D struktura molekule može se rotirati u svim smjerovima i tako se može proučavati raspored atoma u prostoru.



Slika 11. 3D prikaz sulfatnog aniona.

KORAK 6 Prikazanom anionu može se odrediti kovalentni kut objašnjen u prijašnjim koracima, a poznavanjem VSEPR teorije može se odrediti oblik.

1.4. Primjeri zadataka za obradu nastavnog sadržaja

1. Nacrtajte Lewisove strukturne formule sljedećih molekula: ugljikov(IV) oksid i sumporov(IV) oksid.

- Prikažite ove molekule u 3D strukturi.
- Odredite kovalentni kut s tim molekulama.
- Odredite oblik molekule poznavajući VSEPR teoriju.

2. Nacrtajte Lewisove strukturne formule sljedećih iona: nitrita i sulfita.

- Prikažite ove molekule u 3D strukturi.
- Odredite kovalentni kut s tim molekulama.
- Odredite oblik molekule poznavajući VSEPR teoriju.

3. Istražite i odaberite jednu molekulu koja je bitna za svakodnevni život čovjeka. Nacrtajte odabranu molekulu u programu *ChemSketch* i prikažite joj Lewisovu strukturnu formulu. Prikažite odabranu molekulu u 3D strukturi i proučite njezinu prostornu građu.

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaj

4. Nacrtajte Lewisovu strukturnu formulu sumporne kiseline.

- Prikažite ove molekule u 3D strukturi.
- Odredite kovalentni kut s tim molekulama.
- Odredite oblik molekule poznavajući VSEPR teoriju.

KIRALNOST I OPTIČKA AKTIVNOST

1. OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna cjelina: Kiralnost i optička aktivnost
Nastavna jedinica Kiralnost i optička aktivnost
Predviđen broj nastavnih sati: 2

1.1. Teorijski uvod

Optička aktivnost povezana je s unutarnjim prostornim rasporedom atoma u molekuli. Postoje parovi molekula koji su u istom odnosu jedni s drugima kao objekt i njegova slika u ogledalu. Optička aktivnost odvija se u širokom rasponu organskih i anorganskih složenih spojeva. Organski ugljikovi spojevi su najčešće optički aktivne tvari. Uvjet za optičku aktivnost je činjenica da su četiri različita supstituenta vezana za kiralni ugljikov atom.

Takav atom ugljika naziva se asimetrični (kiralni = chiro = grčki ruka) ugljikov atom (kiralno središte molekule). Nekompatibilnost objekta s njegovom zrcalnom slikom naziva se kiralnost. Parovi tvari koje sadrže optički aktivni ugljik i javljaju se u dva oblika (predmet – zrcalna slika) nazivaju se enantiomeri, ranije optički antipodi. Ako molekula sadrži više središta kiralnosti, povećava se broj enantiomera.

Za strukture s acikličkim lancima broj optičkih antipoda jednak je 2^n , gdje je n broj kiralnih centara molekula. S većim brojem asimetričnih atoma, neki izomeri mogu biti simetrični u cjelini. Primjer su izomeri vinske kiseline s dva identična središta kiralnosti u molekuli.

Oznaka enantiomera

Enantiomeri koji zakreću ravninu polariziranog svjetla u desno nazivaju se desnozakrećući i označeni su znakom +. Enantiomeri koji zakreću ravninu polariziranog svjetla u lijevo nazivaju se lijevozakrećući i označeni su znakom -.

Ekvimolarna mješavina oba enantiomera naziva se racemična smjesa (racemat) i nema loma svjetlosti (jednaka je količina + i - enantiomera).

D-; L- enantiomeri

U velikom broju slučajeva znakovi za rotaciju su samo fizička veličine, a odnos između njih i strukture teško je definirati.

Zbog toga su uvedeni standardi po kojima se uspoređuju pojedinačne konfiguracije na asimetričnim centrima. U kemiji šećera, ovaj standard je gliceraldehid - njegov desnozakrećući antipod označen je simbolom D- i lijevozakrećući L-. U kemiji aminokiselina i proteina, ovaj standard je alanin - njegov desnozakrećući antipod označen je simbolom D- i lijevozakrećućim antipodom L-. Budući da ova notacija nije odgovarala, kemičari su se složili izraziti apsolutnu konfiguraciju sustava pomoću Cahn-Ingold-Prelog R,S-sustava, prema kojem je svaki centar kiralnosti označen zasebno.

(R dolazi od latinskog *rectus*, desno; S od latinskog *sinister*, lijevo).


1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

- opisati pojam kiralnosti, optičke aktivnosti, enantiomera
- odrediti kiralnost spoja na temelju strukturne formule molekule
- crtati strukturne formule i formule s veznim crticama molekula raznih kiralnih spojeva
- generirati nazive nacrtanih spojeva u programu *ChemSketch*
- generirati molekulske formule spojeva
- optimizirati strukture nacrtanih molekula pomoću opcije *Clean structure*
- nacrtati optičke izomere zadanih spojeva
- označiti kiralne centre (asimetrično supstituirane ugljikove atome) u strukturi molekule zadanoga spoja
- prikazati strukture molekula kiralnih spojeva u tri dimenzije
- promatrati strukture kiralnih spojeva iz različitih kutova
- okretati i pomicati nacrtane strukture u 2D i 3D
- odrediti duljine veza i međuvezne kutove u molekulama različitih kiralnih spojeva


1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

KORAK 1

U radnom prostoru odaberite *Structure*  

Odaberite *Draw Normal*  mogućnost crtanja (ikona *DrawNormal* odabrana je prema zadanim postavkama, osim ako nakon pokretanja programa niste odabrali drugu ikonu unutar strukturne trake).

KORAK 2


Odaberite ugljikov atom  na *Atom Toolbar* (također odabrano prema zadanim postavkama).

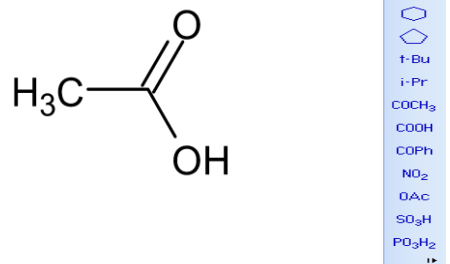
Nakon toga, lijevim klikom miša kliknite u prazan prostor kako bi se generirao metan - CH₄ (**Slika 1.**).



Slika 1. Molekula metana

KORAK 3

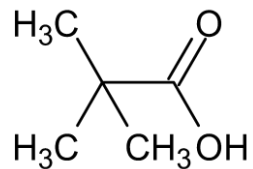
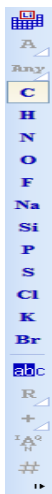
Kliknite na opciju *Table of Radicals*  na traci supstituenata - nakon aktiviranja možete birati između nekoliko mogućih supstituenata - odaberite karboksilnu skupinu COOH i povežite s metanom (**Slika 2.**).



Slika 2. Alatna traka sa supstituentima

KORAK 4

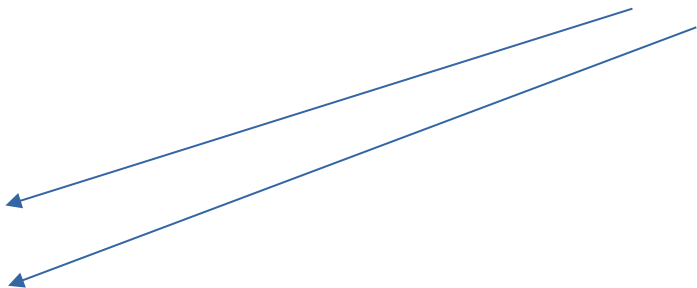
Iz prozora *Atom Toolbar* odaberite **C** i spojite tri CH₃ skupine na posljednji ugljik s lijeve strane (**Slika 3.**):

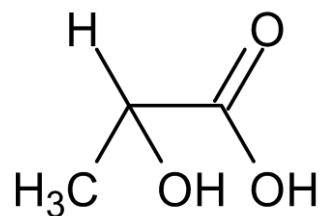
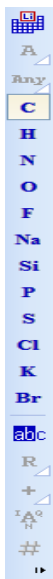


Slika 3. Alatna traka *Atom Toolbar*

KORAK 5


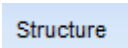

Iz *Atom Toolbar*, odaberite atome vodika i kisika te zatim zamijenite dvije metilne skupine sa jednom hidroksilnom skupinom i atomom vodika (**Slika 4.**).

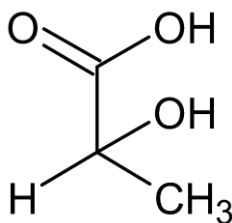




Slika 4. Dodavanje supstituenata

KORAK 6

Upotrijebite ikonu *Select/Move*  i označite formulu, odaberite radni prostor *Draw*  *Draw* i odaberite  *Rotate 90°* ikonu (rotacija za 90°) (Slika 5.).



Slika 5. Rotacija molekule za 90°

KORAK 7

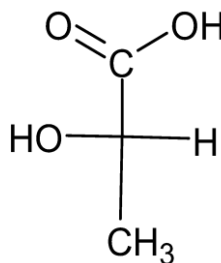
Odaberite radni prostor *Structure*  *Draw*

Sukcesivnim klikom na hidroksilnu skupinu,, atom vodika i metilnu skupinu pomaknite skupine u željeni položaj (**Slika 6.**) D-mliječna kiselina (D-2-hidroksipropanska kiselina)




Slika 6. Prilagodba nacrtane strukture, D-mliječna kiselina

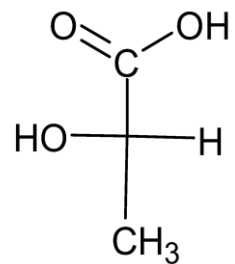
Enantiomeri su označeni prema karakterističnoj skupini (hidroksi) u odnosu na orijentaciju na asimetričnom ugljikovom atomu (**Slika 7.**) L-mliječna kiselina (L-2-hidroksipropanska kiselina).



Slika 7. Označavanje enantiomera, L-mliječna kiselina


KORAK 8

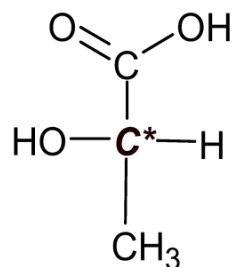
Odaberite *Menu Tools – Generate – Name for Structure* (ili odaberite ikonu  na glavnoj alatnoj traci) - naziv engleske strukture generirat će se prema IUPAC nomenklaturi (**Slika 8.**) - (2-hidroksipropanska kiselina)



Slika 8. Imenovanje nacrtane strukture - 2-hidroksipropanska kiselina

KORAK 9

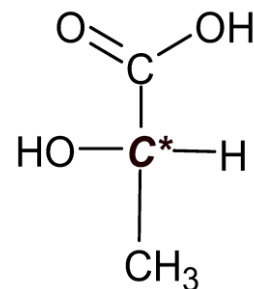
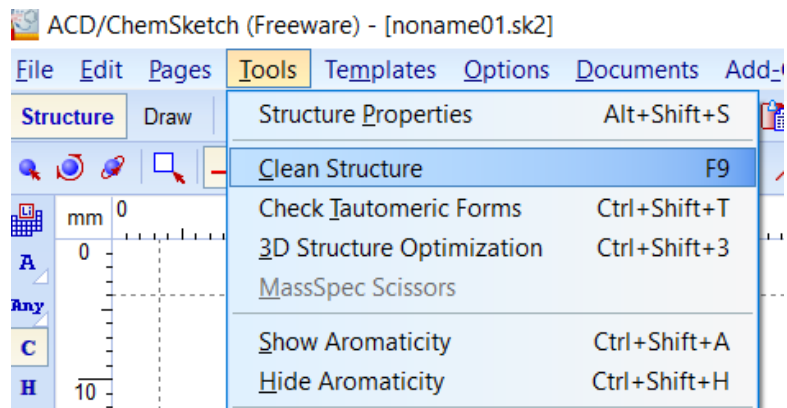
Ako je potrebno označiti kiralni ugljik, odaberite ikonu *Edit Atom Label*  na alatnoj traci *Atom Toolbar* kliknite Kiralni centar (ugljik), te će se pojaviti tablica *Edit Label*, u kojoj je potrebno odabrati ili napisati C* i odabrati *Insert* (**Slika 9.**).



Slika 9. Označavanje asimetričnog ugljikovog atoma

KORAK 10



Stvorene strukture mogu se optimizirati pomoću *Clean Structure* funkcije u programu (**Slika 10.**).

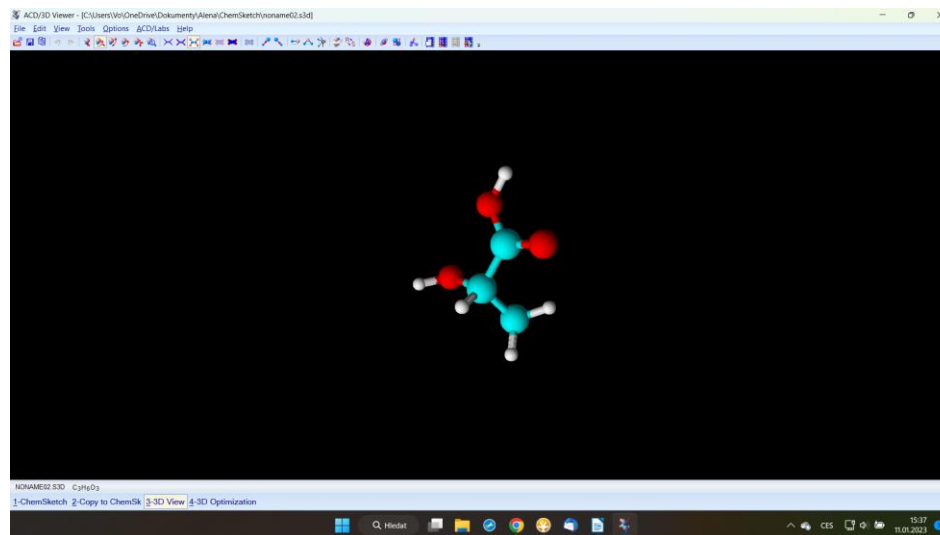
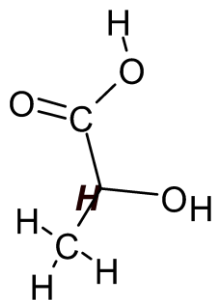


Slika 10. Optimizacija nacrtane strukture 2-hidroksipropanske kiseline

KORAK 11

3D Viewer opcija se koristi za vizualizaciju kemijskih struktura u 3D prostoru. Aktivirajte ovu opciju u izborniku na gornjoj traci *ACD/Labs*. U donjem lijevom kutu nalaze se ikona za prebacivanje iz 2D u 3D preglednik koristeći *Viewer* opciju. Odaberite nacrtanu strukturu i optimizirajte je za 3D vizualizaciju pomoću

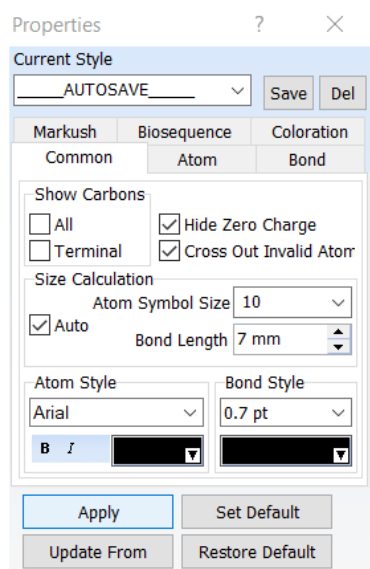
ikone *3D Optimization*: . Odaberite optimiziranu strukturu i pomoću *3D Viewer*  u gornjem desnom kutu glavne alatne trake trake, pogledajte strukturu u *3D Viewer* (Slika 11.).



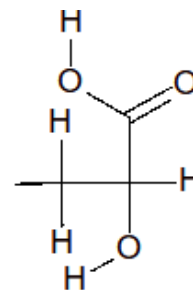
Slika 11. 3D prikaz nacrtane strukture 2-

hidroksipropanske kiseline

KORAK 12 U nacrtanoj formuli možete sakriti ili zadržati sve atome u formulama - stvoriti potpunu ili pojednostavljenu strukturnu formulu. Na glavnoj traci odaberite *Tools - Structure Properties* (kako je prikazano na **Slici 12a**). Ako se želite vratiti na izvornu formulu - kliknite na *All option* i *Apply* ikonu.

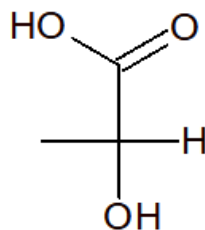


Slika 12a. Prikaz prozora *Properties*



Slika 12b. Dobivena strukturna formula






Za prikaz svih vodika u molekuli odaberite *Tools* u glavnoj traci i *Add Explicit Hydrogens* - **Slika 12c**. Ako želite ukloniti vodikove atome, kliknite na *Tools* i *Remove Explicit Hydrogens*.



Slika 12c. Kompletna strukturna formula



KORAK 13

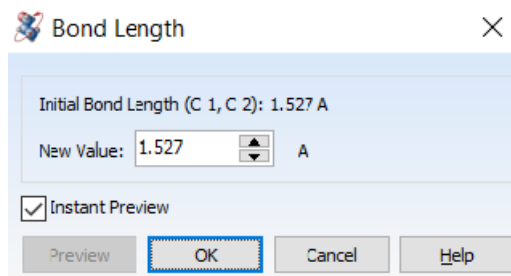
Isprobajte različite načine prikaza molekule u 3D pregledniku.

Kliknite na *3D Viewer* ikonu . Prikažite veze različitim prikazima klikom na ikone , pokušajte automatsku rotaciju molekula klikom na ikonu  ili na ostale mogućnosti rotacije klikom na neku od ponuđenih opcija . Klikom na ikonu  automatski dolazi do rotacije molekula i promjene stila prikaza strukture molekula.



KORAK 14

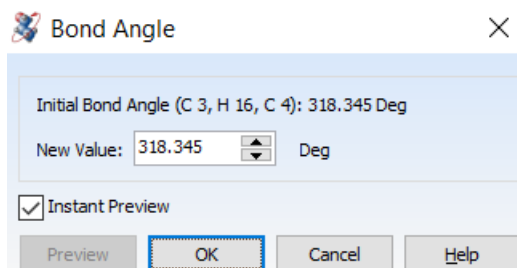
Kut veze i određivanje duljine veze

Određivanje duljine veze: kliknite na *3D Viewer*  zatim  i kliknite na atome između kojih želite odrediti duljinu veze - prozor prikazuje duljinu odabrane veze (**Slika 13.**).



Slika 13. Prikaz duljine odabrane veze u molekuli

Određivanje veznog kuta: kliknite na *3D Viewer*  zatim  i kliknite na atome između kojih želite odrediti vezni kut - prozor prikazuje kut veze (**Slika 14**).



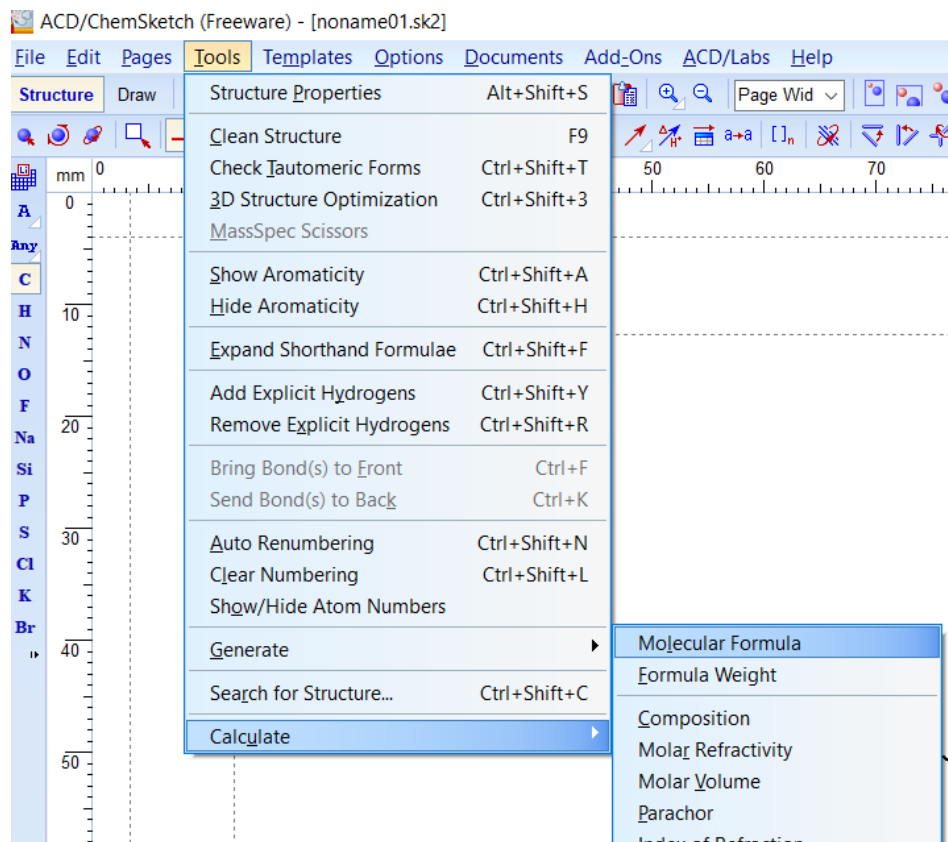
Slika 14. Prikaz vrijednosti odabranog veznog kuta

KORAK 15

Prikazivanje molekulske formule i drugih svojstava nacrtane strukture.

Odaberite *Tools - Calculate - Molecular Formula*.

Da biste prikazali molekulsku formulu na novom listu sa strukturom i nazivom nacrtane molekule, kliknite na *Copy to Editor*. Iz izbornika možete odabrati i druge funkcije - molarnu masu, itd. (**Slika 15**.)



Relativna molekulska masa: 90.07794

Molekulska formula: $C_3H_6O_3$

Slika 15. Prikaz molekulske formule odabrane strukture

KORAK 16

Spremite strukturu na računalo.

1.4 Primjeri zadataka za obradu nastavnog sadržaja

Potražite informacije o pojavi kiralnih spojeva u prirodi, njihovoj povezanosti s metabolizmom i njihovoj upotrebi u svakodnevnom životu.

Prikažite drugi optički izomer mliječne kiseline prema istim uputama.

Odredite:

- a) naziv spoja,
- b) molekulsku formulu,
- c) izradite strukturnu i formulu veznim crticama,
- d) optimizirajte formulu s *Clean Structure*,
- e) izradite 3D model,
- f) prikažite strukturu iz različitih kuteva,
- g) odredite duljinu veze između prvog i drugog atoma ugljika,
- h) odredite vezni kut između prvog i drugog atoma ugljika.

Potražite informacije o proteinogenim aminokiselinama.

1.5 Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

Odredite formule L i D serina i odredite:

- a) naziv spoja,
- b) molekulsku formulu,
- c) strukturnu i formulu veznim crticama,
- d) optimiziranu formulu koristeći opciju *Clean Structure*,
- e) 3D model molekule,
- f) prikažite molekule iz različitih kuteva,
- g) duljinu veze između prvog i drugog atoma ugljika,
- h) vezni kut između prvog i drugog atoma ugljika.

ALKOHOLI

1) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna cjelina: Organski spojevi s kisikom
Nastavna jedinica: Alkoholi
Predviđen broj nastavnih sati: 2

1.1. Teorijski uvod

Alkoholi su skupina organskih spojeva kod kojih je jedna ili više hidroksilnih skupina (-OH) vezana na ugljikov atom osnovnog lanca.

Hidroksilna skupina (-OH) je funkcionalna skupina alkohola.

Alkoholi se mogu kategorizirati prema različitim kriterijima:

- Prema vrsti ugljikovodičnog lanca ili prstena na koji je vezana hidroksilna skupina mogu se razlikovati alifatski alkoholi, ciklički i aromatski alkoholi;
- Prema vrsti atoma ugljika na koji je vezana hidroksilna skupina razlikuju se primarni alkoholi, sekundarni alkoholi i tercijarni alkoholi;
- Prema broju hidroksilnih skupina u strukturi alkoholi mogu biti jednovalentni (jedna hidroksilna skupina), dvovalentni (dvije hidroksilne skupine) ili trovalentni (tri hidroksilne skupine).

Metode njihova dobivanja poznate su od davnina kroz proces fermentacije iz groždanog šećera kao najstariji način dobivanja alkohola, a kasnije s tehnološkim razvojem i sve većom primjenom, mogu se dobiti iz više različitih procesa, među kojima je i onaj katalitički koji se koristi za industrijsku proizvodnju hidratacijom alkena, te za dobivanje u laboratorijskim uvjetima nukleofilnom supstitucijom i drugim metodama.

Sustavna imena alkohola tvore se tako da se korijenu imena doda nastavak -OL. Lanac se numerira tako da ugljikov atom na kojemu je vezana hidroksilna skupina dobije što manji broj. Ako alkohol ima dvije hidroksilne skupine, nastavak je -diol, a ako ima tri hidroksilne skupine, nastavak je -triol (primjeri: CH₂(OH)-CH₂(OH) etan-1,2-diol ili (glikol); CH₂(OH)-CH(OH)-CH₂(OH) propan-1,2,3-triol (glicerol) itd.

Prilikom imenovanja alkohola najduži lanac ugljikovodika uvijek se numerira s one strane gdje -OH skupina ima nižu vrijednost, a supstituenti se pišu prema položaju u glavome lancu. Ako u alkoholu postoje različiti supstituenti, oni se imenuju abecednim redom.

Zbog svoje velike raznolikosti i svojstava, alkoholi su velika i vrlo važna skupina spojeva. Najpoznatiji i najvažniji predstavnici alkohola su metanol, etanol, glikol i glicerol.

Naziv alkohola	Metanol (metilni alkohol)	Etanol (Etilni alkohol)	Propanol (propilni alkohol)	Butanol (butilni alkohol)	etan 1,2-diol (glikol)	Propane-1,2,3-triol (glicerol)	benzilni alkohol
Molekulska formula	CH ₄ O	C ₂ H ₆ O	C ₃ H ₈ O	C ₄ H ₁₀ O	C ₂ H ₆ O ₂	C ₃ H ₈ O ₃	C ₇ H ₈ O





1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

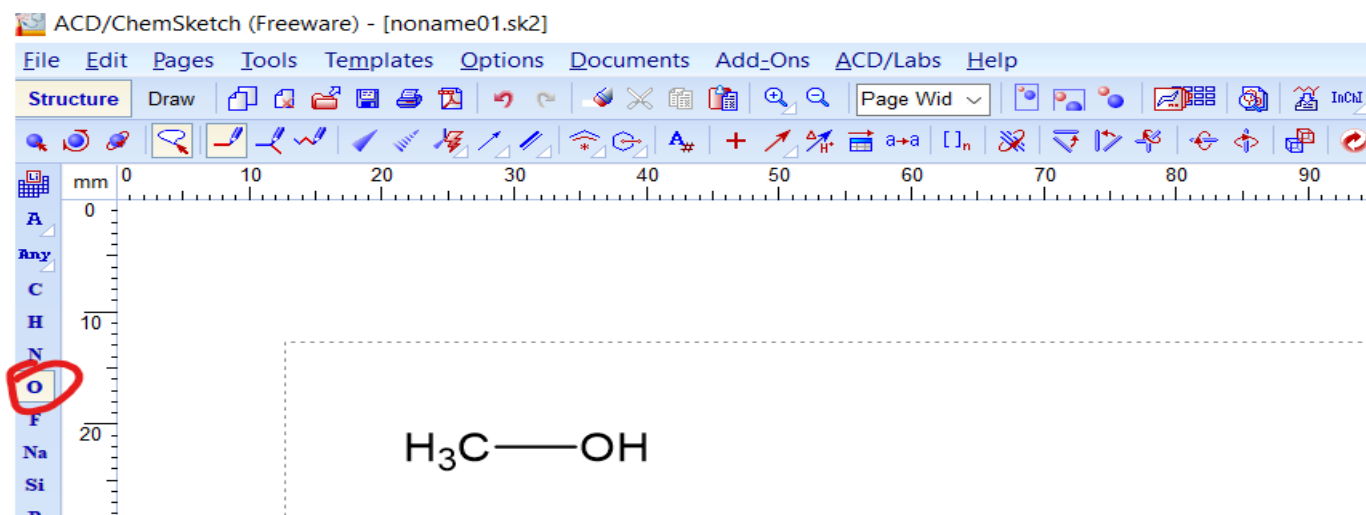
U ovom poglavlju učenici će naučiti:

- nacrtati različite primjere molekula alkohola i prikazati ih strukturnom, kondenziranom strukturnom formulom i formulom s veznim crticama.
- generirati nazive prethodno nacrtanih molekula alkohola u programu *ChemSketch*
- odrediti molekulsku formulu prethodno nacrtanih molekula alkohola u programu *ChemSketch*
- optimizirati prikaz strukture molekula (podesiti duljine veze i međuveznih kutova) pomoću opcije *Clean Structure*
- nacrtati strukturne izomere alkohola
- trodimenzionalno prikazati strukturu molekula alkohola
- rotirati molekule alkohola u dvije i tri dimenzije
- promijeniti način trodimenzionalnog prikaza strukture molekula
- optimizirati strukture molekula alkohola
- spremi na računalo dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu strukturu željene molekule alkohola

1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

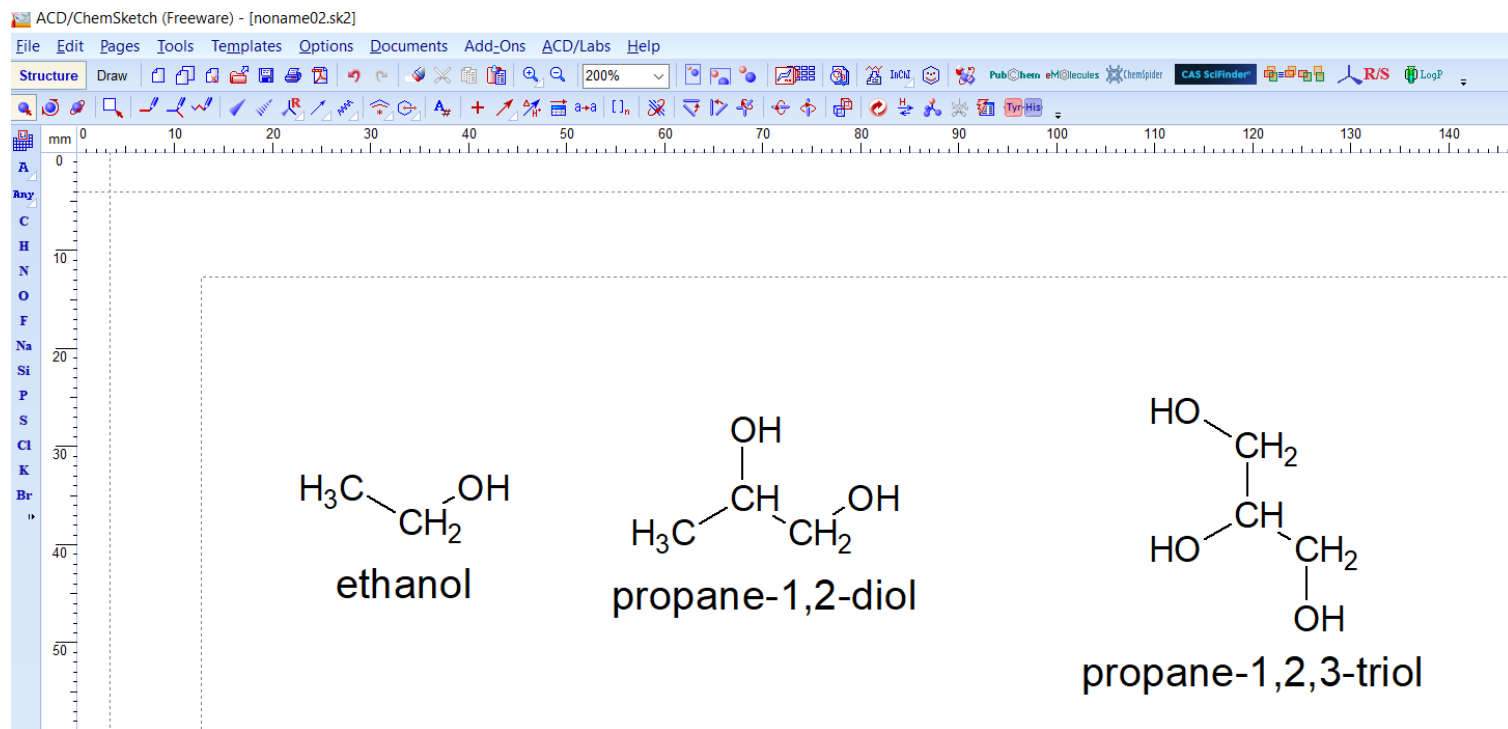
PRIMJER 1 Nacrtajte primjere jednovalentnog, dvovalentnog i trovalentnog alkohola.

KORAK 1 Crtanje jednovalentnih, dvovalentnih i trovalentnih alkohola može se izvršiti odabirom  iz atomske alatne trake. Na alatnoj traci *Structure* kliknite *Draw Normal* . Kliknite na radni prostor pri čemu će se pojaviti CH₄. Klikom na CH₄ formirat ćete lanac od dva ugljikova atoma CH₃ – CH₃. Da biste nacrtali alkohol metanol kao primjer jednovalentnog alkohola potrebno je dodati -OH skupinu tako da se odabere *Oxygen*  iz atomske alatne trake. Klikom na jedan od ugljikovih atoma -CH₃ skupina postaje -OH skupina (**Slika 1.**). Označite cijelu strukturu i odaberite opciju *Clean Structure* .




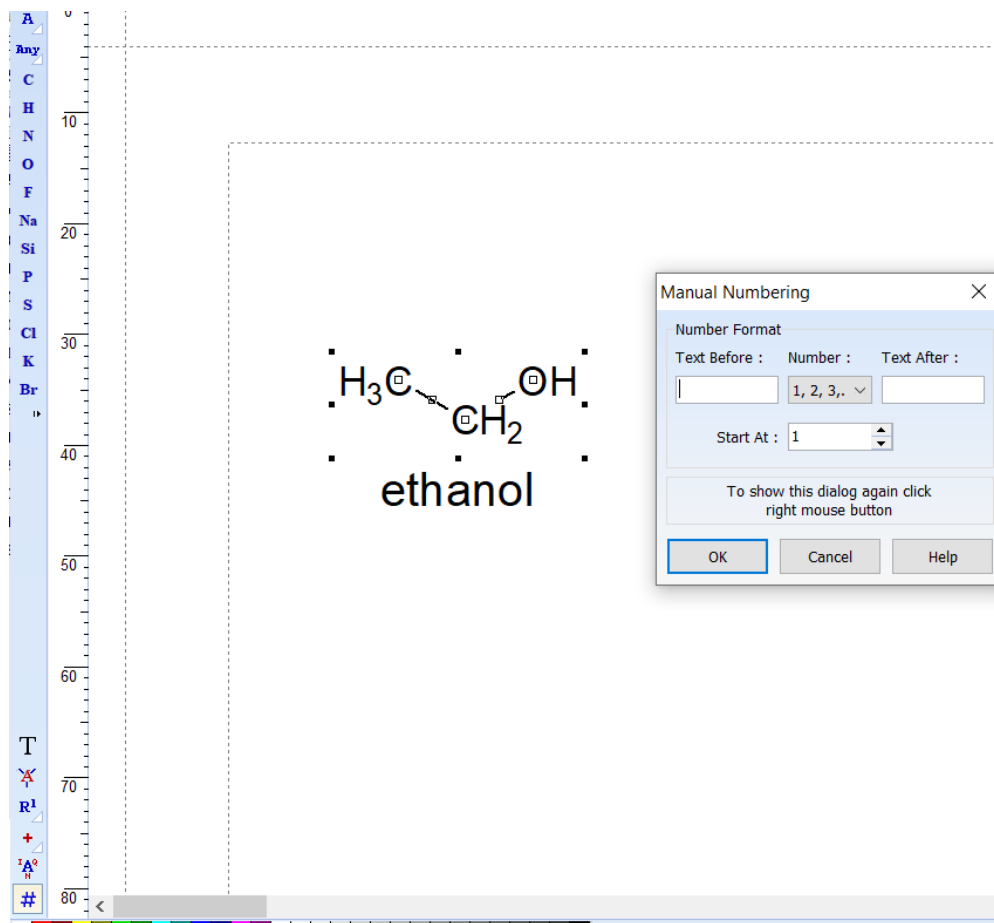
Slika 1. Struktura molekule metanola

KORAK 2 Nacrtajte na način opisan u KORAKU 1 strukture molekula etanola, propan-1,2-diola i propan-1,2,3-triola. U svakoj je strukturi potrebno prikazati sve ugljikove atome (*Tools* → *Structure Properties* → u odjeljku *Show Carbons* odabrati *Select All* → *Apply*) te koristiti opciju *Clean Structure*. U konačnici generirajte nazive svih triju nacrtanih struktura molekula odabirom *Tools*, a zatim *Generate Name for Structure*. Ukoliko ste sve radnje proveli ispravno, trebali biste dobiti strukture molekula i njihove pripadajuće nazive prikazane na **slici 2**.

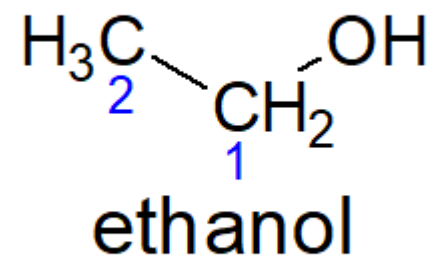


Slika 2. Strukture molekula etanola, propan-1,2-diola i propan-1,2,3-triola i njihovi nazivi.

KORAK 3 Da biste numerirali atome ugljika u ugljikovodičnom lancu, potrebno je označiti cijelu strukturu alkohola  a zatim odabrati ikonu # (*Manual Numbering*) (Slika 3a) kako bi se pojavio prozor *Manual Numbering* te odabrati *OK*. Klikom na odgovarajući ugljikov atom pojavljuje se broj 1, a klikom na drugi atom ugljika pojavljuje se broj 2 Napomena: Numeriranje lanca ugljikovodika počinje od atoma ugljika koji je najbliži hidroksilnoj skupini! (Slika 3b).



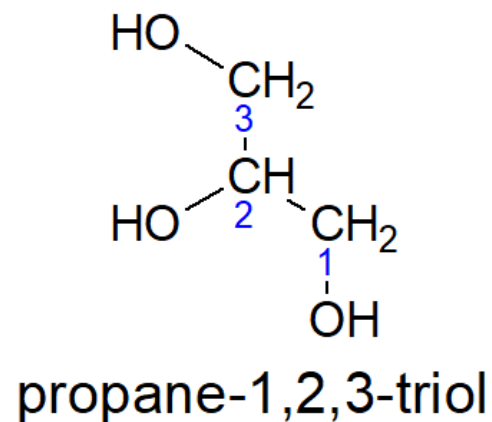
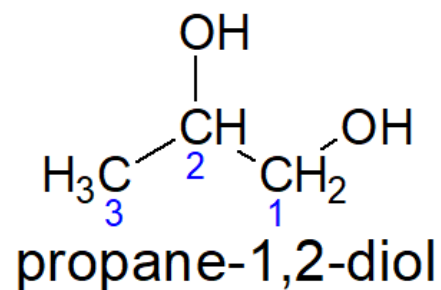
a)



b)

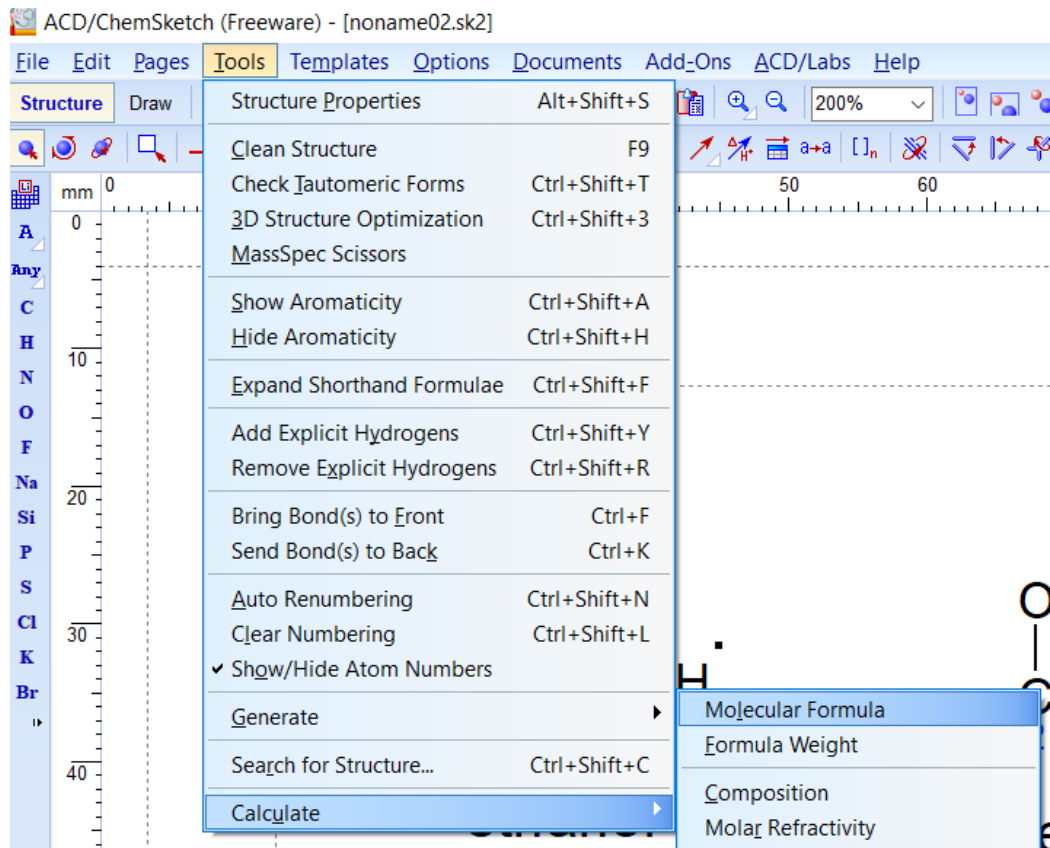
Slika 3. a) postupak numeriranja ugljikovih atoma u etanolu b) Numerirani ugljikovi atomi u strukturi molekule etanola

KORAK 4 Ponovite postupak opisan u **KORAKU 3** na primjerima struktura molekula propan-1,2-diola i propan-1,2,3-triola (**Slika 4**).

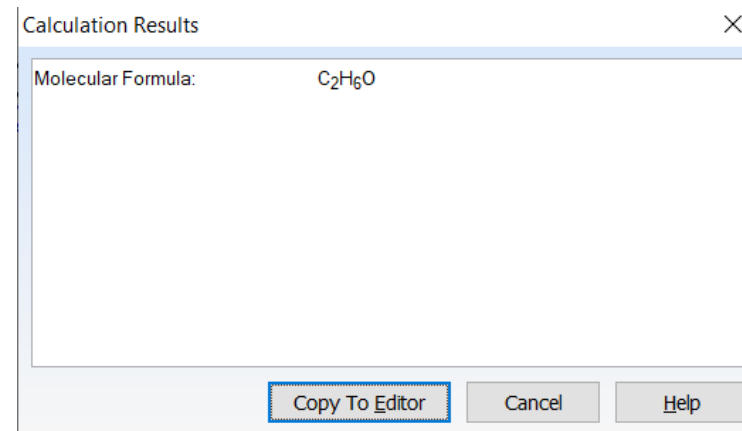


Slika 4. Numeriranje ugljikovih atoma u strukturama molekula propan-1,2-diola i propan-1,2,3-triola

KORAK 5 Molekulska formula nacrtanih struktura određuju se odabirom *Tools*, zatim *Calculate* i *Molecular Formula*. Pojavljuje se prozor *Calculation Results* s molekulskom formulom odabrane strukture molekule (**slika 5a i 5b**). Kako bi se molekulska formula pojavila na radnom prostoru (**slika 6**), potrebno je odabrati *Copy to Editor*.

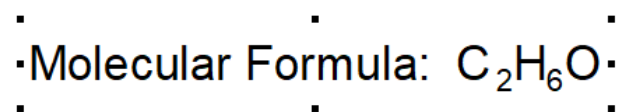
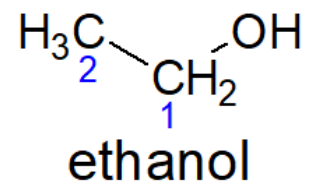


a)




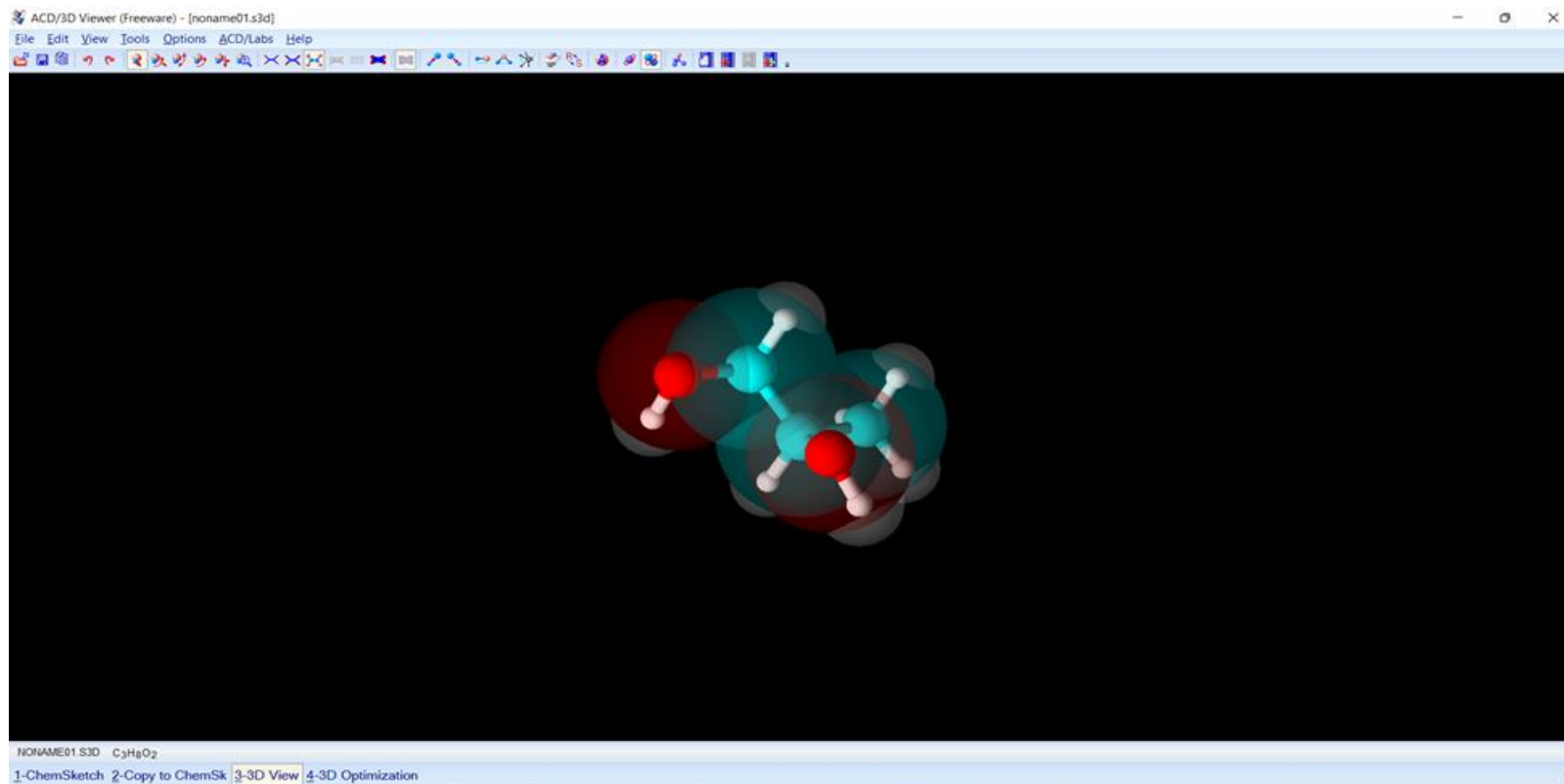
b)

Slika 5. a) Slijed radnji za prikaz molekulske formule etanola b) prozor s molekulskom formulom etanola


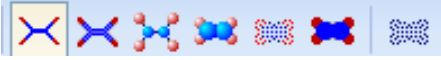



Slika 6. Molekulska formula etanola


KORAK 6 Prikažite nacrtane strukture alkohola u tri dimenzije tako da označite strukturu jedne molekule alkohola, a zatim odaberete ikonu  nakon čega će se pojaviti novi prozor s 3D prikazom struktura molekula (**slika 7**).



Slika 7. 3D struktura propan-1,2-diola

Pokušajte koristiti svaku od opcija rotiranja, premještanja i odabira na gornjoj alatnoj traci: , a zatim prikažite molekulu na svaki od načina koje program nudi: .

Klikom na bilo koju od opcija mijenja se način na koji je prikazana molekula propan-1,2-diola. Za automatsku rotaciju molekule kliknite na ikonu .


Za automatsku kontinuiranu promjenu s jednog na drugi način prikaza molekule s rotacijom kliknite na ikonu .

1.4. Primjeri zadataka za obradu nastavnog sadržaja

1) Nacrtajte strukturu molekule heksan-2-ol, a zatim provedite sljedeće radnje:

- prikažite strukturu molekule sažetom strukturnom formulom i formulom veznim crticama,
- numerirajte ugljikovodični lanac (pri čemu je potrebno paziti s koje strane počinje numeriranje),
- imenujte nacrtani alkohol,
- odredite molekulsku formulu nacrtanog alkohola,
- prikažite 3D strukturu molekule nacrtanog alkohola,
- dodajte još jednu hidroksilnu skupinu na treći atom ugljika u strukturi heksan-2-ola. Imenujte strukturu dobivenog spoja,
- ponišite promjenu napravljenu u podzadatku,
- nacrtajte dvostruku vezu između trećeg i četvrtog atoma ugljika u strukturi alkohola heksan-2-ola,
- imenujte dobivenu strukturu molekule.

2) Istražite online primjenu metanola u svakodnevnom životu. Nacrtajte molekulu metanola u programu *ChemSketch*. Zapišite u svoju bilježnicu primjenu

metanola u svakodnevnom životu. Prikažite 3D strukturu metanola (metilnog alkohola) i koristite sljedeće alate . Optimizirajte strukturu molekule metanola te spremite 2D i 3D strukturu na svoje računalo.

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

Napišite formulu heksan-2-ol alkohola, heks-5-en-3-ola. Nakon što je nacrtana, izvršite sljedeće korake:

- prikažite sve dijelove niza odgovarajućim postupkom, a ne samo prvi i zadnji član;
- izvršite numeriranje niza (pri čemu je potrebno paziti s koje strane počinje numeriranje);
- imenujte alkohol;
- odredite njegovu molekulsku formulu.

1.) Nacrtajte strukturu molekule heks-5-en-3-ol, a zatim provedite sljedeće radnje:

- a) prikažite strukturu molekule sažetom strukturnom formulom i formulom veznim crticama,
- b) numerirajte ugljikovodični lanac (pri čemu je potrebno paziti s koje strane počinje numeriranje),
- c) imenujte nacrtani alkohol,
- d) odredite molekulsku formulu nacrtanog alkohola,
- e) prikažite 3D strukturu molekule nacrtanog alkohola,
- f) spremite 2D i 3D strukturu nacrtane molekule na računalo.

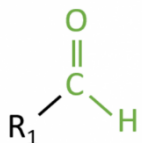
ALDEHIDI I KETONI

1) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

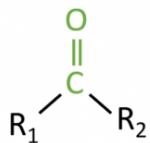
Nastavna jedinica: Organski spojevi s kisikom
Naziv cjeline: Aldehidi i ketoni
Predviđeni broj sati: 2

1.1. Teorijski uvod

Aldehidi i ketoni su organski spojevi koji imaju karbonilnu funkcionalnu skupinu (C=O). Ako se karbonilna skupina nalazi se na kraju lanca, spoj je aldehid, a ako se nalazi u sredini (unutar) lanac je keton.



aldehid



keton

Atom kisika u karbonilnoj skupini daleko je elektronegativniji od atoma ugljika. Dakle, karbonilna skupina je polarne prirode.

IUPAC sustav nomenklature aldehidima dodjeljuje karakterističan sufiks *-al* na osnovni naziv alkana.

Karakterističan sufiks koji se dodjeljuje ketonima je *-on*. Položaju karbonilne skupine obično se daje najmanji broj prilikom numeriranja ugljikovodičnog lanca.

Oksidacijom primarnih alkohola nastaju aldehidi, a oksidacijom sekundarnih alkohola nastaju ketoni.

Aldehidi lako mogu oksidirati u karboksilne kiseline. Ketoni su vrlo otporni na oksidaciju.

Slabi oksidacijski reagensi poput Fehlingov i Tollensovog reagensa mogu se koristiti za dokazivanje aldehida i ketona.

Aldehidi i ketoni koriste se u kemijskoj industriji kao otapala, te kao polazni reagensi za dobivanje drugih spojeva. U prirodi su aldehidi i ketoni često u kombinaciji s drugim funkcionalnim skupinama, poput vanilina, hormona ili ugljikohidrata. Često se koriste kao eterična ulja.

1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

- nacrtati različite primjere molekula acikličkih i cikličkih aldehida i ketona
- prikazati strukturu aldehida i ketona molekulskom strukturnom, kondenziranom strukturnom formulom i formulom s veznim crticama
- imenovati aldehide i ketone prema IUPAC-ovoj nomenklaturi ili generirati naziv u programu *ChemSketch*
- odrediti molekulsku formulu prethodno nacrtanih molekula aldehida i ketona u programu *ChemSketch*
- prikazati 3D modele molekula aldehida i ketona nacrtane u 2D koristeći program *ChemSketch* i rotirati ih
- unaprijediti prikaz strukture molekula aldehida i ketona koristeći funkciju *Clean Structure*
- spremite na računalo dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu strukturu željenih molekula aldehida i ketona
- poboljšati digitalne vještine korištenjem web preglednika za pronalaženje drugih primjera aldehida i ketona.

1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

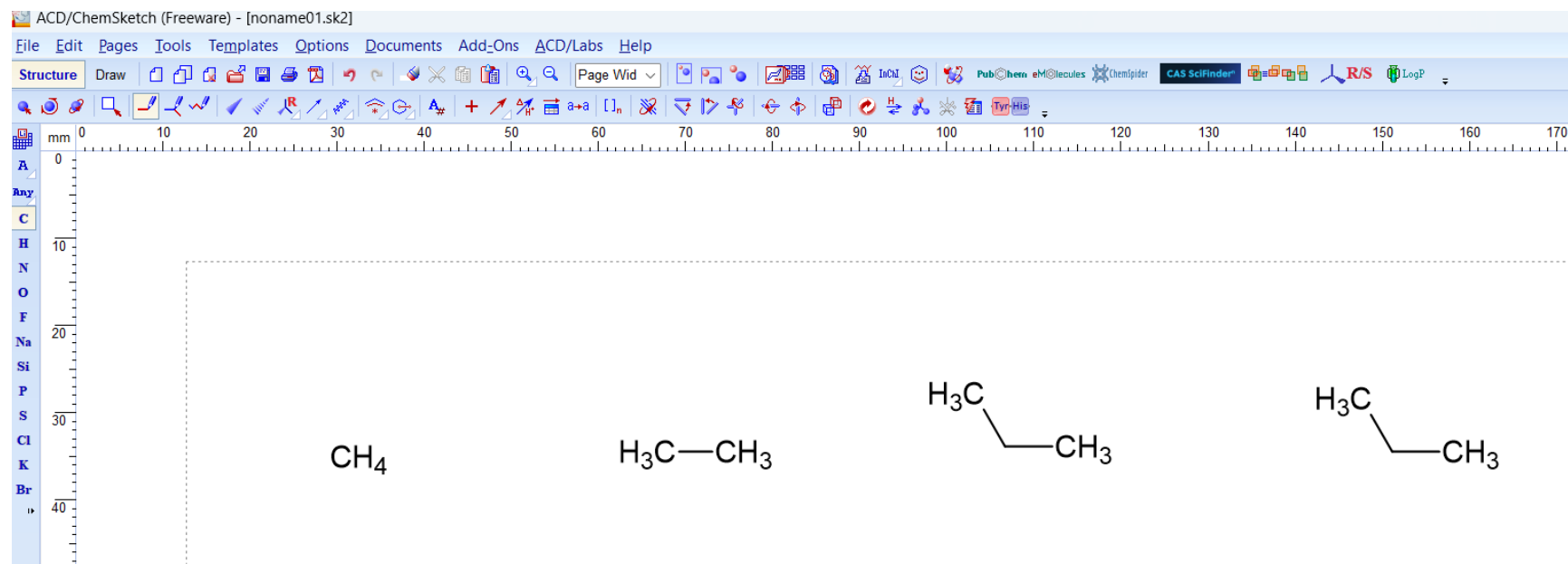
Primjer 1

Metanal , etanal , propanal , propan-2-on

Nacrtajte molekule metanala, etanala, propanala i propan-2-ona kako bi uočili razliku između aldehidne i ketonske C=O skupine. Optimizirajte strukturu i generirajte nazive spojeva. Napravite 3D optimizaciju i izradite 3D modele. Rotirajte ih.

KORAK 1

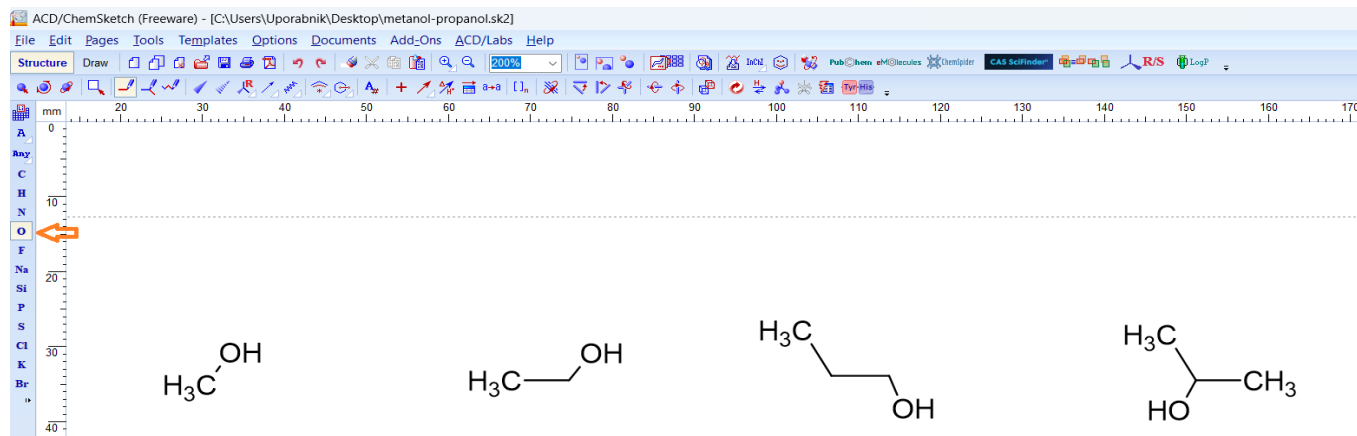
Nacrtajte molekulu metana, etana i dva puta propana kao što je prikazano na **slici 1**. Koristite način *Structure* i *Draw Normal* opciju. Kliknite na prazno područje i pojavit će se CH₄. Klikom na taj atom ugljika stvara se jednostruka veza ugljik-ugljik. Držeći pritisnutu tipku *Ctrl* i klikajući na svaki sljedeći atom ugljika, moguće je nacrtati lanac ugljikovodika od tri atoma ugljika.



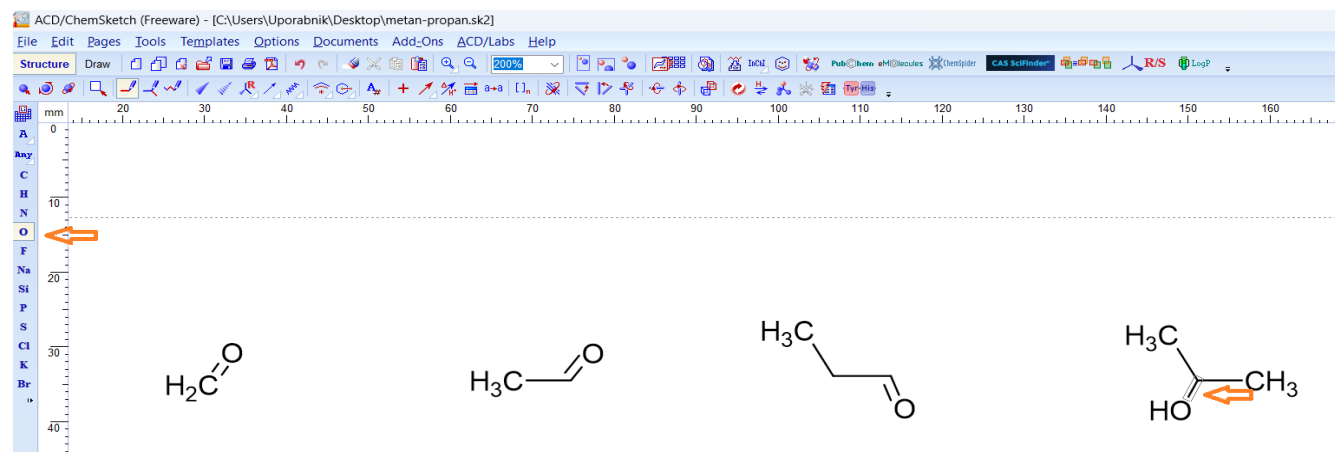
Slika 1. Struktura metana, etana, propana

KORAK 2

Kliknite na O (kisik) na lijevoj strani alatne trake *Toolbar*. Kliknite na prvi C atom u metanu, etanu i prvom propanu i povucite mišem. Pojavit će se OH skupina (**slika 2a**). Kliknite na drugi C atom u drugoj molekuli propana i povucite mišem da biste stvorili OH grupu. Kliknite na C-OH vezu u svakoj strukturi. C=O skupina će se pojaviti kao što je prikazano na **slici 2b**.



a)

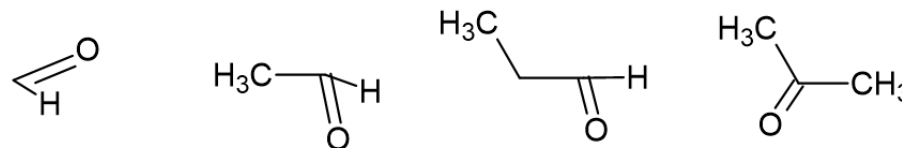
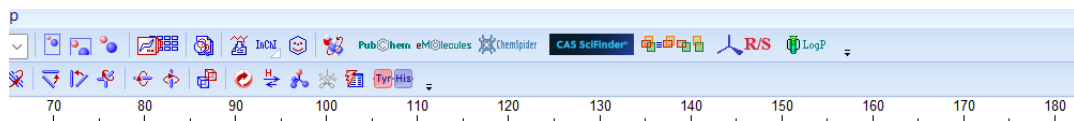


b)

Slika 2. a) Stvaranje C-OH veze, b) stvaranje C=O veze.

KORAK 3

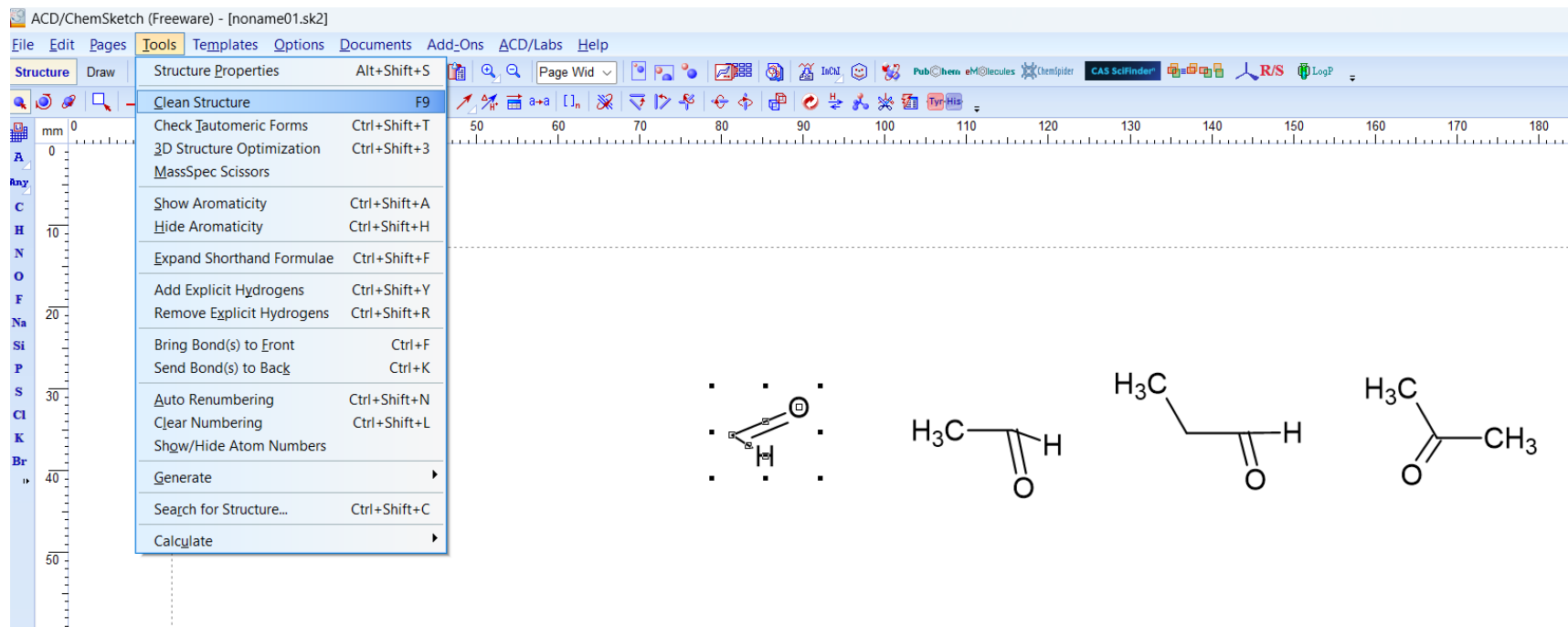
Kliknite na atom H na alatnoj traci s lijeve strane koristeći opciju *Toolbar*, kliknite na atom C od C=O grupe i povucite mišem da biste stvorili CHO grupu u prve tri strukture (**slika 3**).



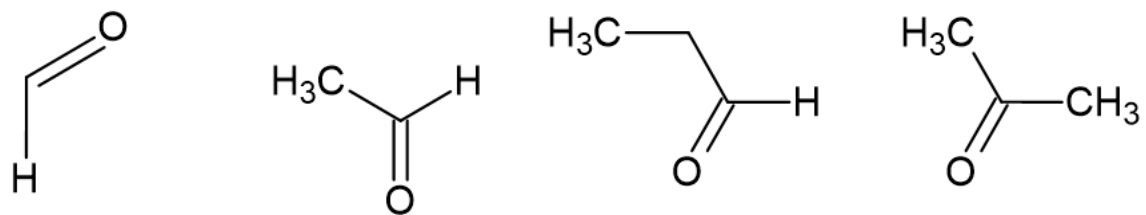
Slika 3. Stvaranje CHO grupe.

KORAK 4

Odaberite prvu strukturu s opcijom *Lasso* i zatim upotrijebite opciju *Tool* i odaberite *Clean Structure* (**slika 4a**). Učinite isto sa svim strukturama kako biste dobili strukture na **slici 4b**.



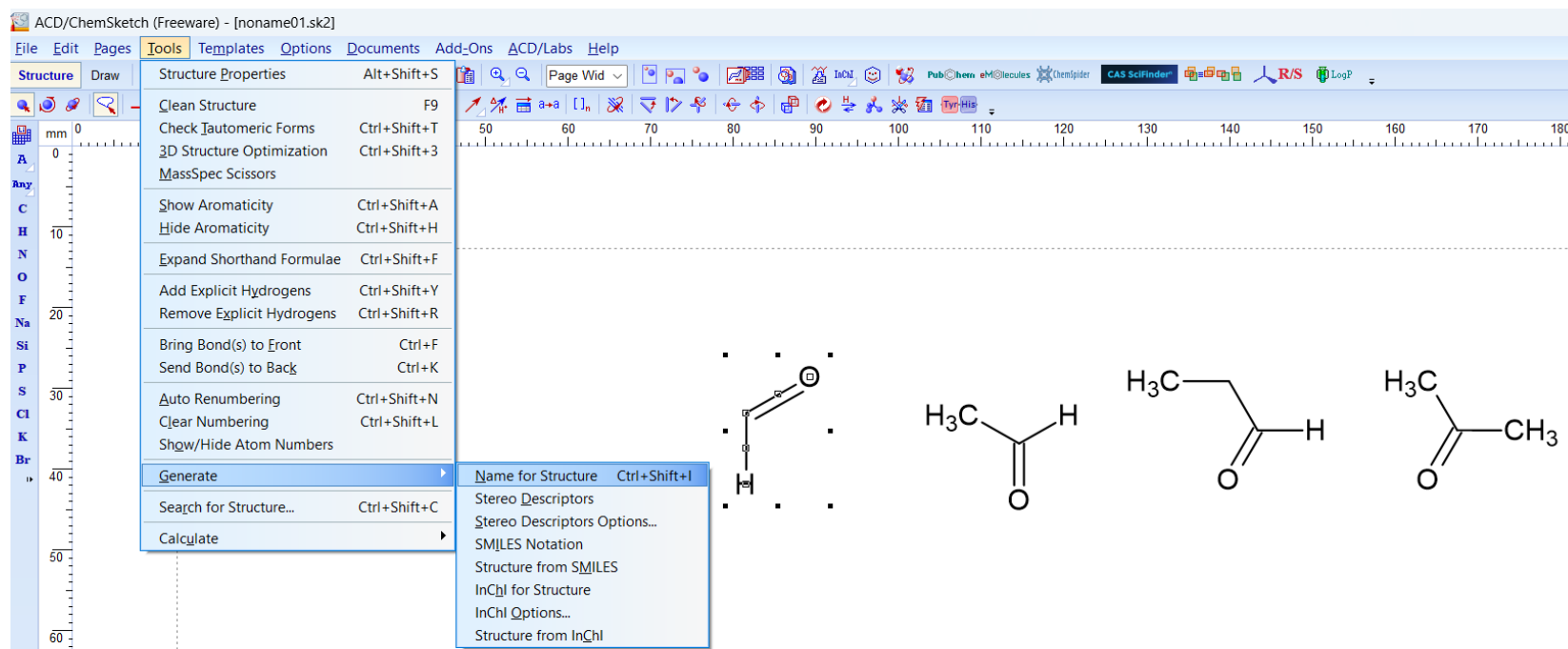
a)



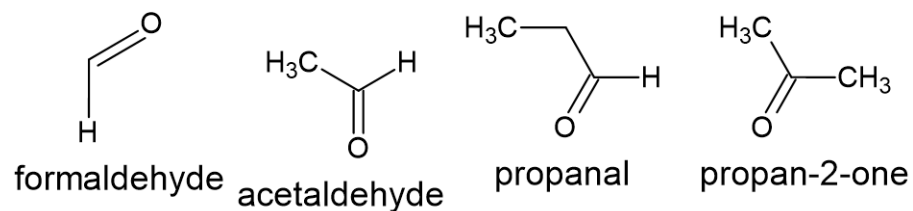
b)

Slika 4. a) Strukture za optimizaciju, b) Optimizirane strukture.

Upotrijebite opciju *Lasso* i odaberite prvu nacrtanu strukturu. Kliknite na izbornik *Tools*, odaberite *Generate*, a zatim *Name for Structure* kao što je prikazano na slici 5a. Učinite isto sa svim strukturama da biste dobili njihove nazive (slika 5b).



a)

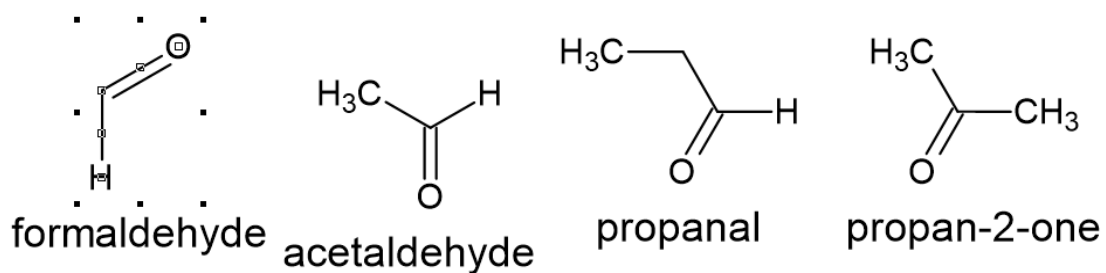
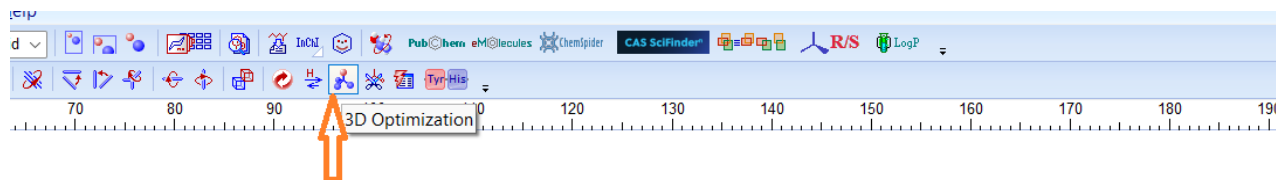


b)

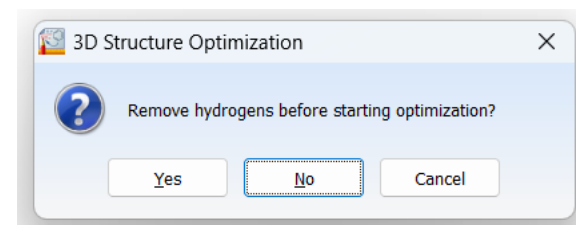
Slika 5. a) Postupak imenovanja struktura, b) Imenovane strukture.

KORAK 6

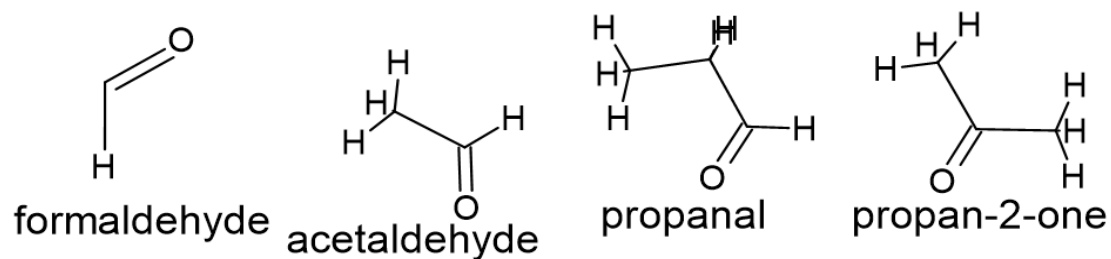
Za 3D optimizaciju odaberite svaku od nacrtanih struktura i koristite ikonu *3D optimization* kao što je prikazano na **slici 6a**. Pojavit će se prozor na **slici 6b** u kojem odaberite NE kao što je uokvireno na prikazanom prozoru. **Slika 6c** prikazuje strukture nakon 3D optimizacije.



a)



b)

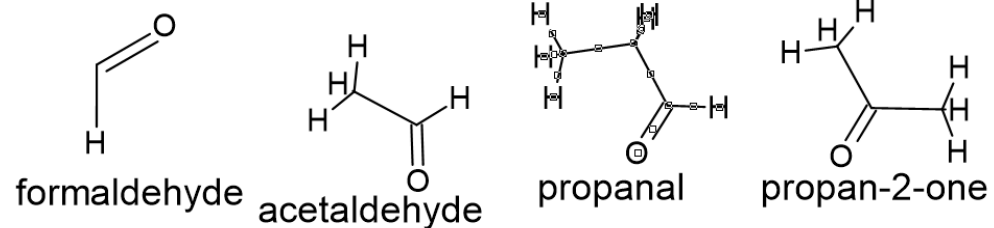
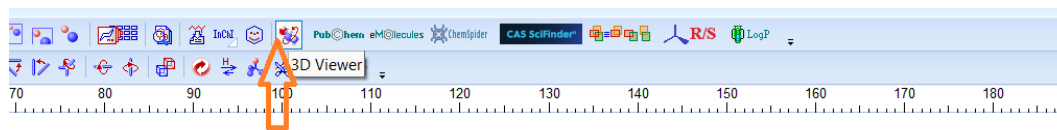


c)

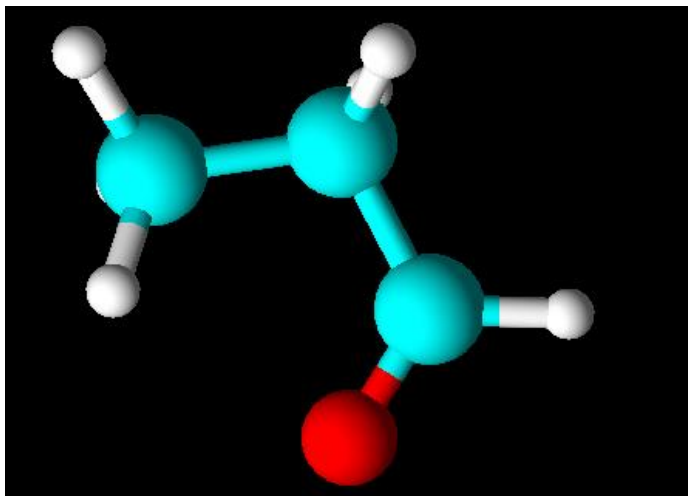
Slika 6. a) 3D optimizacija odabrane strukture, b) prikazani prozor za optimizaciju, c) 3D optimizirane strukture metanala, etanala, propanala i propan-2-ona

KORAK 7

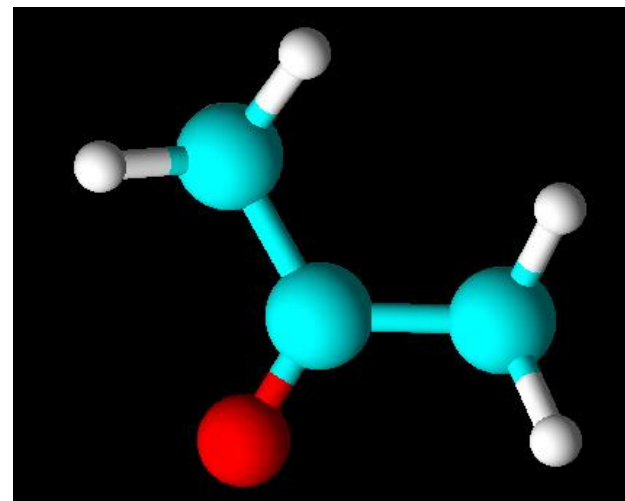
Odaberite prvo propanal, a zatim propan-2-on. Koristite ikonu *3D Viewer* kao što je prikazano na **slici 7a**. Pojavit će se novi prozor s 3D prikazom. Možete rotirati strukturu i promijeniti njen izgled kako biste vidjeli razliku između aldehidne i ketonske karbonilne skupine.



a)



b)



c)

Slika 7. a) Kreiranje 3D modela molekula, b) 3D model molekule propanala, c) 3D model molekule propan-2-ona.

KORAK 8

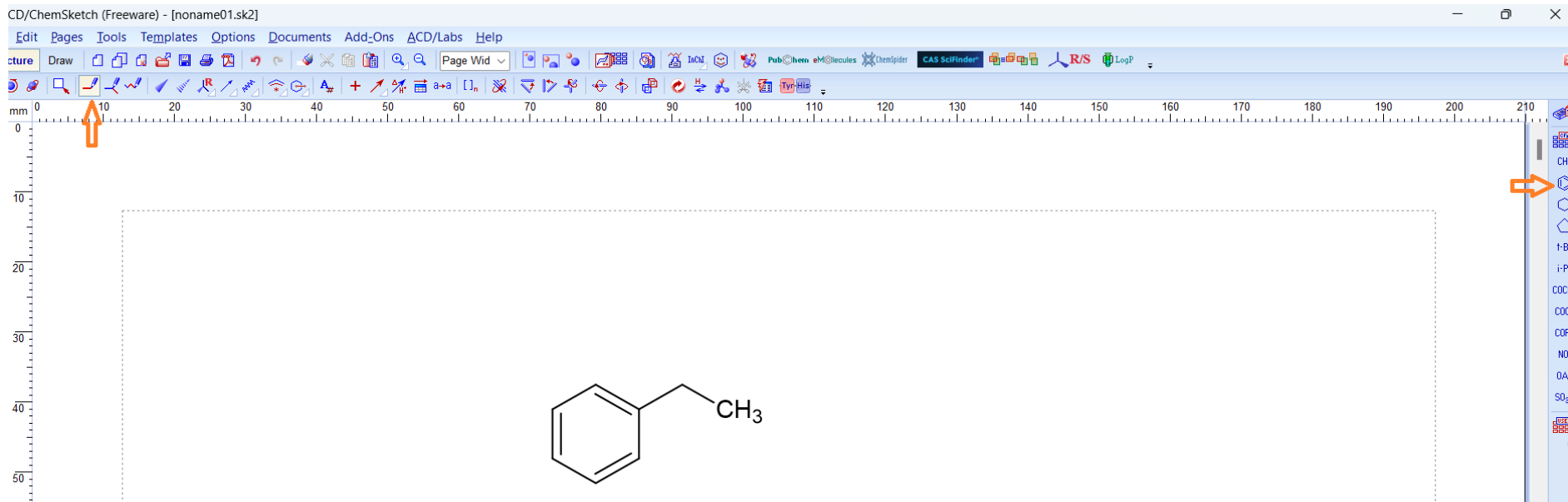
Spremite strukture i 3D modele klikom na *File*, a zatim *Save As*.

Primjer 2

Nacrtajte molekulu fenil-etanala. Fenil-etanal miriše kao jorgovan i zumbul. Optimizirajte strukturu, generirajte naziv i molekulsku formulu i prikažite je u tri dimenzije.


KORAK 1

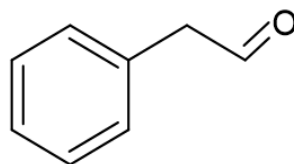
Na alatnoj traci s desne strane (*Radicals Toolbar*) kliknite na benzen, a zatim kliknite na prazno područje. Pojavit će se struktura benzena. Kliknite na bilo koji atom ugljika da biste stvorili CH₃ skupinu, kliknite ponovo da biste stvorili etilnu skupinu, nacrtana struktura je etilbenzen kao što je prikazano na **slici 1**.



Slika 1. Etilbenzen.

KORAK 2

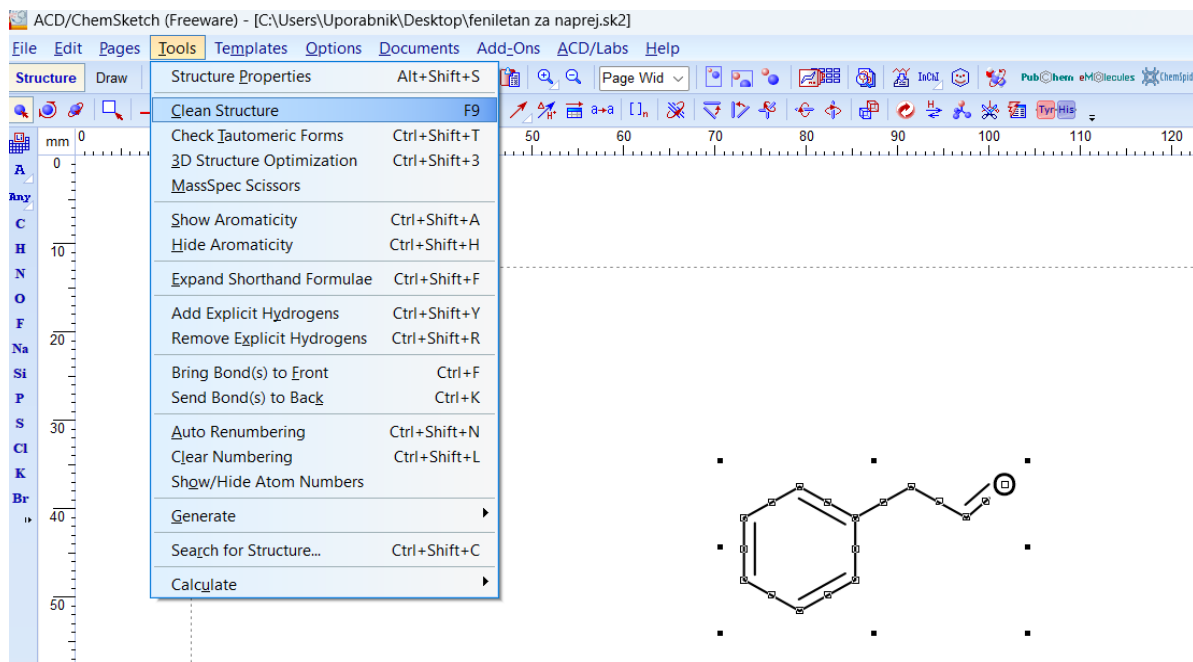
Odaberite atom O na alatnoj traci *Toolbar*. Na alatnoj traci kliknite *Structure* te zatim kliknite *Draw Normal* () , a zatim kliknite posljednji ugljikov atom i dodajte kemijsku vezu. Kliknite na C-OH vezu da biste dobili karbonilnu skupinu kao na **slici 2**.



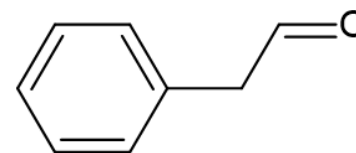
Slika 2. Benzen s etilnom i karbonilnom skupinom.

KORAK 3

Odaberite strukturu s opcijom *Lasso* i zatim upotrijebite opciju *Tool* i odaberite *Clean Structure* kao što je prikazano na **slici 3a** da biste dobili optimiziranu strukturu kao što je prikazano na **slici 3b**.



a)

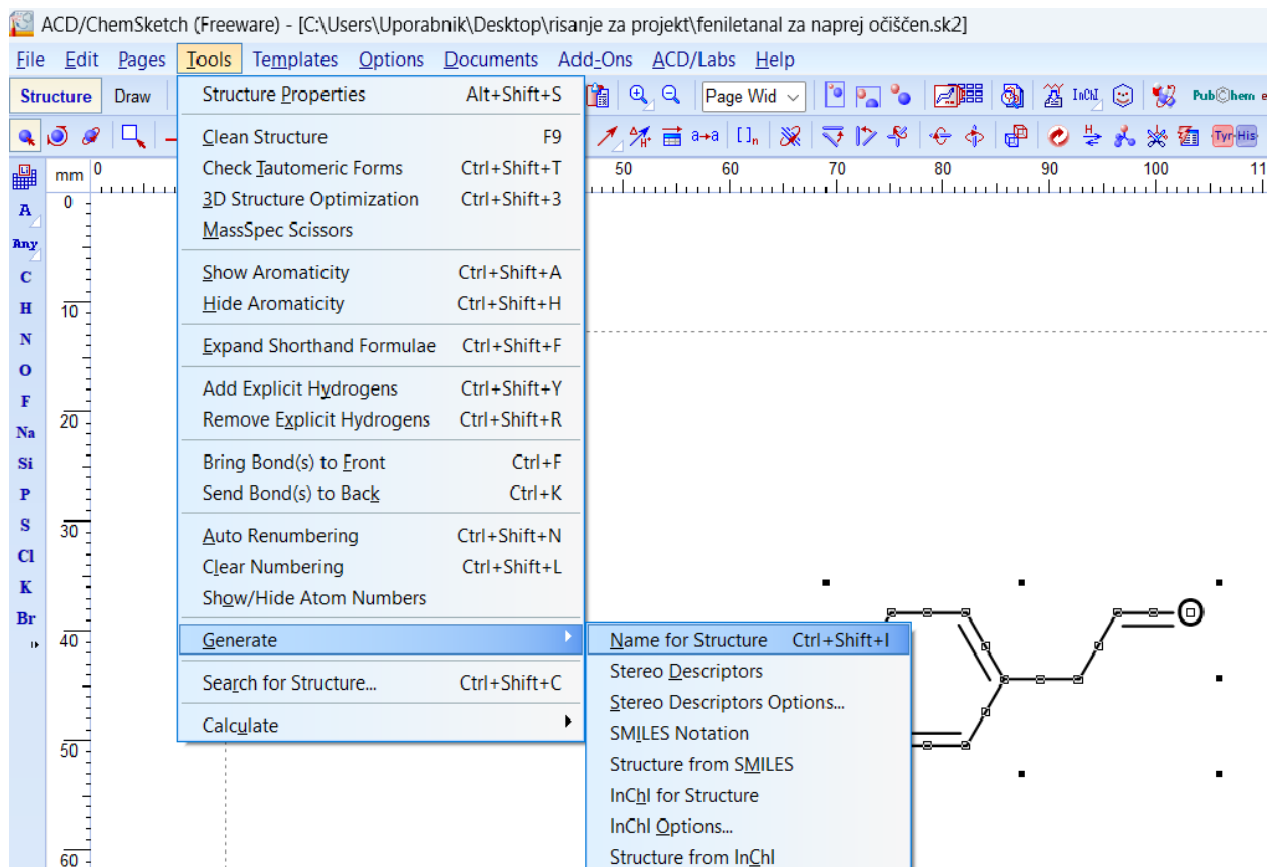


b)

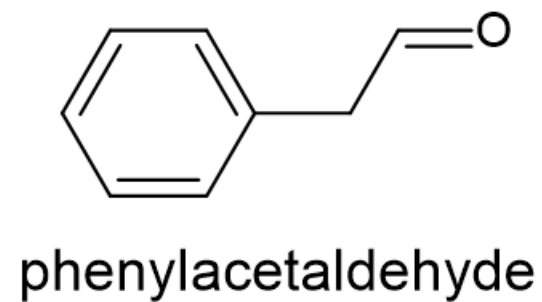
Slika 3. a) Struktura za optimizaciju, b) Optimizirana struktura.

KORAK 4

Upotrijebite *Lasso* i odaberite nacrtanu strukturu. Kliknite na izbornik *Tools*, odaberite *Generate*, a zatim *Name for Structure* kao što je prikazano na **slikama 4a** i **4b**.



a)

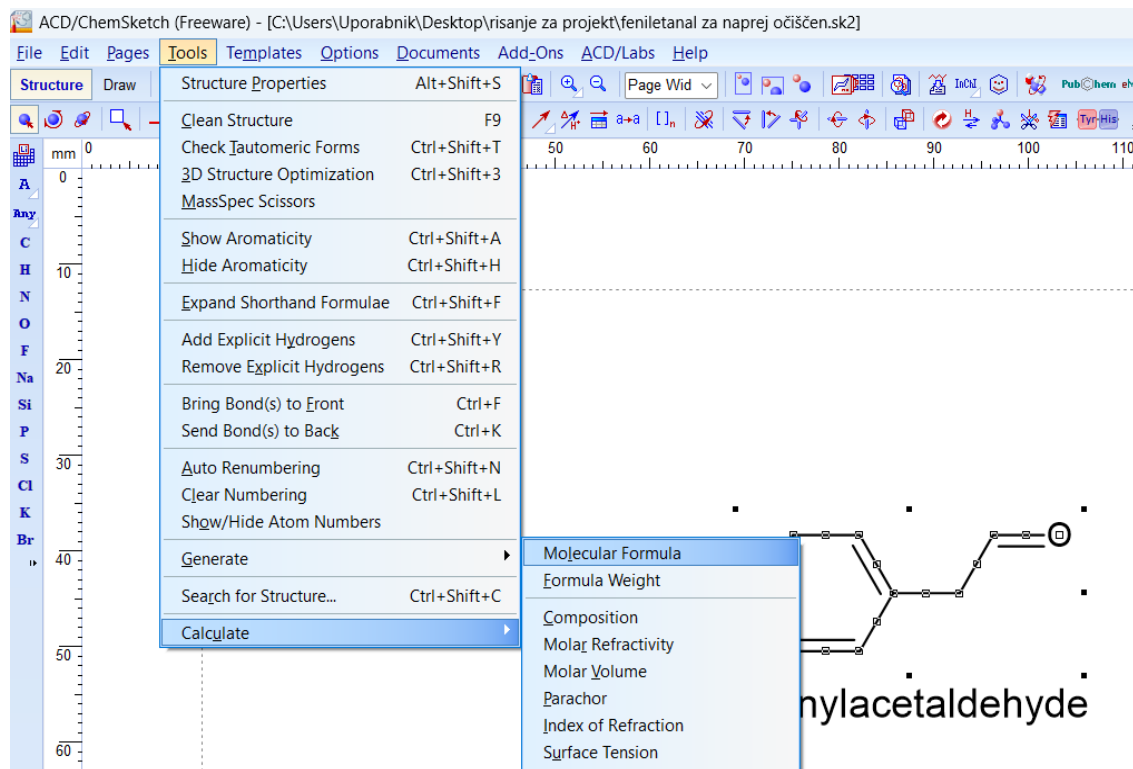


b)

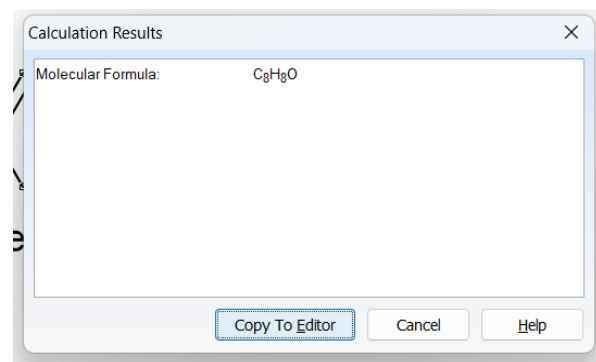
Slika 4. a) Generiranje naziva za nacrtanu strukturu, b) Nacrtana i imenovana struktura.

KORAK 5

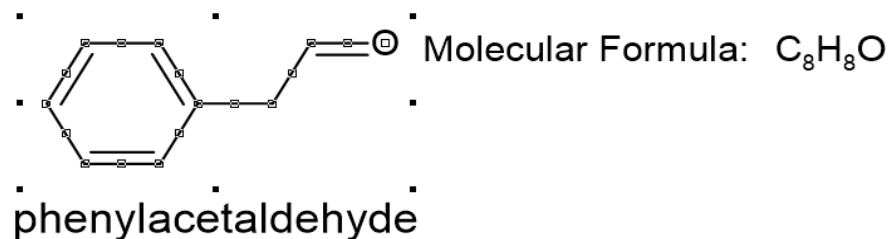
Upotrijebite opciju *Lasso* i odaberite nacrtanu strukturu. Kliknite na izbornik *Tools*, odaberite opciju *Calculate* i zatim kliknite na *Molecular Formula* (slika 5a). Pojavit će se novi prozor s molekulskom formulom. Odaberite *Copy to Editor* (Slika 5b) da biste dobili molekulsku formulu kao što je prikazano na slici 5c.



a)



b)

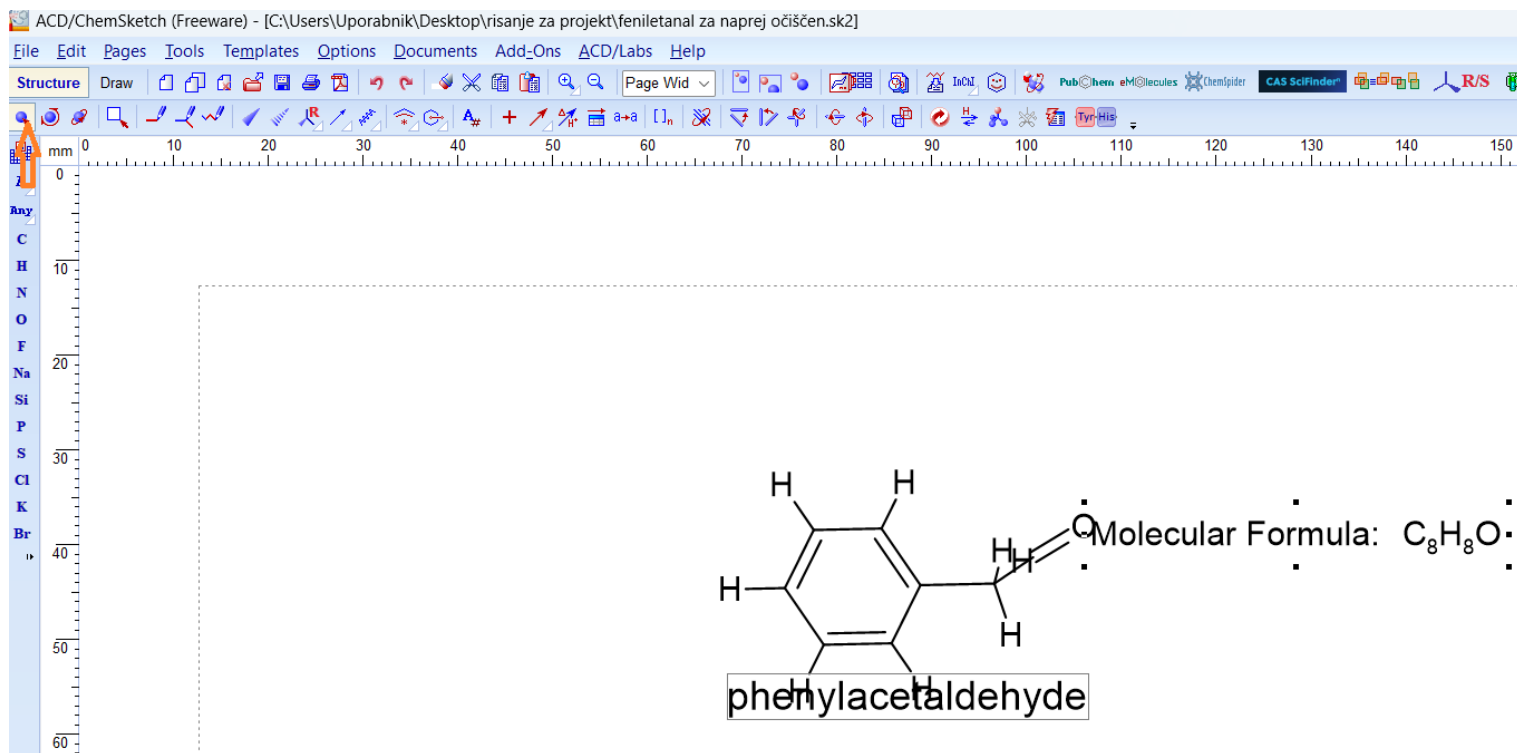


c)

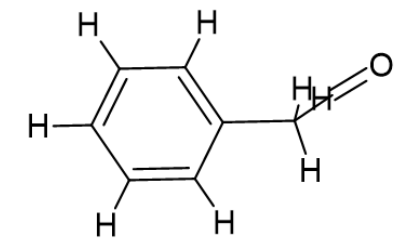
Slika 5. a) Generiranje molekulske formule, b) Prikaz molekulske formule, c) Prikaz molekulske i strukturne formule.

KORAK 6

Za 3D optimizaciju odaberite nacrtanu strukturu s opcijom *Lasso* i zatim kliknite ikonu *3D Optimization* kao u primjeru 1. Za pomicanje naziva i molekulske formule koristite gumb *Select/Move* i samo pomaknite prostor s imenom i formulom kao što je prikazano na **slikama 6a i 6b**.



a)



phenylacetaldehyde

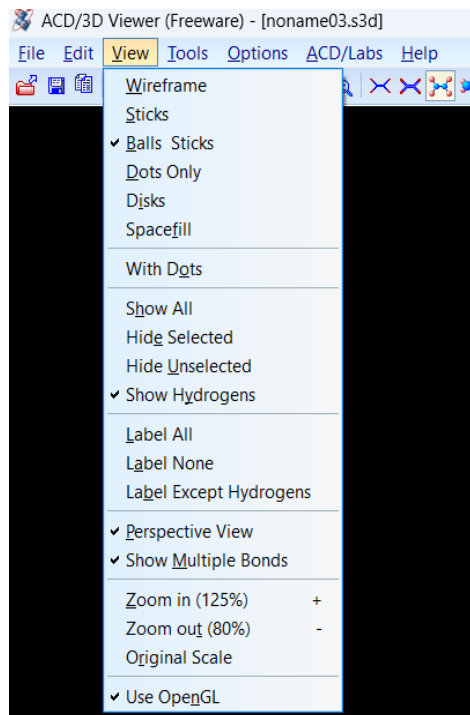
Molecular Formula: C₈H₈O

b)

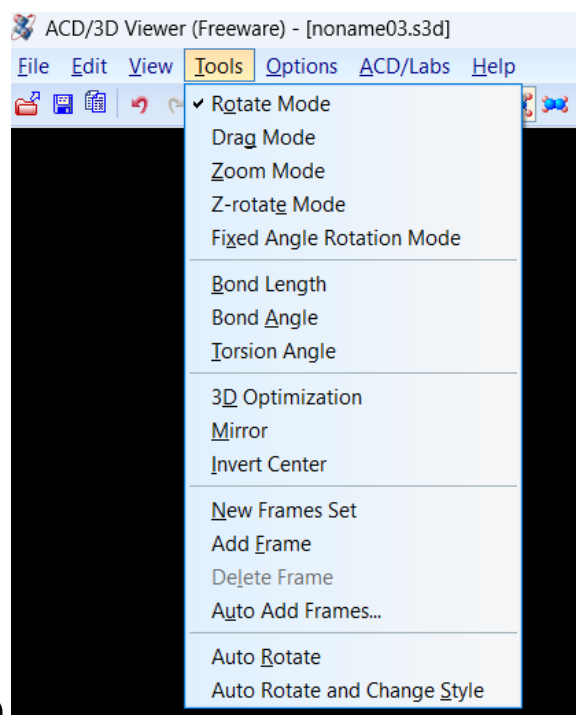
Slika 6. a) i b) Premještanje naziva i molekulske formule iz 3D optimizirane formule.

KORAK 7

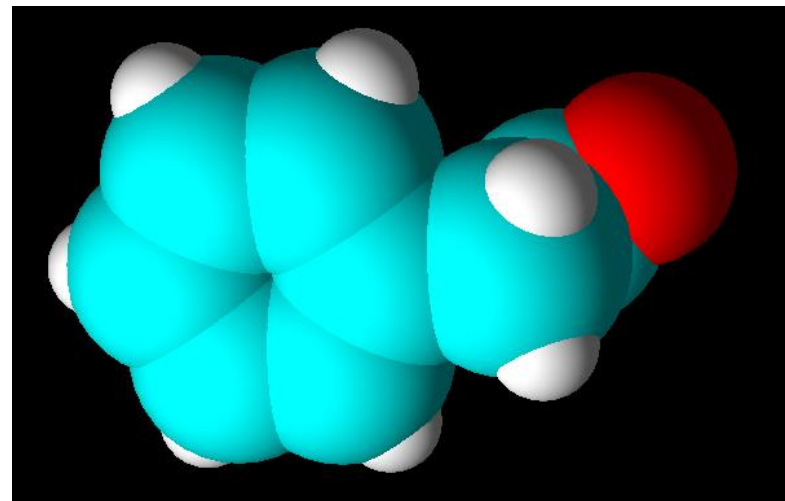
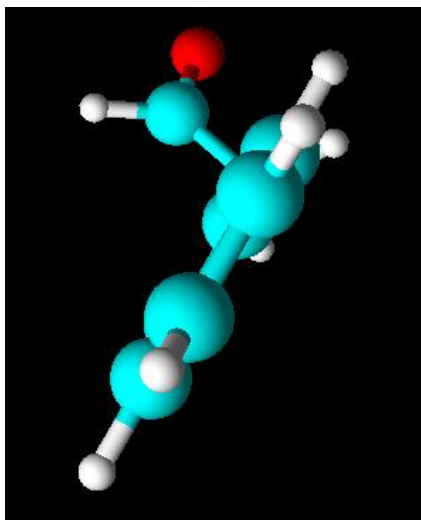
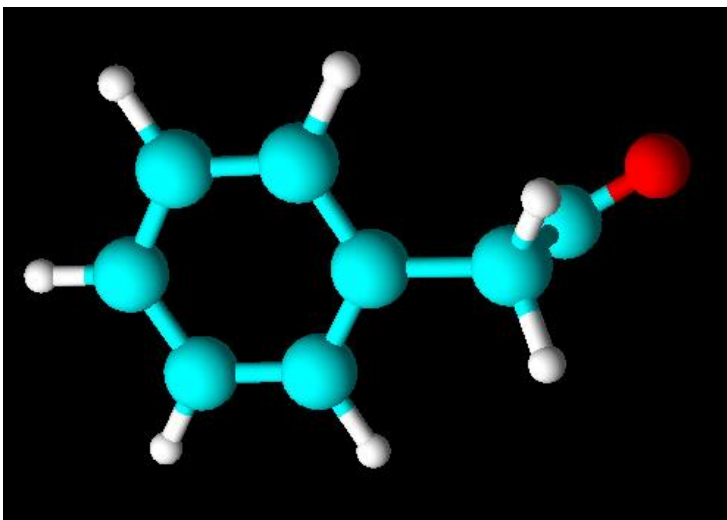
Prenesite strukturu u *3D Viewer*. Rotirajte strukturu i koristite različite načine prikazivanja molekule fenil-etanala. Neki od njih prikazani su na **slikama 7a-7e**.



a)



b)



c)

d)

e)

Slika 7. a-e) Različiti načini prikaza modela fenil-etanala.

KORAK 8

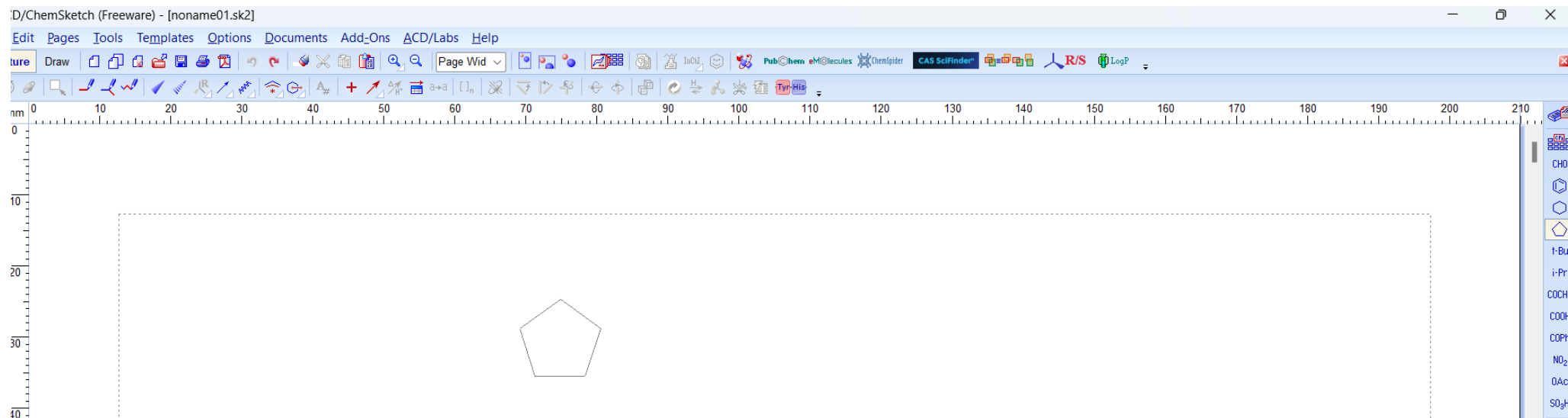
Spremite strukture i 3D modele klikom na *File*, a zatim *Save As*.

Primjer 3

Nacrtajte molekulu ciklopentan-1,3-diona. Prikažite ga veznim crticama, strukturnom i molekulskom formulom.

KORAK 1

Na alatnoj traci s desne strane (*Radicals Toolbar*) kliknite na ciklopentan, a zatim kliknite na prazno područje. Struktura ciklopentana će izgledati kao što je prikazano na **slici 1**.

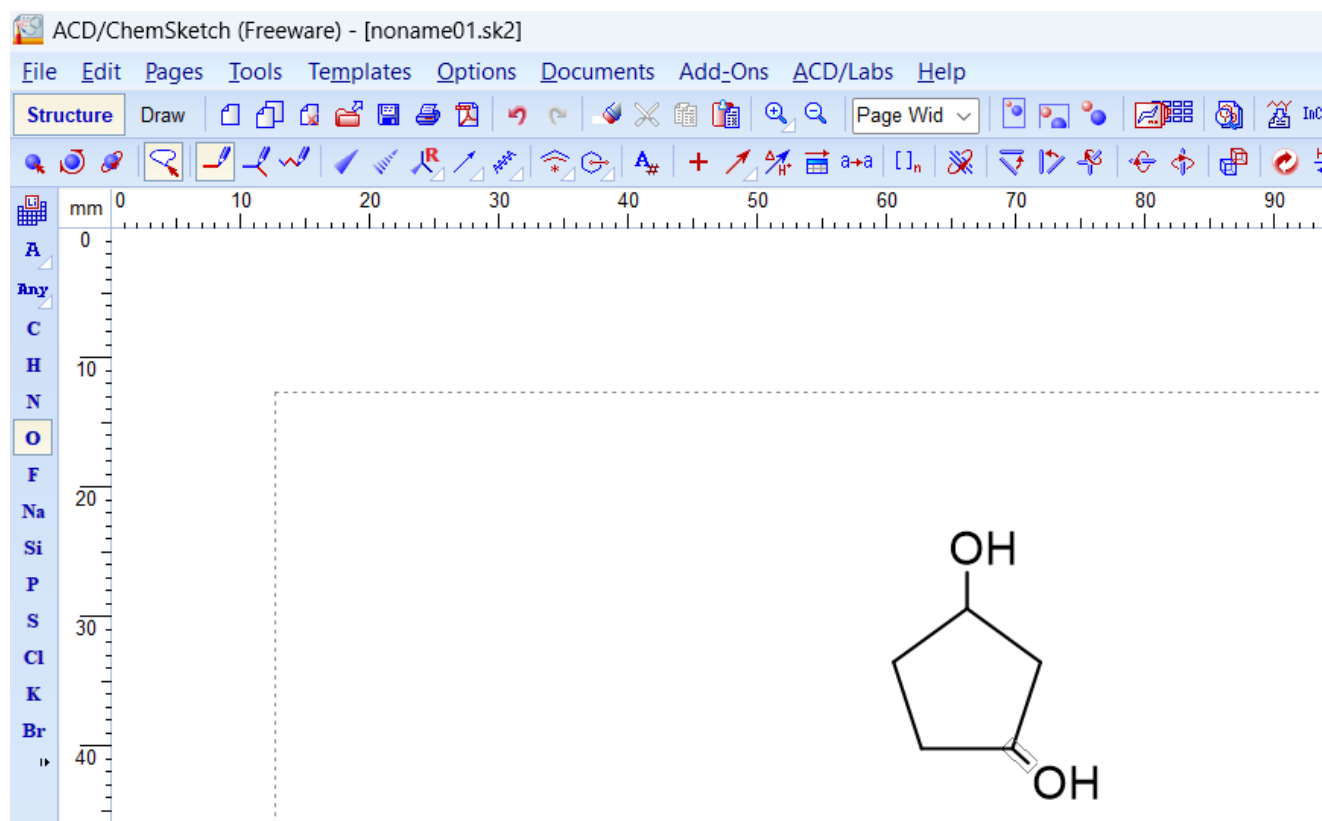


Slika 1. Prikaz strukture ciklopentana.

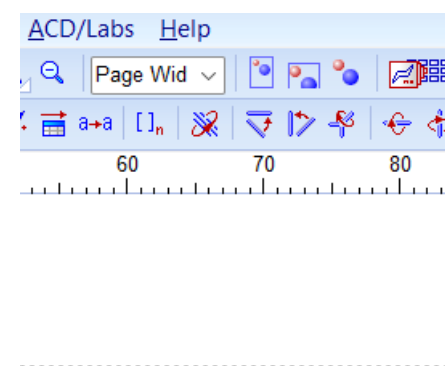
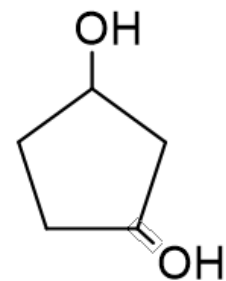
KORAK 2

Odaberite atom O na lijevoj alatnoj traci i stvorite vezu na bilo kojem ugljikovom atomu i učinite isto na trećem ugljikovom atomu, upotrijebite miš (**slika 2a**).

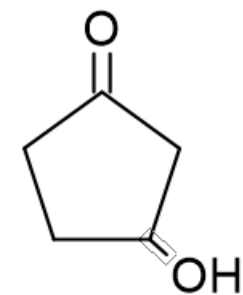
Kliknite na C-OH veze da biste dobili karbonilnu skupinu (**slika 2b**).



a)



b)



Slika 2 . a) stvaranje C-OH veze, b) stvaranje C=O veze.

KORAK 3

Očistite strukturu odabirom strukture s opcijom *Lasso* i klikom na opciju *Tools – Clean Structure* (slika 3a) ili pomoću ikone *Clean Structure*. Formula veznim crticama ciklopentan-1,3-diona pojavit će se kao što je prikazano na **slici 3b**.

The image shows a screenshot of the ACD/Labs software interface. The 'Tools' menu is open, and the 'Clean Structure' option is highlighted. The menu items and their keyboard shortcuts are as follows:

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

Below the menu, two chemical structures of 1,3-dioxolane-2-one are shown. The left structure is a five-membered ring with an oxygen atom at the top and a carbonyl group at the bottom. The right structure is a six-membered ring with two oxygen atoms at the top and bottom, and a carbonyl group on the right side. Both structures are drawn with dashed lines indicating the underlying grid.

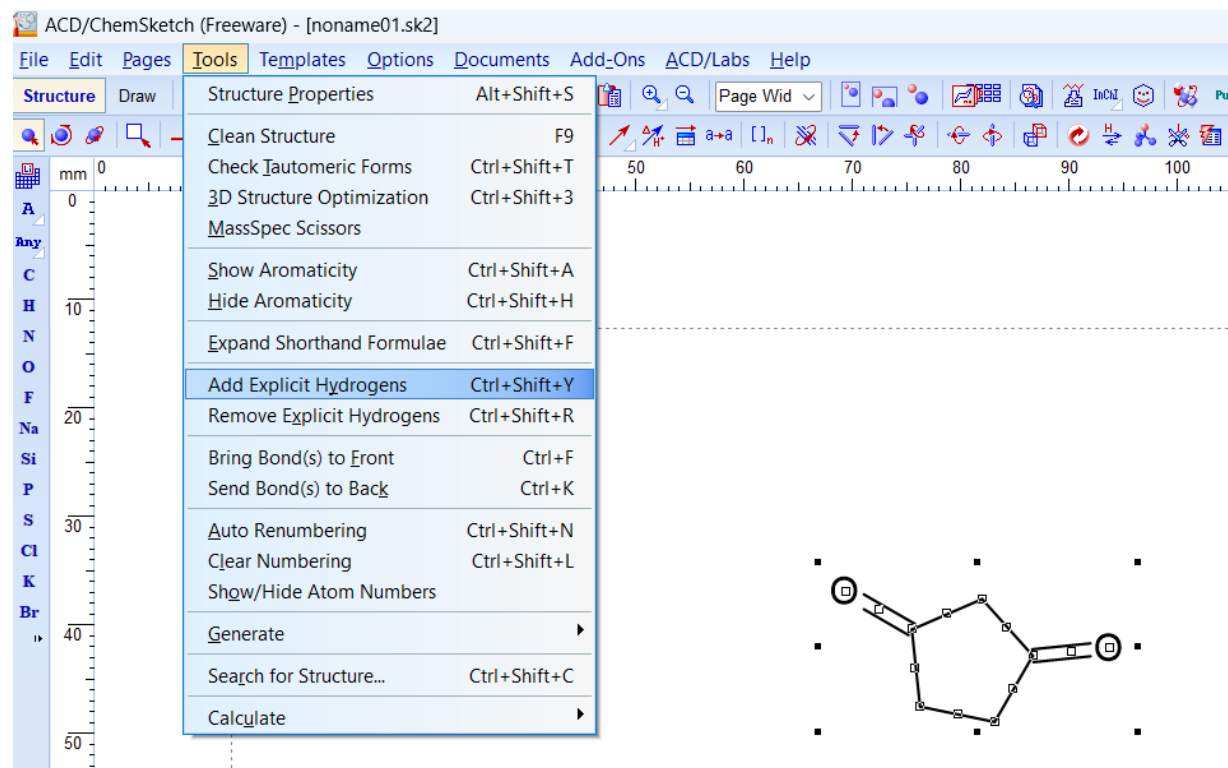
a)

b)

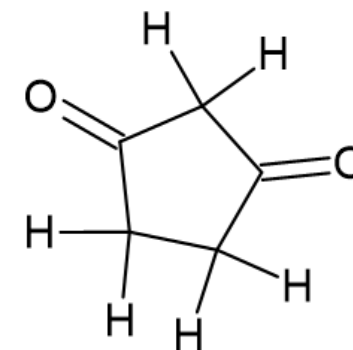
Slika 3 . a) Optimizacija strukture ciklopentan-1,3-diona, b) Optimizirana struktura ciklopentan-1,3-diona.

KORAK 4

Da bi nacrtani spoj veznim crticama prikazali sa strukturnom formulom, kliknite na *Tools* i odaberite opciju *Add Explicit Hydrogens* (**slika 4a i 4b**). Odaberite strukturu pomoću opcije *Lasso*, kliknite na *Tools*, a zatim na *Structure Properties* (**Slika 4c**). Pojavit će se novi prozor. Označite *All* u dijelu *Show Carbons*, a zatim kliknite *Apply*, kao što je prikazano na **slici 4d**, da biste dobili strukturnu formulu (**slika 4e**).



a)



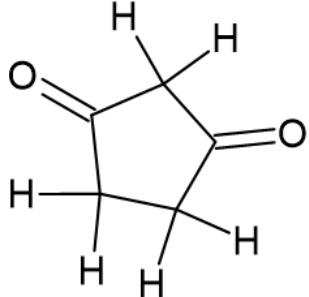
b)

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

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

Structure Draw Structure Properties Alt+Shift+S

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



c)

Properties ? X

Current Style
 AUTOSAVE Save Del

Markush Biosequence Coloration
 Common Atom Bond

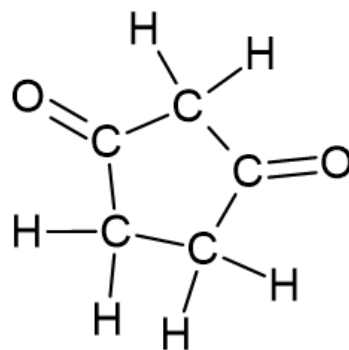
Show Carbons
 All Hide Zero Charge
 Terminal Cross Out Invalid Atom

Size Calculation
 Atom Symbol Size 10
 Auto Bond Length 7 mm

Atom Style Bond Style
 Arial 0.7 pt
 B [] []

Apply Set Default
 Update From Restore Default

d)

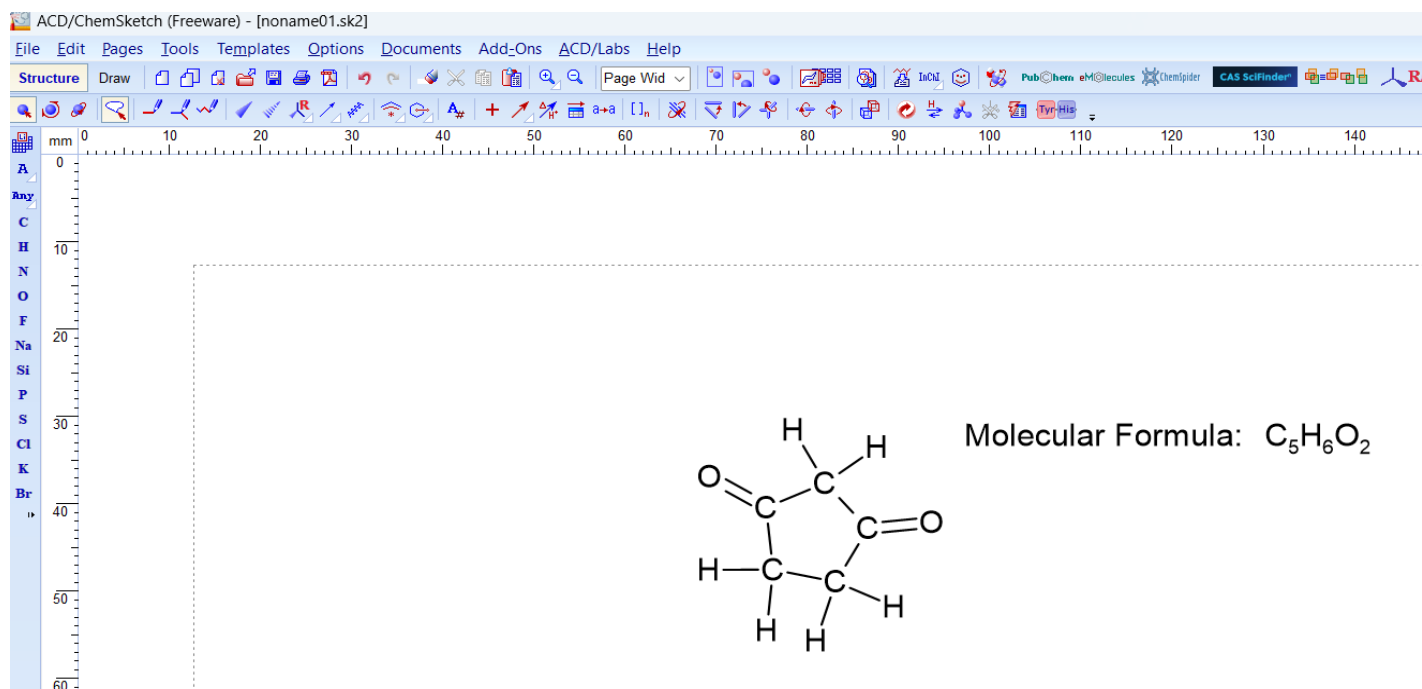


e)

Slika 4 . a) Dodavanje veza ugljik - vodik , b) Strukturna formula sa prikazom atoma vodika, c) Promjena svojstava strukture, d) Prikazivanje atoma ugljika za stvaranje strukturne formule, e) Strukturna formula pentan-1,3-diona

KORAK 5

Stvorite molekulsku formulu koristeći *Tools*, *Calculate* i zatim *Molecular formula* kao u primjeru 2.



Slika 5 . Strukturna i molekularna formula ciklopentan-1,3-diona

KORAK 6

Prenesite strukturu u *3D Viewer*. Rotirajte strukturu i koristite različite načine njezina prikazivanja.

KORAK 7

Spremite strukturu i 3D modele klikom na *File*, a zatim *Save As*.

1.4. Primjeri zadataka za obradu nastavnog sadržaja

Nacrtaj jedan od cis/trans izomera citrala (3,7-dimetilokta-2,6-dienala), komponente eteričnog ulja limunske trave, a zatim:

- optimizirajte strukturu,
- generirajte naziv i odredite molekulsku formulu,
- prikažite strukturu u 3D pregledniku i rotirajte je,
- spremite strukturu i 3D model.

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

Nacrtajte molekule Butandial, 5-metilheptan-2,4-dion, a zatim:

- optimizirajte strukturu,
- generirajte naziv i odredite molekulsku formulu,
- prikažite strukturu u 3D pregledniku i rotirajte je,
- spremite strukturu i 3D model.

Pronađite primjere aldehida i ketona za crtanje, generirajte naziv i molekulsku formulu u programu *ChemSketch*, prikažite to u 3D pregledniku.

BIOMOLEKULE

1) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna cjelina: Biomolekule
Nastavna jedinica: Biomolekule
Predviđen broj nastavnih sati: 3

1.1. Teorijski uvod

Biomolekule, koje se nazivaju i biološke molekule, tvari su koje proizvode i koriste organizmi. Biomolekule imaju različite strukture i funkcije. Četiri glavne vrste biomolekula su ugljikohidrati, lipidi, proteini i nukleinske kiseline. Ugljikohidrati su glavni izvor energije za organizme. Lipidi imaju različite funkcije kao oblici energije ili u izgradnji bioloških membrana. Proteini također imaju različite strukture i funkcije kao što su transport nekih važnih tvari, djeluju kao enzimi, izgrađuju mišiće ili djeluju kao antitijela. Nukleinske kiseline imaju jedinstvenu funkciju sinteze proteina i nositelja genetičkih informacija.

1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

- nacrtati različite primjere molekula ugljikohidrata i prikazati njihovu strukturu pomoću Fisherovih i Haworthovih formula
- generirati naziv ugljikohidrata u programu *ChemSketch*
- opisati kemijska svojstva različitih ugljikohidrata
- nacrtati "D" i "L" strukture različitih monosaharida
- spremi na računalo strukture molekula različitih ugljikohidrata

1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

Primjer 1

Prikaz molekule glukoze Fisherovom projekcijskom formulom.

KORAK 1

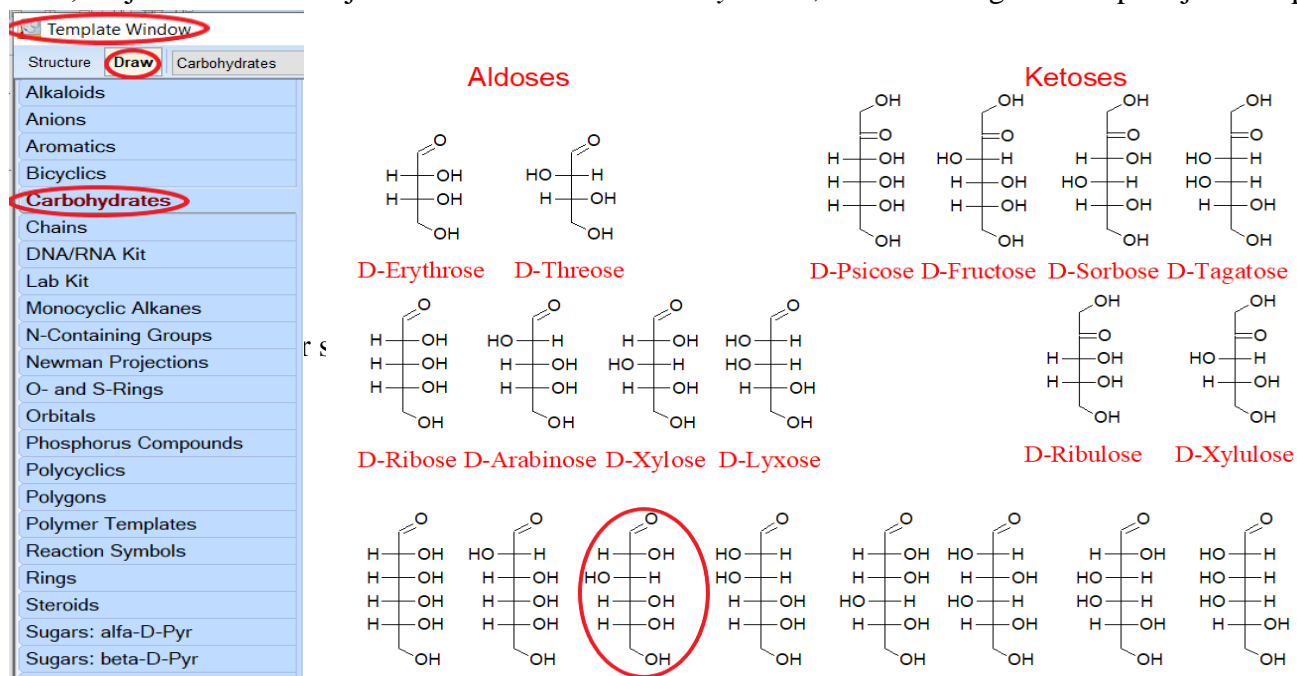
Krenite s radom u modu *Structure*, kliknite na *Templates* (Slika 1.)



Slika 1. Prikaz koraka za odabir predložaka u programu.

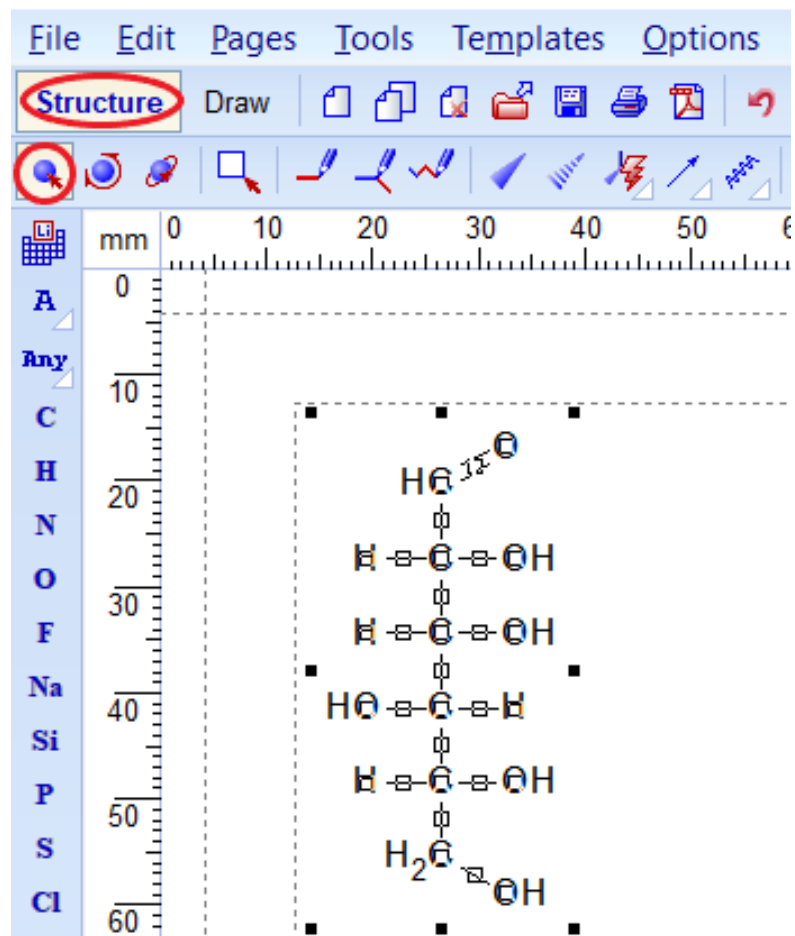
KORAK 2

Otvorite prozor *Template Window*, uključite način crtanja *Draw* i kliknite na *Carbohydrates*, odaberite D-glukozu i premjestite u prostor za crtanje.



KORAK 3

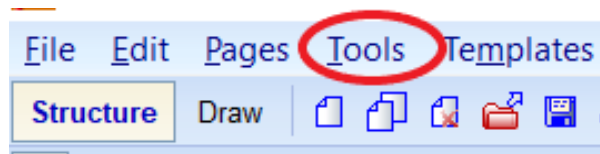
Prebacite se na način rada *Structure* i označite formulu (Slika 3).



Slika 3. Prebacivanje načina rada u *Structure*.

KORAK 4

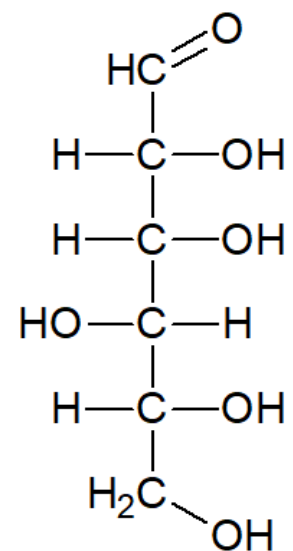
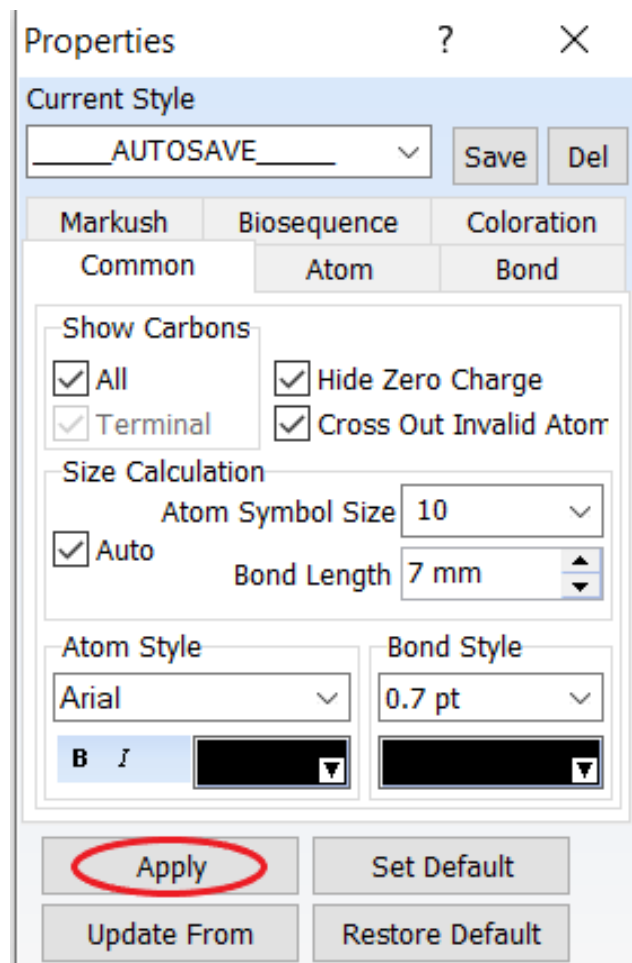
Kliknite na *Tools* (**Slika 4**) i odaberite *Structure Properties* te odaberite *All*.



Slika 4. Slijed koraka za mijenjanje svojstava strukture.

KORAK 5

Kliknite na *Apply* te nacrtajte konačnu Fischerovu formulu sa svim atomima (**Slika 5**).



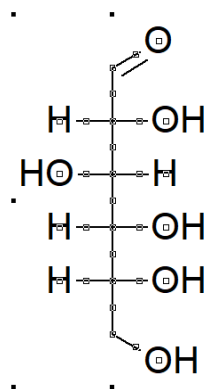
Slika 5. Postavljanje svojstava strukture i Fisherove formule za D – glukozu.

Primjer 2

Generirajte naziv strukture.

KORAK 1

Nacrtajte molekulu u načinu rada *Structure*, kliknite na neko mjesto u dokumentu da označite nacrtanu strukturnu formulu.



Slika 6. Označena strukturna formula D-glukoze.

KORAK 2

Kliknite na *Tools*.

Odaberite *Generate*.

Odaberite *Name for the structure* (**Slika 7**).

The screenshot shows the ACD/ChemSketch interface. The 'Tools' menu is open, and the 'Generate' option is highlighted. A sub-menu is visible, with 'Name for Structure' highlighted. The chemical structure of D-glucose is shown in the workspace.

ACD/ChemSketch - [noname01.sk2]

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

Structure Draw Structure Properties Alt+Shift+S

Clean Structure F9

Check Automeric Forms Ctrl+Shift+T

3D Structure Optimization Ctrl+Shift+3

MassSpec Scissors

Show Aromaticity Ctrl+Shift+A

Hide Aromaticity Ctrl+Shift+H

Expand Shorthand Formulae Ctrl+Shift+F

Add Explicit Hydrogens Ctrl+Shift+Y

Remove Explicit Hydrogens Ctrl+Shift+R

Bring Bond(s) to Front Ctrl+F

Send Bond(s) to Back Ctrl+K

Auto Renumbering Ctrl+Shift+N

Clear Numbering Ctrl+Shift+L

Show/Hide Atom Numbers

Generate

Search for Structure... Ctrl+Shift+C

Calculate

Name for Structure Ctrl+Shift+I

Name for Structure Options...

Structure from Name... Ctrl+Shift+G

Stereo Descriptors

Stereo Descriptors Options...

SMILES Notation

Structure from SMILES

InChI for Structure

InChI Options...

Structure from InChI

H
|
O=C
|
H—C—OH
|
HO—C—H
|
H—C—OH
|
H—C—OH
|
CH₂OH

H
|
O=C
|
H—C—OH
|
HO—C—H
|
H—C—OH
|
H—C—OH
|
CH₂OH

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

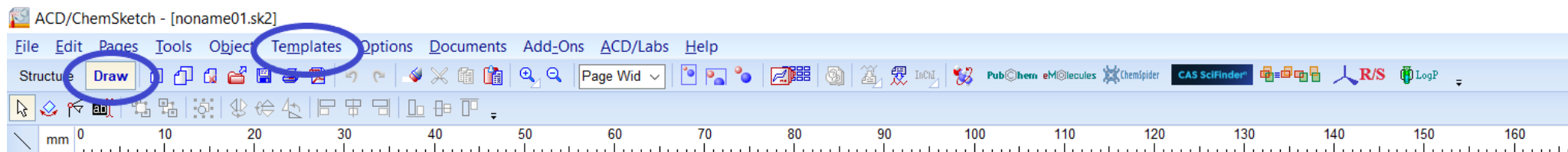
Slika 7. Slijed koraka za imenovanje strukture.

Primjer 3

Nacrtajte molekulu glukoze i generirajte njezin naziv pomoću Haworthove formule.

KORAK 1

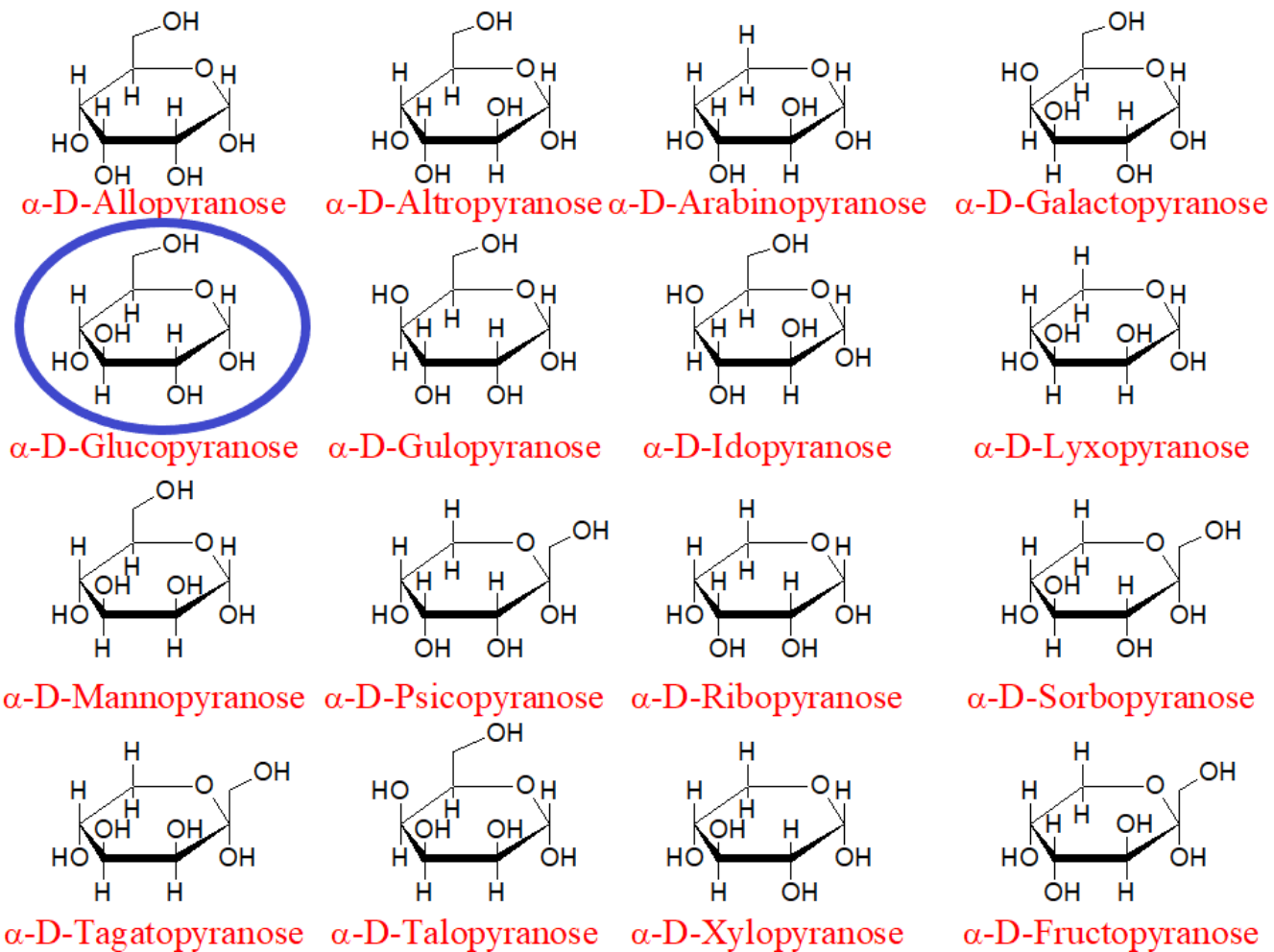
Odaberite rad u načinu *Draw*, kliknite na *Templates* (Slika 8).



Slika 8. Slijed koraka za odabir strukture glukoze iz zadanih predložaka u programu.

KORAK 2

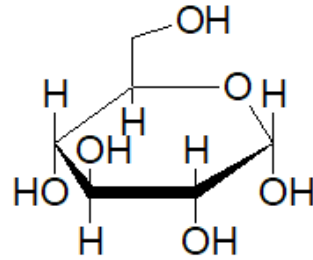
Otvorite prozor predložka (*Template Window*), uključite način crtanja *Draw* i kliknite na *Sugars:alfa-D-Pyr*, kliknite na *α -D-glucopyranose* formulu i pomaknite je u otvoreni prostor za crtanje.



Slika 9. Odabir strukture monosaharida iz izbornika programa *Chemsketch*

KORAK 3

Generirajte naziv strukture koristeći isti način kao da generirate naziv za Fischerove strukture ili kliknite na naziv ispod formule.



α -D-Glucopyranose

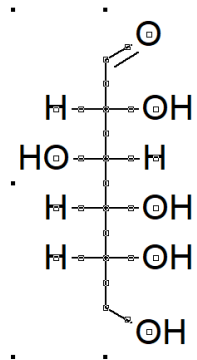
Slika 10. Struktura D-glukopiranoze

Primjer 3

Odaberite *Properties*.

KORAK 1

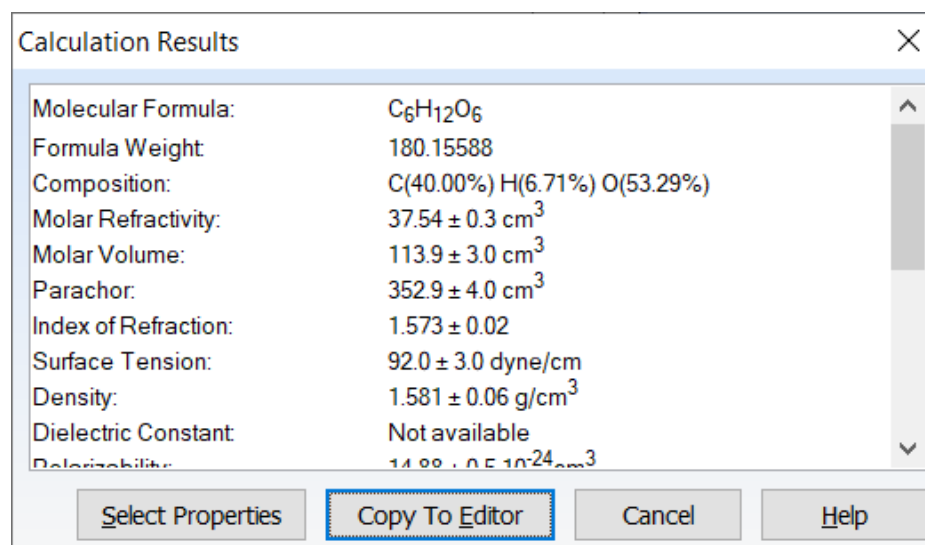
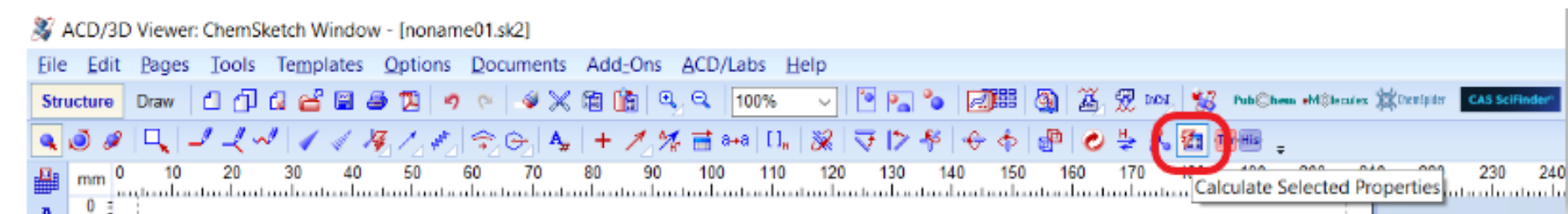
Nacrtajte molekulu u načinu rada *Structure*, kliknite na neko mjesto u dokumentu da označite formulu.



Slika 11. Strukturna formula D-glukoze

KORAK 2

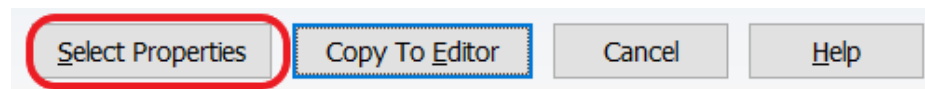
Kliknite na ikonu i odaberite *Properties* (Slika 12).



Slika 12. Slijed radnji za prikaz svojstava odabrane strukture

KORAK 3

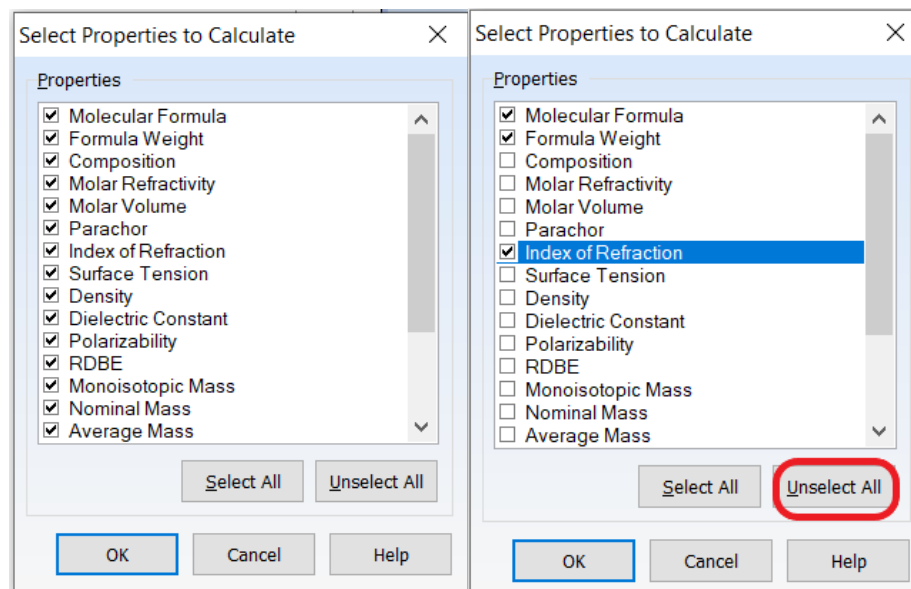
Odaberite *Select Properties* (Slika 13).



Slika 13. Nastavak obrade odabranih svojstava strukture.

KORAK 4

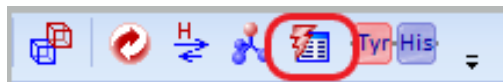
Kliknite na *Unselect All* i odaberite *Properties*, zatim potvrdite odabir sa *OK*.



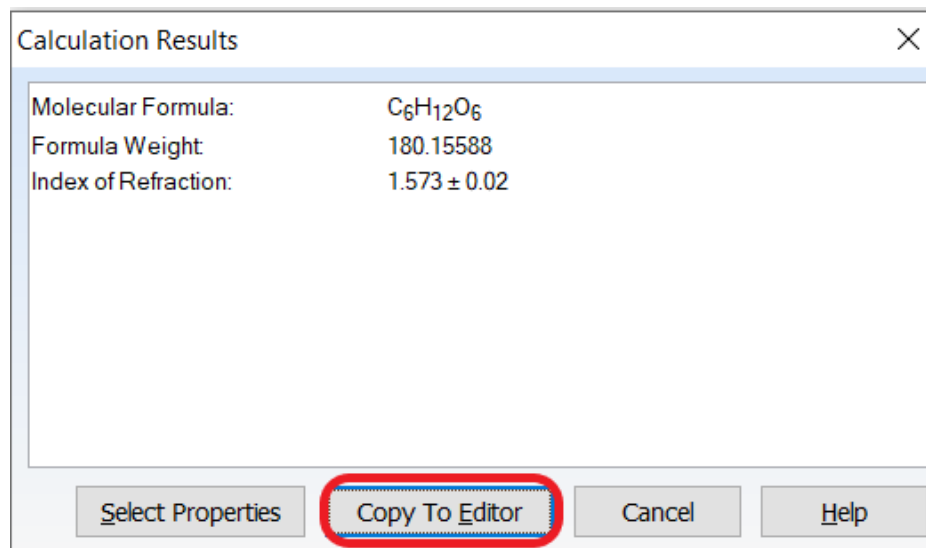
Slika 14. Odabir ispravnih svojstava.

KORAK 5

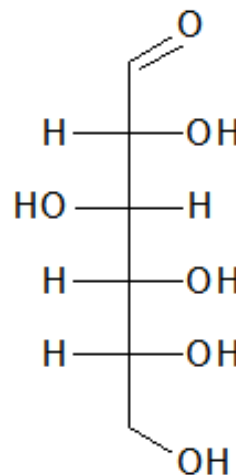
Kliknite na navedenu ikonu, a zatim odaberite opciju *Copy to Editor*.



Slika 15. Ikona za kopiranje



Slika 16. Kopiranje odabranih svojstava



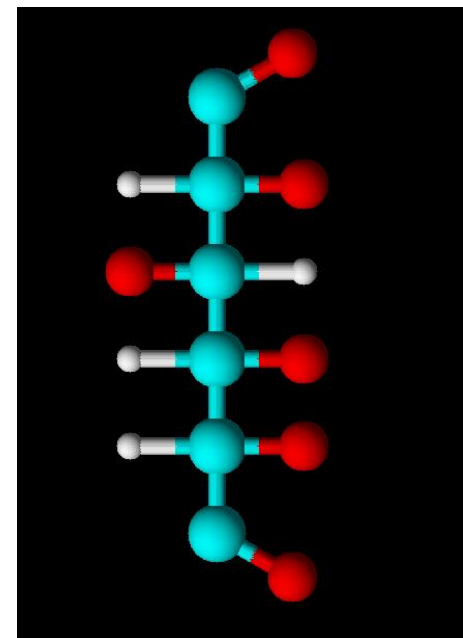
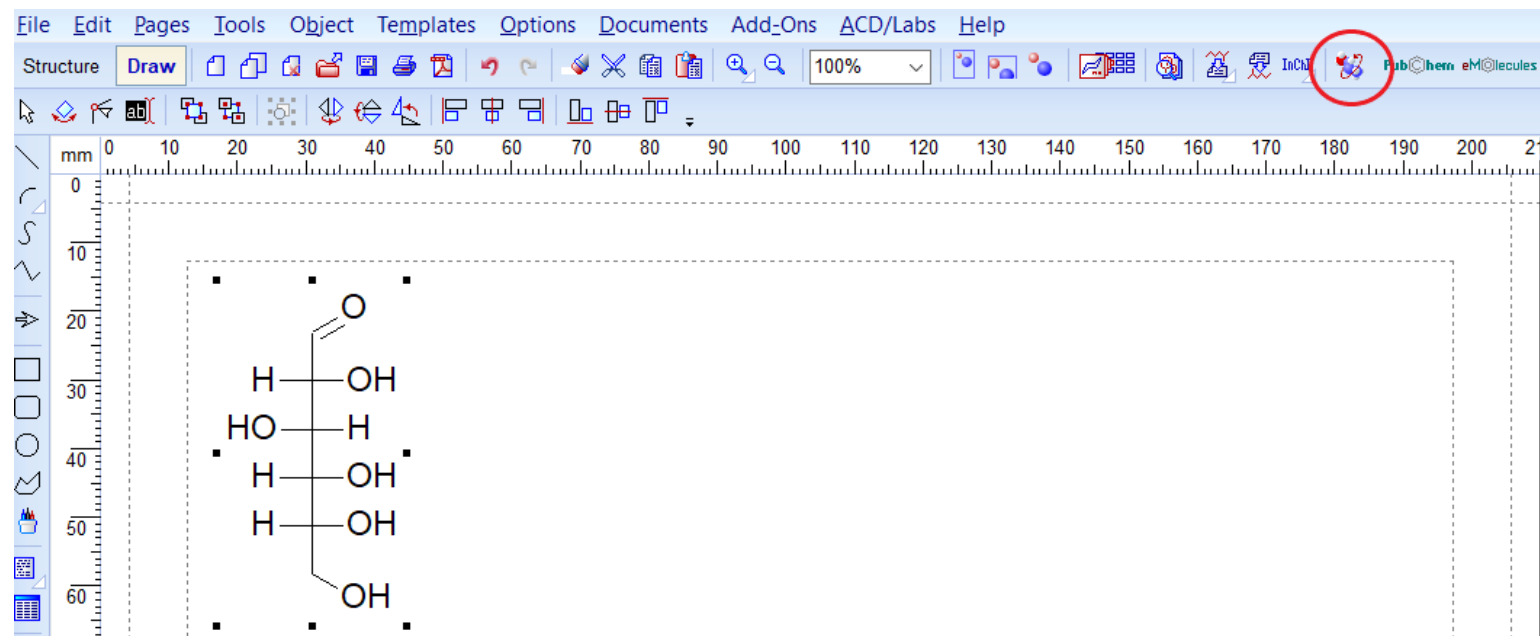
Molecular Formula: C₆H₁₂O₆
Formula Weight: 180.15588
Index of Refraction: 1.573 ± 0.02

Primjer 4

Prikažite molekule D-glukoze i α -D-glukopiranoze u 3D načinu rada.

KORAK 1

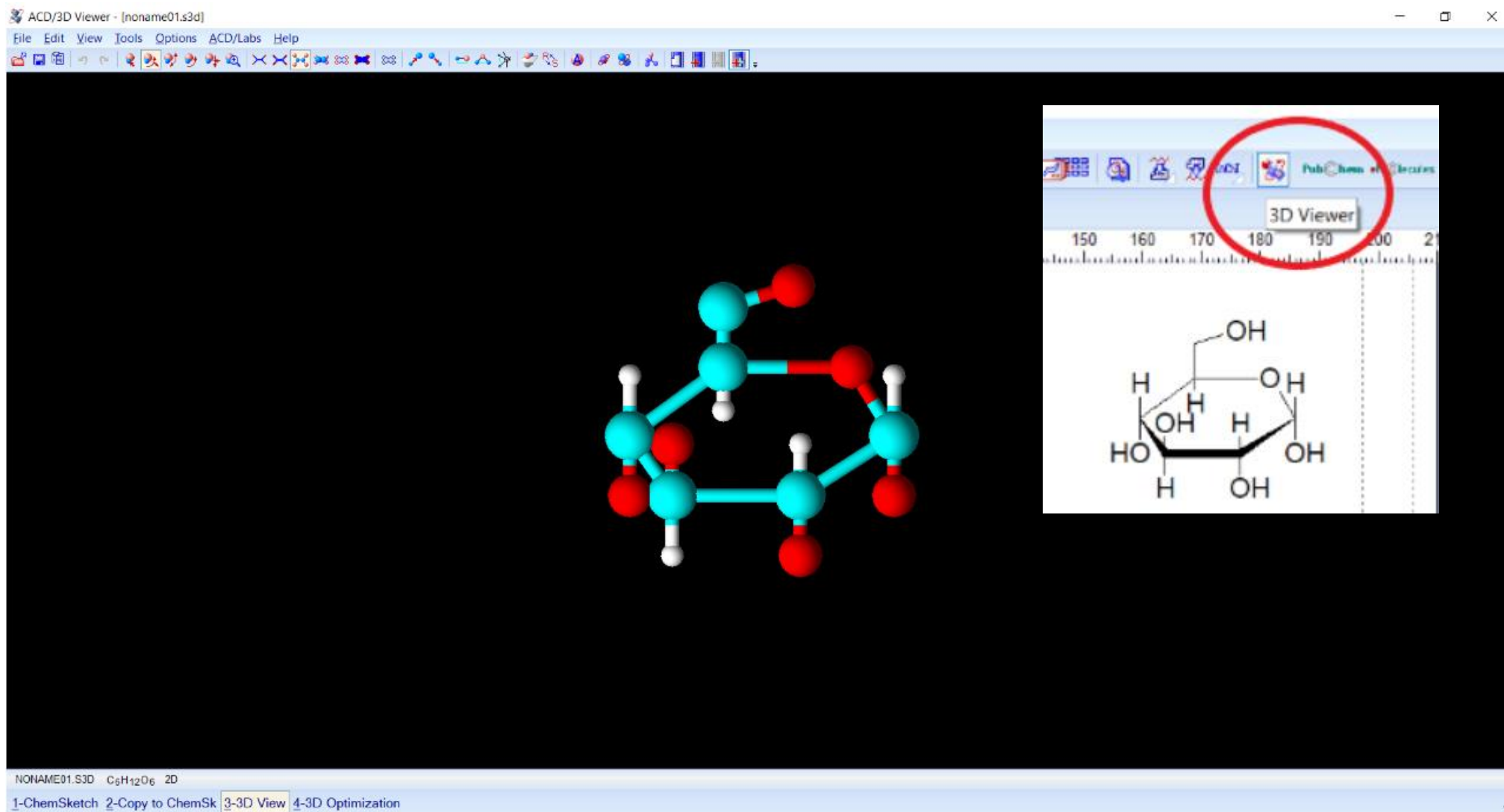
Označite Fischerovu formulu i kliknite na *3D-viewer* (Slika 17).



Slika 17. Označavanje strukture

KORAK 2

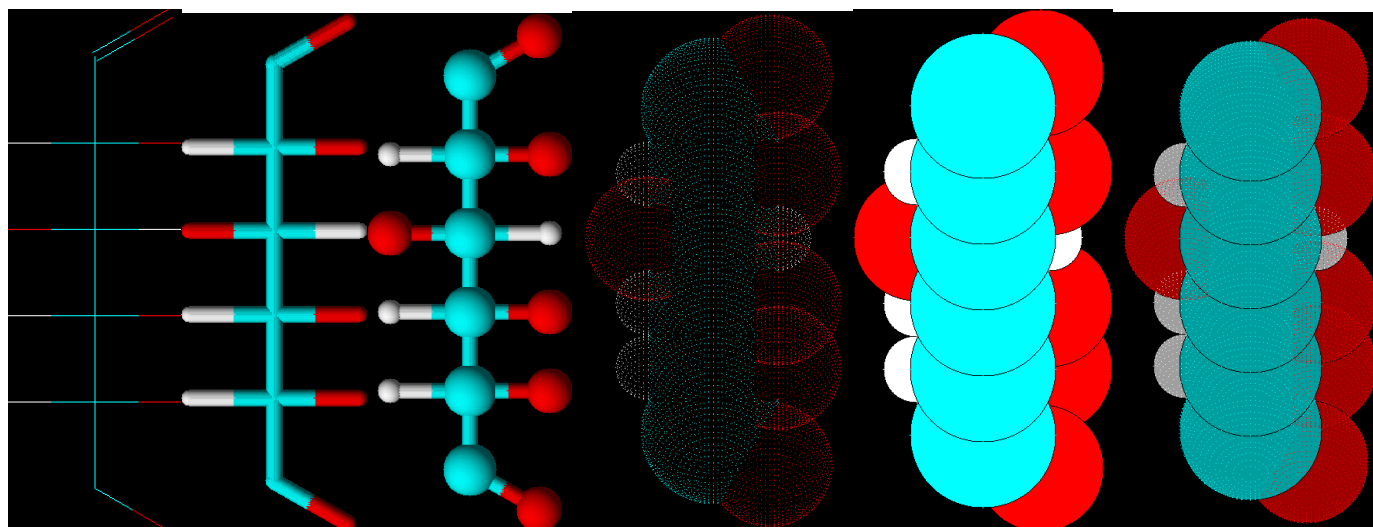
Označite Haworthovu formulu i kliknite na *3D-Viewer*.



Slika 18. Haworthova formula D-glukoze

Primjer 4

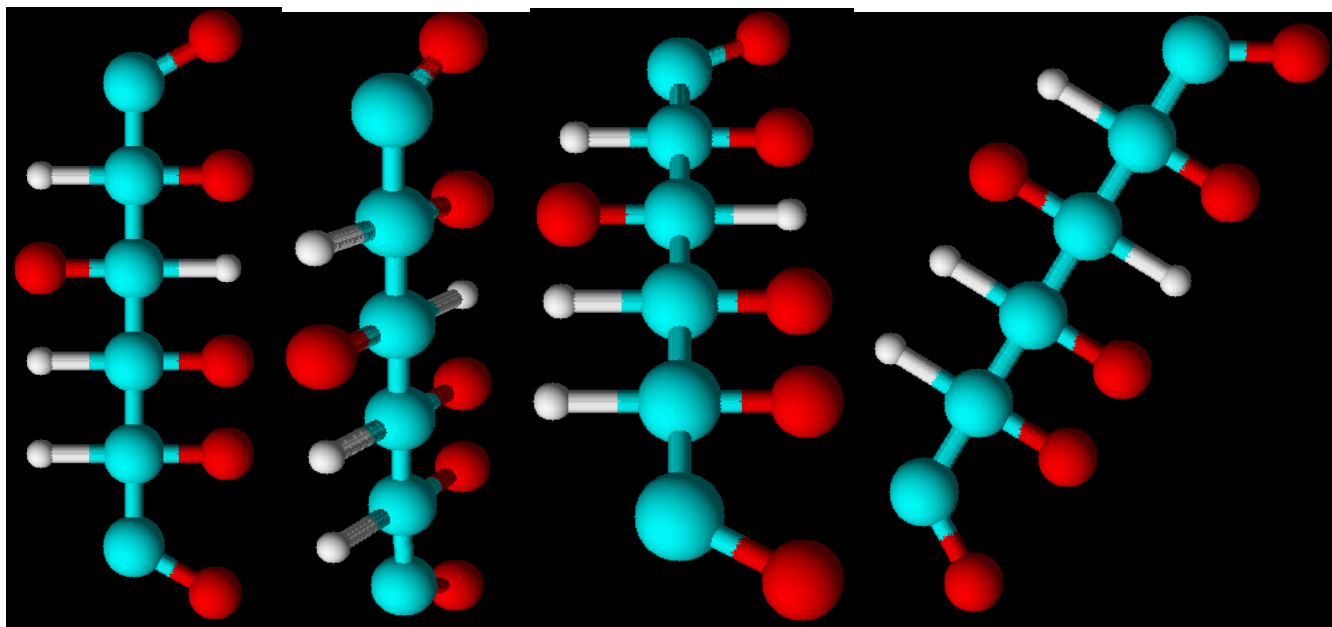
Koristite ikone određenih načina prikaza odabranih struktura molekula.



Slika 19. Vrste formula u 3D prikazu

Koristite ikone svih vrsta rotacija (Slika 20.).





Slika 20. Različiti kutevi monosaharida

1.4. Primjeri zadataka za obradu nastavnog sadržaja

Istražite na internetu kako izgleda molekula fruktoze i prikažite molekulu u programu *ChemSketch*. Kada ste predstavili molekulu fruktoze, istražite kako molekula izgleda u 3D obliku i primijenite naučene značajke rada u programu *ChemSketch*.

1. Nacrtajte molekulu fruktoze koristeći gotove predloške i s njom napravite sljedeće:

- a) nacrtajte dvije vrste strukture ugljikohidrata,
- b) prikažite Fischerovu i Haworthovu formulu,
- c) uredite strukturu molekule, poništite ili promijenite atome i funkcionalne skupine,
- d) generirajte naziv za strukturu,
- e) prikažite strukturu molekule u 3D pregledniku,

- f) koristite ikone svih vrsta rotacija i ikone određenih načina za duljine i atome,
- g) odredite molekulsku formulu, relativnu molekulsku masu i indeks loma.

2. Istražite primjenu biomolekula. Odaberite jednu biomolekulu za prikaz u programu *ChemSketch*. Napišite u bilježnicu primjenu odabrane molekule u svakodnevnom životu te gdje se ona nalazi. Spremite 3D strukturu molekula na svoje računalo.

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

Istražite kako izgleda molekula galaktoze i prikažite molekulu u programu *ChemSketch*. Kada ste predstavili molekulu galaktoze, istražite kako molekula izgleda u 3D obliku i primijenite naučene značajke rada u programu *ChemSketch*.

1. Nacrtajte molekulu galaktoze koristeći gotove predloške i s njom napravite sljedeće:

- a) nacrtajte dvije vrste strukture ugljikohidrata,
- b) prikažite Fischerovu i Haworthovu formulu,
- c) uredite strukturu molekule, poništite ili promijenite atome i funkcionalne skupine,
- d) generirajte naziv za strukturu,
- e) prikažite strukturu molekule u 3D pregledniku,
- f) koristite ikone svih vrsta rotacija i ikone određenih načina za duljine i atome,
- g) odredite molekulsku formulu, relativnu molekulsku masu i indeks loma.

2. Napišite u bilježnicu biološko značenje galaktoze i gdje ona nalazi.

PRIJELAZNI METALI - KOMPLEKSNI (KOORDINACIJSKI) SPOJEVI

1) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna cjelina: Prijelazni metali
Nastavna jedinica: Kompleksni spojevi
Predviđen broj nastavnih sati: 2

1.1. Teorijski uvod

Kompleksni spojevi, također poznati kao koordinacijski spojevi, sastoje se od središnjeg metalnog iona (također poznatog kao koordinacijski centar) okruženog grupom liganada. Ligandi su anioni ili neutralne molekule koje mogu donirati par ili parove elektrona i koji su vezani na metalni ion preko koordinacijskih kovalentnih veza. Ligandi mogu biti monodentatni, bidentatni ili polidentatni. Koordinacijska kovalentna veza je kovalentna veza u kojoj jedan atom (donorski atom) donira oba elektrona u stvaranju kovalentne veze. Ova vrsta veze razlikuje se od normalne kovalentne veze u kojoj svaki atom daje jedan elektron.

Kompleksni spojevi mogu biti neutralni ili pozitivno ili negativno nabijeni. Kada je kompleksni spoj nabijen, stabiliziraju ga ioni suprotnog naboja.

Ako ion ima prethodno opisanu kompleksnu strukturu naziva se kompleksni ion, ali, ako nema ukupnog naboja (kada postoji interakcija između kationa i kompleksnog aniona, kompleksni kation i aniona ili oba kompleksna kationa i aniona) tada se naziva kompleksni spoj.

Koordinacijski broj je broj donorskih atoma vezanih na središnji metalni atom/ion.

Mnogi koordinacijski spojevi imaju različite geometrijske strukture. Dva uobičajena oblika su kvadratni planarni, u kojem su četiri liganda raspoređena u vrhovima hipotetskog kvadrata oko središnjeg metalnog atoma, i oktaedarski, u kojem je šest liganda raspoređeno na način da su četiri u ravnini i po jedan iznad i ispod ravnine.

Koordinacijski spojevi imaju sposobnost ispoljavanja izomerije, što je postojanje različitih spojeva s istom kemijskom formulom, ali različitim rasporedom liganada oko metalnog iona. To dovodi do različitih fizičkih i kemijskih svojstava, čineći koordinacijske spojeve korisnima u različitim primjenama, uključujući uporabu kao katalizatora, pigmenta i terapijskih sredstava.

Osim izomerije, koordinacijski spojevi često pokazuju zanimljiva svojstva boje, magnetska i reaktivna svojstva i stoga imaju ključnu ulogu u mnogim područjima kemije i imaju širok raspon praktičnih primjena.

Neki primjeri kompleksnih iona nalaze se u tablici:

Molekulske formule spojeva	Naziv	Ligand	Koordinacijski broj	Prostorni raspored atoma u ionu
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	diamminrebrov(I) ion	NH_3	2	Linearan
$[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$	tetracijanocinkatni(II) ion	CN^-	4	Tetraedarski
$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$	tetracijanonikelatni (II) ion	CN^-	4	Kvadratno planarni
$[\text{PtCl}_6]^{2-}$	heksakloroplatinatni (IV) ion	Cl^-	6	Oktaedarski
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	heksaamminkobaltov(III) ion	NH_3	6	Oktaedarski
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$	diammindikloroplatina(II)	NH_3, Cl^-	4	Kvadratno planarni Cis-trans izomeri

1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

U ovom poglavlju učenik će naučiti:

- nacrtati različite primjere jedin的角度 kompleksnih iona i molekula te ih prikazati strukturnom formulom
- prikazati strukture jedin角度 kompleksnih spojeva u 2D

- prikazati 3D modele spojeva nacrtanih u 2D koristeći opciju *3D Viewer*
- odrediti koordinacijski broj centralnog iona i geometriju jedinki kompleksnih spojeva
- odrediti moguće geometrijske izomere kompleksnih spojeva
- prikazati strukturu nacrtanih jedinki kompleksnih spojeva u tri dimenzije
- rotirati strukture jedinki kompleksnih spojeva u dvije i tri dimenzije
- promijeniti način trodimenzionalnog prikaza strukture iona
- pomicati strukture jedinki kompleksnih spojeva u 2D i 3D
- odrediti/ispraviti duljine veza i vezne kutove u kompleksnim ionima
- optimizirati strukturu jedinice kompleksnog spoja
- spremiti na računalo dvodimenzionalnu i trodimenzionalnu strukturu nacrtane jedinice koordinacijskog iona ili spoja

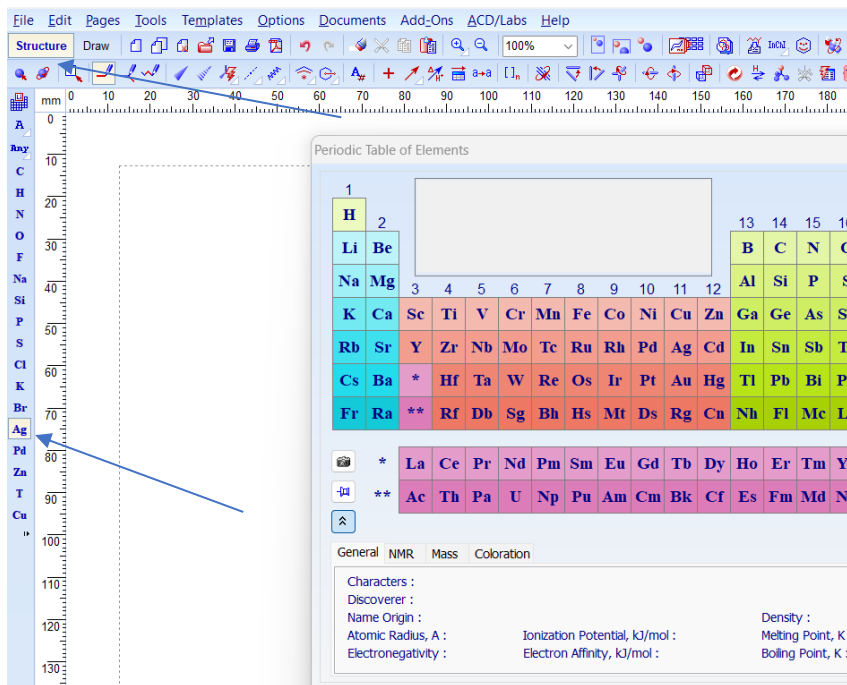
1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

Primjer 1

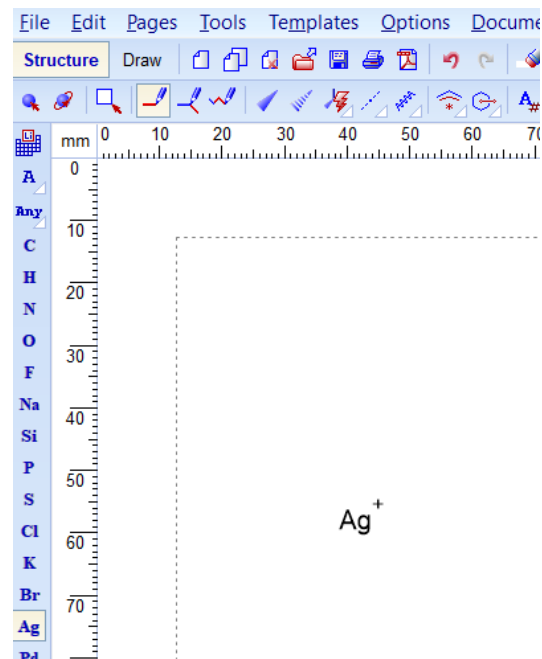
Nacrtaj strukturu diamminsrebrovog(I) iona, $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ te ju prikaži u tri dimenzije na različite načine i odredi vezne kuteve.

KORAK 1

Odaberite *Structure Mode*. Odaberite atom srebra s lijeve strane alatne trake ili odaberite Periodni sustav (lijeva strana alatne trake) i odaberite srebro i kliknite na prazan dio stranice. (**Slika 1a i Slika 1b**). Kada prvi put koristite element, morate ga odabrati iz periodnog sustava, a kasnije se pojavljuje na lijevoj strani alatne trake.



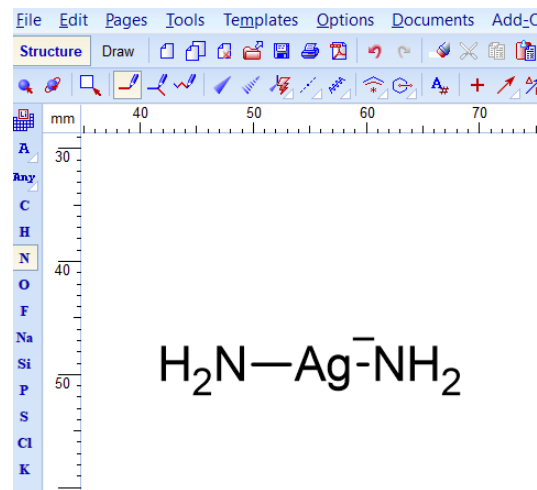
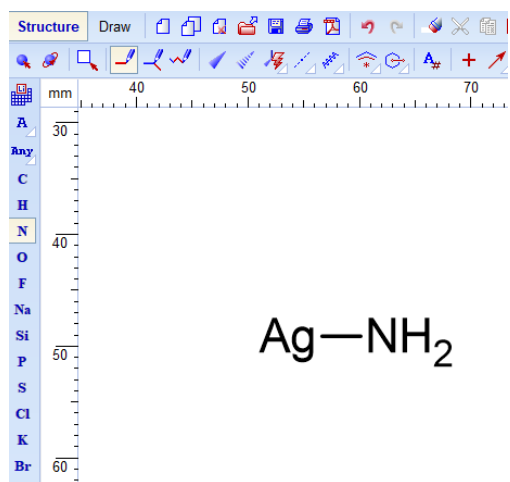
Slika 1a. Odabir željenog elementa.



Slika 1b. Odabrana opcija atoma srebra.

KORAK 2

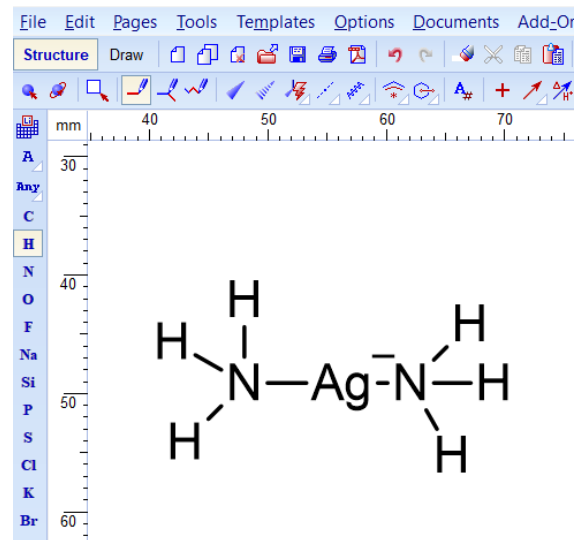
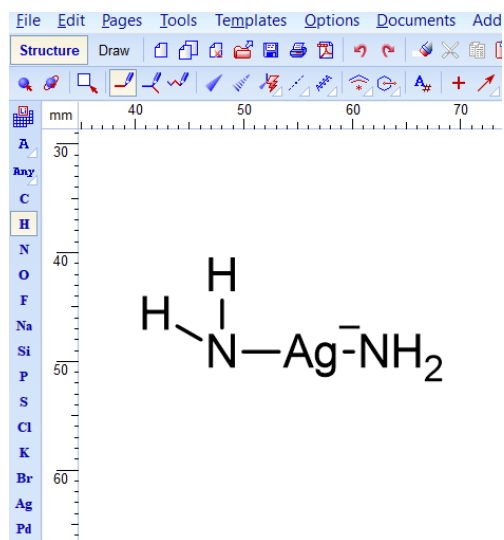
Odaberite *Draw Normal* opciju, odaberite atom dušika na lijevoj alatnoj traci (ili iz periodnog sustava) i nacrtajte vezu sa svake strane Ag. (Slika 2)



Slika 2. Crtanje veze između atoma srebra i dušika.

KORAK 3


Nacrtajte tri dušik - vodik veze na svakom atomu dušika. (Slika 3a) Ponovite s drugim dušikovim atomom.

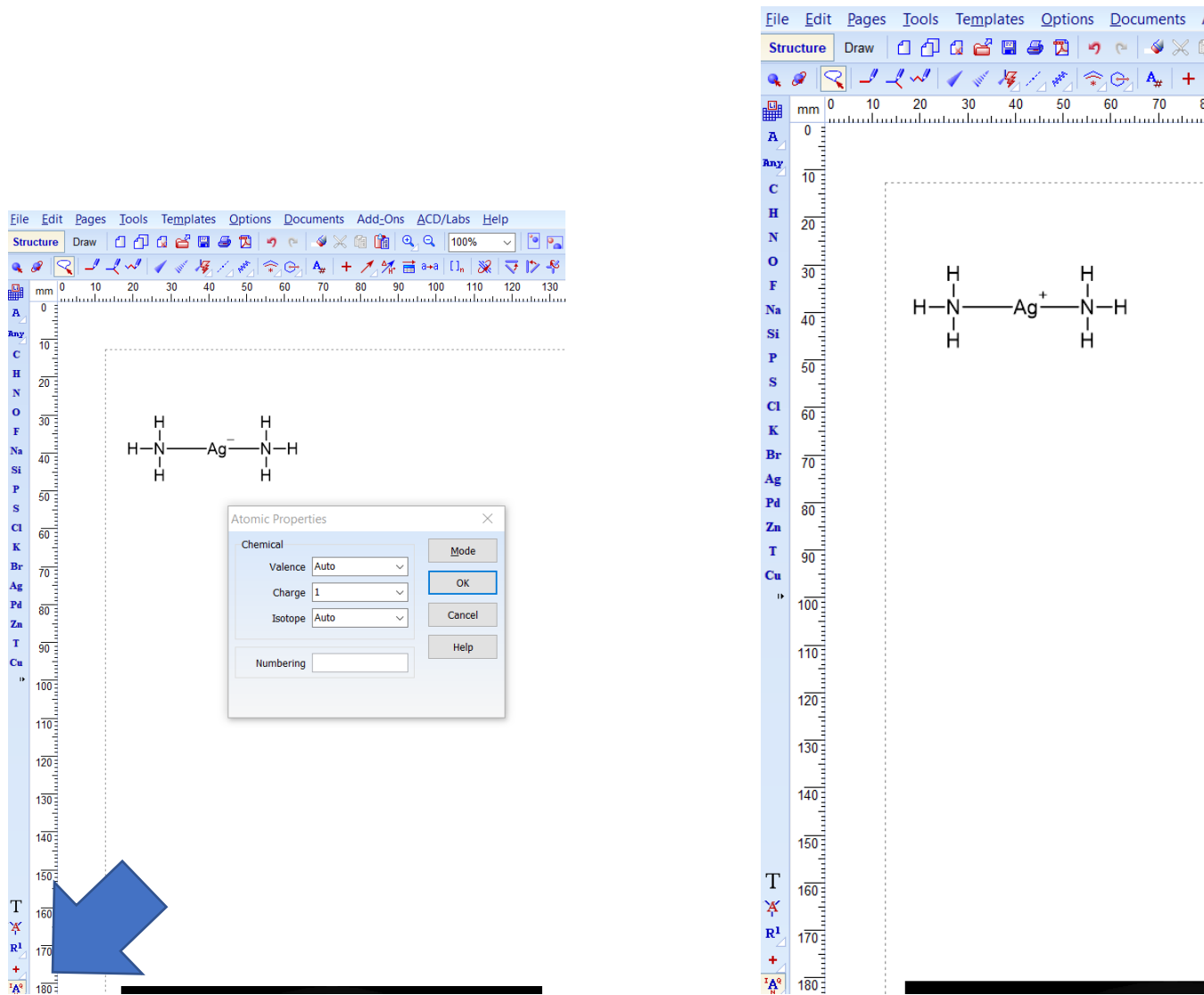


Slika 3a. Crtanje veze dušik - vodik.

KORAK 4



Određivanje naboja središnjeg atoma u nacrtanom kompleksnom spoju.

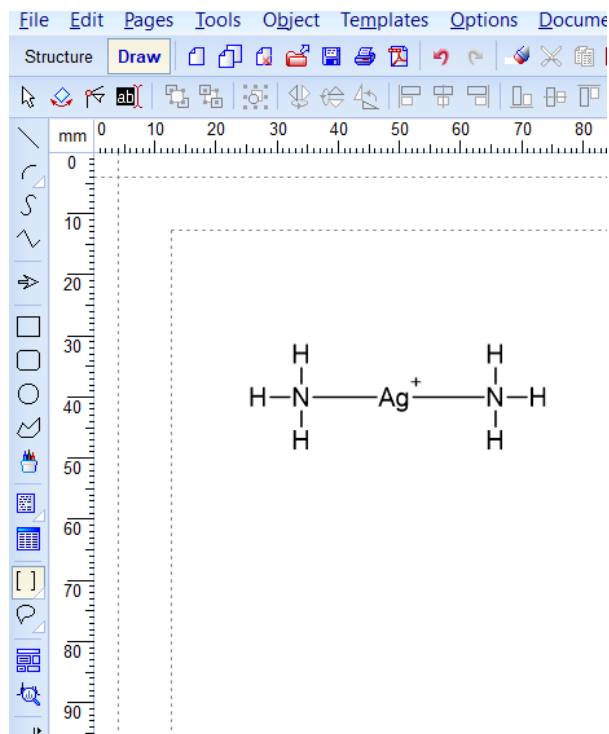
Odaberite  (*Atom Chemical Properties*), kliknite na atom srebra i promijenite mu naboj. Kliknite **OK** (**Slika 4**).



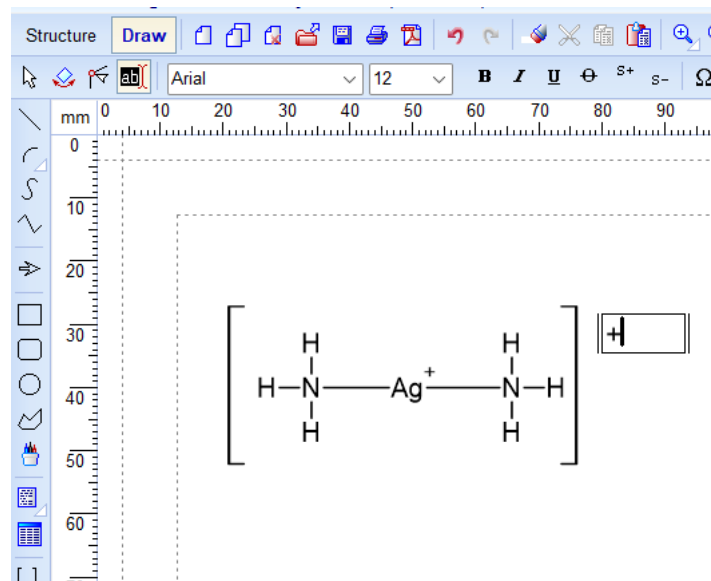
Slika 4. Odabir ispravnog naboja za atom srebra.

KORAK 5

Potrebno je dodati zagrade i odgovarajući naboj. Prebacite se u način rada za crtanje (*Draw*) i odaberite zagrade . (Slika 5a). Za dodavanje naboja odaberite  u *Draw mode* i dodajte naboj. (Slika 5b)




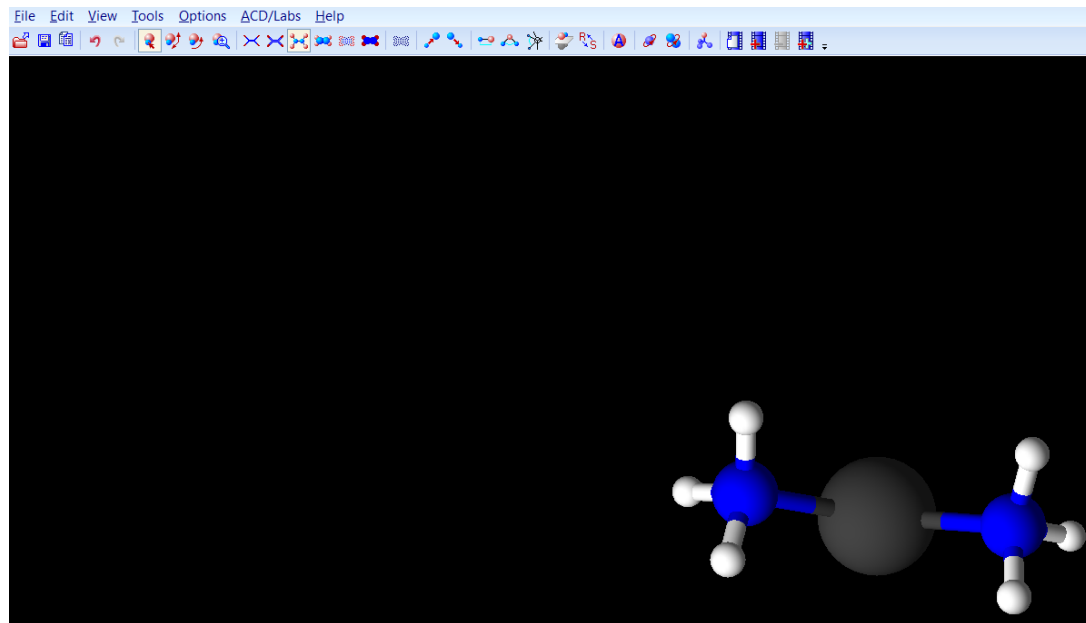
Slika 5a. Dodavanje zagrada kompleksnom spoju.




Slika 5b. Dodavanje naboja kompleksnom spoju.

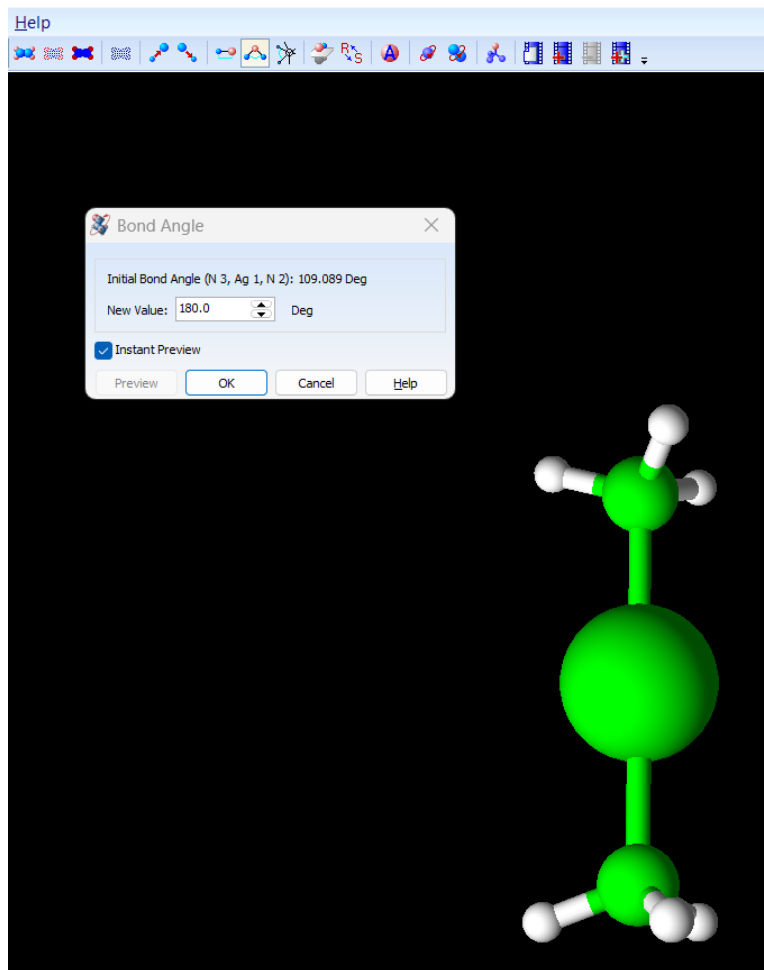
KORAK 6

Prikažite strukturu u 3D tako da je prvo označite, a zatim kliknete na opciju  u gornjem dijelu izbornika. Otvorit će se novi prozor s 3D prikazom strukture (Slika 6a i Slika 6b)




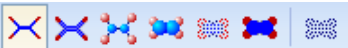
Slika 6b. Struktura u 3D prikazu


KORAK 7 Za prikaz ili promjenu veznog kuta između dva atoma odaberite opciju  *Bond Angle*. Da bismo odredili vezni kut između atoma dušika moramo kliknuti na atom dušika (koji mijenja boju u zelenu) zatim na srebro i drugi atom dušika. Otvorit će se prozor s prikazanom vrijednošću. Možemo promijeniti dobivenu vrijednost u pravu vrijednost veznog kuta (**Slika 7**).




Slika 7. Određivanje međuveznog kuta.

KORAK 8

Pokušajte koristiti svaku od opcija rotiranja, premještanja i odabira na gornjoj alatnoj traci: , a zatim prikazati strukturu na svaki od načina koje program nudi, a opcije se prikazuju i na alatnoj traci: .

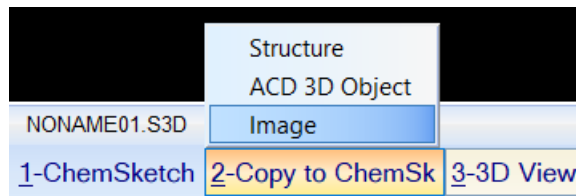
Klikom na bilo koju od opcija mijenja se način na koji je ion prikazan. Za automatsku rotaciju iona kliknite na ikonu .

Za automatsku kontinuiranu promjenu s jednog na drugi način prikaza strukture s rotacijom kliknite na ikonu .

KORAK 9

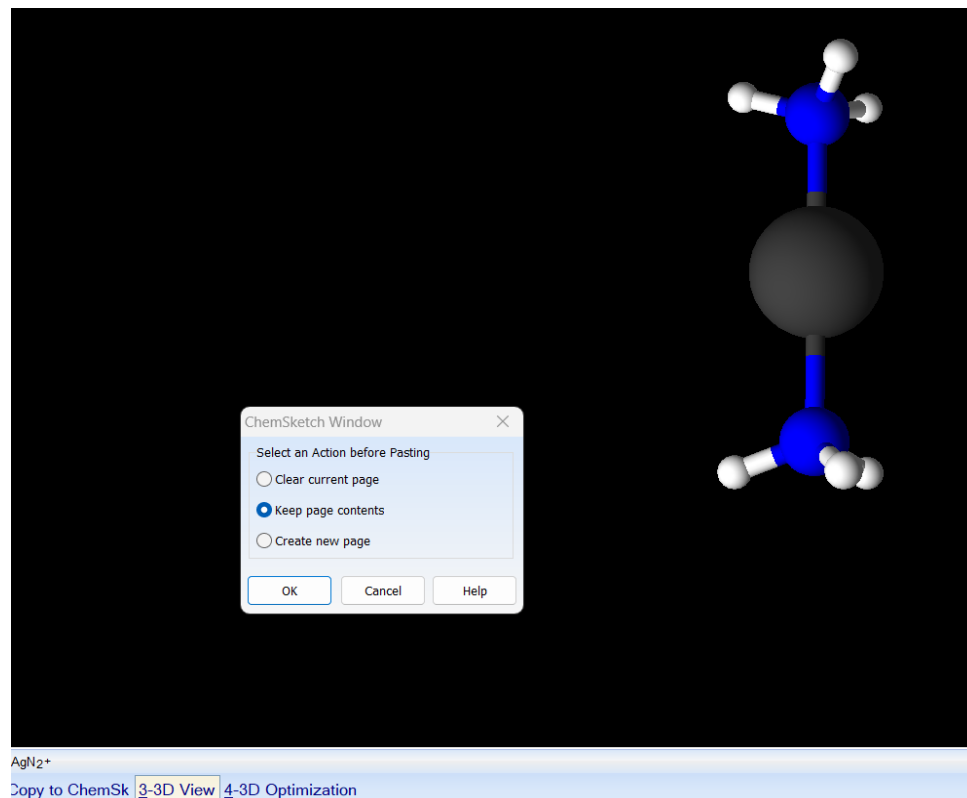
Sada možemo vratiti uređenu strukturu u program *ChemSketch* klikom na opciju *Copy to ChemSketch* i odabirom opcije *Structure* (**Slika 8**) na samom dnu sučelja.

Optimizirana struktura sada se pojavljuje u programu.



Slika 8. Premještanje optimizirane 3D strukture u program *ChemSketch*.

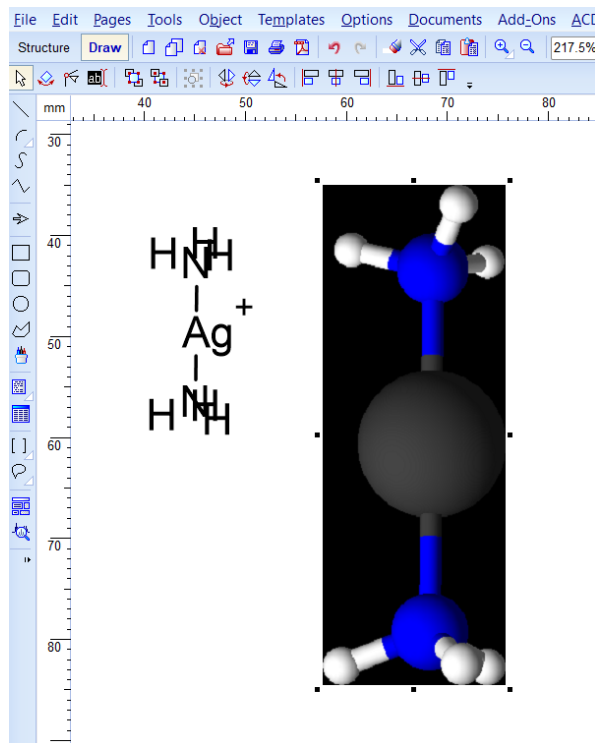
Ako odaberemo *Copy to ChemSketch*, a zatim odaberemo *Image* (**Slika 9a** i **Slika 9b**) možemo kopirati 3D strukturu u program *ChemSketch*.



Slika 9a. Kopiranje strukture u *ChemSketch*.

KORAK 10

Spremite 2D i 3D strukture na radnu površinu klikom na *File*, a zatim odaberite *Save As*.



Slika 9b. Kopirana struktura prikazanog kompleksnog spoja.

Primjer 2

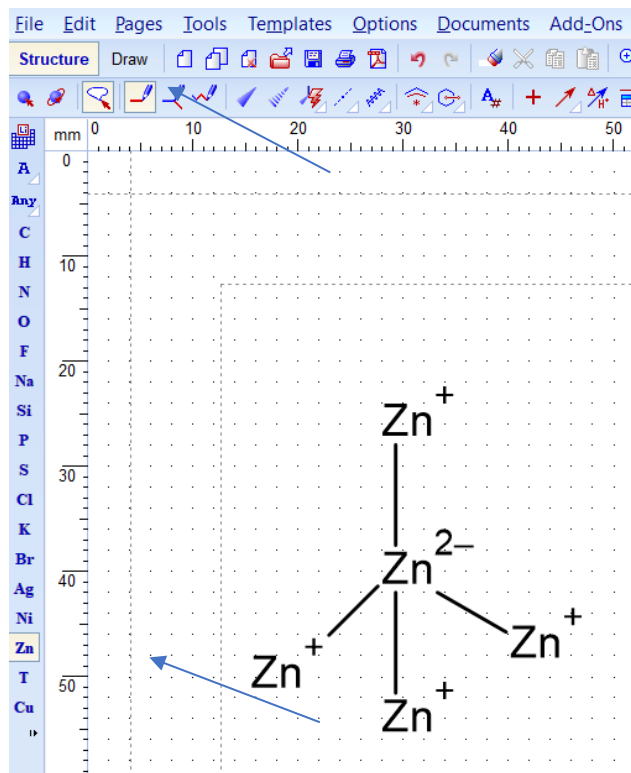
Nacrtaj strukturu tetracijanocinkatnog(II) iona, $[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$. Struktura je tetraedarska.

Nacrtajte strukturu prateći prethodno naučene korake (**slike 1 do 9**). Zatim primijenite prethodno naučene KORAKE od 1 do 9 na ovom primjeru.

KORAK 1

Počnite s načinom *Structure* i odaberite *DrawNormal*.

Odaberite *Zn* iz periodnog sustava (lijeva strana alatne trake) i umetnite ga u prazan prostor sučelja. Nacrtajte tetraedarsku strukturu (**slika 10**).



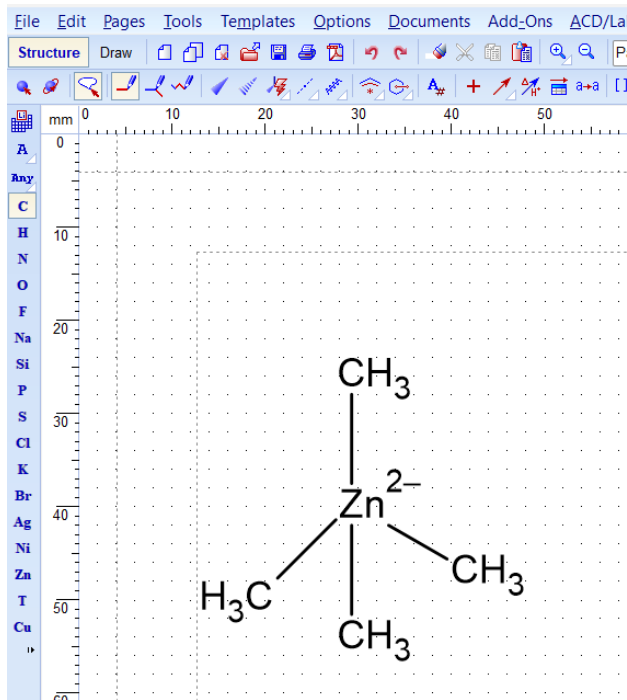
Slika 10. Crtanje tetraedarske strukture odabranog kompleksnog spoja.

KORAK 2

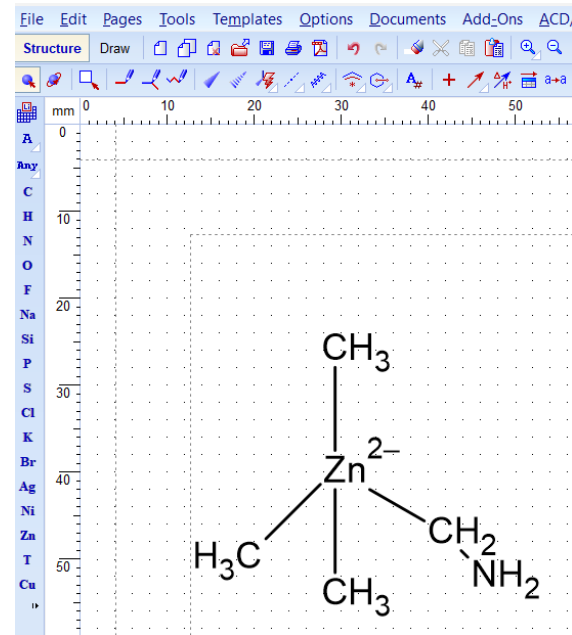
Promijenite četiri atoma cinka (osim središnjeg) sa CN skupinama. Prvo odaberite ugljikov atom s lijeve alatne trake i zamijenite atome cinka odabranim atomom.

KORAK 3

Zatim odaberite atom dušika i nacrtajte trostruku vezu (klikom na vezu, pojavit će se pravokutnik oko veze, zatim kliknite na njega da napravite trostruku vezu) na ugljikovom atomu. Dodajte i pravilan naboj na atom cinka. (Slika 11a-d)

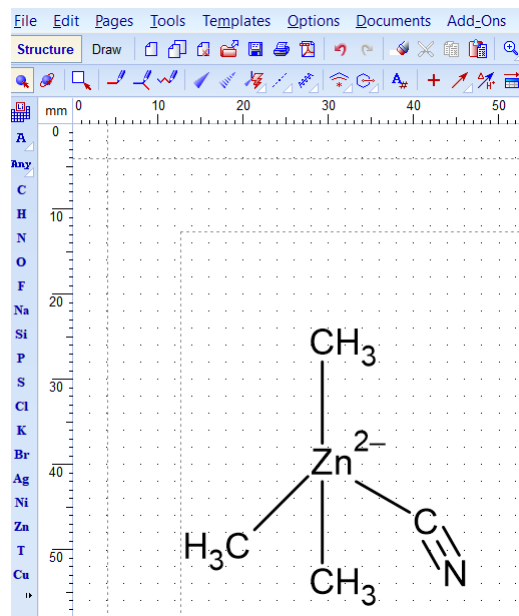


a)

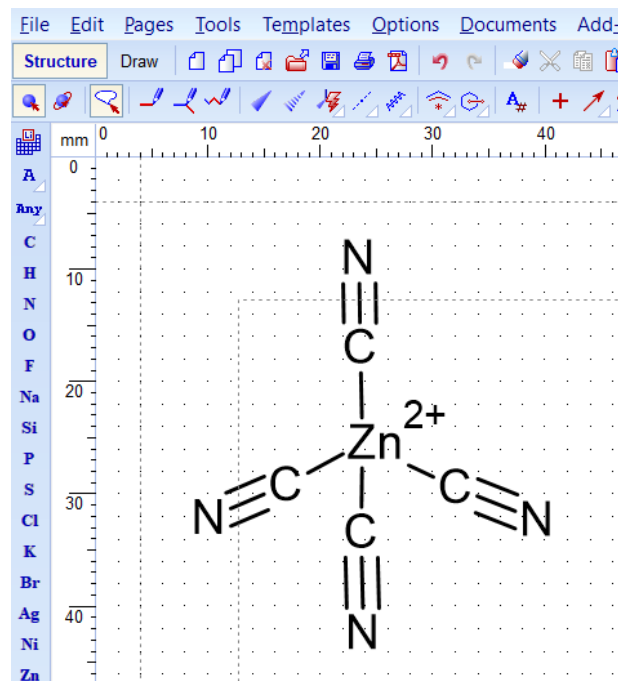


b)

Slika 11. Crtanje CN grupe – slijed radnji




c)



d)

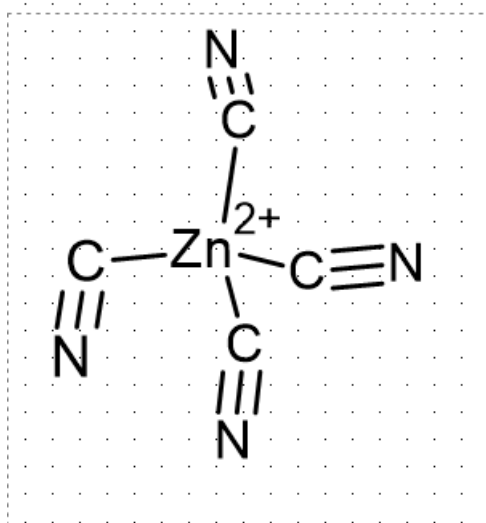
Slika 11. Crtanje CN grupe – slijed radnji

KORAK 4

Koristite opciju *Select/Move* () i prilagodite međuvezne kuteve i položaj. (Slika 11d) ,

KORAK 5

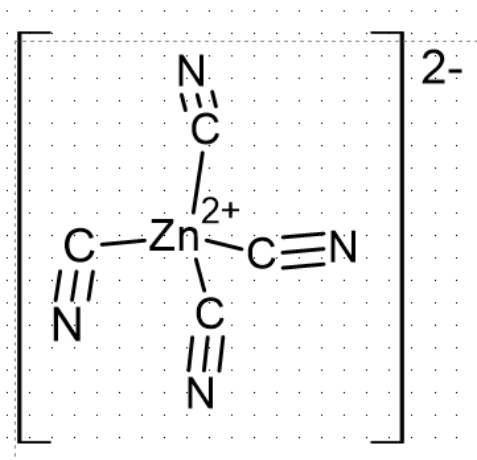
Za bolju strukturu koristite opciju 3D optimizacije . Prethodno odaberite strukturu s  za optimizaciju. (Slika 12)





Slika 12. Struktura kompleksnog spoja nakon 3D optimizacije.

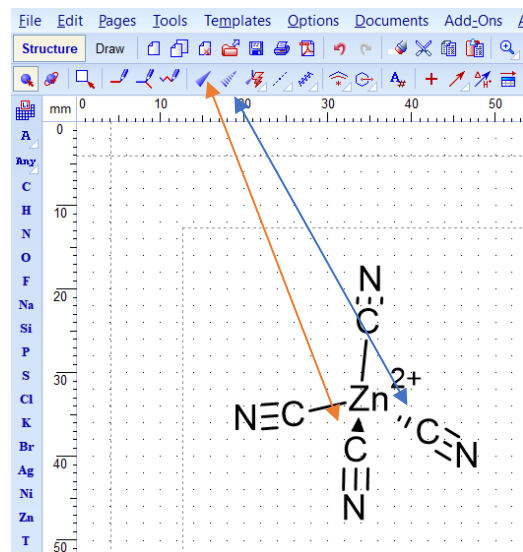
KORAK 6

Dodajte zagrade i naboj koordinacijskog iona. Vidi **primjer 1.** (Slika 13)



Slika 13. Struktura kompleksnog spoja sa zagradama i nabojem.

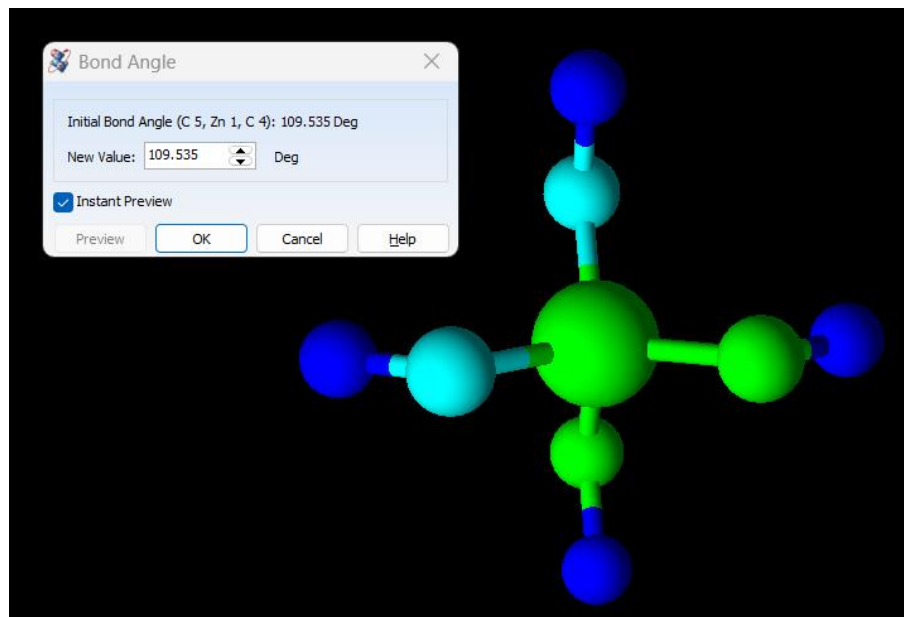
Također je moguće strukturu prikazati klinastim formulama, kao što je prikazano na **slici 14**. Kliknite na ikonu  na složenoj vezi. Ponovite s drugom vezom. Koristite ikonu .



Slika 14. Struktura kompleksnog spoja prikazana klinastim formulama.

KORAK 7

Predstavljanje strukture u 3D kao što je prikazano na **slici 15**. Pogledajte primjer 1.



Slika 15. 3D struktura i vezni kut prikazanog kompleksnog spoja.

KORAK 8

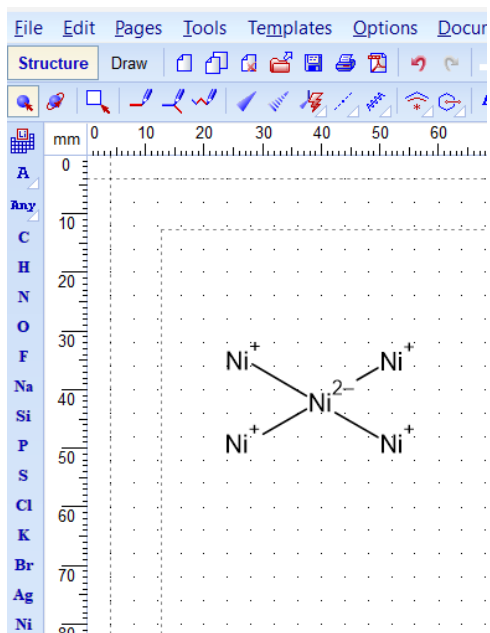
Rotirajte strukturu (pogledajte **KORAK 8, primjer 1**).

Primjer 3

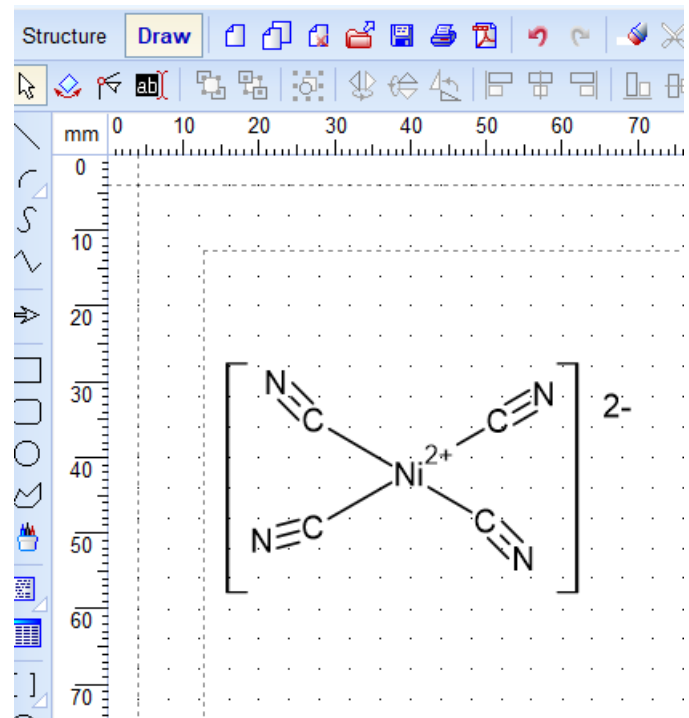
Nacrtajte strukturu tetracijanonikelatnog(II) iona, $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$. Struktura je kvadratno planarna.

KORAK 1

Počnite s načinom *Structure* i odaberite *DrawNormal*. Slijedite korake iz **primjera 1**. (**Slika 16, Slika 17**)



Slika 16. Prikaz strukture $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$



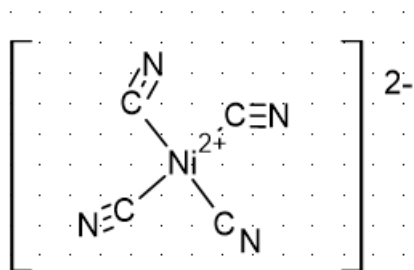
Slika 17. Struktura prije uređivanja nacrtanog kompleksnog spoja.

KORAK 2

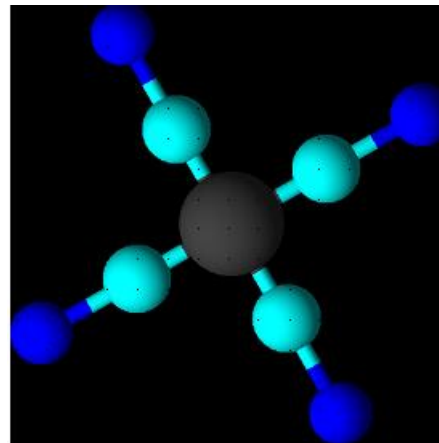
Zamijenite atome nikla sa CN grupom kao u primjeru 2. (Slika 17)

KORAK 3

Struktura nakon uređivanja – koristite opciju *Clean Structure* i opciju 3D optimizacije. (Slika 18 i Slika 19)



Slika 18. Struktura kompleksnog spoja nakon optimizacije



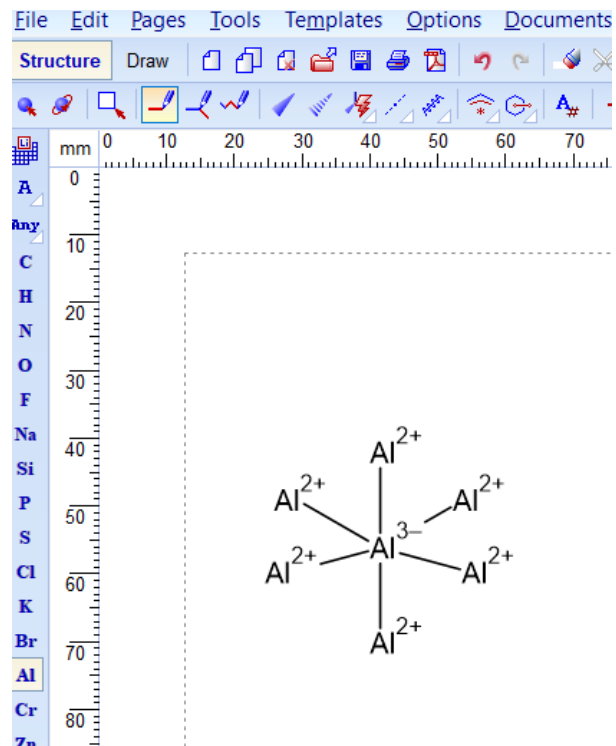
Slika 19. 3D model kompleksnog spoja.

Primjer 4 (opcionalno)

Nacrtajte $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$. Struktura je oktaedarska. Pogledajte korake u **primjerima 1 i 2**.

KORAK 1

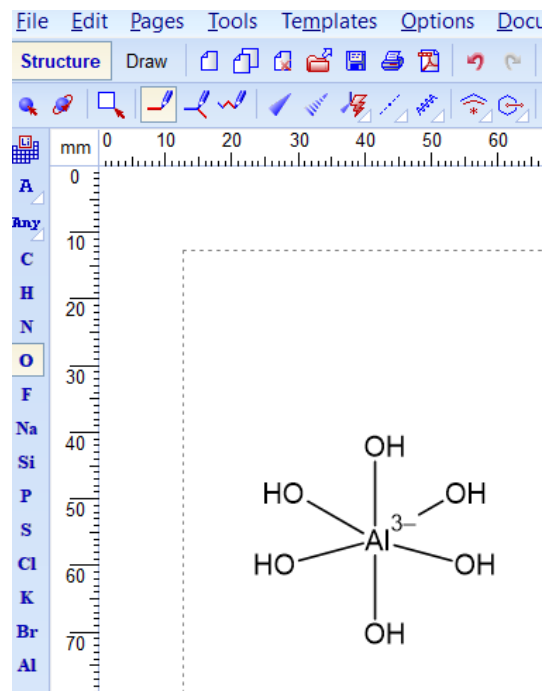
Nacrtajte oktaedarsku strukturu. (**Slika 20**)



Slika 20. Prikazana oktaedarska struktura nacrtanog kompleksnog spoja.

KORAK 2

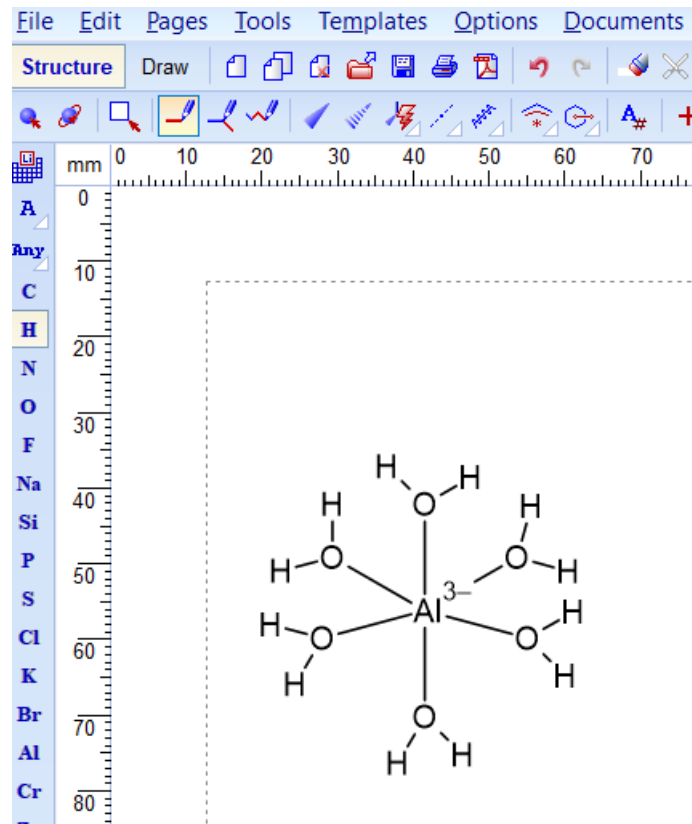
Odaberite atom kisika i zamijenite 6 atoma aluminija (sve osim središnjeg). (**Slika 21**)



Slika 21. Zamjena atoma aluminiija atomima kisika.

KORAK 3

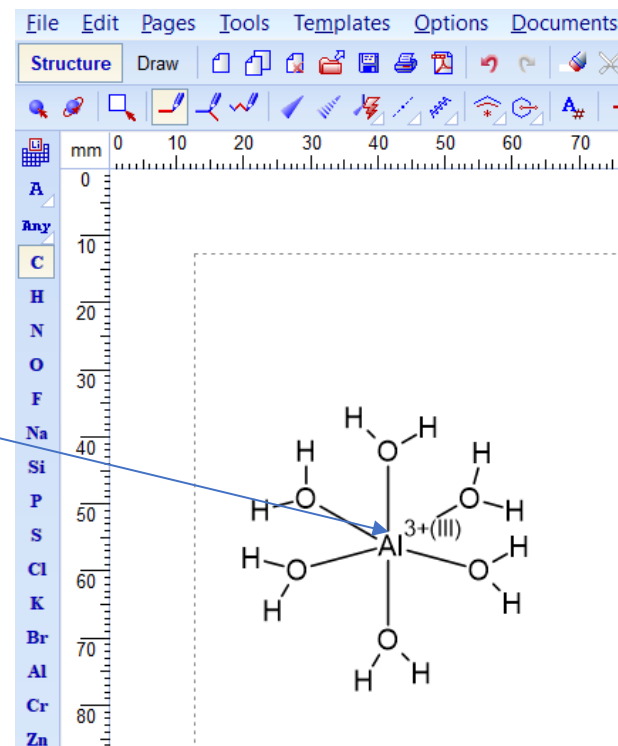
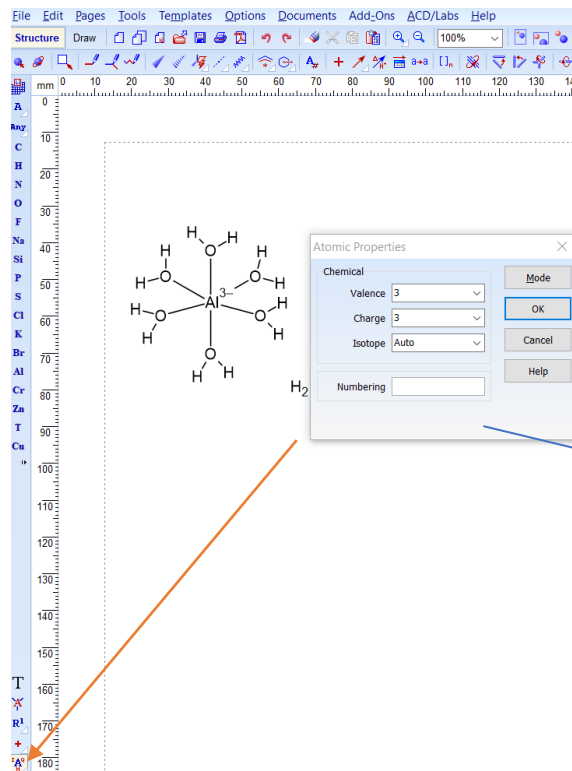
Odaberite atom vodika (H) i nacrtajte dva na svakom atomu kisika. (**Slika 22**)



Slika 22. Dodavanje atoma vodika na prikazani kompleksni spoj.

KORAK 4

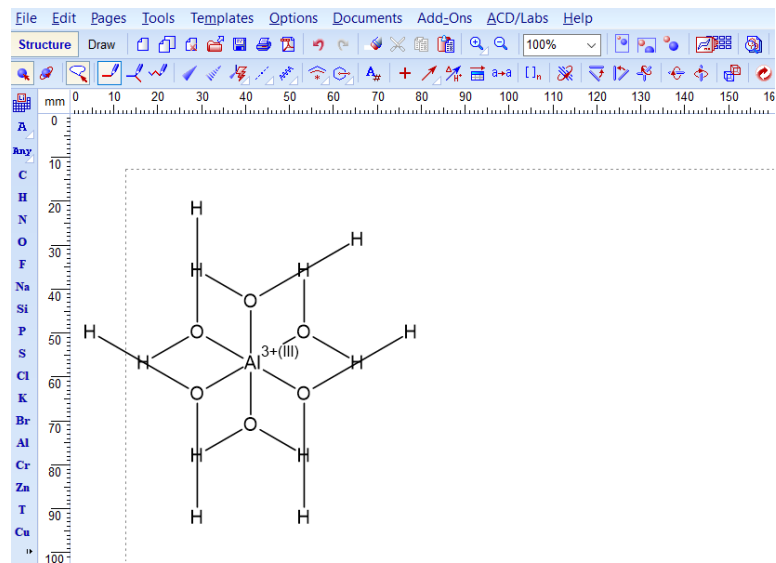
Odabir odgovarajućeg naboja za aluminij. Odaberite svojstva atoma (lijeva alatna traka) i promijenite naboj. (**Slika 23**)



Slika 23. Dodavanje naboja središnjem atomu aluminija.


KORAK 5

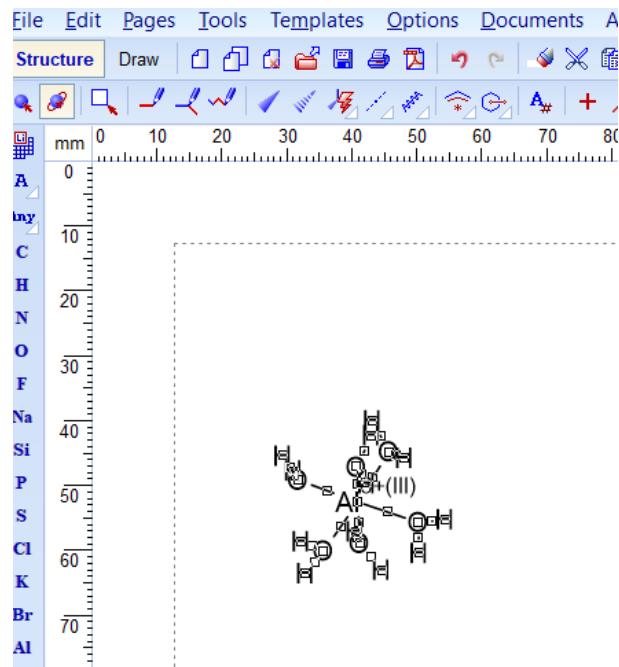
Očistite strukturu koristeći  (Slika 24)



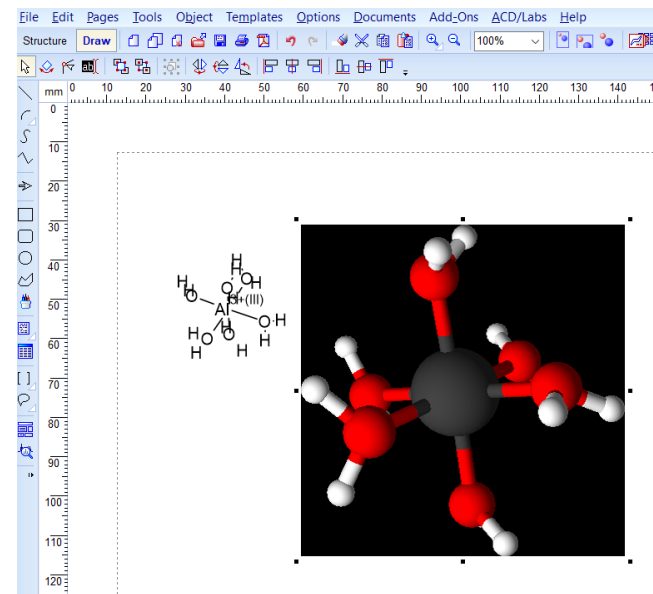
Slika 24. Struktura prikazanog kompleksnog spoja nakon uređivanja.

KORAK 6

Prikažite dobivenu strukturu u tri dimenzije tako da je prvo odaberete, a zatim kliknete na opciju  na alatnoj traci. Otvorit će se novi prozor (*3D Viewer*) s 3D prikazom molekule. (**Slika 25**).



a



b

Slika 25. Optimizirana i 3D struktura spoja.

1.4. Primjeri zadatka za obradu nastavnog sadržaja

1. Pronađite primjer obojenog koordinacijskog iona i nacrtajte ga. Opišite njegovu strukturu i dodajte koordinacijski broj. Navedite vrstu liganda (monodentatni, itd.). Zatim napravite sljedeće:

- prikažite ovaj spoj u 3D,
- optimizirajte ga i
- spremite na računalo.

2. Istražite primjene koordinacijskih spojeva u svakodnevnom životu. Odaberite jednu molekulu za prikaz u programu *ChemSketch*. Zapišite u svoju bilježnicu primjenu odabranog spoja u svakodnevnom životu.

Spremite optimiziranu 2D i 3D strukturu ovih molekula na svoje računalo.

3. Nacrtajte primjer bidentatnog liganda na primjer 1,2-diamintandiklorplatina(II).

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

1. Nacrtajte sljedeći spoj: $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$ i njegov geometrijski izomer. Imenujte oba izomera i vrstu liganada i učinite sljedeće s njima:

- prikažite strukturu spoja u 3D pregledniku,
- prikažite strukturu spoja u 3D pregledniku pomoću štapića i kuglica,
- odredite vezni kut između atoma,
- spremite 2D i 3D strukturu spoja na radnu površinu računala.

2. Nacrtajte sljedeći spoj $[\text{AuCl}_2\text{Br}_2]^-$. Odredite ima li ovaj ion geometrijske izomere. Ako postoje, nacrtajte ih i prikažite strukturu u 3D pregledniku.

CRTANJE APARATURA

1) OBRADA NASTAVNE JEDINICE

Nastavna cjelina: Crtanje aparatura
Nastavna jedinica: Rotacijski vakuumski uparivač
Predviđen broj nastavnih sati: 2

1.1. Teorijski uvod

Isparavanje je proces u kojem se tekuća tvar pretvara u plinovitu. To se koristi, na primjer, za sušenje čvrste tvari, za odvajanje tekućine od otopine u takozvanim isparivačima. Rotacijski vakuumski isparivač (tzv. *rotavap*) je laboratorijski uređaj koji se koristi za brzo isparavanje velike količine otapala i dobivanje čvrste ili nehlapljive tekuće tvari otopljene u njemu. Rotacijski vakuumski isparivači su složeni laboratorijski uređaji koji se sastoje od kondenzatora, rotirajuće tikvice za isparavanje, prihvatne tikvice, pogonskog motora, držača za postavljanje aparata i električne grijače kupke. Vakuumska pumpa je spojena kako bi se smanjio tlak u sustavu. Rotavap se prvenstveno koristi za jednostavnu i vakuumsku destilaciju, kristalizaciju, sušenje, isparavanje ili koncentriranje. Tipični laboratorijski rotavap prikazan je na **slici 1**.



Slika 1. Laboratorijski rotacijski vakuumski

uparivač

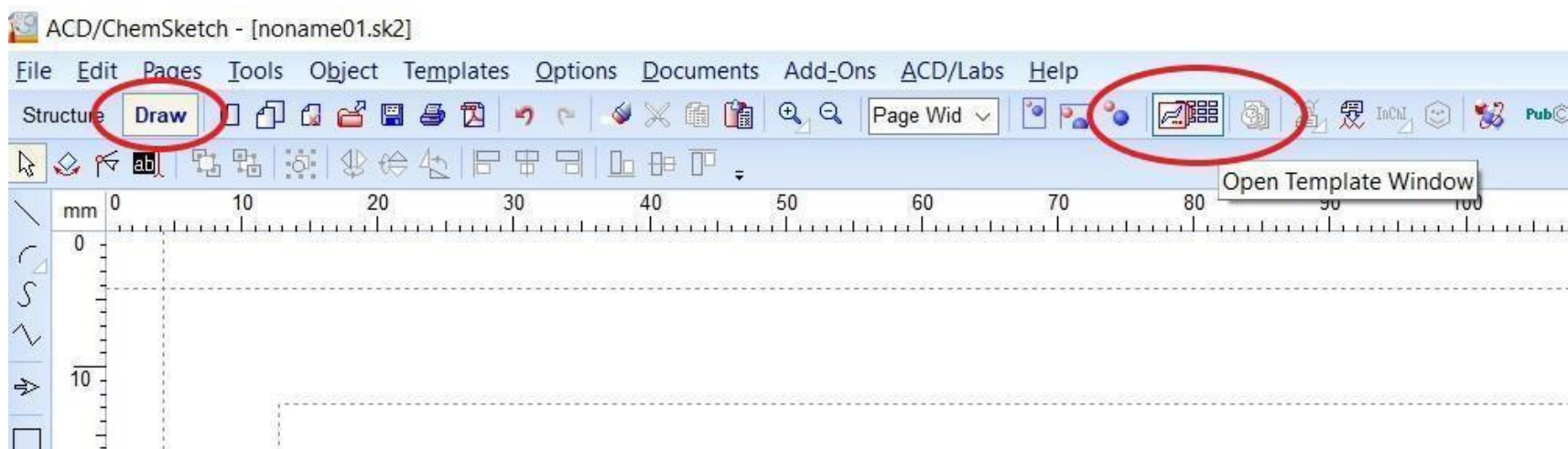
1.2. Odgojno - obrazovni ishodi

- koristiti unaprijed dostupne predloške u *ChemSketch* programu za crtanje različitih aparatura
- urediti, rotirati i pomicati dijelove nacrtane aparature
- spremiti nacrtane aparature na računalo

1.3. Upute za korištenje programa *ChemSketch*

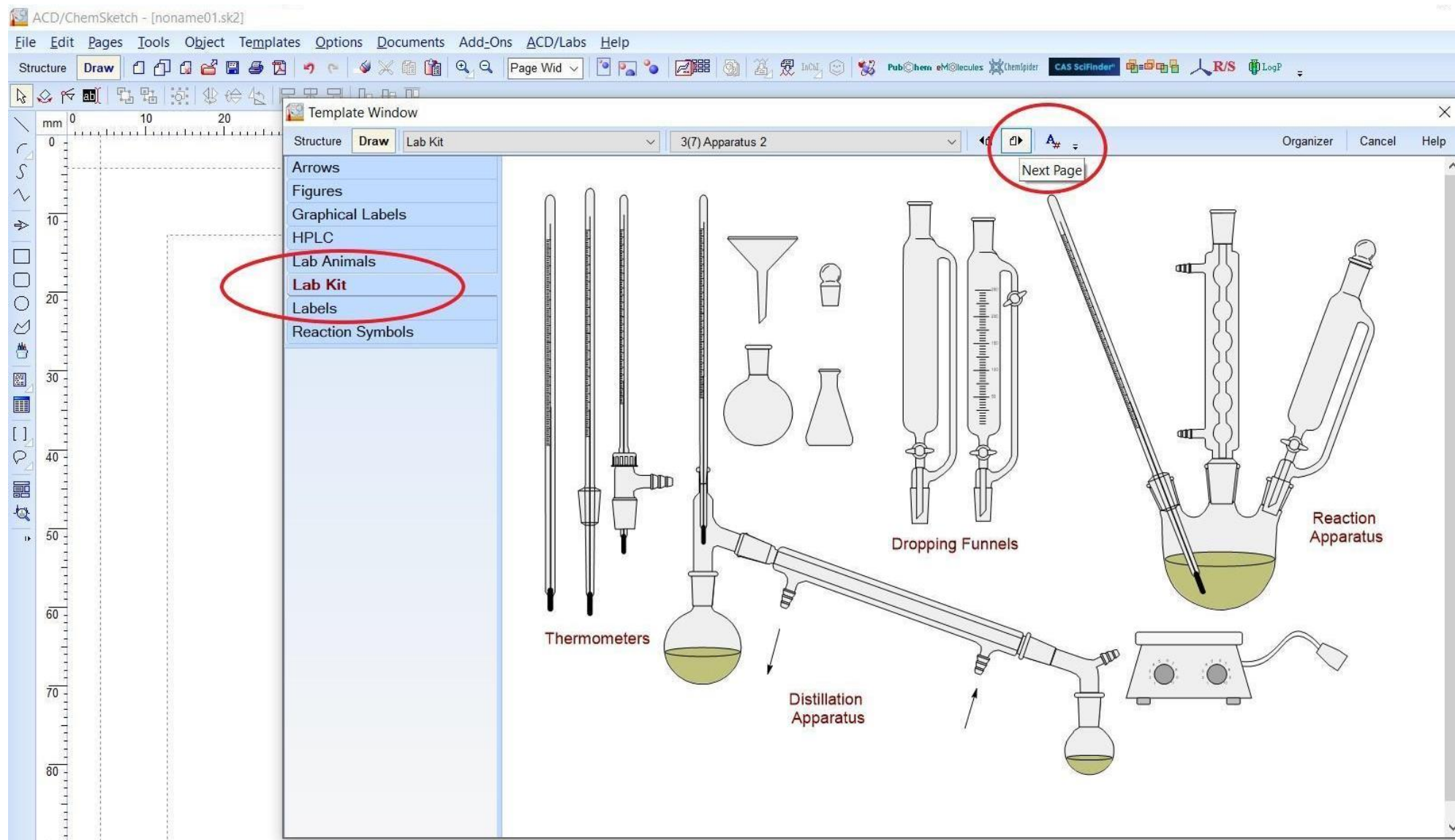
KORAK 1

Najprije ćete se upoznati s mogućnostima softvera vezano uz crtanje aparatura. Prebacite se u način rada *Draw* i otvorite prozor *Template Window*. Navedeni postupak prikazan je na **Slici 2**.



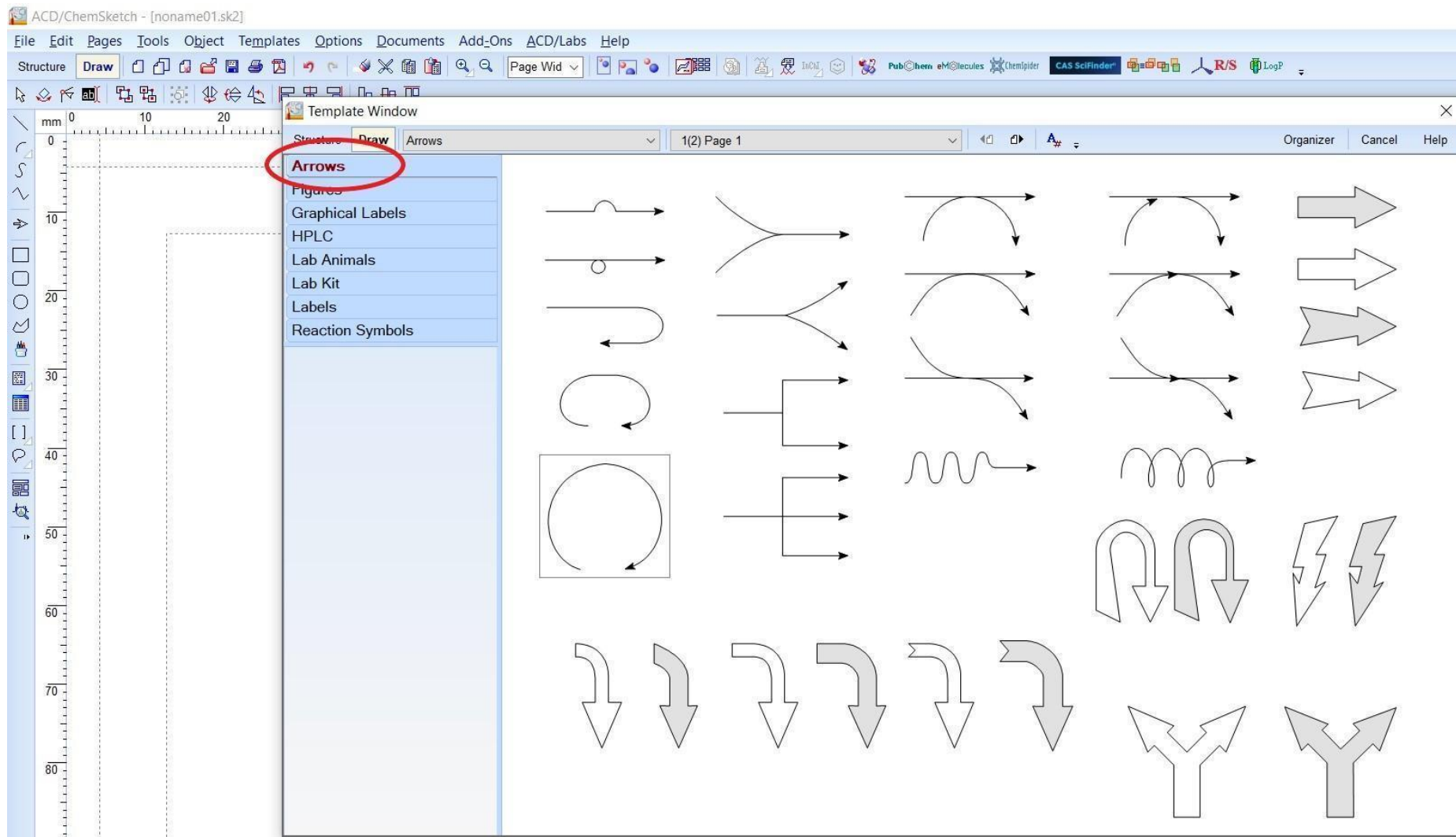
Slika 2. Prvi koraci u programu *ChemSketch* za crtanje aparatura

Unutar opcije *Lab Kit* odaberite stakleno posuđe potrebno za sastavljanje odabranog aparata, počnite s tikvicama s okruglim dnom, zatim dodajte čep, Grahamov kondenzator i adaptere. Koristite *ESC* za uklanjanje odabranog objekta. **Slika 3** prikazuje odabir laboratorijskog pribora i kretanje u izborniku.




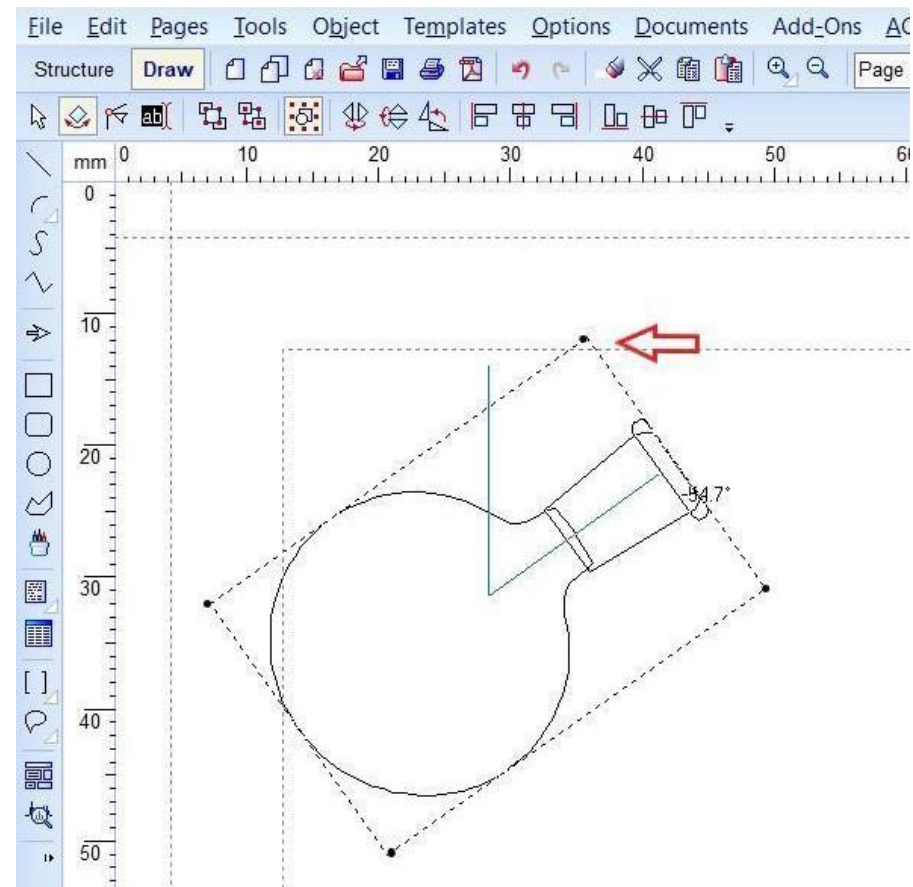
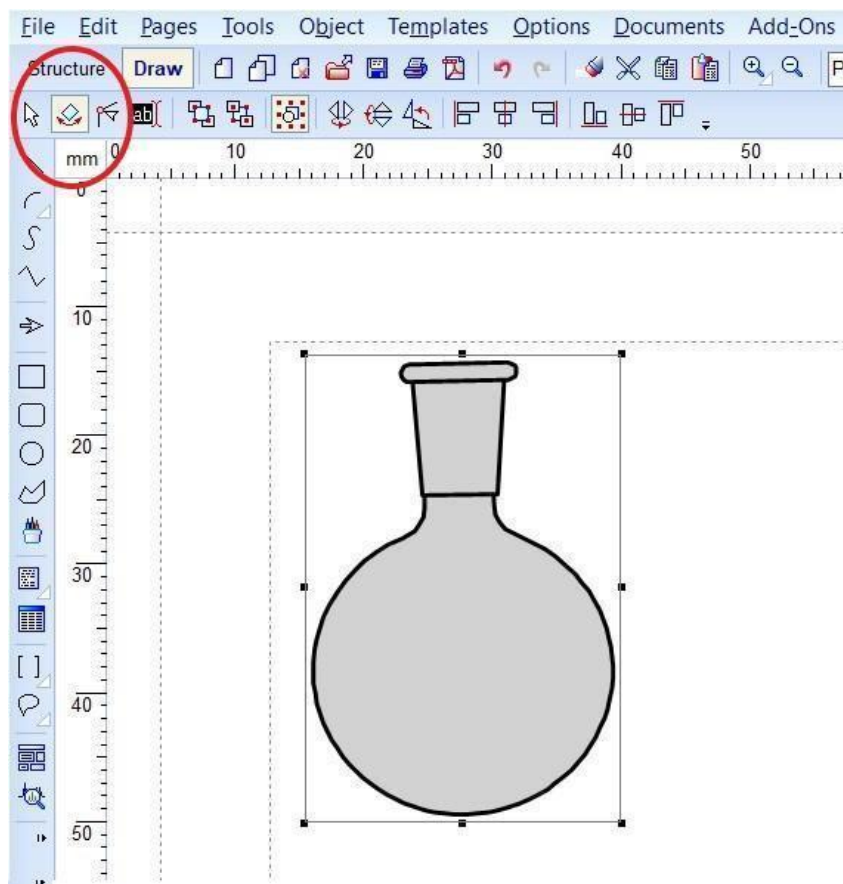
Slika 3. Laboratorijski pribor

Koristite opciju *Arrows* za odabir smjera rotacije (**Slika 4**).



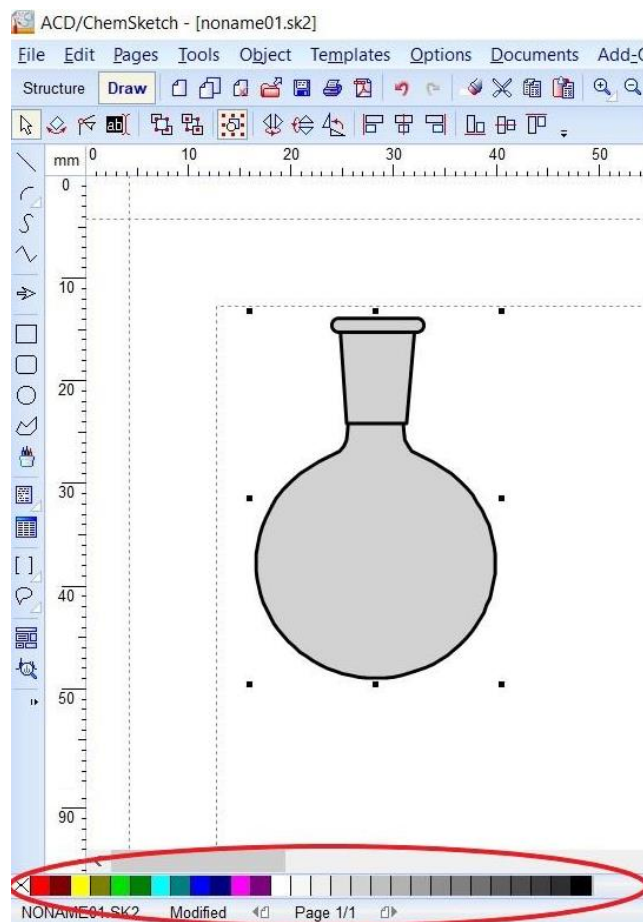
Slika 4. Opcije unutar izbornika *Arrows*

Rotiranje ili okretanje odabranog objekta moguće je pomoću funkcije u gornjem lijevom kutu . Slika 5 prikazuje navedene opcije.



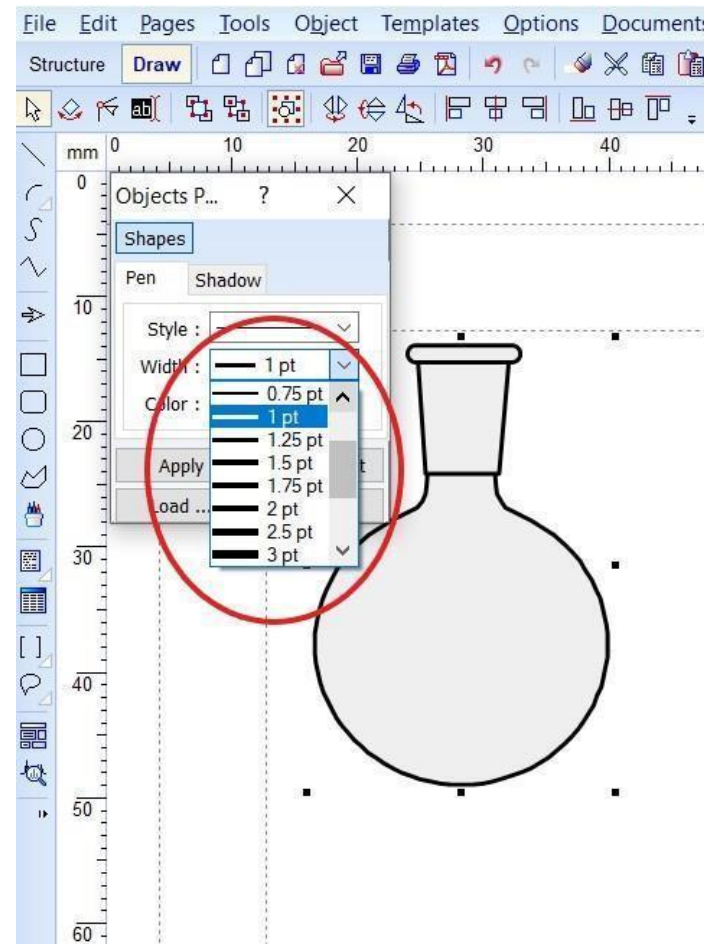
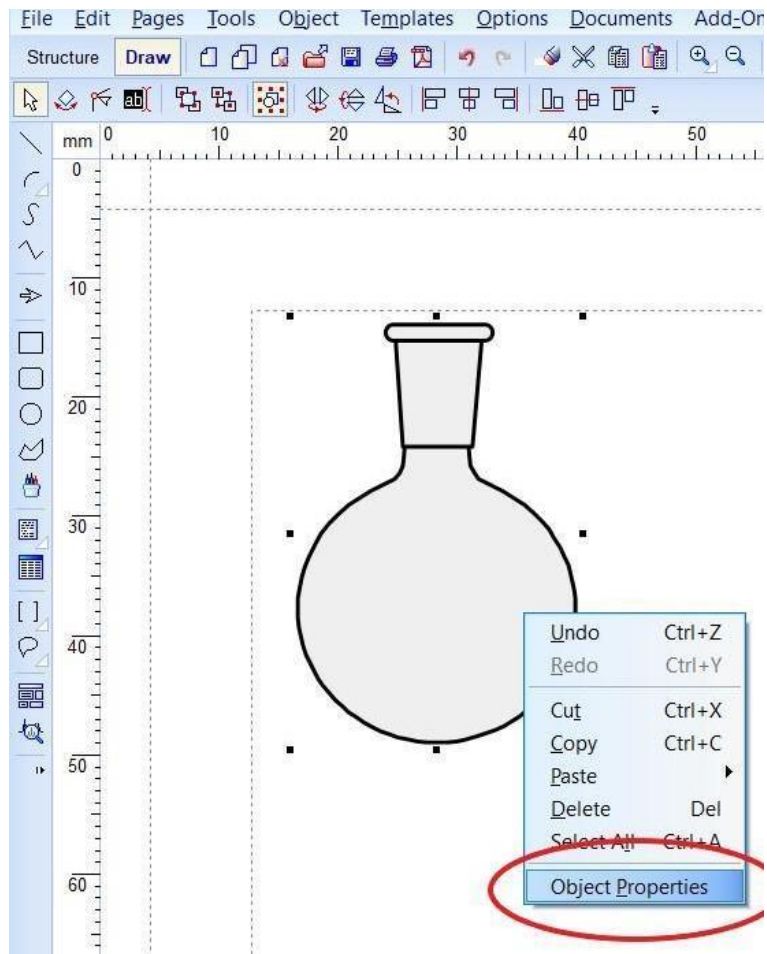
Slika 5. Rotiranje ili okretanje odabranog objekta

Za promjenu površinske boje odabranog objekta moguće je koristiti paletu boja koja se nalazi u lijevom dijelu donje statusne trake (**Slika 6**).



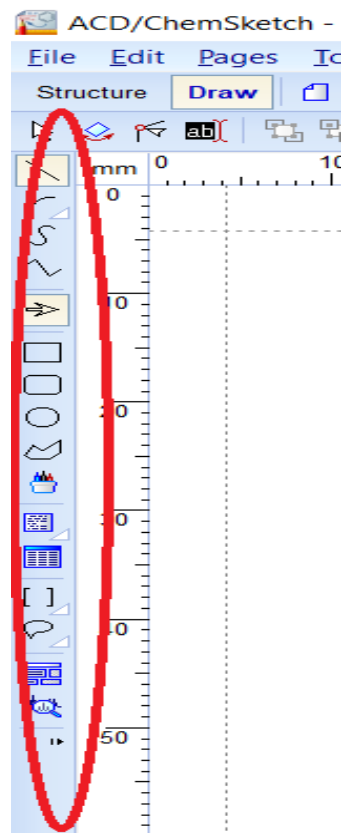
Slika 6. Promjena boje površine

Kliknemo li desnom tipkom miša na odabrani objekt, pojavit će se izbornik koji prikazuje što želimo učiniti s odabranim objektom. Odaberemo li stavku *Object Properties*, možemo promijeniti boju konturne linije ili njenu debljinu i dizajn (puna linija, isprekidana), kao što je prikazano na **Slici 7**.



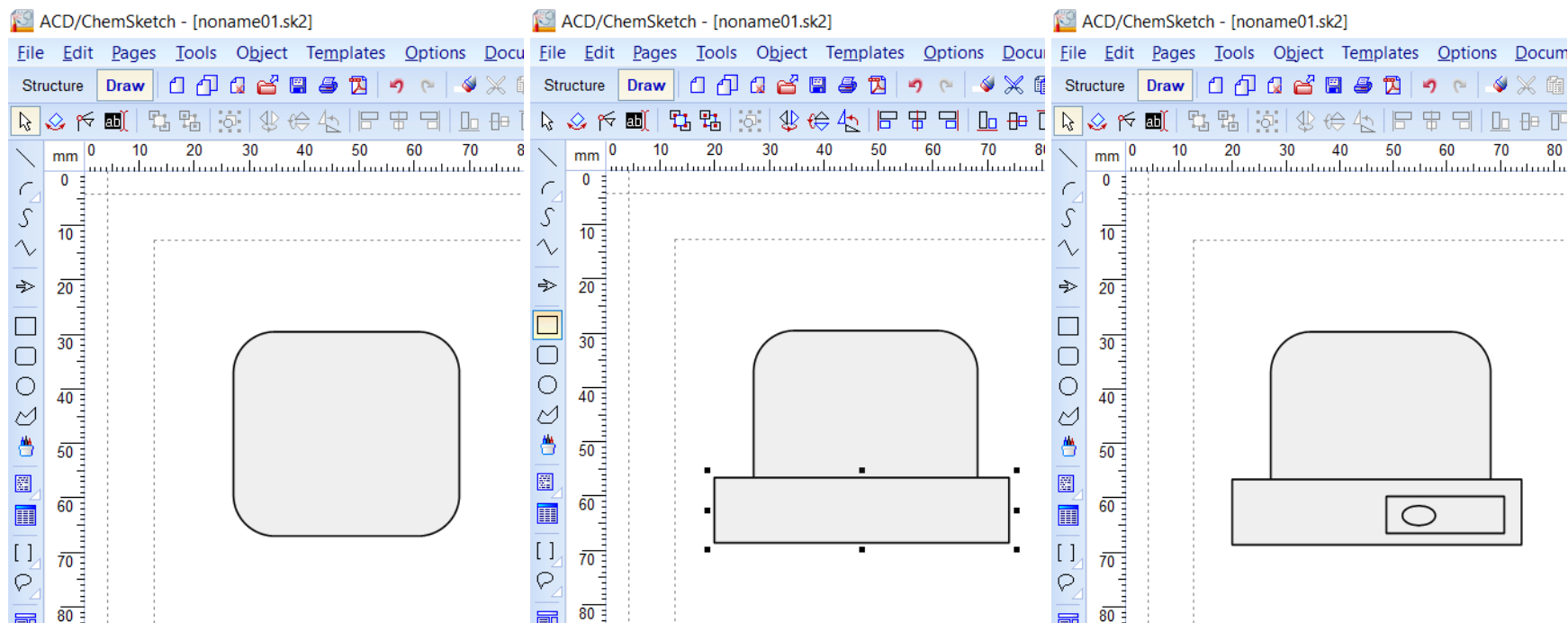
Slika 7. Promjena svojstava objekta

Dijelovi aparature koji nisu standardizirani i stoga se ne mogu naći u izborniku (npr. stalci, držači itd.) mogu se prikazati pomoću geometrijskih oblika u izborniku bočne trake koji je prikazan na **Slici 8**.



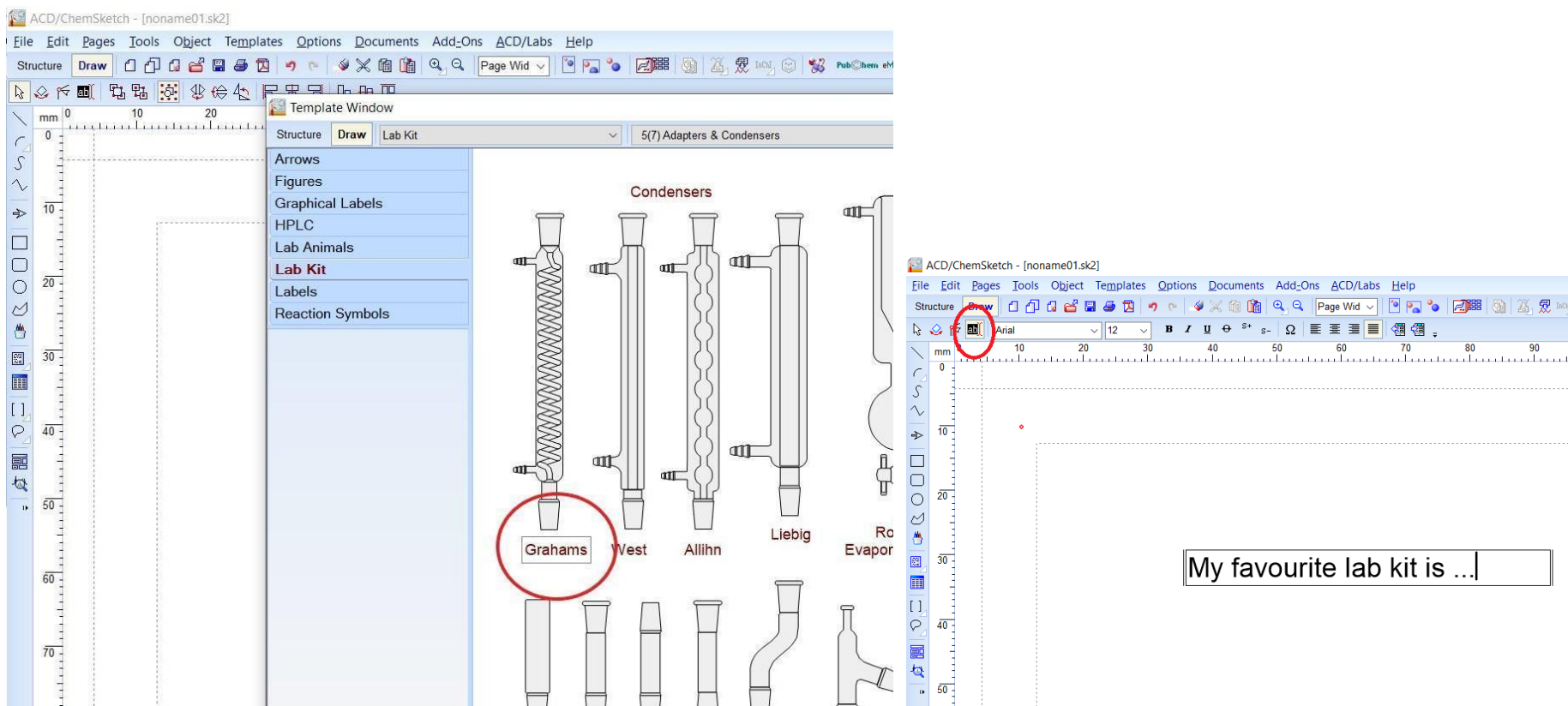
Slika 8. Izbornik bočne trake u softveru *ChemSketch*

Umetanjem jednostavnih oblika možete prikazati npr. vodenu kupelj, što se također može naći u dizajnu naše opreme. Također je moguće promijeniti boju i debljinu linije za objekte i oblike umetnute na ovaj način, kao što je prikazano na **Slici 9**.





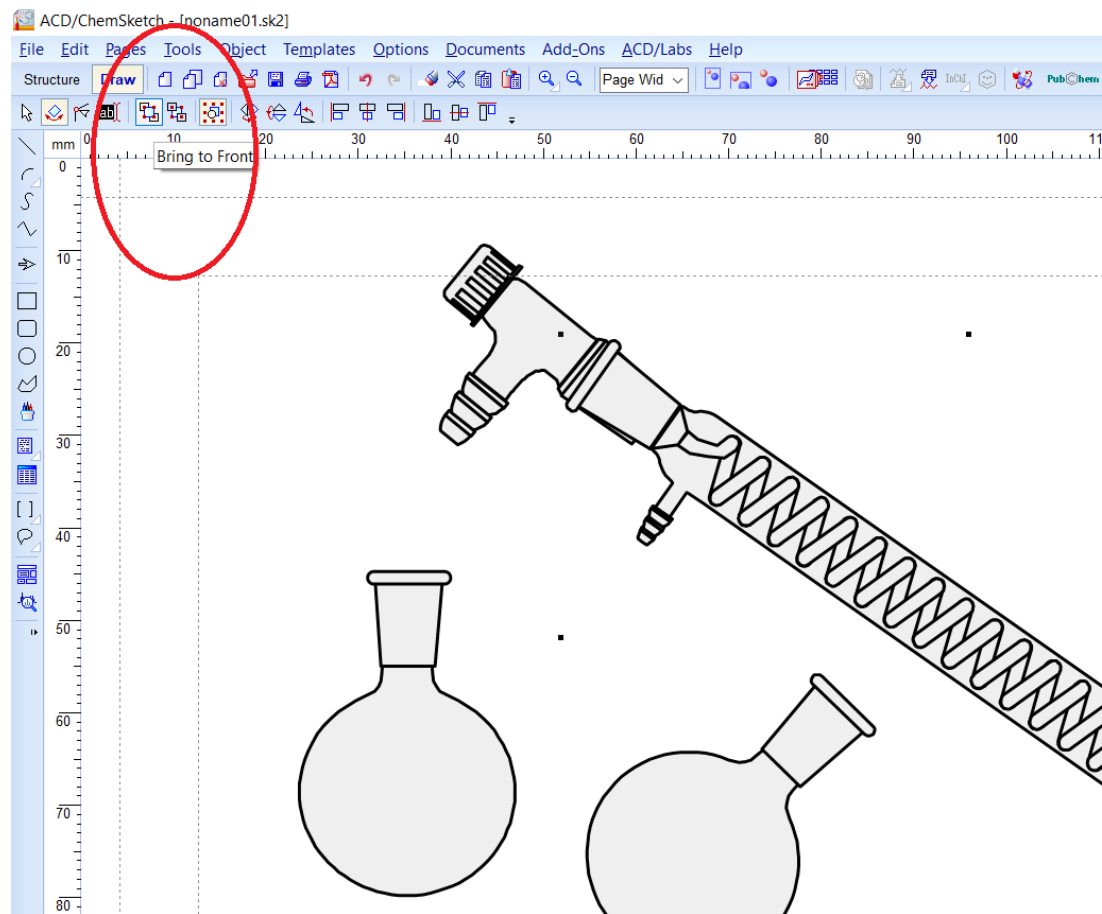
Slika 9. Stvaranje nestandardnih oblika dijelova aparatura

U sklopu izrade laboratorijskih izvještaja potrebno je unijeti i nazive pojedinačnih dijelova koji čine aparaturu. Postupak je jednostavan - možemo koristiti isti izbornik i na isti način kao kod laboratorijskog staklenog posuđa, ili možemo umetnuti tekstualno polje i ručno dodati naziv. Navedeni postupak prikazan je na **Slici 10.**



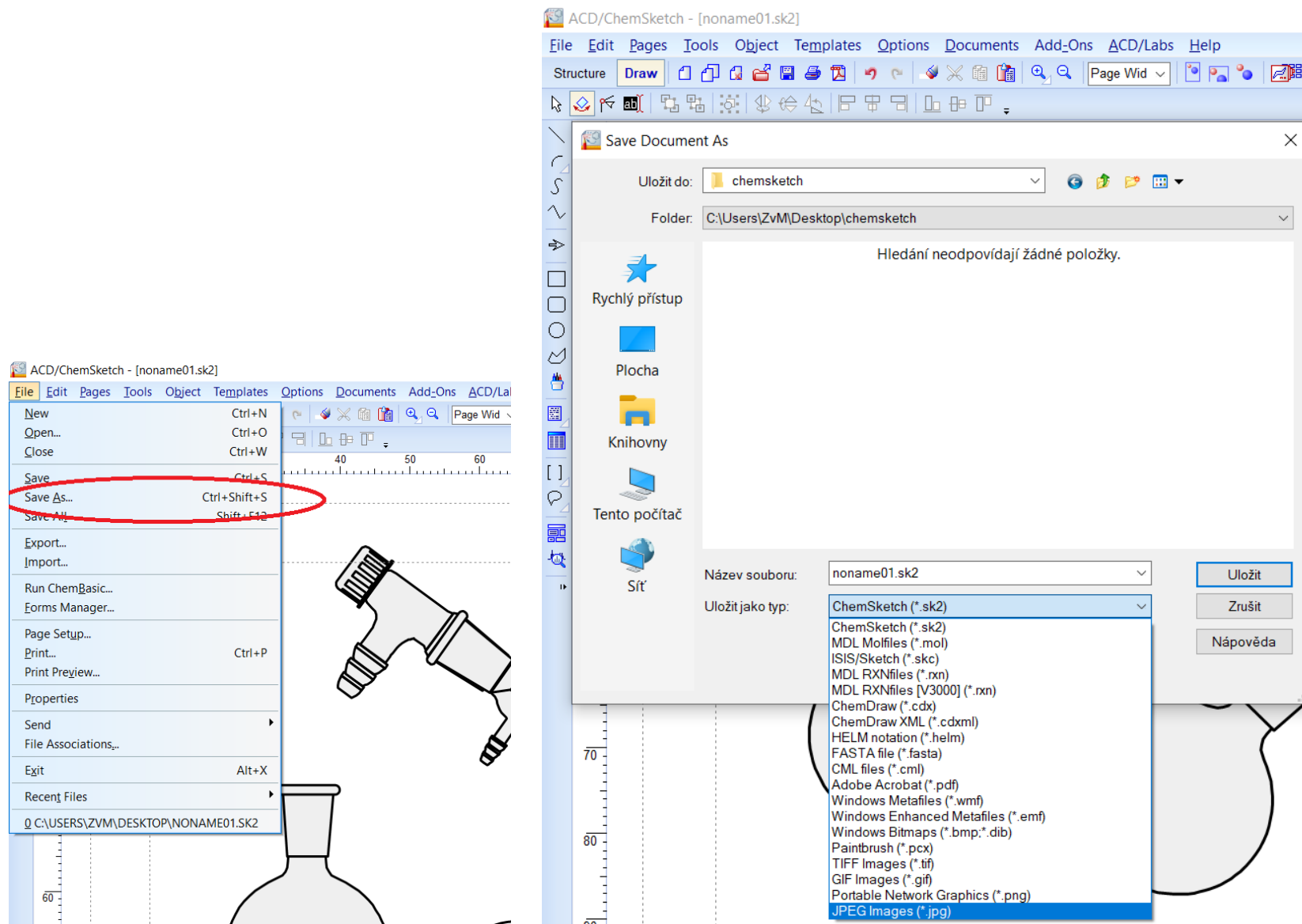
Slika 10. Upisani nazivi predmeta

Pojedinačne stavke od kojih stvaramo aparaturu mogu se premjestiti u prvi plan ili pozadinu, prema trenutnim preferencijama. Koristite *Bring to*  *Front* ili *Send to*  *Back* opciju kao što je prikazano na Slici 11.



Slika 11. Pomicanje predmeta u prvi plan ili pozadinu

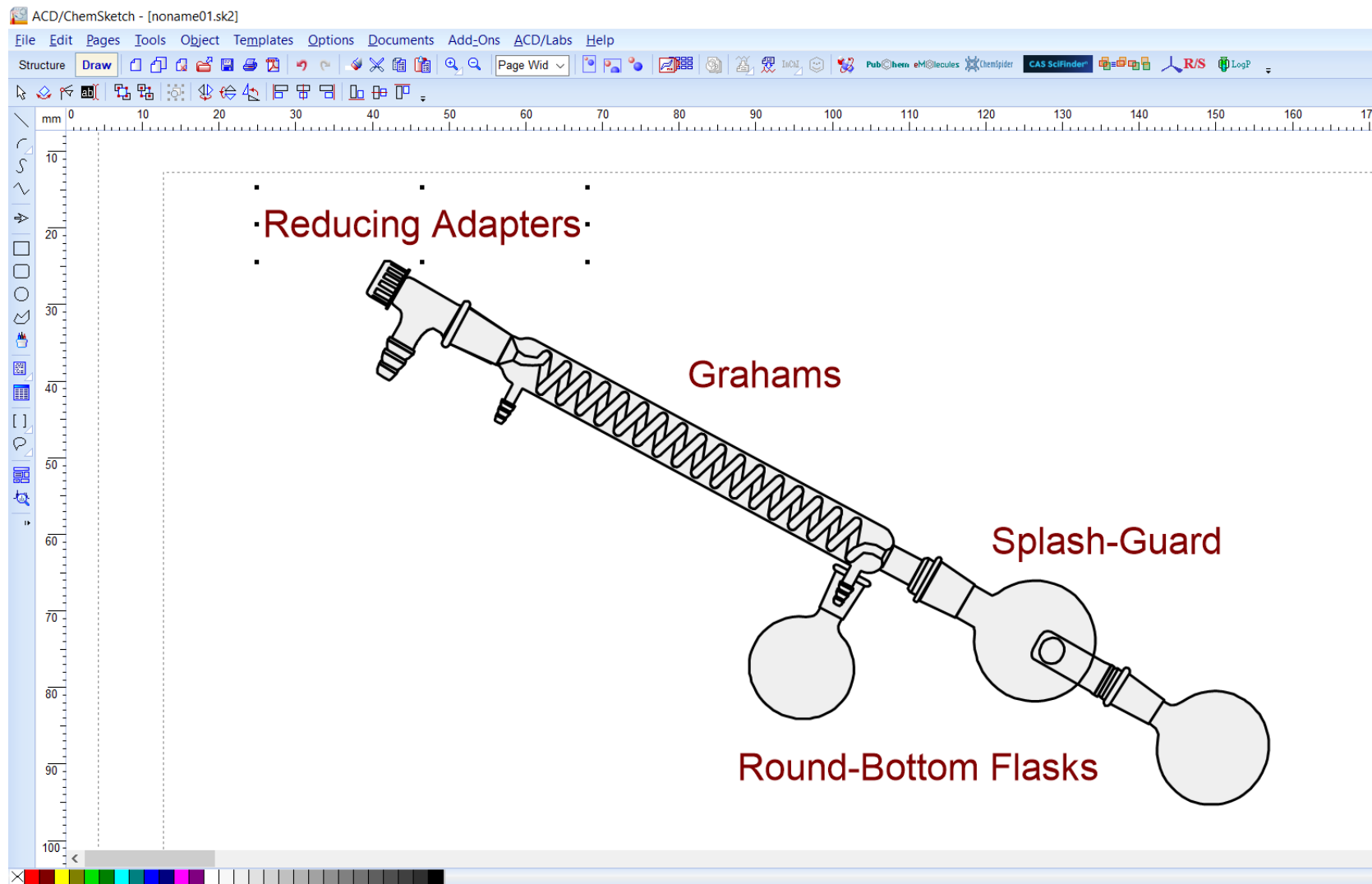
Spremanje prikazane aparature moguće je na više načina - za daljnje uređivanje potrebno je rad spremiti kao *ChemSketch* *.sk2 radnu knjižicu. Da bismo ga koristili, na primjer, u laboratorijskim izvješćima, možemo spremiti rad u npr. jpg formatu – te su opcije navedene na **Slici 12**.



Slika 12. Mogućnosti spremanja rada u programu *ChemSketch*

Sastavljanje rotacijskog vakuumnog uparivača.

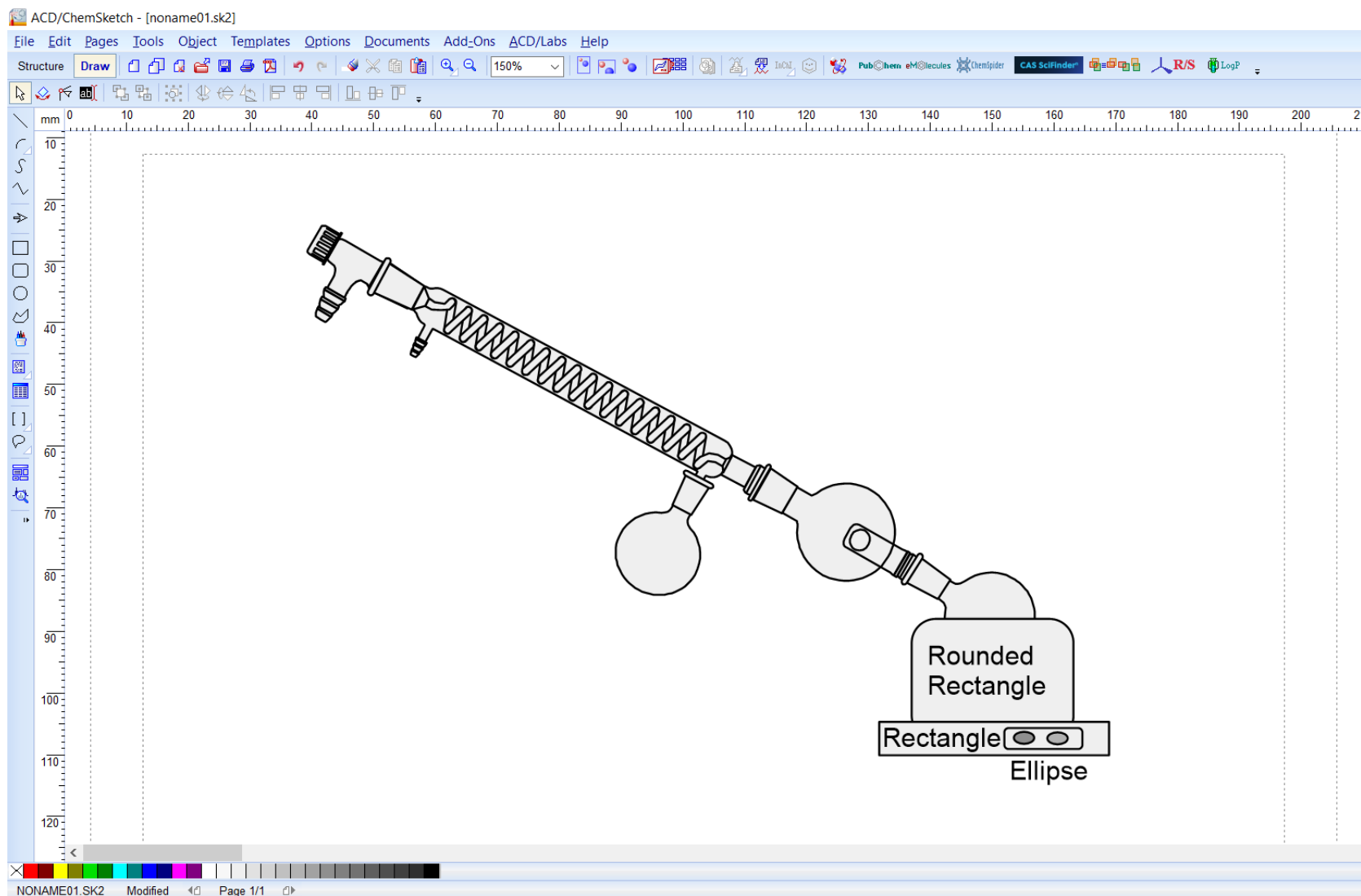
Prema prethodno opisanim koracima odaberite odgovarajući laboratorijski pribor i povežite ga kao što vidite na **Slici 13**.



Slika 13. Laboratorijski pribor za izradu rotacijskog isparivača

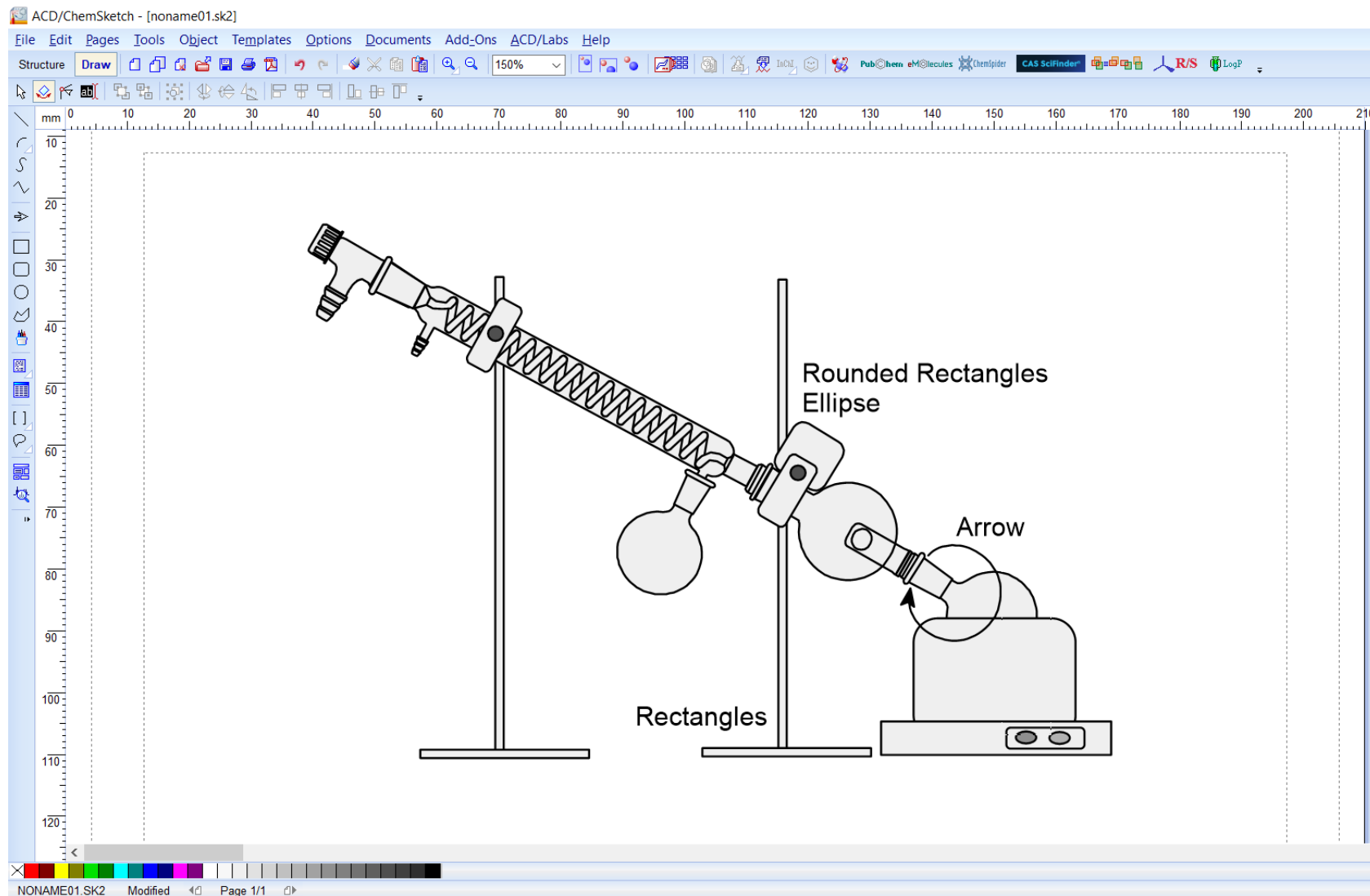
KORAK 3

Uz pomoć sljedeće slike (Slika 14) prikažite donji dio uparivača, koji prikazuje vodenu kupelj i njezine kontrolne tipke.



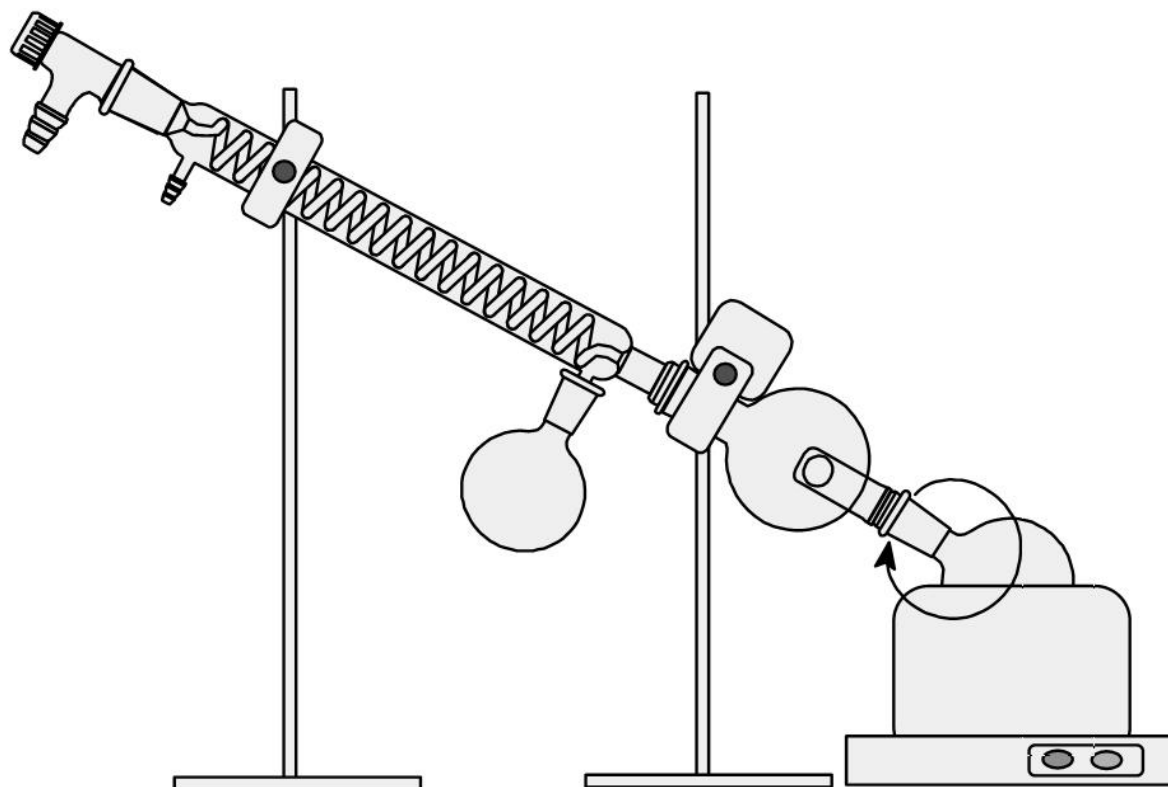
Slika 14. Izrada vodene kupelji za rotacijski uparivač

U sljedećem koraku nacrtajte držač i postolje te strelicom pokažite smjer rotacije uparivača kao na **Slici 15**.



Slika 15. Prikaz rotacijskog vakuumnog uparivača s dodatnom opremom

Konačan prikaz nacrtanog rotacijskog vakuumskog uparivača koji je prikazan na **Slici 16**.



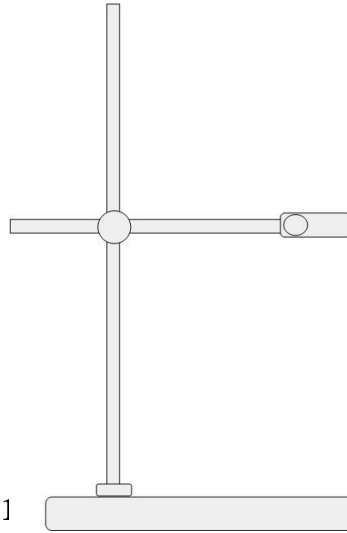
Slika 16. Konačan prikaz rotacijskog vakuuma uparivača izrađenog u programu *ChemSketch*

Drugi primjer:

Aparatura za filtraciju

KORAK 1

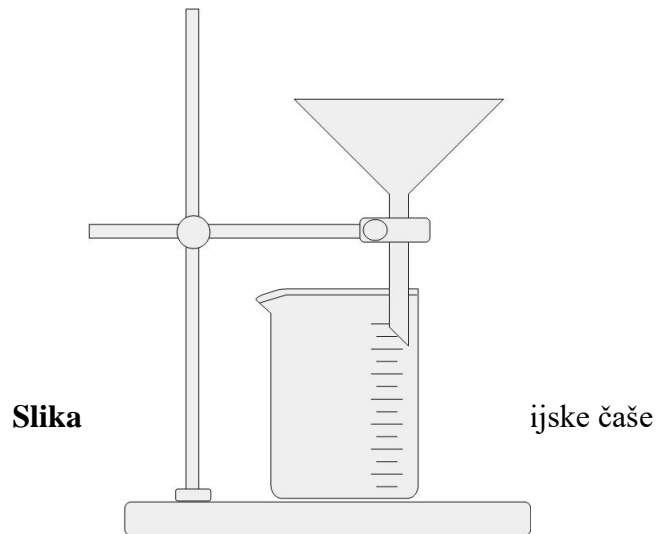
Izaberite metalni stalak iz opcije *LabKit*. Dodajte stezaljke kao što je prikazano na **Slici 17**.



Slika 1 Aparatura za filtraciju

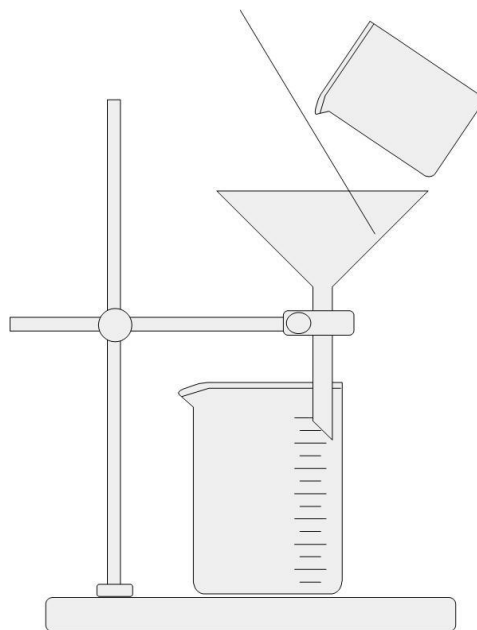
KORAK 2

Zatim postavite lijevak za filtraciju na kraj stezaljke. Stavite laboratorijsku čašu ispod lijevka (vrat lijevka mora biti unutar laboratorijske čaše) kao što je prikazano na **Slici 18**.



KORAK 3

Zatim postavite laboratorijsku čašu i stakleni štapić iznad lijevka pod pravim kutom kao što je prikazano na **Slici 19**.



Slika 19. Cijela aparatura za filtraciju

1.4. Primjeri zadataka za obradu nastavnog sadržaja

Pronađite industrijsku upotrebu destilacijskih kolona u preradi nafte. Usredotočite se na tehnologiju, pokušajte zamisliti pojedine dijelove aparature industrijske prerade ulja i koristeći program *ChemSketch* nacrtajte dio aparature koji se koristi u procesu prerade ulja.

Postavite pojedine dijelove destilacijske kolone na novu stranicu u programu *ChemSketch* i pokušajte imenovati pojedine dijelove aparature.

Zatim spojite sve dijelove aparature i uredno ih poravnajte.

Usporedite rezultat vašeg rada sa zadatkom i konzultirajte se o dobivenom rezultatu s nastavnikom.

1.5. Primjeri zadataka za vrednovanje usvojenosti sadržaja

Napravite i dizajnirajte jednostavan aparat za destilaciju.

- a) imenujte pojedine dijelove tehnološke sheme,
- b) objasnite njihov princip rada i primjenu u destilaciji,
- c) sastavite i poravnajte sve dijelove.

Opišite proces destilacije i porazgovarajte o rezultatima rada s mentorom.

Popis literature:

1. Ribarić N.; Futivić I.; Sakač N., Kemija 4 udžbenik za četvrti razred gimnazije. 2. izdanje. Zagreb. Alfa d.d., 2016.
2. Wade, ml., L. G., Organska kemija, 7. izdanje (englesko), 1. izdanje (hrvatsko). Zagreb. Školska knjiga, 2017.
3. ACD/ChemSketch, Version 11.0 for Microsoft Windows, Tutorial Drawing Chemical Structures and Graphical Images
4. A. Habuš, M. B. Tominac, S. Liber, D. Bajić, Kemija 2, udžbenik kemije za drugi razred gimnazije, Zagreb, Profil Klett, 2020.
5. [https://chem.libretexts.org/Courses/Purdue/Purdue_Chem_26100%3A_Organic_Chemistry_I_\(Wenthold\)/Chapter_03%3A_Structure_of_Alkanes/3.4.%09Structure_and Conformations_of_Alkanes/3.4.1._Newman_Projections](https://chem.libretexts.org/Courses/Purdue/Purdue_Chem_26100%3A_Organic_Chemistry_I_(Wenthold)/Chapter_03%3A_Structure_of_Alkanes/3.4.%09Structure_and Conformations_of_Alkanes/3.4.1._Newman_Projections) - pristupljeno 17. travnja 2023.
6. A. Habuš, M. B. Tominac, S. Liber, D. Bajić, Kemija 3, udžbenik kemije za treći razred gimnazije, Profil Klett, 2020.
7. Barić Tominac, M., Habuš, A., Liber S., Vladušić R. (2019.): Kemija 1, udžbenik kemije za prvi razred gimnazije, Zagreb, Profil Klett
8. Blagović, B. (2018.): Kemija u nastavi, Sveučilište u Rijeci, Medicinski fakultet
9. Mareček, A., Honza, J. Chemistry for four-year high schools, volume 3. 1st ed. Olomouc: Nakladatelství Olomouc 2000. 250 pp. ISBN 80-7182-057-1
10. A. Kornhauser: Organska kemija II, 11.izdaja, DZS, 2000
11. A. Smrdu: Kemijo razumem, kemijo znam 3, Naloge iz kemije za 3. letnik gimnazije, II. Izdaja, Jutro, 2020;
12. A. Smrdu: Snov in spremembe 2, III. izdraja, Jutro, 2012
13. A. Smrdu: Snov in spremembe 3, II. izdaja, Jutro, 2010;
14. F .Lazarini, J .Brenčič, Splošna in anorganska kemija, 3.izdaja 2. natis, FKKT, 2014
15. <https://www.appletonwoods.co.uk/product/rotary-evaporator-complete-with-glass-set-00-stuart/>
16. J. C. Kotz, P. Treichel: Chemistry and Chemical Reactivity, 3rd edition, Harcourt College Pub, 1995
17. M.Tišler: Sporočilnost molekul, DZS, 1998
18. Paulová, H., Dostál, J., Králíková,, M., Peš, O., Slanina, J., Táborská, E. and Tomandlová, M. Biochemistry for non-medical medical disciplines, 1. st ed. Brno: Publisher Masarykova univerzita 2021. 154 s. ISBN 978-80-210-9858-9
19. Predmetni izpitni katalog za splošno maturo iz kemije, RIC, 2021
20. www.britannica.com/science/coordination-compound, pridobljeno: 13. 2. 2023
21. www.unacademy.com/content/cbse-class-12/study-material/chemistry/uses-of-aldehydes-and-ketones/
22. www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/virttxtjml/aldket1.htm

