






PRIROČNIK ZA UČITELJE – ChemDM

1 UVOD V PREDMET

Predmet temelji na najnovejših pristopih in učnih metodah, digitalizacija učnega procesa pa dijakom približuje učne vsebine. Učni proces je bolj dinamičen in interaktiven, dijaki pa dobijo povsem drugačen vpogled v kemijske procese, ki jih bodo z uporabo programa ChemSketch "oživili" v tridimenzionalnem načinu. V okviru seznanjanja s programsko opremo bodo dijaki spoznali vse možnosti, ki jih ChemSketch ponuja, in se na primerih struktur različnih organskih spojin naučili uporabljati ključne funkcije programa. Dijaki bodo program lahko uporabljali tudi za prikaz pripomočkov za laboratorijske vaje in za risanje aparaturne opreme za različne poskuse, kar jim bo v pomoč pri pisanju laboratorijskega dnevnika pri rednem pouku kemije.

2 OPIS PROGRAMA – ChemSketch

- Orodje *DrawNormal* je privzeto orodje ob zagonu programa. V tem načinu lahko rišemo ravne in razvejane verige in zamenjujemo atome z drugimi atomi iz periodnega sistema elementov.
- Orodje *DrawContinuous* uporabimo, če želimo dodati nove atome v narisano strukturo. Ko je ta ukaz aktiven, lahko narišemo kemijsko vez samo na izbranem atomu.
- Risanje dvojnih in trojnih vezi – z miško se postavimo na narisano kemijsko vez, okoli vezi se pokaže pravokotnik, s klikom na vez ustvarimo dvojno vez. Z naslednjim klikom ustvarimo trojno vez.
- Razveljavljanje izvedenih ukazov, da se delovni prostor vrne v stanje pred zadnjo spremembo.
- Brisanje posameznih atomov – izberemo ukaz *Delete* () in s klikom na posamezni atom tega odstranite iz narisane strukture.
- Sprememba vrste atoma - za zamenjavo atoma z novim kemijskim elementom, katerega simbol ni prikazan v orodni vrstici *Atoms toolbar*

- Risanje vezi med atomoma – izberemo ukaz *DrawNormal* () ali *DrawContinuous* () , s klikom na prvi atom in potegom miške do drugega atoma se med njima ustvari enojna kovalentna vez.
- Uporaba ukaza *Clean Structure*– za urejanje dolžin vezi in kotov med vezmi.
- Urejanje oznake atoma - orodje *Edit Atom Label* () omogoča zamenjavo končnih atomov s kraticami.
- Obračanje struktur in delov struktur.
- Risanje verige – z orodjem *DrawChains* () se enostavno nariše verige ogljikovodikov poljubne dolžine s klikom miške in potegom vzdolž risalne površine.
- Določitev naboja in opredelitev kationa in aniona.
- Čiščenje delovne površine, da pripravimo prostor za risanje nove strukture.

3 IZBRANE UČNE TEME

- Osnove dela s programsko opremo ChemSketch
- Alkani in cikloalkani
- Alkeni in alkini
- Aromati
- Lewisove strukturne formule
- Kiralnost in optična aktivnost
- Alkoholi
- Aldehidi in ketoni
- Biomolekule
- Koordinacijske spojine
- Risanje aparaturne

4 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna enota: Uvod
Učna tema: Osnove dela s programsko opremo ChemSketch
Predvideno število ur: 2

4.1 Teoretični uvod

Dijaki bodo spoznali osnovna orodja, potrebna za delo s programom ChemSketch. Poznavanje teh orodij je obvezno za doseg vzgojno-izobraževalnih ciljev izbranih učnih tem. Dijaki se bodo naučili risati enostavne primere struktur organskih spojin, spoznali bodo različne orodne vrstice (*General Toolbar*, *Atoms Toolbar*, *Structure Toolbar*) in usvojili različne možnosti uporabe, ki jih ponuja programsko orodje ChemSketch.


4.2 Učni cilji: Osnove dela s programskim orodjem ChemSketch

V tej enoti se bodo dijaki naučili:

- uporabljati orodja, ki jih ponuja programsko orodje ChemSketch za risanje zelenih molekul organskih spojin,
- prikazati strukture molekul organskih spojin v tridimenzionalnem načinu z uporabo gumba “*3D Viewer*”,
- uporabljati ukaze za označevanje molekul ali delov molekul in gumbe za obračanje in premikanje v 2D in 3D načinu,
- narisati verigo ogljikovodika z uporabo ukazov *DrawNormal*, *DrawContinuous* in *DrawChains*,
- odstraniti narisane strukture ali dele struktur z uporabo opcije gumba “*Delete*”,
- narisati dvojne in trojne vezi,
- dodati alkilne skupine narisani spojini in zamenjati vrsto atomov v strukturi molekule,
- razveljaviti zadnje spremembe,
- optimizirati strukturo molekule,
- narisati strukture anionov in kationov z uporabo orodja za generiranje naboja.

4.3 Navodilo za uporabo programske opreme ChemSketch

a) Uporaba funkcije *DrawNormal*

Način *DrawNormal* () je privzeti način ob zagonu programa. Ko je aktiviran omogoča risanje nerazvejanih ali razvejanih verig in zamenjavo uporabljenih narisanih atomov z drugim iz periodnega sistema elementov.

Primer 1

Narišite 2-metilpropan in 2-metilbutan z uporabo načina *DrawNormal*. Narisani strukturi obrnite navpično.

Preverite, če je v orodni vrstici *Structure toolbar* izbran način *DrawNormal* in ali je v orodni vrstici *Atoms toolbar* izbran ogljik ()

KORAK 1

Kliknite na risalno površino, da narišete strukturo molekule metana CH₄.

KORAK 2

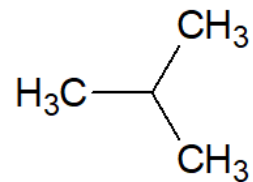
Z miško se postavite na CH₄, okoli formule metana se pokaže pravokotnik (**slika 1**), kliknite nanj, da dodate metilno skupino in tako narišete strukturo molekule etana H₃C—CH₃.



Slika 1: Pravokotnik okoli formule metana

KORAK 3

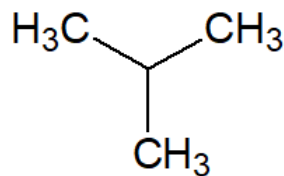
Dvakrat kliknite na eno od -CH₃ skupin, da narišete strukturo molekule 2-metilpropana, prikazanega na **sliki 2**.



Slika 2: Struktura molekule 2-metilpropana


KORAK 4

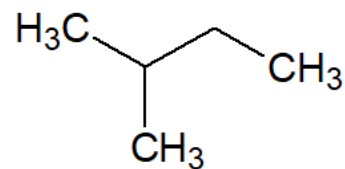
V orodni vrstici *Structure toolbar* kliknite na *Set Bond Vertically* () , nato kliknite na vez, ki je usmerjena navzdol, da obrnete strukturi, kot je prikazano na **sliki 3**.



Slika 3: Obrnjena struktura molekule 2-metilpropana

KORAK 5

V orodni vrstici *Structure toolbar* kliknite na gumb *DrawNormal* () , nato kliknite na zadnji desni atom ogljika, da boste narisali strukturo molekule 2-metilbutana (**slika 4**).



Slika 4: Struktura molekule 2-metilbutana

Opomba: Veriga ogljikovodika se bo podaljšala z vsakim klikom na končni desni atom ogljika. Če želimo podaljšati verigo v vodoravni smeri uporabimo CTRL in držimo, ko kliknemo na atom ogljika.

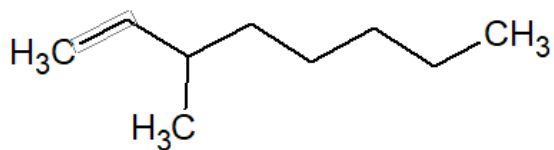
Risanje dvojnih in trojnih vezi

Primer 2

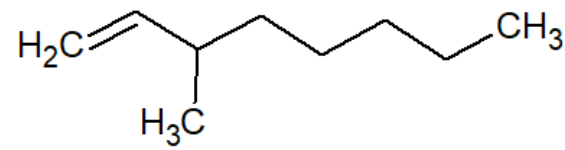
Narišite 3-metilokt-1-en in 3-metilokt-1-in z uporabo orodja *DrawNormal*.

KORAK 1

Narišite strukturo molekule 3-metiloktana (**slika 5**). Nato se z miško postavite na enojno vez med prvima dvema atomoma ogljika v verigi (okoli vezi se pojavi pravokotnik) in kliknite na vez, da ustvarite dvojno vez (**slika 6**).




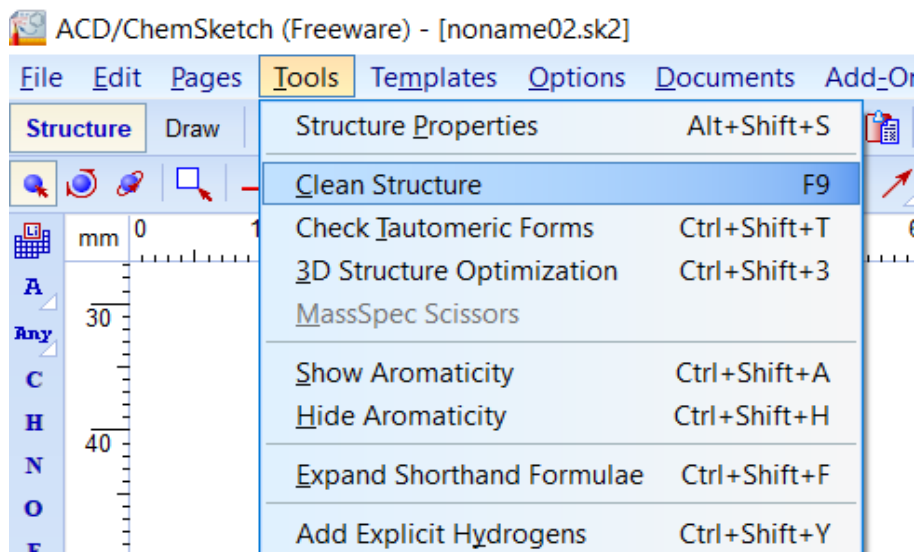
Slika 5: Pravokotnik okoli enojne vezi med prvima dvema ogljikovima atomoma



Slika 6: Struktura molekule 3-metilokt-1-en

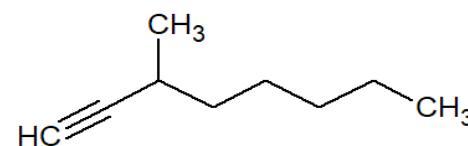
KORAK 2

Kliknite na prej ustvarjeno dvojno vez, da ustvarite trojno vez. Označite strukturo s klikom na ikono  in z miško povlecite okoli celotne strukture. Sedaj kliknite *Tools*, nato izberite opcijo *Clean Structure*, kot je prikazano na **sliki 7 a** in **sliki 7 b**.



a


Slika 7: a) Ukaz *Clean Structure*




b

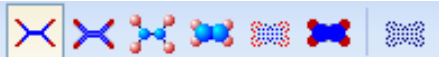
b) Struktura molekule 3-metil-okt-1-in



KORAK 3

S klikom na ukaz *3D Viewer* () prikažite strukturo molekule 3-metil-okt-1-in v 3D načinu.

KORAK 4

Uporabite vse možnosti obračanja, premikanja in označevanja molekule, ki so na zgornjem delu orodne vrstice: , nato prikažite molekulo

na vse načine, ki jih omogoča program in so na voljo v orodni vrstici: . S klikom na posamične gumbе, se spremeni način


prikaza molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana. Za samodejno rotacijo molekule kliknite na gumb . S klikom na gumb  se načini prikaza spreminjajo samodejno, kontinuirno in molekula se tudi obrača.

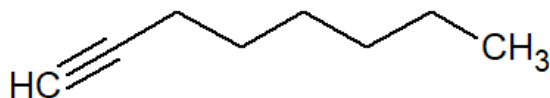
Brisanje posameznih atomov

Primer 3

Uporabite narisano strukturo 3-metilokt-1-ina iz **primera 2** in iz strukture odstranite metilno skupino s pomočjo gumba *Delete*. Sedaj razveljavite vse spremembe, ki ste jih naredili na tej strukturi.

KORAK 1

Kliknite na opcijo *Delete* () v orodni vrstici *General toolbar*. Ukaz *Delete* naj bo aktiven, nato kliknite na ogljikov atom metilne skupine. Imenujte nastalo spojino, prikazano na **sliki 8**.



Slika 8: Struktura molekule _____

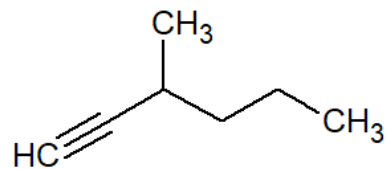
KORAK 2

V orodni vrstici *General toolbar*, kliknite *Undo* () da razveljavite vse spremembe.

Dodatna orodja

KORAK 3

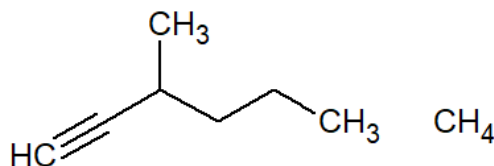
Ponovno uporabite ukaz *Delete*, vendar sedaj kliknite na predzadnji ogljikov atom v verigi. Iz strukture molekule 3-metiloktana ste odstranili etilno skupino. Imenujte nastalo spojino, prikazano na **sliki 9**.



Slika 9: Struktura molekule _____

KORAK 4

Razveljavite vse spremembe dokler nimate strukture molekule 3-metilokt-1-in, izberite ukaz *Delete*, držite tipko CTRL ter ponovno kliknite isti ogljikov atom. Predzadnji atom je odstranjen iz verige, zadnji atom v verigi pa je ločen od preostanka spojine, kot je prikazano na **sliki 10**.



Slika 10: Uporaba tipke CTRL in ukaza *Delete* za brisanje predzadnjega ogljika iz strukture molekule 3-metilokt-1-ina

KORAK 5

Kliknite *Undo* () da razveljavite spremembe in se vrnite na strukturo 3-metiloktana.

Zamenjava atoma

Primer 4

Zamenjajte ogljikov atom v metilni skupini 3-metiloktana z atomom fluora.

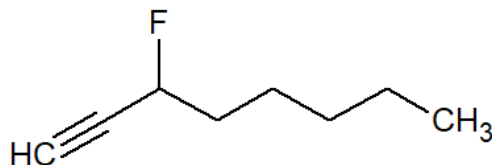
KORAK 1

V orodni vrstici *Atoms toolbar* kliknite *Periodic Table* () za prikaz periodnega sistema elementov.

KORAK 2

V periodnem sistemu elementov kliknite na *Fluorine*, nato kliknite *OK*. Atom fluora je sedaj dodan v orodno vrstico *Atoms toolbar*.

Kliknite ogljikov atom v metilni skupini, da ga boste zamenjali z atomom fluora in dobili strukturo, prikazano na **sliki 11**. Poimenujte to spojino.



Slika 11: Struktura molekule _____

Opomba

Ko izberete elemente iz periodnega sistema elementov, se ustrezni gumbi samodejno dodajo v orodno vrstico *Atoms toolbar*. Če želite te gumbe odstraniti iz orodne vrstice *Atoms toolbar*, z desnim gumbom miške kliknite na orodno vrstico *Atoms toolbar* in iz menija izberite *Reset Toolbar*. V pogovornem oknu kliknite *Yes*. S tem boste odstranili vse gumbe elementov, ki jih je določil uporabnik, razen privzetih.

b) Uporaba funkcije *DrawContinuous*

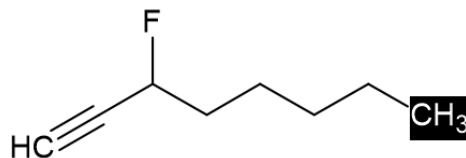
Dokler je aktiven ta ukaz, lahko narišete samo vezi iz izbranega atoma.

KORAK 1

V orodni vrstici *Structure toolbar* kliknite gumb *DrawContinuous* () . Lahko pa uporabite desno tipko miške in vključi se ukaz *DrawContinuous*.

KORAK 2

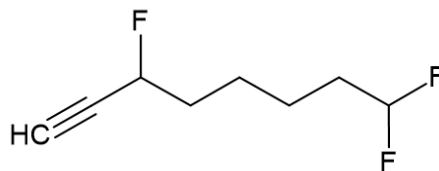
Preverite, da je v orodni vrstici *Atoms toolbar* še izbran fluor (*Fluorine*). Kliknite na zadnji desni ogljikov atom v narisani strukturi (glejte **slika 12**), da ga označite.



Slika 12: Označeni zadnji ogljikov atom v strukturi

KORAK 3

Ponovno kliknite na ogljikov atom, da ustvarite kovalentno vez z atomom fluora. Ponovite **KORAKA 2 in 3** na istem ogljikovem atomu, da ustvarite še eno vez ogljika z drugim atomom fluora (**slika 13**). Poimenujte narisano spojino.



Slika 13: Struktura molekule _____

Risanje vezi med atomi in uporaba funkcije *Clean Structure*

Primer 5

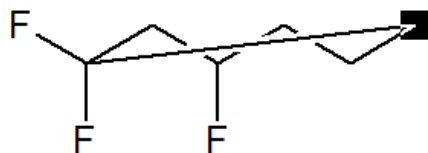
Narišite enojno vez med končnima ogljikovima atomoma v strukturi 1,1,3-trifluoroheksana, nato uporabite ukaz *Clean Structure* na tej strukturi. Ukaz *Clean Structure* standardizira dolžine vezi in kote med vezmi.

KORAK 1

Uporabite ukaz *DrawContinuous* in narišite 1,1,3-trifluorheksan.

KORAK 2

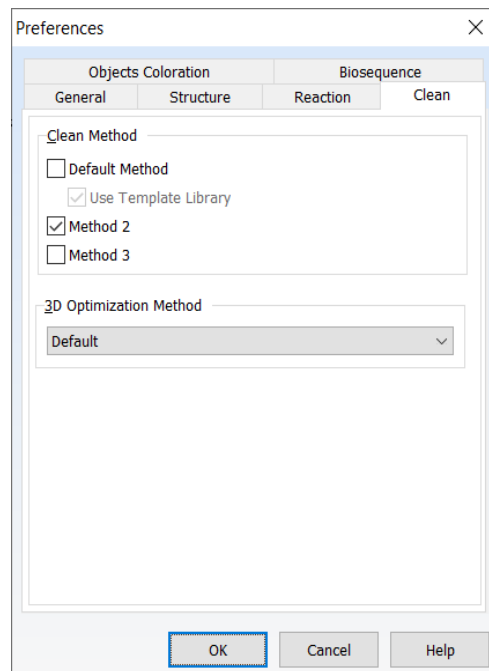
S potegom miške med končnima ogljikovima atomoma se ustvari med njima enojna vez. Aktivirajte ukaz *DrawContinuous* (lahko uporabite tudi način *DrawNormal*), z miško se postavite na prvi ogljikov atom, držite klik in povlecite do zadnjega ogljikovega atoma, da med njima nastane enojna vez (**slika 14**).



Slika 14: Ustvarjanje enojne vezi med krajnima atomoma ogljika

KORAK 3

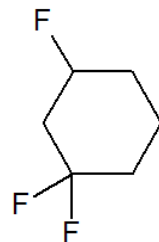
Iz menija *Options* izberite *Preferences*, pojavi se okno, kje izberete *Clean* in nastavite možnosti, kot je prikazano na **sliki 15**.



Slika 15: Nastavitev možnosti ukaza *Clean Structure*

KORAK 3

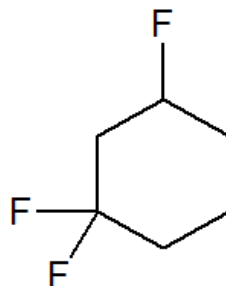
S klikom na gumb *OK* zaprete okno. V orodni vrstici *Structure toolbar* kliknite *Clean Structure* (). Če ste pravilno izvedli vse korake, dobite strukturo molekule, prikazane na **sliki 16**. Poimenujte narisano spojino.



Slika 16: Struktura molekule _____

KORAK 4

V orodni vrstici *Structure toolbar*, kliknite na *Set Bond Vertically* () , nato kliknite na vez ogljik-fluor, da obrnete strukturo (**slika 17**).



Slika 17: Obrnjena struktura molekule _____

Urejanje alkilnih skupin

Primer 6

V strukturi, prikazani na **sliki 17**, zamenjajte atom fluora s skupino $-(\text{CH}_2)_2\text{Ph}$ in razširite ta zapis.

Ukaz *Edit Atom Label* () omogoča zamenjavo končnih atomov (terminalnih) z ustreznimi okrajšavami.

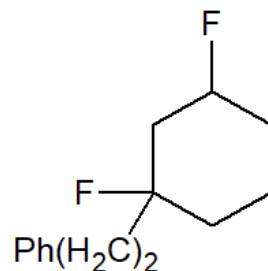
Uporabite strukturo na kateri ste prej uporabili ukaz *Clean Structure* in sledite naslednjim korakom:

KORAK 1

V orodni vrstici *Atoms toolbar*, kliknite *Edit Atom Label* () , nato kliknite na spodnji atom fluora v narisani strukturi.

KORAK 2

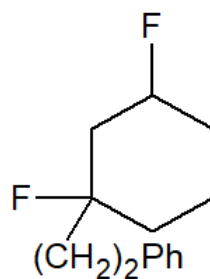
V pogovornem oknu *Edit Label* vpišite $(\text{CH}_2)_2\text{Ph}$, nato kliknite *Insert*. Alkilna skupina je dodana na želeno mesto, številke pa so samodejno napisane v načinu podpisano (v indeks). Na **sliki 18** je prikazana struktura, ki jo morate dobiti. Poimenujte dobljeno spojino.



Slika 18: Struktura molekule _____ dobljene z dodajanjem nove alkilne skupine na želeno mesto.

KORAK 3

V orodni vrstici *Structure Toolbar*, kliknite na *Change Position* () , nato kliknite na alkilno skupino da jo obrnete, kot kaže **slika 19**.



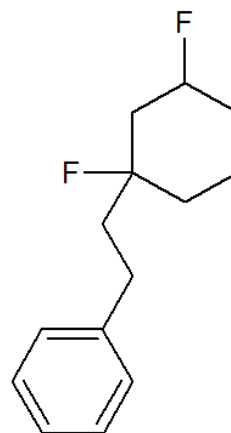
Slika 19: Obrnjena alkilna skupina glede na strukturo molekule, prikazane na **sliki 18**

Nasvet

Če držite tipko SHIFT, ukaz *Change Position* pa je aktiven in kliknete na dodano oznako, opazite, da se spremeni mesto vezave.

KORAK 4

Izberite *Edit Atom Label* () , nato kliknite na prikazano kratico. V pogovornem oknu *Edit Label* kliknite *Expand*, da dobite strukturo, prikazano na **sliki 20**.




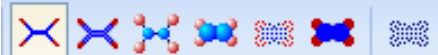
Slika 20: Razširjen prikaz alkilne skupine glede na strukturo molekule prikazane na **sliki 19**.


KORAK 5


S klikom na ukaz-gumb *3D Viewer* () , prikažite trodimenzionalno strukturo narisane molekule.

KORAK 6

Uporabite vse možnosti vrtenja, premikanja in označevanja molekule, ki so na zgornjem delu orodne vrstice: , nato prikažite molekulo

na vse načine, ki jih omogoča program in so na voljo v orodni vrstici:  . S klikom na posamične gumbe, se spremeni način


prikaza strukture molekule. Za samodejno obračanje molekule kliknite na gumb . Za samodejno kontinuirano spreminjanje strukture iz enega v drugi način

prikaza molekule s hkratnim obračanjem, kliknite na gumb .

Pomembno

Z gumbom *Expand* lahko razširimo samo kratice skupin, ki nadomeščajo oznake terminalnih atomov.


Risanje verige ogljikovih atomov

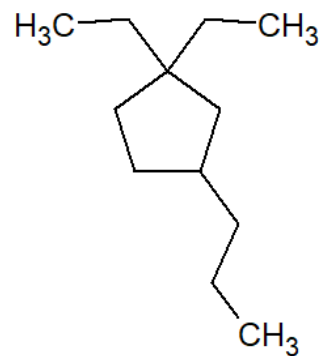
Funkcija *DrawChains* () omogoča enostavno risanje poljubne verige ogljikovih atomov s potegom miške.

Primer 7

Narišite strukturo 1,1-dietil-3-propilciklopentana z uporabo ukaza *DrawChain*.

KORAK 1

Narišite ciklopentan, nato v orodni vrstici izberite *Structure toolbar* in kliknite *DrawChains* (). Z miško se postavite na prvi ogljikov atom, ki potrebuje dve etilni skupini (glede na ime spojine). Povlecite levo, da ustvarite verigo, dokler števec ogljikov (ob kazalniku miške) ne pokaže C2. Upoštevajte, da se števec spreminja z vsakim dodanim (pri vlečenju naprej) ali odstranjenim ogljikom (pri vlečenju nazaj). Ponovite postopek, da narišete drugo etilno skupino na prvem ogljikovem atomu in da narišete eno metilno skupino na tretjem ogljikovem atomu. Kliknite gumb *Clean Structure*. Dobite strukturo, prikazano na **sliki 21**.





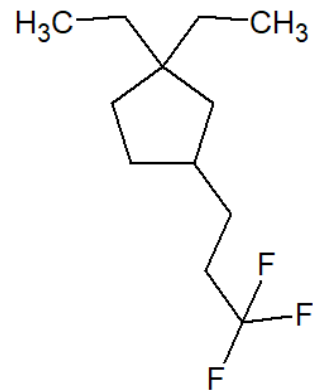
Slika 21: Struktura 1,1-dietil-3-propilciklopentana

Nasvet

Ko povlečemo z miško, se vezi C-C narišejo pod kotom 120° . Če želite vezi pod kotom 180° , med vlečenjem držite tipko CTRL



KORAK 2

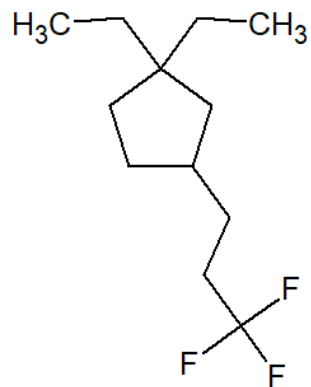
Ukaz *DrawChains* () naj bo aktiven, v orodni vrstici *Atoms toolbar* kliknite *Fluorine* () , nato trikrat kliknite na tretji ogljik propilne skupine, da dobite tri atome fluora (**slika 22**).



Slika 22: Dodajanje atoma fluora v strukturo molekule, prikazane na **sliki 21**


KORAK 3

V orodni *Structure toolbar*, kliknite na *Select/Move* () , nato izberite te tri vezi fluora z atomom ogljika in kliknite *Clean Structure* (). Dobite strukturo, prikazano na **sliki 23**. Poimenujte narisano spojino.




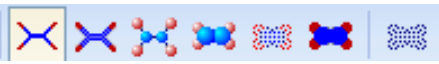
Slika 23: Struktura molekule _____


KORAK 4


S klikom na ukaz *3D Viewer* () prikažite strukturo narisane molekule.

KORAK 5

Uporabite vse možnosti obračanja, premikanja in označevanja molekule, ki so na zgornjem delu orodne vrstice: , nato prikažite molekulo

na vse načine, ki jih omogoča program in so na voljo v orodni vrstici: . S klikom na posamične gumbе, se spremeni način

prikaza strukture molekule. Za samodejno obračanje molekule kliknite na gumb . Za samodejno kontinuirano spreminjanje strukture iz enega v drugi način


prikaza molekule s hkratnim obračanjem, kliknite na gumb .

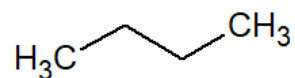
Določanje naboja in opredelitev anionov in kationov

Primer 8

Narišite strukturo butana, nato zamenjajte drugi atom ogljika z atomom dušika. Uporabite gumb *Charges/Radicals*, ki se nahaja v orodni vrstici *Atoms toolbar*, da spremenite naboj dušika ali pa ustvarite radikal.

KORAK 1

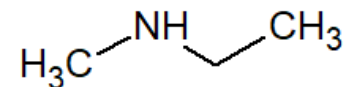
V orodni vrstici *Atoms toolbar*, kliknite na *Carbon* in *DrawNormal* () (mora biti aktiven), nato štirikrat kliknite na isto točko risalne površine, da narišete strukturo molekule butana, prikazane na **sliki 24**.



Slika 24: Struktura molekule butana

KORAK 2

V orodni vrstici *Atoms toolbar*, kliknite na *Nitrogen*, nato kliknite na drugi atom ogljika (od leve), da ga zamenjate z atomom dušika, kot kaže **slika 25**.




Slika 25: Struktura N-metiletanamina


KORAK 3

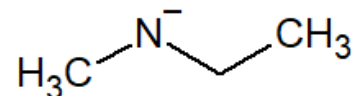
Ustvarite še pet kopij strukture N-metiletanamina. To storite na naslednji način: izberete narisano strukturo s klikom na prazen prostor zraven nje. S pritiskom na CTRL+C boste strukturo kopirali, nato jo z uporabo tipk CTRL+V prilepите na risalno površino.

KORAK 4

V orodni vrstici *Atoms toolbar*, kliknite na spodnji desni trikotnik ikone () , da razširite nabor gumbov *Charges/Radicals*.

KORAK 5

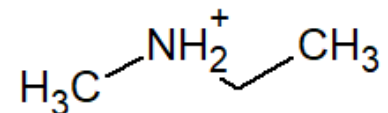
Izberite gumb *Decrement (-) Charge* () , nato kliknite na skupino NH v prvi strukturi, da se ustvari etilmetilazanidni ion (**slika 26**).



Slika 26: Struktura etilmetilazanidnega iona

KORAK 6

Izberite gumb *Increment (+) Charge* () , nato kliknite na skupino NH v drugi strukturi, da jo spremenite v kation N-metiletanamina (**slika 27**).



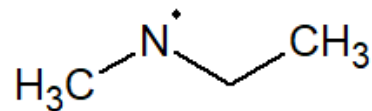
Slika 27: Struktura kationa N-metiletanamina

Opomba:

Ko uporabljamo ukaz *Increment (+) Charge* or *Decrement (-) Charge*, se pravilni naboj nekovinskega atoma ohranja s samodejnim dodajanjem ali odstranjevanjem vodikovih atomov. Če spremenimo naboj se število atomov vodika poveča ali zmanjša v skladu z nabojem iona. Običajna oksidacijska števila najdemo v *Periodic Table of Elements*.

KORAK 7

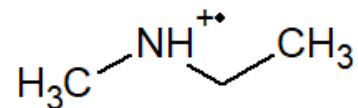
Iz menija *Charges/Radicals* izberite *Radical* in kliknite na NH skupino tretje strukture, da narišete radikal etilmetilamina (**slika 28**).



Slika 28: Struktura radikala etilmetilamina

KORAK 8

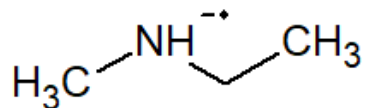
Izberite *Positive Radical Ion* in kliknite NH skupino četrte strukture, da narišete kation etilmetilaminskega radikala (**slika 29**).



Slika 29: Struktura kationskega radikala etilmetilamina

KORAK 9

Izberite *Negative Radical Ion*, nato kliknite skupino NH pete strukture, da narišete anion radikala etilmetilamina (**slika 30**).



Slika 30: Struktura aniona etilmetilaminskega radikala

Čiščenje risalne površine

Če želite očistiti delovni prostor, da bi lahko strukture narisali od začetka, uporabite enega od naslednjih načinov.

Primer 9

Ustvarite nov prazen *ACD/ChemSketch* dokument.

KORAK 1

V orodni vrstici *General toolbar* izberite *New Document*; ali

KORAK 2

Iz meniju *File* izberite *New*.

Primer 10

Dodajte novo prazno stran trenutnemu *ACD/ChemSketch* dokumentu.

KORAK 1

V orodni vrstici *General toolbar* pritisnite *New Page*; ali iz menija *Page* izberete *New*.

Primer 11

Očistite aktivno stran v trenutnem *ACD/ChemSketch* dokumentu.

KORAK 1

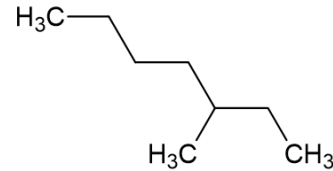
Iz menija *Edit* izberite *Select all*, nato iz menija *Edit* izberite *Delete*; ali

KORAK 2

Držite CTRL+A da označite vse strukture na strani, nato izberite *Delete*; ali v opravilni vrstici *General toolbar* kliknite *Delete*, kliknite na prazen prostor zraven narisanih struktur, da izberete vse, nato kliknite na izbrane strukture. Strukture se izbrišejo.

1.4 Primeri nalog za utrjevanje učnih vsebin

1. S pomočjo znanja, pridobljenega v programu *ChemSketch*, narišite prikazano strukturo 3-metilheptana.

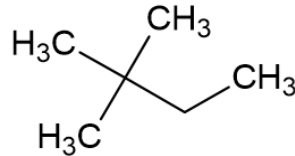


2. Narišite racionalne formule navedenih spojin:

a) 2,2-dimetilbutan

b) 2-metilpentan.

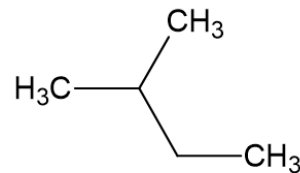
3. Narišite naslednjo strukturno formulo spojine, nato zamenjajte enega od atomov vodika z atomom fluora.



4. a) Narišite strukturo alkana, ki je prikazana na spodnji sliki. Spojino poimenujte. Dodajte trojno vez med tretjim in četrtem ogljikovim atomom in poimenujte nastalo spojino.

b) Iz spojine odstranite metilno skupino in z ukazom *DrawChains* najdaljši verigi ogljikovih atomov, dodajte še tri ogljikove atome, tako da bo trojna vez med prvim in drugim ogljikovim atomom.

c) Na tretji ogljikov atomu dodajte fenilno skupino.



5. Ponovite postopek iz prejšnje naloge, le da ustvarite med tretjim in četrtem ogljikovim atomom dvojno vez.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenih vsebin

1.

a) Narišite strukturo alkana, ki vsebuje 7 ogljikovih atomov.

b) Tretjemu ogljikovemu atomu v strukturi dodajte metilno skupino. Poimenujte spojino.

c) Med tretjim in četrtem ogljikovim atomom v strukturi narišite dvojno vez in spojino poimenujte.

č) Zamenjajte ogljikov atom iz metilne skupine na tretjem ogljikovem atomu v strukturi z atomom broma. Poimenujte spojino.

d) Zamenjajte atom broma v strukturi s skupino CN. Poimenujte spojino.

e) Uporabite orodje za kontinuirno risanje in narišite ciklično obliko spojine iz naloge a).

2.

a) Narišite pentan in zamenjajte drugi ogljikov atom z atomom kisika.

b) Iz narisane pentana ustvarite kation, anion in radikal, tako spremenite naboj na atomu kisika. Poimenujte narisani anion, kation in radikal.

ALKANI IN CIKLOALKANI

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna tema: Ogljikovodiki
Učna enota: Alkani in cikloalkani
Predvideno število učnih ur: 3

1.1 Teoretični uvod

a) Alkani

- Alkani so najenostavnejša skupina organskih spojin.
- Zgrajeni so iz atomov ogljika in vodika, ki so povezani z enojnimi kovalentnimi vezmi (dolžina vezi ogljik-ogljik je približno 1,54 Å).
- Alkani so nasičeni ogljikovodiki, ker imajo v svoji strukturi samo enojne kovalentne vezi med ogljikovimi atomi in ker imajo maksimalno možno število vezi z atomi vodika.
- Splošna formula alkana je: C_nH_{2n+2} , pri čemer n predstavlja število ogljikovih atomov.
- Ime alkana je sestavljeno iz korena besede, ki temelji na izrazu grškega števila (razen za prve štiri alkane) in končnice -an. Vrsta ravnih in nerazvejanih alkanov, ki se med seboj razlikujejo za eno metilensko skupino ($-CH_2-$), se imenuje homologna vrsta alkanov. V **tabeli 1** je prikazana homologna vrsta alkanov.

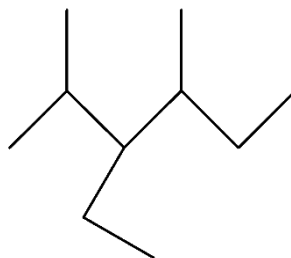
Tabela 1: Imena in molekulske formule prvih desetih alkanov v homologni vrsti.

Ime alkana	metan	etan	propan	butan	pentan	heksan	heptan	oktan	nonan	dekan
Molekulska formula	CH_4	C_2H_6	C_3H_8	C_4H_{10}	C_5H_{12}	C_6H_{14}	C_7H_{16}	C_8H_{18}	C_9H_{20}	$C_{10}H_{22}$

- Kadar ima alkan razvejano verigo, se ime določi glede na najdaljšo verigo.
- Če ima alkan dve verigi z istim številom ogljikovih atomov, se ime določi na osnovi verige, na katero je vezanih več substituentov (atomska skupina ali atom vezan na glavno (najdaljšo) verigo ogljikovodikov).

- Alkilna skupina ali alkil je ogljikovodikova skupina ki ima strukturo alkana z enim vodikovim atomom manj in ima končnico -IL. Običajno alkilno skupino označimo s črko R.
- Ogljikov atom, na katerem je vezana alkilna skupina, se označi z zaporedno številko ogljika. Štetje začnemo s tiste strani, s katere je številka manjša.
- Če ima ogljikovodik več istih alkilnih skupin, se njihovo število označuje s predpono (di-, tri-, tetra-, ...) kar pa se ne upošteva pri razvrščanju imen po abecednem redu.
- Kadar je možnih več enakih načinov številčenja, se izbere abecedni red imen substituentov.

PRIMER

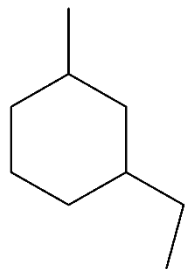


3-etil-2,4-dimetilheksan

b) Cikloalkani

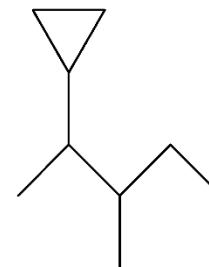
- Ciklični alkani, ki v svoji strukturi vsebujejo vsaj en obroč.
- Pri imenovanju cikloalkana, pred ime alkana z enakim številom ogljikovih atomov, dodamo predpono ciklo.
- Kadar ima cikloalkan samo en substituent, njegove pozicije v imenu ni potrebno označiti.
- Cikloalkan se imenuje kot substituent, če je število ogljikovih atomov v obroču manjše od števila ogljikovih atomov v verigi.
- Kadar je na strukturo cikloalkana vezanih več alkilnih skupin, je ime potrebno tvoriti tako, da imajo te najmanjšo možno številko, če je potrebno, upoštevamo razvrstitev po abecedi.

PRIMERI



1-etil-3-metilcikloheksan

a



2-ciklopropil-3-metilpentan

b

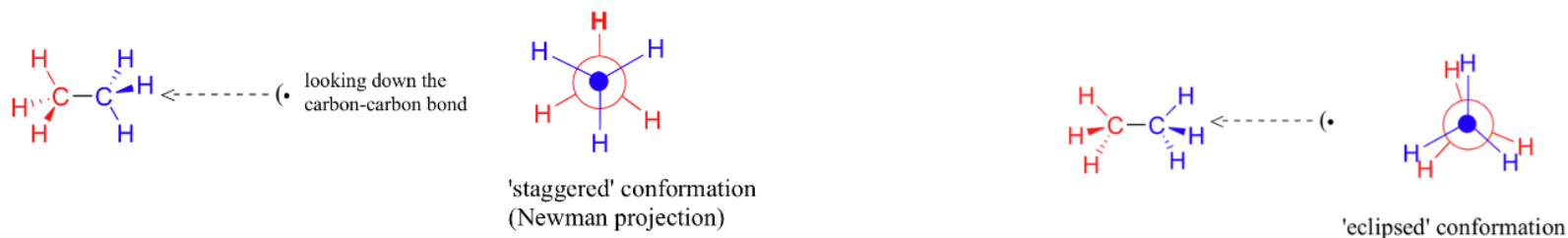
Tridimenzionalne strukture molekul se prikazujejo z različnimi modeli: kroglice in palčke, palčke in kalotni modeli, kot je prikazano v **tabeli 2**:

Tabela 2: Modeli molekul

Spojina	kroglice in palčke	kalotni model	palčke
etan			
ciklobutan			
buten			
but-2-in			
kloretan			

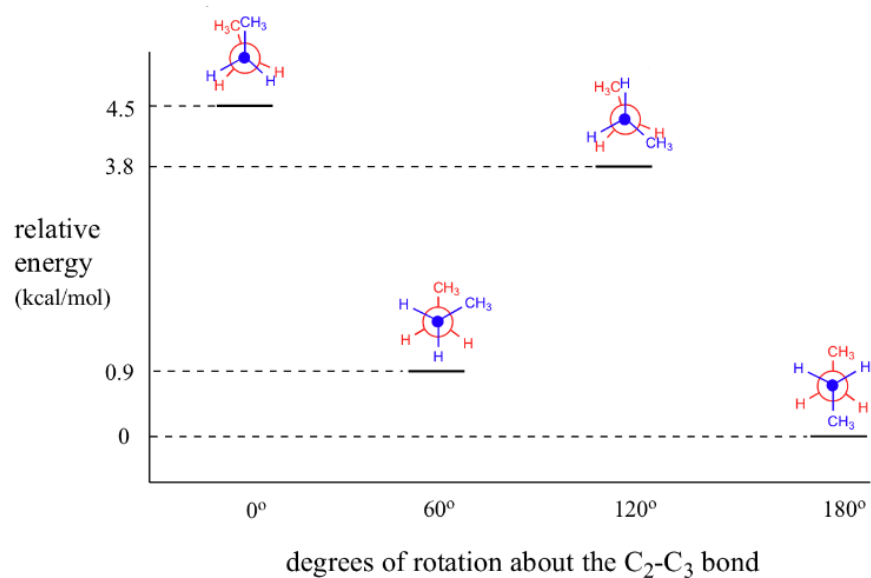
c) Newmanove projekcijske formule

Za boljšo vizualizacijo različnih konformacij molekule uporabljamo Newmanovo projekcijo. Strukturo prikažemo tako, da jo pogledamo vzdolžno glede na izbrano vez – v tem primeru vez ogljik-ogljik v etanu, nato pa 'prednji' atom prikažemo kot piko, 'zadnji' atom pa kot večji krog. Enega od ogljikov z vezanimi tremi vodikovimi atomi zasukamo, pri tem nastaneta prekrita (manj stabilna) in prekrížana (bolj stabilna) konformera oz. rotamera – rotacijska izomera.



Slika 1: Newmanove projekcijske formule (prekrita ali sinperiplanarna in prekrížana ali antiperiplanarna konformacija)

Slika 2 prikazuje relativne energije različnih Newmanovih konformacij.



Slika 2: Relativne energije za različne Newmanove konformacije

1.2 Učni cilji

V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- narisati različne primere molekul alkanov in cikloalkanov in jih prikazati s strukturno, racionalno in skeletno formulo,
- generirati ime predhodno narisanih molekul alkanov in cikloalkanov v programu ChemSketch,
- uporabljati opcijo zapisovanja molekulske formule predhodno narisanih molekul alkanov in cikloalkanov v programu ChemSketch,
- izboljšati prikaz strukture molekul (prilagoditev dolžine vezi in kotov med vezmi) z uporabo opcije „Clean Structure“,
- narisati strukturne izomere alkanov in cikloalkanov,
- prikazati strukture alkanov in cikloalkanov v treh dimenzijah,
- rotirati molekule alkanov in cikloalkanov v dveh in treh dimenzijah,
- menjavati način prikazovanja struktur molekul alkanov in cikloalkanov v treh dimenzijah,
- premikati molekule alkanov in cikloalkanov v 3D in 2D,
- določiti dolžino vezi in kotov med vezmi v molekulah alkanov in cikloalkanov,
- optimizirati strukture molekul alkanov in cikloalkanov,
- zarotirati strukturo molekule v treh dimenzijah, z namenom vizualne predstave Newmanove projekcijske formule različnih alkanov,
- shraniti na računalnik dvodimenzionalno in tridimenzionalno strukturo željene molekule alkana ali cikloalkana.

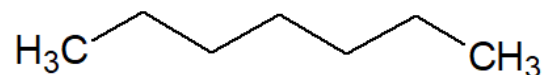
1.3. Navodilo za uporabo programske opreme ChemSketch

Primer 1

Narišite molekulo 5-etil-2,2-dimetilheptan, uredite njeno strukturo, s pomočjo programa generirajte ime in zapis molekulske formule. Strukturo prikažite v treh dimenzijah na različne načine, s strukturno, racionalno in skeletno formulo, določite dolžine izbranih vezi in kote med vezmi, optimizirajte molekulo, rotirajte jo in premikajte v dveh in treh dimenzijah, shranite 2D in 3D strukturo na računalnik.

KORAK 1

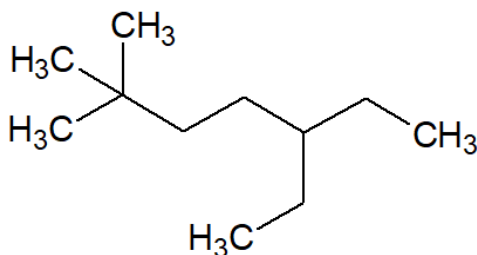
Izberite opcijo *DrawNormal*. Kliknite na prazno področje na risalni površini. Pojavila se bo struktura molekule metana (CH₄). S klikom na atom ogljika nastane enojna vez ogljik-ogljik. S klikom na vsak naslednji pojavljeni atom ogljika ob hkratnem držanju tipke ctrl, lahko narišemo verigo ogljikovodika s sedmimi ogljikovimi atomi. Veriga je prikazana na **sliki 1**.



Slika 1: Struktura verige ogljikovodika s sedmimi ogljiki

KORAK 2

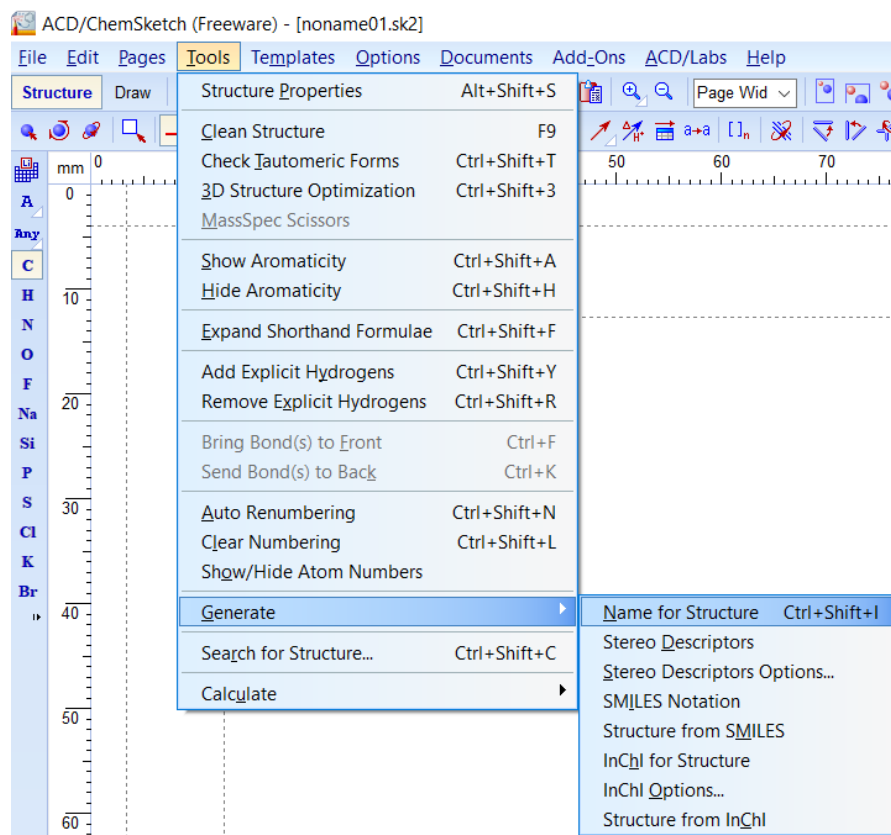
Z dvojnimi klikom na drugi ogljikov atom nastane dve metilni skupini. Z enim klikom na peti ogljikov atom nastane metilna skupina, ki jo lahko podaljšamo v etilno tako, da kliknemo na ogljikov atom iz metilne skupine. Na **sliki 2** je prikazana struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana.



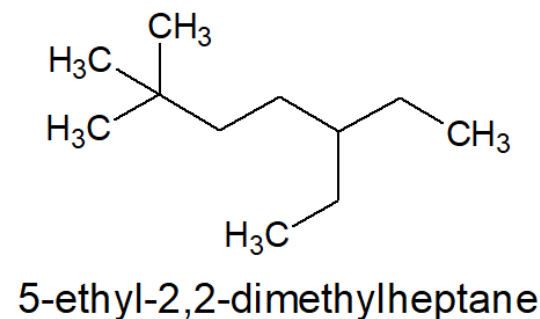
Slika 2: Struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana

KORAK 3

V orodni vrstici kliknite na *Tools*, izberite opcijo *Generate* in nato kliknite na *Name for Structure*. Navedeni postopek je prikazan na **sliki 3a**, na **sliki 3b** pa je prikazana struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana izpod katere je napisano njeno ime. Vkolikor generirano ime ni v skladu s pričakovanim, je potrebno ponoviti postopke opisane v **KORAKIH 1 in 2**.



a

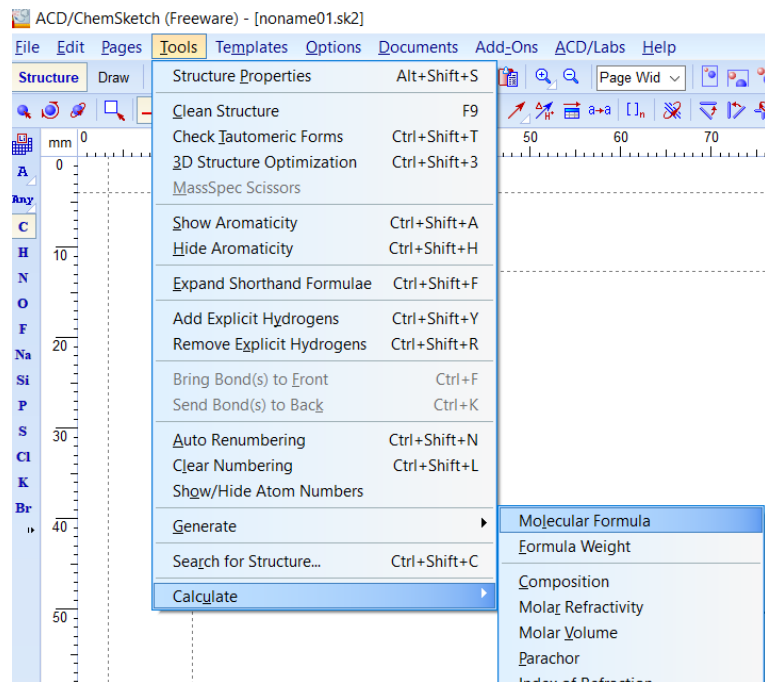


b

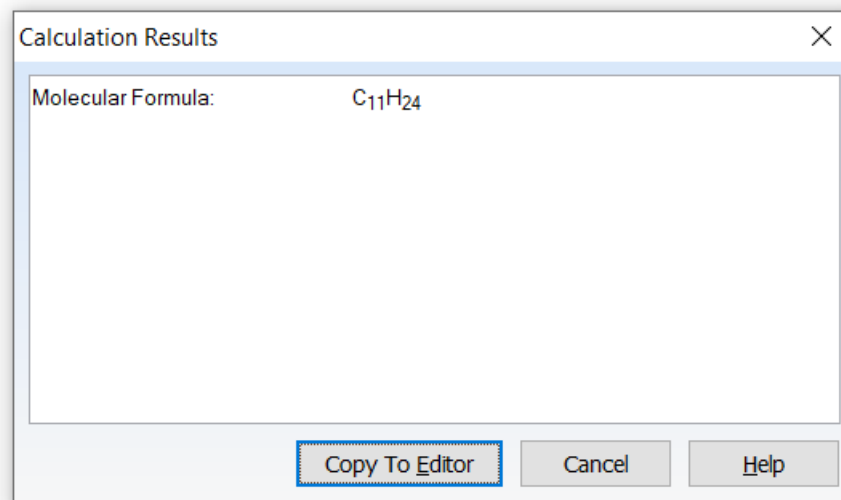
Slika 3: a) Postopek generiranja imena molekule narisane v programu ChemSketch, b) struktura in odgovarjajoče ime predhodno narisane molekule 5-etil-2,2-dimetilheptan

KORAK 4

V orodni vrstici kliknite *Tools* in izberite opcijo *Calculate*, nato pa kliknite na *Molecular Formula*. Navedeni postopek je prikazan na **sliki 4a**, na **sliki 4b** pa je prikazana molekulska formula 5-etil-2,2-dimetilheptana, ki se sledeč navodilom pojavi v novem okencu. Za prikaz molekulske formule na risalni površini ob strukturi in imenu, kliknite na *Copy to Editor*.



a

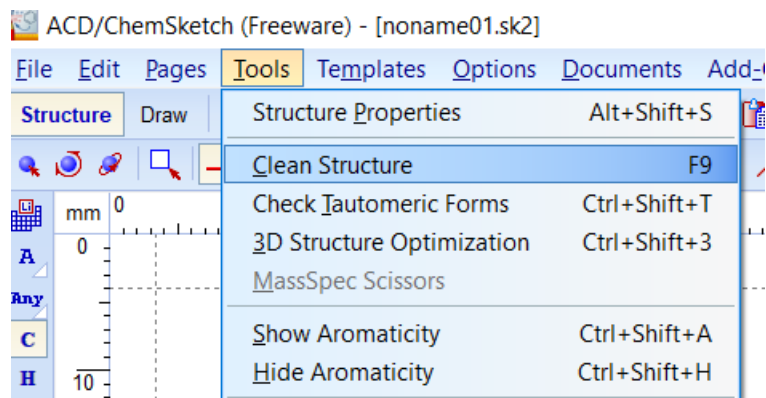


b

Slika 4: a) Postopek za prikaz molekulske formule 5-etil-2,2-dimetilheptana, b) Okence z molekulske formule molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana

KORAK 5




V orodni vrstici izberite *Tools* in s klikom na *Clean Structure* počistite strukturo - popravite dolžine vezi in kote med vezmi (**slika 5**).



Slika 5: Optimizacija dolžine vezi in medveznih kotov v programu ChemSketch

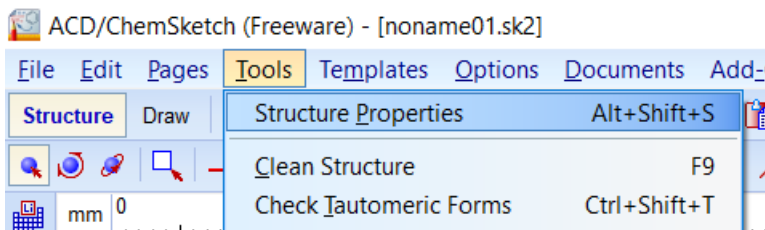
KORAK 6A

Prikažite strukturo molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana s skeletno, racionalno in strukturno formulo.

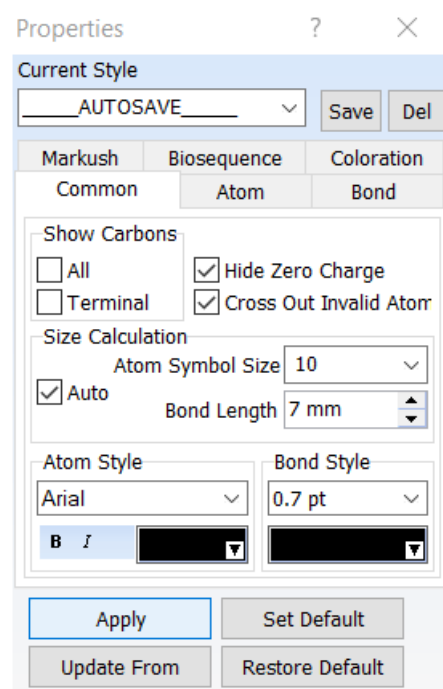
Najprej označite celotno strukturo molekule s klikom na  v gornjem levem kotu vrstice gumbov z orodji, nato nastavite opcijo izbora tako, da se s klikom na  pojavi oznaka: . Ob držanju klika povlecite in obkrožite celotno molekulo.

KORAK 6B

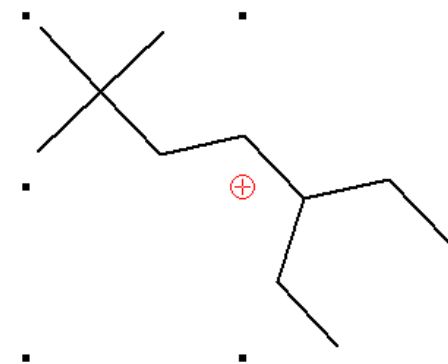
V orodni vrstici kliknite na *Tools*, nato na *Structure Properties*. Odpre se okno z vsemi željenimi možnostmi. Na **sliki 6a** je prikazan postopek odpiranja okna, na **sliki 6b** opcije, ki jih je potrebno nastaviti (v delu *Show Carbons*, kliknite na *all*, nato *apply*). Na **sliki 6c** je prikazana dobljena struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana, prikazana s skeletno formulo.



a



b

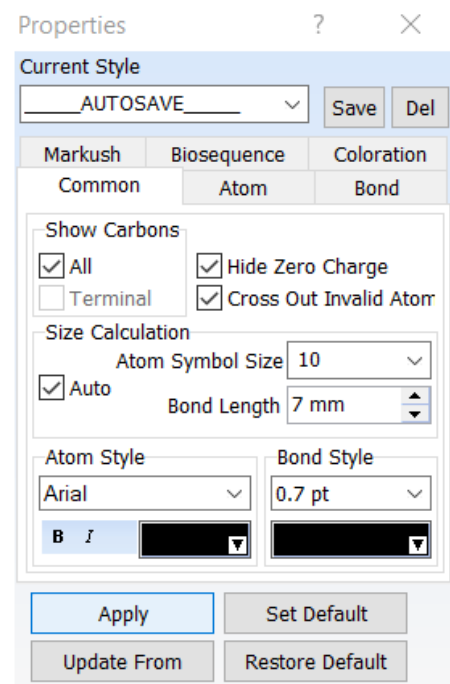


c

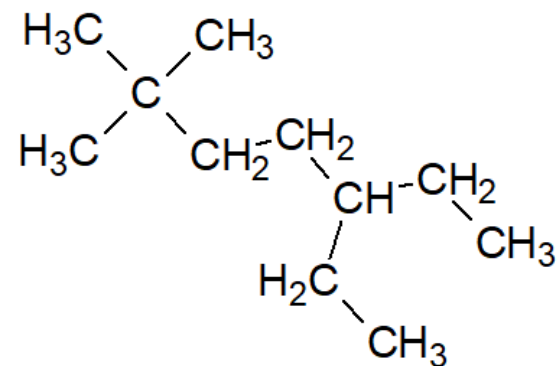
Slika 6: a) Postopek odpiranja okna za nastavitve načina prikaza strukture molekule, b) okence z vsemi možnostmi prikaza strukture molekule z izbranimi opcijami za prikaz strukture molekule s skeletno formulo, c) struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana prikazana s skeletno formulo

KORAK 6C

Ponovno označite molekulo, kliknite na *Tools*, nato pa na *Structure Properties* in nastavite parametre kot je prikazano na **sliki 7**.



a

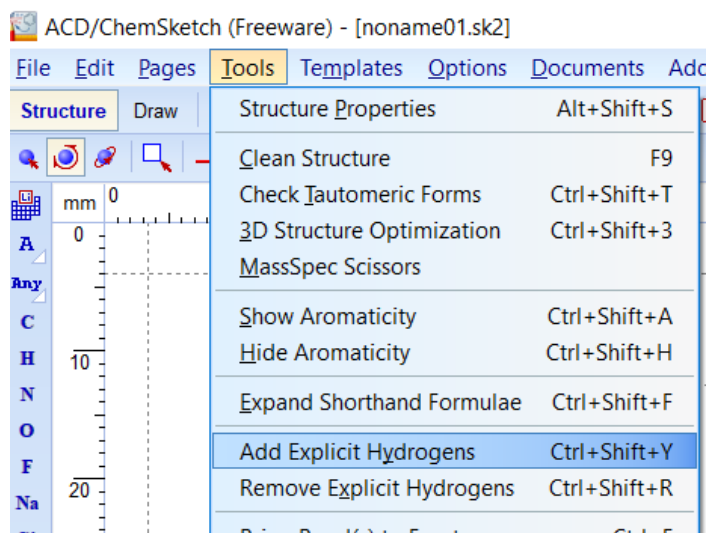


b

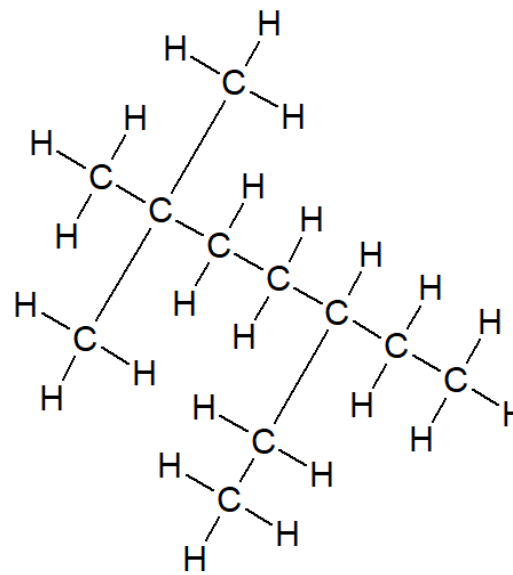
Slika 7: a) Okence z nastavljenimi parametri za prikaz strukture molekule z racionalno formulo, b) Struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana prikazana z racionalno formulo

KORAK 6D

Za prikaz strukture molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana s strukturno formulo kliknite na *Tool sin* izberite *Add Explicit Hydrogens*. Nato z opcijo *Clean Structure* uredite prikazano strukturo (**Slika 8a** prikazuje postopek za prikaz vezi ogljika z vsakim atomom vodika, **slika 8b** pa prikazuje strukturno formulo molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana).




a

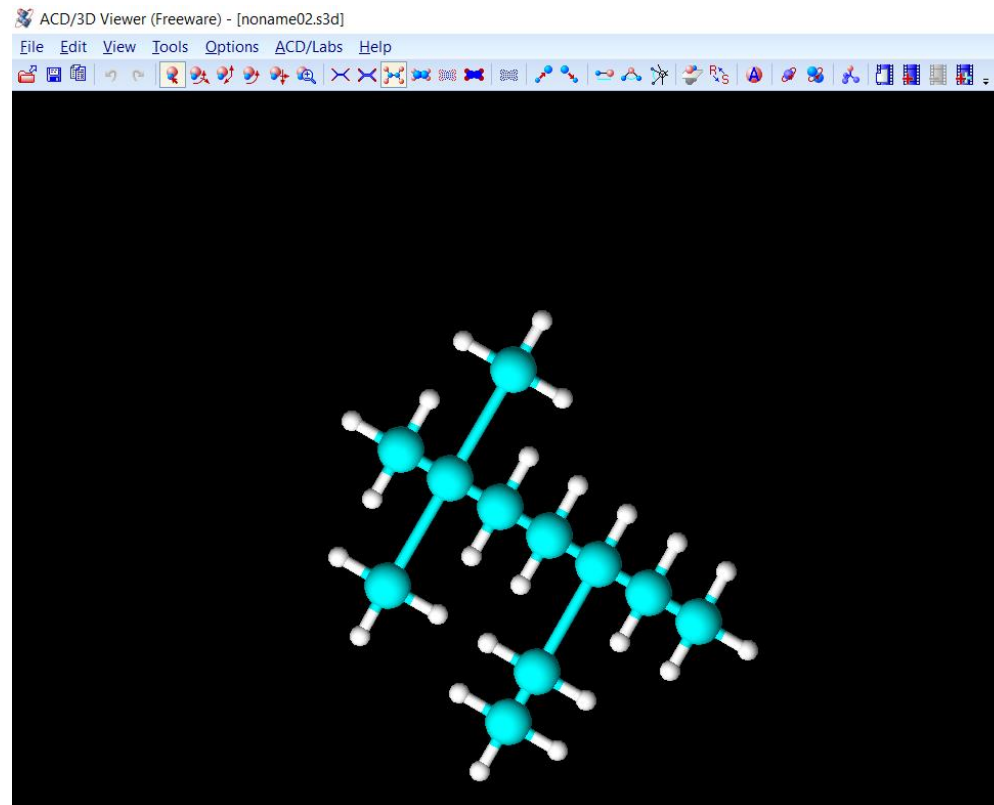


b

Slika 8: a) Navodila za prikaz vezi ogljika z vsakim atomom vodika, b) Strukturna formula molekule 5-etil-2,2-dimetilheptan

KORAK 7

Dobljeno strukturno formulo 5-etil-2,2-dimetilheptana prikažite v treh dimenzijah tako, da jo najprej označite, nato pa kliknete na opcijo  na vrstici z gumbi za orodja. Odprlo se bo novo okno (*3D Viewer*) s 3D prikazom molekule (**slika 9**). Ob postavljanju miške na vsak posamezni atom, se pojavi njegova številčna oznaka v skladu z IUPAC nomenklaturo ter njegove koordinate.



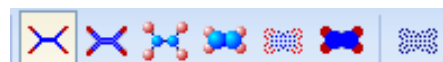
Slika 9: Prikaz 3D strukture molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana

KORAK 8

Poskušajte uporabiti vsako od možnosti rotacije, premikanja in označevanja molekule, ki jo najdete na gornjem delu vrstice z orodji:



nato prikažite molekulo v vseh načinih, ki jih program nudi. Opcije so del vrstice z orodji:




S klikom na katero koli opcijo, se menja način prikaza molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana. Za avtomatsko rotacijo molekule kliknite na ikono

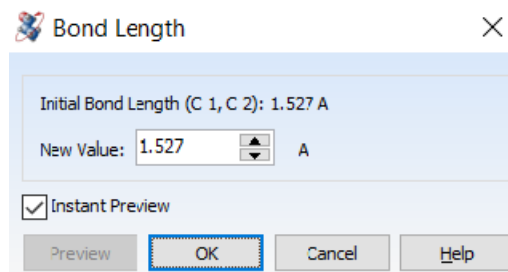


Za avtomatsko kontinuirano izmenjavo iz enega v drugi način prikaza molekule ob rotaciji, kliknite na ikono




KORAK 9

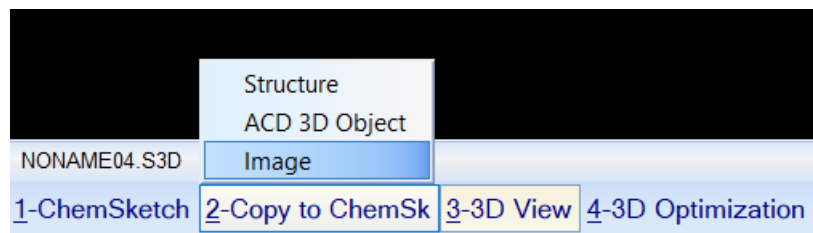
Določite dolžino vezi med prvim in drugim atomom ogljika tako, da kliknete na ikono , nato pa na prvi in drugi ogljikov atom. Pojavilo se bo novo okence z zapisom dolžine izbrane vezi (**slika 10**). Kolikšno dolžino vezi pričakujete? _____.



Slika 10: Določanje dolžine vezi med prvim in drugim ogljikovim atomom v molekuli 5-etil-2,2-dimetilheptana

KORAK 10

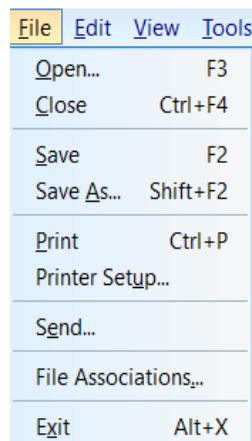
Za prikaz strukture z realnejšimi dolžinami vezi in velikostjo kotov med vezmi, uporabite ikono za 3D optimizacijo () . Tako urejeno strukturo lahko vrnemo iz treh v dve dimenziji programa ChemSketch. To storite tako, da kliknete na opcijo *Copy to ChemSketch* in izberete opcijo *Structure* (**slika 11**) na dnu programskega okna. V ChemSketchu se pojavi optimizirana struktura molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana.



Slika 11: Prenos optimizirane 3D strukture v ChemSketch

KORAK 11

Shranite 2D in 3D prikaz strukture molekule 5-etil-2,2-dimetilheptana na namizje računalnika. V oknu s 3D strukturo kliknite na *File*, nato na *Save As*, vpišite ime strukture, izberite opcijo shranjevanja na namizje in kliknite *Shrani/Save*. Isti postopek ponovite za 2D strukturo v ChemSketch-u (**slika 12**).



Slika 12: Shranjevanje 2D ali 3D strukture na računalnik

NALOGA 1

Narišite 1-etil-4,4-dimetilcikloheksan. Uporabite opcijo *DrawNormal*. Uporabite že naučeno opcijo *Clean Structure* (*Tools* ☐ *Clean Structure*) in uredite narisano strukturo molekule.

Tako dobljeni ciklični strukturi:

- z generiranjem imena preverite točnost narisane strukture
- prikažite molekulsko formulo _____
- prenesite jo v 3D Viewer
- shranite 2D in 3D strukturo.

NALOGA 2 Narišite molekulo etana in jo prikažite v 3 dimenzijah s pomočjo orodja 3D Viewer. Poskušajte rotirati celo molekulo, dokler ne dobite položaja, ki prikazuje antiperiplanarno konformacijo etana. Opazujte spojino vzdolž vezi ogljik-ogljik.

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

1. Narišite vse strukturne izomere butana in napišite njihova imena. Izberite eno od narisanih spojin in opravite sledeče naloge:

- generirajte ime,
- določite molekulsko formulo,
- prikažite strukturo z racionalno, skeletno in strukturno formulo,
- uredite strukturo molekule z opcijo *Clean Structure*,
- prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju,
- prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju v obliki palčk in kroglic,
- optimizirajte molekulo,
- določite dolžino vezi med prvim in drugim ogljikovim atomom,
- shranite 2D in 3D strukturo molekule na namizje računalnika.

2. Raziščite uporabo alkanov in cikloalkanov v vsakdanjem življenju. Izberite eno molekulo, ki jo boste prikazali v programu ChemSketch. V beležko zapišite uporabnost izbrane molekule. Shranite optimizirano 2D in 3D strukturo te molekule na računalnik.

3. Narišite strukturo 1,1,3-trimetilciklopentana in opravite sledeče naloge:

- generirajte ime,
- določite molekulsko formulo,
- prikažite strukturo z racionalno, skeletno in strukturno formulo,
- uredite strukturo molekule z opcijo *Clean Structure*,
- prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju ,
- prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju v obliki palčk in kroglic,
- optimizirajte molekulo,

- g) določite dolžino vezi med prvim in drugim ogljikovim atomom ,
- h) določite kot med vezmi v obroču – med prvim in drugim ogljikovim atomom,
- i) shranite 2D in 3D strukturo molekule na namizje računalnika.

4. Narišite molekulo propana in jo prikažite v 3 dimenzijah s pomočjo orodja 3D Viewer. Poskušajte rotirati celo molekulo, dokler ne dobite položaja, ki prikazuje antiperiplanarno konformacijo propana. Opazujte spojino vzdolž vezi med prvim in drugim ogljikom.

1.5. Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti učnih vsebin

1. Narišite vse strukturne izomere pentana in napišite njihova imena. Izberite eno od narisanih spojin in opravite sledeče naloge:

- a) generirajte ime,
- b) določite molekulsko formulo,
- c) prikažite strukturo z racionalno, skeletno in strukturno formulo,
- d) uredite strukturo molekule z opcijo *Clean Structure*,
- e) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju,
- f) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju v obliki palčk in kroglic,
- g) optimizirajte molekulo,
- h) določite dolžino vezi med prvim in drugim ogljikovim atomom ,
- i) shranite 2D in 3D strukturo molekule na namizje računalnika.

2. Narišite molekulo butana in jo prikažite v treh dimenzijah s pomočjo orodja 3D Viewer. Poskušajte rotirati celo molekulo, dokler ne dobite položaja, ki prikazuje antiperiplanarno konformacijo butana. Opazujte spojino vzdolž vezi med prvim in drugim ogljikom.

ALKENI IN ALKINI

1 OBDELAVA UČNIH TEM

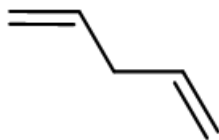
Učna tema: Ogljikovodiki
Učna enota : Alkeni in alkini
Predvideno število učnih ur: 2

1.1 Teoretični uvod

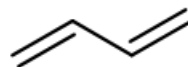
a) Alkeni

Alkeni so nenasičeni ogljikovodiki, ki imajo v svoji strukturi vsaj eno dvojno kovalentno vez med ogljikovimi atomi. V primerjavi z alkani imajo manj atomov vodika, zato pravimo, da so nenasičeni. Splošna formula alkenov je: C_nH_{2n} , pri čemer n - predstavlja število ogljikovih atomov. Najenostavnejši predstavnik alkenov je eten, C_2H_4 . Homologna vrsta alkenov se nadaljuje s propenom (C_3H_6), but-1-enom (C_4H_8)... Alkeni se pojavljajo kot strukturni in kot stereo izomeri od but-1-ena naprej. Cikloalkeni so obročasti alkeni s splošno formulo: C_nH_{2n-2} .

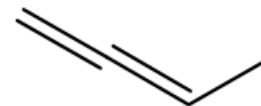
Alkene s preprosto strukturo imenujemo po IUPAC pravilih imenovanja ogljikovodikov tako, da osnovnemu imenu za alkan, z istim številom ogljikovih atomov, dodamo končnico -en. Položaj dvojne vezi označimo s številko, ki jo zapišemo med osnovo in končnico, npr. but-1-en. V molekulah alkenov je lahko tudi več dvojnih vezi. Če sta prisotni dve, dodamo končnico -dien, če so tri -trien... Dvojne vezi se v alkenih pojavljajo kot izolirane (**slika 1a**), konjugirane (**slika 1b**) in kumulirane (**slika 1c**).



Slika 1. a) izolirana dvojna vez



b) konjugirana dvojna vez



c) kumulirana dvojna vez

b) Alkini

Alkini so nenasičeni ogljikovodiki, ki vsebujejo vsaj eno trojno vez. Splošna formula alkinov je C_nH_{2n-2} . V naravi se pojavljajo v majhnem številu, večinoma so močno strupeni, pogosto imajo antibakterijsko in fungicidno delovanje.

1.2 Učni cilji

V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- povezati pojem nenasičenosti s prisotnostjo dvojne vezi med atomi ogljika,
- narisati različne primere molekul alkenov in alkinov in jih prikazati z racionalno, strukturno in skeletno formulo,
- generirati ime predhodno narisanih molekul alkenov in alkinov v programu ChemSketch,
- določiti molekulsko formulo predhodno narisanih alkenov in alkinov v programu ChemSketch,
- izboljšati prikaz strukture molekul (prilagoditev dolžine vezi in medveznih kotov) s pomočjo opcije "Clean Structure"
- narisati strukturne izomere alkenov i alkinov,
- prikazati strukturo alkenov in alkinov v treh dimenzijah,
- rotirati molekule alkenov in alkinov v dveh in treh dimenzijah,
- zamenjati način tridimenzionalnega prikaza molekul alkenov in alkinov,
- premikati molekule alkenov in alkinov v 3D in 2D,
- določiti dolžine vezi in velikost kotov med vezmi v molekulah alkenov in alkinov,
- optimizirati strukture alkenov in alkinov,
- shraniti na računalnik dvodimenzionalno in tridimenzionalno strukturo željene molekule alkenov in alkinov,
- narisati strukturne formule cikloalkenov.

1.3 Navodila za uporabo programske opreme ChemSketch

Primer 1

Narišite molekulo etena in po navodilih uredite njeno strukturo. V programu ChemSketch generirajte njeno ime, določite molekulsko formulo, prikažite jo z racionalno, skeletno in strukturno formulo in na različne načine prikažite strukturo v treh dimenzijah, določite dolžino vezi in kotov med vezmi, optimizirajte molekulo, jo rotirajte in premikajte iz 2D v 3D ter različne oblike shranite na računalnik.

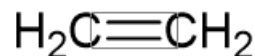
Nato narišite molekulo but-2-in in po navodilih ponovite vse korake.

KORAK 1

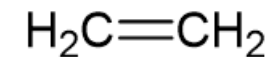
Izberite način risanja *Draw Normal*. Kliknite na prazni del risalne površine. Pojavila se bo struktura molekule metana (CH₄). S klikom na atom ogljika nastane enojna vez ogljik-ogljik. Narišite strukturo etana in se z miško postavite na vez med ogljikovima atomoma (videli boste pravokotnik okrog vezi, prikazane na **sliki 1.a**), kliknite na to vez da naredite dvojno vez (**slika 1: b in c**).



Slika 1: a) pravokotnik okrog vezi



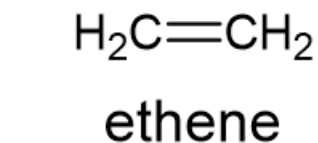
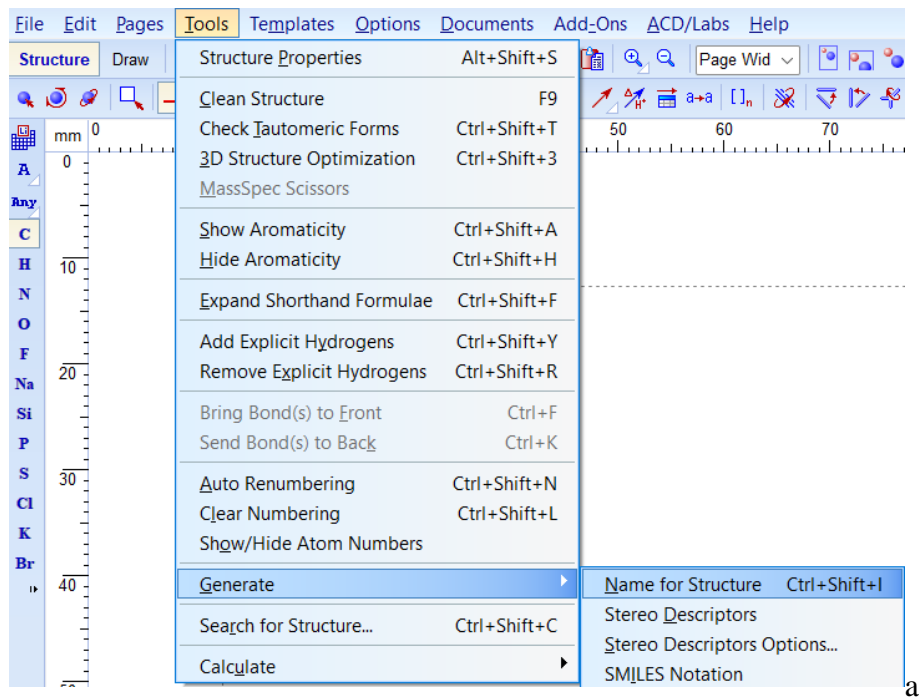
b) dvojna vez v etenu



c) dvojna vez v etenu

KORAK 2

Imenovanje strukture alkena: V orodni vrstici kliknite na *Tools*, izberite opcijo *Generate* in nato *Name for Structure*. Navedeni postopek je prikazan na **sliki 2a**, na **sliki 2b** pa je prikazana struktura molekule etena z zapisanim generiranim imenom.

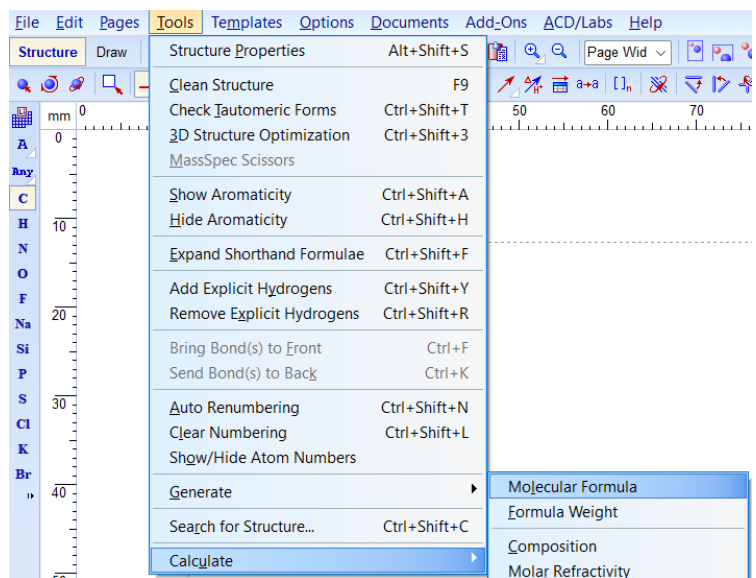


b

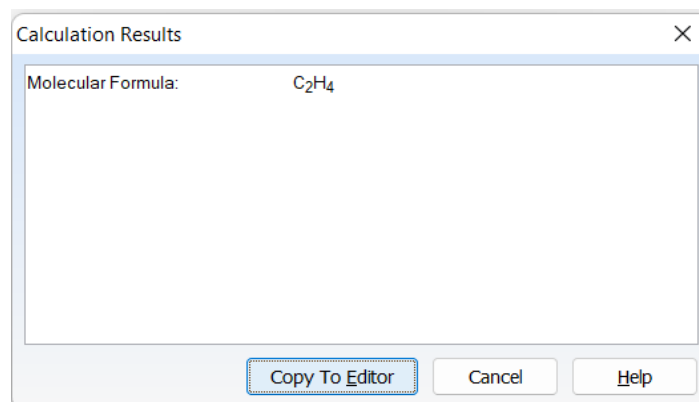
Slika 2: a) Postopek generiranja imena molekule narisane v programu ChemSketch, b) struktura in pripadajoče ime narisane molekule etena.

KORAK 3

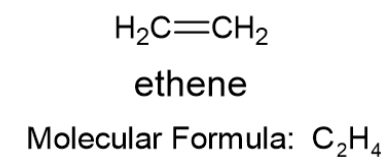
V orodni vrstici izberite *Tools*, nato kliknite na *Calculate*, in izberite *Molecular Formula* (**slika 3a**). Pojavilo se bo okence z molekulsko formulo kot prikazuje **slika 3b**. Za prikaz molekulske formule na risalni površini, kliknite na *Copy To Editor* (**slika 3c**).



a



b

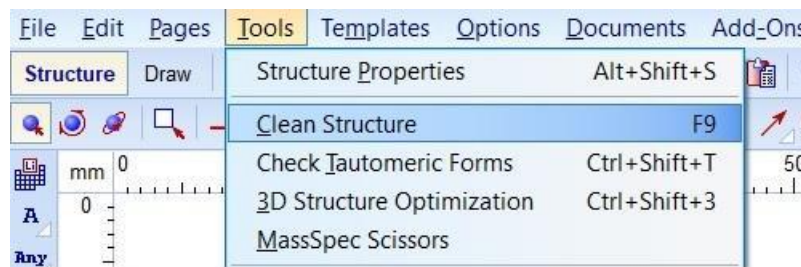


c

Slika 3: a) Navodila za prikaz molekulske formule etena, b) Okence z molekulsko formulo molekule etena, c) Molekulska formula na risalni površini




KORAK 4

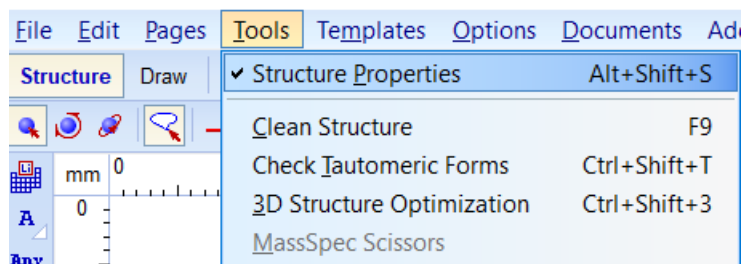
V orodni vrstici izberite opcijo *Tools* in s klikom na *Clean Structure* počistite strukturo - prilagodite dolžino vezi in kote med vezmi (**slika 4**).



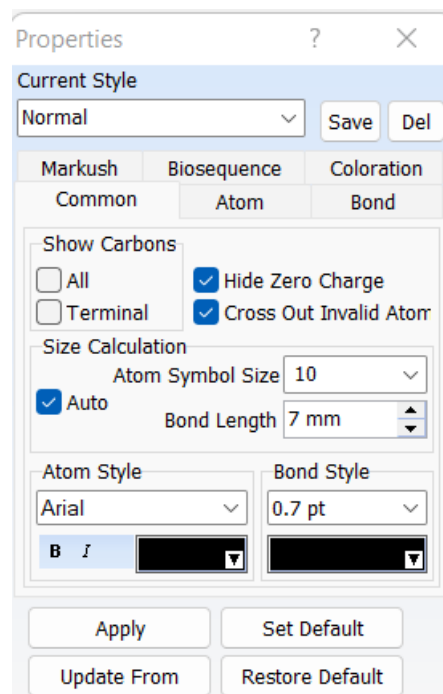
Slika 4: Prilagoditev dolžine vezi in veznih kotov v programu ChemSketch.

KORAK 5

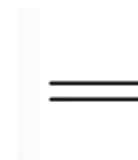
Prikažite skeletno formulo molekule etena. Najprej označite celotno strukturo molekule tako, da uporabite gumb  v zgornjem levem delu vrstice z orodji, nato kliknite na , pri čemer se pokaže: . Med držanjem klika na miški označite celotno strukturo. Kliknite na *Tools* v orodni vrstici, nato pa izberite *Structure Properties*. Odpre se okence za nastavitve željenih lastnosti. **Slika 5a** prikazuje postopek odpiranja tega okenca, **slika 5b** pa opcije, ki jih je potrebno nastaviti (v razdelku *Show Carbons*, kliknite na *Terminal* in nato *Apply*). **Slika 5c** prikazuje skeletno formulo etena.



a



b

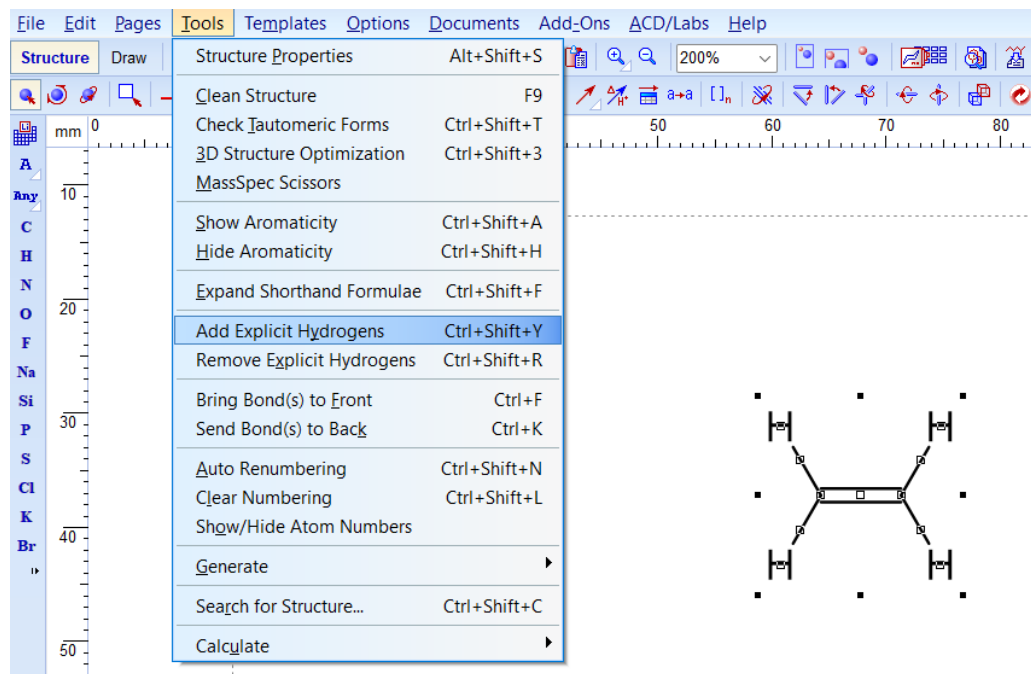


c

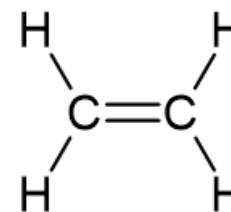
Slika 5: a) Postopek odpiranja okenca za nastavitve prikaza strukture, b) okence za izbiro lastnosti in prikaz ustreznih nastavitvev za prikaz skeletne formule, c) skeletna formula etena.

KORAK 6

V orodni vrstici kliknite na *Tools* in izberite *Add Explicit Hydrogens* za prikaz vodikovih atomov v skeletni formuli etena (slika 6a). Enako storite v strukturalni formuli etena (slika 6b).




a



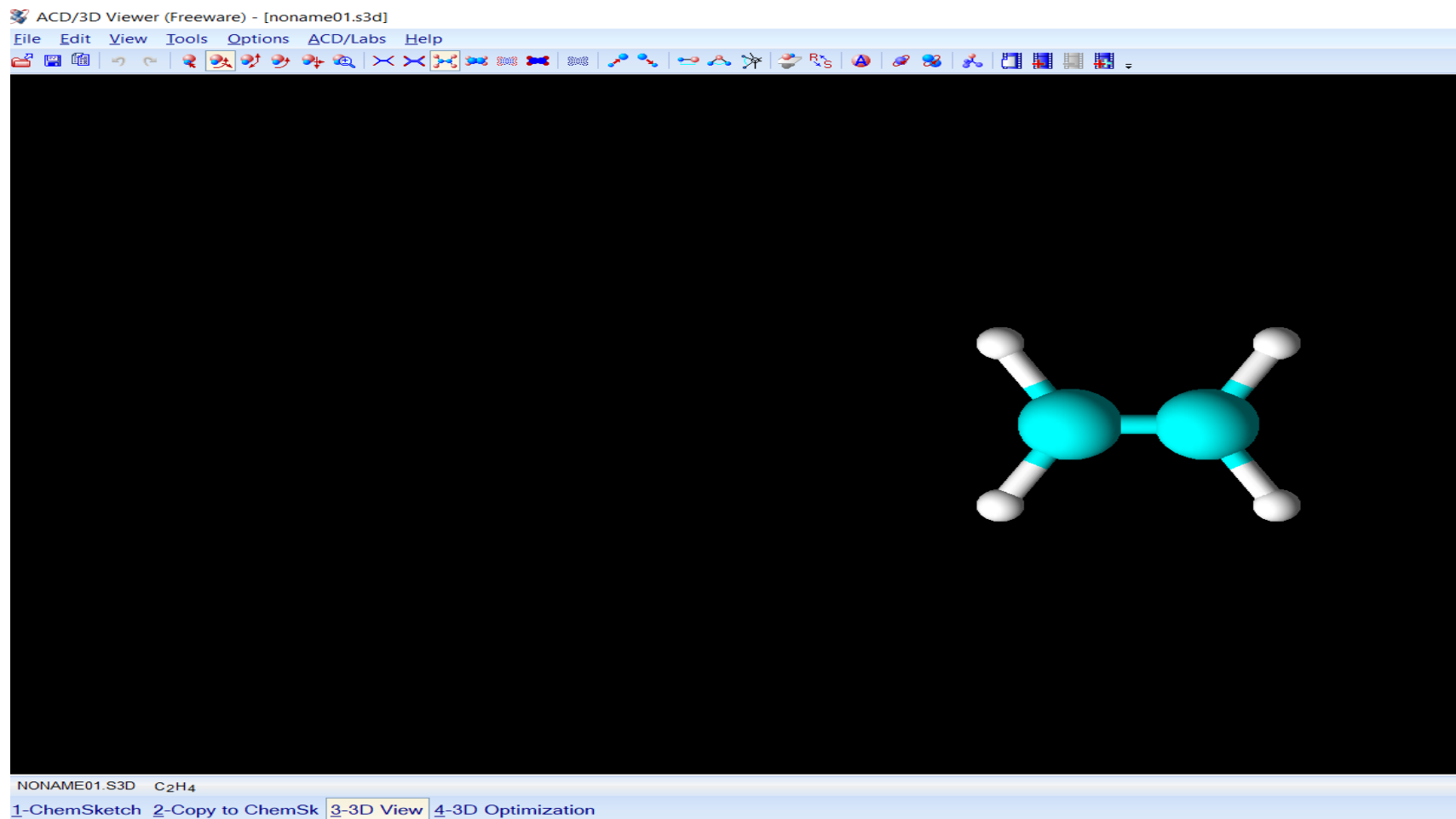
b

Slika 6: a) Postopek za prikaz vseh vezi ogljik-vodik, b) Strukturna formula molekule etena

KORAK 7


Narisano strukturalno formulo etena prikažite v treh dimenzijah. Najprej jo izberite/označite, nato pa kliknite na gumb  v vrstici z orodji.

Odrplo se bo novo okno (3D Viewer) s 3D prikazom molekule (slika 7). S postavitvijo miške na vsak posamezni atom, se na ekranu pojavi njegova številčna oznaka glede na IUPAC nomenklaturu in njegove koordinate.





Slika 7: 3D model molekule etena

KORAK 8



Poskušajte uporabiti vsako od možnosti rotacije, premikanja in označevanja molekule, ki jo najdete na gornjem delu vrstice z orodji: ,

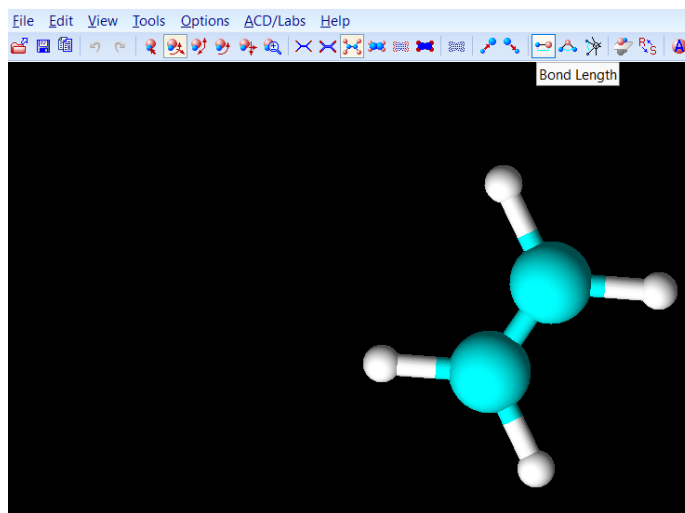
nato prikažite molekulo v vseh načinih, ki jih program nudi. Opcije so del vrstice z orodji: .

S klikom na katero koli opcijo, se menja način prikaza molekule etena. Za avtomatsko rotacijo molekule kliknite na ikono .

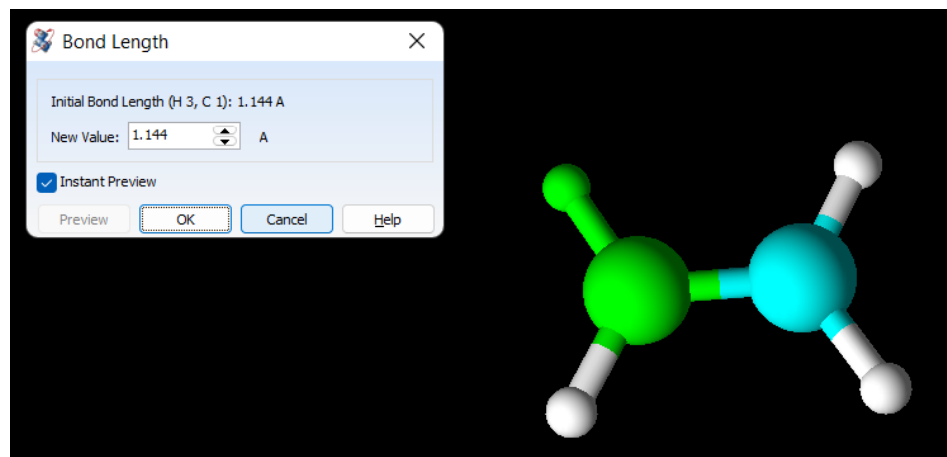
Za avtomatsko kontinuirano izmenjavo iz enega v drugi način prikaza molekule ob rotaciji, kliknite na ikono .

KORAK 9

Izberite način prikaza s kroglicami in palčkami tako, da kliknete na ikono . Na zgornji vrstici z orodji kliknite na ikono *Bond Length*  (**slika 8**) in izberite dva atoma, med katerima želite določiti dolžino vezi, tako, da kliknete nanju. Pojavilo se bo novo okence z zapisom dolžine izbrane vezi (**slika 9**).



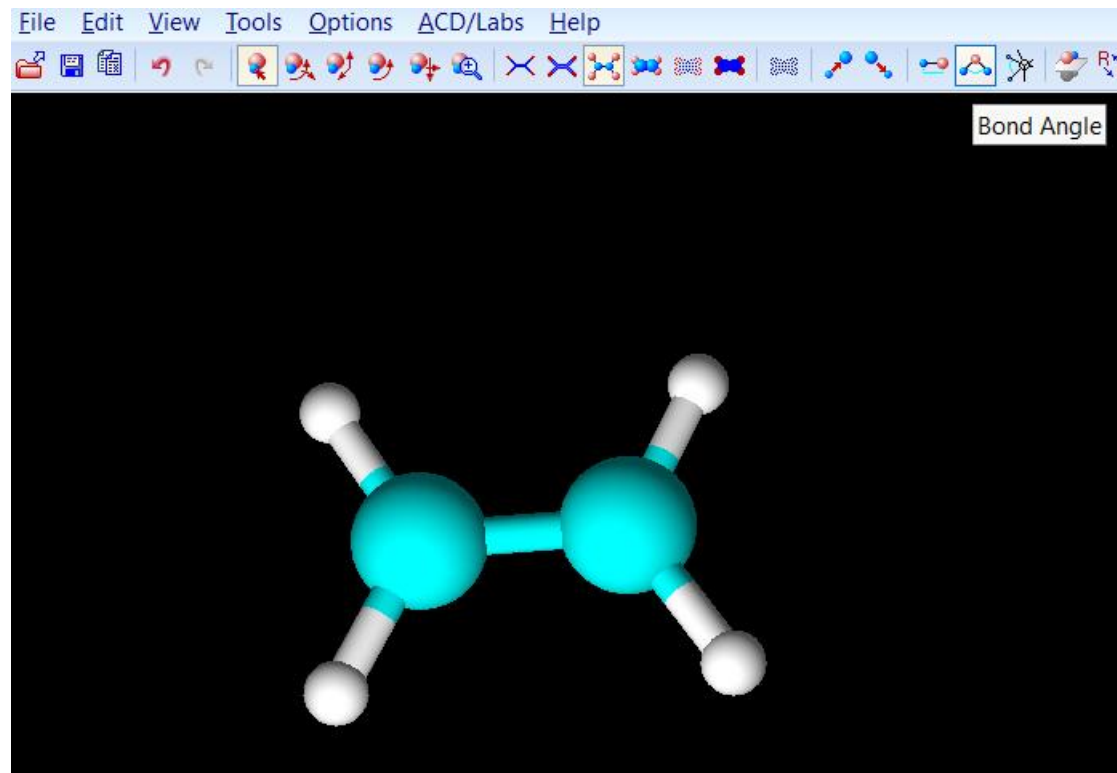
Slika 8: Opcija *Bond Length* – dolžina vezi



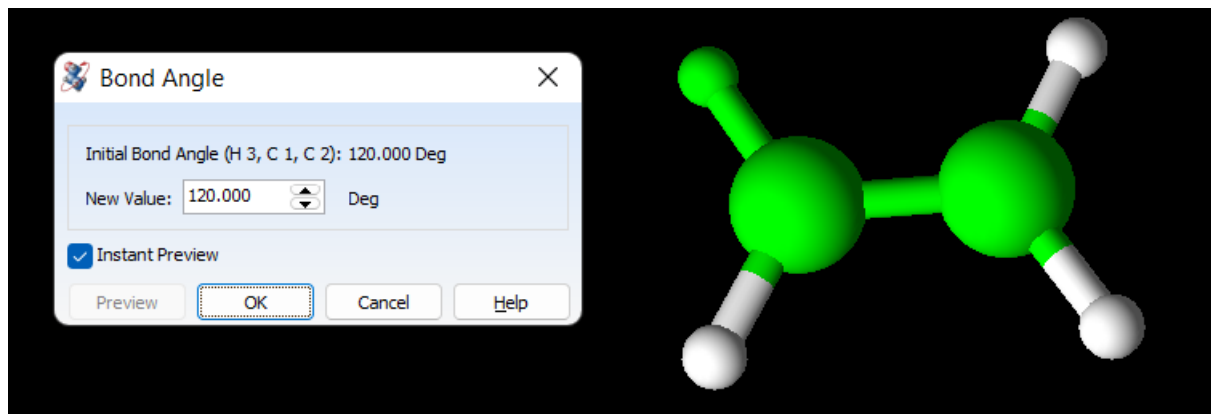
Slika 9: Določanje dolžine vezi med prvim atomom ogljika in vodika v molekuli etena

KORAK 10

Za določitev kota med vezmi v vrstici z orodji izberite ikono *Bond Angle* (**slika 10**). Za določitev kota med vezmi med dvema atomoma ogljika in vodika, je potrebno najprej klikniti na atom vodika, nato pa na oba atoma ogljika. Pojavilo se bo novo okno z zapisom vrednosti velikosti izbranega kota. To prikazuje **slika 11**.




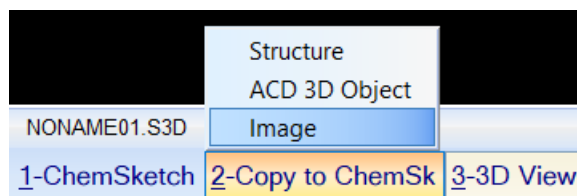
Slika 10: Ikona *Bond Angle* na vrstici z orodji



Slika 11: Določitev kota med vezmi med prvim in drugim atomom ogljika ter tretjim atomom vodika

KORAK 11

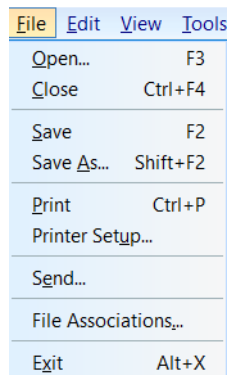
Za prikaz strukture z realnejšimi dolžinami vezmi in velikostjo kotov med vezmi, uporabite ikonico za 3D optimizacijo (). Tako urejeno strukturo lahko vrnemo iz treh v dve dimenziji programa *ChemSketch*. To storite tako, da kliknete na opcijo *Copy to ChemSketch* in izberete opcijo *Structure* (**slika 12**) na dnu programskega okna. V *ChemSketchu* se pojavi optimizirana struktura molekule etena.



Slika 12: Prenos optimizirane 3D strukture v ChemSketch.

KORAK 12

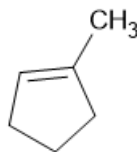
Shranite 2D in 3D strukturo molekule etena na namizje računalnika. To naredite s klikom na *File* in nato *Save As*. V okencu 3D strukture, vpišite ime strukture, izberite *Save to desktop* in kliknite *Save*. Ponovite isti postopek za 2D strukturo v ChemSketchu (**slika 13**).



Slika 13: Shranjevanje 2D ali 3D strukture na računalnik.

KORAK 13

Narišite molekulo 1-metilciklopent-1-ena, tako, da sledite predhodno naučenim korakom (**slika 14**). Nato na tej molekuli izvedite še korake od 2 do 12.

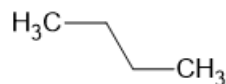


1-methylcyclopent-1-ene

Slika 14: Prikaz strukture molekule 1-metilciklopent-1-ena

KORAK 14a

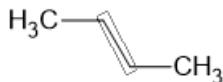
Narišite molekulo but-2-in: izberite način risanja *DrawNormal*. Kliknite na prazni del risalne površine. Pojavila se bo struktura molekule metana (CH_4). S klikom na ogljikov atom nastane enojna vez med dvema ogljikoma. Če držimo Ctrl in hkrati klikamo na vsak naslednji ogljikov atom, lahko narišemo verigo štirih ogljikovih atomov, kar prikazuje **slika 15**.



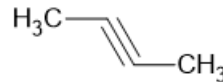
Slika 15: Narisana struktura butana

KORAK 14b

Na narisani strukturi butana puščico miške postavite na vez med drugim in tretjim ogljikom, da se pojavi pravokotnik okrog vezi (**slika 16a**) in dvakrat kliknite nanjo. Nastala bo trojna vez (**slika 16b**). Izvedite korake od 2 do 12 tudi s to spojino.



a



b

Slika 16: a) Pravokotnik okrog vezi, b) But-2-in

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

1. S pomočjo interneta poiščite formulo naravnega kavčuka in njeno strukturo prikažite v programu *ChemSketch*. Narisano strukturo spreminjajte, jo prenesite v 3D in si oglejte različne modele.

2. Narišite molekulo 4-metilpent-2-en in opravite sledeče naloge:

- a) generirajte ime,
- b) določite molekulsko formulo,
- c) prikažite strukturo z racionalno, skeletno in strukturno formulo,
- d) uredite strukturo molekule z opcijo *Clean Structure*,
- e) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju,
- f) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju v obliki palčk in kroglic,
- g) optimizirajte molekulo,
- h) določite dolžino vezi med prvim in drugim ogljikovim atomom,
- i) določite kot med vezmi v obroču – med prvim in drugim ogljikovim atomom,
- j) shranite 2D in 3D strukturo molekule na namizje računalnika.

3. Raziščite uporabo alkenov in alkinov v vsakdanjem življenju. Izberite eno molekulo, ki jo boste prikazali v programu *ChemSketch*. V beležko zapišite uporabnost izbrane molekule. Shranite optimizirano 2D in 3D strukturo te molekule na računalnik.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti učnih vsebin

1. Narišite strukturo 2-metilpent-1-en-3-ina in opravite sledeče naloge:

- a) generirajte ime,
- b) določite molekulsko formulo,
- c) prikažite strukturo z racionalno, skeletno in strukturno formulo,
- d) uredite strukturo molekule z opcijo *Clean Structure*,
- e) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju,
- f) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju v obliki palčk in kroglic,
- g) optimizirajte molekulo,
- h) določite dolžino vezi med prvim in drugim ogljikovim atomom,
- i) določite kot med vezmi v obroču – med prvim in drugim ogljikovim atomom,
- j) shranite 2D in 3D strukturo molekule na namizje računalnika.

AROMATI

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna tema: Aromati
Učna enota: Aromati – poimenovanje, izomerija, sinteza in lastnosti
Predvideno število učnih ur: 2

1.1 Teoretični uvod

Aromatske spojine so nenasičeni ogljikovodiki, ki vsebujejo vsaj en benzenov obroč. Molekula benzena je planarna in ima v šestčlenskem obroču ogljikovih atomov tri konjugirane dvojne vezi oz. 6 delokaliziranih π elektronov. V naftalenu sta povezana dva benzenova obroča, v antracenu trije, lahko pa se jih poveže tudi več.

Z elektrofilno substitucijo enega ali več vodikovih atomov, lahko na benzenov obroč vežemo različne funkcionalne skupine, npr. halogene, nitro skupine, alkilne skupine. Nastale spojine imenujemo tako, da pred benzen dodamo ustrezno predpono in označimo lege substituent npr. klorobenzen, 1,2-diklorobenzen, metilbenzen (trivialno toluen, **Slika 4**), 2,4,6-trinitro toluen. Splošna formula monosubstituiranih benzenov je C_6H_5-R .

1.2 Učni cilji


V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- narisati različne primere molekul aromатов in jih prikazati s strukturno, racionalno in skeletno formulo,
- generirati ime predhodno narisanih molekul aromатов v programu ChemSketch-u,
- generirati molekulske formule predhodno narisanih molekul aromатов v ChemSketch-u,
- izboljšati prikaz strukture molekul (prilagoditev dolžine vezi in kotov med vezmi) s pomočjo ukaza *Clean Structure*,
- narisati strukturne izomere aromатов,



- prikazati strukture aromатов v treh dimenzijah,
- premikati in obračati molekule aromатов v 3D in 2D,
- menjavati način prikazovanja struktur molekul aromатов v treh dimenzijah,
- določiti dolžine vezi in kote med vezmi v molekulah aromатов,
- optimizirati strukture molekul aromатов,
- shraniti dvodimenzionalno in tridimenzionalno strukturo molekule aromata na računalnik .

1.3 Navodilo za uporabo programske opreme ChemSketch

Primer 1

Narišite molekulo benzena z uporabo orodja za ciklizacijo alkana iz ustrezne strukture, nato izberite orodje *Draw Normal* () .

KORAK 1

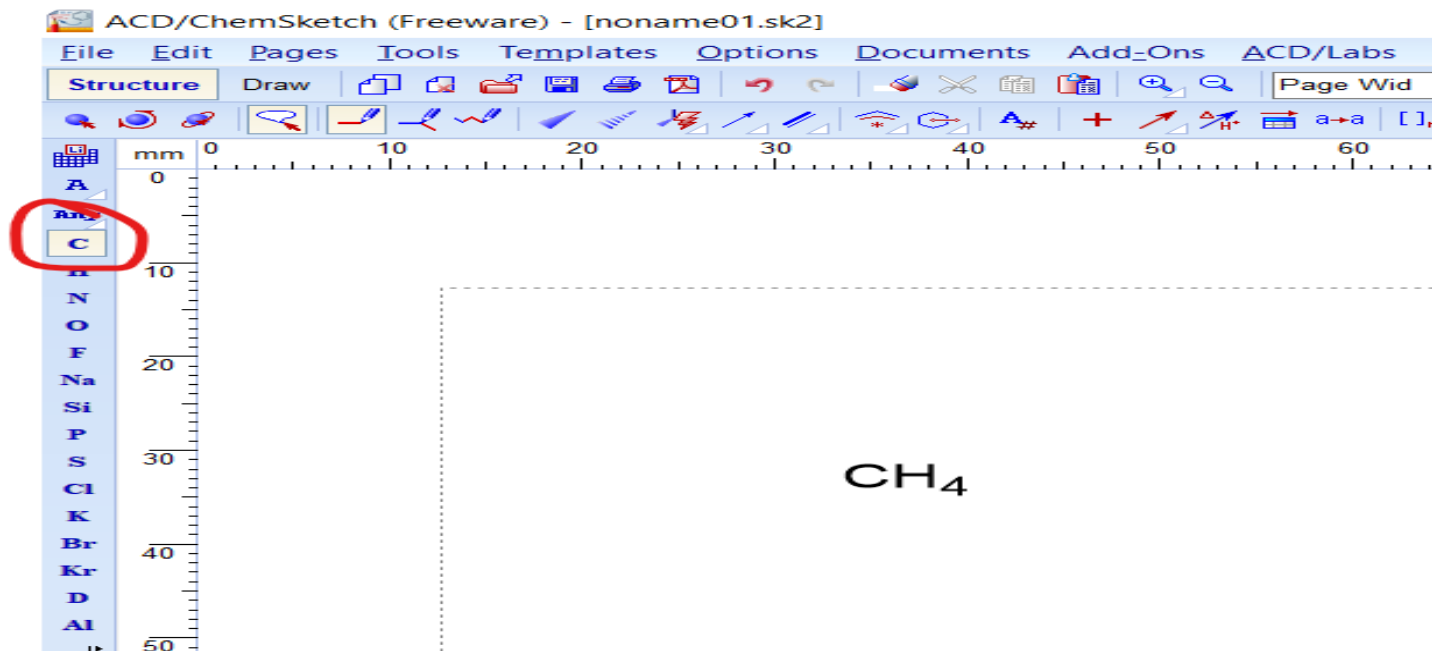
V orodni vrstici izberite *Structure* in nato gumb *Draw Normal* () . Sedaj v orodni vrstici *Atoms toolbar*, na levi strani ekrana, izberite atom ogljika () (slika 1).

KORAK 2

Z miško kliknite na prazno delovno površino, da se pojavi molekula metana CH₄ (slika 1).





KORAK 3

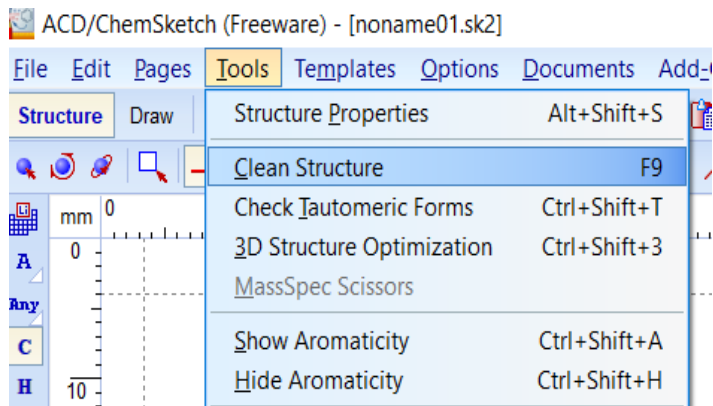
Z miško se postavite na formulo CH₄, okoli nje se pojavi pravokotnik, sedaj znova kliknite, da dodate metilno skupino in dobite etan H₃C-CH₃.



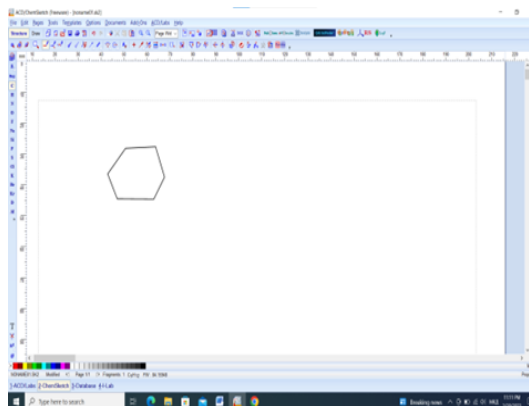
Slika 1: Racionalna formula metana

KORAK 4

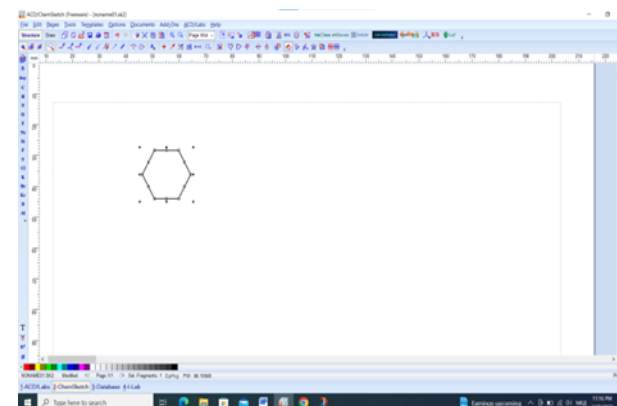
Kliknite na CH₄ in pod določenim kotom povlecite v desno, v krog. Najprej dobite H₃C-CH₃, to ponovite še petkrat, da narišete cikloheksan. Sedaj označite celotno strukturo molekule s klikom na  v gornjem levem kotu orodne vrstice, nato nastavite opcijo izbora tako, da se s klikom na  pojavi oznaka: . Ob držanju klika povlecite z miško in obkrožite celotno molekulo. Nato uporabite funkcijo *Clean structure*  (slike 2 a, b in c), da dobite prave kote in dolžine vezi v cikloheksanu.



a





b

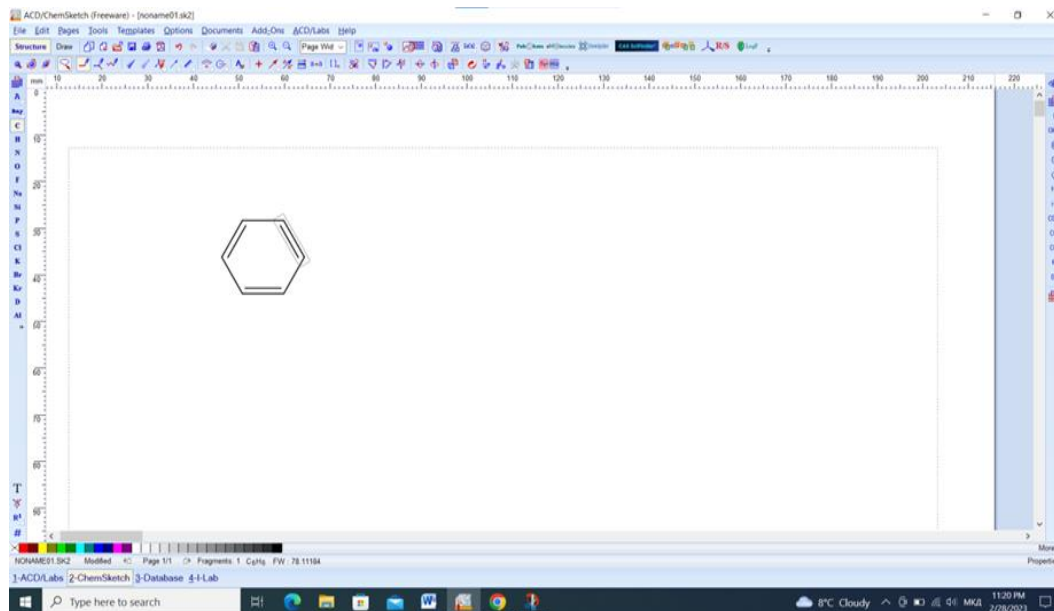


c

Slika 2: a) Uporaba funkcije *Clean Structure* b) in c) Struktura cikloheksana

KORAK 5

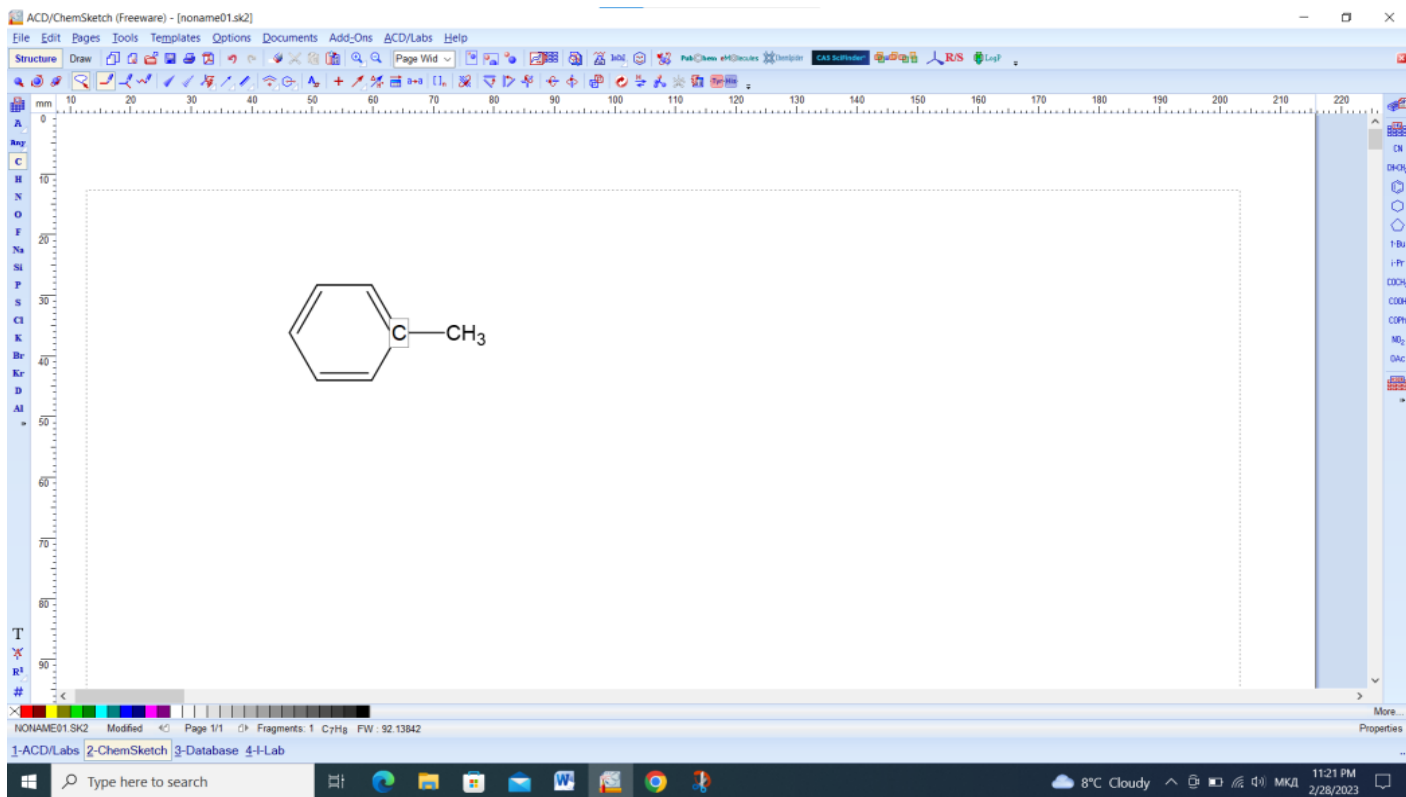
Za risanje dvojnih vezi v benzenu izberite način *Draw Normal* () in ogljikov atom () , kliknite na vez med ogljikovima atomoma, okoli vezi C-C se pojavi pravokotnik, kliknite nanj in nariše se dvojna vez. Narišite še dve dvojni vezi na ustreznih mestih (**slika 3**).



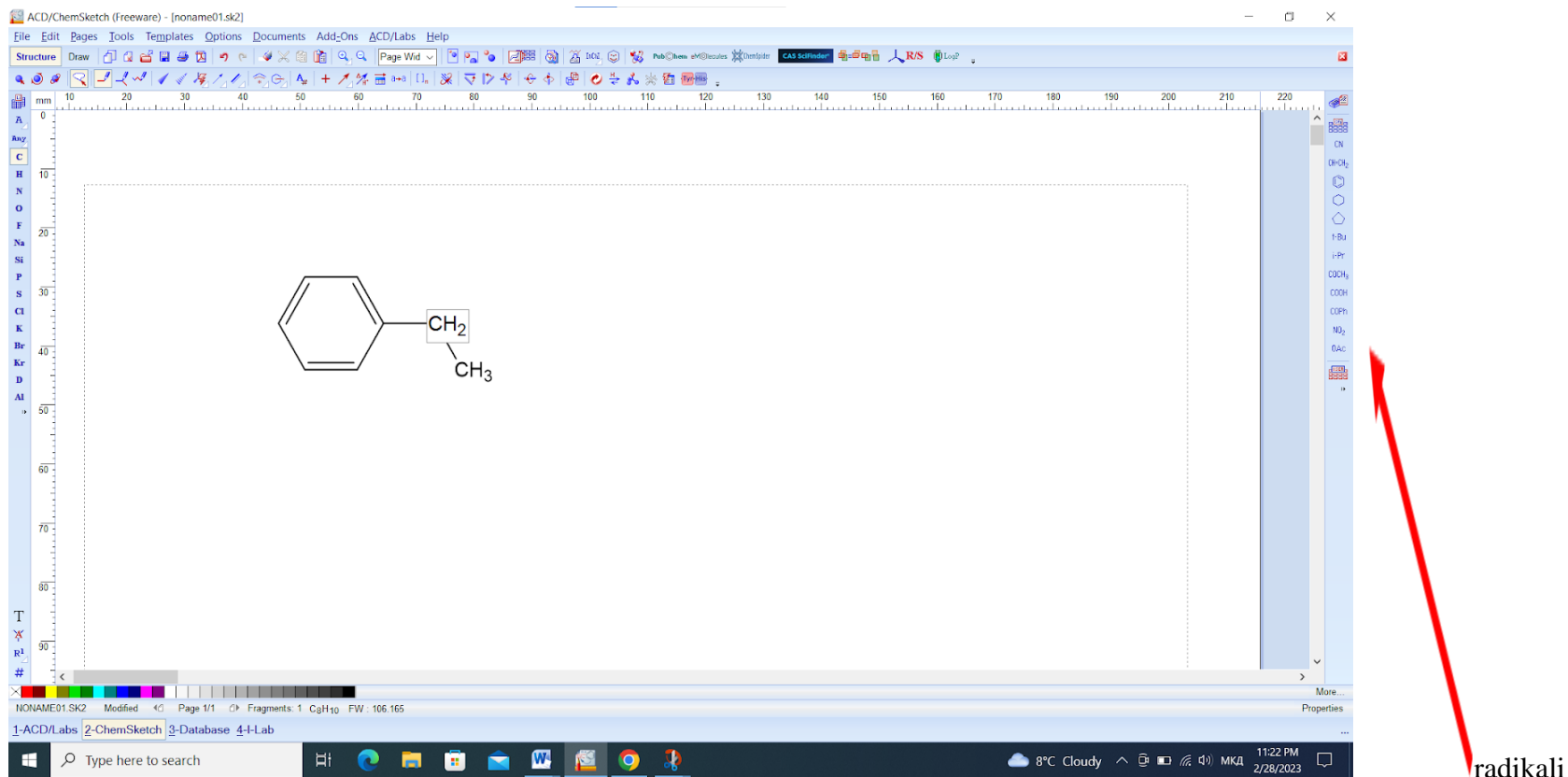
Slika 3: Struktura molekule benzena

KORAK 6

Za dodajanje metilne skupine se postavite na katerikoli ogljikov atom v benzenu in kliknite ter povlecite z miško izven obroča (**slika 4**). S klikom na ogljikov atom metilne skupine lahko narišete etilno skupino (**slika 5**).



Slika 4: Struktura metilbenzena (toluena)



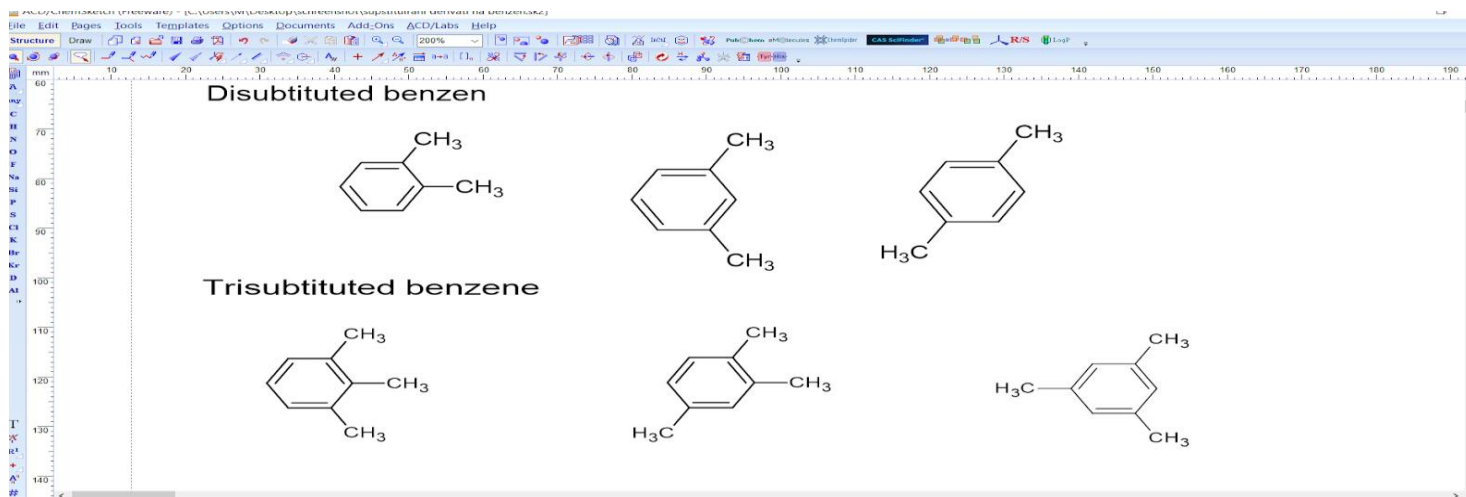
Slika 5: Struktura molekule etilbenzena

KORAK 7

V orodni vrstici na desni strani ekrana so navedeni pogosti radikali (alkilne skupina), ki nam omogočajo hitrejše risanje (slika 5) - nabor *Table of radicals...* Za spreminjanje ali risanje radikala uporabite nabor orodij *Charges/Radicals* v orodni vrstici *Atom*.


Primer 2

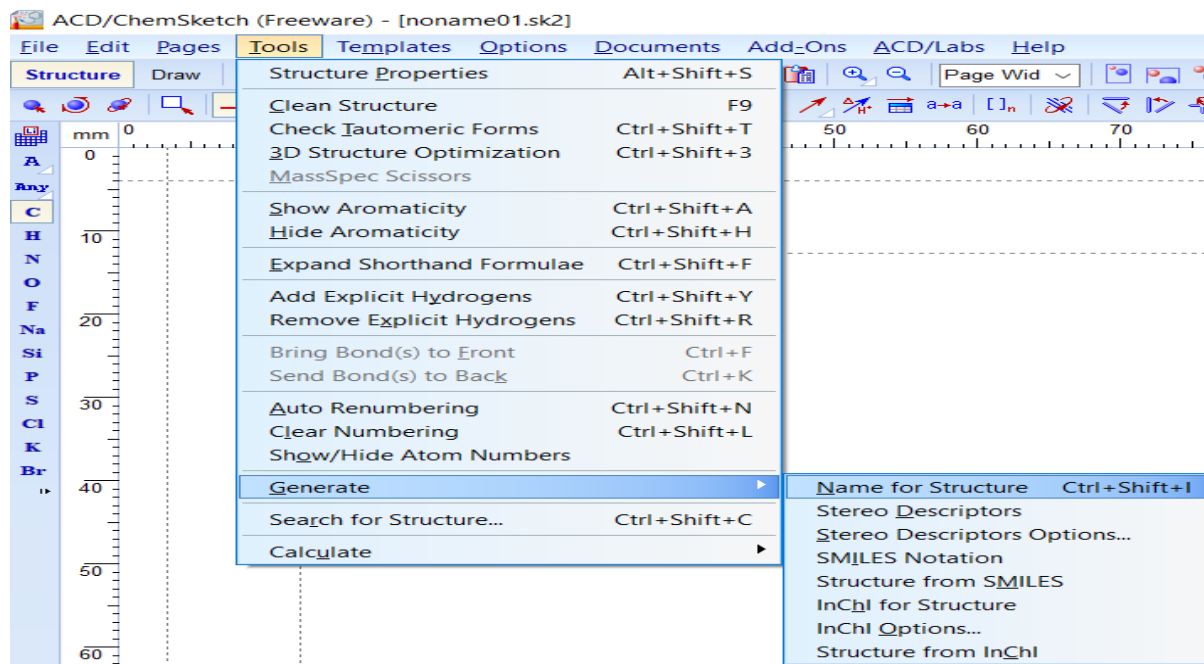
Narišite strukture molekul: metilbenzena (toluena), etilbenzena, izopropilbenzena (kumena) in vinilbenzena (stirena), ki so prikazane na sliki 6 in di- in trisubstituirane derivate benzena, prikazane na sliki 7.



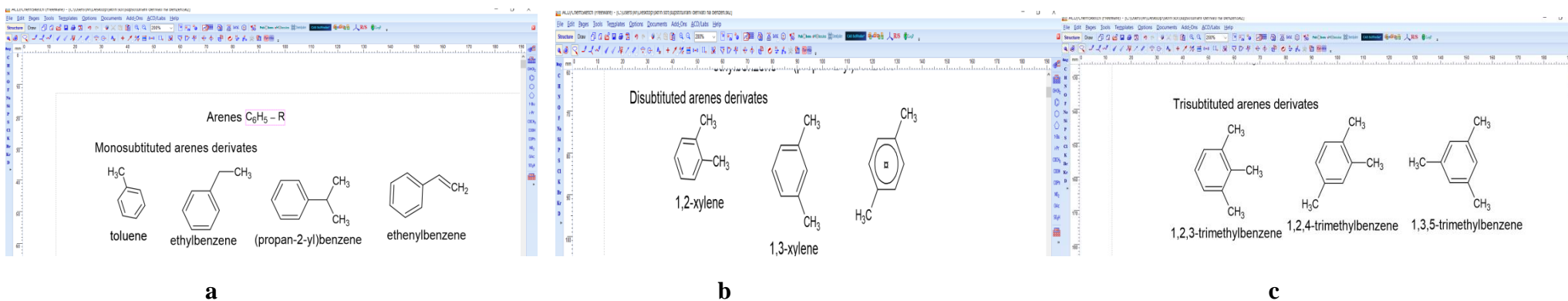
Slika 7: Strukture molekul disubstituiranih in trisubstituiranih derivatov benzena

KORAK 2

Aromatske spojine imajo več različnih imen, ki se uporabljajo za isto spojino. Poznamo poimenovanje po IUPAC nomenklaturi in trivialna imena. Za poimenovanje narisanih molekul označite strukturo s pomočjo ikone , nato izberite *Tools*, nato pa iz spustnega menija izberite *Generate* in *Name for Structure*. Postopek je prikazan na **sliki 8**. Na **sliki 9a** so prikazane strukture narisanih molekul in njihova imena: metilbenzen (toluen), etilbenzen, izopropilbenzen (kumen), vinilbenzen (stiren), na **sliki 9b** (1,2)-dimetilbenzen (ksilen), 1,3-dimetilbenzen in 1,4-dimetilbenzen in na **sliki 9c** 1,2,3-trimetilbenzen, 1,2,4-trimetilbenzen in 1,3,5-trimetilbenzen.



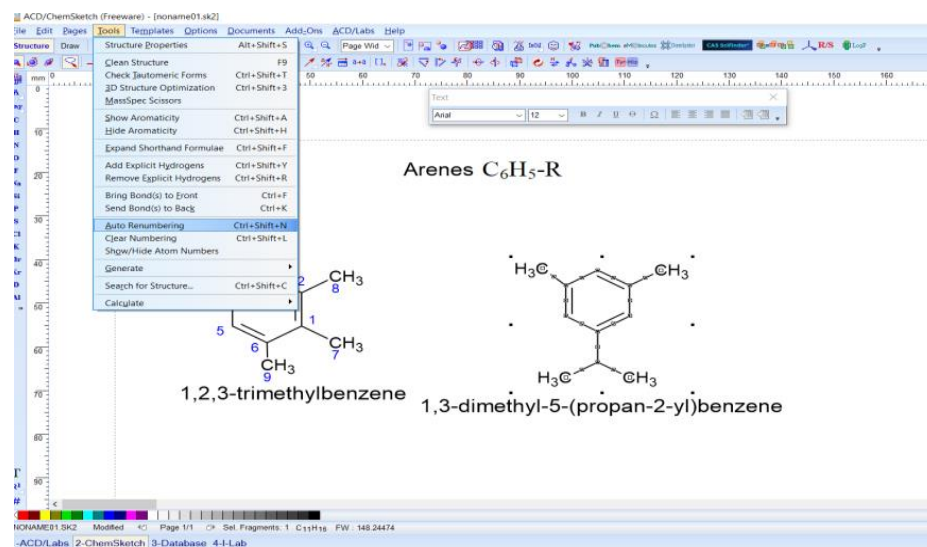
Slika 8: Generiranje imena spojine



Slika 9: a) Generirana imena monosubstituiranih derivatov benzena, b) generirana imena disubstituiranih derivatov benzena in c) generirana imena trisubstituiranih derivatov benzena

KORAK 3

Za oštevilčenje atomov ogljika v strukturi spojine izberite *Tools*, nato *Show/Hide Atom Numbers* (slika 10).

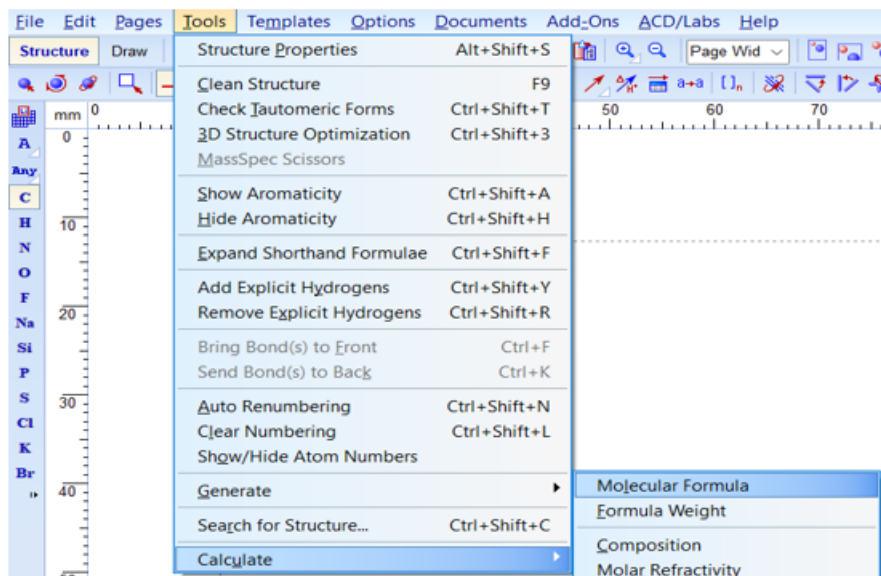


Slika 10: Oštevilčenje ogljikovih atomov v narisani molekuli

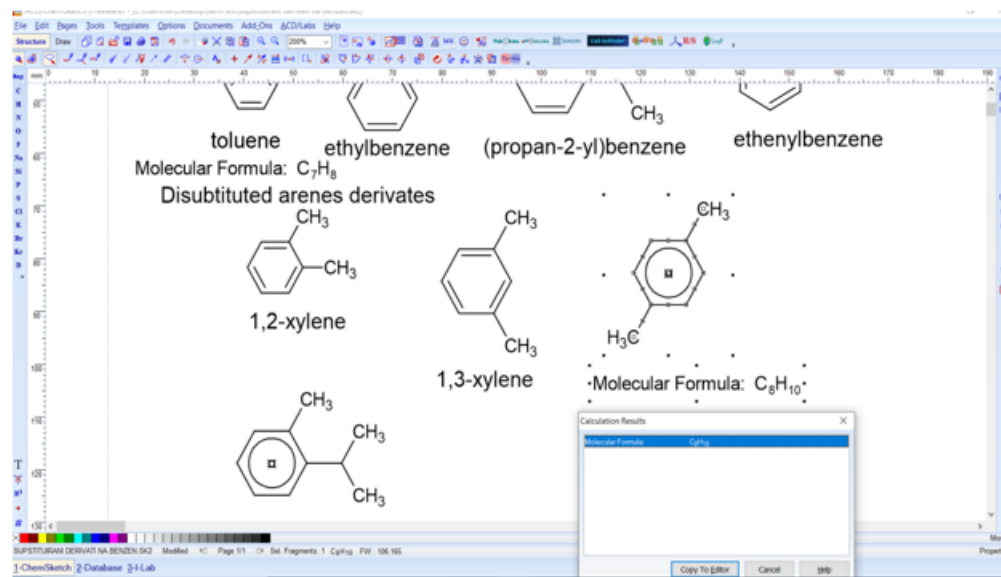
KORAK 4

Označite eno od narisanih struktur in izberite *Tools*, nato *Calculate* in še *Molecular formula*, generirali boste molekulsko formulo izbrane spojine (slika 11 a).

Molekulska formula se prikaže v novem oknu. Za prikaz molekulske formule na risalni površini, kjer sta struktura in ime molekule, izberite *Copy to Editor* (slika 11 b).



a

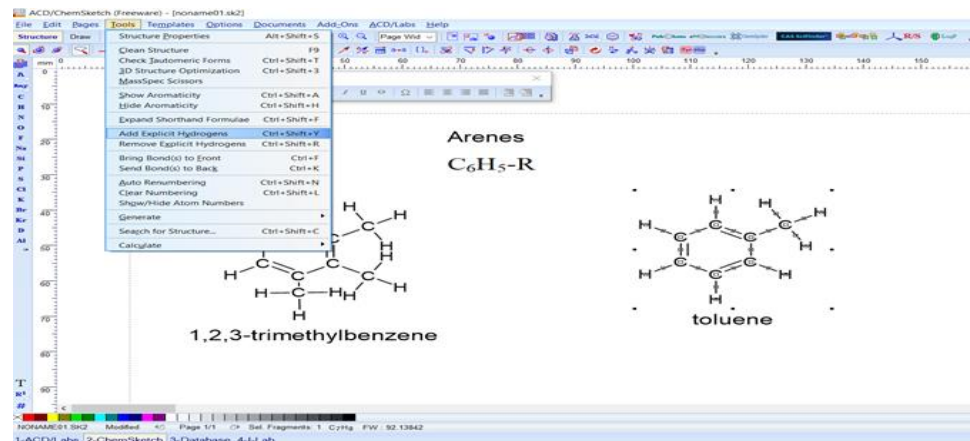


b

Slika 11: a) Zaporedje ukazov za izračun molekulske formule izbrane spojine, b) okno z izračunano molekulsko formulo izbrane spojine

KORAK 5

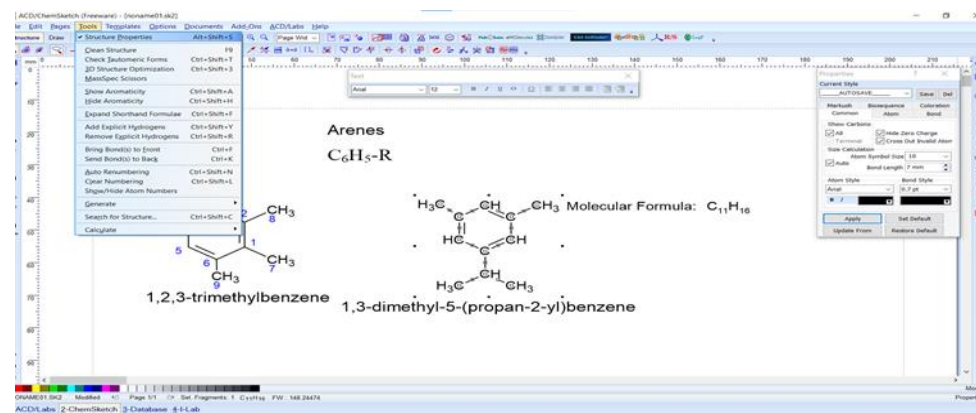
Za prikaz strukture molekule metilbenzena (toluena) izberite *Tools*, nato *Add Explicit Hydrogens*. Sedaj izberite *Clean Structure*, da uredite prikazano strukturo, nato spet izberite *Tools* in kliknite na *Structure Properties*, odpre se novo okno, v razdelku *Show Carbons* izberite ukaz *All* (**slika 12**).



Slika 12: Strukturna formula molekule metilbenzena (toluena)


KORAK 6

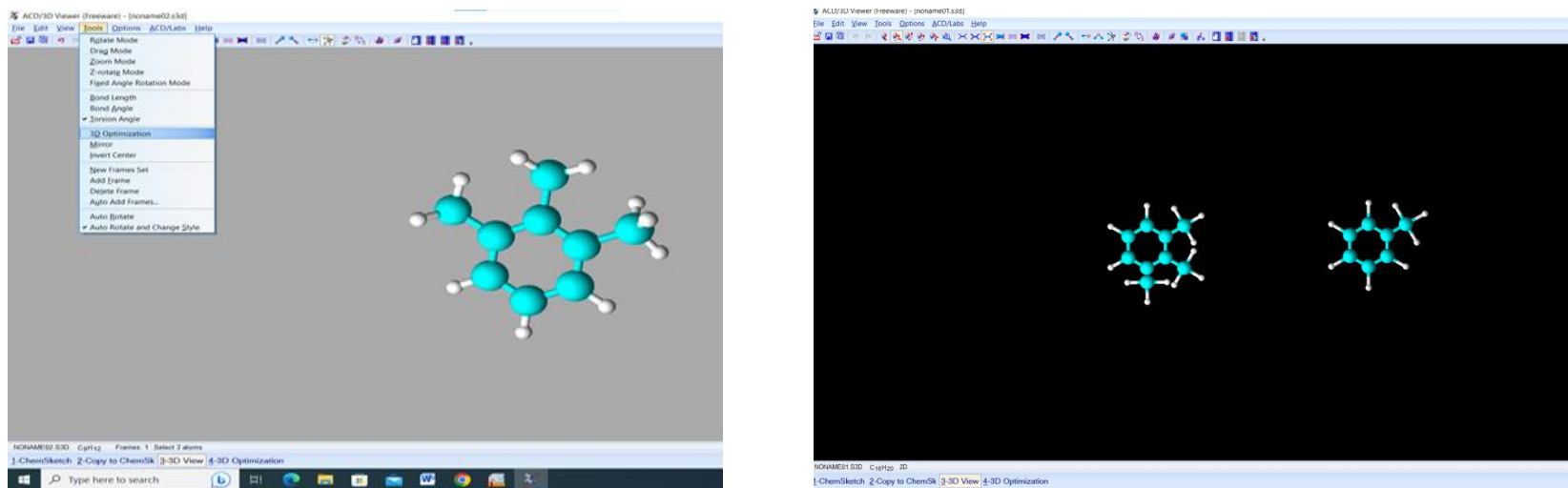
Ponovite opisani postopek prikaza formule molekul na primeru 1,3-dimetil-5-izopropilbenzena (slika 13).



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


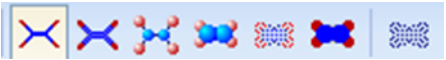

KORAK 7

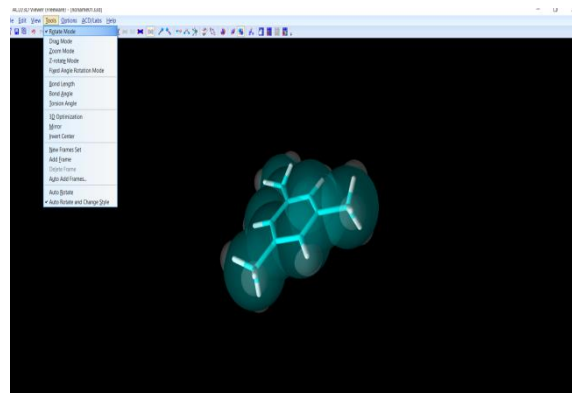
Prikažite strukturne formule metilbenzena in 1,2,3-trimetilbenzen v 3D načinu tako, da označite željene strukture molekul, nato izberete . Odpre se novo okno (*3D Viewer*) s 3D prikazom strukture teh dveh molekul (**slika 14**). Če se postavimo z miško na posamični atom, se pokaže njegova številčna oznaka po IUPAC-ovi nomenklaturi in njegove koordinate.



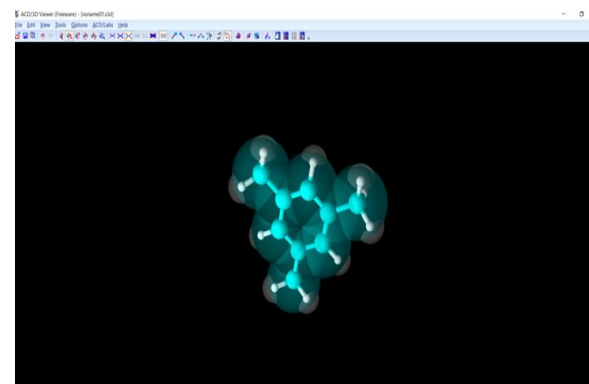
Slika 14: 3D strukture molekul metilbenzena in 1,2,3-trimetilbenzena

KORAK 8

Ponovite postopek prikaza trodimenzionalne strukture molekule na primeru molekule 1,3,5-trimetilbenzena. Uporabite vsako od možnosti obračanja, premikanja in izbire molekul, ki jih ponuja program: , nato prikažite trodimenzionalne strukture molekul na vsakega od načinov in jih najdete v orodni vrstici: . Za samodejno obračanje molekul izberite ikono  (**slika 15 a in b**).



a



b

Slika 15: Prikaz trodimenzionalne strukture molekule 1,3,5-trimetilbenzena s palčkami (a) in s palčkami in kroglicami (b) in prikaz strukture iz dveh različnih kotov kot posledica uporabe opcije vrtenja strukture v prostoru.

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

1. Narišite vse strukturne izomere trimetilbenzena in napišite njihova imena. Izberite eno od narisanih spojin in opravite sledeče naloge:

- a) generirajte ime,
- b) določite molekulsko formulo,
- c) prikažite strukturo z racionalno, skeletno in strukturno formulo,
- č) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju in uporabite vse možnosti prikaza,
- d) določite dolžine vezi in kote med vezmi,
- e) optimizirajte molekulo,
- f) obračajte in premikajte molekulo v 2D in 3D načinu,
- j) shranite 2D in 3D strukturo molekule na namizje računalnika.

2. Raziščite uporabo aromатов v vsakdanjem življenju. Izberite eno molekulo, ki jo boste prikazali v programu ChemSketch. V zvezek zapišite uporabnost izbrane molekule. Shranite optimizirano 2D in 3D strukturo te molekule na računalnik.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti vsebin

1. Narišite vse strukturne izomere ksilena in jih poimenujte. Izberite eno od narisanih spojin in opravite naslednje naloge:

- a) generirajte ime,
- b) določite molekulsko formulo,
- c) prikažite strukturo z racionalno, skeletno in strukturno formulo ,
- č) uredite strukturo molekule z opcijo *Clean Structure*,
- d) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju ,
- e) prikažite strukturo molekule v *3D Viewer*-ju v obliki palčk in kroglic,
- f) optimizirajte molekulo,
- g) shranite 2D in 3D strukturo molekule na namizje računalnika.

LEWISOVE STRUKTURE

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna tema: Lewisove strukture
Učna enota: Risanje Lewisovih struktur
Predvideno število ur: 2

1.1 Teoretični uvod

Lewisove strukturne formule prikazujejo povezovanje atomov v molekuli, pri čemer so valenčni elektroni predstavljeni s pikicami.

Pri risanju preprostih Lewisovih strukturnih formul se uporabljajo naslednja pravila:

1. Določimo skupno število valenčnih elektronov v molekuli ali ionu.
2. Atome razporedimo v ogrodje molekule tako:
 - vodikovi atomi so vedno na koncu, ker se lahko vežejo samo z eno kovalentno vezjo,
 - od preostalih atomov je osrednji atom tisti, ki ima najmanjšo elektronegativnost.
3. Seštejemo valenčne elektrone in delimo z 2. Tako dobimo število elektronskih parov, ki lahko tvorijo vezi. Najprej med atome razporedimo po en elektronski par. Za to povezavo smo uporabili določeno število elektronov, ki jih je potrebno odšteti od skupnega števila valenčnih elektronov. Preostale valenčne elektrone pa je potrebno porazdeliti kot nevezne elektronske pare med zunanje atome, da dobimo oktete.
4. Atomi morajo doseči ustrezno konfiguracijo žlahtnega plina (dublet, oktet).
5. Število veznih elektronskih parov se mora ujemati z valenco (formalni naboj) osrednjega atoma.

V strukturnih formulah vezne elektronske pare prikazujemo s črticami, nevezne pa s pikami.

Teorija odboja valenčnih elektronskih parov (VSEPR) je model, ki se v kemiji uporablja za napovedovanje oblike molekul na podlagi števila elektronskih parov na centralnem atomu in za napovedovanje razporeditve elektronskih parov okoli osrednjih atomov v molekulah, zlasti v preprostih in simetričnih molekulah.

Centralni atom je v tej teoriji opredeljen kot atom, ki je vezan na dva ali več drugih atomov, medtem ko je končni (terminalni) atom vezan le na en drug atom.

1.2 Učni cilji

V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- prikazati atome, molekule in ione z uporabo Lewisovih struktur,
- razložiti prostorsko razporeditev delcev v molekulah spojin z uporabo teorije odboja valenčnih elektronskih parov VSEPR,
- izračunati vezni kot med dvema atomoma v narisani molekuli,
- prenesti narisane molekule ali ione v 3D in ob modelu izboljšati vizualizacijo,
- vizualizirati 3D strukture kompleksnejših ionov z uporabo predlog, ki so na voljo v programu ChemSketch.

1.3 Navodilo za uporabo programske opreme ChemSketch

Primer 1

Risanje Lewisove strukture molekule vode (H_2O).

KORAK 1

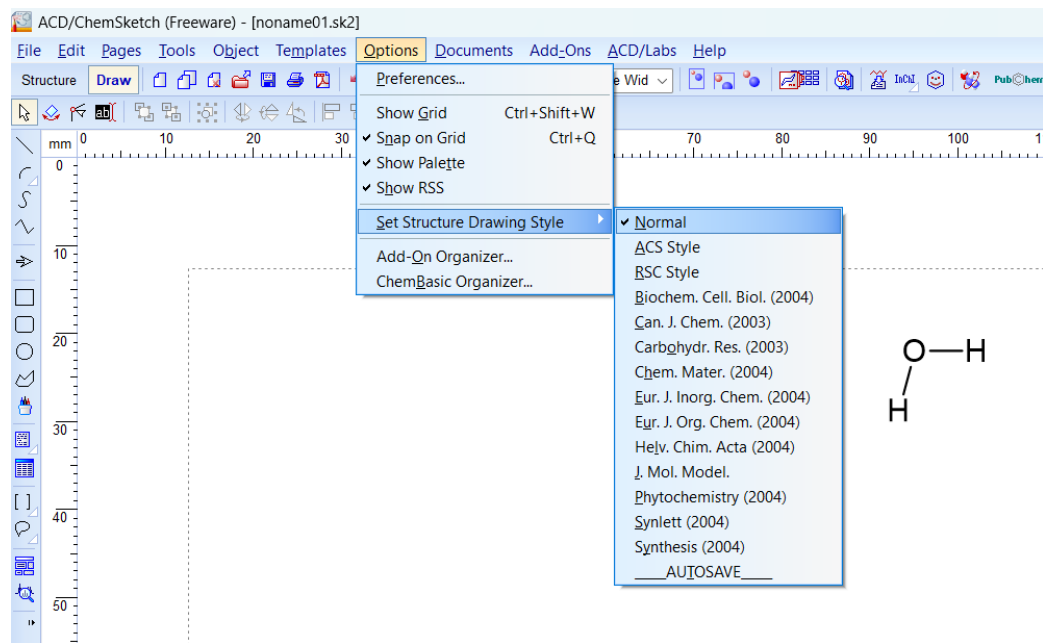
Iz nabora *Periodic Table of Elements*, ki se nahaja v orodni vrstici na levi strani ekrana, izberite kisikov atom in nato kliknite na prazno risalno površino. Pojavi se molekulska formula vode.

KORAK 2

Označite molekulsko formulo in kliknite na *Tools* in *3D Structure Optimisation*. Pojavi se strukturna formula vode.

KORAK 3

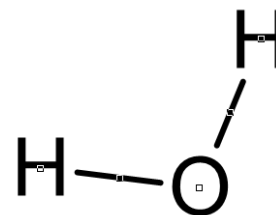
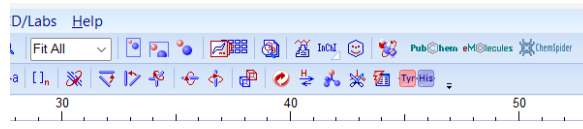
Ponovno označite strukturo narisane molekule, kliknite *Options*, nato v spustnem meniju izberite *Set Structure Drawing* in kliknite *Normal*. Postopek je prikazan na **sliki 1**.



Slika 1: Optimizacija narisane strukture

KORAK 4

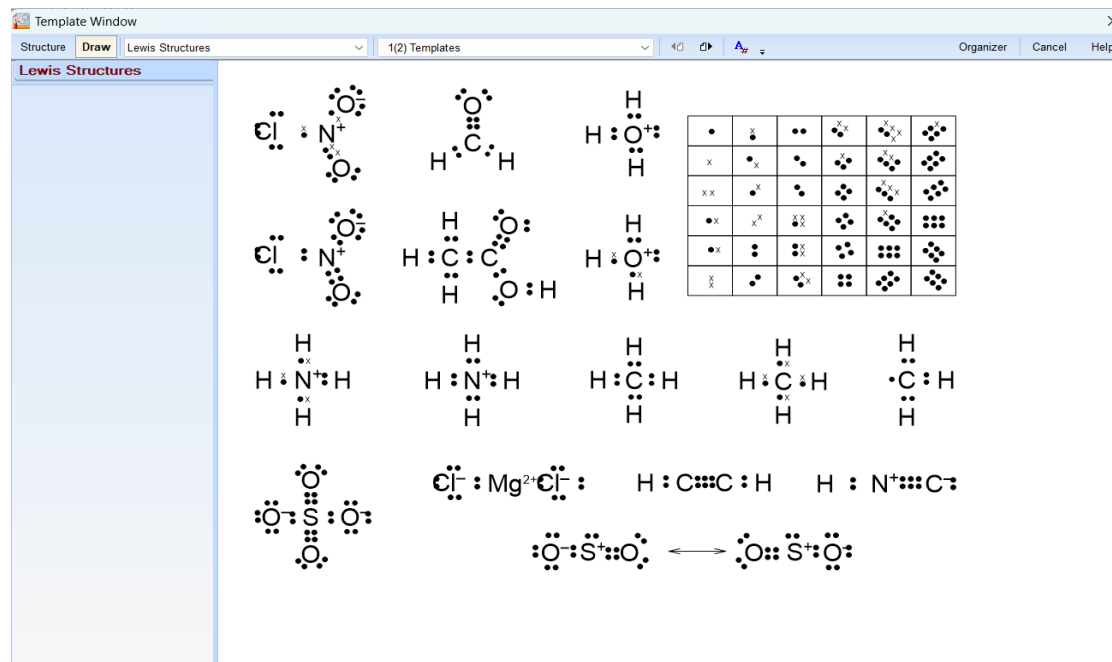
Uporabite funkcijo *Fit all*, da povečate sliko. Tako bolj vidite narisano strukturno formulo (**slika 2**).



Slika 2: Prilagoditev velikosti molekule

KORAK 5

Za risanje Lewisove strukturne formule molekule vode, kliknite na *Templates*, nato na *Template window*, pojavi se okno s pikami, ki predstavljajo valenčne elektrone. Opisani postopek je prikazan na **sliki 3**.



Slika 3: Okno s predlogami za dodajanje valenčnih elektronov.

KORAK 6

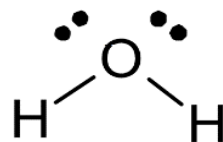
V zgornjem desnem oknu izberete določen način prikaza Lewisovih pik in kliknete poleg atoma, pri katerem jih želite prikazati.

KORAK 7

Če izberete *Selection option*, lahko odstranite dodane Lewisove pike, če izberete *Rotation option*, pa jih lahko obračate.

KORAK 8

Po opisanih korakih ste narisali Lewisovo strukturo molekule vode (**slika 4**).

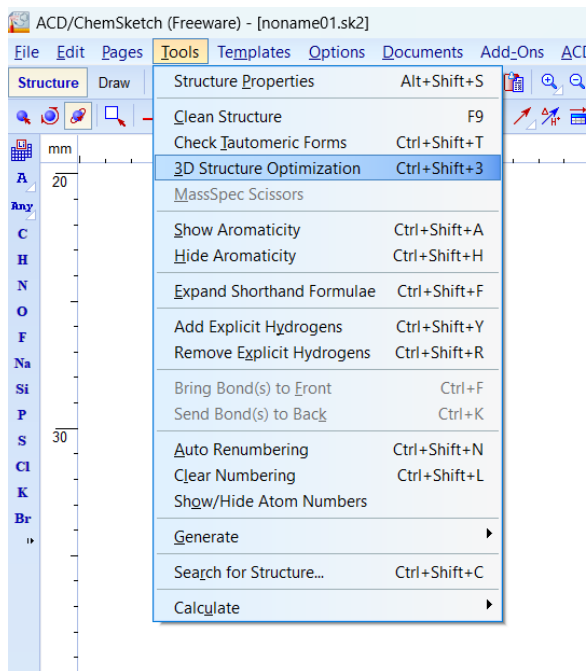


Slika 4: Lewisova struktura molekule vode

KORAK 9

Za prikaz 3D strukture molekule vode najprej ponovite **KORAKE 1- 4**.

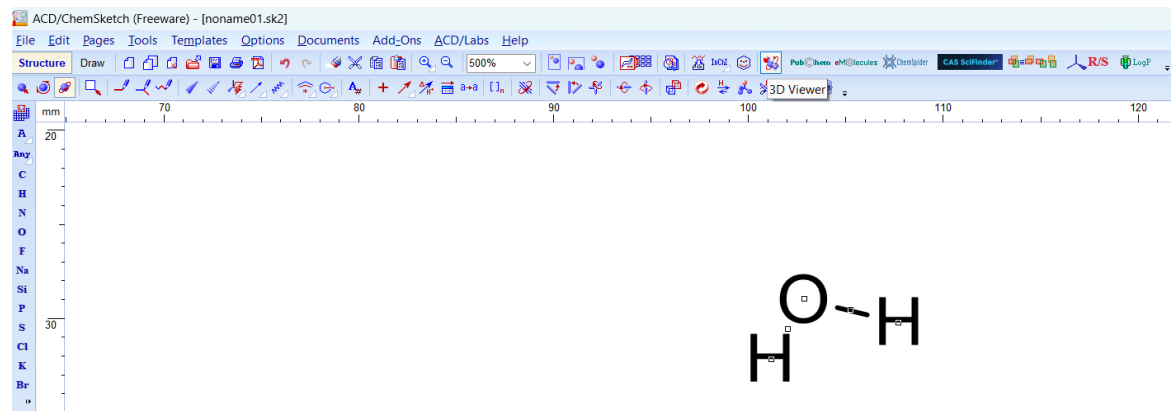
Nato označite narisano molekulo in kliknite *Tools*, zatem pa *3D Structure Optimization*. Opisani postopek je prikazan na **sliki 5**.



Slika 5: 3D optimizacija narisane strukture

KORAK 10

Sedaj v zgornji orodni vrstici izberite *3D Viewer*. Odpre se novo okno s 3D strukturo molekule. Opisani postopek je prikazan na **sliki 6**.



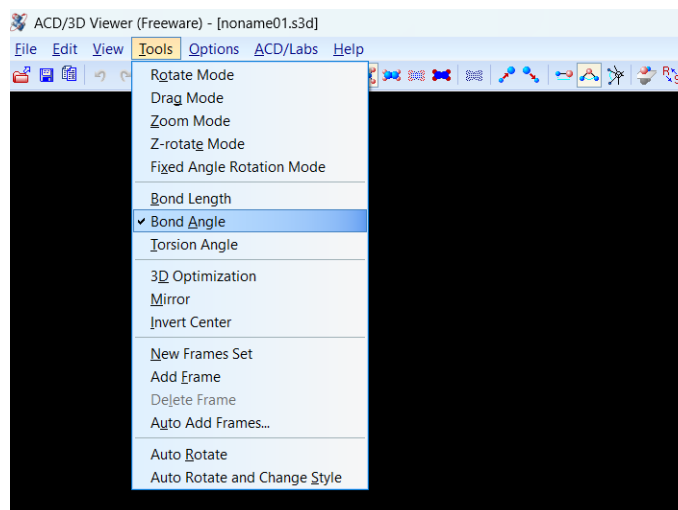
Slika 6: Pretvarjanje strukture v 3D prikaz

KORAK 11

V pogledu 3D lahko molekulo obračamo in preučujemo prostorsko razporeditev atomov.

KORAK 12

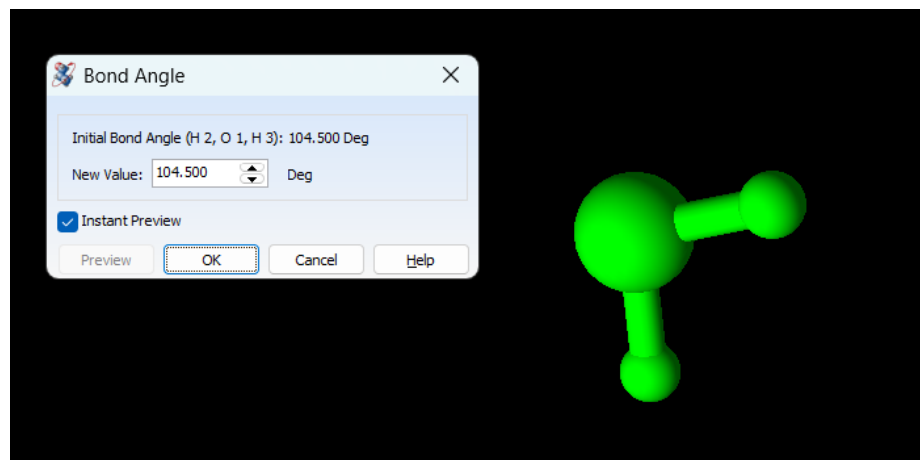
Za izračun kota med vezmi izberite opcijo *Bond Angle* kot prikazuje **slika 7**.



Slika 7: Izračun kota med dvema kovalentnima vezema v molekuli vode

KORAK 13

Sedaj kliknite na atom vodika (ki se ob kliku obarva zeleno), nato na atom kisika in nazadnje na drugi atom vodika. Odpre se okno, v katerem je prikazan kot v molekuli vode.



Slika 8: Kot med vezmi

KORAK 14

Za določitev oblike molekule je potrebno poznati VSEPR teorijo.

Na enak način, kot je opisano pri molekuli vode, lahko v učnem procesu prikažemo tudi molekuli metana in amonijaka. Potrebno je slediti korakom, ki so razloženi pri predstavitvi risanja Lewisove strukturne formule vode.

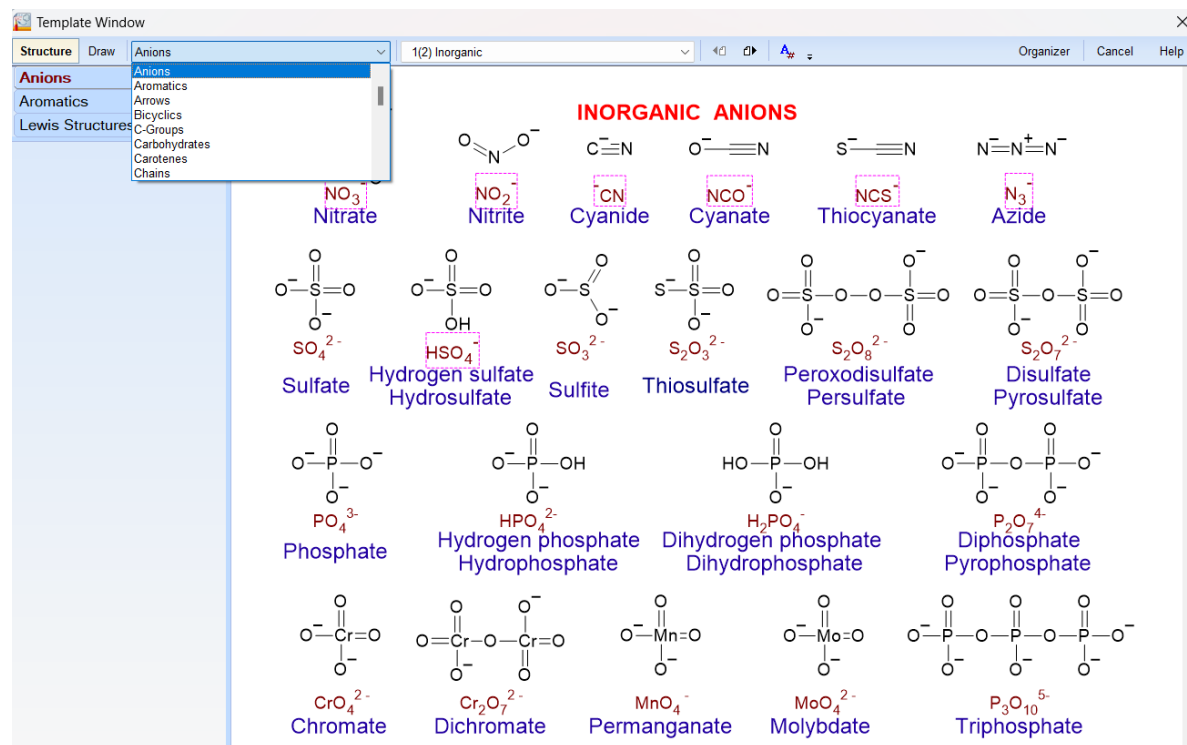
Molekulo amonijaka lahko predstavite tako, da v levi orodni vrstici, na kateri so atomi posameznih elementov, izberete atom dušika, molekulo metana pa tako, da izberete atom ogljika. S klikom na prazno risalno površino se prikaže molekulska formula spojine, po zgornjih korakih za prikaz strukturne formule vode pa lahko prikažemo Lewisovo strukturno formulo teh spojin in njuno 3D strukturo.

Primer 2

Risanje Lewisove strukture SULFATNEGA ANIONA.

KORAK 1

V zgornji orodni vrstici kliknite na *Template* in izberite *Template Window*. Odpre se okno, v katerem izberite *Anions* in *Inorganic*. Postopek je prikazan na **sliki 9**.



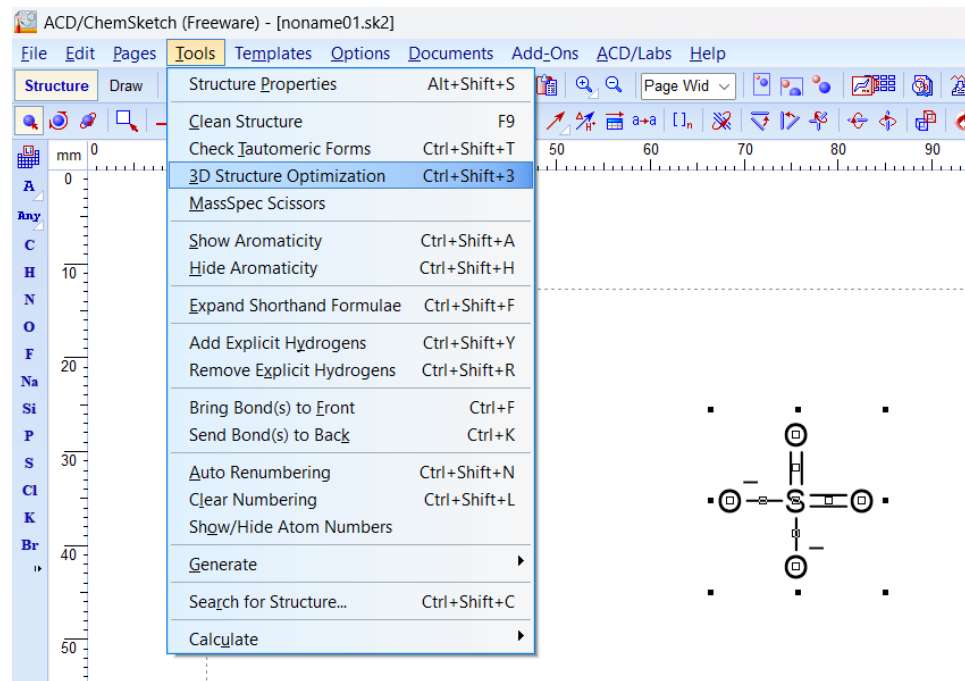
Slika 9: Okno s predlogami anorganskih anionov

KORAK 2

Izberite želeni anion – sulfatni ion. Kliknite na izbrani anion (okno se zapre), sedaj kliknite na izbrani anion na risalni površini.

KORAK 3

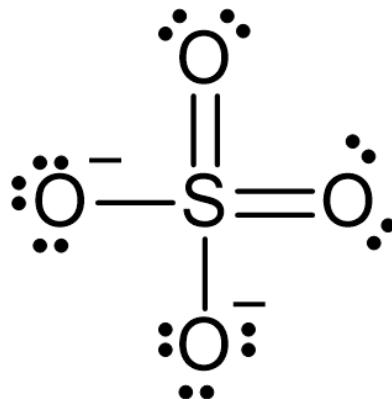
Označite narisani anion in kliknite *Tools*, nato *3D Structure Optimization*. Postopek je prikazan na **sliki 10**.



Slika 10: Risanje anorganskih anionov

KORAK 4

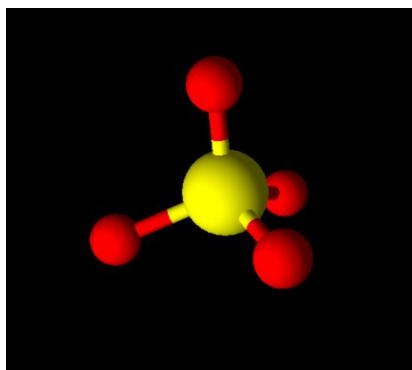
Na **sliki 11** je prikazana Lewisova strukturna formula sulfatnega iona, ki jo narišete po korakih, ki so opisani pri molekuli vode.



Slika 11: Lewisova strukturna formula sulfatnega aniona

KORAK 5

Za prikaz 3D modela kliknite na *3D viewer*, ki se nahaja v zgornji orodni vrstici. Model, ki je prikazan na **sliki 12**, lahko obračate in preučujete prostorsko razporeditev.



Slika 12: 3D struktura sulfatnega aniona

KORAK 6

Predstavljeni molekuli lahko določimo kot med vezmi, s poznavanjem teorije VSEPR pa lahko določimo njeno obliko.

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

1. Narišite Lewisovi strukturi ogljikovega(IV) oksida in žveplovega(IV) oksida.

- Prikažite 3D strukturo narisanih molekul.
- Določite kote med vezmi.
- Določite obliko molekule z uporabo VSEPR teorije.

2. Narišite Lewisovi strukturi sulfatnega(IV) in nitratnega(III) iona.

- Prikažite 3D strukturo narisanih ionov.
- Določite kote med vezmi.
- Določite obliko molekule z uporabo VSEPR teorije.

3. S pomočjo virov izberite eno molekulo, ki je pomembna v vsakdanjem življenju. Narišite molekulo z uporabo programa ChemSketch in jo prikažite z Lewisovo strukturo formulo. Predstavite 3D strukturo izbrane molekule.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti vsebin

1. Narišite Lewisovo strukturo žveplove kisline.

- Prikažite 3D strukturo narisane molekule.
- Določite kot med vezmi.
- Določite obliko molekule z uporabo VSEPR teorije.

KIRALNOST IN OPTIČNA AKTIVNOST

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna tema: Kiralnost in optična aktivnost
Učna enota: Kiralnost in optična aktivnost
Predvideno število ur: 2

1.1 Teoretični uvod

Stereoizomerija je pojav, ko imajo molekule enako molekulsko formulo in enake strukturne dele, ki pa so prostorsko različno razporejeni. Optična aktivnost je značilna za nekatere anorganske spojine, predvsem kompleksne spojine, najpogosteje pa se pojavlja pri organskih spojinah. Osnovni pogoj, da je spojina optično aktivna je, da vsebuje ogljikov atom, na katerega so vezani štirje različni atomi ali atomske skupine. Takemu ogljikovemu atomu pravimo asimetrični ogljikov atom ali kiralni ogljikov atom ali stereogeni ogljikov atom. Označujemo ga z zvezdico. Beseda kiralnost izhaja iz grške besede za roko, saj gre za to, da sta optična izomera zrcalni sliki, tako kot sta zrcalni sliki leva in desna roka. Optična izomera imenujemo enantiomera. Število optičnih izomerov neke spojine izračunamo po formuli 2^n , kjer je n število kiralnih ogljikovih atomov. Enantiomera se razlikujeta v tem, da eden suče linearno polarizirano svetlobo v desno, drugi pa za enak kot v levo stran. Ime optična izomerija izhaja iz te lastnosti – optične aktivnosti enantiomerov. Če je v zmesi prisotna polovica vsakega od enantiomerov, se ta zmes imenuje racemna zmes oz. racemat.

Enantiomere označujemo na različne načine:

- enantiomeri, ki obrnejo ravnino polarizirane svetlobe v desno, se imenujejo desnosučni in so označeni z znakom +,
- enantiomeri, ki obrnejo ravnino polarizirane svetlobe v levo, se imenujejo levosučni in so označeni z znakom -,
- pri ogljikovih hidratih se uporablja L/D (levo/desno) označevanje, pri katerem je osnovni standard za označevanje gliceraldehid,
- pri aminokislinah se uporablja L/D označevanje, pri katerem je osnovni standard alanin,
- R/S sistem označevanja je splošni način, ki izhaja iz latinskih besed rectus=desni in sinister=levi; pri tem načinu vsak kiralni ogljikov atom označimo posebej.

1.2 Učni cilji

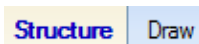
V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- opisati pojme: kiralnost, optična aktivnosti, enantiomera,
- prepoznati kiralne spojine na osnovi njihove strukturne formule,
- narisati strukture in skeletne formule različnih optično aktivnih spojin,
- generirati imena narisanih spojine ChemSketch-u,
- generirati molekulsko formula spojine,
- optimizirati strukture spojin s pomočjo ukaza *Clean structure*,
- narisati optične izomere,
- označiti kiralne centre,
- pokazati strukture optično aktivnih snovi v treh dimenzijah,
- ustvariti 3D modele narisanih spojin,
- preučevati strukture optično aktivnih spojin iz različnih kotov,
- obračati in premikati narisane spojine,
- določiti dolžine vezi in kote med vezmi v optično aktivnih spojinah,
- shraniti narisane strukture na računalnik in Google Drive.

1.3 Navodilo za uporabo programske opreme ChemSketch


KORAK 1

V orodni vrstici izberite način *Structure*



in nato ikono *Draw Normal*  (način Draw Normal je nastavljen kot privzeta možnost).

KORAK 2


Izberite ogljikov atom  na *atom toolbar* (tudi ta je nastavljen kot privzeta možnost).

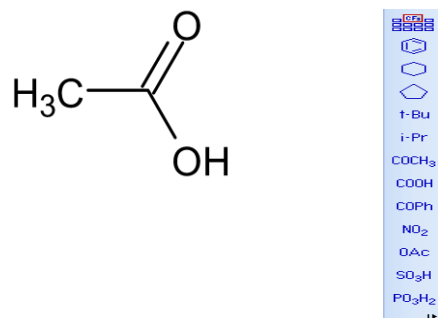
S klikom na prazno delovno površino boste narisali CH₄ (**slika 1**).



Slika 1: Izbira atoma

KORAK 3

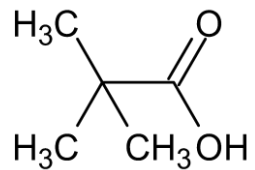
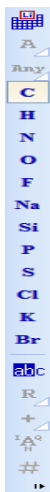
Iz tabele *Table of Radicals* , ki se nahaja v orodni vrstici na desni strani ekrana, izberite karboksilno skupino -COOH in jo povežite z metanom (**slika 2**).



Slika 2: Izbira substituent

KORAK 4

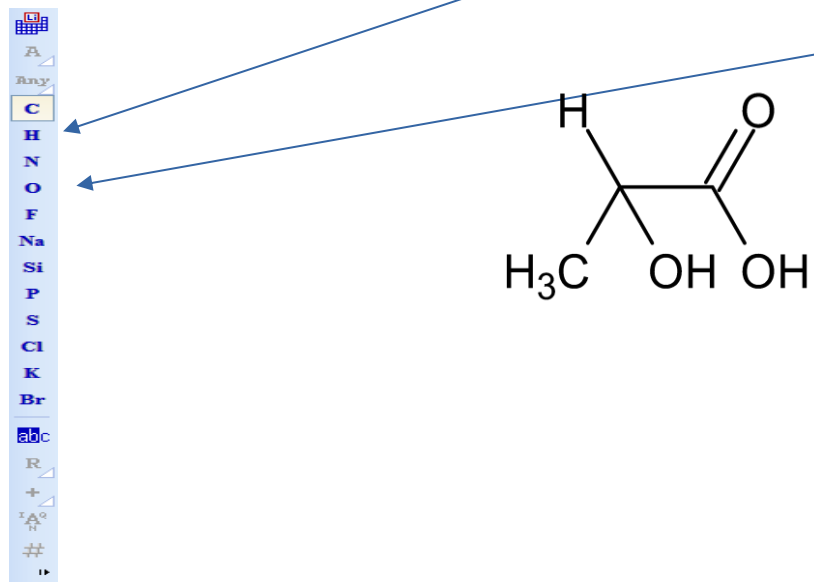
V orodni vrstici *atom toolbar* izberite **C** in dodajte tri CH₃ skupine na prvi ogljikov atom iz leve strani (**slika 3**).



Slika 3: Dodajanje substituent

KORAK 5


V orodni vrstici *atom toolbar*, izberite H in nadomestite eno CH₃ skupino z vodikom, nato izberite O in nadomestite drugo CH₃ skupino z OH skupino (**slika 4**).

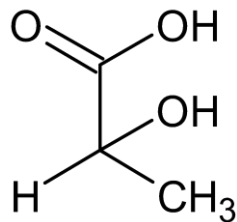


Slika 4: Dodajanje substituent

KORAK 6

Uporabite ukaz *Select/Move* , da označite formulo (kliknite znotraj označenega področja), nato preklopite v način *Draw* **Structure** **Draw** in izberite ikono

 *Rotate 90°* (struktura se obrne za 90°) (**slika 5**).




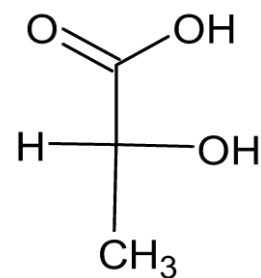
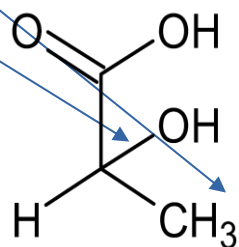
Slika 5: Obračanje formule

KORAK 7

V orodni vrstici izberite ukaz *Structure*

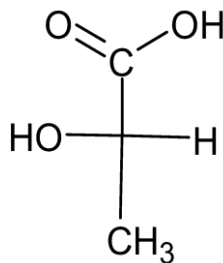
Structure Draw

Zaporedno kliknite na OH, H in CH₃ (izbran mora biti ukaz *Select/Move* ) in premaknite skupine na zeleno mesto (**slika 6**). Narisali ste D-mlečno kislino (D-2-hidroksipropanojsko kislino).




Slika 6: Prilaganje strukture

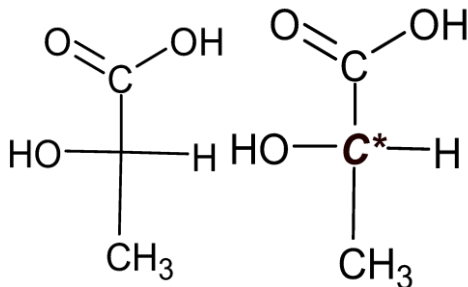
Enantiomere so označene glede na orientacijo značilne skupine (hidroksilna) glede na asimetrični ogljikov atom (**slika 7**). Narisali ste L-mlečno kislino (L-2-hidroksipropanojsko kislino).



Slika 7: Označevanje enantiomer


KORAK 8

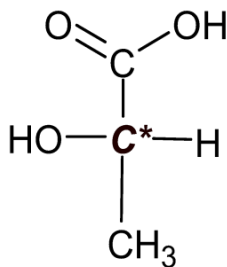
Izberite *Menu Tools – Generate – Name for Structure* (ali kliknite na ikono  v glavni orodni vrstici) – ustvarilo se bo angleško ime spojine po IUPAC-ovi nomenklaturi (**slika 8**) - (2-hydroxypropanoic acid).



Slika 8: Poimenovanje strukture

KORAK 9

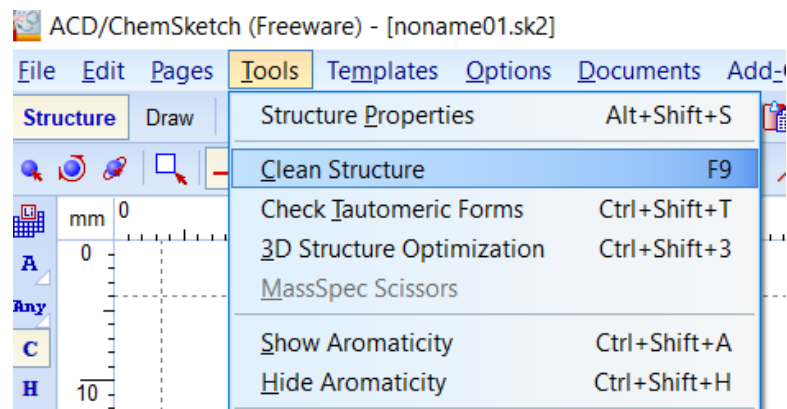
Za označitev kiralnega centra, v orodni vrstici izberite ikono *Edit Atom Label* , kliknite na kiralni center (ogljik), pojavi se okno *Edit Label*, izberite ali napišite C* ter kliknite *Insert* (**slika 9**).



Slika 9: Določitev asimetričnega ogljikovega atoma



KORAK 10

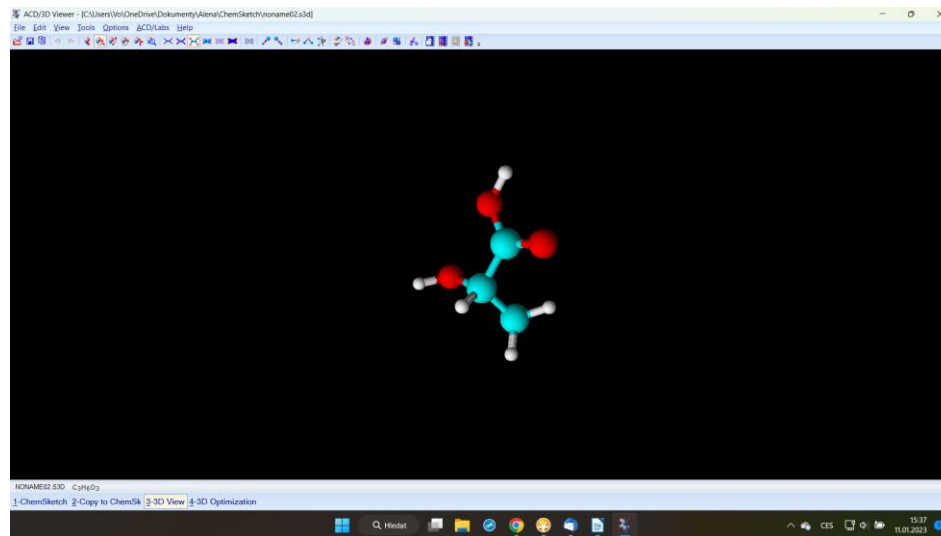
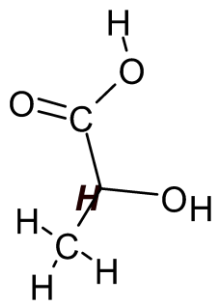
Funkcija *Clean structure* omogoča optimiziranje (popravi izgled) narisane strukture.



Slika 10: Optimizacija strukture

KORAK 11

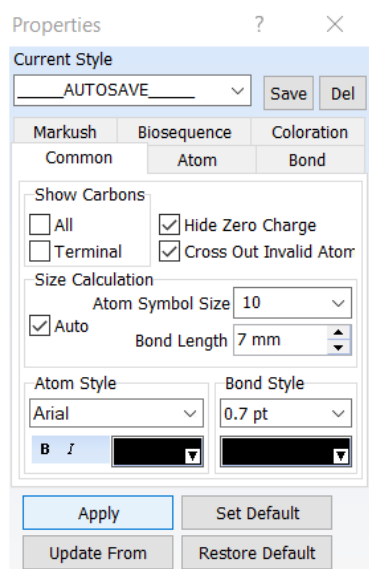
Ukaz *3D Viewer* omogoča prikaz narisane strukture v 3D načinu. Ukaz aktivirate v zgornji orodni vrstici. V spodnjem levem kotu ekrana se pokažeta gumba, ki omogočata preklapljanje med *ChemSketch* in *3D Viewer*. Izberite narisano strukturo in jo optimizirajte za predstavitev v 3D načinu z uporabo ukaza *3D Optimization*: . Izberite optimizirano strukturo in uporabite ukaz *3D Viewer* , ki se nahaja v zgornji orodni vrstici, struktura se bo prikazala v 3D pogledu (**sliki 10 in 11**).



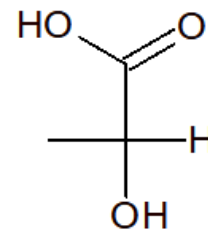
Slika 11: Prikaz strukture v 3D načinu

KORAK 12

V narisani formuli lahko skrijete ali pokažete vse atome - ustvarite popolno ali poenostavljeno strukturno formulo. V orodni vrstici izberite *Tools - Structure Properties* (kot je prikazano na **sliki 12 a**). Če se želite vrniti v prvotno formulo, kliknite možnost *All option* in ikono *Apply*.



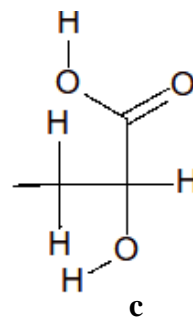
a



b

Slika 12: a) Trenutni stil , b) poenostavljena strukturna formula

Za prikaz vseh vodikovih atomov v molekuli, v zgornji orodni vrstici izberite *Tools* in nato *Add Explicit Hydrogens*, kot je prikazano na **sliki 12 c**. Za povrnitev v prvotno stanje kliknite na *Tools* in *Remove Explicit Hydrogens*.















c

Slika 12: c) Popolna strukturna formula



KORAK 13

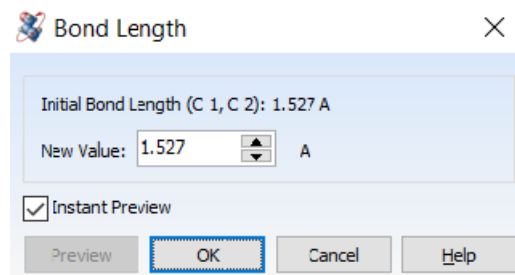
Preizkusite različne možnosti prikaza molekule v 3D načinu.

Kliknite na ikono *3D Viewer* . S kliki na ikone       lahko prikazete strukturo na različne načine, ki jih nudi program. S klikom na ikono  se molekula samodejno obrača, s kliki na ikone    pa preizkusite še druge načine vrtenja in premikanja narisane strukture. Za avtomatsko kontinuirano izmenjavo iz enega v drugi način prikaza molekule ob obračanju, kliknite na ikono .



KORAK 14

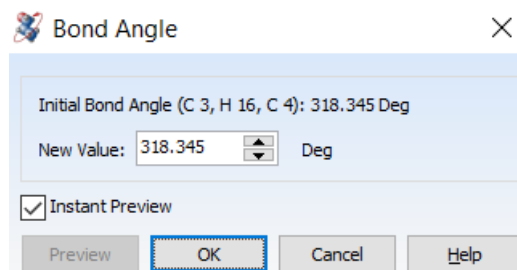
Določanje dolžine vezi in kota med vezmi

Določanje dolžine vezi: kliknite na ikono *3D Viewer* , nato na ikono  sedaj kliknite na atoma, med katerima želite določiti dolžino vezi - v novem pogovornem oknu se pokaže dolžina izbrane vezi (**slika 13**).



Slika 13: Dolžina vezi

Določitev kota med vezmi. Kliknite na ikono *3D Viewer* , nato na ikono  sedaj kliknite na atoma med katerima želite določiti kot – v novem pogovornem oknu se pokaže kot med vezmi (**slika 14**).



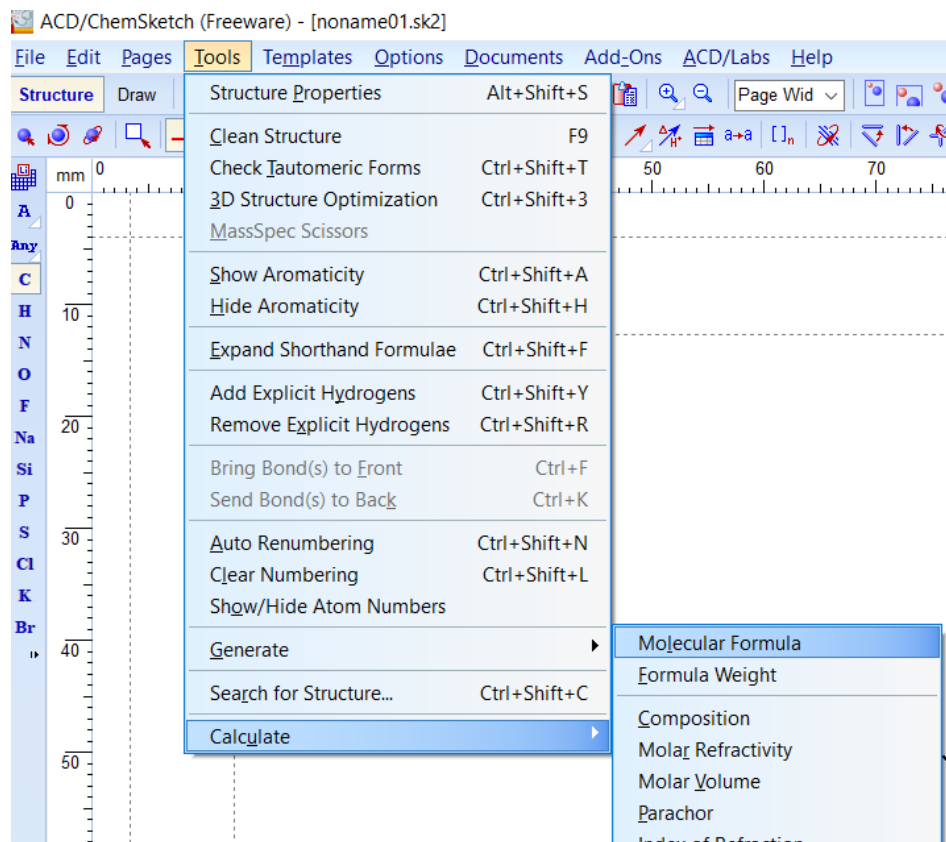
Slika 14: Kot med vezmi

KORAK 15

Določanje molekulske formule in ostalih lastnosti spojine.

Izberite *Tools - Calculate - Molecular Formula*.

Če želite prikazati molekulske formule na novem listu s strukturo in imenom narisane molekule, kliknite *Copy to Editor*. V meniju lahko izberete tudi druge elemente - molekulske mase... (**slika 15**).



Molecular Formula: $C_3H_6O_3$

Formula Weight: 90.07794

Slika 15: Generiranje molekulske formule

KORAK 16

Shranite narisano strukturo na računalnik in na Google Drive.

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

1. Poiščite informacije o optično aktivnih spojinah, ki se pojavljajo v naravi, o njihovem pomenu v presnovi in njihovi uporabi v vsakdanjem življenju.
2. Drugi optični izomer mlečne kisline narišite po prej opisanih navodilih.

Določite:

- ime spojine,
- molekulsko formulo,
- narišite popolno in poenostavljeno formulo spojine,
- optimizirajte spojino z uporabo “*clean structure*”,
- predstavite spojino v 3D načinu,
- obračajte strukturo in jo prikažite iz različnih kotov,
- določite dolžino vezi med prvim in drugim atomom ogljika,
- določite kot med prvim in drugim ogljikovim atomom.

3. Poiščite informacije o aminokislinah, ki gradijo beljakovine in prikažite njihovo strukturo.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti učnih vsebin

Narišite strukturo L- in D- serina in določite:

- ime spojine,
- molekulsko formulo,
- narišite popolno in poenostavljeno formulo spojine,
- optimizirajte spojino z uporabo *Clean structure*,
- predstavite spojino v 3D načinu,
- obračajte spojino in prikažite njeno strukturo iz različnih kotov,
- določite dolžino vezi med prvim in drugim atomom ogljika,
- določite kot med prvim in drugim ogljikovim atomom.

ALKOHOLI

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna enota: Organske kisikove spojine
Učna tema: Alkoholi
Predvideno število učnih ur: 2

1.1 Teoretični uvod

Alkoholi so organske spojine, ki imajo na ogljikov atom vezano hidroksilno funkcionalno skupino (-OH).

Razvrščamo jih lahko po različnih kriterijih, na primer:

- glede na vrsto verige ali obroča na katerega je vezana hidroksilna skupina razlikujemo alifatske alkohole, ciklične in fenole (»aromske alkohole«);
- glede na vrsto ogljikovega atoma na katerega je vezana hidroksilna skupina poznamo primarne, sekundarne in terciarne alkohole;
- glede na število vezanih hidroksilnih skupin v strukturi alkohola poznamo npr. diole, triole, poliole.

Alkohole lahko pripravimo na različne načine. Najstarejši proces je alkoholno vrenje. Pripravimo jih lahko še iz alkenov (adicija vode), halogenoalkanov (nukleofilna substitucija), aldehydov (redukcija).

Po IUPACovi nomenklaturi alkohole poimenujemo tako, da poimenujemo najdaljšo verigo ogljikovih atomov in dodamo končnico – OL. Če sta v molekuli dve hidroksilni skupini, to označimo z grškim številkom pred končnico -diol, če ima tri hidroksilne skupine, je -triol (primeri: $\text{CH}_2(\text{OH})-\text{CH}_2(\text{OH})$ etan-1,2-diol (glikol); $\text{CH}_2(\text{OH})-\text{CH}(\text{OH})-\text{CH}_2(\text{OH})$ propan-1,2,3-triol (glicerol)...

Ogljikove atome v verigi oštevilčimo tako, da dobi ogljikov atom na katerega je vezana hidroksilna skupina najmanjšo številko. V primeru hkratne prisotnosti funkcionalne skupine z višjo prioriteto, se hidroksilna skupina imenuje v predponi imena, npr. 2-hidroksipropanojska kislina.

Zaradi raznolikosti in svojih lastnosti so alkoholi velika in pomembna skupina organskih kisikovih spojin. Najpomembnejši predstavniki alkoholov so metanol, etanol, glikol in glicerol.

Ime alkohola	Metanol	Etanol	Propanol	Butanol	Etan-1,2-diol (glikol)	Propan-1,2,3-triol (glicerol)	Benzil 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. Učni cilji

V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- narisati različne primere molekul alkoholov in jih prikazati s strukturno, racionalno in skeletno formulo,
- generirati ime predhodno narisanih molekul alkoholov v programu ChemSketch,
- uporabljati opcijo zapisovanja molekulske formule predhodno narisanih molekul alkoholov v programu ChemSketch,
- izboljšati prikaz strukture molekul (prilagoditev dolžine vezi in kotov med vezmi) z uporabo opcije "Clean Structure",
- narisati strukturne izomere alkoholov,
- prikazati strukture alkoholov v treh dimenzijah,
- obračati molekule alkoholov v dveh in treh dimenzijah,
- menjavati način prikazovanja struktur molekul alkoholov v treh dimenzijah,
- premikati molekule alkoholov v 3D in 2D,
- optimizirati strukture molekul alkoholov,
- shraniti na računalnik dvodimenzionalno in tridimenzionalno strukturo željene molekule alkohola.





1.3 Navodilo za uporabo programske opreme ChemSketch

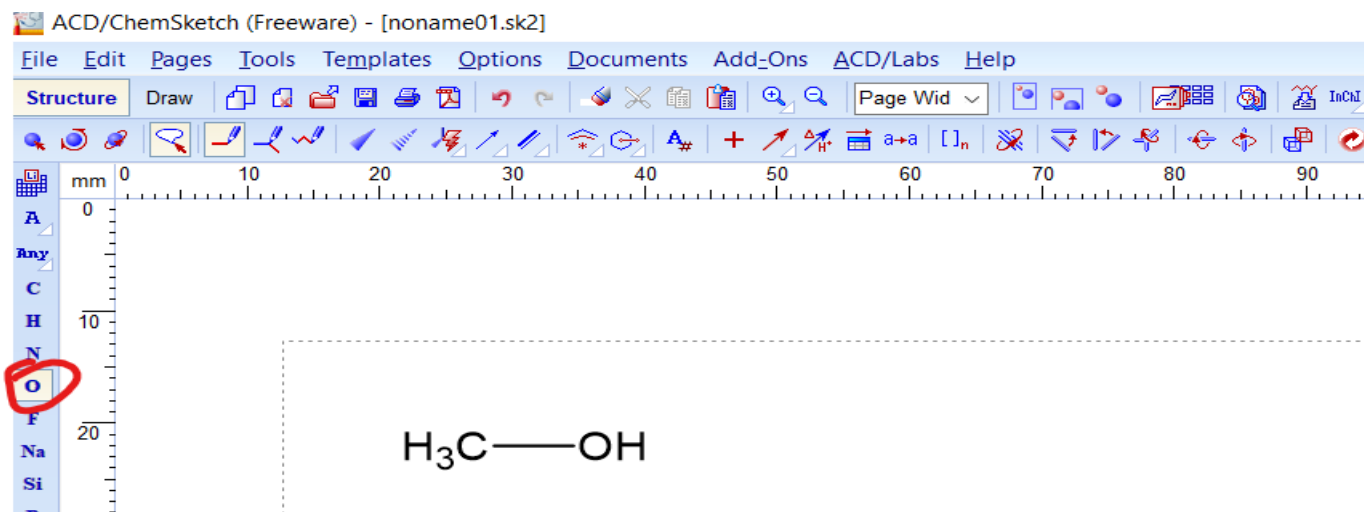
Risanje različnih alkoholov:

Primer 1.

Narišite primere monohidroksi, dihidroksi in trihidroksi alkoholov.

KORAK 1

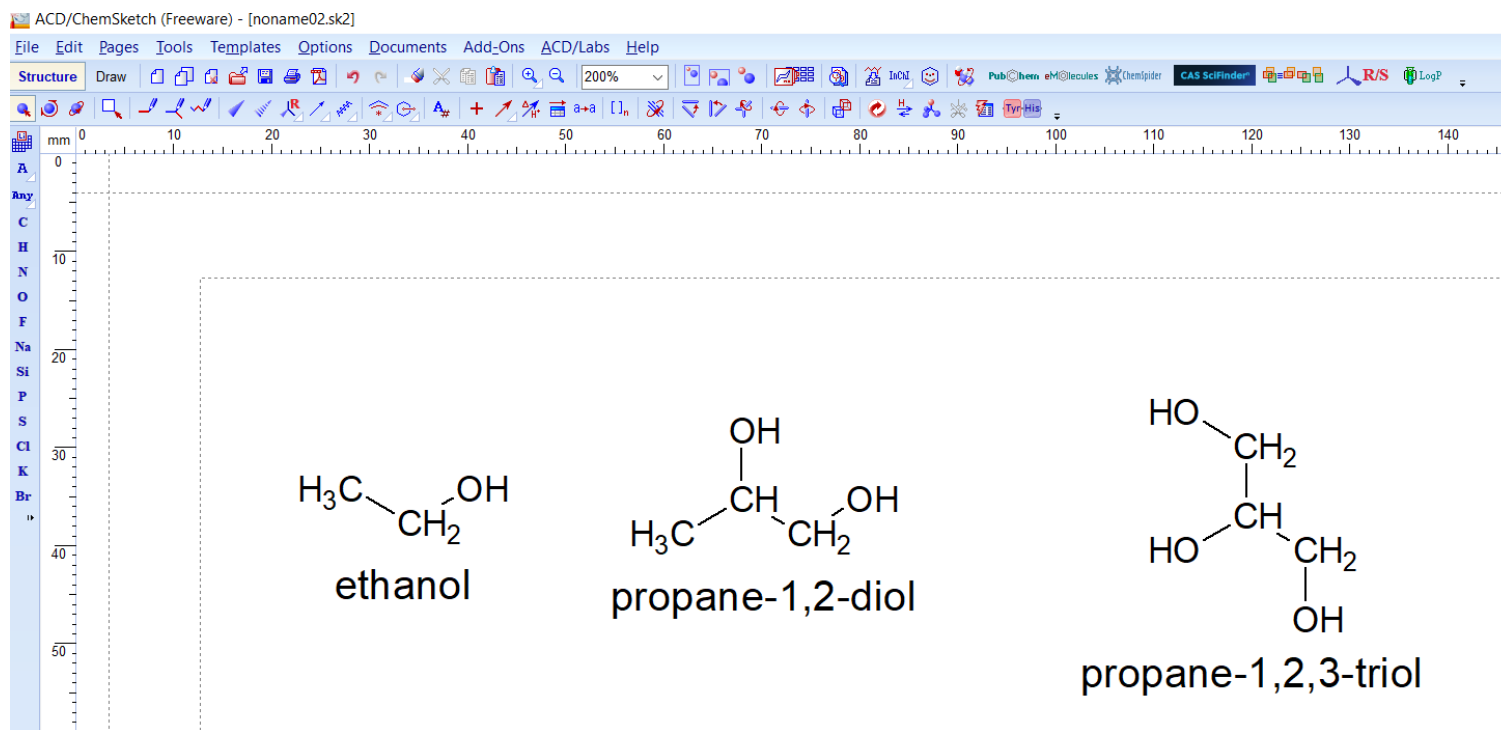
Monohidroksi, dihidroksi in trihidroksi alkohole lahko narišete z izbiro  v orodni vrstici za atome. V orodni vrstici sedaj izberete *Structure* in *Draw Normal* . Kliknite na delovni prostor, pri čemer se bo pojavil CH₄. S klikom na CH₄ in potegom v desno boste oblikovali verigo dveh ogljikovih atomov CH₃ - CH₃. Da narišete metanol kot primer monohidroksi alkohola, morate dodati -OH skupino, tako da v orodni vrstici z atomi izberete *Oxygen* . S klikom na enega od ogljikovih atomov postane -CH₃ skupina -OH skupina (**slika 1**). Označite celotno strukturo in izberite gumb *Clean Structure* .



Slika 1: Struktura metanola


KORAK 2

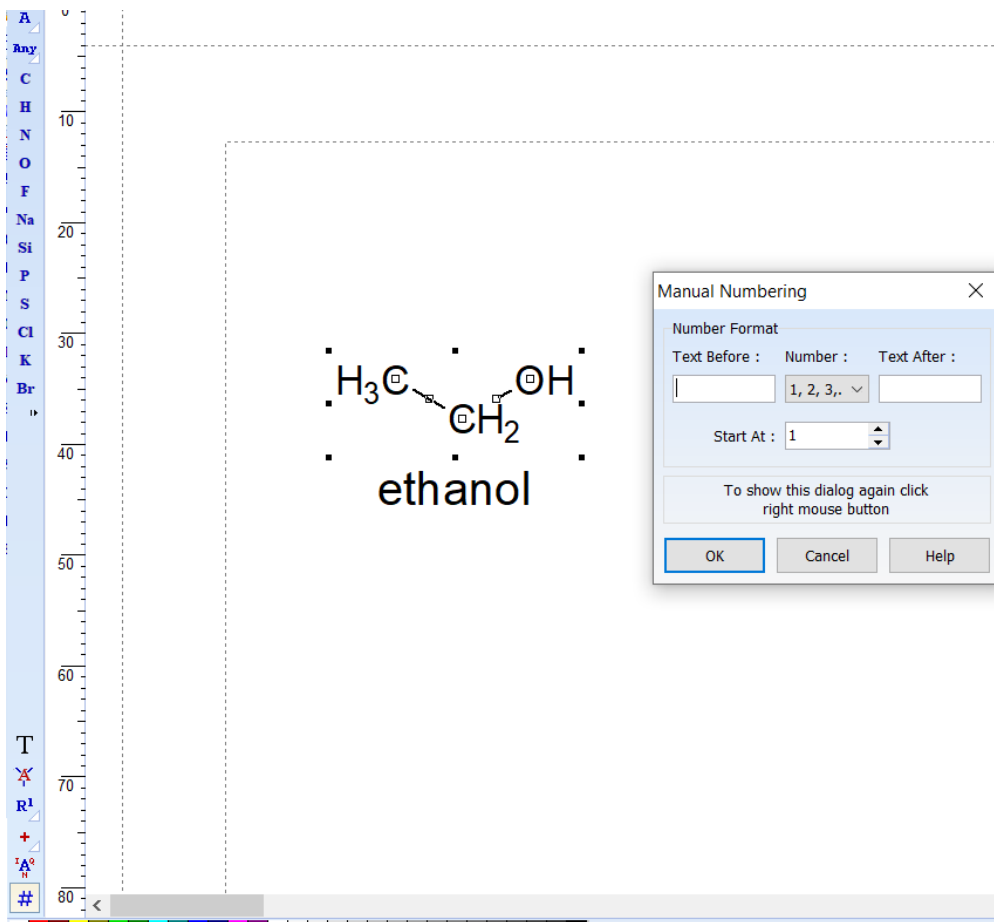
Ponovite ukaze, opisane v **KORAKU 1**, in narišite strukture molekul etanola, propan-1,2-diola in propan-1,2,3-triola. V narisanih strukturah prikažite vse ogljikove atome (*Tools* → *Structure Properties* → v delu *Show Carbons* izberite *Select All* → *Apply*) in uporabite ukaz *Clean Structure*. Sedaj generirajte imena vseh treh narisanih struktur z uporabo *Tools*, nato *Generate Name for Structure*. Če ste izvedli vse korake pravilno, bi morali dobiti strukture in imena, kot je prikazano na **sliki 2**.



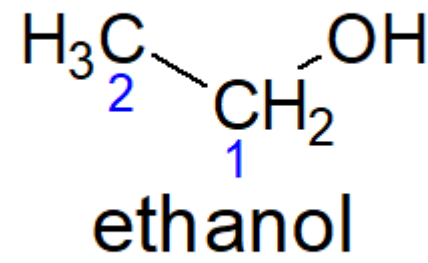
Slika 2: Strukture molekul etanola, propan-1,2-diola in propan-1,2,3-triola in njihova imena

KORAK 3

Da oštevilčite ogljikove atome v verigi, označite strukturo alkohola z uporabo , nato izberite **#** (*Manual Numbering*) (**slika 3 a**), pojavi se okno *Manual Numbering*. Potrdite z gumbom *OK*. Ko kliknete na ustrežni ogljikov atom, se pokaže številka 1, s klikom na drugi ogljikov atom se pokaže številka 2. Opozorilo: Številčenje ogljikovih atomov se začne na atomu ogljika, ki je najbližje hidroksilni skupini. (**slika 3 b**).



a

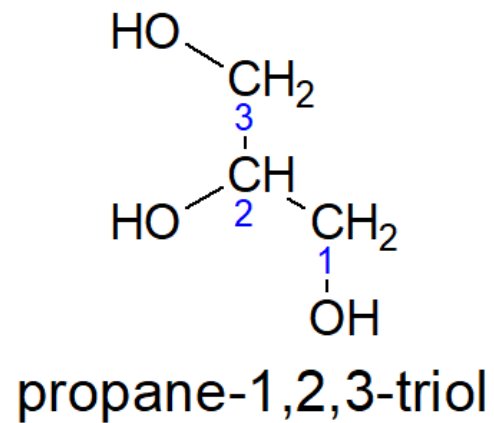
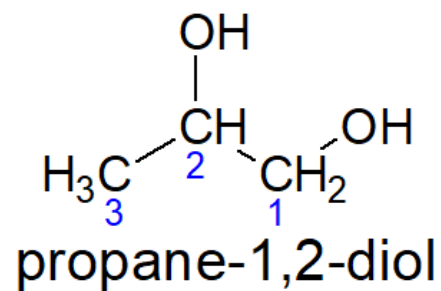


b

Slika 3: a) Postopek oštevilčenja ogljikovih atomov v etanolu b) Oštevilčeni ogljikovi atomi v molekuli etanola

KORAK 4

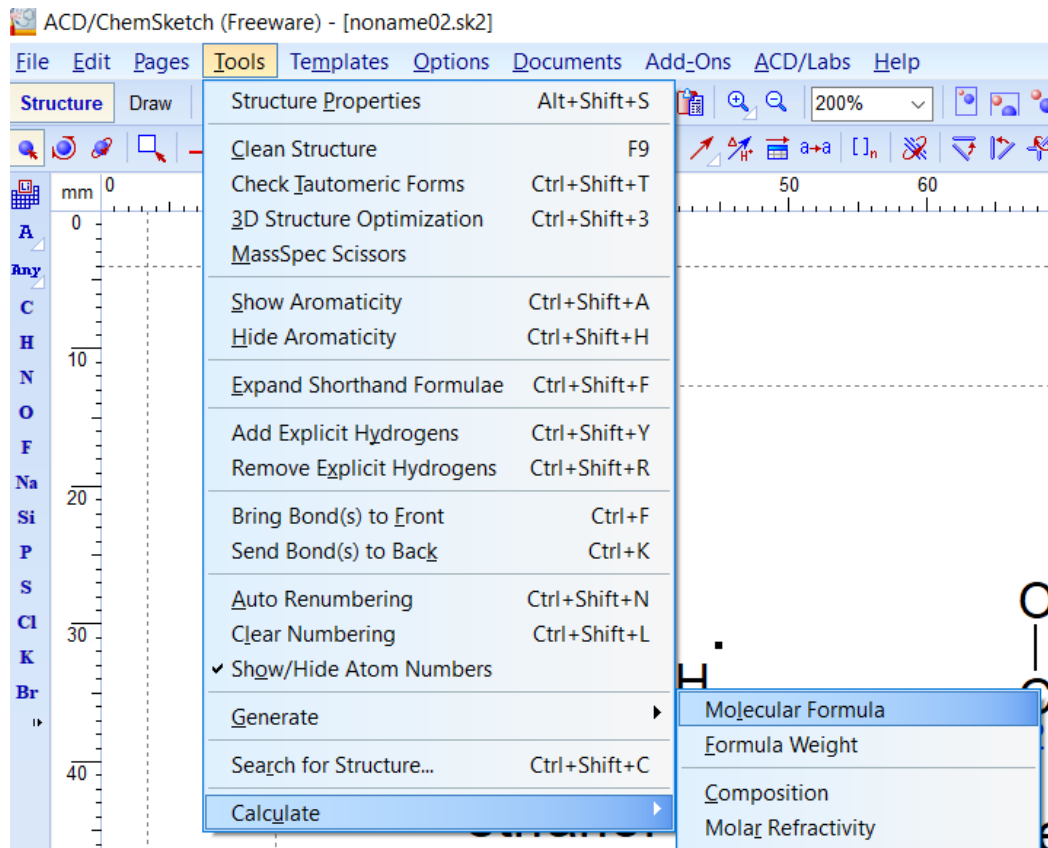
Ponovite postopek, opisan v **KORAKU 3** na primerih struktur molekul propan-1,2-diola in propan-1,2,3-triola (**slika 4**).



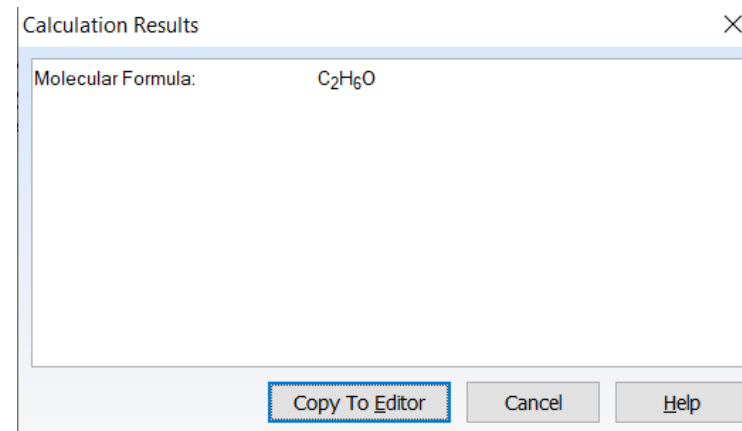
Slika 4: Oštevilčenje ogljikovih atomov v strukturah molekul propan-1,2-diola in propan-1,2,3-triola

KORAK 5

Določite molekulsko formulo narisane strukture z izbiro *Tools*, nato *Calculate* in *Molecular Formula*. Pokaže se pogovorno okno *Calculation Results* z molekulsko formulo izbrane strukture (**slika 5 a in 5 b**). Z izbiro *Copy to Editor* se molekulska formula pojavi na risalni površini (**slika 6**).

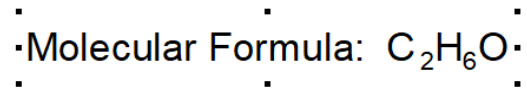
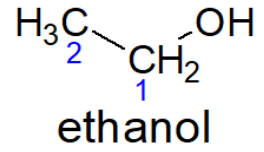


a




b

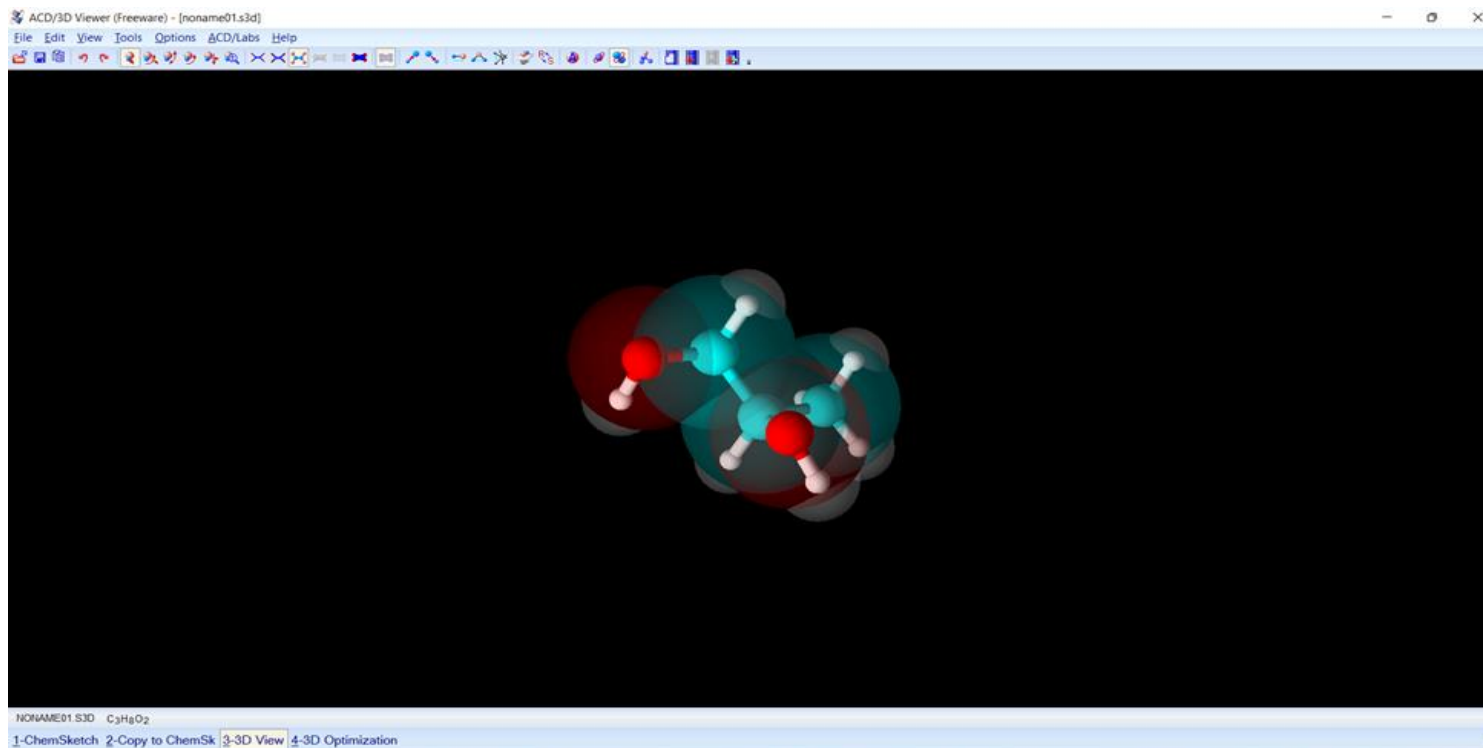
Slika 5: a) Zaporedje ukazov za prikaz molekulske formule etanola b) okno z molekulsko formulo etanola







Slika 6: Molekulska formula etanola

KORAK 6

Za prikaz narisane strukture alkoholov v 3D načinu, označite eno narisano strukturo, nato izberite ikono . Pojavi se novo okno s 3D prikazom struktur molekul (slika 7).



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

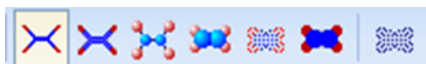
Uporabite vsako od možnosti obračanja, premikanja in izbire molekul, ki jih ponuja program: , nato prikažite tridimenzionalne strukture na vsakega od načinov, ki jih najdete v orodni vrstici: . S klikom na navedene ikone se spremeni način prikaza molekule propan-1,2-diola. Za samodejno obračanje molekule izberite ikono . Za samodejno spreminjanje načina prikaza molekule izberite ikono .

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

1. Narišite strukturo molekule heksan-2-ola in opravite naslednje naloge:

- strukturo molekule prikažite z racionalno in skeletno formulo,
- pravilno oštevilčite verigo,
- poimenujte narisani alkohol,
- določite molekulska formula narisane alkohola,
- prikažite 3D strukturo molekule narisane alkohola,
- dodajte še eno hidroksilno skupino na tretji ogljikov atom v strukturi heksan-2-ola in poimenujte dobljeno spojino,
- razveljavite spremembo, narejeno v nalogi e), nato narišite dvojno vez med tretjim in četrtem ogljikovim atomom v strukturi alkohola heksan-2-ola. Poimenujte dobljeno spojino.

2. S pomočjo interneta raziščite uporabo metanola v vsakdanjem življenju. Prikažite 3D strukturo metanola in uporabite naslednja orodja:



. Optimizirajte strukturo molekule metanola in shranite 2D in 3D strukturo na svoj računalnik.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti učnih vsebin

1. Narišite strukturo molekule heks-5-en-3-ola, in opravite naslednje naloge:

- strukturo molekule prikažite z racionalno in skeletno formulo,
- pravilno oštevilčite verigo,
- poimenujte narisani alkohol,
- določite molekulska formula narisane alkohola,
- prikažite 3D strukturo molekule narisane alkohola,
- shranite 2D in 3D strukturo na računalnik.

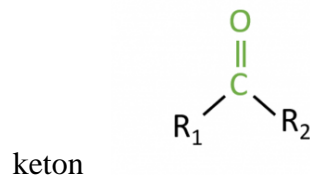
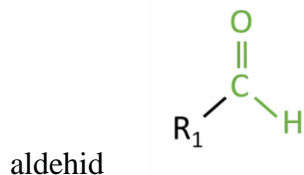
ALDEHIDI IN KETONI

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna enota: Organske kisikove spojine
Učna tema: Aldehidi in ketoni
Predvideno število učnih ur: 2

1.1 Teoretični uvod

Aldehidi in ketoni so organske kisikove spojine, ki imajo karbonilno funkcionalno skupino (C=O). Če je karbonilna skupina na začetku ali na koncu verige, je organska spojina aldehyd, če je karbonilna skupina med začetnim in končnim C atomom pa je keton.



Kisikov atom v karbonilni skupini je dosti bolj elektronegativen od ogljikovega, zato je karbonilna skupina polarna.

Pravila imenovanja po IUPAC določajo končnico *-al* za aldehide in *-on* za ketone. Aldehide v homologni vrsti imenujemo tako, da imenu alkana dodamo končnico al. Pri ketonih lego karbonilne skupine označimo z zaporedno številko C atoma v verigi.

Aldehidi nastanejo pri oksidaciji primarnih alkoholov, ketoni pa pri oksidaciji sekundarnih alkoholov. Pri aldehidih zlahka poteče oksidacija do karboksilnih kislin, pri ketonih pa ne. To lastnost lahko uporabimo za razlikovanje med aldehidi in ketoni, običajno s šibkimi oksidanti kot sta Fehlingov in Tollensov reagent. V kemijski industriji se aldehidi in ketoni uporabljajo kot topila ali kot izhodne spojine v proizvodnji drugih kemikalij. V naravi so pogoste kombinacije karbonilne skupine in drugih funkcionalnih skupin. Tako je npr. v vanilinu, hormonih in ogljikovih hidratih. Spojine aldehidov in ketonov se pogosto uporabljajo kot esencialna olja.

1.2 Učni cilji

V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- narisati ciklične in aciklične primere aldehidov in ketonov,
- razumeti razliko med C=O skupino v aldehidu in v ketonu,
- imenovati in s pomočjo orodja v ChemSketchu generirati ime aldehidov in ketonov,
- s pomočjo orodij v ChemSketchu prikazati strukturo aldehidov in ketonov z molekulsko, strukturno, racionalno in skeletno formulo,
- iz v 2D narisanih struktur v programu ChemSketch ustvariti 3D modele molekul in jih obračati v vse smeri,
- shraniti na računalnik dvo in tridimenzionalne strukture aldehidov in ketonov,
- bolje vizualizirati strukture aldehidov in ketonov,
- razvijati in izboljšati svoje kompetence risanja struktur v programu ChemSketch,
- razvijati svoje digitalne kompetence z uporabo spletnih brskalnikov.

1.3 Navodila za uporabo programa ChemSketch

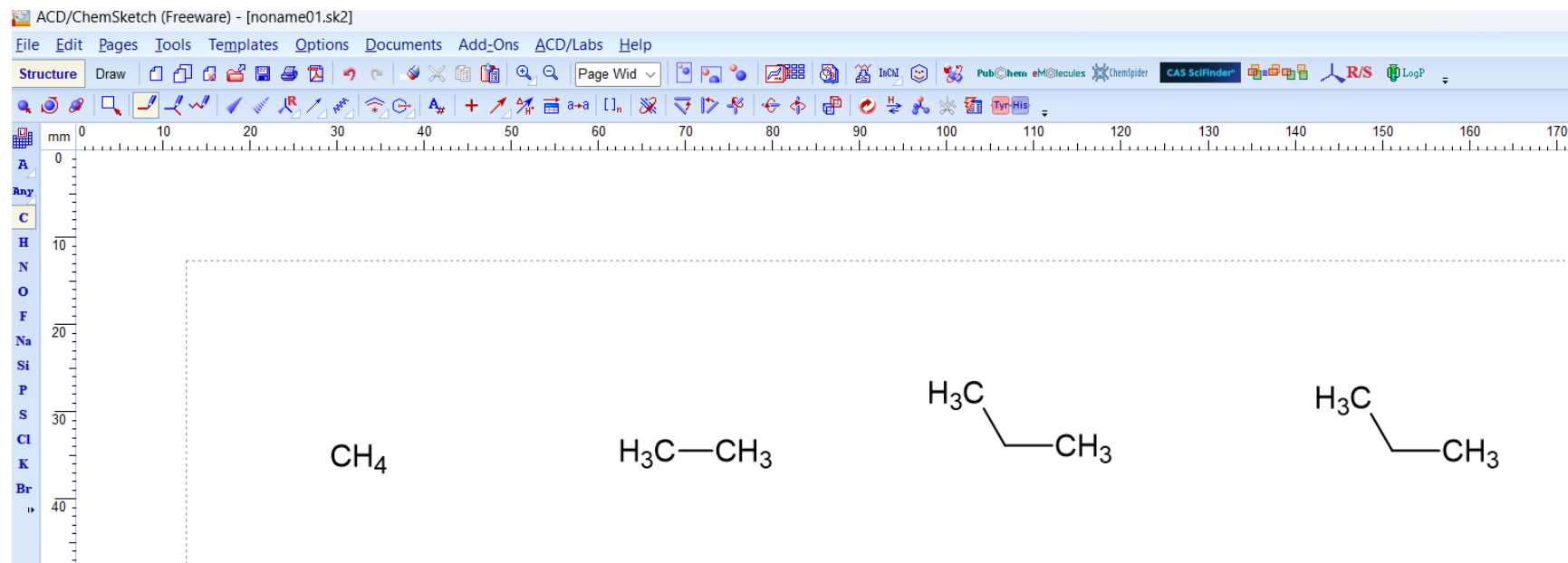
Primer 1

Metanal, etanal, propanal, propan-2-on

Narišite strukture molekul metanala, etanala, propanala in propan-2-ona z namenom prikazati razliko med C=O skupino v aldehidu in v ketonu. Narisane strukture počistite in generirajte imena. Izvedite 3D optimizacijo, ustvarite 3D modele in jih rotirajte v vse smeri.

KORAK 1

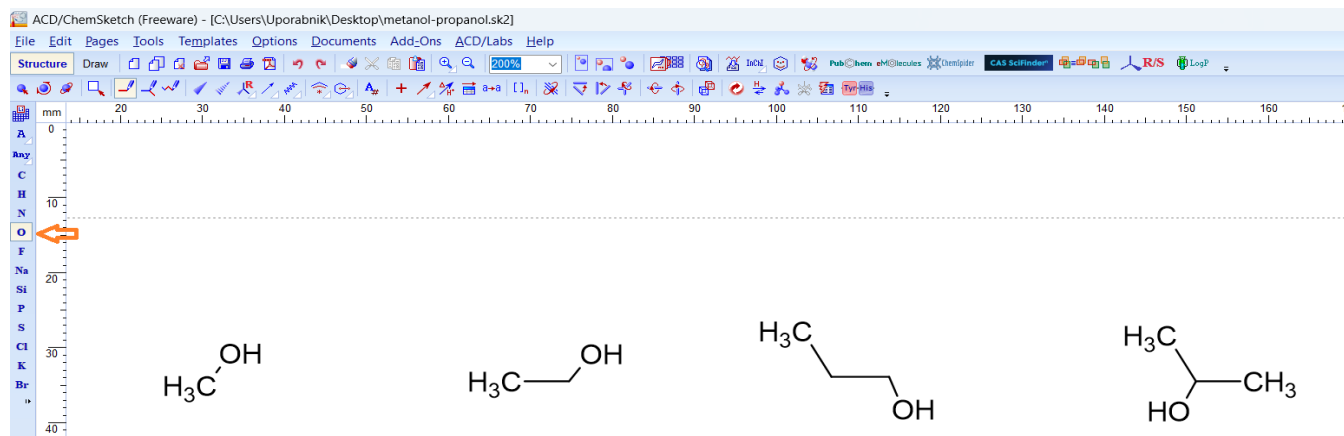
Narišite metan, etan in dvakrat propan kot je prikazano na **sliki 1**. Uporabite *Structure mode* in opcijo *DrawNormal*. Kliknite na prazno področje risalne površine, pojavil se bo CH₄. S klikom na ogljikov atom ustvarite vez med dvema ogljikoma. Da dobite verigo treh ogljikov kliknete še enkrat na ogljikov atom.



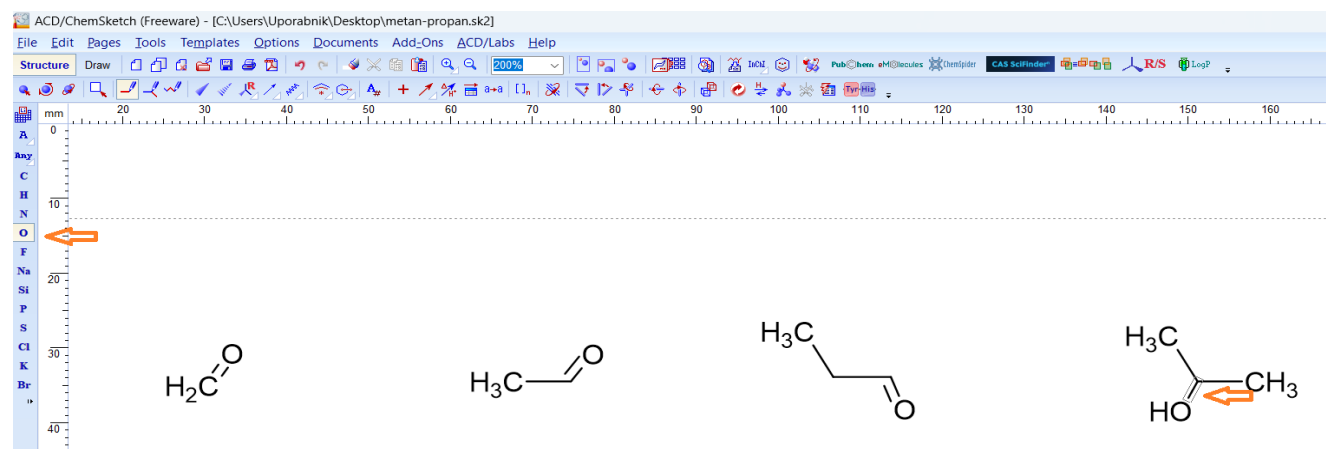
Slika 1: Struktura metana, etana in propana

KORAK 2

V levem stolpcu z orodji izberite O (kisik). Kliknite na prvi ogljik v metanu, etanu in enem od propanov in povlecite z miško. Tako narišete OH skupino (**slika 2a**). Kliknite na drugi ogljikov atom v drugi narisani formuli propana in povlecite z miško. V vsaki strukturi kliknite na C-OH vez, da ustvarite C=O skupino, kar prikazuje **slika 2b**.



a

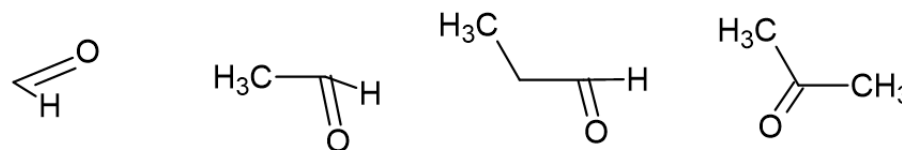
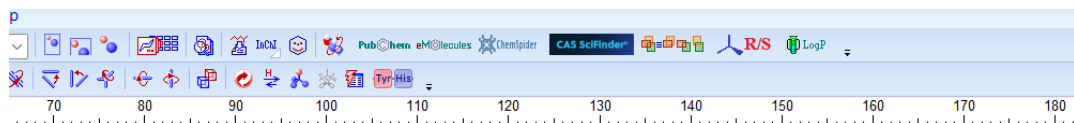


b

Slika 2: a) Risanje C-OH vezi, b) risanje C=O vezi

KORAK 3

Kliknite na H v *levem stolpcu* z *orodji*, nato kliknite C v C=O skupini in povlecite z miško, da ustvarite CHO skupino. To naredite v prvih treh strukturah (**slika 3**).



Slika 3: Risanje CHO skupine

KORAK 4

Z orodjem *Lasso* označite prvo strukturo, nato v orodni vrstici izberite *Tools* in nato iz odprtega seznama izberite *Clean Structure* (**slika 4a**). Enako ponovite z vsemi strukturami, da dobite strukture, ki so prikazane na **sliki 4b**.

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 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	

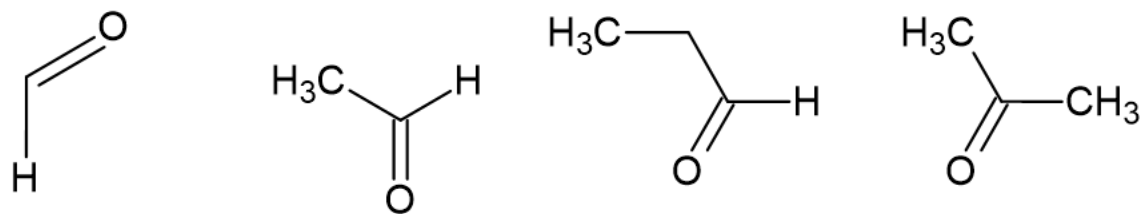
mm 0 10 20 30 40 50

50 60 70 80 90 100 110 120 130 140 150 160 170 180

Chemical structures shown in row 'a':

- Formaldehyde: C=O
- Acetaldehyde: CC=O
- Acetone: CC(=O)C

a

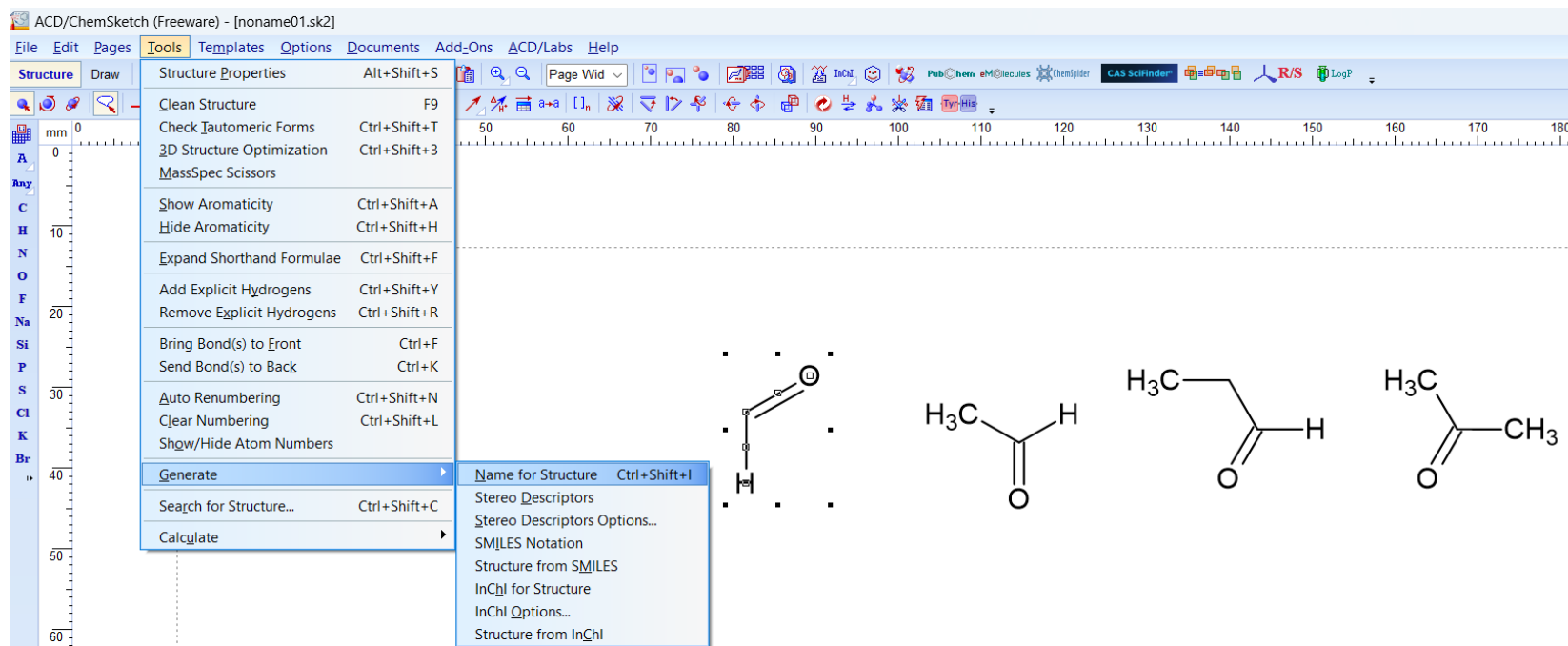


b

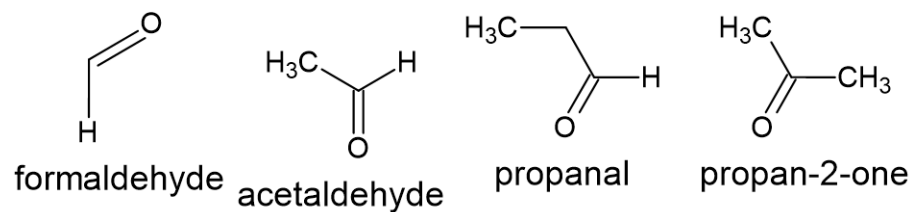
Slika 4: a) Čiščenje struktur, b) Počiščene strukture

KORAK 5

Z orodjem *Lasso* izberite prvo strukturo. V orodni vrstici izberite *Tools*, nato *Generate* in za tem *Name for Structure* kot prikazuje **slika 5a**. Za generiranje vseh imen enako ponovite za vse narisane strukture (**slika 5b**).



a

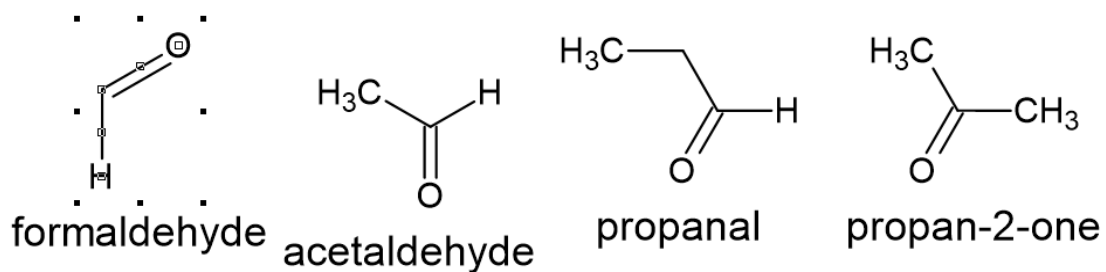
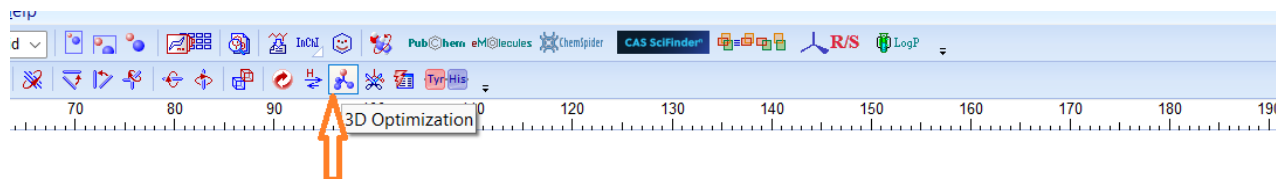


b

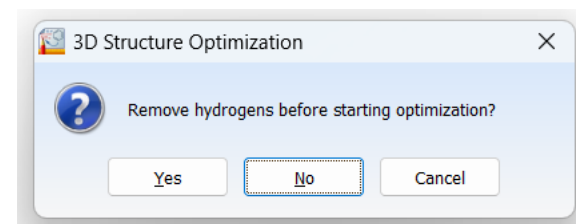
Slika 5: a) Postopek generiranja imen struktur, b) Imenovane strukture

KORAK 6

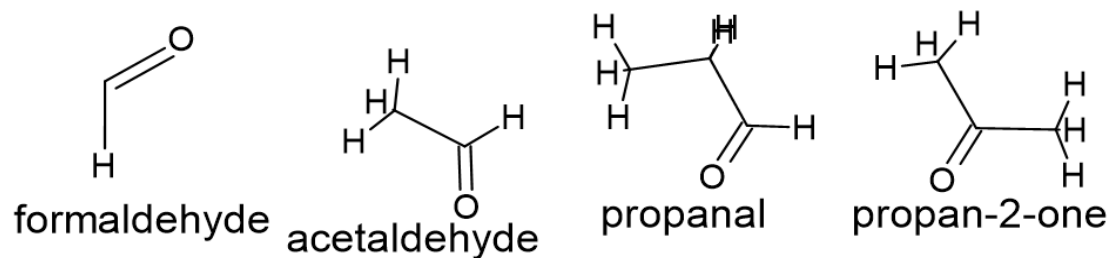
Za 3D optimizacijo izberite vsako od narisanih struktur posebej in uporabite gumb za 3D optimizacijo kot je prikazano na **sliki 6a**. Pojavilo se bo novo okno v katerem izberite opcijo No, kot prikazuje **slika 6b**. **Slika 6c** prikazuje strukture po izvedeni 3D optimizaciji.



a



b

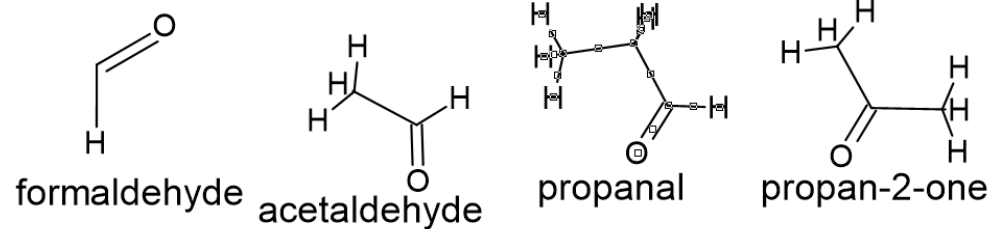
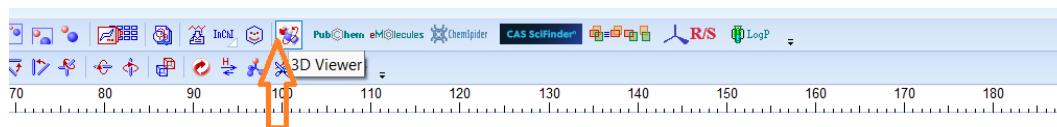


c

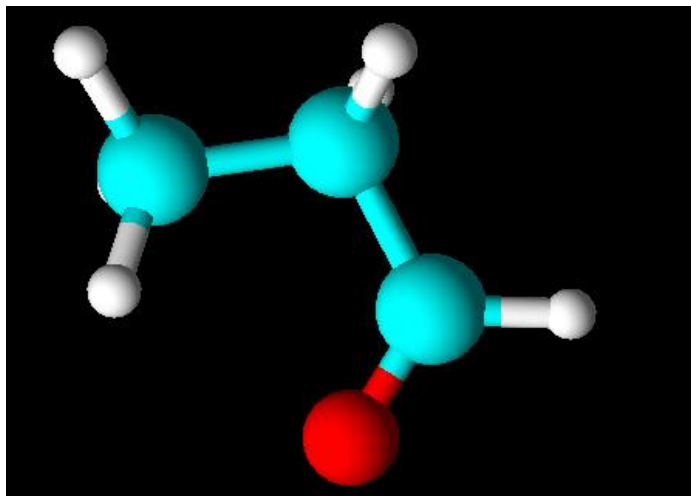
Slika 6: a) 3D optimizacija izbrane strukture, b) pojavno okno, c) 3D optimizirane structure metanala, etanala, propanala in propan-2-ona

KORAK 7

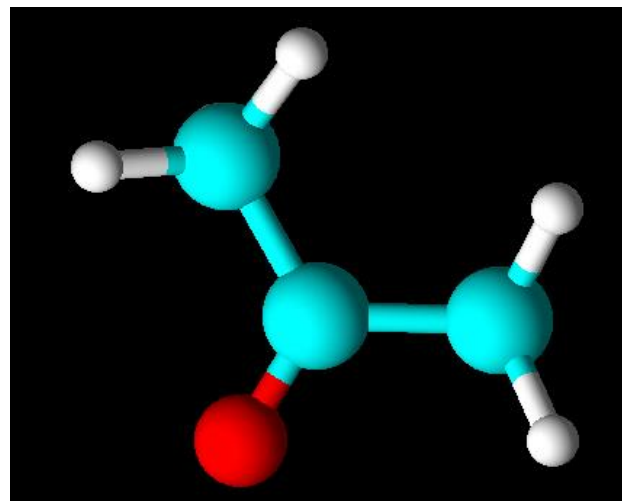
Najprej izberite propanal, nato pa postopek ponovite še s propan-2-onom. Označite strukturo in uporabite gumb *3D* kot je prikazano na **sliki 7a**. Pojavilo se bo novo okno s 3D modelom izbrane strukture. Model je možno po želji rotirati in mu spreminjati videz. Na tak način si lahko boljše predstavljamo razliko med karbonilno skupino v aldehidu in v ketonu.



a



b



c

Slika 7: a) Pretvorba v 3D model , b) Model molekule propanala, c) Model molekule propan-2-ona

KORAK 8

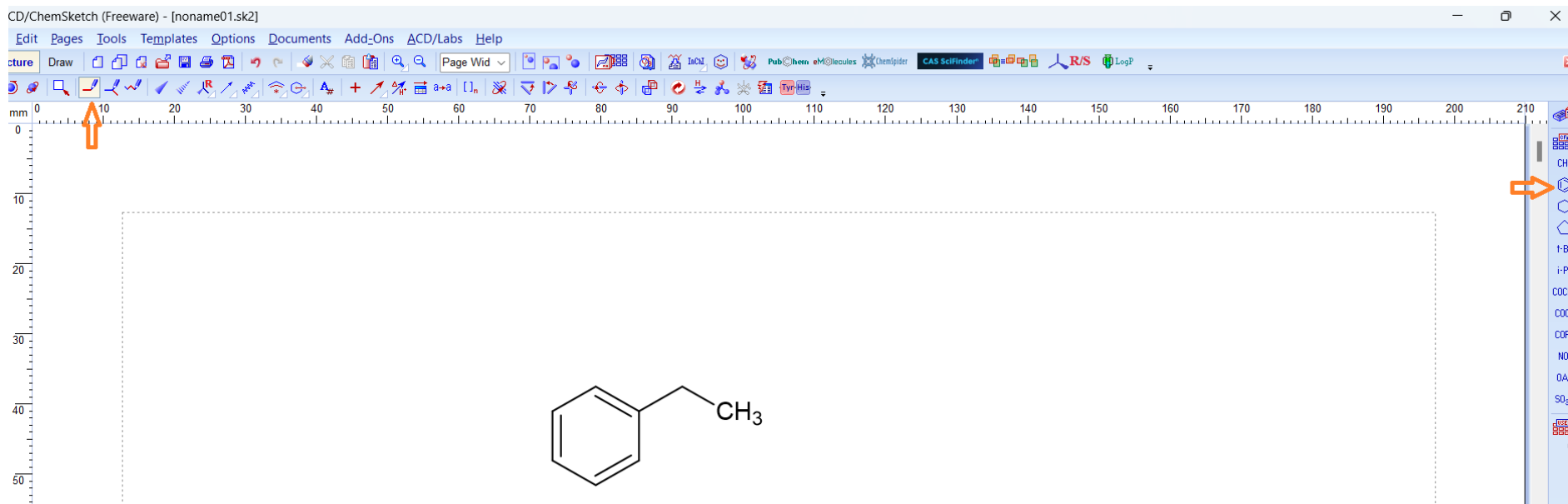
Shranite na računalnik vse strukture in 3D modele tako, da kliknete na *File* in nato *Save As*. Izberite primerna imena.

Primer 2

Narišite molekulo feniletanala. Feniletanal ima vonj po lilijah in hijacintah. Narisano strukturo počistite, generirajte ime in molekulsko formulo ter jo prikažite kot tridimenzionalni model.


KORAK 1

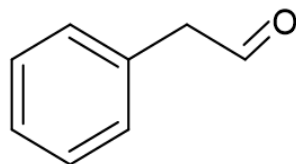
V desnem stolpcu z orodji (*Radicals Toolbar*) izberite benzen in nato kliknite na prazno področje na risalni površini. Prikazala se bo struktura benzena. S klikom na kateri koli ogljikov atom narišite CH₃ skupino in jo s klikom na to skupino podaljšajte v etilno skupino. Narisana je struktura etilbenzena, kar prikazuje **slika 1**.



Slika 1: Etilbenzen

KORAK 2

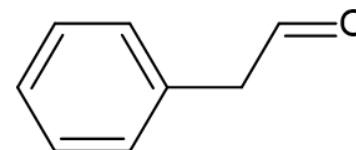
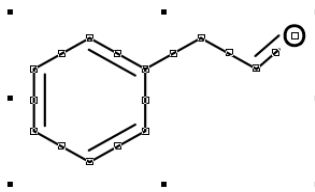
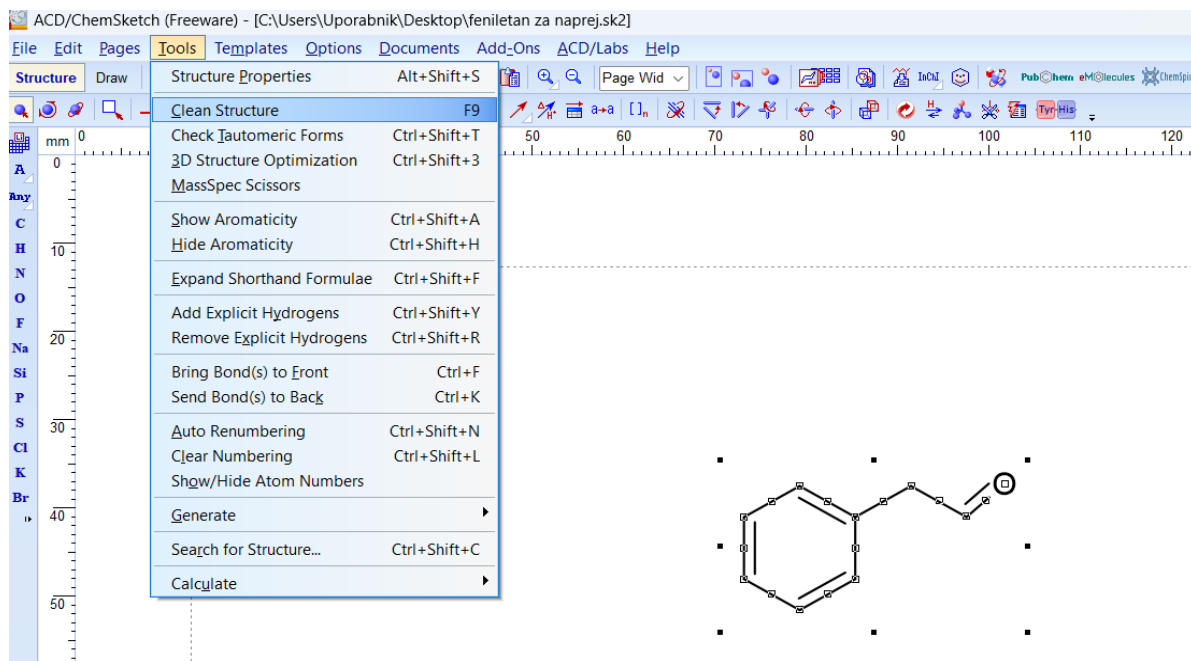
V levem stolpcu z orodji izberite O (kisik). Aktivirajte gumb *Draw Normal* () , nato kliknite na zadnji ogljikov atom da ustvarite vez C-OH. S klikom na to vez ustvarite karbnilno skupino kot prikazuje **slika 2**.



Slika 2: Narisana struktura benzena z etilno in karbnilno skupino

KORAK 3

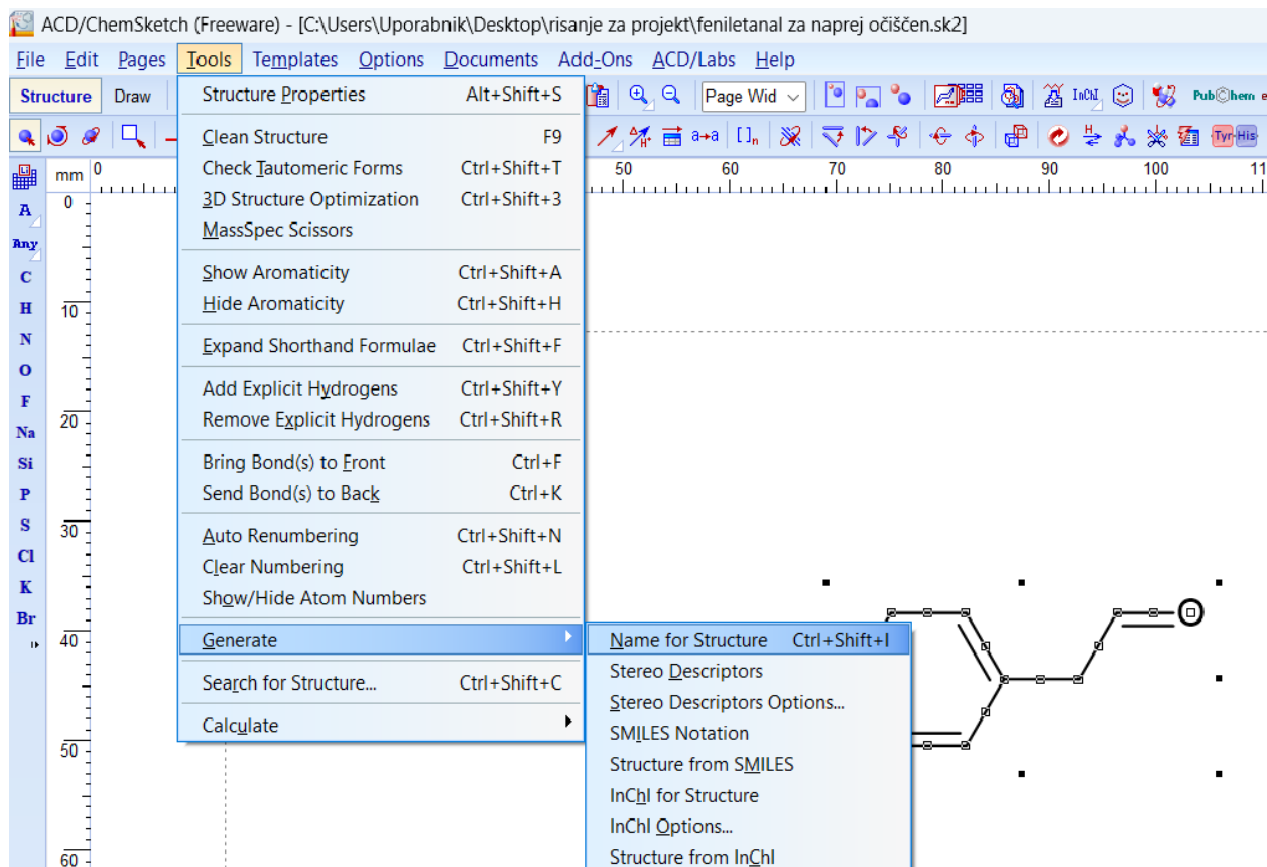
Z orodjem *Lasso* izberite narisano strukturo, nato jo počistite tako, da v orodni vrstici izberete *Tools* in nato *Clean Structure*. Postopek je prikazan na **sliki 3a**, počiščena struktura pa na **sliki 3b**.



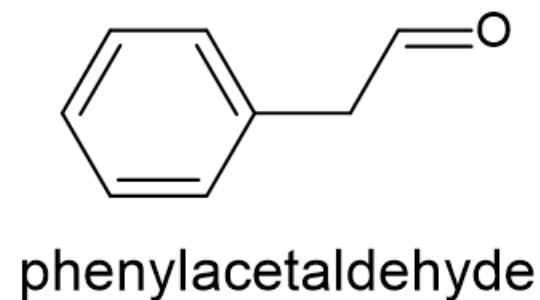
Slika 3: a) Čiščenje strukture, b) Počiščena struktura etilbenzena

KORAK 4

Z orodjem *Lasso* izberite narisano strukturo. V orodni vrstici kliknite na *Tools*, na seznamu izberite *Generate* in nato *Name for Structure*. Postopek prikazujeta **sliki 4a** in **4b**.



a

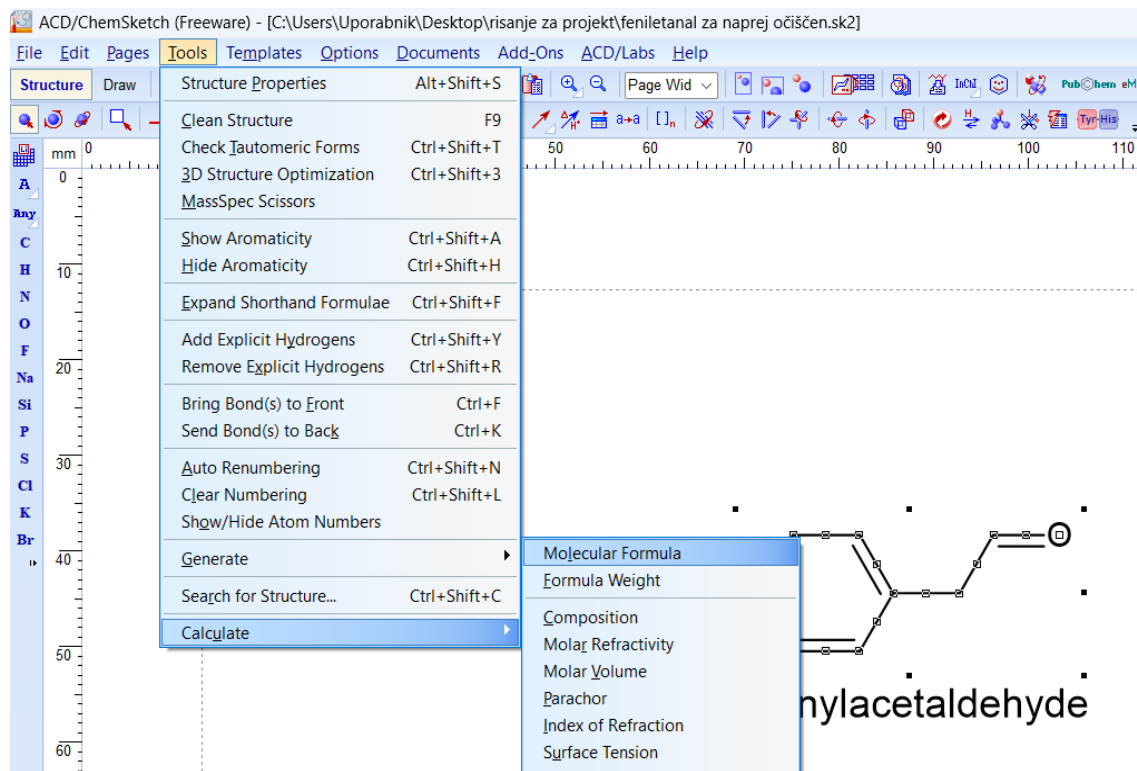


b

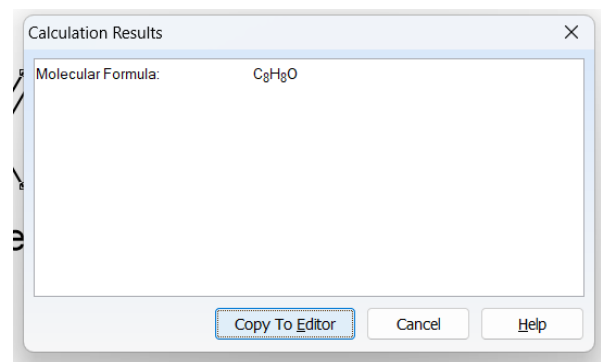
Slika 4: a) Postopek kreiranja imena izbrane strukture, b) Narisana in imenovana struktura

KORAK 5

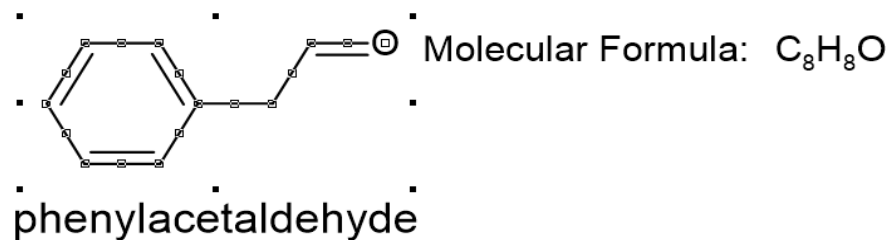
Z orodjem *Lasso* izberite narisano strukturo. V orodni vrstici kliknite na *Tools*, na seznamu izberite *Calculate* in nato *Molecular Formula* (**slika 5a**). Pojavilo se bo novo okno z molekulske formule. Za prikaz molekulske formule, kot je prikazan na **sliki 5c**, izberite *Copy to Editor* (**slika 5b**).



a



b

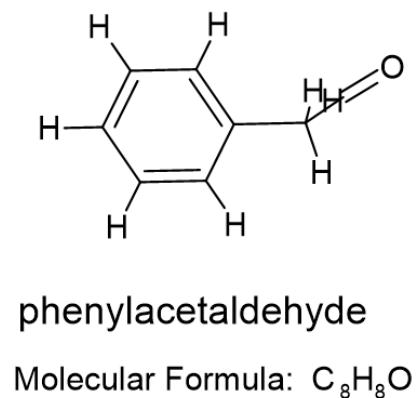
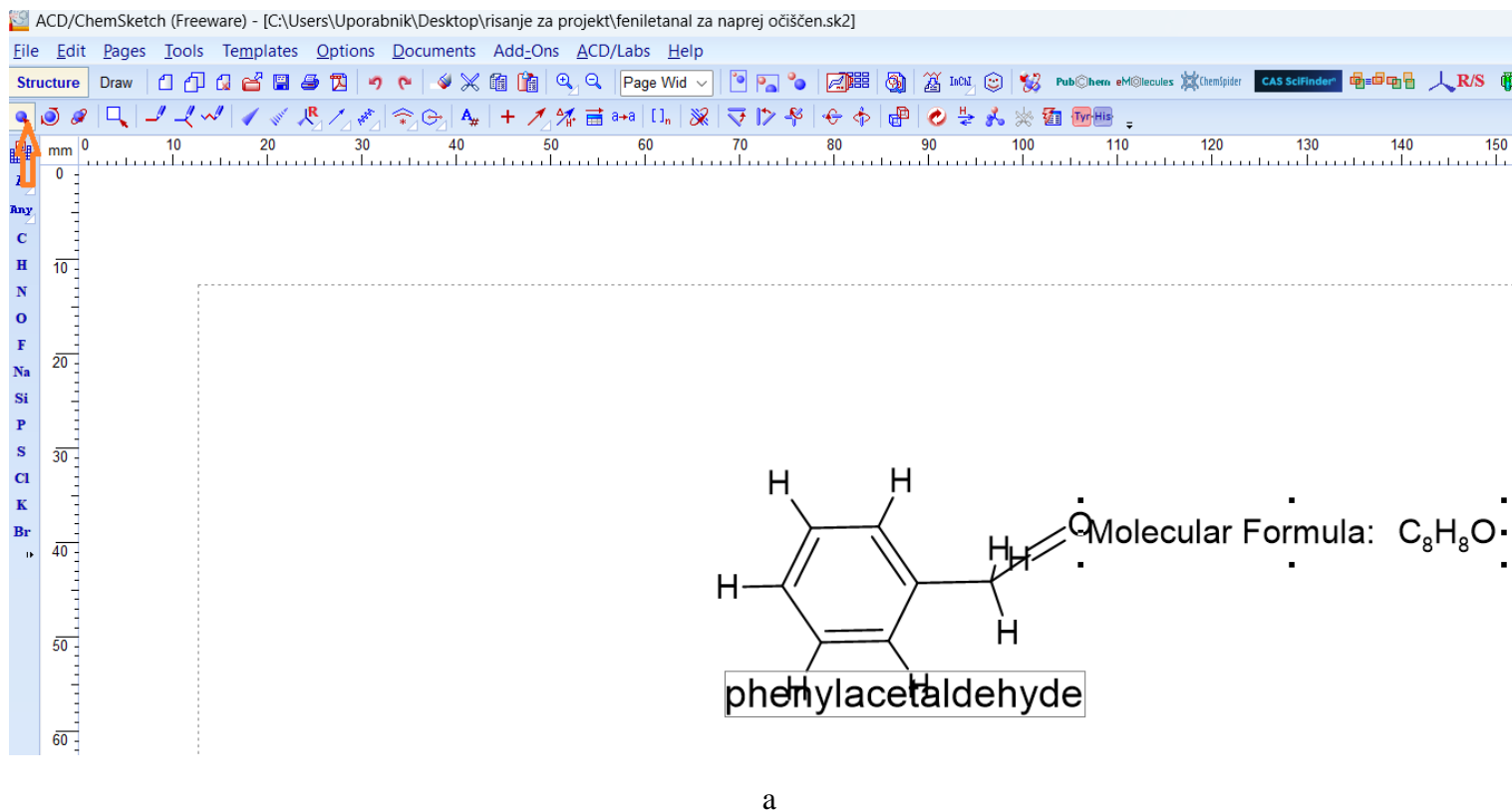


c

Slika 5: a) Kreiranje molekulske formule, b) Prikaz molekulske formule, c) Zapis molekulske formule ob strukturi

KORAK 6

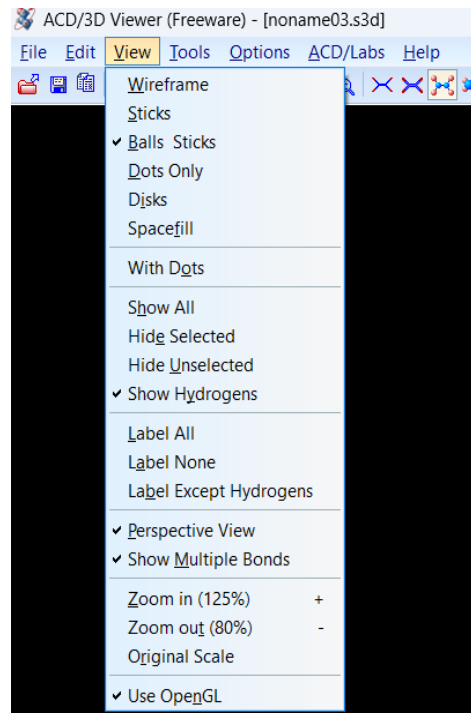
Za 3D optimizacijo strukture z orodjem *Lasso* izberite narisano strukturo in nato kliknite gumb za 3D optimizacijo kot je bilo opisano v Primeru 1. Za premik imena in molekulske formule uporabite gumb *Select/Move* in premaknite polje z imenom in molekulsko formulo. To prikazujeta **sliki 6a** in **6b**.



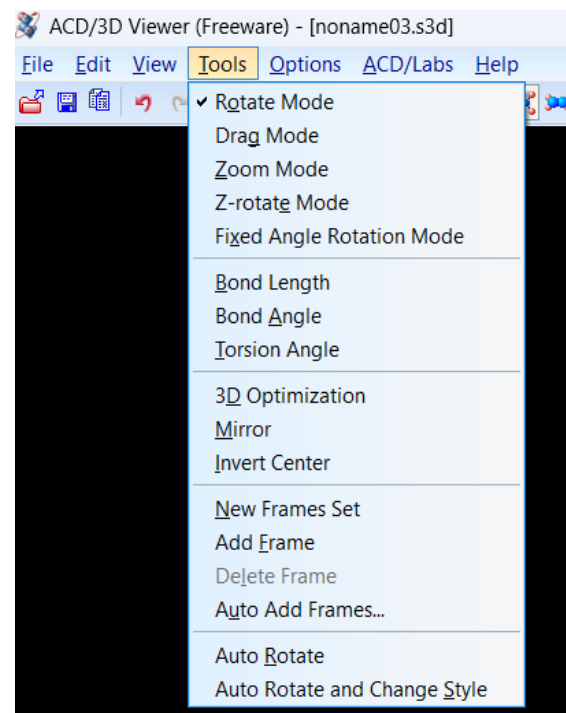
Slika 6: a) in b) Premikanje imena in molekulske formule od 3D optimizirane strukture

KORAK 7

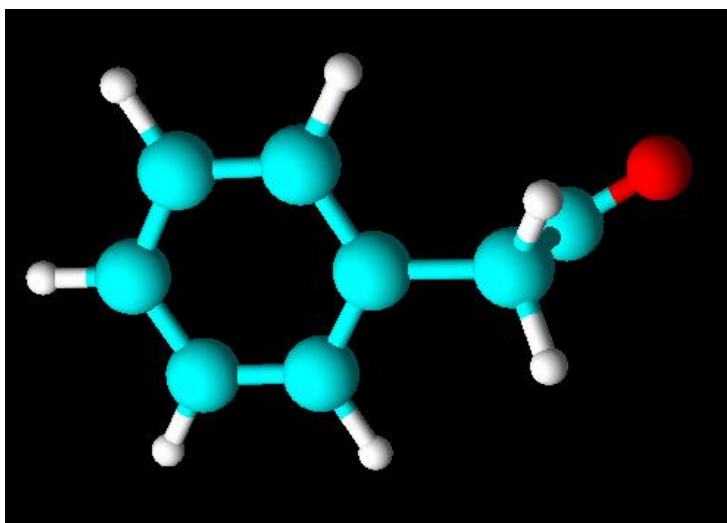
Narisano strukturo prenesite v 3D prikazovalnik (*3D Viewer*). Rotirajte jo in uporabite različne načine prikaza modela molekule feniletanala. Nekaj možnosti je prikazanih **na slikah 7a-7e**.



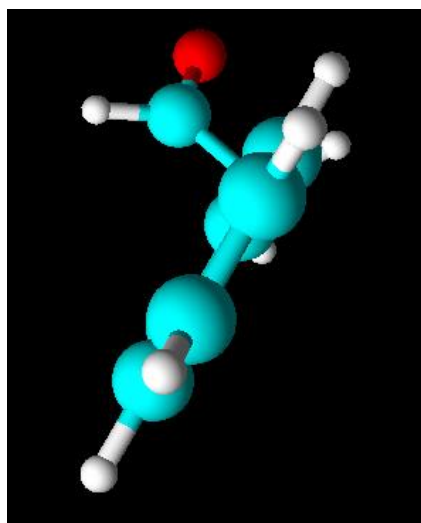
a



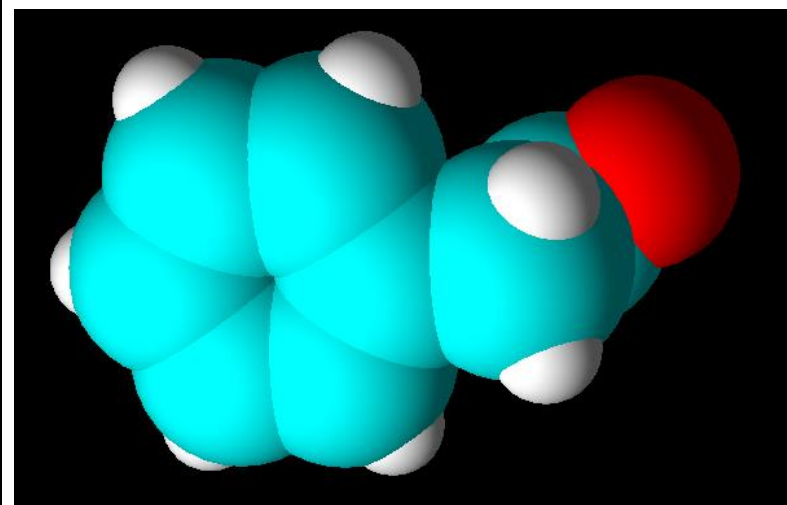
b



c



d



e

Slike 7: a-e) Različni načini prikaza modela molekule feniletanala

KORAK 8

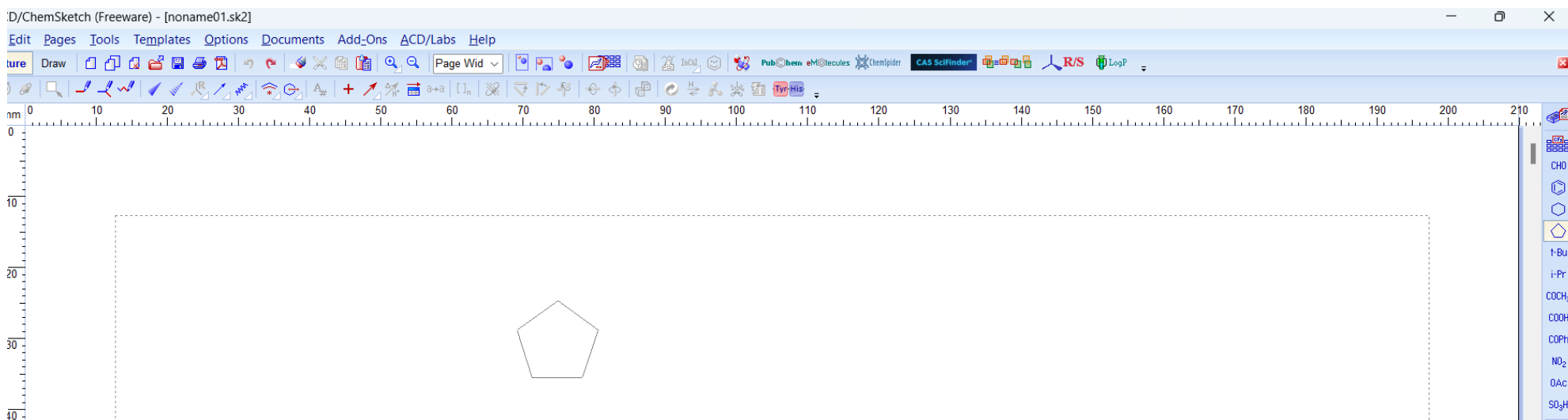
Shranite na računalnik 2D strukturo in 3D modele tako, da kliknete na *File* in nato *Save As*. Izberite primerna imena.

Primer 3

Narišite molekulo ciklopentan-1,3-diona. Prikažite jo s skeletno, strukturno in molekulsko formulo.

KORAK 1

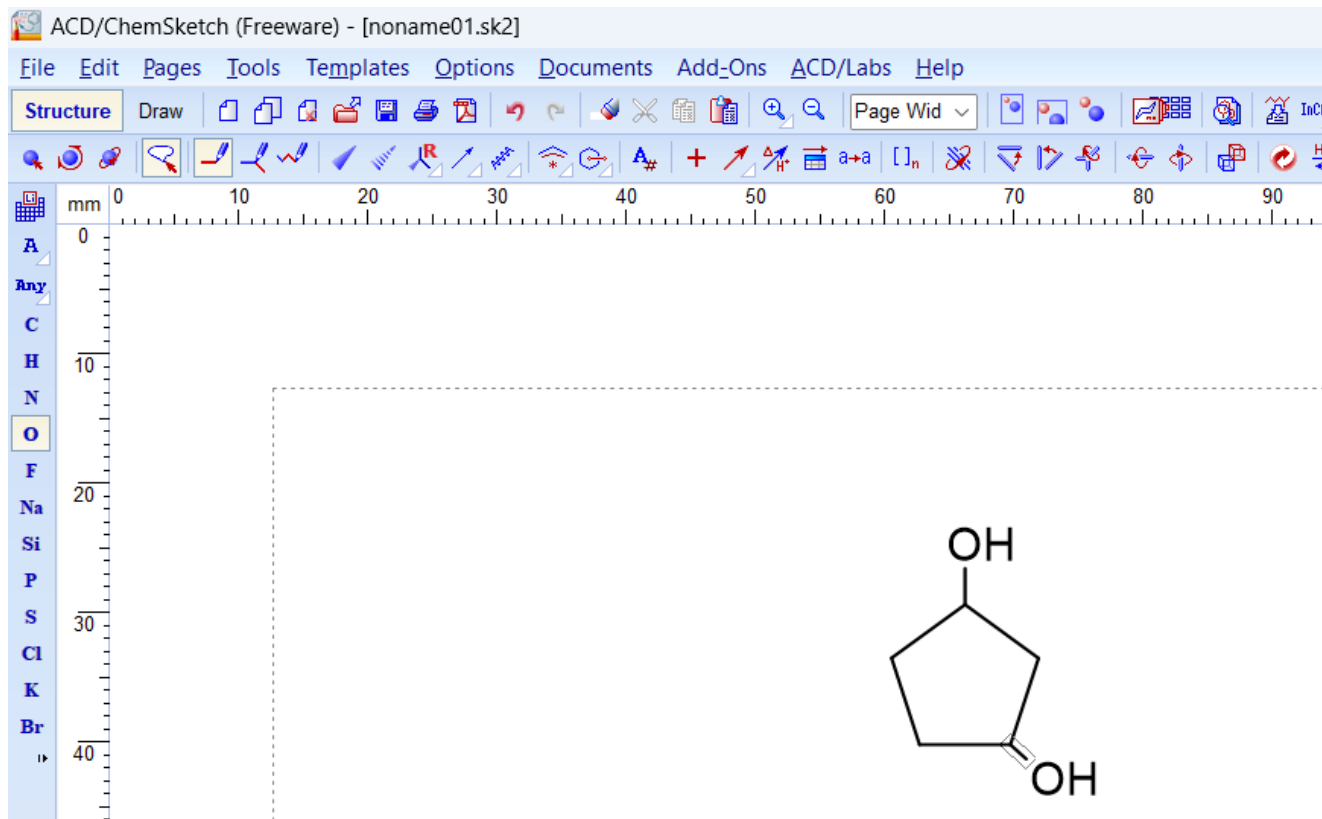
V desnem stolpcu z orodji (*Radicals Toolbar*) izberite ciklopentan in nato kliknite na prazno področje na risalni površini. Prikazala se bo struktura ciklopentana kot je prikazano na **sliki 1**.



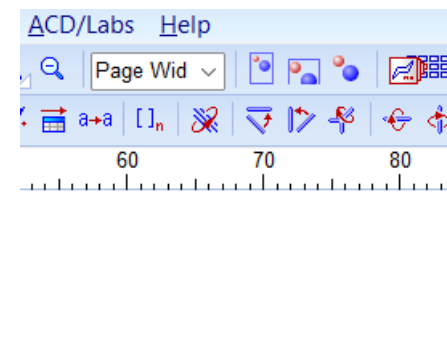
Slika 1: Ciklopentan

KORAK 2

V levem stolpcu z orodji izberite O (kisik). Kliknite na kateri koli ogljikov atom in povlecite z miško, nato enako ponovite na tretjem ogljikovem atomu. Tako narišete OH skupino (**slika 2a**). Kliknite na obe C-OH vezi, da ustvarite C=O skupino, kar prikazuje **slika 2b**.



a



b

Slika 2: a) Risanje C-OH vezi, b) Risanje C=O vezi

KORAK 3

Narisano strukturo počistite tako, da jo označite z orodjem *Lasso*, nato pa v orodni vrstici izberite *Tools* in opcijo *Clean Structure* (slika 3a) ali uporabite gumb *Clean Structure*. Prikazala se bo skeletna formula ciklopentan-1,3-diona. To prikazuje slika 3b.

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

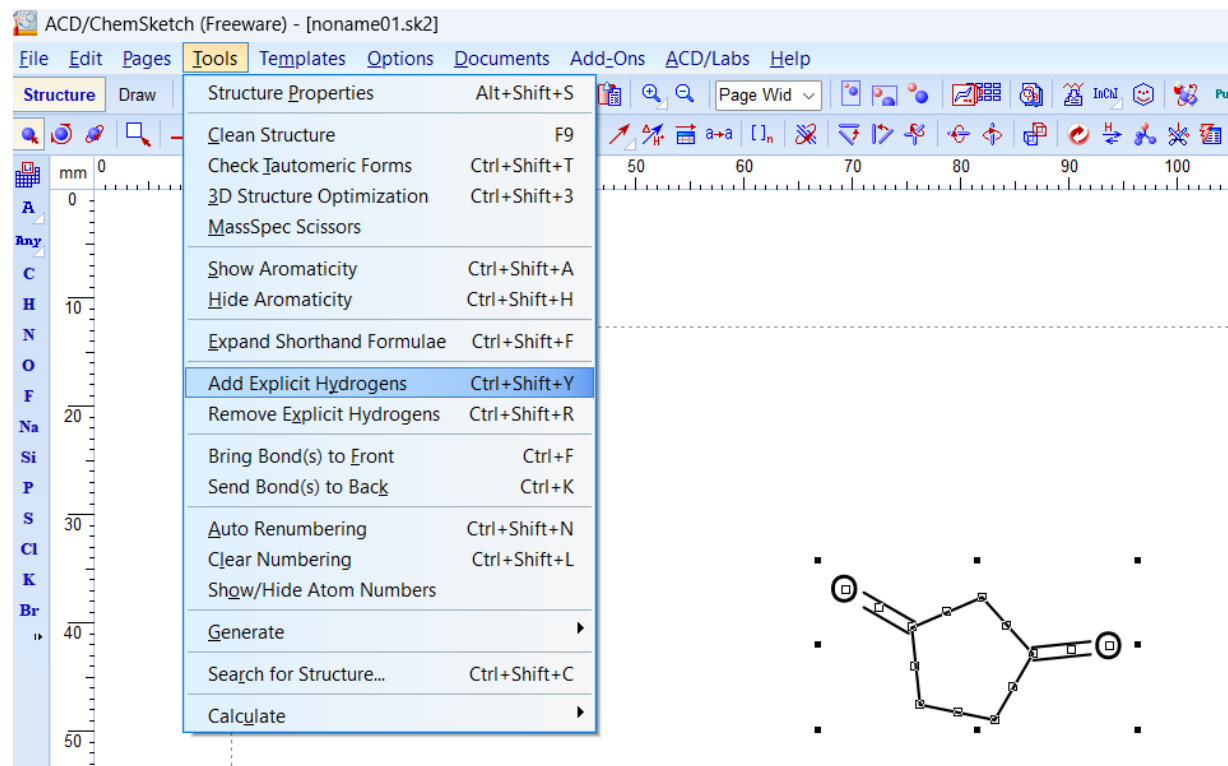
Menu Item	Keyboard Shortcut
Structure Properties	Alt+Shift+S
Clean Structure	F9
Check Automatic Forms	Ctrl+Shift+T
3D Structure Optimization	Ctrl+Shift+3
MassSpec Scissors	
Show Aromaticity	Ctrl+Shift+A
Hide Aromaticity	Ctrl+Shift+H
Expand Shorthand Formulae	Ctrl+Shift+F
Add Explicit Hydrogens	Ctrl+Shift+Y
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 are shown. Structure 'a' is a skeletal structure of cyclopentan-1,3-dione with two carbonyl groups highlighted by a lasso. Structure 'b' is the cleaned skeletal structure of cyclopentan-1,3-dione.

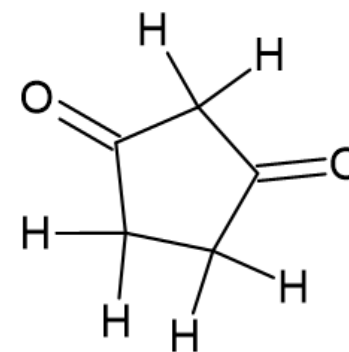
Slika 3: a) Čiščenje strukture ciklopentan-1,3-diona, b) Počiščena struktura ciklopentan-1,3-diona

KORAK 4

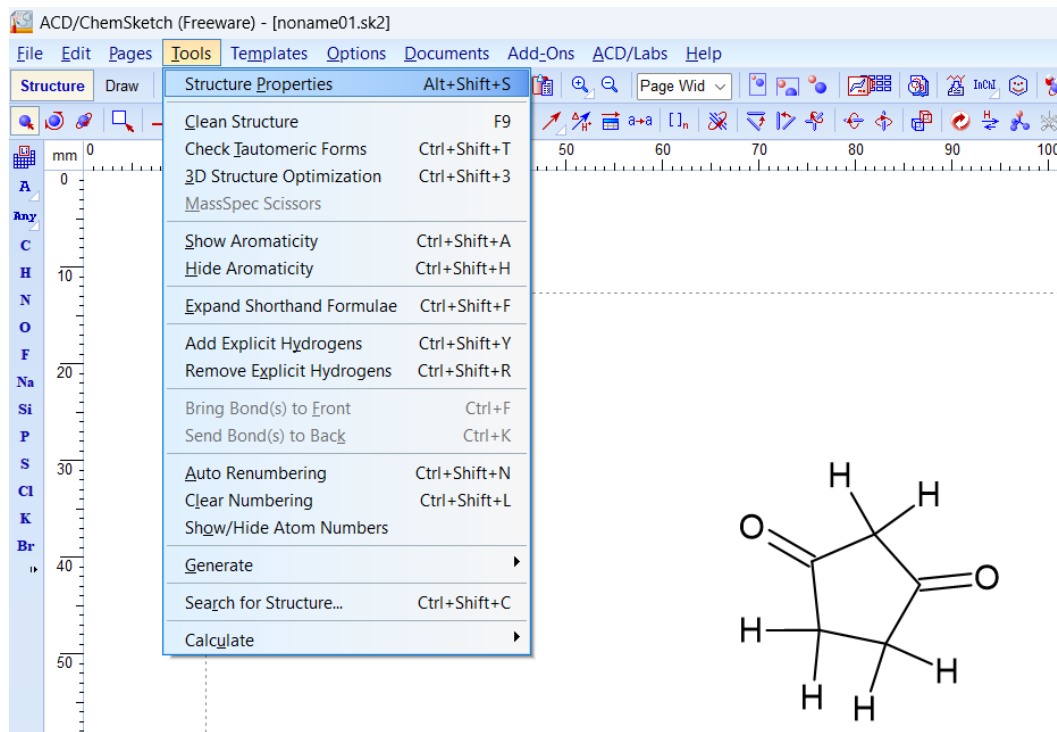
Za pretvorbo narisane skeletne formule v strukturno, v orodni vrstici kliknite *Tools* in nato izberite *Add Explicit Hydrogens* (sliki 4a in 4b). Z orodjem *Lasso* označite strukturo, v orodni vrstici kliknite *Tools* in izberite *Structure Properties* (slika 4c). Pojavilo se bo novo okno v katerem obkljukajte *All* v razdelku *Show Carbons*. Za tem kliknite *Apply*, kot prikazuje slika 4d in dobili boste strukturno formulo (slika 4e).



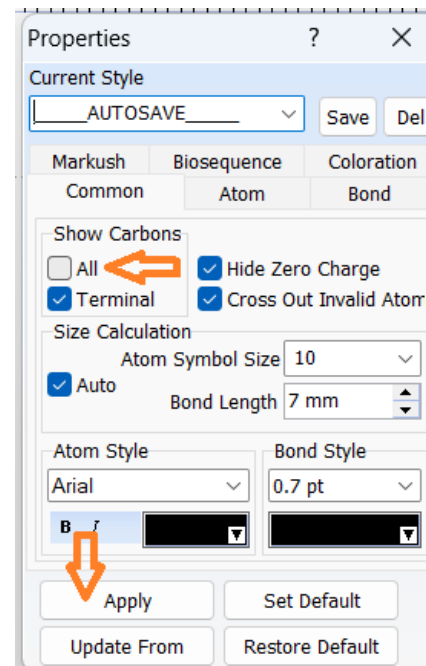
a



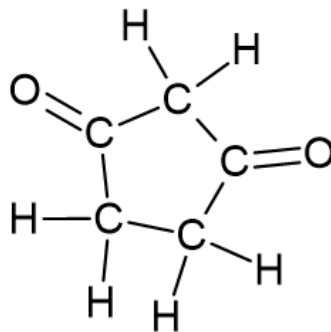
b



c



d

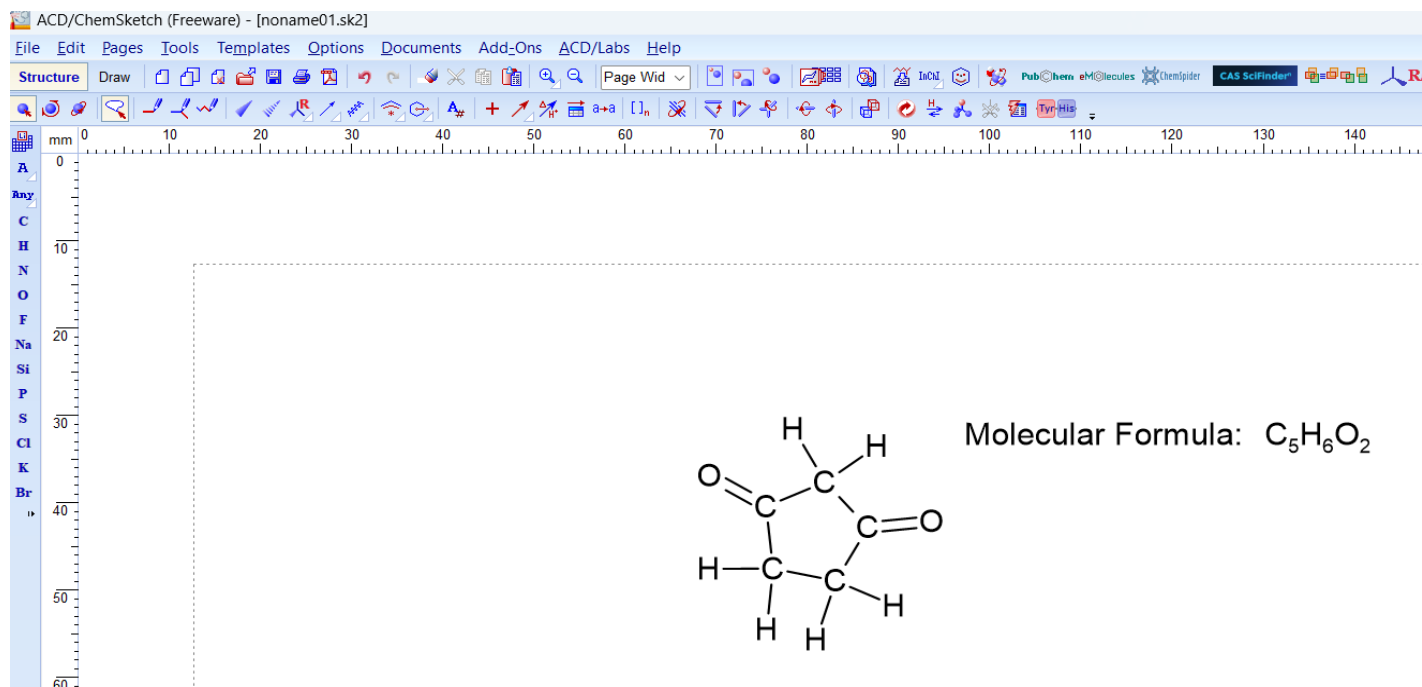


e

Slika 4: a) IZpisovanje vseh vodikov , b) Vsi vodiki so izpisani, c) Spreminjanje nastavitve lastnosti, d) Navodilo za prikaz ogljikov, e) Strukturna formula pentan-1,3-diona

KORAK 5

Prikažite molekulska formulo ob uporabi *Tools*, *Calculate* in nato *Molecular formula*. Postopek ste že izvedli pri primeru 2.



Slika 5: Strukturna in molekulska formula ciklopentan-1,3-diona

KORAK 6

Narisano strukturo prenesite v 3D prikazovalnik (*3D Viewer*). Rotirajte jo in uporabite različne načine prikaza modela molekule ciklopentan-1-3-diona.

KORAK 7

Shranite na računalnik 2D strukture in 3D modele tako, da kliknete na *File* in nato *Save As*. Izberite primerna imena.

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

Narišite enega od cis/trans izomerov citrala (3,7-dimetilokta-2,6-dienal), ki je sestavina esence limonske trave.

Počistite strukturo.

Generirajte ime in izpis molekulske formule.

Prenesite strukturo in jo prikažite v 3D prikazovalniku in jo rotirajte.

Shranite narisano strukturo in 3D model.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti učnih vsebin

Butandial, 5-metilheptan-2,4-dion

S pomočjo spletnih brskalnikov ali literature poiščite primere aldehydov in ketonov, narišite njihove strukture, jih pretvorite v različne oblike zapisov, generirajte imena in molekulske formule ter prenesite v 3D prikazovalnik kjer si oglejte različne prikaze modelov molekul in jih rotirajte.

BIOMOLEKULE

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna tema: Biomolekule
Učna enota: Ogljikovi hidrati
Predvideno število učnih ur: 2

1.1 Teoretični uvod

Biomolekule, imenovane tudi biološke molekule, so snovi, ki jih proizvajajo in uporabljajo živi organizmi. Imajo različne strukture in funkcije. Štiri glavne vrste biomolekul so: ogljikovi hidrati, lipidi, beljakovine in nukleinske kisline. Ogljikovi hidrati so glavni vir energije za organizme.

Lipidi so pogosti kot gradniki bioloških membran ali predstavljajo različne oblike energije.

Tudi beljakovine imajo številne pomembne funkcije, kot so prenašanje nekaterih pomembnih snovi, delovanje kot encimi, gradnja mišic ali delovanje kot protitelesa. Njihove strukture so zelo raznolike. Nukleinske kisline imajo pomembno vlogo za sintezo beljakovin in prenašanje genetskih informacij.

1.2 Učni cilji

V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- narisati različne primere molekul ogljikovih hidratov,
- predstaviti strukturo ogljikovih hidratov s Fisherjevimi in Haworthovimi formulami,
- uporabljati nomenklaturu ogljikovih hidratov,

- zapisati kemijske reakcije ogljikovih hidratov,
- narisati formuli "D" in "L" ogljikovih hidratov,
- shraniti na računalnik narisane molekule ogljikovih hidratov.

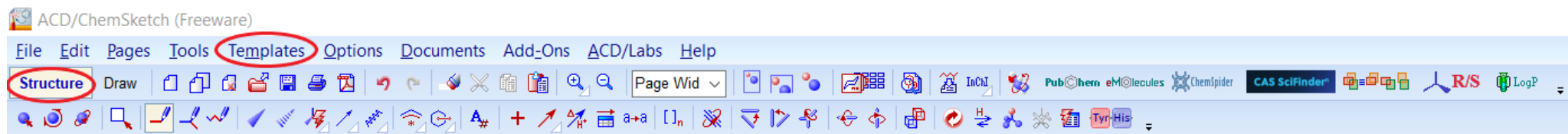
1.3 Navodila za uporabo programske opreme ChemSketch

Primer 1

Risanje strukture D-glukoze s Fischerjevo formulo.

KORAK 1

Začnite v modulu *Structure* in v orodni vrstici kliknite na *Templates*. Oboje je prikazano na **sliki 1**.



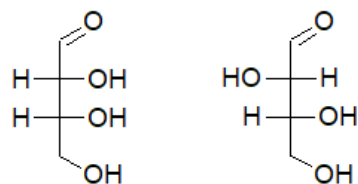
Slika 1: Izbira orodja

KORAK 2

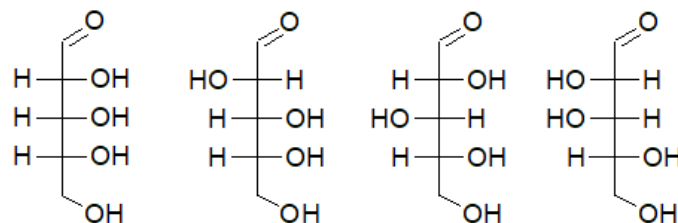
Odprite okno s predlogami – *Template Window*. Izberite modul *Draw* in za izbiro ogljikovih hidratov kliknite na *Carbohydrates* kot je prikazano na **sliki 2**. Izberite formulo D-glukoze, kliknite nanjo in jo s ponovnim klikom prenesite na risalno površino v *ChemSketchu*.



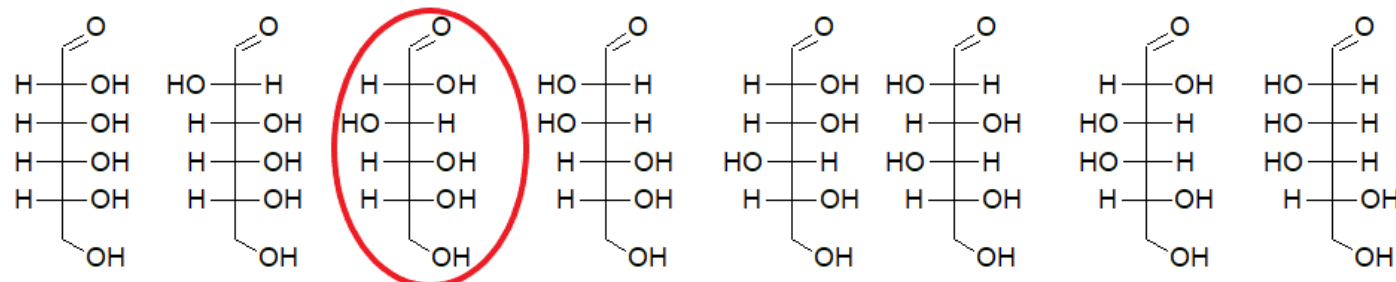
Aldoses



D-Erythrose D-Threose

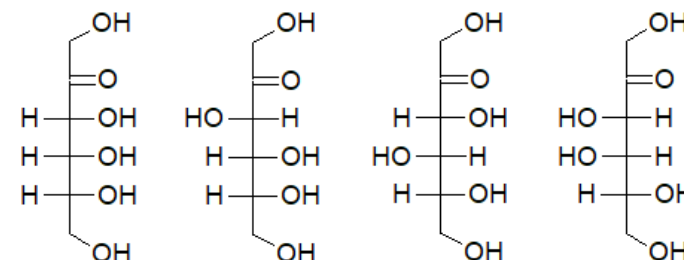


D-Ribose D-Arabinose D-Xylose D-Lyxose

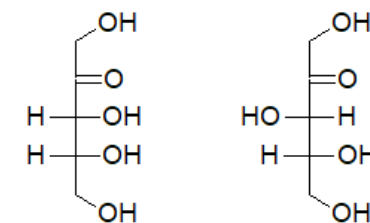


D-Allose D-Altrose D-Glucose D-Mannose D-Gulose D-Idose D-Galactose D-Talose

Ketoses



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

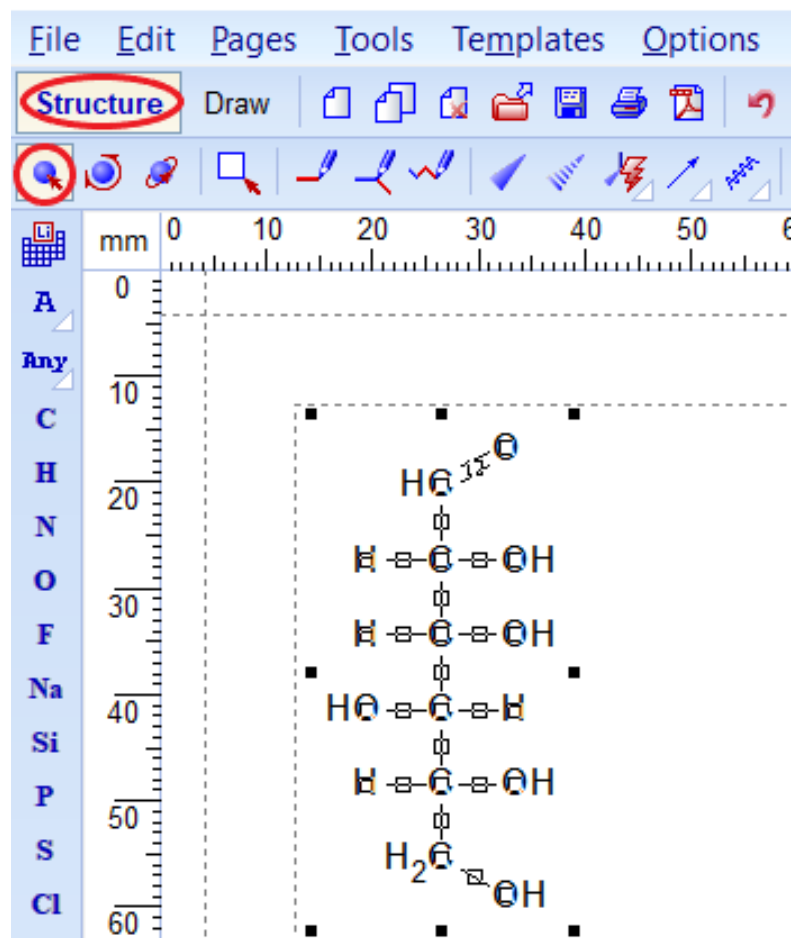


D-Ribulose D-Xylulose

Slika 2: Izbira ugljikovih hidratov

KORAK 3

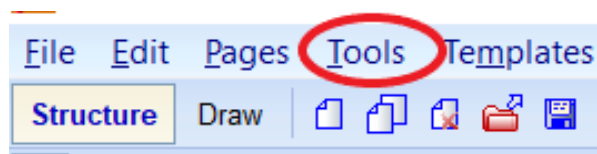
Preklopite na način *Structure* in označite formulo kot je prikazano na **sliki 3**.



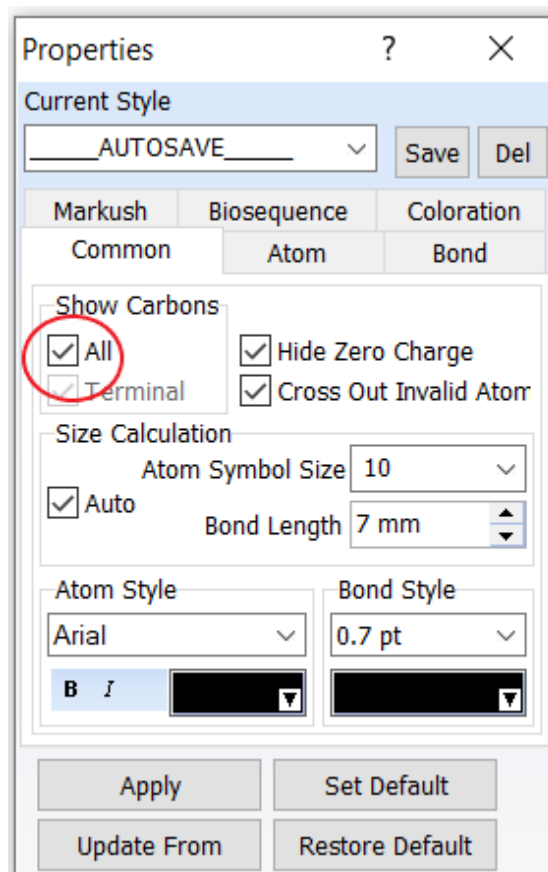
Slika 3: Postopek označevanja formule

KORAK 4

V orodni vrstici kliknite na *Tools* (**slika 4**) in nato izberite *structure properties*. Pojavi se novo okno v katerem odkljukajte *all* kot je prikazano na **sliki 5**.



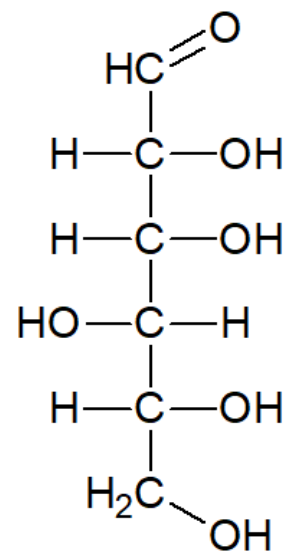
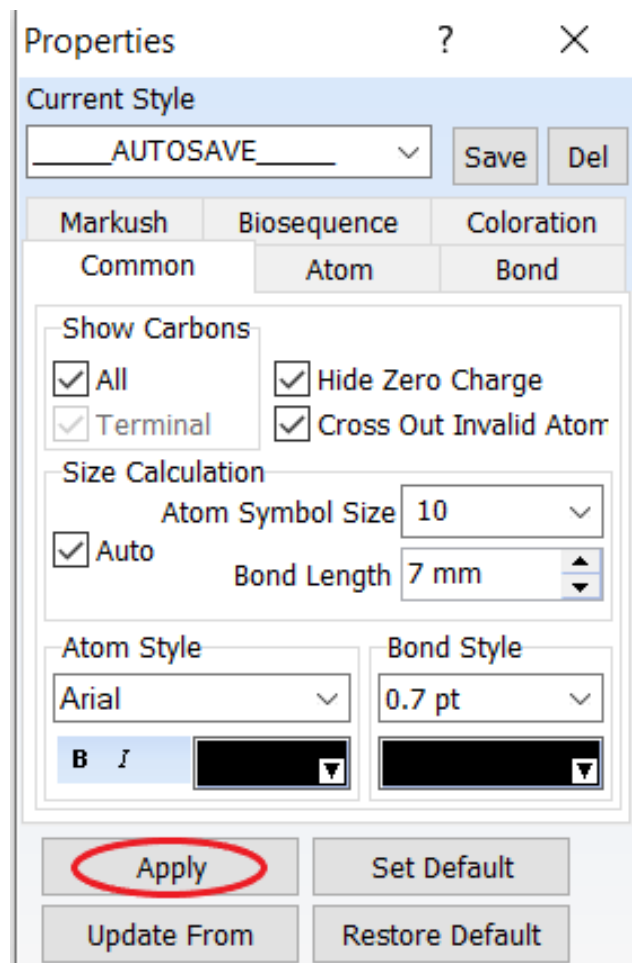
Slika 4: Izbira orodja v orodni vrstici



Slika 5: Izbira možnosti *All* omogoča prikaz vseh ogljikov

KORAK 5

Za prikaz Fischerjeve formule z izpisanimi vsemi atomi, kliknite na *Apply*. (slika 6)



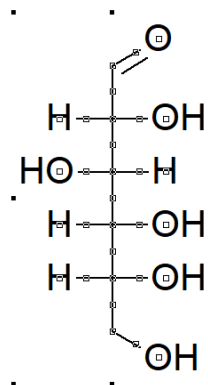
Slika 6: Izpis Fischerjeve formule D-glukoze

Primer 2

Generiranje imena narisane strukture.

KORAK 1

Narišite strukturo molekule kot je opisano v primeru 1. **Slika 7** prikazuje narisano in označeno strukturo D-glukoze.



Slika 7: Označena struktura D-glukoze

KORAK 2

V orodni vrstici kliknite na *Tools*, izberite *Generate* in nato za prikaz imena kliknite na *Name for Structure*. Postopek je prikazan na **sliki 8**.

The image shows a screenshot of the ChemSketch software interface. The 'Tools' menu is open, and the 'Generate' option is highlighted. A sub-menu is also open, showing the 'Name for Structure' option highlighted. The chemical structure of D-glucose is visible in the background.

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 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

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
|
CH₂—OH

H
|
O=C
|
H—C—OH
|
HO—C—H
|
H—C—OH
|
H—C—OH
|
CH₂—OH

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

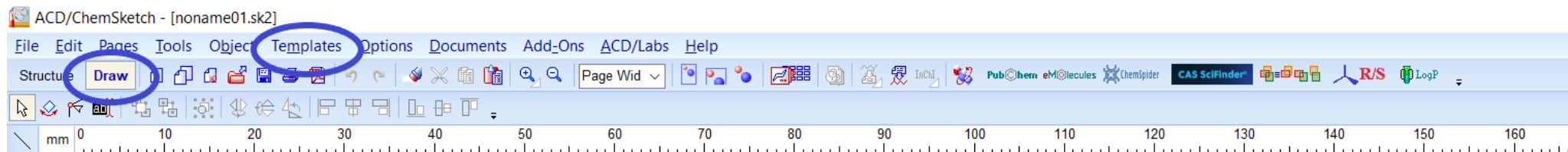
Slika 8: Postopek generiranja imena v ChemSketchu

Primer 3

Zapis glukoze s Haworthovo formulo in generiranje imena.

KORAK 1

V modulu *Draw* v orodni vrstici kliknite na *Templates* (slika 9).

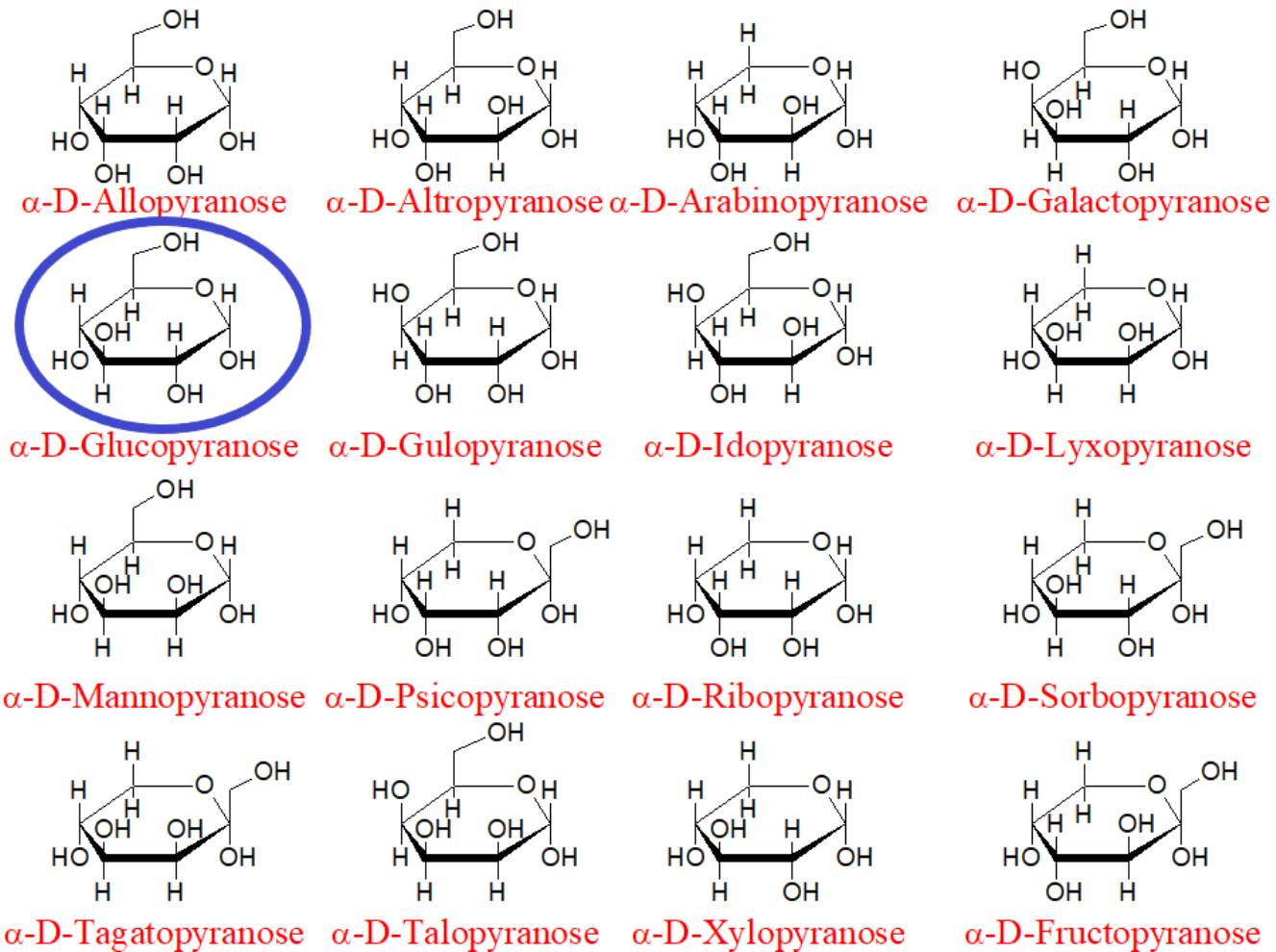


Slika 9: Izbira ustreznega orodja

KORAK 2

S klikom na *Template Window* odprite okno s predlogami. Vključite način *Draw* in nato kliknite na *Sugars:alfa-D-Pyr*.

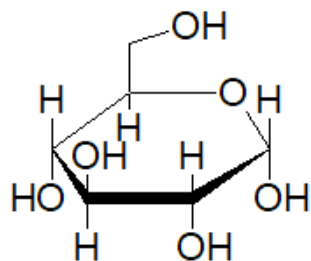
S klikom izberite formulo *α -D-glucopyranose* in jo prenesite na risalno površino. Opisani postopek je prikazan na sliki 10.



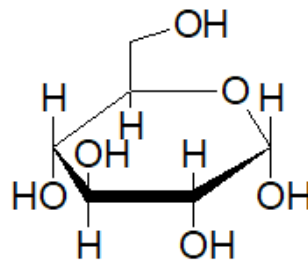
Slika 10: Izbira željene formule monosaharida iz ChemSketchevega okna s predlogami

KORAK 3

Za generiranje imena lahko uporabite enak postopek kot v prejšnjem primeru, lahko pa s klikom prenesete ime, ki je zapisano pod formulo v oknu s predlogami.



α -D-glucopyranose



α -D-Glucopyranose

Slika 11: Haworthova formula in ime izbranega monosaharida

Primer 4

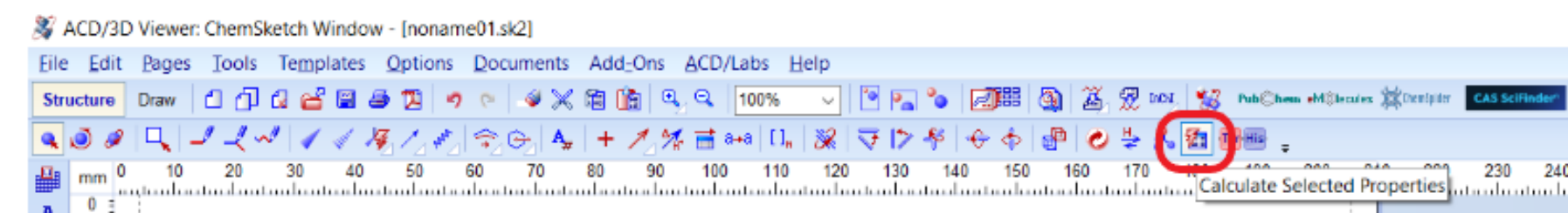
Izbira in prikaz lastnosti narisane spojine.

KORAK 1

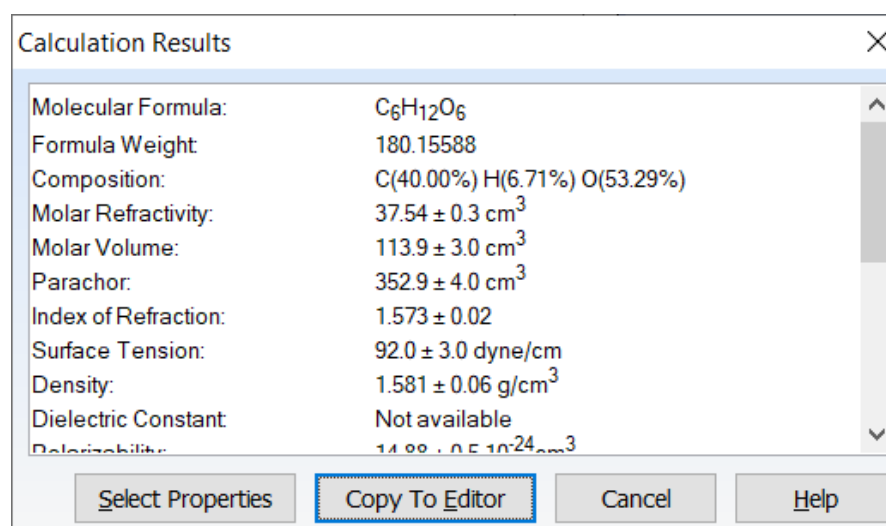
Narišite strukturo glukoze in jo označite.

KORAK 2

V vrstici z orodji kliknite na ikono *Calculate Selected Properties* kot prikazuje **slika 12**. Na **sliki 13** je prikazano pojavno okno s prikazanimi lastnostmi narisane spojine.



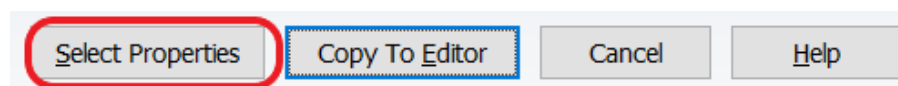
Slika 12: Izbira orodja za prikaz lastnosti narisane spojine



Slika 13: Pojavno okno s prikazanimi lastnostmi spojine

KORAK 3

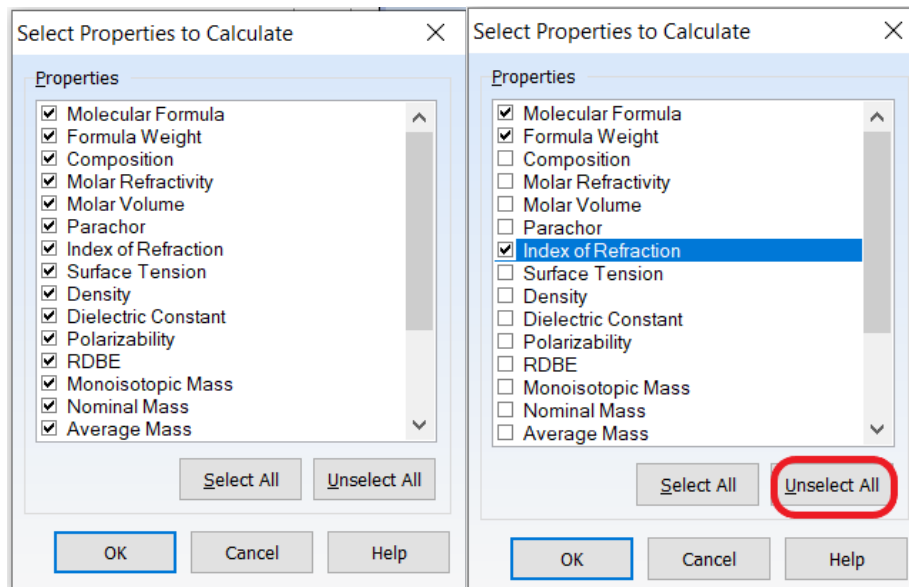
Za prikaz točno določenih lastnosti, najprej izberite *Select Properties* kot je prikazano na **sliki 14**.



Slika 14: Izbira gumba za prikaz lastnosti

KORAK 4

Kliknite na *Unselect all*, da odznačite vse lastnosti in nato izberite tiste, ki jih želite prikazati in jih potrdite s klikom na OK. (slika 15)



Slika 15: Odnajčitev vseh lastnosti in izbira samo željenih lastnosti

KORAK 5

Za prikaz izbranih lastnosti ob formuli, najprej v vrstici z orodji kliknite na ikono kot je prikazano na sliki 16. Nato kliknite na gumb *Copy to editor* (slika 17).

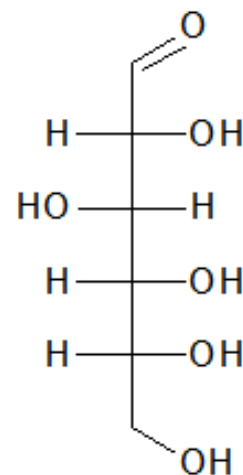


Slika 16: Izbira gumba za prikaz lastnosti ob formuli

Calculation Results

Molecular Formula:	C ₆ H ₁₂ O ₆
Formula Weight:	180.15588
Index of Refraction:	1.573 ± 0.02

Select Properties Copy To Editor Cancel Help



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

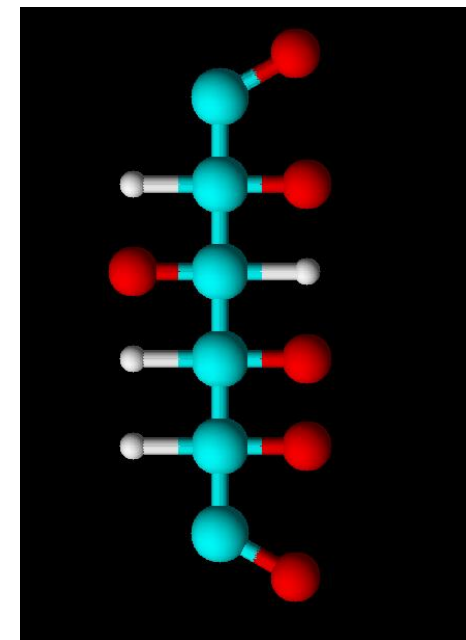
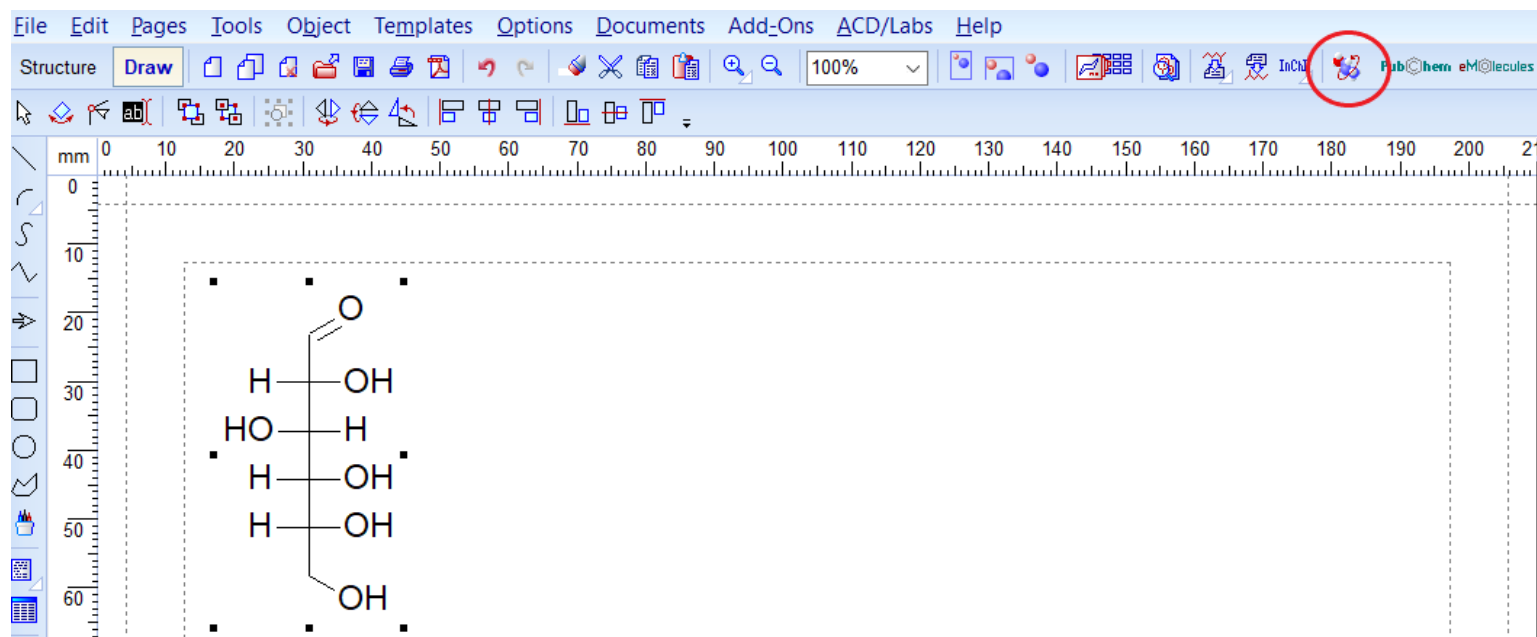
Slika 17: Postopek za prikaz izbranih lastnosti ob narisani strukturi

Primer 5

Prenos molekul D-glukoze in α -D-glukopiranoze v 3D.

KORAK 1

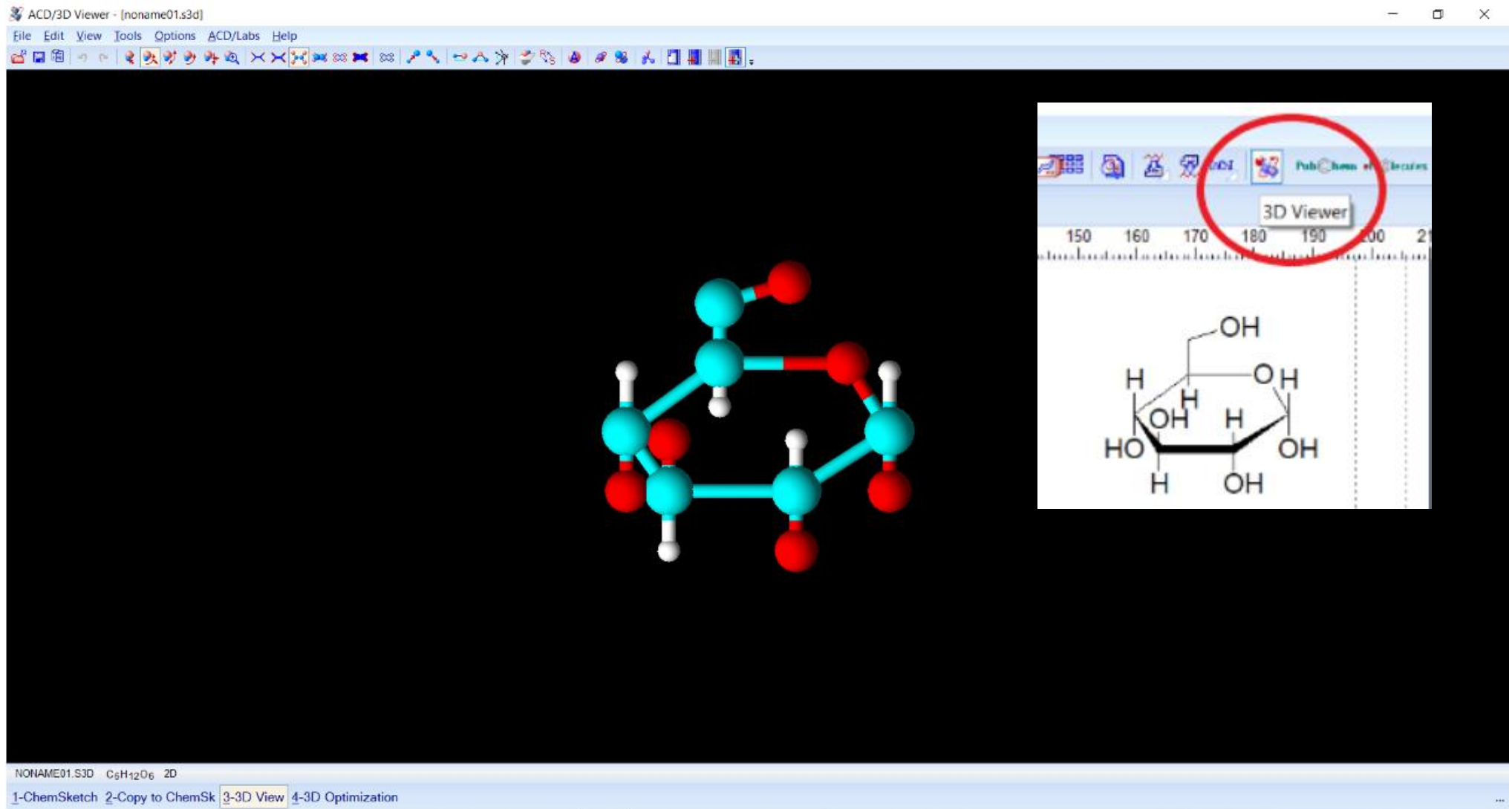
Označite Fischerjevo formulo narisane spojine in v vrstici z orodji kliknite na ikono 3D viewer kot prikazuje **slika 18**.



Slika 18: Izbira gumba za prenos strukture iz 2D v 3D in rezultat prenosa – 3D model

KORAK 2

Za prikaz modela spojine s Haworthovo formulo, označite narisano Haworthovo formulo in kliknite na ikono 3D-viewer (**slika 19**).



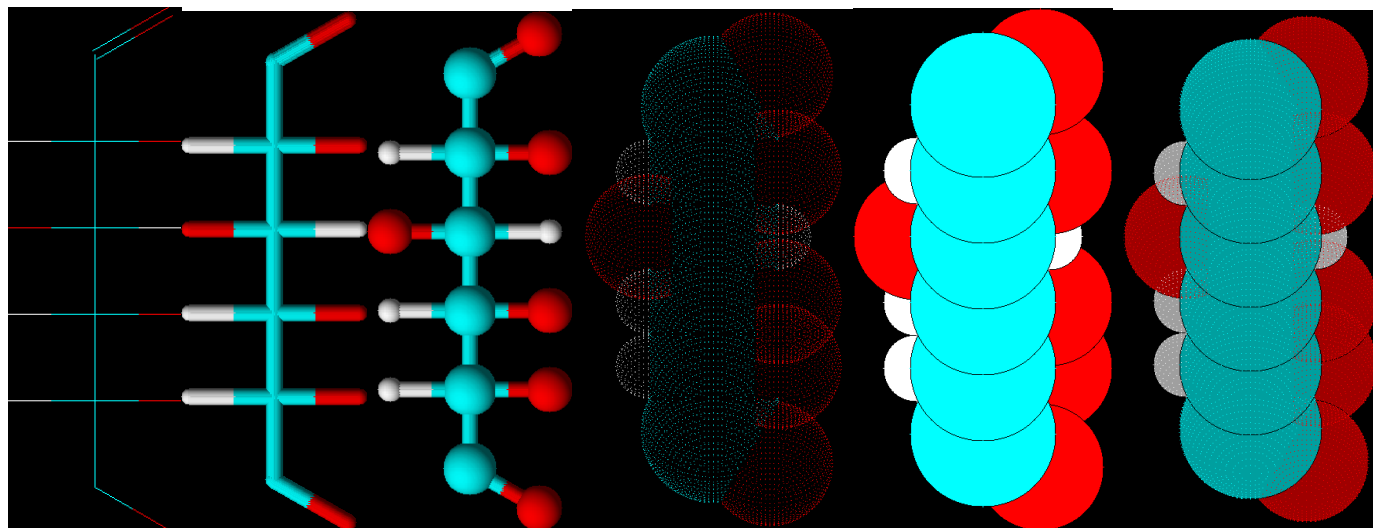
Slika 19: Prenos iz 2D v 3D in 3D model iz narisane Haworthove formule

Primer 6

Uporabite ikone, prikazane na **sliki 20**, za prikaz različnih modelov na **sliki 21**.



Slika 20: Ikone za izbiro različnih modelov

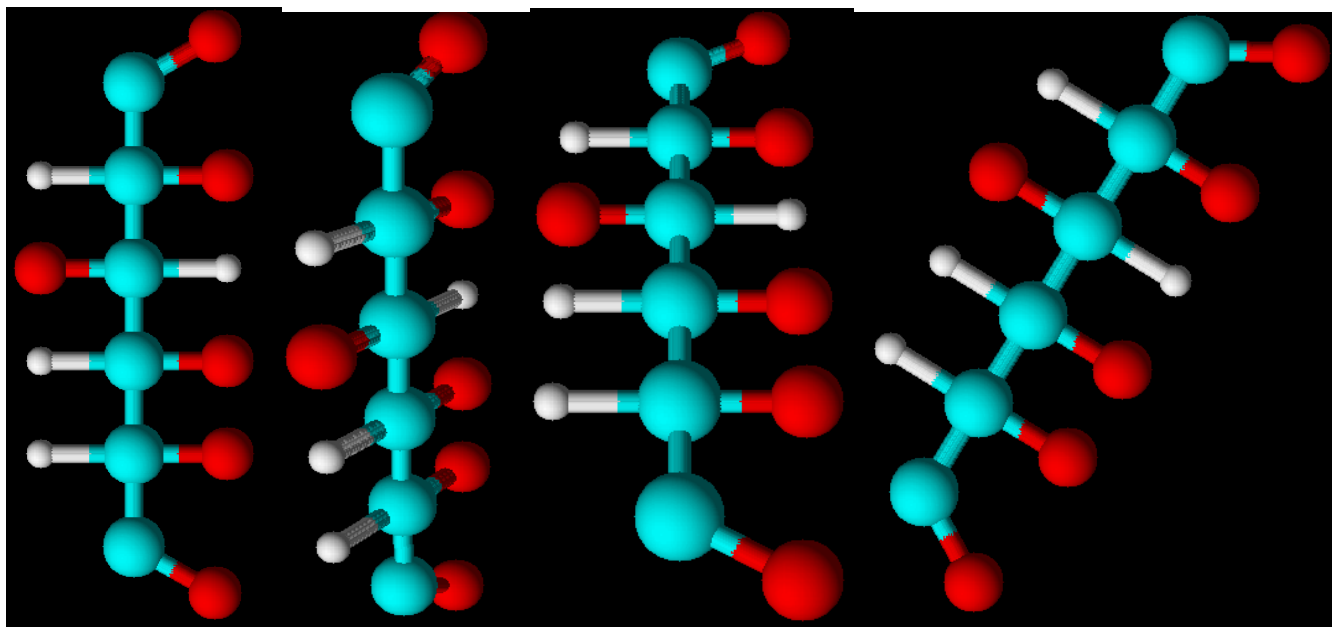


Slika 21: Različni 3D modeli narisane spojine

Uporabite ikone, prikazane na **sliki 22**, za različne možnosti rotacije, ki so prikazane na **sliki 23**.



Slika 22.Ikone za izbiro načina rotacije



Slika 23: Različno obrnjeni 3D modeli

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

Na internetu poiščite formulo fruktoze, jo narišite v *ChemSketchu*, nato opravite sledeče naloge:

- a) narišite dve vrsti monosaharidnih struktur,
- b) narišite Fischerjevo in Haworthovo formulo,
- c) uredite strukturo molekule, spremenite prikaz atomov in funkcionalnih skupin,
- č) generirajte ime,
- d) prikažite strukturo molekule s pomočjo *3D Viewerja*,
- e) uporabite ikone vseh vrst rotacij in ikone posebnih načinov za dolžine in atome,
- f) prikažite molekulsko formulo, molekulsko maso in lomni količnik.

Preglejte biomolekule na predlogah v *ChemSketchu*. Izberite eno iz vsakdanjega življenja in jo prikažite s pomočjo orodij v *ChemSketchu*.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti učnih vsebin

Na internetu poiščite formulo galaktoze, jo narišite v programu *ChemSketch* in opravite sledeče naloge:

- a) narišite dve vrsti monosaharidnih struktur,
- b) narišite Fischerjevo in Haworthovo formulo,
- c) uredite strukturo molekule, spremenite prikaz atomov in funkcionalnih skupin,
- d) generirajte ime,
- e) prikažite strukturo molekule s pomočjo *3D Viewerja*,
- f) uporabite ikone vseh vrst rotacij in ikone posebnih načinov za dolžine in atome,
- g) prikažite molekulsko formulo, molekulsko maso in lomni količnik.

V zvezek zapišite biološki pomen galaktoze in njene vire (pojavljanje v naravi).

KOORDINACIJSKE SPOJINE

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna enota: Prehodni elementi
Naslov: Koordinacijske spojine
Predvideno število ur: 2

1.1 Teoretične osnove

Koordinacijske spojine, znane tudi kot koordinacijski kompleksi, so spojine, sestavljene iz osrednjega kovinskega atoma/iona, ki ga obdaja skupina ligandov. Ligandi so anioni ali nevtralne molekule, ki lahko oddajo par ali pare elektronov in so s kovinskim ionom povezani s koordinacijskimi kovalentnimi vezmi. To je kovalentna vez, pri kateri en atom - atom donor - prispeva oba elektrona. Ligandi so lahko enovezni ali večvezni.

Kompleksi so lahko nevtralni ali pa imajo naboj. Če ima koordinacijski kompleks neto naboj, se kompleks imenuje kompleksni ion.

Koordinacijsko število je število donorskih atomov, vezanih na osrednji kovinski atom/ion.

Številne koordinacijske spojine imajo značilno geometrijsko strukturo. Dve pogosti obliki sta kvadratno planarna, pri kateri so štirje ligandi razporejeni v ogliščih hipotetičnega kvadrata okoli osrednjega atoma kovine in oktaedrična, pri kateri je razporejenih šest ligandov, štirje v ravnini ter po en nad in pod ravnino.

Pri koordinacijskih spojinah se pojavljajo tudi različne vrste izomerije. Spojine imajo enako molekulsko formulo in različno razporeditev ligandov okoli kovinskega iona. To vodi do različnih fizikalnih in kemijskih lastnosti, zaradi česar so koordinacijske spojine uporabne za različne namene, med drugim kot katalizatorji, pigmenti in zdravilne učinkovine.

Primeri

Formula	Ime	Ligand	Koordinacijsko število	Struktura
$[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$	diaminsrebrov(I) ion	NH_3	2	linearna
$[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$	tetracianidocinkatni(II) ion	CN^-	4	tetraedrična
$[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$	tetracianidonikolatni(II) ion	CN^-	4	kvadratno planarna
$[\text{PtCl}_6]^{2-}$	heksakloroplatinatni(IV) ion	Cl^-	6	oktaedrična
$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$	heksaaminkobaltov(III) ion	NH_3	6	oktaedrična
$[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$	diamindikloridoplatina(II)	NH_3 , Cl^-	4	kvadratno planarna cis trans izomerija

1.2 Učni cilji

V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

- narisati različne primere koordinacijskih ionov in spojin ter jih predstaviti s strukturno formulo,
- določiti koordinacijsko število in obliko,
- prikazati strukture spojin v treh dimenzijah,
- vrteti molekule v dveh in treh dimenzijah.
- način prikaza struktur molekul v treh dimenzijah.
- premikati molekule v tridimenzionalni in dvodimenzionalni tehniki,
- določiti dolžine vezi in kote med vezmi v molekulah,
- optimizirati strukture narisanih spojin,
- v računalnik shraniti dvodimenzionalno in tridimenzionalno strukturo želenega koordinacijskega iona ali spojine.

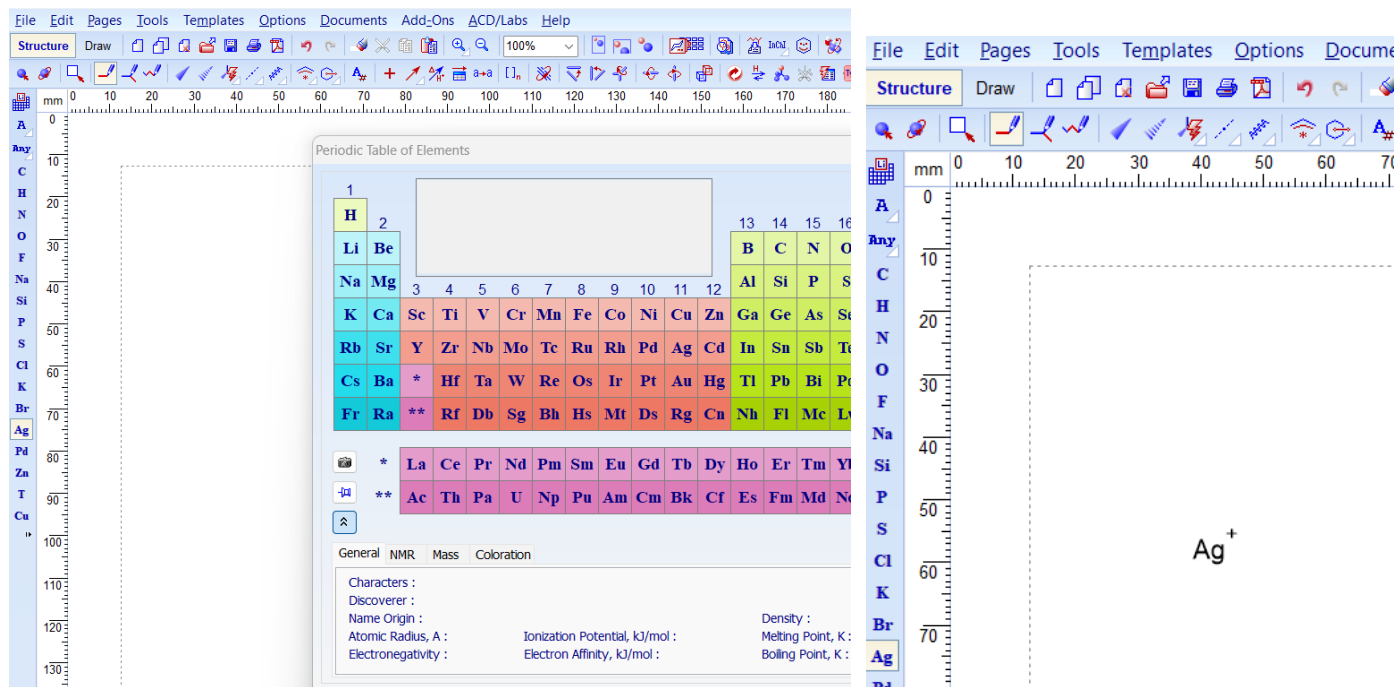
1.3 Navodila za uporabo programske opreme ChemSketch

Primer 1

Narišite $[\text{Ag}(\text{NH}_3)_2]^+$ ter prikažite strukturo narisane iona v 3D, uporabite različne funkcije prikaza ter določite/popravite kot med vezmi.

KORAK 1

Izberite način *Structure mode*. Iz periodnega sistema izberite Ag (orožna vrstica na levi strani) ter kliknite na risalno površino (**slika 1a in 1b**). Ko prvič izberete nek element, ga morate izbrati iz periodnega sistema, kasneje se pojavi v orožni vrstici (na levi strani).

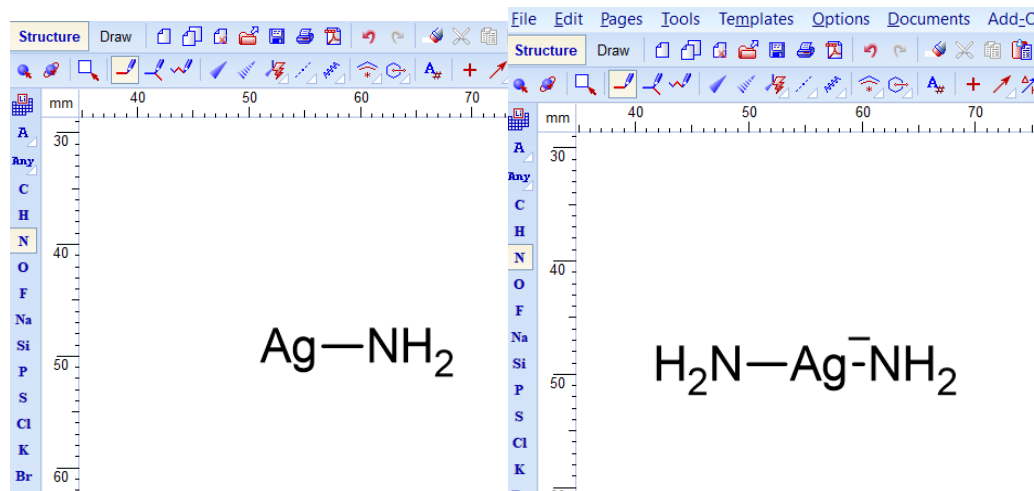


Slika 1: a) Izbira ustreznega elementa

b) Ag na risalni površini

KORAK 2

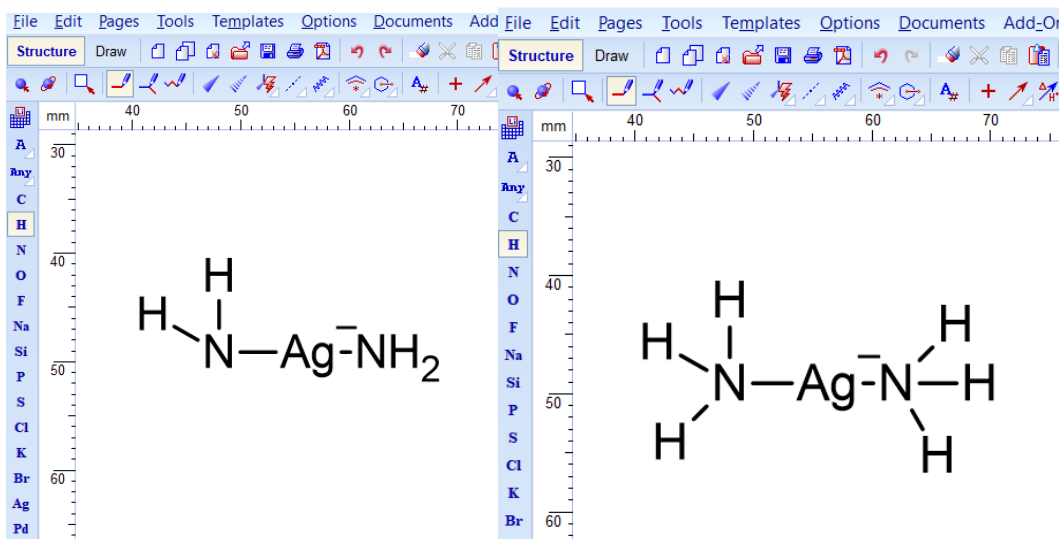
Izberite način *DrawNormal*, izberite N iz orožne vrstice na levi strani (ali z periodnega sistema) in narišite vez na vsako stran Ag (**slika 2**).



Slika 2: Risanje vezi Ag-N

KORAK 3

Narišite tri vezi N-H na vsakem dušikovem atomu (slika 3 a in 3 b). Ponovite na drugem dušikovem atomu.

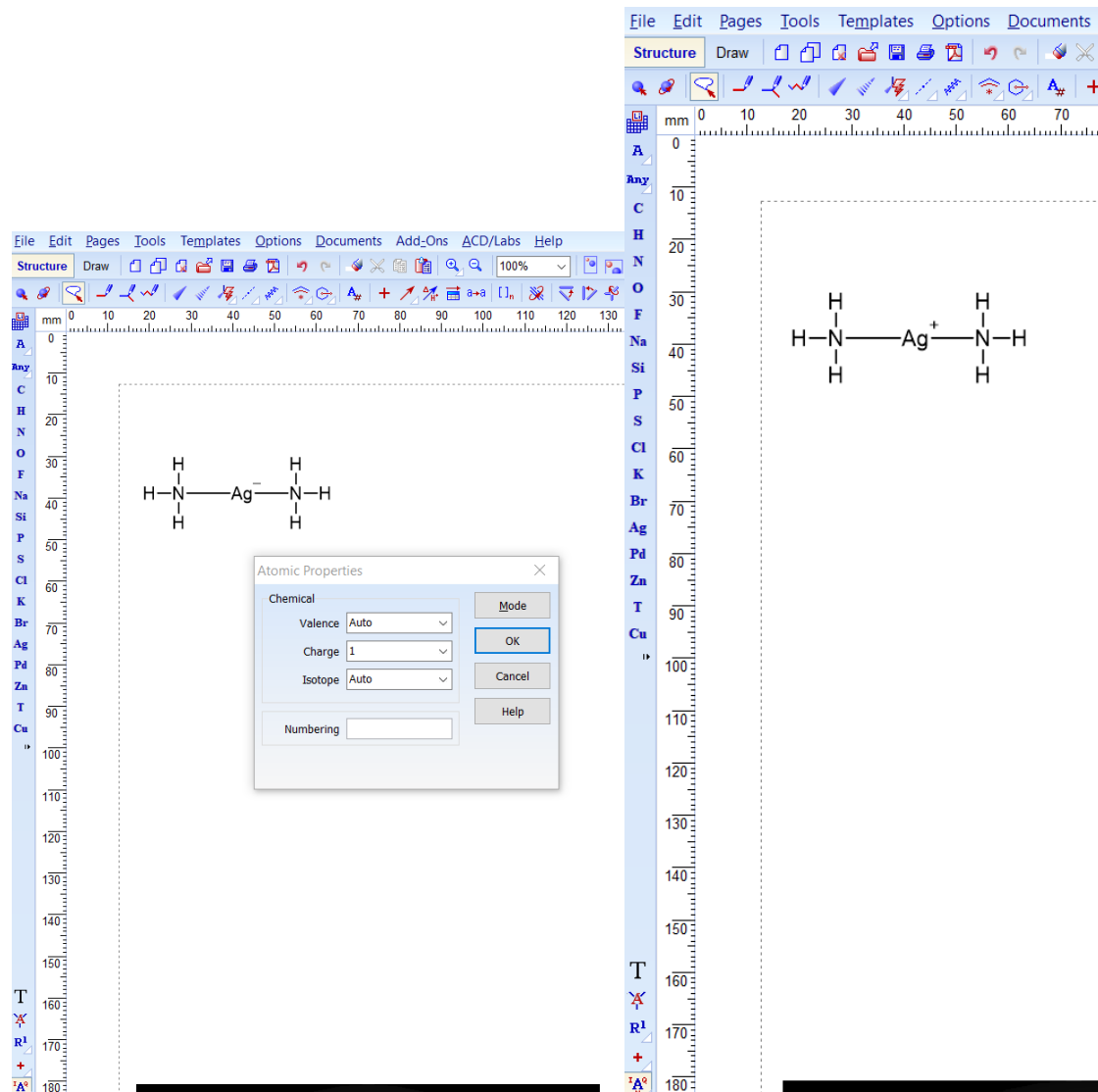


Slika 3: Risanje vezi N-H

KORAK 4



Izbira pravilnega naboja srebrovemu atomu.

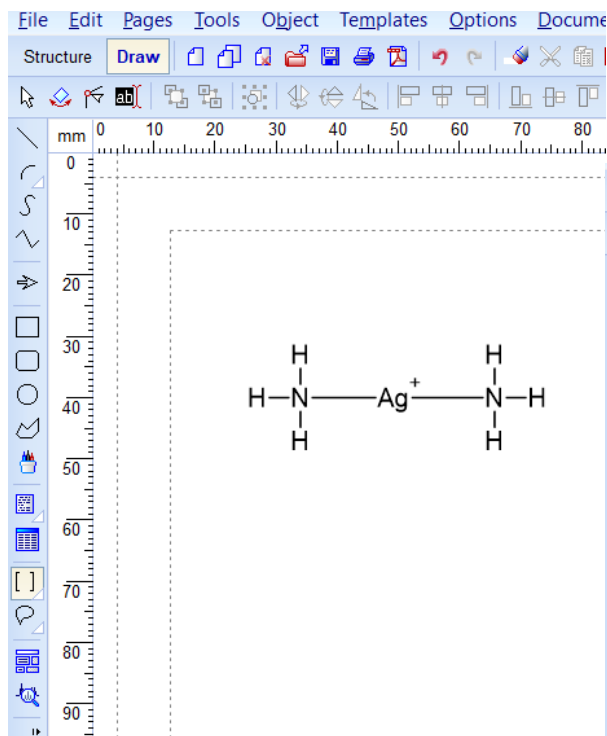
Izberite ikono  (*Atom chemical properties*) kliknite na Ag in spremenite naboj. Kliknite OK (**slika 4**).



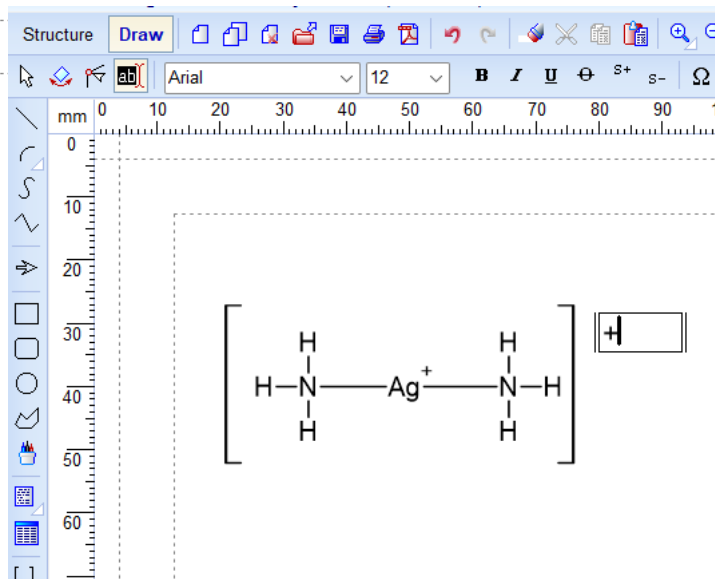
Slika 4: Izbira pravilnega naboja

KORAK 5

Dodajmo še oglate oklepaje in naboj iona. Preklopite na *Draw mode* in izberite  (slika 5 a). Izberite  v načinu *Draw mode* in napišite naboj iona (slika 5 b).




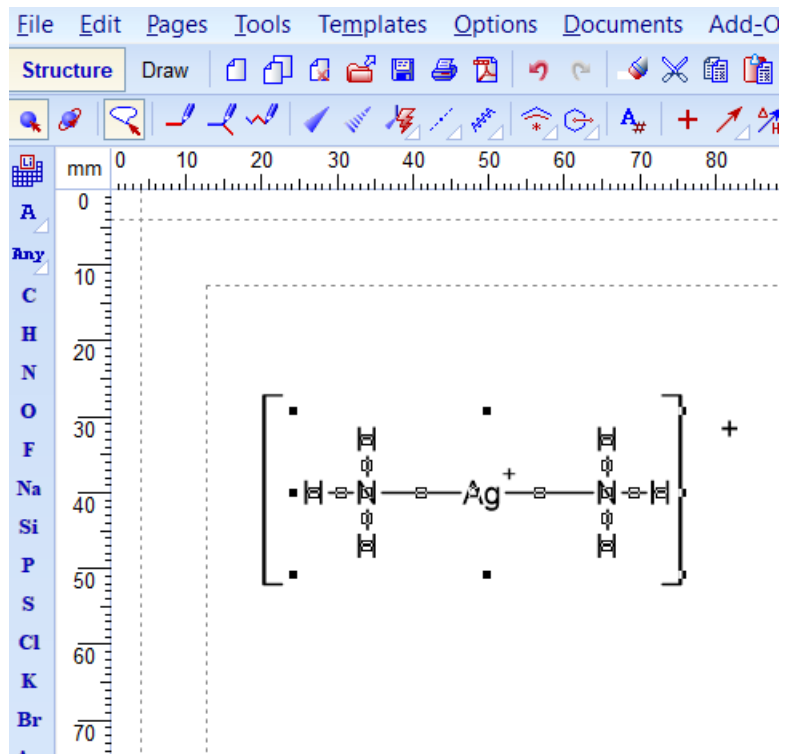
Slika 5: a) Dodajanje oglatega oklepaja



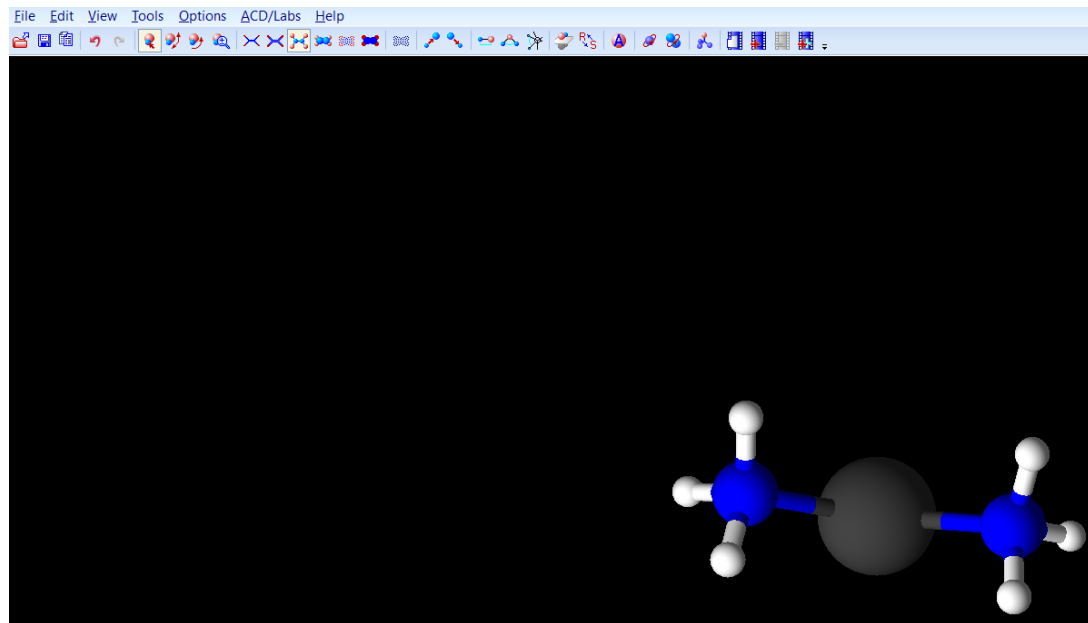
b) Dodajanje naboja iona

KORAK 6

Označite strukturo ter jo predstavite v 3D, tako da uporabite ikono , ki se nahaja na zgornjem delu orodne vrstice. Prikaže se novo okno s 3D strukturo (slika 6 a in b).




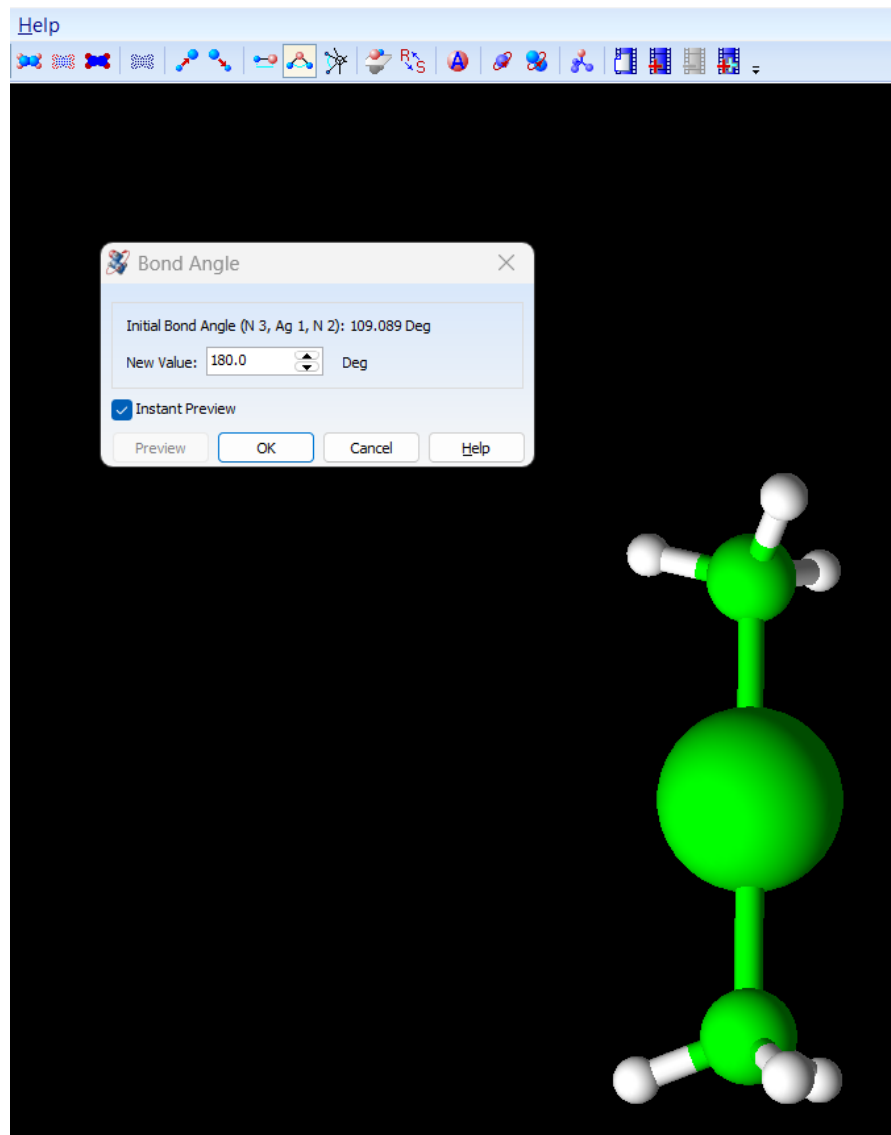
Slika 6: a) Označevanje strukture



Slika 6: b) Predstavitev strukture v 3D načinu


KORAK 7

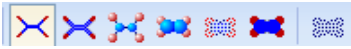
Za prikaz kota med vezmi izberite ikono  (*Bond angle*). Za prikaz kota med vezmi je potrebno kliknit na dušikov atom (ki spremeni barvo v zeleno), nato pa na srebrov in drugi dušikov atom. Odprlo se bo okno s prikazano vrednostjo. Vrednost lahko spremenimo v ustrezno (**slika 7**).





Slika 7: Določitev kota med vezmi

KORAK 8

Uporabite funkcije iz zgornje orodne vrstice, ki omogočajo vrtenje, premikanje izbiranje: , nato uporabite še ikone:

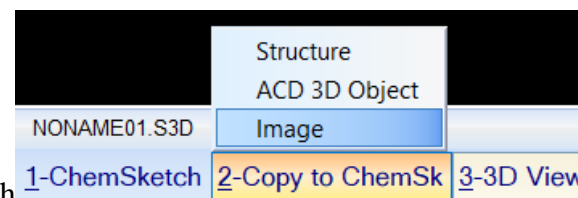
, ki omogočajo predstavitev strukture na različne načine (palični model, kalotni ...).

Z uporabo ikone  se struktura samodejno obrača.

Če izberete ikono  se bo struktura samodejno vrtela in spreminjal se bo način prikaza.

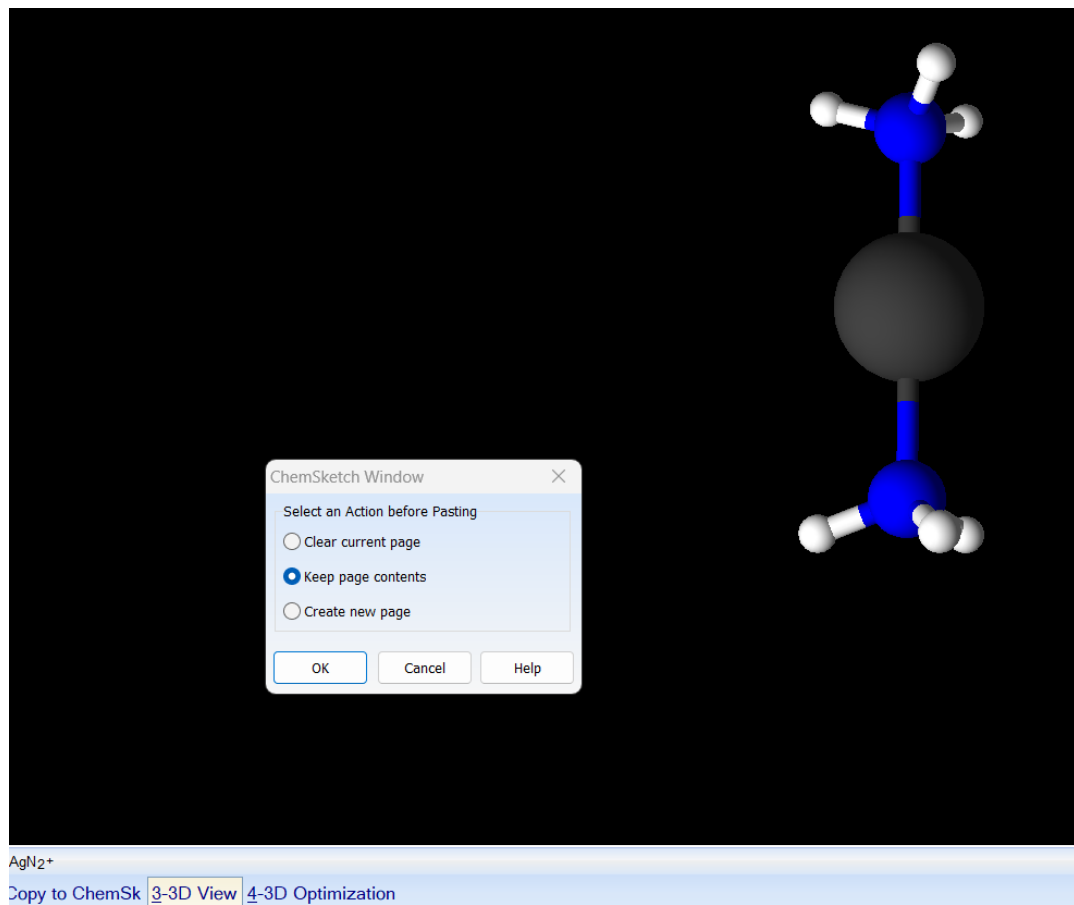
KORAK 9

Sedaj lahko urejeno strukturo vrnemo v ChemSketch s klikom na *Copy to ChemSketch* ter izbiro opcije *Structure* (**slika 8**) na spodnjem delu ekrana. Optimizirana struktura se sedaj prikaže na risalni površini ChemSketch.



Slika 8: Kopiranje optimizirane 3D strukture v ChemSketch

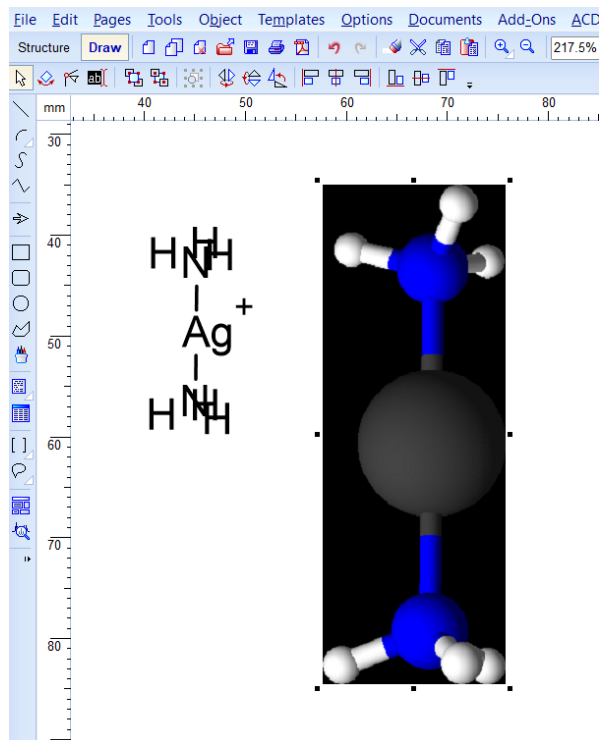
Če izberemo možnost *Copy to ChemSketch* in nato *Image* (**slika 9 a in b**) bomo kopirali sliko 3D modela v ChemSketch.



Slika 9: a) Kopiranje slike 3D modela ChemSketch

KORAK 10

S klikom na *File* in nato na *Save As* lahko shranite 2D strukturo in 3D modele na računalnik.



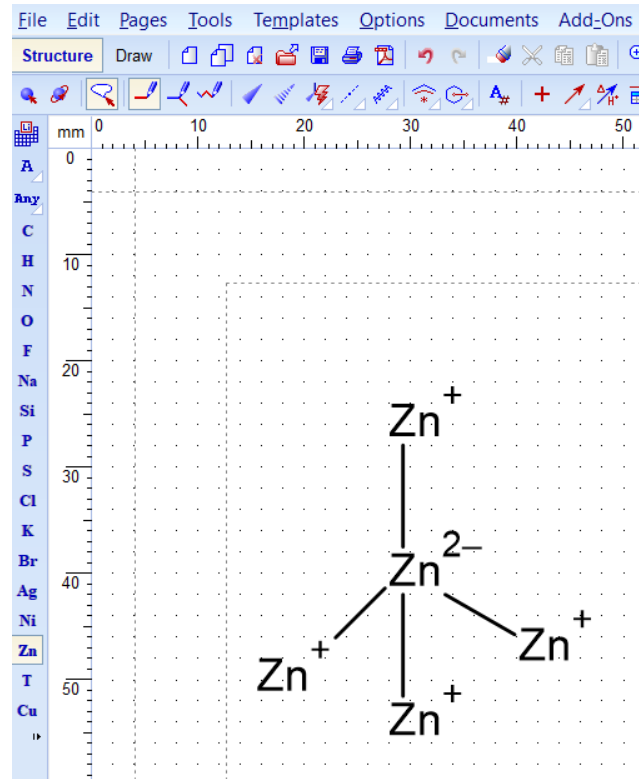
Slika 9: b) Prenešena slika 3D modela.

Primer 2

Narišite $[\text{Zn}(\text{CN})_4]^{2-}$. Ion ima obliko tetraedra.

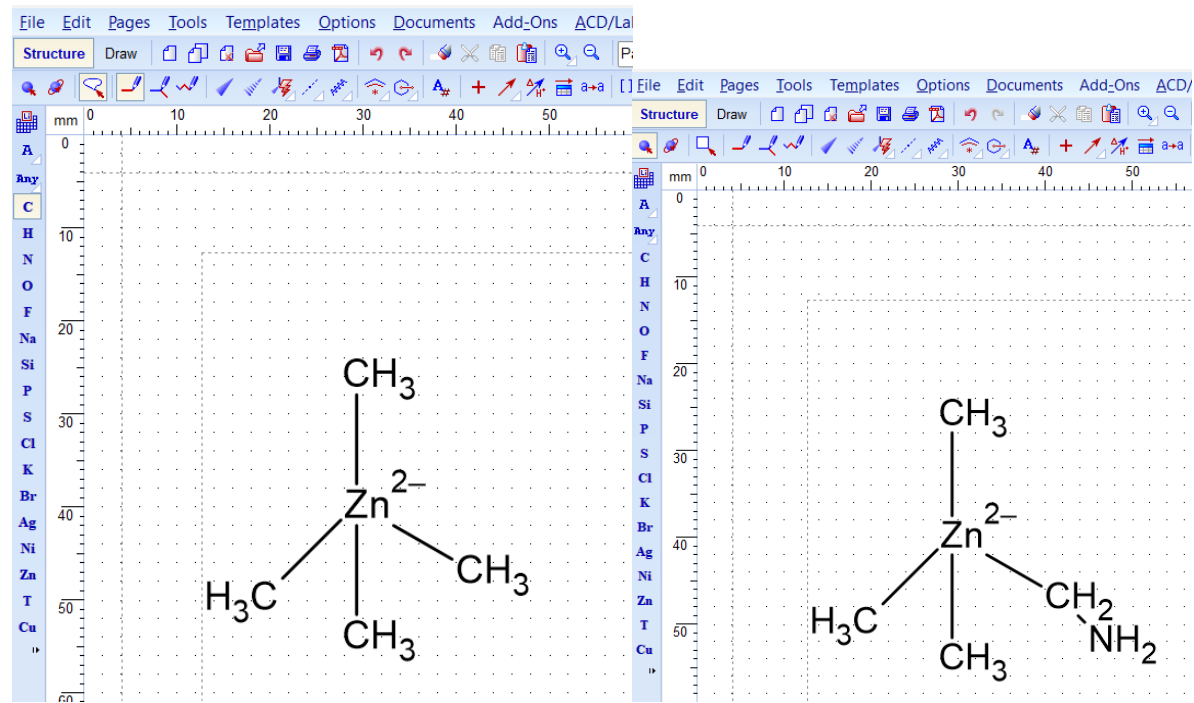
Narišite strukturo po predhodno naučenih korakih (**slike 1 do 9**). Nato uporabite prej naučene **korake (od 1 do 9)** na tem primeru.

Začnite v načinu *Structure mode* in izberite *DrawNormal*. Iz periodnega sistema izberite cink (Zn) in ga postavite na risalno polje. Narišite tetraedrično strukturo (**slika 10**).



Slika 10: Risanje tetraedrične structure

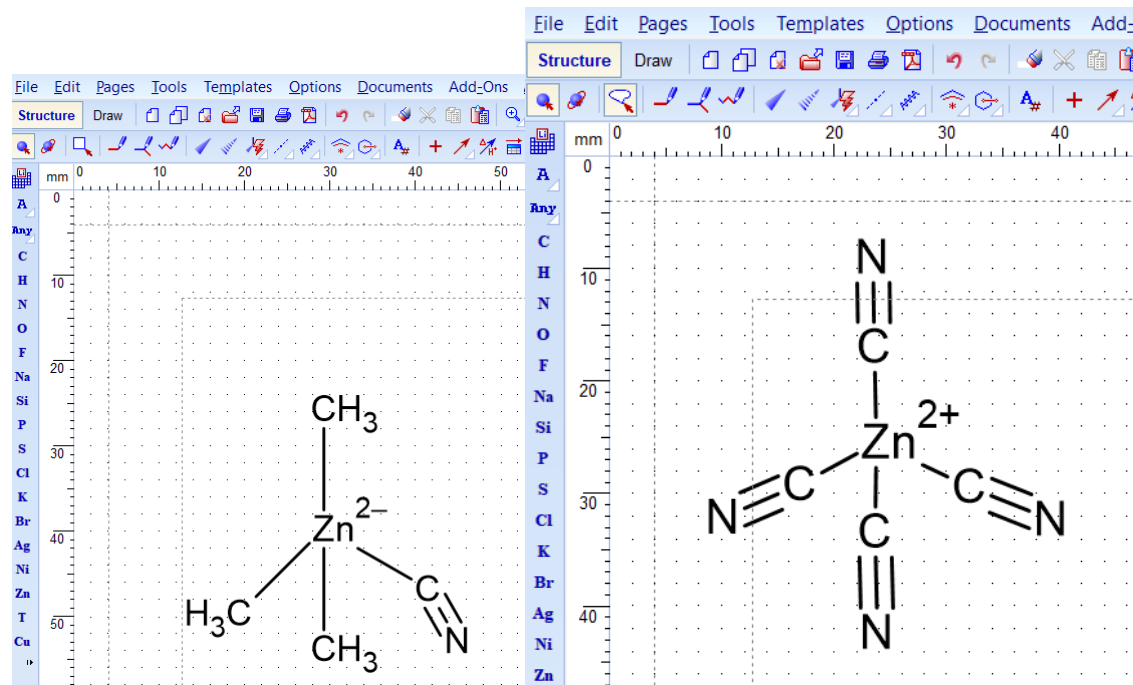
Štiri atome Zn (razen osrednjega) zamenjajte s skupino CN. Najprej izberite C v levi orodni vrstici in zamenjajte Zn. Nato izberite N in narišite trojno vez (z miško se postavite na vez, okoli vezi se bo pojavil pravokotnik, nato kliknite nanj, da ustvarite trojno vez na atom ogljika (**slike 11 a, b, c in d**)). Cinku spremenite naboj v pravičnega.



a

b

Slika 11: Risanje liganda CN – zaporedje ukazov





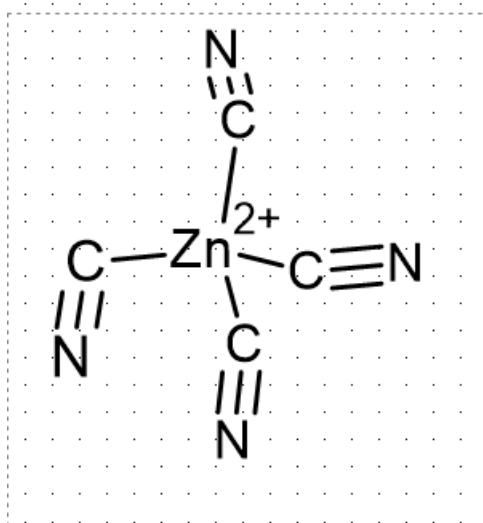
c

d

Slika 11: Risanje liganda CN – zaporedje ukazov

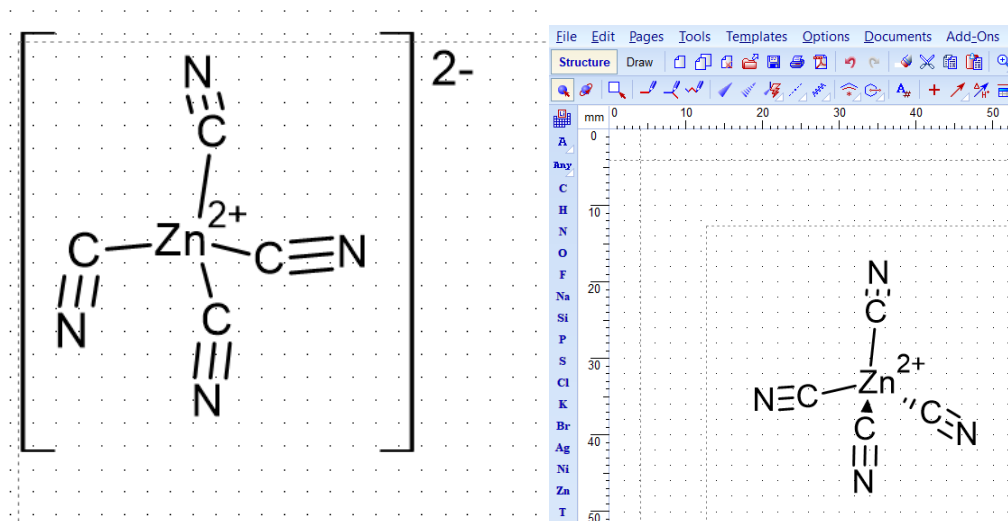
Uporabite ikono *Select/Move*  in prilagodite dolžine vezi in kote med njimi.

Za ustrežnejši prikaz strukture jo označite z  in nato uporabite možnost 3D optimizacijo: .



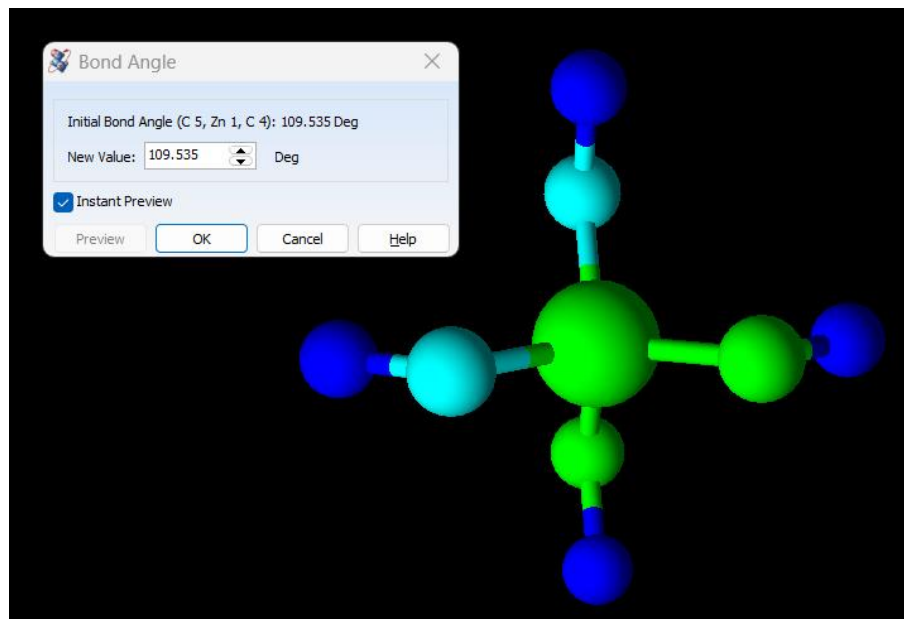
Slika 12: Spojina po 3D optimizaciji

Dodajte še oglate oklepaje in naboj iona. Glejte **primer 1**.



Slika 13: Prikaz strukture

Predstavitev spojine v načinu 3D. Glejte **primer 1**.



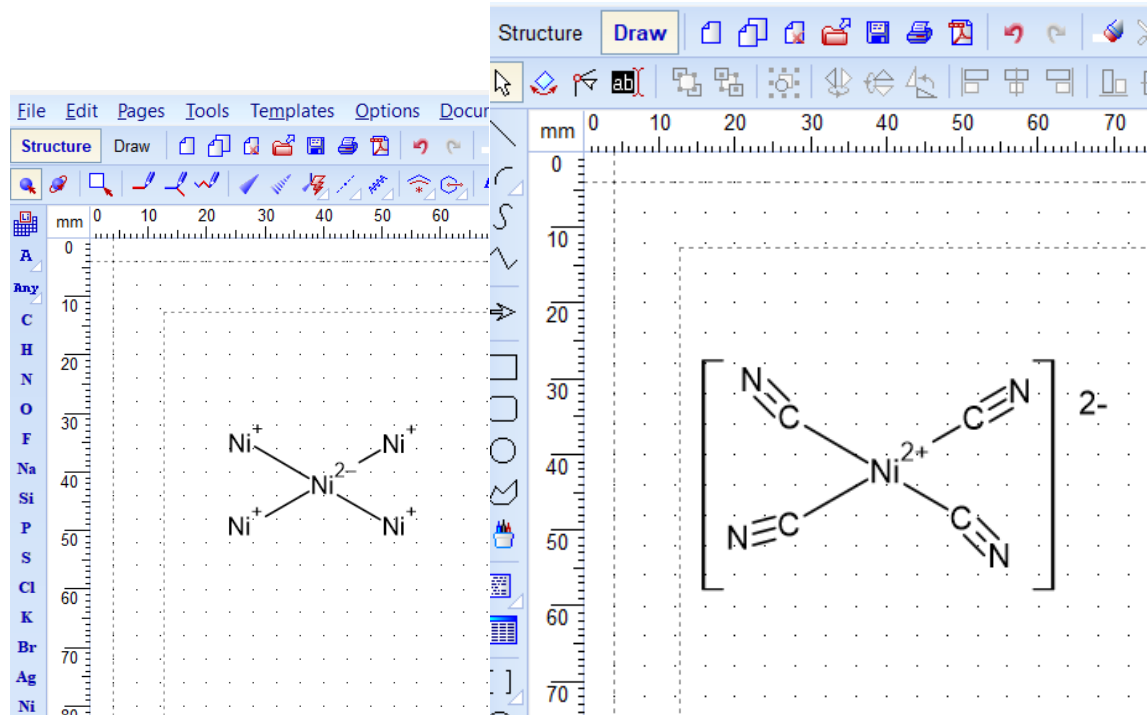
Slika 14: 3D prikaz spojine in kotov med vezmi

Uporabite še možnost vrtenja spojine (**KORAK 8, primer 1**).

Primer 3

Narišite $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$. Ion ima kvadratno planarno obliko.

Začnite v načinu *Structure mode* in izberite *DrawNormal*. Sledite korakom **primera 1**.

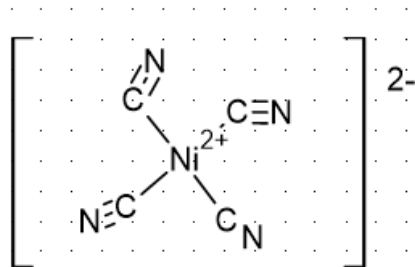


Slika 15: Prvi koraki risanja iona $[\text{Ni}(\text{CN})_4]^{2-}$

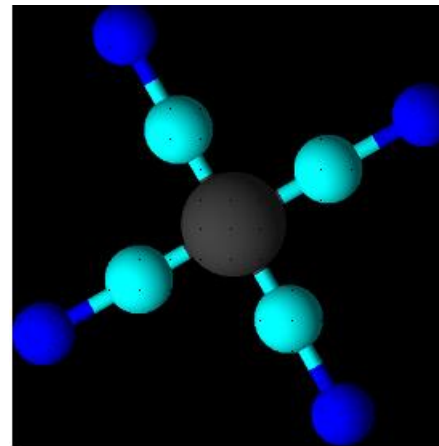
Slika 16: Ion pred urejanjem

Zamenjajte Ni (razen osrednjega) s CN kot v **primeru 2 (slika 16)**.

Ion po urejanju – uporabite možnost *Clean structure* in 3D optimizacijo.



Slika 17: Ion po optimizaciji



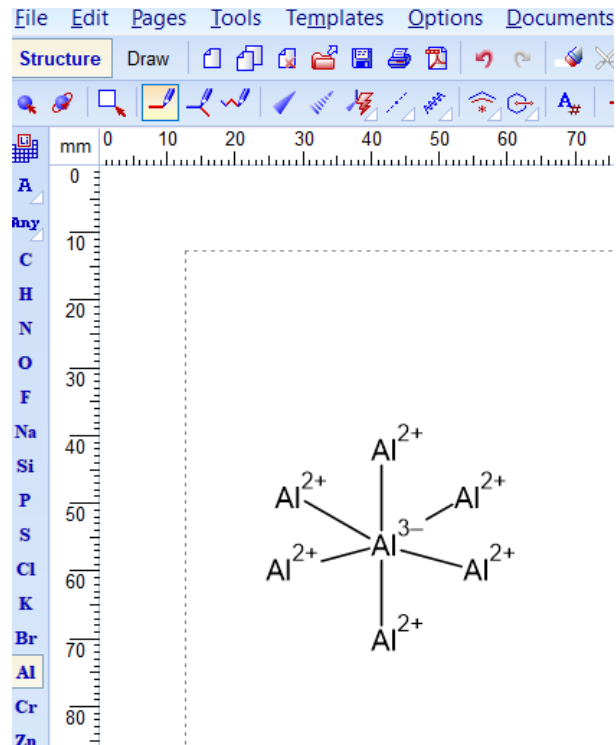
Slika 18: 3D model

Primer 4 (izbirno)

Narišite $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]^{3+}$. Ion ima oktaedrično obliko. Sledite korakom **primerov 1 in 2**.

KORAK 1

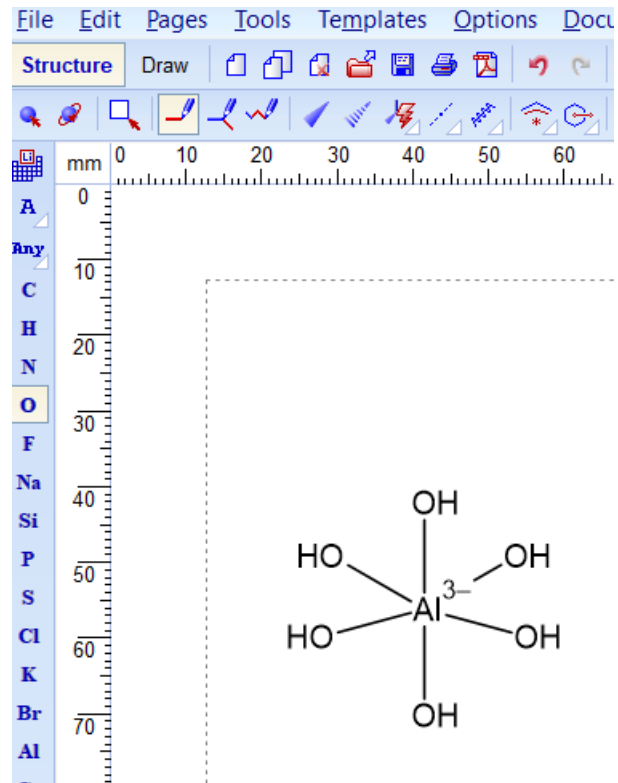
Narišite oktaedrično struktur (**slika 20**).



Slika 20: Oktaedrična struktura

KORAK 2

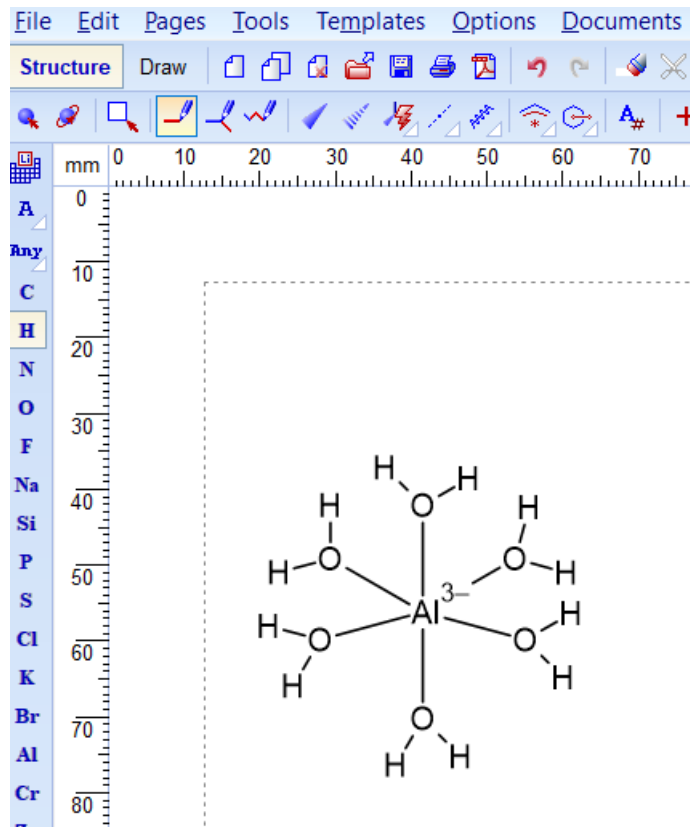
Izberite atom kisika in nadomestite atome aluminija (vse razen osrednjega). Prikaže se skupina OH (**slika 21**).



Slika 21: Zamenjava atomov Al s kisikovimi

KORAK 3

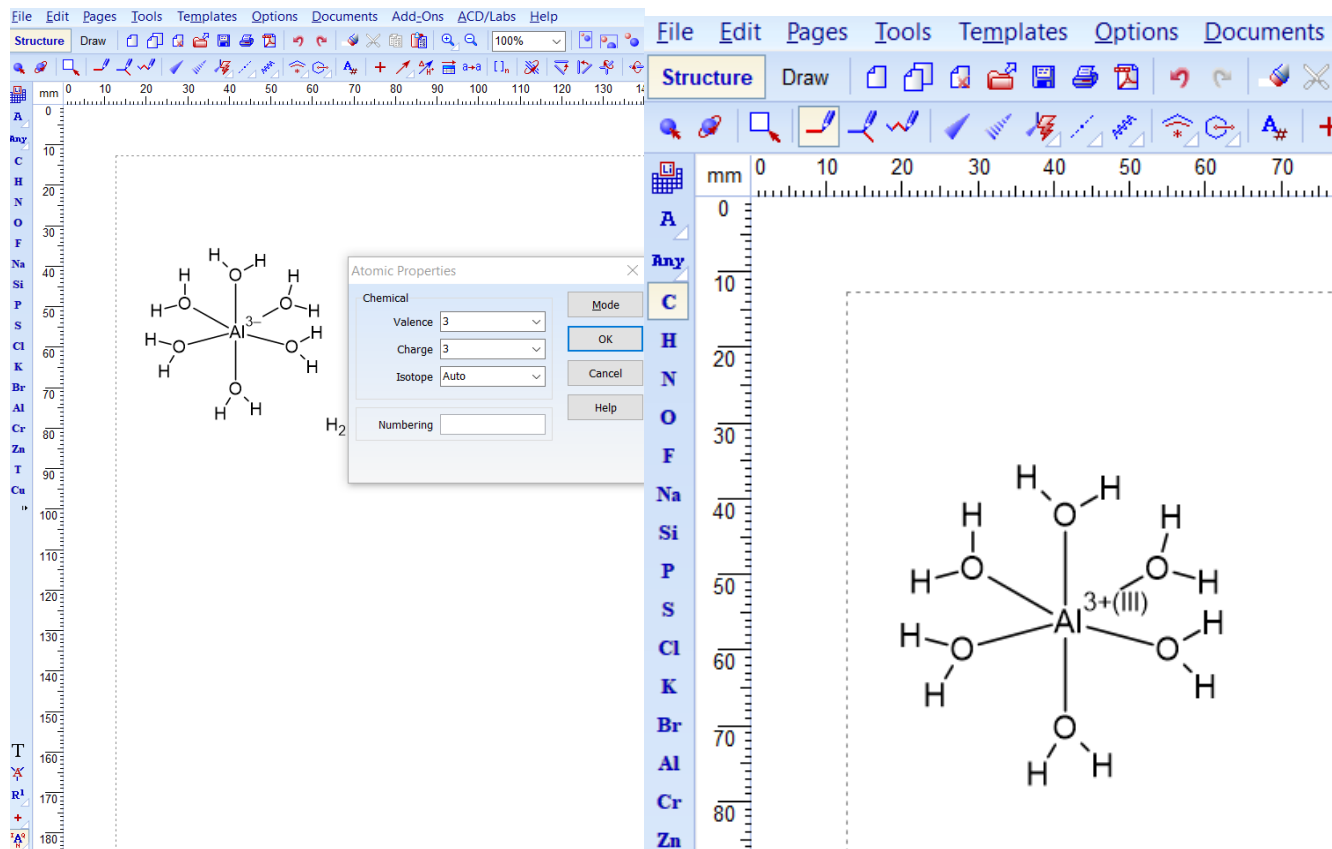
Izberite atom vodika in narišite dva na vsakem kisikovem atomu (slika 22).



Slika 22: Risanje atomov vodika


KORAK 4

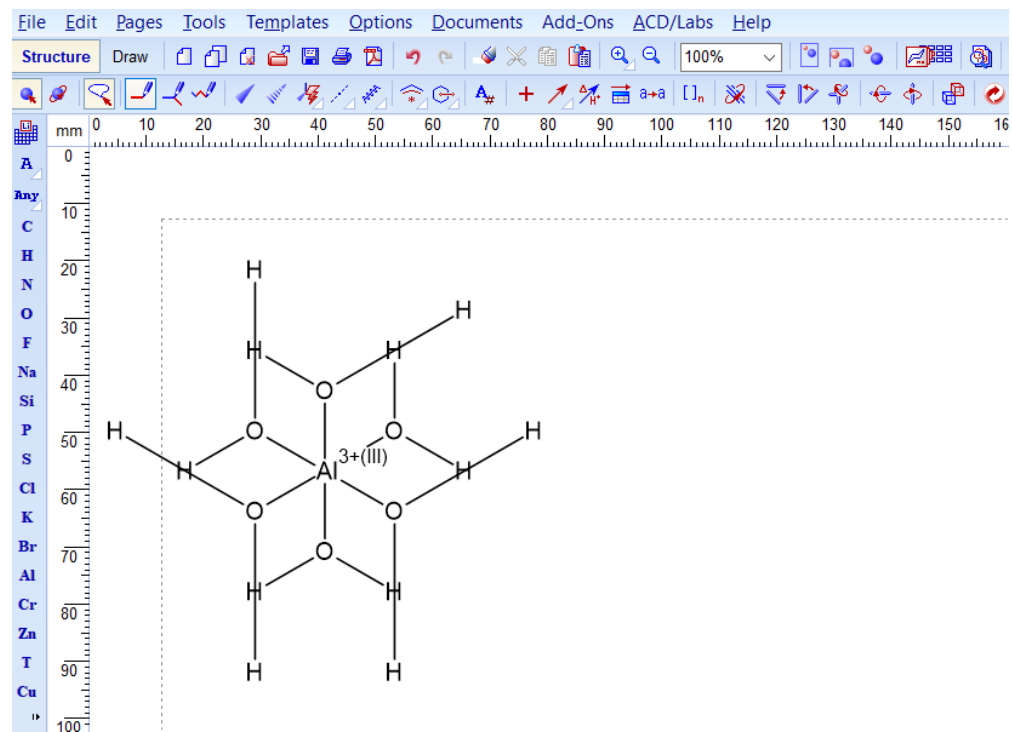
Izbira pravilnega naboja aluminiju. Izberite *Atom properties* (orodna vrstica na levi strani ekrana) in izberite pravilni naboj (**slika 23**).



Slika 23: Zapis pravega naboja na Al


KORAK 5

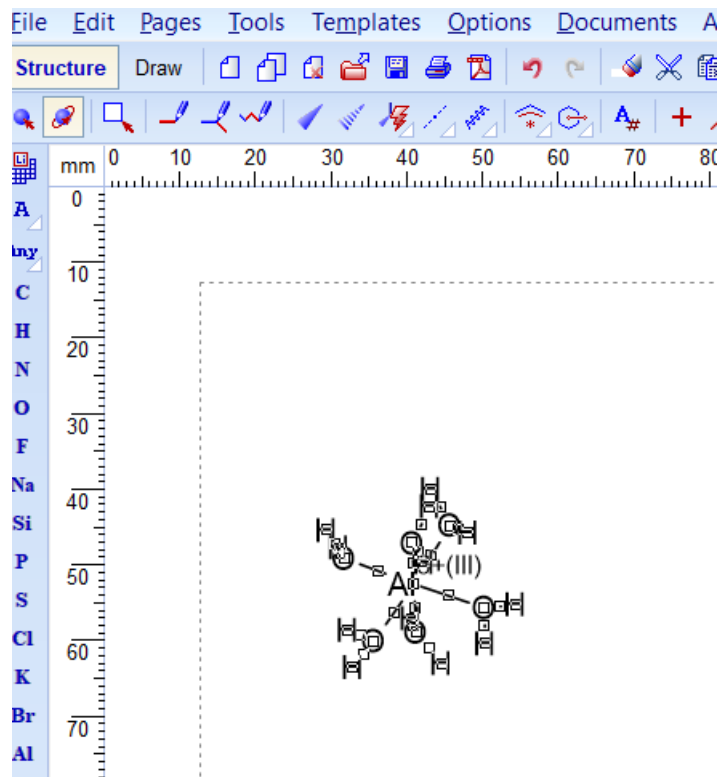
Izboljšajte izgled narisane strukture z uporabo gumba  (slika 24).



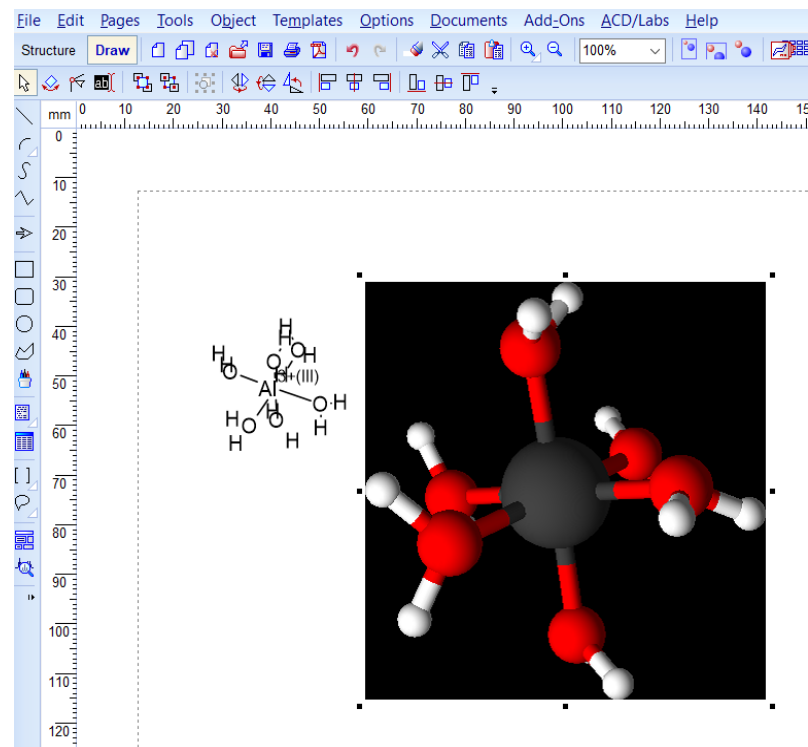
Slika 24: Izgled narisane strukture po urejanju

KORAK 6

Prikažite 3D model strukture. Izberite narisano strukturo in kliknite na gumb.  . Pokaže se novo okno (*3D Viewer*) s 3D modelom (**slika 25 a in b**).



a



b

Slika 25: a) Optimizirana struktura b) 3D model

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

1. Poiščite primer obarvanega koordinacijskega iona. Narišite ga. Opišite njegovo strukturo in navedite koordinacijsko število. Navedite tip liganda (enovezni ali...)

Nato predstavite to spojino v 3D, jo optimizirajte in shranite na računalnik.

2. Raziščite uporabo koordinacijskih spojin v vsakdanjem življenju. Izberite eno spojino za prikaz v programu ChemSketch. V zvezek zapišite uporabo izbrane spojine v vsakdanjem življenju.

Optimizirano 2D in 3D strukturo teh struktur shranite na računalnik.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti učnih vsebin

1. Narišite spojino: $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_2\text{Cl}_2]$ in njene geometrijske izomere. Poimenujte obe izomeri, določite vrsto ligandov ter:

- a) prikažite strukturo v načinu 3D.
- b) prikažite strukturo v načinu 3D ter preizkusi različne načine prikaza.
- c) določite/popravite kote med vezmi.
- č) shranite 2D in 3D strukture na svoj računalnik.

RISANJE LABORATORIJSKIH APARATUR

1 OBDELAVA UČNIH TEM

Učna tema: Risanje aparatur
Učna enota: Rotacijski vakuumski uparjalnik
Predvideno število ur: 2

1.1 Teoretični uvod

Izhlapevanje je proces, pri katerem se tekoča snov spremeni v plinasto. Uporablja se na primer za sušenje trdne snovi, za ločevanje tekočine od raztopine v tako imenovanih uparjalnikih. Rotacijski vakuumski uparjalnik (rotavapor) je laboratorijska naprava, ki se uporablja za hitro izhlapevanje velike količine topila in pridobivanje v njem raztopljene trdne ali nehlapne tekoče snovi. Rotacijski vakuumski uparjalniki so zapletene laboratorijske naprave, sestavljene iz kondenzatorja, vrtljive uparjalne bučke, sprejemne bučke, pogonskega motorja, držala za postavitev naprave in električne grelne kopeli. Vakuumska črpalka je priključena, da se v sistemu vzpostavi znižan tlak. Rotavapor se uporablja predvsem za enostavno in vakuumsko destilacijo, kristalizacijo, sušenje, izhlapevanje ali koncentriranje. Tipičen laboratorijski rotavapor je prikazan na **sliki 1**.



Slika 1: Laboratorijski rotacijski vakuumski uparjalnik

1.2 Učni cilji

V tem poglavju se bodo dijaki naučili:

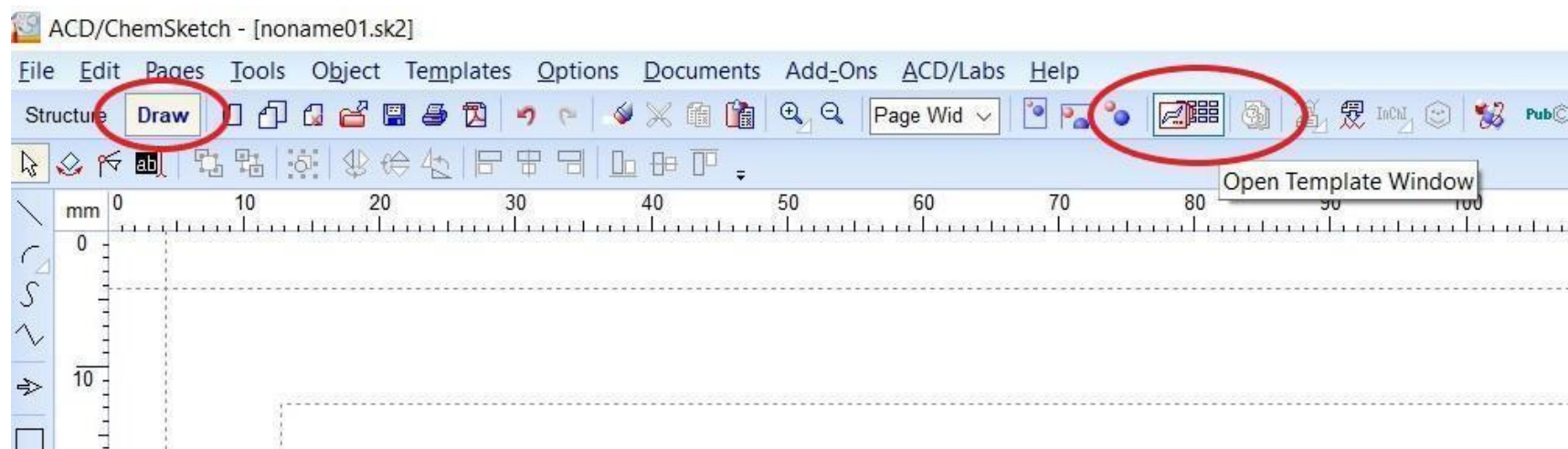
- načrtovati aparat za vakuumsko rotacijsko uparjevanje v programu ChemSketch,
- urejati, vrteti, obračati in poravnati predmet,
- vstavljati in urejati oznake,
- shraniti izdelane slike v računalnik,
- urejati shranjene slike,
- načrtovati sheme podobnih aparatov.

1.3 Navodila za uporabo programske opreme ChemSketch

Primer 1

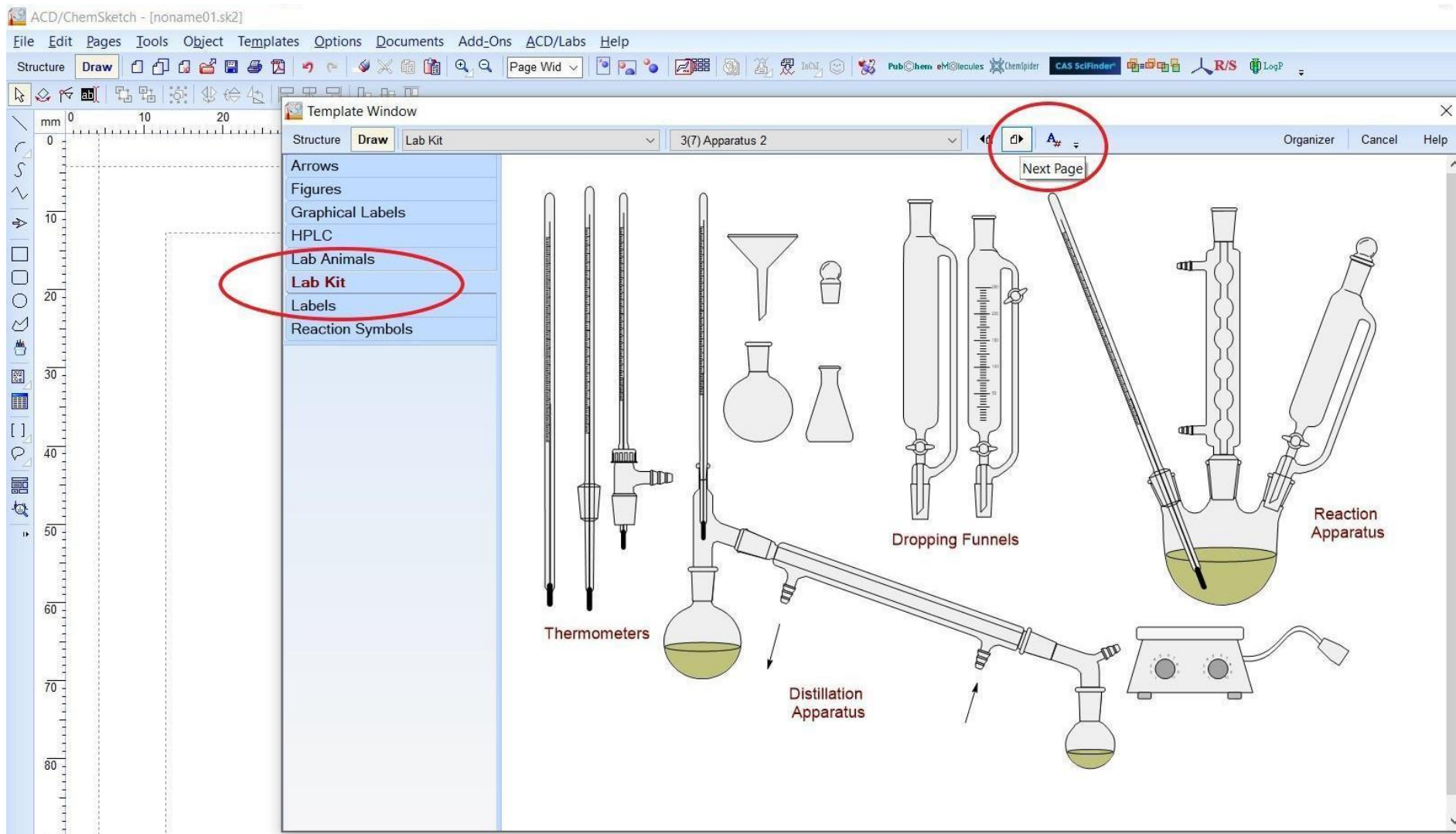
KORAK 1

Najprej se boste seznanili z lastnostmi programske opreme. Preklopite v način "Draw" in odprite okno s predlogami - *Template Window* . Postopek je prikazan na **sliki 2**.



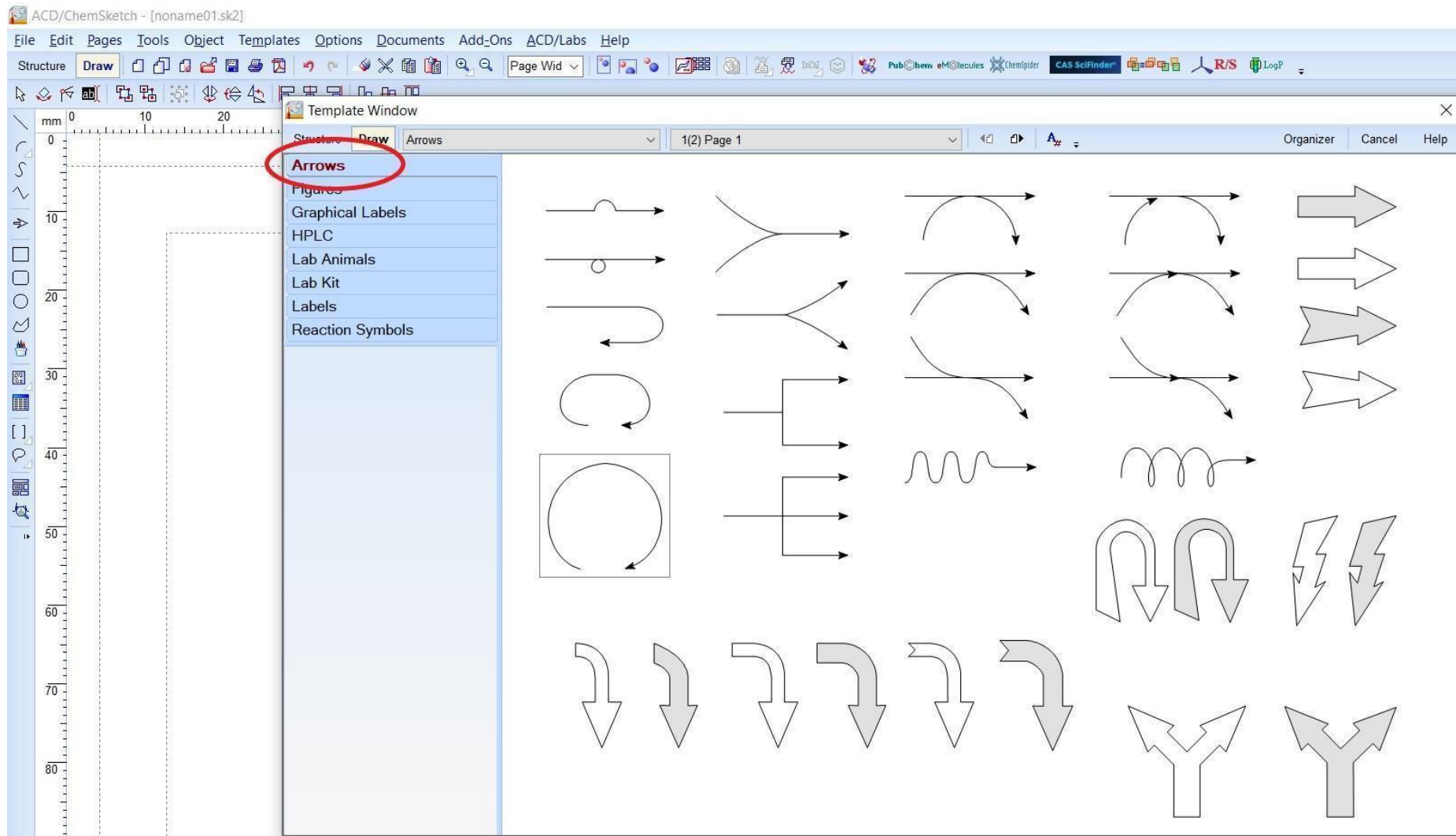
Slika 2: Prvi korak za risanje aparatur s pomočjo programa ChemSketch (Lab Kit)

V razdelku „*Lab Kit*“ izberite laboratorijsko steklovino, potrebno za sestavo izbrane aparature. Začnite z bučkami z okroglim vratom, nadaljujte z zaščito pred brizganjem, Grahamovim kondenzatorjem in redukcijem nastavkom. Za odstranitev izbranega predmeta uporabite tipko ESC. **Slika 3** prikazuje postopek izbire laboratorijske opreme.




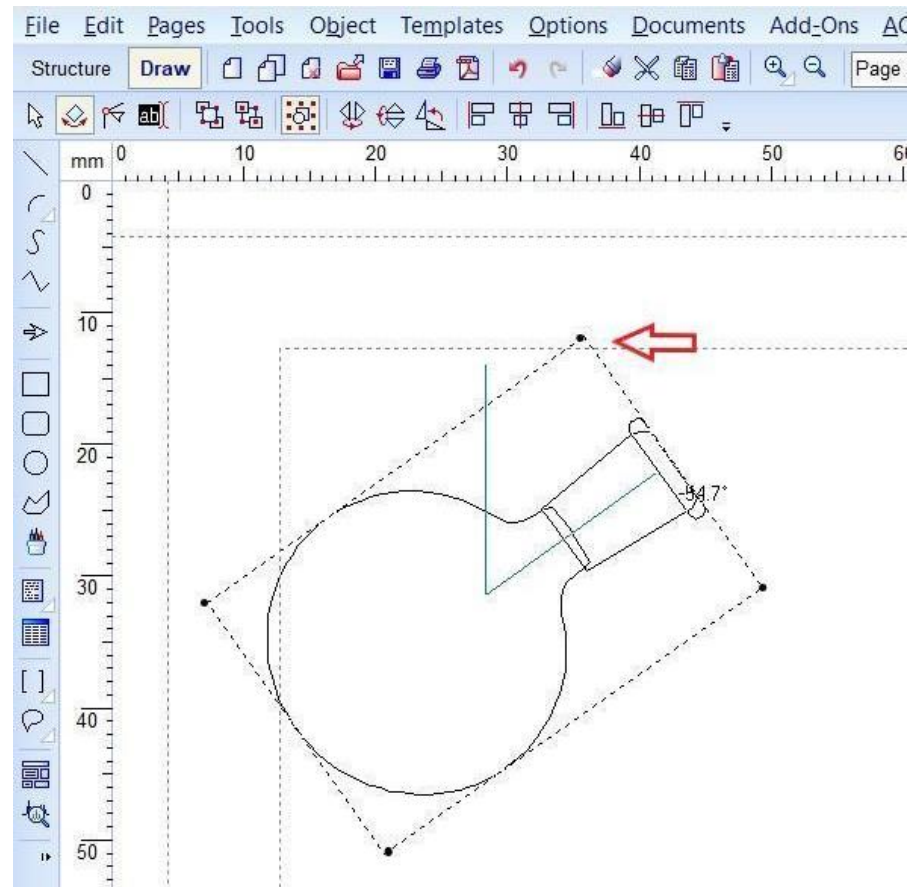
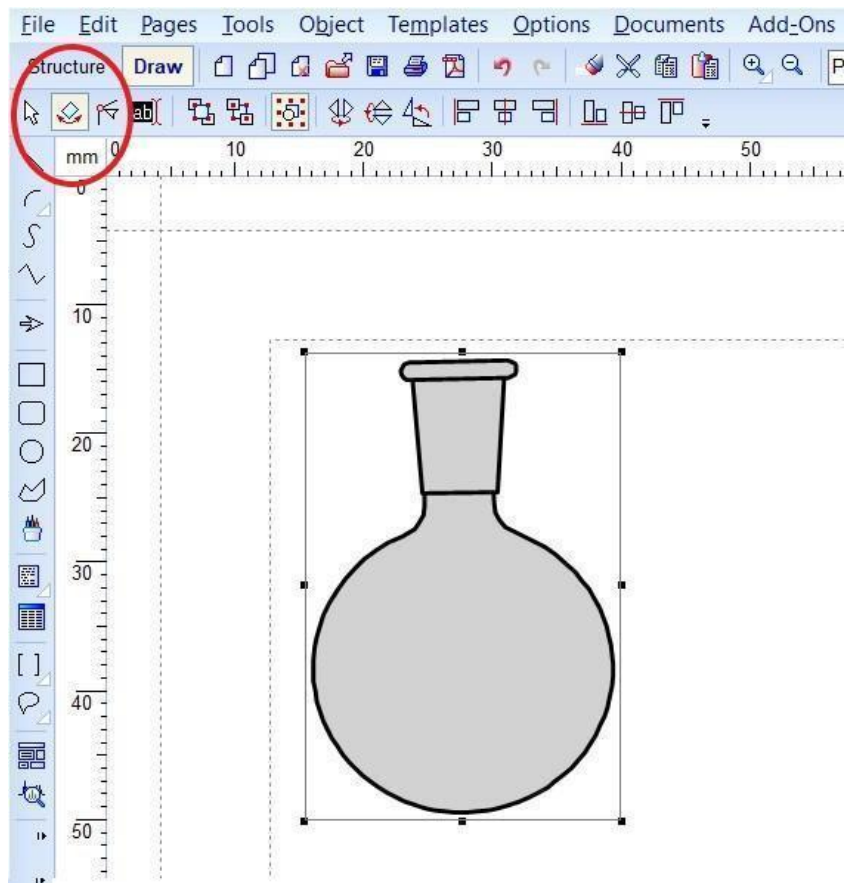
Slika 3: Laboratorijska oprema

Možnost *Arrows* omogoča, da s puščico prikažemo smer vrtenja (slika 4).



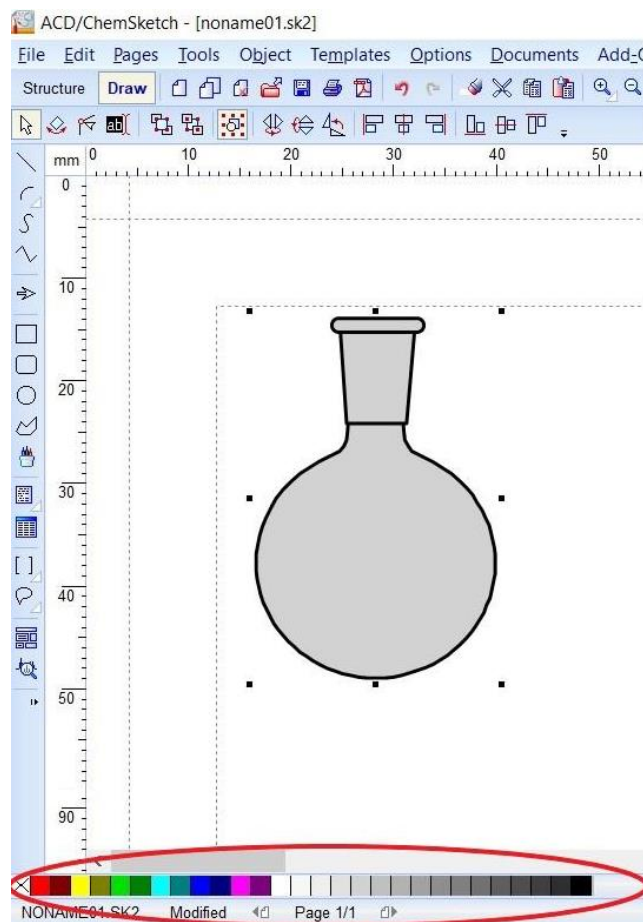
Slika 4: Možnost *Arrows* za prikaz smeri vrtenja

Za obračanje in vrtenje izbranega predmeta, uporabimo gumb  v zgornjem levem kotu vrstice z orodji. Postopek je prikazan na **sliki 5**.



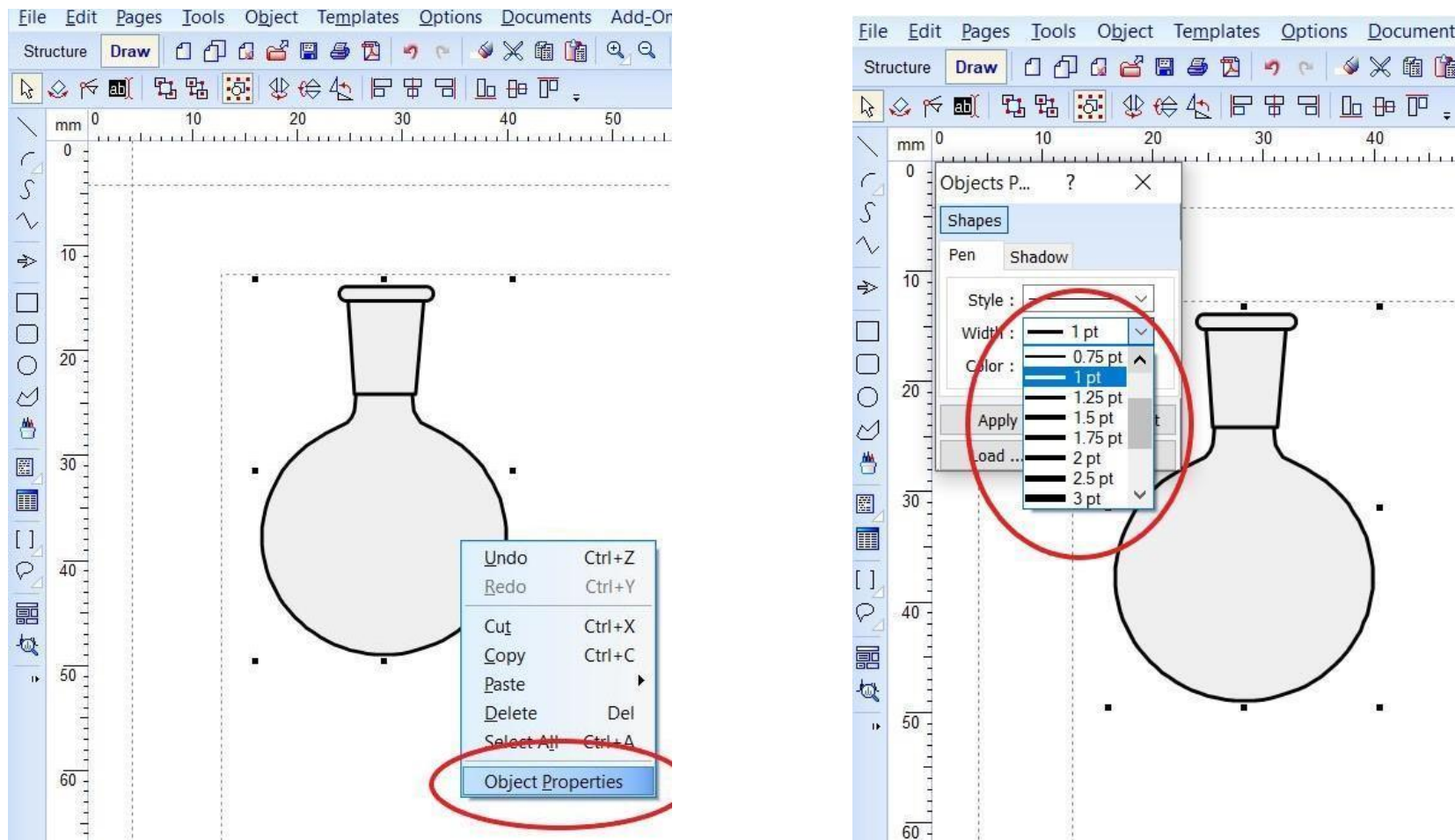
Slika 5: Obračanje in vrtenje izbranega predmeta

Za spremembo barve ozadja izbranega predmeta, uporabimo barvno paletu, ki je v programskem oknu levo spodaj, kar prikazuje **slika 6**.



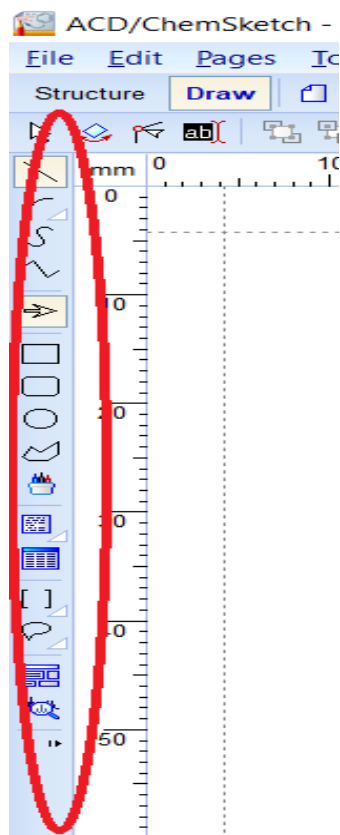
Slika 6: Spreminjanje barve ozadja

Če na izbrani predmet kliknemo z desnim gumbom miške, se pojavi drsni trak z različnimi možnostmi opravi. Izbira *Object Properties* nam omogoča, da spremenimo barvo, debelino ali obliko obrisa predmeta. Postopek prikazuje **slika 7**.



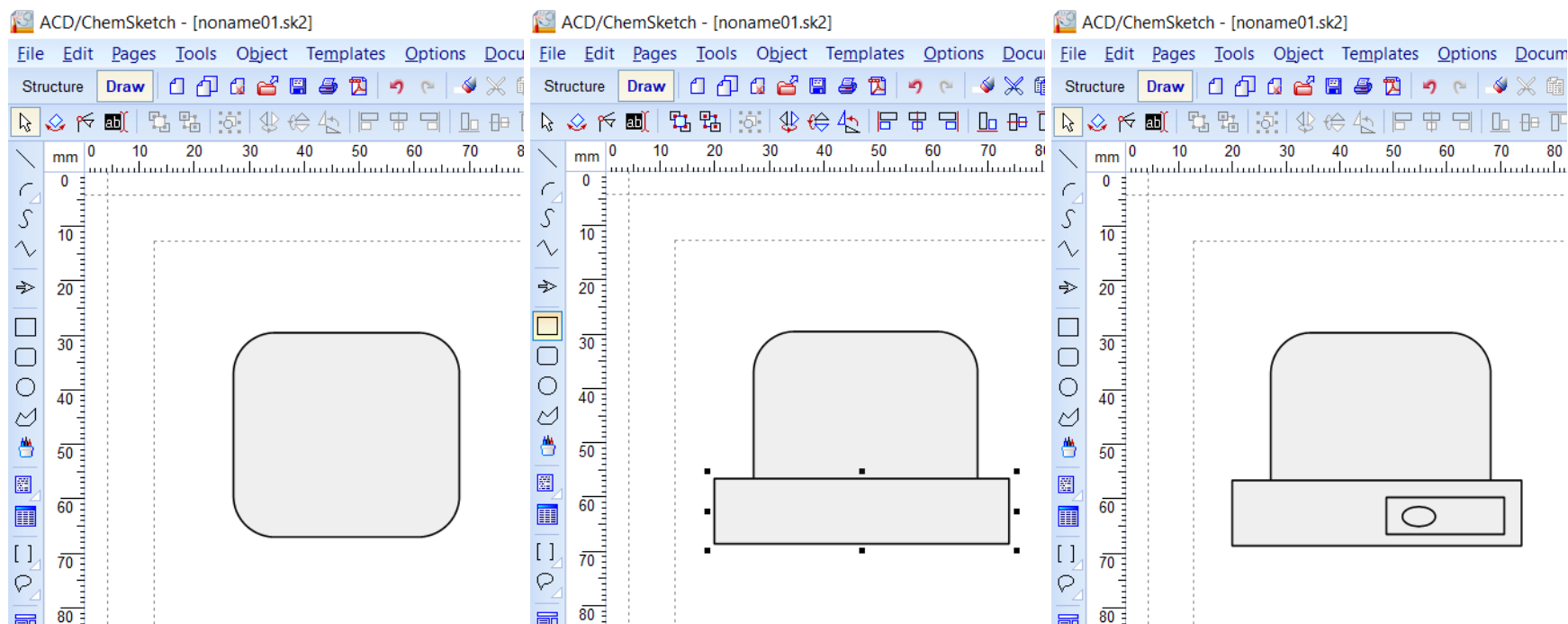
Slika 7: Spreminjanje lastnosti izbranega predmeta

Nestandardne dele aparatur, ki jih ne najdemo med ponujenimi predlogami, narišemo s pomočjo geometrijskih oblik na levi stranski vrstici z orodji. Leva vrstica z orodji je prikazana na **sliki 8**.



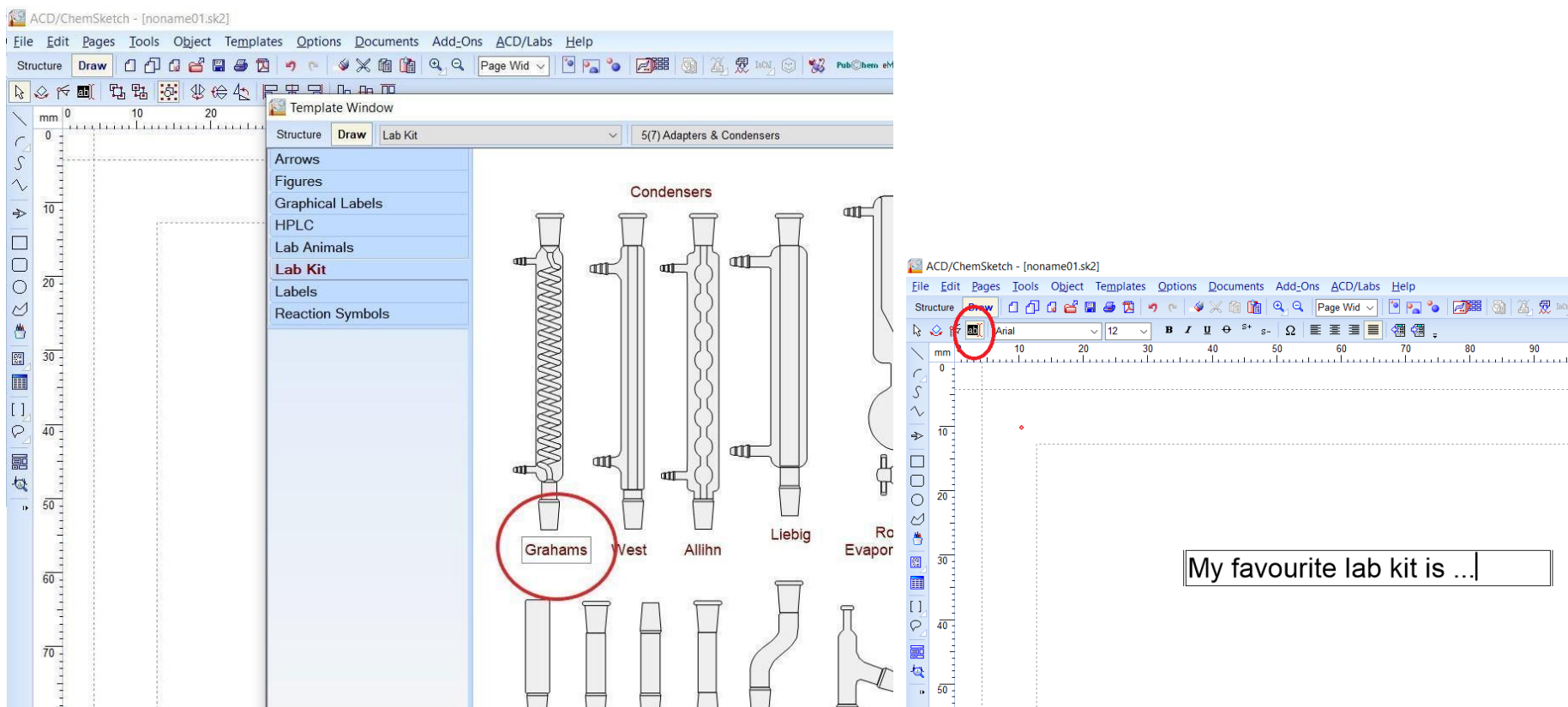
Slika 8: Leva stranska vrstica z orodji v ChemSketchu

Z vstavljanjem preprostih oblik lahko sestavite nestandardne aparature. Na primer vodno kopel, ki je tudi sestavni del naše aparature za vakuumsko uparjevanje. Za vstavljene predmete in oblike je mogoče spremeniti tudi barvo in debelino črte, kar prikazuje **slika 9**.





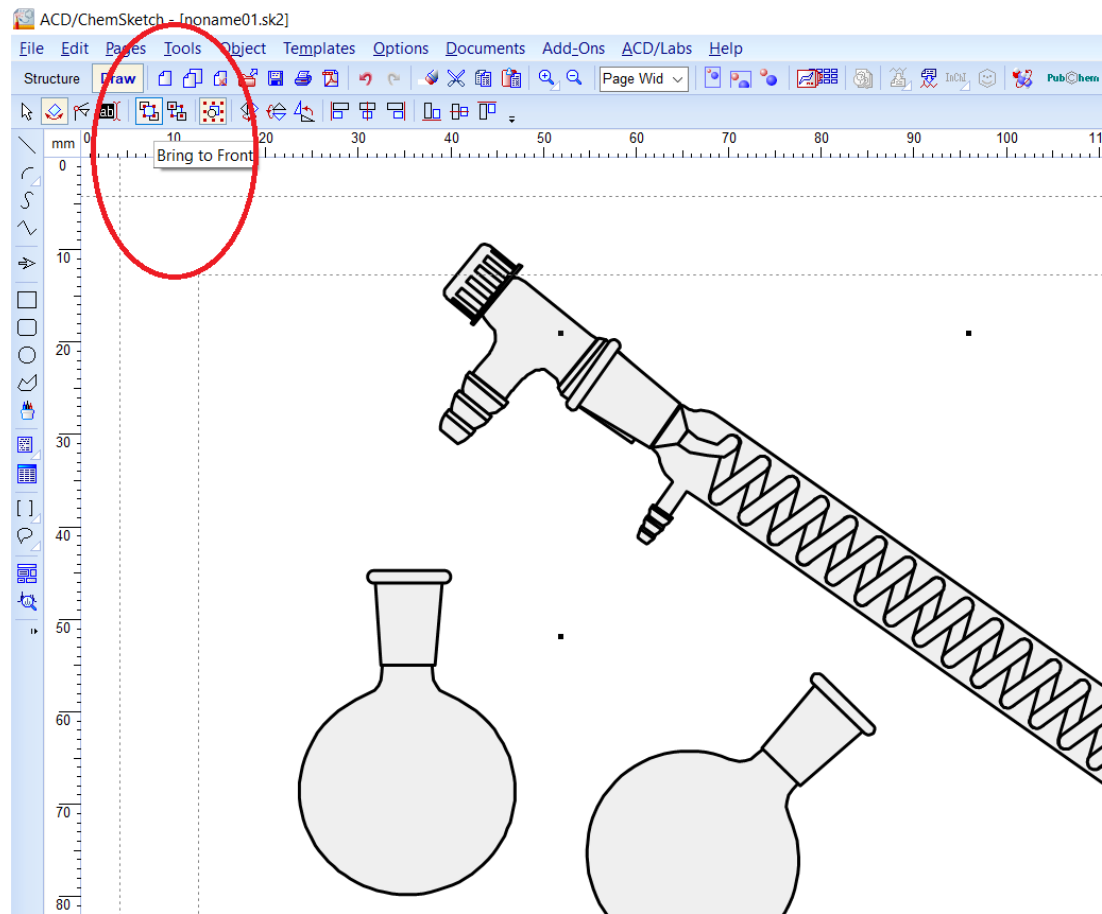
Slika 9: Risanje nestandardnih oblik in delov aparatur

Pri izdelavi laboratorijskih poročil je pogosto potrebno vnesti tudi imena posameznih delov, ki sestavljajo laboratorijsko aparaturo. Postopek je preprost - lahko uporabimo isti menu in enak način, kot smo ga uporabili za izbiro laboratorijske steklovine in risanje aparaturn, ali pa vstavimo besedilno polje in ime dodamo ročno. Omenjeni postopek je prikazan na **sliki 10**.



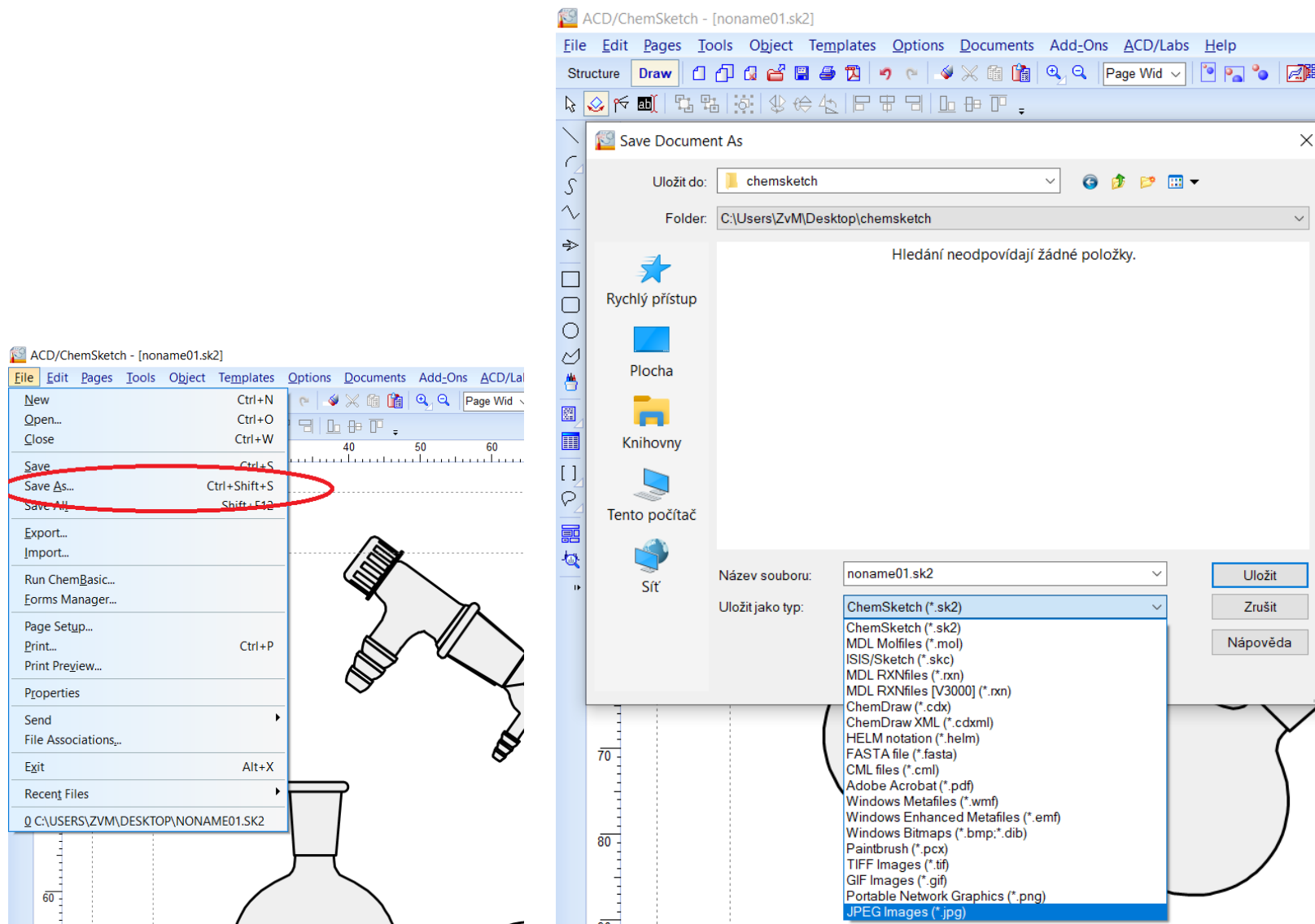
Slika 10: Vnos imen sestavnih delov aparature

Posamezne dele narisane aparature lahko premikamo v ospredje ali ozadje. Za to uporabljamo ikoni *Bring to Front*  in *Send to Back* , kot je prikazano na **sliki 11**.



Slika 11: Premikanje predmeta v ospredje ali ozadje

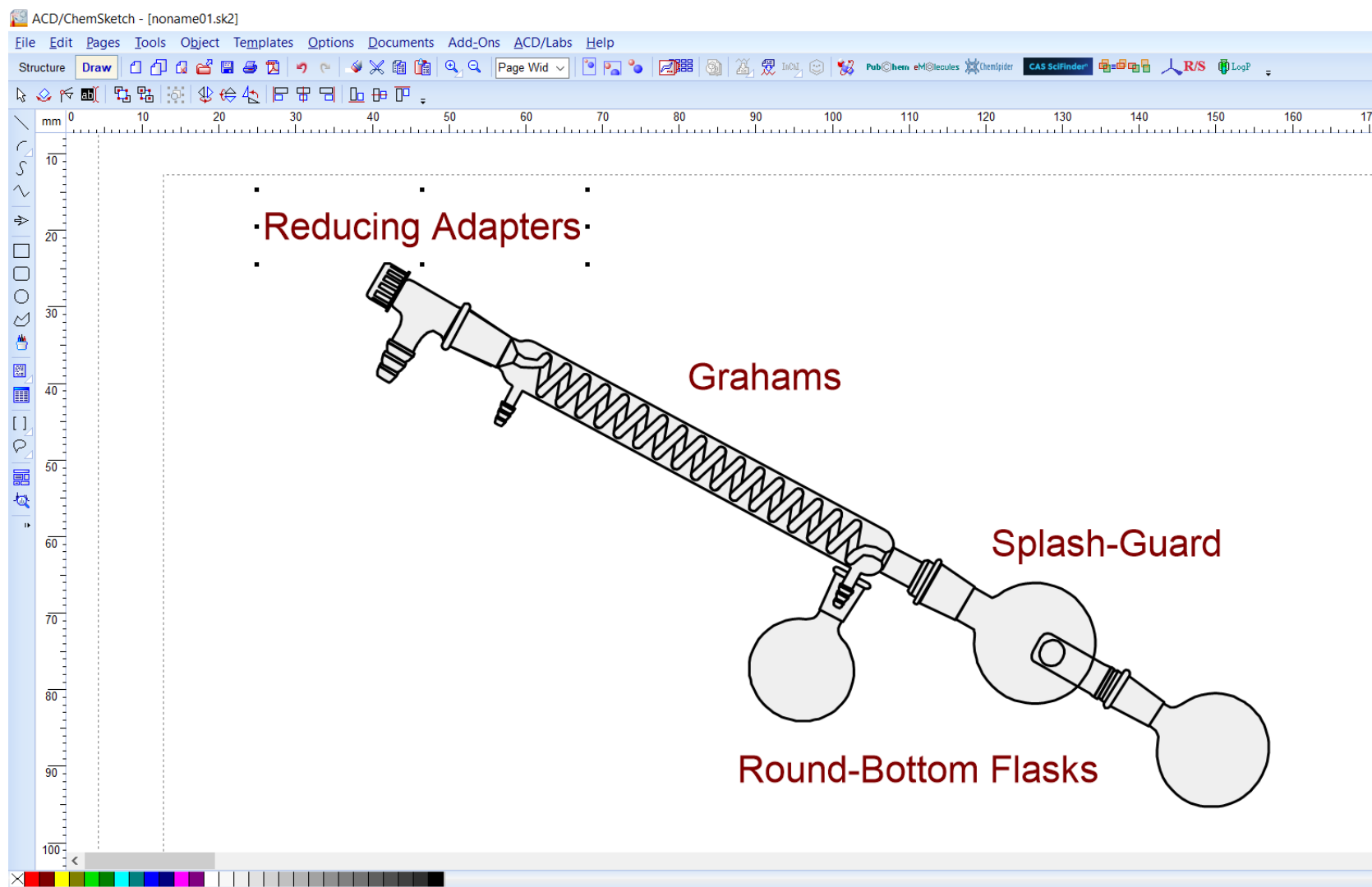
Risbe, ustvarjene s programsko opremo ChemSketch, lahko shranimo na računalnik na različne načine. Če jih želimo kasneje še urejati, jih obvezno shranimo kot ChemSketch *.sk2 . Če jih želimo samo shraniti ali uporabiti kot del laboratorijskega poročila, jih shranimo v formatu .jpg oz. izberemo ustreznega s seznama, ki je prikazan na **sliki 12**.



Slika 12: Načini shranjevanja narisanih slik s pomočjo programske opreme ChemSketch

KORAK 2

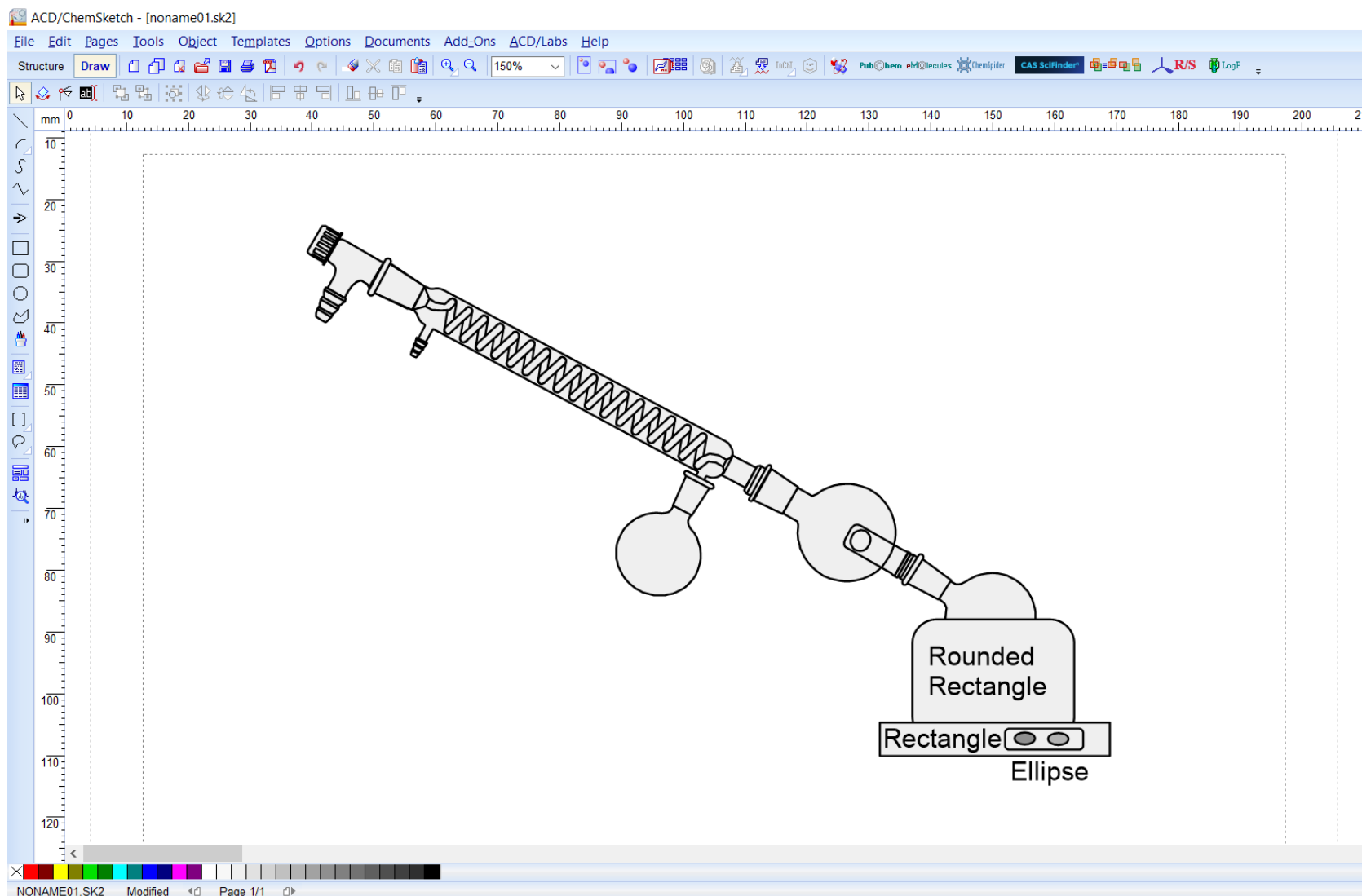
Narišite aparaturo za vakuumsko uparjevanje. Izberite ustrezno laboratorijsko opremo in posamezne dele med seboj povežite kot prikazuje **slika 13**. Pomagajte si z opisi postopkov v koraku 1.



Slika 13: Laboratorijska oprema, potrebna za sestavo vakuumskega uparjevalnika

KORAK 3

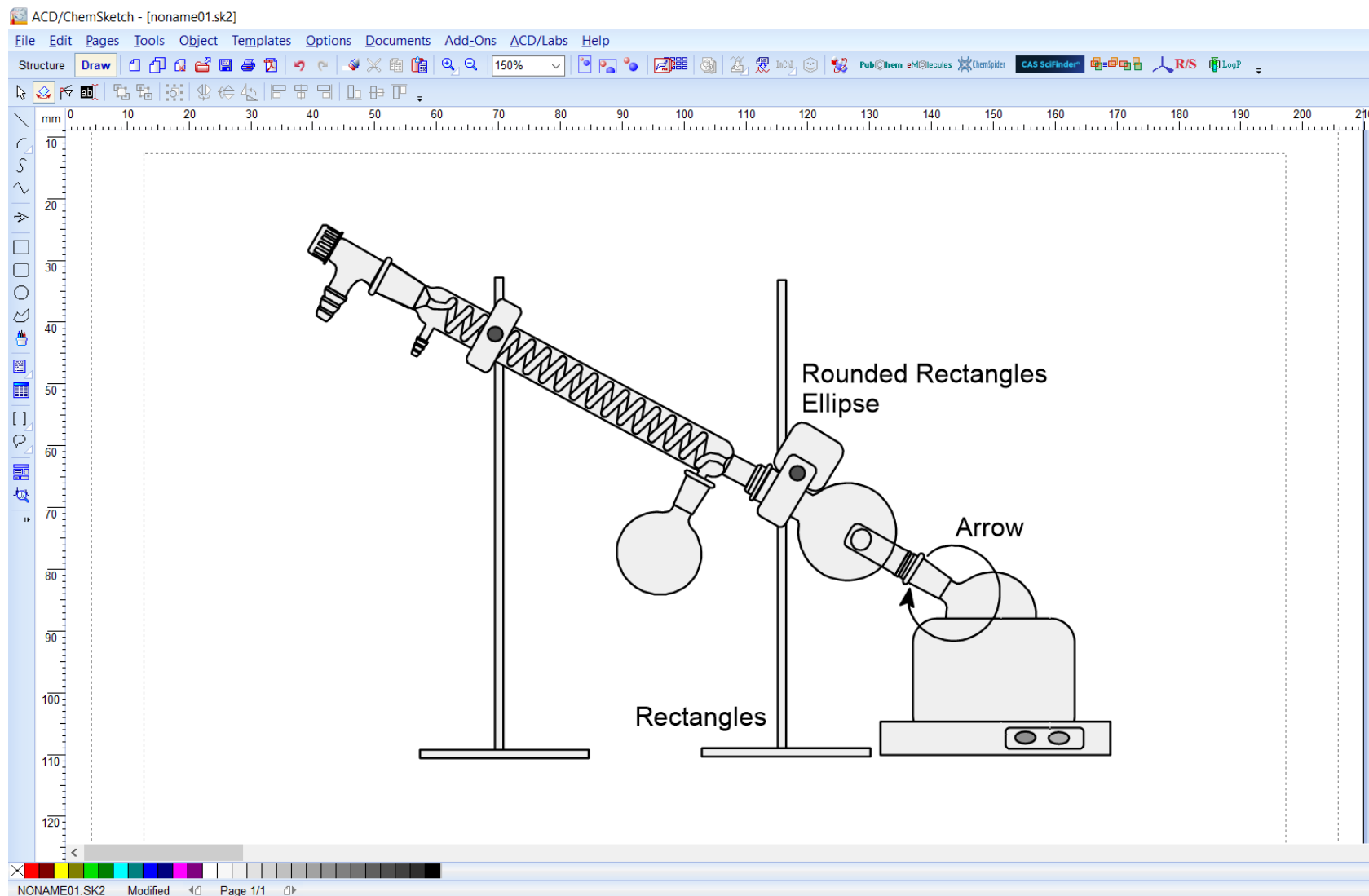
Uporabite levo stransko vrstico z orodji in prikaz na **sliki 14**, da narišete vodno kopel, ki je potrebna za vakuumsko uparjevanje.



Slika 14: Risanje vodne kopeli za vakuumsko uparjevanje

KORAK 4

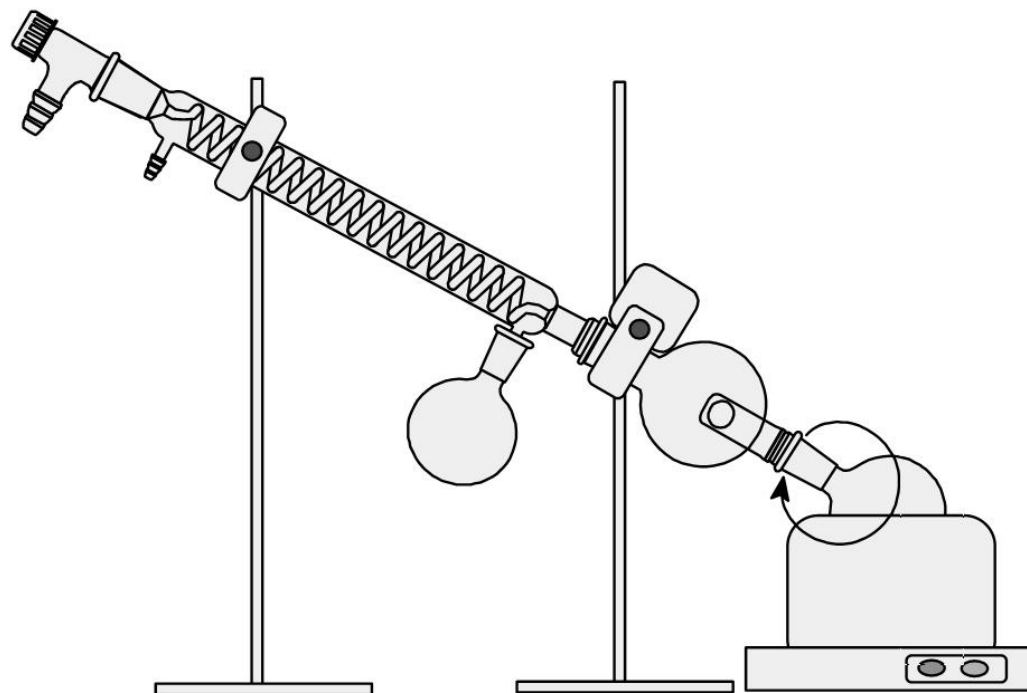
V naslednjem koraku narišite stojali s prižemami in s puščico prikažite smer vrtenja uparjalnika, kot je prikazano na **sliki 15**.



Slika 15: Dodajanje stojal, prižem in puščice za prikaz smeri vrtenja

KORAK 5

Na **sliki 16** je prikazan končni izgled oblikovanega in narisane rotacijskega vakuumskega uparjevalnika.



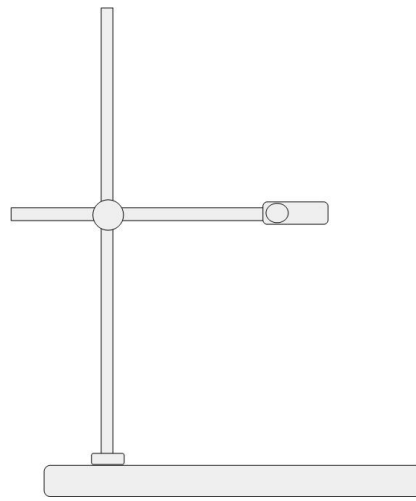
Slika 16: Končni izgled rotacijskega vakuumskega uparjevalnika, narisane s pomočjo programa ChemSketch

Primer 2

Aparatura za navadno filtracijo

KORAK 1

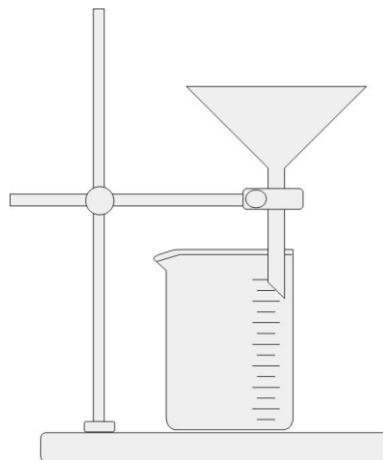
Iz nabora opreme *LabKit* izberite stojalo in dodajte obroč, kot je prikazano na **sliki 17**.



Slika 17: Postavitev stojala in obroča za filtriranje

KORAK 2

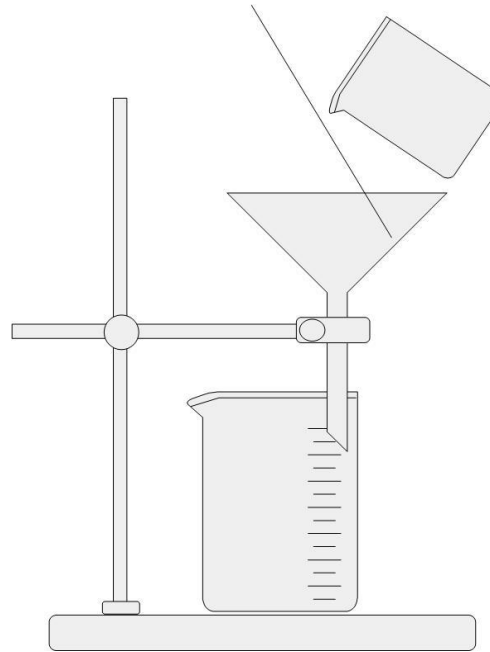
V obroč namestite filtrirni lij, pod lij pa čašo, kot je prikazano na **sliki 18**.



Slika 18: Postavitev lija in čaše

KORAK 3

Nad lij namestite še čašo in stekleno palčko, ki naj bo pod ustreznim kotom (**slika 19**).



Slika 19: Končni izgled aparature za filtriranje

1.4 Primeri nalog za usvajanje učnih vsebin

Raziščite primere industrijske uporabe destilacijskih kolon pri predelavi olja. Osredotočite se na tehnologijo, poskusite si predstavljati posamezne faze pri industrijski predelavi olja in s pomočjo ChemSketcha narišite del postopka predelave olja.

Posamezne dele destilacijske kolone postavite na prazno stran programa ChemSketch in jih poimenujte.

Nato povežite vse dele v aparaturu in jih lepo poravnajte.

Rezultat svojega dela primerjajte z nalogo in se o pravilnosti posvetujte z učiteljem.

1.5 Primeri nalog za vrednotenje usvojenosti učnih vsebin

Oblikujte in narišite preprosto napravo za destilacijo.

Poimenujte posamezne dele narisane aparature ter razložite njihovo delovanje in uporabo pri destilaciji.

Sestavite in poravnajte vse dele.

Opišite postopek destilacije in se o rezultatih svojega dela pogovorite z mentorjem.

LITERATURA

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