

Cele dydaktyczne

- Ćwiczenie umiejętności powiązania budowy materii z jej właściwościami. (Jak budowa cząsteczki - polarna lub nie - wpływa na właściwości fizyczne substancji?)
- Przypomnienie pojęcia polarności wiązań chemicznych. Zapoznanie uczniów z metodą określania polarności cząsteczek chemicznych.
- Zapoznanie uczniów z zapisem wzorów strukturalnych uwzględniających budowę przestrzenną cząsteczki (wiązania przed i za "płaszczyzną kartki").
- Zapoznanie uczniów z pojęciami: izomeria optyczna, chiralność, enancjomery, konfiguracja absolutna izomerów R i S,
- zapisem wzorów strukturalnych uwzględniających budowę przestrzenną cząsteczki (wiązania przed i za "płaszczyzną kartki").
- Ćwiczenie umiejętności manipulacji w myślach modelami cząsteczek chemicznych.

Cele operacyjne

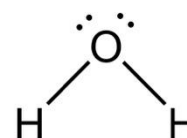
Po zajęciach uczeń potrafi:

- Opisać budowę elektronową cząsteczek H_2O , CH_4 , CH_3F , CH_2F_2 , CHF_3 , CF_4 , CH_3OH , opisać ich strukturę przestrzenną, wyznaczyć polarność cząsteczek i powiązać ją z właściwościami substancji - w szczególności z jej stanem skupienia i temperaturą wrzenia.
- Zbudować modele ww. cząsteczek za pomocą modeli kulkowych/aplikacji w tablecie/aplikacji w komputerze/aplikacji na gogle VR
- Rysować wzory cząsteczek uwzględniające ich budowę przestrzenną z wykorzystaniem linii pogrubionych i przerywanych do oznaczania atomów nie znajdujących się w płaszczyźnie kartki.
- Nazwać enancjomery w oparciu o ich konfigurację absolutną.
- Rozwiązywać zadania wymagające stworzenia trójwymiarowego modelu mentalnego prostych cząsteczek i manipulowania tym modelem w wyobraźni.

Polarność cząsteczek

Woda

1. Jaki jest wzór sumaryczny wody? Z jakich atomów jest zbudowana? Ile mają protonów, a ile elektronów?
2. Narysuj wzór elektronowy wody opisz, jak powstają wiązania.
3. Zbuduj molekułę w 3D za pomocą modeli/aplikacji w tablecie/aplikacji w komputerze/gogli VR
4. Na podstawie wartości elektroujemności podaj jaki typ wiązań występuje w cząsteczce wody.
5. Jak są przesunięte ładunki w wiązaniach?
6. Jaki ma molekuła kształt?
7. Czy cząsteczka wody jest polarna?
8. Gdzie umiejscowiony jest ładunek dodatni a gdzie ujemny w cząsteczce?
9. Dlaczego cząsteczki wody określamy jako dipole? (Określić polarność cząsteczki wody poprzez przesunięcie ładunków w wiązaniach i geometrię cząsteczki.)
10. Czy polarność molekuły ważna? Jak polarność molekuł wpływa na właściwości fizyczne wody? (Odniesienie do temperatury wrzenia wody oraz roli wody jako rozpuszczalnika.)
11. Temperatura wrzenia i topnienia wody w porównaniu do innych cząsteczek o podobnej masie a mniejszej polarności (przykład: H_2S , CH_4 . Dla H_2S należy wspomnieć, że budowa przestrzenna cząsteczki jest analogiczna do wody, dla CH_4 samo porównanie polarności wiązań i temperatur wrzenia, bez analizy budowy przestrzennej; dla H_2S $\Delta E = 0,38$ a dla CH_4 $\Delta E = 0,35$).



	Temperatura wrzenia	Rozpuszczalność w wodzie
H ₂ S	-59,55 °C	3,980 g/l (20 °C)
CH ₄	-161,48 °C	0,022 g/l (17 °C)

CH₄

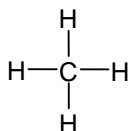
1. Kontynuujemy wątek właściwości CH₄. $\Delta E = 0,38$ dla H₂S, a dla CH₄ $\Delta E = 0,35$, dlaczego zatem różnica temperatur wrzenia do ponad 100 °C? Aby odpowiedzieć na to pytanie musimy zastanowić się jak zbudowana jest ta cząsteczka.
2. Z jakich atomów jest zbudowana? Ile mają protonów, a ile elektronów?
3. Narysuj wzór strukturalny molekuly opisz, jak powstają wiązania.
4. Zbuduj molekułę w 3D za pomocy modeli/aplikacji w tablecie/aplikacji w komputerze/gogli VR
5. Na podstawie różnicy elektroujemności podaj jaki to typ wiązań.
6. Jaki ma molekula kształt?
7. Jak są przesunięte ładunki w wiązaniach?
8. Gdzie umiejscowiony jest ładunek dodatni a gdzie ujemny w cząsteczce?
9. Czy cząsteczka jest polarna? (Określić polarność cząsteczki poprzez przesunięcie ładunków w wiązaniach i geometrię cząsteczki.)
10. Jak budowa tej cząsteczki wpływa na temperaturę wrzenia i rozpuszczalność tej substancji w wodzie?

Zapis wzorów przestrzennych cząsteczek w 2D

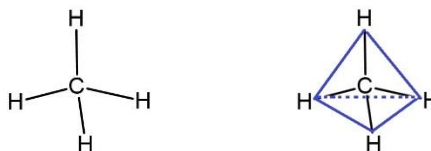
Zapoznaliśmy się z budową wybranych cząsteczek chemicznych i przeanalizowaliśmy jak budowa wpływa na ich właściwości. Zastanówmy się teraz jak przedstawić budowę cząsteczki na kartce papieru, aby zapis informował o budowie przestrzennej.

Powróćmy do przykładu metanu – CH₄

Znacie jego wzór cząsteczkowy (rysujemy wzory):



Oraz budowę cząsteczki. Cząsteczka ta ma kształt tetraedru z centralnie umieszczonym atomem węgla.

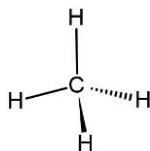


Niebieskie linie mają za zadanie jedynie pomóc Ci zobaczyć kształt tetraedru.

Aby przedstawić przestrzenne ułożenie cząsteczki na płaskiej kartce, używamy różne rodzaje kresek informujące o ułożeniu wiązań.

—	▬	⋯⋯⋯
Proste wiązanie leży w płaszczyźnie kartki.	Klin, czyli wiązanie pogrubione oznacza, że wiązanie „wychodzi z kartki” w kierunku naszych oczu (jest przed płaszczyzną kartki)	Linia przerywana, oznacza, że wiązanie „przebija kartkę na wylot” i oddala się od nas (jest za płaszczyzną kartki)

Ustawiamy odpowiednio model cząsteczki metanu i rysujemy wzór:



CH₃F, CH₂F₂, CHF₃, CF₄, CH₃OH połączone z budową przestrzenną (następny punkt)

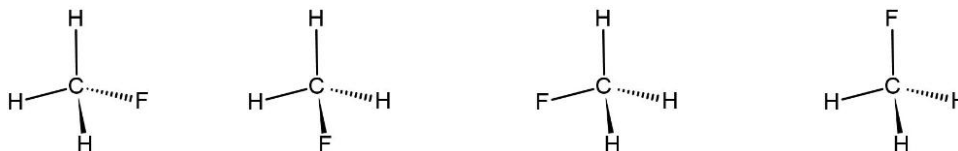
1. Jak zmieniają się właściwości metanu jeżeli jeden z atomów wodoru zamienimy na atom fluoru? – Pytanie do uczniów bez tłumaczenia na tym etapie. Weryfikacja stwierdzeń na podstawie analizy budowy substancji w kolejnych krokach.
2. Z jakich atomów jest zbudowana? Ile elektronów walencyjnych posiada fluor? Jaka jest elektroujemność fluoru w porównaniu do atomów H i C?
3. Narysuj wzór strukturalny molekuly opisz, jak powstają wiązania.
4. Zbuduj molekułę w 3D za pomocy modeli/aplikacji w tablecie/aplikacji w komputerze/gogli VR
5. Na podstawie różnicy elektroujemności podaj jaki to typ wiązań.
6. Jaki ma molekuła kształt?
7. Jak są przesunięte ładunki w wiązaniach?
8. Gdzie umiejscowiony jest ładunek dodatni a gdzie ujemny w cząsteczce?
9. Czy cząsteczka jest polarna? (Określić polarność cząsteczek poprzez przesunięcie ładunków w wiązaniach i geometrię cząsteczki.)
10. Jak budowa tej cząsteczki wpływa na temperaturę wrzenia i rozpuszczalność tej substancji w wodzie?
11. Powtarzamy analizę dla cząsteczek CH₂F₂, CHF₃, CF₄ (pkt. 3 – 10)

	Moment dipolowy	Temperatura wrzenia	Rozpuszczalność w wodzie
CH₄	0 D	-161,48 °C	0,022 g/l
CH₃F	1,8 D	-78,4 °C	2,295 g/L
CH₂F₂	1,9 D	-51,6 °C	3,628 g/L
CHF₃	1,65 D	-82,1 °C	1,000 g/l
CF₄	0 D	-127,8 °C	0,020 g/l
CH₃OH	1,7 D	+64,7 °C	nieograniczona

12. Powtarzamy analizę dla cząsteczki CH₃OH (pkt. 3 – 10). Gdzie jest część polarna a gdzie niepolarna cząsteczki?

Ćwiczenie: model CH₃F

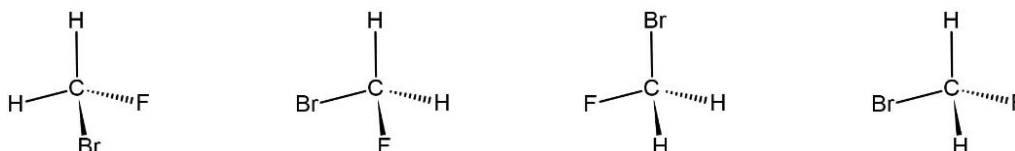
1. Zbuduj model cząsteczki CH₃F z kulek, w tablecie/aplikacji w komputerze/lub w VR
2. Ustawiamy model w różnych pozycjach i ćwiczmy zapis wzorów w 2D. Obracamy wokół osi wiązania.



3. Czy rysunki przedstawiają tę samą cząsteczkę?

Ćwiczenie: model CH₂BrF

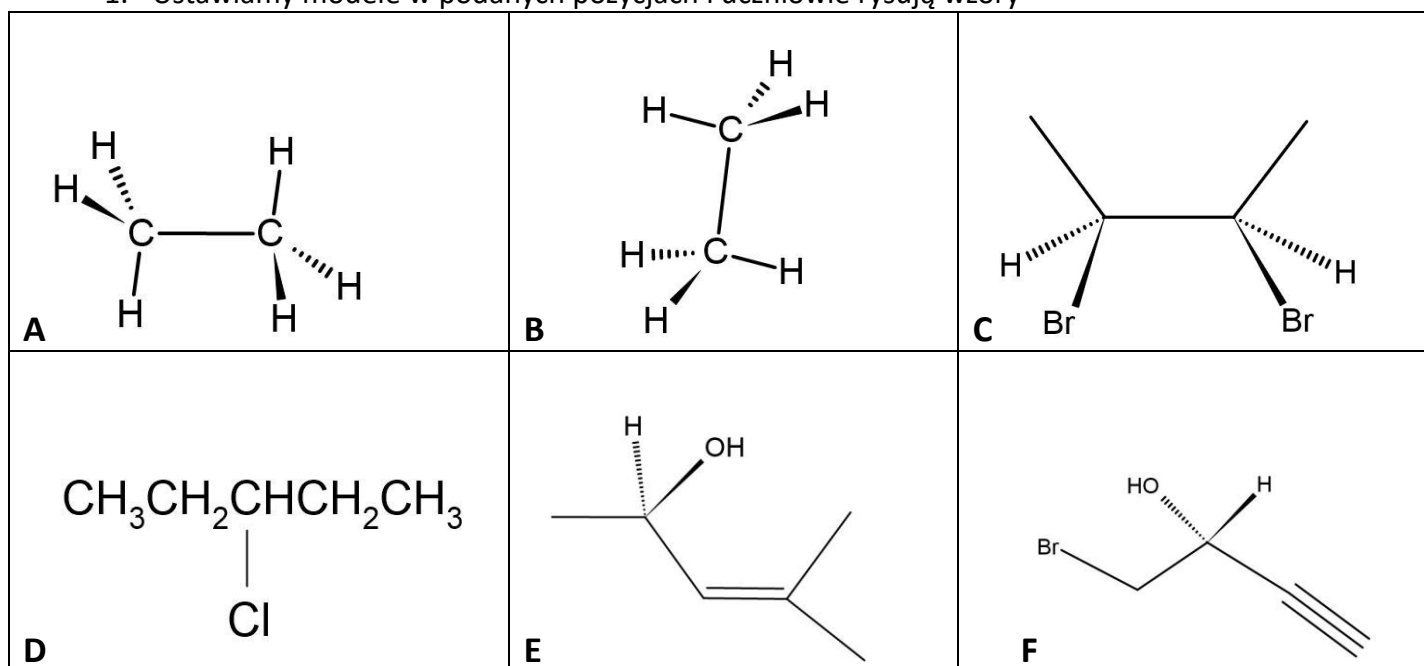
1. Zbuduj model cząsteczki CH₂BrF z kulek, w tablecie/aplikacji w komputerze/lub w VR
2. Ustawiamy model w różnych pozycjach i ćwiczmy zapis wzorów w 2D.



3. Czy rysunki przedstawiają tę samą cząsteczkę?

Zapis wzorów przestrzennych na podstawie modeli


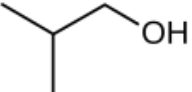
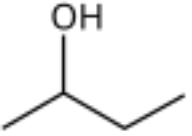
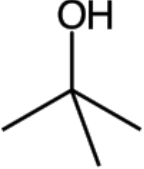
1. Ustawiamy modele w podanych pozycjach i uczniowie rysują wzory



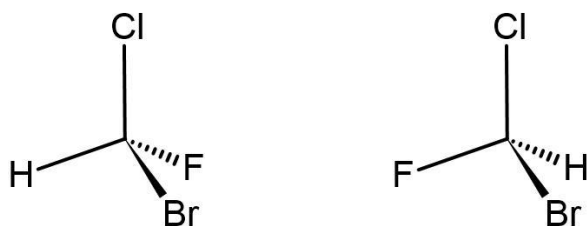
Izomery butanolu i ich temperatura wrzenia

Analizujemy dane z poniższej tabeli i porównujemy z budową cząsteczek. Ogólne reguły:

- Bardziej rozgałęziony łańcuch – cząsteczka trudniej tworzy wiązania wodorowe, bo jest gorszy dostęp do grupy –OH.
- Bardziej rozgałęziony – mniejsza powierzchnia zatem słabsze oddziaływania.

Nazwa	Temperatura wrzenia (°C, 1 atm)	Moment dipolowy	Wzór
butan-1-ol	117,7	1,75	
izo-butanol (2-metylopropan-1-ol)	108,0	1,79	
butan-2-ol	99,5	1,41	
tert-butanol (2-metylopropan-2-ol)	82,5	1,31	

Enancjomery – system R i S



1. Jak nazywa się cząsteczka na rysunku?
2. Są takie same?
3. Zbuduj cząsteczkę przedstawioną na rysunku.
4. Czy cząsteczki można na siebie nałożyć? Czy to jest ta sama cząsteczka czy są to izomery?
5. Wprowadzamy pojęcie – chiralny atom węgla, chiralna cząsteczka.
6. Wprowadzamy pojęcie enancjomery – para nienakładalnych na siebie cząsteczek chemicznych, które są wzajemnymi odbiciami lustrzanymi (podobnie jak prawa i lewa ręka).
7. Musimy zatem nazwać te dwa izomery, tak abyśmy wiedzieli o który nam chodzi.
8. Wprowadzamy system nazewnictwa oparty na konfiguracji absolutnej i konwencji CIP.

Ćwiczenie: model CBrClFI

a) Napisz, narysuj i zbuduj obie formy enancjomeryczne bromochlorofluoriodometanu i

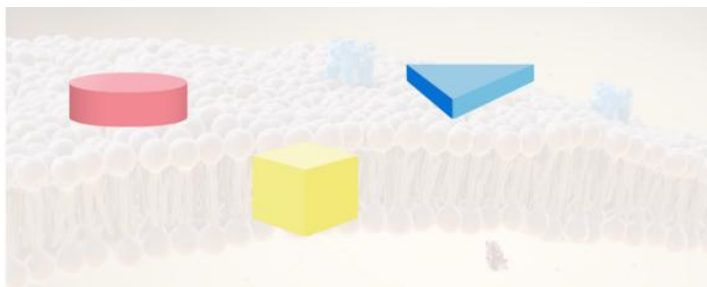
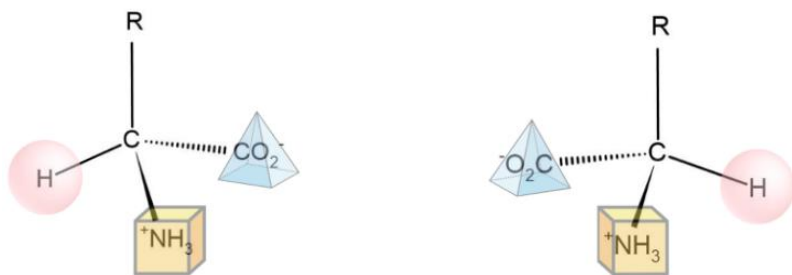
Ćwiczenie:

b) Rozważ podaną parę struktur i określ, czy są to enancjomery, czy ta sama cząsteczka tylko obrócona w przestrzeni. Przypisz każdej z nich poprawną konfigurację (R) lub (S)-

	Struktura 1	Struktura 1	Wniosek
A.			
B.			
C.			
D.			

Ćwiczenia na obracanie i dokowanie:

1. Bioaktywność enancjomerów



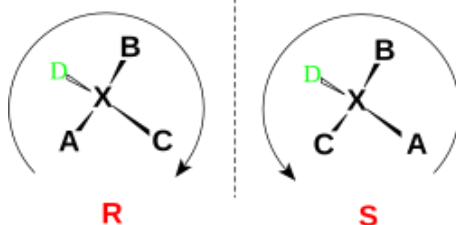
Rekapitulacja

1. Czy zawsze gdy w cząsteczce występują wiązania kowalencyjne spolaryzowane, cząsteczka jest polarna? Wyjaśnij dlaczego.
2. Jak polarność cząsteczek wpływa na rozpuszczalność substancji w wodzie?
3. Od jakich czynników zależy temperatura wrzenia substancji?
4. Co oznacza wiązanie chemiczne zapisane jako klin we wzorze strukturalnym? Co oznacza linia przerywana, a co zwykłe wiązanie?

System R i S – nazewnictwo **Tylko przypomnienie, nie do realizacji z uczniami**

Ustalanie konfiguracji absolutnej wokół danego centrum chiralności przeprowadza się zgodnie z następującymi regułami:

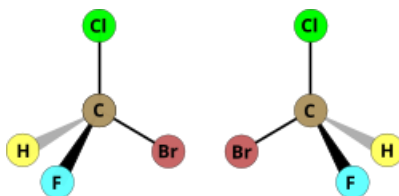
1. kolejności pierwszeństwa podstawników przyłączonych do atomu stanowiącego centrum chiralności
2. podstawnik o najniższym pierwszeństwie (D na pierwszym rysunku) musi znajdować się jak najdalej od obserwatora
3. jeśli układ pozostałych podstawników jest taki, że patrząc od strony obserwatora, należy wodzić okiem od podstawnika o największym pierwszeństwie (A) do trzeciego w kolejności (C) zgodnie z kierunkiem wskazówek zegara, to konfiguracja absolutna jest oznaczana literą *R* (do łac. *rectus* – prawy), a gdy odwrotnie, to literą *S* (od łac. *sinister* – lewy).



Np.: w przypadku enancjomeru z jednym centrum chiralności o czterech podstawnikach A, B, C i D, których kolejność pierwszeństwa jest $A > B > C > D$, należy go ustawić w przestrzeni tak aby podstawnik D znalazł się najdalej z tyłu, a potem patrząc od frontu wodzić wzrokiem od podstawnika o największym pierwszeństwie do podstawnika o najmniejszym. Gdy wykonuje się wówczas ruch w prawo jest to konfiguracja *R*, a gdy w lewo *S*.

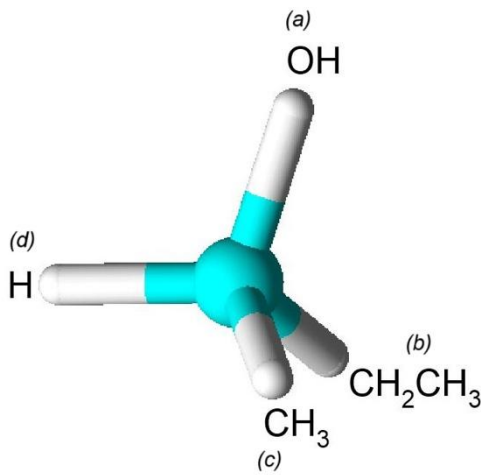
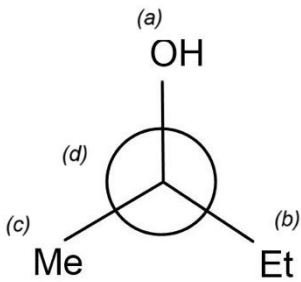
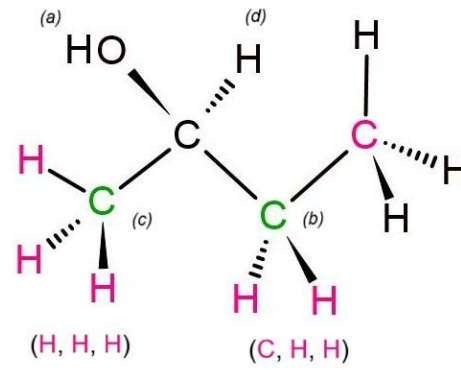
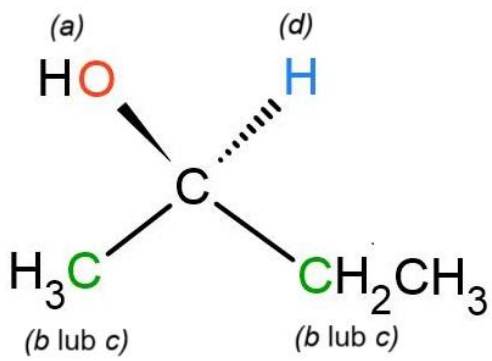
W ramach konwencji Cahna-Ingolda-Preloga istnieją następujące reguły ustalania pierwszeństwa:

1. W pierwszej instancji jest to liczba atomowa (l.a.) atomu podstawnika, który jest bezpośrednio przyłączony do centrum chiralności. Oznacza to na przykład, że w sytuacji, gdy podstawniki są czterema różnymi pojedynczymi atomami (np. jod (I, l.a. = 53), brom (Br, l.a. = 35), chlor (Cl, l.a. = 17), wodór (H, l.a. = 1) ich kolejność jest następująca: $I > Br > Cl > H$. Jeżeli jednym z podstawników jest wolna para elektronowa, to przypisuje się jej l.a. = 0.
2. W wypadku występowania izotopów, o pierwszeństwie decyduje ich większa liczba masowa.



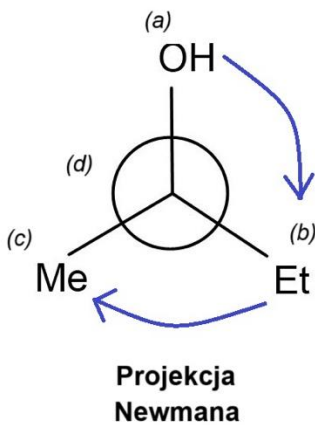
3. Jeśli podstawniki łączą się z centrum chiralności atomami tego samego pierwiastka, to bierze się pod uwagę kolejne atomy przyłączone bezpośrednio do atomu, którym cały podstawnik łączy się z centrum chiralności (czyli rozpatrujemy kolejną sferę koordynacyjną). Jeśli i te zestawy są takie same, należy wziąć pod uwagę kolejne, dalsze atomy, aż w końcu dojdzie się do takich zestawów atomów, z których jeden posiada przynajmniej jeden atom, który ma większą liczbę atomową od wszystkich atomów w drugim zestawie, albo większą liczbę atomów o największej liczbie atomowej. Przykładowo kolejne sfery koordynacyjne dla grupy metylowej $-CH_3$ to: (C) \rightarrow (H, H, H); zaś dla etylowej $-CH_2CH_3$: (C) \rightarrow (C, H, H) \rightarrow (H, H, H). Różnica pojawia się w pierwszej sferze koordynacyjnej, a więc grupa etylowa ma pierwszeństwo przed metylową.
4. Gdy dalsze atomy są połączone wiązaniami wielokrotnymi, liczy się je jakby były połączone wiązaniami pojedynczymi, ale wiele razy. Na przykład z dwóch podstawników $-A=B$ i $-A-B$, podstawnik $-A=B$ będzie pierwszy, gdyż A łączy się z atomem B „dwa razy”, podczas gdy podstawnik $-A-B$ tylko „raz” (dokładniej: podstawnik $-A=B$ jest równoważny układowi $-A(B-A)B$). Warto zaznaczyć, że mimo iż wiązanie $P=O$ zapisuje się jako wiązanie wielokrotne, traktuje się je jak wiązanie pojedyncze $P^+ - O^-$. Stąd podstawnik $OR > O$ dla cyklofosfamidu na ilustracji.
5. Jeżeli podstawniki różnią się jedynie konfiguracją absolutną na centrach chiralności, pierwszeństwo przypisuje się podstawnikowi *R*.

Jeden z dwóch enancjomerów butan-2-olu:

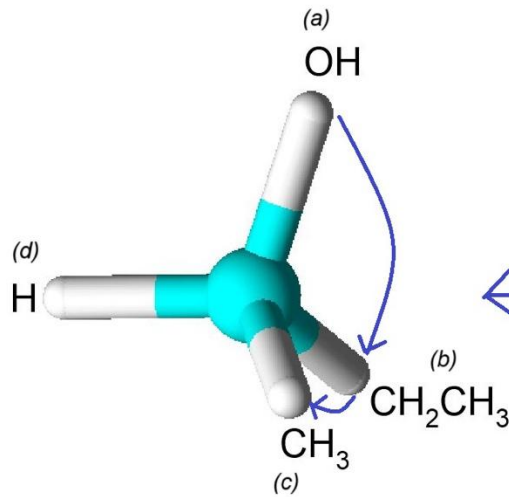


Projekcja Newmana

Jeden z dwóch enancjomerów 2-butanolu



Projekcja Newmana



Ruch zgodny z kierunkiem wskazówek zegara

(R)-Butan-2-ol