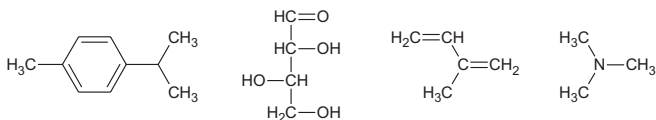


### 3. Lekce III

#### Cvičení k zopakování

Zopakujte si práci s tlačítky *Normální kreslení vazeb* a *Kreslení vazeb – pokračování* na konstrukci těchto sloučenin (snažte se postupovat co nejefektivněji):



#### Kreslení řetězce

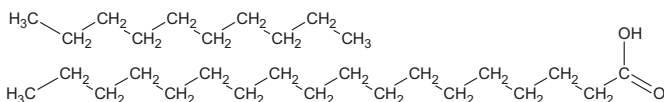
Pro kreslení delších řetězců ze zvolených atomů použijeme tlačítko *Kreslení řetězce*.



- Tahem myši kreslíme řetězec ze zvolených atomů buď samostatně na pracovní ploše, nebo navázáním na již nakreslený atom. Při tahu myši je vedle kurzoru zobrazen počet atomů vznikajícího řetězce.
- Tah provedený se stisknutým *Shift* dovolí kreslit řetězce vodorovné, svislé nebo odkloněné po 15° od tohoto směru, tah se stisknutým *Ctrl* kreslí místo klikatých řetězců řetězce rovné.

#### Cvičení

- Nakreslete dekan  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_8\text{CH}_3$ .
- Nakreslete stearovou kyselinu  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{16}\text{COOH}$ . Hotovou strukturu „vyčistěte“.



#### Jiné atomy ve struktuře

Jsmo-li postaveni před problém výběru prvku, který není zobrazen v panelu nástrojů atomů, je řešení snadné. Horním tlačítkem *Periodická tabulka prvků* vyvoláme periodickou tabulku na obrazovku:



The screenshot shows a window titled "Periodic Table of Elements". The element Carbon (C) is selected, and its properties are displayed: Mass: 12.0107, Valence: 4, and Electron configuration: 2-4. The periodic table is visible in the background. Two callout boxes point to icons in the bottom left: "Ukázat fotografie prvků" (Show element photos) and "Změnit navigační mód" (Change navigation mode). At the bottom, there are tabs for "General", "NMR", "Mass", and "Coloration", and a table with columns for "Isotope", "%", and "Mass".

Klepnutím nebo pouhým pohybem myši v závislosti na volbě navigačního módu (viz obrázek) můžeme v horní části sledovat základní vlastnosti prvků:

- *Mass* – relativní atomová hmotnost,
- *Oxidation states* – oxidační čísla,
- *Electron configuration* – elektronová konfigurace.

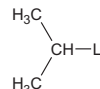
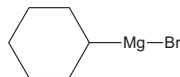
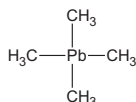
Další informace související s prvkem jsou uvedeny ve spodní části okna.

Tlačítkem se symbolem fotoaparátu si můžeme nechat zobrazit okno s fotografií vzorku prvku.

Po dvojitým klepnutím na prvek jej přidáme do panelu nástrojů atomů jako svou uživatelskou volbu. Kdybychom naopak chtěli odstranit své uživatelské volby z panelu nástrojů atomů, klepneme dvojitě na šedé pozadí panelu a odpovíme *Yes* nebo klepneme na dolní tlačítko v tomto panelu a zvolíme *Reset Toolbar*.

#### Cvičení

- Vyhledejte možná oxidační čísla manganu a chloru.
- Jaká je hustota zlata?
- Co znamená v tabulce D a T?
- Napište vzorce těchto organokovových sloučenin: tetramethylplumban, cyklohexylmagnesiumbromid, isopropyllithium.



#### Stereochemie – tlačítka *Stereo vazby*

Tlačítko *Stereo vazby vpřed*. S pomocí tohoto tlačítka se kreslí v podstatě stejným způsobem jako s tlačítkem *Normální kreslení vazeb* s tím rozdílem, že:

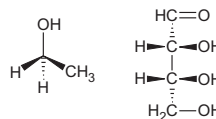
- Když je vazba tvořena z daného atomu (klepnutí nebo tah) k novému atomu, je mířena směrem k pozorovateli (tj. rozšířením klínku k novému atomu).
- Klepnutí na tuto vazbu nemění násobnost vazby, ale její směr; kreslit násobné vazby takto nelze.
- Druhé klepnutí změní vazbu na tučnou. Vše lze cyklicky opakovat dalšími klepnutími myši na vazbu.

Obdobně lze použít tlačítko *Stereo vazby vzad*. Kreslí klínky čárkované, znamenající vazbu ustupující za rovinu atomu, z něhož se vazba kreslí. Mezi oběma tlačítky se dá přepnout pravým tlačítkem myši během práce.

- Jestliže opakovaně klepneme na tuto vazbu, přepínáme se mezi čtyřmi možnostmi – čárkovanými klínkem mířícím dopředu, dozadu, širokou a tenkou čárkovanou čarou.

#### Cvičení

Nakreslete uvedené sloučeniny. Změnit vazbu nakreslenou s jiným tlačítkem je jednoduché. Např. normální jednoduchou vazbu změníme na stereo po zvolení tlačítka a klepnutí na vazbu.



#### Koordinační a nedefinovaná vazba

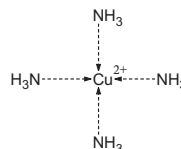
Tlačítko *Koordináční vazba* dovoluje znázornit koordinační vazbu s šipkou, mířící od donoru k akceptoru elektronů. Trojúhelníček v dolním rohu tlačítka umožní vybrat jeho další modifikace. Směr šipky změníme klepnutím na ni.



#### Cvičení

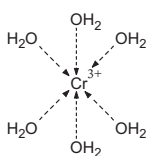
Nakresleme tetraamminměďnatý kation.

- Měď si musíme vybrat v periodické tabulce. Pak klepneme do plochy a dostaneme  $\text{Cu}^{2+}$ .
- Zvolíme koordinační vazbu a dusík. Tahem myši kreslíme vazby od centrálního atomu k amoniaku. Přidržením *Shift* zajistíme dodržení délky vazby.
- Je-li třeba změnit náboj na centrálním atomu, dvojitě klepneme na fragment atomu (musí být zvoleno tlačítko *Výběr – přesun*), otevře se již známý panel, ve kterém nyní změníme náboj.
- V kartě *Atom* klepneme na malé políčko *q*, po kterém se v panelu objeví jeho hodnota (*Value*). Tu změníme pomocí volby z roletky nebo přepsáním na potřebné číslo a změnu provedeme tlačítkem *Apply*.

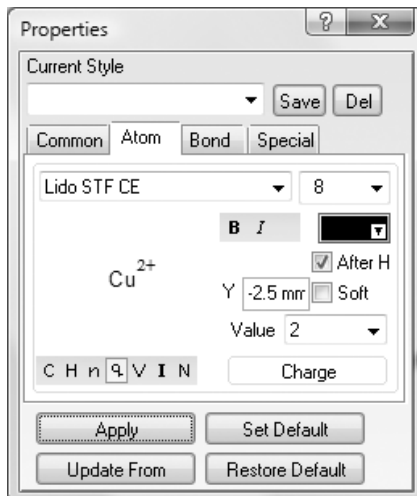
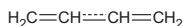


### Cvičení

- Nakreslete vzorec komplexního hexaaqua-chromitého kationtu (vpravo):
- Po těchto úkolech obnovte panel atomů do výchozí podoby třeba takto: Nejdřív dvojitě klepnutí na pozadí panelu, na dotaz „Remove user-selected „Atom“ buttons?“ odpověď Yes.



Tlačítko *Nedefinovaná vazba* je použitelné, když chceme naznačit, že není známo, kterým směrem v prostoru vazba míří. Je nakreslena vlnovka. Jak vypadá, vyzkoušejte sami. Trojúhelníček v dolní části tlačítka dává na výběr další typy vazeb, z nichž vyzkoušejte *Delocalized bonds* k naznačení delokalizovaných  $\pi$ -elektronů v buta-1,3-dienu mezi uhlíky 2 a 3.



### Chemické reakce

Reakční plus se zapisuje jednoduše klepnutím do pracovní plochy po volbě tlačítka *Reakční plus*. Stejně jednoduše lze zakreslit reakční šipku s tlačítkem *Reakční šipka*. U šipek však máme celou sadu na výběr. Tento výběr se objeví, když myši klepneme na bílý trojúhelníček tlačítka. Vybranou šipku odklepeme a pak ji můžeme nakreslit. V pracovní ploše je možno opakovaně měnit typ šipky pravým tlačítkem myši.

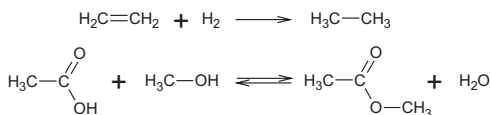
Obě tato tlačítka jsou doplněna nástrojem mazání (*Del*) – když umístíme plus nebo šipku nevhodně, ihned je můžeme mazat, pokud na ně klepneme podruhé (povšimněte si tvaru kurzoru myši).



### Cvičení

Vyzkoušejme na jednoduchých příkladech:

- Napište reakci hydrogenace ethenu na ethan.
- Napište esterifikační reakci octové kyseliny a methanolu za vzniku methyl-acetátu a vody (reakce dospěje do rovnováhy).



### Test z učiva

Napište vzorce podle vzoru:

