

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΣΤΕΡΕΟΪΣΟΜΕΡΕΙΑΣ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΠΟΛΥΜΕΣΩΝ

Κορακάκης Γώργιος
Τεχνολόγος γραφικών τεχνών-Χημικός-
Msc ΔιΧηNET
gk1966@yahoo.com

Μουτεβέλη- Μηνακάκη
Παναγιώτα
Επίκουρος Καθηγήτρια, Ε.Κ.Π.Α.,
Τμήμα Χημείας Πανεπιστήμιο Αθηνών

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στερεοχημεία είναι η ενότητα της χημείας που εξετάζει τη δομή των μορίων στο χώρο, από την οποία εξαρτάται η αναγνώριση και η εκλεκτική αλληλεπίδρασή του με άλλα κατάλληλα υποστρώματα, ώστε τελικά να εκφράζεται η ίδια η ζωή.

Στην παρούσα εργασία παρουσιάζονται βασικές αρχές των δύο ειδών της στερεοϊσομέρειας δηλαδή της εναντιομέρειας και της διαστερεομέρειας, όπως απαντώνται στην Οργανική Χημεία. Με την κατανόηση αυτών των βασικών αρχών γίνονται κατανοητές βασικές λειτουργίες της ζωής όπως η γεύση, η όσφρηση, η όραση κ.λ.π. Γίνεται επίσης κατανοητή η δομή των βιομορίων και των διαφόρων φαρμάκων και ερμηνεύεται η τόσο σημαντική σχέση δομής-βιολογικής δράσης. Η στερεοϊσομέρεια αποκτά έτσι διαθεματικό χαρακτήρα, αφού συνδυάζει ενδιαφέρον από χημικής, βιολογικής και βιοχημικής πλευράς συγχρόνως. Η αντίληψη όμως του σχήματος των μορίων στο χώρο και η ταυτόχρονη αναγκαιότητα αναπαράστασής τους σε δύο διαστάσεις (χαρτί, πίνακας) παρουσιάζει δυσκολίες. Η χρήση επομένως του παρόντος λογισμικού βοηθά πολύ στην υπέρβαση αυτής της δυσκολίας και απευθύνεται σε μαθητές Λυκείου, σε φοιτητές καθώς και σε οποιονδήποτε επιθυμεί ν' ασχοληθεί με το τόσο σημαντικό θέμα της Στερεοχημείας των Οργανικών μορίων.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Στοιχεία στερεοϊσομέρειας, εκπαιδευτικό λογισμικό, τρισδιάστατα, animation, ασκήσεις

ΣΚΟΠΟΙ ΚΑΙ ΣΤΟΧΟΙ ΤΟΥ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ

Ο κύριος σκοπός της δημιουργίας του εκπαιδευτικού λογισμικού είναι να γίνει η διδασκαλία της στερεοϊσομέρειας όσο το δυνατόν πιο αποτελεσματική και εποικοδομητική. Οι επιμέρους στόχοι αναφέρονται σε συγκεκριμένες πτυχές της εργασίας και μερικοί από αυτούς είναι:

- Να κεντρίσει το ενδιαφέρον του μαθητή στο να μελετήσει τη δύσκολη αυτή ενότητα.
- Να αντικαταστήσει σε μεγάλο βαθμό το διδάσκοντα.
- Να συνδέσει το κεφάλαιο αυτό με θέματα από την καθημερινή ζωή.
- Να μπορεί ο μαθητής:
- Να διατυπώνει τους ορισμούς των εννοιών που αντιστοιχούν στο κεφάλαιο της στερεοϊσομέρειας.
- Να αναγνωρίζει αν υπάρχει ασύμμετρο άτομο C ή γενικά στερεογονικό κέντρο σε μία ένωση.

- Να εξηγεί την ύπαρξη της οπτικής ενεργότητας.
- Να περιγράφει τις φυσικές και χημικές ιδιότητες των στερεοϊσομερών.
- Να γράφει τα μόρια με τύπους προβολών Fischer.
- Να χαρακτηρίζει στερεογονικά κέντρα ως D, L ή R, S.
- Να βρίσκει τον αριθμό των στερεοϊσομερών μιας ένωσης και να τα χαρακτηρίζει.
- Να εξηγεί την ύπαρξη γεωμετρικής ισομέρειας ως είδος διαστερομέρειας και να χαρακτηρίζει τα γεωμετρικά ισομερή ως cis, trans ή E, Z.
- Να απαντάει στις ερωτήσεις που υπάρχουν στο τέλος του λογισμικού.
- Να ελέγχει την απάντησή του
- Να ανατρέχει σε οποιαδήποτε ενότητα εύκολα
- Να κατανοεί το λάθος που τυχόν έκανε.

ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΤΟΥ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ

Το περιεχόμενο του εκπαιδευτικού λογισμικού χωρίζεται σε δύο ενότητες. Στην πρώτη ενότητα γίνεται διδασκαλία των στοιχείων στερεοϊσομέρειας, με επιμέρους διδακτικές υποενότητες τις ακόλουθες:

- Εισαγωγή
- Εναντιομέρεια
- Φυσικές ιδιότητες εναντιομερών
- Οπτική ενεργότητα
- Χημικές ιδιότητες εναντιομερών
- Ονομασία άνθρακα ως D ή L
- Ονομασία άνθρακα ως R ή S
- Ονομασία άνθρακα ως R ή S μέσω προβολών Fischer
- Επιτρεπτές αλλαγές στις προβολές Fischer
- Διαστερομέρεια
- Συμπεράσματα

Στην δεύτερη ενότητα, γίνεται μια προσπάθεια ελέγχου των γνώσεων που αποκόμισε ο χρήστης αναφορικά με το κεφάλαιο της στερεοϊσομέρειας, με τη χρήση ασκήσεων.

ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΤΟΥ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ

Το εκπαιδευτικό λογισμικό έχει κατασκευαστεί κατά τέτοιο τρόπο ώστε να χαρακτηρίζεται από ευκολία στην πλοήγηση. Γι' αυτό το σκοπό η πλοήγηση είναι και καθοδηγούμενη για το χρήστη. Όλα αυτά επιτυγχάνονται με το κατάλληλα επιλεγμένο μενού και την μπάρα πλοήγησης, Συγκεκριμένα :

Το μενού περιέχει πέντε επιλογές (αρχείο, ενότητες, ερωτήσεις, βιβλίο, βοήθεια). Κάθε μία από τις παραπάνω επιλογές περιλαμβάνει:

- **Αρχείο:** Εγκατάσταση, τερματισμός.
- **Ενότητες:**¹Εισαγωγή. Εναντιομέρεια. Φυσικές ιδιότητες εναντιομερών. Οπτική ενεργότητα. Χημικές ιδιότητες εναντιομερών. Ονομασία άνθρακα ως D ή L. Ονομασία άνθρακα ως R ή S. Ονομασία άνθρακα ως R ή S μέσω προβολών Fischer. Επιτρεπτές αλλαγές στις προβολές Fischer. Διαστερομέρεια. Συμπεράσματα.

- **Ερωτήσεις:** Ερωτήσεις.
- **Βιβλίο:** Βιβλίο. (όπου αναγράφεται όλο το κείμενο)
- **Βοήθεια:** Βοήθεια.

Η μπάρα στο κάτω μέρος της οθόνης βοηθάει στην καθοδηγούμενη εναλλαγή των σκηνών έτσι, ώστε να γίνεται ευκολότερη η μελέτη κάθε κεφαλαίου. Επίσης υπάρχουν κουμπιά που οδηγούν στην προβολή των animations και τρισδιάστατων που είναι απαραίτητα για την καλύτερη κατανόηση αυτών που εξετάζονται σε κάθε σκηνή όπως φαίνεται στην επόμενη εικόνα.

ENANTIOMEREA

ΧΕΙΡΑΙΑΚΑ ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΑ

Τα μόρια (ή αντικείμενα) που δεν ταυτίζονται με τα κατοπτρικά τους είδωλα ονομάζονται χειραϊκά ή χειρόμορφα (από την λέξη "χείρ"). Τα μόρια αυτά έχουν δυο εναντιομερείς μορφές που δεν ταυτίζονται μεταξύ τους, ακριβώς όπως τα δυο μας χέρια, αλλά η μια μορφή αποτελεί το κατοπτρικό είδωλο της άλλης (ικανή και αναγκαία συνθήκη για την εμφάνιση εναντιομερείας).

ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑΤΑ ΧΕΙΡΑΙΑΚΩΝ ΜΟΡΙΩΝ

$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH}$ $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{Br})\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$

ΓΑΛΑΚΤΙΚΟ ΟΞΥ **3-ΒΡΩΜΟΕΞΑΝΙΟ**

Ακόμα το εκπαιδευτικό λογισμικό περιλαμβάνει:

- **Τρισδιάστατα γραφικά με ελεύθερη περιστροφή** (η τελευταία επιτυγχάνεται με τη χρήση ποντικιού). Η χρήση των τρισδιάστατων γίνεται ως εξής:

Περιστροφή: Γίνεται με πατημένο το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού και σύρσιμο.

Μετακίνηση: Γίνεται με πατημένο το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού και σύρσιμο καθώς και πατώντας ταυτόχρονα το πλήκτρο shift.

Μεγέθυνση-σμίκρυνση: Γίνεται με πατημένο το αριστερό πλήκτρο του ποντικιού και σύρσιμο καθώς και πατώντας ταυτόχρονα το πλήκτρο ctrl.

Ανάλυση: Γίνεται με πατημένο το δεξί πλήκτρο του ποντικιού και σύρσιμο

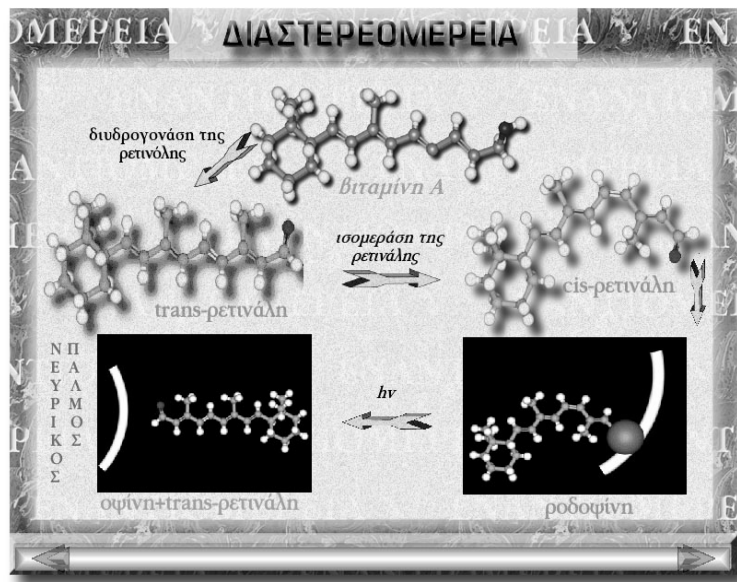


- **Animations και τρισδιάστατα**, που διευκολύνουν στην πλήρη κατανόηση των δύσκολων εννοιών της στερεοϊσομέρειας. Για παράδειγμα, στο σχήμα που ακολουθεί εξηγείται ότι το επίπεδα πολωμένο φως μπορεί να θεωρηθεί ως αποτέλεσμα δύο κυκλικά πολωμένων, σε φάση ακτίνων, της ίδιας συχνότητας και του μισού πλάτους ταλάντωσης η κάθε μια. Τα ηλεκτρικά ανύσματα των ακτίνων αυτών συμβολίζονται με E_R και E_L και ακολουθούν ελικοειδείς δρόμους αντίθετης χειρομορφικότητας² όπως φαίνεται στο σχήμα

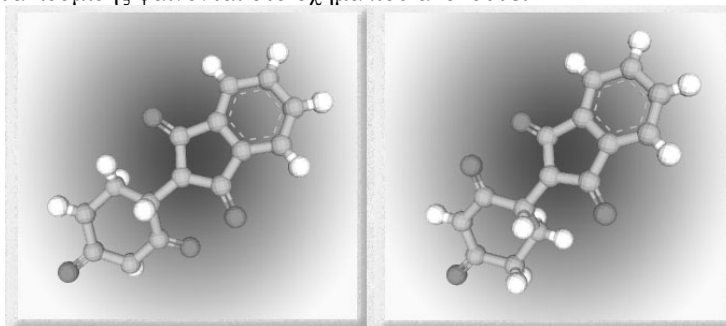




- **Εφαρμογές της στερεοϊσομέρειας με παραδείγματα από την καθημερινή ζωής όπως:** Στον κύκλο της όρασης η ισομερείωση της trans-ρετινάλης σε cis-ρετινάλη και η αλλαγή σχήματος του μορίου που αυτή συνεπάγεται, είναι υπεύθυνη για τη διαδικασία της όρασης ³.

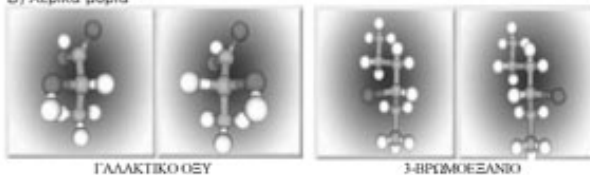


Στην περίπτωση του φαρμάκου «θαλιδομίδη»⁴, όπου το R-ισομερές παρουσιάζει καταπραυντική και υπνωτική δράση, ενώ το εναντιομερές του S προκαλεί τερατογένεση, όταν χορηγηθεί σε εγκύους. Τα δυο εναντιομερή της θαλιδομίδης φαίνονται στο σχήμα που ακολουθεί



- **E-book (σε μορφή PDF).** Το τελευταίο δημιουργήθηκε με την βοήθεια τρισδιάστατων βίντεο και γραφικών έτσι, ώστε ο χρήστης να μπορεί να τρέξει μέσα στην εφαρμογή, καθώς και να τυπώσει οποιαδήποτε σελίδα επιθυμεί.

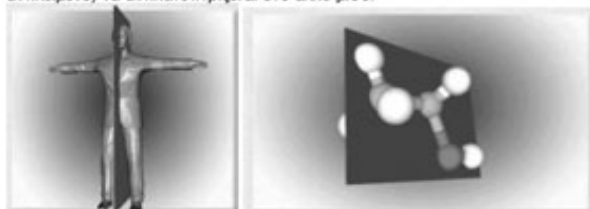
Β) Χειρικά μόρια



Ένα μόριο προκειμένου να χαρακτηριστεί ως **χειρικό** δεν πρέπει να έχει ορισμένα στοιχεία συμμετρίας δηλ. **επίπεδο συμμετρίας (σ)**, **κέντρο συμμετρίας (i)**, ή πληρέστερα **μη κανονικό άξονα περιστροφής (S_n)**.

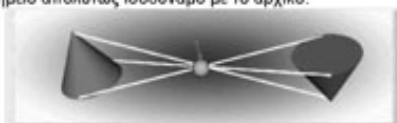
Α) ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ (σ)

Ως επίπεδο συμμετρίας σ θεωρούμε εκείνο το επίπεδο που τέμνει το μόριο μιας ένωσης, ή και οποιοδήποτε αντικείμενου, ώστε το μισό μόριο (ή αντικείμενο) να αντικατοπτρίζεται στο άλλο μισό.

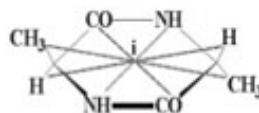
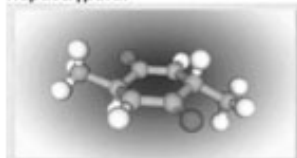


Β) ΚΕΝΤΡΟ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ (i)

Ως κέντρο συμμετρίας (i) θεωρούμε εκείνο το σημείο που, εάν φέρουμε την ευθεία από ένα σημείο έως το (i) και προεκτείνουμε κατά ίση απόσταση θα προκύψει σημείο απολύτως ισοδύναμο με το αρχικό.



Παραδείγματα:



- **Παράθεση ασκήσεων με δυνατότητα ελέγχου της σωστής απάντησης.** Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να εξασκείται και να επιβεβαιώνει αν έγινε η σωστή εμπέδωση των όσων μελέτησε παραπάνω. Με την επιλογή μιας λανθασμένης απάντησης εμφανίζεται στην οθόνη η λέξη «Λάθος», ενώ αν η απάντηση που δόθηκε είναι σωστή εμφανίζεται η λέξη «Σωστά». Και στις δύο περιπτώσεις ακούγεται χαρακτηριστικός ήχος, που αντιστοιχεί στη σωστή ή τη λάθος απάντηση. Ένα παράδειγμα άσκησης φαίνεται στο σχήμα

ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ

Οι ενώσεις των παρακάτω ζευγών είναι μεταξύ τους:

i) Ταυτόσημες ii) Συντακτικώς ισομερείς iii) Εναντιομερείς
iv) Διαστερεομερείς:

α)

$$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{CH}_3 \\ | \quad | \\ \text{C} - \text{CH}_2\text{Br} \\ | \\ \text{HO} \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{H} \\ | \quad | \\ \text{C} - \text{CH}_2\text{OH} \\ | \\ \text{Br} \end{array}$$

ΣΥΝΤΑΚΤΙΚΟΕ ΙΣ

ΤΑΥΤΟΣΗΜΕΣ

ΔΙΑΣΤΕΡΕΟΜΕΡΕΙΣ

ΕΝΑΝΤΙΟΜΕΡΕΙΣ

β)

$$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{CH}_3 \\ | \quad | \\ \text{C} - \text{Br} \\ | \\ \text{CH}_3\text{CH}_2 \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{Br} \\ | \quad | \\ \text{C} - \text{CH}_3 \\ | \\ \text{CH}_3\text{CH}_2 \end{array}$$

ΣΥΝΤΑΚΤΙΚΟΕ ΙΣ

ΤΑΥΤΟΣΗΜΕΣ

ΔΙΑΣΤΕΡΕΟΜΕΡΕΙΣ

ΕΝΑΝΤΙΟΜΕΡΕΙΣ

γ)

$$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{CH}_3 \\ | \quad | \\ \text{C} - \text{Br} \\ | \\ \text{CH}_3\text{CH}_2 \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \text{CH}_3 \quad \text{H} \\ | \quad | \\ \text{C} - \text{CH}_2\text{CH}_3 \\ | \\ \text{Br} \end{array}$$

ΣΥΝΤΑΚΤΙΚΟΕ ΙΣ

ΤΑΥΤΟΣΗΜΕΣ

ΔΙΑΣΤΕΡΕΟΜΕΡΕΙΣ

ΕΝΑΝΤΙΟΜΕΡΕΙΣ

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Mc Murry, J., (1999). Οργανική χημεία. Τόμος Α (μτφ. Α. Βαρβόλης, Μ. Ορφανόπουλος, Ι. Σμόνου, Μ. Στρατάκης) Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης.
2. K. Peter, C. Vollhardt, Neil Schöve, (1994), *Organic Chemistry*, W.H. Freeman and Company Limited.
3. Maitland Jones Jr, (1997), *Organic Chemistry*, W.W. Norton and Company.
4. G. M. Loudon, (1995), *Organic Chemistry*, 3th Edn., The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc.
5. K. Mislow, (1966), *Introduction to Stereochemistry*, W.A. Benjamin, Inc.
6. Solomons, T.W.G and Fryhle, C.B. (2000). *Organic Chemistry* (7th Edition). John Wiley and Sons, Inc.
7. Jean Jacques, (1993), Το μόριο στον καθρέπτη, (μτφ Κ. Γεωργούλης), εκδόσεις κάτοπτρο.