

# *Elektronitiheyden ja kemiallisten mallien visualisointi*

Kemian mallit ja visualisointi

Iines Kari

Katja Sievänen

Jonna Teikari

29.4.2008

## **Tavoitteet**

Harjoitustyö mallintamisesta on suunnattu yläkoulun yhdeksännelle luokalle, kemian oppimäärän suorittaneille oppilaille. Lisäksi fysiikan tiedot tukevat molekyylihallinnustunnilla käytäviä asioita. Peruskoulun kemiassa käsitellään muun muassa aineen rakennetta, kemiallisia yhdisteitä sekä sidoksia. Tunti on rakennettu osittain näiden asioiden pohjalta.

*”Opetussuunnitelman mukaan kemian opetuksen tehtävänä vuosiluokilla 7–9 on laajentaa oppilaan tietämystä kemiasta ja kemiallisen tiedon luonteesta sekä ohjata luonnontieteille ominaiseen ajatteluun, tiedonhankintaan ja tietojen käyttämiseen elämän eri tilanteissa. Opetus antaa oppilaalle persoonallisuuden kehittymisen ja nykyaikaisen maailmankuvan muodostamisen kannalta välttämättömiä aineksia ja se auttaa ymmärtämään kemian ja teknologian merkityksen jokapäiväisessä elämässä, elinympäristössä ja yhteiskunnassa.”* (Pops, 2004, 128) Yläkoulun opetussuunnitelman tavoitteena on myös tutustua aineen rakennetta ja kemiallisia sidoksia kuvaaviin käsitteisiin ja malleihin, sekä kuvailemaan ja mallintamaan kemiallisia reaktioita reaktioyhtälöiden avulla.

Tämän työn tavoitteena on havainnollistaa molekyylien sekä yhdisteiden kolmiulotteisuutta ja molekyylien elektronitiheyttä Spartan-ohjelman avulla. Opetustunnin tavoitteena on myös saada oppilaat kiinnostumaan kemiasta, havainnollistaa atomien ja molekyylien rakennetta, sekä tutustuttaa oppilaat nykyaikaisiin kemian työvälineisiin.

## Toteutus käytännössä

### 1. Harjoitus

- ❖ Hiili on yksi elämän tärkeimmistä alkuaineista, koska sitä esiintyy kaikkialla, missä on elämää.
- ❖ Hiili on yleinen epämetalli ja sen yhdisteitä on miljoonia.

a.) Piirrä Spartan-ohjelmalla hiili-atomi (C). Laske hiilen elektronitiheys perustilassa Semi-Empiirisellä -laskutasolla. Mallinna hiilen elektronitiheyskaavio. Laskun tulokset on nähtävissä "Output"-valikossa.

Montako elektronikuorta hiilellä on? \_\_\_\_\_

Montako ulkoelektronia hiilellä on? \_\_\_\_\_

Semi-empiirinen -laskutaso huomioi vain molekyylin ulkoelektronien määrän.

b.) Laske hiilen elektronitiheys perustilassa Hartree-Fock -laskutasolla. Visualisoi elektroni-tiheyskaavio.

Montako elektronia hiilellä on? \_\_\_\_\_

Montako protonia hiilellä on? \_\_\_\_\_

Hartree-Fock -taso laskee koko atomin elektronien määrän.

### 2. Harjoitus

- ❖ Jätteen hajotessa kaatopaikalla, vapautuu metaania. Metaani kerätään talteen ja hyödynnetään energian tuotannossa.
- ❖ Metaani on kasvihuonekaasu, jota syntyy karja- ja maataloudesta sekä fossiilisten polttoaineiden polttamisesta.

a.) Piirrä Spartan-ohjelmalla metaanimolekyylin rakenne. Kääntelee molekyyliä.

Metaanin rakennekaava on  $\text{CH}_4$ . Mitä havaitset?

---

---

---

b.) Laske elektronitiheydet edellisen ohjeen avulla (Semi-Empiirinen -laskutaso).

Missä molekyylin elektronit sijaitsevat todennäköisimmin?

---

---

---

### 3. Harjoitus

- ❖ Etanoli on alkoholi, jota alkoholijuomat sisältävät. Se sisältää reaktiivisen OH-ryhmän.
- ❖ Etanolia käytetään desinfiointiaineena, polttoaineena sekä teollisuuden raaka-aineena.
- ❖ Etanoli lamaannuttaa keskushermostoa. Väkevä etanoli on myrkyllistä.

a) Piirrä etanoli-molekyyli. Etanolin rakennekaava on  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ .

Laske elektronitiheydet edellisen ohjeen avulla (Semi-Empiirinen -laskutaso).

Mikä on molekyylin reaktiivisin kohta?

---

---

---

b) Vertaile pallotikkumallia, kalottimallia ja elektronitiheyskaaviota. Mitä eroja havaitset?

---

---

---

---

Spartan-ohjelmasta on erilliset käyttöohjeet (Liite 1).

## Arviointilomake

Tyttö

Poika

Ympyröi mielestäsi paras vaihtoehto.

5 erittäin paljon,

4 paljon,

3 jonkin verran,

2 vähän,

1 erittäin vähän

1. Opitko tunnilla jotain uutta?

1            2            3            4            5

2. Ymmärrätkö nyt paremmin molekyylien kolmiulotteisuutta?

1            2            3            4            5

3. Ymmärrätkö paremmin, miten elektronit jakautuvat atomin ytimen ympärille?

1            2            3            4            5

4. Kasvoiko kiinnostuksesi kemiaa kohtaan?

1            2            3            4            5

5. Aiotko tulevaisuudessa opiskella lisää kemiaa?

1            2            3            4            5

6. Vaikuttiko tämä tunti päätökseesi?

1            2            3            4            5

7. Mikä tunnilla oli parasta? Perustele.

---

---

8. Mitä kehitettävää mielestäsi tunnissa on? Perustele.

---

---

Kiitos vastauksestasi!

#### 4. Arviointilomakkeen yhteenveto

Arviointilomakkeen kysymykset:

1. Opitko tunnilla jotain uutta?
2. Ymmärrätkö nyt paremmin molekyylien kolmiulotteisuutta?
3. Ymmärrätkö nyt paremmin, miten elektronit jakautuvat atomin ytimien ympärille?
4. Kasvoiko kiinnostuksesi kemiaa kohtaan?
5. Aiotko tulevaisuudessa opiskella kemiaa?
6. Vaikuttiko tämä tunti päätökseesi?

Taulukko arviointilomakkeen kysymyksistä:

Kysymys	erittäin paljon	paljon	jonkin verran	vähän	erittäin vähän
1		x	xxx		
2		x	xxx		
3			xx	xx	
4			xx	xx	
5			xxx		x
6		x	x	x	x

Kaikki oppilaat oppivat tunnilla uutta ja etenkin molekyylien kolmiulotteisuus hahmottui heille paremmin. Kaksi vastanneista koki oppineensa vain vähän elektronien jakautumista. Oppilaiden kiinnostus kemiaa kohtaan kasvoi ainakin vähän tunnin ansiosta, ja se kannusti myös useaa oppilasta jatkamaan kemian opiskelua. Jopa yhden oppilaan, jonka tulevaisuuden opintoihin ei kuulu kemia, kiinnostus kasvoi vähän.

7. Mikä tunnilla oli parasta? Perustele

- molekyylien rakentelu kuulemma opettaa
- hassun hauska softa
- piirtely oli ihan kivaa

8. Mitä kehitettävää mielestäsi tunnissa oli? Perustele.

- ei oikeastaan mitään, tunti oli hyvä ja opin uusia asioita
- innostusta, olihan sitä, mutta saisi olla vielä lisää

Työn tavoitteena oli havainnollistaa molekyylien sekä yhdisteiden kolmiulotteisuutta ja molekyylien elektronitiheyttä Spartan-ohjelman avulla. Oppilaiden vastauksista voidaan päätellä, että he kokivat oppivansa kolmiulotteisuutta jonkin verran tai paljon. Elektronitiheyden ymmärrys oli hieman heikompaa, koska aihe oli oppilaille uusi. Jos opetusryhmä olisi kemian opinnoissaan edennyt pidemmälle, elektronitiheys olisi voinut olla helpommin ymmärrettävä käsite.

Opetustunnin tavoitteena on myös saada oppilaat kiinnostumaan kemiasta, havainnollistaa atomien ja molekyylien rakennetta, sekä tutustuttaa oppilaat nykyaikaisiin kemian työvälineisiin. Oppilaiden kiinnostus kemiaa kohtaan ei tunnin perusteella kasvanut kovin paljon, mutta osalle oppilaista tunti vaikutti myönteisesti tulevaisuuden kemian opiskeluun. Oppilasryhmällä oli todella heikko kemian osaaminen, kuitenkin ohjeen seuraaminen ja Spartan-ohjelman käyttö sujui oppilailta hyvin. Mielestämme oppilaiden suurin hyöty tunnista oli se, että he saivat tutustua kemian mallinnusohjelmaan sekä saada laajemman kuvan kemiasta ja siinä käytettävistä erilaisista malleista.

Liite 1.

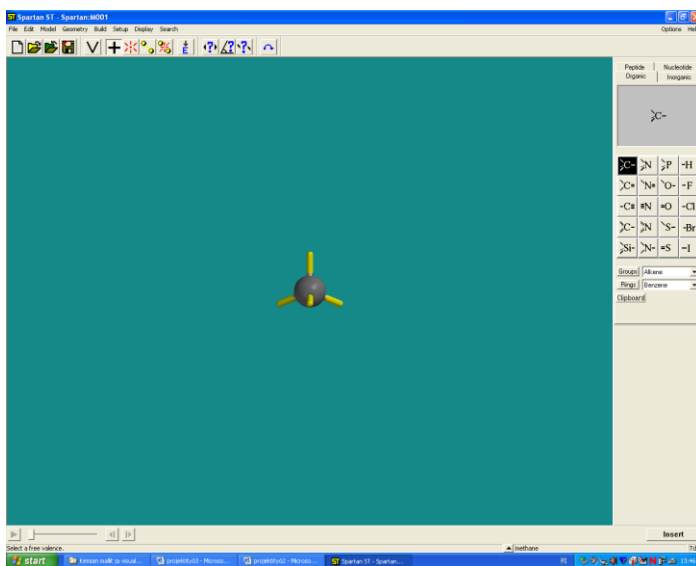
Spartan-ohjelman käyttöohjeet

Tehtävä 1

1. Avaa Spartan

2. Avaa ohjelma painamalla vasemmasta yläkulmasta valkoista ikonia. Tällä saat auki uuden sivun.

3. Piirrä hiilimolekyyli. Vie hiiri vihreälle alueelle ja paina hiiren vasenta näppäintä.

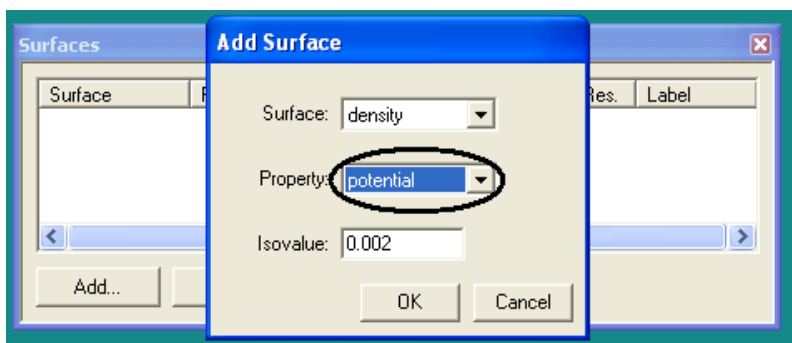


4. Poista hiilen sidokset (keltaiset viivat). Paina delete -ikonia ja klikkaa yksitellen keltaisia sidosviivoja, jolloin ne saadaan poistettua.

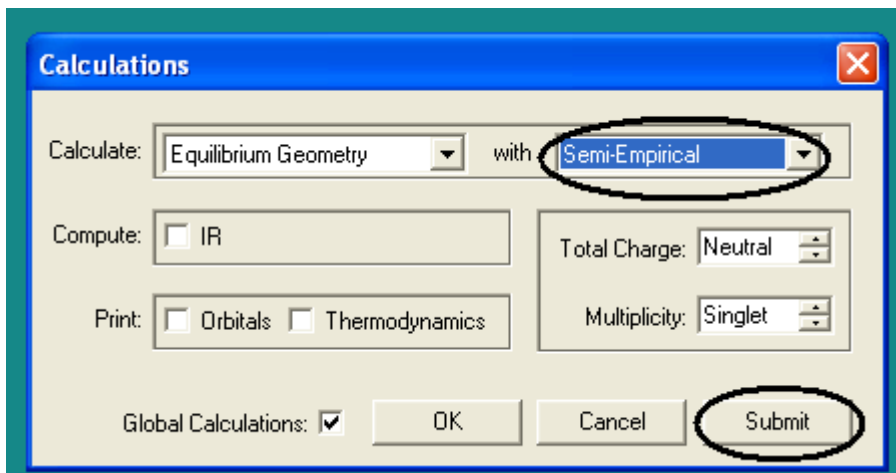
5. Paina "**Setup**" → "**Surfaces**". Toiminnolla saadaan laskettua mm. molekyylin muoto ja elektronitiheys.



6. Valitse Surfaces ikkunasta **"Add"**. Valitse Surface-valikosta **"density"** ja Property-valikosta **"potential"**. Paina lopuksi **"OK"**.



7. Valitse **"Setup"**→**"Calculations"**. Ruudulle avautuu laskentakaavio. Valitse Calculations ikkunasta toiminnot **"Equilibrium Geometry"** (mittaus tasapainotilassa) ja **"Semi-Empirical"** (mittausmetodi). Paina lopuksi **"Submit"**.

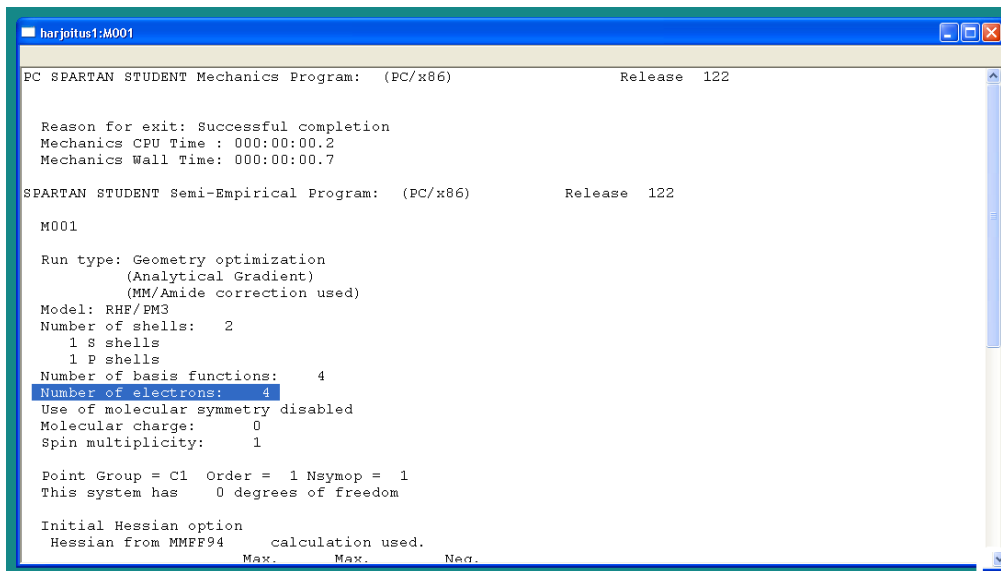


8. Tallenna lasku nimellä harjoitus1 ja klikkaa **"Save"** nappulaa. Ruudulle ilmestyy ikoni. Ohjelma aloittaa laskemisen kun painat **"OK"** nappulaa. Ruudulle ilmestyy ikoni. Ohjelma on lopettanut laskemisen. Paina **"OK"** nappulaa.

9. Paina **Surface** -ikkunasta keltaista laatikkoa. Saat näkyviin hiiliatomin elektronitiheyden.

Pyörittele atomia painamalla hiiren vasentanappulaa, paina pitkään hiiren vasentanappulaa jolloin atomiin ilmestyy pieni neliö → kuvaruudun oikeassa laidassa on **"Style"** dots (pisteinä), **mesh** (viivoina), **solid** (kiinteä), **transparent** (läpinäkyvä).

10. Katso laskun tuloksia: **"Display"** → **"Output"**. Ruudulle avautuu laskun tulokset:



```
harjitus1:M001
PC SPARTAN STUDENT Mechanics Program: (PC/x86) Release 122

Reason for exit: Successful completion
Mechanics CPU Time : 000:00:00.2
Mechanics Wall Time: 000:00:00.7

SPARTAN STUDENT Semi-Empirical Program: (PC/x86) Release 122

M001

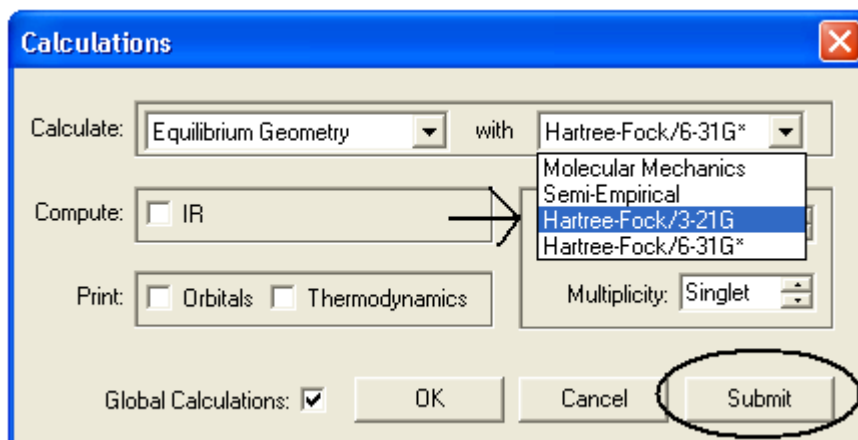
Run type: Geometry optimization
          (Analytical Gradient)
          (MM/Amide correction used)
Model: RHF/PM3
Number of shells: 2
  1 S shells
  1 P shells
Number of basis functions: 4
Number of electrons: 4
Use of molecular symmetry disabled
Molecular charge: 0
Spin multiplicity: 1

Point Group = C1 Order = 1 Nsymop = 1
This system has 0 degrees of freedom

Initial Hessian option
Hessian from MMFF94 calculation used.
Max. Max. Neg.
```

11. Vastaa tehtävän 1a) kysymyksiin.

12. Valitse **"Setup"** → **"Calculations"**. Muuta laskutaso Hartree-Fock/3-21G. Paina **"Submit"**.



→ **"OK"** aloittaa laskemisen

→ **"OK"** lopettanut laskemisen

13. Katso laskun tuloksia: **"Display"** → **"Output"**. Vastaa tehtävän 1b) kysymyksiin.

14. Paina **"File"** → **"Close"**. Tämä sulkee tehtävä sivun.

(sulje Surfase ikkuna)

## Tehtävä 2

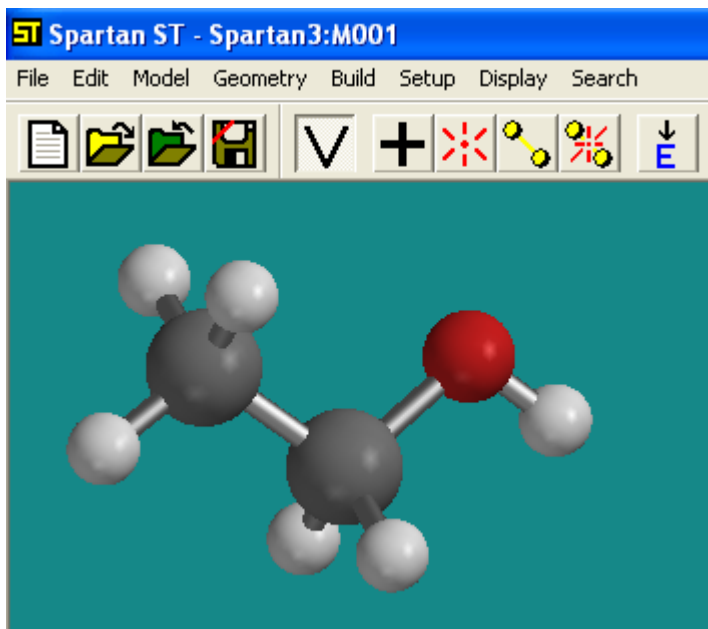
1. Avaa ohjelma painamalla vasemmasta yläkulmasta valkoista ikonia.
2. Piirrä metaanimolekyyli.
3. Kääntelee molekyyliä. Vastaa tehtävään 2a).
4. Laske elektronitiheydet samalla tavalla kuin tehtävässä 1 kohdissa 5-9. Vastaa tehtävän kysymykseen 2b).
5. Paina "**File**" → "**Close**". Tämä sulkee tehtävisivun.

Ilmoitu: "**Save changes to harjoitus1?**" → "**No**"

(sulje Surfase ikkuna)

## Tehtävä 3

1. Piirrä etanoli-molekyyli. Tämän jälkeen poista steeriset esteet painamalla minimize-ikonia.



2. Laske elektronitiheys Semi-Empiirisellä laskutasolla kuten harjoituksessa 1. (Kohdat 5-9)  
Lisää **Calculations** kaavioon **Compute** kohtaan ruksi, saadaan IR.

Vastaa kysymykseen 3a). Elektronitiheyskaavio: ("**Setup**" → "**Surfaces**")

3. Poista elektronitiheyskaavio klikkaamalla **Surfaces** ikkunasta punainen ruksi pois. Vertaile pallotikkumallia, kalottimallia ja elektronitiheyskaaviota. Kalottimallin saat "**Model**" → "**Space Filling**". Vastaa kysymykseen 3b)

4. Avaa ohjelma etanoli.profile1 painamalla vasemmasta yläkulmasta keltaista kansioita → **Open**. IR-spektri: "**Display**" → "**Spectra**". Paina **Draw IR Spectrum**.