

# **Alkuaineen hybridisaatiotyypin vaikutus molekyylin muotoon.**

02.05.08

Tekijä: Eero Jalonen

## 1. Luokka-aste: lukio (kurssi 2)

## 2. Tavoitteet:

- 1) Oppilas perehtyy tieto- ja viestintätekniiikan mahdollisuuksiin mallintamisen välineenä.
- 2) Oppilas saa kokemuksia, jotka herättävät ja syventävät kiinnostusta kemiaa ja sen opiskelua kohtaan.
- 3) Oppilas tekee omakohtaisia havaintoja ja johtopäätöksiä.
- 4) Oppilaan tiedot hybridisaatiotyypeistä ja orgaanisten yhdisteiden sidos- ja avaruusrakenteista syvenevät.

## 3. Toteutus

Pedagoginen toteutus: Käytössä 10 Spartan-ohjelmalisenssiä. Oppilaat koneilla yksin tai pareittain. Oppimistuokion jälkeen opetuskeskustelua opituista asioista.

### Ohje oppilaalle:

Huom! joka kohdassa voit kysyä tarvittaessa neuvoa opettajalta

1. Piirrä Spartan –ohjelmalla etanolimolekyylin (aloita valitsemalla pikanäppäin New) -mittaa sidospituudet ja sidoskulmat (pikanäppäimet Distance ja Angle)

Mitä huomaat?

-paina pikanäppäintä Minimize ja mittaa uudestaan sidospituudet ja sidoskulmat

Mitä huomaat? Miksi eri tuloksia kuin edellä?

-voit pyörittää molekyylin vetämällä hiiren vasen näppäin pohjassa

-siirrä molekyylin kuvaruudulla vasemmalle ylös vetämällä hiiren oikea näppäin pohjassa

2. Piirrä propenaali (New)

-mittaa sidospituudet ja sidoskulmat (pikanäppäimet Distance ja Angle)

Mitä huomaat?

-paina pikanäppäintä Minimize ja mittaa uudestaan sidospituudet ja sidoskulmat

Mitä huomaat? Miksi eri tuloksia kuin edellä?

-siirrä molekyylin kuvaruudulla vasemmalle vetämällä hiiren oikea näppäin pohjassa

-pikanäppäimestä View saat näkyviin molemmat molekyylit samanaikaisesti

3. Piirrä dimetyyliamiini (New)

-toista samat vaiheet kuin edellä

4. a) Järjestä molekyylit vierekkäin

b) Kääntelee molekyylejä

Mikä molekyylin on tasomainen? Miksi?

Mitkä ovat hiilen, hapen ja typen hybridisaatiotyypit kussakin molekyylissä? Piirrä molekyylit vihkoon ja merkitse hybridisaatiotyypit atomien kohdalle.

Mitkä atomien välisistä sidoksista ovat sigmasidoksia ja mitkä piisidoksia?

5. Tutkitaan seuraavaksi sigmasidoksen pyörähdyssymmetrisyyttä ja potentiaalienergioita etanolimolekyylillä

- tuhoa muut molekyyliä paitsi etanolimolekyyli pikanäppäimellä Close
  - tallenna etanolimolekyyli tiedostoksi etanoli.spartan (File-Save as)
  - valitse Geometry-Constrain Dihedral
  - klikkaa hiirellä järjestyksessä vasemmalta oikealle hiiliatomeja ja sitten happiatomia ja vetyatomia
  - klikkaa sen jälkeen ruudun oikeassa alakulmassa olevaa lukonkuvaa
  - valitse Display-Properties ja klikkaa molekyylissä olevaa torsiokulman merkkiä
  - rasti ruutuun Dynamic
  - kulmaksi to-kohtaan 0 ja paina Enter näppäimistöä
  - valitse Setup-Calculations ja ikkunasta valinnat Calculate: Energy Profile ja Semi-Empirical sen jälkeen paina Submit ja OK
  - sulje tämä tiedosto ja avaa tiedosto etanoli.Profile1
  - valitse Geometry-Align Molecules, klikkaa hiiliatomeja ja happiatomia, paina Align-nappulaa, klikkaa View-pikanäppäintä
  - avaa lasketut energia-arvot näkyville eli valitse Display-Spreadsheet
  - valitse Add-Rel.E-Käytä
  - visualisoidaan etanolin energiaprofiili: valitse Display-Plots ja sieltä Xaxis:molecule sekä Yaxis: Rel.E
  - käynnistä esitys ikkunan vasemmasta alakulmasta, voit käänellä molekyyliä ja pysäyttää liikkeen tiettyyn kohtaan
- Missä molekyylin asennossa potentiaalienergia on suurimmillaan ja missä pienimmillään? Miksi?

#### 4. Arviointi

Oppilailta (7 tyttöä ja 7 poikaa) kysyttiin harjoitusten jälkeen seuraavia avoimia kysymyksiä:

- a) Mitä asioita ymmärrät paremmin ohjelman avulla?
- b) Mitä mieltä olet tästä oppimisympäristöstä?

Kommentteja:

- loistava ohjelma
- kolmiulotteisuus helpottaa
- hauska nähdä, millaisia molekyylit ovat
- kivaa

Oppilaat kiinnittivät vastauksissaan huomiota seuraavien asioiden parempaan ymmärtämiseen:

	frekvenssi pojat	frekvenssi tytöt
sidoskulmat	3	1
sidosvälit	2	0
avaruusmuodot	3	6
atomien kokoerot	1	2
symmetrisyys	2	0

Opittuja asioita

