

Asetyylisalisyylihapon energiaprofiili

- Konformaatioisomeria

Kemian mallit ja visualisointi

Tom Olsson

Simo Tolvanen

25.4.2008

Suoritus

Kohderyhmänä on lukion kemian 2- kurssi.

Aiheena on Asetyyliäsalisylihapon eli aspiriinin konformaatioisomerian tutkiminen. Työssä on tarkoituksena käydä ensin hiukan teoriaa aiheeseen liittyen, jonka jälkeen aspiriinin energiaprofiili määritetään Spartan- ohjelmalla. Työstä on tehty yksityiskohtainen ohje, jonka avulla kuka tahansa pystyy suorittamaan työn eri vaiheet. Kun työ on tehty keskustellaan vielä hetki tuloksista ja niiden tarkkuudesta. Lisäksi pohditaan molekyylihallinnuksen käyttöä.

Tavoitteet

”2. Kemian mikromaailma (KE2)

Kurssin tavoitteena on, että opiskelija

- *tuntee aineen rakenteen ja ominaisuuksien välisiä yhteyksiä*
- *osaa käyttää aineen ominaisuuksien päättelyssä erilaisia kemian malleja, taulukoita ja järjestelmiä*
- *tuntee orgaanisten yhdisteiden rakenteita ja tuntee rakenteen määrittämisessä käytettäviä menetelmiä*
- *osaa tutkia kokeellisesti tai erilaisia malleja käyttäen aineiden rakenteeseen, ominaisuuksiin ja reaktioihin liittyviä ilmiöitä.” (LOPS, 2003)*

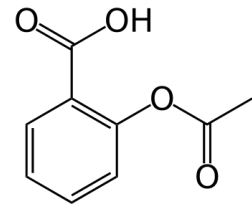
Mielestämme aspiriinin konformeeri-isomeerien tutkiminen osuu kaikkiin OPSin asettamiin tavoitteisiin.

Oppilas ymmärtää eri rakenteiden energeettisten tilojen merkityksen. Erilaisten rakenteiden merkitys selviää. Siis nimenomaan se, että erilaisilla rakenteilla on suuri merkitys aineen kemiallisen merkityksen kannalta. Esim. aspiriinin kohdalla vain tietty rakenne antaa toivotun vasteen särkylääkkeenä. Työssä annetaan oppilaalle ainakin yksi selkeä malli, jonka avulla on helppo hahmottaa tiettyjä kemiallisia ominaisuuksia. (torsioikulma/energia)

Edelleen voidaan helpommin hahmottaa orgaanisten yhdisteiden rakenteita. Rakenteen määrittäminen on kuitenkin itse tehtynä paljon kirjan kuvaa opettavaisempaa ja hauskeempaa.

Työn ohjeistus

- Avaa ohjelma Spartan: start → programs → Spartan Student
- Valitse vasemmasta yläkulmasta file → new
- Piirrä asetyylisalisyylihappo
 - Oikeassa reunassa Organic- välilehden alta
 - Valitse Rings- Benzene → klikkaa hiirellä alustaa
 - Valitse happi, jolla on kaksi sidosryhmää → liitä se bentseenirenkaaseen
 - Valitse hiili, jolla on kaksoissidos → liitä se happeen
 - Valitse happi, jolla on kaksoissidos → liitä se hiileen
 - Valitse hiili, jolla on neljä sidosryhmää → liitä se hiileen
 - Valitse Groups- Carboxylic Acid → liitä se bentseenirenkaaseen
- Paina View- painiketta, iso V-kirjain
- Paina Minimize- painiketta, E, jonka päällä nuoli alaspäin
- Valitse Setup → Calculations
 - Calculate: Equilibrium Geometry
 - with: Semi-Empirical
- Paina submit
- tallenna työ nimellä ”aspiriini.spartan”
- Odota ilmoitusta aspiriini.spartan has completed
- Valitse Geometry → Constrain Dihedral
- Valitse kaikki atomit, joiden suhteen torsioliikettä tarkastellaan (metyyliryhmä- hiili-happi bentseenirengas), valitut atomit muuttuvat keltaisiksi.
- Paina pientä vaaleanpunaista lukkoa sivun alareunassa, lukko menee kiinni ja ohjelma ilmoittaa sen hetkisen kulman arvon
- Paina View- painiketta, iso V-kirjain
- Valitse Display → Properties, ikkuna: Atom Properties aukeaa
- Klikkaa torsiokulman merkkiä molekyylissä, ikkunan nimi muuttuu: Constraint Properties
- Valitse Dynamic painike, jolloin ikkunaan ilmestyy kaksi numeroarvoa lisää
 - vaihda ensimmäinen asteluku 0° → paina Enter
 - vaihda ensimmäinen asteluku 360° → paina Enter
 - vaihda steps kohdan arvoksi 20 → paina Enter



- Laske aspiriinin energiaprofiili
 - Setup → Calculations → Calculate: Energy Profile , paina Submit näppäintä
 - Odota laskun loppumista
- Sulje ohjelma
- Avaa ohjelma Spartan: start → programs → Spartan Student
- Valitse vasemmasta yläkulmasta file → open → aspiriini.Profile1.spartan
 - ohjelma avaa laskun tulokset
- Valitse Geometry → Align Molecules valitse kolme hiiliatomia bentseenirenkaasta (1,2 ja 6 hiili, eli hapteen sitoutunut hiili sekä sen viereiset hiilet) ja paina Align
- Paina View- painiketta, iso V-kirjain
- Paina Display → Spreadsheet
- Paina Add.. → rel. E, vaihda Energy: kJ/mol, paina OK
- Valitse Display → Plots
 - X- axis: molecule
 - Y- axis: rel. E
- Vasemmassa ala- kulmassa on näppäimet, joiden avulla voi tutkia eri rakenteiden energiaa.

Palautelomakkeen tulokset

Vastaajia oli yhteensä 21. Vastaukset olivat yleisesti ottaen hyvin positiivisia ja kannustavia.

1) Koitko laskennallisen kemian käyttämisen kemian oppimisen kannalta hyödyllisenä / haitallisena? Miksi?

Kaikki kokivat laskennallisen kemian käyttämisen hyödylliseksi. Yleisimmät vastaukset olivat:

- Mielenkiintoista vaihtelua normaalin kemian opiskeluun
- Antaa tietoa mitä ei saa koetuloksista
- Pääsi tutustumaan molekyyliin ja rakenteisiin
- Lisäksi oletettiin opetuksesta olevan hyötyä tulevaisuuden opinnoissa
- Tarjosi yleisesti uutta tietoa kemiasta ja kemistin työkaluista

2) Mikä oli mielestäsi oppitunnin paras anti?

Hyvinkin moni oli sitä mieltä, että leikkiminen esim. DNA- rakenteilla oli tunnin parasta antia. Onneksi saimme muunkin laista palautetta.

- ohjelmalla leikkiminen
- nukleotidit
- uuden oppiminen
- Powerpoint- esitys sai myös erityiskiitosta
- itse tekeminen ja Spartaniin tutustuminen

3) Mitä haluaisit muuttaa oppitunnissa?

Suurin osa vastaajista jätti tämän kohdan tyhjäksi. Ne jotka vastasivat ottivat lähinnä kantaa ajan käyttöön.

- laskuihin olisi pitänyt kestää vähemmän aikaa
- oppitunti olisi saanut kestää pidempää

4) Muuta palautetta?

Suurin osa jätti osion tyhjäksi. Vastauksista päätelimme kuitenkin, että tunti oli ollut ainakin jollain tapaa mieleinen.