

Veden ja glukoosin mallinnus

Jääskeläinen, Piia. Mallinnus, vesi ja glukoosi,
<http://www.helsinki.fi/kemia/opettaja/ont/jaaskelainen-p-2008.pdf>

Harjoitustöissä mallinnetaan vesi- ja glukoosimolekyylit ArgusLab-ohjelmalla. Ohjelma on ilmaiseksi ladattavissa Internetistä osoitteesta:

<http://www.planariasoftware.com/arguslab40.htm>

Ohjelma ei ilmeisesti toimi Windows Vistalla, mutta vanhemmilla versioilla toimintahäiriötä saattaa ilmetä. Tällöin auttaa ohjelman uudelleenkäynnistys.

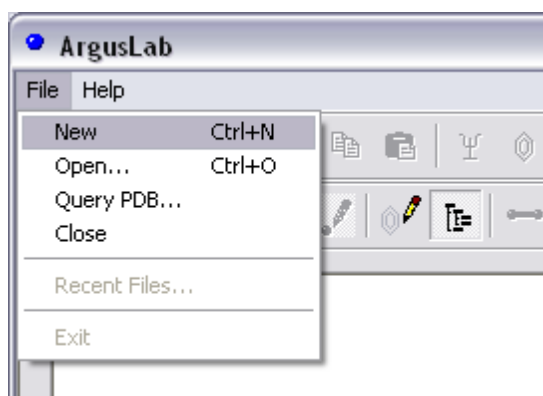
Harjoitus 1. Vesi

Ennakkotehtäviä

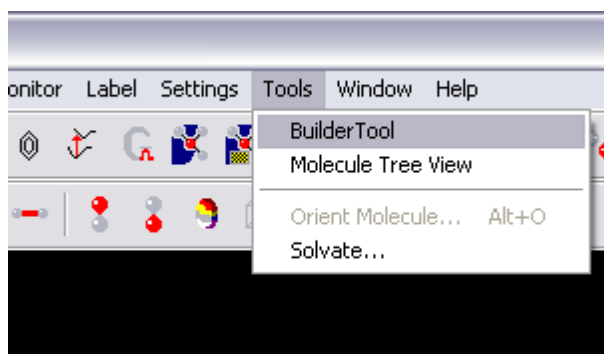
- Nimeä veden kolme olomuotoa.
- Mikä on veden tieteellinen nimi?
- Mikä on veden molekyylikaava?
- Mikä on veden rakennekaava?

Mallinnus

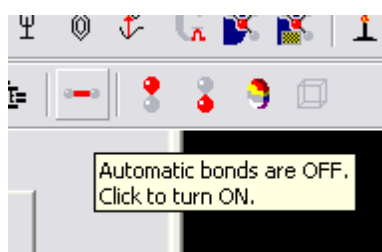
1. Avaa uusi työ: *File* → *New*



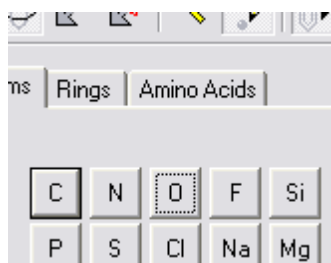
2. Avaa atomivalikko: *Tools* → *Builder Tool*



3. Valitse työkalupalkista hiirellä *Automatic bonds ON*. Tällä asetuksella mallinnohjelma liittää yksittäiset atomit kemiallisella sidoksella molekyyliksi.



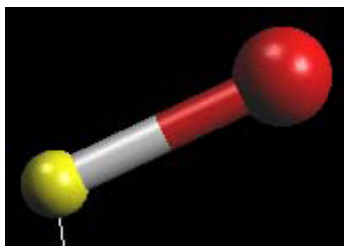
4. Valitse atomivalikosta hiiren vasemmalla painikkeella happiatomi (O) ja lisää se painamalla hiiren oikeanpuoleista painiketta mustaan ikkunaan.



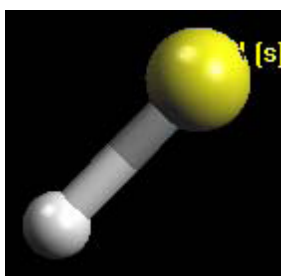
5. Avaa atomivalikosta jaksollinen järjestelmä (*Periodic table...*) ja valitse sieltä vety (H). Paina *OK*.



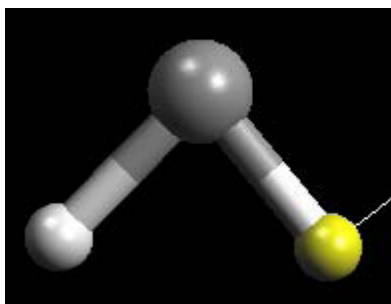
6. Lisää molekyyliin vetyatomi painamalla hiiren oikealla painikkeella happiatomin viereen.



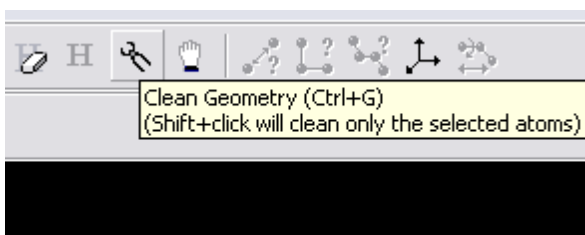
7. Aktivoi happiatomi valitsemalla se hiiren vasemmalla painikkeella, jotta lisää seuraavan vedyn hiileen, etkä edelliseen vetyyn.



8. Lisää molekyyliin toinen vety (hiiren oikealla painikkeella). Huomioi veden rakenteen V-muoto. Molekyylin rakenne riippuu siinä olevien atomien ominaisuuksista; kuten elektronien lukumäärästä ja sijoittumisesta ytimen ympärille. Ne määräävät atomien välisten sidosten pituudet ja sidoskulmat.



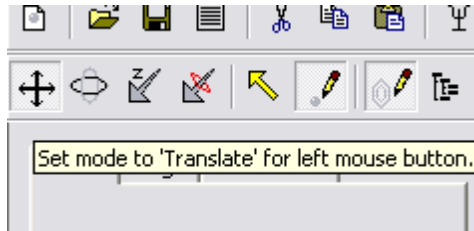
9. Optimoi kolmiulotteinen rakenne valitsemalla työkalupalkista: *Clean geometry (Ctrl+G)*. Miksi molekyyli muuttaa muotoaan, kun sen kolmiulotteinen rakenne optimoidaan?



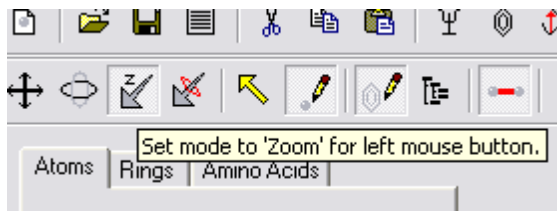
10. Avautuneeseen *Save a Molecule* -ikkunaan tallenna työ nimellä *vesi.agl*

Molekyylin tarkastelu

1. Voit siirtää molekyyliä valitsemalla työkalupalkista *Translate*. Molekyyli liikkuu ottamalla siitä kiinni hiiren vasemmalla painikkeella ja liikuttamalla hiirtä.



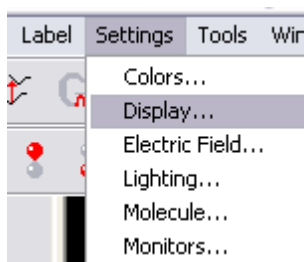
2. Muuta molekyylin kokoa valitsemalla työkalupalkista *Zoom* (ota kiinni hiiren vasemmalla painikkeella ja liikuta hiirtä).



3. Kääntele molekyyliä valitsemalla työkalupalkista *Rotate* (ota kiinni hiiren vasemmalla painikkeella ja liikuta hiirtä).



4. Vertaa molekyylimalleja seuraavasti: Vaihda rautalankamalliin valitsemalla *Settings* → *Display*, valitse *Fireframe* ja paina *OK*.





5. Vaihda pallomalliin valitsemalla: *Settings* → *Display*, valitse *CPK (Space filling) (normal)* ja paina *OK*.
6. Vaihda takaisin pallotikkumalliin valitsemalla: *Settings* → *Display*, valitse *Ball cylinder (normal)* ja paina *OK*.

Tehtäviä

- Miten molekyylimallit eroavat toisistaan?
- Kuinka monella erilaisella molekyylimallilla olet kuvannut vettä tässä harjoituksessa?
- Mitä tarkoittaa molekyylimalli?

Harjoitustyö 2. Glukoosi (rypälesokeri)

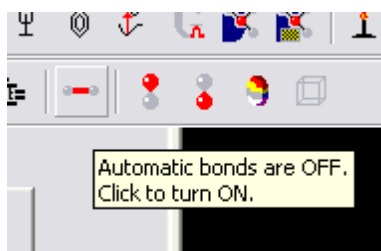
Ennakkotehtäviä

- Mistä sokeri on peräisin?
- Mihin ihminen tarvitsee sokeria?
- Mikä on glukoosin molekyylikaava?
- Mikä on glukoosin rakennekaava?

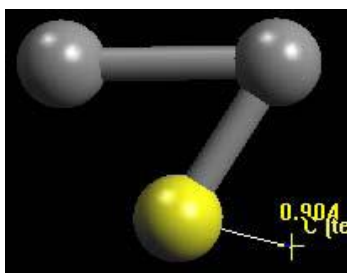
Mallinnus

1. Avaa uusi työ: *File* → *New*

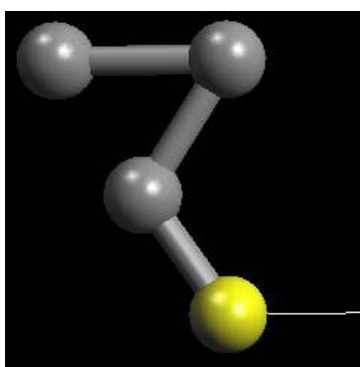
2. Valitse työkalupalkista hiirellä *Automatic bonds ON*. Tällä asetuksella mallinnusohjelma liittää yksittäiset atomit kemiallisella sidoksella molekyyliksi.



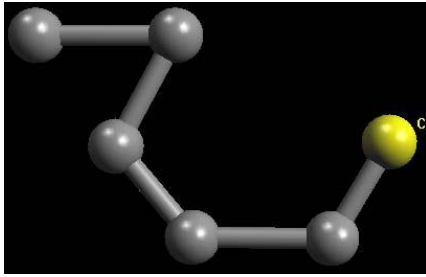
3. Valitse atomivalikosta hiiliatomi (C) ja lisää se mustaan ikkunaan.
4. Lisää molekyyliin toinen hiili painamalla hiiren oikeaa painiketta ensimmäisen hiilen oikealla puolella.
5. Lisää ketjuun kolmas hiili kuvan mukaisesti edellisten alapuolelle.



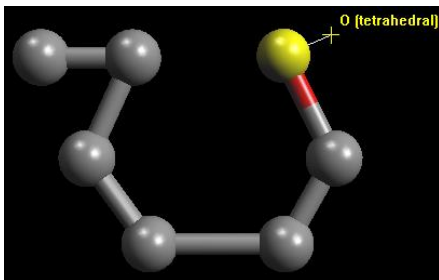
6. Hiiliketjun neljäs hiiliatomi tulee kuvan osoittamalla tavalla suoraan toisena lisätyn hiilen alapuolelle.



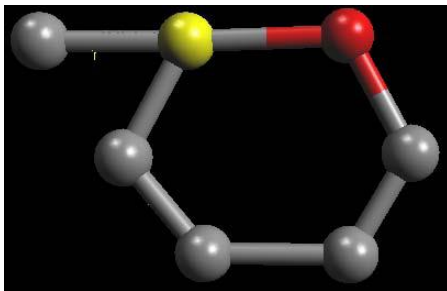
7. Viides hiiliatomi tulee edellisen oikealle puolelle.
8. Hiiliketjun kuudes atomi tulee kuvan osoittamalla tavalla suoraan kolmantena lisätyn hiilen oikealle puolelle. Mikä on kuusihhilisen alkaanin nimi?



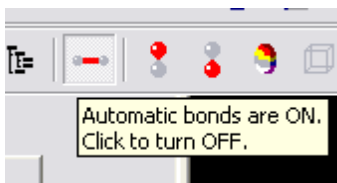
9. Lisää molekyyliin happi (O) valitsemalla se atomivalikosta ja lisäämällä hiirellä kuvan osoittamalla tavalla ketjun jatkoksi.



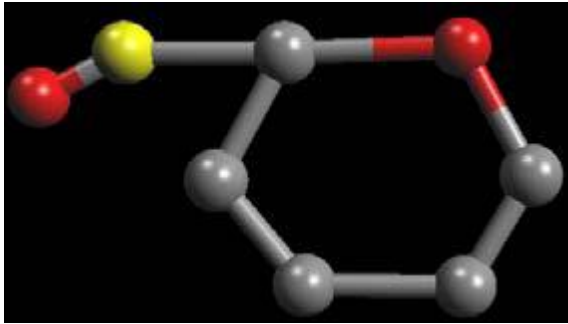
10. Sulje molekyyliketju renkaaksi valitsemalla hiirellä valmistamasi ketjun toinen hiiliatomi (hiiliketjun 2. molekyyli alkupäästä laskettuna).



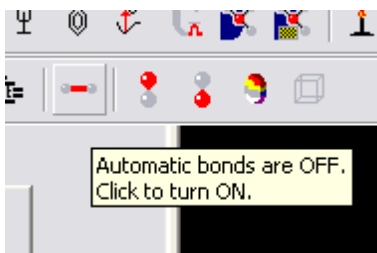
11. Lisätäksesi molekyylin hiiliatomeihin yksittäiset happiatomit, valitse ensin hiirellä työkalupalkista *Automatic bonds OFF*.



12. Lisää ensimmäisen hiiliatomin viereen happi hiiren vasemmalla painikkeella.

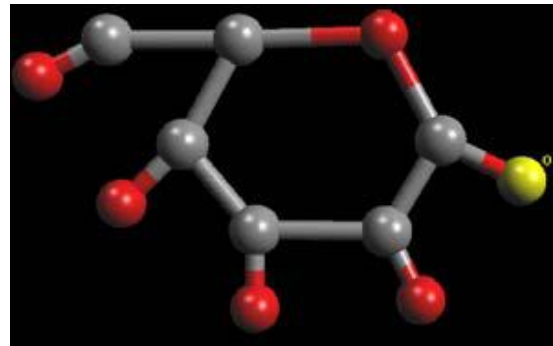
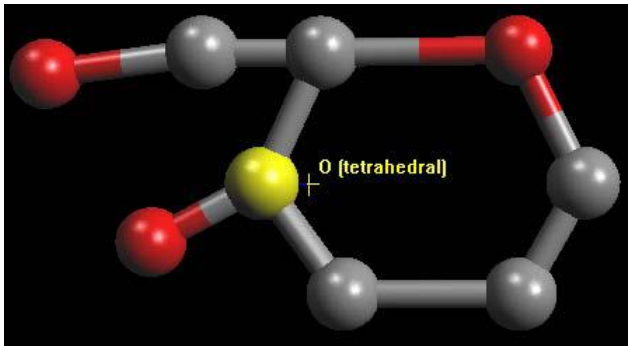


13. Muuta asetukseksi työkalupalkista hiirellä *Automatic bonds ON*.

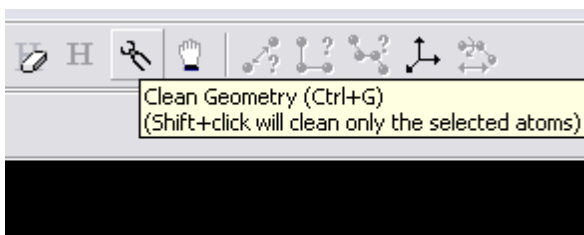


14. Liitä happiatomi hiiliketjuun valitsemalla hiiliatomi hiiren vasemmalla painikkeella.

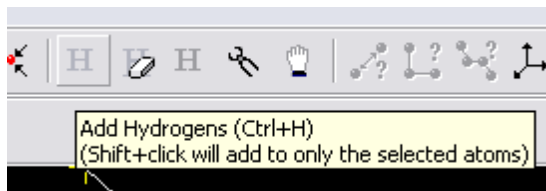
15. Lisää puuttuvat neljä happiatomia toistamalla kohdat 11–14 jokaisen hiiliatomin kohdalla. (Huomaa, että renkaassa olevaan hiiliatomiin hapen ja sivuketjun välissä ei tule erillistä happea.)



16. Optimoi kolmiulotteinen rakenne valitsemalla työkalupalkista: *Clean geometry* (*Ctrl+G*) ja tallenna molekyyli nimellä *glukoosi.agl*

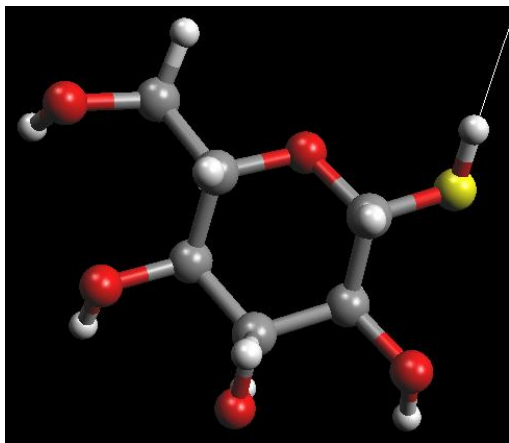


17. Lisää molekyyliin vetyatomit valitsemalla työkalupalkista *Add Hydrogens*.



18. Optimoi rakenne uudelleen.

19. Tarkastele molekyyliä kuten edellisissä harjoitustehtävissä: Molekyylin tarkastelu (kohdat 1-6).



Tehtäviä

- Mitä asioita eri molekyylimallit kuvaavat parhaiten?
 - rautalankamalli
 - pallomalli
 - pallotikkumalli
- Mikä molekyylimalli on mielestäsi selkein? Miksi?
- Mitkä glukoosimolekyylin atomit ovat samassa tasossa?
- Kuinka monella molekyylimallilla olet kuvannut glukoosia tässä harjoituksessa?

Opettajalle

Harjoitustyössä mallinnetaan vesi- ja glukoosimolekyylit. Mallinnusohjelmalla rakennetaan molekyyli atomi kerrallaan ja lopuksi optimoidaan valmiin molekyylin rakenne. Mallinnusohjelma korjaa molekyylin rakenteen atomien ominaisuuksien perusteella.

Työohjeesta puuttuu huomio: yksittäisen atomin ollessa valittuna molekyylimallia vaihdettaessa vain ko. atomi vaihtuu toiseen molekyylimalliin valitun toiminnon mukaisesti. Kun mikään atomeista ei ole keltainen eli valittuna toiminnan kohteeksi, koko molekyyli muuttuu valitun toiminnon mukaisesti.

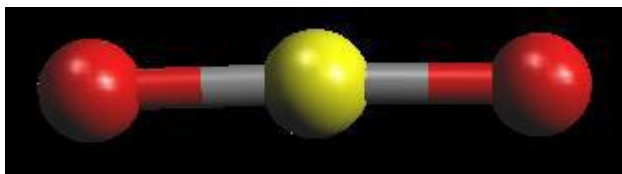
Mallinnusharjoitusten tavoitteet

- Tietokoneavusteiseen kokeellisuuteen tutustuminen
- Mallinnusohjelmaan tutustuminen
- Molekyylin ominaisuuksien ja mallinnuksen kertaus
- Aineen rakennetta ja kemiallisia sidoksia kuvaavien käsitteiden ja mallien kertaus
- Työohjeen noudattaminen
- Kiinnostuksen tukeminen kemiaa ja työmenetelmää kohtaan

Työselostusohje-suunnitelma lukiotasolle

1. Tee harjoitustyöstä työselostus erilliselle paperille tai työvihkoosi.
2. Piirrä ja nimeä (tieteellinen nimi) mallintamasi molekyyli.
3. Kuvaile muutamalla lauseella työn kulku.
4. Harjoitustyöhön liittyy kysymyksiä, joihin pohditaan vastauksia työn edetessä.
5. Analysoi tulosten järkevyyttä: vertaa saamiasi tuloksia (rakennetta) esimerkiksi oppikirjan tietoihin.
6. Kirjaa työselostukseen harjoitustyön kysymysten vastaukset.

Lisäharjoitus: hengitysilman hiilidioksidi



Mallinnus

1. Avaa uusi työ: *File* → *New*
2. Valitse työkalupalkista hiirellä *Automatic bonds ON*. Tällä asetuksella mallinnusohjelma liittää yksittäiset atomit kemiallisella sidoksella molekyyliksi.
3. Valitse atomivalikosta hiiliatomi (C) ja lisää se ikkunaan.
4. Lisää molekyyliin happiatomi (O) valitsemalla se atomivalikosta ja lisäämällä hiiliatomin viereen hiiren oikealla painikkeella.
5. Aktivoi hiiliatomi hiiren vasemmalla painikkeella ja lisää siihen toinen happiatomi (painamalla oikeanpuoleista painiketta hiiliatomin vieressä). Huomioi rakenteen muoto.
6. Optimoi kolmiulotteinen rakenne valitsemalla työkalupalkista: *Clean geometry (Ctrl+G)*
7. Avautuneeseen *Save a Molecule* -ikkunaan tallenna työ nimellä *hiilidioksidi.agl*
8. Tarkastele molekyyliä kuten edellisessä harjoitustehtävässä.