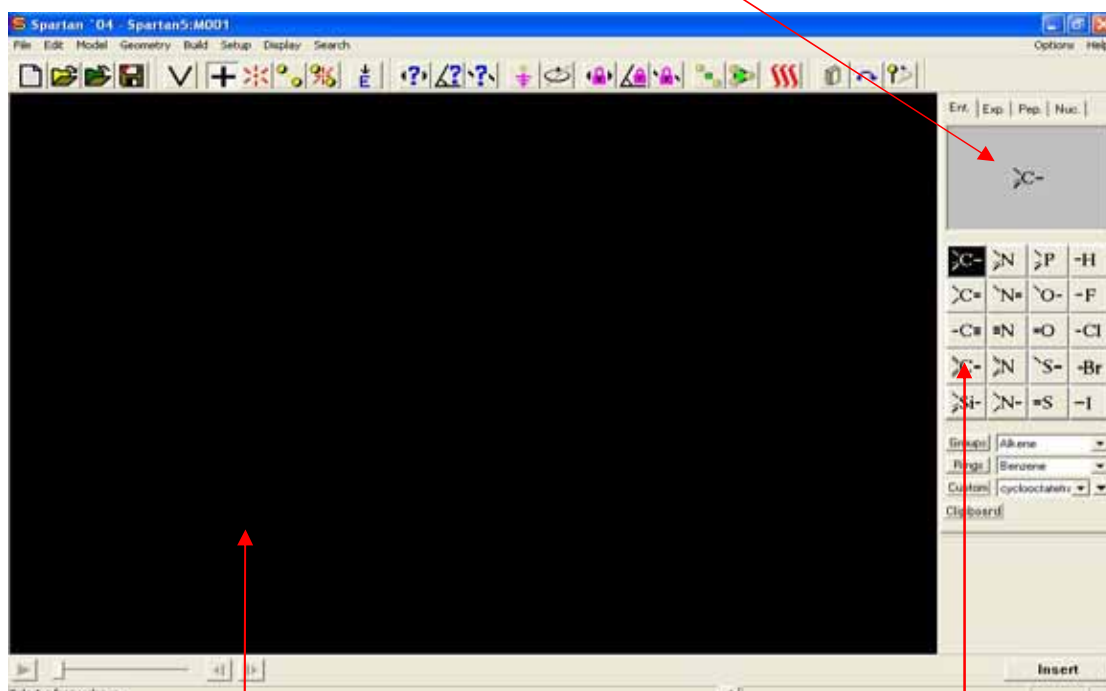


Spartan tutuksi

1. Aloittaminen

Avaa Spartan -molekyylin mallinnusohjelma. Valitsemalla **file** ja **new**, avautuu kuvan 1 mukainen näkymä.

Valittu atomi



Kuva 1: Spartanin mallinnusnäky

Mallinusikkuna

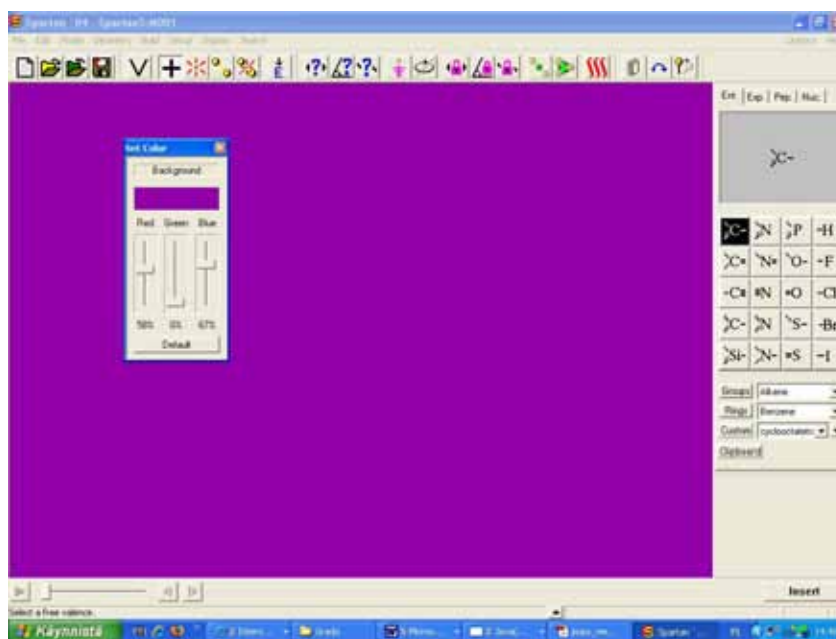
Atomivalikko

Oikealla on atomivalikko. Voit vaihtaa orgaanisen kemian valikon myös epäorgaanisia alkuaineita käsittäväksi valikoksi painamalla **Exp.** näppäintä valikon yläreunasta. Alussa käytämme kuitenkin orgaanista **Ent.** -valikkoa.

Valittuna oleva alkuaine on mustalla pohjalla valikossa ja se näkyy pienellä ruudulla valikon yläpuolella. Atomia saa vaihdettu klikkaamalla hiirellä haluamaansa alkuainetta.

2. Taustaväri

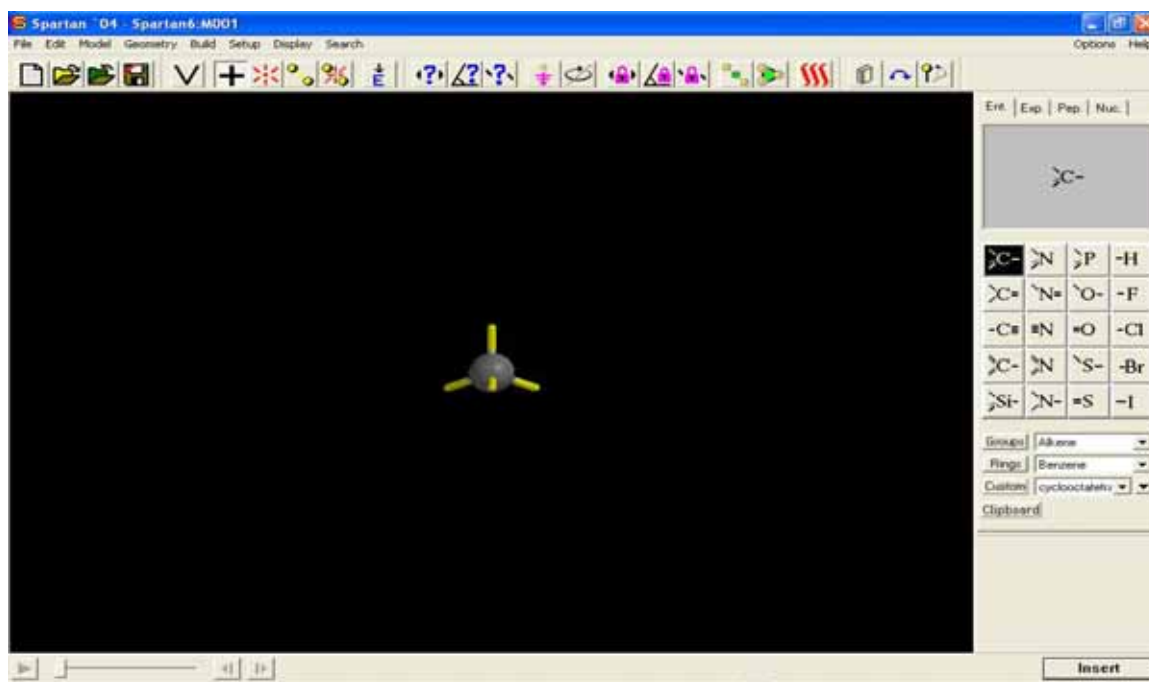
Mallinusikkunan taustaväriä voi vaihtaa mieleisekseen valitsemalla näytön oikeasta ylälaidasta **options** ja sieltä colors. **Set color** ikkuna aukeaa. Liikuttamalla säätimiä, saat mallinusikkunan värin muutettua. (Kuva 2)



Kuva 2: Spartanin taustavärin vaihtaminen

3. Molekyylin luominen

Mallinnetaan ruudulle ensimmäinen molekyyli. Valitse atomivalikosta hiiliatomi, jolla on neljä yksinkertaista sidosta. Klikkaa hiiren vasemmalla näppäimellä mallinnusikkunaan. Atomin tulisi ilmestyä mallinnusikkunaan (Kuva 3)



Kuva 3: Hiiliatomi

Atomien poistaminen

Voit poistaa atomeja valitsemalla punaisen tähden (kuva 4) ikonirivistöstä ja klikkaamalla poistettavaa osaa. Poistamisen jälkeen aktivoi taas + ikoni.

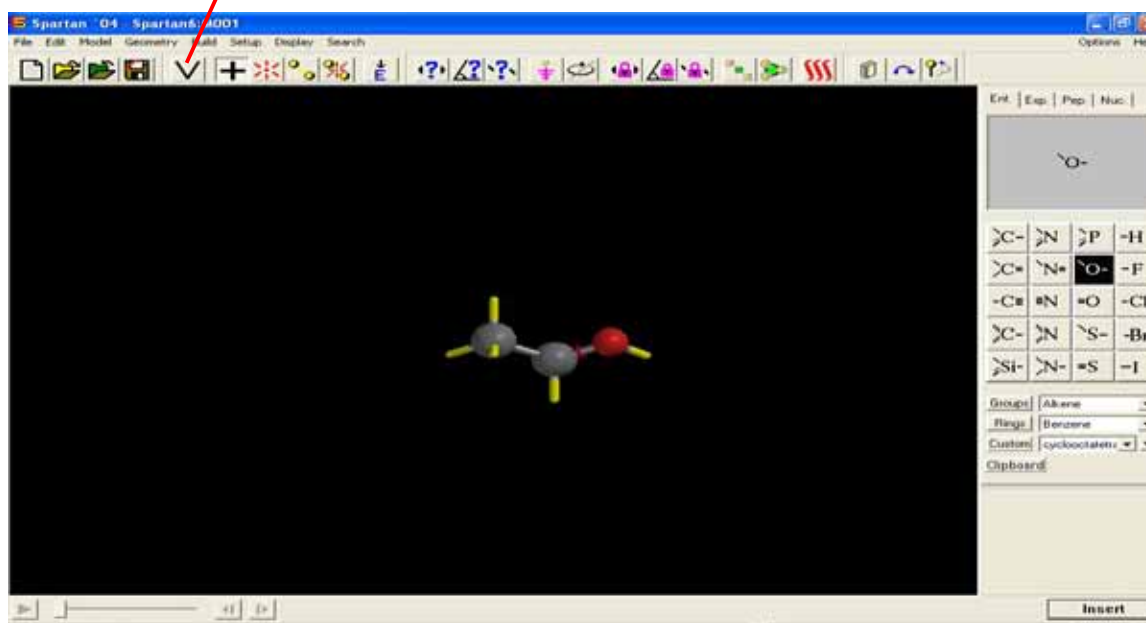


Kuva 4: Atomien poistaminen

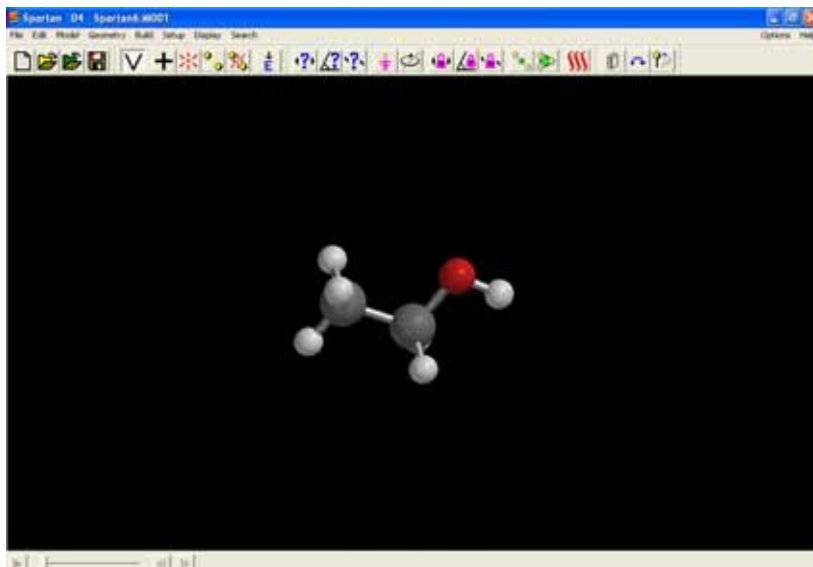
Voit liittää atomiin toisen hiiliatomin klikkaamalla hiiren vasemmalla näppäimellä keltaisen sidoksen päähän. Valitse atomivalikosta happiatomi, jolla on kaksi yksinkertaista sidosta. Liitä happi toiseen hiileen.

Sinulla on nyt mallinnettuna ruudulla lähes valmis etanoli. Koska Spartan on alunperin orgaanisen kemian tutkimukseen kehitetty ohjelma, se lisää automaattisesti vedyt vapaisiin sidoksiin, kun siirrytään molekyylin tarkkailutilaan painamalla ylhäältä ikonivalikosta V.(Kuva 5) Vedyt ilmestyvät paikoilleen ja atomivalikko katoaa (kuva 6). Jos haluat muuttaa molekyyliä, pääset takaisin rakennusvalikkoon painamalla ylhäältä ikonivalikosta +.

Tarkkailutilaan siirtyminen



Kuva 5: Ohjelman tarkkailutilaan siirtyminen



Kuva 6: Valmis etanoli

4. Molekyylin liikuttelu ja koon muuttaminen

Voit pyörittää molekyyliä pitämällä hiiren vasemman näppäimen pohjassa ja liikuttamalla hiirtä. Molekyyliä siirretään painamalla hiiren oikea näppäin pohjaan ja liikuttamalla hiirtä. Kokoa saa suurennettua painamalla näppäimistöä shift pohjaan ja liikuttamalla hiirtä vasen näppäin pohjassa ylöspäin. Vastaavasti molekyyli pienenee liikuttamalla hiirtä alaspäin.

Pohdinta:

Minkä värisiä atomit ovat luonnossa? Vastaavatko värit Spartanin värejä?

- Luonnossa atomit yksittäisinä ovat värittömiä. Spartanissa niille on määritetty mielivaltaiset värit atomien tunnistamiseksi.

Voit halutessasi vaihtaa atomien värejä siirtymällä tarkkailutilaan painamalla + ikonia ja

valitsemalla sen jälkeen oikean yläkulman **Options** valikosta **Colors**. Napsauta hiirellä sitä atomia, jonka värin tahdot muuttaa. Alkuperäiset värit saa palautettua painamalla *default set colors* ikkunan alaosasta.

5. Molekyylin tarkastelu eri malleilla

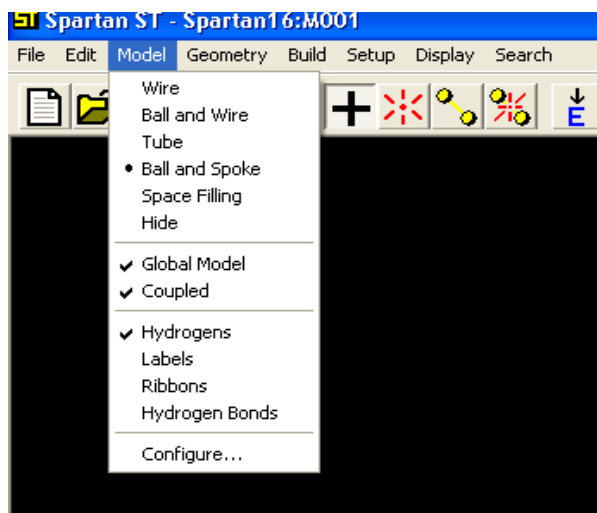
Pohdinta:

Mitä malli tarkoittaa? Millaisia malleja olette käyttäneet kemian tunneilla? Oletteko törmänneet malleihin arkielämässänne? Ovatko mallit kopioita todellisuudesta? Voiko niitä muuttaa?

Malli on kemiassa työväline, jolla halutaan tehdä muutoin nähtäväksi liian pienet elementit silmin havaittavaksi. Mallit eivät ole kopioita luonnosta ja mallintajalla on aina aktiivinen rooli mallinnus prosessissa. (Gilbert & al, 1998b) Mallintaja voi siis muokata mallista omia tarpeitaan vastaavan; malleja voi muuttaa. On olemassa erilaisia malleja: lentokoneen pienoismalli on tarkka malli, joka jäljittelee luonnollista vastinettaan. Kemian mallit ovat aina epätarkkoja malleja. Tunnetuimmat ja useimmin käytetyt mallit kemiassa ovat erilaiset molekyyylimallit. Kuitenkaan yksikään tutkija ei väitä näiden mallien näyttävän oikeilta molekyyyleiltä. On yksinkertaisesti mahdotonta tietää miltä molekyyli tai atomi todellisuudessa näyttää. (Francoeur, 1997)

Seuraavassa katsomme etanolia viidellä eri mallilla.

Valitse **Model** valikosta (Kuva 7) Wire, Ball and wire, Tube, Ball and spoke ja Space filling kohdat vuorotellen.



Kuva 7: Model- valikko

Pohdinta:

Mitä malleista käyttäisit jos haluaisit

- esitellä molekyylin rakennetta
- tuoda esiin mitä alkuaineita molekyyli sisältää
- havainnollistaa tilaa, jonka se ympäristöstään vie?

- Molekyylin kolmiulotteisen rakenteen saa parhaiten esille wire tai ball and wire mallilla. Kun haluamme korostaa, mitä alkuaineita molekyyli sisältää, kannattaa käyttää ball and spoke mallia, jossa atomien suhteelliset koot on huomioitu. Molekyylin koon havainnollistaminen toimii parhaiten space filling mallilla, joka antaa tietoa siitä, kuinka suuren tilan molekyyli ympäristöstään vie.

6. Molekyylin tasapainotilan laskeminen

Kun olet mallintanut molekyylin ruudulle, se saattaa olla hyvinkin erinäköinen kuin toisen mallintajan tekemä vastaava molekyylä. Meidän on nyt määritettävä molekyylille tasapainotila eli tila, jossa molekyylin on energeettisesti mukavinta olla.

Paina ensin yläikonivalikosta E:tä, jonka päällä on nuoli. Tämä toiminto poistaa molekyylistä steeriset esteet.

Tasapainotilan laskemiseksi valitse **setup** valikko ja sieltä *calculations*. Varmista, että *calculate* kohdassa on valittuna *equilibrium geometry* (tasapaino geometria) ja että laskutasona *with* kohdassa on Hartree- Fock ja seuraavassa valikossa kantafunktiojoukkona 3-21G(*). Hartree -Fock 3-21G(*) on laskutaso, jolla ohjelma laskee molekyylin ominaisuudet. Paina **submit** ja tallenna nimellä etanoli. Ruutuun ilmestyy ikkuna, joka ilmoittaa laskun alkaneen. Kun lasku on valmis, ruutuun ilmestyy ikkuna, jossa ohjelma ilmoittaa laskun päättyneen onnistuneesti.

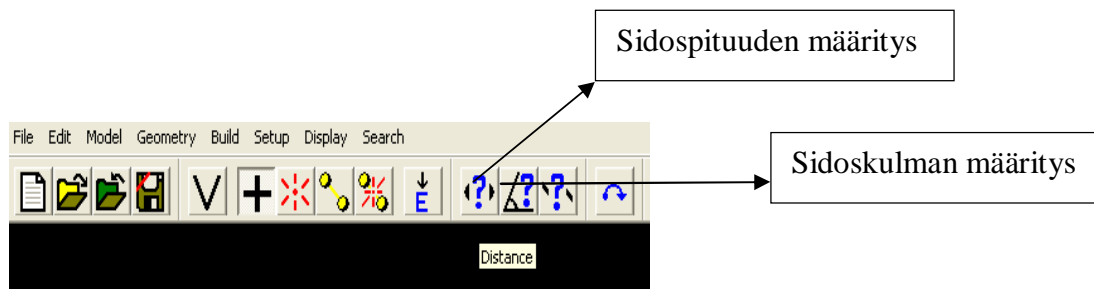
7. Sidospituus ja -kulma

Sidospituus

Valitse ylävalikosta ikoni, jossa on kysymysmerkki ja nuolet sen molemmiin puolin.(Kuva 19) Tällä voit määrittää kahden atomin välisen sidospituuden. Klikkaa sen jälkeen molekyylistäsi kahta atomia, joiden välisen etäisyyden haluat selvittää. Pituus ilmestyy ruudun oikeaan alalaitaan.

Sidoskulma

Kulman pystyt mittaamaan painamalla sidospituus ikonin oikean puoleista nappia.(Kuva 8) Napauta tämän jälkeen kolme atomia, joiden välisen kulman haluat selvittää.

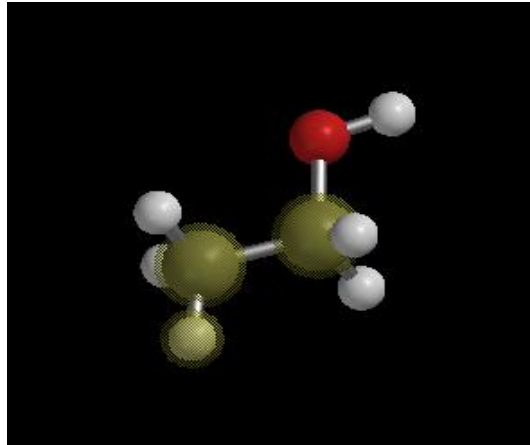


Kuva 8: Siduskulma ja -pituus

Selvitä molekyylistä suurin ja pienin siduskulma sekä pisin ja lyhin sidos. Missä ne ovat? Miksi?

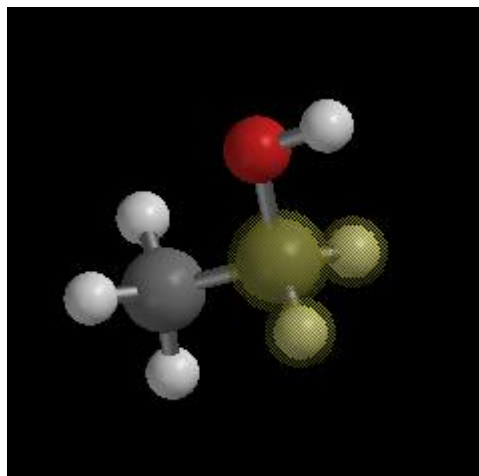
- Lyhin sidos löytyy hapen ja vedyn väliltä. Hapen ja vedyn välinen sidos on lyhyempi kuin vedyn ja hiilen välinen koska happi on *elektronegatiivisempi* kuin hiili ja siis vetää sidoselektroneja voimakkaammin puoleensa, jolloin sidospituus lyhenee hieman.
- Pisin sidos on hiiliatomien välillä.

Suurin kulma löytyy hiiliatomien ja yhden vedyn muodostamasta kulmasta. (Kuva 9)



Kuva 9: Etanolin suurin sidoskulma

Pienin kulma löytyy hiilen ja vetyjen väliltä hiiliatomista, johon happi on liitettynä (Kuva 10).



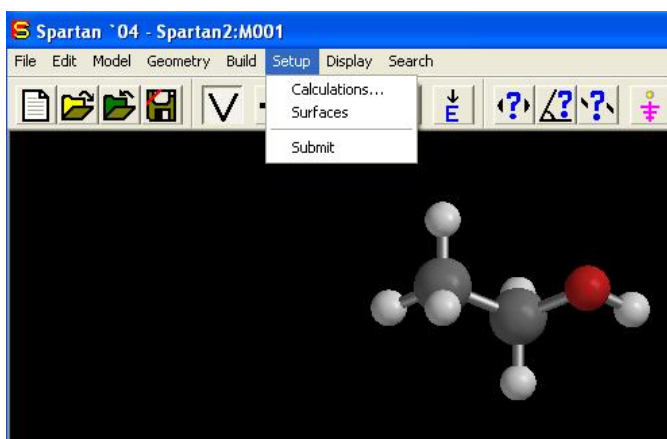
Kuva 10: Etanolin pienin sidoskulma

Tarkastele, mitä sidospituuksille ja kulmille tapahtuun, kun ne määritetään tasapainotilan (kts. Kpl 6) laskemisen jälkeen.

8. Elektronipinnan määrittäminen

Elektronit ovat liima, joka sitoo molekyylin atomit toisiinsa. Kaikki reaktiot tapahtuvat elektronien myötävaikutuksesta. On tärkeä kemian kannalta ymmärtää, kuinka elektronit ovat molekyyliin sijoittuneet.

Jotta saat laskettua yhdisteelle elektronipinnan valitse **setup** –valikko ja sieltä *surfaces* (kuva 11).



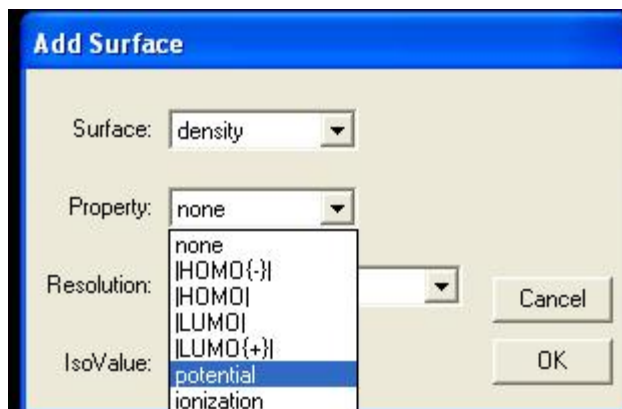
Kuva 11: Setup -valikko

Ruudulle avautuu **surface** ikkuna (kuva 12).



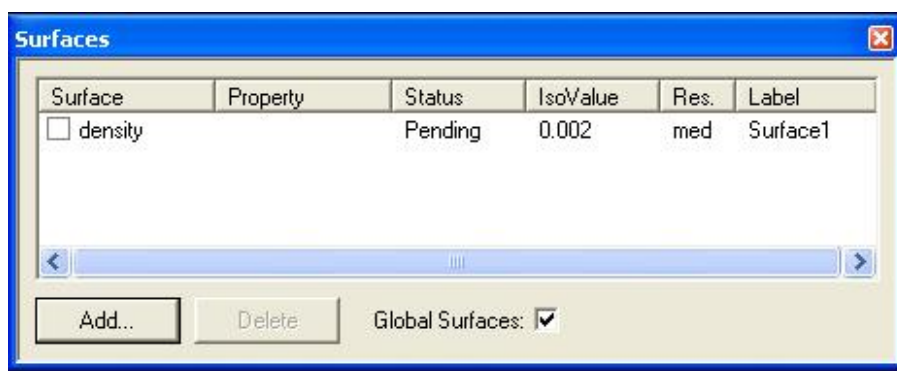
Kuva 12: Surface-ikkuna

Valitse **Add**. Sinulle avautuu **Add surface** ikkuna (Kuva 13).



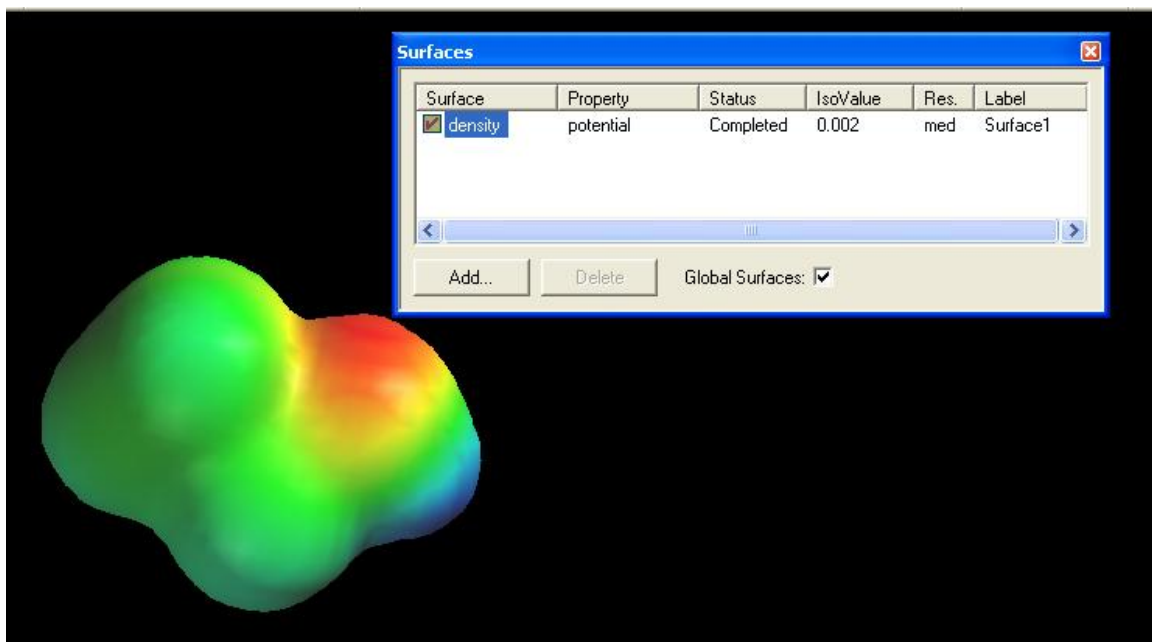
Kuva 13: Add surface -ikkuna

Varmista, että *Surface* valikossa on *density*. Aseta *Property* valikkoon *potential*. Paina sen jälkeen OK, jolloin Add surface ikkuna katoaa ja Surface ikkunaan tulee kuvan 14 mukainen teksti.



Kuva 14: Elektronipinnan laskeminen

Jätä surface- ikkuna edelleen auki ja valitse **setup** valikosta *submit*, jolloin ohjelma ilmoittaa laskun lähtevän käyntiin. Kun lasku valmistuu, **Surface** ikkunan valkoinen ruutu tekstin *density* edessä muuttuu keltaiseksi. Ruksi keltainen laatikko. Molekyylin elektronipinta tulee esille (Kuva 15).



Kuva 15: Etanolin elektronipinta

Elektronipinnalla havainnollistetaan elektronien esiintymistodennäköisyyttä molekyyllissä. Punaisilla alueilla elektronitiheys on suuri ja sinisillä pieni.

Missä molekyylin osassa etanolissa on suurin elektronitiheys? Mitkä seikat vaikuttavat siihen?