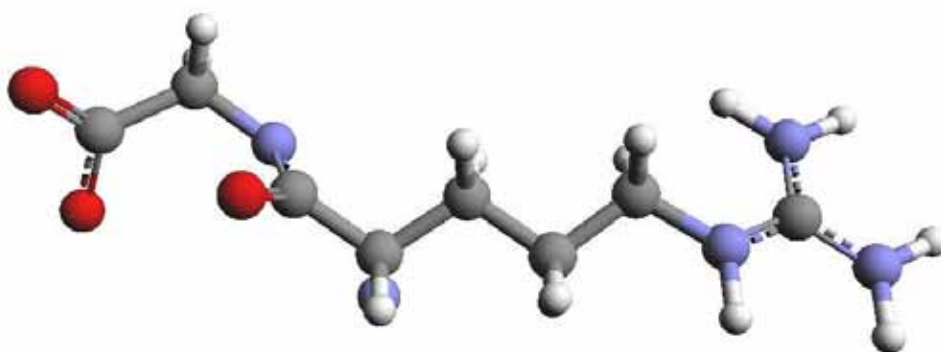


# MOLEKYYLIMALLINNUKSEN ALKEET

ILMAISTA MOLEKYYLIMALLINNUSTA  
OPETTAJILLE



versio 1

## LUKIJALLE

Tämän opas on suunnattu opettajille ja sen tavoitteena on toimia molekyylihallinnuksen ensiapuna ennen monipuolisempiin ja maksaviin mallinnusohjelmiin siirtymistä. Tämä mallinnusopas on tehty *Arguslab* –mallinnusohjelman ympärille, joka on verkosta vapaasti ladattava ilmainen mallinnusohjelma (<http://www.arguslab.com/>).

*Argulabissa* on hyvät ja huonot puolensa. *Arguslab* ei vedä vertoja maksullisille ohjelmille käyttöominaisuuksiltaan, grafiikaltaan tai käyttömukavuudeltaan, mutta *Arguslab* -ohjelma on kuitenkin osaavissa käsissä erittäin käyttökelpoinen kemian opetuksen työkalu. *Argulabin* avulla opettaja pystyy tuomaan kemian mikromaailman oppilaalle käsinkosketeltavaksi.

Ohjelman avulla oppilaat pääsevät ITSE rakentamaan molekyyliä, optimoimaan niiden rakenteet ja tarkastelemaan niitä eri visualisointi tavoin. Eri sidostyyppien sidospituudet ja molekyylien sidoskulmat ovat näkyvissä muutamalla hiiren klikkauksella. *Argulabin* avulla oppilaat pääsevät myös käsiksi kvanttimekaaniseen maailmaan ja pystyvät havainnollistamaan orbitaaleja, konkretisoimaan molekyylien varausjakaumia ja pääsevät siten tarkastelemaan reaktiivisuuteen liittyviä tekijöitä. *Arguslabilla* päästään myös käsiksi systeemien energioihin.

Kaiken kaikkiaan ohjelmasta on pelkkää hyötyä. Hinnan vuoksi aloittamiselle ei ole yhtään estettä. Jos koulussa ei ole riittävästi koneita, voi mallinnuksen suorittaa kotona ja siirtää aineistot muistitikun avulla koululle oppilaiden nähtäväksi. Yhdelläkin koneella pääsee alkuun, jos sitä hyödyntää osana työpistetyöskentelyä.

Tiedän, että molekyylihallinnuksen sisällyttäminen luontevaksi osaksi omaa opetusta on ennenkaikkea resurssikysymys, kuten tutkimuksetkin osoittavat, mutta aloittaa voi myös pienellä panostuksella ja kuitenkin saada tuloksia aikaan. Uusien asioiden omaksuminen vaatii aikaa ja kokeilemista.

Tämän oppaan avulla pääset molekyylihallinnuksessa alkuun, mutta taitojen ja tietojen kartuttamiseksi suosittelen osallistumista täydennyskoulutuksiin sekä tutustumaan lähteissä mainittuun kirjallisuuteen.

Helsingissä  
8.4.2008  
Johannes Pernaa

## SISÄLLYSLUETTELO

1. Johdatus molekyyli­mallinnukseen .....	1
1.1 Molekyyli­mallinnuksen yhteys opetus­suunnitelmien perusteisiin.....	2
1.1.1 Peruskoulu .....	2
1.1.2 Lukio .....	2
2. Alkuun.....	4
2.1 Aloituskäytävä .....	4
3. Perustyökalut molekyylien käsittelyyn .....	5
3.1 Molekyylin rakentaminen .....	5
3.2 Molekyylin liikuttelu.....	6
3.3 Eri visualisointitavat.....	6
3.4 Sidospituus ja sidoskulma .....	7
4. Laskeminen .....	7
4.1 Laskutasot.....	8
4.1.1 Molekyyli­mekaniikka.....	8
4.1.2 Semi­empiirinen laskutaso .....	8
4.2 Esimerk­kimolekyyli – vesi.....	9
4.3 Geometrinen optimointi .....	10
4.3.1 Vesimolekyylin rakenteen optimointi .....	10
4.4 Energia .....	12
4.4.1 Potentiaalienergian laskeminen.....	12
4.5 Orbitaalit.....	13
4.5.1 Atomiorbitaalit .....	13
4.5.2 Molekyyli­orbitaalit.....	15
4.6 Elektronitiheys .....	17
5. Hienosäätöä ja käyttökelpoisia toimintoja .....	19
5.1 Väri­n muuttaminen.....	19
5.2 Kuvan tekeminen.....	19
5.3 XYZ- ja PDB -tiedosto.....	19
5.4 MDL MOL -tiedosto .....	19
5.5 Tiedostojen tuonti.....	19

## LÄHTEET

## MUISTIINPANOJA

## 1. Johdatus molekyylihallinnukseen

*”Kemia on materiaaleja ja niissä tapahtuvia tai aiheutettuja muutoksia tutkiva tiede”* (Hudson, 1992).

Kokeellisuus on aina ollut kemian näkyvin osa-alue. Kemian kokeellista puolta korostavat myös tarinat ja kirjallisuus, minkä johdosta kemisti mielletään usein laboratoriossa työskenteleväksi valkotakkiseksi mieheksi, jonka hiukset ovat sotkussa. Nykypäivänä totuus on kuitenkin se, että vaikka perinteinen kokeellisuus on elintärkeä osa kemian tutkimusta, noin 60 % tutkimuksista tukeudutaan vahvasti tietokoneavusteisiin kemian tutkimusmenetelmiin. Tietotekniikan kehittyminen tulee jatkossa vielä kasvattamaan tietokoneavusteisten tutkimusmenetelmien osuutta tutkimuksessa. Kemiassa tietotekniikkaa käytetään hyväksi esim. raportoinnissa, tiedonhaussa ja kokeellisen työn kontrolloimisessa (mittausautomaatio). (Lundell & Aksela, 2003)

Molekyylihallinnus on tietokoneavusteista kemiaa. Molekyylihallinnus yhdistää teoreettisen ja kokeellisen kemian. Kemiassa molekyylihallinnusta käytetään mm. molekyylien rakenteiden ja ominaisuuksien tutkimiseen, molekyylien välisten vuorovaikutusten kartoittamiseen ja kemiallisen reaktion tutkimiseen. Mallinnuksen avulla pystytään esim. tarkastelemaan reaktion transiitotilaa pysäyttämällä reaktion eteneminen, mihin ei perinteellisen kokeellisuuden keinoin pystytä. Kemistit käyttävät malleja myös kokeellisten töiden havainnollistamiseen ja selittämiseen. (Lundell & Aksela, 2003)

Molekyylihallinnus tukee myös vihreän kemian periaatteita. Mallinnuksen avulla vähennetään laboratoriossa tehtävän kokeellisuuden määrää ja pystytään käsittelemään turvallisesti vaarallisiakin aineita. Nykypäivänä molekyylihallinnuksen haasteita ovat esim. biomolekyylien ominaisuuksien selvittäminen, entsyymikemia sekä aineiden rakennetietoja ja ominaisuuksia yhdistelevän tietokannan kokoaminen. (Lundell & Aksela, 2003)

Kemian opetukseen tietokoneavusteinen kemia tuo arvokkaan lisän. Tietokoneiden avulla pystytään esim. havainnollistamaan oppilaille kemian kolmen tason välisiä yhteyksiä (Lundell & Aksela, 2003). Tutkimusten (Gabel, 1999) mukaan oppilaat kokevat kemian vaativaksi ja abstraktiksi oppiaineeksi, mikä on seurausta kemian tiedon kompleksisesta luonteesta. Kemiassa samaa ilmiötä pystytään mallintamaan kolmella eri tasolla: makrotasolla, mikrotasolla ja symbolisella tasolla (Gabel, 1999). Käytännössä se tarkoittaa esim. kokeellisen työn vaiheiden tai tulosten esittämistä piirtämisohjelman avulla symbolisesti ja kokeen taustalla olevien teorioiden selittämistä ja visualisoinnista molekyylihallinnusohjelmien avulla. Tutkimuksen (Russel et al., 1997) mukaan tieto- ja viestintätieteiden mahdollistamien monipuolisten visualisointiresurssien on todettu auttavan oppilaita hahmottamaan yhteyksiä kemian tiedon kolmen eri tason välillä (Russell et al., 1997).

Suomessa tv:n ja mallinnuksen käyttö kemian opetuksessa ei ole vielä kovinkaan laajaa. Ongelmana eivät ole opettajien asenteet, vaan tiedot ja taidot sekä resurssiongelmat. Opettajat suhtautuvat mallinnukseen erittäin positiivisesti ja ymmärtävät mallinnuksen mahdollisuudet. Ongelmana on kuitenkin mallinnusohjelmien hinta, tietokoneiden määrät ja huonot tietotekniset taidot, jolloin mallinnuksen tuominen osaksi opetusta on vaikeaa. Myös suomenkielisen opetusmateriaalin puuttuminen vaikeuttaa mallinnuksen siirtymistä opetukseen. (Aksela & Lundell, 2007)

## 1.1 Molekyylimallinnuksen yhteys opetussuunnitelmien perusteisiin

Opetussuunnitelma uudistusten jälkeen malleilla ja tietokoneiden hyödyntämisellä kemian opetuksessa on tärkeä rooli.

### 1.1.1 Peruskoulu

Peruskoulun opetussuunnitelman perusteissa (2004) tietokoneet ja siten myös mallinnus ilmenevät seuraavasti:

Kemian opetuksen tehtävänä on laajentaa oppilaiden tietämystä kemiasta, kemiallisen tiedon luonteesta ja kemiasta tieteenä. Opetuksen pitää mahdollistaa oppilaan persoonallisuudelle mahdollisuus kehittyä niin, että se tukee nykyaikaisen maailmankuvan muodostumista. Tämä pitää sisällään ymmärtämistä kemian ja teknologian merkityksestä jokapäiväisessä elämässä yhteiskunnan, yksilön ja ympäristön näkökulmista. Kemian opetuksen tärkeänä peruspilarina pidetään kokeellista työskentelyä. Kokeellisuuden avulla pyritään tulkitsemaan ja selittämään aineiden ominaisuuksia sekä kemiallisia reaktioita mallinnusta apuna käyttäen. Kaikkien tekijöiden synteessä voidaan pitää riittävien tietojen ja taitojen omaksumista jatko-opintojen kannalta, oppilaan innostamista sekä myönteisten asenteiden syntymistä kemiaa kohtaan. (Opetushallitus, 2004)

Yläkoulun kemian opetuksen tavoitteissa mainitaan tieto- ja viestintäteknikka, tulosten tulkitseminen ja esittäminen, käsitteitä ja ilmiöitä kuvaavat mallit, kemiallisen reaktion kuvailu ja mallintaminen, tiedon soveltaminen ja kemian sovellusten merkityksen yhteiskunnallisen merkityksen tunteminen. Keskeisissä sisällöissä mallintamista voidaan hyödyntää esim. ”Ilman ja veden” sekä ”Raaka-aineiden ja tuotteiden” yhteydessä. Mallien tulkinta, kuvailu ja niiden avulla päätelmien tekeminen mainitaan myös arviointiosiossa. (Opetushallitus, 2004)

### 1.1.2 Lukio

Lukion opetussuunnitelman perusteissa (2003) painotetaan opiskelijan luonnontieteellisen ajattelun ja nykyaikaisen maailmankuvan kehittymisen tukemista siten, että opiskelija ymmärtää kemian merkityksen luonnontieteenä yhteiskunnan, yksilön ja elinympäristön kannalta. Opetuksessa painotetaan kemian kokeellista puolta painottaen erityisesti mallien merkitystä kemian ilmiöiden tulkitsemisessa, havainnoimisessa ja selittämisessä. Opetuksen täytyy myös antaa valmiuksia jatko-opintoihin sekä luoda myönteistä kuvaa kemiaa kohtaan. (Opetushallitus, 2003)

Lukion opetussuunnitelman kemian opetuksen tavoitteissa tv ja mallintaminen esiintyvät seuraavasti: tieto- ja viestintäteknikan mahdollisuudet tiedonhankinnan ja mallintamisen välineenä, kokeellinen tulkinta ja arviointi sekä tiedon esittäminen, kestävä kehitys, nykyaikainen teknologia teollisuudessa ja ympäristötekniikassa sekä kokemukset, jotka syventävät kiinnostusta kemiaa kohtaan.

Myös arvioinnissa huomioidaan tulosten tulkitseminen ja mallintaminen sekä tiedon esittäminen. Keskeisissä sisällöissä mallit mainitaan konkreettisesti sähkökemian, tasapainon, kemiallisen reaktion ja aineen rakenteen yhteydessä.

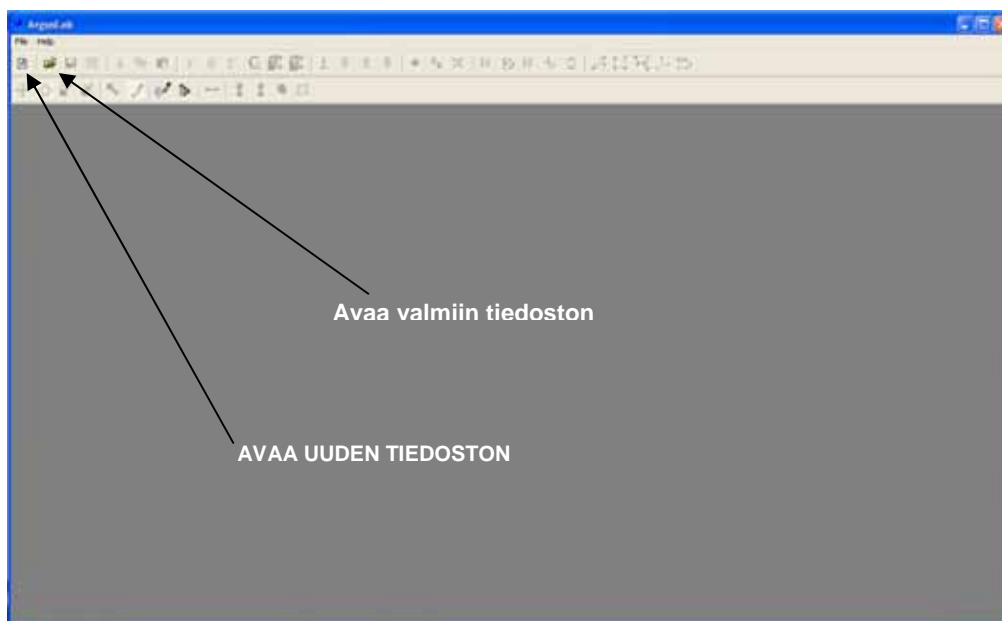


## 2. Alkuun

Ohjelman on ladattavissa osoitteesta: <http://www.arguslab.com/>

### 2.1 Aloitusnäky

Tiedosto avataan **File** -valikosta tai pikanäppäimistä (kuva 2).



**Kuva 2.** Aloitusnäky.

- Arguslabiin voit myös tuoda valmiita rakenteita vaikka esimerkiksi Protein Data Bankista.

- Arguslab lukee seuraavia tiedostotyyppisiä:

- ArgusLab XML
- Gaussian .log (output tiedosto Gaussian ohjelmasta)
- Gaussian .fch, .fchk
- MDL MOL
- PDB version 2.2
- XYZ

- ja kirjoittaa seuraavia:

- ArgusLab XML
- MDL MOL → avautuu Chemskechissä (ks. luku 5.4)
- PDB version 2.2 → soveltuu esim. verkkosivustoihin
- XYZ → soveltuu esim. verkkosivustoihin (ks. luku 5.3)

LISÄTIETOA:




XML: <http://www.w3c.org/>

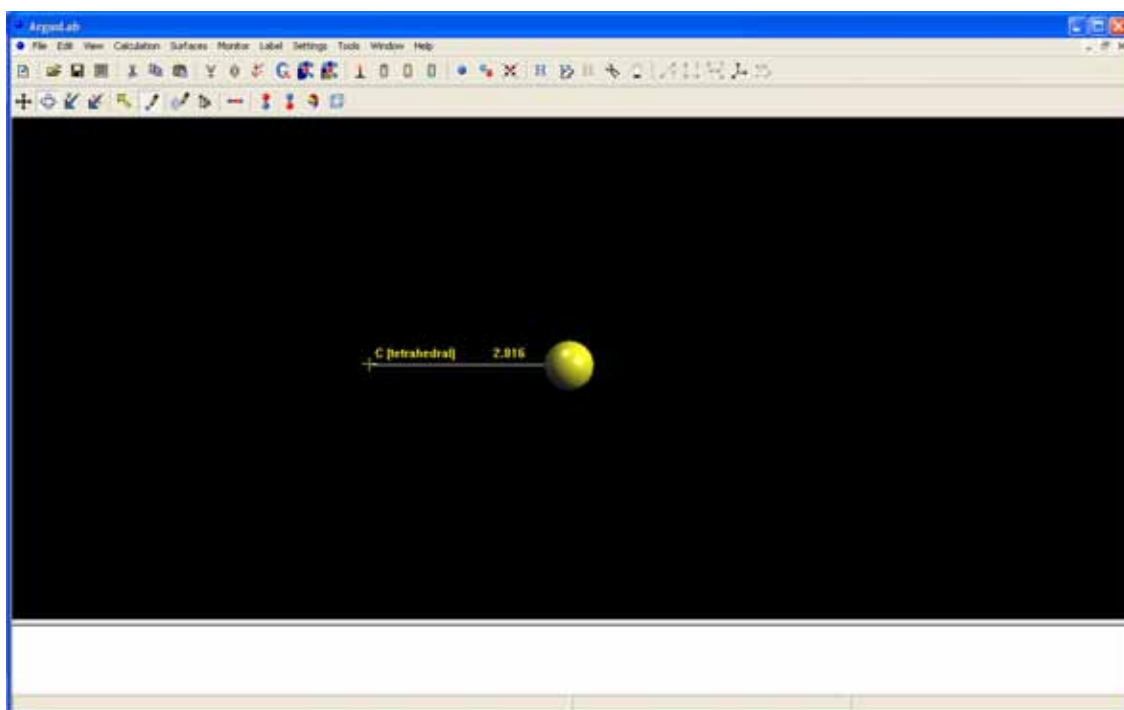
PDB : <http://www.rcsb.org/pdb>

MOL: <http://www.mdli.com/cgi/dynamic/product.html>


### 3. Perustyökalut molekyylien käsittelyyn

#### 3.1 Molekyylin rakentaminen





- Paina pohjaan työkaluriviltä  -ikoni.
- Molekyylien lisääminen työalustalle tapahtuu hiiren oikealla näppäimellä.
- Näyttöön ilmestyy etäisyys kursoria työpöydällä liikuttaessa (ks. kuva 3).
- Rakennettujen molekyylien välille muodostetaan sidos  työkalulla.
- Lisättävän atomin vaihto: **Edit** → **add atom**
- Poista rakenteita aktivoimalla poistettava osa ja paina **Del** -näppäintä näppäimistöä tai **"Edit"** → **"Delete"**
- Valmiiden rakenteiden lisääminen  työkalulla.




Kuva 3. Molekyylin rakentaminen.

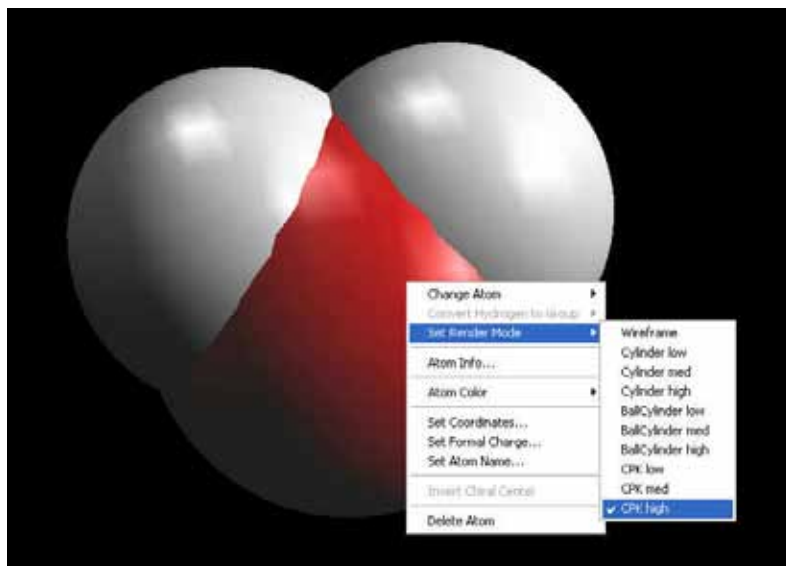
- Molekyylin ollessa valmis siirry, visualisointi puolelle painamalla alas  -ikoni.
- Visualisointi puolellakin voi tehdä molekyylin rakenteisiin muutoksia: aktivoi muutettava osa (atomi, sidos jne..), paina hiiren oikeaa näppäintä ja valitse **"Change atom"** tai suoraan **"Edit"** -valikosta.

### 3.2 Molekyylin liikuttelu

Toiminto	Toteutus	Pikanäppäin
Pyöritys	Valitse  työkalu ja pyöritä molekyyliä liikuttamalla hiirtä vasen näppäin pohjassa.	Alt + vasen näppäin
Siirtäminen	Valitse  työkalu tai <b>Edit</b> -valikosta ” <b>Translate Mode</b> ” ja siirrä molekyyliä liikuttamalla hiirtä vasen näppäin pohjassa.	Ctrl + vasen
Suurennus ja pienennys	Valitse  työkalu tai <b>Edit</b> -valikosta ” <b>Zoom Mode</b> ” ja pyöritä molekyyliä liikuttamalla hiirtä eteen- ja taaksepäin vasen näppäin pohjassa.	Shift + vasen
Kääntö tasossa	Valitse  työkalu tai <b>Edit</b> -valikosta ” <b>Rotate Z-axis Mode</b> ” ja käännä molekyyliä liikuttamalla hiirtä oikealta vasemmalle vasen näppäin pohjassa.	Ctrl + Shift + vasen

### 3.3 Eri visualisointitavat




- Siirry visualisointi puolelle.
- Muuta esitystapaa **aktivoimalla** hiiren vasemmalla näppäimellä **koko molekyyli (tuplaklikkaus)** tai vain osa molekyylistä (yksi klikkaus) ja avaa **oikealla näppäimellä valikko**, josta valitse ”**Set Render Mode**” ja muuta esitystapaa tarvittavaksi (ks. kuva 4).
- Myös  työkalu avaa suoraan visualisointivalikon.

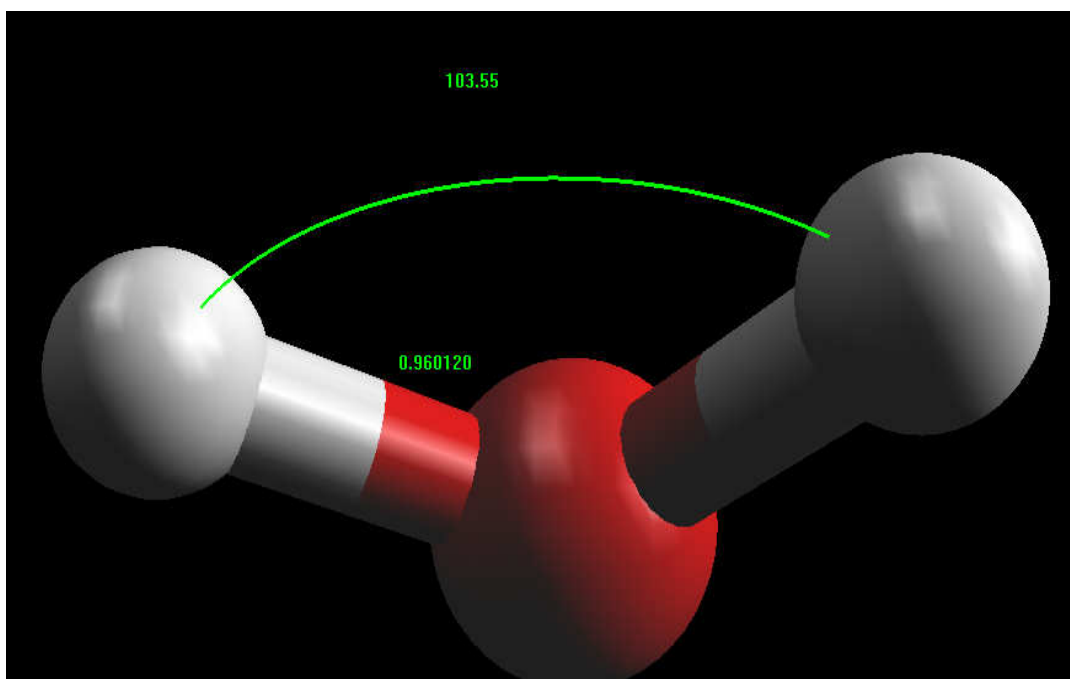


**Kuva 4.** Visualisointitavat - (Kuvassa oleva CPK -malli on suomeksi kalottimalli. Kalottimallin muoto perustuu atomien suhteellisiin kokoihin ja antaa siten kuvan molekyylin muodosta).

- **HUOM!** Oppilaille esittelyn yhteydessä täytyy muistaa korostaa, että atomit eivät ole värillisiä tai heijasta valoa. Mallinnusohjelmissa niin on tehty, jotta työskentely helpottuisi.

### 3.4 Sidospituus ja sidoskulma

- Sidospituudet mitataan valitsemalla kaksi atomia, jonka jälkeen klikataan  ikonia. Sidospituus ilmestyy mitattavan sidoksen kohdalle (ks. kuva 5).
- Sidoskulma mitataan valitsemalla kolme atomia ja  ikoni.
- Torsiokulma: neljä atomia ja  ikoni.



Kuva 5. Sidospituus ja sidoskulma.

## 4. Laskeminen

Laskentatyö on molekyylihallinnuksen punainen lanka. Kvanttimekaaniseen maailmaan päästään kiinni Schrödingerin yhtälön ratkaisemisella. Yhtälön ratkaiseminen on kuitenkin mahdotonta vetyä suuremmille systeemeille, joten molekyylihallinnuksessa sen ratkaisemiseen sovelletaan joitain approksimaatioita:

**1) Bornin ja Oppenheimerin approksimaatio:** Approksimaatio perustuu ydinten ja elektronien suureen kokoeroon. Oletetaan ydinten verkosto kiinteäksi ja ettei elektronien liike vaikuta ytimiin. Ydinten liikehtiessä, elektronit muuttavat paikkaansa niin, että ne vastaavat muodostunutta potentiaalikenttää. Näin päästään käsiksi molekyylin elektronijakaumaan.

**2) LCAO –MO:** Käydään läpi tarkemmin molekyyliorbitalien kohdalla ([ks. luku 4.5.2](#)).

**3) Kantafunktiojoukot:** Rajataan tämän oppaan ulkopuolelle (lisätietoa: Jensen, F. 2004. *Introduction to Computational chemistry*. John Wiley & Sons)

*Arguslab* –ohjelmalla lasketaan kvanttimekaanisia laskuja (semiempiiriset laskut (ks. luku 4.1.2) ja molekyylimekaniikka laskuja (ks. luku 4.1.1.).

## 4.1 Laskutasot

### 4.1.1 Molekyylimekaniikka

Molekyylimekaniikka sopii isojen systeemien mallintamiseen. Molekyylimekaniikassa sovelletaan Newtonin mekaniikan lakeja, jolloin kvanttimekaaninen maailma jää kokonaan huomioimatta. Molekyylimekaniikka laskut ovat nopeita. Niiden nopeus perustuu valmiiseen empiiriseen dataan, josta on muodostettu valmiita laskentamalleja, joita kutsutaan voimakentiksi. Molekyylimekaniikan haittapuolena on laskujen epätarkkuus.

*Arguslabissa* on mahdollista käyttää UFF (Universal Force Field)- tai Amber (Assisted Model Building using Energy Refinement) –voimakenttiä.

UFF –voimakentän esittelivät Rappe' et al. vuonna 1993. UFF sopii geometrian optimointiin, ennen semiempiiriseen tasolle siirtymistä. UFF –voimakenttä kattaa koko jaksollisen järjestelmän.

### 4.1.2 Semiempiirinen laskutaso

Semiempiirisen tason laskut perustuvat Schrödingerin yhtälöstä saataviin tuloksiin, jolloin päästään jo käsiksi kvanttimekaaniseen maailmaan. Semiempiirissä laskutasossa Schrödingerin yhtälöstä saataviin tuloksiin sovelletaan kuitenkin tiettyjä approksimaatioita:

- Joitain integraaleja approksimoidaan tai ohitetaan kokonaan.
- Täysiä elektronikuoria ei huomioida (esim. vesimolekyylissä *Arguslab* ilmoittaa molekyylissä olevan 8 elektronia) ja käytössä on vain pieni kantafunktioiden joukko.
- Integrointia helpotetaan valmiin empiirisen datan avulla, jolloin puhutaan parametrsoinnista. Parametrsoinnissa hyödynnetään muun muassa tietoja dipolimomenteista, reaktiolämmöistä, ionisaatiopotentiaaleista.

Semiempiiriset laskut ovat nopeita ja erittäin käyttökelpoisia orgaanisessa kemiassa. Tulosten luotettavuus riippuu mallinnettavan molekyylin verrattavuudesta käytössä oleviin parametrsointeihin. Jos niiden välillä on paljon eroavaisuuksia, tulokset ovat epätarkkoja. Semiempiiriset laskut eivät ole yhtä herkkiä parametrsoinnille kuin molekyylimekaniikka laskut.





*Arguslabissa* on käytössä seuraavia semiempiirisiä menetelmiä:

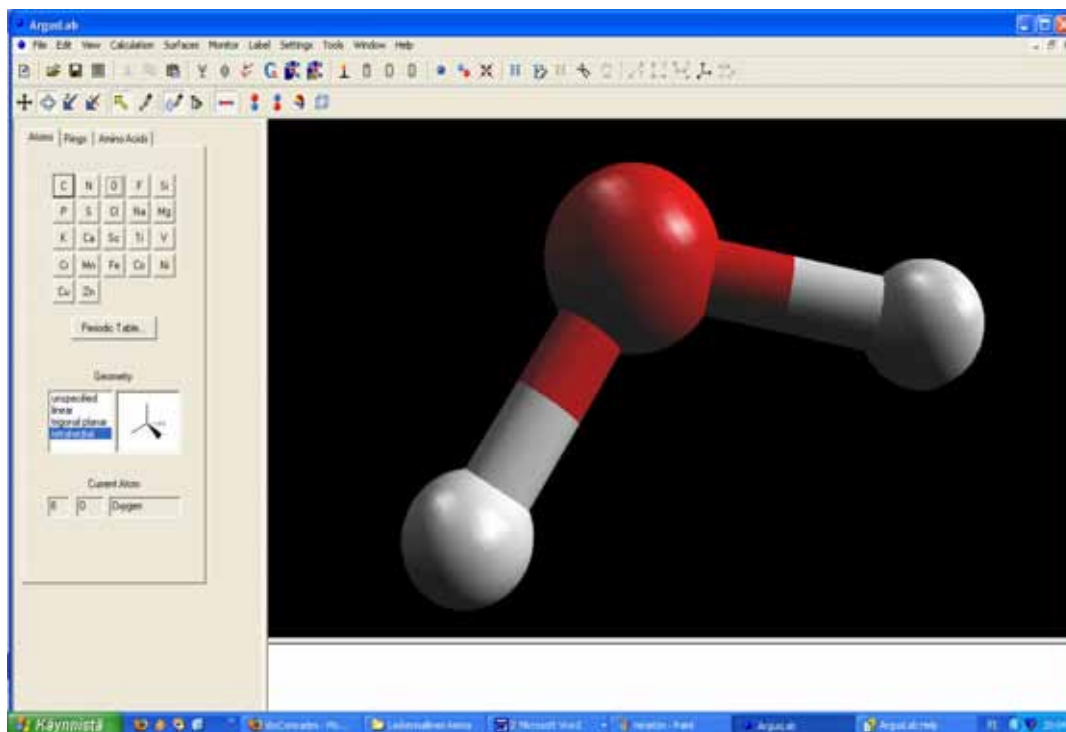
- EHT (The Extended Huckel method): *Arguslabin* yksinkertaisin kvanttimekaaninen menetelmä.
- MNDO (Modified Neglect of Differential Overlap)
- PM3 (Parametric Method 3): PM3 on MNDO:n parametrsointi.

- AM1 (Austin Model 1): AM1 on MNDO:n parametrusointi. AM1 on yksi tarkimmista semiempiirisistä menetelmistä yhdessä PM3:n kanssa. AM1 –menetelmällä voidaan esim. optimoida rakenne ja kokonaisenergia, tarkastella elektronien ominaisuuksia ja arvioida muodostumislämpö.
- ZINDO (Zerner's Spectroscopic parameterization of the Intermediate Neglect of Differential Overlap INDO 1/s Hamiltonian): Zindo –menetelmää käytetään erityisesti organometalleihin liittyvissä laskuissa.

## 4.2 Esimerkkimolekyylä – vesi.

Seuraavissa alaluvuissa (4.2 - 4.6) käydään läpi ohjelman käyttöä yksityiskohtaisten esimerkkien avulla. Esimerkkimolekyylinä toimii vesimolekyylä, pl. atomiorbitaaleissa hiiliatomi.

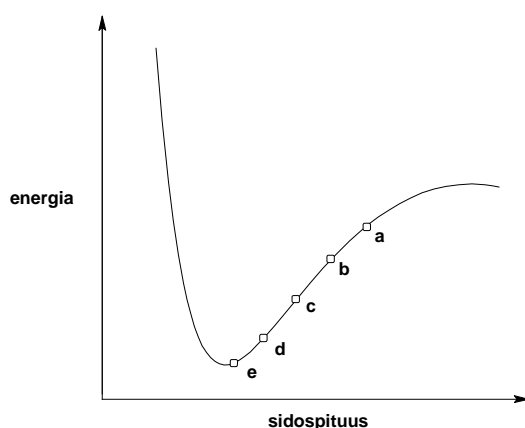
- Avaa rakennusvalikko  työkalulla. Valitse happi ja vie se työpöydälle.
- Lisää vedyt  työkalulla (ks. kuva 6).
- Vesimolekyylin ollessa valmis, siirry visualisointi puolelle painamalla alas  -ikoni.
- Putsaa steeriset esteet valitsemalla  tai pikavalikko **Alt+G**.
- Tallenna tiedosto.



**Kuva 6.** Esimerkkinä vesimolekyylä.


## 4.3 Geometrinen optimointi

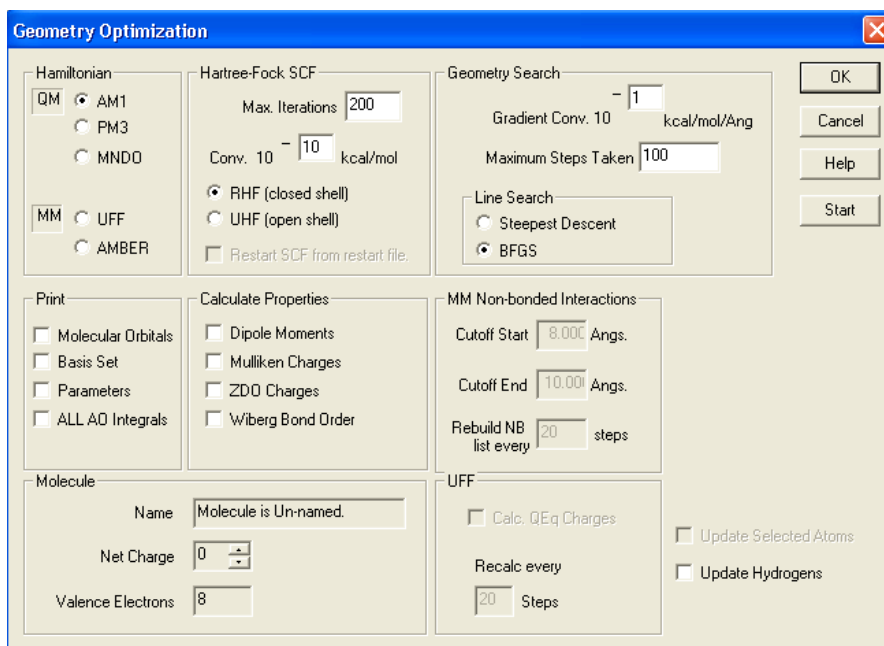
Geometrisessä optimoinnissa etsitään molekyylille energeettisesti edullisin rakenne. Mallinnuksen avulla pyritään löytämään energiainimi ja siten mahdollisimman todenmukainen tilanne. Optimointia voidaan tarkastella potentiaalienergiakäyrän avulla (ks. kuva 7). Tarkastele käyrää myös yhdessä muistion (ks. kuva 10) esittämän datan valossa. Optimoinnin ongelmana on, että ei tiedetä onko saavutettu globaali vai lokaaali minimi. Mallinnusohjelmat etsivät lähimmän energiainimin.





Kuva 7. Potentiaalienergiakäyrä.

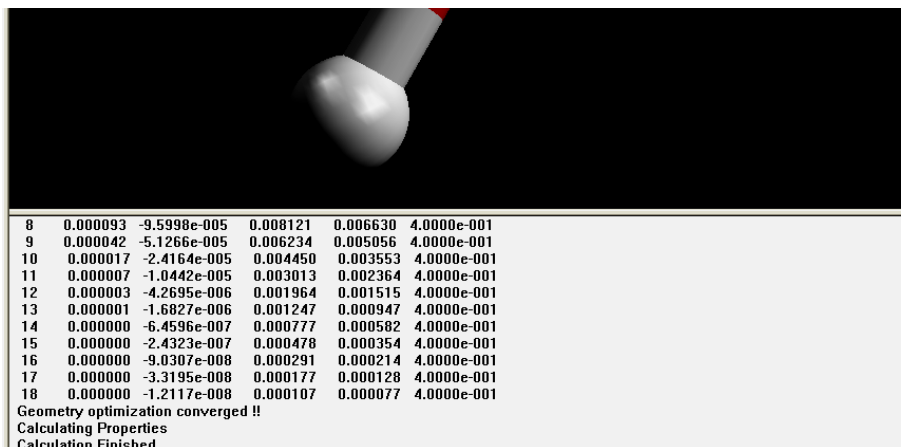
### 4.3.1 Vesimolekyylin rakenteen optimointi

- Valitse **“Calculation”** → **”Optimize Geometry”**, kuvake  tai pikanäppäin **alt + o**.
- Valitse tarpeeseesi sopiva laskutaso (ks. luku 4.1) sekä haluamasi lisävalinnat ja paina **OK** (ks. kuva 8).



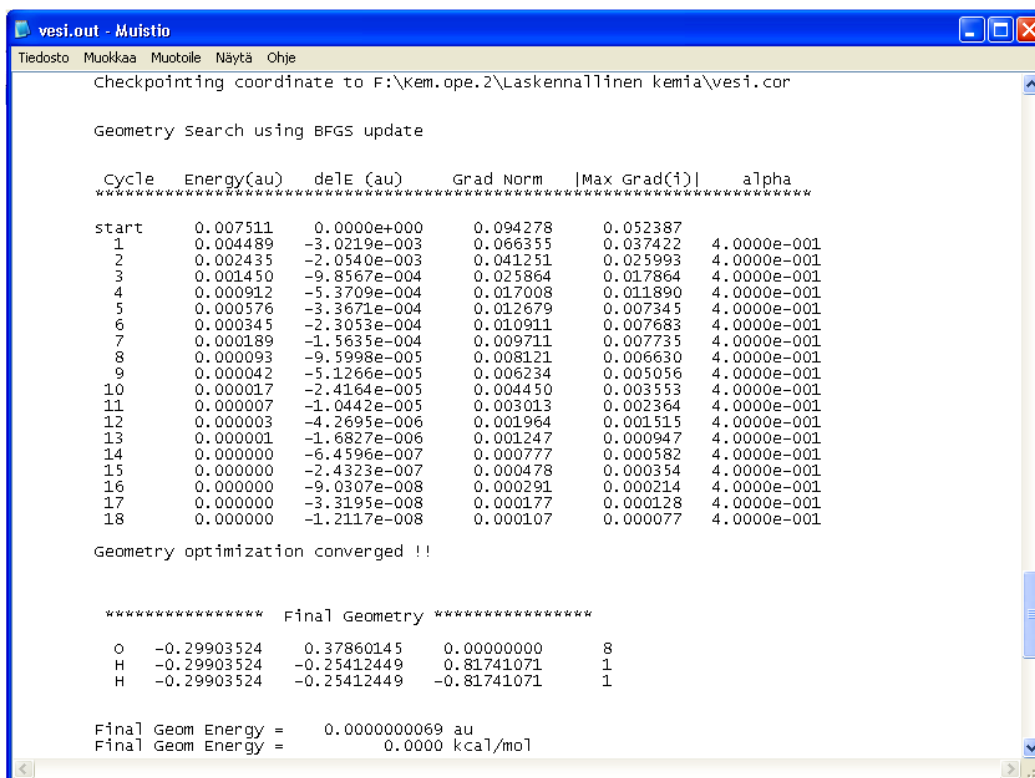
Kuva 8. Geometrian optimointilehti.

- Suorita lasku valitsemalla  .
- Laskentatyötä voit ohjata liikennevaloista  .
- Suoritetun laskun tiedot näkyvät molekyylin alapuolella työalustalla (ks. kuva 9)



**Kuva 9.** Suoritetun laskun tiedot.

- Kaikki suoritettuun laskutoimintoon liittyvät tiedot löytyvät myös muistiosta  (ks. kuva 10).






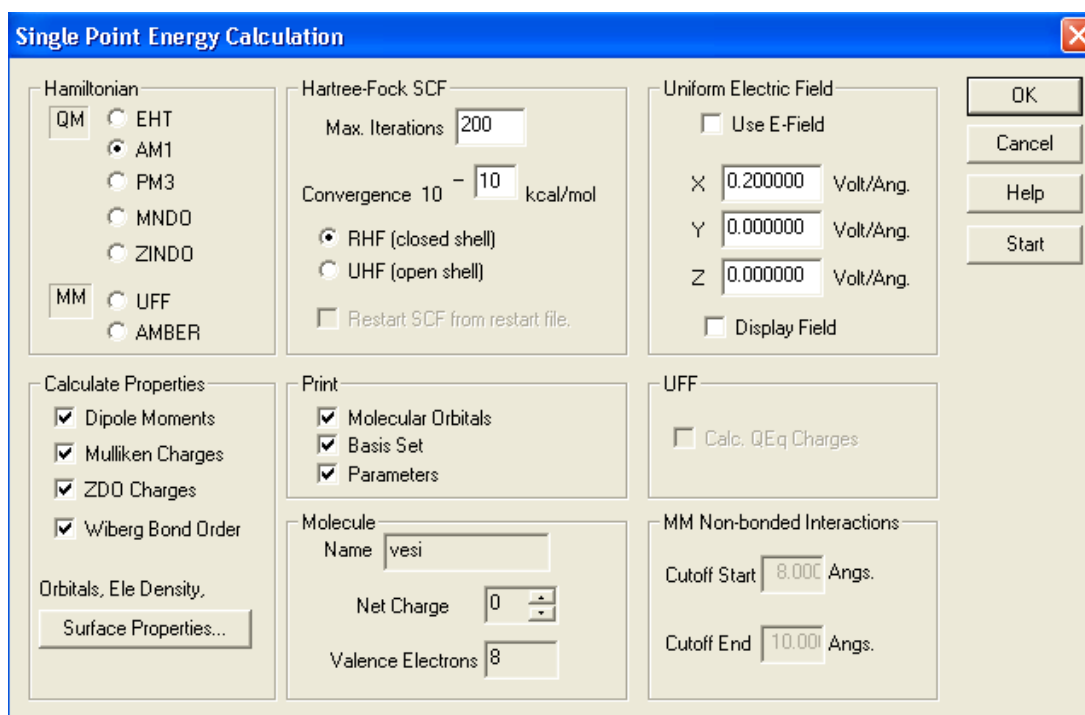
**Kuva 10.** Muistio – kaikki laskun tiedot.

## 4.4 Energia

Optimoinnin jälkeen molekyyllille voidaan laskea sen energia. Mallinnuksen avulla pystytään muuttamaan todellisuutta siten, että esim. molekyylien kineettinen energia voidaan rajata kokonaan pois ja mallintaa pelkästään potentiaalienergiaa. Kemiallisen reaktion mallinnuksessa potentiaalienergiaa käytetään hyväksi esim. laskemalla erikseen lähtöaineiden energiat, transiitotilan energia ja tuotteiden energiat. Näin päästään käsiksi kemiallisessa reaktiossa tapahtuviin energeettisiin muutoksiin. Kemiallisia reaktioita mallintaessa on hyvä muistaa, että mallinnusohjelmassa molekyylit ovat kaasufaasissa ja lämpötila on 0 K.

### 4.4.1 Potentiaalienergian laskeminen

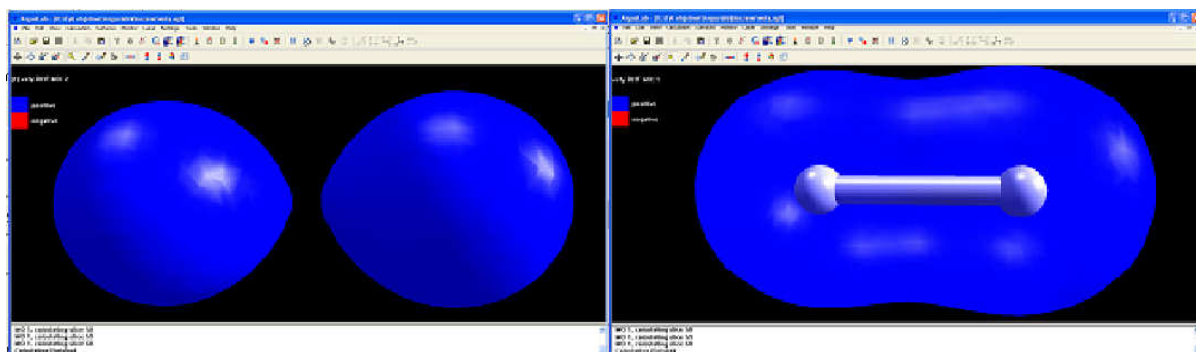
- Valitse **“Calculation”** → **”Energy”**, kuvake  tai **alt + e** (ks. kuva 11).
- Tee tarvittavat valinnat ja paina **OK**.
- Suorita lasku valitsemalla .
- Tarkastele tuloksia muistiosta .



Kuva 11. Energian laskeminen.

## 4.5 Orbitaalit





Opetuksessa orbitaalit ovat vaikea asia. Orbitaalien opettamisessa on tärkeää korostaa, että orbitaali ei ole todellinen. Orbitaali on matemaattinen malli, jonka avulla kuvataan elektronien sijoittumisen todennäköisyyttä ja havainnollistetaan sidosten muodostumista sekä katkeamista (ks. kuva 12).



Kuva 12. Sidoksen muodostuminen.


### 4.5.1 Atomiorbitaalit

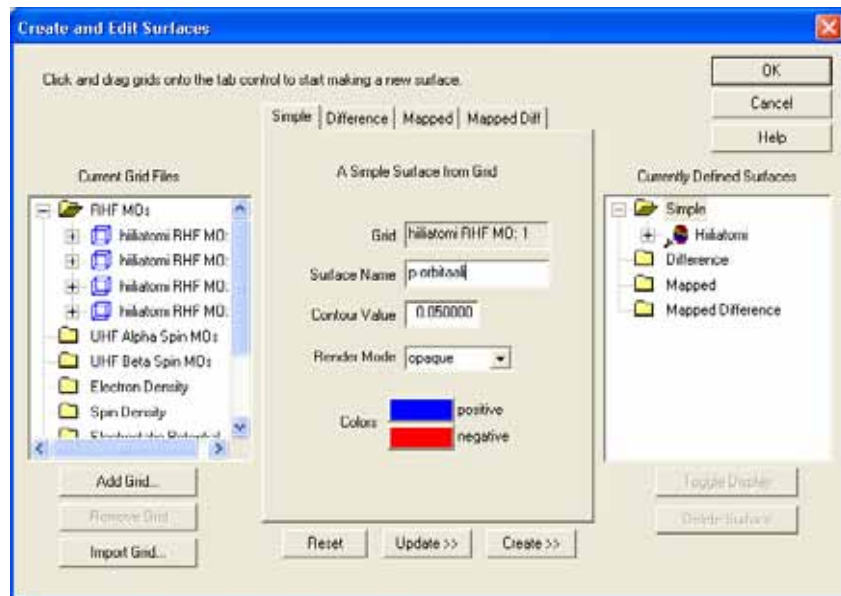
Atomiorbitaali on elektronin aaltofunktion ratkaisu. Se kuvaa elektronin sijaintia 90-95 % todennäköisyydellä.

- Valitse **“Calculation”** → **”Energy”**, kuvake  tai **alt + e** (ks. kuva 11).
- Valitse tarvittavat laskutasot (vain EHT), pinnat (**Surface Properties**) (ks. kuva 13).
- Paina **OK, OK** ja suorita lasku valitsemalla .
- Oikean laskutason (EHT) ollessa valittuna atomiorbitaaleja voidaan laskea myös suoraan valitsemalla  (HOMO) tai  (LUMO).



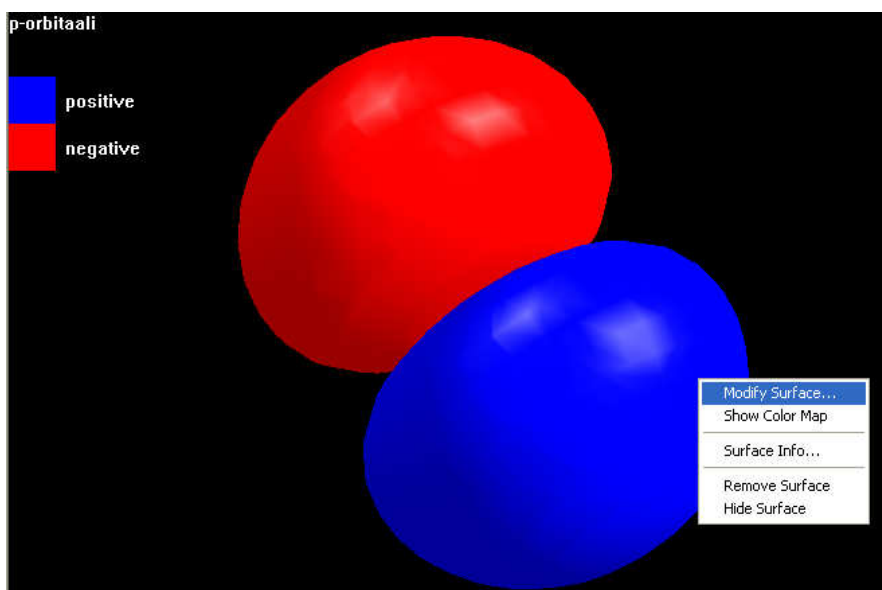
Kuva 13. Pintojen valitseminen (hiilen atomiorbitaalit).

- Atomiorbitaalit visualisoidaan seuraavasti: **"Surfaces"** → **"Make Surfaces"** tai avaamalla **"Create an Edit Surfaces"** suoraan  työkalulla (ks. kuva 14).
- Raahaa haluamasi orbitaali **"Simple"** –lehden **"Grid"** –osaan, vaihda pinnan nimeksi esim. **"p-orbitaali"** ja paina **"Create"** –toimintoa.



**Kuva 14.** Pintojen luominen (atomiorbitaali).



- Aktivoi luotu pinta ja paina **"Toggle Display"** → **OK** (ks. kuva 15).





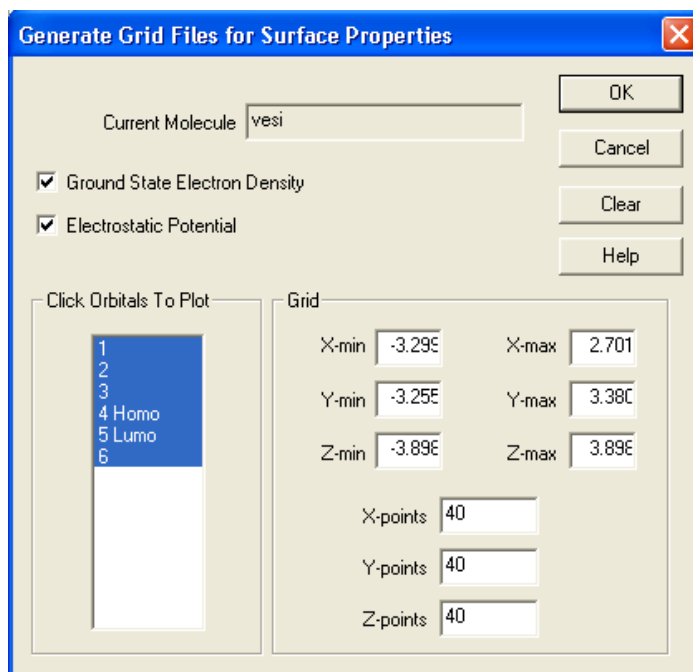
**Kuva 15.** Hiilen atomiorbitaali  
(hiiren oikealla näppäimellä avautuu valikko, josta saa muutettua pinnan esitystapaa).

#### 4.5.2 Molekyyliorbitaalit

Molekyyliorbitaali kuvaa molekyylin elektronien todennäköisintä sijaintia 90-95 % todennäköisyydellä. Molekyyliorbitaalit muodostuvat molekyylin muodostavien atomien atomiorbitaalien lineaarikombinaationa. Menetelmää kutsutaan MO-LCAO -menetelmäksi (Molecular Orbitals as Linear Combinations of Atomic Orbitals).

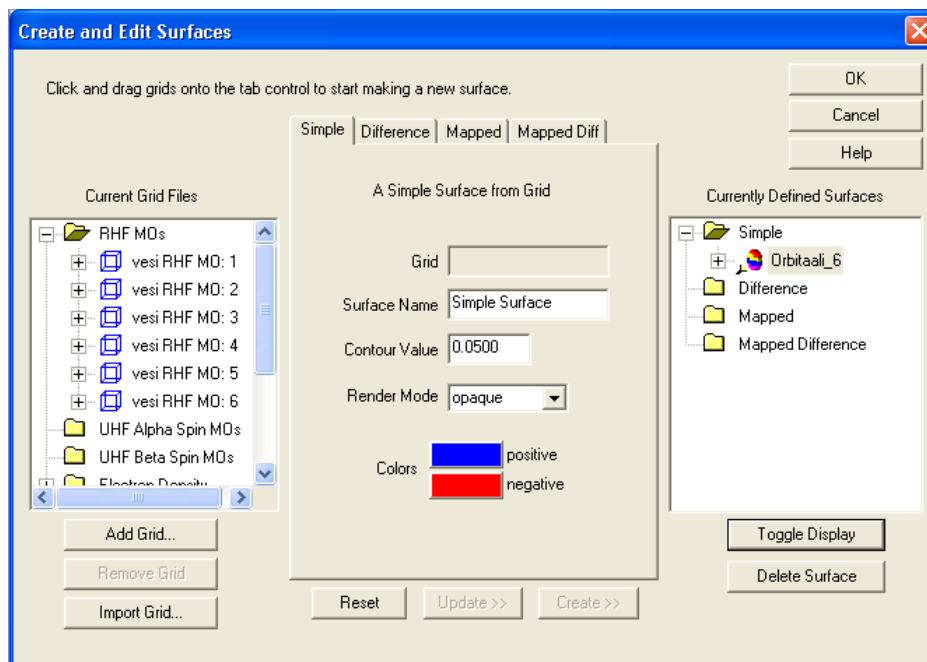
- Valitse **“Calculation”** → **”Energy”**, kuvake  tai **alt + e** (ks. kuva 11).
- Valitse tarvittavat laskutasot, pinnat (**Surface Properties**) (ks. kuva 16).
- Paina **OK**, **OK** ja suorita lasku valitsemalla .
- Molekyyliorbitaaleja voidaan laskea myös suoraan valitsemalla

 (HOMO) tai  
 (LUMO).



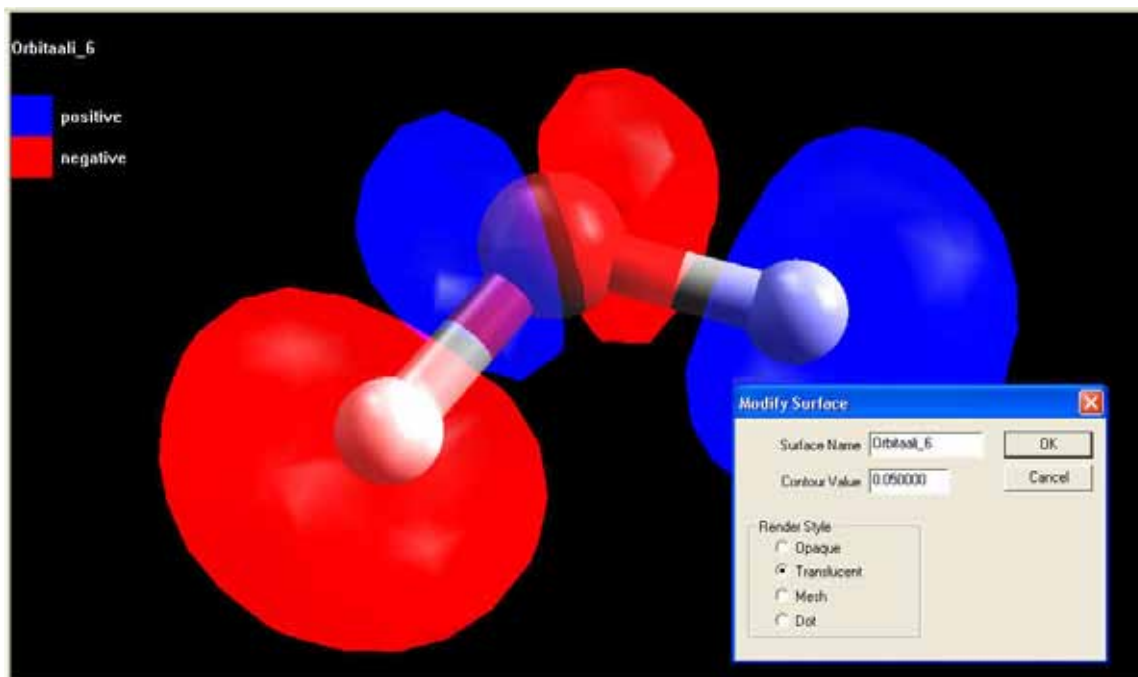
**Kuva 16.** Pintojen valitseminen (veden molekyyliorbitaalit).

- Molekyyliorbitaalien visualisointi tapahtuu samoin kuin atomiorbitaalien visualisointi (ks kuva 17).
- Raahaa haluamasi orbitaali **”Simple”** -lehden **”Grid”** -osaan, vaihda pinnan nimeksi esim. **”orbitaali\_6”** ja paina **”Create”** -toimintoa.




**Kuva 17.** Pintojen luominen (veden molekyyliorbitaali).

- Aktivoi luotu pinta ja paina ”**Toggle Display**” → **Ok** (ks. kuva 18).



**Kuva 18.** Veden molekyyliorbitaali.  
(hiiren oikealla näppäimellä avautuu valikko, josta saa muutettua pinnan esitystapaa).

- Orbitaaleihin liittyvät tiedot näet muistiosta  (kuva 19).

```

vesi.out - Muistio
Tiedosto Muokkaa Muotoile Näytä Ohje

Ground state properties
*****

**** Heat of Formation ****
-58.3019 kcal/mol

SCF eigenvalues (au) eigenvectors
*****

MO number ->      1      2      3      4      5
Eigenvalues ->   -1.338722 -0.668983 -0.549582 -0.458122  0.162287
1 o 2S           -0.895418 -0.000000 -0.359966  0.000000 -0.262015
1 o 2Px          -0.000000  0.000000  0.000000 -1.000000 -0.000000
1 o 2Py          0.153491 -0.000000 -0.801998 -0.000000  0.577270
1 o 2Pz          -0.000000 -0.770201  0.000000 -0.000000  0.000000
2 H 1s          -0.295523 -0.450993  0.337064 -0.000000  0.546858
3 H 1s          -0.295523  0.450993  0.337064  0.000000  0.546858




MO number ->      6
Eigenvalues ->    0.227630
1 o 2S           -0.000000
1 o 2Px          -0.000000
1 o 2Py          0.000000
1 o 2Pz          -0.637801
2 H 1s          0.544615
3 H 1s          -0.544615


```

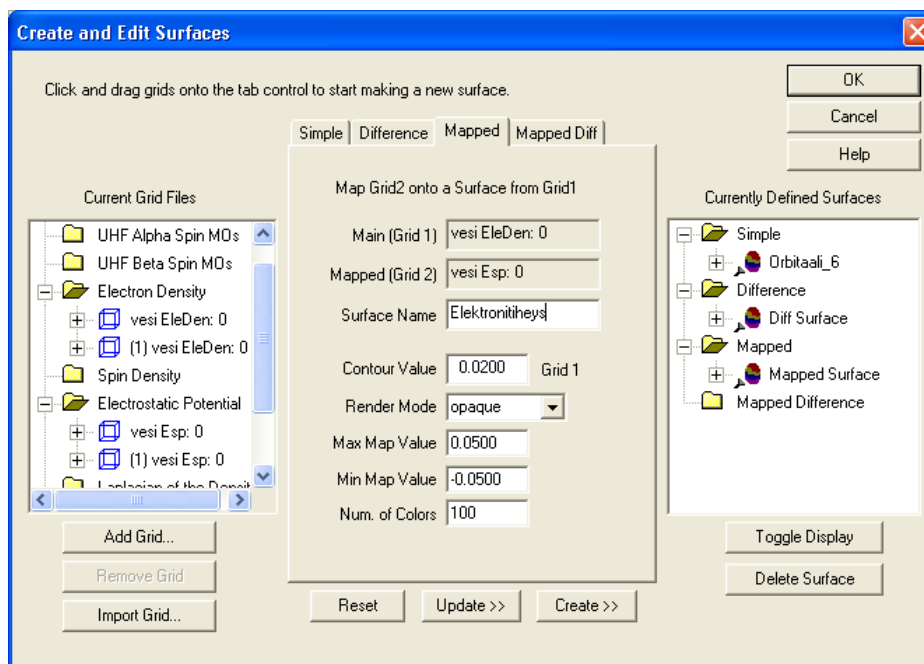
Kuva 19. Orbitaaleihin liittyvä data.

## 4.6 Elektronitiheys

Elektronitiheyden ( $|\psi|^2$ ) ja orbitaalien ( $\psi$ ) käsitteiden välille on tehtävä opetuksessa selkeä ero. Elektronitiheys kuvaa elektronien sijoittumista systeemissä. Elektronitiheys on kokeellisesti määritettävissä oleva aineen ominaisuus. Molekyylimallinnuksen avulla elektronitiheyttä voidaan visualisoida elektronitiheyskartan avulla (ks. kuva 20).

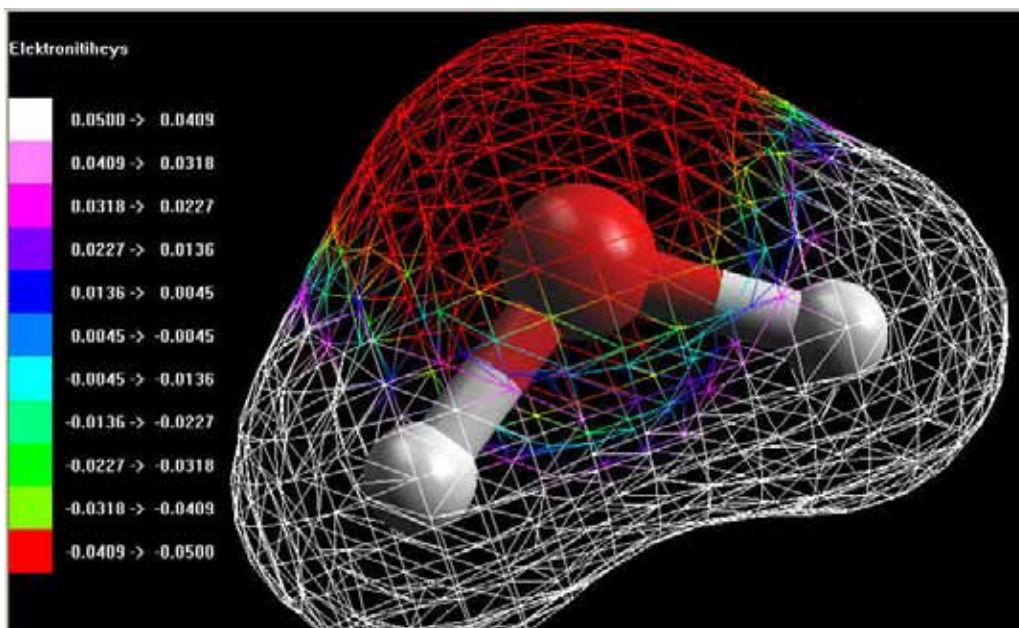
- Valitse **“Calculation”** → **”Energy”**, kuvake  tai **alt + e** (ks. kuva 11).
- Valitse tarvittavat laskutasot, pintaominaisuudet (Surface Properties) (ks kuvat 13 ja 16).
- Rastita **”Ground State Electron Density”** ja **“Electrostatic potential”**
- Paina **OK, OK** ja suorita lasku valitsemalla .
- Elektronitiheyden voi laskea myös pikanäppäimellä .

- Elektronitiheyskartta visualisoidaan seuraavasti: ”Surfaces” → ”Make Surfaces” tai avaa ”Create an Edit Surfaces” suoraan  työkalulla (ks. kuva 18).
- Raahaa ”EleDen” ”Mapped” –lehden ”Grid 1” –osaan ja ”Esp” ”Mapped” –lehden ”Grid 2” –osaan, vaihda pinnan nimeksi ”elektronitiheys” ja paina ”Create” –toimintoa.



Kuva 18. Pintojen luominen (elektronitiheys).

- Aktivoi luotu pinta ja paina ”Toggle Display” → OK (ks. kuva 19).



Kuva 19. Elektronitiheyskartta (hiiren oikealla näppäimellä avautuu valikko, josta saa muutettua pinnan esitystapaa).

## 5. Hienosäätöä ja käyttökelpoisia toimintoja

### 5.1 Värin muuttaminen

Värien muuttaminen tapahtuu ”Settings” → ”Colors” –valikosta. Valinnat tulevat voimaan vasta kahden **OK** valinnan jälkeen.

### 5.2 Kuvan tekeminen

*Arguslabilla* voit helposti tehdä kuvia molekyyleistä vaikka luontokalvoihin tai dokumentteihin liitettäväksi.

Valitse ”File” → ”Export” → valitse haluamasi tallennusmuoto

**Vinkki!** Tausta kannattaa asettaa valkoiseksi liitettäessä kuvia dokumentteihin, koska ohjelma tekee kuvan koko työpöydän näkymästä.

### 5.3 XYZ- ja PDB -tiedosto

*Arguslabilla* pystyy tallentamaan molekyylijä .xyz-tiedostoiksi, joista saat hienon interaktiivisen lisän vaikka esimerkiksi verkkomateriaaleihin.

Katso käytännön esimerkki Hyönteisten kemiaa -verkkomateriaalista. Avaa XYZ-tiedosto klikkaamalla isopentyylisetaatin molekyyylimallia (kuva 1) tai kuvatekstiä.

<http://www.helsinki.fi/kemia/opettaja/aineistot/hyonteistenkemiaa/Isopentyylisetaatti.htm>

PDB -tiedostotyyppi on kuitenkin käyttökelpoinen, koska se toimii hyvin monessa ohjelmassa.

### 5.4 MDL MOL -tiedosto

*Arguslabilla* pystyy tallentamaan .mol –tiedostoksi, jonka pystyy avaamaan esimerkiksi *Chemsketch* -ohjelmassa.

### 5.5 Tiedostojen tuonti

*Arguslab* tukee useita erilaisia tiedostotyyppisiä (ks. luku 2.1), joita voi ladata suoraan verkosta ja avata ohjelmassa.

## LÄHTEET

- Aksela, M & Lundell, J. 2007. Kemian opettajien kokemuksia tietokoneavusteisesta molekyylihallinnuksesta. Kirjassa *Uusia lähestymistapoja kemian opetukseen perusopetuksesta korkeakouluihin*. Toim. M. Aksela and M. Montonen. Helsinki: Opetushallitus.
- ArgusLab 4.0.1. Mark A. Thompson. Planaria Software LLC, Seattle, WA. <http://www.arguslab.com>, luettu 10.3.2008.
- Blomqvist, J., Ahokas, J., Ennari, J., Kinnunen, T., Korhonen, S-P., Kurtén, T., Mattila, K., Runeberg, N., Sillanpää, A. ja Tuononen, H. 2008. *Ongelmasta ratkaisuun – CSC:n kemian mallinnusopas*. Tieteen tietotekniikan keskus. [http://www.csc.fi/csc/julkaisut/oppaat/index\\_html](http://www.csc.fi/csc/julkaisut/oppaat/index_html), luettu 31.3.2008.
- Gabel, D. 1999. Improving Teaching and Learning through Chemistry Education Research: A Look to the Future. *Journal of Chemical Education* 76 (4), 548-553.
- Hudson, J. 1992. *Suurin tiede - Kemian historia*. Suom. Kimmo Pietiläinen. 2002. Jyväskylä: Gummerus.
- Kalliorinne, K., kankaanperä, A., Kivinen, A. & Liukkonen, S. 1988. *Fysikaalinen kemia 1 – kvanttikemia ja spektroskopia*. Helsinki: Kirjayhtymä.
- Lundell, J. & Aksela, M. 2004a. Molekyylihallinnus kemian opetuksessa, osa 4: Orbitaalien havainnollistaminen lukion kemian opetuksessa. *Dimensio* 68 (3), s. 40-43. <http://www.maol.fi/frames/dimensio/D304kansio/Orbitaalit.pdf>, luettu 2.4.2008.
- Lundell, J. & Aksela, M. 2004b. Molekyylihallinnus kemian opetuksessa, osa 2: Molekyylihallinnus ja energia. *Dimensio* 68 (1), 53-54. <http://www.maol.fi/frames/dimensio/D104kansio/MolMalli2.pdf>, luettu 1.4.2008.
- Lundell, J. & Aksela, M. 2003. Molekyylihallinnus kemian opetuksessa osa 1: Molekyylihallinnus ja kemian opetus. *Dimensio* 67 (5), 47-49. <http://www.maol.fi/frames/dimensio/D503kansio/Molmalli.pdf>, luettu 2.4.2008.
- Muurinen, M. & Skarp, N. 2004. *Oivaltamisen iloa laskennallisesta kemiasta*. Pro gradu – tutkielma, Helsingin yliopisto.
- Opetushallitus, 2004. *Peruskoulun opetussuunnitelman perusteet 2004*. Helsinki: Opetushallitus.
- Opetushallitus, 2003. *Lukion opetussuunnitelman perusteet 2003*. Helsinki: Opetushallitus.
- Rappe', A. K., Colwell, K. S. & Casewit, C. J. 1993. Application of a Universal Force Field to Metal Complexes, *Inorganic Chemistry* 32, 3438-3450.
- Russell, J.W., Kozma, R.B., Jones, T., Wykoff, J., Marx, N. & Davis, J. 1997. Use of simultaneous synchronized macroscopic, microscopic, and symbolic representations to enhance the teaching and learning of chemical concepts, *Journal of Chemical Education* 74 (3), 330.
- Scerri, E. R. 2000. Have Orbitals Really Been Observed? *Journal of chemical education* 77 (1), 1492-1494.

# MUISTIINPANOJA