



Jmol opetuksen tukena

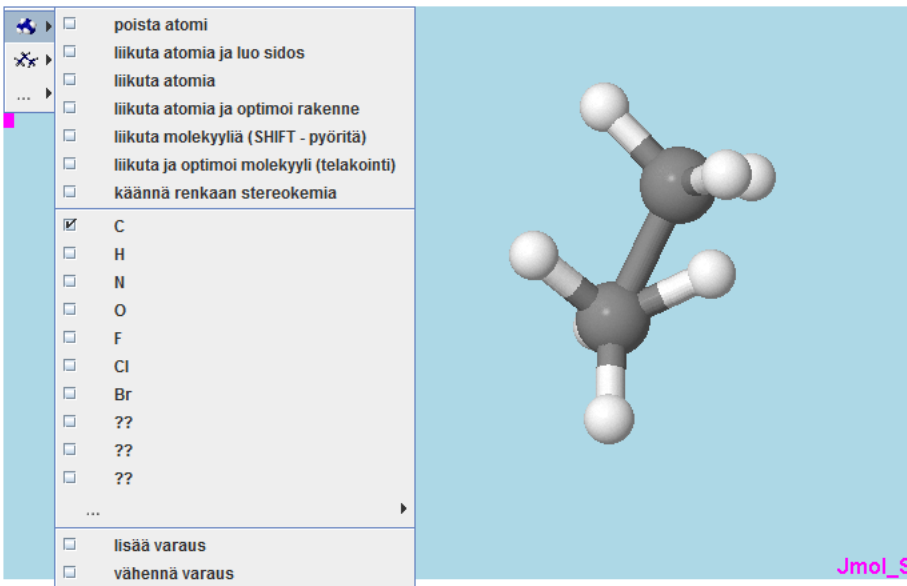
Osa 2 : Jmol työkalut

Johdanto

Sarjan toisessa osassa tutustutaan Jmolin rakennus-⁽¹⁾, laskenta-⁽²⁾ ja mittaustyökaluihin⁽³⁾. Harjoituksissa suoritetaan ensin rakentaminen, jonka jälkeen rakenne optimoidaan molekyylimekaniikka -tasolla. Lopuksi mitataan kulmia ja sidoksia. Harjoitukset voi suorittaa esimerkiksi vertailemalla etaania, eteeniä ja etyyniä.

1) Jmol rakentaminen

- Aktivoi rakennustyökalut laittamalla ruksi Rakentaminen -otsikkorivin laatikkoon.
 - Toiminto aktivoi rakennustyökalut ja asettaa työpöydälle ensimmäisellä kerralla oletuksena metaani-molekyylin
 - Palaa
 - tyhjään työpöytätilaan Poista molekyyli -työkalulla.
 - lähtötilanteeseen Uusi molekyyli -työkalulla.
 - Lisää uusia rakenneosia hiiren vasemmalla painikkeella (HVP).
 - Atomit: Oletuksena Jmol lisää hiilitomin.
 - Voit vaihtaa lisättävää atomia violetista valikosta vasemmasta ylälaidasta.
 - Sidokset: Klikkaa kahden atomin välistä sidosta hiiren vasemmalla painikkeella
 - kerran → yksinkertainen sidos muuttuu kaksoissidokseksi
 - kahdesti → kaksoissidos muuttuu kolmoissidokseksi
- Inaktivoi rakennustyökalut ottamalla ruksi pois Rakentaminen otsikkorivin -laatikosta.



The screenshot shows the Jmol software interface. On the left, a menu titled 'Rakentaminen' (Building) is open, listing various actions: 'poista atomi', 'liikuta atomia ja luo sidos', 'liikuta atomia', 'liikuta atomia ja optimoi rakenne', 'liikuta molekyyliä (SHIFT - pyöritä)', 'liikuta ja optimoi molekyyli (telakointi)', 'käännä renkaan stereokemia', 'C', 'H', 'N', 'O', 'F', 'Cl', 'Br', '??', '??', '??', '...', 'lisää varaus', and 'vähennä varaus'. The 'C' option is checked. To the right, a ball-and-stick model of a molecule is displayed. The text 'Jmol_S' is visible in the bottom right corner of the model area.

Rakentaminen

Uusi molekyyli Poista molekyyli

Laskenta

Avaa konsoli Optimoi rakenne

Mittaustyökalut
Aloita ja lopeta mittaaminen
tuplaklikkaamalla atomia.

Listaa mittaukset
Poista mittaukset

2) Laskenta

Jmolissa rakennetut molekyylit voidaan optimoida molekyylimekaniikka -laskutasolla. Molekyylimekaniikka perustuu Newtonin mekaniikan lakeihin, jolloin kvanttimekaaninen maailma jää kokonaan huomioimatta. Molekyylimekaniikka -laskut ovat nopeita suorittaa. Niiden nopeus perustuu valmiiseen empiiriseen dataan, josta on muodostettu valmiita laskentamalleja, joita kutsutaan voimakentiksi. Koska laskuissa ei huomioida kvanttimekaanista maailmaa, esimerkiksi elektronitiheyspintoja, orbitaaleja tai värähtelyjä ei Jmolin pystytäkään laskemaan.

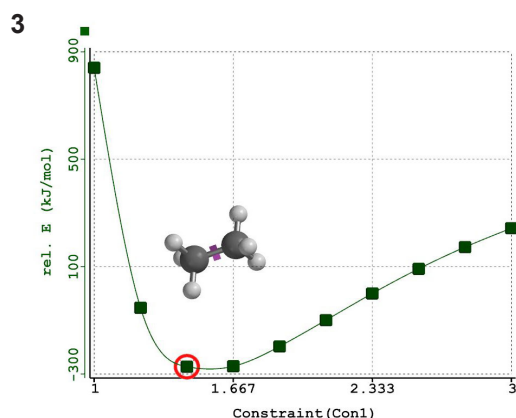
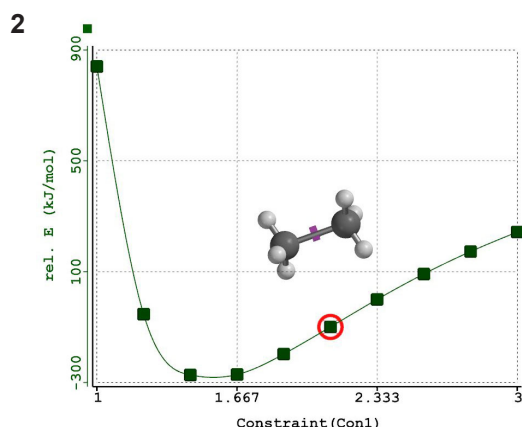
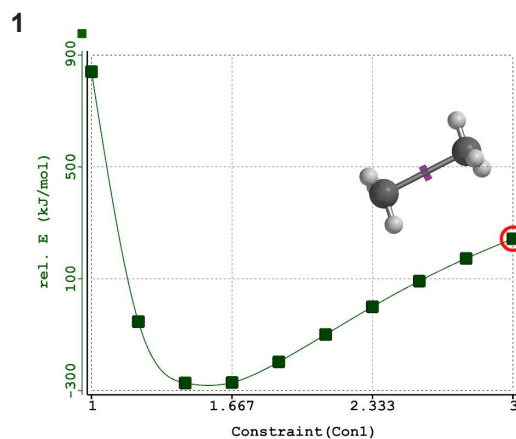
Geometrian optimoinnissa molekyylille etsitään energieettisesti alhaisin rakenne, minkä avulla mallinnetaan luonnossa vallitsevaa todellista tilannetta. Optimoinnin etenemistä voidaan tarkastella potentiaalienergiakäyrän avulla. Tarkastele käyrää yhdessä konsoli-ikkunan esittämän datan valossa.

- Avaa konsoli
- Optimoimetria

KONSOLINÄKYMÄ

Initial E = 3876.069 kJ/mol criterion
= 0.001000 max steps = 100

- 1) Step 10 E = 6.791272 dE = -4.158396
- 2) Step 20 E = 0.656491 dE = -0.026935
- 3) Step 24 E = 0.594750 dE = -0.000235



3) Sidosten ja kulmien mittaaminen

Jmolissa kulmien ja sidosten mittaaminen on todella helppoa. Aloita mittaaminen tuplaklikkaamalla atomia (HVP) ja vie hiiren kursori toiseen atomiin.

Sidospituus: Tuplaklikkaa toista atomia (HVP).

Sidoskulma: Klikkaa kerran (HVP), siirrä kursori kolmanteen atomiin ja tuplaklikkaa kolmatta atomia (HVP).

Torsiokulma: Torsiokulma mitataan samalla tavalla kuin sidoskulma, mutta sisällyttämällä prosessiin neljäs mittauspiste.

Listaa mittaukset -työkalu tekee mittauksista lista konsoli-ikkunaan ja Posta mittaukset -työkalu poistaa suoritettu mittaukset jmol-ikkunasta.

Seuraavassa osassa

Toukokuussa jatketaan hiilivetyjen kanssa työskentelyä ja tutkitaan kovalenttista sidosta.