

Aspiriinin ja veden mallintamista

Kemian mallit ja visualisointi

Sanna Alhonen

Suvi Niemenaho

Ilmo Teikari

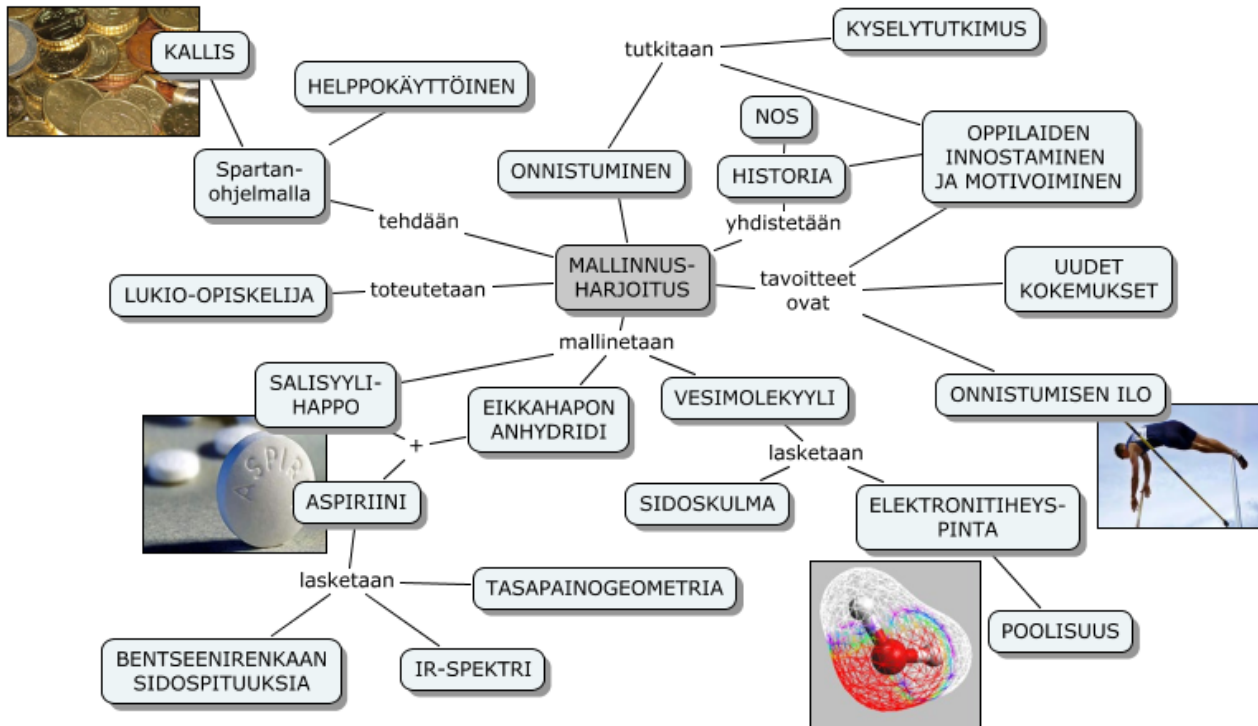
3.5.2010

Sisältö

Johdanto	1
Tavoitteet LOPS huomioiden.....	2
Mallinnuksen kemiallinen näkökulma	3
Mallinnuksen pedagoginen toteutus.....	4
Tutkimuksen kokoaminen.....	5
Kysymystutkimus oppilaille.....	5
Kysymyslomakkeen avoin kysymys	10
Itsearviointi	11
Liitteet	13
1. Mallinnusohje oppilaalle.....	13
2. Mallinnustuokio, tehtäväpaperi oppilaille	17
3. Aspiriinin historiaa.....	20
4. Kysymyslomake mallinnusharjoitukseen liittyen.....	21
5. Kyselytutkimuksen tulokset taulukoituna.....	22

Johdanto

Suunnittelimme ja toteutimme mallinnusharjoituksen lukion ensimmäisen luokan oppilaille, jotka olivat juuri lopettelemassa lukion kemian toista kurssia, kemian mikromaailma. He kaikki siis opiskelivat valinnaista kemiaa lukiossa. Ryhmän opettajan toivomuksesta mallinnusharjoitus liittyi aspiriiniin ja vesimolekyyliin ja toteutettiin Spartan- nimisellä mallinnusohjelmalla. Muita rajoituksia mallinnusharjoituksen suhteen meille ei annettu. Mallinnusharjoituksen jälkeen opiskelijat täyttivät kysymyslomakkeen, jonka perusteella saamaamme informaatiota analysoimme raportissa. Mallinnusharjoitusta kokonaisuutena havainnollistaa kuva 1.



Kuva 1. Kuvaus mallinnusharjoituksesta.

Tavoitteet LOPS huomioiden

Lukion opetussuunnitelman perusteiden 2003 (myöh. LOPS 2003) mukaan kemian opetuksen tavoitteena on, että opiskelija osaa kemian keskeisimmät peruskäsitteet ja tietää kemian yhteyksiä jokapäiväisen elämän ilmiöihin sekä ihmisen ja luonnon hyvinvointiin sekä perehtyy tieto- ja viestintätekniikan mahdollisuuksiin tiedonhankinnan ja mallintamisen välineinä. Mallinnustuokiossamme nämä tavoitteet toteutuivat, sillä aspiriini on jokapäiväiseen elämään liittyvä lääke, joka historiallisesta näkökulmasta katsottuna on vaikuttanut pitkään ihmiskunnassa. Vesimolekyylin ja sen poolisuuden mallintaminen tukee vielä enemmän edellä mainittuja tavoitteita.

Saimme tiedon, että mallinnustuokioon tulevat oppilaat ovat lukion kemian kakkoskurssilla (Kemian mikromaailma (KE2)). Tällöin he ovat suorittaneet pakollisen kemian kurssin (Ihmisen ja elinympäristön kemia (KE1)), ja siten mallintaminen tukee myös pakollisen kurssin tavoitetta ”osaa orgaanisten yhdisteiden rakenteita, niiden ominaisuuksia ja reaktioita sekä ymmärtää niiden

merkityksen ihmiselle ja elinympäristölle” ja keskeisiä sisältöjä ”orgaanisia yhdisteryhmiä kuten hiilivetyjä, orgaanisia happiyhdisteitä, orgaanisia typpiyhdisteitä sekä niiden ominaisuuksia ja sovelluksia, orgaanisissa yhdisteissä esiintyvät sidokset sekä poolisuus” (LOPS 2003).

Lähdimme ajatuksesta, että kurssin Kemian mikromaailma (KE2), jolla oppilaat ovat parhaillaan, osalta mallinnuksemme sopii tavoitteisiin ”osaa käyttää aineen ominaisuuksien päättelyssä erilaisia kemian malleja, taulukoita ja järjestelmiä. Ymmärtää orgaanisten yhdisteiden rakenteita ja tuntee rakenteen määrittämisessä käytettäviä menetelmiä. Osaa tutkia kokeellisesti ja erilaisia malleja käyttäen aineiden rakenteeseen, ominaisuuksiin ja reaktioihin liittyviä ilmiöitä.”(LOPS 2003)

Kyseisen kurssin keskeisistä sisällöistä varsinkin orgaanisten yhdisteiden sidos- ja avaruusrakennetta pystytään mallinnuksella havainnollistamaan konkreettisesti. Havainnollistamisessa pitää kuitenkin muistaa se, että kyse on aina malleista ja kemiassa kuten muissakin tieteissä, ei ole lopullista totuutta. Malleissa on aina heikkouksia. ChemSketch-ohjelmalla piirrettäessä asetyylialisyylihappoa näkyy ”kaksoissidokset” bentseenirenkaassa. Mallinnettaessa Spartanilla molekyylin bentseenirenkaan sidokset näyttävät erilaiselta. Tähän liittyy mielenkiintoinen kysymys, minkä teimme oppilaille, kun olimme mallintaneet Spartanilla asetyylialisyylihapon. Montako kaksoissidosta on bentseenirenkaassa? Vastaus on, että ei yhtään. Kun kysymyksen jälkeen kerroimme oikean vastauksen, tuli luokkaan hiljaista. Palautelomakkeen

(kysymyslomakkeen) avoimeen kysymykseen eräs oppilas vastasi ”En oppinut mitään uutta paitsi, ettei bentseenirenkaassa ole kaksoissidoksia!” Oppilaat oppivat hyvin tärkeän asian mallinnuksesta. Mallit eivät ole todellisuutta, vaan vain yrittävät esittää todellisuudesta käsitteellisen mallin. Pelkkä havainnollistaminen ilman käsitteiden avaamista ei riitä. Tämä pätee kemian lisäksi muihinkin oppiaineisiin, joissa opetuksessa käytetään malleja.

Historiallinen osuus alussa teki aspiriinin muodostumisreaktiosta perustellun. Oppilaille tuli näin selväksi asetyylisalisyylihappomolekyylin syntetisoinnin tarpeellisuus. Sitä ei tehdä siksi, että saataisiin lääkettä, vaan siksi että saataisiin lääke vähemmän ihmiselle haitalliseen muotoon. Halusimme myös opettaa nuorille opiskelijoille myös luonnontieteiden luonnetta.

Lisäksi tavoitteena oli innostaa ja motivoida nuoria kemian opiskeluun ja antaa heille uusia kokemuksia sekä onnistumisen iloa. Koska oppilaat pääsivät itse mallintamaan, oppivat he aiheen kemiallisen puolen lisäksi myös molekyylihallinnusta ja toiminta aktivoi myös oppilaiden korkeamman tason ajattelutaitoja.

Mallinnuksen kemiallinen näkökulma

Mallinnustuokion aiheena on aspiriinin ja vesimolekyylien mallintaminen. Aspiriinin kohdalla mallinnus aloitetaan lähtöaineiden salisyylihapon ja etikkahapon anhydridin mallinnuksella. Tarkoituksena on tutustua lähtöaineiden funktionaalisiin ryhmiin ja mallinnuksen avulla miettiä syytä siihen, miksi mallinnetussa etikkahapon anhydridissä hapet sijaitsevat eri tavoin kuin piirreyssä anhydridin rakennekaavasta. Samanmerkkisesti varautuneet hapet pyrkivät molekyylissä kiertymään toisistaan pois päin.

Oppilaiden kanssa kannattaa verrata aspiriinin molekyylikaavaa, $\text{CH}_3\text{COOC}_6\text{H}_4\text{COOH}$, ja mallinnettua rakennekaavaa keskenään. Tällöin oppilaat huomaavat, että organisisessa kemiassa rakennekaavoilla on suurempi merkitys kuin molekyylikaavoilla. Rakennekaavat kertovat enemmän siitä, miten eri yhdisteet reagoivat keskenään.

Aspiriinin avulla tutustutaan erilaisten sidosten sidospituuksiin ja sidoskulmiin. Selitämme mallinnuksen avulla oppilaille, mistä aspiriinissa olevan bentseenirenkaan erot sidospituuksissa ja – kulmissa johtuvat. Bentseenirenkaaseen liittyneiden funktionaalisten ryhmien ja bentseenirenkaan välille syntyy vuorovaikutuksia; eri atomit vetävät toisiaan puoleensa elektronegatiivisuuserojensa

takia. Harjoituksessa käsitellään lisäksi erot eri sidosten pituuksissa. Hiilten välinen yksöissidos on pisin, kolmoissidoksen ollessa lyhin.

Mallinnustuokiossa optimoidaan aspiriinin rakenne laskemalla molekyylin tasapainogeometria. Tässä vaiheessa voidaan oppilaiden kanssa keskustella siitä, mitä tasapainogeometria tarkoittaa. Molekyyleillä on tapana asettua sellaiseen muotoon, että niiden kokonaisenergia on minimissä. IR-spektrin avulla voidaan osoittaa, että molekyyleissä tapahtuu aina värähtelyä. Funktionaalisilla ryhmillä on niille ominaiset värähtelytaajuudet ja IR-spektriä voidaankin käyttää aineiden tunnistamisessa.

Vesimolekyylin mallinnuksen yhteydessä mittaamme vesimolekyylin sidoskulman. Oppilaiden kanssa voi heidän tasostaan riippuen keskustella, siitä mistä vesimolekyyllille ominainen muoto johtuu. Oppilaille voidaan kertoa hapen sitoutumattoman elektroniparin voimakkaasta poistovoimasta, mutta taustatietona oppilailta vaaditaan asian ymmärtämiseksi atomiorbitaalien tuntemusta. Poolisuutta käsiteltäessä mallinnetaan vesimolekyylin elektronitiheyspinta, joka kuvaa selkeästi elektronitiheyden keskittymistä hapen puolelle. Esimerkiksi rinnalle kannattaisi ottaa hiilidioksidimolekyyli, jonka lineaarinen muoto tekee siitä selvistä elektronegatiivisuuseroista huolimatta poolittoman yhdisteen.

Mallinnuksen pedagoginen toteutus

Pedagogisena työkaluna käytössä oli ohjattu harjoitus, jossa molekyylimallintamista käytettiin opetusvälineenä. Opetusjärjestelyihin vaikutti paljolti se seikka, että oppilaat eivät aiemmin olleet Spartan molekyylimallinnusohjelmaa nähneet. Oppilaiden itsenäisen työskentely piti siten olla alusta loppuun asti ohjattua. Osa oppilaista tarvitsi jatkuvaa ohjausta, joten opettajajohtoisuus oli tarpeen. Tällaisen opettajajohtoinen työskentelyn vaarana on, että oppilaat tekevät harjoitusta ajattelematta mitään. Tätä pyrimme estämään tekemällä tehtäväpaperiin avoimia kysymyksiä, jolloin didaktinen prosessi muodostui lineaariseksi. Kunnianhimoisempaa olisi ollut didaktisen prosessin luonteen saaminen itseohjautuvaksi, mutta huomioiden se, kuinka lyhyen aikaa olimme oppilaiden kanssa tekemisissä, lineaarisuus didaktisessa prosessissa on hyväksyttävää.

Tiedostimme sen, että pelkkä oppilaan sijoittaminen oppimisympäristöön ei vielä takaa laadullisesti parempaa oppimista. Pyrimme siksi saamaan molekyylihallinnuksesta mahdollisimman paljon oppilaiden parhailaan suorittamaa Kemian mikromaailma -kurssia tukevaa oppimista. Toivottavasti didaktisista taitomme riittivät tähän ja oppilaat kykenivät muodostamaan kokonaisuuksia kurssilla ja molekyylihallinnuksessa oppimastaan. Ajatus oli, etteivät oppilaat tule näyttämään mitä jo osaavat, vaan oppivat uutta. Luonnollisesti oppiminen rakentuu jo opitun varaan, mutta mallinnus työtapana on sellainen, että oppilas käsittelee, jäsentää ja muokkaa hankkimaansa tietoa. Oppilas voi oppia myös erehdysten ja epäonnistumisten kautta, mutta huomionarvoista on ohjauksen tarpeellisuus, ettei molekyylihallinnuksesta opita sen olevan vain vaikeaa ja sopivaa pelkästään tietoteknisiltä taidoiltaan hyvillä oppilaille. Käytännössä pystyi helposti havaitsemaan, että niiden, jotka olivat hyvä yleisiltä atk-taidoiltaan, oli helpompi myös käyttää mallinnusohjelmaa.

Oppilaiden ohjauksen osalta hyväksi havaitsimme tavan, jossa yksi ohjaajista vetää harjoitusta luokan edessä käyttäen valkokankaalle heijastettua kuvaa mallinnuksesta ja kaksi ohjaajaa kiertää katsomassa, että oppilaat pysyvät mukana harjoituksessa opastaen tarvittaessa. Tästä saimme myös kiitosta palautelomakkeen (kysymyslomakkeen) avoimen kysymyksen vastauksessa: ”Auttajat oli kyllä hyviä”. Kolmen myöhästyneen oppilaan vuoksi oli varsin hyvä asia, että meitä ohjaajia oli kolme, jolloin yksi ohjaajista pystyi yksilöllisesti opastamaan mallinnusharjoituksen alkuun myöhästyneitä oppilaita.

Tutkimuksen kokoaminen

Kysymystutkimus oppilaille

Oppilaat täyttivät kysymyslomakkeen, joka löytyy liitteestä 4. Monivalintalomakkeessa kysyttiin myös vastaajan sukupuoli, sillä tahdoimme vertailla tyttöjen ja poikien vastauksia keskenään. Lomakkeen kysymykset jakautuivat neljään osioon. Ensimmäisen osion väittämällä pyritään saamaan käsitys opiskelijoiden suhtautumista tietokoneella työskentelyyn ja kokeellisuuteen. Kolmen muun osion väittämät koskevat kaikki jollain tavalla mallinnusta.

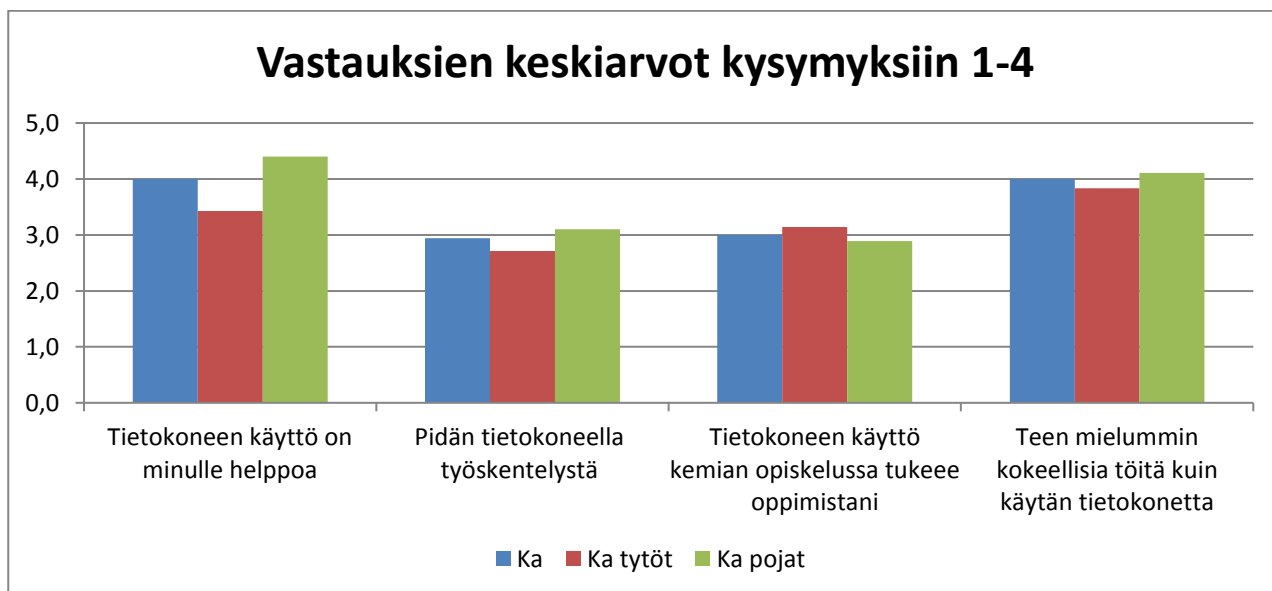
Kysymyslomakkeessa oli erilaisia väittämiä, joihin oppilaat vastasivat numeroilla 1-5. Vastaus yksi kertoo, että oppilas on asiasta täysin eri mieltä ja vastaus viisi tarkoittaa, että oppilas on täysin samaa mieltä asiasta. Vastausvaihtoehdoista valitaan nolla, silloin kun ei osaa ilmaista mielipidettään asteikolla yhdestä viiteen. Liitteellä 5 on kaikki kyselytutkimuksen vastaukset taulukoituna keskiarvoineen. Opiskelijaryhmässä oli seitsemän tyttöä ja kymmenen poikaa.

Ensimmäiset väittämät olivat seuraavanlaiset:

1. *Tietokoneen käyttö on minulle helppoa*
2. *Pidän tietokoneella työskentelystä*
3. *Teen mieluummin kokeellisia töitä kuin käytän tietokonetta*
4. *Teen mieluummin kokeellisia töitä kuin käytän tietokonetta*

Tyttöjen ja poikien vastaukset eroavat hyvin vähän toisistaan. Pojat kuitenkin kokevat tietokoneen käytön selvästi helpommaksi. Vastausten keskiarvojen ero on tasan yksi. Huomionarvoista on se, että kaikki arvostavat kokeellisten töiden tekemisen tietokoneella työskentelyn edelle keskiarvolla neljä. Tiedämme, että ryhmän opettaja käyttää opetuksessaan paljon kokeellisuutta ja varmaankin sillä on oma vaikutuksensa oppilaiden kiinnostukseen. Osa ryhmän oppilaista on lisäksi opiskellut myös yläkoulussa saman opettajan kemianopetuksessa jo ennen lukiota kolmen vuoden ajan eli he ovat hyvin tottuneita tutkimaan kemiaa kokeellisesti.

Opiskelijat osasivat vastata osion kysymyksiin hyvin. Vastausten joukossa oli vain kolme nollaa. Ne näkyvät liitteen 5 taulukossa tyhjinä ruutuina, sillä nolla alentaisi keskiarvoa.



Kaavio 1. Kysymystutkimuksen vastauksien keskiarvot ensimmäisen osion kysymyksiin.

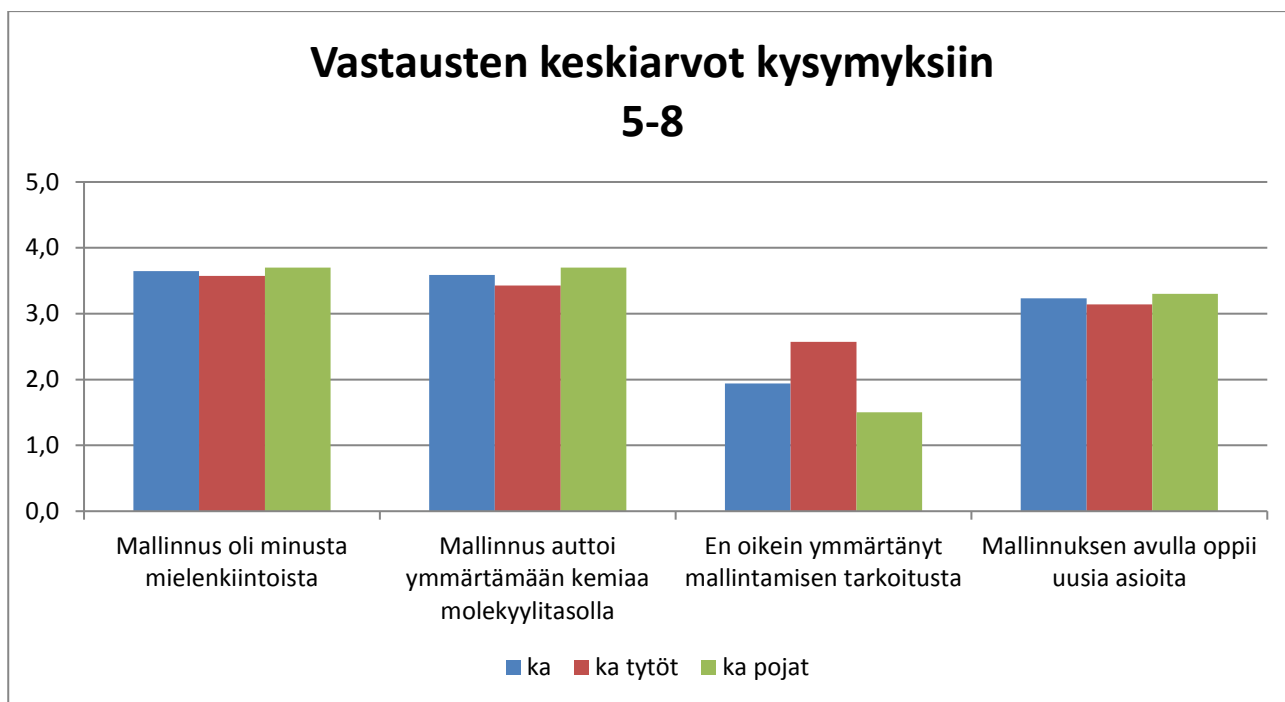
Väittämät 5-8 koskivat mallinnusta ollen seuraavanlaiset:

5. *Mallinnus oli minusta mielenkiintoista*
6. *Mallinnus auttoi ymmärtämään kemiaa molekyylitasolla*

7. En oikein ymmärtänyt mallintamisen tarkoitusta

8. Mallinnuksen avulla oppii uusia asioita

Vastauksien perusteella oppilaat suhtautuvat mallinnukseen positiivisesti. Pojat näyttävän olevan hiukan kiinnostuneempia kuin tytöt. Pojat ymmärsivät mallinnuksen tarkoituksen selvästi paremmin kuin tytöt.



Kaavio 2. Kysymystutkimuksen vastauksien keskiarvot toisen osion kysymyksiin.

Eräs ryhmämme jäsen teki johdatus kemian opetukseen - kurssilla kouluvierailun samaisen kemian ryhmän oppitunnille. Hän sai etukäteen tietää, että oppilaat olivat vähän kokeilleet mallinnusta Arguslabilla. Niinpä kouluvierailun yhteydessä oppilaiden täyttämiin kysymyslomakkeisiin laitettiin muutama kysymys myös mallinnusta koskien. Kaksi tämän osion ensimmäistä kysymystä esitettiin oppilaille kouluvierailullakin, joka toteutettiin noin neljä viikkoa ennen pitämäämme mallinnusharjoitusta. Taulukosta 1 ilmenee vastausten keskiarvot kouluvierailun ja mallinnusharjoituksen jälkeen.

Taulukko 1. Kouluvierailun (1. ka) ja mallinnusharjoituksen (2. ka) kahden kysymyksen vastauksien keskiarvot taulukoituna.

Kysymys	1. ka tytöt	2. ka tytöt	1. ka pojat	2. ka pojat
Molekyylimallinnus on mielenkiintoista	3,2	3,6	2,7	3,7
Molekyylimallinnus auttoi ymmärtämään kemiaa molekyylitasolla	3,7	3,4	3,5	3,7

Tuloksista nähdään, että varsinkin poikien kiinnostus molekyylimallinnusta kohtaan lisääntyi selvästi mallinnusharjoituksen myötä. Tytöillä hieman yllättäen toisen kysymyksen keskiarvo laski hieman. Voinee johtua siitäkin, että kahdella tytöllä tietokoneet toimivat äärettömän hitaasti ja heillä oli vaikeuksia pysyä mukana harjoituksessa.

Väittämät yhdeksästä kolmeentoista käsitelivät mallinnusta seuraavanlaisin kysymyksin:

9. Tekisin mallinnusharjoituksia mielelläni myös koulussa

10. Voisin mallintaa vapaa-ajallakin

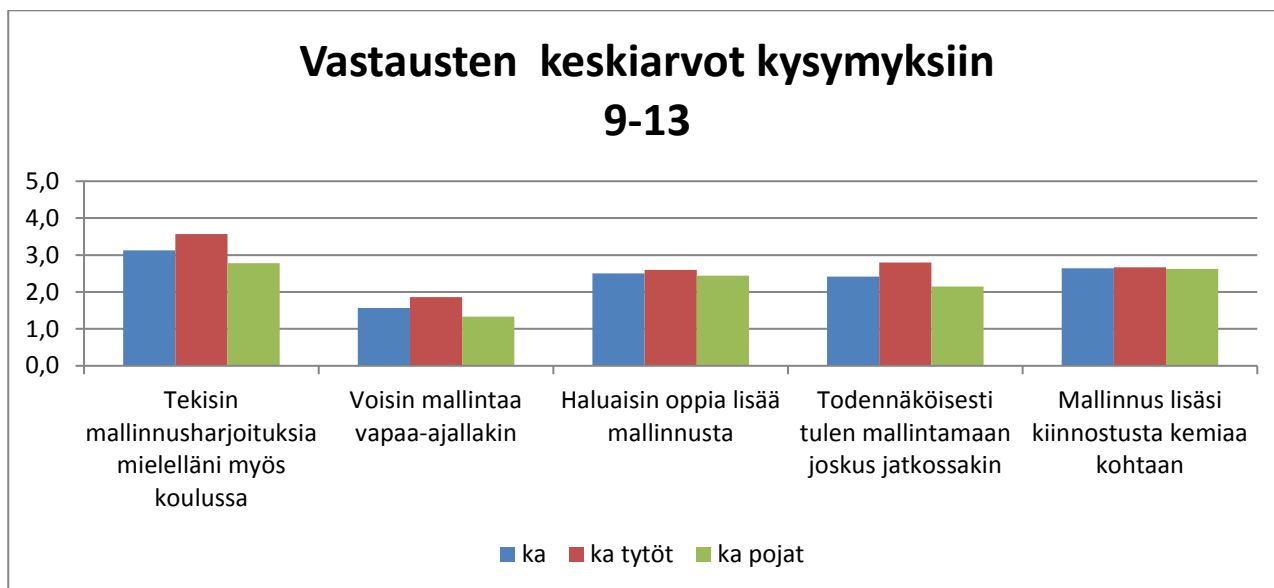
11. Haluaisin oppia lisää mallinnusta

12. Todennäköisesti tulen mallintamaan joskus jatkossakin

13. Mallinnus lisäsi kiinnostusta kemiaa kohtaan

Kyseisen ryhmän koulussa ei ole käytössään Spartan-ohjelmaa, mutta tavoitteena on saada hankituksi. Tytöt tekisivät mallinnusharjoituksia koulussa mieluummin kuin pojat. Hieman yllättävää, sillä aikaisemman perusteella pojat pitävät mallinnusta mielenkiintoisempina kuin tytöt. Kaiken kaikkiaan tämän osion vastaukset jäävät ensimmäistä kysymystä lukuun ottamatta alle kolmosen keskiarvon. Erityistä on se, että kysymys numero 11 esitettiin samalle ryhmälle jo aikaisemmin Alhosen kouluvierailun yhteydessä. Tällöin tytöt vastasivat kysymykseen saavuttaen keskiarvon 3,7 ja pojat 2,7. Mallinnusharjoituksen jälkeen keskiarvot olivat 2,6 ja 2,4. Mallinnus ei tuntunut lisäävän mielenkiintoa kemiaa kohtaan erityisemmin. Se ei sinänsä ole ihmeteltävää, sillä kyseessä on erittäin innostunut ja motivoitunut lukion valinnaista kemiaa opiskeleva ryhmä, joka mielellään tekee kokeellisia töitä. Opiskelijat ovat jo valmiiksi kiinnostuneita.

Kysymykset olivat ilmeisen hankalia, sillä osion vastausten joukossa oli peräti kolmetoista nollaa. Saattaa olla, että väsymyksen alkoi painamaan, sillä opiskelijaryhmä oli aloittanut vierailunsa jo aamulla. Lisäksi heillä oli lukiossa meneillään rankka koeviikko.



Kaavio 3. Kysymyslomakkeen vastauksien keskiarvot kolmannen osion kysymyksiin.

Viimeiset kysymykset koskivat mallinnusharjoitusta seuraavasti:

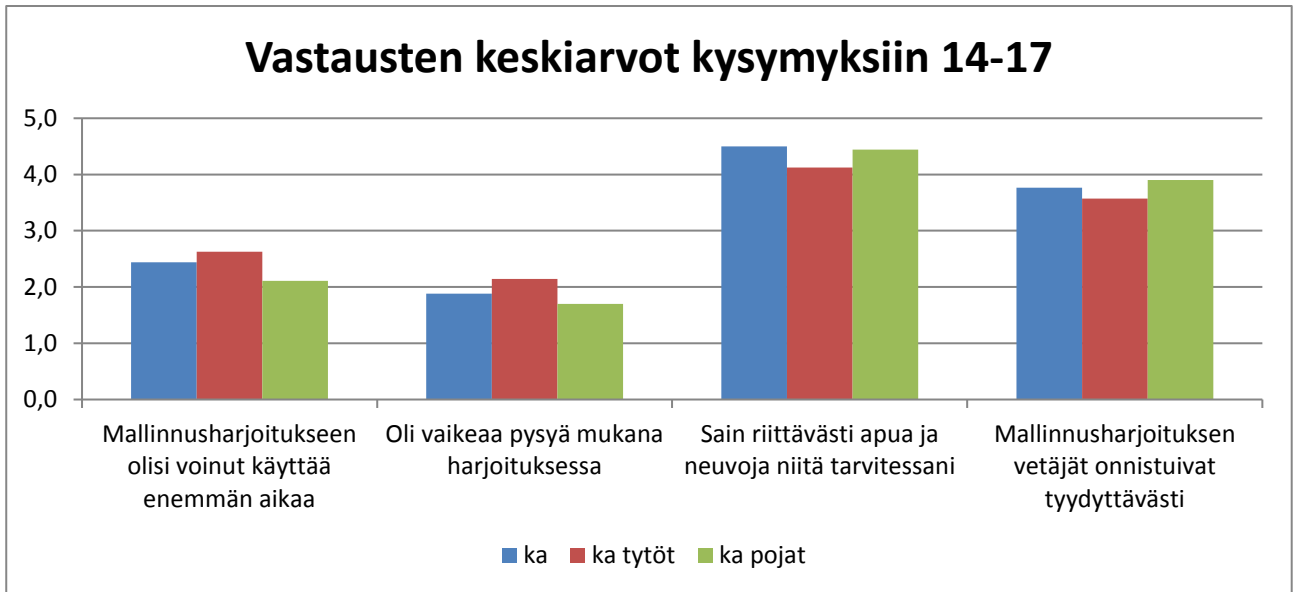
14. Mallinnusharjoitukseen olisi voinut käyttää enemmän aikaa

15. Oli vaikeaa pysyä mukana harjoituksessa

16. Sain riittävästi apua ja neuvoja niitä tarvitessani

17. Mallinnusharjoituksen vetäjät onnistuivat tyydyttävästi

Vastausten perusteella mallinnusharjoituksiin käytetty aika oli sopiva tai ainakaan harjoitukseen ei olisi kannattanut käyttää enempää aikaa. Opiskelijat myös mielestään pysyivät mukana mallinnusharjoituksen tahdissa ja kokivat saaneensa riittävästi apua harjoituksen pitäjiltä. Viimeinen kysymys olisi kannattanut muotoilla eri tavalla esimerkiksi pyytää opiskelijoita arvostelemaan harjoituksen onnistuminen asteikolla yhdestä viiteen. Viimeisen kysymyksen antamaa tietoa on hankala analysoida, kun ei tiedä miten oppilaat käsittävät sanan tyydyttävä. Ilmeisen tyydyttävästi onnistuimme.



Kaavio 4. Kysymyslomakkeen vastauksien keskiarvot neljännen osion kysymyksiin.

Kysymyslomakkeen avoin kysymys

Kysymyslomakkeen avoimena kysymyksenä oli ”Kertoisitko lyhyesti, opitko jotain uutta mallinnusharjoituksessa? Selkenikö kenties jokin hieman epäselväksi jäänyt asia?” Vain kaksi opiskelijaa oli jättänyt vastaamatta avoimeen kysymykseen. Useimmat vastauksista ovat lyhyitä, yhden lauseen vastauksia, jossa toistetaan jotain monivalintakysymyksen vastausta. Mahdollisesti johtuen kysymyksen johdattelevuudesta, osa vastauksista sisälsi diplomaattisen ilmoituksen ”opin käyttämään mallinnusohjelmaa”. Muutamassa vastauksessa todetaan lakonisesti, ettei mitään opittu. Se, ettei bentseenirenkaassa ole kaksoissidoksia, on jäänyt ainakin kuudelle oppilaalle mieleen vastausten perusteella. Tämä todistaa sen, että mallintamisen lisäksi saavutimme ymmärryksen luomista oppilaille siitä, että mallit ovat aina vajavaisia, eivätkä kuvaa todellisuutta täydellisesti. Tämä myös kirjaimellisesti todetaan parissa vastauksessa.

Sidosten venyminen on vastausten perusteella jäänyt parille oppilaalle hyvin mieleen: ”kyllä selkisi, että sidokset voivat venyä”. Mallinnusharjoituksen alun tarpeeton kiiruhtaminen mallinnuksen kanssa tulee kahdesta vastauksesta ilmi. Yhdessä vastauksessa todetaan tosi-asia, että mallinnukseen pitäisi käyttää enemmän aikaa, ”jotta pääsisi enemmän mallinnukseen sisään”. Näiden vastausten kanssa yhteneviä on lomakkeissa myös monivalintakysymyksiin vastaaminen.

Itsearviointi

Mielestämme mallinnusharjoitus onnistui kaiken kaikkiaan ihan mallikkaasti. Joitakin asioita unohtui ilmeisesti pienoisesta jännityksestä johtuen. Emme muistaneet käsitellä kaikkia kysymyksiä, jotka olimme etukäteen laatineet harjoituksen yhteydessä käsiteltäviksi. Harmi, sillä hyvät kysymykset valuivat hukkaan. Oppilaat olivat myöhässä mallinnusharjoituksesta ja tämä varmaan aiheutti sellaisen ”paniikkireaktion”, että aika tuntui loppuvan kesken.

Aloitimmekin mallinnusharjoituksen pitämisen turhan vauhdikkaasti. Saimme hyvää oppia siitä, että harjoituksen ohjaamisessa ei kannata turhaan kiirehtiä. Opettajan ammattitaitoon kuuluu opetuksen hoitaminen annetussa ajassa ja opetusmateriaalin rajaaminen. Aloituksessa tulevan oppisisällön kanssa ei kannattaisi koskaan kiirehtiä, sillä se voi kostautua myöhemmin. Huomioituna se seikka, että kyseessä oli kaikille oppilaille täysin uusi ohjelma, tulisi harjoituskin aloittaa mahdollisimman rauhallisesti. Osa oppilaista tuntui omaksuvan ohjelman logiikan nopeasti, mutta muutamalla oppilaalla oli huomattavia vaikeuksia koko mallinnusharjoituksen ajan. Pelkästään heikosta kemian osaamisesta ei ollut kyse.

Tietokoneet suorittavat mallinnukseen liittyviä laskutoimituksia hiukan eri tahdissa ja tällöin hitaimmilla koneilla työskentelevät oppilaat helposti putoavat kärryiltä. Onneksi meitä oli kolme ohjaajaa pitämässä harjoitusta, jolloin kaksi ohjaajaa pystyi kiertelemään luokassa neuvon ohjauksen tahdista jääneitä. Kolme opiskelijaa saapui mallinnusharjoitukseen myöhässä, mutta he pääsivät nopeasti jyvälle ohjelman käytöstä yksilöllisen ohjauksen avulla. Tässä huonona puolena oli se, että yksi ohjaajista joutui olemaan pelkästään näiden kolmen opiskelijan ohjauksessa. Hyvä puoli asiassa oli se, että koska meitä ohjaajia oli kolme henkeä, niin haitta ei ollut niin suuri kuin kahden ohjaajan kohdalla olisi ollut.

Mallinnusharjoituksen suunnittelussa onnistuimme mielestämme kohtuullisen hyvin. Tehtävä oli siinä mielessä helppo, että aihe oli tarkkaan määritelty. Suunnitteluun olisi voinut käyttää enemmänkin aikaa, mutta harjoituksen sisältöön tällä ei olisi ollut vaikutusta. Todennäköisimmin olisimme lisänneet suunnitelmaan kohdan ”jos aikaa jää”. Tarkempi valmistautuminen mallinnusharjoituksen pitämiseen olisi ollut paikallaan huomioiden se, että emme koskaan aikaisemmin olleet vetäneet mallinnusta.

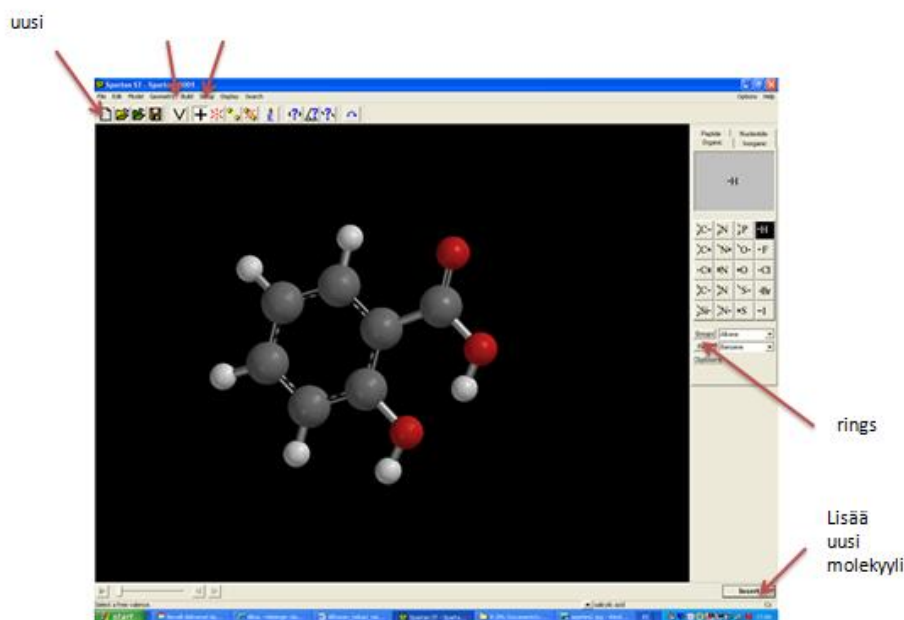
Kevään kiireiden vuoksi raportin laatiminen jäi liian viime tippaan, jolloin työnjaon suunnittelu jäi osittain sattumanvaraiseksi. Työt eivät varmaankaan jakautuneet tasapuolisesti ja raportin rakenne voi olla osittain hajanainen.

Liitteet

1. Mallinnusohje oppilaalle

1. Ensimmäisessä mallinnusvaiheessa mallinnetaan kaupallisella Spartan-molekyylimallinnusohjelmalla aspiriinisynteesin lähtöaineet: etikkahapon anhydridi sekä salisyylihappo.

Rakennetaan molekyylit avaamalla uusi työlehti kohdasta File → New (tai vastaavasti ensimmäisestä työkalurivin kuvakkeesta). Nyt näytön oikeaan reunaan ilmestyy työskentelylehti, josta valitaan molekyyleihin tarvittavat atomit ja valmiit rakenteet (kuten esim. bentseeni-renkaan saa valikosta kohdasta Rings). Atomin saa ruutuun painamalla hiiren vasenta näppäintä. Katselumoodiin pääsee painamalla työkalurivin isoa V-kuvaketta. Ja vastaavasti +-kuvakkeella saa jatkettua molekyylin rakentamista.



Kuva 2. Molekyylin rakentaminen mallinnusohjelmalla.

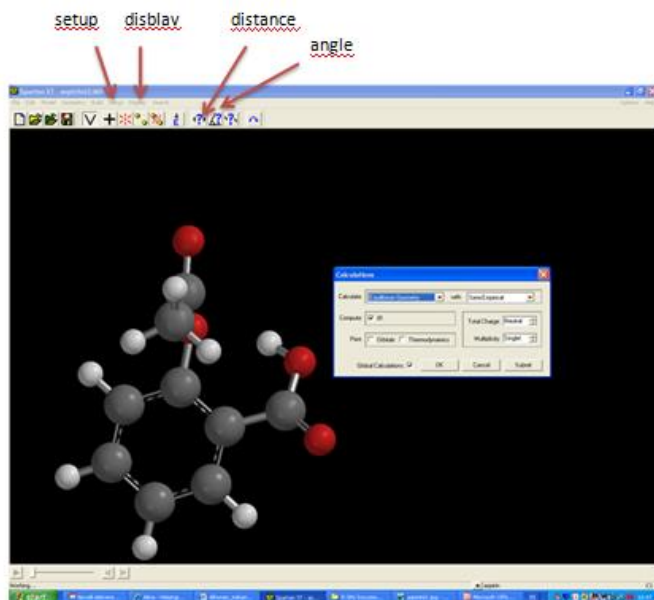
Jos haluaa uuden molekyylin samaan näkymään, jossa jo on valmis molekyyli, niin paina oikeassa alanurkassa olevaa insert- näppäintä. Uuden molekyylin voi tehdä myös valitsemalla yläpalkista puhtaan sivun, kuvakkeesta new, uusi.

2. Seuraavaksi mallinnetaan aspiriinimolekyyli ja tutkitaan mallinnettua molekyyliä seuraavilla tavoilla:

- Optimoidaan aspiriinin rakenne laskemalla molekyylin tasapainogeometria
- Tutkitaan molekyylin sidospituuksia ja -kulmia
- Tarkastellaan aspiriinin IR-spektriä ja suurimpien intensiteettien sidosvenytyksiä

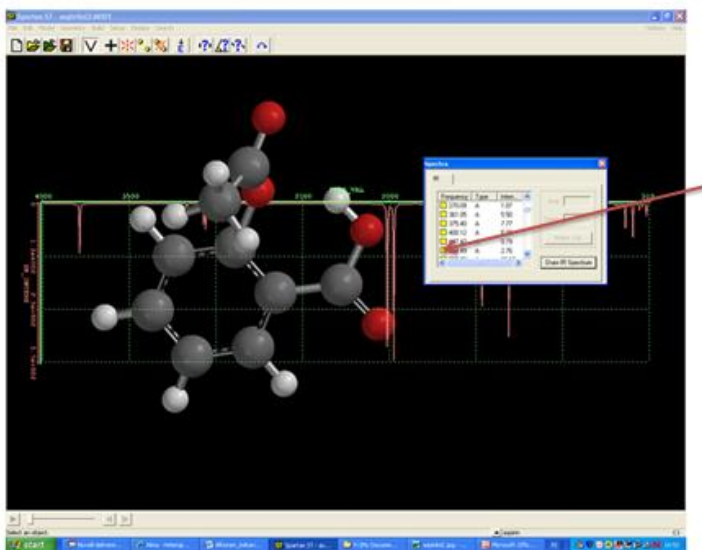
Aspiriinin tasapainogeometria lasketaan valitsemalla valikko Setup → Calculations. Valittuna on valmiina Equilibrium Geometry. Laskutasoksi voidaan valita Semi-Empirical, jolloin lasku ei vie kauaa aikaa. Lisäksi pitää muista rastia kohta IR. Tämän jälkeen painetaan Submit ja tallennetaan tiedosto.

Kun Spartan on lopettanut laskemisen voidaan mitata sidoskulmia ja –pituuksia. Sidoskulmien mittaus tapahtuu valitsemalla ylhäällä olevista kuvakkeista Angle-kuvaketta. Tämän jälkeen aktivoidaan hiiren vasemmalla näppäimellä kolme atomia, joiden välistä kulmaa halutaan mitata. Sidospituuksien mittaus suoritetaan samoin, mutta valitaan kuvakkeeksi ”Distance” ja aktivoidaan kaksi vierekkäistä atomia.



Kuva 3. Tasapainogeometrian laskeminen ja sidoskulmien ja –pitoisuuksien mittaaminen.

Lopuksi IR-spektrin tutkiminen tapahtuu valitsemalla valikosta Display → Spectra. IR-spektri voidaan piirtää klikkaamalla Draw IR-spectrum-kohtaan auenneessa ikkunassa.

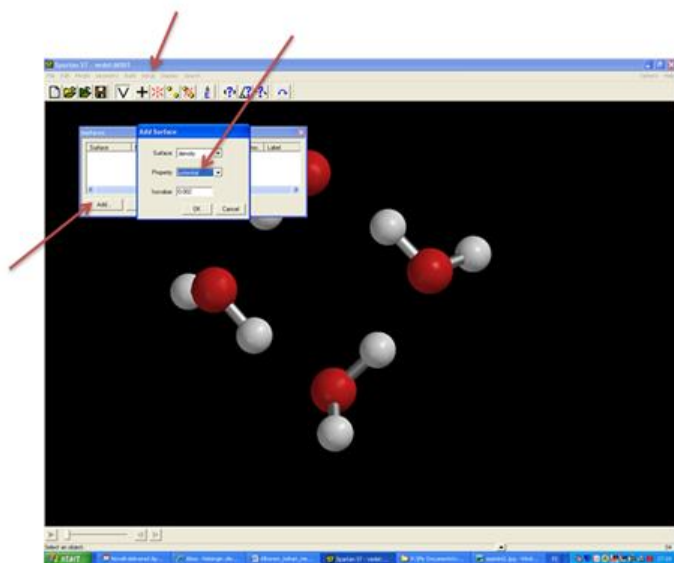


Kuva 4. IR-spektri

Sidosvenytyksiä voidaan nyt tutkia ruksaamalla eri taajuuksia lasketusta spektristä. Suurimman intensiteetin venytykset on helposti löydettävissä taulukosta.

3. Viimeisessä mallinnusvaiheessa mallinnetaan Spartanilla vesimolekyylejä sekä niiden väliset vetysidokset ja mitataan mallinnetusta vesimolekyylistä sidoskulma sekä lasketaan elektroni-tiheuspinnat.

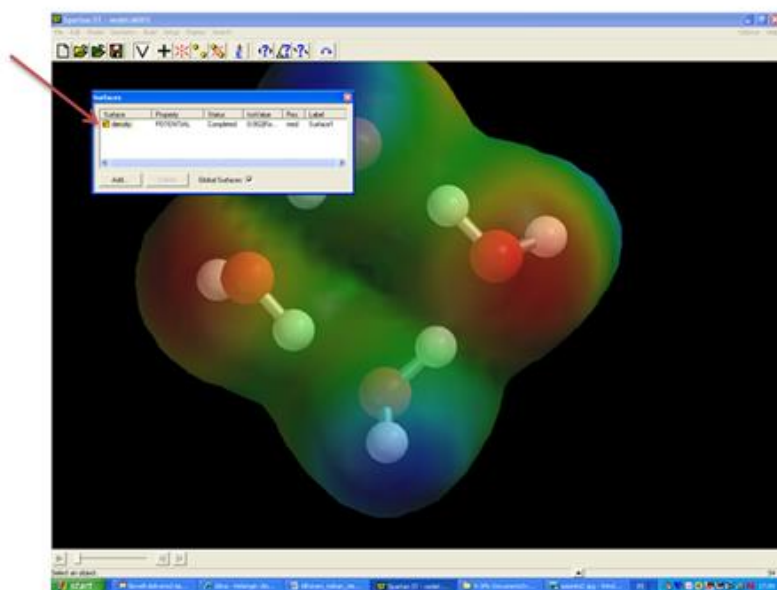
Elektronitiheuspinnat lasketaan valitsemalla valikosta Setup → Surfaces. Aukeavasta ikkunasta painetaan Add-näppäintä ja Add surface-ikkunaan pinnaksi (Surface) valitaan ”density” ja ominaisuudeksi (Property) valitaan ”potential”. Minkä jälkeen painetaan OK ja suljetaan Surfaces-ikkuna.



Kuva 5. Elektronitiheuspinnan lisääminen vesimolekyyleihin.

Tämän jälkeen suoritetaan taas Tasapainogeometria laskut samoin kuin edellä kohdassa 2. (Laskutasona voidaan tosin käyttää nyt tasoa: Hartree-Fock/3-21G).

Laskun jälkeen saadaan vesimolekyyliden potentiaalipinta näkyviin menemällä Display → Surfaces-ikkunaan ja laittamalla rasti keltaiseksi muuttuneeseen density-ruutun. Potentiaalipinnan tyyliä voi muuttaa painamalla hiiren vasenta näppäintä ja valitsemalla oikealta alhaalta valikosta haluamansa tuulin (Style).

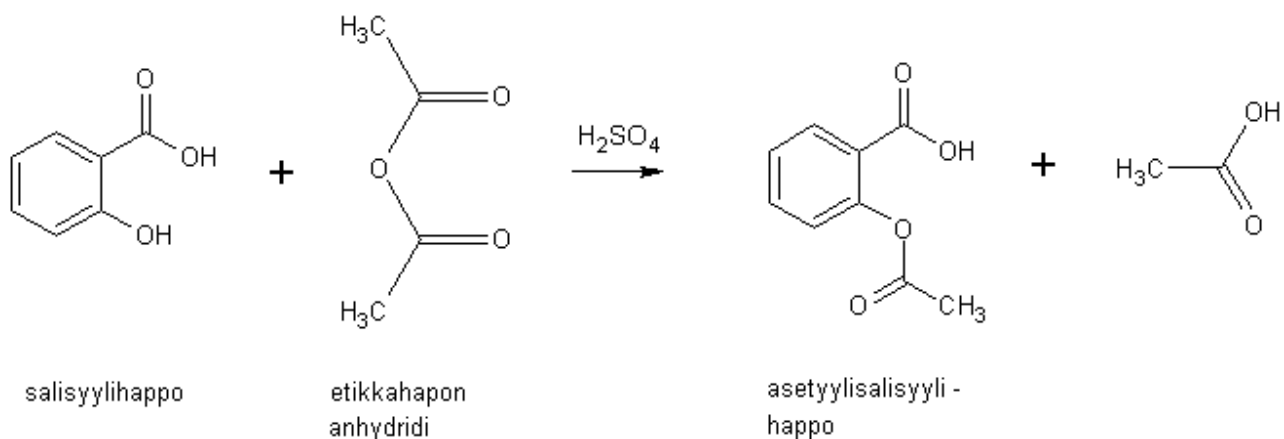


Kuva 6. Vesimolekyylien elektronitiheyspinta esitettynä muodossa ”transparent”, läpinäkyvä.

2. Mallinnustuokio, tehtäväpaperi oppilaille

1.4.2010

1. Alapuolella on aspiriinin reaktioyhtälö



- Mikä on toisen reaktiotuotteen nimi?
-

- Miksi reaktioastiaan lisätään rikkihappoa?
-

2. Mallinnetaan seuraavaksi Spartan-mallinnusohjelmalla lähtöaineet. Seuraa ohjaajan antamia ohjeita.

Mallinnuksen jälkeen vastaa seuraaviin kysymyksiin:

- Mitä funktionaalisia ryhmiä löydätte lähtöaineista?
-

- Mikä on rengasrakenteisessa yhdisteessä oleva rengasrakenne nimeltään?
-

- Mikä on rengasrakenteisen yhdisteen nimen loppupääte? Onko kyseessä alkoholi vai jotain muuta?
-

- Verratkaa työhjeessa olevaa rakennekaavaa molekyyllimallinnuksesta saatuun kuvaan etikkahapon anhydridistä. Miksi anhydridin kaksoissidoksilla sitoutuneet happiatomit asettuvat ”eri puolille molekyyliä”?
-

3. Seuraavaksi mallinnetaan aspiriinimolekyyli. Katso mallia tehtäväpaperissa olevasta reaktioyhtälöstä.

Tutkitaan mallinnettua molekyyliä seuraavilla tavoilla:

- Optimoidaan aspiriinin rakenne laskemalla molekyylin tasapainogeometria
- Tutkitaan molekyylin sidospituuksia ja -kulmia
- Tarkastellaan aspiriinin IR-spektriä ja suurimpien intensiteettien sidosvenytyksiä

Kirjoita alla olevaan taulukkoon mitaamasi sidospituudet ja -kulmat

sidos	pituus	kulma
C-C		
C=C (bentseeni)		
C-OH		
C=O		

- Miksi bentseenirenkaan sidospituudet ja -kulmat ovat eripituisia ja -suuruisia?
-

- Mitä mielestäsi tarkoittaa molekyylin tasapainogeometria?
-

- Tutkitaan IR-spektriä. Spektristä nähdään, että molekyyli ja sen sisäiset sidokset eivät ole staattisia, vaan jatkuvassa liikkeessä. Mitkä ovat ominaisia venytyksiä aspiriinimolekyyllille ts. mitä siirtymiä tapahtuu eniten? Miten tätä tietoa voidaan yleisesti hyödyntää molekyylien tutkimisessa?
-

4. Vesimolekyylien tutkiminen

- Mittaa mallinnetusta vesimolekyylistä sidoskulma:

- Mitä pystyt päätellä neljälle H₂O-molekyylille mallinnetuista elektronitiheyspinnoista?

3. Aspiriinin historiaa

Jo Hippokrateen kirjoituksissa kerrotaan pajun kuoresta tehdyn jauheen lievittävän kipua, kuumetta ja päänsärkyä (salix, paju). Pajun kuori sisältää salisiini-nimistä ainetta. Salisiinista saadaan hapettamalla ja hydrolysoimalla salisyylihappoa. Nykyisin salisyylihappoa valmistetaan synteettisesti fenolista ja hiilidioksidista.

Aspiriinin historian voidaan katsoa alkavan vuodesta 1863 Friedrich Bayer & Co:n väritehtaan perustamisesta. Bayer siirtyi farmakologian alalle 1880-luvulla värituotannon heikentyessä. Bayer ryhtyi markkinoimaan värituotannon sivutuotetta, fenasetiinia. Kivihilitervasta valmistetulla fenasetiinilla on kuumetta alentavaa ja kipua lievittävää vaikutusta.

Aspiriinin eli asetosalisyylihapon syntetisoi ensimmäisenä saksalainen kemisti **Charles Gerhardt** v. 1853. Keksintö jäi unholaan kunnes se tehtiin uudestaan. Kunnia lääkkeen keksimisestä on annettu Bayerin kemistille Felix Hoffmannille. Hoffmannin isä kärsi nivelkivuista ja käytti lääkkeenä jo tuolloin massatuotannossa ollutta salisyylihappoa. Hän kuitenkin kärsi lääkkeen sivuvaikutuksista ja pahasta mausta. Hoffman esteröi salisyylihapon fenolisen OH-ryhmän ja sai tällä tavoin yhdisteen, jonka happamuus on vähäisempi kuin salisyylihapon ja joka liukenee hyvin veteen sekä hydrolysoituu elimistössä salisyylihapoksi.

Lääke otettiin jauhemuodossa käyttöön vuonna 1899 ja se valloitti hetkessä markkinoiden ykkösaseman. Tablettimuotoinen valmiste tuli markkinoille 1915. Bayer joutui luopumaan Aspirinin® kauppanimestä Saksan hävittyä ensimmäisen maailmansodan Versaillesin rauhansopimuksen ehtona 1919.

Aspiriini lievittää kipua, kuumetta ja tulehdusta. Lisäksi se estää veren hyytymistä, joten aspiriinilla on merkitystä myös sydänveritulpan ehkäisyssä. Aspiriini ärsyttää happamuudellaan limakalvoja.



Kuva 1. Aspiriini

Lähteet:

Kivun hoidon ja lääketieteen historia.
http://personal.fimnet.fi/laaketiede/hanski.tapiovaara/kivun_historiaa.htm. Luettu 21.03.2010

Lääkekemiaa, asetyylisalisyylihappo eli aspiriini.
<http://www.helsinki.fi/kemia/opettaja/aineistot/laakkeet/aspiriini.htm>. Luettu 23.03.2010

4. Kysymyslomake mallinnusharjoitukseen liittyen

Vastaisiko ystävällisesti seuraaviin kysymyksiin. Autat meitä kehittämään työtämme. **Kiitos!!**

Olen tyttö _____ poika _____

Kysymyksiä mallinnuksesta ja mallinnusharjoituksesta:

Rengasta mieleisesi vaihtoehto asteikolla:

1=täysin eri mieltä 2=eri mieltä 3=o.k 4=samaa mieltä 5= täysin samaa mieltä 0=en osaa sanoa

1. Tietokoneen käyttö on minulle helppoa	1	2	3	4	5	0
2. Pidän tietokoneella työskentelystä	1	2	3	4	5	0
3. Tietokoneen käyttö kemian opiskelussa tukee oppimistani	1	2	3	4	5	0
4. Teen mieluummin kokeellisia töitä, kuin käytän tietokonetta	1	2	3	4	5	0
5. Mallinnus oli minusta mielenkiintoista	1	2	3	4	5	0
6. Mallinnus auttoi ymmärtämään kemiaa molekyyalitasolla	1	2	3	4	5	0
7. En oikein ymmärtänyt mallintamisen tarkoitusta	1	2	3	4	5	0
8. Mallinnuksen avulla oppii uusia asioita	1	2	3	4	5	0
9. Tekisin mallinnusharjoituksia mielelläni myös koulussa	1	2	3	4	5	0
10. Voisin mallintaa vapaa-ajallakin	1	2	3	4	5	0
11. Haluaisin oppia lisää mallinnusta	1	2	3	4	5	0
12. Todennäköisesti tulen mallintamaan joskus jatkossakin	1	2	3	4	5	0
13. Mallinnus lisäsi kiinnostusta kemiaa kohtaan	1	2	3	4	5	0
14. Mallinnusharjoitukseen olisi voinut käyttää enemmän aikaa	1	2	3	4	5	0
15. Minulla oli vaikeuksia pysyä mukana mallinnusharjoituksessa	1	2	3	4	5	0
16. Sain riittävästi apua ja neuvoja niitä tarvitessani	1	2	3	4	5	0
17. Mallinnusharjoituksen vetäjät onnistuivat tyydyttävästi	1	2	3	4	5	0

Kertoisitko lyhyesti, opitko jotain uutta mallinnusharjoituksessa? Selkenikö kenties jokin hieman epäselväksi jäänyt asia?

5. Kyselytutkimuksen tulokset taulukoituna.

Opiskelijoille mallinnuksen jälkeen esitetyt kysymykset	Ka	Opp. 1	Opp. 2	Opp. 3	Opp. 4	Opp. 5	Opp. 6	Opp. 7	Opp. 8	Opp. 9	Opp. 10	Opp. 11	Opp. 12	Opp. 13	Opp. 14	Opp. 15	Opp. 16	Opp. 17	Ka tytöt	Ka pojat
Tietokoneen käyttö on minulle helppoa	4,0	3	4	4	3	3	4	3	5	5	5	5	3	4	4	5	3	5	3,4	4,4
Pidän tietokoneella työskentelystä	2,9	2	3	3	2	2	4	3	4	4	4	4	2	2	1	4	2	4	2,7	3,1
Tietokoneen käyttö kemian opiskelussa tukee oppimistani	3,0	2	4	3	3	3	4	3	4	3	4	4	2	3	1	3		2	3,1	2,9
Teen mieluummin kokeellisia töitä kuin käytän tietokonetta	4,0	4	3	3	4	4		5	4	3	3	3	5	4	5		5	5	3,8	4,1
Mallinnus oli minusta mielenkiintoista	3,6	4	2	4	4	4	4	3	4	3	4	3	3	4	3	4	4	5	3,6	3,7
Mallinnus auttoi ymmärtämään kemiaa molekyyllitasolla	3,6	3	3	4	3	4	4	3	4	4	3	2	3	3	4	5	4	5	3,4	3,7
En oikein ymmärtänyt mallintamisen tarkoitusta	1,9	4	2	3	3	2	2	2	1	1	2	1	1	2	1	1	1	4	2,6	1,5
Mallinnuksen avulla oppii uusia asioita	3,2	3	3	4	4	3	3	2	3	4	3	4	3	3	3	3	3	4	3,1	3,3
Tekisin mallinnusharjoituksia mielelläni myös koulussa	3,1	4	4	4	4	3	5	1	4	3	2	4	1	2	1	3		5	3,6	2,8
Voisin mallintaa vapaa-ajallakin	1,6	2	1	2	2	3	2	1	1	1	2	1	1	1	1	1		3	1,9	1,3
Haluaisin oppia lisää mallinnusta	2,5	4	2	3	3			1	3	2	4	3	1	2	1	2		4	2,6	2,4
Todennäköisesti tulen mallintamaan joskus jatkossakin	2,4	3	2	4	4			1	3	2	3	3	1		1	2			2,8	2,1
Mallinnus lisäsi kiinnostusta kemiaa kohtaan	2,6	3	3	3	3	3		1	3	2	4	3	1		1	3		4	2,7	2,6
Mallinnusharjoitukseen olisi voinut käyttää enemmän aikaa	2,4	2	3	3	2	3	3	4		1	3	2	1	3	1	2	1	5	2,6	2,1
Oli vaikeaa pysyä mukana harjoituksessa	1,9	2	1	3	1	2	1	5	1	1	1	1	5	2	1	2	1	2	2,1	1,7
Sain riittävästi apua ja neuvoja niitä tarvitessani	4,5	4	5	4	5	4	5	5		1	5	5	5	4	5	5	5	5	4,1	4,4
Mallinnusharjoituksen vetäjät onnistuivat tyydyttävästi	3,8	3	5	3	4	3	4	3	4	5	5	4	1	2	5	3	5	5	3,6	3,9

