

Mari Liukkonen
mari.liukkonen@helsinki.fi
Jaana Herranen
jaana.herranen@helsinki.fi
Mikko Laurila
mikko.laurila@helsinki.fi
Johanna Kuronen
johanna.kuronen@helsinki.fi

Funktionaaliset ryhmät

29.4.2008

Luokka-aste ja työn tavoitteet

Työ on tarkoitettu lukion 2. kurssilaisille. Työssä on tavoitteena palauttaa mieleen funktionaalisia ryhmiä, ymmärtää orgaanisten yhdisteiden rakenteita (lops, 2004) ja tutustua samalla tietokoneella tehtävään molekyylimallinnukseen.

Oppilaat käyttävät työssä *ChemSketch* -ohjelmaa, jonka avulla he muodostavat ohjeen mukaan molekyylejä. Tunnin aluksi käydään nopeasti oppilaiden kanssa ohjelman käyttöä läpi esimerkkimolekyylin (propanaali) kanssa. Sen jälkeen siirrytään varsinaiseen työhön. Työohjeessa on kunkin molekyylin kohdalla pieni tietoisku molekyylistä, jolloin työ tulee liitettyksi arkipäivän sovelluksiin ja kemian teollisuuteen. Kun oppilaat saavat itse muodostaa molekyylit, jokainen joutuu itse pohtimaan tehtävää. Jokainen voi myös edetä omaan tahtiinsa, jolloin oppiminen on yksilöllisempää. Jo muodostettuja molekyylejä voi kääntää ja tarkastella eri suunnista, jolloin avaruudellinen hahmottaminen helpottuu. 3D-mallin avulla atomien suhteelliset koot tulevat esille.

Työohje

1. Lähdetään liikkeelle etaanimolekyylistä, joka on normaalioloissa kaasumainen hiilivety. Etaani on hajuton ja mauton ja pääasiassa sitä saadaan maakaasusta. Etaania käytetään lähinnä kemian teollisuudessa katalyyttinä eli se nopeuttaa reaktiota. Etaani kuuluu hiilivetyihin, jotka koostuvat nimensä mukaisesti hiilestä ja vedystä.

Piirrä etaanimolekyyli.

Selvitä molekyylistä seuraavat asiat. Valitse Tools - Calculate - All properties ja Copy to Editor.

Molekyylikaava: _____

Kaavamassa: _____

Koostumus (massa-% kutakin alkuainetta): _____

Tiheys: _____

(Vertaa taulukkokirjaan)

2. Etanolin hydroksyyli-ryhmä tekee sen polaariseksi ja veteen liukenevaksi. Etanolin hiilivetyrunko taas mahdollistaa sen liukenemisen orgaanisiin yhdisteisiin, kuten hiilivetyihin, bensiiniin tai dieselöljyyn. Etanolia voidaankin käyttää polttoaineena joko sellaisenaan tai bensiiniin sekoitettuna. Etanolista saadaan tislauksella seos, joka sisältää korkeintaan 96 %:a etanolia ja loput vettä (väkiviina). Etanolia voidaan käyttää myös desinfiointiaineena, sillä väkevä alkoholi tappaa pieneliöitä. Etanolia voidaan valmistaa käymisreaktion avulla ja sitä syntyy myös pieniä määriä elimistössä.

Muodosta etaanista etanoli.

Mitä voit kertoa atomien koosta? _____

Miksi? _____

3. Alkoholeja voidaan hapettaa karboksyylihapoiksi käyttämällä voimakasta hapetinta. Karboksyylihapot ovat hiiltä sisältäviä orgaanisia happoja. Funktionaalisena ryhmänä karboksyylihapoissa toimii karboksyyli-ryhmä $-\text{COOH}$. Luonteeltaan karboksyylihapot ovat heikkoja happoja.

Etikkahappoa käytetään mm. kasvien, juuresten ja maustevihannesten säilöntäaineena. Useat elintarvikkeiden pilaantumista aiheuttavat mikrobit kuolevat happamissa oloissa. Etikkahappo ei kuitenkaan ole liian hapan. Teollisuudessa etikkahappoa käytetään reagenssina. Etikkahappoa tuotetaan sekä synteettisesti, että bakteerituotannon avulla (10 %).

Piirrä etanolista etikkahappo.

Millainen avaruus rakenne molekyylillä on? _____

Mitkä atomit ovat samassa tasossa (tasossa, jossa on eniten atomeja)? _____

Miten muut atomit ovat asettuneet? _____

Määritä molekyylin sidoskulmat _____

Määritä $\text{C}=\text{O}$ -sidoksen sidospituus _____

4. Etikkahapon ja etanolin reagoidessa muodostuu etikkahapon etyyliesteri eli etyyliasettaatti. Se on väritön neste ja sillä on tunnusomainen haju. Etyyliasettaattia käytetään perhosten keräilyssä niiden tainnuttamiseen. Liimojen ja kynsilakan poistoaineissa on teollisesti valmistettua etyyliasettaattia.

Piirrä etikkahapon ja etanolin välinen reaktio sekä muodostuva etyyliasettaatti.

Mikä on toinen reaktiotuote? _____

Arviointilomake:

1. Opitko mitään uutta? Mitä?

2. Oletko aikaisemmin käyttänyt molekyylimallinnusohjelmia? Jos olet, niin mihin tarkoitukseen?

3. Mikä oli harjoituksessa hyvää?

4. Miten harjoitusta voisi parantaa?

5. Kuinka mielenkiintoinen harjoitus oli asteikoilla 1-5?

Esimerkki, jonka avulla harjoitellaan ohjelman käyttöä. Jaetaan oppilaille.

Piirretään *Chemsketch*illä propanaalimolekyyli

- Avaa *Chemsketch*-ohjelma.
- Vasemmalla laidassa työkalurivillä on eri alkuaineiden kuvakkeita. Napsauta hiilen (C) kuvaketta.
- Piirrä nyt propaani: Siirrä osoitin piirtotilaan. Paina hiiren vasen painike pohjaan ja vedä sidosviiva. Vapauta painike. Toista. Nyt sinulla pitäisi olla propaanimolekyyli.
- Sitten valitse työkaluriviltä hapen kuvakkeen (O). Siirrä osoitin toisen päätyhiilen päälle. Paina painike pohjaan, vedä sidosviiva ja päästä irti. (Syntyi propanoli).
- Napsauta sidosviivaa. Sidos muuttuu nyt kaksoissidokseksi (Propanaali).
- Valitse molekyyli: Valitse toiselta työkaluriviltä yllä painikkeet *Lasso On* (neljäs vasemmalta) ja *Select/Move* (ensimmäinen vasemmalta). Siirrä osoitin molekyylin viereen. Paina hiiren vasen painike pohjaan, kierrä molekyyli ja vapauta painike.
- Napsauta sitten painiketta *3D Optimization* (toinen työkalurivi ylhäältä, toinen oikealta). Nyt molekyyli saa näennäisen 3D-muodon ja sidospituudet tasoittuvat.
- Voit vielä nimetä molekyylin. Valitse molekyyli. Valitse Tools - Generate -Name for Structure. Molekyylin alle pitäisi ilmestyä sen nimi englanniksi. (Toimii yksinkertaisille molekyyleille.)

Siirrytään sitten kolmiulotteiseen mallinnukseen.

- Valitse molekyyli lassoamalla. (Onhan ylemmän työkalurivin Structure -painike pohjassa.)
- Paina *3D-Viewer* (ylin työkalurivi, oikealla). Ohjelma avaa nyt uuden ikkunan, jonka keskellä molekyyli on tikkumallilla esitettyinä.
- Paina työkaluriviltä *3D Optimization*. Voit muuttaa molekyylin esitystapaa valitsemalla *View* ja sopiva mallinnustapa. Kokeile eri mallinnustapoja. (Esim. Wireframe, stick, balls and sticks, disks, spacefill).
- Voit myös käänellä samalla molekyyliä. Tähän sopivia painikkeita työkalurivillä on mm. *Rotate* ja *3D Rotate*. Automaattisen pyörytyksen saa päälle työkalurivin painikkeista *Auto Rotate* tai *Auto Rotate and Change Style*, joka myös muuttaa molekyylin tyyliä.
- Sidokulman saat näkyviin, klikkaamalla sivun yläreunasta *Angle*-painiketta. Tämän jälkeen valitse kolme atomia, joiden välillä haluttu kulma on. Voit myös muuttaa kulmaa.
- Sidospituus saadaan klikkaamalla sivun yläreunassa olevaa *Bond Length*-painiketta. Tämän jälkeen valitaan kaksi atomia, joiden välillä sidos on. Voit myös muuttaa sidospituutta.

Työohjeen vastaukset -jaettiin oppilaille

1. Piirrä etaanimolekyyli.

Selvitä molekyylistä seuraavat asiat. Valitse Tools - Calculate - All properties ja Copy to Editor.

Molekyylikaava:

Molecular Formula: C₂H₆

Kaavamassa:

Formula Weight: 30,06904

Koostumus (massa-% kutakin alkuainetta):

Composition: 79,89 m-% hiiltä ja 20,11 m-% vetyä___

Tiheys:

Density: 0,488±0,06 g/cm³ vrt. taulukko 1,35 kg/m³. Tulokset eroavat paljon toisistaan, mutta suurin syy lienee, ettei ohjelma tunnista etaanin olevan kaasua normaaliolosuhteissa, jolloin tiheys perustuu suoraan laskennalliseen tietoon.

2. Etanoli

Mitä voit kertoa atomien koosta?

Vetyatomit ovat selvästi pienempiä kuin hiili- ja happiatomit. Happiatomi on pienempi kuin hiiliatomi.

Miksi?

Vedyt ovat pienimpiä atomeja, joiden säde on noin 30 pm. Hiiliatomin säteen pituus on 77 pm ja hapen 66 pm. (katso taulukkokirja) Atomien suhteellisiin kokoihin vaikuttaa niiden sisäinen rakenne esimerkiksi elektronien määrä ja sijoittuminen ytimen ympärillä.

3. Etikkahappo

Millainen avaruusrakenne molekyyllillä on?

Etikkahapossa kaksi hiiltä on liittynyt toisiinsa yksinkertaiselle sidoksella. Toisessa hiilessä sijaitsee etikkahapon funktionaalinen ryhmä –COOH, jossa hiileen on sitoutunut happi kaksoissidokselle ja hydroksyyli-ryhmä –OH. Toiseen hiileen on sitoutunut kolme vetyä, jotka ovat sijoittuneet hiileen tetraedriseen muotoon muodostaen toisiinsa nähden 109,5 asteen kulmia.

Mitkä atomit ovat samassa tasossa (tasossa, jossa on eniten atomeja)?

Hiili ja happi atomit sekä OH-ryhmän vety ovat samassa tasossa.

Miten muut atomit ovat asettuneet?

Toisessa hiilessä olevat vedyt ovat asettuneet noin 109,5° asteen kulmassa hiilen ympärille pois päin toisesta hiilestä. Tämä rakenne on tyypillinen tetraedrimuoto, jota hiilellä esiintyy.

Määritä molekyylin sidoskulmat

O-C-O, C-C-O ja C-O-H 120° ; H-C-H ja H-C-C 90°

Määritä C=O -sidoksen sidospituus

1,241 Å eli noin 124 pm vrt. taulukkokirja 122 pm.

4. Piirrä etikkahapon ja etanolin välinen reaktio sekä muodostuva etyyliasetaatti.

Mikä on toinen reaktiotuote?

Vesi

Toteutus pedagogisesti: mitä työtapoja käytettiin ja miten

Kerroimme harjoituksen alussa ohjeistusta ohjelman käytöstä ja oppilaat tekivät samalla esimerkkiharjoitusta itse, jolloin he oppivat mallin avulla.

Sitten oppilaat saivat omatoimisesti tutkia kaikessa rauhassa harjoituksemme orgaanisia molekyyliä. Näin he oppivat tekemällä itse (toiminnallinen oppiminen) ja pohtimalla tekemiimme kysymyksiin vastauksia (konstruktiiivinen opetus). Tutkimusten mukaan konstruktiiivinen opetus edistää keskimäärin paremmin ajattelua, jossa ilmenee korkeatasoisia kognitiivisia prosesseja kuten arviointia, päättelyä ja selittämistä. (esimerkiksi Kallio 2004)

Harjoituksen aikana kiertelimme luokassa, katsoimme että kaikki pääsivät eteenpäin ja tarjosimme tarvittaessa apua. Koska jotkut oppilaat olivat toisia nopeampia, näytimme heille henkilökohtaisesti, mitä muuta ChemSketchillä voi tehdä tai ehdotimme omien molekyylien rakennusta. Näin nopeimmat oppilaat eivät joutuneet odottamaan vaan saivat tehdä haluamiaan malleja. Tämä toivottavasti lisäsi heidän motivaatiotaan kemian opiskeluun.

Harjoituksen lopuksi näytimme vielä tieteellisempää molekyylihallinnusohjelmaa Spartania, jota käytetään tutkimuksessakin. Oppilaat saivat jälleen kokeilla molekyylien piirtämistä.

Kallio, K. (toim.) 2004, *Museo oppimisympäristönä*, Suomen museoliiton julkaisuja 54. Helsinki: Suomen museoliitto ja Suomen Tammi Plus -projekti.

Arviointilomakkeen koonti

18 oppilasta 22:sta palautti arviointilomakkeen.

Ensimmäinen kysymys oli ”*Opitko mitään uutta? Mitä?*”. Oppilaista 16 vastasi kyllä, yksi ”en oikeastaan” ja yksi jätti vastaamatta. 13 opiskelijaa vastasi, että he oppivat käyttämään ChemSketch-ohjelmaa paremmin. Lisäksi kaksi oppilasta oppivat sidoskulmien määrittämisen, kaksi uusia asioita molekyyleistä ja yksi sen, kuinka prameaa yliopistolla on.

Toiseen kysymykseen ”*Oletko aikaisemmin käyttänyt molekyyllimallinnusohjelmia? Jos olet, niin mihin tarkoitukseen?*” 17 oppilasta vastasi kyllä ja 1 oppilas ei. Suurin osa ohjelmaa kokeilleista on vilkaissut sitä nopeasti koulussa lähinnä tutustumismielessä. Kolme sanoi piirtäneensä sen avulla molekyyliä ja yksi oli harjoitellut sillä koulussa edellisen kurssin asioita.

Kolmas kysymys oli ”*Mikä oli harjoituksessa hyvää?*”. Oppilaat vastasivat:

- ”Esitteiden saaminen. Positiivista oli myös hienomman ohjelman esittely ja vastausmonisteen saaminen, myös ChemSketchin käyttöohje voi osoittautua hyödylliseksi”,
- ”sai itse tehdä omassa rauhassa”,
- ”Kokonaisuus oli hyvä”,
- ”sai tehdä ja nähdä mallit eri muodoissa, kuten rakennemalleina”,
- ”oppii molekyylien rakennetta”,
- ”sai vähän kertausta”,
- ”kohtuullisen selkeä. Erilainen kuin yleensä”,
- ”se kertasi unohtuneita asioita ja oppi samalla uutta”,
- ”3D-ohjelma” x 3,
- ”että sai tehdä paljon” x 2,
- ”hienot ohjelmat”,
- ”saa uuden kuvan molekyylien rakenteesta, eli ne eivät todellakaan ole kaksiulotteisia”,
- ”kemian havainnollistaminen”,
- ”monipuolista, sai apua tehtäviin heti kun pyysi”.

Lisäksi yksi oppilas oli jättänyt tähän kohtaan vastaamatta.

Neljänteen kysymykseen ”*Miten harjoitusta voisi parantaa?*” viisi oppilasta oli jättänyt vastaamatta. Lisäksi kolme oppilasta vastasi ”ei mitenkään” ja yksi kirjoitti, että ”ihan hyvä harjoitus”. Muita kommentteja kysymykseen:

- ”alussa ohjelman käytön opettelu eteni mielestäni liian nopeasti”,
- ”voisi olla haastavampi, esim. voisi rakentaa jonkin sokerin”,
- ”aluksi käytyä opastusta voisi hidastaa, jotta pysyisi alusta alkaen kärryillä”,
- ”ohjelman voisi kääntää suomeksi”,
- ”selvemmat kysymykset”,
- ”taimmaisessa rivissä näkyi huonosti ja opetus tuli eturivin mukaan, jolloin helposti jäi kärryiltä”,
- ”voisi mennä vähän hitaammin eteenpäin”,
- ”ohjeet tulivat välillä vähän epäselvästi”,
- ”yleistietoa, varsinkin muuta kuin itsestäänselvyyksiä, olisi voinut olla enemmän. Monistenivaskan kysymykset tuntuivat hieman hähliltä, eikä Maolista löytynyt etaanin tiheyttä. Luovaakin mainostetaan koulussa aivan tarpeeksi”.

Viimeinen kysymys oli: "*Kuinka mielenkiintoinen harjoitus oli asteikolla 1-5?*" Tähän saimme vastauksien keskiarvoksi 3.4722 eli noin 3.5. Arvosanjakauma on seuraavassa taulukossa:

Arvosana	Kappaletta
1-2	0
2-3	2
3-4	7
4-5	9
5	0

Kaiken kaikkiaan arviointilomakkeiden perusteella voi sanoa, että harjoitus onnistui hyvin. Oppilaat selvästi pitivät harjoituksesta ja kokivat sen hyödyllisenä (mm. vanhojen asioiden kertaus, atomien ja molekyylien rakenne). He myös pitivät siitä, että saivat edetä omaan tahtiinsa ja apua oli saatavilla tarvittaessa.

Palautteen perusteella voi todeta, että Chemskechin esittelyn olisi voinut hoitaa hieman rauhallisemmin. Myöskin ohjeistusta ohjelmien käyttöön ja harjoituksen tekemiseen olisi voinut parantaa.

Oppilaiden arvioidessa harjoituksen mielenkiintoisuutta saimme arvosanaksi 3.5. Tämä osoittaa, että oppilaat todella pitivät harjoituksesta ja olivat kiinnostuneita tietokoneella tehtävästä mallinnuksesta.