

## ***Raportti Perjantaipajasta 26.3.: Molekyyliden mallinnusta***

Kemian mallit ja visualisointi

Jan Jansson

Jaana Saarni

## Sisältö

Raportti Perjantaipajasta 26.3.: Molekyylien mallinnusta .....	1
1. Johdanto .....	3
2. Pedagoginen näkökulma .....	4
2.1 Pedagogiset perustelut .....	4
2.2 Opetustuokion tavoitteet .....	4
3. Opetuksen kemiallinen tausta .....	5
4. Toteutus .....	6
4.1 Pajan toteutus 26.3.2010 .....	6
4.2 Toimintaohjeet pajaa toteuttavalle opettajalle .....	8
5. Tutkimus .....	12
6. Itsearviointi .....	14
Lähteet .....	16
LIITE 1: Pajan ohjelma .....	17
LIITE 2: ChemSketch –pikaohje .....	18
LIITE 3: Divetymonoksidi-posteri .....	22
LIITE 4: Mallipohja .....	23
LIITE 5: Tyytyväisyyskysely .....	24

## 1. Johdanto

Toteutimme Kemian mallit ja visualisointi -kurssin projektityön vetämällä molekyylihallinnusta Töölön yhteiskoulun peruskoulun oppimäärää suorittaville aikuisopiskelijoille 26.3.2010 klo 15.15-18. Opiskelija-aines on maahanmuuttajapainotteista, mikä piti ottaa huomioon pajaa suunniteltaessa. Koululla järjestetään perjantaisin eri aineiden perjantaipajoja, joissa käsitellään soveltavasti aiheita peruskoulun eri aineiden oppisisältöjen suunnalla.

Molekyylihallinnus sopi hyvin perjantaipajan aiheeksi, koska sitä ei aikuisopetuksen normaalien kurssien puitteissa ole yleensä mahdollista järjestää niin, että oppilaat ehtisivät itsekin käyttää tietokoneita. Koska oli oletettavaa, että oppilaat eivät aiemmin ole molekyylihallintaneet ja koska opiskelijat olivat kemian perusopintojen eri vaiheissa, paja suunniteltiin yksinkertaiseksi molekyylihallintamiseen tutustumiseksi, joka ei vaadi merkittäviä aiempia tietoja.

## **2. Pedagoginen näkökulma**

### **2.1 *Pedagogiset perustelut***

Käytämme tässä normaalin perusopetuksen opetussuunnitelmaa, koska sen sisällöt ovat olennaisesti aikuisperusopetuksen kanssa samat ja paja on suunniteltu sovellettavaksi myös normaalin perusopetuksen piirissä.

Opetussuunnitelman perusteissa (POPS 2004) kemian opetuksen tehtäväksi mainitaan ”laajentaa oppilaan tietämystä kemiasta ja kemiallisen tiedon luonteesta sekä ohjata luonnontieteille ominaiseen ajatteluun, tiedonhankintaan ja tietojen käyttämiseen elämän eri tilanteissa. Opetus antaa oppilaalle persoonallisuuden kehittymisen ja nykyaikaisen maailmankuvan muodostamisen kannalta välttämättömiä aineksia ja se auttaa ymmärtämään kemian ja teknologian merkityksen jokapäiväisessä elämässä, elinympäristössä ja yhteiskunnassa.” Mallinnuspaja itse tekemisineen ja tiedonhakuineen antaa hyvät mahdollisuudet opiskelijoiden kehittyä kohti opetussuunnitelman perusteiden tavoitteita, vaikka opiskelijat ovatkin iältään perinteisen perusopetuksen kohderyhmää vanhempia. Opetussuunnitelman tavoitteista paja tukee erityisen hyvin tavoitetta: ”Oppilas oppii käyttämään luonnontieteellisen tiedonhankinnan kannalta tyypillisiä tutkimusmenetelmiä, myös tieto- ja viestintäteknikkaa, sekä arvioimaan tiedon luotettavuutta ja merkitystä.”

Valitsimme tutkittaviksi molekyyleiksi arkielämässä ja yhteiskunnassa tärkeitä orgaanisia yhdisteitä, joista opiskelijoita pyydettiin etsimään kemiallisten ja fysikaalisten ominaisuuksien lisäksi sovelluksia ja käyttöä arjessa ja merkitystä ihmiselle ja ympäristölle.

Motivoimme oppilaita tiedonhakuun ja työskentelyyn kertomalla heidän tekemiensä molekyyliesitteiden tai -postereiden tulevan näytille käytävään. Päädyimme tähän, koska työelämässä mitään suoritteita tai tekstejä ei tehdä vain yhtä ihmistä kuten tarkistajaa tai opettajaa varten, vaan yleisempään käyttöön. Ja kemiankin on hyvä näkyä koulun seinillä.

### **2.2 *Opetustuokion tavoitteet***

Opetustuokion tavoitteet jakautuvat kolmeen alaryhmään. 1) Kemian sisällöt 2) Mallinnusohjelman käytön oppiminen 3) Yleisten TVT-taitojen oppiminen.

Kemian sisällöistä oppilaat oppivat molekyylien avaruudellista rakennetta ja tunnistamaan sääntöjä, joiden mukaan Lewis-rakenteiden kaltaisia piirroksia voi molekyyleistä piirtää. Lisäksi oppilaat näkevät 2D-esityksen muuntamisen 3D-esitykseksi, mikä voi auttaa jatkossa 2D-esitysten visualisoimista oppilaiden ajatuksissa. Lisäksi tiedonhakuosuudessa oppilaat etsivät tietoa omasta

molekyylistä ja pajan lopussa tietoja yhdistetään. Pajan lopussa voidaan vetää johtopäätös siitä, että molekyylin ominaisuudet vaikuttavat aineen ominaisuuksiin.

Pajan tavoitteeksi otimme myös, että jokainen oppii mallintamaan molekyylin tietokoneohjelmalla. Tarkoituksena oli tutustua tutujen orgaanisten molekyyliden kuvaamiseen erilaisilla malleilla ja oppia ohjelman perustoimintoja. Tämän jälkeen ohjelman käyttöönottoon ja ohjelmalla tuotettujen kuvien tarkastelemiseen on normaaliopetuksessa matalampi kynnys.

Työssä yhdistettiin myös sellaisia taitoja kuin tekstitiedoston muokkaaminen, kuvan liittäminen tekstitiedostoon, yksinkertaista tiedostojen hallintaa ja toisaalta kemiallisen tiedon hakua internetistä. Osallistuessaan molekyylikirjaston luomiseen oppilaat tulevat monipuolisesti harjoitelleeksi tietokoneen käyttöä. Myös piirto-ohjelman käytössä tuotiin esille esimerkiksi pikanäppäinten ja näppäinyhdistelmien käyttöä, mitkä ovat hyviä perustietokonetaitoja.

### ***3. Opetuksen kemiallinen tausta***

ChemSketch-ohjelma on ohjelma, jolla voi nimenomaan piirtää kemiaa. Lisäksi sillä voi tehdä yksinkertaisia kolmiulotteisia esityksiä molekyyleistä, mutta näiden geometria perustuu yksinkertaiselle laskennallisuudelle eikä ohjelma havainnollista esimerkiksi elektronitiheyksiä. Yksinkertaisissa molekyyleissä ja perusopetuksen tasoisessa tarkastelussa tarkat sidospituudet tai siduskulmat eivät kuitenkaan vielä nouse esille. Palamista tai esteröitymistä ei vielä tarkastella niin tarkasti, että molekyylin hieman todellisuudesta poikkeava geometria vaikuttaisi näiden ilmiöiden ymmärtämiseen.

ChemSketchin puutteena on, että niissä voidaan havainnollistaa kerralla vain yhtä molekyylia eikä useamman molekyylin välisiä vuorovaikutuksia voida lainkaan havaita. Oppilaiden käsitys aineen rakenteesta sijoittuu usein jonnekin jatkuvan aineen (aine, joka on kaikkialla samanlaista ja jonka voi aina jakaa pienempiin osiin) ja partikkeleiden interaktioista syntyvän aineen (aine, jonka ominaisuudet syntyvät aineen rakenneosien keskinäisistä vuorovaikutuksista eivätkä yksittäisen rakenneosan ominaisuuksista) (esim. Renström et al. 1990) välille. Tyypillisesti molekyylillä ajatellaan olevan väri tai sulamispiste tai kemiallisten sidosten ajatellaan olevan elastisia tms. ChemSketchin tyyppinen ohjelma ei pysty havainnollistamaan molekyyliden välisiä vuorovaikutuksia, mutta vertaamalla eri aineiden ominaisuuksia ja molekyyliden rakenteita voidaan tehdä se johtopäätös, että rakenteella on vaikutusta aineen ominaisuuksiin kuten sulamispisteeseen ja kiehumispisteeseen.

Rakenteita piirrettäessä ChemSketch-ohjelmassa käytetään mallia, jossa kovalenttista sidosta kuvaa sidosviiva. Kovalenttisen sidoksen ajatellaan muodostuvan, kun kahden atomin elektroniorbitaalit muuttuvat yhteisiksi elektroniorbitaaleiksi hybridisaatiossa. Tällöin kahden eri atomin elektronit pariutuvat samalle orbitaalille. ChemSketchin mallinnustasolla yksittäiset elektronit tai edes orbitaalit eivät missään vaiheessa nouse esille. Opetustuokio on suunnattu eri vaiheessa perusopetuksen kemian opintoja oleville, joten ei välttämättä ole tarpeen tarkastella kemiallisen sidoksen muodostumista. Voidaan vain pitää sidosta objektina, joka sitoo atomeja toisiinsa. Kolmiulotteisia rakenteita tarkastellessa voi kuitenkin olla hyvä korostaa, ettei kemiallinen sidos ole konkreettinen objekti vaan elektronien avulla syntynyt sitoutuminen. Esimerkiksi space filling –malli, joka havainnollistaa atomien elektronipilvien kokoa häivyttää sidoksen näkyvistä kokonaan.

ChemSketchin kolmiulotteisissa malleissa on vaihtoehtona näyttää rautalankamalleja tai pallo-tikku –malleja tai nk. space filling –malleja. Mallien kokeilun yhteydessä voidaan tuoda esille, että osalla malleista ainoastaan korostetaan atomien keskinäisiä yhteyksiä kuten on 2D-malleissa. 3D-malleista taas osa painottaa atomien keskinäisiä sijainteja ja osalla malleista yritetään havainnollistaa atomien kokosuhteita tai molekyylin muotoa.

## **Toteutus**

### ***3.1 Pajan toteutus 26.3.2010***

Pajaa suunniteltaessa yritettiin ottaa huomioon se, että opiskelijat ovat eritasoisia, heidän kielitaitonsa vaihtelee ja he ovat erilaisin asentein tekemässä opintojaan. Perjantaipaja ei ole kaikille opiskelijoille pakollinen suoritus ja siihen osallistujien määrä vaihtelee. Lisäksi osa opiskelijoista tulee tunnille vasta yli tunnin myöhemmin S2-opinnoistaan, joten ohjelma oli suunniteltava joustavaksi. Oppilaiden piti olla mahdollista päästä mukaan työskentelyyn vaikka tulisivat myöhässä. Ohjelma on liitteenä (LIITE 1).

Ennen pajaa pyysimme koulun atk-tukihenkilöä lataamaan koneille ChemSketch –ohjelman, jolle ohjelman kehittäjät myöntävät ilmaisia oppilaitoslisenssejä. Teimme pikaohjeen ohjelman käyttöön (LIITE 2) ja mallin ”posterista”, jollaiset opiskelijat tekisivät omista molekyyleistään (LIITE 3). Pajan aluksi latasimme jokaiselle oppilaskoneelle kansion, jossa oli tekemämme ChemSketch -ohje, molekyylikorttipohja (LIITE 4) ja mallijuliste. Samat materiaalit jaettiin myös tulosteina joka

toisella koneella. Toimme opiskelijoille tietolähteiksi myös kokoelman yläkoulun ja lukion kemian kirjoja. Lisäksi valmistelimme kyselylomakkeen kartoittaaksemme opiskelijoiden kokemuksia mallinnuksen ja tiedonhaun kiinnostavuudesta (LIITE 5). Kyselylomakkeen kysymykset perustettiin Jenni Västinsalon pro gradu –tutkielmassa käyttämiin kysymyksiin.

Paja aloitettiin suunniteltuun aikaan sillä, että opiskelijoille esittäydettiin ja käytiin lyhyesti läpi tulevan pajan ohjelma pp-esityksen avulla. Tämän jälkeen opiskelijoita pyydettiin avaamaan työpöydälle tallennettu kansio, jossa olevat tiedostot esiteltiin oppilaille ja tarkennettiin pajan tavoitteena olevan posterin tekeminen jostakin molekyylistä. Opiskelijat asemoitiin istumaan jokainen omalle koneelle niin, että vierekkäisillä koneilla istui aina pari opiskelijaa. Oppilaita motivoitiin työn suorittamiseen kertomalla, että julisteet on tarkoitus laittaa esille koulun käytävälle työn tekemisen jälkeen.

ChemSketch-ohjelmaan tutustuminen aloitettiin alkuohjeen jälkeen. Osa opiskelijoista oli jo osannut avata tietokoneelta oikean ohjelman tässä vaiheessa ja kokeili sen käyttöä. Luokassa oli käytössä opettajan kone, jonka näyttö voitiin heijastaa valkokankaalle, josta opiskelijoiden oli mahdollista seurata opetuksen etenemistä.

Ohjaus seurasi työtä varten valmistettua ChemSketch –pikaohjetta (LIITE 2). Opiskelijoille kerrottiin aluksi mistä he voivat valita atomin ja kuinka tehdä sidoksia näiden välillä sekä poistaa atomeja. Tämän jälkeen opiskelijat saivat hetken itsenäisesti rakennella erilaisia molekyyliä. Selkien takana kierrellessä opiskelijat näyttivätkin keksivän monenmoisia häkkyröitä. Ensimmäisen kokeiluhuuman laannuttua palattiin ohjattuun tekemiseen ja opastimme jokaisen rakentamaan kuuden hiilen renkaan. Renkaista tuli epäsäännöllisen muotoisia, ja siitä pääsikin luontevasti ChemSketchin ominaisuuteen siistiä rakenteet. Siistimisen jälkeen oli luontevaa siirtyä 3D-visualisointeihin. Opiskelijat saivat kokeilla erilaisia malleja samalla sykloheksaanille. Erilaisista malleista ja niiden käyttötarkoituksista voisi puhua jo tässä vaiheessa, mutta päätimme jättää keskustelun myöhemmäksi. Oppilaita ohjastettiin myös vaihtamaan värejä 3D-esityksessä, mikä silminnähden herätti innostusta.

Opiskelijoille jaettiin omat tutkittavat molekyylit, joista hakea tietoja. Tarkoituksena oli ensin etsiä molekyylin rakenne sen järjestelmällisen nimen perusteella ja piirtää kuva, sitten etsiä käyttötarkoitustietoa ja muuta kiinnostavaa tietoa, joka oli tarkoitus esittää kuten liitteessä 4 on ohjeistettu.

Kuunteluindeksin mukaan opiskelijat kokivat molekyylien piirtämisen varsin kiinnostavana ja ihastelivat ääneen aikaansaannoksiaan. Kukaan ei käyttänyt oppikirjoja rakenteen tai muun tiedon etsimiseen, vaan tietoa haettiin internetistä. Oppilaille oli vaikeuksia tulkitta Wikipediaan viivapiirroksia, joissa kaikkia hiiliatomeja ei ole merkitty, mutta pienellä avustamisella tämäkin onnistui. Opiskelijat auttoivat helposti toisiaan tietokoneen käytössä ja kommentoivat toistensa aikaansaannoksia. Oppilaiden istuminen pareittain koneilla osoittautui keskustelua aktivoivaksi tekijäksi.

Rakenteen piirtämisen jälkeen opiskelijoita ohjastettiin kuvan tallentamiseen ja liittämiseen tekstitiedostoon. Kun kuvat oli liitetty tekstitiedostoon, aloitettiin aineen ominaisuuksien etsiminen. Monet tiedot löytyivät nopeiten ja helpoiten Wikipediasta.

Työn yhteydessä kävi ilmi, että suurella osalla opiskelijoista on heikot tietokoneenkäyttötaidot ja tässä kohtaa piti useasti esitellä esimerkiksi näppäinyhdistelmien käyttöä ja kuvan tallentamisessa piti kiinnittää huomiota siihen, että tiedosto tallennetaan oikeaan kansioon. Myös tiedoston nimeäminen järkevästi ja selvästi on huomiota kaipaava yksityiskohta.

Eri aikaan aloittaneiden opiskelijoiden työskentelyn aikatauluttaminen on haastavaa, toiset olivat jo valmiita omien molekyyliensä kanssa toisten vasta aloittaessa. Jälkikäteen totesimme, että opiskelijoita tuli tuokioon vielä ennakoituakin myöhemmin, viimeiset vasta kaksi tuntia aloituksen jälkeen. Heitä varten olisi pitänyt olla varastossa muutama todella yksinkertainen molekyyli. Koska viimeisillä opiskelijoilla ei ollut aikaa tehdä kokonaista julistetta, he harjoittelivat rakennekaavojen piirtämistä tietokoneella ja muuntamista kolmiulotteiseksi kirjoissa olevista 2D-malleista.

Oppilaita pyydettiin tallentamaan valmiit tuotokset verkkoasemalle luotuun kansioon.

### ***3.2 Toimintaohjeet pajaa toteuttavalle opettajalle***

**Hyvissä ajoin** ennen oppituntia kannattaa olla yhteydessä ACD Labsiin ja pyytää ilmaista oppilaitoslisenssiä ohjelmalle. Yhteydenottolomake löytyy ACD Labsin sivuilta. Lisenssin saamisen jälkeen voi pyytää koulun mikrotukihenkilöä tekemään asennuksen oppilaskoneille.

**Ennen tunnin alkua** kannattaa tallentaa ChemSketch-pikaohje, oppilaille tarkoitettu julistepohja ja mallijuliste (ks. liitteet) samaan kansioon yhteiselle verkkoasemalle, josta oppilaat voivat työn alkaessa käydä kopioimassa tiedostot oman koneensa kovalevyille. Jos yhteistä verkkolevyä ei ole käytössä, opettajan kannattaa kopioida kansio USB-muistitikulle ja käydä siirtämässä se koneisiin esimerkiksi työpöydälle, josta se helposti löytyy.



Tarkista myös, että videotykki toimii ja opettajan koneen tapahtumat on mahdollista näyttää oppilaille.

Halutessasi voit tulostaa ChemSketch-pikaohjetta. Paperin säästämiseksi ohjeita voi käyttää toistekin.

### **Tunnin aikana**

Tunti alkaa oppilaiden istuttamisella pareittain koneille niin, että jokaisella oppilaalla on oma kone tai parilla aina yksi. Opettaja esittelee tunnin ohjelman joko suullisesti tai esimerkiksi power point – tiedoston avulla.

Oppilaat kirjautuvat koneelle ja opettaja esittelee tunnin kansion sisällön oppilaille ja kertoo, että heidän pitää kopioida omalle koneelleen posteripohja, jota he muokkaavat, jos kansiota ei ole jo kopioitu joka koneelle.

Opettaja aloittaa ChemSketch-ohjelman esittelyn pikaohjeen mukaisesti. Opettajan kannattaa viitata usein pikaohjeeseen, jotta oppilaat osaavat etsiä siitä ohjeita työskennellessään itsenäisesti myöhemmin tunnilla. Ensin esitetään, miten lisätään atomeja ja sidoksia ja miten atomeja siirrellään ja poistetaan. Tämän jälkeen oppilaiden voidaan antaa hetki kokeilla erilaisia rakenteita. Jos opiskelijoiden koneilla on päällä viivapiirtoasetukset avataan yhdessä Tools > Structure Properties ikkuna ja muutetaan asetuksia pikaohjeen mukaisesti.

Oppilaita voidaan pyytää piirtämään jokin hiilivety ohjeiden perusteella ”piirtäkää kuusi hiiliatomia niin, että ne ovat renkaassa” tai heteroatomeja ja kaksoissidoksia sisältävä rakenne valmiin mallin perusteella.

Kun kaikilla oppilailla on haluttu rakenne valmiina, opettaja näyttää vetyjen lisäämisen rakenteeseen ja rakenteen siistimisen. Kannattaa näyttää oppilaille näppäinyhdistelmien käyttö. Kun kaikki ovat tehneet tämän rakenne 3D-optimoidaan ja siirrytään 3D-katseluun. Opettaja näyttää, miten tavalliseen katseluasemaan päästään takaisin klikkaamalla vasemmasta alareunasta oikeaa välilehteä. Tämän jälkeen opettaja kehottaa vaihtamaan esityksen mallia ja näyttää, miten atomien ja taustan väriä voidaan muokata.

Oppilaille jaetaan kullekin oma molekyyli. Molekyylejä voi jakaa esimerkiksi seuraavassa järjestyksessä:

- etaani, etanoli, etaanihappo
- glykoli
- metaani, metanoli, etaanihappo
- eteeni, etyyni
- propanoli, glyseroli
- oksaalihappo, bentseeni, ksylitoli, sorbitoli

Haastetta kaipaaville oppilaille voidaan jakaa

- bentsoehappo, sitruunahappo, maitohappo, glukoosi, fruktoosi, steariinihappo

Oppilaat päästetään työskentelemään vapaasti ja opettaja kiertää ohjeistamassa oppilaita.

Sopivassa vaiheessa opettaja näyttää kaikille oppilaille yhteisesti kuinka kuva tallennetaan ChemSketch-ohjelmassa ja kuinka se liitetään tekstitiedostoon. Kannattaa kiinnittää huomiota (MS Office Wordissa) kuvan asetelun muuttamiseen niin, että kuvaa voi siirrellä sivulla (Kuvan asetukset/ominaisuudet => asetelu: esim. neliö).

Kun oppilaat alkavat tehdä tiedonhakuja opettaja voi ohjata oppilaita kielitaidosta riippuen myös englanninkieliseen Wikipediaan, jossa on laajempia artikkeleita ja joistakin aineista tutustumaan esimerkiksi OVA-ohjeisiin tai käyttöturvallisuustiedotteisiin (englanniksi MSDS, material safety data sheet). Kannattaa korostaa, että tieto yhdessä paikassa voi olla väärin ja kannattaa vertailla. Hakusanoihin googlessa kannattaa lisätä sellaisia sanoja kuin sulamispiste tai molekyyli, jolloin haut karsiutuvat sellaisiin, jotka käsittelevät ainetta kemiallisesta näkökulmasta.

Tunnin loppupuolella opettaja pyytää tallentamaan valmiit tuotokset järkevästi nimettyinä (esim. ”yhdiste Sukunimi Etunimi”) verkkoasemaan luotuun palautuskansioon tai vaikka luokassa kiertävälle muistitikulle.

Valmiita tuotoksia voidaan tarkastella yhdessä ja opettaja voi nostaa esille eritoten hiiliketjun pituuden vaikutusta kiehumispisteeseen ja funktionaalisten ryhmien ja määrän ja laadun vaikutusta kiehumispisteeseen. Oppilaita voidaan myös pyytää lyhyesti esittelemään oma molekyylinsä.

**Tunnin jälkeen** luotu molekyylikirjasto voidaan nittoa lehdeksi ja laittaa esille koulun kirjastoon tai julisteet voidaan asettaa näkyviin ilmoitustaululle tai vitriiniin koulun käytävälle.

## 4. Tutkimus

Opiskelijoita osallistui mallintamiseen yhteensä 10, joista 9 täytti palautelomakkeen. Lisäksi luokassa oli muutama omia tehtäviään tehnyt opiskelija ja aivan viime hetkellä mallintamista kokeilleita opiskelijoita, joita ei pyydetty täyttämään lomaketta.

Vastauksia on niin vähän, ettei tilastollista tarkastelua ole mielekästä tehdä kovin suurella tarkkuudella. Opiskelijoille esitettiin seitsemän väittämää opetustapahtuman mielekkyydestä.

Molekyylien rakentaminen oli kiinnostavaa

Molekyylin kolmiulotteisen rakenteen tarkastelu oli kiinnostavaa

Molekyylin tarkastelu eri malleilla oli kiinnostavaa

Molekyylien "näkeminen" oli kiinnostavaa

Koin kiinnostavana, että sain mallintaa itse

Minusta oli hauska etsiä tietoa yhdisteistä internetistä

Tietokonepohjainen molekyylihallinnus oli kokonaisuutena kiinnostavaa

Opiskelijoita pyydettiin antamaan vastauksensa asteikolla (0-) 1-5. Asteikossa 0 on ”en osaa sanoa/en tehnyt” ja 1 ”en ole lainkaan samaa mieltä”. 5 tarkoittaa ”olen täysin samaa mieltä”. Asteikon keskiväliä 3 kuvattiin ”en ole samaa mieltä enkä eri mieltä”.

Yhtään 0-vastausta ei saatu vaikka yksi opiskelija ei antanut lainkaan vastauksia. Annetut arvot vaihtelevat 2-5 välillä kaikissa väitteissä poislukien väite 6 ”Minusta oli hauska etsiä tietoa yhdisteistä internetistä”, missä vastaukset vaihtelevat välillä 1-4.

Kaikkien vastausten tyyppi-arvona on 4. Kun kaikki väittämät on muotoiltu positiivisiksi ja 4 tulkitaan ”olen jokseenkin samaa mieltä” tästä voidaan tulkita, että tässä ryhmässä toimintaa pidettiin mielenkiintoisena. Tosin yleistysten tekemistä näin pienestä aineistosta on varottava.

vastaus	väittämä							yht.
	I1	I2	I3	I4	I5	I6	II	
1	0	0	0	0	0	1	0	1
2	2	1	1	2	1	0	1	8
3	2	<b>3</b>	<b>4</b>	1	<b>4</b>	<b>4</b>	2	20
4	<b>4</b>	<b>3</b>	2	<b>3</b>	3	<b>4</b>	<b>3</b>	<b>22</b>
5	1	2	1	<b>3</b>	1	0	<b>3</b>	11

TAULUKKO 1: Oppilaiden antamien vastausten frekvenssit väittämittäin ja yhteensä.

Kolmessa väittämässä tyyppiarvo on yli kolmen ja ainoastaan väittämissä 3 ja 5, jotka koskivat molekyylien tarkastelua eri malleilla ja itse mallintamisen kiinnostavuutta, tyyppiarvo on kolme. Minkään väittämän vastausten tyyppiarvo ei ole alle kolme.

Kaikissa väitteissä enintään kaksi opiskelijaa oli eri mieltä, mikä viittaa siihen suuntaan, että yleisesti opiskelijat pitivät molekyylihallinnusta mielenkiintoisena.

Opiskelijoille esitettiin myös kaksi avointa kysymystä. ”Mikä teki mallinnuksesta kiinnostavaa” ja ”Mikä mallinnuksessa ei ollut kiinnostavaa”. Annettuja vastauksia on vähän, mutta niissä nousevat esille itse tekeminen ja molekyylien konkreettinen näkeminen. Jälkimmäinen saattaa henkiä käsitystä siitä, että esitetyt mallit ovat enemmän totta kuin jotkin toiset esitystavat molekyyliä. Toisaalta se saattaa viitata myös siihen, että kolmiulotteinen malli oli helpommin ymmärrettävä kuin erittäin abstrakti viivapiirros. Yksi opiskelija ilmoitti, ettei pitänyt 3D-mallia mielenkiintoisena vaan piti enemmän 2D-mallien piirtämisestä.

## 5. Itsearviointi

Perjantaipaja sujui hyvin. Tietokoneluokassa oli koko ajan rauhallista, naputtelu ja pieni puheensorina antoivat kaikille sopivan työrauhan. Pienen ryhmän kanssa riitti yksi opettaja, mutta lähes jokaiselle joutui kädestä pitäen kertomaan etenemisen vaihe vaiheelta. Jatkossa on kiinnitettävä huomiota ohjeistuksen muuttamiseen sellaiseksi, että opiskelijat kykenevät itsenäisempään työskentelyyn ja rohkaistava oma-aloitteisuutta ja aktiivisuutta. Hyviä keinoja tehdä tätä olisi käydä tarkemmin läpi ChemSketch-pikaohjetta, jotta oppilaat osaavat etsiä tietoa myös siitä. Lisäksi oppilaita voi rohkaista neuvomaan pariaan. Erityisesti työtä aiheutti myös se, että kuvan tallentamista ja liittämistä ei käyty läpi yhdessä vaan sitä mukaa, kun opiskelijat pääsivät tähän vaiheeseen. Lisäksi myöhään saapuneet opiskelijat sekoittivat tunnin etenemistä. Oli varauduttu yhtäkkiseen ryntäykseen noin tunnin jälkeen, mutta suuri osa opiskelijoista ilmeisesti piti ruokataukoa ennen toista tuntia.

Opiskelijat käyttävät verkkoa lähdeaineistona paljon kirjoja luontevammin. Itse asiassa kukaan ei vapaaehtoisesti koskenut oppikirjoihin lähdeaineistona. Ne voisi ehkä jatkossa jättää kokonaan pois tai antaa opiskelijalle jo valmiiksi sivun, josta he tietoa löytävät. Muuten Wikipedia on helpompi (ja usein laajempi) tietolähde. Opiskelijoilla on taipumusta myös yrittää päästä tiedonhausta ja varsinkin tietojen koostamisesta helpolla ja laittaa vain suoraan ensimmäisen linkin takaa lainattua tekstiä molekyylikorttiin, joten on syytä korostaa omin sanoin kirjoittamista ja tekstin muokkaamista ja lähdekritiikkiä tekemisessä.

Jatkossa on syytä varata helppoja molekyylejä, koska muuten myöhässä tulleille saattaa jäädä kovin haastavia molekyylejä. Toisaalta itse rakenteen piirtäminen on ChemSketch-ohjelmassa kuitenkin melko helppoa ja voi olla mukava tehdä piirtämistä vähän enemmän sitten, kun on saanut siitä otteen. On harmillista, jos joutuu tekemään monta työvaihetta peräkkäin (vetyjen lisääminen, siistiminen, 3D-optimointi, värien vaihtaminen, mallin vaihtaminen) hyvin ohjatusti ilman autonomian tunnetta. Esimerkiksi metaanimolekyylin piirtäminen kutistuu sarjaksi ohjeiden varassa tehtyjä klikkauksia eikä varsinaista itse mallintamisen tunnetta ehkä synny.

Jos olisimme tallentaneet ohjeet vain verkkoasemalle, ei olisi tarvinnut poistaa kansiota erikseen joka koneelta. Kun keräsimme tiedostot verkkoasemalle, opiskelijat eivät osanneet nimetä tiedostojaan mitenkään selkeästi. Opiskelijoille olisi hyvä tähdentää tiedostojen nimeämistä systemaattisesti.

Työskentelyä voisi auttaa koostamalla sellaisen kalvon, jossa olisi vielä julisteohjeet tiivistettynä. Vaikka lähtökohtaisesti tiedonhaun ja molekyylihallinnuksen yhdistäminen tuntui hyvältä idealta, voisi niistä molemmista saada enemmän irti erillisinä. Voisi pohtia sitä, että olisi erikseen tehtävänä

Yhdelläkin ohjaajalla pärjää vallan mainiosti näin pienen ryhmän kanssa, ja hyvä näin, sillä toisella ohjaajalla oli ääni melkein poissa. Suuren ryhmän kanssa useampi ohjelman perusteet hallitseva avustaja on hyödyksi, ettei oppilaiden tarvitsisi odottaa apua niin pitkään. Tosin myös kuuluvalla äänellä annetut opastukset auttaisivat samalla useampaa opiskelijaa, mutta siinä on riskinä koko luokan melutason nouseminen. Nyt äänivaroja ei ollut käytettävissä.

Tämä oli molemmille ohjaajille ensimmäinen molekyylihallinnuspajan vetäminen ja loimme itse työohjeen erityisesti tätä tilannetta varten. Jälkeenpäin arvioidessa tuntuu, että olisi voinut yrittää keskittyä pelkästään mallintamiseen tai pelkästään tiedonhakuun. Jatkossa ehkä näiden kokemusten pohjalta opetustapahtuma tulee jäsennettyä paremmin. Pajan ohjelman voisi esittää esimerkiksi prosessikaaviona, johon voisi sisällyttää ohjeita. Tämä voisi myös tukea oppilaita, joilla on vaikeuksia kielen kanssa. Toisaalta, jos oppilasryhmä on aktiivinen, olisi hauska pystyä tarjoamaan oppilaille itsenäisen työskentelyn mahdollisuuksia. Pajasta saaduista kokemuksista opittiin myös paljon sellaista, mitä voitaisiin käyttää itsenäisemmän pajan järjestämiseksi ensi kerralla.

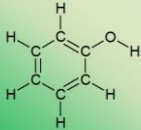
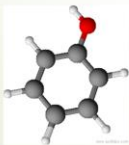
## Lähteet

- Anon (2004): Perusopetuksen opetussuunnitelman perusteet  
[http://www02.oph.fi/ops/perusopetus/pops\\_web.pdf](http://www02.oph.fi/ops/perusopetus/pops_web.pdf)
- Lavonen, Meisalo, Niittykangas et al. (2001) Luonnontieteiden työtapaopas – lukemalla ja kirjoittamalla oppiminen: <http://www.edu.helsinki.fi/malu/kirjasto/tieto/lukem/index.htm>
- Renström, L., Andersson, B. & Marton, F. (1990). Students' conceptions of matter. *Journal of educational psychology*, 82(3), 555-569.
- Västinsalo, J. (2009). Pro-gradu –tutkielma.



## LIITE 1: Pajan ohjelma

Perjantaipaja:  
molekyylimallinnusta



Jan Jansson  
Jaana Saarni

### Ohjelma

- Tutustutaan Chems sketch-ohjelmaan
- Piirretään itse molekyylin kuva
- Etsitään tietoa yhdisteestä
- Tehdään juliste
- Vertaillaan löytyneitä tietoja

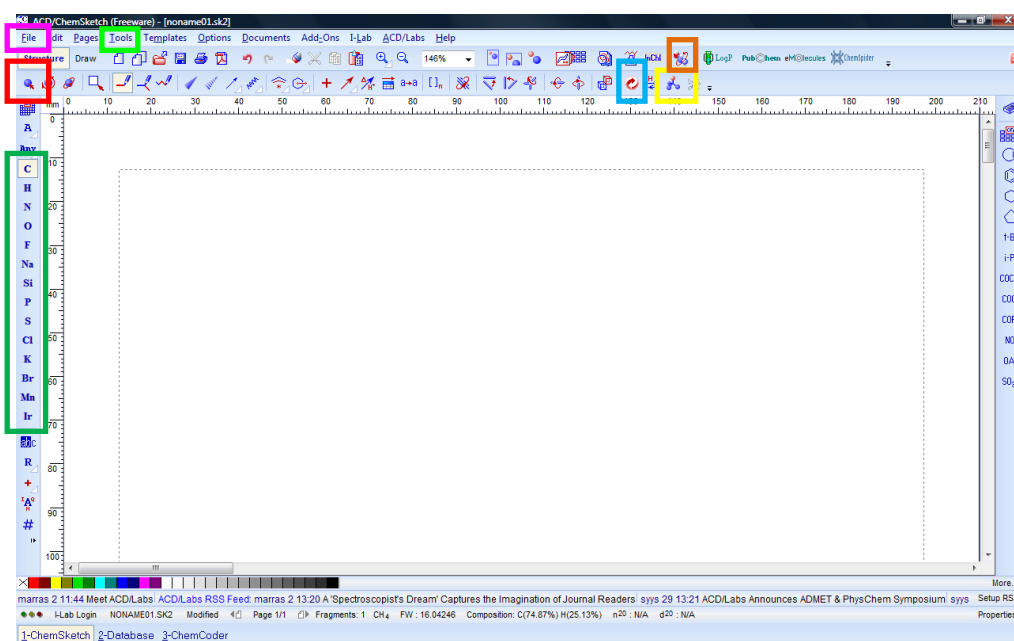
### Juliste yhdisteestä

- Piirretään molekyylin kuva
- Etsitään tietoa yhdisteestä internetistä ja kirjoista
- Tehdään juliste, jossa kerrotaan yhdisteestä
- Työskennellään pareittain
- Jokainen tekee yhden julisteen
- Julisteet tulevat esille koulun käytävälle

## **LIITE 2: ChemSketch -pikaohje**

Seuraavalla sivulla.

## ChemSketch – lyhyt käyttöohje freeware versioon 12.0



Kun avaat ChemSketchin, vastaa molempiin kysymyksiin OK. Aloitussivu näyttää yllä olevalta. Osa valikoista aktivoituu vasta, kun lisäät piirtoalustalle ensimmäisen atomin.

### Piirtäminen

Varmista, että vasemmasta yläreunasta on valittu ”Structure” eikä ”Draw”. Valitse vasemmasta valikosta atomi, jonka haluat lisätä rakenteeseen. Klikkaa piirtoalustalle ja atomi ilmestyy siihen. Kaikkiin vapaisiin sidoksiin on lisätty vetyatomi ja molekyyli on kirjoitettu lyhyessä muodossa. Esim. CH<sub>4</sub>

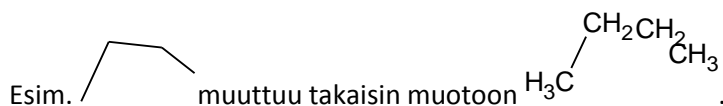
Jos haluat liittää tähän atomiin jonkin atomin, valitse sopiva atomi valikosta. Paina hiiren vasemmalla näppäimellä ensimmäistä atomia ja vedä osoitin paikkaan, johon haluat lisätä seuraavan atomin. Päästä vasen näppäin ylös vasta nyt. Näin atomien välille muodostuu sidos. Sidoksesta voit tehdä moninkertaisen klikkaamalla sitä. Esim. H<sub>3</sub>C—CH<sub>3</sub> muuttuu klikkauksella H<sub>2</sub>C=CH<sub>2</sub>.

Jos haluat lisätä sidoksen kahden atomin välille, valitse mikä tahansa atomi valikosta. Paina hiiren vasen näppäin pohjaan ensimmäisen atomin kohdalla ja siirrä osoitin toisen atomin kohdalle. Päästä irti hiiren vasemmasta näppäimestä vasta toisen atomin kohdalla.

Voit poistaa atomin valitsemalla valitsemistyökalun vasemmasta yläreunasta ja klikkaamalla poistettavaa atomia. Paina nyt näppäimistöä Del.

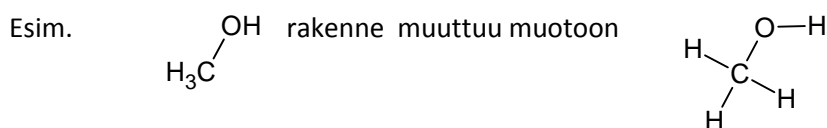
## Structure properties

Jos kaikki hiilet katoavat näkyvistä ja jäljelle jää pelkkä viivakehikko, toimi seuraavasti: Valitse rakenne valitsemistyökalun avulla. Valitse **Tools** > Structure properties. Laita ruksi "Show carbons" alla kohtaan "All". Klikkaa Apply (ja Set Default). Täältä voit myös säätää kirjainten kokoa ja viivojen pituutta.



## Rakenteen siistiminen

Valitse **valitsemistyökalu** vasemmasta yläreunasta. Klikkaa rakenteen lähellä. Rakenne tulee valituksi. Paina Ctrl+Shift+Y. Tämä lisää kaikki vedyt rakenteeseen erillisiksi atomeiksi.



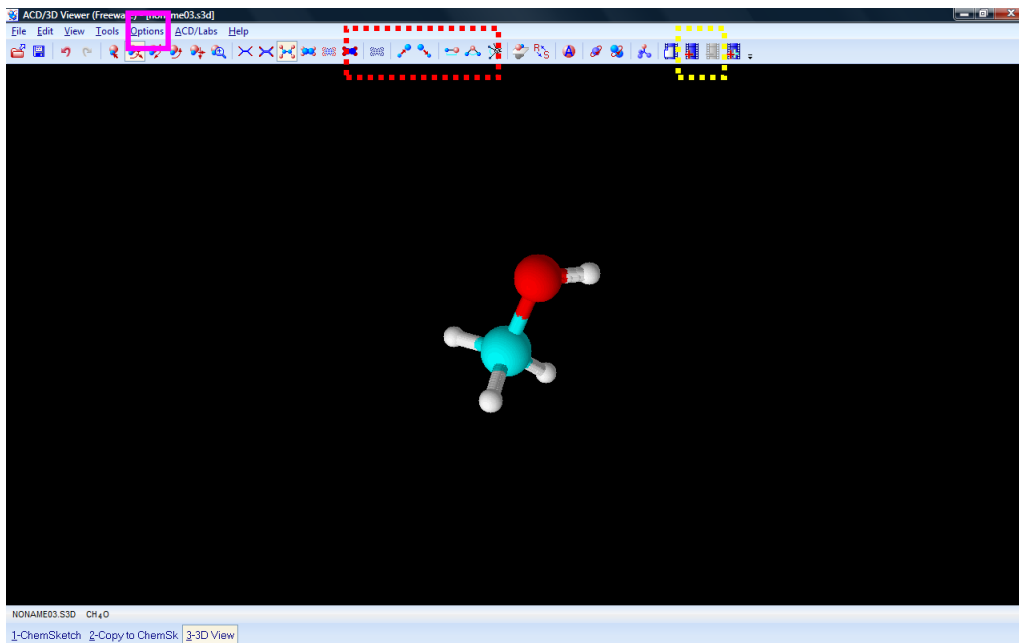
Jos tämän jälkeen haluat lisätä atomeita rakenteeseen, sinun pitää ensin poistaa vetyatomi, joka on uuden atomin tiellä. Klikkaa **rakenteensiistimisnappulaa**.

## Kuvan vieminen ohjelmasta

Valitse **File** > Save as. Muuta Tallennusmuoto kuvaformaatiksi (esim. GIF-bitmaps). Tallenna tiedosto haluamaasi paikkaan. Tekstinkäsittelyohjelmassa voit ottaa kuvan käyttöön valitsemalla Lisää > kuva (> tiedostosta) tai vastaavaa.

## 3D-rakenteen katsominen

Siisti rakenne ensin. Valitse **valitsemistyökalu** vasemmasta yläreunasta. Klikkaa rakenteen lähellä. Rakenne tulee valituksi. Klikkaa **kolmiulotteisen iäriestämisen nappulaa**. Ohjelma kysyy "Do you want to remove the hydrogens before optimization?". Vastaa "No." Klikkaa seuraavaksi **3D Viewer-nappulaa**.



Voit käännellä molekyyliä hiiren vasemman nappulan avulla.

Eri malleista voit kokeilla, miltä molekyyli näyttää eri esitystavoilla. Kokeile erilaisia malleja. Pallo-tikku – malli on yleisin ja usein selkein.

Värienvaihtovalikosta voit muuttaa taustan ja atomien väriä.

Kuva otetaan samalla tavalla kuin aiemminkin.

### LIITE 3: Divetymonoksidi-posteri

#### DIVETYMONOKSIDI – H<sub>2</sub>O

(vesi)

ulkonäkö: huoneenlämmössä väritön neste

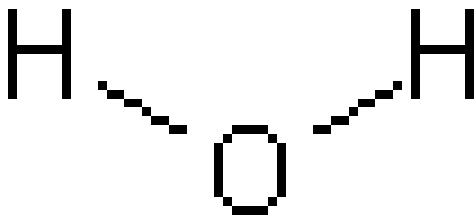
sulamispiste: 0 °C

kiehumispiste: 100 °C

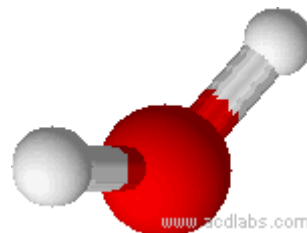
liukoisuus: liukenee veteen kaikissa suhteissa, ei liukene bensiiniin

tiheys: 1,000 g/cm<sup>3</sup>

**Rakennekaava:**



**Kolmiulotteinen kuva:**



Vettä esiintyy kaikkialla luonnossa. Suurin osa elävistä olennoista koostuu pääosin vedestä. Maapallon pinta-alasta 2/3 on veden peitossa. Vettä ei useimmiten valmisteta teollisesti, mutta sitä syntyy hiilivetyjen (esim. bensiini) polttamisen yhteydessä. Luonnonvesien puhdistus juomavedeksi ja käytetyn veden (jäteveden) puhdistaminen ennen luontoon palauttamista on yleistä ja sitä tehdään kaikissa asutuskeskuksissa.

Vedellä on luonnossa monia erilaisia tehtäviä. Veden kiertokulku tarkoittaa veden haihtumista pintavesistä pilviin, joista vesi taas sataa alas maahan. Sadevesi valuu pintavaluntana jokiin ja järviin ja suodattuu maakerrosten läpi pohjavedeksi.

Vedellä on ihmisessäkin tärkeitä tehtäviä. Ihminen tarvitsee vettä päivittäin 2-3 litraa. Soluissa vesi mahdollistaa erilaiset kemialliset reaktiot veteen liuenneiden aineiden välillä. Vesi myös sitoo hyvin lämpöä ja auttaa pitämään kehonlämmön tasaisena.

## LIITE 4: Mallipohja

### YHDISTEEN JÄRJESTELMÄLLINEN NIMI – YHDISTEEN KAAVA

(yhdisteen arkinimi)

ulkonäkö: kuvaus ulkonäöstä

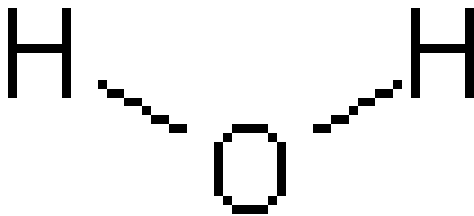
sulamispiste: kuinka monta astetta °C

kiehumispiste: kuinka monta astetta °C

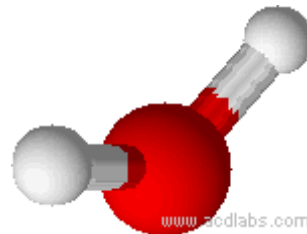
liukoisuus: liukeneeko veteen? liukeneeko bensiiniin?

tiheys: kuinka monta g/cm<sup>3</sup>

Rakennekaava:



Kolmiulotteinen kuva:



Missä yhdistettä esiintyy luonnossa? Valmistetaanko yhdistettä teollisesti?

Mitä merkitystä yhdisteellä on luonnossa? Mihin yhdistettä käytetään teollisuudessa?

Mitä merkitystä yhdisteellä on ihmiselle?

Liittyykö yhdisteeseen jotain muuta mielenkiintoista?

**LIITE 5: Tyytyväisyyskysely**  
**Perjantaipaja 26.3.2010**

Arvioi mallinnustuokion jälkeen, kuinka hyvin alla olevat väittämät kuvaavat kiinnostustasi tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen mahdollistamiin toimintoihin.

Arvioi kiinnostuksesi asteikolla 0-5, jossa

0= en osaa sanoa, en tehnyt

1= en ole lainkaan samaa mieltä

2= olen jokseenkin eri mieltä

3= en ole samaa enkä eri mieltä

4= olen jokseenkin samaa mieltä

5= olen täysin samaa mieltä

- +

**I. Ympyröi parhaiten mielipidettäsi kuvaava vaihtoehto:**

- |   |             |
|---|-------------|
| 1. Molekyylien rakentaminen oli kiinnostavaa                        | 0 1 2 3 4 5 |
| 2. Molekyylin kolmiulotteisen rakenteen tarkastelu oli kiinnostavaa | 0 1 2 3 4 5 |
| 3. Molekyylin tarkastelu eri malleilla oli kiinnostavaa             | 0 1 2 3 4 5 |
| 4. Molekyylien "näkeminen" oli kiinnostavaa                         | 0 1 2 3 4 5 |
| 5. Koin kiinnostavana, että sain mallintaa itse                     | 0 1 2 3 4 5 |
| 6. Minusta oli hauska etsiä tietoa yhdisteistä internetistä         | 0 1 2 3 4 5 |

**II Tietokonepohjainen molekyylihallinnus oli kokonaisuutena kiinnostavaa** 0 1 2 3 4 5

**III Vastaa seuraaviin kysymyksiin sanallisesti:**

1. Mikä teki mallinnuksesta kiinnostavaa?

---

---

2. Mikä mallinnuksessa ei ollut kiinnostavaa?

---

---