

Molekyylimallinnus kemian opetuksessa, osa I

Molekyylimallinnus ja kemian opetus

JAN LUNDELL, Kemian tieto- ja viestintätekniiikan keskus (eChemicum), kemian laitos, Helsingin yliopisto, jan.lundell@helsinki.fi
MAIJA AKSELA, Kemian opettajankoulutusyksikkö, kemian laitos, Helsingin yliopisto, maija.aksela@helsinki.fi

Molekyylimallinnus on olennainen osa nykyaikaista kemian tutkimusta ja opetusta. Kemian uusien opetussuunnitelmien perusteiden mukaisesti kemian opetukselle on luonteensa mukaisesti kemiallisten ilmiöiden ja aineiden

ominaisuuksien havaitseminen ja tutkiminen kokeellisesti. Ilmiötä tulkitaan ja selitetään mallien ja rakenteiden avulla ja kuvataan kemian merkkielellä. Kemian opetuksessa ilmiötä myös mallinetaan ja käsitellään matemaattisesti.

Perinteisesti kemia on ollut kokeellinen tiede, joka tutkii eri aineita ja niiden ominaisuuksia, aineiden rakenteita sekä aineiden muuttamista toisiksi aineiksi.

Tietotekniikan kehittyessä myös kemian tutkimus on kokenut muutoksia, sillä tietokoneavusteista kemiaa sovelletaan kokeellisen työn ohella yhä enemmän. Tietokoneet ovat auttaneet kemistejä niiden keksimisestä lähtien, mutta nykypäivän nopeat ja tehokkaat koneet tarjoavat mahdollisuuden merkittävään lisäpanostukseen tutkimuksessa, opetuksessa ja oppimisessa. Jopa 60% nykyisestä kemian tutkimuksesta käyttää tietokoneavusteisia menetelmiä apunaan ja tietokoneavusteisen kemian osuus tulee entisestään kasvamaan.

Nykyaikainen teknologia avaa uusia mahdollisuuksia kemian opetukseen kouluissa. Yhä laajempia ja helpokäyttöisempiä ohjelmia, esimerkiksi molekyylimallintukseen, on saatavilla kemian oppimisen tueksi. Tietokonetta voidaan käyt-

Aspiriinin rakenne eri molekyylimallien avulla: a) tikkumalli, b) tikku-pallomalli, c) kalottimalli (CPK) ja d) laskennallinen elektronitiheyskartta, joka kuvaa elektronien todennäköisintä esiintymisaluetta.

Artikkelisarjassa käsitellään sitä, mitä molekyylimallinnus on, min-kälaisia mahdollisuuksia se tarjoaa kemian opetukseen sekä konkreettisia esimerkkejä sen käytöstä kouluopetuksessa. Ensimmäinen artikkeli käsittelee yleisesti molekyylimallinnusta ja sen merkitystä kemian opetuksessa.

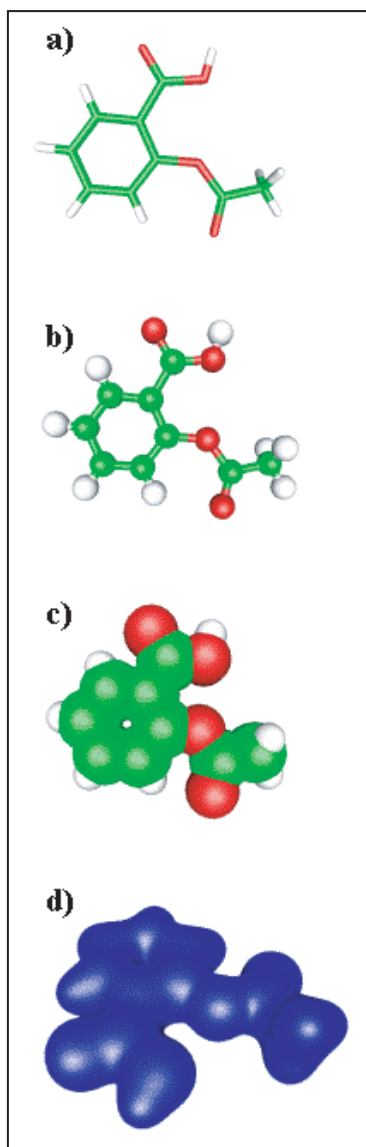
tää kontrolloimassa kokeellisen työn edistymistä, tulosten raportoinnissa ja tiedonhaussa.

Tietokoneen avulla voidaan myös selvittää mm. molekyyli-rakenteita ja ominaisuuksia, tutkia tarkasti molekyyliä välisiä vuorovaikutuksia sekä kartoittaa kemiallisten reaktioiden etenemistä. Molekyylimallinnusta - laskennallista kemiaa - voidaan pitää kokeellisen ja teoreettisen kemian yhdistäjänä: vaikeatkin asiat voidaan esittää selkeästi ja erityisesti kokeelliset ilmiöt voidaan havainnollistaa atomi- ja molekyylitasolta lähtien. Tietokoneiden käyttöä kemiassa voidaan kutsua myös vihereäksi kemiaksi, sillä molekyylimallinnus tukee kokeellisten tutkimusten suunnittelua ja vähentää tarpeettomia kokeita.

Molekyylimallinnus

Kemiassa mallit ja mallintaminen ovat tärkeä osa kokeellisten tutkimusten havainnollistamista ja selittämistä. Kemistit ilmaisevat tutkimustuloksensa malleilla konkreettisesti (esim. rakentamalla molekyylimallin), visuaalisesti (esim. virtuaalisen mallin kautta), matemaattisesti ja/tai verbaalisesti.

Kemiallinen malli on aina hypo-



teesi, arvaus miten systeemiä voidaan kuvata. Täydellistä kemiallista mallia ei ole olemassa ja siitä syystä on aina muistettava mallin rajoitukset ja mahdollisuudet sekä tuotava se esille myös kemian ope- tuksessa.

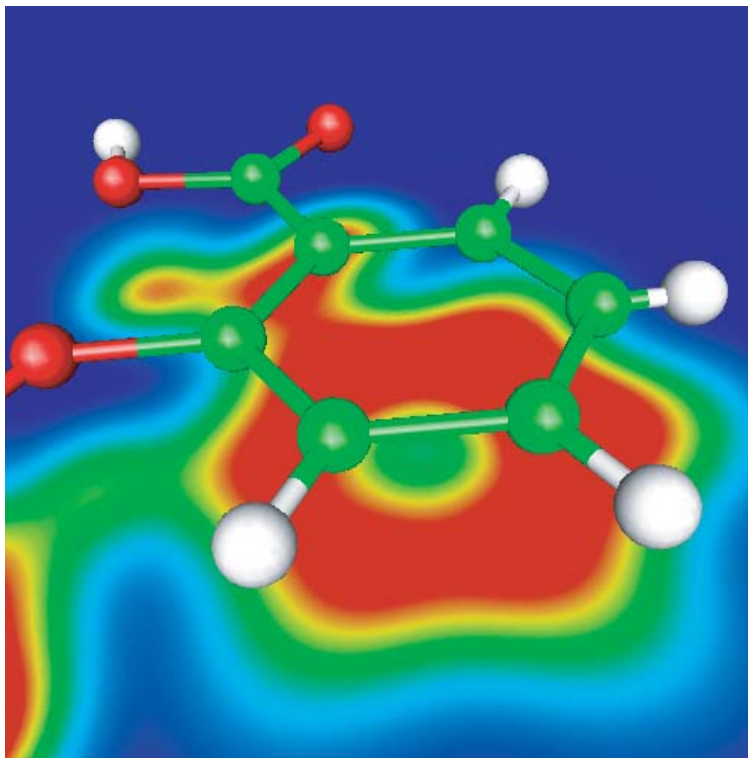
Tieteellinen malli kemiassa on usein nopeasti myös historiallinen malli, sillä kemian tiede kehittyi koko ajan ja tieteelliset mallit muuttuvat. Jopa 300 kemian in- novaatiota julkaistaan joka päivä.

Mallintamisessa on lähinnä ky- symys siitä, millaisia approksimaa- tioita mallin kehittämisessä on käytetty ja miten ne vaikuttavat uuteen tietoon – miten nykyinen malli kuvaa systeemiä paremmin kuin vanha malli.

Teoria taustalla

Molekyylimallinnuksessa käytetty malli perustuu aina johonkin hy- poteesiin, teoriaan, jolla pyritään selittämään kemiallisen systeemin käyttäytymistä. Molekyylimallin- nuksessa tämä tarkoittaa oikean laskentamenetelmän ja molekyy- lien välisten vuorovaikutusten valintaa. Teorian taso on valittava tutkittavan kemiallisen systeemin mukaan. Tällöin on myös oleellista tuntea kyseisen kemiallisen systeemin todellinen (kokeellinen) luon- ne. Mallin hyvyttä on aina arvioi- tava ja ainoa oikea vertailukohta on kokeelliset havainnot.

Jotta saatujen tulosten tark- kuutta ja oikeellisuutta voitaisiin arvioida, on tunnettava mallin käyttämät teoreettiset perusteet. Ei ole välttämätöntä tuntea kaik- kea malliin sisäänrakennettua asiaa tarkasti, mutta on kuitenkin ymmärrettävä laskennallisen mal- lin kemialliset seuraukset. Mallin avulla saadaan yleensä tietoa mm. systeemin kemiallisesta rakentees- ta, systeemin fysikaalisista ominai- suuksista sekä voidaan ennustaa,



Aspiiriinin molekyylimalli ja elektronitiheyskartta päällekkäin.

Nettisivu kouluille molekyylimallinnuksesta

”Laskennallista kemiaa kouluopetuksessa” –projekti on Helsingin yli- opiston kemian laitoksen, Suomen Kemian Seuran sekä Tieteen tietotek- niikan keskuksen (CSC) yhteistyöprojekti. Sen tarkoituksena on kartoittaa, helpottaa ja edesauttaa laskennallisen kemian sekä kemian tietokone- avusteisen kemian menetelmien hyödyntämistä ja soveltamista perus- koulujen ja lukiodien kemian opetuksessa. Tätä artikkelisarjaa ja molekyyli- mallitusta kouluopetuksessa tukeva www-sivusto tullaan avaamaan tämän syksyn aikana Helsingin yliopiston kemian laitoksen opettajankoulutusyk- sikon verkkosivujen yhteyteen (<http://www.helsinki.fi/ml/kemia/opettaja- koulutus/>)

miten systeemi käyttäytyy esim. paineen tai lämpötilan muuttues- sa.

Mallinnuksen haasteet

Molekyylimallinnuksen tämän het- ken suuria haasteita ovat erityises- ti uusien turvallisten lääkeainei- den suunnittelu, proteiinien omi- naisuuksien ja laskostumismeka- nismien ymmärtäminen molekyy- litasolta lähtien sekä entsyymien toiminnan selvittäminen. Tieto-

koneiden kehittyessä kemiallisten virtuaalimallien kokoa ja tarkkuut- ta voidaan kasvattaa. Yhtenä haas- teena mallinnukselle onkin kyettä yhdistämään pienten molekyylien tarkoissa laskuissa käytetyt me- netelmät osaksi biomallinnuksen työvälineitä.

Molekyylimallinnuksen kasva- viin haasteisiin kuuluvat myös ra- kennetietoa ja kemiallisia ominai- suuksia yhdistelevien tietokanto- jen suunnittelu ja rakentaminen,



Molekyylimallitusohjelma ja muovimalli yhteiskäytössä.

jotta jo olemassa olevia tietoja voitaisiin käyttää uuden tutkimuksen ja tuotekehityksen pohjana. Helsingin yliopiston kemian laitoksella on molekyylimallinnusta käytetty mm. uusien jalokaasumolekyylien tutkimuksessa, polymeerien ja raskaita metalleja sisältävien molekyylien suunnittelussa ja molekyylien magneettisten ominaisuuksien tutkimuksessa.

Mallinnus kouluopetuksessa

Nykyiset oppimiskäsitykset korostavat oppimista aktiivisena kokemukseen perustuvana vuorovaikutusprosessina. Molekyylimallinnuksen käytöllä opetuksessa on mahdollista tukea kemian käsitteiden ymmärtämistä, harjoittaa erilaisia opiskelutaitoja sekä motivoida oppilaita opiskelemalla autenttisessa modernissa tutkimusympäristössä.

Oppilaille annetaan mahdollisuus sosiaaliseen vuorovaikutukseen, aktiiviseen ja luovaan opiskeluun ja tutkimiseen: oppilaat saavat testata omia hypoteesejaan, tehdä kysymyksiä, analysoida malleja ja tehdä niistä johtopäätöksiä

sekä käyttää oppimaansa ja kehittämänsä raportoinnissa. Samalla havainnollistuu symbolien käyttö ja tulkinta sekä se, miten siirrytään mikroskooppiselta tasolta makroskooppiselle tasolle.

Molekyylimallinnuksen liittäminen kemian opetukseen ei ainoastaan anna uutta työkalua opettajalle tai oppilaalle, vaan se myös tutustuttaa nykyaikaiseen ja moderniin tutkimusvälineeseen. Mallinnus luo uusia mahdollisuuksia kokeellisten tulosten selittämiseen sekä ennustamiseen kemian opetuksessa. Tutkivaa mallintamista voidaan käyttää kemian opetuksessa esimerkiksi opettajan johdolla videotykin kautta, oppilastöinä pienissä ryhmissä ja/tai työpistetyöskentelynä.

Tärkeintä on kuitenkin tavoitteellinen toiminta, jossa oppilas on aktiivinen, vuorovaikutteinen ja oppimistaan refleктоiva. Hyviä oppimistuloksia on saatu erityisesti silloin, kun on käytetty rinnan muovisia molekyylimalleja sekä tietokoneavusteista molekyylimallinnusta.

Kemian oppimisen tukena

Kemia eroaa monista muista aloista esityskielensä vuoksi. Siinä, missä yleensä käytetään vain kirjallista esitystä asioiden kuvaamiseen, kemian kieli käsittää kolme eri tasoa: kirjallisen, ns. ”normaalin” esitystason, kaavamuotoisen esitystavan ja kolmantena kuvallisen esitystavan.

Tämä merkitsee, että kemiassa käsitellään hyvin pitkälti visuaalista informaatiota. Erilaisia malleja käytetään kuvaamaan makrotason ilmiöitä sekä mikrotasolla että symbolisesti.

Molekyylimallitus ja kemiallinen visualisointi luovat uusia kognitiivisia työkaluja - tapoja ja käytäntöjä - opiskeluun ja oppimiseen. Mallintamalla kemian ymmärtämisen kannalta tärkeitä molekyylimuotoja, sidosrakenteita ja elektronien avaruudellisia jakautumia saadaan opetukseen uusia näkökulmia ja ulottuvuuksia. Usein kemian käsitteet ovat opiskelijoille hyvin abstrakteja, mutta tietokone mahdollistaa asioiden hahmottamisen visuaalisen kokemuksen kautta. Tämä auttaa asioiden mieleenpainumista ja parantaa oppimistuloksia.

Molekyylimallinnuksen käyttö opetuksessa saa kiinnostumaan kemiasta ja ymmärtämään paremmin esimerkiksi sitä, mitä kemiallisissa reaktioissa todella tapahtuu. Tietokoneen ruudulla voi ”nähdä” mm. miten atomit liikkuvat, millaisia avaruudellisia rakenteita molekyyleillä on, miten elektronit ovat jakautuneet ja miten molekyylin sähköiset ominaisuudet muuttuvat kemiallisen sidoksen katketessa.