

# Tuulesta temmattu

Tietokonepohjaista molekyyli­mallinnusta  
ilman molekyy­leistä  
9. luokkalaisille

Jenni Västinsalo ja Matleena Ojapalo  
Kemian mallit ja visualisointi  
2.5.2008

# Sisällysluettelo

1. Tavoitteet ja yhteys OPS:iin.....	1
2. Toteutus.....	2
2.1 Oppilaan ohje.....	3
2.2 Pedagoginen toteutus.....	8
3. Arviointilomakkeen vastaukset ja yhteenveto.....	9

## 1. Tavoitteet ja yhteys OPS:iin

Ilma on hyvin keskeinen käsite yläkoulun opetussuunnitelmassa. Tutkittuamme yläkoulun kemian kirjoja huomasimme, että aihetta kuitenkin käsitellään hyvin pintapuolisesti molekyyllitasolla. Mallinnustuokiomme tukee muun muassa seuraavia perusopetuksen opetussuunnitelman perusteita:

Oppilas oppii...

- *käyttämään luonnontieteellisen tiedonhankinnan kannalta tyypillisiä tutkimusmenetelmiä, myös tieto- ja viestintäteknikkaa, sekä arvioimaan tiedon luotettavuutta ja merkitystä*
- *aineen rakennetta ja kemiallisia sidoksia kuvaavia käsitteitä ja malleja*

Ja tukee seuraavia aiheita:

- *ilmakehän aineet ja niiden merkitys ihmiselle ja luonnon tasapainolle*
- *vesi ja veden ominaisuuksia*

Tarkoituksemme on esitellä peruskoulun 9. luokkalaisille ilmaa, sen molekyyliä ja niiden ominaisuuksia syvällisemmin.

Opetukselliset tavoitteet:

- Oppilaat tunnistavat typpi-, happi-, hiilidioksidi- ja vesi molekyylit.
- Oppilaat erottavat kaksois- ja kolmoissidoksen ja niiden erot ja yhtäläisyydet.
- Oppilaat hahmottavat elektronipinnan käsitteen ja osaavat etsiä molekyylistä kohdat, joissa elektronitiheys on suuri ja pieni.
- Oppilaat tiedostavat sidospituuden ja -kulman käsitteet ja osaavat tutkia niitä molekyyleistä.

Affektiiviset tavoitteet:

- Oppilaat innostuvat kemiasta ja kokevat elämyksiä mallinnuksen kautta
- Oppilaat saavat onnistumisen tunteita.
- Oppilaat motivoituvat tietokonepohjaisesta kemiasta "nähdessään" molekyyliä, sidoksia ja elektronipintoja.

## 2. Toteutus

Toteutus suurpiirteittäin:

Ajankäyttö on laskettu kahdeksi oppitunniksi yhteensä 90 minuuttia.

Aluksi muutama sana malleista ja tietokonepohjaisesta molekyyllimallinnuksesta ja sen eduista.  
Power Point -esitys

1. Spartanin peruskäyttöön tutustuminen voihappomolekyylin avulla.

- Molekyylin luominen
- Eri mallit ja niiden käyttö
- Sidospituuden ja -kulman mittaaminen. Etsi molekyylistä suurin ja pienin kulma sekä pisin ja lyhin sidos.

2. Ilman molekyyli

- Typpi ja happi. Tutkitaan rakenteita, sidoksia ja elektronipintoja. Pohditaan eroja ja yhtäläisyyksiä, sekä syitä näihin. Mietitään niiden merkitystä luonnolle ja ihmiselle.
- Onko ilma ainetta? Tutkitaan näiden kahden ilman yleisimmän kaasun ominaisuuksia ja tullaan tulokseen, että niillä on todella massa.

3. Vesi

- Ilmassa on myös vettä kaasumaisessa olomuodossa. Tutkitaan veden rakennetta ja pohditaan molekyylin muotoa.
- Milloin molekyyli ovat ihan paikallaan? Tutkitaan vesimolekyylin IR- värähdyksiä ja tullaan tulokseen, että molekyyli ovat aina liikkeessä.

4. Etanoli

- Mallinnetaan etanoli molekyyli. Lasketaan molekyylin sidospituuksia ja sidos kulmia sekä tarkastellaan sen elektronipintaa.

5. Arviointilomake

## 2.1 Oppilaan ohje

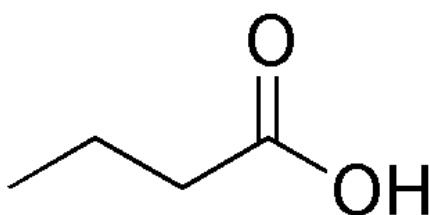
### 1. Voihappo (butaanihappo)

– Avaa Spartanista uusi lehti painamalla **File** ja valitsemalla sieltä **New**.

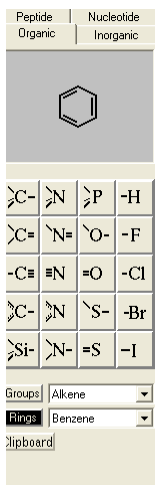
– Oikealla on valikko, jossa on listattuna alkuaineita. Kokeile valita jokin alkuaine hiiren vasemmalla näppäimellä. Vie hiiri mallinnusalueelle ja näpäytä hiiren vasenta näppäintä. Atomin pitäisi ilmestyä mallinnusalueelle. Kokeile valita jokin toinen alkuaine ja napauta edellisen atomin yhtä pallosta sojottavaa tikkua, sidosta.

– Rakennetaan voihappo.

Taululle on piirrettynä voihapon rakennekaava.



Aloitetaan valitsemalla oikean puoleisesta rakennusvalikosta nelisidoksinen hiili.



Viedään hiili mallinnusalueelle.

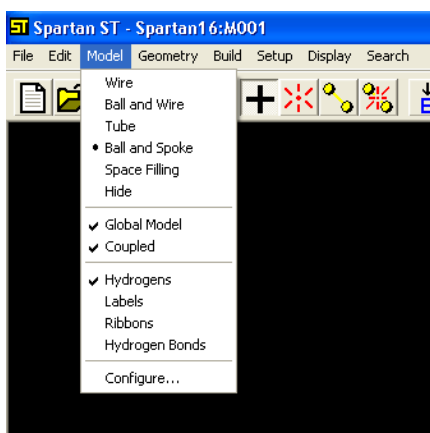
Rakennetaan molekyyli loppuun valitsemalla valikosta tarvittavat alkuaineet ja lisäämällä ne oikeisiin sidoksiin.

Poistetaan molekyylistä steeriset esteet painamalla ylävalikosta E:tä, jonka päällä on nuoli.

Voit pyörittää molekyyliä pitämällä hiiren vasemman napin pohjassa ja liikuttamalla hiirtä. Tarkastele molekyylin rakennetta. Kiinnitä erityisesti huomiota hiiliketjun suuntautumiseen (ei olekaan tasomainen)!

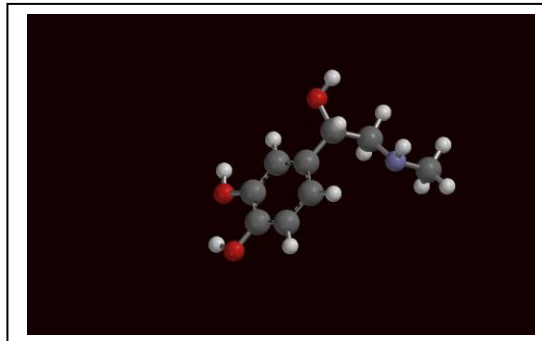
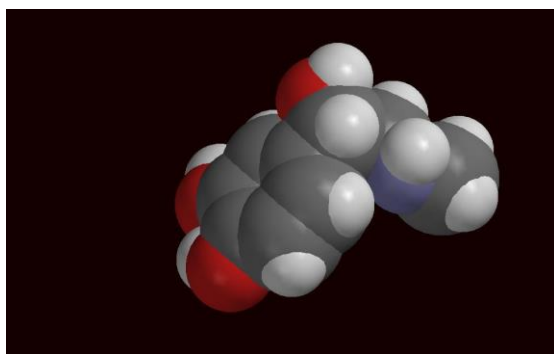
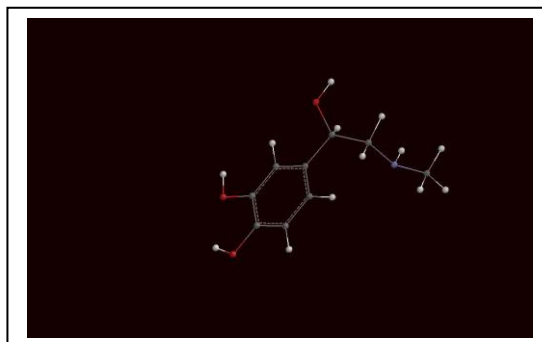
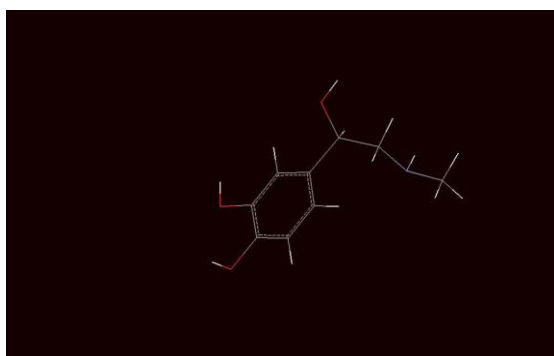
Saat suurennettua molekyyliä painamalla näppäimistöstä shiftin pohjaan ja vetämällä hiirtä vasemmasta yläkulmasta kohti oikeaa alakulmaa pitämällä samalla hiiren oikeaa nappia pohjassa.

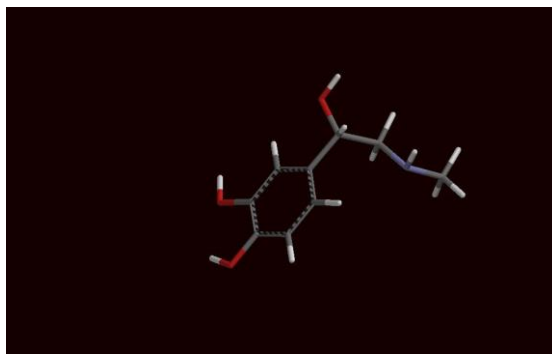
– Katsotaan voihippaa eri malleilla.



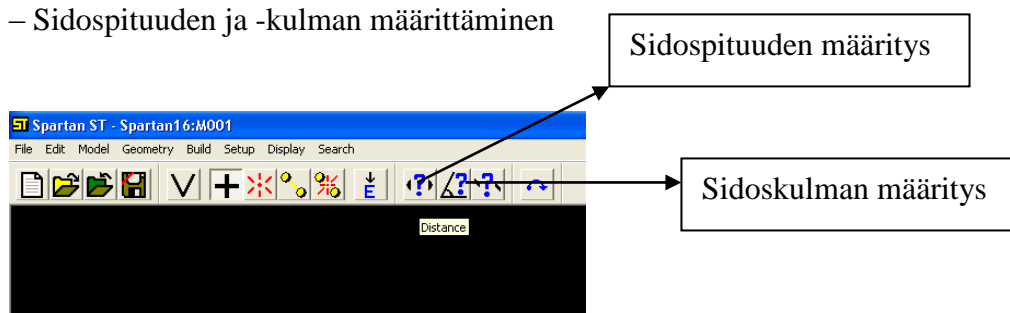
Valitse **Model** valikosta Wire, Ball and wire, Space filling Ball and spoke ja Tube kohdat vuorotellen. Mitä malleista käyttäisit jos haluaisit

- esitellä voihipon rakennetta
- tuoda esiin mitä alkuaineita molekyyli sisältää
- havainnollistaa sen todellista kokoa?





– Sidospituuden ja -kulman määrittäminen



Valitse ylävalikosta ikoni, jossa on kysymysmerkki ja nuolet sen ympärillä. Tällä voit määrittää kahden atomin välisen sidospituuden. Paina sen jälkeen molekyylistäsi kahta atomia, joiden välisen etäisyyden haluat selvittää.

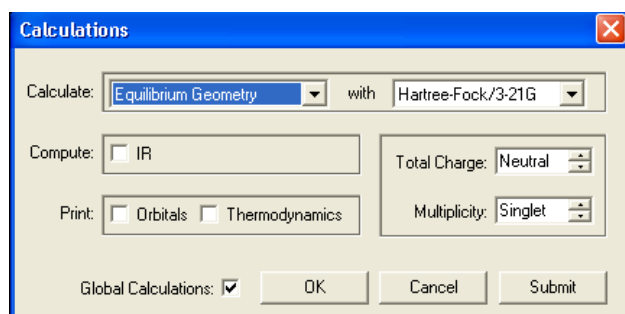
Kulman pystyt mittaamaan painamalla sidospituus napin oikean puoleista nappia. Napauta tämän jälkeen kolme atomia, joiden välisen kulman haluat selvittää.

Selvitä molekyylistä suurin ja pienin siduskulma sekä pisin ja lyhin sidos. Missä ne ovat? Miksi? Sulje työ **File** valikosta kohdasta **close**.

## 2. Ilman molekyylit

Ilmassa on eniten typpeä (n. 78 %) ja happea (n. 21 %). Mallinna typpi- ja happimolekyylit ruudulle. Typpimolekyylissä atomien välillä on kolmoissidos ja happimolekyylissä atomien välillä on kaksoissidos. Lasketaan molekyyleille *tasapainogeometria* eli muoto, jossa niiden on hyvä olla.

Valitse **Setup** valikosta **Calculations**. Seuraava laatikko avautuu. Kohdassa **Calculate** on valmiina käsky, joka laskee tasapainogeometrian. Käynnistä lasku painamalla submit. (Tallenna valitsemallasi nimellä lasku.)



Kun tasapainogeometria on laskettu:

Pohdi mitä ilma on? Onko se ainetta? Onko sillä massa?

Valitse **Display** valikko ja sieltä kohta **Properties**.

Klikkaa toista molekyyliä. Avautuvassa ikkunassa on molekyylin ominaisuuksia. Katso kohtaa **mass**. Mitä mieltä nyt olet ilman painosta?

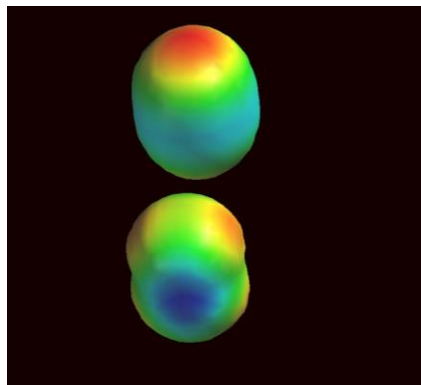
Mittaa typpimolekyylissä olevan kolmoissidoksen pituus sekä happimolekyylissä olevan kaksoissidoksen pituus. Mitä havaintoja teet?

Mallinnetaan molemmille molekyyille elektronipinnat esiin. Valitse **Setup** valikosta **surface**. Paina **Add**. Valitse seuraavasta avautuvasta ikkunasta alempaan alavetovalikkoon **potential**. Paina **Ok**. **Setup** valikosta valitse **submit**.

Kun lasku on valmis, värjäytyy pieni keltainen laatikko Surface ikkunassa keltaiseksi. Ruksaa tuo keltainen laatikko.

Tarkastele elektronipintoja. Missä on suurin elektronitiheys entä missä pienin? Mitä eroavaisuuksia happimolekyylin ja typpimolekyylin elektronijakaumissa on? Miksi?

Missä molekyyleillä on tiheimmin elektroneja. Miksi?



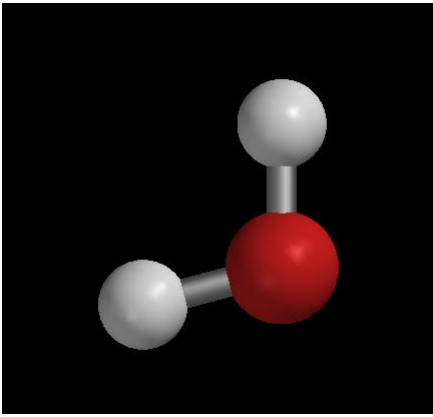
Sulje työ **File** valikosta kohdasta **close**.

### 3. Vesi

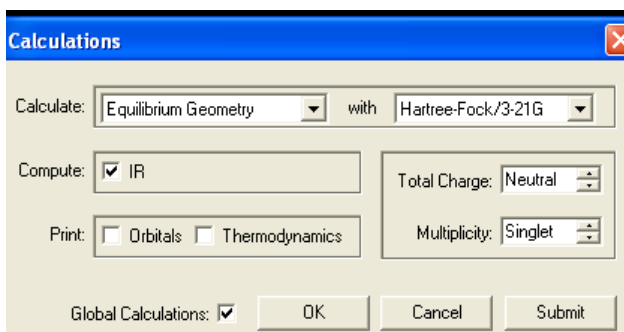
Vettä on myös ilmassa vesihöyrynä.

Mallinna vesimolekyyli tarkasteluikkunaan.





Laske veden tasapaino geometria ja ruksaa myös kohta IR.

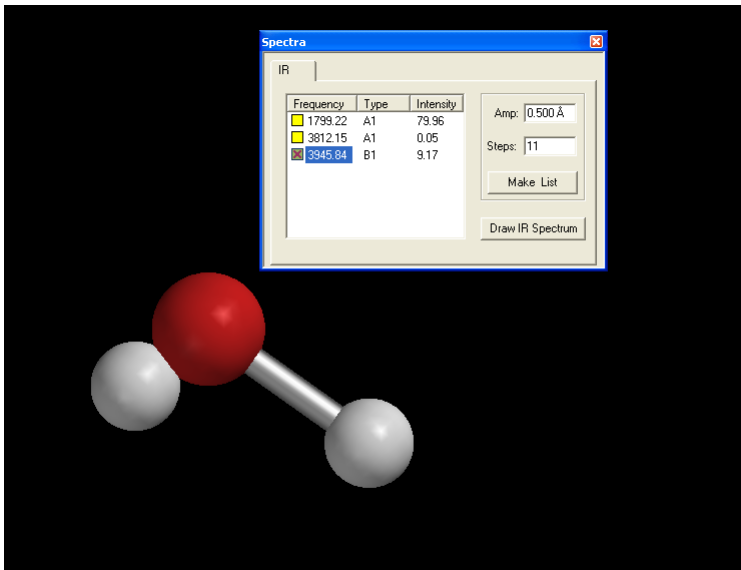


Miksi vesi on V:n mallinen vaikka toinen kolmiatominen molekyyli hiilidioksidi on rakenteeltaan suora? Tutki veden elektronipintaa.

Millainen on molekyylien liike? Milloin ne ovat ihan paikallaan.

Tutkitaan nyt vedelle ominaisia värähdyksiä infrapunaspektrin avulla.

Valitse ylävalikosta **Display** ja sieltä **spectra**. Avautuu ikkuna, jossa on kolme keltaista laatikkoa. Ruksaa ne yksitellen. Nämä ovat vesimolekyylille ominaisia värähdyksiä. värähdykset on laskettu käyttäen oletuksena, että lämpötila on  $-273,15$  celsius astetta. Ovatko molekyylit koskaan paikallaan?



Sulje työ **File** valikosta kohdasta **close**.

#### 4. Etanoli

Mallinnetaan etanoli molekyyli tarkasteluikkunaan.

Tutkitaan etanolimolekyylin sidospituuksia, sidoskulmia ja elektronipintaa kuten edellä ohjeissa on opastettu.

### 2.2 Pedagoginen toteutus

Mallinnuksessa käytetään runsaasti kyselevää opetusta sekä tutkimalla oppimista. Oppilaat tekevät aktiviteetit joko yksin tai pareittain. Ohjaajat vetävät ja kertovat itse samalla tehden kuinka toimitaan. Ohjaajat myös esittävät runsaasti omaan pohdintaan ohjaavia kysymyksiä.

### 3. Arviointilomakkeen yhteenveto

Tunnin alussa pidetystä lyhyestä powerpoint esityksestä oppilaille oli jäänyt hyvin mieleen tietokonemallintamisen edut ja käyttökohteet.

Oppilaat listasivat monia asioita, mitä he ovat tunnin aikana oppineet. Jakauma on seuraavan lainen: oppi mittaamaan sidoskulmia ja -pituuksia (14), käyttämään Spartanin ohjelmaa (8), kuinka elektronit sijoittuvat molekyylissä (8), molekyylin rakentamisen (8), "molekyylit tanssivat" (4) ja jotain muuta (6). Tunnilla esitetyt asiat olivat nähtävästi jääneet oppilaiden mieleen.

Oppilaista 74 % haluaisi käyttää Spartanin ohjelmaa koulussaan tai haluaisi opettajan käyttävän ohjelmaa opetuksessa. Perusteluiksi mainittiin muun muassa, että ohjelma on selkeä, helppo käyttää, nopeuttaisi oppimista ja auttaisi hahmottamaan molekyylejä paremmin. Oppilaista 26 % on sitä mieltä, ettei Spartani sovellu yläasteen opetukseen.

Oppilaat listasivat tunnin parhaan jutun seuraavasti: molekyylin rakentaminen (6), "molekyylin tanssi" (6) ja elektronipinnat (1). Yksi oppilas ei ollut kovin kiinnostunut aiheesta, mutta piti opettajia mukavina:)

Arviointilomakkeen lopussa kysyttiin vielä arvosanaa tunnin kiinnostavuudesta, alla olevassa taulukossa tulokset. Keskiarvoksi saimme arvosanan 7+.

