

RAPORTTI

Kemian mallit ja visualisointi

Raportti

Elina Rautapää

Piia Tikkanen

Johdanto

Mallinnusharjoitusta suunniteltiin 5. luokan opetussuunnitelman perusteisiin pohjautuen. Opettajaa konsultoitiin mahdollisesta mallinnustuokion aiheesta ja ehdotettiin vettä. Koska vesi sopi aiheeksi opettajalle ja se on kirjattu opetussuunnitelman perusteiden keskeisiin sisältöihin, valittiin se aiheeksi.

Opetussuunnitelman perusteissa (2004) ja oppimateriaalien perusteella valittiin keskeisistä sisällöistä mallinnustuokion aiheeksi veden rakenne ja liukoisuus. Liukoisuutta havainnollistetaan molekyylimallinnuksen, simulaation ja kokeellisuuden avulla.

Mallinnusohjelmaksi valittiin ChemSketch, koska ohjelma on yksinkertainen ja helppo käyttää. Lisäksi ohjelma on ilmainen, joten oppilaat voivat tehdä mallinnusta myös kotikoneellaan.

Teoria

Vesi on yhdiste, joka on muodostunut kahdesta aineesta; vedystä ja hapesta. Yleensä vety ja happi esiintyvät luonnossa kaksiatomisina molekyyleinä. Vedyllä ja hapella on suhteellisen alhaiset kiehumispisteet (vedyllä -253 °C , hapella -183 °C), joten ne ovat huoneenlämpötilassa kaasuja. Vety on erittäin räjähdysherkkä kaasu ja happi puolestaan tukee palamista. Vedyn ja hapen ominaisuuksia on koottu taulukkoihin 1 ja 2. Yhdistetä vesi, saadaan muodostettua, kun yhdistetään vetyä ja happea¹. Vesi koostuu kahdesta vetyatomista ja yhdestä happiatomista. Vesi on ominaisuuksiltaan hyvin erilainen kuin alkuaineet, joista se on muodostunut. Veden ominaisuuksia on koottu taulukkoon 3.

Taulukko 1. Vedyn ominaisuuksia.

Kiehumispiste (°C)	-253
Atomiluku	1
Atomimassa (g/mol)	1,008
Elektronien lukumäärä ulkokuorella	1
Kemiallinen merkki	H
Ominaisuudet	Alkuaine, kaasu huoneenlämpötilassa, räjähdysherkkä, käytetään polttoaineena

Taulukko 2. Hapen ominaisuuksia.

Kiehumispiste (°C)	-183
Atomiluku	8
Atomimassa (g/mol)	16,00
Elektronien lukumäärä ulkokuorella	6
Kemiallinen merkki	O
Ominaisuudet	Alkuaine, kaasu huoneenlämpötilassa, tukee palamista, ilman komponentti

Taulukko 3. Veden ominaisuuksia.

Kiehumispiste (°C)	100
Molekyyli massa (g/mol)	18,02
Kemiallinen kaava	H ₂ O
Ominaisuudet	Molekyyliyhdiste, koostuu kahdesta vetyatomista ja yhdestä happiatomista, neste huoneenlämpötilassa, käytetään sammuttamaan tulta

Vesi on hyvä liuotin monille yhdisteille. Vettä kutsutaankin usein yleisliuottimeksi. Huoneenlämpötilassa ja normaalissa paineessa vesi on poolinen yhdiste. Sen vuoksi se liuottaa hyvin poolisia yhdisteitä. Poolittomat yhdisteet liukenevat huonosti veteen. Tähän pätee sääntö; samanlainen liuottaa samanlaista, eli pooliset yhdisteet liukenevat hyvin poolisiin liuottimiin. Kun aine liukenee veteen vesimolekyylit settuvat ioni- tai poolisten yksiköiden ympärille, muodostaen X---H₂O sidoksia. Tätä kutsutaan hydratoitumiseksi.

OPS -kytkentä

Uusi opetussuunnitelman perusteet ilmestyi vuonna 2004. Siinä peruskoulun 5.-6. luokalle lisättiin kemian opetus, jota ei aikaisemmin ole ollut. 5.-6. luokan opetussuunnitelman perusteissa sanotaan seuraavaa; *Fysiikan ja kemian opetuksen lähtökohtana ovat oppilaan aikaisemmat tiedot, taidot ja kokemukset sekä ympäristön kappaleista, aineista ja ilmiöistä tehdyt havainnot ja tutkimukset, joista edetään kohti fysiikan ja kemian peruskäsitteitä ja periaatteita.* Vesi on yksi 5. luokan kemiassa käsiteltävistä aiheista. Se on mainittu erikseen opetussuunnitelman perusteissa. 5. luokan vesiaiheen keskeiseksi sisällöksi kuuluu mm. liukenevuus, joka on otettu huomioon mallinnusharjoitusta suunniteltaessa.

Pedagogiset perustelut

Vesi aihe kuuluu 5.luokan opetussuunnitelman perusteisiin, joten aihe on siksi valittu tähän mallinnusharjoitukseen. Liukenevuutta, joka kuuluu 5. luokan OPS:n vesi aiheen keskeisiin sisältöihin, havainnollistetaan tässä harjoituksessa molekyylimallinnuksen ja kokeellisuuden avulla. Kemian kokeellisuus ja mallinnus mainitaan myös 5. ja 6.luokan opetussuunnitelman perusteissa.

Mallinnustuokion tarkoitus oli johdatella lapsia näkemään mallien avulla yhtäläisyyksiä toisiinsa liukenevien molekyylien välillä sekä tekemään aiheeseen liittyviä hypoteeseja.

Mallinnusharjoituksen ohjeistus

Mallinnusharjoituksen tarkoituksena on havainnollistaa oppilaille vety- ja happimolekyylien rakennetta, sekä vesimolekyylin rakennetta. Lisäksi tarkoituksena on opettaa liukenevuutta mallinnuksen ja simulaation avulla. Mallinnusharjoituksena mallinnetaan etanoli ja oktaani, ja pohditaan periaatteella ”samanlainen liuottaa samanlaista” miksi etanoli liukenee veteen ja oktaani ei. Lisäksi havainnollistetaan ioniyhdiste natriumkloridin liukenemistä veteen simulaation avulla.

Ohjeet on tehty ChemSketchille, koska ohjelma on ilmainen ja näin mallinnusharjoituksia pystyy jatkamaan esimerkiksi kotona ja koulussa.

1. Vaihe: Vetymolekyylin mallinnus

- a) Valitaan vety H vasemmallalla olevasta valikosta ja viedään hiiren kursori piirtoalueelle. Klikataan hiiren vasenta näppäintä.
- b) Viedään hiiren kursori ilmestyneen H_2 :n päälle ja klikataan hiiren vasenta näppäintä uudestaan -> muodostuu H-H. Painetaan nappia 3D Optimization (toinen oikealta laskettuna, alarivissä).
- c) Klikataan oikealla yläkulmassa olevaa nappia (kolmas oikealta laskien, ylärivissä) 3D Viewer. Tämän jälkeen tarkastellaan vetymolekyyliä 3D Viewerissa. Painetaan nappia Auto rotate and change style (kuudes oikealta laskettuna) jolloin molekyyli alkaa pyörimään ja molekyylin mallinnusmuoto vaihtuu.

2. Vaihe: Happimolekyylin mallinnus

- a) Valitse oikealla olevasta valikosta happi O ja viedään kursori piirtoalueelle ja klikataan hiiren vasenta näppäintä. Muodostuu H_2O .
- b) Viedään hiiren kursori H_2O :n päälle ja klikataan hiiren vasenta näppäintä -> muodostuu HO-OH.
- c) Viedään hiiren kursori OH-ryhmien välissä olevan sidoksen päälle ja klikataan hiiren vasenta näppäintä -> muodostuu O=O.
- d) Klikataan nappia 3D Optimization.
- e) Klikataan oikealla yläkulmassa olevaa nappia (kolmas oikealta laskien, ylärivissä) 3D Viewer. Tämän jälkeen tarkastellaan vetymolekyyliä 3D Viewerissa. Painetaan nappia

Auto rotate and change style (kuudes oikealta laskettuna) jolloin molekyyli alkaa pyörimään ja molekyylin mallinnusmuoto vaihtuu.

3. Vaihe : Vesimolekyylin mallinnus

- a) Valitse vasemmalla olevasta valikosta happi O ja viedään kursori piirtoalueelle ja klikataan hiiren vasenta näppäintä. Muodostuu H_2O .
- b) Klikataan nappia 3D Optimization.
- c) Klikataan oikealla yläkulmassa olevaa nappia (kolmas oikealta laskien, ylärivissä) 3D Viewer. Tämän jälkeen tarkastellaan vetymolekyyliä 3D Viewerissa. Painetaan nappia Auto rotate and change style (kuudes oikealta laskettuna) jolloin molekyyli alkaa pyörimään ja molekyylin mallinnusmuoto vaihtuu.

4. Vaihe: Liukenevuuden tutkiminen; etanolin mallinnus

- a) Valitse vasemmalla olevasta valikosta hiili C ja vie kursori piirtoalueelle ja klikataan hiiren vasenta näppäintä -> muodostuu CH_4
- b) Viedään hiiren kursori CH_4 :n päälle ja klikataan kerran hiiren vasenta näppäintä. Viedään hiiren kursori toisen kerran CH_4 :n päälle ja klikataan hiilen oikeaa näppäintä -> muodostuu $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$
- c) Valitaan vasemmalla olevasta valikosta happi O ja viedään kursori toisessa päässä olevan CH_4 – ryhmän päälle. Klikataan hiiren vasenta näppäintä. -> muodostuu $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH}$
- d) Klikataan nappia 3D Optimization
- e) Klikataan oikealla yläkulmassa olevaa nappia (kolmas oikealta laskien, ylärivissä) 3D Viewer. Tämän jälkeen tarkastellaan vetymolekyyliä 3D Viewerissa. Painetaan nappia Auto rotate and change style (kuudes oikealta laskettuna) jolloin molekyyli alkaa pyörimään ja molekyylin mallinnusmuoto vaihtuu.

5. Vaihe: Liukenevuuden tutkiminen; oktaanin mallinnus

- a) Valitse vasemmalla olevasta valikosta hiili C ja vie kursori piirtoalueelle ja klikataan hiiren vasenta näppäintä -> muodostuu CH_4
- b) Vie kursori ryhmän päälle ja klikkaa hiiren vasenta näppäintä. Toista tämä aina päädyssä olevalle ryhmälle, niin että muodostuu kahdeksan hiilen ketju.

- c) Klikataan nappia 3D Optimization.
- d) Klikataan oikealla yläkulmassa olevaa nappia (kolmas oikealta laskien, ylärivissä) 3D Viewer. Tämän jälkeen tarkastellaan vetymolekyyliä 3D Viewerissa. Painetaan nappia Auto rotate and change style (kuudes oikealta laskettuna) jolloin molekyyli alkaa pyörimään ja molekyylin mallinnusmuoto vaihtuu.

Pohditaan mitä samanlaista on etanolin rakenteessa kuin vedessä, mistä johtuu että etanoli liukenee veteen mutta oktaani ei.

- 6. Vaihe: Liukenevuuden tutkiminen; NaCl- simulaatio
 - a) Tämä simulaatio on pohjustus kokeelliselle työlle (suolasateenkaari)
 - b) Natriumkloridin liukenemisen simulaatio löytyy osoitteesta http://phet.colorado.edu/simulations/sims.php?sim=Salts_and_Solubility
 - c) Aukaise simulaatio painamalla vihreää run now nappia.
 - d) Kun simulaatio on latautunut laske veden pintaa $2,0 \times 10^{-23}$ tasolle avaamalla hiiren kursorilla astian alareunassa oleva hana.
 - e) Pyydä oppilaita ravistamaan suolasirota kuvan yläreunassa, liikuttamalla hiiren kursoria. Suolaa pitää lisätä tässä vaiheessa vähän.
 - f) Havainnoikaa mitä tapahtuu kun suola liukenee veteen.
 - g) Lisätkää suolaa veteen niin paljon että siihen muodostuu keko.
 - h) Lisätkää vettä astiaan aukaisemalla astian yläreunassa oleva hana hiiren kursorilla. Lisätkää vettä niin paljon että suolakeko liukenee.

Kokeellisen työn ohjeistus

Kokeellinen työ pohjustetaan edellisessä luvussa esitetyllä simulaatiolla.

- 1) Oppilaat jaetaan neljään ryhmään, joista jokainen valmistaa eri pitoisen suolaliuoksen.
- 2) Ensimmäinen ryhmä liuottaa 1 tl suolaa 200 ml:n vettä.
- 3) Toinen ryhmä liuottaa 4 tl suolaa 200 ml:n vettä.
- 4) Kolmas ryhmä liuottaa 2 rkl suolaa 200 ml:n vettä.
- 5) Neljäs ryhmä liuottaa 8 rkl 200 ml:n vettä. (kaikki suola ei liukene).
- 6) Oppilaat värjäävät liuokset eri värisiksi karamelliväreillä ja pohtivat mikä liuoksista on raskain.

- 7) Opettajan johdolla kaadetaan liuokset isoon mittalasiin letkun ja suppilon avulla.
- 8) Liuokset kaadetaan varovasti suppiloon pienimmästä pitoisuudesta suurimpaan. Mitä varovaisemmin liuokset kaataa, sitä paremmat kerrokset mittalasiin saa ikäiseksi. Letkun päälle täytyy olla mittalasin pohjalla, koko ajan.
- 9) Lopuksi pohditaan miksi suolaliuokset pysyvät kerroksittain mittalasisissa.

Kyselyn tulokset

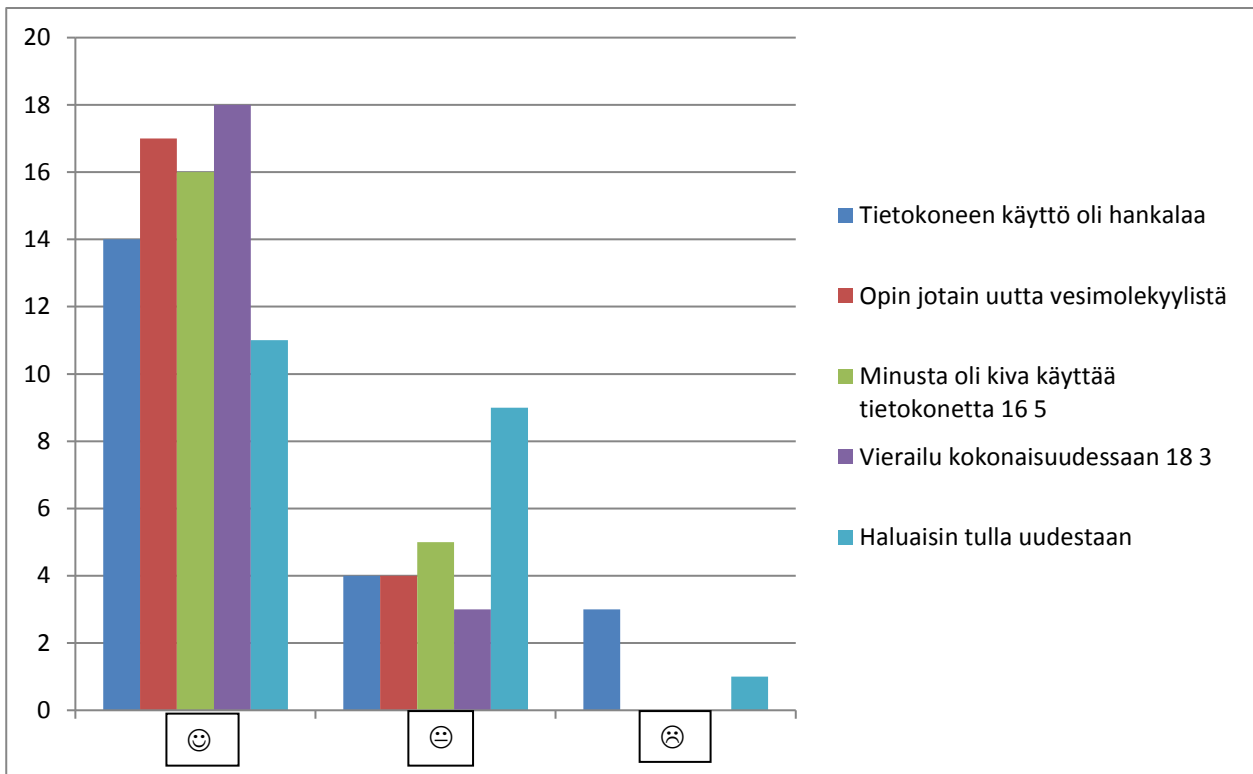
Teimme vierailijoille kyselyn, johon kaikki vastasivat. Kysymyslomake oli tarkoituksella tehty lyhyeksi (vain 7 kysymystä) sekä helpoksi vastata, koska vastaajat olivat vasta kymmenvuotiaita. Saimme 21 vastausta. Kyselylomake on liitteessä 1. Lomakkeessa esitettiin väitteitä, joihin vastaajat vastasivat joko olevansa samaa mieltä (hymynaama), ei samaa eikä eri mieltä (viiva suu) tai eri mieltä (mutrunaama). Keskimmäisen vaihtoehdon voi ehkä tulkita myös ”en osaa sanoa vaihtoehdoksi”. Kyselyn vastausten lukumäärät on esitetty taulukossa 4.

Taulukko 4. Kyselyn tulokset			
	☺	☹	☹
Sain tehtyä annetut tehtävät	21		
Ohjeet olivat selkeät	21		
Tietokoneen käyttö oli hankalaa	14	4	3
Opin jotain uutta vesimolekyylistä	17	4	
Minusta oli kiva käyttää tietokonetta	16	5	
Vierailu kokonaisuudessaan	18	3	
Haluaisin tulla uudestaan	11	9	1

Ensimmäiseen kysymykseen ”Sain tehtyä kaikki annetut tehtävät” sekä toiseen kysymykseen ”Ohjeet olivat selkeät” kaikki vastasivat hymynaamalla. Tämän perusteella voisi ehkä päätellä, että lasten mielestä ohjeet olivat tarpeeksi selkeät ja niiden avulla he saivat tehtyä kaikki antamamme tehtävät.

Seuraava kysymys koski tietokoneella työskentelyä. 14 vastaajaa oli samaa mieltä väittämän ”Tietokoneen käyttö oli hankalaa” kanssa. Tämän perusteella voisi päätellä, että lapset kokivat tietokoneella työskentelyn vaikeaksi. Kuitenkin edellisten kohtien perusteella voisi vetää myös sen johtopäätöksen, että lapset eivät olleet ymmärtäneet kysymystä oikein päin. Vastauslomakkeissa oli sellaisia vastauksia, joissa kaikki rastit oli laitettu samaan kohtaan (hymynaama), mikä voisi tarkoittaa sitä, että vastaaja ei ole jaksanut lukea väittämiä eikä vastata kyselyyn ajatuksella. Kolme kuitenkin oli vastannut olevansa eri mieltä väittämän kanssa (surunaama) eli ei kokenut tietokoneen käyttöä hankalana.

17 vastaajaa kokivat oppineensa jotain uutta vesimolekyylistä. Olisi ollut mielenkiintoista kysyä jatkokysymys, jolla selvitettäisiin tarkemmin mitä he kokivat oppineensa. 16 oppilasta olivat samaa mieltä väittämän ”Minusta oli kivaa käyttää tietokonetta” kanssa. Kukaan ei ollut eri mieltä, joten ehkä voidaan ajatella, että lapset pitävät tietokoneen käytöstä ja sen käyttö on luultavasti tuttua ja jokapäiväistä. 18 vastaajaa piti vierailusta, mutta vain 11 haluaisi tulla uudestaan. Yksi vastaaja ei haluaisi tulla uudestaan. Hänen kokemuksensa vierailusta oli ilmeisesti negatiivinen. Mukana olleen luokanopettajan käytös ei ollut kovin miellyttävää. Se häiritsi vierailun tunnelmaa erittäin paljon.



Kuva 1. Kyselyn tuloksia.

Jos luokanopettajaa ei oteta huomioon, niin vierailu oli oikein onnistunut. Lapset osallistuivat mielellään ja osasivat tehdä annetut tehtävät.

Pohdintaa

Mallinnustuokio oli onnistunut.