

Ilman kaasujen molekyylimallinnus
7-9 – luokkalaisten kiinnostuksen tukena

Jenni Västinsalo

Pro gradu- tutkielma

26.11.2009

Kemian opettajan suuntautumisvaihtoehto

Kemian koulutusohjelma

Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta

Helsingin yliopisto

Ohjaaja: Maija Aksela

Sisällys

1. JOHDANTO.....	3
2. ILMAN KAASUT.....	5
2.1 ILMA KÄSITTEEN KEHITYS.....	5
2.2 PALAMINEN JA HAPEN LÖYTYMINEN.....	9
2.3 TYPPI.....	14
2.4 ARGON.....	15
3. TIETOKONEPOHJAINEN MOLEKYYLIMALLINNUS	22
3.1 MALLIT KEMIAN OPETUKSESSA.....	22
3.2. MALLIEN LUONNE.....	23
3.3 MOLEKYYLIMALLINNUS KEMIAN OPPIMISEN TUkena.....	24
4. KIINNOSTUS.....	26
4.1 KIINNOSTUKSEN MERKITYS OPPIMISESSA.....	27
4.2 MOLEKYYLIMALLINNUS KIINNOSTUKSEN HERÄTTÄJÄNÄ JA TUKIJANA.....	28
5. KEHITTÄMISTUTKIMUS.....	30
5.1 TUTKIMUSKYSYMYKSET.....	30
5.2 TARVEANALYYSI.....	31
5.3 MATERIAALIN KEHITTÄMINEN.....	33
5.4 MATERIAALIN ARVIOINTI.....	35
6. TUTKIMUKSEN TULOKSET.....	37
6.1 TARVE KIINNOSTUSTA TUKEVALLE MALLINNUSMATERIAALILLE	37
6.2 KIINNOSTUSTA TUKEVAN MATERIAALIN TOTEUTUS.....	41
6.3 KIINNOSTUKSEN TUKEMINEN MALLINNUSTA HYÖDYNTÄEN.....	42
7. JOHTOPÄÄTÖKSET JA POHDINTA.....	51
7.1 TARVE KIINNOSTUSTA TUKEVALLE MALLINNUSMATERIAALILLE.....	51
7.2 KEHITETTY MATERIAALI OPPILAAN KIINNOSTUKSEN TUkena.....	52
LÄHTEET:.....	55
LIITTEET.....	62
1. KEHITETTY MALLINNUSMATERIAALI.....	62
2. MALLINNUSKORTIT OPPILAILLE	93
3. TARVEANALYYSIN KYSELYLOMAKE.....	96
4. MATERIAALIN ARVIOINTILOMAKE.....	97

1. Johdanto

Yläkoululaisten vähäinen kiinnostus kemiaa kohtaan on huolestuttavaa. PISA tutkimuksen mukaan alle puolet 9- luokkalaisista kokee kemian kiinnostavana. (Arinen & Karjalainen, 2006) Kiinnostukseen kemiaa kohtaan vaikuttavat lukuisat tekijät. Sillä, miten kemiaa opiskellaan, on merkitystä. Työtavan valinnalla on suuri rooli oppilaan kiinnostuksen heräämisessä. (Lavonen & al, 2005; Schraw & Lehman, 2001)

Lukuisissa tutkimuksissa on tuotu esiin, että oppilaita kiinnostaa tietokoneilla työskentely (esim. Lavonen & al, 2005) sekä tietokoneella tehty molekyylihallinnus (esim. Jääskeläinen & Aksela, 2008) Suomessa ei vielä tähän mennessä ole pyritty kehittämään tietokonepohjaista molekyylihallinnusta hyödyntävää materiaalia, joka perustuisi elementteihin, jotka tutkimuskirjallisuuden mukaan herättävät ja tukevat oppilaan kiinnostusta kemiaa kohtaan.

Tämä tutkimus on tilaustyö Heurekalta. Tutkimuksessa haluttiin kehittää kiinnostusta tukevaa mallinnusmateriaalia 7-9- luokkalaisille oppilaille, jota voidaan hyödyntää koulujen lisäksi tiedekeskus Heurekassa. Opettajat kokevat, että tietokonepohjainen molekyylihallinnus soveltuu parhaiten lukioon ja orgaanisten molekyylien mallintamiseen. (Aksela & Lundell, 2008) Tässä tutkimuksessa kehitetään materiaalia yläkouluun ilman kaasujen opetukseen mallinnusta hyväksi käyttäen. Tavoitteena on oppilaiden kiinnostuksen tukemisen lisäksi rohkaista myös opettajia hyödyntämään mallinnusta laajemmin kemian opetuksessa.

Mallinnuksen teemaksi on valittu ilman kaasut. Ilman kaasujen tutkimus on vaikuttanut laaja-alaisesti koko kemian käsitteistön muokkautumiseen. Ilman tutkimuksessa kiinteänä osana on ollut palamisen tutkiminen. Kun palaminen osoitettiin olevan hapen yhtymistä aineeseen ja flogistonteoria hylättiin, alkoi laaja kemian käsitteistön ja ilmiöiden uudelleen arvioiminen. (Partington 1989) Flogistonteorian avulla oli selitetty lukuisia kemian ilmiöitä ja reaktioita, jonka vuoksi sen hylkääminen aiheutti paljon vastustusta. (Engels & Nowak, 1992)

Luvussa 2 käsitellään ilman kaasujen historiaa sekä ilmakäsitteen kehitystä. Teoria on rajattu historialliseen näkökulmaan, sillä se on kehitetyn materiaalin näkökulma kaasujen kemiaan. Historiallisten tapahtumien esilletuominen opetuksessa tukee oppilaan käsitystä kemiallisen tiedon kehittymisestä sekä kemiasta tieteenä. Historiakontekstilla voidaan häivyttää oppilaiden vaihtoehtoisia käsityksiä ja lisätä kiinnostusta ja sitoutumista kemian oppimista kohtaan. (Monk & Osborne, 1997)

Luvussa 3 käsitellään mallien ja tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen käyttöä kemian opetuksessa sekä niiden mahdollisuuksia kiinnostuksen herättäjänä ja tukijana. Luku 4 tarkastelee kiinnostusta ilmiönä ja sen merkitystä oppimisessa.

On tutkittu, että opettajat kokevat tarvetta saada lisää materiaaleja ja koulutusta mallinnuksen hyödyntämiseksi opetuksessa. Opettajat kokevat mallinnuksen käytön oppimisen kannalta hyödyllisenä. (Aksela & Lundell, 2008) Tämän kehittämistutkimuksen ensimmäisessä osassa halutaan selvittää, kuinka tarpeellisenä oppilaat kokevat mallinnuksen käytön kemian opetuksen välineenä ja tuntevatko he tarvetta saada opetusta kiinnostusta tukevan mallinnusmateriaalin avulla. Opettajia ja heidän suhtautumistaan tietokonepohjaiseen molekyylihallinnukseen on tutkittu melko paljon (esim. Aksela & Lundell, 2008), joten tässä tutkimuksessa halutaan painottaa oppilaan kokemusta mallinnuksesta kiinnostuksen tukijana.

Kehittämistutkimuksen toisessa vaiheessa kehitetään kiinnostusta tukevaa molekyylin mallinnusmateriaalia yläkouluun tarveanalyysin ja tutkimuskirjallisuuden myötä nousseiden tavoitteiden suunnassa. Materiaali kehitetään ilman kaasujen historiasta kertovaan kehystarinaan. Kemian historia on tärkeä elementti opetuksessa kemian ja mallien luonteen esille tuomiseksi sekä kiinnostuksen tukemiseksi. (Monk & Osborne, 1997)

Kolmannessa tutkimuksen osassa tutkitaan, miten kehitetty materiaali tukee oppilaiden kiinnostusta. Tavoitteena on arvioida kiinnostuksen määrää sekä laatua.

Luvussa 5 on esitetty tutkimuksen toteutus ja luvussa 6 tutkimuksen tulokset. Luvussa 7 on tutkimuksen johtopäätökset sekä ehdotuksia jatkotutkimuksen aiheista. Johtopäätöksissä tuodaan esiin myös, miten tutkimuksen tuloksia tulisi huomioida opetuksen ja sen tutkimuksen kehittämisessä.

2. Ilman kaasut

2.1 Ilma käsitteen kehitys

Käsitys ilmasta on kokenut suuria muutoksia historian kuluessa. Koska ilman kaasut ovat näkymättömiä, hajuttomia ja mauttomia, ilmaa ei ole aina pidetty aineena. Ilman kaasujen erottaminen toisistaan aistein on lähes mahdotonta. Tämän vuoksi pitkään eli ajatus, että ilma itsessään on alkuaine. Näkymättömyyden on ollut vaikea käsittää ja ilma sai jopa jossain määrin yliluonnollisia määritelmiä, joista muistutuksena on monien ilmaan liittyvien sanojen etymologia. Kreikan kielen hengittämistä tarkoittava sana on hyvin samankaltainen kuin henkeä tai sielua tarkoittava sana. Samoin latinankieliset sanat *spiro*, hengittää ja *spiritus*, ihmisen sielu tulevat samasta kantasanasta. (Ramsay, 1905)

Vuonna n. 490 eaa syntynyt Empledokles todisti ensimmäisen kerran, että ilma on ainetta vaikka sitä ei voi nähdä. Kokeessaan hän käytti ajan mittaamiseen tarkoitettua kartiota, jonka päässä oli pieni reikä. Tästä reiästä kartiossa oleva vesi valui pois ja aika pystyttiin mittaamaan. Kun Empledokles käänsi kartion ylösalaisin ja sulki reiän sormellaan, ei kartioon tullut vettä sisään avoimesta pohjasta jos sen upotti veteen pystyasennossa. Hän oli todistanut ilman aineeksi. (Hudson, 2002) Seuraavan askeleen ilman kehityksessä otti Galileo Galilei (1564- 1662), joka väitti ilmalla olevan massa. (Engels & Nowak, 1992)

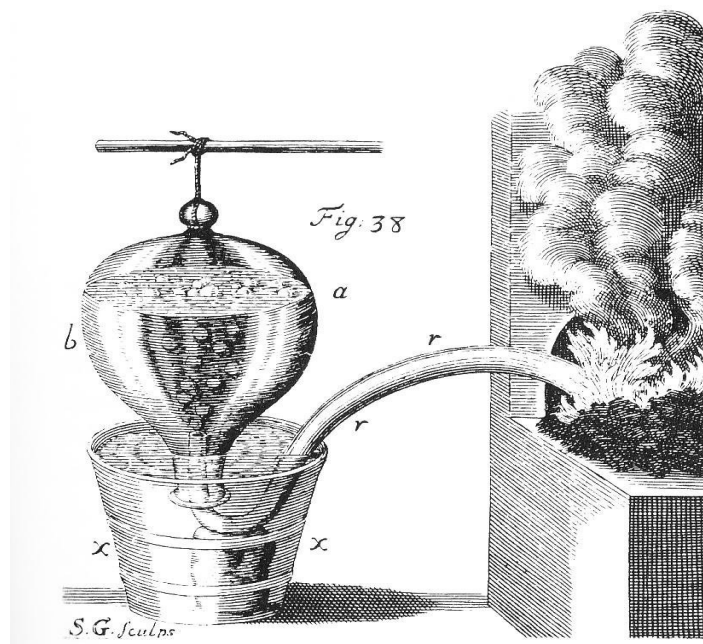
Empledokles esitti, että maailma koostuu neljästä peruselementistä maasta, tulesta, vedestä ja ilmasta. Platon oli ensimmäinen, jonka tiedetään käyttäneen termiä alkuaine. Aristoteles kehitti edelleen Empledokleksen ajatusta neljästä peruselementistä ja alkoi Platonin myötävaikutuksesta kutsua niitä alkuaineiksi. Käsitykset ilmasta yhtenä alkuaineena pitivät tiukasti pintansa aina 1700- luvun loppuun. (Partington, 1989)

Aleksandrialainen tieteilijä Zosimos oli n. 300 eaa lähellä löytää kaasut. Hän teki eron kiinteiden aineiden (body) ja näkymättömien aineiden (spirits) välille. Zosimos havaitsi, että näkymättömiä aineita voi syntyä kiinteistä ainesta ja näkymättömät aineet voivat liittyä kiinteisiin. (Partington, 1989)

Kaasu nimitystä on ensimmäisen kerran tietävästi käyttänyt belgialainen iatrokemisti Van Helmont (1579- 1644). Van Helmontin tutkimuksessa liekki, joka on ”vain palavaa savua”, katoaa suljetussa astiassa. Hän havaitsi myös, että hiiltä voitiin kuumentaa suljetussa astiassa sen katoamatta. 62 paunaa hiiltä sisältää 1 paunan tuhkaa ja 61 paunaa ”villia henkeä” (*spiritus silvestre*), joka pakeni sulkemattomasta astiasta. Van Helmont ilmoitti kutsuvansa tätä tuntematonta henkeä kaasuksi. (Partington, 1989)

Robert Boyle (1627- 1691) oli kemisti, joka alkoi kyseenalaistaa neljän alkuaineen maailmankuvaa. Häntä kutsutaan modernin kemian löytäjäksi, sillä Boyle ymmärsi merkityksen tutkia kemiaa sen itsensä takia eikä vain lääketieteen edistämiseksi. Boyle myös kehitti kemian täsmällistä kokeellista tutkimusta ja antoi selkeän määritelmän alkuaineelle kumoten neljä alkuaineen teorian. Boyle oli saanut runsaasti vaikutteita tutkimuksiinsa Van Helmontilta. Hän pystyi todistamaan, että kaasua pystyi varastoimaan pulloon. Boyle oli hyvin kiinnostunut ilmapaineesta. Hänen mukaansa on nimetty kuuluisa kaasulaki, jossa paineella ja tilavuudella on käänteinen suhde. Boyle uskoi, että paine johtuu partikkelien liikkeestä ja teki kolme johtopäätöstä ilman koostumuksesta: i) Ilmassa on höyryjä vedestä ja elävistä olennoista ii) ilmassa on hyvin hienovaraista säteilyä maan magneettikentästä, joka aiheuttaa valon aistimuksen iii) ilmassa on nestettä, joka pystyy puristumaan ja laajentumaan ja jolla on massa sekä kyky heijastaa valoa. (Partington, 1989)

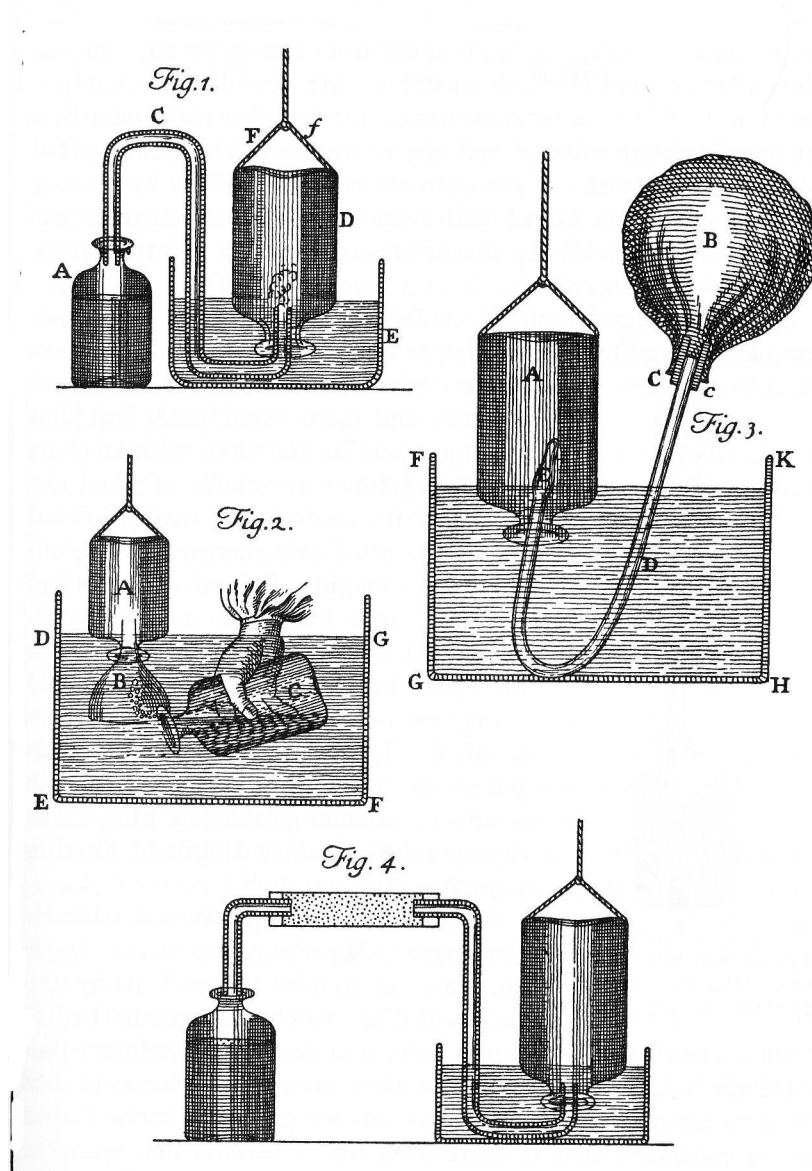
Ilman tutkimusta edisti voimakkaasti pappi Stephen Hales (1677- 1761), joka kehitti tavan kerätä ja varastoida kaasuja. Hales keksi pneumaattisen astian (Kuva 1), jolla pystyttiin keräämään palamisessa vapautuvia kaasuja. Hänen myötään kehittyi uusi tutkimusalue pneumaattinen kemia, joka keskittyi kaasujen tutkimukseen. Hän ei kuitenkaan pyrkinytkään tutkimaan kerättyjen kaasujen ominaisuuksia vaan uskoi, että kaikki kaasut olivat ilmaa, jotka sisälsivät joitain ylimääräisiä hiukkasia. Hiukkasilla hän selitti kaasujen ominaisuuksia mm. tulenarkojen kaasujen käyttäytymistä. (Hudson, 1992)



Kuva 1: Pneumaattinen astia (Partington, 1989, 92)

1700- luvun puolivälissä Joseph Black (1728- 1799) toi esiin ajatuksen, että ilma voisikin olla kaasujen seos. Black löysi tutkimuksillaan hiilidioksidin. Hän nimitti hiilidioksidia korjatuksi ilmaksi (fixed air). (Ramsay, 1905) Kun Black kuumensi emäksistä karbonaattia, vapautui kaasua, joka oli identtistä Van Helmontin löytämän kaasun kanssa. Black havaitsi emäksisessä karbonaatissa massan vähenemisen kaasun vapautumisen myötä. (Partington, 1898)

Cavendish (1731- 1810) kehitti monia laitteistoja, joilla kaasuja voitiin kerätä (kuva 2). Cavendish keksi vedyn olemassa olon käsitellessään metalleja vahvalla hapolla. Boyle oli saanut jo aiemmin samassa kokeessa vapautumaan kaasua pystymättä kuitenkaan selvittämään sen luonnetta tarkemmin. Cavendish kuitenkin huomasi vedyn alkuaineluonteen. Hän määritteli vedyn massan olevan 11 kertaa vähemmän kuin ilman massa. Cavendish päätteli ilman koostuvan yhdestä osasta happea (deflogistoitunut ilma) ja neljästä osasta typpeä (flogistoitunutta ilmaa). (Partington, 1989)



Kuva 2: Cavendishin kaasun tutkimuslaitteita (Partington, 1989)

Tiedemiehet olivat selvillä siitä, että ilma koostuu komponenteista, joilla on erilaisia ominaisuuksia. Ilmassa oli kaksi pääkomponenttia flogistoitunut ilma ja deflogistoitunut ilma tai tuli-ilma ja myrkyllinen ilma kuten Scheele (1742- 1786) niitä nimitti. Tarvittiin lukuisia tutkimuksia ennekuin keksittiin niiden alkuaineluonne. Antoine Lavoisier (1743-1794) havaitsi ensimmäisenä hapen alkuaineluonteen v. 1775 ja antoi sille nimen happi kreikankielisen ”hapon muodostaja ”sanan mukaan. Ranskalainen kemisti Jean-Antoine

Chaptal (1756- 1832) nimesi v. 1790 typen kreikankielisen sanan mukaan, joka tarkoitti soodan muodostajaa. Kesti hyvin pitkään ennen kuin kemistit lopettivat käyttämästä kaasuista nimityksiä, jotka viittaavat kaasujen olevan muunnelmia tavallisesta ilmasta. Vielä senkin jälkeen, kun Lavoisier alkoi käyttää hapestä nimitystä happi, hän käytti rinnalla ilmaisuja elinvoimainen ilma sekä palamaton ilma. (Holmes & Levere, 1999)

1800- luvun loppupuolella tiedemiehet pitivät ilman koostumusta täysin selvitettyinä. Kun argon sattuman myötä löytyi v. 1894, herätti löytö suurta huomiota, jopa epäuskoa. Argon antoi alkusysäyksen täysin uuden alkuaineiden ryhmän löytymisen, joista useat löytyivät myös ilmasta. Käsityksiä ilman kaasuista jouduttiin jälleen muokkaamaan, sillä argonin myötä löytynyt uusi ryhmä, jalokaasut, eivät reagoineet lainkaan normaaliolosuhteissa. (Ramsay, 1905)

Ilma käsitteen historiallinen tarkastelu tuo hyvin esille, miten eri tutkijoiden tulokset ovat riippumatta siitä, ovatko ne olleet oikeita vai vääriä, johdatelleet tutkimusta kohti ilman todellisempaa olemusta. Ilman tutkiminen ei johtanut pelkästään ilman ominaisuuksien selvittämiseen vaan varsinkin Lavoisierin löydökset aiheuttivat suuria mullistuksia kemian käsitteissä ja johtivat laajaan aineiden ja yhdisteiden olemuksen uudelleen arvioimiseen.

2.2 Palaminen ja hapen löytyminen

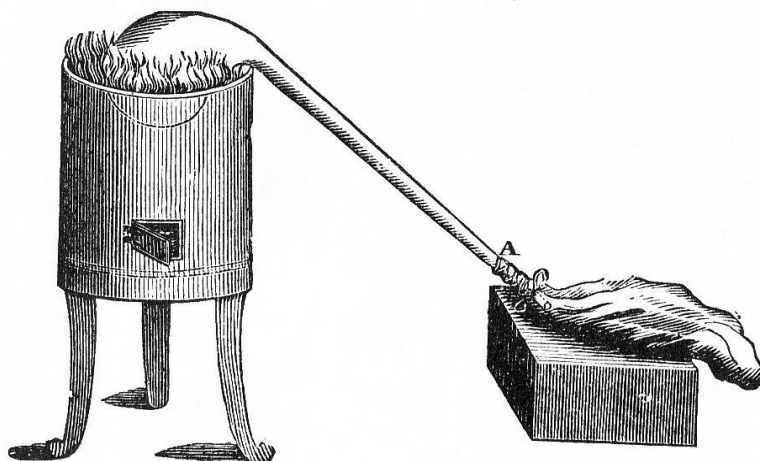
Kemistit olivat jo pitkään tienneet, että palaminen on tapahtuma, jossa aineet hajoavat yksinkertaisemmiksi aineiksi. Flogistonteoria on yksi tiukimmin pintansa pitäneitä selityksiä palamiselle. Flogiston teoria sai alkunsa v. 1669 Johan Joachim Becherin (1635- 1682) ajatuksesta, että kaikki kappaleet muodostuvat vedestä, ilmasta ja kolmesta erityyppisestä maasta: *terra pinque*, *terra mercurialis* ja *terra lapidea*. Palamisen hän selitti *terra pinquen* pakenemisella aineesta. Georg Ernst Stahl (1660- 1734) tarttui Becherin teoriaan ja kehitti sitä edelleen. 1703 hän toi esille teorian, jossa palaminen selitettiin flogistonin poistumisella aineesta. Flogistonin uskottiin olevan erittäin hienoa ainetta, joka pystyttiin havaitsemaan lämpönä ja valona vain sen poistuessa materiasta. Palamistuotteiden katsottiin olevan flogistoninsa menettänyttä alkuperäistä ainetta. Useat kemian ilmiöt pystyttiin selittämään flogistonin avulla. Robert Boyle (1627- 1691) oli pystynyt osoittamaan, ettei palaminen tapahdu tyhjiössä. Tästä tehtiin johtopäätös, että ilma absorboi flogistonia ja kun se tulee kylläiseksi, palaminen loppuu. (Hudson, 1992)

Flogistonteorian vallitsevina aikoina oli hyvin tiedossa, että metallien kalsinoinnissa eli palamisessa, niiden massa kasvoi. Boyle selitti massan kasvun tulevan metallikalkista, joka oli metallioksidia ja lämmöstä, jolla hän uskoi myös olevan massa. John Mayow (1641-1671) oli lähempänä totuutta väittäessään, että massan kasvu johtui metallikalkin ja tuli-ilman yhdistymisestä. (Ramsay, 1905)

Hapen löysi muutaman vuoden sisällä toisistaan riippumatta kaksi tutkijaa. William Scheele suoritti vuonna 1771 tutkimuksia ruunikivellä ja väkevällä rikkihapolla:



Reaktiossa syntynyttä kaasua hän kutsui tuli-ilmaksi. Scheele valmisti ”tuli-ilmaa” myös kuumentamalla elohopeanitraatteja ja kuumentamalla hopea- tai elohopeakarbonaattia, jolloin muodostui myös hiilidioksidia, jota Scheele kutsui ilmahapoksi (aerial acid). Kuvassa on esitetty Scheelen tuli-ilma keräyslaitteisto.

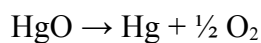


Kuva 3: Scheelen "tuli-ilman" keräyslaitteisto (Partington, 1989, 108)

Scheele havaitsi, että tuli-ilma absorboitui täydellisesti kosteaan rikin maksaan, joka on suurimmilta osin kaliumin polysulfideja. Polttaessaan fosforia ohuessa astiassa, se viileni. Paksuseinäisemmässä astiasta korkkia ei saanut irrotetuksi veden alla, mutta työnnettyä sisään kyllä. Scheele tutki ampiaista tuli-ilmalla täytetyssä pullossa. Pullossa oli hiukan

hunajaa sekä kalkkivettä. Viikon kuluttua ampiainen oli kuollut, soodavesi muuttunut maitomaiseksi ja melkein täyttänyt pullon. (Partington, 1989) Scheele yritti julkaista laajojen tuli-ilmalla tehtyjen kokeiden tuloksia vuoden 1771 lopussa, mutta kustantajan velkojen vuoksi niiden ilmestyminen tapahtui vasta v. 1777. (Engels & Nowak, 1992)

Sillä aikaa kun Scheele odotti tutkimuksiensa julkaisua, Joseph Priestly teki tahollaan omia tutkimuksia. Vuonna 1772 Priestly julkaisi kaasujen kemian kehittymisen kannalta tärkeän kirjoituksen *Observations on Different Kind of Air*, jossa hän kertoo tapoja kerätä kaasuja ja tuo esiin muutaman uuden kaasun valmistuksen. Priestly keräsi kaasuja Cavendishin tapaan elohopean päälle, jolloin kaasujen vesiliukoisuus ei häirinnyt tutkimustuloksia. (Partington, 1989) Priestly valmisti ensimmäisen kerran happea elokuussa 1774. Hän kuumensi kalsinoitua elohopeaa polttolasin avulla ja sai aikaan kaasua.



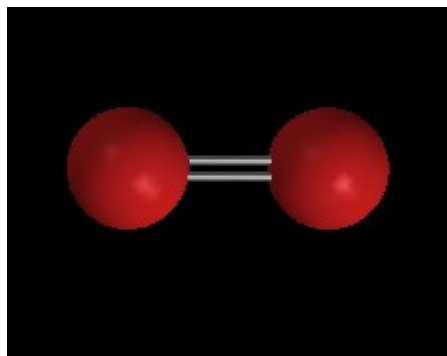
(Engel & Nowak, 1992)

Syntynyt kaasu oli lähes liukenematon veteen, sai kynttilän liekin palamaan kirkkaammin ja rautavillan säkenöimään. (Ramsay, 1905) Priestly kutsui löytämänsä kaasua deflogistoituneeksi ilmaksi. Hän ei uskonut löytäneensä uutta alkuainetta, vaan ajatteli kaasun olevan ilman muunnelman. Priestlyn työllä oli kuitenkin suurin vaikutus Lavoisierin tutkimuksiin hapella. (Holmes & Levere, 1999)

Priestley kertoi Lavoisierille tutkimuksistaan kalsinoidulla elohopealla. Lavoisier suoritti v. 1775 kokeen, jossa hän todisti metallien painon lisääntyvän reaktiossa hapen kanssa. Tämä havainto johti lopulta flogistonteorian aseman järkkymiseen ja palamisen selittymiseen aineen yhtymisellä happeen. Lavoisier oli ensimmäinen, joka viittasi palamisilmiön olevan vaikutusta hapen yhdistymisestä aineeseen. Kuitenkin jo ennen kuin happi oli edes löytynyt, tutkija Molonossoff esitti, että metallien palamisessa ilmassa olevat hiukkaset virtaavat aineeseen ja saavat aikaan massan kasvun.

Priestly uskoi, että happi oli ilmaa, josta flogiston oli poistunut ja Scheele näki hapen tuli-ilmana, joka tuotti flogistonin kanssa valoa ja lämpöä. (Engels & Nowak, 1992) Lavoisier alkoi käyttää uudesta kaasusta nimitystä happi (*oxygen*). Ennen happi nimityksen käyttöönottoa Lavoisier nimitti sitä mm. palamattomaksi ilmaksi ja elinvoimaiseksi ilmaksi. (Crosland, 1999)

Gay-Lussac teki 1800- luvun alussa merkittäviä havaintoja kaasujen suhteista, jolla ne reagoivat. Hän määritteli, että happi ja vety reagoivat tilavuussuhteessa 1:2, kun muodostuu 1 tilavuus vettä. Avogadro julkaisi oman teoriansa v. 1811, jossa hän osoitti samassa tilavuudessa, lämpötilassa ja paineessa olevan sama määrä kaasun partikkeleita, oli mikä tahansa kaasu kyseessä. 1850- luvulla hyväksyttiin Avogadron teoria, jolla hän pystyi selittämään havainnon, jossa yksi tilavuus happea muodostaa kaksi tilavuutta vettä. Tuolloin Avogadro toi esiin ajatuksen, että happi (kuva 4) ja vety esiintyvät kaksiatomisessa muodossa. (Ramsay, 1905; Partington, 1989) Avogadro oli esittänyt ajatuksensa jo paljon aiemmin, mutta ruotsalainen kemisti Berzelius, jolla oli paljon vaikutusvaltaa, ei hyväksynyt sitä. Monet kemistit liittyivät mieluummin Berzeliuksen linjaan, jossa kaksi samanlaista alkuainetta ei voinut liittyä yhteen. (Hudson, 1992)

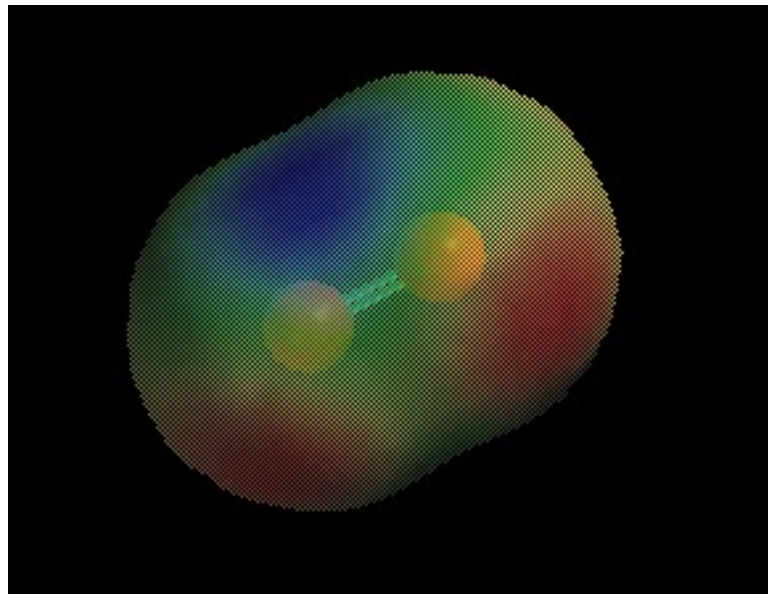


Kuva 4: Happi on kaksiatominen molekyyli

Dalton määritteli vuonna 1805 alkuaineiden atomipainoja. Hän määräsi vedyn atomipainoksi 1, johon kaikki muut atomipainot suhteutettiin. Daltonin atomipainojen mukaan happi sai atomipainon 5,5 (Hudson, 1992) Avogadron teorian pohjalta Stanislao Cannizzaro teki 1860- luvulla oman atomipainotaulukkonsa, joka oli hyvinkin lähellä nykyisin hyväksytyjä atomipainoja. (Partington, 1989) Lordi Rayleigh määritteli hapen atomipainoksi v. 1893 15,882 au hapen tiheyden perusteella. (Ramsay, 1905)

V. 1911 Daniel Rutherford (1871- 1937) esitti teoriansa alkuaineiden ydin- elektronirakenteesta. Hän määritteli sirontakokeiden avulla, että atomissa raskasta positiivista ydintä kiertää negatiivisten elektronien pilvi. Niels Bohr kehitti edelleen Rutherfordin atomiteoriaa v. 1913- 1915. Bohr selitti Mendeljeevin jaksollisen järjestelmän

atomimallinsa avulla. Bohrin työn myötä alettiin ymmärtää atomien reaktiot niiden uloimman kuoren elektronien kautta. (Heilbron, 1961) 1900- luvun alussa Gilbert Lewis julkaisi teoriansa atomien sitoutumisesta. Lewis esitti, että sidos voi syntyä myös elektroniparin jakamisen myötä. Jo aiemmin kehitetyn ionisidosmallin rinnalle syntyi teoria kovalenttisesta sidoksesta. Lewisin kovalenttisen sidoksen teoria auttoi ymmärtämään paremmin kaksiatomisten kaasujen ominaisuuksia. (Lewis, 1916) Kuvassa 5 on esitetty happimolekyylin elektronipintamalli.



Kuva 5: Hapen elektronipintamalli

2.3 Typpi

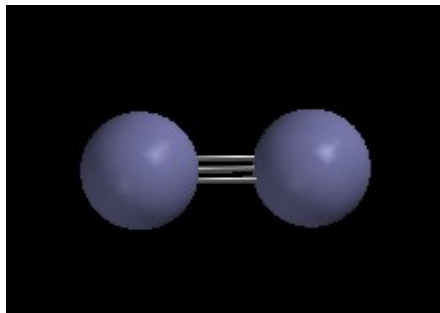
Typpi, kuten happi löytyi samoihin aikoihin usean toisistaan riippumattoman tiedemiehen toimesta. Lomonossov oli havainnut v. 1756, että kun metalleja kuumennetaan suljetussa astiassa ilmaa jää jäljelle. Cavendish huomasi, että johdettaessa ilmaa hehkuvien hiilien yli ja poistettaessa muodostunut hiilidioksidi kalilipeällä, jäljelle jääneen kaasun ominaispaine oli pienempi kuin ilmalla. Cavendish kutsui kaasua memfiittiseksi ilmaksi. Hän ei julkaissut heti tutkimuksiaan memfiittisestä ilmasta. (Engels & Nowak, 1992)

Daniel Rutherford (1749- 1819) julkaisi vuonna 1772 väitöskirjansa, jossa hän mainitsee myrkyllisen ilman. Rutherford oli Blackin oppilas ja jatkoi hänen tutkimuksiaan ilmalla. Rutherford on kuuluisa kokeistaan, joissa hän tutkii hiirillä ilman ominaisuuksia. Hän sulki hiiren ilmatiiviiseen astiaan. Kun hiiri kuoli, hän havaitsi ilman määrän vähentyneen kymmenyksellä. Edelleen kun jäännösilmaa käsiteltiin emäksellä, tilavuus väheni 1/11 osan. Rutherford havaitsi, että tämä jäljelle jäänyt ilma tukahdutti kynttilän liekin. Hän tutki myös mm. fosforin palamisreaktioita ja havaitsi, että fosfori hehkui edelleen ilmassa, jossa kynttilän liekki oli jo tukahtunut. (Partington, 1989)

Rutherford löysi typen poistamalla ilmasta ensin hapen palavan hiilen, fosforin tai kynttilän avulla. Syntyneen hiilidioksidin hän poisti emäksellä ja sai jäännöksen, jota myöhemmin alettiin kutsua typeksi. Rutherford selitti löydöksensä prosessin flogistonteorian avulla ja siksi hän kutsui typpeä flogistoituneeksi ilmaksi. (Partington, 1989)

Koska Rutherford julkaisi tutkimuksensa ennen Cavendishia, on hän periaatteessa typen löytäjä. Scheele ja Priestly olivat myös havainneet tutkimuksissaan typen ja kutsuivat sitä pilaantuneeksi ilmaksi ja flogistoituneeksi ilmaksi. Lavoisier ehdotti typen nimettäväksi *azoteksi* Kreikan elämää tukahduttavan sanan mukaan. (Engels & Nowak, 1992) Typpi nimettiin kuitenkin ranskalaisen kemistin Jean – Antoine Chaptalin ehdotuksesta kreikankielisen soodan muodostaja sanan mukaan. Suomenkielinen sana typpi tulee murren sanasta typehtyä eli tukehtua. (Häkkinen, 2004)

Gay- Lussac huomasi, että kaasujen reaktiot eivät noudata mitään selvää kaavaa massan suhteen. Ammoniakkia voitiin valistaa 3 grammasta vetyä ja 14 grammasta typpeä. Kaasujen reaktioiden tilavuudet sitä vastoin noudattivat kaavaa. Kolme tilavuutta vetyä ja yksi tilavuus typpeä muodostivat yhden tilavuuden ammoniakkia. Avogadro osoitti typen olevan kaksiatominen molekyyli (kuva 6). Typpimonoksidin muodostumisreaktio voitiin selittää kaksiatomisen typen hajoamisella kahtia ja liittyvän samalla tavalla hajonneeseen kaksiatomiseen happeen. (Hudson, 1992)



Kuva 6: Typpi on kaksiatominen molekyyli

2.4 Argon

Brittiläinen tutkija Henry Cavendish (1731- 1810) oli löytää argonin jo vuosina 1784-1785, kun hän suoritti kokeita ilmalla. Cavendish tutki ilman käyttäytymistä sen läpi johdettaessa kipinöitä. (Engels & Nowak, 1993) Cavendishin kokeessa tuli ilmi, että ilma sisältää yhden osan deflogistoitunutta ilmaa (happea) ja neljä osaa flogistoitunutta ilmaa (typpeä). Kun ilmaan johdettiin kipinöitä, typpi reagoi hapen kanssa ja yhdiste pelkistyi typpihapoksi. Typpi ja happi muodostivat dityppitetraoksidia, joka alkalisessa liuoksessa muodostaa nitriitti ja nitraatti-ioneja. (Holmes & Levere, 2000)

Typpi pystyttiin poistamaan ilmasta kipinöittämällä sitä ylimääräisen hapen kanssa ja antamalla reagoida alkaliseen liuokseen, kunnes molemmat ilman pääkomponentit olisivat poistuneet ja vähenemistä ei enää tapahtuisi. Lisätyn hapen Cavendish poisti edelleen seoksella, jossa oli kaliumin polysulfideja ja -sulfaatteja. Tämänkin jälkeen hänelle jäi edelleen pienen pieni kaasukupla testiputkeen. Kupla oli vain 1/120 osa putkeen johdetusta alkuperäisestä kaasumäärästä. Cavendish ei tiennyt eristäneensä juuri uuden alkuaineen. (Holmes & Levere, 2000) Vasta vuosisata Cavendishin tutkimusten jälkeen tämä pieni jäännös nousi uudelleen esille.

Sir William Ramsay (1852- 1916) oli ensimmäinen kemisti, joka jäi pohtimaan Cavendishin 1/120 osaa. (Holmes & Levere, 2000) Hän oli kirjoittanut itselleen muistiin Cavendishin elämästä kertovan teoksen marginaaliin kehotuksen miettiä tarkemmin salaperäistä pientä kaasujäännöstä. (Farber, 1953) Tämä marginaaliin kirjoitettu muistiinpano unohtui kuitenkin vuosiksi, kunnes Lordi Rayleighin tutkimukset ilman kaasujen tiheyksistä palauttivat sen taas Ramsayn mieleen.

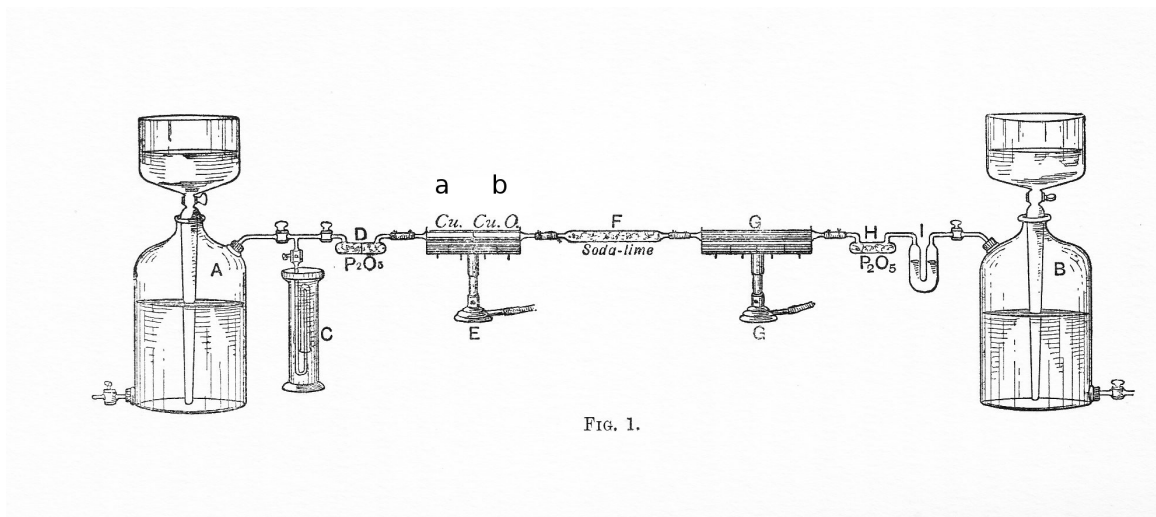
Lordi Rayleigh (1842- 1919) aloitti ilman kaasujen tiheyksien tutkimukset v. 1882. Vuonna 1893 hän julkaisi tuloksensa, jossa normaalipaineessa ja -lämpötilassa yksi litra happea painoi 1,42952 g, litra typpeä 1,25718 g ja litra ilmaa 1,29327 g. Näillä tuloksilla hän määrittä ilmassa olevan happea 20,941 % ja typpeä 79,059 %. (Ramsay, 1905) Rayleigh oli kuitenkin hyvin tarkka mittauksissaan, eikä näin ollen tyytynyt tuloksiin, joissa mitattu kaasu oli valmistettu vain yhdellä tavalla. Hän valmisti happikaasua kolmella menetelmällä: veden elektrolyysillä, kuumentamalla kloraatteja sekä kuumentamalla kaliumpermanganaattia. Eri tavoin valmistetuilla happikaasuilla saaduissa tiheystuloksissa ilmenevät eroavaisuudet olivat hyvin marginaalisia ja voitiin laskea koeolosuhteista johtuviin virheisiin. (Ramsay, 1905)

Vastaavasti Rayleigh halusi tutkia typen tiheyksiä eri valmistusmenetelmillä tuotetuista kaasuista. Yllättäen hän huomasi jatkuvasti toistuvan tiheyseron verrattaessa ilmasta eristettyä typpeä ja laboratorio-olosuhteissa valmistettua typpeä. Ammoniakista valmistettu typpi oli kevyempää kuin ilmasta eristetty typpi. Ero oli vain 1/200. Rayleigh julkaisi elokuussa 1892 tuloksensa Nature -lehdessä toivoen jonkun kollegan pystyvän selittämään tiheyseron. Vastauksia ei kuitenkaan tullut. Rayleigh itse epäili, että ilmasta eristetty typpi

saattoi sisältää hiukan happea. Tämän oletuksen hän kuitenkin hylkäsi, sillä ilman komponenttien suhteiden mukaan $1/200$ ero ei olisi ollut mahdollinen. Hän piti todennäköisenä myös, että ammoniakista tuotettu typpi saattoi vielä sisältää hiukan vetyä tai osa näin valmistetusta tyypestä olisi saattanut hajota yksiatomiseksi typeksi. Hän tutki tätä vaihtoehtoa lisäämällä typen sekaan vetyä ja johtamalla kaasuseoksen hehkuvan kuparioksidin yli, joka hapettaa vedyn vedeksi. Tuloksena oli sama tulos typen tiheydessä kuin ilman vedyn lisäyskoetta. Todennäköisimpänä Rayleigh piti kuitenkin mahdollisuutta, että typpi kuten happi, kipinän vaikutuksesta muodostaisi kolmeatomista allotrooppia. Hän oletti, että jokin näkymätön sähköinen purkaus olisi voinut aiheuttaa typen kolmiatomisen allotroopin syntymisen ilmassa ja näin kasvattaa ilman typen tiheyttä. Rayleigh ei kuitenkaan saanut aiheutetuksi tiheyden muutosta johtaessaan sähköpurkauksen laboratorio-oloissa valmistettuun tyypeen. (Ramsay, 1905) Ramsay pyysi Rayleighilta lupaa tutkia edelleen tiheyserojen syytä. Hän uskoi, että kyseessä saattaisi olla mahdollisesti uusi alkuaine. (Hudson, 1993)

Ramsay oli aiemmissa typen ja vedyn reaktion tutkimuksissa pannut merkille, että hehkuva lastuiksi vuoltu magnesium absorboi tehokkaasti typeä. Ramsay käytti tätä havaintoa hyväksi tutkiessaan ilmakehän typeä. Hän poisti ilmasta hapen ja antoi jäljelle jääneen typen reagoida hehkuvan magnesiumin kanssa. Kun magnesiumin ja typen reaktio eteni, hän lisäsi edelleen typeä tutkimuslaitteistoon. Kun tunnettu määrä typeä oli reagoinut magnesiumin kanssa, hän keräsi talteen elohopeapumpulla jäännöskaasun ja punnitsi sen. Hän havaitsi työssä tiheyden muutoksen. Tiheys oli kasvanut. (Ramsay, 1905)

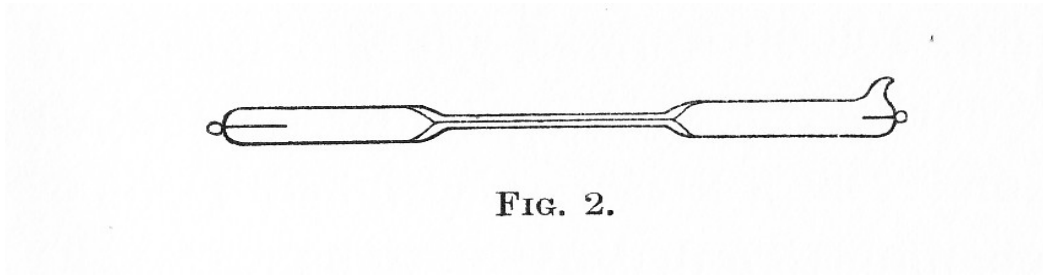
Ramsayn kokeen aikana tapahtunut typen tiheyden kasvu antoi viitettä uuden alkuaineen löytymisestä. Ramsay aloitti suuremman skaalan kokeet ilman typellä. Hän johti typeä 10 päivän ajan edestakaisin kuvan 7 mukaisessa laitteistossa.



Kuva 7: Laitteisto, jolla Ramsay eristi argonin (Ramsay, 1905, 160)

Laitteiston päissä oli vedellä osittain täytetyt kaasusäiliöt A ja B. Putkessa G oli hehkuvaa magnesiumia, joka reagoi typen kanssa muodostaen magnesiumnitridiä. Putkissa a ja b oli kuparia ja kuparioksidia, jotta mahdolliset hiiliyhdisteet saataisiin hapetettua vedeksi ja hiilidioksidiksi. Mahdollisen hiilidioksidin poistamiseksi laitteistossa oli putkissa F ja I natriumhydroksidi-kalkki seosta. Putkissa D ja H oli fosforipentaoksidia vesijäämien poistamiseksi kaasusta. (Ramsay, 1905)

Kun alkuperäinen kaasumäärä oli vähentynyt 1/8 osaan, se punnittiin ja tiheydeksi määritettiin 16,1. Tässä vaiheessa edelleen uskottiin, että jäännöskaasu saattaisi olla kolmiatomista tyyppiä. Ramsay yritti uudella tuoreella magnesiumilla saada eristettyä ”kolmiatomisen typen”. Merkittävää reaktiota ei kuitenkaan tuntunut tapahtuvan. Hän selvitti, kuinka paljon typpi oli reagoinut magnesiumin kanssa lisäämällä magnesiumin ja typen reaktiotuotteeseen vettä, jotta typpi vapautuisi ammoniakkinä. Tuloksena oli, että magnesiumnitridiä oli muodostunut häviävän vähän. Kun käsitellyn jäännöskaasun tiheys määritettiin, se oli 19,086. Tutkimukset jäännöskaasulla jatkuivat edelleen. Seuraavaksi Ramsay lisäsi pieneen osaan jäännöskaasua happea ja johti seokseen kipinöitä natriumhydroksidin läsnä ollessa. Kun hän poisti hapen ylimäärän, oli 15,4 % alkuperäisestä määrästä vähentynyt. Puhtaan jäännöskaasun tiheydeksi arvioitiin 20 kertaa niin paljon kuin vedyn tiheys. Ramsay tutki tuntemattoman kaasun spektrin Plückerin putkella (kuva 8). (Ramsay, 1905)



Kuva 8: Plückerin putki (Ramsay, 1905, 164)

Plückerin putkessa on platinajohtimet sinetöity molempiin päihin lasiputkea. Platinajohtimet kytketään Rühmkorffin kipinäinduktoriin. Rühmkorffin kipinäinduktori kehitettiin 1800- luvun alussa ja se muuntaa paristosta tai akusta saatavan virran korkeajännitteiseksi kipinöitä synnyttäväksi virraksi. Kun Plückerin putki täytetään tutkittavalla kaasulla ja kipinäinduktori kytketään toimintaan, alkaa putki hehkua. Prisman läpi katsottuna eri kaasut muodostavat kullekin ominaisen viivaspektrin. Ramsay sai esiin typen viivojen lisäksi myös punaisten ja vihreiden viivojen joukon, jotka eivät kuuluneet millekään tunnetulle kaasulle. (Ramsay, 1905)

Samaan aikaan Ramsayn tutkimusten kanssa lordi Rayleigh teki tahollaan omia tutkimuksia mahdollisesti uudeksi alkuaineeksi osoittautuvan kaasun kanssa. Yhdistettyään voimansa, Ramsay ja Rayleigh ilmoittivat juuri ennen British Association kokousta elokuussa 1894 löytäneensä ilmasta uuden alkuaineen. (Ramsay, 1905)

Uusi kaasu osoittautui yksiatomiseksi kaasuksi, jonka suhteellinen atomimassa oli Ramsayn lokakuussa 1895 suorittamien mittausten mukaan 39,88. Pian uuden alkuaineen löytymisen jälkeen kävi selväksi, ettei sitä ollut helppo saada reagoimaan. Se nimettiin argoniksi kreikan joutilasta tarkoittavan sanan mukaan. Ramsay yritti tuloksetta saada argonin muodostamaan yhdisteen hapen, hyvin elektronegatiivisen ja magnesiumin, yhden elektropositiivisimmista aineista kanssa. Reaktiota ei syntynyt vedyn ja kloorin kanssa. Merkkejä yhdisteen syntymisestä fosforin, rikin, telluriumin ja natriumin kanssa ei havaittu. Ensimmäinen reaktio, joka herätti tutkijoiden toiveet, oli tutkimukset reaktiosta hiilen kanssa. Kahden hiilisauvan välille synnytetään sähköpurkaus argonkaasussa.

Tuloksena oli kaasun tilavuuden kasvu. Kuitenkin jatkotutkimukset osoittivat, että kyseessä olikin hiilioksidien muodostuminen argonyhdisteen sijaan. Ranskalainen kemisti Marcellin Berthelot (1827- 1907) ilmoitti, että hän oli saanut argonin reagoimaan bentseeniin. Tämä todistettiin pian vääräksi. Ramsay tutki argonin reaktiivisuutta myös alhaisissa lämpötiloissa -185 °C. Loppujen lopuksi kaikki yritykset saada aikaan reaktio argonin kanssa epäonnistuivat. (Ramsay, 1905)

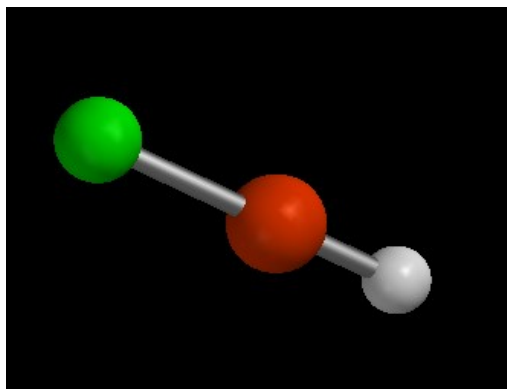
Helium löydettiin jo vuonna 1868 auringon spektristä. Pian argonin löytymisen jälkeen samanlaisen spektrin antava kaasu löytyi myös mineraaleista ja se osoitettiin maanpäälliseksi uudeksi alkuaineeksi. Helium oli argonin lailla yksiatominen inertti kaasu. Ramsay ennusti, että heliumin atomipainolla 4 ja argonin atomipainolla 40, väliin olisi asetettava vielä ainakin yksi samantyyppinen alkuaine atomipainolla 20. 30.5.1898 Ramsay löysi tutkijakollegansa Morris William Traversin kanssa kolmannen inertin yksiatomisen kaasun. Kaasu oli argonia raskaampi ja nimettiin kryptoniksi. Saman vuoden kesäkuussa löytyi Ramsayn olemassa olevaksi ennustama neon ja heinäkuun 12. kryptonin raskaampi ksenon. (Engels & Nowak, 1993) Vuonna 1900 Ramsay ja Travers esittivät, että uudet alkuaineet muodostaisivat kokonaan uuden ryhmän jaksolliseen järjestelmään. Ensin jalokaasut saivat paikan ryhmänä 0. Myöhemmin ne siirrettiin 8. pääryhmäksi. (Hudson, 1992)

Jalokaasuja pidettiin täysin reagoimattomina 1960- luvulle saakka. 1963 valmistettiin ensimmäinen jalokaasuyhdiste, joka oli ksenonheksafluoroplatinaatti. (Bartlett, 2003) Ensimmäinen argonyhdiste valmistettiin v. 2000 Helsingin yliopistolla professori Markku Räsäsen tutkimusryhmässä.

Argonyhdiste valmistettiin käyttämällä matriisi-isolaatiotekniikkaa. Argonia vietiin HF-pyridiinipolymeerin ylle huoneenlämmössä. Seos kondensoitiin 7 kelvin asteen lämpötilassa olevan CsI substraatin pintaan. Vedyn ja fluorin välinen sidos katkaistiin fotodissosiaatiolla. Kun lämpötilaa nostettiin 20 K:iin, kiinteästä argon kiteestä aktivoitui atomi vedyn ja fluorin väliin muodostaen neutraalin yhdisteen. HArF tunnistettiin infrapunaspektrin värähdystaajuuksien perusteella. H-Ar venytykselle tyypillinen tripletti absorptioalue havaittiin taajuuksilla 1965,7, 1969,4 ja 1973,2 cm⁻¹. Hydridoargonfluoridi osoittautui stabiiliksi alle 27 K lämpötilassa. n. 30 K lämpötiloissa H-Ar venytyksen absorptioalueet hälvenivät. Samalla kuitenkin taajuuksilla 2016,3 ja 2020,8 cm⁻¹ tuli esille H- Ar venytys. Tämä sinisiirtymä dupletti vastasi stabiilimman HArF:n syntymisestä

argonmatriisissa. Stabiilimpi HArF saadaan aikaiseksi hajottamalla epästabiili HArF lämmittämällä argonmatriisia 40 kelviniin. HArF:ia, joka absorboi alueella n. 2000, kutsutaan ”stabiiliksi” HArF:ksi erotuksena ”epästabiilista” HArF:sta, joka absorboi alueella n. 1970. Stabiili HArF hajoaa yli 40 K lämpötiloissa. (Räsänen & *al*, 2000; Khriachtchev & *al*, 2001)

Kvanttikemialliset laskut tukivat argonyhdisteen (kuva 9) olemassa oloa. Laskut suoritettiin laskutasolla CCSD(T)/aug-cc-pV5Z. HArF on lineaarinen molekyyli. H-Ar sidos on pituudeltaan 132,9 pm ja Ar-F sidos 196,9 pm. Laskennallisella 6,51 D dipolimomentilla HArF on voimakkaasti ioninen yhdiste, jossa argonilla on positiivinen +0,54 ja fluorilla negatiivinen -0,76 varaus. (Runeberg & *al*, 2001)



Kuva 9: HArF

3. Tietokonepohjainen molekyylimallinnus

3.1 Mallit kemian opetuksessa

Kemiassa on käytetty matemaattisia, visuaalisia ja verbaalisia malleja niin kauan kuin kemiallisia käsitteitä ja ilmiöitä on tutkittu. Mallien historiallisena maamerkkinä voidaan pitää 1800-luvun alussa kehitettyä Daltonin atomimallia. Tämän jälkeen tutkijat ovat aktiivisesti kehittäneet erilaisia malleja selittääkseen ja ennustaakseen niiden avulla ilmiöitä. (Gilbert & Justi, 2002)

Mallien käytön sekä niiden luonteen opettaminen ovat yksi kemian opetuksen tavoitteista. Nykyään tieteen opetuksen eräänä osana on sisällyttää opetukseen vakiintuneiden mallien käyttöä ja luonnetta sekä niiden roolia tieteellisen tiedon kehittämisessä. (Gilbert & al, 2000). Mallien käytön tarpeellisuutta opetuksessa ei tulisi vähätellä, sillä ne toimivat siltana tieteellisen teorian ja todellisuuden välillä. (Gilbert, 2005) Kemian opetuksessa on tärkeää auttaa oppilasta luomaan ilmiöistä ja käsitteistä omat representaatiot. Oppilaat käyttävät tieteellisiä malleja apuna luodessaan omia henkilökohtaisia mallejaan. (Treagust & al, 2002)

On olemassa neljänlaisia malleja: visuaalisia, symbolisia, konkreettisia ja verbaalisia. Materiaalinen malli on fyysinen objekti, jolla demonstroidaan ilmiötä, esimerkiksi prisma, jolla valo hajotetaan. Visuaalisessa mallissa on graafinen esitys, joka kuvaa esimerkiksi valon tuloa prismaan. Verbaalisella mallilla tarkoitetaan suullista esitystä ja symbolisella mallilla mallia, jossa voidaan hyödyntää matemaattisia esityksiä. (Gilbert et al. 1998 a)

Mallien avulla selitetään kemian ilmiöitä ja käsitteitä. Gilbert & al (2000) esittelevät viisi selitystyyppiä. Selitys voi olla intentionaalinen, deskriptiivinen, tulkitseva, kausaalinen tai ennustava. Intentionaalisella selityksellä pyritään tuomaan esiin motiivit, miksi ilmiötä pyritään selittämään. Deskriptiivinen selitys kuvaa ilmiön ominaisuuksia ja tulkitseva ilmiön niitä osia, joita ei voi silmin tarkastella. Kausaalisella selityksellä tuodaan esiin syyt, miksi ilmiö tapahtuu juuri tietyllä tavalla. Ennustavalla selityksellä vastataan kysymykseen mitä tapahtuisi, jos esimerkiksi olosuhteet muuttuisivat. Kaikki selitystyytit vaativat laajaa mallien käyttöä.

Konkreettisia malleja on hyvä käyttää deskriptiivisissä selityksissä. Ennustavat selitykset vaativat abstrakteja malleja, joten soveliaat mallit ovat matemaattisia, visuaalisia tai verbaalisia. Selityksiä tukevat mallit on valittava aina kysymyksen pohjalta. Relevantin mallin valinta selityksen tueksi on olennaista kemian oppimisen kannalta.(Gilbert & al, 2000)

3.2. Mallien luonne

Malleja käytetään tutkimuksessa ja opetuksessa kuvaamaan, selittämään ja tarkastelemaan ilmiötä, prosessia tai abstraktia käsitettä. Malli on käytännöllinen ja toimiva, jos se on yksinkertaisempi kuin kohde, jota se esittää. (Barak & Dori, 2000)

Mallit ovat tieteessä aina työvälineitä, joilla pyritään ennustamaan ja havainnollistamaan vuorovaikutussuhteita. Yhtä ilmiötä havainnollistamaan voidaan käyttää useaa erilaista mallia riippuen siitä, mitä nimenomaista näkökulmaa halutaan tarkkailla. Oppilaiden tulisi käsittää, että malli on aina vain yksi tapa kuvata ilmiötä tai käsitettä tietystä näkökulmasta. (Treagust & al, 2002) On tärkeää tuoda selkeästi mallin luonne esille opetuksessa. Malli on aina kehitetty palvelemaan tiettyä tarkoitusta ja kehittämään siihen liittyviä ajatuksia ja käsitteitä. Mallit eivät ole kopioita luonnosta ja mallintajalla on aina aktiivinen rooli mallinnusprosessissa. (Gilbert & al, 1998b) Oppilaiden käsityksiä malleista on tutkittu. Monella oppilaalla on käsitys, että malli on suora kopio luonnosta (Treagust & al, 2002). Samansuuntaisia tutkimustuloksia on saatu myös muista malleista ja niiden luonnetta koskevista tutkimuksista. (esim. Grosslight et al. 1991 ; Ingham and Gilbert 1991; Harrison & Treagust 1996)

Visuaalisia malleja on karkeasti jaoteltuna olemassa kahta tyyppiä: jäljennös, jolla on oikeat yksityiskohdat ja tarkkuus sekä epätarkkamalli, joka ei välttämättä ole lainkaan objektinsa kaltainen, vaan sen tarkoituksena on havainnollistaa kuinka tai miksi jonkin toimii tietyllä tavalla. Kun opetuksessa käytetään malleja, tulisi aina selvittää, minkälainen malli on luonteeltaan. (Treagust & al, 2002) Kemian mallit ovat useimmiten epätarkkoja malleja. Tunnetuimmat ja useimmin käytetyt mallit kemiassa ovat erilaiset molekyylihallit. Kuitenkaan yksikään tutkija ei väitä näiden mallien näyttävän oikeilta molekyylieltä. On yksinkertaisesti mahdotonta tietää, miltä molekyyli tai atomi todellisuudessa näyttää. (Francoeur, 1997)

3.3 Molekyylihallinnus kemian oppimisen tukena

Tietokonepohjaisella molekyylihallinnuksella on selkeitä etuja verrattuna fyysisten molekyylihallien käyttöön. Se mahdollistaa minkälaisen molekyylin tahansa rakentamisen, jossa atomeilla on määritellyt värit ja suhteelliset koot, jolloin tulos on tarkempi ja lähempänä modernia kemian tutkimusta. Oppilaat motivoituvat saadessaan itse koostaa malleja, heidän kolmiulotteinen hahmotuskykynsä paranee ja oppilaat saavat työskennellä oman tahtinsa mukaisesti. (Barnea & Dori, 1996) Tietokonepohjaisten molekyylihallien käyttö parantaa oppilaiden kykyä luoda omia representaatioita ilmiöistä ja käsitteistä sekä kehittää heidän kykyään tehdä ennustuksia mallien avulla. (Gilbert & Boulter, 1998).

Kemiallisia ilmiöitä tarkastellaan kolmella tasolla: makro-, mikro-, ja symbolitasolla. (Gabel, 1999) Makrotasolla tarkoitetaan esimerkiksi liuoksen kuplimista kemiallisen reaktion seurauksena, mikrotasolla tarkastellaan, mitä molekyylielle tapahtuu reaktiossa ja symbolitasolla pyritään selittämään ilmiö esimerkiksi reaktioyhtälöllä. Kemian ilmiön syvällinen ymmärtäminen vaatii kykyä yhdistää nämä tasot ja luontevasti liikkua niiden välillä. (Gabel, 1999) Oppilaille on haastavaa yhdistää makrotason ilmiöt mikrotasoon. (Aksela, 2005) Tietokonepohjaisella molekyylihallinnuksella voidaan luontevasti opettaa kemian ilmiöiden kaikkia tasoja sekä niiden yhteyttä toisiinsa. Tietokonepohjainen

molekyyylimallinnus tukee konstruktivistista oppimista. Oppilas aktiivisesti konstruoi tiedon, kun hän itse vuorovaikuttaa esillä olevan ilmiön kanssa. Oppilas joutuu haastamaan itsensä yleistämään käsityksiä, tekemään johtopäätöksiä ilmiöistä molekyylien rakenteen avulla ja joutuu liikkumaan kemian käsitteiden kaikilla tasoilla; mikro-, makro- ja symbolitasoilla. (Barnea & Dori, 1999).

Tietokonepohjainen molekyyylimallinnus tarjoaa mahdollisuuden tarkastella samaa ilmiötä eri malleilla, joka auttaa oppilasta ymmärtämään mallien luonteen. Oppilaat, jotka saavat itse rakentaa molekyyylimallit tietokoneen avulla, tarkastella malleja ja tehdä muutoksia niihin sekä ennustaa vuorovaikutuksia ja ilmiöitä, ymmärtävät paremmin mallien luonteen kuin oppilaat, jotka seuraavat opettajan esitystä liikkumattomista kaksiulotteisista malleista. (Barnea & Dori, 1999).

Kun oppilaat työskentelevät mallien kanssa, on hyvä tuoda esille mallien historiallista kehityskulkua. Opiskeltaessa kemian ilmiöitä mallien avulla historiakontekstissa, oppilaat tutustuvat kemiallisen tiedon kehitysprosesseihin. Prosessien kautta oppilaat saavat kemisteistä kuvan ihmisinä onnistumisineen ja erehdyksineen. Mallien historiaperustaisella opetuksella voidaan opetukseen sisällyttää tärkeää tietoa kemiasta muuttuvana, sosiaalisena, ihmisten aikaansaamana tuotoksena. (Justi, 2000)

Kemian monipuolinen osaaminen vaatii kolmiulotteista hahmotuskykyä. Osalle oppilaista on haastavaa kuvitella kirjan kaksiulotteinen malli kolmiulotteiseksi kappaleeksi. Koska tietokonepohjainen molekyyylimallinnus tarjoaa mahdollisuuden pyörittää ja tarkastella molekyyliä kolmiulotteisena tietokoneen ruudulta, se kehittää oppilaiden kolmiulotteista hahmotuskykyä. (Barnea & Dori, 1999)

Tietokonepohjainen molekyyylimallinnus on hyvä ja joustava opetuksen väline. Monet kemian selitykset tehdään verbaalisilla malleilla. Tietokonepohjainen molekyyylimallinnus on helppo ja nopea tapa käyttää visuaalisia malleja verbaalisten mallien tukena. Oppimista tukee monipuolinen mallien käyttö. (Barnea, 2000) Modernilla molekyyylimallinnuksella on mahdollista visualisoida, muokata ja muuttaa jo olemassa olevia malleja opetuksen tarpeiden mukaisiksi. (Aksela & Lundell, 2008)

4. Kiinnostus

Kiinnostus määritellään ilmiöksi, joka tulee esiin ihmisen vuorovaikutuksesta ympäristöönsä. (Krapp, 2002). Kiinnostus on oleellinen osa luontaista motivaatiota, muttei ole välttämätön kaikissa motivaation muodoissa. (Deci, 1992) Toisin kuin monet muut motivaation osa-alueet, kiinnostus on aina suuntautunut joltain tiettyä asiaa tai objektia kohtaan. (Krapp, 2002) Kiinnostuksen laukaisema toiminta on mielihyvää tuottavaa. Jos toiminta on erityisen miellyttävää, on mahdollista kokea flow-tila, jossa yksilö syventyy täydellisesti tavoitteelliseen toimintaansa. Kun oppilas on kiinnostunut jostain, hän luo läheisen suhteen aiheeseen ja oppiminen johtaa syväoppimiseen, joka taas tarjoaa kyvyn soveltaa opittuja taitoja ja tietoja uusissa tilanteissa. (Lavonen & al. 2005)

Kiinnostuksesta voidaan erottaa kaksi päähaaraa: henkilökohtainen kiinnostus ja ympäristön luoma tilannekohtainen kiinnostus. Henkilökohtainen kiinnostus nähdään vakaana ja on usein yhteydessä lisääntyvään tietoon ja positiivisiin tuntemuksiin. Ympäristön luoma tilannekohtainen kiinnostus on virikkeen luoma useita henkilöitä samanaikaisesti koskettava kiinnostus. (Krapp & al. 1992) Henkilökohtainen kiinnostus katsotaan usein oppimisen kannalta edullisemmaksi kuin tilannekohtainen kiinnostus, mutta sen tukemisessa luokkatilanteessa on erityisiä haasteita verrattuna tilannekohtaisen kiinnostuksen herättämiseen. Koska luokassa saattaa olla yli kaksikymmentä oppilasta, joilla jokaisella on jollain tavalla eroavat henkilökohtaisen kiinnostuksen kohteet, on opettajalle erityisen aikaa vievää ja vaativaa yrittää palvella kaikkien henkilökohtaista kiinnostusta. Tähän vaihtoehtona on tilannekohtaista kiinnostusta tukeva opetustuokio, joka huomioi tasapuolisesti oppilaiden kiinnostuksen. (Hidi & Andersson, 1992)

Henkilökohtaiselle kiinnostuneisuudelle on ominaista hidas herääminen, mutta se on usein pitkäkestoista. Henkilökohtainen kiinnostus voidaan jakaa piilevään ja tietoiseen (actualized) kiinnostukseen (Hidi & Andersson, 1992) Piilevä kiinnostus jaetaan edelleen kahteen osaan: tunneperäiseen ja arvoperäiseen. Tunneperäiselle kiinnostukselle ominaista on positiivisten tunteiden liittyminen aiheeseen. Arvoperäinen kiinnostus liittyy aiheen luomaan henkilökohtaiseen merkitykseen. Tietoiselle kiinnostukselle on ominaista kiinnostus aiheen sisältöön ja halu oppia sitä aiheen itsensä vuoksi. (Schiefele, 1991)

Tilannekohtainen kiinnostus herää usein nopeasti ympäristön luoman ärsykkeen vaikutuksesta ja saattaa vaikuttaa yhtä hyvin kuin olla vaikuttamatta pitkäkestoisen henkilökohtaisen kiinnostuksen heräämiseen. (Hidi, & Andersson, 1992) Tilannekohtaisen kiinnostuksen muuttuminen henkilökohtaiseksi kiinnostukseksi vaatii kolme askelta: Ensimmäisestä tilannekohtaisen kiinnostuksen heräämisestä (catch-facet) siirrytään tilannekohtaisen kiinnostuksen ylläpitämiseen (hold –facet), josta voidaan päästä edelleen pysyvän henkilökohtaisen kiinnostuksen tasolle. (Krapp, 2002) Oppimisen kannalta tärkeintä on, miten kiinnostus pystytään pitämään yllä. Kiinnostus saadaan pidettyä yllä, jos oppisisältö on merkityksellistä oppilaan pitkän tähtäimen tavoitteiden ja arvojen kanssa. (Mitchell, 1993)

Tilannekohtainen kiinnostus jaetaan kolmeen osa-alueeseen: suorituspohjainen (task-based), tekstipohjainen (text-based) ja tietopohjainen (knowledge-based.) Suorituspohjaisella kiinnostuksella tarkoitetaan tilannetta, jossa ohjeiden antotapaa tai tavoitteita muutetaan. Tietopohjainen kiinnostus luodaan relevantilla ensisijaisella tiedolla. Tekstipohjainen kiinnostus tarkoittaa opiskeltavan sisällön ominaisuuksia, usein kirjallisen tekstin kiinnostusta herättäviä ominaisuuksia. (Schraw & Lehman, 2001)

4.1 Kiinnostuksen merkitys oppimisessa

Kiinnostus opiskeltavaa aihetta kohtaan lisää oppimista. (esim. Krapp, 1992; Ainley & al, 2002) Lukuisissa tutkimuksissa on osoitettu, että oppilaan kiinnostus opiskeltavaa aihetta kohtaan lisää oppimisen määrää ja laatua. Oppilaan kiinnostuksella luonnontieteitä ja teknologiaa kohtaan on suuri merkitys luonnontieteiden oppimistuloksien kannalta. (Osborne & al, 2003). Shiefele & al (1992) tekemässä tutkimuksessa todetaan, että luonnontieteissä kiinnostuksen merkitys oppimistuloksiin on suurempi kuin muissa oppiaineissa.

Jos oppilas kiinnostuu annetusta tehtävästä, tapahtuu positiivinen aktivoituminen ja oppilaan huomio suuntautuu tehtävään. Oppilaalle syntyy mielihalu toimintaa kohtaan, joka johtaa tiedon karttumiseen. (Ainley, 2006) Oppilaat kokevat kiinnostavat aiheet tärkeiksi ja sen vuoksi muistavat ja oppivat niitä paremmin. (Shirley & al, 1992) Kiinnostumisen myötä oppimisessa voidaan päästä syväoppimiseen ja edelleen prosessiin, jossa oppiminen jatkuu läpi elämän. (Krapp, 2002)

4.2 Molekyylimallinnus kiinnostuksen herättäjänä ja tukijana

Luonnontieteiden ja kemian haasteena on oppilaiden kiinnostuksen lisääminen niiden opiskelua kohtaan. Oppilaat eivät koe luonnontieteitä juurikaan kiinnostaviksi ja pitävät muita oppiaineita usein kiinnostavampina. (Lavonen & al, 2005) Huomattavan vähän kiinnostavana oppilaat kokevat kemian keskeisimmät yksiköt atomit ja molekyylit sekä niiden ominaisuudet. (Lavonen & Byman, 2008) Oppilaita kuitenkin kiinnostaa työskentely tietokoneella ja tietokonepohjainen molekyylimallinnus koetaan kiinnostavana työtapana (Lavonen & al, 2005)

Hidi ja Renninger (2006) ovat luoneet neljävaiheisen mallin kiinnostuksen heräämisen vaiheista. Kiinnostuksen heräämisen ensimmäinen vaihe on tilannekohtaisen kiinnostuksen latautuminen. Toiseen vaiheeseen päästään, jos tilannekohtainen kiinnostus saadaan ylläpidettyä. Kolmannessa vaiheessa voidaan päästä nousevaan henkilökohtaiseen kiinnostukseen. Kolmannesta vaiheesta voi kehittyä edelleen pysyvä neljännen tason henkilökohtainen kiinnostus.

Tietyn työvälineen käyttö kemian opiskelussa voi laukaista oppilaissa tilannekohtaisen kiinnostuksen. (Schraw & Lehman, 2001) Oppilaat pitävät tietokoneella työskentelyä kiinnostavana (Lavonen & al, 2005), joten on perusteltua pyrkiä herättämään kiinnostusta kemiaa kohtaan käyttämällä myös kemian opiskelussa tietokoneita. Molekyylien visualisoiminen molekyylinmallinnusohjelmilla mahdollistaa erilaisten työtapojen käytön ja edistää oppilaiden kiinnostuksen herättämistä kemiaa kohtaan. (Suits, 2003)

Tietokonepohjaisella molekyylimallinnuksella voidaan tukea koko neljävaiheisen kiinnostuksen heräämisen prosessia. Tietokonetyöskentely on tehokas tapa herättää tilannekohtainen kiinnostus, joka on kiinnostuksen syntymisen ensimmäinen vaihe. Jos tietokoneella työskentelyyn liitetään oppilasta aktivoivia työtapoja kuten ongelmanratkaisutehtäviä tai ryhmätyöskentelyä, kiinnostuksen herääminen ja ylläpitäminen on todennäköisempää. (Hidi & Renninger, 2006)

Ohjeistamalla tietokonepohjaisen työskentelyn oppilaita aktivoivaksi, he kokevat olevansa itse vastuussa tehtävän etenemisestä. Tilannekohtainen kiinnostus saadaan ylläpidettyä, jos oppilas kokee sitoutuvansa tehtävään. (Mitchell, 1993) Tilannekohtainen kiinnostus alkaa muuttua henkilökohtaiseksi, kun saavutetaan tilanne missä oppilas kokee mielihyvää,

hänen tietonsa kehittyvät ja tiedon arvo tulee merkitykselliseksi oppilaalle. (Mitchell, 1993)

Jotta oppilas pääsisi kiinnostuksen korkeammille tasoille, on hänelle tarjottava mahdollisuus etsiä itse vastauksia mielenkiintoisiin kysymyksiin ja ongelmiin. (Hidi & Renninger, 2006) Tietokonepohjainen molekyylihallinnus mahdollistaa kemian ilmiöiden tutkimisen mallien avulla ja ideoiden testaamisen ja näin ollen tukee kiinnostuksen muuttumista pysyväksi.

Jotta oppilas voisi liikkua kiinnostuksen tasolta toiselle, hän tarvitsee tukea. Ilman tukea oppilaan alkanut kiinnostus voi jopa loppua. Neljänteen kiinnostuksen tasoon yltäminen on pitkä prosessi ja vaatii kumulatiivista, vähitellen kehittyvää kiinnostuksen saavuttamista ja ylläpitämistä. (Hidi & Renninger, 2006)

Barnea & Dori (1996) ovat tutkineet tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen vaikutusta oppilaiden kemialliseen ymmärrykseen ja sen affektiivisia vaikutuksia oppilaisiin. Tuloksena oppilaat kokivat oppineensa hyvin molekyylien kolmiulotteista hahmottamista, molekyylin rakenteen ja ominaisuuksien välistä yhteyttä sekä ymmärtämisen olleen helpompaa, koska he saivat työskennellä omassa rauhassa omaan tahtiin. Oppilaat kokivat tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen innostavaksi ja kiinnostavaksi tavaksi opiskella kemiaa sekä nauttivat mallintamisesta, koska he kokivat ymmärtävänsä ilmiöt paremmin.

Mikään yksittäinen työtapa ei pysty luomaan oppilaaseen pysyvää henkilökohtaista kiinnostusta. (Lavonen & al, 2005) Tietokonepohjaisella molekyylihallinnuksella voidaan kemian opiskelusta tehdä monipuolisempaa, jolloin oppilaan kiinnostus saa tukea.

5. Kehittämistutkimus

Tutkimuksen tavoitteena on kehittää yläkoulutasolle oppilaiden kiinnostusta tukevaa tietokonepohjaista molekyylimallinnusta hyödyntävää materiaalia. Tutkimus on kehittämistutkimus (Edelson, 2002), joka koostuu kolmesta osasta: materiaalin tarpeen analysoinnista, materiaalin kehittämisestä sekä kehitetyn materiaalin arvioimisesta.

5.1 Tutkimuskysymykset

Tutkimusta ohjasivat seuraavat tutkimuskysymykset

1. Kuinka kiinnostavana oppilaat kokevat tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen?
 1. 1 Miten tietokonepohjainen molekyylimallinnus vaikuttaisi oppilaiden mielestä kemian tuntien kiinnostavuuteen?
2. Millainen tietokonepohjaista molekyylimallinnusta hyödyntävä materiaali tukee kiinnostusta kemiaa kohtaan?
3. Miten tietokonepohjaiseen molekyylimallinnukseen kehitetty materiaali tukee oppilaiden kiinnostusta kemiaa kohtaan?

5.2 Tarveanalyysi

Tarveanalyysissä tutkittiin oppilaiden kiinnostusta tietokonepohjaista molekyylimallinnusta kohtaan sekä kartutettiin syitä, jotka oppilaiden mielestä tekevät mallinnuksesta kiinnostavaa tai ei kiinnostavaa. Tarveanalyysin tavoitteena oli saada tietoa kuinka kiinnostavana yläkouluikäiset kokevat tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen kemian opetuksen tukena sekä miten tietokonepohjainen molekyylimallinnus vaikuttaa kemian opiskelun kiinnostavuuteen oppilaiden mielestä. Tutkimusta ohjaavina tutkimuskysymyksinä olivat:

1. Kuinka kiinnostavana oppilaat kokevat tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen?
 1. 1 Miten tietokonepohjainen molekyylimallinnus vaikuttaisi oppilaiden mielestä kemian tuntien kiinnostavuuteen?

Tutkimus tehtiin kontrolloituna kyselytutkimuksena. Kontrolloidussa kyselytutkimuksessa saadaan hyvä vastausprosentti sekä voidaan paremmin kertoa tutkimuksen tavoitteista ja ohjeistaa lomakkeen täyttöön. Kontrolloidussa kyselytutkimuksessa luotettavuus paranee, sillä tutkittavat voivat kysyä selvennyksiä tai apua kyselylomakkeen täyttämiseen. (Hirsjärvi & al, 2009)

Tutkimukseen osallistui 60 8- luokkalaista oppilasta. Tutkimukseen valittiin umpimähkään neljä Kemianluokka Gadolinin mallinnustuokioon osallistunutta yläkoulun oppilasryhmää. Oppilaille pidettiin Kemianluokka Gadolinin tarjoama peruspaja tietokonepohjaisesta molekyylimallinnuksesta. Oppilailla ei ollut mitään aiempaa kokemusta tietokonepohjaisesta molekyylimallinnuksesta.

Oppilaille jaettiin kyselylomakkeet tietokonepohjaisen molekyylihallinnuspajan jälkeen. Kyselylomake (Kts. Liite 3: Tarveanalyysin kyselylomake) koostui suljetusta kysymyksestä, jossa oppilaat arvioivat Likertin viisiportaisella (Hirsjärvi & al, 2009) asteikolla tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen heissä herättämää kiinnostusta sekä yhdestä avoimesta kysymyksestä, jossa oppilaat arvioivat toisiko tietokonepohjainen molekyylihallinnus heidän mielestään lisää kiinnostavuutta kemian tunteihin ja miksi. Likertin asteikko oli 0-5, jossa 1= en ole lainkaan samaa mieltä, 2= olen jokseenkin samaa mieltä, 3= en ole samaa enkä erimielä, 4= olen jokseenkin samaa mieltä ja 5= olen täysin samaa mieltä. Oppilaille annettiin mahdollisuus vastata ”en osaa sanoa”, joka oli vaihtoehto 0. Mukana oli mahdollisuus valita neutraali vaihtoehto (vaihtoehto 3). Oppilailla ei ollut aikarajaa kyselyyn vastatessa ja heillä oli mahdollisuus kysyä tarkennusta epäselviin kohtiin.

Kyselylomake laadittiin mahdollisimman yksinkertaiseksi ja vain tutkimuksen kannalta olennaisiin asioihin keskittyvistä kysymyksistä. Tämän vuoksi lomakkeessa ei esimerkiksi kysytty vastaajan sukupuolta. Lomakkeen ulkoasu laadittiin selkeäksi ja kaikki kysymykset asetettiin yhdelle A4- lomakkeelle. Kyselylomake oli testattu oppilasryhmällä ennen tarveanalyysitutkimusta ja sitä oli paranneltu oppilaiden palautteen pohjalta.

Tutkimuslomakkeen ensimmäinen suljettu kysymys analysoitiin kvantitatiivisesti Open Office laskentataulukolla. Vastauksista analysoitiin tyyppiarvo, aritmeettinen keskiarvo ja frekvenssi. Avoin kysymys analysoitiin aineistolähtöisellä sisällön analyysillä. Vastauslomakkeet koodattiin, jotta yksittäisen vastaajan tuloksia voitaisiin esittää.

5.3 Materiaalin kehittäminen

Materiaalin kehittämisvaiheessa tutkittiin kirjallisuuden pohjalta, millainen materiaali tukee parhaiten kemian kiinnostavuutta tietokonepohjaista molekyylihallinnusta hyödyntäen. Materiaalin tavoitteissa huomioitiin tarveanalyysin tulokset ja painotettiin oppilaiden näkökulmasta kiinnostavia osa-alueita. Tutkimusta ohjasi tutkimuskysymys:

2. Millainen tietokonepohjaista molekyylihallinnusta hyödyntävä materiaali tukee oppilaiden kiinnostusta kemiaa kohtaan?

Tarveanalyysin ja tutkimuskirjallisuuden pohjalta materiaalille asetettiin tavoitteet.

Materiaalin tavoitteet:

- Herättää oppilaiden kiinnostus kemiaa ja molekyylien rakenteita kohtaan
- Tukea kemian kiinnostusta visualisoimalla molekyyliä
- Havainnollistaa ilmiöiden mikrotasoa ja oppilaiden lisääntyvän ymmärryksen avulla tukea kiinnostusta
- Kehittää oppilaiden kiinnostusta kemiaa kohtaan antamalla heille mahdollisuus tehdä itse molekyylihallinnusta sekä ennusteita ja johtopäätöksiä mallien avulla

Kehitettävän materiaalin aiheeksi valittiin ilman kaasut. Opettajien kokemusten mukaan tietokonepohjainen molekyylihallinnus sopii parhaiten orgaanisten molekyylien opetuksen yhteyteen (Aksela & Lundell, 2008). Materiaalissa haluttiin laajentaa mallinnuksen mahdollisuuksia myös alueelle, jossa opettajat kokevat mallinnuksen suhteen haasteita. ROSE tutkimuksen mukaan oppilaat eivät koe juurikaan kiinnostavana aineen rakenteeseen liittyviä kysymyksiä. (Lavonen, 2005) Materiaalissa tuodaan esiin aineen rakenteen yhteys sen ominaisuuksiin, jolloin kiinnostusta aineen rakennetta kohtaan saataisiin mahdollisesti parannettua.

Materiaali kehitettiin Spartan (Wavefunction) molekyylin mallinnusohjelmalle. Spartan on kaupallinen ohjelma, mutta sen edut ilmaisohjelmiin verrattuna ovat huomattavia. Spartan on monipuolinen ohjelma, jolla voidaan mallintaa mm. molekyylien kolmiulotteisia rakenteita, elektronipintoja sekä reaktioita.

Materiaalissa haluttiin painottaa historiallista näkökulmaa ilmaan ja sen kautta tuoda esiin kemian luonnetta tieteenä. Historiaan perustuvalla kehystarinalla pyrittiin lisäämään oppilaiden kiinnostusta kemian käsitteiden, prosessien ja ilmiöiden kehitystä kohtaan. Historianäkökulman käyttö kemian opetuksessa tukee oppilaiden motivaatiota ja sitoutumista oppimiseen (Monk & Osborne, 1997), joka taas kehittää kiinnostusta kohti pysyvää henkilökohtaista kiinnostusta. (Hidi & Renninger, 2006)

Materiaali kehitettiin niin, että oppilas on mallinnuksessa aktiivinen toimija ja tekee mallinnuksen itse opettajan suullisella ohjeistuksella. Tarveanalyysin mukaan (kts. kpl 5.2) oppilaat pitivät huomattavan kiinnostavana, että saivat tehdä itse mallinnusta. Kiinnostuksen syntymiseen ja kehittymiseen vaaditaan kompetenssin, pystyvyyden ja osaamisen tunnetta, jota voidaan tukea, kun oppilas saa olla aktiivinen toimija. (Mithcell, 1993)

Kehitetty materiaali pyrittiin laatimaan niin, että opettaja voi halutessaan suorittaa materiaalin kokonaisuutena tai valita siitä osia. Materiaali pitää sisällään myös yleisohjeen Spartan –molekyylin mallinnusohjelman käyttöön mallinnuksen monipuolisen harjoittamisen tukemiseksi.

Kehitettyssä materiaalissa annetaan ehdotuksia materiaalin hyödyntämisestä opintokäynnillä Tiedekeskus Heurekaan sekä tiedekerhossa tai -leirillä sovellettavaksi. Ehdotukset pitävät sisällään virittäytymisen aiheeseen, itse mallinnuksen sekä mallinnustuokion koonnin. (Escach, 2007) Virittäytymiseen ja koontiin on valittavissa tehtävien suorittaminen koulussa tai Tiedekeskus Heurekassa.

5.4 Materiaalin arviointi

Kehitettyä mallinnusmateriaalia ja sen toimivuutta kiinnostuksen tukijana tutkittiin oppilailla.

Materiaalin arviointia ohjasi tutkimuskysymys:

3. Miten tietokonepohjaiseen molekyylihallinnukseen kehitetty materiaali tukee oppilaiden kiinnostusta kemiaa kohtaan?

Kehitetyn oppimateriaalin kykyä vaikuttaa kiinnostukseen positiivisesti tutkittiin oppilailla. Tutkimuksessa oli kvalitatiivinen ja kvantitatiivinen osa. Tutkimusmetodina oli triangulaatio, joka sisälsi kyselytutkimuksen sekä semi-strukturoidun pienryhmähaastattelun. Triangulaatiossa käytetään kahta tai useampaa tutkimusmetodia mittaamaan yhtä tutkimuskohdetta. Triangulaatiolla voidaan saada syvällisempiä ja luotettavampia tuloksia tutkimusongelmiin kuin yhden metodin käytöllä. (Cohen & al, 2000) Tässä tutkimuksessa triangulaatiota käytettiin täyttämään kvantitatiivisen kyselytutkimuksen jättämiä aukkoja semi- strukturoidulla haastattelulla. Tavoitteena oli myös haastattelujen avulla vahvistaa kyselytutkimuksesta saatuja kvalitatiivisia tuloksia.

Kyselytutkimuksella haluttiin kartoittaa, kuinka paljon mallinnuksen mahdollistamat toiminnot kiinnostivat oppilaita sekä avoimilla kysymyksillä tutkia, miksi oppilaat kokevat mallinnuksen kiinnostavana ja miksi he kokevat sen epäkiinnostavana. Pienryhmähaastattelun tavoitteena oli selvittää syvällisemmin mallinnuksen oppilaissa herättämän kiinnostuksen laatua ja syitä.

Oppilaat suorittivat kehitetyn materiaalin (Kts. Liite 1: Kehitetty oppimateriaali) mukaisen mallinnustuokion, jonka jälkeen kaikki oppilaat vastasivat kyselylomakkeeseen ja osaa heistä haastateltiin kolmen hengen pienryhmissä. Kysely tehtiin kontrolloituna kyselytutkimuksena, jolloin voidaan paremmin ohjeistaa oppilaita vastaamiseen sekä antaa tarkennuksia ja selityksiä esiin tuleviin epäselvyyksiin (Hirsjärvi & al, 2009)

Kyselylomake laadittiin mahdollisimman selkeäksi. Kysymykset suunniteltiin mahtumaan yhdelle A4- lomakkeelle selkeyden ja vastausmotivaation takaamiseksi. Mitta-asteikkona käytettiin Likertin -asteikkoa, jossa oppilaat arvioivat kuinka samaa mieltä he ovat esitettyjen väittämien kanssa. Väittämät oli muotoiltu mahdollisimman yksiselitteisesti. Kaikki väittämät olivat positiivisessa valossa esitettyjä. Ennen lomakkeiden täyttämistä oppilaille kerrottiin lomakkeen tarkoitus. Oppilailla oli mahdollisuus kysyä, jos he eivät ymmärtäneet jotakin kohtaa. Lomakkeen täytölle ei annettu aikarajaa ja tila, jossa lomakkeisiin vastattiin, oli rauhallinen. Kyselylomakkeen toimivuus oli testattu oppilasryhmällä ennen varsinaista tutkimusta.

Kyselylomake (Kts. Liite 4: Materiaalin arviointi lomake) sisälsi kaksi osaa: Ensimmäisessä osassa oppilaat arvioivat kiinnostustaan tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen mahdollistamia toimintoja kohtaan suljetuilla kysymyksillä. Toisessa osassa oppilaat vastasivat avoimiin kysymyksiin, mikä heistä oli mallinnuksessa kiinnostavaa ja mikä ei kiinnostavaa.

Haastattelun ryhmäjako oli suoritettu jo ennen oppilaiden saapumista istumapaikkojen mukaan tavoitteena mahdollisimman sattumanvarainen otos. Haastattelu suoritettiin semi-strukturoituna ryhmähaastatteluna. Haastateltaessa yläkouluikäisiä ryhmähaastattelu on usein toimivampi kuin kahdenkeskeinen haastattelu. Lapset uskaltavat sanoa mielipiteensä paremmin, jos heillä on tukenaan ikäistään seuraa. (Hirsjärvi & Hurme, 2008)

Haastattelurunko oli testattu aiemmin oppilasryhmällä, jonka jälkeen sen toimivuutta edelleen parannettiin muuttamalla joidenkin kysymysten muotoa sekä muuttamalla haastateltavan ryhmän kokoa. Haastattelu järjestettiin häiriöttömään tilaan, jossa haastateltavat ja haastatteli ja istuivat ringissä. Haastateltaville kerrottiin haastattelun tavoite sekä heitä rohkaistiin tuomaan esiin niin myönteiset kuin kielteisetkin näkemykset. Haastattelut videoitiin. Videointia haluttiin käyttää nauhoituksen sijaan, jotta oppilaiden eleet ja ilmeet tulisivat mukaan vastauksiin.

Haastattelun tavoitteena oli selvittää oppilaiden tuntemuksia molekyylihallinnuksen käytöstä. Haastattelut litteroitiin ja aineistolle tehtiin aineistolähtöinen sisällönanalyysi. Oppilaiden mainitsevat adjektiivit mallinnukseen liittyen kerättiin ja jaettiin luokkiin, jotka nimettiin luokan sisältöä kuvaavaksi. Oppilailta kysyttiin syitä mallinnuksen

kiinnostavuuteen sekä ei- kiinnostavuuteen. Syyt luokiteltiin ja syntyneet luokat nimettiin. Myös haastattelussa pyydettiin oppilaita arvioimaan samanmielisyytensä väittämän ”Mallinnus oli mielestäni kiinnostavaa” kanssa viisiportaisella Likertin asteikolla, jossa 1= en ole lainkaan samaa mieltä ja 5= olen täysin samaa mieltä. Oppilaita pyydettiin arvioimaan, tuoko mallinnus lisää kiinnostavuutta kemian opiskeluun. Haastattelulla pyrittiin kuvailemaan tulokseen. Ainoastaan kysymys, jossa oppilaat arvioivat kiinnostuksensa numeerisesti kvantifioitiin. Tällä pyritään vertailemaan saatua keskiarvoa haastattelussa kyselylomakkeen vastaavan kysymyksen keskiarvoon luotettavuuden tukemiseksi.

6. Tutkimuksen tulokset

Tutkimuksen tulokset on seuraavassa esitetty tutkimuskysymyksittäin.

6.1 Tarve kiinnostusta tukevalle mallinnusmateriaalille

Taulukossa 1 on esitetty vastausten frekvenssi väitteeseen ”Tietokonepohjainen molekyylimallinnus on kiinnostavaa”. Suurin osa vastaajista koki olevansa väittämän kanssa jokseenkin samaa mieltä ja 15 oli täysin samaa mieltä. Oppilaat kokivat enimmissä määrin tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen kiinnostavaksi. Viisi vastaajaa arvioi väittämän vaihtoehdoilla ”en ole lainkaan samaa mieltä” tai ”olen jokseenkin eri mieltä”.

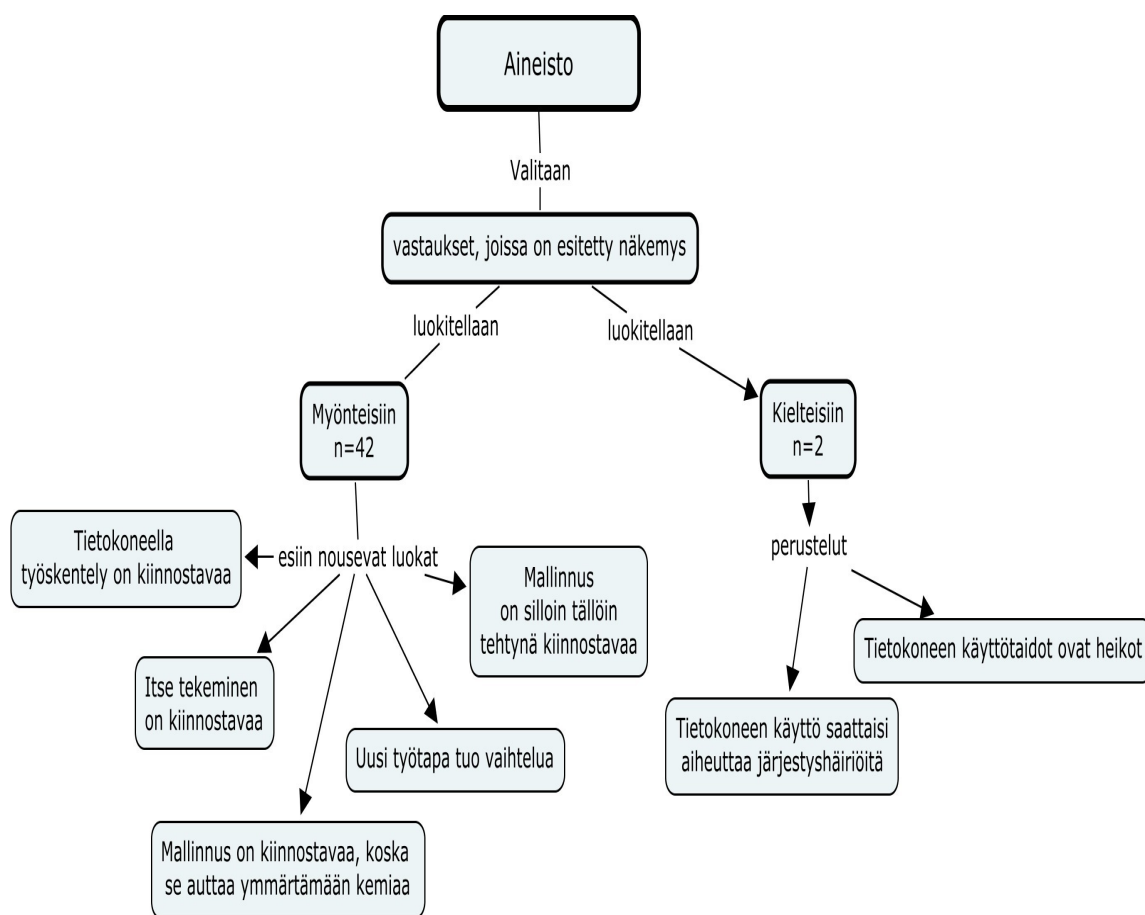
Taulukko 1: Oppilaiden kiinnostus mallinnusta kohtaan

Tietokonepohjainen molekyylimallinnus on kiinnostavaa	Vastaajien lukumäärä
0 en osaa sanoa	1
1 en ole lainkaan samaa mieltä	2
2 olen jokseenkin eri mieltä	3
3 en ole samaa enkä eri mieltä	14
4 olen jokseenkin samaa mieltä	24
5 olen täysin samaa mieltä	16
n=	60

Oppilaiden vastausten keskiarvo oli 3,76 ja tyyppiarvo 4. Keskiarvo on yli 3 ja tyyppiarvo 4. Jos oppilaan vastaus on enemmän kuin kolme, voidaan vastaus tulkita kiinnostuksen kannalta myönteiseksi. Vastaus kolme tulkitaan neutraaliksi.

Kyselylomakkeen avoimen kysymyksen ”Olisiko mielestäsi kiinnostavaa, jos koulussa käytettäisiin tietokonepohjaista molekyylimallinnusta kemian opiskelun tukena? Miksi?” vastaukset analysoitiin aineistolähtöisellä sisällön analyysillä ja luokiteltiin aineistosta nousseihin luokkiin. Luokitteluun otettiin mukaan vastaukset, joissa vastaaja oli perustellut kantansa. Oppilaiden vastaukset kirjattiin ylös ja luettiin rauhassa läpi. Perustellut vastaukset jaettiin ensin kahteen ryhmään: myönteisiin ja kielteisiin. Myönteisiä vastauksia oli 42 ja kielteisiä 2. Samansisältöiset vastaukset niputettiin yhteen esiluokiksi. Luokat kuvailtiin ja kuvailultaan yhtenevät luokat yhdistettiin. Perustelluista myönteisistä vastauksista nousi esiin kuusi luokkaa, jotka on esitetty käsitekartassa (kuva 10)

Tietokonepohjaista molekyylihallinnusta pidettiin kiinnostusta lisäävänä, koska se tuo vaihtelua kemian tuntiin uutena työtapana, siinä saa olla tekemisissä tietokoneen kanssa, saa tehdä itse, ymmärtää paremmin kemiaa ja tietokonepohjainen molekyylihallinnus oli silloin tällöin käytettynä kiinnostusta lisäävää.



Kuva 10: Oppilaiden näkemyksiä mallinnuksen tarpeellisuudesta

Vastaajista 16 koki tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen tuovan lisää kiinnostusta uutena, vaihtelua antavana työtapana.

”Toisi paljon, koska ei olisi vain kirjasta lukua!” (Oppilas 5a)

13 oppilasta tunsi kiinnostuksen lisääntyvän, koska mallinnus auttoi ymmärtämään kemiaa paremmin.

”Totta kai! Tajuaisi paremmin, mitä käytännön kokeissa tekee.” (Oppilas 9a)

”Kyllä, ymmärtäisi paremmin, miksi juuri tietyt aineet reagoivat ja miltä osin keskenään. Molekyylihallinnuksen käyttö ennen työtä on kivaa.” (Oppilas 54a)

Seitsemän vastaajaa piti tietokoneella ylipäänsä työskentelyä kiinnostusta lisäävänä.

”Kyllä, sillä nuoret saattaisivat kiinnostua asiasta enemmän, koska tietokoneet ovat muutenkin läheisiä heille arjessa.” (Oppilas 57a)

Kuusi vastaajaa uskoi itse tekemisen lisäävän kiinnostusta kemiaa kohtaan.

”Joo, koska se olisi hauskeempaa itse tehdä eikä vain katsoa kirjasta.” (Oppilas 36a)

Kielteiset vastaukset perusteltiin tietokoneen heikoilla käyttötaidoilla ja epäilyksellä, että tietokoneiden käyttö lisäisi järjestyshäiriöitä luokassa.

Tarveanalyysin otos oli melko pieni (n=60), joten tuloksia ei voi yleistää koko ikäryhmään. Tarveanalyysissä tuli kuitenkin hyvin voimakkaasti esiin, että oppilaat uskovat tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen tuovan lisää kiinnostavuutta kemian opiskeluun.

6.2 Kiinnostusta tukevan materiaalin toteutus

Kehittämistyön tuloksena syntyi historiapohjaiseen kehystarinan liitetty tietokonepohjaista molekyylihallinnusta hyödyntävä oppimateriaali. Oppimateriaaliin liitettiin ehdotuksia materiaalin toteuttamisesta opintokäynnin yhteydessä sekä leirillä tai kerhossa hyödynnettäväksi. Ehdotuksessa on tuotu esiin ehdotuksia virittäytymiseen sekä koontiin.(Escach, 2007)

Kehitetty materiaali alkaa Spartan tutuksi osiolla, jossa opetellaan käyttämään Spartan molekyylin mallinnusohjelman perustoimintoja.

Materiaalia kehitettäessä siihen liittyviä elementtejä testattiin jatkuvasti oppilasryhmillä Kemianluokka Gadolinin mallinnuspajojen yhteydessä. Oppilasryhmien suhtautumista havainnoitiin ja materiaaliin tehtiin havaintojen perusteella tarkennuksia ja parannuksia. Myös oppilaiden spontaanin palautteen kautta tehtiin kehitystyötä.

Mallinnus alkaa kehystarinalla, jossa kerrotaan hyvin varhaisista alkuainekäsityksistä sekä niiden muutoksista. Tarina jatkuu flogistonteoriaan, jolla selitettiin palamista. Kehystarinassa kerrotaan hapen löytymisen vaiheita. Flogistonteorialla ja hapen löytymisellä virittäydytään tarkastelemaan nykypalamisen käsitettä. Tämän jälkeen mallinnetaan happimolekyylin ominaisuuksia.

Kehystarina jatkuu typen löytymisellä. Kehystarinan myötä siirrytään pohtimaan typen käyttökohteita. Mallinnuksen avulla pyritään havainnoimaan typpimolekyylin ominaisuuksia.

Typen tutkimuksesta siirrytään kehystarinassa argonin löytymiseen, joka tapahtui hapen ja typen ominaisuuksien tutkimisen yhteydessä. Kehystarinassa kerrotaan, miten argonia luultiin ensialkuun typen kolmiatomiseksi allotroopiksi. Mallinnuksessa selvitetään, miksi typen kolmiatominen allotrooppi ei ollut järkevä vaihtoehto. Tavoitteena on myös tuoda esiin molekyylipainojen avulla, miksi argonia luultiin typen kolmiatomiseksi allotroopiksi.

Argonin löytymisestä siirrytään kehystarinan vaiheeseen, jossa kerrotaan jalokaasujen ominaisuuksista ja käsityksistä, etteivät ne voi reagoida. Mallinnuksessa mallinnetaan maailman ensimmäinen argonyhdiste ja tutkitaan sen ominaisuuksia.

Kehystarina tuo jatkuvasti esille tieteen käsitteiden kehitystä sekä inhimillisiä erehdyksiä ja sattumia keksintöjen vaikuttajina. Oppilaat pääsevät itse testaamaan ja tutkimaan molekyylien ominaisuuksia ja tekemään mallien avulla selityksiä liittyen kehystarinaan.

6.3 Kiinnostuksen tukeminen mallinnusta hyödyntäen

Oppimateriaalin toimivuutta testattiin viidellä oppilasryhmällä.

Oppilaat arvioivat kiinnostustaan tietokonepohjaista molekyylimallinnusta kohtaan viisi-portaisella Likertin asteikolla, jossa he arvioivat samanmielisyyttään esitettyjen väitteiden kanssa viisi-portaisella Likertin -asteikolla. (Hirsjärvi & al, 2009)

Seuraavassa on esitetty kyselylomakkeen suljettujen kysymysten tulokset. Kysymyksistä on analysoitu aritmeettiset keskiarvot, tyyppiarvo sekä vastausten frekvenssit. Yhtään tyhjää vastausta ei ollut. Vastaukset ”en osaa sanoa” otettiin mukaan frekvenssi tarkasteluun, mutta jätettiin pois keskiarvon määrittämisestä.

Väittämään ”Tietokonepohjainen molekyylimallinnus oli kokonaisuutena kiinnostavaa” oppilaiden vastausten aritmeettinen keskiarvo oli 4,0. Tyyppiarvo oli 4. Taulukossa 2 on esitetty vastauksien hajonnat.

Taulukko 2: Oppilaiden kiinnostus ilman kaasujen mallinnusta kohtaan

Kiinnostuksen taso	Tietokonepohjainen molekyylihallinnus on kiinnostavaa	Vastaajien lkm
0 en osaa sanoa		
1 en ole lainkaan samaa mieltä	4	
2 olen jokseenkin eri mieltä	0	
3 en ole samaa enkä eri mieltä	4	
4 olen jokseenkin samaa mieltä	23	
5 olen täysin samaa mieltä	22	
n=	58	

45 vastaajaa koki mallinnuksen kiinnostavana tai hyvin kiinnostavana. Neljä arvioi kiinnostuksen neutraaliksi. Neljä arvioi, ettei mallinnus herättänyt kiinnostusta.

Oppilaat arvioivat viisiportaisen Likertin-asteikon avulla kiinnostustaan tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen mahdollistamiin toimintoihin, jossa 1 vastasi täysin puuttuvaa kiinnostusta ja 5 voimakasta kiinnostusta.

Oppilaat arvioivat samanmielisyytensä väittämän ”koin kiinnostavana, että sain mallintaa itse” kanssa keskiarvolla 4,3. Tyypillisin vastaus oli 5. Molekyylien rakentamisen ja luomisen kiinnostavuuden keskiarvo oli 4 ja tyyppi-arvo 4.

Taulukossa 3 on esitetty frekvenssit, keskiarvot ja moodit itse tekemisen ja mallien rakentamisen kiinnostavuudesta.

Taulukko 3: Kiinnostus mallintamista ja molekyylien rakentamista kohtaan

Kiinnostuksen taso	Koin kiinnostavana, että sain mallintaa itse	Molekyylien rakentaminen oli kiinnostavaa
0 en osaa sanoa	3	1
1 en ole lainkaan samaa mieltä	2	2
2 olen jokseenkin eri mieltä	1	2
3 en ole samaa enkä eri mieltä	5	9
4 olen jokseenkin samaa mieltä	18	25
5 olen täysin samaa mieltä	29	19
Keskiarvo	4,3	4,0
Tyyppiarvo	5	4
n=	58	58

Oppilaiden kiinnostusta herätti huomattavasti mallien visuaaliset ominaisuudet. Oppilaat kokivat kiinnostavana molekyylien kolmiulotteisen rakenteen tarkastelun (ka 4,1, tyyppiarvo 4) ja molekyylien näkemisen (ka: 3,9, tyyppiarvo 5). Oppilaat arvioivat mahdollisuuden tarkastella molekyyliä eri malleilla kiinnostavaksi. Mahdollisuuteen nähdä eri esitystapoja samasta molekyylistä oppilaiden kiinnostuksen keskiarvo oli 3,7 ja tyyppiarvo 4.

Taulukossa 4 on esitetty visuaalisiin elementteihin painottuvien väittämien frekvenssit, keskiarvot ja tyyppiarvot.

Taulukko 4: Oppilaiden kiinnostus visuaalisia elementtejä kohtaan

Kiinnostuksen taso	Molekyylin kolmiulotteisen rakenteen tarkastelu oli kiinnostavaa	Molekyylin tarkastelu eri malleilla oli kiinnostavaa	Molekyylien ”näkeminen” oli kiinnostavaa
0 en osaa sanoa	1	1	2
1 en ole lainkaan samaa mieltä	1	3	3
2 olen jokseenkin eri mieltä	4	3	1
3 en ole samaa enkä eri mieltä	3	15	13
4 olen jokseenkin samaa mieltä	30	24	19
5 olen täysin samaa mieltä	19	12	20
Keskiarvo	4,1	3,7	3,9
Tyyppiarvo	4	4	5
n=	58	58	58

Oppilaat kokivat molekyylien ominaisuuksien selittämisen mallinnuksen avulla kiinnostavaksi (ka: 3,5, tyyppiarvo 4). Elektronipintojen tarkastelun kiinnostavuuden keskiarvo oli 3,6 ja tyyppiarvo 4. Sidospituuksien mittaamisen oppilaat arvioivat toiminnoista vähiten kiinnostavaksi. Kuitenkaan sidospituuksien mittaamista ei koettu epäkiinnostavana, sillä vastausten keskiarvo oli 3 ja tyyppiarvo 3. Kiinnostus sidospituuksien mittaamiseen oli neutraalia.

Taulukossa 5 on esitetty molekyylin ominaisuuksien selittämiseen käytettyjen elementtien kiinnostavuus.

Taulukko 5: Molekyylin ominaisuuksiin liittyvien elementtien kiinnostavuus

Kiinnostuksen taso	Molekyylien ominaisuuksien selittäminen mallien avulla oli kiinnostavaa	Elektroni-pintojen tarkastelu oli kiinnostavaa	Sidospituuksien mittaaminen oli kiinnostavaa
0 en osaa sanoa	2	4	3
1 en ole lainkaan samaa mieltä	4	2	9
2 olen jokseenkin eri mieltä	6	4	7
3 en ole samaa enkä eri mieltä	15	18	21
4 olen jokseenkin samaa mieltä	21	21	12
5 olen täysin samaa mieltä	10	9	6
Keskiarvo	3,5	3,6	3,0
Tyyppiarvo	4	4	3
n=	58	58	58

Kyselylomakkeen avoimet kysymykset analysoitiin aineistolähtöisellä sisällön analyysillä. Kysymykseen ”Mikä mallinnuksessa oli kiinnostavaa” muodostui kuusi luokkaa. Kysymykseen vastasi 55 oppilasta. Taulukossa 6 on esitetty muodostuneet luokat, luokkien frekvenssit sekä esimerkkejä oppilaiden vastauksista.

Taulukko 6: Oppilaiden esittämät syyt mallinnuksen kiinnostavuudelle

Luokka	Frekvenssi	Esimerkkejä
Saa itse olla aktiivinen toimija	11	<i>”Se, että sai itse kokea molekyyliden tekemisen ja eri rakenteiden syntymisen”</i> (Oppilas 4) <i>”Se oli kiva ku sai ite tehdä molekyylejä”</i>(Oppilas 25)
Molekyyliden rakentaminen	14	<i>”Kun sai itse rakentaa molekyylin alusta asti”</i> (Oppilas 44) <i>”Rakentelu oli mielestäni kiinnostavinta”</i>(Oppilas 21)
Molekyyliden ”näkeminen”	15	<i>”Muodostaa molekyylejä ja nähdä niitä kunnolla”</i> (Oppilas 3) <i>”Se kun sai selville, miltä tietty molekyyli näyttää eri kuvakulmista.”</i>(Oppilas 29)
Molekyyliden ominaisuuksien selittäminen mallien avulla	5	<i>”Se kun sen avulla voi ymmärtää molekyylin rakenteen ja toiminnan”</i> (Oppilas 53)
Mallinnuksen avulla ymmärsi paremmin	4	<i>”Kun sai katsella molekyylejä ja ymmärsi, mistä kemian tunnilla on puhuttu”</i> (Oppilas 45)
Kokonaisuus	3	<i>”Kaikki!”</i> (Oppilas 35)
Ei mikään	2	<i>”Ei mikään”</i>(Oppilas 19)
n=	55	

Molekyylien rakenteiden näkeminen teki 15 oppilaan mielestä mallinnuksesta kiinnostavan. Molekyylien rakentaminen oli 14 oppilaan mielestä kiinnostavaa. Tietokonepohjainen molekyylimallinnus koettiin kiinnostavaksi, koska ohjelman avulla sai tehdä itse mallinnusta. 11 oppilasta koki kiinnostuksen tulevan nimenomaan itse tekemisestä. Viisi oppilasta piti molekyylien ominaisuuksien selittämistä mallien avulla kiinnostavana ja neljä oppilasta kiinnostui, koska tunsivat oppivansa paremmin. Neljä oppilasta mainitsi kokonaisuuden olleen kiinnostava ja kaksi koki, ettei mallinnuksessa ollut mitään kiinnostavaa.

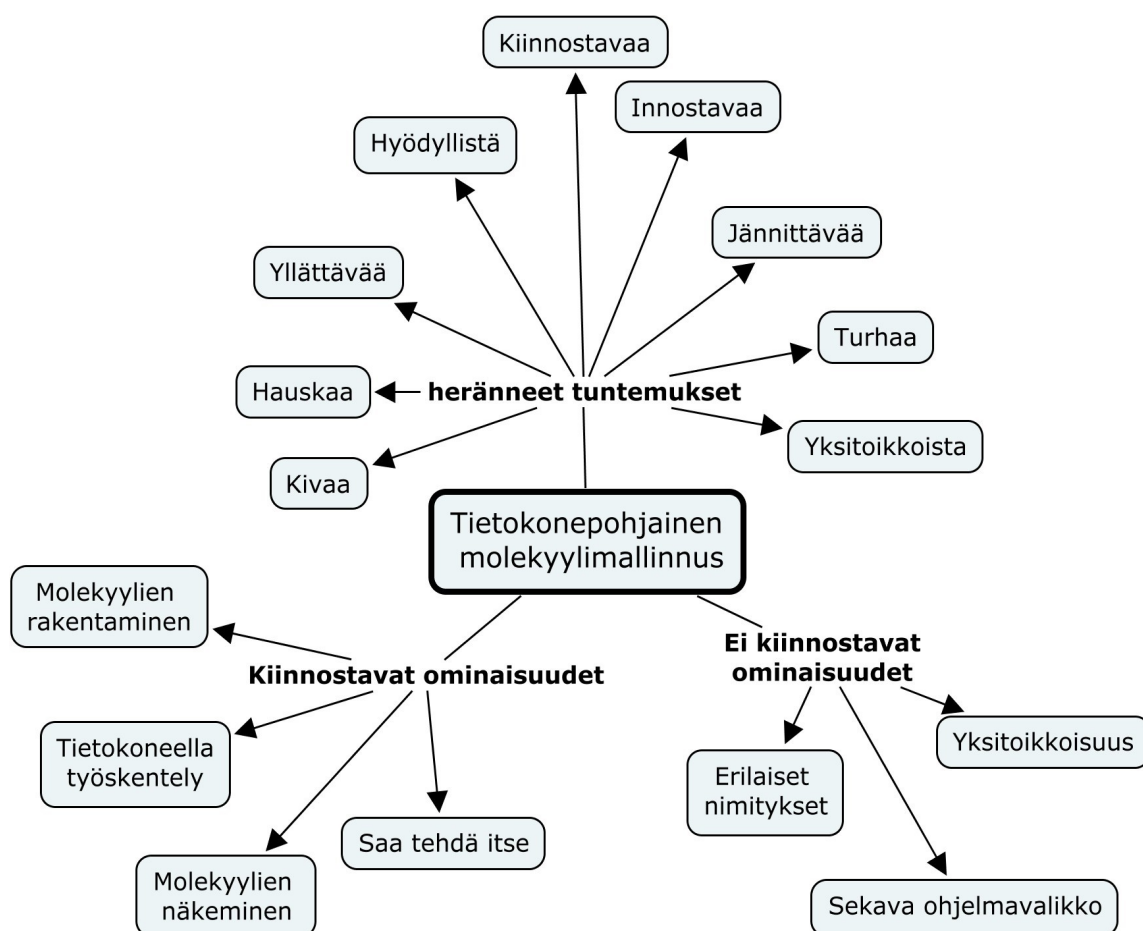
Avoimen kysymyksen toiseen osaan: ”Mikä mallinnuksessa ei ollut kiinnostavaa?” vastasi 40 oppilasta, joista 20 ilmoitti, että mikään ei ollut ei-kiinnostavaa. 20 oppilasta mainitsi epäkiinnostavan seikan. Mallinnuksen ei-kiinnostavista elementeistä muodostui kuusi luokkaa, joista yksi luokka on ”mikään ei ollut epäkiinnostavaa”. Luokat sekä frekvenssit ja esimerkit oppilaiden näkemyksistä on esitetty taulukossa 7.

Taulukko 7: Oppilaiden esittämät syyt mallinnuksen epäkiinnostavuudelle

Luokka	Frekvenssi	Esimerkkejä
Molekyylin koko	5	”Sidospituuksien mittaaminen ei ollut niin kiinnostavaa” (Oppilas 5) ”Massan katsominen” (Oppilas 27)
Ohjelmalla laskeminen	4	”Laskut” (Oppilas 47) ”Nimen keksiminen tallennukseen” (Oppilas 37)
Mallinnus oli haastavaa	5	”Se oli vähän sekavaa” (Oppilas 41) ”En ehtinyt tehdä niitä kaikkia” (Oppilas 46)
Ohjauksen kuunteleminen	3	”Se ku piti kuunnella jotain selitystä” (Oppilas 51) ”Kuunteleminen” (Oppilas 32)
Kaikki	2	”Kaikki” (Oppilas 30)
Ei mikään	20	”Ei ollut mitään ei kiinnostavaa” (Oppilas 4) ”Kaikki oli mielenkiintoista!” (Oppilas 29)
n=	40	

20 oppilasta oli sitä mieltä, ettei mallinnuksessa ollut mitään epäkiinnostavaa. Sidospituuden mittaaminen ja massojen katsominen nähtiin epäkiinnostavimpana (f. 5). Laskujen suorittaminen ohjelmalla (f. 4) ja ohjauksen kuunteleminen (f. 3) koettiin epämieluisana. Viisi oppilasta koki mallinnuksen haastavana, joka laski mielenkiintoa. Kahden oppilaan mielestä mallinnuksessa kaikki oli epäkiinnostavaa.

12 oppilasta haastateltiin pienryhmähaastatteluissa. Oppilaiden tuntemukset mallinnusohjelman käytöstä olivat positiivisia. Yksi haastateltava koki mallinnuksen täysin turhana. Oppilaat kuvailivat mallinnusta mm. hauskaksi, hyödylliseksi, kiinnostavaksi ja innostavaksi. Kuvassa 11 on esitetty käsitekartan avulla mallinnuksen oppilaissa herättämiä tuntemuksia ja tekijöitä, jotka he kokevat kiinnostaviksi tai ei-kiinnostaviksi.



Kuva 11: Oppilaiden tuntemuksia mallinnusta kohtaan

Mallinnus herätti positiivisia tuntemuksia kemiaa kohtaan. 11 oppilasta toivoisi mallinnusta käytettävän enemmän opetuksen tukena koulussa. Oppilaiden mielestä mallinnuksen käyttö toisi tunteihin vaihtelua ja kiinnostavuutta

Kiinnostavimmiksi toiminnoiksi nousivat haastateltavien keskuudessa molekyylien rakentaminen ja katseleminen. Oppilaat kokivat kiinnostavana myös mallien avulla tehtävät selitykset. Haastatteluissa mainittiin kiinnostavana seikkana tietokoneen käyttö.

Haastatteluissa oppilaat arvioivat Likertin asteikolla (1 = ei lainkaan kiinnostavaa, 5= erittäin kiinnostavaa) kiinnostuksen keskiarvoksi 3,75. Vastauksien tyyppiarvo oli 4.

7. Johtopäätökset ja pohdinta

7.1 Tarve kiinnostusta tukevalle mallinnusmateriaalille

Oppilaat pitävät tietokonepohjaista molekyylimallinnusta kiinnostavana ja uskovat sen käytön lisäävän kiinnostusta kemian opiskelua kohtaan. Suurin osa tutkituista oppilaista koki tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen tuovan lisää kiinnostavuutta kemian opiskeluun, koska se tuo vaihtelua tunteihin ja lisää ymmärrystä kemiaa kohtaan. Vastaavia tutkimustuloksia on saatu aiemmista tutkimuksista. Jääskeläinen & Aksela (2008) tekemän tutkimuksen tuloksena yli puolet oppilaista koki mallinnuksen kiinnostavana, koska se toi vaihtelua tuntiin. Jääskeläisen tutkimuksessa osa oppilaista koki kiinnostuksen tulevan uuden oppimisesta.

Kemia koetaan usein haastavaksi sen abstraktiuden sekä molekyylien ja atomien silmin näkemättömyyden vuoksi (mm. Garnet & al, 1995). Tietokonepohjaisella molekyylimallinnuksella voidaan tehokkaalla tavalla visualisoida molekyyliä ja tuoda kemian ilmiöitä silminnähtäväksi. Tämän tutkimuksen tuloksena oppilaat kokivat, että molekyylien ”näkeminen” auttoi heitä ymmärtämään kemiaa paremmin ja näin myös tekemään sen opiskelusta kiinnostavampaa.

Vaikka tutkimuksen otos on pieni ($n = 60$), tulokset antavat vahvasti viitteitä, että tietokonepohjaisen molekyylihallinnusmateriaalin kehittäminen kemian opetuksen tueksi on hyvin tarpeellista ja perusteltua. 40 oppilasta koki mallinnuksen tukevan kiinnostusta kemiaa kohtaan. Kahdeksan antoi neutraalin vastauksen. Vain kaksi oppilasta koki, ettei mallinnus lisännyt kiinnostusta. Näin voimakas jakautuminen kiinnostuksen puoleen antaa hyvin perustellun syyn kehittää materiaalia, joka tukee oppilaan kiinnostusta kemiaa kohtaan hyödyntämällä tietokonepohjaista molekyylihallinnusta.

7.2 Kehitetty materiaali oppilaan kiinnostuksen tukena

Kehitetty materiaali tuki hyvin oppilaiden kiinnostusta kemian oppimista kohtaan. Oppilaat kuvailivat mallinnusta mm. hauskaksi, kiinnostavaksi ja hyödylliseksi. Vastaavia tuloksia oppilaiden tuntemuksista on saanut mm. Jääskeläinen & Aksela (2008). Kaikki mallinnuksen mahdollistamat toiminnot arvioitiin kiinnostaviksi. Molekyylin sidospituuksien mittaaminen koettiin vähiten kiinnostavaksi, mutta keskiarvolla 3, se sijoittuu kiinnostuksen kannalta neutraaliksi. Yhdenkään toiminnon keskiarvo ei ollut vähäisen kiinnostuksen puolella (ka. vähemmän kuin 3). Useat muut tutkimukset ovat osoittaneet, että mallinnus koetaan oppilaiden keskuudessa kiinnostusta lisääväksi työtavaksi. (esim. Barnea & Dori, 1995)

Mallinnus koettiin kiinnostavaksi, koska oppilaat saivat itse olla aktiivisia toimijoita. Itsetekeminen arvioitiin kiinnostavimmaksi tekijäksi mallinnuksessa (ka 4,3). Tulos vastaa aiempia kiinnostuksesta tehtyjä tutkimuksia. Oppilas kiinnostuu, kun hän on itse vastuussa oppimisesta ja saa olla aktiivinen toimija. (Hidi & Renninger, 2006)

Mallinnusohjelman visuaalisuus tuki oppilaiden kiinnostusta kemiaa kohtaan. Molekyylien näkeminen koettiin kiinnostusta lisääväksi, sillä oppilaat tunsivat ymmärtävänsä paremmin kemiaa. Kiinnostuksen kehittymisen kannalta on tärkeää, että oppilaan tiedot ja taidot karttuvat ja minäpystyvyyden tunne kasvaa. (Hidi & Renninger, 2006; Lavonen & al, 2005) Oppilaat kokivat ymmärtävänsä paremmin kemiaa, kun he saivat nähdä molekyyliä ja mallien avulla tutkia niiden ominaisuuksia. Barnea & Dori (1995) ovat tutkineet oppilaiden suhtautumista tietokonepohjaiseen molekyylihallinnukseen. Oppilaat kokivat ymmärtävänsä visualisoinnin kautta kemiaa paremmin.

Haastattelut tukivat kyselytutkimuksessa saatuja tuloksia. Myös haastatteluissa oppilaat mainitsivat kiinnostuksen herätyksen molekyylien rakentamisesta, katselusta ja lisääntyneestä oppimisesta.

Tämän tutkimuksen otos on melko pieni (n=58), joten tuloksia ei voi suoraan yleistää koko ikäluokkaan. Tutkimuksen luotettavuus on hyvä, sillä triangulaatiolla on saatu kahdella tutkimusmenetelmällä yhteneviä tuloksia samaan ongelmaan. Oppilaiden haastattelut tukevat kirjallisenä annettuja vastauksia. Tutkimuslomakkeet ja haastattelurunko testattiin oppilasryhmillä tutkimusta vastaavissa olosuhteissa. Tutkimuksen myötä kehitetty oppimateriaali tuki erittäin voimakkaasti oppilaiden kiinnostusta. Vastaukset olivat selkeästi kasvavan kiinnostuksen puolella. Oppilaat mainitsivat, että he kokisivat hyödyllisenä ja kiinnostavana mallinnuksen käytön kemian oppituntien tukena. Tämän tutkimuksen myötä on erittäin perusteltua oppilaiden kiinnostuksen tukemiseksi kemiaa kohtaan kehittää jatkossakin oppimateriaalia, joka hyödyntää tietokonepohjaista molekyylihallinnusta.

Tutkimuksen tuloksessa on merkittävää ja huomionarvoista, että oppilaat itse kokevat kiinnostuksensa lisääntyvän perustelluin syin tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen avulla. He kokevat mallintamisen hauskana mutta myös hyödyllisenä. Opetuksessa tulisi kuunnella oppilasta ja tuoda tunneille oppilasta kiinnostavia elementtejä ja työvälineitä. Oppilaat toivat myös spontaanisti esille oppineensa paremmin mallinnuksen avulla ja näin kiinnostuneet aiheesta lisää.

Tässä tutkimuksessa pyrittiin kiinnostusta lisäävän materiaalin tuottamiseen. Materiaali toimi hyvin oppilaiden kiinnostuksen herättäjänä. Aiemmin on tutkittu, että mallinnus kiinnostaa 7-9- luokkalaista kemian työtapana (Jääskeläinen & Aksela, 2008). Jääskeläisen tutkimuksessa 16 % oppilaista koki mallinnuksen erittäin kiinnostavana. Kun tässä tutkimuksessa oppilaiden kiinnostusta mitattiin heidän käytettyään materiaalia, jonka tavoitteena oli lisätä kiinnostusta kemian ilmiöitä ja oppimista kohtaan 38 % oppilaista koki mallinnuksen erittäin kiinnostavaksi. Tulokset eivät ole suoraan vertailukelpoisia, mutta antavat viitteitä, että kiinnostuksen tukemiseksi suunniteltu materiaali onnistuu tavoitteissaan.

Tutkimuksesta nousi esiin mahdollisia jatkotutkimuksen aiheita. Olisi tärkeää tutkia, kuinka tietokonepohjaisella molekyylihallinnuksella voidaan tukea pysyvän kiinnostuksen syntymistä. Olisi perusteltua myös tutkia tietokonepohjaisen molekyylihallinnuksen vaikutusta oppilaiden oppimistuloksiin. Jo tässä tutkimuksessa oppilaat spontaanisti toivat esille, että mallinnus auttoi heitä ymmärtämään kemian käsitteitä ja ilmiöitä paremmin.

Viemällä tietokonepohjainen molekyylihallinnus mielekkääksi osaksi kemian opetusta, pystymme tukemaan oppilaiden kiinnostusta ja innostusta kemiaa kohtaan. Mikään yksittäinen työtapaa tai väline ei pysty nostamaan kemian kiinnostusta. Kuitenkin työtavalla on suuri merkitys kiinnostuksen herättämisessä ja tukemisessä. (Lavonen & al, 2005) Mallinnus näyttäisi olevan yksi tehokas työväline, jolla pystymme nostamaan nuorissa romahtanutta (Arinen & Karjalainen, 2006) kiinnostusta luonnontieteitä ja erityisesti kemiaa kohtaan.

Lähteet:

- Ainley, M., Hidi, S. & Berndorff, D. (2002). Interest, Learning, and the Psychological Processes That Mediate Their Relationship. *Journal of Educational Psychology*, 94(3), 545-561.
- Aksela, M. 2005. *Supporting Meaningful Chemistry Learning and Higher-order Thinking Through Computer-Assisted Inquiry: A Design Research Approach*. Helsinki: Helsingin yliopiston kemian laitos.
- Aksela, M.& Lundell, J. (2008). Computer-based molecular modelling: Finnish school teachers' experiences and views. *Chemistry Education Research and Practice*, 9, 301- 308.
- Arinen P. & Karjalainen T. (2007). PISA 2006 ensituloksia 15-vuotiaiden koululaisten luonnontieteiden, matematiikan ja lukemisen osaamisesta. Yliopistopaino, Opetusministeriön julkaisuja 2007: 38.
- Barnea, N. & Dori, Y.J. J. (1996). Computerized Molecular Modeling as a Tool To Improve Chemistry Teachings. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 36, 629-636.
- Barnea, N.& Dori, Y.J. (1999). High-School Chemistry Students' Performance and Gender Differences in a Computerized Molecular Modeling Learning Environment. *Journal of Science Education and Technology*, 8(4), 257- 271.
- Barak, N & Dori, Y.J. (2000). Computerized molecular modeling: Enhancing Meaningful Chemistry Learning. Teoksessa Fishman, B. & O'Connor-Divelbiss, S. (Toim.) *Proceeding of the Fourth International Conference of the Learning Sciences*, (s.185-192) Mahwah, NJ: Erlbaum.

Bartlett, N. (2003) *Noble gases*. Luettu 7.9.2009
<http://pubs.acs.org/cen/80th/noble gases.html#Anchor-Neil-4676>

Cohen, L., Manion, L., Morrison, K. (2000), *Research Methods in Education*, Lontoo: Routledge Falmer.

Crosland, M. (2000). Slippery Substances. Teoksessa Holmes F.L. & Levere, T.H. (Toim. *Instruments and Experimentation in the History of Chemistry*, (s. 79- 104) London: The MIT Press.

Deci, R. (1992). The Relation of interest to the Motivation of Behavior: A Self-determination of Theory Perspective. Teoksessa Renninger, K. A., Hidi, S. & Krapp, K. (toim.) *The Role of Interest in Learning and Development*, (s. 43- 71) Hillsdale, NJ: Erlbaum.

Dori, Y. J. & Barak, M. (2001). Virtual and physical molecular modeling: Fostering model perception and spatial understanding. *Educational Technology & Society*, 4(1), 61 – 74.

Edelson, D.C. (2002). Design research: What we learn when we engage in design. *The Journal of Learning Sciences*, 11, 105-121.

Eshach, H. (2007) Bridging In-school and Out-of-school Learning: Formal, Non-Formal, and Informal Education. *Journal of Science Education and Technology*, 16(2)

Farber, E. (1953). *Noble price winners*. New York: Henry Schuman

Franceour, E. (1997). The forgotten tool: Desing and use of molecular models. *Social Studies of Science*, 27(1), 7- 40.

Gabel, D. (1999). Improving Teaching and Learning through Chemistry Education Research: A Look to the Future. *Journal of Chemical Education*, 76(4), 548-554.

- Garnet, P.J. & Hackling, M.V. (1995). Students alternative conceptions in chemistry: A review of research and implications for teaching and learning. *Studies in Science education*, 25, 69- 95
- Gilbert, J. K., Boulter, C. & Rutherford, M. (1998a). Models in explanations, Part 1: Horses for courses? *International Journal of Science Education*, 20(1), 83–97.
- Gilbert, J. K., Boulter, C. & Rutherford, M. (1998b). Models in explanations, Part 2: Whose voice? Whose ears? *International Journal of Science Education*, 20 2), 187–203.
- Gilbert, J. K., Boulter, C. J., & Elmer, R. (2000). Positioning models in science education and in design and technology education. Teoksessa: J. K. Gilbert & C. J. Boulter (Toim.), *Developing Models in Science Education*, (3-18). Dordrecht: Kluwer.
- Gilbert, J. K., Boulter, C. J., & Rutherford, M. (2000). Explanations with Models in Science Education Teoksessa: J. K. Gilbert & C. J. Boulter (Toim.), *Developing Models in Science Education*, (s. 193- 208). Dordrecht: Kluwer.
- Gilbert, J. K., Justi R. & Aksela, M. (2003). The visualization of models: A metacognitive competence in the learning of chemistry. In Proceedings of fourth international conference of the European Science Education Research Association, Noordwijkerhout, (s.19-23) The Netherlands.
- Gilbert, J.K. (2005). Models and Modelling: Routes to More Authentic Science Education, *International Journal of Science and Mathematics Education*, 2(2), 115- 130.
- Gilbert, J. K. (2005). Models and Modeling in Science Education. Teoksessa: Gilbert, J. K. (Toim.), *Visualization in science education*, (s. 1, 1 – 7). Dordrecht: Kluwer.
- Gilbert, S. W. (1991) Model building and a definition of science. *Journal of Research in Science Teaching*, 28 (1), 73–79.

- Grosslight, L., Unger, C., Jay, E. & Smith, C. (1991). Understanding models and their use in science: conceptions of middle and high school students and experts. *Journal of Research in Science Teaching*, 28 (9), 799–822.
- Harrison, A. G. & Treagust, D. F. (1996). Secondary students' mental models of atoms and molecules: implications for teaching chemistry. *Science Education*, 80 (5), 509–534.
- Hidi, S. & Anderson, V. (1992). Situational Interest and its impact on reading and expository writing. Teoksessa Renninger, A., Hidi, S. & Krapp, A. (toim.) *The Role of Interest in Learning and Development*, (215–238). Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum.
- Hidi, S. & Renninger, K. (2006) The Four-Phase Model of Interest Development. *Educational Psychologist*, 41(2), 111- 127.
- Hirsjärvi, S., Remes, P. & Sajavaara, P. (2009). *Tutki ja kirjoita*. Helsinki: Tammi.
- Hirsjärvi, S & Hurme, H. (2009). *Tutkimushaastattelu*. Helsinki: Gaudeamus
- Hudson, J. (1992). *Kemian historia*. Helsinki: Art House
- Heilbron, J.R. (1981) Rutherford- Bohr Atom. *American Journal of Physics*, 49(3), 223-231.
- Häkkinen, K. (2004) *Nykysuomen etymologinen sanakirja*. Helsinki: WSOY.
- Ingham, A. I. & Gilbert, J. K. (1991). The use of analogue models by students of chemistry at higher education level. *International Journal of Science Education*, 13 (2), 203–215.
- Jones, L. L., Jordan, K. D. & Stillings, N.A. (2005). Molecular visualization in chemistry education: the role of multidisciplinary collaboration. *Chemistry Education Research and Practice*, 6 (3), 136-149.

- Justi, R. (2000). Teaching with Historical Models. Teoksessa Gilbert, J. K. & Boulter, C. J. (toim.) *Developing Models in Science Education*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers
- Jääskeläinen, P. & Aksela, M. (2008). Tietokonepohjainen molekyylimallinnus-oppimisympäristö 9. luokkalaisten oppilaiden kemian kiinnostuksen tukena. Teoksessa Väliisaari, J. & Lundell, J. (toim.) *Kemian opetuksen päivät 2008: Uusia oppimisympäristöjä ja ongelma-aperustaista oppimista*. Jyväskylän kemian laitoksen tutkimusraportti nro 129, 2008
- Krapp, A., Hidi, S. & Renninger, K. A. (1992). Interest, Learning, and Development. Teoksessa: Renninger, K. A., Hidi, S. & Krapp, K. (Toim.) *The Role of Interest in Learning and Development* (s. 3-25). Hillsdale, NJ: Erlbaum.
- Khriachtchev, L., Petterson, M., Runeberg, N. & Räsänen, M. (2000). Stable argon compound, *Nature*, 406, 874- 876.
- Lavonen, J., Juuti, K., Uitto, A. & Meisalo V. (2005). Attractiveness of Science Education in the Finnish Comprehensive School. Teoksessa: Manninen, A., Miettinen, K. & Kiviniemi, K. (Toim.) *Research Findings on Young People's Perceptions of Technology and Science Education. Mirror results and good practice*. (s. 5-30) Helsinki: Technology Industries of Finland.
- Lavonen J. (2008). Learning and the use of ICT in science education. Teoksessa Demkanin, P., Kibble B., Lavonen J., Mas, J. & Turlo, J. (toim.) *Effective use of ICT in science education*. University of Edinburgh, School of Science.
- Lewis, G.. (1916). Atoms and Molecules. *Journal of American Chemical Society*, 38(4), 762- 785.
- Mitchell, M. (1993). Situational interest: Its multifaceted structure in the secondary school mathematics classroom. *Journal of Educational Psychology*, 85(3), 424–436.

- Monk, M. & Osborne, J. (1996). Placing the History and Philosophy of Science on Curriculum: A Model for the Development of Pedagogy. *Science Education*, 81(4) 405- 424.
- Osborne, J., Simon, S., & Collins, S. (2003). Attitude towards science: A review of the literature and its implications. *International Journal of Science Education*, 25(9), 1049–1079
- Ramsay, W. (1905) *The gases of the atmosphere : the history of their discovery*. Lontoo: McMillan & co.
- Runeberg, N., Pettersson, M., Khriachtchev, L., Lundell, J. & Räsänen, M. (2001). A Theoretical Study of HArF, a Newly Observed Neutral Argon Compound, *The Journal of Chemical Physics*, 114 (2), 836- 841.
- Schraw G. & Lehman S., (2001) Situational Interest: A Review of the Literature and Directions for Future Research. *Educational Psychology Review*, 13(1), 23-52.
- Schiefele, U. (1991). Interest, learning, and motivation. *Educational Psychologist* 26(3&4), 299–323.
- Shirey, L. L. (1992). Importance, Interest, and Selective Attention. Teoksessa Renninger, K. A., Hidi, S. & Krapp, K. (Toim.) *The Role of Interest in Learning and Development*. (s. 281- 296) Hillsdale: NJ: Erlbaum.
- Suits J.P. (2003). Aesthetic constructivism: Development of expertise in science classrooms. *National Forum of Applied Educational Research Journal*, 17, 46-53.
- Treagust D. F., Chittleborough G. & Mamiala T.L. (2002). Students' understanding of the role of scientific models in learning science. *International Journal of Science Education*, 24(4), 357–368.

Volman M. Van Eck E., Heemskerk I. & Kuiper E. (2005). New technologies, new differences. Gender and ethnic differences in pupils' use of ICT in primary and secondary education. *Computers & Education*, 45(1), 35–55

Liitteet

1. Kehitetty mallinnusmateriaali

Tuulesta temmattu

Ilman kaasujen kemiaa 7-9 – luokkalaisille

Ohje opettajalle tai ohjaajalle

Mallinnuksen sisällys

1. Johdanto.....	65
2. Mallinnuksen tavoitteet.....	66
3. OPS- yhteys.....	67
4. Mallinnuksen rakenne.....	67
4.2 Ehdotuksia mallinnuksen toteuttamiseksi.....	68
4.2.1 Opintokäynti Tiedekeskus Heurekaan.....	68
4.2.2 Tiedeleirillä tai -kerhossa.....	69
5. Spartan tutuksi.....	71
5.1. Aloittaminen	71
5.2. Taustaväri.....	72
5.3. Molekyylin luominen.....	73
5.4. Molekyylin liikuttelu ja koon muuttaminen.....	75
5.5. Molekyylin tarkastelu eri malleilla.....	76
5.6. Molekyylin tasapainotilan laskeminen.....	78
5.7. Sidospituus ja -kulma.....	78
5.8. Elektronipinnan määrittäminen.....	80
6. Ilman kaasujen tietokonepohjainen molekyylimallinnus.....	83
6.1 Virittäytyminen aiheeseen.....	83
6.2 Flogiston teoria	84
6.3 Happi.....	84
6.4 Typpi.....	90
6.5. Argon.....	91
6.6 Argonin ainoa yhdiste.....	92

1. Johdanto

Kemiassa on käytetty matemaattisia, visuaalisia ja verbaalisia malleja niin kauan kuin kemiallisia käsiteitä ja ilmiöitä on tutkittu. Mallien historiallisena maamerkkinä voidaan pitää 1800- luvun alussa kehitettyä Daltonin atomimallia. Tämän jälkeen tutkijat ovat aktiivisesti kehittäneet erilaisia malleja selittääkseen ja ennustaakseen niiden avulla ilmiöitä.(Gilbert & Justi, 2002) Malleja käytetään, jotta ymmärrettäisiin miksi jokin tietty kemiallinen tai fysikaalinen ilmiö tapahtuu juuri tietyllä tavalla. (Erduran, 2001).

Kemistit ovat käyttäneet tietokoneita tiedon tallentamiseen, muokkaamiseen ja esittämiseen siitä asti, kun tietokoneita on ollut olemassa. Jo 1950- luvulla tietokoneet olivat tärkeässä asemassa kemian laboratorioissa. Opetuskäyttöön tietotekniikkaa on alettu soveltaa heti, kun mikroprosessoripohjaiset henkilökohtaiset tietokoneet tulivat yleisimmiksi. (Lagowski, 1998) 1960- luvulla, kun tietokonepohjaiset molekyylimallit alkoivat kehittyä, vähentyi perinteisten molekyylimallien suosio. Syynä ei ole pelkästään kolmiulotteisten mallien tarkastelun ja käsittelyn tuomat visuaaliset edut vaan myös tietokoneen suoma kyky ennustaa kolmiulotteisia rakenteita kvanttimekaanisten laskujen kautta. (Barak & Dori, 2001)

Molekyyylimallinnus voidaan määritellä seuraavasti: Molekyylimalli on usein matemaattinen yksinkertaistettu tai idealisoitu kuvaus systeemistä tai prosessista joka on suunniteltu helpottamaan laskuja ja ennustuksia. Tietokonepohjainen molekyyylimallinnus on molekyyylimallinnusta, jossa käytetään apuna kvanttimekaanisia laskuja molekyylien rakenteiden ja ominaisuuksien määrittämiseksi. Tietokonepohjainen molekyyylimallinnus käyttää apunaan laskennallista kemiaa ja visualisointia ymmärtääkseen ja ennustaakseen molekyylisten systeemien käyttäytymistä. (Leach, 2001)

Tietokonepohjaisella molekyyylimallinnuksella on etuja verrattuna perinteisiin malleihin. Perinteisten pallotikkumallien rajoituksena ovat sidokset, jotka ovat kaikki samanpituisia, pallojen kuvastamien atomien samat koot, pallojen ja tikkujen rajoitettu määrä sekä mallin yksipuolisuus ja hankala muunneltavuus. Tietokone ohjelmassa atomit ovat suhteellisen kokonsa mukaisia, värikoodattuja ja niitä on lukematon määrä tarjolla. Tietokonepohjaisten molekyylimallien muuttaminen on helppoa, samaa molekyyliä voi tarkastella erilaisin

mallein helposti ja tarvittaessa ohjelma nimeää atomit ymmärtämisen lisäämiseksi. (Barnea & Dori, 1996) Tietokone mahdollistaa elektronipintojen ja molekyyliorbitaalien tarkastelun, sidospituuksien ja -kulmien mittaamisen sekä reaktion yksityiskohtaisen tarkastelun mikrotasolla.

Kemian monipuolinen osaaminen vaatii osakseen hyvää kolmiulotteista hahmotuskykyä. Koska tietokonepohjainen molekyylinmallinnus tarjoaa mahdollisuuden pyörittää ja tarkastella molekyyliä kolmiulotteisena tietokoneen ruudulta, se kehittää oppilaiden spatiaalista hahmotuskykyä. (Barnea & Dori, 1999)

Tietokonepohjainen molekyylimallinnus tukee konstruktivistista oppimista. Oppilas aktiivisesti konstruoi tiedon, kun hän pääsee vuorovaikuttamaan käsillä olevan ilmiön kanssa. Hän joutuu haastamaan itsensä yleistämään käsityksiä, tekemään johtopäätöksiä ilmiöistä molekyylien rakenteen avulla ja oppii liikkumaan kemian oppimisen kaikilla tasoilla; mikro-, makro-, ja symbolitasoilla. (Barnea&Dori, 1999)

Tutkimuksen mukaan (Barnea & Dori, 1999) oppilaat, jotka saavat itse rakentaa molekyylimallit tietokoneen avulla, tarkastella ja muokata niitä sekä tehdä ennustuksia niiden avulla, ymmärtävät paremmin mallien luonteen kuin oppilaat, jotka seuraavat opettajan esitystä.

2. Mallinnuksen tavoitteet

- Tutustuttaa oppilaat tietokonepohjaiseen molekyylimallinnukseen ja sen käyttöön kemian työkaluna.
- Oppilaat oppivat selittämään ilman kaasujen ominaisuuksia niiden rakenteiden avulla.
- Oppilaat oppivat vertailemaan molekyylien ominaisuuksia niiden rakenteiden avulla.
- Oppilaat oppivat keskustelemaan kemiasta ja harjaantuvat kysymään sekä ihmettelemään.
- Mallinnuksen tavoitteena on olla elämyksellinen kokemus, joka innostaa oppilaita kemian maailmaan sekä tukee kiinnostuksen syntymistä

3. OPS- yhteys

Tietokonepohjainen mallinnustuokio tukee peruskoulun 7-9 -luokkien opetussuunnitelmien perusteita.

- Oppilaat oppivat kemiallisten mallien ominaisuuksia ja luonnetta.
- Oppilaat oppivat ilman kaasujen rakenteesta ja sidoksista
- Oppilaat ymmärtävät aineiden rakenteen ja ominaisuuksien välisiä yhteyksiä.
- Mallinnustuokio tukee peruskoulun opetussuunnitelmien perusteista aihekokonaisuuksia ilmakehän aineet ja niiden merkitys ihmiselle

4. Mallinnuksen rakenne

Ilman ja jalokaasujen mallinnusta kuljettaa eteenpäin kehyskertomus, joka alkaa Aristoteleen aikaisesta käsityksestä aineen rakenteesta jatkuu aina jalokaasuyhdisteisiin saakka. Kehyskertomuksen aikana mallinnetaan yhdisteille ominaisia piirteitä. Kehyskertomus on merkitty työohjeeseen *kursiivilla*. Oppilaat täyttävät mallinnuksen edetessä molekyylikortteja, joissa on esitetty keskeisiä kysymyksiä kunkin kaasun ominaisuuksista. Mallinnuksesta voi tehdä vain osia tai suorittaa sen kokonaisuutena.

Mallinnus on tarkoitus vetää ohjaaja- tai opettajajohtoisesti vuorovaikutteisena ja keskustelevana tuokiona. Oppilaille ei jaeta omaa mallinnusohjetta vaan ohjaaja selostaa mitä kulloinkin tehdään ja näin oppilaat voivat keskittyä pohtimaan ilmiöitä ja rakenteita. Kun kaikki oppilaat ovat samassa vaiheessa, voidaan keskustelua pitää yllä helpommin.

4.2 Ehdotuksia mallinnuksen toteuttamiseksi

Seuraavassa on esitetty ehdotuksi, kuinka mallinnusta voi hyödyntää opintokäynnillä tiedekeskus Heurekaan sekä hyödynnettäväksi tiedeleirin tai -kerhon yhteydessä.

4.2.1 Opintokäynti Tiedekeskus Heurekaan

Virittäytyminen koulussa

Aloittakaa oppilaiden kanssa pohtimalla ilman ominaisuuksia, joita he ovat havainneet arkielämässä. Mitä ilmalle tapahtuu, kun se lämpenee? Kumpi putoaa nopeammin rutistettu paperi vai suora? Onko sillä merkitystä missä asennossa paperin pudottaa? Miksi tuuli pystyy kaatamaan puun?

Pohtikaa, mitä ilma on. Mitä molekyyliä se sisältää ja mikä on kunkin merkitys ihmiselle ja luonnolle?

Onko kaasuilla massa? Mitä jalokaasut ovat?

Katsokaa oppilaiden kanssa seuraavasta internet osoitteesta löytyvä video ja pohtikaa sen jälkeen ylläesitettyjä kysymyksiä. Video on englanninkielinen, joten on hyvä välillä pysäyttää video ja selostaa oppilaille, mitä tapahtuu.

<http://www.youtube.com/watch?v=QLrofyj6a2s> (katsottu 27.12.2008)

Kerätkää oppilaiden kanssa yhdessä kysymyksiä, joihin vierailun aikana haluatte saada vastauksen.

Virittäytyminen tiedekeskus Heurekassa

Käykää katsomassa Tiedeteatteri Minervan esitys Kaasumaailma. Laatikaa Kaasumaailma näyttelyn pohjalta kysymyksiä, joihin haluatte mallinnuksen aikana saada vastauksen.

Mallinnustuokio

Täyttäkää ohjatun mallinnustuokion aikana molekyylikortit, sitä mukaa, kun saatte tietoa kustakin aiheesta.

Koonti koulussa

Suunnitelkaa pienissä ryhmissä posterit, jossa esittelette jonkin ilman kaasun kemiallisia ominaisuuksia ja käyttöä. Esittäkää posterit muille ryhmille. Voitte suunnitella mukaan myös jonkin aktiviteetin; pelin, leikin tai näytelmän, joka sopii aiheeseen. Pohtikaa lopuksi kysymyksiä, jotka laaditte ennen vierailua. Saitteko vastauksia? Kuinka selvittäisitte itse edelleen askarruttaviin kysymyksiin vastaukset?

Koonti tiedekeskus Heurekassa

Kiertäkää pienissä n. 3-4 hengen ryhmissä vapaasti Heurekan näyttelyitä ja etsikää sieltä elementtejä, jotka liittyvät ilmaan ja ilman kaasuihin. Listatkaa löytämäne asiat ja valmistautukaa esittelemään ne toisille ryhmille. Pohtikaa vielä lopuksi, saitteko vastauksia Kaasumaailma näyttelyn jälkeen laatimiinne kysymyksiin.

4.2.2 Tiedeleirillä tai -kerhossa

Virittäytyminen

Tutustukaa ilman koostumukseen ja kaasujen nimiin seuraavan leikin avulla. Leikki toimii hyvin myös tutustumisleikkinä leiriläisten tai kerholaisten kesken.

Leikkijät menevät ringiin seisomaan ja jokaiselle nimetään yksi ilman kaasu happi, typpi, hiilidioksidi ja argon niin, että kaasuja on tasaisesti sama määrä. Yksi leikkijöistä menee keskelle. Kun hän huutaa jonkin kaasun, esimerkiksi happi, tulee kaikkien hapeksi nimettyjen vaihtaa paikkoja keskenään. Samalla keskellä olija yrittää päästä jonkun paikalle ringiin. Ilman paikkaa jäänyt asettuu keskelle huutajaksi. Jos keskellä olija haluaa kaikkien vaihtavan paikkaa, hän huutaa ilma.

Mallinnustuokio

Täyttäkää molekyylkortit mallinnuksen edetessä.

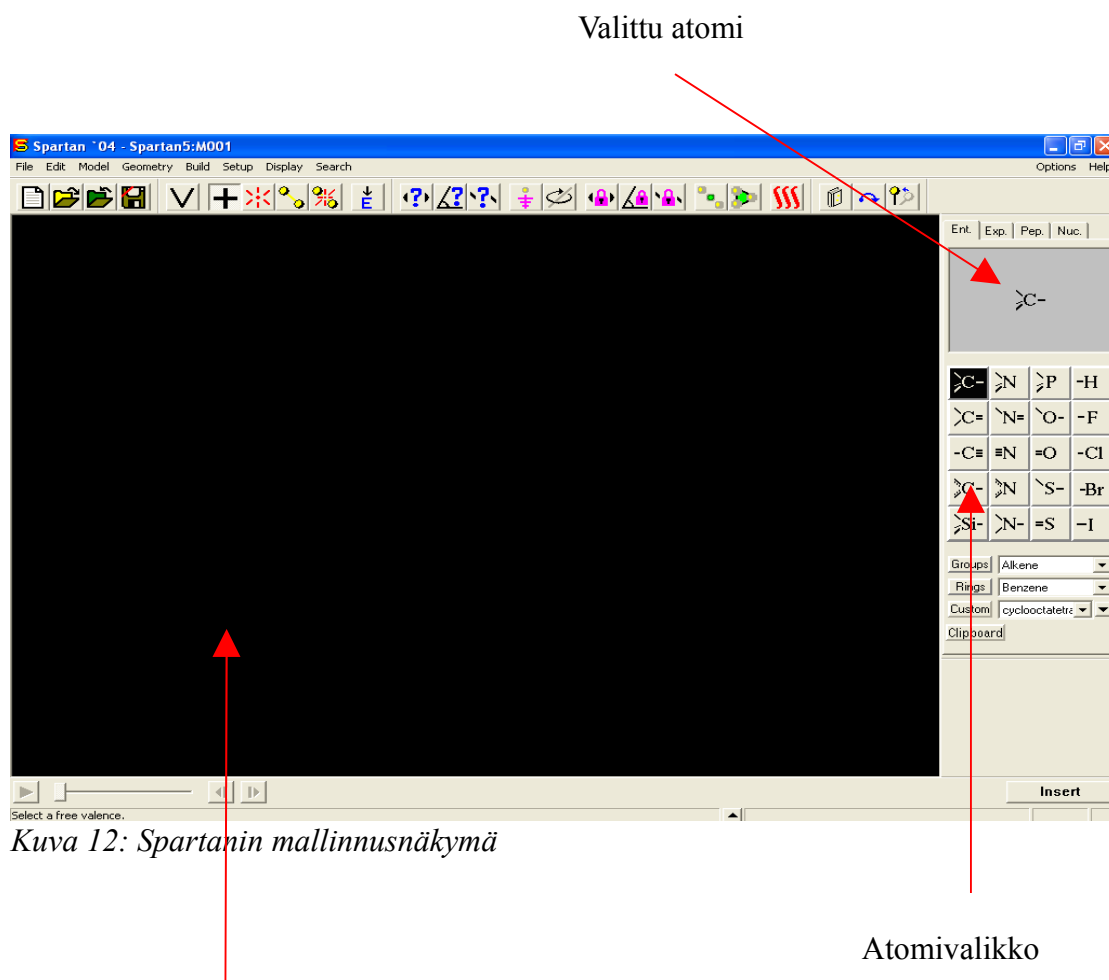
Koonti

Järjestäkää tietokilpailu vierailusta. Keksikää pareittain vierailulla opituista asioista kysymyksiä ja niille kolme vastausvaihtoehtoa. Pitäkää lopuksi tietokilpailu kysymyksistä. Käyttäkää mallinnuskortteja apuna laatiessanne kysymyksiä.

5. Spartan tutuksi

5.1. Aloittaminen

Avaa Spartan -molekyylin mallinnusohjelma. Valitsemalla **file** ja new, avautuu kuvan 12 mukainen näkymä.

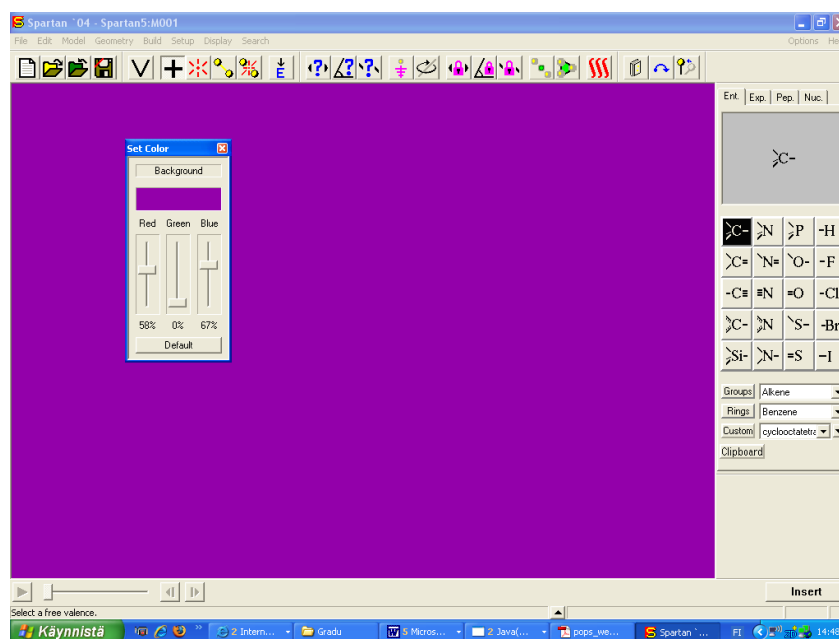


Oikealla on atomivalikko. Voit vaihtaa orgaanisen kemian valikon myös epäorgaanisia alkuaineita käsittäväksi valikoksi painamalla **Exp.** näppäintä valikon yläreunasta. Alussa käytämme kuitenkin orgaanista **Ent.** -valikkoa.

Valittuna oleva alkuaine on mustalla pohjalla valikossa ja se näkyy pienellä ruudulla valikon yläpuolella. Atomia saa vaihdettu klikkaamalla hiirellä haluamaansa alkuainetta.

5.2. Taustaväri

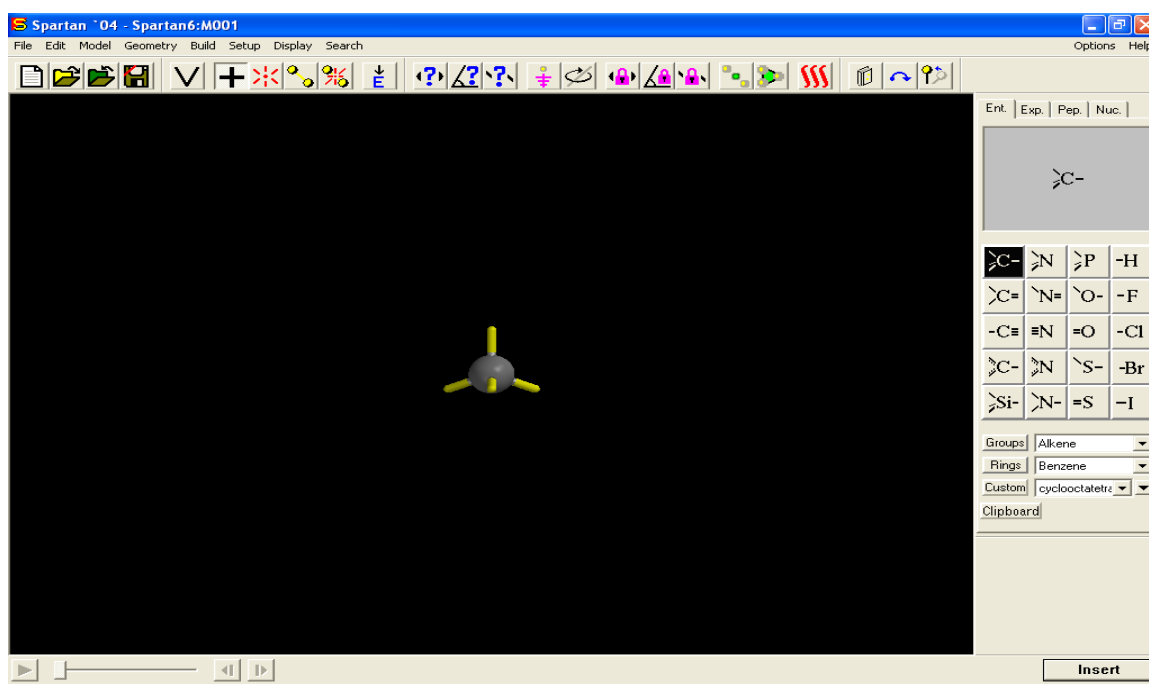
Mallinnusikkunan taustavärin voi vaihtaa mieleisekseen valitsemalla näytön oikeasta ylälaidasta **options** ja sieltä colors. **Set color** ikkuna aukeaa. Liikuttamalla säätimiä, saat mallinnusikkunan värin muutettua. (Kuva 13)



Kuva 13: Spartanin taustavärin vaihtaminen

5.3. Molekyylin luominen

Mallinnetaan ruudulle ensimmäinen molekyyli. Valitse atomivalikosta hiiliatomi, jolla on neljä yksinkertaista sidosta. Klikkaa hiiren vasemmalla näppäimellä mallinnusikkunaan. Atomin tulisi ilmestyä mallinnusikkunaan (Kuva 14)



Kuva 14: Hiiliatomi

Atomien poistaminen

Voit poistaa atomeja valitsemalla punaisen tähden (kuva 15) ikonirivistöstä ja klikkaamalla poistettavaa osaa. Poistamisen jälkeen aktivoi taas + ikoni.

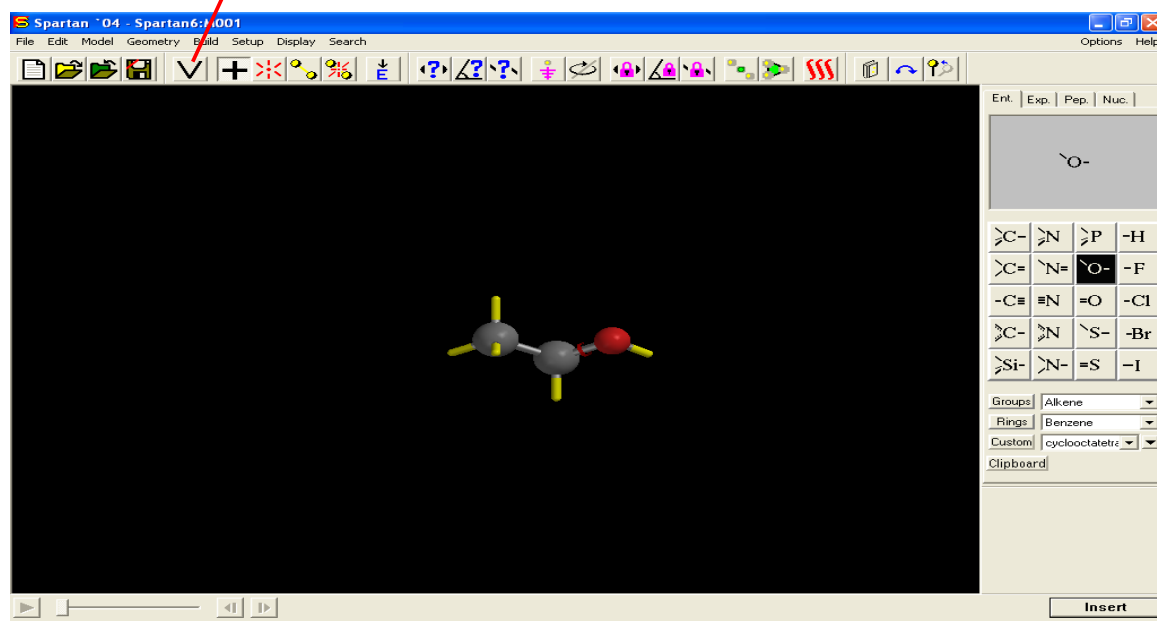


Kuva 15: Atomien poistaminen

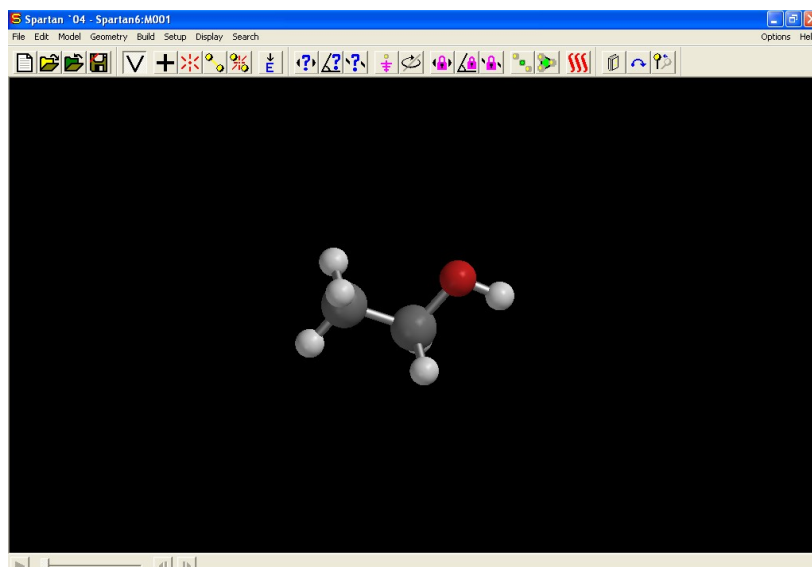
Voit liittää atomiin toisen hiiliatomin klikkaamalla hiiren vasemmalla näppäimellä keltaisen sidoksen päähän. Valitse atomivalikosta happiatomi, jolla on kaksi yksinkertaista sidosta. Liitä happi toiseen hiileen.

Sinulla on nyt mallinnettuna ruudulla lähes valmis etanoli. Koska Spartan on alunperin orgaanisen kemian tutkimukseen kehitetty ohjelma, se lisää automaattisesti vedyt vapaisiin sidoksiin, kun siirrytään molekyylin tarkkailutilaan painamalla ylhäältä ikonivalikosta V. (Kuva 16) Vedyt ilmestyvät paikoilleen ja atomivalikko katoaa (kuva 17). Jos haluat muuttaa molekyyliä, pääset takaisin rakennusvalikkoon painamalla ylhäältä ikonivalikosta +.

Tarkkailutilaan siirtyminen



Kuva 16: Ohjelman tarkkailutilaan siirtyminen



Kuva 17: Valmis etanoli

5.4. Molekyylin liikuttelu ja koon muuttaminen

Voit pyörittää molekyyliä pitämällä hiiren vasemman näppäimen pohjassa ja liikuttamalla hiirtä. Molekyyliä siirretään painamalla hiiren oikea näppäin pohjaan ja liikuttamalla hiirtä. Kokoa saa suurennettua painamalla näppäimistöä shift pohjaan ja liikuttamalla hiirtä vasen näppäin pohjassa ylöspäin. Vastaavasti molekyyli pienenee liikuttamalla hiirtä alaspäin.

Pohdinta:

Minkä värisiä atomit ovat luonnossa? Vastaavatko värit Spartanin värejä?

- Luonnossa atomit yksittäisinä ovat värittömiä. Spartanissa niille on määritetty mielivaltaiset värit atomien tunnistamiseksi.

Voit halutessasi vaihtaa atomien värejä siirtymällä tarkkailutilaan painamalla + ikonia ja valitsemalla sen jälkeen oikean yläkulman **Options** valikosta **Colors**. Napsauta hiirellä sitä atomia, jonka värin tahdot muuttaa. Alkuperäiset värit saa palautettua painamalla *default set colors* ikkunan alaosa.

5.5. Molekyylin tarkastelu eri malleilla

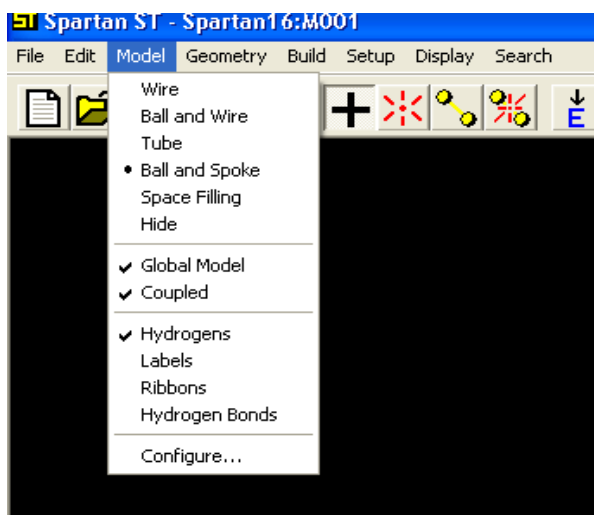
Pohdinta:

Mitä malli tarkoittaa? Millaisia malleja olette käyttäneet kemian tunneilla? Oletteko törmänneet malleihin arkielämässänne? Ovatko mallit kopioita todellisuudesta? Voiko niitä muuttaa?

Malli on kemiassa työväline, jolla halutaan tehdä muutoin nähtäväksi liian pienet elementit silmin havaittavaksi. Mallit eivät ole kopioita luonnosta ja mallintajalla on aina aktiivinen rooli mallinnus prosessissa. (Gilbert & al, 1998b) Mallintaja voi siis muokata mallista omia tarpeitaan vastaavan; malleja voi muuttaa. On olemassa erilaisia malleja: lentokoneen pienoismalli on tarkka malli, joka jäljittelee luonnollista vastinettaan. Kemian mallit ovat aina epätarkkoja malleja. Tunnetuimmat ja useimmin käytetyt mallit kemiassa ovat erilaiset molekyylimallit. Kuitenkaan yksikään tutkija ei väitä näiden mallien näyttävän oikeilta molekyyleiltä. On yksinkertaisesti mahdotonta tietää miltä molekyyli tai atomi todellisuudessa näyttää. (Francoeur, 1997)

Seuraavassa katsomme etanolia viidellä eri mallilla.

Valitse **Model** valikosta (Kuva 18) Wire, Ball and wire, Tube, Ball and spoke ja Space filling kohdat vuorotellen.



Kuva 18: Model- valikko

Pohdinta:

Mitä malleista käyttäisit jos haluaisit

- esitellä molekyylin rakennetta
- tuoda esiin mitä alkuaineita molekyyli sisältää
- havainnollistaa tilaa, jonka se ympäristöstään vie?

- Molekyylin kolmiulotteisen rakenteen saa parhaiten esille wire tai ball and wire mallilla. Kun haluamme korostaa, mitä alkuaineita molekyylissä on, kannattaa käyttää ball and spoke mallia, jossa atomien suhteelliset koot on huomioitu. Molekyylin koon havainnollistaminen toimii parhaiten space filling mallilla, joka antaa tietoa siitä, kuinka suuren tilan molekyyli ympäristöstään vie.

5.6. Molekyylin tasapainotilan laskeminen

Kun olet mallintanut molekyylin ruudulle, se saattaa olla hyvinkin erinäköinen kuin toisen mallintajan tekemä vastaava molekyyli. Meidän on nyt määritettävä molekyylille tasapainotila eli tila, jossa molekyylin on energeettisesti mukavinta olla.

Paina ensin yläikonivalikosta E:tä, jonka päällä on nuoli. Tämä toiminto poistaa molekyylistä steeriset esteet.

Tasapainotilan laskemiseksi valitse **setup** valikko ja sieltä *calculations*. Varmista, että *calculate* kohdassa on valittuna *equilibrium geometry* (tasapaino geometria) ja että laskutasona *with* kohdassa on Hartree- Fock ja seuraavassa valikossa kantafunktiojoukkona 3-21G(*). Hartree -Fock 3-21G(*) on laskutaso, jolla ohjelma laskee molekyylin ominaisuudet. Paina **submit** ja tallenna nimellä etanoli. Ruutuun ilmestyy ikkuna, joka ilmoittaa laskun alkaneen. Kun lasku on valmis, ruutuun ilmestyy ikkuna, jossa ohjelma ilmoittaa laskun päättyneen onnistuneesti.

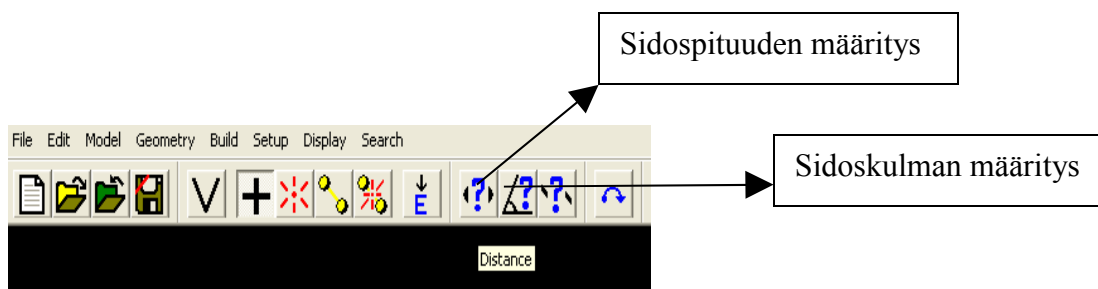
5.7. Sidospituus ja -kulma

Sidospituus

Valitse ylävalikosta ikoni, jossa on kysymysmerkki ja nuolet sen molemmiin puolin.(Kuva 19) Tällä voit määrittää kahden atomin välisen sidospituuden. Klikkaa sen jälkeen molekyylistäsi kahta atomia, joiden välisen etäisyyden haluat selvittää. Pituus ilmestyy ruudun oikeaan alalaitaan.

Sidoskulma

Kulman pystyt mittaamaan painamalla sidospituus ikonin oikean puoleista nappia.(Kuva 19) Napauta tämän jälkeen kolme atomia, joiden välisen kulman haluat selvittää.

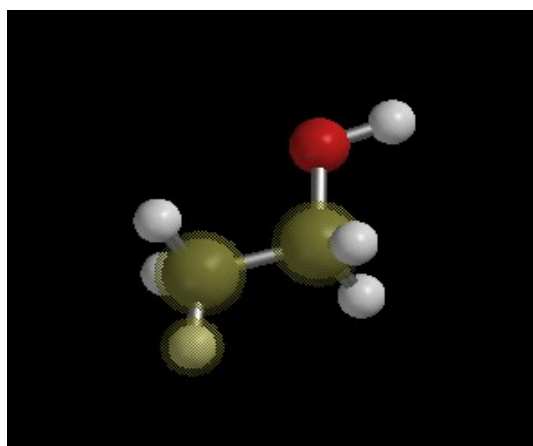


Kuva 19: Siduskulma ja -pituus

Selvitä molekyylistä suurin ja pienin siduskulma sekä pisin ja lyhin sidos. Missä ne ovat? Miksi?

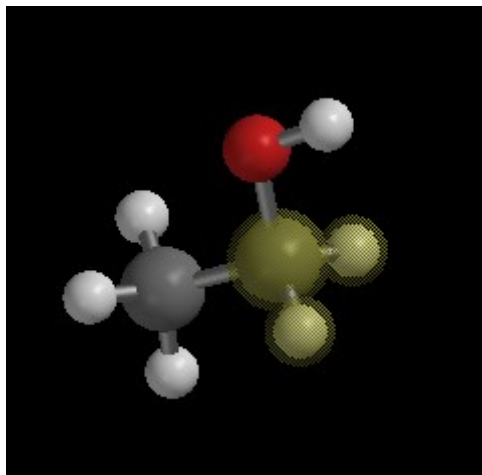
- Lyhin sidos löytyy hapen ja vedyn väliltä. Hapen ja vedyn välinen sidos on lyhyempi kuin vedyn ja hiilen välinen koska happi on *elektronegatiivisempi* kuin hiili ja siis vetää sidoselektroneja voimakkaammin puoleensa, jolloin sidospituus lyhenee hieman.
- Pisin sidos on hiiliatomien välillä.

Suurin kulma löytyy hiiliatomien ja yhden vedyn muodostamasta kulmasta. (Kuva 20)



Kuva 20: Etanolin suurin siduskulma

Pienin kulma löytyy hiilen ja vetyjen väliltä hiiliatomista, johon happi on liitetty (Kuva 21).



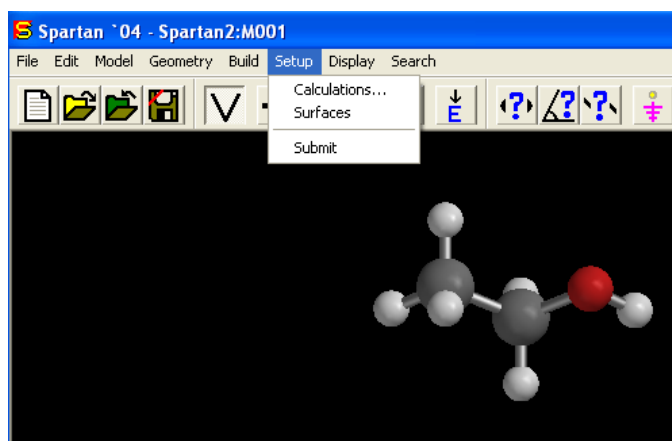
Kuva 21: Etanolin pienin sidoskulma

Tarkastele, mitä sidospituuksille ja kulmille tapahtuun, kun ne määritetään tasapainotilan (kts. Kpl 5.6) laskemisen jälkeen.

5.8. Elektronipinnan määrittäminen

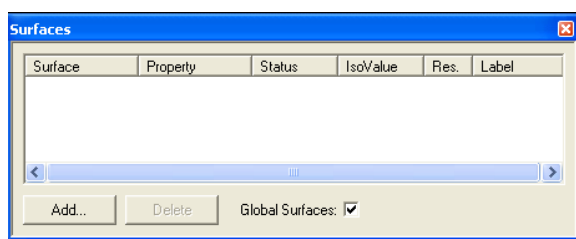
Elektronit ovat liima, joka sitoo molekyylin atomit toisiinsa. Kaikki reaktiot tapahtuvat elektronien myötävaikutuksesta. On tärkeä kemian kannalta ymmärtää, kuinka elektronit ovat molekyyliissä sijoittuneet.

Jotta saat laskettua yhdisteelle elektronipinnan valitse **setup** –valikko ja sieltä *surfaces* (kuva 22).



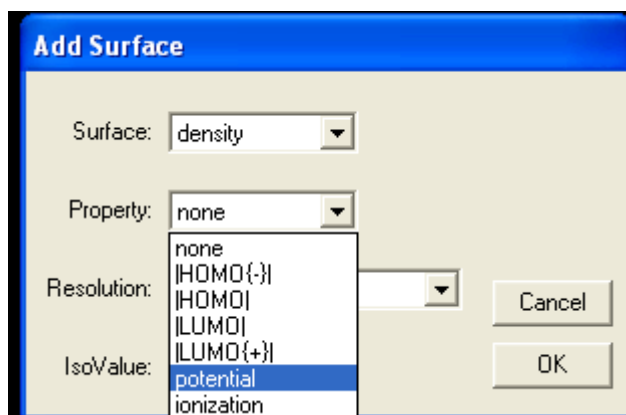
Kuva 22: Setup -valikko

Ruudulle avautuu **surface** ikkuna (kuva 23).



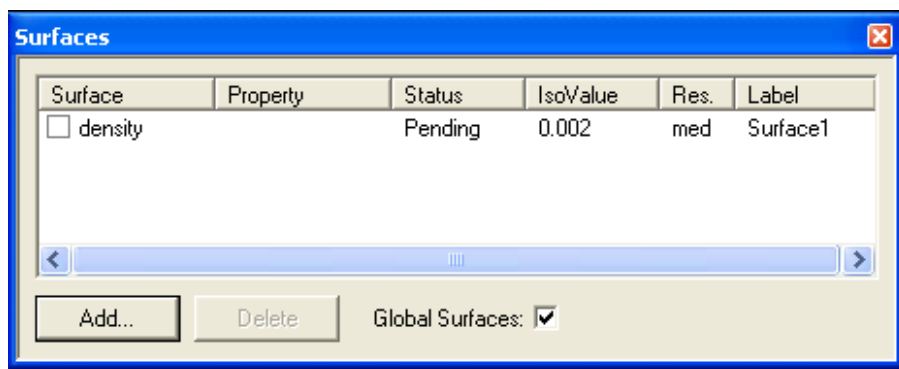
Kuva 23: Surface- ikkuna

Valitse **Add**. Sinulle avautuu **Add surface** ikkuna (Kuva 24).



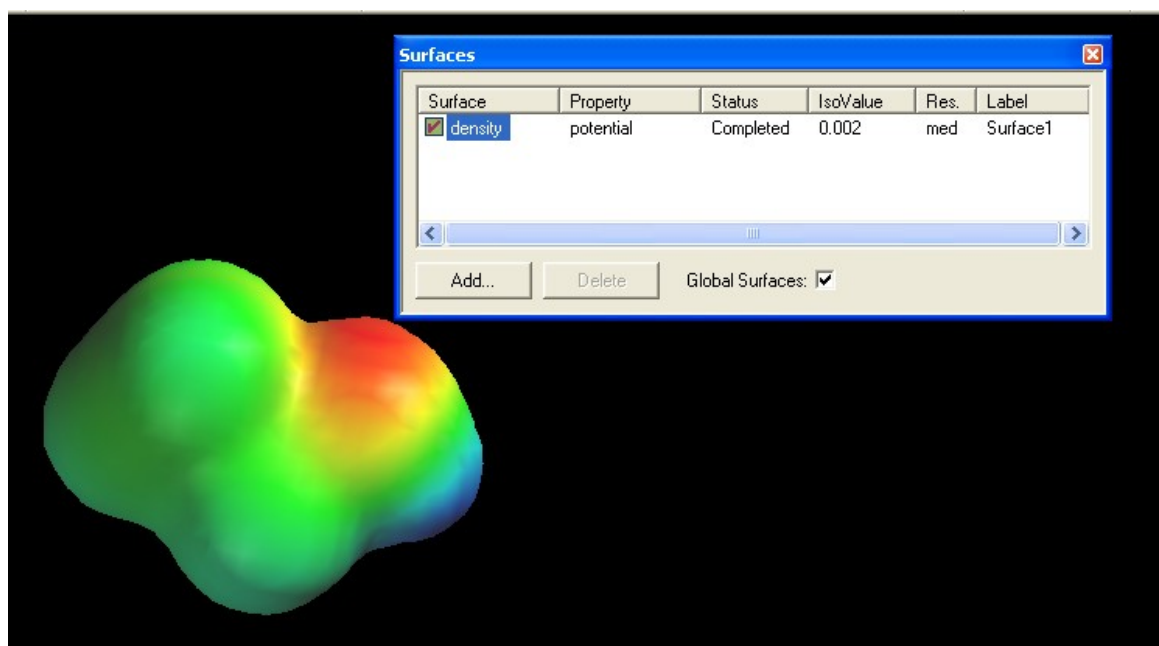
Kuva 24: Add surface -ikkuna

Varmista, että *Surface* valikossa on *density*. Aseta *Property* valikkoon *potential*. Paina sen jälkeen OK, jolloin Add surface ikkuna katoaa ja Surface ikkunaan tulee kuvan 25 mukainen teksti.



Kuva 25: Elektronipinnan laskeminen

Jätä surface- ikkuna edelleen auki ja valitse **setup** valikosta *submit*, jolloin ohjelma ilmoittaa laskun lähtevän käyntiin. Kun lasku valmistuu, **Surface** ikkunan valkoinen ruutu tekstin *density* edessä muuttuu keltaiseksi. Ruksi keltainen laatikko. Molekyylin elektronipinta tulee esille (Kuva 26).



Kuva 26: Etanolin elektronipinta

Elektronipinnalla havainnollistetaan elektronien esiintymistodennäköisyyttä molekyylissä. Punaisilla alueilla elektronitiheys on suuri ja sinisillä pieni.

Missä molekyylin osassa etanolissa on suurin elektronitiheys? Miksi?

6. Ilman kaasujen tietokonepohjainen molekyylimallinnus

6.1 Virittäytyminen aiheeseen

Aineen olemus on askarruttanut ihmiskuntaa jo satoja vuosia ennen ajanlaskumme alkua. Filosofit Leukippos Miletos selitti jo n. 450 eaa aineen koostuvat pienistä jakamattomista aineista atomeista (atomos kreik. jakamaton), joiden liittyessä toisiinsa eri tavoin, muodostuu eri aineita. Hän kuitenkin oletti, että atomit ovat yhtä ja samaa alkuainetta.

Leukippoksen oppilas Demokritos Abderas täydensi opettajansa teoriaa: aine koostuu äärettömän monesta perushiukkasesta, jotka ovat jatkuvasti liikkeessä. Kappaleet voivat hajota, mutta atomit säilyvät ja liikkuvat tyhjässä tilassa muodostaen uusia aineita.

Aristoteles ja Platon, aikansa huomattavimmat filosofit, kehittivät neljän alkuaineen teorian. Kaikki materia koostui neljästä perusalkuaineesta tulesta, maasta, vedestä ja ilmasta. Aineet saattoivat muuttua toisikseen, kun niiden suhteita muutettiin. Esimerkiksi puun palaminen selitettiin seuraavasti: Kun puu palaa, siitä kohoaa tulta, uuttuu vettä ja se tuottaa ilmaa savun muodossa. Jäljelle jää tuhka eli maa. Viidenneksi alkuaineeksi oletettiin eetteri. Eetteri ei suinkaan tarkoita tässä yhteydessä nykyiseltään tunnettua orgaanista liuotinta vaan eetterillä tarkoitettiin kaikkea ympäröivää ainetta maanpäällä ja avaruudessa. Eetteri ei kuitenkaan ollut vaikutuksessa muihin alkuaineisiin. Vasta 1600-luvulla alettiin todella kapinoida ajatusta vastaan, että kaikki koostuisi neljästä alkuaineesta. Robert Boyle oli yksi kärkkäimpiä vastaan väittäjiä.

Nykyisin tunnetaan 112 alkuainetta, joista 94 esiintyy luonnossa ja 18 on keinotekoisesti valmistettuja.

6.2 Flogiston teoria

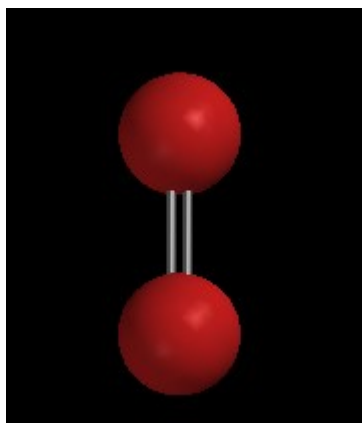
Palaminen on kemiallisista reaktioista yksi tutuimpia. Se on tunnettu jo vuosituhansien ajan ja luonnollisesti askarruttanut ihmismieltä. Pitkään oli oltu sitä mieltä, että palaminen on aineiden hajoamista yksinkertaisemmiksi aineiksi. Vuonna 1703 vallitsevaksi käsitykseksi palamisesta tuli flogiston teoria. Flogiston oli erittäin hienoa ainetta, joka havaittiin vain sen paetessa sitä sisältävästä aineesta. Kyseisessä tilassa flogiston ilmeni tulena. Palaminen oli siis flogistonin menettämistä. Flogiston selitti useat kemialliset reaktiot. Boyle oli pystynyt osoittamaan, ettei palaminen tapahdu tyhjiössä. Näin ollen oletettiin, että ilma absorboi flogistonia ja kun ilma on kylläinen, loppuu palaminen.

6.3 Happi

Hapelle ei voi nimetä varsinaisesti yhtä löytäjää, sillä sen keksi samoihin aikoihin neljä kemistiä. Priestly julkaisi tutkimuksensa ensimmäisenä 1774, mikä tekee hänestä periaatteessa hapen keksijän vaikka William Scheele oli löytänyt hapen jo vuonna 1771. Scheelen tutkimusta ei pystytty julkaisemaan ajoissa kustantajan velkojen vuoksi. Lavoisier antoi lopullisen tuomion flogiston teorialle osoittaessaan, että metallien palaessa eli yhtyessä happeen niiden paino lisääntyy.

Gay-Lussac teki 1800-luvun alussa merkittäviä havaintoja kaasujen suhteista, jolla ne reagoivat. Hän määrittä, että happi ja vety reagoivat tilavuus suhteessa 1:2, kun muodostuu 1 tilavuus vettä. Avogadro teki julkaisi oman teoriansa v. 1811, jossa hän osoitti samassa tilavuudessa, lämpötilassa ja paineessa olevan sama määrä kaasun partikkeleita, oli mikä tahansa kaasu kyseessä. 1850-luvulla hyväksyttiin Avogadron teoria, jolla hän pystyi selittämään havainnon, jossa yksi tilavuus happea muodostaa kaksi tilavuutta vettä. Tuolloin Avogadro toi esiin ajatuksen, että happi ja vety esiintyvät kaksiatomisessa muodossa. Avogadro oli esittänyt ajatuksensa jo paljon aiemmin, mutta ruotsalainen kemisti Berzelius, jolla oli paljon vaikutusvaltaa, ei hyväksynyt sitä. Monet kemistit liittyvät mieluummin Berzeliuksen linjaan, jossa kaksi samanlaista alkuainetta ei voinut liittyä yhteen.

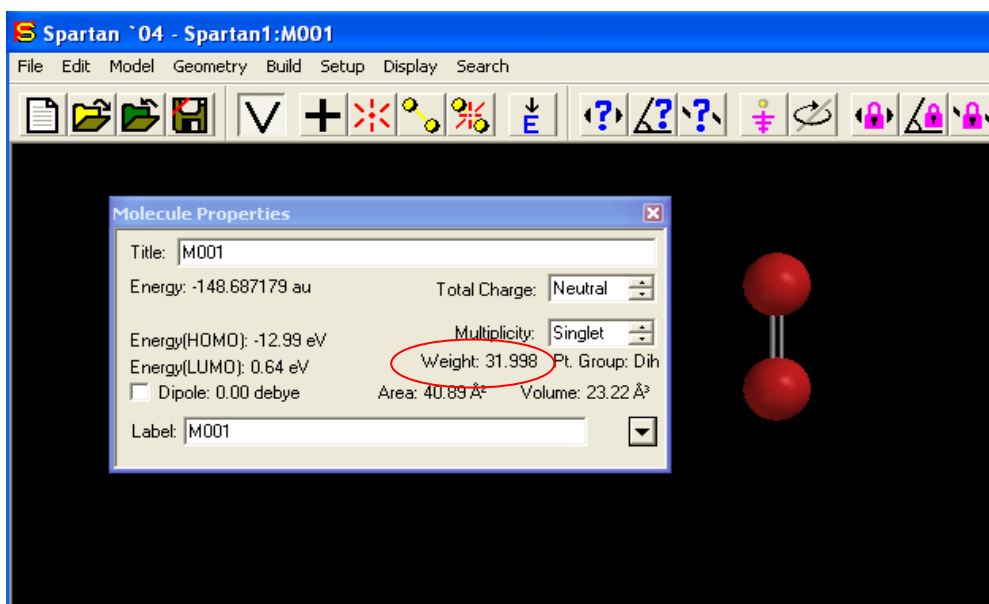
Mallinnetaan happimolekyyli. Ilmassa oleva happi on kaksiatominen molekyyli (kuva 27). Millainen sidos on happiatomien välillä? Mallinna happimolekyyli.



Kuva 27: Happi on kaksiatominen molekyyli

Pohdi, onko ilmalla massa, onko ilma ainetta?

Lasketaan hapelle ensin tasapainogeometria (Kts. Kpl 5.6). Tarkastellaan sen jälkeen happi molekyylin massaa. Avaa **Display** valikko ja sieltä *properties*. Kohdasta weight voit nähdä happimolekyylin massan (Kuva 28).



Kuva 28: Happimolekyylin massa

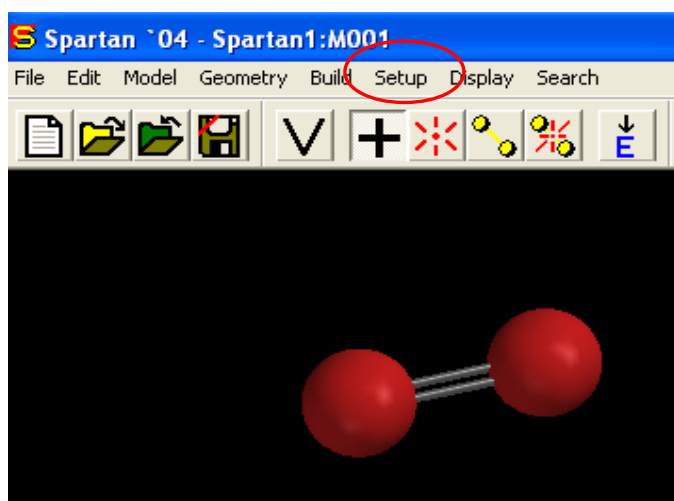
Massa on ilmoitettu yksiköissä g/mol. Voitko päätellä tästä, onko ilmalla massa?

Mittaa happimolekyylin sidospituus valitsemalla yläikonivalikosta kysymysmerkki, jonka ympärillä on nuolet. Klikkaa sen jälkeen atomeja, joiden välisen sidoksen haluat määrittää.

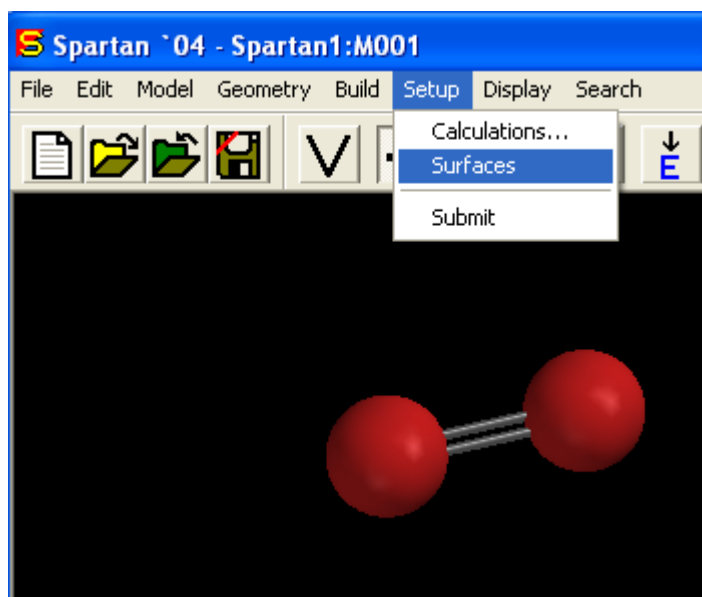
Elektronipinta

Pohdi, mikä elektronien rooli on molekyylissä? Kuinka ne ovat sijoittuneet. Ovatko elektronit paikallaan vai liikkuvatko ne?

Tarkastellaan happimolekyylin elektronipintaa. Saat happimolekyylin elektronipinnana mallinnettua avaamalla valikon **setup** (Kuva 29) ja valitsemalla sieltä *surface* (Kuva 30).

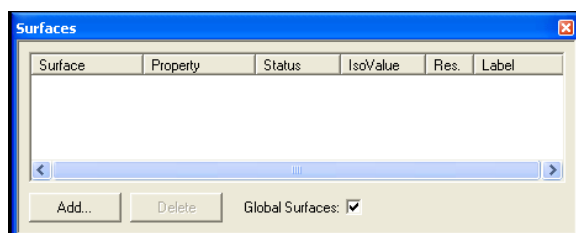


Kuva 29: Setup- valikko



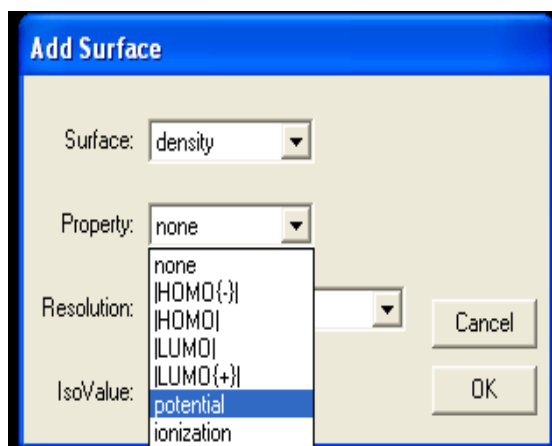
Kuva 30: Kohdasta surface, saadaan elektronipinta mallinnettua

Ruudulle avautuu **surface** ikkuna (Kuva 31).



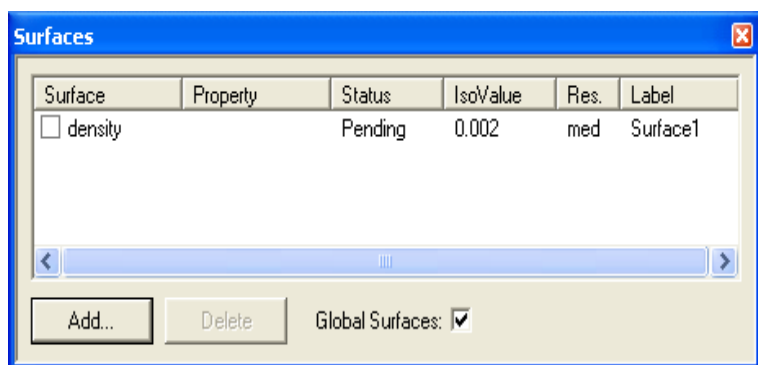
Kuva 31: Surface- ikkuna

Valitse **Add**. Sinulle avautuu **Add surface** ikkuna (kuva 32).



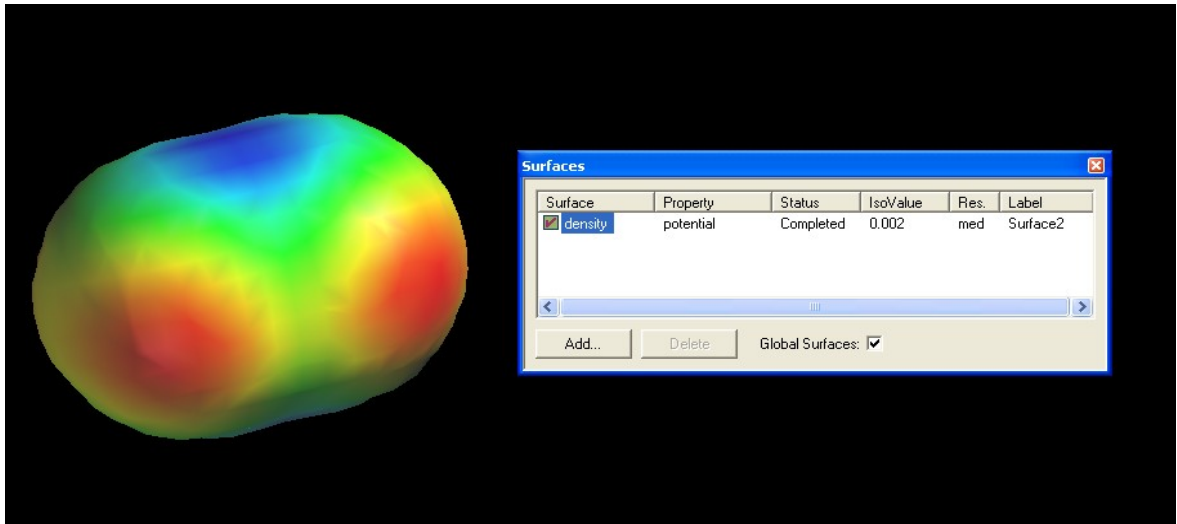
Kuva 32: Add surface- ikkuna

Varmista, että *Surface* valikossa on *density*. Aseta *Property* valikkoon *potential*. Paina sen jälkeen OK, jolloin ikkuna katoaa ja surface valikkoon tulee kuvan 33 mukainen teksti.



Kuva 33: Surface- ikkuna

Valitse sitten **setup** valikosta *submit*, jolloin ohjelma ilmoittaa laskun lähtevän käyntiin. Anna **Surface** ikkunan olla kokoajan auki. Kun lasku valmistuu, Surface ikkunan valkoinen ruutu tekstin density edessä muuttuu keltaiseksi. Ruksi keltainen laatikko. Happi molekyylin elektronipinta tulee esille (Kuva 34).



Kuva 34: Hapen elektronipinta

Klikkaamalla kertaalleen elektronipintaa, siihen ilmestyy keltainen kehikko ja oikeaan alakulmaan tulee esille alasvetovalikko, joka antaa sinulle mahdollisuuden tarkastella molekyylin elektronipintaa eri malleilla. Mikä malleista on sinun mielestäsi toimivin?

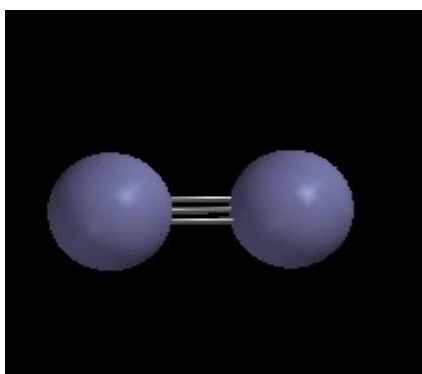
Punaisilla alueilla on elektronitiheys suurimmillaan ja sinisillä pienimillään. Kuinka selität elektronipinnan värityksen hapen atomimallin avulla? Miksi elektronipinta on esitetty tasaisena, eivätkä yksittäiset elektronit näy?

- Punaisilla alueilla on havaittavissa hapen vapaiden elektroniparien aiheuttama suuri elektronitiheys. Elektronipinta esitetään tasaisena pintana, koska elektronit ovat jatkuvassa liikkeessä ja niistä voidaan ennustaa vain suurin todennäköisyys, jossa ne esiintyvät.

6.4 Typpi

Typellä on useita keksijöitä samoin kuin hapella. Cavendish oli eräs typen löytäjä. Tutkimuksissaan vuonna 1772 hän huomasi, että johdettaessa ilmaa hehkuvien hiilien yli, jäljelle jäävän kaasun ominaispaine oli pienempi kuin ilman. Cavendish ei julkaissut tutkimustaan heti, mutta tiedotti siitä Priestleylle. Cavendishin tutkimuksista riippumatta samana vuonna julkaisi Daniel Rutherford väitöskirjansa, jossa mainitaan myrkyllinen ilma. Myrkyllinen ilma löytyi kokeessa, jossa Rutherford piti hiiriä päivän ilmatiiviissä astiassa ja käsitteli ilman kalilipeällä niin, että jäljelle jäi lähinnä typpeä. Koska Rutherford julkaisi tutkimuksensa ensin, sai hän typen keksimisen nimiinsä. Typen suomenkielinen nimi juontaa juurensa vanhaan suomenkieliseen sanaan typehtyä, joka tarkoittaa tukehtumista.

Mallinnetaan ruudulle kaksiatominen typpi (kuva 35). Millainen sidos atomien väliin tulee?



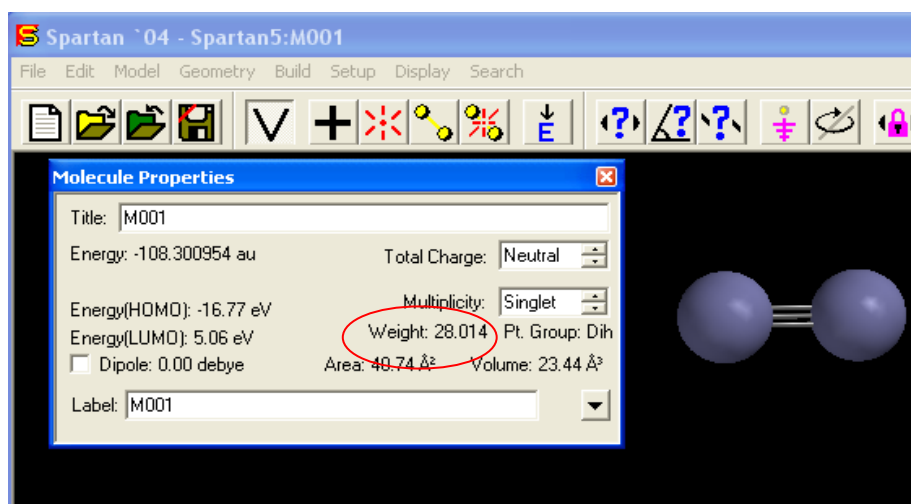
Kuva 35: Typpimolekyyli

Typpiatomien välissä on kolmoissidos. Typen sidos on erittäin voimakas. Pohtikaa, missä typpeä käytetään.

- Typpeä käytetään mm. elintarviketeollisuudessa suojakaasuna sekä jäädytyksessä.

Laske typelle tasapainogeometria (kts. Kpl. 5.6).

Määritä sitten typpimolekyylin massa. Avaa **Display** valikko ja valitse sieltä *Properties*. Katso massa kohdasta *Weight* (Kuva 36).



Kuva 36: Typpimolekyylin massa

6.5. Argon

Kuten monet keksinnöt myös jalokaasut keksittiin vahingossa.

Argon oli ensimmäinen jalokaasu, jonka olemassa olo tiedostettiin. Henry Cavendish eristi tietämättään argonin jo vuosina 1784 -1785.

Varsinaiset argonin toteamiseen johtaneet tutkimukset jäivät lähes sadan vuoden päähän Cavendishin tiedostamattomasta löydöksestä. Vuonna 1870 lordi Rayleigh tutki hapen ja typen tiheyksiä. Hänen kokeensa osoittivat, että ilmasta saatu typpi oli aina tiheämpää kuin laboratorio oloissa valmistettu typpi. Rayleigh oletti, että typellä olisi taipumus muodostaa samoin kuin hapella kolmiatomista allotrooppista muotoa. William Ramsay oli viimein tutkija, joka pystyi ratkaisemaan arvoituksen. Kemiallisesti valmistetun typen ja ilman typen tiheyksien ero oli $0,0016\text{g/dm}^3$. Tämä ero antoi syyn epäillä uutta alkuaainetta. Ramsay poisti typen ja hapen ilmasta antamalla ilman reagoida hehkuvan magnesiumin ja kuparin kanssa. Jäljelle jääneen kaasun spektrissä näkyi punainen ja vihreä viiva, joka ei kuulunut millekään muulle tunnetulle kaasumaiselle aineelle.

Jatkotutkimukset osoittivat, ettei uusi aine reagoanut minkään muun aineen kanssa. Argon nimettiin reagoimattomuutensa vuoksi hidasta tarkoittavan kreikankielisen sanan mukaan.

Mallinnetaan kaksiatomisen typpimolekyylin rinnalle kolmiatominen typpi. Kolmiatomista tyyppiä ei oikeasti ole olemassa, mutta mallinnamme sen samalla rakenteella, kuin mikä otsonilla on. Valitse atomivalikosta typpi, jolla on delokalisoidut sidokset. Delokalisoiduissa sidoksissa toinen sidos on piirretty täytenä ja toinen katkoviivalla.



Kuva 37: Typpi delokalisoiduin sidoksin

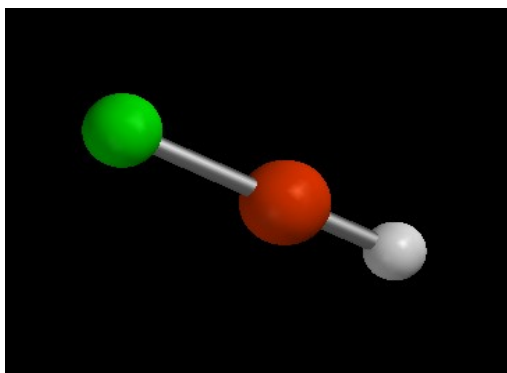
Jotta saat mallinnettua ruudulle toisen molekyylin, on sinun painettava ennen atomin ruudulle klikkaamista oikeasta alakulmasta *insert*. Rakenna molekyyli, jossa on kolme typpiatomia delokalisoiduin sidoksin (Kuva 37). Sinulle jää ylimääräisiä sidoksia, jotka tulee poistaa.

Tarkastele molekyylien eroja ja yhteneväisyyksiä. Voisiko kolmiatominen typpi olla mahdollinen? Poista kaksiatominen typpi ruudulta. Katso nyt kolmiatomisen typen massa. Sulje kolmiatominen typpi pois ja mallinna ruudulle argon. Argonia ei löydy lainkaan Ent. valikosta, joten sinun on vaihdettava atomivalikko Exp. tilaan. Määritä argonin massa ja vertaa sitä kolmiatomisen typen massa. Mitä huomaat?

6.6 Argonin ainoa yhdiste

Ensimmäinen argonin yhdiste on suomalaisten ylpeyden aihe. Hydridoargonfluoridi HArF valmistettiin vuonna 2000 Helsingin yliopiston kemian laitoksella ensimmäisenä ja toistaiseksi ainoana argonyhdisteenä.

Mallinnetaan HArF (Kuva 38) ja tutkitaan sen elektronipintaa. Argonia ei löydy lainkaan Ent. valikosta, joten sinun on vaihdettava atomivalikko Exp. tilaan. Valitse ensin atomivalikosta argon. Lisää sen jälkeen argonin toiselle puolelle vety ja toiselle fluori. Tuhoa ylimääräiset sidokset pois.



Kuva 38: HArF

Laske HArF:lle tasapainogeometria (kts. kpl 5.6). Laskennallisesti HArF:in rakenne ennustettiin jo vuonna 1995. Sen sidospituudet ennustettiin riittävän lyhyiksi, jotta sen olemassaolo olisi mahdollista. Mittaa HArF:in sidospituudet. Vertaa niitä hapen ja typen sidospituuksiin. Mitä havaitset?

Määritä yhdisteelle elektronipinta (kts, kpl 5.7). Tutki yhdisteen elektronipintaa. Missä elektronit todennäköisimmin yhdisteessä liikkuvat? Onko kyseessä luonteeltaan enemmän ioni- vai molekyyliyhdiste?

- HArF on luonteeltaan ioninen yhdiste. Elektronitiheys on keskittynyt voimakkaasti fluorin läheisyyteen.

2. Mallinnuskortit oppilaille

Happi

Molekyylikortti oppilaalle

1. Piirrä happimolekyyli



2. Kuinka monta elektronia hapella on uloimmalla kuorellaan?

3. Mikä on happimolekyylin massa?

4. Millainen sidos happiatomien välillä on kaksiatomisessa happimolekyyliässä? Mikä on sidospituus?

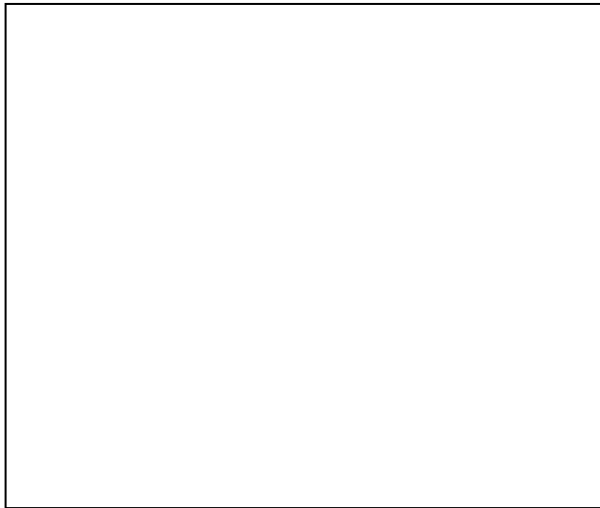
5. Mikä on elektronien rooli molekyylissä?

6. Missä luonnossa happea tarvitaan? Missä sitä syntyy?

Typpi

Molekyylikortti oppilaalle

1. Piirrä typpimolekyyli



2. Millainen sidos typpiatomien välillä on typpimolekyyliissä?

3. Missä typpikaasua käytetään? Miksi?

4. Mikä on typen sidospituus?

5. Mikä on kaksiatomisen typen massa?

Argon

Molekyylikortti oppilaalle

1. Mihin jaksollisen järjestelmän ryhmään argon kuuluu? Millaisiksi jalokaasujen reaktiivisuutta usein kuvataan ja miksi?

2. Mikä yhteys tyellä ja argonilla on historiassa?

3. Mikä on argonin ainoa tähän mennessä valmistettu yhdiste? Missä se valmistettiin ensimmäisen kerran?

4. Piirrä argonin yhdiste HArF (hydridoargonfluoridi)



5. Mittaa HArF :in sidospituudet

3. Tarveanalyysin kyselylomake

Kysely tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen herättämästä kiinnostuksesta pro gradu-tutkimuksen tarveanalyysiä varten

Arvioi mallinnustuokion jälkeen, kuinka hyvin alla oleva väittämä kuvaa kiinnostustasi tietokonepohjaisen molekyylinmallinnusta kohtaan.

Arvioi kiinnostuksesi asteikolla 0-5, jossa

0= en osaa sanoa

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

Ympyröi parhaiten mielipidettäsi kuvaava vaihtoehto:

Tietokonepohjainen molekyylimallinnus oli kiinnostavaa 0 1 2 3 4 5

Vastaa seuraavaan kysymykseen sanallisesti:

Toisiko mielestäsi tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen käyttö koulussa lisää kiinnostavuutta kemian tunteihin? Perustele vastauksesi.

Kiitos vastauksistasi!

4. Materiaalin arviointi lomake

Kysely tietokonepohjaisen molekyylimallinnuksen herättämästä kiinnostuksesta pro gradu tutkimusta varten

Arvioi mallinnustuokion jälkeen, kuinka hyvin alla olevat väittämät kuvaavat kiinnostustasi tietokonepohjaisen molekyylinmallinnuksen mahdollistamiin toimintoihin. Arvioi kiinnostuksesi asteikolla 0-5, jossa

0= en osaa sanoa

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. Molekyylin sidospituuksien mittaaminen oli kiinnostavaa | 0 1 2 3 4 5 |
| 5. Molekyylin elektronipinnan tarkastelu oli kiinnostavaa | 0 1 2 3 4 5 |
| 6. Molekyylien ”näkeminen” oli kiinnostavaa | 0 1 2 3 4 5 |
| 7. Molekyylien ominaisuuksien selittäminen mallien avulla oli kiinnostavaa | 0 1 2 3 4 5 |
| 8. Koin kiinnostavana, että sain mallintaa itse | 0 1 2 3 4 5 |

II Tietokonepohjainen molekyylimallinnus 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?
