

OIVALTAMISEN ILOA LASKENNALLISESTA KEMIASTA

Pro gradu-tutkielma

Miia Muurinen ja Noora Skarp

22.1.2004

Fysikaalisen kemian laboratorio ja

Kemian opettajankoulutusyksikkö

Kemian laitos

Helsingin yliopisto

HELSINGIN YLIOPISTO – HELSINGFORS UNIVERSITET

Tiedekunta/Osasto Fakultet/Sektion Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta		Laitos Institution Kemian laitos	
Tekijä/Författare Miia Muurinen ja Noora Skarp			
Työn nimi Arbetets titel Oivaltamisen iloa laskennallisesta kemiasta			
Oppiaine Läroämne Fysikaalinen kemia / kemian opettajan suuntautumisvaihtoehto			
Työn laji Arbetets art Pro gradu	Aika Datum 22.1.2004	Sivumäärä Sidoantal 94 + Cd-rom	
Tiivistelmä Referat <p>Pro gradu -tutkielman päätavoitteena oli selvittää tietokoneavusteisen molekyyli­mallituksen käyttömahdollisuuksia lukion kemian opetuksessa. Tutkielman yhteydessä tuotettiin lukion kemian opetukseen soveltuva WWW-pohjainen "Laskennallisen kemian tutkimustori", joka on tasavertaisesti kaikkien saatavilla Internetistä kemian opettajankoulutusyksikön WWW-sivujen kautta. Tutkimustorin tehtävien avulla on tuotu täysin uudenlainen lähestymistapa kemiallisiin ilmiöihin, joissa yhdistyvät kokeellinen laboriotyöskentely ja tietokoneavusteinen molekyyli­mallitus toisiaan tukeviksi kokonaisuuksiksi. Kokeellinen lähestymistapa, sisältäen myös molekyyli­mallituksen, on sekä tämän hetkisen että 1.8.2005 voimaantulevan opetussuunnitelman mukainen (40,41).</p> <p>Tutkimustorin tehtävissä käsitellään kemiallisia ilmiöitä makro-, mikro- ja kaavatasoilla, joten tehtävät tukevat monitaso-opetusta auttaen oppilasta ymmärtämään mikro- ja makrotasojen välisen yhteyden. Lisäksi ne helpottavat mallien luonteen ymmärtämistä. Tällainen monimuoto-opetusmalli tukee hyvin myös konstruktivistista oppimiskäsitystä.</p> <p>Kirjallinen tutkimus jakautuu kolmeen osaan: molekyyli­mallituksen ja mallien käsittelyyn, yleensä tietokoneavusteiseen opetukseen sekä laskennallisen tutkimustorin käsittelemiseen ja mallintamisen pohjana olevaan teoriaan. Laskennallisen kemian tutkimustori sisältää viisi molekyyli­mallitustehtävää, kaksi laboratoriossa suoritettavaa oppilastyötä sekä yhden demonstraation. Internet -sivuilla on lisäksi paljon etanoliin, laskennalliseen kemiaan, molekyyli­mallitukseen ja lukion kemian opetussuunnitelmiin liittyvää materiaalia.</p>			
Avainsanat - Nyckelord Kemian opetus, laskennallinen kemia, lukio, malli, molekyyli­mallitus, opetussuunnitelma, oppimisympäristö, tietokoneavusteinen kemia, tietokoneavusteinen opetus			
Säilytyspaikka - Förvaringställe Helsingin yliopisto, Fysikaalisen kemian laboratorio ja Kemian opettajankoulutusyksikkö			
Muuta tietoja			

SISÄLLYSLUETTELO

	sivu
I JOHDANTO	1
I.1 Mitä on tietokoneavusteinen molekyylimallitus.....	2
I.2 Mikä on malli ja millainen on hyvä malli?.....	3
I.3 Kemian opetuksen tieto- ja viestintäteknikkaa hyödyntävistä projekteista Suomessa.....	4
I.4 Tietokoneavusteinen opetus konstruktivistisen oppimiskäsityksen tukena.....	7
II TIETOKONEAVUSTEINEN OPETUS	11
II.1 Tietokoneavusteisen opetuksen avulla parempiin oppimistuloksiin.....	11
II.2 Tietokoneavusteisen opetuksen historiasta.....	13
III TIETOKONEAVUSTEINEN OPETUS JA MOLEKYylimallitus LUKION OPETUSSUUNNITELMISSA	18
III.1 Tietokoneavusteinen opetus osana lukion opetussuunnitelmia.....	18
III.2 Tietokoneavusteinen opetus ja molekyylimallitus lukion kemian opetussuunnitelmissa	20
IV WWW-POHJAINEN OPETUS- JA OPPIMISympäristö	22
IV.1 Hyvän WWW- sivuston piirteitä.....	23
IV.2 WWW-pohjainen opiskeluympäristö sulautettuna perinteiseen luokkahuoneopetukseen.....	26
IV.3 WWW- pohjaisen opetusympäristön mahdollisuuksista.....	27
IV.4 Aktiiviseksi oppijaksi WWW-pohjaisella oppimisympäristöllä?.....	29
IV.5 Rajoituksia tietokoneavusteisen opetuksen ja molekyylimallituksen käytölle lukiossa.....	31

V MOLEKYYLIMALLITUS OSANA TIETOKONEAVUSTEISTA	
OPETUSTA	33
V.1 Ajatuksista animaatioihin - Mallien historiaa.....	33
V.2 Tietokoneavusteisen molekyylimallituksen etuja muihin malleihin verrattuna.....	43
VI LASKENNALLISEN KEMIAN TUTKIMUSTORI	49
VI.1 Laskennallisen kemian tutkimustorin esittely.....	49
VI.2 Laskennallisen kemiantutkimustorin tehtävien yksityiskohtainen tarkastelu.....	51
VI.3 HyperChemin laskennallista taustaa ja tehtävien kemiallista tarkastelua.....	54
VI.3.1 Optimoinnin päämääränä on energian minimointi.....	55
VI.3.2 Molekyylimallituksessa käytetyt menetelmät.....	59
VI.3.2.1 Kvanttikemia.....	61
VI.3.2.2 Schrödingerin aaltoyhtälö kvanttikemial- listen laskujen pohjana.....	61
VI.3.2.3 Molekyylisimulaatiot.....	72
VI.3.3 Spektroskopia.....	74
VI.3.3.1 Mitä on spektroskopia?.....	74
VI.3.3.2 Sähkömagneettisen säteilyn ja aineen vuorovaikutus.....	75
VI.3.3.3 Vibraatio- eli värähdyspektrit.....	78
VI.3.3.4 Molekyylin värähtelyliike.....	80
VI.3.3.5 Molekyyli harmonisena värähtelijänä.....	83
VII JOHTOPÄÄTÖKSET JA POHDINTAA	85
VIII KIRJALLISUUS	88
IX LIITTEET	94

I Johdanto

Tämä työ on osana Suomen Kemian Seuran laskennallisen kemian jaoston, Helsingin yliopiston kemian laitoksen, sekä CSC-Tieteellinen laskenta Oy:n ”Laskennallista kemiaa kouluihin” -yhteistyöprojektia, jonka tarkoituksena on kartoittaa, helpottaa ja edesauttaa laskennallisen kemian hyödyntämistä ja soveltamista peruskoulujen ja lukioiden kemian opetuksessa. Projektissa tuotetaan uutta materiaalia kouluopetukseen soveltuvaksi ja tutkitaan sen vaikuttavuutta kemian oppimisessa sekä opiskelussa.

Tutkielman innoittajana on ollut Maija Akselan ja Maija Lahtela-Kakkosen keväällä 2001 ilmestynyt artikkeli (1), jossa tuotiin esille laskennallisen kemian merkitys kouluopetuksessa. Tämän myötä heräsi innostus kehittää opetusmateriaalia lukion kemian opetukseen, jossa perinteinen kokeellinen laboratoriotyöskentely ja laskennallinen kemia yhdistyvät toisiaan tukevaksi kokonaisuudeksi. Pedagogisena motivaationa oli tuoda lisäarvoa kemian opetukseen.

Tutkielman ensisijaisena tavoitteena on kehittää uusia ideoita ja materiaalia lukion kemian opetukseen. Työssä suunniteltu ja toteutettu tutkimustori mahdollistaa molekyylien kolmiulotteisen mallituksen ja kemiallisten reaktioiden havainnollistamisen molekyyalitasolla lukion kemian opetukseen soveltuvassa muodossa. Tutkimustorin sisältämissä tehtävissä käsitellään kemiallisia ilmiöitä makro-, mikro- ja symbolitasoilla, jolloin oppilaalla on mahdollisuus tutustua saman asian eri puoliin ja ymmärtää näin laaja-alaisemmin kemiallisia ilmiöitä. Tehtävät ovat monitasoisia ja sisältävät kokeellisesti, mallintamalla sekä kaavatasolla suoritettavia osatehtäviä. Osatehtävät voi suorittaa joko itsenäisinä tai yhtenäisinä kokonaisuuksina. Laskennallisen kemian tutkimustori on kaikkien opettajien ja oppilaiden saatavilla Internetissä kemian opettajakoulutuksen www-sivujen kautta¹, joten kaikilla on mahdollisuus hyödyntää sitä niin opetuksessa kuin opiskelussakin. Tehtävien suorittamiseen suositellaan normaalin kemian luokan varustuksen lisäksi HyperChem² -molekyylimallitusohjelmaa, jota on käytetty tutkimustorin

¹ <http://www.helsinki.fi/ml/kemia/opettajakoulutus/>

² <http://www.hyper.com>

tuottamisessa. Tehtävät on kuitenkin suunniteltu niin, että osan niistä pystyy suorittamaan myös ilman erillistä ohjelmaa.

Kirjallisen tutkimuksen tavoitteena on ollut koota tutkimustorin toteutuksen kannalta keskeistä tietoa kemiasta, molekyyllimallituksesta, pedagogiikasta ja WWW-pohjaisista oppimisympäristöistä. Molekyyllimallitusta käsiteltäessä on perehdytty myös moniin laskennallisen kemian kannalta oleellisiin teorioihin ja laskumenetelmiin. Näiden ymmärtäminen on mallituksen soveltamisen kannalta tärkeää.

1.1 Mitä on tietokoneavusteinen molekyyllimallitus

Laskennallinen kemia on yksi nopeimmin kehittyviä kemian aloja. Laskennallisessa kemiassa pyritään mallintamaan esimerkiksi molekyylien rakenteita, reaktiivisuutta ja ominaisuuksia, molekyylien välisiä vuorovaikutuksia sekä reaktioiden kinetiikkaa (1,2). Nykyaikaisten tietotekniikan laitteiden ja sovellusohjelmien ansiosta on mahdollista ennustaa, selittää ja havainnollistaa erilaisten yhdisteiden ominaisuuksia, kemiallisia prosesseja ja kolmiulotteisia rakenteita interaktiivisesti. Tätä kutsutaan molekyyllimallitukseksi, jossa kokeellisesti havaittua ilmiötä kuvaamaan pyritään luomaan tietokoneavusteinen malli. Molekyyllimallitus on noussut viime vuosina yhdeksi merkittävimmistä kemian menetelmistä.(3) Tällä hetkellä sitä hyödynnetään muun muassa biomolekyylien tutkimuksessa, materiaalien kehitystyössä ja kokeellisen tiedon ohella lääkkeiden suunnittelussa.

Tietokoneiden avulla voidaan mallintaa ja simuloida todellisuutta ennen kokemattoman tarkasti ja siten luoda uutta tietoa ja teknologiaa. Tämä nopeuttaa ja helpottaa huomattavasti esimerkiksi geenitutkimusta sekä uusien lääkeaineiden ja materiaalien suunnittelua. Teollisuuden parissa monimutkaiset ja kalliit kokeet voidaan suurin osin korvata simuloinein, jotka paljastavat myös empiirisissä kokeissa näkymättömiä yksityiskohtia. Myös vaarallisten kokeiden testaaminen onnistuu turvallisesti mallituksen avulla. Samalla myös kustannukset pienenevät. (ks. 1,4-11)

Laskennallista kemiaa, mallintamista ja simulointia voidaan käyttää tieteellisen tutkimuksen ja teollisuuden lisäksi myös kouluopetuksessa. Sen avulla pystytään kuvaamaan ja havainnollistamaan ilmiöitä, prosesseja ja abstrakteja käsitteitä. Laskennallisen kemian avulla oppilas pystyy helpommin yhdistämään kokeellisen ja teoreettisen kemian molekyyalitasolta lähtien. Sitä voidaan käyttää yhtä hyvin abstraktien käsitteiden konkretisoimiseksi, yksinkertaistamiseksi ja selventämiseksi kuin teorioiden, ilmiöiden ja sääntöjen havainnollistamiseksi ja selittämiseksi. (1)

Molekyyylimallitukseen sopiva ohjelmatarjonta on nopeasti lisääntynyt viime vuosina. Uusia tietokoneohjelmia käyttämällä oppilaat voivat yhä paremmin ymmärtää molekyylien kolmiulotteisia rakenteita sekä molekyylien ominaisuuksia ja niiden välisiä vuorovaikutuksia (1). Kemiallisen prosessin kulku määräytyy reagoivien komponenttien kolmiulotteisen rakenteen perusteella, joten mallituksen avulla oppilaat voivat ymmärtää paremmin myös molekyylien reaktiivisuutta sekä kemiallisten reaktioiden etenemistä ja nopeutta. Lisäksi voidaan havainnollistaa ja ymmärtää energian, joka on molekyyylimallituksen tärkein tarkasteltava suure, yhteys molekyylin eri konformaatioihin, reaktion kulkuun ja sen kemialliseen reaktiivisuuteen.

I.2 Mikä on malli ja millainen on hyvä malli?

Malli on käsitteenä hyvin moniulotteinen. Sille on hankalaa antaa lyhyttä, kaiken kattavaa määritelmää ilman, että se johtaisi väärinkäsityksiin. Siksi se on syytä määritellä hieman laajemmin: malli on jonkin kohteen kuten idean, prosessin, systeemin tai tapahtuman konkreettinen, matemaattinen, mielen muodostama, sanallinen tai visuaalinen kuvaus (12). Mallien käyttö ei ole uutta vaan malleja on käytetty tieteessä kautta aikojen. Niiden avulla on pyritty kuvaamaan luontoa ja siinä tapahtuvia ilmiöitä. Mallien voidaankin sanoa olevan mielen tuotteita tieteestä ja niitä voidaan pitää tieteen opettamisen ja opiskelun työkaluina siinä missä oppikirjojakin.(13)

Mallilla on aina jokin tarkoitus; se edustaa asiaa tai ilmiötä ja se on saanut alkunsa lähteestä, ideasta tai kohteesta. Mallin katsotaan olevan käyttökelpoinen, kun se on yksinkertaisempi tai havainnollisempi kuin todellinen kohde, jota on tarkoitus kuvata

(3). Kemiassa mallin on yleensä tarkoitus kuvata esimerkiksi molekyyliä, atomia tai reaktiota. Mallien käyttäjän on oleellista ymmärtää mallitukseen liittyvät rajoitukset. Vaikka mallituksen tehtävä on kuvata kohteen keskeisiä piirteitä mahdollisimman kattavasti, todenmukaisesti ja havainnollisesti, se ei koskaan ole identtinen kuvatun kohteensa kanssa. Mallien tulee korostaa kohteensa keskeisiä piirteitä epäolennaisten ominaisuuksien kustannuksella. Epäolennaiset piirteet eivät saa peittää alleen oleellisia piirteitä. Hyvä malli antaa kuvan myös systeemin sisäisestä rakenteesta ja sisäisistä vuorovaikutuksista eikä luo virheellistä tai harhaanjohtavaa kuvaa todellisuudesta. (13,14, s.123)

Tieteissä, kuten kemiassa, mallit luovat yhdistävän sillan puhtaan teorian ja kokeellisen toiminnan välille (3). Ne helpottavat asian ymmärtämistä, johtopäätösten tekoa tai asioiden yhdistämistä. Koska jokainen malli on aina ihmisen tuottama, olipa se sanallinen tai konkreettinen, se ei ole sellaisenaan selvä toiselle ihmiselle. Mallin luojaan tuleekin esitellä malli, sen ominaisuudet ja käyttömahdollisuudet sekä mallin rajallisuus, jotta siitä saataisiin kussakin tilanteessa tarvittava hyöty.(3,15)

Useat tutkijat (ks. 1,3,10,13,15-19) pitävät mallien käyttöä kemian opetuksessa tärkeänä. Jotta oppilaat oppisivat hahmottamaan siirtymisen kaksiulotteisesta kolmiulotteisiin rakenteisiin, pidetään erityisen tärkeänä konkreettisten tai tietokonemallien käyttöä. Konkreettisten mallit, opetuksessa yleensä pallotikkumallit, ovat yleensä riittämättömiä todellisuuden simulaatioita ja ovat näin ollen usein liian yksinkertaistettuja luoden oppilaalle harhakäsityksiä todellisuudesta. Koska malleilla on puutteita, on tärkeää ja hyödyllistä havainnollistaa samaa asiaa monella eri tavalla. Näin oppilas saa selkeämmän ja monipuolisemman kuvan siitä mistä kemian ilmiöissä todella on kyse.

I.3 Kemian opetuksen tieto- ja viestintätekniikkaa hyödyntävistä projekteista Suomessa

Tietokoneavusteiset menetelmät ovat luoneet uuden mahdollisuuden kemian tulosten arviointiin tekstinkäsittely-, piirto- ja tieteellisten erikoisohjelmien avulla. Kuten Lundell artikkelissaan (20) toteaa ”kemian opetuksessa ja oppimisessa keskeistä on kemian ilmiöiden ymmärtäminen – ja tässä tietokoneavusteisen kemian mahdollisuus

yhdistettynä Internetin järkevään ja muuta opetusta täydentävään käyttöön antaa lähes rajattomat mahdollisuudet luoda uusia ja motivoivia opetusympäristöjä kemian opetukseen ja opiskeluun”. Lundellin mukaan kemian tieto- ja viestintäteknikka (kemian tvt) kattaa kaikki kemian tieto- ja viestintätekniset innovaatiot ja se auttaa opiskelijaa ymmärtämään, selvittämään ja ennustamaan kemian ilmiöitä ja käsitteitä.

Aihe on erittäin ajankohtainen, sillä Suomessa on viime vuosina sekä aloitettu että valmistunut useita valtakunnallisia hankkeita, joiden tarkoituksena on kehittää sellaisia kemian opetuksen ja opiskelun työtapoja, joissa tieto- ja viestintäteknikka tukee oppimista. Seuraavassa luodaan lyhyt katsaus joihinkin tärkeimpiin projekteihin, jotta saataisiin käsitys siitä kuinka tärkeänä kemian opetuksen kehittämistä tällä hetkellä pidetään.

FyKe–virtuaalikouluhanke pohjautuu Opetusministeriön julkaisemaan koulutuksen ja tutkimuksen tietostrategiaan (21). Tämä kolmivuotinen hanke on käynnistynyt syksyllä 2000 ja se jakautuu useampaan osahankkeeseen, joita valmistelee sähköpostin välityksellä opettajista kootut vastuutiimit. Tässä kehittämis- ja koulutushankkeessa kehitetään pedagogisesti mielekkäitä tieto- ja viestintäteknikkaa hyödyntäviä fysiikan ja kemian opetuksen ja opiskelun työtapoja. Perimmäisenä tavoitteena on luoda tietoverkkoon uusia fysiikan ja kemian opetukseen ja opiskeluun soveltuvia oppimateriaaleja ja työtapoja sekä olla vuorovaikutuksessa verkon välityksellä. Lisäksi hankkeessa mukana olevia fysiikan ja kemian opettajia tuetaan tehtävässään hyödyntää tieto- ja viestintäteknikkaa monipuolisesti opetuksessa ja kannustetaan heitä levittämään hankkeen materiaaleja ja kokemuksia ammattitovereilleen. (22-24)

Kemia tänään -hanke on Kemianteollisuus ry:n, Opetushallituksen, Opetusministeriön ja Matemaattisten Aineiden Opettajien Liiton MAOL ry:n sekä Helsingin yliopiston kemian opettajankoulutusyksikön, kemian alan yritysten ja Teollisuuden ja Työnantajain Keskusliiton (TT) yhteinen kemian opetuksen kehittämiseen tähtäävä hanke (25). Sen tavoitteena on nostaa kemian opetuksen tasoa ja asemaa kansainvälisesti kilpailukykyiselle tasolle, kehittää kemian opettajien ammattitaitoa sekä parantaa työskentelymotivaatiota, edistää uusien opetusmenetelmien ja näkökulmien soveltamista opetuksessa sekä aktivoida ja

innostaa yrityksiä tekemään yhteistyötä koulujen kemian opettajien ja oppilaitosten kanssa.

LUMA-projekti on vuonna 2002 päättynyt Opetushallituksen hanke luonnontieteiden ja matematiikan opetuksen kehittämiseksi peruskoulussa, lukiossa ja toisen asteen ammatillisessa koulutuksessa. Luonnontieteet ja matematiikka eli LUMA talkoissa pyrittiin nostamaan suomalaisten matematiikan ja luonnontieteiden osaaminen kansainväliselle tasolle. Tavoitteeseen pääsemiseksi kehitettiin opetusmenetelmiä niin, että oppilaat pystyvät paremmin ymmärtämään käsitteitä, osaavat työskennellä kokeellisesti ja soveltaa tietojaan. (22,26)

LUONTI+ eli Luonnontieteiden opetuksen työtapojen ja tietotekniikan opetuskäytön kehittämishanke on Helsingin yliopiston opettajankoulutuslaitoksen vuonna 2002 päättynyt tutkimus-, kehittämis- ja koulutushanke. Hankkeessa kehitettiin mm. uusia oppimateriaaleja, tietokoneohjelmia ja mittalaitteita peruskoulujen, lukioden ja eritasoisten ammatillisten oppilaitosten luonnontieteiden ja teknologian opiskeluun. Lisäksi kehitettiin kiinnostavampia ja monipuolisempia opiskeluympäristöjä, jotka tarjoavat käyttäjystävällisen ympäristön opiskella luonnontieteitä ja teknologiaa. (27-29)

Maassamme on tällä hetkellä menossa myös useita hankkeita, jotka tähtäävät varta vasten matemaattis-luonnontieteellisten aineiden opettajien koulutuksen kehittämiseen tieto- ja viestintäteknikkaa apuna käyttäen. Virtuaalinen cum laude -hanke on Helsingin yliopiston opettajankoulutuslaitoksen matemaattisten aineiden opettajien perus- ja täydennyskoulutuksen tutkimus- ja kehittämishanke. Siinä luodaan tietoverkkoon peruskoulun ja lukion opettajan pedagogisten opintojen tieto- ja viestintäteknikkaa hyödyntävä opiskeluympäristö.(30)

MALU -verkkokoulu-hankkeen tavoitteena on integroida tieto- ja viestintäteknikka monipuolisesti mukaan matemaattisten aineiden opettajankoulutukseen. Hanke on saanut Helsingin yliopiston opetusteknologiapalkinnon vuonna 1999.(31,30)

Tämä pro gradu-tutkielma liittyy Laskennallista kemiaa kouluihin -projektiin, joka on Suomen Kemian Seuran laskennallisen kemian jaoston, Helsingin yliopiston

kemian laitoksen, sekä Tieteen tietotekniikan keskuksen (CSC) yhteistyöprojekti. Sen tarkoituksena on kartoittaa, helpottaa ja edesauttaa laskennallisen kemian hyödyntämistä ja soveltamista peruskoulujen sekä lukioiden kemian opetuksessa (32).

I.4 Tietokoneavusteinen opetus konstruktivistisen oppimiskäsityksen tukena

Nykyinen konstruktivistinen oppimiskäsitys korostaa oppimista aktiivisena kokemukseen perustuvana prosessina (33). Tiedon siirtoon ei ole olemassa suoraa kanavaa, vaan uusien tietojen ja taitojen oppiminen on oppilaan aktiivinen prosessi. Opettaminen, samoin kuin minkä tahansa välineen tarjoama informaatio, voi vaikuttaa vain epäsuorasti oppimiseen. Kun asia mielletään näin, havaitaan, että oppilaiden yksilöllisyyden huomioivaan oppimisympäristöön kohdistuu suuria vaatimuksia. Jotta oppiminen olisi mahdollisimman monipuolista ja tietoa voitaisiin soveltaa joustavasti monissa eri tilanteissa, tulisi myös oppimisympäristön olla mahdollisimman monipuolinen. Tietokone tarjoaa monimuoto-opetusympäristön antamalla mahdollisuuden oppimiseen oivaltamalla ja kokeilemalla. Tietokoneavusteinen opetus on yksilöllistä ja aktivoi tehokkaasti, sillä opiskelija voi edetä omaan tahtiinsa eikä tehtäviä voi tehdä vain sivusta seuraamalla. Lisäksi tietokoneavusteinen opetus mahdollistaa niin sanotun ”ajasta ja paikasta riippumattoman” opiskelun. Opiskelu ei ole sidottu luokkahuoneeseen vaan sitä voi toteuttaa missä tahansa paikassa, jossa on käytettävissä tietokone.

Kemiassa tietokoneavusteisen molekyyli mallitus tarjoaa yksilöllisyyttä tukevan oppimisympäristön, jossa oppilaiden vaikeina kokemia asioita on helppo käsitellä ja havainnollistaa. Useat tutkimustulokset (ks. 3,13,15,17,19,34) ovat osoittaneet, että kemiassa oppilaille tuottaa suuria vaikeuksia etenkin aineen luonteen ymmärtäminen, molekyylien avaruudellinen hahmottaminen, symbolien tulkinta ja käyttö sekä nopea siirtyminen makroskooppiselta tasolta mikroskooppiselle tasolle. Kemiassa on tyypillistä, että asiat esitetään joko makro-, mikro- tai symbolisella tasolla. Makrotasolla ilmiö on paljain silmin havaittavissa. Tällainen on esimerkiksi kokeellisessa oppilastyössä aistein havaittava ilmiö. Koska kuitenkin kaikki kemialliset prosessit tapahtuvat mikro- eli atomi- ja molekyyli tasolla, edellyttää asioiden ymmärtäminen kykyä siirtyä makrotasolta mikrotasolle. Usein, etenkin

kirjallisuudessa, tyydytään käsittelemään asioita ainoastaan symbolisella tasolla esimerkiksi kemiallisten kaavojen avulla. Oppilaiden on vaikea muodostaa linkkejä näiden eri tasojen välille ja ymmärtää, että samaa asiaa voidaan merkitä usealla eri tavalla. Molekyylimallituksen avulla makrotason ilmiöitä on mahdollista kuvata erilaisia malleja apuna käyttäen sekä mikrotasolla että symbolisesti, jolloin siirtyminen tasojen välillä helpottuu.

Tietokoneen avulla opiskelijan on helppo kokeilla molekyylitasolla erilaisia vaihtoehtoja molekyyliin havainnollistamiseksi ja havaita, etteivät visuaaliset seikat vaikuta molekyylin kemiallisiin ominaisuuksiin. Opiskelijalla on myös tilaisuus seurata reaaliaikaisesti tietokoneen näytöltä millaisia vaikutuksia hänen tekemillään muutoksilla on. Sama asia voidaan esittää sekä mikrotasolla että symbolisesti eli sekä molekyylimalleina että kaavoina. Laskennallisen kemian tutkimustorilla esitellyt monitasoiset tehtävät tukevat tätä niin kutsuttua monitaso-opetusta auttamalla oppilasta ymmärtämään tasojen välisen yhteyden sekä helpottamalla mallien luonteen ymmärtämistä.

Tieteellisen laskennan avulla tietokoneelle luotuja molekyylejä voidaan käsitellä monin eri tavoin. Molekyylejä voidaan tarkastella eri suunnista ja usein niille voidaan laskea energiaminimiä vastaava rakenne sekä seurata kuinka lämpötilan muutos vaikuttaa niiden rakenteisiin ja sidospituuksiin. Myös molekyyliin rakennetta ja niiden osia voidaan muunnella tarpeen mukaan. Molekyyleille on mahdollista laskea värähdyspektri, joka antaa paljon tietoa molekyylin värähtelyistä, ominaisuuksista, kemiallisista sidoksista ja rakenteista. Kemiallista reaktiota voidaan katsella hidastettuna ja reaktioympäristöä muunnellen tai reaktio voidaan pysäyttää kokonaan, jolloin päästään tarkastelemaan esimerkiksi sen siirtymätilaa tai reaktion etenemistä vaiheittain.(4,6,35)

Kun visuaalista esitystä käytetään empiirisen kokeen ohella, pystyy oppilas ymmärtämään paremmin myös kemiallisen reaktion synnyn ja sen seuraukset. Samalla oppilas ymmärtää myös molekyylin geometrian yhteyden reaktiivisuuteen sekä kemiallisen reaktion alkuperän mikrotasolla.

Kehityopsykologian tutkijat ovat todenneet, että kaikki eivät pysty käsittelemään tietoa abstraktilla tasolla. Asiat painuvat mieleen selkeämmin ja oppimistulos paranee, mikäli ne voidaan hahmottaa konkreettisesti. Visualisointi antaa uusia resursseja oppilaille. Esimerkiksi työmuisti ei rajoitu aivojen sisälle, vaan laajempi kokonaisuus on näkyvillä tietokoneen näytöllä. Tutkittava etsintäavaruus pienenee ja tarvittavan tiedon löytäminen nopeutuu, kun tieto voidaan esittää tiiviissä ja mielekkäässä muodossa. Tällöin tieto hahmottuu paremmin käyttäjälle ja johtopäätösten teko on helpompaa. Myös monen asian yhtäaikaista seuranta on helppoa visuaalisten vihjeiden perusteella, sillä luodut mallit voidaan tallentaa ja niihin voidaan palata aina uudelleen.(14)

Tietokoneavusteisen mallinnuksen tuominen lukio-opetukseen ei vain tuo uutta työkalua opettajalle ja oppilaalle vaan se antaa oppilaalle mahdollisuuden tutustua eräaseen nykyajan moderniin ja tärkeään tutkimusmenetelmään (ks. 4-9,36-39). Oppilaalle on hyvä antaa kuva siitä millaisia työmenetelmiä esimerkiksi lääketieteellisyydessä nykyisin käytetään (14, s.34). Tietokoneavusteista opetusta lisäämällä voidaan myös vastata teollisuuden tuomiin haasteisiin, sillä esimerkiksi bioteknologian kehittyessä alalle tarvitaan uusia osaajia (5). Kun tietokone otetaan mukaan opetukseen jo kouluissa, voi oppilaiden kiinnostus näihin suhteellisen uusiin tieteenaloihin ja niiden käsittelemiin ilmiöihin herätä.

Tietotekniikan hyväksikäyttö opetuksessa tukee myös lukion opetussuunnitelman päämääriä jossa todetaan, että yleissivistys pitää sisällään käsityksen teknologisesta tietotaidosta, jota tarvitaan teknologiaa koskevien keskustelujen käyntiin ja päätösten tekoon (40,41). Jotta oppilaat voivat osallistua teknologiaan liittyviin keskusteluihin, vaaditaan heiltä medialukutaitoa ja -kriittisyyttä. Yksi lukio-opetuksen tehtävistä on luoda tälle perusta. Etenkin tulevassa kemian opetussuunnitelmassa korostetaan lisäksi, että tietokoneavusteisen mallituksen tulee olla keskeisenä osana lukion kemian opetusta (41).

Tietokoneavusteisen opetuksen koulukäyttöä on tutkittu ja sen hyödyntämisestä kemian opetuksessa on saatu hyviä tuloksia (ks. 1,3,13,15,18,19). Sen on havaittu lisäävän oppilaiden opiskelumotivaatiota huomattavasti sekä työskentelyn itsenäisyydestä (mm. 3,13,15,18,19,42,43). Vastoin yleisesti esitettyjä väitteitä on

havaittu, että tarkoituksenmukaisesti ohjattu työskentely tietokonetta apuna käyttäen ei ainoastaan monipuolista opiskelua vaan myös lisää oppilaiden välistä sosiaalista vuorovaikutusta. Tietokoneella työskennellessä oppilaille on mahdollisuus keskustella ohjelman sisältämistä asioista ja kysymyksistä, jolloin monet ongelmat on helpompi ratkaista.

II Tietokoneavusteinen opetus

Varhaisin oppimisen muoto, joka oli käytössä ennen koulujen yleistymistä, oli oppiminen kokemuksen ja ihmisten kanssa keskustelun avulla. Opetuksen ohjaaja ei luennoinut, vaan asetteli kysymyksensä huolellisesti, johdatellen oppilasta oivaltamaan asioita. Luentotyypin opetus yleistyi vasta, kun tietoa haluavien määrä alkoi lisääntyä, eikä ohjaajalla enää ollut mahdollisuutta keskustella jokaisen kanssa erikseen. Kun kirjapaino keksittiin, yhä laajemmalla kuulijakunnalla oli mahdollisuus perehtyä ohjaajan jakamaan tietoon. Samalla opetus muuttui yksisuuntaiseksi keskustelun kuoltua.(44, s.11-12) Tietokoneiden tultua osaksi opetusta luotiin uusi mahdollisuus palata keskustelulla ja oivaltamalla oppimiseen.

Helsingin yliopiston yliopistonlehtori Maija Akselan ja Kemianteollisuus ry:n koulutuspäällikkö Riitta Juvosen tekemästä Kemian opetus tänään–tutkimuksesta käy ilmi, että yksi opettajien kemian opetuksen kehittämistoiveista koski tietokoneavusteista opetusta. Opettajat esittivät toivomuksia tietokoneavusteisen kurssin käyttöön ottamisesta ja siihen soveltuvan materiaalin kehittämisestä. Tietokoneavusteinen opetus, erityisesti mittausohjelmat, opetusohjelmat ja Internetin käyttö kemian opetuksessa, olivat opettajien eniten toivomia koulutusaihepiirejä.(34, s.37,55)

II.1 Tietokoneavusteisen opetuksen avulla parempiin oppimistuloksiin

Tietokoneiden avulla on mahdollista aktivoida opiskelijaa ja yksilöllistää opetusta. Monien tutkimusten tuloksena onkin ollut, että tietokoneavusteisella opetuksella päästään parempiin tuloksiin kuin perinteisellä luokkahuoneopetuksella.

Teoksessaan ”Tietokone opetusvälineenä” (44) Lehtinen esittelee vuonna 1980 julkaistun tutkimuksen tuloksia. Tutkimuksessa analysointiin 59:ää toisistaan riippumatonta Yhdysvaltojen college-opiskelijoille tehtyä tutkimusta. Yhteenvetona niistä todettiin, että tietokoneavusteisen opetuksen seurauksena oppilaiden suoritustaso kohosi ja oppimiseen vaadittu aika lyheni. Syitä tulokseen ei pystytty erittelemään, mutta eräänä vaihtoehtona esitettiin tietokoneisiin liittyvää uutuuden viehätystä ja niiden tuomaa vaihtelua perinteiseen luokkahuoneopetukseen

verrattuna. Tietokoneiden opetusohjelmat ovat yleisesti ottaen hyvin tarkkaan mietittyjä ja niiden valmistelemiseen on käytetty enemmän aikaa kuin perinteisen luennon tai luokkahuoneopetuksen, jolloin lopputuloksena on looginen, tiivis ja selkeä oppitunti. Lisäksi tutkimuksissa havaittiin, että oppilas osallistuu aktiivisesti tietokoneavusteisesti toteutetun oppitunnin kulkuun ja prosessoi sen aikana tietoa tehokkaasti.

Leino on tutkinut tietokoneen käyttöä opetuksen kehittämisessä (42,43,45). Hänen keväällä 1986 aloittamansa Kauniaisten suomenkielisen koululaitoksen projekti kuului osana laajempaa SITRA:n projektia, jonka tavoitteena oli kartoittaa ja edistää tietokoneiden käyttöä eri tavoin yleissivistävässä koulutuksessa. Tietokonetta oli tarkoitus käyttää sekä ala- ja yläasteella että lukiossa työvälineenä tekstinkäsittelyssä, graafisissa käyttötarkoituksissa sekä tiedostojen luomisessa ja käyttämisessä. Lisäksi oli tarkoitus saada tietokoneet opettajien täydennyskoulutuksen kautta oppilaiden normaaleiksi opiskeluvälineiksi oppiaineesta ja luokka-asteesta riippumatta. Opettajat saivat mikrotietokoneiden käyttöön perehtymisen jälkeen myös suunnitella tietokoneen käyttötapoja omassa opetuksessaan, ja tämän toteutumiseksi suunnitella oman täydennyskoulutuksensa.

Kokeilun tulokset osoittivat että tietokoneavusteisella opetuksella voidaan päästä suunnilleen samantapaiseen oppimistuloksiin kuin perinteisellä opetuksellakin. Kuitenkin ohjelmasta, käyttötavoista, opiskelijoista ja opettajasta riippuen, voidaan tietokoneavusteisella opetuksella saavuttaa jopa parempiakin tuloksia kuin niin sanotulla tavallisella opetuksella. Havaittiin myös, että keskitasoa paremman koulumenestyksen omaavat oppilaat oppivat myös eniten tietokoneavusteisessa opetuksessa. Lisäksi, vaikka vain muutamalla opettajalla oli aikaisempia kokemuksia koneiden käyttämisestä, olivat opettajat innostuneita projektista.

Laitisen (46) ”Tietokoneavusteinen opetus” kirjassa määritellään tietokoneavusteisen opetuksen termistöä niin englanniksi kuin suomeksikin. Laitisen mukaan tietokoneavusteinen opetus soveltuu aineisiin, joissa tarvitaan paljon harjoittelua. Tietokoneavusteinen opetus ei ole hänen mukaansa hedelmällistä, jos luokassa on vain yksi tietokone, mutta jos ryhmän käytössä on useita koneita, hän toteaa oppimistulosten parantuneen kaikentasoisilla oppilailla.

Beckerin mukaan (47) tietokoneavusteisesta opetuksesta on eniten hyötyä keskitasoa lahjakkaimmilla tai heikoimmilla oppilailla.

Duffyn ja Jonassenin (48) tutkimuksen mukaan opetusta ja oppimista tukevat parhaiten käyttäjien tarpeisiin ja ongelmalähtöiseen tutkimukselliseen lähestymistapaan keskittyvät, myös opiskelun sosiaalisen luonteen huomioivat tietokoneavusteiset opiskeluympäristöt ja materiaalit. Toisessa tutkimuksessa, johon Duffy osallistui (49) todetaan ryhmätyöskentelyn olevan tietokoneen ympärillä aidommin yhteisöllistä kuin perinteisessä luokahuoneopetuksessa. Tietokoneen ääressä toiminta kohdistuu koneen ruudulla esillä olevaan ongelmaan ja sen ratkaisuyritykseen. Oppilaiden puheen ja keskusteluiden kohde on tällöin tarkemmin rajattu. Voidaan sanoa, että tietokoneen kanssa työskentely kehittää myös oppilaan sosiaalisia taitoja.

Kallonen-Rönkkö (50,51) on tutkinut opetusohjelmien tarjoamia mahdollisuuksia opetuksen osana sekä oppimisympäristöjen vaikutusta tietokoneavusteiseen opetukseen. Hänen mukaansa tietokoneavusteisen opetuksen roolin määrää luokan tapahtumat ja käytetty opetusohjelma. Sinänsä tietokoneavusteinen opetus ei rajoita oppimisympäristöä, mutta toisaalta se ei ole myöskään ehdoton edellytys minkään oppimisympäristön menestykselle käytölle. Toisaalta hyväkään tietokoneohjelma ei pelasta huonoa oppimisympäristöä. Ratkaisevaan asemaan joutuukin se miten, eikä mitä, käytetään.

Edellisiin tutkimustuloksiin vedoten voidaan yhteenvetona todeta, että tietokoneavusteinen opetus lisää oppilaan aktiivisuutta, sosiaalisia taitoja ja tukee hänen yksilöllisyyttään. Tietokoneavusteinen opetus yleensä myös parantaa oppilaan oppimistuloksia. Täytyy kuitenkin muistaa, ettei tietokoneen käyttö saa olla itseisarvo, vaan tietokone on aina vain oppimisen apuväline, samaan tapaan työväline kuin esimerkiksi kynä ja kumi.

II.2 Tietokoneavusteisen opetuksen historiasta

Tietokoneavusteisen opetuksen historia mukaillee tietokoneiden kehityksen historiaa, sillä kyseessä on oppimista tavoitteleva didaktinen toiminta, jossa on mukana

tietokone. Koneiden kehittyessä ja yleistyessä ne ovat saaneet paikkansa myös luokkahuoneissa. On havaittu, että oppilaiden on saatava omakohtaisia kokemuksia tietokoneiden parissa työskentelystä. Tällöin he pystyisivät oppimaan koneiden käyttämiseen liittyviä taitoja ja näkemään tietotekniikan suomat mahdollisuudet nyt ja tulevaisuudessa, sekä kenties joskus itse osallistumaan niiden kehittämiseen. Tulevaisuuden yhteiskunnassa tietotekniset taidot tulevat yhä enemmän osaksi tarpeellisia ja hyödyllisiä yleisiä kansalaistaitoja.

Tietokoneiden tulosta kouluihin ei aina ole oltu kovin innostuneita. Vaikka ymmärrettiinkin, että tietokoneilla voidaan parantaa ja monipuolistaa opetusta, uskottiin niiden olevan haitaksi lapsille. Epäiltiin jopa, että ne voivat olla vaaraksi ihmisille ja heidän elinympäristölleen (45, s.13). Opettajien asema katsottiin uhatuksi ja epäiltiin jopa, että he käyvät täysin tarpeettomiksi. Kaikki pelot ovat hyvin ymmärrettävissä, sillä tietotekniikan kehitys on muuttanut ihmisten elämää monin tavoin. Ajan kuluessa on kuitenkin osoittautunut, ettei pelkoon ole aihetta. On huomattu, ettei tietokoneista ole suoranaista haittaa sen enempää oppilaille kuin ympäristöllekään ja etteivät opettajat ole käyneet tarpeettomiksi. Sen sijaan opettajan rooli on muuttunut tiedon jakajasta ohjaajan rooliin.

Tietokoneavusteisessa opetuksessa on havaittavissa neljä pääkehitysvaihetta (44). 1960-luvun alun kokeilevan vaiheen jälkeen seurasi 1970-luvulla laajenemisvaihe. Laajenemisen voidaan katsoa jatkuneen nykyiseen siirtymävaiheeseen saakka. Tulevaisuutta voidaan pitää niveltymis- ja sulautumisvaiheena.

Tietokoneavusteisen opetuksen historia alkaa kuitenkin jo ennen kokeilevaa vaihetta, varhaisista 1950-luvun opetuskoneista (44). Sidney L. Pressey kehitti 1950-luvulla ensimmäisen opetuskoneen ja aloitti tietokoneavusteisen opetuksen historian. Myöhemmin 1950-luvun lopulla ja 1960-luvun alussa B.F. Skinner loi opetuskoneet, jotka toimivat hänen kolmen oppimisen pääperiaatteen: vahvistamisen, opetuksen ohjelmoinnin ja aktivoinnin mukaan. Opetuksen ohjelmoinnin periaate tarkoitti opetuksen ja oppiaineksen kulun huolellista suunnittelua, johon kuuluu myös oppimismotivaatiota laskevien tekijöiden poisto sekä oppilaan roolin tekeminen aktiiviseksi. Oppimiskoneilla saadaan aikaan aktiivinen tilanne, kun oppilas välittömästi vastauksen jälkeen saa aina uuden kysymyksen vastattavakseen ja

pystyy näin määräämään oman opetuksensa tahdin. Oppilas etenee ikään kuin tietokonepeliä pelaten. Opetuskoneita voidaankin pitää niiden ”luonteen” perusteella eräänlaisina alkeellisina tietokonepeleinä.

Suomessa tietokoneiden koulukäyttöä kokeiltiin ensimmäisen kerran 1960-luvulla. Tällöin opetus keskittyi lähinnä tietokoneen rakenteen ja käytön ymmärtämiseen. Vähitellen tietokone integroitiin myös joidenkin matematiikan ja fysiikan kurssien yhteyteen, tosin silloinkin perehdyttiin vain matemaattisten sovelluksien ohjelmointitaitoihin. Vaikka kouluihin hankittiin tietokoneita, niitä käyttivät lähinnä vain innostuneimmat opettajat. Normaaliopetukseen ne katsottiin sopimattomiksi ja opettajien työnkuvaan kuulumattomiksi. Lisäksi tietokoneiden käytöstä uskottiin olevan hyötyä vain keskitasoa selvästi parempien oppilaiden opetuksessa ja vain harvat opettajat uskoivat siitä olevan apua heikkojen oppilaiden opetuksessa. (42)

Kuusikymmentäluvun tietokoneiden opetuskäyttö oli lähinnä tietokoneperusteista opetusta (computer-based education, CBE) (52). Kolme yhdysvaltalaista tutkijaa, Donald Bitzer, Patrik Suppes ja Richard C. Atkinson, kiinnostuivat tietokoneiden käytöstä opetuksessa. Bitzer teki tutkimustaan toisista tietämättä ja koki paljon vastustusta oman yliopistonsakin taholta. Tutkimusten lopputuloksena syntyi kuitenkin PLATO-opetusjärjestelmä, jonka kehittämistä jatkettiin vielä kymmeniä vuosia.(44)

1970-luvulla tietokone sai kouluissa eräänlaisen apuopettajan roolin. Se toimi informaation välittäjänä ja opitun kontrolloimisen välineenä. Samalla havaittiin, että tietokone soveltuu myös muuhun kuin ohjelmoinnin opetukseen.(42) Vuosikymmenen lopulla opetus jakaantui tietokoneohjattuun opetukseen (computer-managed instruction, CMI) ja tietokoneavusteiseen opetukseen (computer-assisted instruction, CAI). Tietokoneohjattu opetus sai voimakkaimman suosion Yhdysvalloissa. Sen pääajatuksena oli hoitaa koko opetusprosessi tietokoneen avulla. Euroopassa taas yleistyi tietokoneen käyttö opetuksen apuna eli tietokoneavusteinen opetus. Samaan aikaan Euroopassa alettiin korostaa opetuskäsitteen sijaan opiskelun ja oppimisen käsitteitä. (52)

1980-luvulla tietokonetta ryhdyttiin pitämään työvälineenä muiden työvälineiden joukossa. Opettajat käyttivät tietokonetta apuna oppituntien suunnittelussa ja oppilaat materiaalien työstämisessä. Työvälineohjelmina toimivat tekstinkäsittely, tietojenhallinta-, taulukkolaskenta- ja graafiset ohjelmat, joilla ei ole tiettyä opetustavoitetta. Kuitenkin jo kahdeksankymmentäluvulla aloitettiin erilaisten opetusohjelmien kehittäminen.(42) Kahdeksankymmentäluvun lopulla eri oppiaineiden opetuksessa alkoi korostua viestinnän merkitys. Esimerkiksi vieraissa kielissä siirryttiin kommunikatiiviseen ja yhteistoiminnalliseen opetukseen, jossa viestinnällä ja omakohtaisella kokemuksella, eksperimentaalaisella oppimisella, oli keskeinen rooli.(52)

Tietotekniikan tullessa valinnaiseksi oppiaineeksi uskottiin tämän lisäävän tietokoneiden käyttöä myös muussa opetuksessa, sillä oppilailla olisi perusvalmiudet koneiden käyttöön. Näin ei kuitenkaan käynyt. Tietotekniikan opetus jäi usein yhden asiaan perehtyneen opettajan työksi ja muissa aineissa opetusta jatkettiin tuttuun vanhaan tapaan. Opettajat saivat tilaisuuden kyseenalaistaa koko tietokoneavusteisen opetuksen merkityksen, kun tutkimuksilla ei pystytty osoittamaan sen hyödyllisyyttä.(44,45) Tietokoneiden koulukäytön yleistymistä rajoitti myös koneiden suuri koko ja kallis hinta. Aina kahdeksankymmentä luvulle saakka koneet olivat suuria keskuskoneita. Vähitellen ne syrjäytyivät minitietokoneiden tieltä kunnes kahdeksankymmentäluvulla alkoivat henkilökohtaiset mikrotietokoneet yleistyä. Samaan aikaan tietokoneiden hinnat laskivat. Vähitellen yritys- ja koulukäytössä olleita mikrotietokoneita alettiin kytkeä lähi- tai erilaisiin opetusverkkoihin, mutta varsinainen verkottuminen alkoi vasta yhdeksänsankymmentäluvun alussa World Wide Web:in eli Internetin saadessa jalansijaa.(52)

Tietotekniikan kehitys oli 1990-luvulla erittäin nopeaa. Samaan aikaan erilaisten opetuspelien ja opetuskäyttöön suunniteltujen ohjelmien määrä lisääntyi huomattavasti. Eniten uusia ohjelmia syntyi kielten opetuksen tarpeisiin. Näistä mainittakoon niin sanotut drilli- eli harjoituspelit, joissa eteneminen tapahtuu pienin askelin ja kehittymisestä kiitetään positiivisella palautteella. Kouluissa otettiin käyttöön myös erilaiset tutor-ohjelmistot, joissa oppilaalla on selkeiden ohjeiden avulla mahdollisuus perehtyä erilaisiin aiheisiin ja uusiin taitoihin.

Viime vuosina nopeasti kehittyvän tieto- ja televiestintätekniikan myötä monia alan sovelluksia ja ohjelmistoja on otettu mukaan opetus–opiskelu–oppimisprosessiin. Tietokoneperustaisesta opetuksesta on siirrytty uuteen pedagogiseen paradigmaan, jossa yksittäisen tietokoneen ja siinä käytettävän opetus- tai muun ohjelmiston sijaan oppilas työskentelee Internetiin liitetyllä koneella. Tällöin oppilaalla on vapaa pääsy Internetissä oleviin verkkopalveluihin ja -ohjelmistoihin sekä erilaisiin tieto-, tietämys- ja kuvapankkeihin. Nykyisin tietokoneen katsotaankin olevan niin opetus-, opiskelu-, viestintä- kuin työvälinekin.(52) Samalla ollaan siirrytty tekniikan ja teknisen atk:n painotuksesta kohti inhimillistä lähestymistapaa. Tietotekniikasta haetaan apua ja tukea oppimisprosessille, ja tietotekniikalla pyritään tyydyttämään oppijan tarpeita ja toiveita mahdollisimman luontevasti ja tarkoituksenmukaisesti unohtamatta henkilökohtaisen ohjauksen ja sosiaalisten kontaktien tärkeyttä.

III Tietokoneavusteinen opetus ja molekyylimallitus lukion opetussuunnitelmissa

Tämän pro gradu-tutkielman tavoitteena on luoda materiaalia lukion opettajien ja oppilaiden käyttöön. Jotta materiaali olisi käyttökelpoista ja opetukseen soveltuvaan sen tulee tukea lukion opetussuunnitelmaa. Siksi onkin tärkeää tehdä lyhyt katsaus lukion opetussuunnitelmaan, jossa kokeellinen lähestymistapa, pitäen sisällään myös tietokoneavusteisen molekyylimallituksen, on vahvasti esillä. Katsauksen tarkoitus on etenkin tarkastella tietokoneavusteista opetusta ja molekyylimallitusta lukion kemian opetussuunnitelmassa.

III.1 Tietokoneavusteinen opetus osana lukion opetussuunnitelmia

Lukion opetussuunnitelmakäytäntöä uudistettiin edellisen kerran vuonna 1994. Valtakunnallinen opetussuunnitelma ei enää ”kahlinnut” kouluja ja sen tehtäväksi asetettiin ainoastaan opetuksen suunnan ja tuntijaon esittäminen. Tuntijako määrittelee opiskelijan opinto-ohjelman eri aineiden vähimmäiskurssimäärän. Tavoitteiden täsmentäminen sekä tavoitteisiin johtavien keinojen valitseminen jätettiin koulujen ja opettajien omaan harkintaan. Samoihin aikoihin lakkautettiin oppimateriaalien tarkastaminen, joka myös lisäsi opettajien liikkumavaraa oman oppimateriaalin valitsemisessa ja suunnittelussa.

Nykyinen valtakunnallinen opetussuunnitelma (40) määrittelee koulukohtaisen opetussuunnitelman sisällön hyvin karkeasti. Sen tulee sisältää koulun toiminta-ajatus, arvot, tuntijako, opetuksen tavoitteet sekä kaikkien koulun opetusohjelmaan kuuluvien kurssien tavoitteet ja sisällöt. Lisäksi opetussuunnitelmasta tulee löytyä kurssien suoritus- ja arvosteluohjeet, koulun itsearviointi- ja kehittämissuunnitelmat, tiedot koulun yhteistyöstä muiden oppilaitosten ja työelämän kanssa sekä opetusjärjestelyä koskevat seikat. Opetussuunnitelman ei ole tarkoitus olla voimassa useita vuosia vaan sen laadinnan tulee olla jatkuva, koulua itseään palveleva prosessi.(40, s. 18-21,26-30,34)

Opetussuunnitelman mukaan lukion tehtävänä on antaa laaja-alaista ja yleissivistävää koulutusta, joka valmentaa ylioppilastutkintoon ja jatko-opintoihin. Opetus- ja

kasvatustyön päämääräksi se nimeää opiskelijan yksilöllisen kasvun tukemisen samalla kun hän kypsyy aikuisuuteen sekä sukupuolten tasa-arvon vahvistamiseen.

Lukion opetussuunnitelman perusteiden (40) mukaan tietotekniikan hyväksikäyttö avaa uusia mahdollisuuksia opiskelun yksilöllistämiseen. Internetin, samoin kuin esimerkiksi molekyylihallitusohjelmien käyttö, mahdollistaa oppilaan aktiivisen työskentelyn ja etenemisen omassa tahdissa ja tarjoaa monipuolisen ympäristön teknologisen sivistyksen ymmärtämiseksi ja kehittämiseksi. Samalla se totuttaa opiskelijat nyky-yhteiskunnan keskeisen työvälineen käyttöön (40, s.12-14).

Edellisestä lukion opetussuunnitelman perusteiden uudistamisesta on kulunut aikaa ja sen jälkeen on sekä kehityksessä että väestön ikärakenteessa tapahtunut voimakkaita muutoksia. Nykyisiä lukion opetussuunnitelman perusteita on myös kritisoitu paljon sen liiasta väljyydestä (34,41). Jotta lukio yleissivistävänä oppilaitoksena pysyisi ajan tasalla ja mukana kehityksessä, on opetussuunnitelmaa uudistettu. Opetushallituksen johtokunta on hyväksynyt uudet lukion opetussuunnitelman perusteet 15.8.2003 ja ne otetaan käyttöön 1.8.2005 lukion aloittavilla opiskelijoilla.

Uudistustyön tarkoituksena on opetushallituksen mukaan tavoitteiden ja sisällön nykyistä tarkempi määrittäminen, huomion kiinnittäminen opettajien yhteistyöhön, opinto-ohjaukseen, oppilaitosten yhteistyöhön, työpaikalla oppimisen perusteisiin, kurssien numerointiin, suoritusjärjestyksen määrittelyyn sekä syventävien ja soveltavien kurssien erojen selkiyttämiseen. Uudistustyössä tullaan ottamaan huomioon myös yhteiskunnan muutokset, tieteen ja tutkimuksen tulokset, nuorison motivoiminen opiskeluun, oppimiskäsitys ja integraatio. Lisäksi opiskelun yksilöllistämistä tullaan painottamaan yhä enemmän.(41)

Kasvavan teknologisen kehityksen myötä on oppilaan entistä tärkeämpää ymmärtää teknologian merkitys ihmisen toiminnassa ja oppia käyttämään tekniikan sovelluksia. Tämän seurauksena tietokoneet tulevat yhä kasvavassa määrin olemaan mukana lukio-opetuksessa. (40,41)

III.2 Tietokoneavusteinen opetus ja molekyylihallitus lukion kemian opetussuunnitelmissa

Nykyisen valtakunnallisen opetussuunnitelman mukaan kemian, kuten muidenkin luonnontieteiden, opetuksen tehtävänä on auttaa opiskelijaa ymmärtämään luonnontieteiden ja teknologian merkitys osana ihmisen kehitystä ja kulttuuria sekä ohjata opiskelijaa luonnontieteille ominaiseen ajattelutapaan, omakohtaiseen tiedonhankintaan ja tietojen aktiiviseen soveltamiseen. Lisäksi opetuksen tulee kehittää luonnontieteellistä sivistystä ja opiskelunvalmiuksia sekä antaa sellaisia tietoja ja taitoja, joita tarvitaan otettaessa kantaa elämään ja ympäröivää maailmaa koskeviin arvoihin ja kysymyksiin. (40, s.77, 80-82)

Sekä nykyisen että tulevan opetussuunnitelman perusteiden mukaan jokaisen lukion tulee tarjota opiskelijoilleen yhden kemian pakollisen kurssin lisäksi vähintään neljä kemian syventävää kurssia. Kemian soveltavia kursseja lukiot voivat sitä vastoin toteuttaa rajatta mahdollisuuksiensa mukaan. (40, s. 80-82, 90)

Opetussuunnitelman perusteissa (40) tuodaan kemian kohdalla esille tietotekniikan hyväksikäyttö opetuksen monipuolistajana. Tietotekniikan hyödyntäminen on mahdollista muun muassa mittauksia tehdessä, tulosten käsittelyssä, tiedon analysoimisessa, tulosten raportoinnissa sekä mallien luomisessa.(40, s.80-82)

Tietokoneavusteisen mallinnuksen liittäminen lukion kemian opetukseen ei vain tuo uutta työkalua opettajalle ja oppilaalle, vaan se antaa oppilaalle mahdollisuuden tutustua erääseen nykyajan tärkeään tutkimusmenetelmään. Tämä tukee vahvasti sekä nykyisen että tulevan lukion opetussuunnitelman päämääriä. Opetussuunnitelmissa todetaan, että yleissivistys pitää sisällään käsityksen teknologisesta tietotaidosta, jota tarvitaan teknologiaa koskevien keskustelujen käyntiin ja päätösten tekoon. Oppilaalle on siis hyvä antaa kuva siitä millaisia työmenetelmiä esimerkiksi kemian teollisuudessa ja lääketeollisuudessa nykyisin käytetään.(14, s.34)

Uudessa kemian opetussuunnitelmassa korostetaan edellistä opetussuunnitelmaa enemmän kemian opetukselle luonteenomaista kemiallisten ilmiöiden ja aineiden

ominaisuuksien tulkitsemista ja selittämistä mallien ja rakenteiden avulla, ilmiöiden kuvaamista kemian merkkikielellä sekä ilmiöiden mallintamista ja matemaattista käsittelyä. Erityisesti kemian syventävillä kursseilla mallintaminen on esillä yhä laajemmin. Syventävien kurssien tavoitteena on muun muassa perehdyttää opiskelija ilmiöiden mallintamiseen liittyvään matemaattiseen tiedonkäsittelyyn sekä opettaa häntä tutkimaan kokeellisesti ja erilaisia malleja apuna käyttäen aineiden rakenteeseen, ominaisuuksiin, kemialliseen tasapainoon sekä reaktioihin, reaktionopeuteen ja reaktiomekanismeihin liittyviä ilmiöitä.(53)

IV WWW-pohjainen opetus- ja oppimisympäristö

Laskennallisen kemian tutkimustori integroi tietokoneen tavalliseen luokkahuoneopetukseen. Opetus ei pohjautu pelkästään tietokoneavusteiseen osioon sillä siinä yhdistyvät kemian kokeellinen työskentely, molekyylihallitus ja näihin liittyvät tehtävät muodostaen monitasoisen opetusmallin. Tutkimustorissa hyödynnetään WWW-pohjaista opetusta. Se julkaistaan ja levitetään käyttäen luonteeltaan globaalia WWW:tä, johon tutustutaan seuraavassa.

Jotta voitaisiin käsitellä WWW-pohjaista opetusta ja opiskeluympäristöä, täytyy ensimmäiseksi määritellä mitä WWW:llä tarkoitetaan. Lyhenne WWW muodostuu englannin kielen sanoista World Wide Web (maailman laajuinen verkko). Alun perin World Wide Web oli tiedonhallintapalvelin jonka tavoitteena oli levittää reaaliaikaisesti tutkimusten tuloksia maailmanlaajuisesti. Tänä päivänä siitä on muodostunut Internetin helppokäyttöinen yleisliittymä jonka kautta käyttäjä pääsee käsiksi kaikkiin Internetin tarjoamiin palveluihin. WWW on erittäin monipuolinen. Se sisältää kuvia (kaksi- ja kolmeulotteista, liikkuvia ja liikkumatonta), tekstiä ja äänitallenteita. WWW- sivut voivat olla myös vuorovaikutteisia.

Sivut on luotu joko XML-, HTML- tai VRML (Extended Markup Language, Hyper Text Markup Language, Virtual Reality Markup Language) -pohjaisia kuvauskieliä käyttäen. Niillä sivut saadaan halutun näköiseksi ja toiminnallisiksi erilaisia muotoilukomentoja käyttäen. Vuorovaikutteisuutta sivuille voidaan lisätä esimerkiksi interaktiivisten, aktivoitujen valikkojen avulla.. Lisäksi käytössä ovat muun muassa JavaScript-kieli tai monipuolisempi Java-ohjelmointikieli, joiden käyttö mahdollistaa monipuolisen käyttäjän ja tietokoneen välisen vuorovaikutuksen.

Tellan mukaan tekniikan nopea kehitys erityisesti Internetin ja World Wide Web:n alueella on johtanut kasvatustieteen ajatusmallien muutokseen (54,55). Hän katsoo, että olemme siirtyneet tietokoneavusteisen opetuksen (CBE eli Computer-Based Education) paradigmasta verkostopohjaisen oppimisen (NBL eli Network-Based Learning) paradigmaan. Tietokoneiden mukanaan tuoma informaation käsittelyn tekniikka laajentuu verkkoon liittämisen myötä kommunikaation tekniikaksi (33). Verkko sinänsä on vaikeasti määriteltävissä. Sille on kuitenkin pyritty antamaan

joitakin määritelmiä. Lintulan (56) mukaan verkko on käsitteellinen ja kulttuurihistoriallinen artefakti tai tekninen alusta. Vahtivuoren mukaan taas se on materiaallinen ja sosiaalinen, viestintävälineiden ja erilaisten käytäntöjen sommitelma ja yhdistelmä, jonka avulla voidaan hankkia informaatiota, kommunikoida ja toimia yhdessä ja olla yhteydessä (57). Määritelmäksi riittää myös yksinkertaistettu tiivistelmä edellisistä; verkko on sosiaalinen informaatio- ja kommunikointikanava, jota voidaan hyödyntää myös opetuksessa.

IV.1 Hyvän WWW- sivuston piirteitä

Kun mietitään hyvän, opetuskäyttöön suunnitellun, WWW-sivuston piirteitä, tulee ottaa huomioon, ettei mikään opiskeluympäristö ole samanlainen kaikille siihen osallistuville oppilaille. Oppiminen on luonteeltaan yksilöllistä ja siihen vaikuttavat niin oppilaan aikaisemmat tiedot, motivaation kohteet kuin tapa hahmottaa ympäröivää maailmaa. Siksi on mahdotonta luoda yleispäteviä ohjeita siitä, mitä hyviltä sivuilta tulee vaatia. On kuitenkin olemassa joitakin pääpiirteitä, jotka on hyvä huomioida opetuskäyttöön tarkoitettuja sivustoja tarkastellessa. Nämä seikat on pyritty ottamaan huomioon myös Laskennallisen kemian tutkimustorin suunnittelussa ja toteutuksessa.

Kaikista merkittävin seikka, sisällön huolellisen ja harkitun suunnittelun lisäksi, on käyttöliittymän suunnittelu. Jotta sivujen käytön kynnykseksi ei nousisi opiskelijan tietotekniikan taidot, on käyttöliittymän oltava intuitiivinen, helppo ja selkeä. Ohjelmaa täytyy pystyä käyttämään ilman ohjaajan jatkuvaa läsnäoloa. Lisäksi opiskelijan huomion tulee keskittyä opittavaan asiaan, eikä siihen mitä nappia milloinkin täytyy painaa. Käyttöliittymän tulee tukea kyseistä virtuaalista opiskeluympäristöä, sillä ei riitä, että kiinnitetään huomiota pelkästään opettamisen muotoihin. On otettava huomioon koko se ympäristö, joka kehystää opetusta ja oppimista. WWW:ssä toimiva opetussovellus on syytä suunnitella yhtä huolellisesti kuin erillinen opetusohjelma, joten niiden tulisi täyttää myös hyvien opetusohjelmien tunnuspiirteet.

Kaikista vaikein ongelma on käyttöliittymän helppokäyttöisyyden ja opiskelijan riittävän aktivoinnin välillä tasapainottelu. Vaikka onkin tärkeää, että liittymä on

helppokäyttöinen, ei helppous saa olla ensisijainen tavoite, kuten monissa muissa ohjelmissa. Esimerkkeinä mainittakoon HTML-wysiwyg ("What You See Is What You Get") -editoriohjelmat, tekstinkäsittely- ja taulukkolaskentaohjelmat. Tavoitteista tärkein on saada käyttäjä oppimaan esitetty asia. Mikäli kone tekee kaiken oppijan puolesta, hän jää passiivisen sivustaseuraajan rooliin eikä opi. Käyttöliittymän pitää aktivoida oppijaa, luoda tilanteita, joissa oppija joutuu ajattelemaan ja muokkaamaan tietoa. On paljon hyödyllisempää osallistua simulaation luontiin ja muokata sitä kuin katsella vain kuinka se tapahtuu. Kun opiskelija työstää materiaalia hän joutuu samalla miettimään syy-seuraus suhteita ja prosessoimaan tietoa aktiivisesti.

Ohjelman täytyy myös olla sovitettu opiskelijan tasoon ja opittavaan tehtävään. Toisaalta mitä enemmän opiskelija osallistuu, sitä enemmän hän joutuu perehtymään myös itse ohjelman toimintaan ja ajatus intuitiivisesta käytöstä kärsii. Toisaalta samalla opiskelija oppii varsinaisen opittavan asian lisäksi työskentelemään uudella työkalulla, ja näin ollen kasvattaa tietotaitoaan. Samalla hän oppii käyttämään samoja työvälineitä kuin työelämässäänkin käytetään (14). Kun tasapaino oppilaan aktivoinnin ja käyttöliittymän helppouden välillä on löydetty, voidaan sivujen suunnitteluun soveltaa samoja sääntöjä kuin muiden toimivien verkkoympäristöjen suunnitteluun.

Ikkunoiden vieritustoimintoa tulisi välttää. Vierivä teksti rasittaa silmiä ja vaikeuttaa kokonaiskuvan sekä oleellisten seikkojen hahmottamista. Lisäksi, kun teksti jaetaan näytöllisiksi, sen muoto tiivistyy ja epäoleelliset seikat karsiutuvat pois. Tärkeät asiat tulisi sijoittaa näytön yläosaan, kappaleiden alkuun. Ruudulla olisi myös hyvä olla joko jatkuvat ohjeet tai ainakin tieto mistä ne ovat saatavilla.

Meisalo, Sutinen ja Tarhio (14, s.119) paneutuvat WWW-muotoisen oppimisympäristön ominaisuuksiin. He toteavat, että hyvän oppimisympäristön tunnistaa selkeästi suunnitellusta arkkitehtuurista ja nopeasti latautuvista sivuista. Lisäksi opiskelijan tulee koko ajan olla selvillä sijainnistaan ja siitä kuinka hän pystyy selaamaan sivuja eteen ja taaksepäin. Jokaiselta sivulta täytyy olla paluu- tai etenemismahdollisuus, niin ettei synny ”orpoja” muista sivuista erillään olevia sivuja. Greenlaw ja Hepp (14) painottavat nopean latautumisen lisäksi myös

visuaalisen ulkonäön tärkeyttä ja selkeyttä. Yksityiskohtien tulee olla huolella harkittuja, niin että fontti, värit, kirjoitusasu ja tyyli ovat sopuissa (14). On muistettava, että vaikka värien käyttö elävöittää sivun ulkonäköä, liian monet värit ruudulla vain pirstovat kuvan ja tekevät sivusta sekavan näköisen. Taustaväri on hyvä olla vaaleahko, niin ettei se peitä tekstiä. Vastavärejä ei tulisi käyttää vierekkäin. Myös punaisen ja vihreän yhdistäminen tulee välttää, sillä se vaikeuttaa puna-viher-värisokeiden työskentelyä.

Hypermedian avulla materiaali on mahdollista linkittää asiaa tukevaan tietoon ja kuviin, jolloin sivuston käyttäjä pääsee välittömästi käsiksi asian kannalta oleellisiin tietoihin. Linkkien lisäämisen yhteydessä on kuitenkin tärkeää tarkastaa linkkien sopivuus ja toimivuus, ettei käyttäjä ajaudu turhille sivuille. Painikkeiden ja linkkien tulee noudattaa yhtenäistä graafista suunnittelua ja eri elementeille tulisi olla kaikissa ikkunoissa niistä riippumattomat vakiopaikat. Standardista poikkeavien värien käyttöä painikkeissa ja linkeissä tulisi välttää, esimerkiksi avaamattomat linkit ovat yleisesti sinisiä ja avatut punaisia tai purppuran punaisia.

HTML-kielen tarjoamia mahdollisuuksia tulee käyttää riittävästi. Samalla tulee välttää erikoisvaikutelmia, esimerkiksi erilaisia efektejä on parempi käyttää liian vähän kuin liian paljon, ja aina niitä käytettäessä on harkittava tukevatko ne sisältöä. Turhat animaatiot ja liikkuvat tekstit hidastavat sivujen latautumista ja vievät huomion pois oleellisesta (14). Sivuston tulee olla yhtä käyttökelpoinen ja yleisilmeeltään samanlainen kaikilla yleisimmillä selaimilla. Monimutkaisia ja epäloogisia tiedoston ja sivujen nimiä tulisi välttää. Otsikon tulisi antaa selkeä kuva sivun sisällöstä. Aloitussivun tulisi motivoida sivuston käyttöön ja siinä olisi hyvä olla maininta kohderyhmästä. Kaiken kaikkiaan ulkoasun tulisi olla houkutteleva.

Mikäli ohjelmalla ei ensisijaisesti pyritä harjaannuttamaan käyttäjän kielitaitoa, tulisi sivujen ja ohjeiden olla kohderyhmän äidinkielellä. Lisäksi on syytä kiinnittää huomiota tekstin luettavuuteen ja välttää vierasperäisiä sanoja. Tieteellinen teksti sisältää aina myös alan erikoissanastoa, mutta mikäli mahdollista pitäisi ainakin ohjeet olla selkeällä yleiskielellä. Jotta sivut olisivat luotettavat, tulisi sivujen tekoon käytetyn lähdeaineiston tulla selvästi esille. Käyttäjystävällisyyttä lisää palautteenantomahdollisuus sivun tekijöille.

IV.2 WWW-pohjainen opiskeluympäristö sulautettuna perinteiseen luokkahuoneopetukseen

Tietokoneiden käytön hallinta on osa nykyaikaista yleissivistystä. Koska Internet vaikuttaa voimakkaasti kaikilla tietotekniikan aloilla, on luonnollista, että se otetaan mukaan myös opetusympäristöön. Pedagogiikan haasteena onkin nyt yhdistää koulutuksen tavoitteelliset organisoidut opetusympäristöt erilaisten medioiden tarjoamiin mahdollisuuksiin. Televisio ja radio ovat saaneet jo paikkansa luokkahuoneissa, nyt on tullut tietokoneiden vuoro. Internetin hyöty tulee erityisesti esille etäopetuksessa mutta se toimii hyvin myös perinteisen luokkahuoneopetuksen apuvälineenä (33).

Mitä on WWW-pohjainen opetus ja millainen on sitä toteuttava opiskeluympäristö? Lyhyesti määriteltynä WWW-pohjainen opetus on hypermediaperusteista opetusta, jossa hyödynnetään WWW:n ominaisuuksia ja sen tarjoamia resursseja. Tarkoituksena on luoda sellainen mielekäs ja oppimista tukeva opiskeluympäristö, joka tukee yhteistyötä ja toteuttaa WWW-pohjaisia toimia osana oppimiskehystä samalla tukien sekä aloittelijoita että taitajia (58).

Niin tietokoneavusteisessa kuin perinteisessä luokkahuoneopetuksessakin on hyvä pyrkiä oppilaan aktiiviseen (*hands-on*) toimintaan, joka pitää sisällään omakohtaisen kokeilun ja kokemuksellisuuden etsimisen. Perinteisesti tähän päästään opettajan esittämällä demonstraatioilla ja tekemällä itsenäisiä kokeita. Tekemisen ja kokeilun (*hands-on*) seurauksena opiskelija on myös ajatuksellisesti ja tiedollisesti mukana prosessissa, jolloin tapahtuu aidosti tiedollisen ajattelun kehittymistä (*heads-in* viitteiden 59 ja 60 mukaan tai *minds-on* viitteiden 61 ja 62) mukaan. Tietokoneavusteisessa opetuksessa ei ole tarkoitus sulkea näitä elementtejä pois, vaan tuoda niiden rinnalla uusi mahdollisuus itsenäisen työskentelyn toteuttamiseen ja asioiden kokemiseen. Oppilaalle halutaan antaa vaihtoehtoinen tapa hahmottaa ja kokea asioita. Lisäksi tietokoneiden avulla voidaan oppilaalle esittää sellaisia mikrotason demonstraatioita, joita ei perinteisesti ole voitu havainnollistaa lainkaan. (14)

Tavanomaisessa luento-opetuksessa opiskelijan yksilöllistä ajankäyttöä on vaikea ottaa huomioon. Opettajan on huomioitava oppilaan erilainen ajantarve ja varattava nopeille muuta tekemistä, jottei luokkahuoneen ilmapiiri muuttuisi levottomaksi. On havaittu, että opiskelijan on helppo ottaa hänen oppimiseen tarvitsemansa aika tietokoneavusteisessa opetuksessa. Laskennallisen kemian tutkimustorin kohdalla voi oppilas tehtävän suoritettuaan vierailta esimerkiksi linkki- tai kirjastosivuilla. Kokemusten mukaan oppilaat ovat olleet myös erittäin kiinnostuneita tietokoneiden käyttämisestä omassa opiskelussaan (mm.3,13-15,18,43,44).

Kaiken keskellä on kuitenkin hyvä muistaa, ettei teknologia sinänsä edistä oppimista, sillä kukaan ei suoraan opi informaation välityksen välineistä, kuten tietokoneista tai kirjoista vaan ajattelemalla. Tietokoneiden merkitys tulee esille uuden tiedon konstruoinnin ja yhdistelyn sekä käsitteellistämisen työkaluna. Erilaisten uuden median tuotteiden suunnittelua määrittelee multimediaalisten teknologioiden kehittäminen ja niiden tarjoamat mahdollisuudet. Esimerkiksi "Laskennallisen kemian tutkimustorin" avulla pyritään tuomaan viimeisintä teknologiaa kemianopetukseen.

IV.3 WWW- pohjaisen opetusympäristön mahdollisuuksista

Useat tutkijat ovat kiinnostuneet hypermedian, Internetin, World Wide Web:in ja yleensäkin tietokoneavusteisen opetuksen mahdollisuuksista pedagogisessa yhteydessä (mm. 1,3,10,13-16,18,19,33,42-45,54,55) ja katsovat sen soveltuvan hyvin konstruktivistiseen oppimiskäsitykseen.

Tietokoneavusteinen opiskeluympäristö täyttää muun muassa Multisillan (64) määritelmän pedagogisesti mielekkästä oppimisympäristöstä; se tarjoaa kognitiivisia työkaluja, jotka tukevat, ohjaavat ja laajentavat oppimisprosessia sekä kommunikaatiotyökaluja, jotka mahdollistavat opiskelijan ja opettajan välisen sekä opiskelijoiden keskinäisen kommunikaation ja yhteistoiminnallisuuden.

Kozman (65) mukaan tietokoneavusteinen opetus tarjoaa oppilaalle mahdollisuuden hyödyntää muistiaan tehokkaammin tarjoamalla hänelle uutta tietoa. Lisäksi se mahdollistaa opitun kertaamisen ja avustaa tiedon hakemisessa sekä opitun tiedon

organisoinnissa ja uuden tiedon liittämässä aiemmin opittuun. Aksela on hyödyntänyt Internetiä ja WWW:tä kehittämällä interaktiivisen WWW-pohjaisen opiskeluympäristön. Tämä tutkimustoriksi nimetty mittausautomaatiota hyödyntävä opiskeluympäristö on tarkoitettu yläasteen ja lukion orgaanisen kemian opetuksen tueksi. Se koostuu tutkimus-, kirjasto-, keskustelu- ja arviointiosista. Aksela on myös tutkinut tutkimustorinsa käytön vaikutuksia oppilaisiin.(18) Alustavien tapaustutkimustulosten perusteella oppilaiden suhtautuminen oli myönteistä. He olivat hyvin innostuneita käyttämään tätä joustavaa ja monipuolista opiskeluympäristöä opiskelussaan. Oppilaat olivat erittäin aktiivisia tehdessään tutkimusosion laboratoriotöitä ja innostuneita keskustelemaan sekä kyselemään neuvoja kemian asiantuntijoilta keskustelupalstan välityksellä. Tutkimustorin käyttö myös motivoi oppilaita aiempaa paremmin kemian opiskeluun. He olivat halukkaita käyttämään sitä jatkossakin. Myös Varjola (66) on tutkinut Internetin käyttöä kemian opetuksessa ja opiskelussa ja havainnut sillä olevan positiivisia vaikutuksia nuoren asenteisiin ja oppimistuloksiin.

Oppimistilanteessa hypermedian etuna on korostettu olevan hypertekstuaalisuus ja erilaisten lähteiden assosiativista käyttöä. Esimerkiksi Lehtisen (33) mukaan tietokoneiden tulo luokkiin mahdollistaa monimutkaisten ongelmien kohtaamisen ja opiskelijoiden tukemisen tietokoneiden hallinnassa. Samalla saavutetaan ulkoisen ohjaamisen ja spontaanin tutkivan oppimisen sekä aitojen ongelmien ja abstraktin järjelyn hallittu integraatio. Toisaalta verkolle ominainen tekstuaalinen ja käsitteellinen ”informaation ja älyn maailma” ei sellaisenaan ole riittävä pohja ja itseisarvo mielekkääseen ja tulokselliseen opiskeluun.

Kuten jokaisella opetusta uudistavalla projektilla, on WWW-pohjaisella opetusympäristölläkin, vastustajansa. Chiou (67) on tutkinut tietokonepohjaista opiskeluympäristöä. Hänen varsin konservatiivisten mielipiteidensä mukaan oppimisstrategiat eivät sovi tietokoneavusteiseen opetukseen, eikä älykäs oppimiskäyttäytyminen sovi tietokonepohjaiselle opiskeluympäristölle. Hänen mukaansa informaatioteknologian tulisi olla kypsää ja vakaata, mutta koska mikään ei loppujen lopuksi ole tarpeeksi kypsää ja vakaata, on tyydyttävä epätäydelliseen informaatiotekniikkaan. Kriittisistä arvosteluistaan huolimatta hän kuitenkin yhteenvedossaan puoltaa uudenlaisia opiskeluympäristöjä todetessaan, että

informaatioyhteiskunta tarvitsee informaatioteknologis-orientoituneita opiskeluympäristöjä.

IV.4 Aktiiviseksi oppijaksi WWW-pohjaisella oppimisympäristöllä?

Laskennallisen kemian tutkimustori on avoin oppimisympäristö, jossa ovat käytössä Internetin mahdollistamat resurssit. Muun muassa linkkien ja sähköpostiyhteyksien avulla opiskeluympäristö ulottuu luokkahuoneiden ulkopuolelle WWW-maailmaan. Mitä uutta WWW-ympäristö tarjoaa oppilaalle?

Tarkastellaan ensiksi WWW-pohjaisen opiskeluympäristön mahdollisuuksia opetuksessa oppimateriaalin näkökulmasta. Perinteisiin oppimateriaaleihin ja tietolähteisiin verrattuna WWW tarjoaa moninkertaisen määrän tietolähteitä, jotka ovat lisäksi helposti tietoverkoissa oppilaan saatavilla vuorokauden ympäri. Tietoverkoista löytyvä informaatio on yleensä myös uudempaa ja ajankohtaisempaa kuin oppi- ja tietosanakirjoissa oleva tieto. On kuitenkin muistettava, ettei Internetistä löytyvän tiedon oikeellisuudesta aina ole takeita. Tämän vuoksi on toisinaan tärkeä olla hyvinkin kriittinen löytyvää tietoa kohtaan. Valtaisa tietolähteiden määrä yhdistettynä niiden helppoon saatavuuteen mahdollistaa kuitenkin lähteissä olevien tietojen aktiivisen vertailun ja arvioinnin. Tietoverkosta löytyy myös aineistoa, jota on mahdoton esittää paperimuodossa kuten esimerkiksi fysiikan ja kemian ilmiöiden simulaatioita.

Tietovarastojen hyödyntämiseen opetuksessa liittyy kuitenkin myös ongelmia ja rajoituksia. Koska WWW on kaikille avoin julkaisukanava, saattaa sieltä löytyä myös sisällöltään epäasianmukaista, epäeksaktia ja jopa täysin väärää tietoa. Jos oppilaalla ei ole tutkittavasta asiasta minkäänlaisia taustatietoja, hänen on vaikea olla kriittinen ja tunnistaa virheellinen tieto. Jotta välttyttäisiin tämänlaisilta ongelmilta, on oppilaalle hyvä antaa jonkin verran taustatietoa tutkittavasta asiasta. Lähteenä voi olla oppikirja, opettajan antama WWW-osoite jonka sisällön oikeellisuus on tarkastettu tai vaikkapa Laskennallisen kemian tutkimustori. Opettaja voi myös helpottaa tiedonhakuja antamalla oppilaalle asiaan liittyviä hakusanoja. Yleensä jo pelkästään se, että oppilas tiedostaa tämän WWW:n käyttöön liittyvän vajavuuden, helpottaa hänen työskentelyään. Oppilasta on myös muistutettava, ettei WWW:stä

välttämättä löydy käyttökelpoista tietoa jokaisesta aiheesta ja tällöin kirjastossa käynti on parempi vaihtoehto. Joskus projekti- tai tutkimustyön alussa ensimmäisillä mieleen tulevilla hakusanoilla tehty tiedonhaku voi tuottaa jopa tuhansittain aihepiiriin liittyviä lähteitä. Tällainen tietomäärän tulva voi synnyttää oppilaalle voimattomuuden tunteen ja hänellä saattaa olla suuria vaikeuksia karsia oleellinen tieto epäoleellisen joukosta. Myös tällöin on opettajan tuki paikallaan.(68)

WWW-maailman tarjoamaa helppoa, ilmaista ja nopeaa julkaisumahdollisuutta voidaan hyödyntää tiedon haun lisäksi myös ryhmätöiden ja projektien julkaisemisessa. Oppilaat saattavat motivoitua aivan uudella tavalla, kun heidän omat tuotoksensa laitetaan periaatteessa kenen tahansa Internetin käyttäjän nähtäväksi. Lehtisen (33) mukaan yhteyden muodostuminen ulkopuolisen maailman kanssa voi olla erittäin merkityksellistä oppilaille ja heidän suorittamista selvityksistä tulee paljon autenttisempia, mielekkäämpiä ja vaikutukseltaan merkityksellisempiä kun aineisto laitetaan Internetiin.

Opettajan on hyvä huomioida, että jos oppilaiden koneet ovat yhteydessä koulun ulkopuoliseen verkkoon voivat oppilaat käyttää oppimiseen varatun ajan jopa vahingolliseen toimintaan. (14, s.146) Jos tämänlaisia ongelmia esiintyy, on tarpeen suunnitella Internetin käyttö huolellisesti etukäteen. Kun Internetiä ei tarvita, on opettajan parempi estää sinne pääsy kokonaan kytkemällä koneet ainoastaan koulun sisäiseen verkkoon.

Kaikenlaisen tietokonetta hyödyntävän opetuksen kohdalla on muistettava, ettei kaikkien oppilaiden tietotekniikan tuntemus ole samanlainen eikä välttämättä kovin hyvä. On myös mahdollista, ettei oppilas ole aikaisemmin työskennellyt juurikaan tietokoneen kanssa tai käyttänyt Internetiä. Tällöin opettaja joutuu opettamaan alkeet myös tietokoneen käyttämisestä ja käyttämään opetusaikaansa tavallaan oppiaineeseen kuulumattomaan asiaan. Vaikka tämä saattaakin tuntua opettajasta ajan väärinkäyttämiseltä, se ei sitä kuitenkaan ole. Se, että oppilaille opetetaan tietokoneen käyttöä juuri kyseisen oppiaineen piirissä, antaa heille hyödyllistä tietotaitoa sekä lisää heidän aktiivisuuttaan oppimisprosessissa, vaikka näitä asioita ei ainakaan vielä mitata ylioppilaskirjoituksissa.(43, s.20)

IV.5 Rajoituksia tietokoneavusteisen opetuksen ja molekyylihallituksen käytölle lukiossa

Edellä on käyty läpi mitä kaikkea tietokoneavusteinen opetus tarjoaa oppilaille ja esitelty sitä puoltavia tutkimustuloksia. Jos tietokoneiden käytön puolesta opetuksessa puhuu näin monta seikkaa, niin miksi sitä ei sitten käytetä enemmän opetuksessa?

Opettajien mukaan suurimmaksi esteeksi tietokoneiden käytölle lukiossa ovat muodostuneet tietokoneiden ja tilojen puute sekä liian suuret opetusryhmät. Tietokoneiden käyttäminen vaatii opettajien mukaan aikaa ja kaksoistunteja.(34,42,43,45) Jos tietokoneita ei löydy tavallisista luokista ja tietokoneen hyödyntämiseksi on siirryttävä ATK-luokkaan, on ymmärrettävää, että jo pelkkä järjestelyjen teko voi olla hyvin hankalaa. Tietokoneavusteinen opetus tuo aluksi opettajalle paljon lisätöitä; on suunniteltava tarkkaan etukäteen mitä tehdään ja miten työskentely organisoidaan sekä on varauduttava mahdollisiin laitehäiriöihin. Pidemmällä aikavälillä modernia tieto- ja viestintätekniikkaa hyödyntävien oppituntien valmisteluun ja toteuttamiseen ei kuitenkaan kulu sen enempää aikaa kuin perinteisten tuntien valmisteluun ja toteutukseen. Opettajan työnkuva voi jopa helpottua, kun oppilaat pääsevän itse hankkimaan informaatiota, jonka opettaja on heille aikaisemmin välittänyt. Tällaisella toiminnalla on todettu myös olevan useita oppijan itsenäistä työskentelyä ja luovaa ongelmanratkaisutaitoa tukevia piirteitä. Opettajan tehtävänä voidaankin nähdä itsenäisten piirteiden tukeminen samalla, kun hän ohjaa oppilaiden kehittyvää informaation käsittelytaitoa. Parhaimmillaan opettajasta voi kehittyä oppimistilanteen ohjaaja, kanssaoppija, neuvoja ja konsultti (68).

Useilla opettajilla tuntuu olevan myös käsitys, että tietokoneavusteinen opetus voi olla tehokasta vain silloin, kun jokaisella oppilaalla on oma kone (34,42,43,45). Kahden hengen ryhmissä työskentelyn puolesta puhuu kuitenkin monta seikkaa. Parilla on mahdollisuus keskustella ohjelman sisältämisistä asioista ja kysymyksistä. Kahdestaan monet ongelmat on helpompi ratkaista. Neljän hengen ryhmä saattaa kuitenkin olla hieman liian iso jo siksi, että heidän on hankala sijoittua näytön eteen niin että jokaisella on samanlainen mahdollisuus nähdä (44, s.39). Jos kaikkien

työllistäminen on mietitty huolellisesti etukäteen ja sovittu milloin ja miten roolit vaihdetaan ryhmässä, voi myös kolmen hengen ryhmissä työskentely olla tehokasta.(69) Työskentelyn ollessa meneillään on opettajan ainakin aluksi ”hypättävä sinne ja tänne”, osattava antaa neuvoja myös teknisissä kysymyksissä ja pidettävä oppilaat asiassa. Palkinnoksi tästä opettaja saa tunteen, että jotakin on tapahtunut, että hän on voinut antaa neuvoja enemmän kuin normaalitunnilla ja oppia tuntemaan oppilaansa entistä paremmin (44, s.29).

Kuten kaikki koulu-uudistukset, myös tietokoneen aktiivinen hyödyntäminen opetuksessa on joutunut kohtaamaan vastustusta opettajien asenteiden vuoksi. Etenkin vanhempien opettajien keskuudessa puheet tietokoneavusteisesta opetuksesta ovat saaneet osakseen kritiikkiä ja herättäneet epävarmuutta ja pelkoa. Tämä on ymmärrettävää, sillä heillä ei välttämättä itsellään ole lainkaan kokemuksia tietokoneen käytöstä. On paljon helpompaa hyväksyä aikaisemmin kehitetty ja verraten turvalliseksi koettu tekniikka kuin ottaa harppaus kohti uutta ja tietämätöntä. Kun tietokoneen käytön opiskelu on aloitettava alkeista, vie se väistämättä paljon aikaa. Monet opettajat ovatkin nähneet tietokoneen käytön opettelun, niin oppilaiden kuin opettajienkin osalta, vievän ajan suurimmaksi esteeksi tietokoneavusteiselle opetukselle. Siksi olisikin välttämätöntä järjestää opettajilla täydennyskoulutusta. Jatkuvasti kehittyvässä teknologisessa yhteiskunnassa tietokoneiden koulukäytön hyväksyminen on välttämätöntä, mutta on toki muistettava ettei tietokoneiden kouluun tuominen saa aikaan, eikä niin ole tarkoitettukaan, automaattista kehitysprosessia (24,44, s.31).

V Molekyylimallitus osana tietokoneavusteista opetusta

Keskeisenä alueena tutkimustorin tehtävissä on mallien avulla työskentely. Tehtävissä malleilla tarkastellaan etanolimolekyylin rakennetta, värähdysominaisuuksia ja pyritään selvittämään makroskooppista kemiallista ilmiötä, jossa etanolia liuotetaan veteen. Tehtävien syvällisen ymmärtämisen kannalta on tärkeää ymmärtää malli käsitteenä ja sen merkitys kemiassa ja kemian opetuksessa.

Vaikka seuraavassa keskitytään lähinnä konkreettisiin malleihin, on hyvä muistaa, että mielen mallit luovat perustan oppimiselle. Opiskelijalla on omiin havaintoihinsa perustuva ennakkokäsitys kemiallisista ilmiöistä. Tämä malli voi olla joko oppimista edistävä tai niin virheellinen, että se joko estää tai hidastaa oppimisprosessia. Oppilaan käsitykset voidaan jakaa arki- ja tieteellisiin käsityksiin joista jälkimmäiset syntyvät kouluopetuksessa ja luovat yhtenäisen ajatusrakennelman. Arkikäsitykset voivat sen sijaan olla hyvinkin hajanaisia ja päällekkäisiä, jopa ristiriitaisia. Oppilaan on hyvä havaita käsitteiden välillä vallitseva hierarkia ja tätä harjoitellaan usein erilaisten käsittekarttojen avulla. Kemiassa käytetään usein tieteellisiä mielenmalleja, ajatusta siitä, miten prosessi etenee, mitä tapahtuu ja miksi ja mitä näistä tapahtumista seuraa. Mielenmalli mahdollistaa huolellisen suunnittelun ja projektiin valmistautumisen.

V.1 Ajatuksista animaatioihin - Mallien historiaa

Erilaisista malleista saa hyvän käsityksen luomalla katsaus mallien synnyn historiaan. Tiede on kautta aikojen pyrkinyt kuvaamaan luontoa ja siinä tapahtuvia ilmiöitä erilaisten mallien avulla. Malli luo yhteyden, ikään kuin sillan, puhtaan teorian ja kokeellisen toiminnan välille. Malleja käytettäessä ja tulkittaessa on hyvä muistaa, että niillä on pitkä filosofiaan pohjautuva historia ja että malleihin pohjautuva opetus on samalla filosofisen ajattelun opetusta oppilaille.

Antiikin atomioppi

Antiikin atomiopeilla on hämmästyttäviä yhtäläisyyksiä nykyisten atomikäsitysten kanssa. Näiden kahden vertailuun on kuitenkin suhtauduttava tietyllä varauksella. Vaikka atomiteorioissa on ideologisia elementtejä, ei antiikin atomikäsitettä pidä

yliarvioida. Antiikin atomiteoria ei ollut varsinainen tieteellinen saavutus vaan ainoastaan pelkkä ideologia, joka heijastaa aikakautensa yhteiskunnallisia rakenteita. Nykyinen atomikäsitys puolestaan on todellisen tieteellisen tutkimuksen tulosta.

Filosofi ja amiraali Melissos Samoslaisen mielessä heräsi ensimmäisenä ajatus atomien olemassa olost. Hänen tiedetään pohtineen: ”Mutta, jos on monta, kullakin on oltava yhden luonne.” (70, s.25). Kreikkalainen filosofi Demokritos (460-370 eKr.) jatkoi Melissoksen ajatusta esittämällä, että maailma koostuu lukemattomista, pysyvistä, moninaisista ja samankaltaisista yksittäisistä ja kooltaan äärettömän pienistä atomeista. Demokritos kuvaili teoriansa olennaisen osan sanoen:” Sopimuksen mukaan on makea, sopimuksen mukaan on katkera, sopimuksen mukaan kuuma ja kylmä, sopimuksen mukaan värit, mutta todellisuudessa on vain atomeja ja tyhjyys” (70, s.26). Lauseesta käy hyvin ilmi, mikä on todellista ja mikä tulkinnanvaraista. Näin puhdas päättely ja mielen muodostamat mallit toivat esiin aineen luonnetta koskevan perustotuuden.

Antiikin kreikassa platonilais-pythagoralaiseen ajatusmallin mukaan ”tosiolevan” todellinen luonne paljastuu vasta matemaattisen mallin kautta. Mallien historian voidaankin katsoa alkaneen Platonin (427-347 eKr.) luomasta olemassaolon mallista. Hän liitti pythagoralaisten keksimästä viidestä monitahokkaasta neljä Empedokleen neljään alkuaineeseen. Nämä neljä elementtiä, joiden alle kaikki elollinen ja eloton voitiin sijoittaa, olivat tuli, ilma, vesi ja maa. Hänen mukaansa tuli vastasi tetraedriä, joka oli terävä ja piikikäs, ilma oktaedria, vesi ikosaedria, joka on miltei pyöreä ja liukas, sekä maa kuutiota. Kahdentoista tahkon dodekaedrin Platon liitti eläinradan kahteentoista merkkiin. Platonin olemassaolon malli on esitetty viiteessä 71, s.25.

Demokritoksen atomiteoria ei koskaan saanut suurta kannattajajoukkoa. Lopulta Aristoteles, yksi aikamme suurimmista filosofeista, hylkäsi sen kokonaan. Hän tuomitsi atomiteorian epäuskottavana koska hänen mukaansa atomit ovat liian kaukana aistein havaitun maailman todellisuudesta. Atomismi ei kuitenkaan kuollut kokonaan vaikkakin joutui kokemaan kovia seuraavan vuosituhannen aikana, toisinaan se kytkettiin jopa ateismiin.

Kemiallisen atomiteorian kehitys alkaa

Mallien kehitys nytkähti uudelleen liikkeelle, kun platonismi nosti jälleen päätään renessanssin aikaan. Galileo Galilei (1564-1642) oli mukana luomassa nykyaikaista eksaktia tiedettä, jossa kokeellisuus ja teoria pyrkivät kulkemaan käsi kädessä. Galilei asetti kysymykset uudelleen niin, että niihin voitiin löytää vastaukset mittaamalla. Hänen ajatuksensa olivat erittäin moderneja ja sopusoinnussa nykyisin vallitsevan tieteellisen realismin kanssa, jonka mukaan objektiivista tietoa on mahdollista saada kehittämällä todellista objektia esittäviä malleja. (72)

Kemian kehitys jatkoi taukoamatta kulkuaan. Mallien kehityksen kannalta ei kuitenkaan tapahtunut mitään merkittävää ennen vuotta 1808, jolloin englantilainen John Dalton (1766-1844) julkaisi ensimmäisen kemiallisen atomiteoriaansa kuvauksen kirjassaan, ”A New System of Chemical Philosophy”. Teoksessaan hän kertoi yhdisteiden muodostuvan atomien yhdistelmästä ja alkuaineiden yksinkertaisista, erilaisista ja eri painoisista atomeista, jotka olivat jakautumattomia ja muuttumattomia.

Mallintamisen kehityksen kannalta merkittävintä oli Daltonin teoriansa tueksi esittämä symboliikka. Varhaiset kemistit ja alkemistit olivat käyttäneet symboleita nopeuttaakseen kirjoittamista, ilman sen syvempää merkitystä. Heidän symbolinsa pohjautuivatkin lähinnä myyttisiin uskomuksiin; mm. metalleja kuvattiin planeettojen symboleilla. Daltonin käyttöön ottamat merkit olivat ympyröitä, joiden sisällä oli selvästi erottuva hahmo tai kirjain. Kukin ympyrä vastasi tiettyä alkuainetta. Yhdisteet hän kuvasi toisiaan koskevilla ympyröillä. Daltonin symboleilla oli ensimmäisenä sekä kvantitatiivinen että kvalitatiivinen merkitys. Daltonin atomisymbolit on esitetty viitteessä 71, s.131.

Kolme vuotta myöhemmin, vuonna 1811, Dalton toi julkisuuteen oman atomimallinsa ja havainnollisti teoriaansa yksinkertaisilla kaksiatomisilla molekyylimalleilla. Kyseessä oli ensimmäinen kemistien atomikäsitys sillä tähän saakka atomit olivat olleet fyysikaalinen ilmiö. Atomeja pidettiin kuitenkin pitkään vain käyttökelpoisena faktana ja niihin suhtauduttiin kuin nykyisin pörssissä vaihdettuihin osakkeisiin. Ne olivat pikemminkin hyödyllisiä abstraktioita kuin todellisia esineitä.

Ranskalainen Louis Pasteur (1822-1895) oli mallien kehityksen kannalta merkittävä henkilö, vaikka hänet tunnetaan paremmin yhtenä optisen aktiivisuuden tutkimuksen tärkeimpänä hahmona. Hän kiinnostui optisen aktiivisuuden ja molekyylien rakenteen välisestä yhteydestä jo opiskeluaikoinaan tutkittuaan Eilhard Mitscherlichin vuonna 1844 julkaisemaa isomeeristen viini- ja parafiinihappojen suoloja käsittelevää artikkelia. Mitscherlich väitti happojen ainoana erona olevan sen, että viinihapon suolat ovat optisesti aktiivisia mutta parafiinihappojen eivät. Pasteur oli kuitenkin vakuuttunut, että suolojen välillä oli oltava molekyyllitason eroja. Huolellisen tutkimuksen tuloksena, vuonna 1848, hän havaitsi isomeeristen molekyylien peilisyymmetrisyyden. Kiteet voitiin jakaa kahteen tyyppiin, ne olivat toistensa peilikuvia. Liuoksissa nämä molemmat kiersivät valon polarisaatiotasoa yhtä paljon mutta vastakkaisiin suuntiin. Vaikka Pasteur ei pystynytkään tuohon aikaan, sopivien mallien puuttumisen vuoksi, täydellisesti selittämään keksintöään, häntä voidaan silti pitää merkittävänä mallien kehityksen edesauttajana.

Molekyylikaavoista rakennekaavoihin

1800-luvun jälkipuoliskolla useiden orgaanisten aineiden molekyylikaavat olivat jo selvillä. Oli aika ryhtyä pohtimaan yhdisteiden rakennekaavoja. Saksalainen kemisti Friedrich August Kekule von Stradonitz (1829-1896) loi perustan orgaanisten yhdisteiden rakenteiden selvittämiseksi. Kekule kirjoitti vuonna 1858 artikkelin, ”Kemiallisen yhdistyksen muodostuminen ja muutokset sekä hiilen kemiallisesta luonteesta”, jossa hän esitti hiiliatomiin sitoutuneiden alkuaineiden kemiallisten yhteyksien summan olevan neljä. Tämä johti ajatukseen hiiliatomin neliarvoisuudesta eli neliperustaisuudesta. Artikkelista puuttuivat graafiset esitykset mutta se pureutui tuon ajan suurimpaan ongelmaan: montako sidosta kukin alkuaine muodostaa.

Samaan aikaan Kekulen kanssa skotlantilainen Archibald Scott Couper (1831-1892) esitti neliarvoista hiiltä koskevan teorian. Joissakin suhteissa Couperin ajatukset olivat jopa kattavampia kuin Kekulen, sillä hänen mielestään hiilen valenssi vaihteli (esimerkiksi hiilimonoksidissa ja hiilidioksidissa). Hän kuvasi myös ennen Kekulea hiiliyhdisteitä graafisilla kaavoilla. Couperin graafisia molekyylikaavoja on esitetty viitteessä 71, s.184.

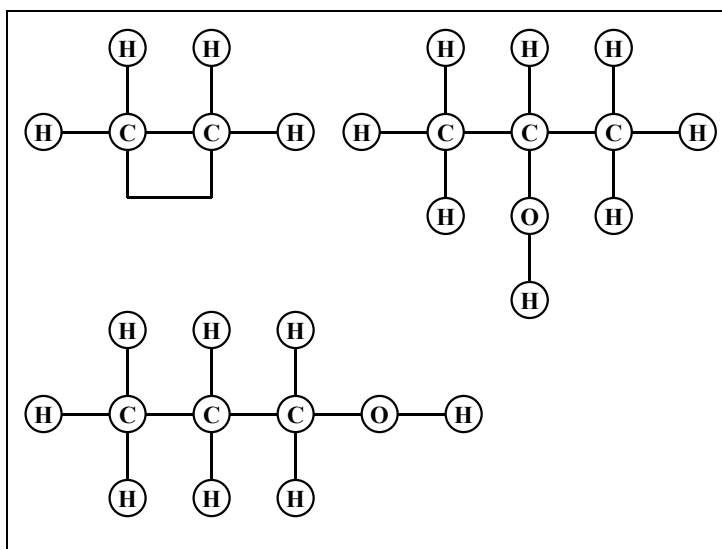
Couperin graafiset kaavat vaipuivat täydelliseen unohdukseen, kun hänen esimiehensä Wurtz erotti hänet laboratoriostaan. Couper oli jättänyt teoriaansa koskevan artikkelinsa Wurtzille julkaistavaksi mutta tämä viivytteli julkaisun kanssa niin pitkään, että Kekule oli jo ehtinyt esittää saman teorian. Couperin valitus asiasta koettiin öykkäröinniksi ja hänen uransa kemian tutkimuksen parissa päättyi lyhyeen. Kunnian työstään Couper sai vasta kuolemansa jälkeen, kun saksalainen kemisti Richard Anschüts löysi ne uudelleen.

Kekule otti graafiset esityksensä järjestelmäänsä vasta vuonna 1861. Hän kuvasi yksiarvoisia atomeja yksinkertaisilla ympyröillä ja moniarvoisia toisiaan peittäville ympyröillä. Kaavojen ulkomuodon vuoksi niitä kutsutaan usein ”makkarakaavoiksi”. Kekulen makkarakaavoja on esitetty viitteessä 71, s.185.

Vuonna 1865 Kekule osoitti, että on olemassa ketjun ja renkaan muotoisia yhdisteitä. Näiden rakenne ei kuitenkaan selvinnyt pelkällä tieteellisellä ajattelulla. Kekulella oli erikoinen kyky nähdä näkyjä ja usein hän työskentelikin ”meditoimalla”, vaipumalla unenomaiseen tilaan. Hän kertoi hiiliatomien kyvyn sitoutua toisiinsa selvinneen hänelle ensi kertaa unessa. Ajatus, jonka mukaan molekyylin ominaisuudet johtuvat yksinomaan sen sisältämistä atomeista ja niiden keskinäisestä järjestyksestä, ei käy selvästi ilmi Couperin ja Kekulen kirjoituksista. Ei kuitenkaan voida olla varmoja siitä, etteivätkö nämä oletukset olisi sisältyneet jo heidän ajatuksiinsa. Venäläistä Aleksander Mihailovitsh Butlerovia (1828-1866) pidetään kuitenkin ensimmäisenä näitä ajatuksia käsittelevänä henkilönä. Hän esitti ensimmäisenä rakenneteorian selkeästi ja kuvasi sen johdonmukaisesti. Vuonna 1861 ilmestyneessä artikkelissaan hän sanoi: ”Kullakin yhdisteellä voi olla vain yksi järkevä kaava ja kun kemialliseen rakenteeseen perustuvat ominaisuudet määrittävät lait on selvitetty, tämä kaava kuvaa kaikki molekyylin ominaisuudet.” (71, s. 209)

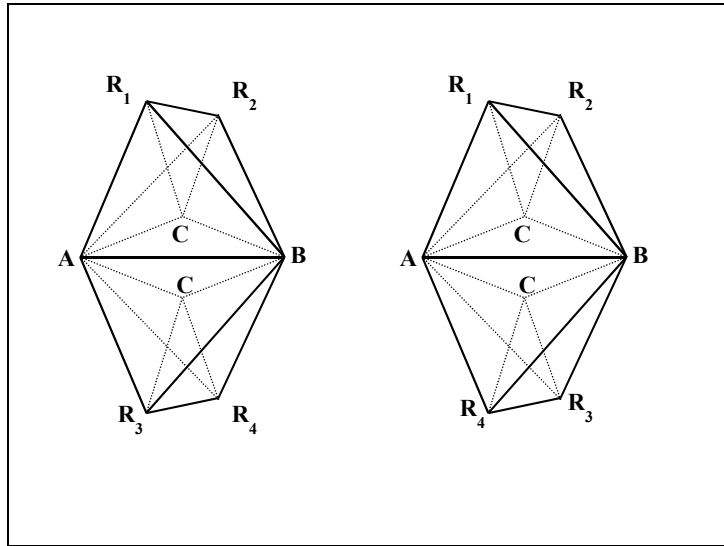
Usko molekyyliarakenteiden yksityiskohtien selvittämisen mahdollisuuteen ja tärkeyteen kasvoi ja rakenteiden graafisia kuvauksia ryhdyttiin julkaisemaan enemmän. Alexander Crum Brown käytti Couperin ajatuksia laajentavia kaavoja, joissa näkyivät molekyylien atomit toisiinsa liittävät sidokset (ks. KUVA 1)(71, s.

210). Brownin kaavat kuvasivat ainoastaan kemiallisia ”asemia” ja molekyylien atomit oli esitetty samassa tasossa.



KUVA 1. Crum Brownin rakennekaavoja. (71, s. 210) Rakennekaavoissa näkyvät myös sidokset.

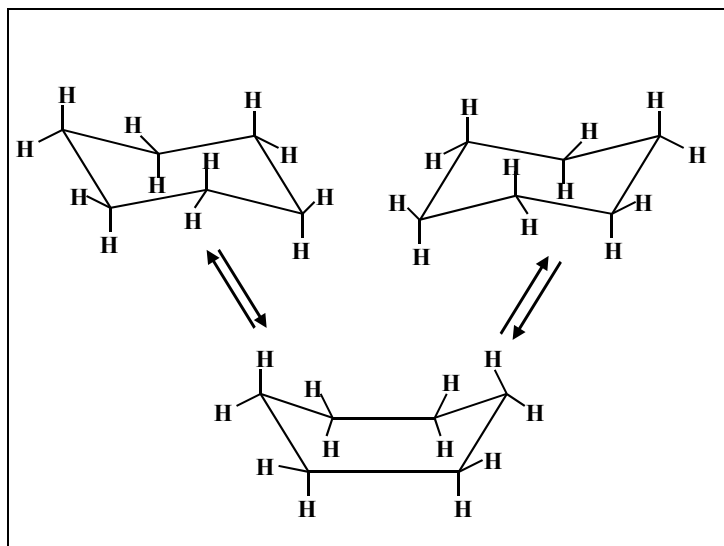
Jacobus Henricus van't Hoff (1852-1911) julkaisi vuonna 1874 hiilen tetraedrarakennetta sekä optista ja geometrista isomeriaa koskevat teoriansa. Julkaisemassaan artikkelissa hän kuvasi mm. viinihapon optisia isomeerejä, mistä oli tullut Pasteurin merkittävien havaintojen jälkeen laajalle levinnyt tutkimuskohde. Van't Hoff käytti mallia, jossa hiiliatomilla on neljän eri atomin tai ryhmän kanssa tetraedrin kärkiä kohti suuntautuneet sidokset. Yksinkertaisen sidoksen muodostavan hiilen sidoskulma oli siis 109°. Hän laajensi esityksensä myös molekyyliin, joissa oli hiiliatomien välinen kaksoissidos (ks. KUVA 2)(71, s. 225).



KUVA 2. Van't Hoffin malli hiilen tetraedrisestä rakenteesta. (71, s. 225)

van't Hoff kuvasi molekyylit, joissa oli hiiliatomien välinen kaksoissidos, kahdeksi tetraedriksi, joilla oli yhteinen särmä.

Ulrich Sachse esitti vuonna 1890, että kuuden tai sitä useamman atomin muodostaman renkaan jännitys häviää, mikäli renkaan rakenne poikkeaa tasomaisesta. Hän havaitsi molekyylimallien avulla, että sykloheksaanilla oli kaksi tällaista rakennetta. Näitä ryhdyttiin muotojensa mukaan kutsumaan vene- ja tuolimuodoiksi (ks. KUVA 3) (71, s.228).



KUVA 3. Malli sykloheksaanin rakenteesta. (71, s.228)

Sykloheksaanilla on kaksi mahdollista rakennetta; tuoli- ja venerakenne.

Atomikäsité vakiintuu

Vasta vuoden 1900 tienoilla atomi, joka oli keksitty 2300 vuotta aikaisemmin, jätti viimein hypoteesin aseman taakseen. Se hyväksyttiin faktana ja käsite ”atomi” vakiintui. Tämä merkitsi luopumista Daltonin atomiteorian atomien jakamattomuudesta ja muuttumattomuudesta. Ensimmäistä kertaa pystyttiin selittämään millaiset voimat aiheuttavat kemiallisen sidoksen.

Vuosisatojen ajan atomeja oli pidetty aineen perusosina. Ratkaiseva käänne tapahtui vuonna 1897, kun englantilainen Josef John Thomson (1856-1940) julkaisi hiukkasteoriaa testaavat koetulokset. Hän kertoi löytäneensä jotain, mikä oli 2000 kertaa kevyempää kuin siihen asti kevyimpänä pidetty vety. Hän oli tunnistanut katodisäteiden hiukkaset elektroneiksi ja samalla aloittanut atomien hajottamisen osiin. Vuonna 1904 hän esitti havaintojaan vastaavan atomin rakenteen mallin. J. J. Thomson oletti atomin olevan positiivisesta varauksesta muodostunut pallo, jonka sisällä oli renkaita pitkin kulkevia elektroneja. Hänen atomimalliaan kutsutaan toisinaan osuvasti rusinakakkumalliksi, sillä Thomsonin atomin elektronit ovat sananmukaisesti kuin rusinat kakussa. Thomson yritti ensimmäisenä tutkijana selittää kemiallisen sidoksen atomin elektronirakenteen käsittein. Hän esitti, että yhdisteen syntyessä elektroneja siirtyi atomista toiseen. Thomsonin ajatus soveltui vain voimakkaasti polaarisiin yhdisteisiin, ja niiden soveltaminen vähemmän polaarisiin yhdisteisiin johti vakaviin vaikeuksiin.

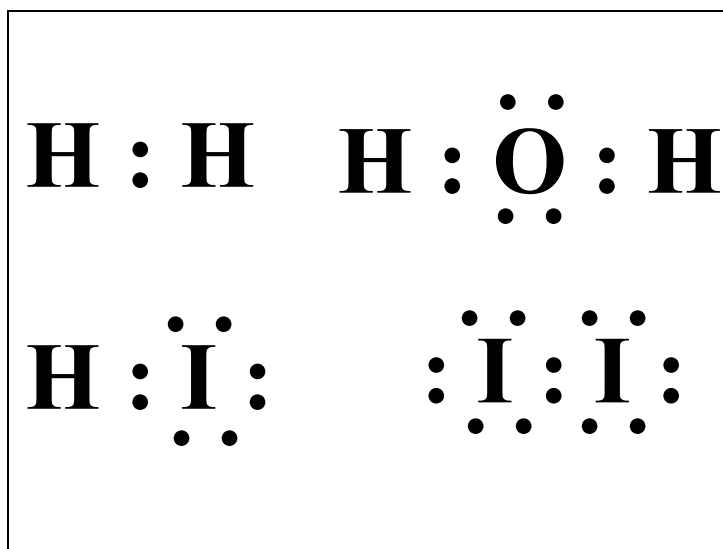
Atomin hajottaminen pienempiin osiin jatkui ja vuonna 1911 Ernest Rutherford (1871-1937) esitti, että atomin keskellä oli pieni positiivisesti varautunut alue, jota kiertävät kaukana negatiivisesti varautuneet elektronit. Elektronit tasapainottavat ytimen, joksi hän nimitti positiivisesti varautunutta aluetta, varauksen. Hän osoitti myös, että suurin osa atomin massasta oli sen ytimessä. Rutherfordin teoriolla oli kuitenkin vakava puute. Klassisen teorian mukaan ydintä kiertävien elektronien pitäisi tällaisessa liikkeessä menettää energiaa ja pudota pitkin spiraalirataa kohti ydintä. Tanskalainen Niels Henrik David Bohr (1885-1962) esitti ongelmaan ratkaisun vuonna 1913 (73). Hän onnistui rakentamaan ensimmäinen toimivan atomimallin, joka sopi yhteen sekä klassisen mekaniikan vaateiden että Planckin lain kanssa. Ratkaisu perustui kvanttiteorian käsitteiden soveltamiseen ydintä kiertäviin elektroneihin. Bohr ehdotti, että elektronit kiertävät ydintä tiettyä, energiatasoaan

vastaavaa, rataa pitkin. Ytimen lähellä oleville radoille hän oletti mahtuvan vähemmän elektroneja kuin siitä kaukana oleville. Atomin elektroniverhon hän katsoi olevan vakaa ja säteilemätön. Teorian mukaan elektroni voi siirtyä korkeammalla tai alemmalla tasolla olevaan avoimeen tilaan, jolloin se absorboi tai emittoi siirtymistä vastaavan määrän energiaa sähkömagneettisina säteilykvantteina. Bohr paranteli malliaan vielä kolmeen otteeseen. Hän havaitsi, että useita elektroneja sisältävää atomia on hankala kuvata hänen kolmiulotteisella mallillaan ja yksinkertaisti sen kaksiulotteiseksi. Esimerkit Bohrin kaksi- ja kolmiulotteisesta mallista hiiliatomille on esitetty viitteessä 74.

Vaikka Bohrin planetaarista mallia ei aikoihin ole pidetty oikeana, sen alkuaikoina menestys oli niin vaikuttava, että siitä tuli atomin vahvin kansanomaisen symboli. Suosiota kuvaa hyvin se, että Bohrin atomimalli on edelleen käytössä sekä peruskoulun että lukion oppikirjoissa.

Bohrin mallikaan ei pystynyt selvittämään kemiallisen sidoksen luonnetta. Ratkaisu löytyi vuonna 1916 jolloin yhdysvaltalainen Gilbert Newton Lewis (1875-1946) julkaisi tärkeän artikkelin otsikolla: ”The Atom and the Molecule”. Artikkelissaan Lewis kuvasi elektronit asettuneiksi samankeskisten kuutioiden kärkiin. Lewisin kuvauksia kemiallisesta sidoksesta on esitetty viitteessä 71, s. 272.

Hän kuvitteli, että atomien välinen sidos perustui, kuution kulmien lukumäärän mukaan, kahdeksan elektronin rakenteeseen johtavaan elektronien siirtymiseen. Lewis esitti, että vähemmän polaarisisä yhdisteissä atomit jakavat elektronit pareittain siten, että kaksi kuutiota jakaa särmän tai tahkon. Molekyylimallituksen kannalta merkittävää oli Lewisin käyttöön ottama pistesymboliikka, jolla kuvataan uloimpien kuorten elektroneja. (ks. KUVA 4) (71, s.272)



KUVA 4. Lewisin malleja. (71, s.272) Lewisin pistesymboliikka on säilyttänyt merkityksensä nykypäiviin saakka

Lewisin mallin käytöllä on kuitenkin omat rajoituksensa, sillä oktettisääntö ei ole aina voimassa. Mallia onkin kehitelty paljon eteenpäin ja nykyisin on olemassa paljon tarkempia kuvauksia atomeista ja molekyyleistä. Uudet laskennalliseen kemiaan perustuvat kemiallisen sidoksen mallit soveltavat molekyylien elektronijakauman topologista analyysiä kuvatessaan atomien välistä sidosta. Koska lukion kemiassa ei käytetä Lewisin malleja monimutkaisempia esityksiä, niitä ei ole myöskään syytä käsitellä tarkemmin tässä.

Graafisista molekyylimalleista muovi- ja tietokonemalleihin

Molekyylimalleja oli 1800-luvun jälkipuoliskolle asti havainnollistettu lähes yksinomaan graafisten esitysten avulla. Ensimmäisten konkreettisten mallien ns. pallo-tikkumallien ”esi-isinä” voidaan pitää August Wilhelm von Hoffmannin (1818-1892) vuonna 1865 esittämiä krokettipallomalleja. Mallit perustuivat Crum Brownin kaavoihin ja ne oli rakennettu atomeja symboloivista krokettipalloista ja sidoksia kuvaavista tangoista. Von Hoffmann käytti krokettipallomallejaan mm. kuninkaallisessa instituutissa (Royal Institution) pitämänsä luennon havaintovälineenä. Hoffmannin krokettipallomalleja on esitetty viitteessä 71, s. 211.

Pallotikkumallien erinomaista havainnollisuutta alettiin arvostaa, ja 1900-1920 lukujen aikana niiden käyttö alkoi levitä yhä laajemmalle. Vuonna 1934 Stuart esitti

kalottimallit (space-filling models) jotka perustuivat atomien van der Waals -säteisiin molekyyleissä. Vuonna 1947 K. S. Pitzer laski butaanin hiili-hiili-sidoksen sidosenergian ja myöhemmin, yhdessä Hazelin kanssa, demonstroi sykloheksaanin aksiaalisen ja ekvatoriaalisen tuolimudon. Kalottimalleja käsiteltiin välttämättöminä orgaanisen kemian työkaluina seuraavat 30 vuotta ja ne tekivät mahdolliseksi rakenteen konformaation, stereokemian, reaktiivisuuden ja fysikaalisten ominaisuuksien ennustamisen. Merkittävimpänä näistä voidaan pitää nobelistien, James D. Watsonin (1928-) ja Francis Crickin (1916-) vuonna 1953 esittämää DNA-molekyylin kaksoiskierteisen rakenteen mallia. Tämä kolmiulotteinen malli oli rakennettu käytössä olevan kemiallisen aineiston perusteella ja se oli sopusoinnussa röntgendiffraktiokuvien kanssa. Watsonin ja Crickin DNA-malli on esitetty viitteessä 71, s. 336.

Tietokonemolekyylimallien keksiminen 1960-luvun lopulla vähensi perinteisten mallien suosiota. Molekyyliden rakenteiden havainnollistamisen lisäksi tietokoneavusteinen mallinnus mahdollisti myös kvanttimekaniikkaan perustuvan energian minimoimisen. Walter Kohn ja John Pople ovat kehittäneet tietokoneavusteisia laskennallisia menetelmiä molekyyliden ominaisuuksien ja niiden vuorovaikutusten tutkimiseen. Heille myönnettiin kemian Nobel-palkinto vuonna 1998.(75)

V.2 Tietokoneavusteisen molekyylimallituksen etuja muihin malleihin verrattuna

Koulussa opettavan kemian suurimpia puutteita on ollut, etteivät opiskelijat ole päässeet niin sanotusti ”sisään kemian maailmaan”. Tällöin tieto ja käsitteet ovat jääneet yleensä suppeiksi ja irrallisiksi, jolloin todellinen kemian ymmärtäminen on jäänyt heikoksi ja puutteelliseksi (13,17). Mallityypin valinnalla on vaikutusta oppilaiden mielen malleihin eli siihen mielikuvaan, jonka oppilaat luovat käsitellessään esimerkiksi molekyyliden rakentumista ja siihen kuinka he toimivat ”todellisessa” maailmassa tieteellisestä näkökulmasta katsottuna (15).

Yksiulotteinen molekyyliden ja reaktioiden havainnollistaminen esimerkiksi paperille piirtämällä on opetuksessa vanhin ja eniten käytetty tapa mallintaa kemiallisia

ilmiöitä, mekanismeja ja rakenteita (71). Konkreettisten, kolmiulotteisten molekyyli mallien, kuten muovisten pallotikkumallien, käyttö opetuksessa kemiallisten ilmiöiden havainnollistamiseksi on yksiulotteisiin esitystapoihin verrattuna uutta ja yleistymässä kemian opetuksessa. Tietokoneavusteinen molekyyli mallitus puolestaan on suhteellisen uusi ja lähitulevaisuudessa kehittynein tapa kemiallisten reaktioiden mallintamiseen (13). Mikä tekee tietokonemalleista niin ylivoimaisia muihin malleihin verrattuna? Tämän kysymyksen selvittämiseksi ”puolueettomasti” on ehkä järkevintä vertailla erilaisia malleja ja niiden ominaisuuksia toisiinsa.

Kohdassa I.2 määriteltiin hyvän mallin ominaisuuksia ja todettiin hyvän mallin olevan sellainen todellisuuden simulaatio, joka korostaa kohteensa keskeisiä piirteitä epäolennaisten ominaisuuksien kustannuksella. Sen on tarkoitus helpottaa todellisuuden ymmärtämistä luomatta siitä kuitenkaan virheellistä tai harhaanjohtavaa kuvaa. Hyvä malli antaa kuvan myös systeemin sisäisestä rakenteesta ja sisäisistä vuorovaikutuksista.

Yksiulotteisten mallien käyttö kemian opetuksessa on nopea ja ilmainen tapa mallintaa atomien ja molekyylien rakenteita sekä reaktiomekanismeja ja -yhtälöitä. Yksiulotteisten mallien käyttö ei myöskään vaadi mitään erikoisjärjestelyjä, joten oppilas voi harjoitella niiden avulla myös kotona. Yksiulotteisia malleja käytetään edelleen paljon ja oppikirjat ovat niitä pullollaan. Kemistit ja tutkijat ovat vuosien varrella kehittäneet tapoja ”elävöittää” paperille piirrettyjä malleja. Kaavatasolla esitetty reaktioyhtälö (esimerkiksi $\text{Na}^+ + \text{Cl}^- \rightarrow \text{NaCl}$) on nopein mutta mallin havainnollisuuden kannalta kaikkein alkeellisin ja mitättömin tapa mallintaa kemiallisia ilmiöitä. Se ei kerro reaktiosta muuta kuin sen mitkä ovat reaktion lähtöaineet ja tuotteet ja mihin suuntaan reaktio pääasiassa tapahtuu. Se ei esimerkiksi kerro mitään aineiden rakenteista eikä reaktion mekaniismista.

Kehittynein tapa ilmaista rakenteita ja reaktiomekanismeja kaksiulotteisesti on käyttää piirtämisessä erilaisia tehosteita. Esimerkiksi molekyylin kolmiulotteisen rakenteen mallintamiseksi on käytetty lihavoituja kolmioita esittämään katsojaan päin suuntutunutta sidosta, katkoviivalla katsojasta pois päin suuntautunutta ja tavallisella viivalla tasossa olevaa sidosta. Tämä havainnollistaa rakennetta jo

paremmin mutta vaatii katsojalta hyvää avaruudellista hahmottamista. On totta, että kolmiulotteinen hahmottamiskyky paranee, kun tällaisia malleja käytetään usein. Joillekin oppilaille paperille piirretyn rakenteen tai reaktioyhtälön hahmottaminen kolmiulotteisena kuvana tuottaa kuitenkin ylitsepääsemättömiä vaikeuksia (63).

Kehittyneimmilläkkin yksi- ja kaksiulotteisilla malleilla on useita puutteita. Koska mallit eivät ole konkreettisia, niitä ei voi käänellä eikä tarkastella eri suunnilta. Malleilla ei myöskään pystytä havainnollistamaan todenmukaisesti atomien avaruudellista suuntautumista, niiden välisiä kokoeroja, molekyylin sidoskulmia ja -pituuksia, sidoksien luonnetta eikä sisäisiä vuorovaikutuksia. Lisäksi paperille voi helposti piirtää aivan millaisia rakenteita ja reaktiomekanismeja tahansa ilman vihjettä siitä, että kyseinen malli saattaisi ehkä olla kemiallisesti mahdoton. Piirretty malli ei näet koskaan ”valita” virheellisyydestään. Kovin suuria rakennelmia on vaikeaa tai mahdotonta hahmottaa ainakaan kovin selkeästi paperille piirretystä kuvasta. Myös suurien molekyylien ja esimerkiksi niiden kaikkien isomeerien piirtäminen on kovin työlästä.

Yksi- ja kaksiulotteisten mallien suurena puutteena on, etteivät ne pysty herättämään teoriaa eloon vaan tieto jää hyvin abstraktiksi. Voidaan jopa väittää, että jos opetuksessa käytetään ainoastaan näitä malleja, molekyyliä eivät koskaan tule oppilaille todellisiksi minkä seurauksena ymmärrys kärsii. Kun riittävää ymmärrystä ei ole, opetellaan helposti vain ulkoa.

Konkreettiset mallit, kuten opetuksessa perinteisesti käytetyt pallotikkumallit, ovat kehittyneimpiä mekaanisia malleja kemiallisista yhdisteistä ja niiden rakenteista. Pallotikkumalleista käy hyvin ilmi molekyylien kolmiulotteinen rakenne. Koska mallit ovat käsin kosketeltavia, niitä pystytään myös käänteleämään käsissä, muokkaamaan ja tarkastelemaan eri suunnista. Tällöin molekyylien avaruudellinen hahmottuminen helpottuu ja konkreettiset mallit muuttuvat oppilaille ikään kuin ”todellisiksi”. On kuitenkin tutkittu, että juuri edellä mainitun seikan vuoksi oppilaille jää usein käsitys, että perinteinen pallotikkumalli on suora suurennos todellisesta molekyylistä. Konkreettinen malli luo myös harhakäsityksen, jonka mukaan atomien väliset sidokset ovat jäykkiä, samanpituisia ja muutenkin täysin

muuttumattomia. Lisäksi pallotikkumallit eivät havainnollista todenmukaisesti atomien välisiä sidoskulmia.(13)

Koska molekyylien sisäisiä vuorovaikutuksia ei ole huomioitu, oppilas voi rakentaa myös rakenteellisesti ja kemiallisesti täysin vääriä ja mahdottomia molekyyli rakenteita ilman, että malli itsessään jotenkin ”protestoisi” tätä vastaan. Oppilas ei myöskään pysty havaitsemaan kuinka esimerkiksi atomien vaihto vaikuttaa molekyylien kemiallisiin ominaisuuksiin. Konkreettisilla malleilla on mahdotonta rakentaa kovin suuria, monien atomien yhdistelmiä ja niiden käyttö rajoittuu ainoastaan pieniin ja yksinkertaisiin molekyyliin. Tällöin oppilas ei kuitenkaan saa käsitystä kuinka monimutkaisia suurempien molekyylien rakenteet ovat (3).

Opettajat käyttävät useimmiten vain jonkun yhden tai kahden molekyyli tyyppin malleja, jolloin oppilaille saattaa jäädä täysin väärä kuva molekyyleistä eivätkä he pysty ymmärtämään molekyyli maailman monimuotoisuutta. Konkreettiset mallit eivät myöskään havainnollista atomien välisiä kokoeroja eivätkä anna mahdollisuutta luoda kaikkia mahdollisia isomeerejä molekyyliin. Oppilaille saattaa jäädä myös kuva, että atomeilla on tietty niille ominainen väri. (1,3,10,13)

On tutkittu, että tietokone- eli virtuaalimallien avulla virheellisten päätelmien määrää voidaan vähentää (1,6,8). Tietokonemallit havainnollistavat hyvin atomien välisiä kokoeroja, sidospituuksia ja -kulmia ja antavat samalla hyvän kuvan systeemien sisäisistä rakenteista sekä vuorovaikutuksista. Ne auttavat oppilaita ymmärtämään muun muassa molekyylien fysikaalisia ominaisuuksia, kiraalisuutta, konformaatioita, reaktiivisuutta, reaktiomekanismeja sekä stereokemiaa. Niillä voidaan havainnollistaa myös käsitteitä kuten atomi, elektronipilvi, kemiallinen sidos, molekyyli ja orbitaali, joita perinteiset mallit eivät havainnollista (8,10). On jopa sanottu, että tietotekniikka on väline, joka herättää teorian eloon (14, s. 19).

Konkreettisiin malleihin, kuten esimerkiksi muovisiin pallotikkumalleihin, verrattuna tietokonemallien käytön etuna on, etteivät niiden osat katoa eivätkä lopu kesken. Tällöin on mahdollista rakentaa erilaisia molekyyli systeemejä alusta asti lähes systeemien koosta riippumatta ja havainnollistaa esimerkiksi molekyyliin kaikkia

mahdollisia konformeereja. Molekyylin rakenteen muuttumista optimoinnin aikana on mahdollista seurata ikään kuin animaationa tietokoneruudulta. Lisäksi virtuaalimalleilla on mahdollista havainnollistaa muun muassa molekyylin värähtelyjä ja kemiallisen reaktion tapahtumista. Tällöin oppilas ymmärtää paremmin myös molekyylin geometrian yhteyden sen reaktiivisuuteen. (13,15) Jotkut mallitusohjelmat, kuten esimerkiksi HyperChem, tarkastavat tunnetun tiedon pohjalta mikäli jokin yhdiste tai reaktio on kemiallisen sidoslouonteen perusteella täysin mahdoton³.

Myös monen asian yhtäaikainen seuranta on helppoa visuaalisten vihjeiden perusteella. Oppilas voi esimerkiksi seurata kuinka lämpötilan muutos vaikuttaa systeemin liikkeeseen, rakenteeseen ja sidospituuksiin. Vaikka tietokonemallit, kuten mitkä tahansa muutkin mallit, ovat vain todellisuutta vastaavia simulaatioita, ne eivät koskaan vastaa täysin todellisuutta. Koska tietokoneen avulla voidaan liikkua helposti kaksiulotteisesta esityksestä kolmiulotteiseen sekä käyttää saman molekyylin havainnollistamisessa useita eri värejä ja mallityyppejä kuten esimerkiksi viiva-, pallotikku- ja kalottimalleja, hahmottuu oppilaille kuitenkin mallien luonne; sama asia voidaan esittää lukuisalla eri tavalla. Oppilas voi testata erilaisia malleja ja havaita, etteivät visuaaliset seikat vaikuta molekyylin kemiallisiin ominaisuuksiin.

Tietokonemallien haittapuolena voidaan pitää sitä että ne eivät ole käsin kosketeltavia (3). Tutkimusten mukaan parhaimpiin oppimistuloksiin päästään, kun käytetään muovimalleja yhtä aikaa kolmiulotteisten virtuaalimallien kanssa (15). Opettaja voi esimerkiksi jakaa oppilaille valmiin muovisen mallin jonka avulla ryhdytään luomaan omaa kolmiulotteista virtuaalimallia. Tällainen toimintatapa voi olla etenkin aluksi erittäin hyödyllinen, mikäli oppilaat ovat tottuneita muovimallien käyttäjiä. Lisäksi itse tietokoneet ovat tietysti kalliimpia kuin esimerkiksi muoviset pallotikkumallit mutta jos tietokoneet ovat valmiina, molekyylimallitusohjelmien hinta tuskin muodostuu esteeksi.

Useat tutkijat puoltavat tietokonemallien ja -animaatioiden koulukäyttöä ja ovat havainneet, että näiden käyttö kemian opetuksen tukena helpottaa oppilaita

³ siis esimerkiksi C- ei voi liittyä =O sidokseen

ymmärtämään paremmin muun muassa aineen käsitettä ja luonnetta kemiallisissa ilmiöissä. Osa tutkijoista puolestaan arvelee oppilaiden saavan parhaan edun, kun konkreettisia ja virtuaalimalleja käytetään rinnakkain.(15) Mallit on kuitenkin tärkeä esitellä hyvin. Jokaisella mallilla on omat etunsa ja puutteensa, joten on tärkeää kertoa sekä niiden eduista että puutteista.

VI Laskennallisen kemian tutkimustori


VI.1 Laskennallisen kemian tutkimustorin esittely

WWW-sivuista on pyritty tekemään mahdollisimman intuitiiviset, helpot ja selkeät, jotta opiskelijan tietotekniikan taidot eivät nousisi esteeksi ja oppilas kykenisi käyttämään sivuja ilman opettajan jatkuvaa ohjausta. Samasta syystä mallitustehtäviin on liitetty hyvin yksityiskohtaiset ohjeet, vaikka moni opiskelija pystyisi suoriutumaan tehtävistä yleisemmällä tasolla esitettyjen ohjeiden avulla. Ohjeiden pikkutarkkuus on samalla sekä hyvä että huono asia. Yksityiskohtaisten ohjeiden orjallisella seuraamisella on haittapuolena se, ettei oppilas keskity riittävästi siihen mitä tekee vaan painelee vain nappeja käskyjen mukaan. Toisaalta samalla ohjeet antavat oppilaalle aikaa keskittyä opittavaan asiaan. Voi olla, että ilman tarkkoja ohjeita opiskelija ei pystyisi suoriutumaan itsenäisesti tehtävistä.

Sivuja luodessa on pyritty kiinnittämään huomiota niihin seikkoihin joita kohdassa ”hyvän WWW-sivuston piirteitä” on käsitelty. Sivujen teossa on käytetty apuna HTML-Kit ohjelmaa ja JavaScriptejä. Koodi on pyritty pitämään yksinkertaisena ja selainkohtaisia erikoisuuksia on vältetty. Sivujen HTML-koodiin voi tutustua liitteenä olevan cd-rom levyn avulla.

Esittely	Tehtävät	Tehtävien tueksi	Galleria
----------	----------	------------------	----------

Tervetuloa tutustumaan laskennalliseen kemiaan ja molekyylimallitukseen!

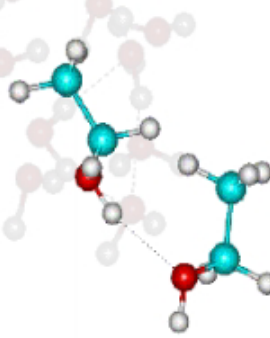


"Esittely" kohdasta löytyy taustatietoa sivuista, laskennallisesta kemiasta ja molekyylimallituksesta.

"Tehtävät" kohdasta löytyy yhteensä kahdeksan mielenkiintoista laboratorio- ja molekyylimallitustehtävää joiden avulla perehdytään niin etanolin kuin kemiainkin saloihin.

"Tehtävien tueksi" kohdassa on tietoa HyperChem -ohjelmasta ja tehtävien teoreettista taustaa. Täältä löytyy myös mielenkiintoista lisälukemistoa täydentämään lukion kemian oppikirjoja.

"Galleriasta" löytyvät kaikki tehtäviin ja teoriaan liittyvät kuvat. Kuvia voidaan hyödyntää myös muun opetuksen ja opiskelun tukena.



[Tulosta sivu](#) | [Sivun alkuun](#) | [Edellinen sivu](#)

KUVA 5. WWW-sivujen aloitussivu.

"Esittely" -valikosta löytyvältä "Aloitussivulta" löytyy lyhyt esittely valikoiden sisällöistä.

Esittely	Tehtävät	Tehtävien tueksi	Galleria
Aloitussivu Oivaltamisen iloa laskennallisesta kemiasta Mitä on tietokoneavusteinen molekyylimallitus Lukion kemian opetussuunnitelmasta			

KUVA 6. "Esittely" -valikko

Lisäksi "Esittely" -valikosta löytyy lyhyet tietopakettit molekyylimallituksesta, lukion kemian opetussuunnitelmasta sekä "Laskennallista kemiaa kouluihin projektista".

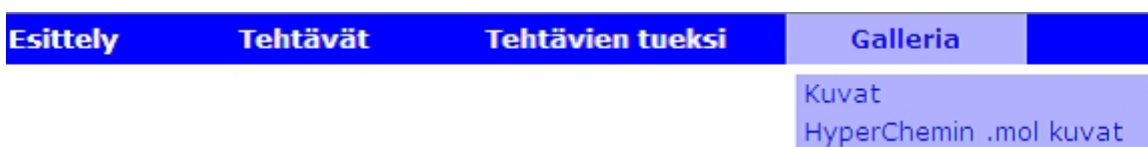
"Tehtävät" -valikko on esitelty seuraavassa otsikossa (VI.2) "Laskennallisen kemian tutkimustorin tehtävien yksityiskohtainen tarkastelu". Tehtäviin on pyritty

linkittämään oleellista tietoa kemiasta ja molekyylihallituksesta. Nämä löytyvät myös kohdasta ”Tehtävien tueksi”. Tehtävien vastaukset ja sanaselitykset aukeavat linkeistä pienempään apuikkunaan, joka on toteutettu JavaScriptinä. Samalla on tiedostettu se, etteivät JavaScript-ratkaisut toimi kaikissa selaimissa, vaikka yleisimmin käytetyt tukevatkin tätä toimintoa.



KUVA 7. ”Tehtävien tueksi” -valikko

”Tehtävien tueksi” kohdasta löytyy taustatietoa HyperChem ohjelmasta, tehtäviin liittyvää kemian teoriaa sekä kemian ja HyperChemien sanaselityksiä. ”Tiesitkö” kohdasta löytyy kolme lisätietokappaletta etanolista.



KUVA 8. ”Galleria” -valikko

”Galleria” -valikosta löytyvät kaikki sivuston kuvat yhteen koottuina. Näitä kuvia opettajan on mahdollista käyttää opetuksen tukena myös ilman tehtäviin perehtymistä. ”HyperChemien.mol kuvat” sisältää .mol muotoisia tiedostoja joista voi olla hyötyä tehtävien teossa, opetuksessa ja opiskelussa.

VI.2 Laskennallisen kemian tutkimustorin tehtävien yksityiskohtainen tarkastelu

Tämän pro gradu -tutkimuksen ensisijaisena tavoitteena on tuoda uutta materiaalia lukion kemian opetukseen tutkimustorin tehtävien muodossa. Kuten alussa todettiin,

lukioon halutaan tuoda molekyylien kolmiulotteinen mallinnus ja kemiallisten reaktioiden havainnollistaminen molekyylylasolla sekä havainnollistava reaktiokinetiikka. Tämä on tutkimustorissa toteutettu kahdeksan tehtävän avulla. Tehtävissä käsitellään kemiallisia ilmiöitä makro-, mikro- ja kaavatasoilla, joten tehtävät tukevat monitaso-opetusta auttaen oppilasta ymmärtämään mikro- ja makrotasojen välisen yhteyden. Lisäksi ne helpottavat mallien luonteen ymmärtämistä.

Oppilaalla ja opettajalla on mahdollisuus valita tehdäänkö mallitustehtävät kokonaan alusta alkaen vai käytetäänkö hyväksi ”Galleriasta” löytyviä kuvia. Tällöin on helppoa tasapainotella uuden työkalun käytön opetteluun ja kemian tietouden hankkimiseen käytetyn ajan kanssa. Aikaa ei ole aina käytettävissä niin paljon kuin sitä tarvittaisiin ja silloin joudutaan turvautumaan kompromisseihin. Näihin tilanteisiin opettajan on mahdollista varautua käyttämällä valmiita .mol muotoisia kuvia.

Esittely	Tehtävät	Tehtävien tueksi	Galleria
	Tehtävien esittely Yleisohjeet 1. Piirrä etanolimolekyyli (mallitustehtävä) 2. Etanolin valmistus (oppilastyö) 3. Etanolin valmistus (mallitustehtävä) 4. Etanolin vibraatiospektri (mallitustehtävä) 5. Palava raha (demonstraatio) 6. Etanolin palaminen (mallitustehtävä) 7. Etanolin liukeneminen veteen (oppilastyö) 8. Etanolin liukeneminen veteen (mallitustehtävä) Tehtävien vastaukset		

KUVA 9. ”Tehtävät” -valikko.

”Tehtävät” -valikosta löytyy tehtävien lisäksi tehtävien esittely, yleisohjeet, ja tehtävien vastaukset. Vastaukset on linkitetty myös kysymysten yhteyteen. Seuraavassa perehdytään tehtävien sisältöihin.

Tehtävässä yksi (etanolimolekyylin piirtäminen ja rakenteen optimointi) perehdytään mallitusohjelman käyttöön piirtämällä yksinkertainen molekyyli, etanoli. Luotu malli korostaa etanolin keskeisiä piirteitä antaen samalla hyvän kuvan systeemin sisäisestä

rakenteesta ja sisäisistä vuorovaikutuksista. Samalla tutustutaan etanolin ominaisuuksiin pohtimalla sen funktionaalista ryhmää ja vertailemalla erilaisten sidosten pituuksia. Tietokoneen avulla opiskelijan on helppo kokeilla molekyylitasolla erilaisia vaihtoehtoja molekyylin havainnollistamiseksi ja havaita, etteivät visuaaliset seikat vaikuta molekyylin kemiallisiin ominaisuuksiin. Opiskelijalla on myös tilaisuus seurata reaaliaikaisesti tietokoneen näytöltä millaisia vaikutuksia hänen tekemillään muutoksilla on. Tämän tehtävän suorittaminen ensimmäisenä helpottaa oppilaan työskentelyä myöhemmissä mallitustehtävissä. Lisäksi se auttaa ymmärtämään laboratoriotöiden ja demonstraatioiden kohdalla esiin tulevia reaktioita. Tehtävät voidaan kuitenkin tehdä vapaassa järjestyksessä.

Tehtävä kaksi on laboratoriotyö, jossa valmistetaan etanolia. Tämän tehtävän tarkoituksena on tutustuttaa oppilas yhteen kemian keskeiseen työskentelymuotoon, laboratoriotyöskentelyyn. Toisaalta reaktiossa silmin nähden tapahtuu jotain, mutta mitä? Tehtävän tarkoituksena on myös herättää opiskelija pohtimaan tapahtunutta reaktiota. Tehtävä toimiikin parhaiten yhdessä tehtävän kolme kanssa, jossa pohditaan etanolin valmistusta myös toisen prosessin kautta. Reaktiota tutkitaan tarkemmin kolmiulotteisten mallien avulla ja oppilaan tehtävänä on pohtia, kuinka reaktio todella tapahtuu. Tällöin oppilaalla on mahdollisuus luoda malli teorian ja kokeellisen toiminnan välille. Tällöin asian ymmärtäminen, johtopäätösten teko ja asioiden yhdistäminen helpottuu.

Laskennallisen kemian avulla oppilas pystyy helpommin yhdistämään kokeellisen ja teoreettisen kemian molekyylitasolta lähtien. Sitä voidaan käyttää yhtä hyvin abstraktien käsitteiden konkretisoimiseksi, yksinkertaistamiseksi ja selventämiseksi kuin teorioiden, ilmiöiden ja sääntöjen havainnollistamiseksi ja selittämiseksi.

Tehtävässä neljä laskennallista kemiaa käytetään avuksi oppilaan perehtyessä etanolin rakenteeseen laskennallisen värähdyspektrin avulla. Spektri antaa paljon tietoa molekyylin värähtelyistä ja ominaisuuksista. Oppilaalla on mahdollisuus visualisoida tietokoneen näytöllä etanolin erilaisia värähtelyjä. Tehtävä tuo hyvin esille sen, ettei molekyylit ole jäykkiä tiettyyn asentoon jähmettyneitä kappaleita vaan erittäin monimuotoisia ja herkästi ympäristön muutoksiin reagoivia.

Tehtävässä viisi tutustutaan etanolin palamiseen demonstraation ja johdattelevien kysymysten kautta. Tehtävä toimii hyvin yhdessä tehtävän kuusi kanssa, jossa tutustutaan samaan aiheeseen reaktioyhtälöiden ja mallintamisen kautta. Tehtävät viisi ja kuusi luovat yhdessä oivallisen mahdollisuuden tarkastella samaa ilmiötä kolmelta eri näkökulmalta.

Samantapaisen kokonaisuuden luovat tehtävät seitsemän ja kahdeksan. Niissä oppilaan tehtävänä on ensin liuottaa etanolia veteen laboratoriossa ja pohtia sitten havaitsemaansa tapahtumaa mallien avulla.

Nämä tehtäväyhdistelmät ovat erittäin monipuolisia ja auttavat oppilasta ymmärtämään aineen luonnetta, symbolien tulkintaa ja hahmottamaan molekyyliä avaruudellisesti. Ne mahdollistavat nopean siirtymisen makroskooppiselta (kokeellinen työ) tasolta mikroskooppiselle (eli atomi- ja molekyyli-) tasolle jolloin asioiden ymmärtäminen helpottuu. Tutkimusten mukaan (3,13,15,17,19,34) oppilaiden on vaikea muodostaa linkkejä näiden eri tasojen välille ja ymmärtää, että samaa asiaa voidaan merkitä usealla eri tavalla.

VI.3 HyperChemin laskennallista taustaa ja tehtävien kemiallista tarkastelua

Laskennallisen kemian tutkimustorilla olevien tehtävien toteutukseen on valittu lukuisista eri tietokoneohjelmista HyperChem, joka on helppokäyttöinen ja suhteellisen edullinen. Ohjelmaan voi tutustua verkossa osoitteessa www.hyper.com. HyperChem on monipuolinen kolmiulotteinen molekyylien visualisointi ohjelma, jolla voi simuloida, havainnollistaa ja analysoida molekyyliä. Lisäksi molekyylien havainnollistamiseen voidaan käyttää mm. tikku-, pallotikku- tai kalottimalleja. Se tarjoaa siis monipuolisen katsauksen tietokoneen tuomiin mahdollisuuksiin kemian opetuksessa.

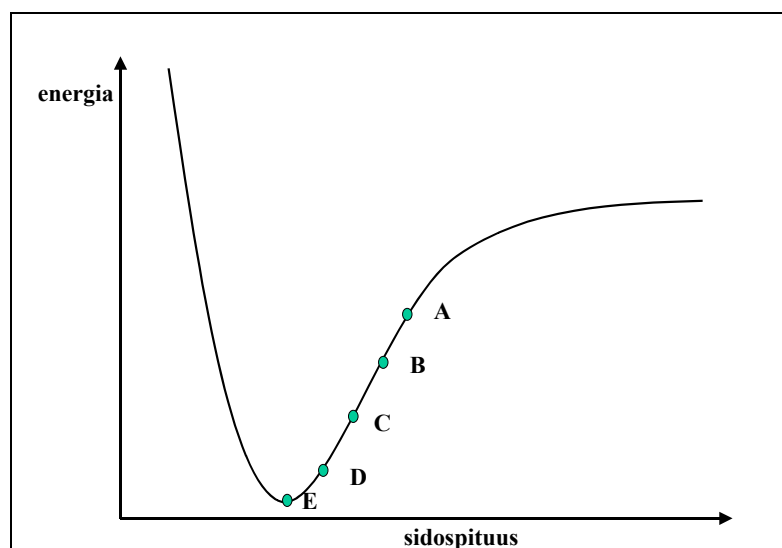
Seuraavassa perehdytään HyperChemin laskennalliseen taustaan eli niihin teorioihin ja laskennallisiin menetelmiin, joita käytetään Laskennallisen kemian tutkimustorin tehtävien suorittamisessa. Samalla perehdytään myös muutamiiin laskennallisen kemian kannalta keskeisiin käsitteisiin.

VI.3.1 Optimoinnin päämääränä on energian minimointi

Kun ainetta tutkitaan kokeellisesti tai valmistetaan laboratoriossa, saadaan usein eri konformaatioiden seosta. Seoksessa on aina eniten energeettisesti edullisinta rakennetta ja siksi, jos mallituksen avulla halutaan löytää todellisuutta lähellä oleva tilanne, pyritään etsimään energiainimiä. Alimman energian muoto vastaa suotuisinta kokeellisesti havaittavaa molekyyli-rakennetta. Molekyylin kaikkien energiainimien kartoittaminen kertoo olemassa olevien rakenteiden lukumäärän. HyperChem -ohjelmassa on automaattinen energioiden minimointiohjelma, joka optimoi rakennetun molekyylin geometrian. Energianminimin etsiminen kvanttimekaanisissa laskuissa perustuu elektronisen energian minimointiin eri ydinkonfiguraatioissa. Molekyylimekaniikassa energian minimointi perustuu sidos-, kulma-, van der Waals- ja varausenergioiden summan minimointiin ydinkoordinaattien suhteen.

Minimointiprosessia voi seurata myös graafisesti, jolloin kuvaruudulta voidaan nähdä miten molekyylin konformaatio muuttuu minimoinnin aikana. Minimointiprosessin kesto riippuu molekyylin koosta; mitä monimutkaisempi molekyyli on kyseessä, sitä enemmän minimointiprosessi vie aikaa.

Minimointiprosessia voidaan tarkastella potentiaalienergiakäyrän avulla, josta nähdään miten molekyylin energia muuttuu sen rakenteen muuttuessa. Tarkemmin potentiaalienergiakäyrä kuvaa elektronisen energian (potentiaalienergian) muutosta, kun atomiytimien paikat muuttuvat. Kuvassa 10 on havainnollistettu kaksiatomisen molekyylin minimointiprosessia.



KUVA 10: Kaksiatomisen molekyylin minimointiprosessi.

Minimointi lähtee liikkeelle siitä, että ohjelma etsii potentiaalienergiakäyrältä jonkun pisteen, jonka se ottaa minimoinnin lähtökohdaksi (kuvassa 10 piste A). Tätä energiapistettä vastaa jokin kyseisen molekyylin rakenne. Minimointiprosessi etenee vaihe vaiheelta kohti alemman energian omaavaa rakennetta. Potentiaalikäyrällä tämä tarkoittaa liikkumista käyrää pitkin alaspäin pisteiden B, C ja D kautta pisteeseen E, jossa sijaitsee käyrän minimikohta, joka siis vastaa molekyylin pienimmän energian omaavaa rakennetta eli tasapainosidospituutta. Energiaminimi on tunnettava, jotta molekyylin ominaisuuksia voitaisiin määrittää.

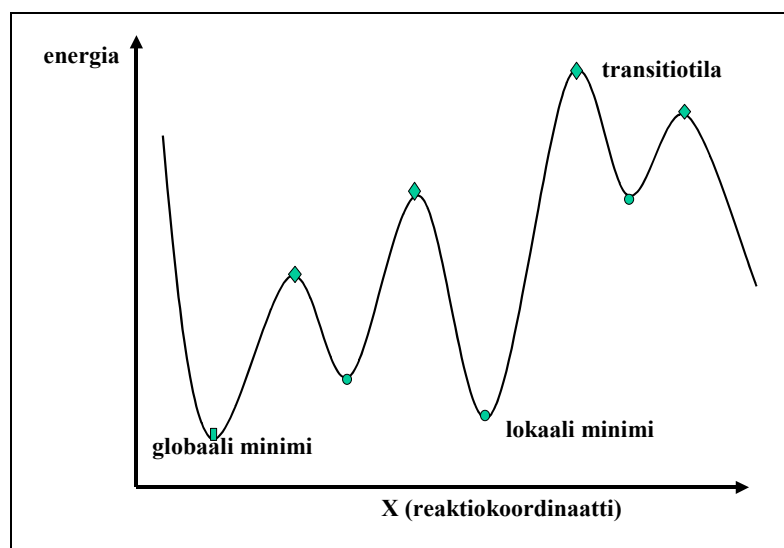
Minimointiprosessi etenee askeleittain. HyperChem tarjoaa mahdollisuuden määrittää kuinka tiheäksi askelväli halutaan. Jokaisen askeleen jälkeen ohjelma laskee uuden geometrian energian. Jos askeleet ovat liian pieniä, askelia tulee paljon ja prosessi vie paljon aikaa. Jos taas askeleet ovat liian suuria, energian minimikohta saatetaan ohittaa ja aikaa tuhlaantuu, kun joudutaan palaamaan takaisin. Askelväli on siis tärkeä valita tarkasti sen mukaan mikä on koneen teho, käytettävissä oleva aika ja kuinka tarkkoja tuloksia halutaan.

Minimointiprosessi tapahtuu tiettyjen minimointialgoritmien avulla. Yleisesti ottaen minimointiprosessi päättyy kuitenkin siihen pisteeseen, josta liikuttaessa käyrää pitkin kumpaan suuntaan tahansa, energian arvo kasvaa. Käytännössä tämä tarkoittaa sitä, että muutettaessa molekyylin rakennetta millä tavalla tahansa on aina tuloksena

energian kasvaminen. Minimointialgoritmin valinta riippuu tutkittavan molekyylin ominaisuuksista, käytetystä voimakentästä tai kvanttikemiallisesta laskutasosta ja siitä kuinka tarkkoja vastauksia tarvitaan. Kaikki HyperChemin käyttämät menetelmät, "Block-diagonal Newton Raphson", "Eigenvector-Following", "Fletcher-Reeves", "Polak-Ribiere" ja "Steepest descent", perustuvat energian derivaattojen laskemiseen. Menetelmän valinta riippuu minimoinnin kohteesta, käytettävissä olevasta ajasta sekä siitä kuinka tarkkoja tuloksia halutaan. Joissakin ohjelmissa on käytössä myös ei-derivatiivisia menetelmiä, kuten esimerkiksi "Simplex Minimisation". Nämä eivät kuitenkaan ole läheskään niin tehokkaita kuin edellä mainitut derivatiiviset menetelmät.

Kuvan 10 potentiaalienergiakäyrässä tutkitaan energian muuttumista ainoastaan sidospituuden funktiona ja prosessi saattaa näyttää erittäin yksinkertaiselta. Todellisuudessa molekyyllillä on kuitenkin $3N - 6$ vapausastetta (jossa N on molekyyllissä olevien atomien lukumäärä) joten muuttujia on paljon useampia, jopa satoja ja tämän vuoksi prosessi onkin todellisuudessa paljon monimutkaisempi.

Minimikohdan löytäminen on kuitenkin vielä suhteellisen helppoa tapauksessa, jossa on vain yksi mahdollinen minimikohta. Tällainen on tilanne jäykkärakenteisten kaksiatomisten molekyylien kohdalla, jolla on ainoastaan yksi muuttuja, sidospituus joten valittavana on lisätäkö vai vähennetäänkö sidospituutta (kuvassa 10 oikealle mentäessä sidospituus kasvaa ja vasemmalle mentäessä sidospituus lyhenee). Useampiatomisen molekyylin potentiaalienergiapinnat ovat kuitenkin monimutkaisempia ja niissä on useita minimi- ja maksimikohtia (ks. kuva 11). Piste jossa energian arvo on kaikkein alhaisin, on nimeltään globaali minimi. Potentiaalienergiapinnalta voi löytyä monta muutakin minimienergiapistettä mutta ne sijaitsevat aina korkeammalla energia-arvolla kuin globaali minimi. Näitä pisteitä sanotaan lokaaleiksi minimeiksi. (Huom. globaali minimi on aina myös samalla lokaali minimi.) Globaalia minimiä vastaa molekyylin energeettisesti edullisin rakenne. Potentiaalienergiapinnan maksimikohdat ovat transitio- eli siirtymätiloja, joita ei voida suoraan kokeellisesti tutkia eikä niitä vastaavia rakenteita voida määrittää.



KUVA 11: Moniatomisen molekyylin potentiaalikäyrä yhden koordinaatin suhteen.

Tietokoneohjelman kannalta suurin ongelma piilee siinä, että sillä ei ole nähtävissä kuvien 10 ja 11 mukaisesti koko potentiaalienergiakäyrää vaan ainoastaan pieni osa siitä. Mistä siis tiedetään missä kohtaa potentiaalikäyrää ollaan? Yksi tapa olisi tietenkin tehdä rakenteeseen mahdollisimman pieniä muutoksia ja tutkia miten energia muuttuu ja havaita, että jos energia vähenee konfiguraatiota muutettaessa, ei minimiä ole löydetty. Kaikkien mahdollisten rakenteiden läpikäyminen on kuitenkin aikaa vievää etenkin, jos molekyylissä on paljon atomeja. Tarkastelemalla molekyylin värähdys- eli vibraatiospektriä voidaan selvittää onko löydetty piste jokin energiaminimeistä vai jokin transitiotilojen pisteistä. Jos löydetty piste on transitiotila, havaitaan tämä lasketussa värähdyspektrissä imaginäärisenä taajuutena. Tällöin kaikkia molekyylin koordinaatteja ei ole optimoitu halutulla tavalla ja jokin sisäinen koordinaatti on maksimissa. Globaalin tai lokaalin minimin ollessa kyseessä, havaitaan spektrissä ainoastaan positiivisia arvoja. Se onko löydetty minimi lokaali vai globaali, selviää ainoastaan etsimällä kaikki potentiaalienergiakäyrän minimi ja vertailemalla niiden energioita toisiinsa. Alimman energian omaava piste, on globaali minimi ja molekyylin rakenteen stabiilein muoto. (76,77)

VI.3.2 Molekyylimallituksessa käytetyt menetelmät

Molekyylimallituksessa käytetyt menetelmät jakaantuvat kvanttikemiaan ja molekyylimekaniikkaan pohjautuviin menetelmiin. Oikean menetelmän valinta riippuu paljon siitä, mitä ominaisuutta halutaan mallintaa ja tutkia. Lisäksi se riippuu tutkittavasta systeemistä, sen koosta, siinä olevista alkuaineista ja siitä onko kyseessä ulospäin varauksellinen vai varaukseton systeemi. Menetelmää valittaessa on syytä ottaa huomioon myös käytettävissä oleva aika sekä se, kuinka tarkkoja tuloksia halutaan saada (ks. taulukko 1).

Seuraavassa keskitytään ensin kvanttikemiallisiin laskumenetelmiin, joita käytetään ”Laskennallisen kemian tutkimustori”:n tehtävissä yksi, kolme, neljä ja kuusi. Ensimmäisessä tehtävässä mallinnetaan pienikokoista etanolimolekyyliä ja tehtävissä kolme ja kuusi etanolin valmistukseen ja palamiseen liittyvien reaktioiden eri vaiheita. Tehtävässä neljä lasketaan etanolimolekyylin vibraatio- eli värähdyspektri. Lopuksi perehdytään vielä molekyylimekaniikkaan ja molekyylidynamiikkasimulaatioihin. Niitä tarvitaan tehtävässä kahdeksan, jossa tutkitaan etanolin liukenemista veteen. Mallinnettavassa systeemissä on tällöin yhteensä 49 molekyyliä (kaksi etanolimolekyyliä ja 47 vesimolekyyliä). Mallinnettaessa näin isoja systeemejä ja verrattaessa saatuja tuloksia niiden makroskooppisiin ominaisuuksiin on kvanttimekaniikan käyttö mahdotonta laskujen monimutkaisuuden vuoksi.

Mitattu suure	ab initio /3-21G	Semiempiirinen/AM1	Molekyylimekaniikka /MM+ -voimakenttä	Kokeellisesti saatu arvo
Sidospituuksia				
(Å)				
r(OH)	0,966	0,964	0,942	
r(CO)	1,444	1,420	1,402	1,410 ^{b)}
r(CC)	1,525	1,512	1,528	1,510 ^{b)}
r(CH)	1,085	1,124	1,116	
r(CH)	1,084	1,116	1,114	
Sidoskulmia (°)				
α(HOC)	110,9	106,6	108,4	
α(OCH)	111,1	109,8	107,7	
α(CCO)	106,9	107,3	107,3	105,0 ^{b)}
α(CCH)	109,5	109,5	110,8	
α(HCH)	109,3	109,2	110,0	
τ(HCCO)	59,4	59,8	59,7	
Laskuun				
kulunut aika^{a)}	65	2		1
(s)				

^{a)} Laskettu Pentium 2,0 GHz tietokoneella.

^{b)} (78)

Taulukko 1. Etanolin rakenne optimoitu globaaliin minimiin kolmella eri laskumenetelmällä, ab initio; laskutaso HF/3-21G, semiempiiriset menetelmät; AM1 ja molekyylimekaniikka, jossa voimakenttänä on MM+. Viimeisessä sarakkeessa on kokeellisesti mitattu rakenneparametri. Tulokset ovat hyvin samankaltaiset. Etanolin tapauksessa saadaankin hyviä tuloksia kaikilla menetelmillä. AM1 laskutaso antaa hyviä tuloksia pienille orgaanisille molekyyleille, joissa on alkuaineina H, C, N, O, F, Cl, Br ja I. Tutkimusten (79) mukaan, AM1 -lasketut sidospituudet eroavat kokeellisista tuloksista ~0,027Å ja sidoskulmat ~2,3°. Vastaavat poikkeavuudet ovat havaittavissa myös taulukon arvoista.

VI.3.2.1 Kvanttikemia

Kvanttikemialliset menetelmät voidaan jakaa karkeasti kahteen ryhmään: ab initio eli elektroniverholaskuihin ja semiempiirisiin menetelmiin. Jako perustuu siihen kuinka paljon menetelmä käyttää kokeellisia tai kokeellisiin tuloksiin sovitettuja parametreja menetelmien perustana olevan Schrödingerin yhtälön ratkaisemisessa.

Ab initio -menetelmä

Ab initio -menetelmä (ab initio tulee latinasta ja tarkoittaa "alusta alkaen") on tärkein kvanttikemiallinen laskumenetelmä. Ab initio -menetelmä on johdettu suoraan teoriasta käyttäen lähtötietoina atomin järjestyslukuja, massoja, atomien paikkoja, molekyylin kokonaisvarausta ja spinnikerrannaisuuksia (esimerkiksi etanoli on singletti, $^1\Sigma$). Laskuissa ei käytetä empiiristä aineistoa mutta Schrödingerin yhtälön ratkaisemisessa käytetään matemaattisia approksimaatioita.(76,80-83)

VI.3.2.2 Schrödingerin aaltoyhtälö kvanttikemiallisten laskujen pohjana

Schrödingerin aaltoyhtälö on lineaarinen toisen kertaluvun differentiaaliyhtälö, jonka esitti ensimmäisenä Erwin Schrödinger vuonna 1926. Sitä ei voida johtaa, vaan se perustuu muutamiin postulaatteihin. Schrödingerin yhtälöön päädytään usein klassillisen mekaniikan aaltoyhtälöiden pohjalta mutta on hyvä muistaa, että analogia klassillisen mekaniikan aaltoyhtälöiden ja kvanttimekaanisten aaltoyhtälöiden välillä on ainoastaan muodollinen.

Kvanttikemiassa atomien ja molekyylien kuvaus tapahtuu aalto- eli tilafunktioiden avulla. Ne saadaan kuhunkin tilanteeseen sovelletun Schrödingerin yhtälön ratkaisuna. Aaltofunktioista puolestaan saadaan todennäköisyyksinä kaikki se fysikaalinen informaatio mikä aaltofunktioon liittyvästä hiukkasesta tai systeemistä on saatavissa. Ratkaistuna Schrödingerin yhtälö antaa siis paljon tietoa systeemin energiatiloista, geometriasta, stabiilisuudesta ja värähdysspektristä. Sen avulla saadaan selville myös atomin tai molekyylin sähköiset ominaisuudet kuten dipolimomentti, varaukset sekä reaktiivisuus. Käytännössä, kun aaltofunktio ψ_i

saadaan ratkaistua, tunnetaan koko systeemin kemiallinen luonne. Kvanttiteorian keskeisin kysymys on, miten päästään tietyn fysikaalisen systeemin tilafunktioihin eli miten saadaan ratkaistua Schrödingerin differentiaaliyhtälö.

Schrödingerin yhtälön ajasta riippuva yleinen muoto on seuraava:

$$\hat{H}\Psi_i(r,t) = E\Psi_i(r,t) \quad [1]$$

missä

Ψ_i = systeemin stationaarinen tila

\hat{H} = Hamiltonin operaattori

E_i = systeemin energia

Yhtälössä [1] \hat{H} on Hamiltonin operaattori, jonka muoto on hyvin monimutkainen jo yksinkertaisimmillekin atomeille ja molekyyille, E on systeemin energia ja $\Psi(r, t)$ on aaltofunktio, joka määrää täysin systeemin tilan ja on riippuvainen sekä hiukkasten koordinaateista että ajasta. Koska nyt ei tutkita molekyylien kemiallisten ominaisuuksien riippuvuutta ajasta, voidaan laskuissa soveltaa Schrödingerin yhtälön ajasta riippumatonta muotoa:

$$\hat{H}\psi_i(r) = E_i\psi_i(r) \quad [2]$$

missä

ψ_i = systeemin stationaarinen tila

\hat{H} = Hamiltonin operaattori

E_i = systeemin energia

Yhtälössä [2] ψ_i on nyt aaltofunktio, joka riippuu ainoastaan hiukkasten koordinaateista.

Yhtälön eksakti ratkaiseminen monielektronisille systeemeille on hyvin hankalaa. Schrödingerin yhtälön ratkaisemisen vaikeus johtuu Hamiltonin operaattorista, joka koostuu kineettisestä ja potentiaalienergiaoperaattoreista ($\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$). Se on hyvin monimutkainen jo hyvin yksinkertaisillekin atomeille ja molekyyille. Erityisesti

lausekkeessa esiintyvä $\frac{1}{r_{12}}$ -termi, joka kuvaa elektroni-elektroni vuorovaikutusta, tuottaa suuria hankaluuksia. Molekyylille jossa on n kpl:ta m_e massaisia elektroneja ja N kpl:ta m_α massaisia ytimiä, saadaan Hamiltonin operaattorille lauseke:

$$\hat{H} = -\sum_{\alpha=1}^{ytimet} \frac{\hbar^2 \nabla_\alpha^2}{8\pi^2 m_\alpha} - \sum_{i=1}^{elektronit} \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{8\pi^2 m_e} - \sum_{i=1}^{elektronitytimet} \sum_{\alpha=1} \frac{z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{i\alpha}} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \sum_{\alpha<\beta} \sum_{ytimet} \frac{z_\alpha z_\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{\alpha\beta}} \quad [3],$$

missä

α ja β ovat ytimiin ja i ja j elektroneihin viittaavia indeksejä, ∇^2 on Laplacen operaattori, z on hiukkasen varaus, ϵ_0 on tyhjiön permittiivisyys, jonka arvo on $8,854188 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$, $r_{i\alpha}$ on elektronin i etäisyys ytimestä α , r_{ij} on elektronin i etäisyys elektronista j ja $R_{\alpha\beta}$ on ydinten α ja β välinen etäisyys.

Yhtälössä [3] ensimmäinen summatermi edustaa ytimien kineettistä energiaa, toinen elektronien kineettistä energiaa, kolmas elektronien ja ytimien välistä attraktiota eli vetovoimaa, neljäs elektronien välistä repulsiota eli hylkimisvoimaa ja viimeinen ytimien välistä repulsiota ($H =$ ytimien kineettinen energia + elektronien kineettinen energia + ytimien ja elektronien välinen vetovoima + elektronien välinen hylkimisvoima + ytimien välinen hylkimisvoima). Kun oletetaan, että ytimien ja elektronien koordinaattien origo on molekyylin painopiste, saadaan molekyylin translaatioliike eliminoitua ja tällöin Schrödingerin yhtälö on muotoa

$$\hat{H}\psi_i(r, R) = E\psi_i(r, R) \quad [4]$$

missä

$\psi(r, R)$ riippuu sekä elektronisista koordinaateista r , että ydinten koordinaateista R

\hat{H} = Hamiltonin operaattori

E = molekyylin kokonaisenergia translaatiota lukuun ottamatta

Yhtälössä [4] on siis mukana vielä molekyylin rotaatio- ja värähtelyliikkeet.

Approksimaatiot

Yhtälön [4] ratkaiseminen eksaktisti on mahdotonta vetyä suuremmille systeemeille. Koska ratkaistu Schrödingerin yhtälö tarjoaa kaiken mahdollisen tiedon systeemistä, pyritään se ratkaisemaan likimääräisesti turvautumalla approksimaatioihin.

Myös HyperChem käyttää hyväksi laskuissaan erilaisia approksimaatioita, joista kolme tärkeintä (Bornin ja Oppenheimerin approksimaatio, LCAO–MO eli molekyyliorbitaliapproksimaatio ja HF-SCF eli Hartree-Fockin itseytyvän kentän menetelmä) on esitelty seuraavassa.

1. Bornin ja Oppenheimerin approksimaatio

Sekä molekyyli- että kvanttimekaaniset simuloinnit perustuvat yleensä Bornin ja Oppenheimerin approksimaatioon joka viittaa elektronien ja ydinten massojen suureen eroon ($m_e = 9,109390 \cdot 10^{-31}$ kg, $m_p = 1,672\,623 \cdot 10^{-27}$ kg, $m_n = 1,674\,929 \cdot 10^{-27}$ kg). Koska ytimet ovat paljon painavampia kuin elektronit, ne myös liikkuvat paljon näitä hitaammin. Tällöin millä tahansa ajan hetkellä ydinten liikkeessa toisiinsa nähden, elektronit muuttavat välittömästi jakaumaansa uutta ydinten muodostamaa potentiaalientä vastavaksi. Elektronit ehtivät siis päästä tasapainoon ennen kuin atomiytimet liikkuvat merkittävästi.

Ytimien voidaan ajatella liimautuneen paikoilleen, minkä seurauksena yhtälö [4] voidaan ratkaista approksimatiivisesti elektronien liikkeen suhteen paikalleen kiinnitettyjen ytimien muodostamassa potentiaalientässä. Tällöin aaltofunktion ψ sijaan tutkitaan ns. elektronisia aaltofunktioita ψ_{el} .

Tällöin Schrödingerin yhtälö voidaan esittää muodossa:

$$\hat{H}^{el} \psi^{el}(r, R) = E^{eff}(R) \psi^{el}(r, R) \quad [5]$$

missä

\hat{H}^{el} = elektroninen Hamiltonin operaattori

$\psi^{el}(r, R)$ = elektroninen aaltofunktio jossa elektronien koordinaatit r ovat muuttujia

ja ydinten koordinaatit R parametreja

$E^{eff}(R)$ = ytimen sijainnista riippuva efektiivinen elektroninen energia

Nyt voidaan Hamiltonin operaattorin lausekkeesta [3] unohtaa ensimmäinen termi (ytimet ovat paikallaan) ja viimeinen termi (ydinten välinen potentiaali on vakio) ja \hat{H}^{el} saa näin ollen muodon [6]

$$\hat{H}^{el} = - \sum_{i=1}^{elektronit} \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{8\pi^2 m_e} - \sum_{i=1}^{elektronit} \sum_{\alpha=1}^{ytimet} \frac{z_\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{i\alpha}} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad [6]$$

Viimeinen termi (elektronien välinen repulsio) monimutkaistaa Schrödingerin yhtälön ratkaisua suuresti, sillä elektronien paikkaa ei voida täsmällisesti määrittää. Approksimoidaan viimeistä termiä itseytyvän kentän menetelmällä, jolloin kuvataan integraalifunktiolla potentiaalienergiaa, jonka elektroni tuntisi liikkeessaan muiden elektronien muodostamassa tasaisesti jakautuneessa kentässä. Tällöin Schrödingerin yhtälön ratkaisuna saadaan kyseisen molekyylin orbitaalienergiat ja yksielektronifunktiot eli atomiorbitaalit Φ_i määritettyä. (76,77,80-83,86)

2. LCAO - MO

Perinteiset orbitaalikuvaukset ovat harhaanjohtavia, koska elektronien löytymistodennäköisyys piirroksen rajojen sisältä voi olla jopa alle 80 %. Toisaalta todennäköisyys on jo melko pieni piirrettyä rajapinnalla ja pienenee koko ajan rajapinnan ylittämisen jälkeen. Todellisuudessa orbitaalilla ei ole selkeästi määriteltäviä reunoja ja siksi elektronin löytymistodennäköisyyttä on vaikea visualisoida perinteistä orbitaalikuvaa selkeämmin.

Molekyyliorbitaalit voidaan esittää molekyylin muodostavien atomien atomiorbitaalien eli yksielektronifunktioiden lineaarikombinaationa yhtälön [7] mukaan

$$\psi_i(r) = \sum_{\mu=1}^{\mu} c_{\mu i} \Phi_{\mu} \quad [7]$$

missä $c_{\mu i}$ on molekyyliorbitaalien kehityskertoimet funktioiden Φ_{μ} muodostamassa kannassa.

Tätä menetelmää kutsutaan LCAO-menetelmäksi (Linear Combination of Atomic Orbitals). Mainittakoon menetelmästä esimerkkinä vetymolekyyli-ioni, joka on siis

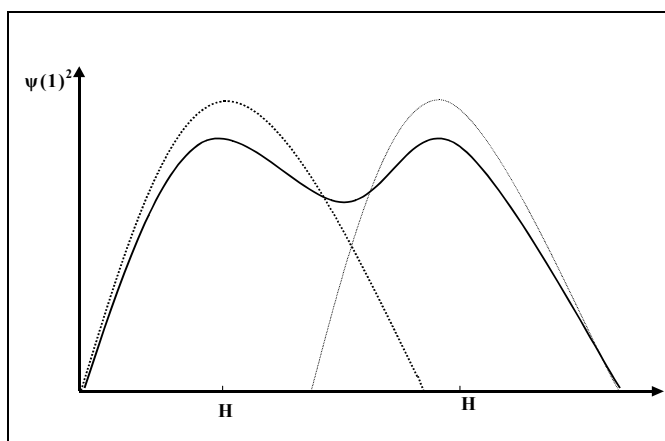
kahden samanlaisen atomiorbitaalin muodostama kombinaatio. Sen aaltofunktiolle on saatu seuraavat lausekkeet

$$\psi(1) = \Phi(1) + \Phi(2) \quad [8]$$

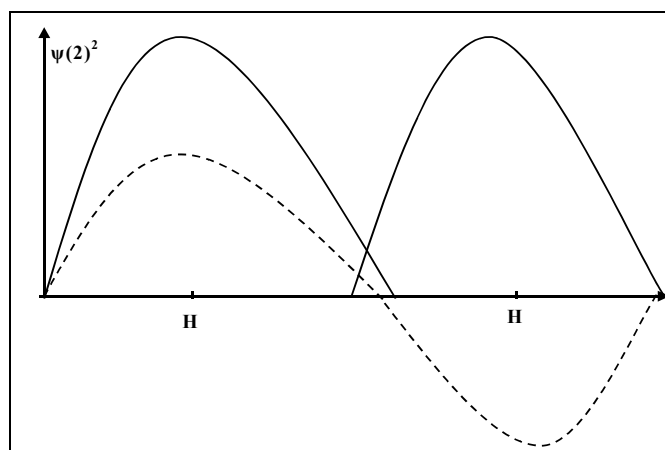
$$\psi(2) = \Phi(1) - \Phi(2),$$

missä $\Phi(1)$ ja $\Phi(2)$ ovat atomiorbitaaleja.

Lausekkeista huomataan, että $\psi(1)^2$:n kohdalla elektronitiheydet kasvavat ydinten välillä eli ts. vetyatomien ja protonin välillä on kemiallinen sidos (sitova orbitaali) ja $\psi(2)^2$:n kohdalla pienenevät (hajottava orbitaali). Tätä on havainnollistettu kuvassa 12.



a) Sitova orbitaali (σ)



b) Hajottava orbitaali (σ^*). Molekyyli hajoaa välittömästi, kun $\psi(2)$ orbitaalille tuodaan elektroni.

Kuva 12. Vetymolekyyli-ionin elektronin esiintymistodennäköisyystiheys esitettynä pitkin ytimiä yhdistävää viivaa. Katkoviivalla on esitetty vastaavat todennäköisyystiheydet kahdelle erilliselle vetyatomille.

Palataan vielä yhtälöön [6] missä viimeistä termiä on approksimoitu keskimääräisen kentän menetelmällä. Nyt Hamiltonin operaattori voidaan periaatteessa laskea. Jos lisäksi tunnetaan molekyyliorbitaalit, on yhtälössä [5] esiintyvän systeemin efektiivinen elektroninen energia ratkaistavissa Schrödingerin yhtälöstä [9].

$$E_{eff} = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} \quad [9]$$

Yhtälöstä [9] täytyy ratkaista yksielektroniaaltofunktioiden kehityskertoimet $c_{\mu i}$. Se onnistuu käyttämällä variaatioperiaatetta. Variaatioperiaatteen mukaan energia, joka on laskettu approksimoituista aaltofunktioista, ei voi koskaan olla alempi kuin todellinen energia, joten alimman energian aaltofunktio on aina paras mahdollinen. Periaatteen mukaan paras kehityskerroin onkin se, joka antaa alimman energian E. (76,80-83)

3. Kantafunktiojoukot

Orbitaali kertoo elektronin sijoittumisesta muiden elektronien muodostamassa kentässä. Elektronin aaltofunktio määritetään matemaattisen funktion avulla joita tunnetaan vain muutamille yhden elektronin systeemeille. Siksi orbitaalia tavallisesti kuvaillaan kantafunktiojoukoilla. Koska kantafunktiojoukot ovat approksimaatioita oikeista aaltofunktioista, niillä saatu energia on aina liian suuri variaatioperiaatteen mukaan. Yksinkertaisilla kantafunktiojoukoilla laskut ovat nopeita mutta epätarkkoja. Hienoimmilla kantafunktiojoukoilla taas saadaan tarkempia tuloksia mutta aikaa kuluu paljon enemmän.

Yksinkertaisimmillaan kantafunktiojoukko χ_{μ} voi olla ns. slater-tyypin orbitaaleja (STO) jotka ovat analyttisiä lausekkeita

$$\chi = R(r)Y_{lm}(\Theta, \varphi)$$

$$R_{1s} = N_1 e^{-\xi r}$$

$$R_{2s} = N_2 r e^{-\xi r},$$

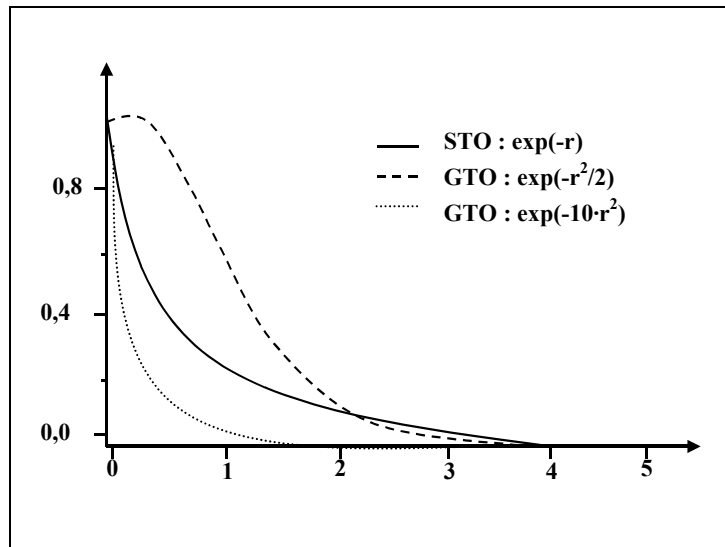
missä ξ kuvaa elektronipilven varjostusta

Koska Schrödingerin yhtälön ratkaisussa STO-orbitaalien suhteen integroiminen on hankalaa, käytetään näitä orbitaaleja vain yksittäisille atomeille ja lineaarisille molekyyille.

Gaussin-tyyppiset orbitaalit (GTO = Gaussian Type Orbitals) ovat suositumpia. Ne ovat karteesisia ja käyttökelpoisia moniatomisten molekyylien integraalien ratkaisemisessa. Orbitaalit muodostuvat gaussin-funktioista. Yksi gaussin funktio ei tuota kovin hyvää esitystä orbitaalista sillä ne eivät ole oikean mallisia lähellä ydintä. Funktioita on kuitenkin helppo manipuloida; kahden gaussin funktion tulosta saadaan uusi gaussin funktio ja useiden gaussin orbitaalien kombinaatioita voidaan käyttää hyvien tulosten saamiseen.

Yksinkertaiset gaussin -kantafunktiojoukot matkivat slater-tyyppisiä orbitaaleja. Jokainen STO korvataan n :llä GTO-funktiolla ja merkitään STO- n G. Esimerkiksi STO-3G on yleisin minimaalinen kantafunktiojoukko. Siinä kolme gaussin funktiota muodostavat kukin slater-tyyppisen orbitaalin. Split-valence kantafunktiojoukot ovat muotoa a - bc G, joissa kukin a , b ja c vastaavat kussakin mallin osassa käytettävien gaussin-funktioiden määrää (esim. 3-21G $a=3$, $b=2$, $c=1$). Mitä suurempia numerot ovat sitä tarkempia ja matemaattisesti monimutkaisempia ovat niitä vastaavat kantafunktiojoukot.

Kantafunktioita voidaan kehittää myös lisäämällä ns. polarisointia tai diffuuseja funktioita parantamaan orbitaalien suuntautuneisuutta tai kantamaa ytimestä. 3-21G on pienin gaussin-tyyppinen kantafunktiojoukko. Siinä ensimmäisen rivin alkuaineilla 1s-elektroneita kuvaa 3 GTO:ta, 2s, 2p jne. -elektroneita 2 GTO:ta ja ylimääräisiä valenssi-elektroneja kuvaa vain yksi GTO. 6-31G-kanta tuottaa paljon parempia laskennallisia tuloksia mutta laskut vaativat enemmän laskutehoa ja aikaa. Aika, joka laskuihin vaaditaan, kasvaa noin n^4 :llä, missä n on kantafunktioiden määrä. Jos kantafunktioiden määrää kasvatetaan, kasvaa laskenta-aika dramaattisesti.



Kuva 13. Esimerkki yhdestä STO:sta ja kahdesta GTO:sta. (85)

HF-SCF eli Hartree-Fockin itseytyvän kentän menetelmä

Schrödingerin yhtälössä laskennallisesti hankalin osa on elektroni-elektroni-vuorovaikutus, jossa summataan elektronien välinen potentiaalienergia kaikista elektroneista kaikkiin elektroneihin lausekkeen [10] mukaan.

$$V_{ee} = \sum_i \sum_f \frac{e^2}{|r_{if}|^2} \quad [10]$$

Tätä ei voida suoraan laskea kuin hyvin pienille systeemeille joiden koko vastaa heliumatomin kokoa. Ongelma voidaan ratkaista Hartree-Fock:in menetelmällä. Sen avulla Schrödingerin yhtälö jaetaan moneksi yksinkertaiseksi yhden elektronin yhtälöksi, jotka ratkaisemalla saadaan yhden elektronin aaltofunktioita, orbitaaleja ja orbitaalienergioita. Elektroni-elektroni -vuorovaikutus ei sisälly Hartree-Fock-menetelmään.

Hartree-Fockin itseytyvän kentän menetelmä (SCF = self-consistent field) on yleisin kvanttikemiallinen laskutyyppi. SCF pohjautuu Hartreen menetelmään, jossa lähtökohtana on, että atomin tai molekyylin elektroniset ominaisuudet voidaan kuvata yksi-elektronisten orbitaalien tulon avulla. Fock jatkoi Hartreen menetelmän kehittämistä ja lisäsi siihen elektronien vaihtoilmion.

Vaihtoilmio perustuu havaintoon hiukkassysteemejä kuvaavista aaltofunktioista. Ne ovat joko symmetrisiä tai antisymmetrisiä identtisten hiukkasten (esim. elektronien)

vaihdon suhteen. Elektronisysteemiä vastaa antisymmetrinen aaltofunktio (joka ei siis ole symmetrinen kahden elektronin vaihdon suhteen) koska elektronien spinkvanttiluku on 1/2. Elektroneista puhuttaessa ilmiötä kutsutaan Paulin periaatteeksi (joka on toiselta nimeltään antisymmetrisyysperiaate). Sen erikoistapaus, Paulin kieltoääntö, tunnetaan hyvin seuraavassa muodossa: ”tietyissä atomissa kahdella elektronilla ei voi olla täysin sama kvanttilukukombinaatio”.

Hartreen ja Fockin yhtälöt ovat differentiaali- ja integraaliyhtälöitä, joiden ratkaiseminen tehdään iteratiivisesti. Aloitus tehdään arvaamalla aaltofunktiot kaikille systeemin elektroneille, käyttäen hyväksi kaikkea sitä tietoa mitä vastaavan tyyppisestä systeemistä on saatavissa (=tietokoneohjelmaan sisäänrakennettu informaatio). Tämän jälkeen valitaan yksi elektroni ja kiinnitetään muut elektronit ikään kuin paikoilleen jähmettyneeksi potentiaalilähteeksi, jolloin saadaan arvioitua potentiaalienergia, missä elektroni liikkuu. Koska kukin elektroni vuorovaikuttaa potentiaalilähteen kanssa erikseen, voidaan kaksoissumma korvata yksinkertaisella summalla [11].

$$V_{ee}' = \sum_f V_l^{av} \quad [11]$$

Nyt riittää, että ratkaistaan yhden elektronin aaltofunktio kerrallaan sen sijaan, että pyrittäisiin löytämään suoraan ratkaisua kaikkien atomien ja elektronien paikoista riippuvalle Schrödingerin yhtälölle.

Yhden elektronin aaltofunktio on muotoa [12]:

$$\begin{aligned} \phi_l : \sum_f (T_{e,f} + V_{Ne,l} + V_f^{av}) \psi(x_1, x_1, \dots, x_N) &= E \psi(x_1, x_1, \dots, x_N) \\ (T_{e,l} + V_{Ne,f} + V_l^{av}) \phi_l(x_1) &= F \phi_l(x_1) = \epsilon_l \phi_f(x_1) \end{aligned} \quad [12]$$

jossa F on ns. Fock-operaattori. Yhtälö on ns. Hartree-Fockin yhtälö.

Operaatio toistetaan seuraavan elektronin suhteen ja potentiaalienergiaa arvioitaessa otetaan huomioon jo ratkaistut aaltofunktiot. Kun kaikki elektronit on käyty läpi, saadaan uusi alkuperäisestä poikkeava aaltofunktiojoukko. Kertoja jatketaan, kunnes viimeksi saatu joukko ei enää juurikaan poikke edellisestä eli lasku konvergoituu ja silloin kenttä on itseytynyt. (Se, että iterointi konvergoi tai että konvergoitunut

ratkaisu on se oikea, ei ole millään lailla varmaa.) Laskuissa voidaan käyttää hyväksi joko Slater- tai Gaussin- tyyppisiä orbitaaleja. (76,77,80-83)

Semiempiiriset menetelmät

Semiempiiristen laskujen perusasetelma on sama kuin Hartree-Fock laskuissa, eli kaikki perustuu Hamiltoniin ja Schrödingerin yhtälön ratkaisemiseen, mutta tietyt laskuissa esiintyvät integraalit approksimoidaan tai ohitetaan kokonaan. Yleensä täysien kuorien elektroneja ei oteta mukaan laskuihin ja käytössä on vain minimaalinen kantafunktiojoukko. Integraalien laskemista nopeutetaan käyttämällä lisäksi empiirisillä menetelmillä saatua aineistoa eli parametrisoimalla menetelmä. Parametrisoimalla pyritään myös pienentämään approksimaatioista seuranneita virheitä. Voidaan siis sanoa, että semiempiiriset menetelmät on rakennettu pienistä orgaanisista molekyyleistä saatujen parametrien avulla. Siksi, kun tutkittava molekyyli on samankaltainen ohjelman tietokannassa olevan molekyyli kanssa, saadaan erittäin hyviä tuloksia (ks. taulukko 1). Laskumenetelmän parametrisointiin on käytetty tietoja molekyylien mukaan reaktiolämmöistä, dipolimomenteista ja ionisaatiopotentiaaleista.

Semiempiiriset laskut kuvaavat hyvin orgaanista kemiaa, jossa vain muutamia alkuaineita käytetään laajasti ja molekyylit ovat kohtuullisen kokoisia. Semiempiirinen AM1 (Austin Model 1) laskumenetelmä on käyttökelpoinen kaikille niille molekyyleille, jotka sisältävät alkuaineita jaksollisen järjestelmän ensimmäiseltä ja toiselta vaakariviltä siirtymämetalleja lukuun ottamatta. AM1 on kalibroitu kokeellisen muodostumisentalpian avulla ja se on yhdessä PM3:n kanssa yleisesti tarkin semiempiirinen menetelmä, joka HyperChemissä on. AM1:n avulla voidaan laskea elektronisia ominaisuuksia, optimoida geometria ja kokonaisenergia sekä arvioida molekyylin muodostumislämpö. (76,80-84)

Semiempiiristen laskujen edut ja ongelmat ab initio laskuihin verrattuna

Semiempiiriset laskut ovat nopeampia kuin ab initio laskut. Toinen etu saavutetaan parametrisoinnilla. Koska menetelmä parametrisoidaan kokeellisin tuloksin, ne sisältävät myös elektronien välisten vuorovaikutusten vaikutuksia. Toisaalta tämä voidaan nähdä myös haittana, koska ei ole selvää kuinka suuri vaikutus on ja miten suurilla virheillä parametrisointi aiheuttaa laskuihin. Lisäksi tulokset voivat olla

virheellisiä tai niitä ei voida ennustaa niin luotettavasti. Mallinettaessa kuitenkin pienikokoisia orgaanisia molekyyliä, esimerkiksi etanolia, saadaan erittäin hyviä tuloksia. Jos molekyyli poikkeaa kaikista parametrisoiduista molekyyleistä, voivat tulokset olla erittäin huonoja. Semiempiiriset laskut eivät ole kuitenkaan niin herkkiä parametrisoinnille kuin molekyylimekaniikka laskut. (76,80-83)

VI.3.2.3 Molekyylisimulaatiot

Mallinettaessa isoja systeemejä ja niiden makroskooppisia ominaisuuksia on kvanttimekaniikan käyttö mahdotonta laskujen monimutkaisuuden vuoksi ja siksi tehtävässä 8, jossa tutkitaan etanolin liuottamista veteen, turvaudutaan molekyylimekaniikkaan ja molekyylidynamiikkaan.

Molekyylidynamiikassa molekyyლისysteemin käyttäytymistä tutkitaan ajan funktiona (esimerkiksi systeemin lämmitys, värähdysliike tai Brownin liike) ja ilmennetään simulaationa (86). Laskennan alussa systeemin hiukkasille annetaan alkuarvot eli hiukkasten paikat ja nopeudet. Tämän jälkeen suoritetaan laskennallinen "mittaus", jossa ratkaistaan hiukkasten liikkeet hiukkasiin vaikuttavien voimien avulla. Koska molekyyლისssä tapahtuvat geometriset muutokset tarkoittavat sen energian muuttumista, täytyy energiat ratkaista. Tähän käytetään yleisimmin molekyylimekaniikkalaskuissa käytettyjä kemiallisen systeemin kokonaisenergian arviointimenetelmiä.

Molekyylimekaniikassa käytetään puhtaasti empiirisestä aineistosta rakennettuja mekaanisia malleja. Tämän haittapuolena on, ettei elektroneja huomioida huolimatta niiden keskeisestä asemasta kemiassa. Molekyylimekaniikalla saavutetut tulokset eivät ole aina tarkkoja. Esimerkiksi systeemin energian minimoinnilla löydetään jokin konformaatio mutta tämä ei välttämättä ole alimman energian omaava konformaatio.

Tutkittavasta molekyyლისistä tarvitaan tarkka kuvaus, jotta molekyylimekaniikan laskut ja simulaatiot onnistuisivat. Kaikki tarvittavat tiedot on sisällytetty voimakenttiin.

Yleisesti voidaan sanoa, että molekyyliidynamiikkaa käytetään hyväksi etenkin silloin, kun kyseessä on isokokoinen systeemi (tutkimustorilla etanolin liuottaminen veteen), jonka käyttäytymistä halutaan simuloida. Tällöin ab initio tai semiempiiristen laskujen suorittaminen on hyvin aikaa vievää tai jopa mahdotonta. (76,80-83)

Voimakentät

Voimakentät ovat molekyylimekaniikan ja -dynamiikan ydin. HyperChem-ohjelma esittää molekyylin kuvaamista varten tarvittavat tiedot numeerisessa muodossa taulukoituna voimakenttiin. Molekyylien kuvaaminen ei ole kovin yksinkertaista ja siksi erilaisia voimakenttiin liittyviä tiedostoja on paljon ja ne sisältävät suuren määrän tietoa erilaisista atomeista ja niiden naapurisuhteista. Jokaisesta atomista tarvitaan oma kuvaus sekä tiedot siitä missä kohtaa molekyyliä ne sijaitsevat (atomien karteesiset koordinaatit). Lisäksi tarvitaan tietoa muun muassa atomityypistä, joita on olemassa paljon enemmän kuin alkuaineita (esimerkiksi hiili, jonka järjestysluku on 6, voi olla tyypiltään sp^3 tai sp^2 ja muodoltaan tetraedrinen, trigonaalinen, tasomainen tai lineaarinen), tietoja atomeja yhdistävistä sidoksista (sidospituudet, -kulmat jne.), varauksista sekä systeemin sisällä vallitsevista vuorovaikutuksista (joita on jo yksinkertaisessa molekyyliässä erittäin paljon).

Voimakenttälaskut ovat yleensä erittäin nopeita. Tämä on tehty mahdolliseksi sovittamalla tiettyjä alkuaineryhmiä ikään kuin molekyyleiksi sen sijaan että niitä tutkittaisiin yksittäisinä atomeina. Esimerkiksi metyyliryhmä voidaan kuvata isoksi pallomaiseksi yksiköksi tai koostuneeksi yhdestä hiilestä ja kolmesta vedystä. Jälkimmäisessä tapauksessa laskujen tulokset ovat tarkempia mutta ensimmäisellä vaihtoehdolla säästetään paljon aikaa.

Voimakentät toimivat parhaiten orgaanisille systeemeille, jolloin voimakenttiä voidaan käyttää useiden molekyylien analysoimiseen ja erilaisten ominaisuuksien määrittämiseen. Epäorgaanisille ja metalli-hiili sidoksille ei ole olemassa yhtä hyviä valmiita parametreja.

Parametrit eivät ole siirrettävissä voimakenttien välillä vaan tietyn voimakentän tiedot on suunniteltu tietyn tyyppisten ongelmien ratkaisuun (kuten proteiinien

rakenteen määrittämiseen). Siksi ei ole olemassa yhtään yleispätevää kaikille ongelmille sopivaa voimakenttää vaan se valitaan tutkittavan systeemin mukaan. Myös se halutaanko nopeita ja hieman epätarkempia tuloksia vai onko mahdollista käyttää paljon enemmän aikaa tarkkojen tulosten saamiseksi, vaikuttaa kentän valintaan. Parametrien lisääminen voimakenttiin on mahdollista mutta koska käytössä on erittäin laaja valikoima erilaisia voimakenttiä, ei niiden muokkaamiseen yleensä ole tarvetta.

Tehtävissä käytetty MM+ on kaikkein yleisimmin käytetty voimakenttä molekyylimekaniikkalaskuille. Se on kehitetty aluksi orgaanisille molekyyileille mutta sitä voidaan käyttää kaikkien atomien voimakenttänä. MM+:lla on mahdollista käsitellä myös sitomattomia vuorovaikutuksia, jotka ovat olennaisia esimerkiksi liukenemisen mallinnuksessa. (76,80-83)

VI.3.3 Spektroskopia

Laskennallisen kemian tutkimustorilla, tehtävässä 4, mallinnetaan ja tutkitaan etanolimolekyylin vibraatio- eli värähdysspektriä. Molekyylin värähtelyliikkeen simulointi on mielenkiintoinen ja tärkeä osa molekyyylimallitusta. Pelkän värähtelyspektrin käsittely ilman siihen kytköksissä olevia käsitteitä on kuitenkin puutteellista ja jopa harhaanjohtavaa. Tämän vuoksi seuraavassa käsitellään suhteellisen perusteellisesti molekyylin värähtelyspektrien lisäksi sen perustana olevia käsitteitä ja teoriaa.

VI.3.3.1 Mitä on spektroskopia?

Spektroskopia tutkii sähkömagneettisen säteilyn ja aineen välistä vuorovaikutusta. Se sisältää monia kemian tärkeimpiä tutkimusmenetelmiä, joista kolme keskeisintä ovat infrapunaspektroskopia, elektronispektroskopia ja ydinmagneettinen resonanssispektroskopia. Spektroskopiassa tarkastellaan molekyylien siirtymistä energiatilasta toiseen.

Eri menetelmillä saatujen tulosten tulkinta on mahdollista kvanttimekaniikan avulla. Newton suoritti ensimmäiset spektroskooppiset tutkimukset jo 1700-luvulla mutta

tulosten kvantitatiivinen käsittely tuli mahdolliseksi vasta kvanttimekaniikan kehittymisen myötä. Atomi- ja molekyyli-spektroskopian avulla saadaan erittäin paljon ja hyvin monipuolista tietoa molekyylin rakenteesta (esimerkiksi: sidospituuksista ja –kulmista), molekyyli-symmetriasta, kemiallisista ominaisuuksista (esimerkiksi: elektronijakautumista, sidosvahvuuksista) sekä molekyylien sisäisistä että molekyylien välisistä prosesseista. (82,87, s.142,155)

VI.3.3.2 Sähkömagneettisen säteilyn ja aineen vuorovaikutus

Spektrometrisista tutkimusmenetelmistä infrapunaspektroskopialla tutkitaan sähkömagneettisen säteilyn imeytymistä eli absorptiota sen kulkiessa tutkittavan aineen läpi. Näin saadaan monipuolista tietoa sekä molekyylin rakenteesta (esimerkiksi: symmetriasta, sidospituuksista, ja –kulmista) että kemiallisista ominaisuuksista (esimerkiksi: elektronijakaumasta, sidosvahvuuksista, molekyylin sisäisistä ja molekyylien välisistä vuorovaikutuksista). Sähkömagneettisen säteilyn alue on hyvin laaja ja se jaetaan useisiin eri energian ja taajuuden omaaviin pienempiin alueisiin. Koko sähkömagneettisen säteilyn spektri on esitetty taulukossa (2)

Taulukko 2. Sähkömagneettisen säteilyn spektrin alueet, niiden likimääräiset rajat ja eri alueilla tapahtuvat ilmiöt. (87, s. 144)

Alue	Säteilyn aallonpituusrajat Λ	Säteilyn taajuusrajat ν / Hz	Säteilyn aikaansaama ilmiö
Gammasäteet	10 pm	$3,0 \cdot 10^{21}$	Ydinsiirtymät
Röntgensäteet	10 nm	$3,0 \cdot 10^{18}$	Sisäelektronien siirtymät
Vakuumiultravioletti	200nm	$1,5 \cdot 10^{17}$	Uloimpien kuorien elektronien poistuminen
Ultravioletti	380 nm	$7,9 \cdot 10^{14}$	Valenssielektronien siirtymät
Näkyvä valo	780 nm	$3,8 \cdot 10^{14}$	Valenssielektronien siirtymät
Lähi-infrapuna	2,5 μ m	$1,2 \cdot 10^{14}$	Molekyylivärähtelyt
Keski-infrapuna	50 μ m	$6,0 \cdot 10^{12}$	Molekyylivärähtelyt
Kaukainen infrapuna	1 mm	$3,0 \cdot 10^{11}$	Molekyylivärähtelyt
Mikroaallot	100 mm	$3,0 \cdot 10^9$	Molekyylirotaatiot ja elektronin spinresonanssi
Radioaallot			Ydinmagneettinen resonanssi

Säteily on aaltoliikettä. Aalloilla on tietty nopeus, aallonpituus ja taajuus. Kullakin aallolla on tietty energia, jonka se pystyy luovuttamaan energiapaketteina eli kvantteina joko kokonaan tai osittain ollessaan vuorovaikutuksessa aineen kanssa. Yhden kvantin energia saadaan laskettua yhtälön [13] avulla.

$$E = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = hc\bar{\nu}, \quad [13]$$

jossa h on ns. Planckin vakio, jonka suuruus on $6,626076 \cdot 10^{-34} \text{ Js} = 4,135669 \cdot 10^{-15} \text{ eVs}$ (88), ν on säteilyn taajuus, c on aallon nopeus, λ on aallonpituus ja $\bar{\nu}$ on aaltoluku.

Tästä saadaan aallon nopeuden, aallonpituuden ja säteilyn taajuuden ν välinen yhteys.

$$c = \lambda\nu \quad [14]$$

Koska kvantin energia on riippuvainen säteilyn aallonpituudesta, on tästä seurauksena se, että sähkömagneettisen säteilyn eri alueiden energiakvantit ovat erisuuruisia. Kuten taulukosta 2 voidaan havaita, yhden kvantin energia on pienin radioaalloilla ja suurin γ -säteilyllä. Kvanttien energioiden erilaisuudesta on seurauksena, että eri aallonpituuksinen säteily saa aineeseen osuessaan aikaan erilaisia muutoksia.

Kuten kaikki sähkömagneettisen säteilyn lajit, myös atomien ja molekyylien energiatilat ovat kvantittuneita. Tämän vuoksi atomin tai molekyylin energiatilan muuttaminen vaatii tietyn suuruisen kvantin.

Jotta ymmärrettäisiin tarkemmin sähkömagneettisen säteilyn ja aineen välistä vuorovaikutusta, tarkastelemme lähemmin molekyylin virittymistä ja tähän liittyvää energiatilan muuttumista. Molekyylin sisäinen energia voidaan jakaa kolmeen osaan, pyörimisenergiaan E_r , värähtelyenergiaan E_v ja elektroniseen energiaan E_e yhtälön [15] mukaan.

$$E = E_r + E_v + E_e \quad [15]$$

Säteilyn absorptiossa molekyyli voi virittyä alemmalta energialta ylemmälle energiatilalle. Jos alkutilaa merkitään, eli alemman energian omaavaa tilaa, E'' :lla ja

lopputilaa, eli korkeamman energian omaavaa tilaa, E' :lla, saadaan yhtälö [15] muotoon [16].

$$\Delta E = E' - E'' = (E'_r - E''_r) + (E'_v - E''_v) + (E'_e - E''_e) \quad [16]$$

Energia säilyy, kun aine ja sähkömagneettinen säteily ovat vuorovaikutuksessa. Säteily voi absorboitua säteilyä absorboivaan molekyyliin tietyn suuruksina "energia-annoksina", energiakvantteina. Yhden energiakvantin suuruus on $h\nu$ (ks. yhtälö [13]) mikä on täsmälleen yhtä suuri kuin atomin tai molekyylin kahden peräkkäisen energiatilan välinen energiaero ts.

$$\Delta E = h\nu \quad [17]$$

Tämä yhtälö on spektroskopian perusyhtälö ja on nimeltään Bohrin taajuusehto. (82,87, s.155,156)

VI.3.3.3 Vibraatio- eli värähdyspektrit

Infrapunaspektri (IR-spektri) antaa paljon tietoa molekyylin rakenteesta ja sen sidosten luonteesta, mutta jo suhteellisen pienenkin molekyylin infrapunaspektrin täydellinen tulkitseminen on vaikeaa ja aikaa vievää. Spektriä voidaan pitää molekyylin kokeellisena sormenjälkenä, joka saadaan laboratoriotutkimuksissa.

Tutkimustorin tehtävissä tarkasteltu värähdyspektri on laskennallinen. HyperChem luo spektrin mallintamalla molekyylin värähdysliikkeet N :n pistemäisen massan joukkona, jotka edustavat atomien ytimiä, ja joista kukin värähtelee optimoidun tasapainokohtansa ympärillä. Tasapainokohdat HyperChem määrittelee ratkaisemalla elektronisen Schrödingerin yhtälön kyseiselle systeemille. Kvanttikemiallisesti värähdyspektri saadaan energian toisena derivaattana ydinkoordinaattien suhteen (ns. Hessin matriisi). Koska HyperChem käyttää harmonisen värähtelijän mallia kaikissa laskuissa, se antaa hieman liian suuria värähtelytaajuuksia Hartree-Fock laskuissa (~10%).

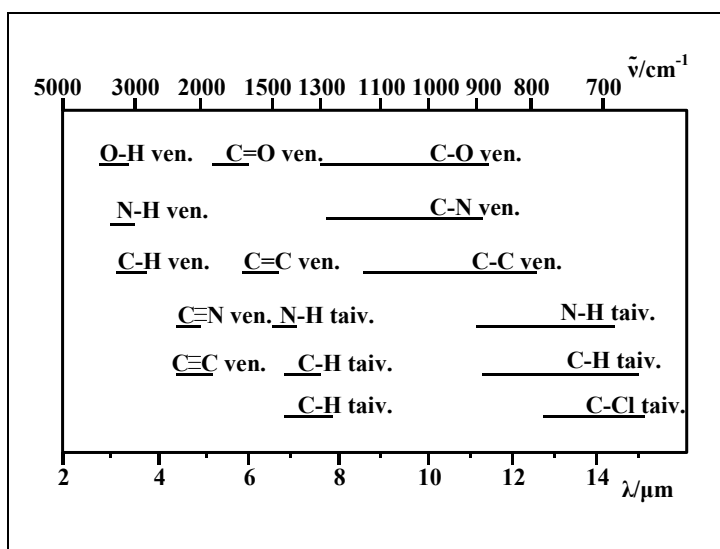
Seuraavassa tutustutaan hieman tarkemmin värähdyspektreihin, sillä vaikka HyperChem:llä luodussa spektrissä ei ole konkreettisesti kyse sähkömagneettisen säteilyn ja aineen välisestä vuorovaikutuksesta, on tuloksia vaikea ymmärtää ilman tietoa siitä mitä värähdyspektrit ovat ja miten ne syntyvät.

Lämpösäteily saa aikaan atomien värähtelyn molekyylissä ja infrapunasäteilyllä voidaan vaikuttaa molekyylin värähtely- ja pyörimisenergioihin. Säteilyn osuessa molekyyliin osa siitä absorboituu saaden aikaan molekyylin virittymisen. Molekyylin dipolimomentti ja sidospituudet muuttuvat jolloin myös molekyylin värähtelyn amplitudi muuttuu. Tämä näkyy infrapunaspektrissä kyseisen aaltoluvun alueella säteilyenergian absorptiona.

Eristetyn molekyylin tilaa voidaan kuvata kvanttilukujen avulla. Nämä kvanttiluvut kuvaavat molekyylin rotaatio-, värähtely- ja elektronitilaa. Kun molekyylin energiatila muuttuu, muuttuvat myös kvanttiluvut. Erilaisia periaatteessa mahdollisia siirtymiä on olemassa paljon mutta kaikki siirtymät eivät ole sallittuja. Sallituille siirtymille on olemassa valintasäännöt, jotka voidaan esittää kvanttilukujen muutoksina. Värähdysenergiatasojen välisiin siirtymiin liittyy valintasääntö $\Delta v = \pm 1$, mikä pätee täysin harmoniselle värähtelijälle. Värähdyspektristä voidaan kuitenkin havaita myös muita siirtymiä, nk. ylisiirtymiä, joille $\Delta v = \pm 2, \pm 3 \dots$, mikä johtuu todellisen molekulaarisen värähtelijän epäharmonisesta luonteesta. Siirtymien edellytyksenä on, että molekyylin dipolimomentti muuttuu värähtelyn aikana ydinten välisen etäisyyden muuttuessa. Dipolimomentin muutos mahdollistaa molekyylin ja säteilyn välisen vuorovaikutuksen, jolloin värähdyspektri voidaan kokeellisesti havaita. Tästä johtuen samanytimisillä molekyyyleillä kuten esim. H_2 tai O_2 , joiden dipolimomentti on nolla kaikilla sidosetäisyyksillä, ei havaita värähdyspekttriä lainkaan. Eriytimisillä kaksiatomisilla molekyyyleillä puolestaan on sidospituudesta riippuva dipolimomentti ja näillä molekyyyleillä voidaan siis todeta värähdyspektri. (82,87 s.163)

Infrapunaspektrin (IR-spektrin) avulla saadaan molekyylistä tai yhdisteestä paljon tietoa. Useat funktionaaliset ryhmät voidaan tunnistaa spektristä suhteellisen helposti ja tämän vuoksi spektrin avulla saadaan usein hyvä yleiskuvan yhdisteen rakenteesta. Yleisimmin tutkittu väli on $4000 \text{ cm}^{-1} - 200 \text{ cm}^{-1}$, joka vastaa molekyylin sisäisten

liikkeiden energioita. Spektrien avulla voidaan aineiden identifioimisen lisäksi tutkia niiden puhtautta. IR-absorptioiden ryhmätaajuudet on esitetty kuvassa 14. (82, 87, s.170,171,172,173)



KUVA 14. IR-absorptioiden ryhmätaajuudet. (87, s.174) Yleinen käytäntö on, että puhutaan taajuuksista, vaikka kysymys on yksiköistä cm^{-1} eli aaltoluvuista.

VI.3.3.4 Molekyylin värähtelyliike

Kaikissa molekyyeissä, olosuhteista riippumatta, atomit värähtelevät tasapainoasemiensa molemmin puolin. Näiden värähdysten amplitudit ovat kuitenkin hyvin pieniä atomien välisiin etäisyyksiin verrattuna. Kaksiatomisilla molekyyeillä on ainoastaan venytysvärähtelyä. Moniatomisilla molekyyeillä sitä vastoin on useita värähtelyliikkeitä; sidosten venymisiä ja kulmien taipumisia molekyylin energiatilan muuttuessa. Moniatomisten molekyylien värähtelyliike saattaa olla hyvin monimutkaista.

Molekyylin erilaisten värähdysliikkeiden lukumäärä saadaan laskettua, kun tiedetään siinä olevien ydinten määrä. Otetaan esimerkiksi tarkastelun kohteeksi molekyyli, jossa on N kappaletta ytimiä. Tämän molekyylin tarkan paikan määrittämiseksi avaruudessa tarvitaan $3N$ koordinaattia, kolme karteesisista koordinaattia (x , y ja z) kutakin atomia kohden. Voidaan myös sanoa, että N -atomisella molekyyllillä on $3N$

vapausastetta. Kaikki vapausasteet eivät kuitenkaan kuvaa värähtelyjä, sillä molekyylin massakeskipisteen kuvaamiseen tarvitaan näistä koordinaateista kolme. Näitä koordinaatteja nimitetään etenemisvapausasteiksi sillä perusteella, että liike näitä kolmea koordinaattia pitkin vastaa molekyylin massakeskipisteen liikettä. Myös ytimien orientaation kuvaamiseen avaruuteen kiinnitetyn koordinaatiston suhteen tarvitaan lineaarisilla molekyyleillä kaksi ja ei-lineaarilla molekyyleillä kolme koordinaattia. Näiden koordinaattien suhteen tapahtuva liike vastaa pyörimisliikettä ja näitä vapausasteita nimitetään pyörimisvapausasteiksi. Näin ollen, jos kyseessä on lineaarinen molekyyli, jossa on N ydintä, tiedetään sen värähtelevän $(3N - 5)$ eri tavalla. Ei-lineaarinen molekyyli voi värähdellä $(3N - 6)$:lla eri tavalla. Jäljelle jäävät koordinaatit kuvaavat siis N :n ytimen keskinäistä liikettä eli molekyylien värähtelyvapausasteita. Selvyyden vuoksi taulukossa 3 on esitetty muutamien molekyylien vapausasteiden lukumäärät.

Taulukko 3. Eräiden molekyylien vapausasteet.

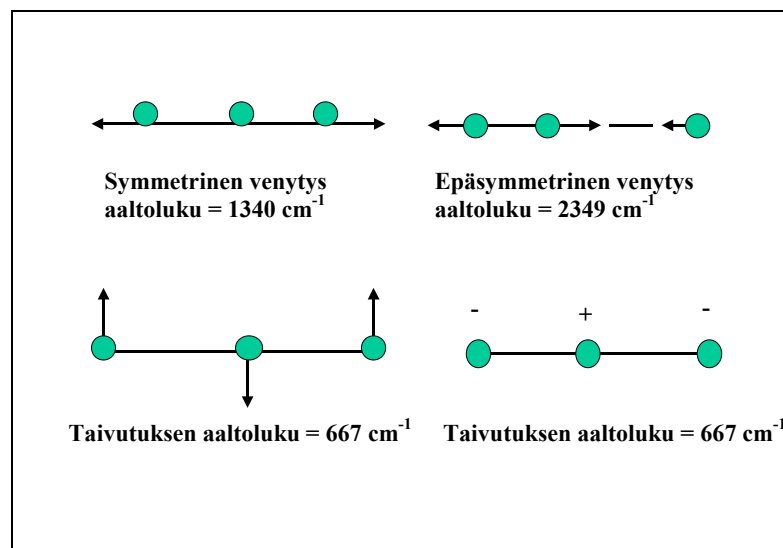
Molekyyli	vapausasteiden lkm. kaikkiaan	etenemis- vapausasteita	pyörimis- vapausasteita	värähtely- vapausasteita
CO ₂ (lineaarinen)	9	3	2	4
H ₂ O (ei- lineaarinen)	9	3	3	3
C ₂ H ₅ OH(ei- lineaarinen)	21	3	3	15

Moniatomisten molekyylien värähtelyliike voi siis olla hyvinkin monimutkaista. Värähtelyliikkeet voidaan kuitenkin pelkistää suhteellisen yksinkertaisiksi kuviksi, sillä yleensä jokainen liike voidaan yksinkertaistaa. Näitä kuvia kutsutaan värähtelyn normaalimalleiksi ("normaalimooodeiksi"). Normaalivärähtelyjen lukumäärä on sama kuin värähtelyvapausasteiden lukumäärä.

Normaalimallissa kaikki ytimet liikkuvat samassa vaiheessa. Tämä tarkoittaa, että ne sivuuttavat ääriarvonsa samanaikaisesti. Ydinten normaalivärähtelyissä molekyylin massakeskipiste ei liiku eikä molekyyli myöskään pyöri. Tästä johtuen eri atomit liikkuvat eri pituisia matkoja. Jokaisella normaalivärähtelyllä on myös sille

luonteenomainen taajuus. Yleisesti voidaan todeta, että molekyylin venytysvärähtelyjen aaltoluvut ovat yleensä suurempia kuin taivutusvärähtelyjen. Tämä johtuu siitä, että yleensä tarvitaan enemmän voimaa molekyylin venyttämiseen kuin sen taivuttamiseen. (87, s.171,172)

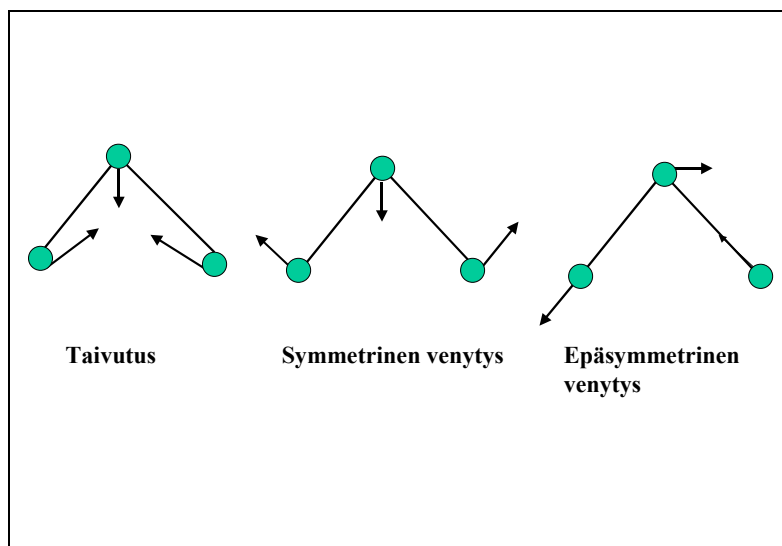
Kaikki molekyylin värähtelyliikkeet voidaan esittää eri normaalimallien siirtymien summana. Normaalivärähtelyn käsitettä valaistaan seuraavaksi muutaman esimerkin avulla.



KUVA 15 a) Hiilidioksidimolekyylin värähtelyt. (87, s.172 ja 89, s.18-7)

Lineaarisen CO₂-molekyylin värähtelyvapausaste on 4 mikä on siis myös normaalimoodien lukumäärä. Värähtelyistä kaksi on venytysvärähtelyjä (symmetrinen ja antisymmetrinen venytys) ja kaksi taivutusvärähtelyä, jotka tapahtuvat kahdessa toisiaan vastaan kohtisuorassa tasossa, mutta ovat muuten samanlaisia. Merkillä - tarkoitetaan tässä, että atomin liike tapahtuu kuvan tasosta ja merkillä +, että atomin liike on kuvan tasoa vastaan.

Symmetrinen venytys poikkeaa muista värähtelyistä siinä, että sen aikana molekyylin dipolimomentti ei muutu. Hiilidioksidilla tämä perussiirtymä on IR-inaktiivinen, mikä tarkoittaa, ettei se näy infrapunaspektrissä. Molekyylin värähtelyt liittyvät sen symmetriaan siten, että jokainen normaalimalli on joko symmetrinen tai antisymmetrinen molekyylin kaikkien symmetriaoperaatioiden suhteen. (87, s.172)



KUVA 15 b) Vesimolekyylin värähtelyt. (87, s.172 ja 89, s.18-6)

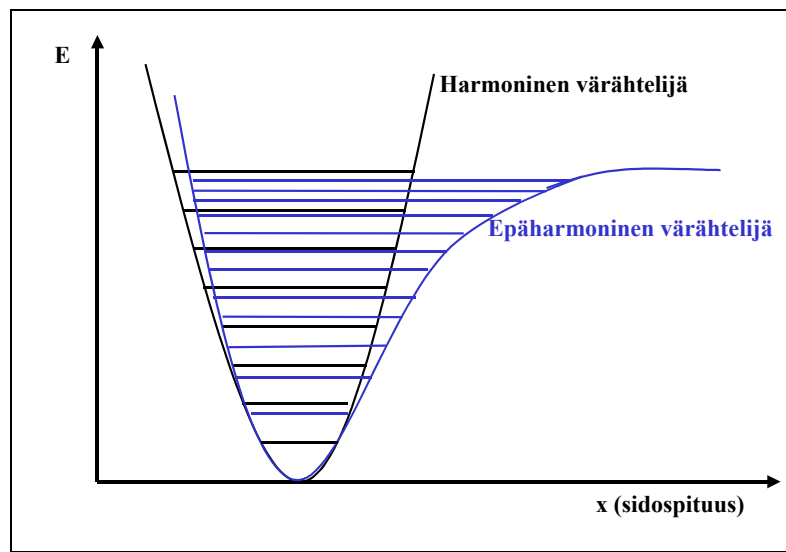
Taipuneen H₂O-molekyylin värähdysvapausasteiden lukumäärä on 3, joka on sama kuin molekyylin normaalimoodien luku. Kaikki vesimolekyylin värähtelyt ovat IR-aktiivisia, joten ne näkyvät kokeellisessa IR-spektrissä. Värähtelyistä kaksi on venytyksiä, toinen symmetrinen ja toinen antisymmetrinen ja yksi taivutus, joka on degeneroitumaton.

VI.3.3.5 Molekyylin harmonisena värähtelijänä

Atomien värähtelyjä voidaan karkeasti havainnollistaa jousimallin avulla, jossa atomit ovat liittyneet toisiinsa kimmoisien jousien välityksellä. Tällaista systeemiä kutsutaan harmoniseksi värähtelijäksi. Harmonisen värähtelijän malli muodostaa pohjan molekyylin värähtelyliikkeen tarkastelulle. Myös HyperChem käyttää sitä laskuissaan.

Oikeat molekyylit eivät kuitenkaan noudata harmonisen värähtelijän mallia. Se havaitaan helposti tutkimalla jonkin todellisen molekyylin spektriä. Harmonisen värähtelijän approksimaation mukaan esim. perustilassa olevan molekyylin absorptiospektrissä havaitaan vain yksi siirtymä kutakin IR-aktiivista värähdystä kohden. Todellisissa spektreissä havaitaan kuitenkin tämän perussiirtymän lisäksi paljon muitakin, intensiteetiltään heikkeneviä viivoja. Nämä vastaavat siirtymiä $\Delta v = +2, +3, \dots$ ja ovat ylisiirtymiin liittyviä viivoja. Toinen ero todellisuuden ja teorian välillä liittyy myös viivojen määrään. Harmonisen värähtelijän mallin mukaan

yhdisteellä olisi ääretön määrä värähtelytasoja joiden energiaero pysyy vakiona. Todellisuudessa kuitenkin yhdisteellä on rajallinen määrä värähtelytasoja (esim. vedyllä on 14 energiatasoa ennen kuin se dissosioituu) ja energiatasojen ero pienenee värähdyskvanttiluvun kasvaessa. Harmonisen värähtelijän approksimaatio antaaakin hyviä tuloksia ainoastaan siirtymille, joilla Δv on pieni. Koska värähdyssiirtymissä tutkitaan ainoastaan ensimmäistä siirtymä tilalta 0 tilalle 1, on harmonisen värähtelijän approksimaatio tällöin riittävä. Harmonisen ja epäharmonisen värähtelijän potentiaalienergiakäyrät on esitetty kuvassa 16. (82,89,87, s.165)



KUVA 16 . Harmonisen ja epäharmonisen värähtelijän ero

VII Johtopäätökset ja pohdintaa

Tämän tutkielman päätavoitteena on selvittää tietokoneavusteisen molekyylimallituksen käyttömahdollisuuksia lukion kemian opetuksessa. Teoreettisen tarkastelun lisäksi on tuotettu lukion kemian opetukseen soveltuva WWW-pohjainen laskennallisen kemian oppimisympäristö. Julkaisukanavaksi on valittu Internet sen globaalin luonteen vuoksi. Internetiä hyödyntäen materiaali saadaan tasavertaisesti kaikkien halukkaiden ulottuville.

"Laskennallisen Kemian Tutkimustoriksi" nimetty oppimisympäristö tukee hyvin nykyistä konstruktivistista oppimiskäsitystä, joka korostaa oppimista aktiivisena kokemukseen perustavana prosessina. Tutkimustoria suunniteltaessa on otettu huomioon sekä nykyinen (40) että 1.8.2005 voimaan tuleva (41) lukion kemian opetussuunnitelma, jossa on erityisesti tuotu esiin tietokoneen hyödyntäminen mallien luomisessa. Lisäksi on pyritty hyödyntämään olemassa olevaa tietoa WWW-pohjaisesta opetus- ja oppimisympäristöistä, tietokoneavusteisen opetuksen positiivisista vaikutuksista oppimistuloksiin sekä tietokoneavusteisten mallien eduista muihin malleihin verrattuna (1,3,10,13,15-19). Tutkielmassa on perehdytty myös niihin kemian ilmiöihin, teorioihin ja laskumenetelmiin, jotka liittyvät oleellisesti tutkimustorin tehtäviin. Tutkielman tarkoituksena on muun muassa edesauttaa laskennallisen kemian hyödyntämistä ja soveltamista lukioden kemian opetuksessa.

Tutkimustorin tehtävissä yhdistyvät perinteinen laboratoriotyöskentely ja tietokoneavusteinen molekyylimallitus lukion kemian opetuksen kannalta uudella tavalla. Molekyylimallitus on noussut viime vuosina yhdeksi merkittävimmistä kemian menetelmistä (3) ja nyt on tullut ajankohtaiseksi ottaa se mukaan myös kemian opetukseen. Molekyylimallitustehtävien avulla tuodaan uudenlainen lähestymistapa kemiallisiin ilmiöihin. Molekyylimallitus on havainnollistava tapa kuvata muun muassa molekyylien rakenteita, ominaisuuksia, reaktioita ja molekyylien liikettä. Tutkimustori sisältää viisi molekyylimallitustehtävää, kaksi laboratoriossa suoritettavaa oppilastyötä sekä yhden demonstraation. Tutkimustorin sisältö on suunniteltu huolellisesti ja harkitusti. Tämä näkyy muun muassa tehtävien rakenteessa ja laskumenetelmien valinnassa. Opettajia ei ole koulutettu

tietokoneavusteisen opetuksen ja virtuaalimallien käyttöön, minkä vuoksi tehtävät on ohjeistettu yksityiskohtaisesti niin, ettei aikaa kulu liialti tietokoneen ja mallitusohjelman käytön opetteluun opetustapahtumassa.

Tutkimustorin käyttöliittymä on pyritty suunnittelemaan intuitiiviseksi, helpoksi ja selkeäksi, jolloin sivujen käytön kynnykseksi ei nouse opiskelijan tietotekniikan taidot ja ohjelmaa pystytään käyttämään ilman ohjaajan jatkuvaa läsnäoloa. Oleellisena seikkana on pidetty, että opiskelijan huomio keskittyy opittavaan asiaan, eikä siihen mitä nappia kulloinkin täytyy painaa. Ohjelmavalinnassa on korostettu käytön yksinkertaisuuden ja kustannusten lisäksi kemian tutkimuksessa sovellettavan ohjelman käyttöä myös opetuksessa. Tämän vuoksi tehtävät on tuotettu HyperChem -molekyylihallitusohjelmalla. Näin opiskelijalle tarjoutuu mahdollisuus tutustua erääseen nykyajan moderniin ja tärkeään mallitusohjelmaan. Myös molekyylihallituksessa käytetyt menetelmät on valittu harkiten. Laskumenetelmät ovat nopeita, jolloin aikaa ei tuhlaannu odottelemiseen ja opiskelijalle jää aikaa keskittyä oleelliseen eli kemiallisen ilmiön ymmärtämiseen.

Tutkimukset ovat osoittaneet, että parhaimpiin oppimistuloksiin päästään käyttämällä perinteisiä konkreettisia malleja tietokonemallien ohella (15). Jotta opetustilanne olisi mahdollisimman hyödyllinen oppilaan ymmärtämisen kannalta, olisi konkreettisten muovimallien käyttö suositeltavaa tietokonemallien rinnalla. Näin oppilaalle luodaan mahdollisuus tutkia molekyylimalleja myös käsin kosketeltavassa muodossa. Samalla oppilaan on helpompi ymmärtää, että täysin samaa asiaa voidaan esittää monin eri tavoin ja hänen käsityksensä molekyyleistä tai malleista ei jää pelkistetyksi. Virtuaalisten molekyylihallitusmallien etuja jäykkiin muovisiin molekyylihallitukseen verrattuna on monia. Niiden avulla on mahdollisuus rakentaa ja hahmottaa nopeasti erilaisia molekyyliä, tarkastella molekyyliä kolmiulotteisesti eri mallityypeillä ja niiden avulla voidaan auttaa ymmärtämään mm. molekyylien rakennetta, konformaatioita, stereokemiaa, reaktiivisuutta sekä kemiallisia reaktioita. Virtuaalimallit tarjoavat myös mahdollisuuden molekyylin energiaminimointiin, jolloin havainnollistetaan molekyylin stabiilisuutta ja sen olotilan muuttumismahdollisuuksia.(1)

Tutkimustorin tehtävät voidaan suorittaa vapaassa järjestyksessä. Tehtävät on kuitenkin suunniteltu niin, että ne tukevat toisiaan tehokkaimmin, silloin kuin ne suoritetaan numerojärjestyksessä. Opettajan kannattaakin perehtyä materiaaliin huolellisesti ja harkita tarkoin tehtävien uusi suoritusjärjestys, mikäli se poikkeaa suosituksesta. Ensimmäisissä tehtävissä harjoitellaan molekyylihallitusohjelman käyttöä ja esimerkiksi tehtävässä kahdeksan (molekyylihallitustehtävä) etsitään syytä tehtävässä seitsemän (laboratoriotyö) havaitulle kemialliselle ilmiölle. Vaikka tehtävät on suunniteltu lukion opetuskäyttöön, voidaan niitä soveltaa myös yläkoulun kemian opetuksessa. Tällöin opettajan tulisi kuitenkin varmistaa, että oppilaiden kemian tietämys on riittävä tehtävien ilmiöiden ymmärtämiseen.

Tutkielman päätavoitteena oli tuottaa materiaalia lukion kemian opetukseen. Materiaalia ei ole testattu autenttisessa opetusympäristössä. Projektin luonnollinen jatko olisikin materiaalin soveltaminen osana lukion kemian opetusta ja palautteen kerääminen sekä opetusmateriaalin jatkokehitys arvioinnin avulla. Ennen testausta olisi kuitenkin hyvä suorittaa taustatietotutkimus jonka avulla kartoitettaisiin oppilaiden ja opettajien taitoja ja ennakoasenteita aiheeseen liittyen. Kun materiaali on testattu ja kehitetty eteenpäin saatujen tulosten turvin voidaan mallitus ottaa osaksi lukio-opetusta ja opettajien täydennyskoulutusta. Tulevien opettajien koulutuksessa on jo otettu ensimmäinen askel molekyylihallituksen tuomiseksi kouluihin, sillä vuonna 2002 on aloitettu Helsingin yliopiston kemian laitoksella ensimmäinen opettajaopiskelijoille suunnattu molekyylihallituskurssi. Samaan aikaan voitaisiin aloittaa vastaavan materiaalin tuottaminen erityisesti yläkoulun kemian opetukseen soveltuvaksi. Materiaalin tulisi ottaa huomioon yläkoulun oppilaiden tietämys kemiasta sekä tukea laajenevaa kemian opiskelua.

VIII Kirjallisuus

1. Aksela, M. & Lahtela-Kakkonen, M., *Molekyylitason teknologiaa opetukseen*, Kemia-Kemi 28(3) (2001) s.200-203.
2. *Helsingin yliopiston kemian laitoksen Tutkimusstrategia 2001*, http://www.chemistry.helsinki.fi/hallinto/strategiat/laitosstrategia_2004-2006 (luettu 21.1.2004).
3. Barak, M., Dori, Y. *Computerized Molecular Modeling as a Collaborative Learning Environment*. 2001, <http://kn.cilt.org> (luettu 12.09.2003).
4. Nyrönen, T. Tietoyhteys 4(2) (2000) s. 16.
5. Pihlajaniemi, T. Tietoyhteys 4(2) (2000) s. 4.
6. Pihlajaniemi, T. Tietoyhteys 4(5) (2000) s. 8.
7. Juffer, A. Tietoyhteys 4(2) (2000) s. 20.
8. Nieminen, P. Tietoyhteys 4(2) (2000) s. 23.
9. Haataja, J. Tietoyhteys 4(5) (2000) s. 13.
10. Aksela, M. & Lahtela-Kakkonen, M. *Laskennallisen kemian mahdollisuuksia*, Dimensio 2 (2001) s. 34.
11. *Suurteholaskennan toimenpideohjelma 1997-2001*, <http://www.csc.fi/raportit/Suurteholaskenta.html> (luettu 12.09.2003).
12. *Developing Models in Science Education*. J. K. Gilbert, C. S. Boulter (Eds.), Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2000.
13. Barnea, N. & Dori, Y.J. J. *Computerized Molecular Modeling as a Tool To Improve Chemistry Teachings*. Chem. Inf. Comput. Sci. 36 (1996) s. 629-636.
14. Meisalo, V., Sutinen, E., & Tarhio, J. *Modernit oppimisympäristöt, tietotekniikan käyttö opetuksen ja oppimisen tukena*, Helsinki, Tietosanoma, 2000.
15. Dori, Y. J., & Barak, M. *Virtual and Physical Molecular Modeling: Fostering Model Perception and Spatial Understanding*. Educational Technology & Society 4(1) (2001).
16. Gilbert, J., luento: "Models and Modelling in Science Education", Helsingin yliopisto, kemian laitos. 29.10.2001.
17. Nakhleh, M. B., *Why Some Students Don't Learn Chemistry, Chemical Misconceptions*, Purdue University, West Lafayette, IN 47907, 69(3) (1992).

18. Aksela M. & Meisalo V., *School chemistry in inspiring ways: A web-based investigative environment for interactive chemistry education*, 6th ECRICE proceedings book 2001, Portugal.
19. Hsin-kai Wu, Joseph S. Krajcik & Elliot Soloway, *Promoting Conceptual Understanding of Chemical Representations: Students Use of a Visualisation Tool in the Classroom*, *Journal of Research in Science Teaching*, 38(2000), s. 821-842.
20. Lundell, J., *Tietoyhteys 2*, (2003) s. 23-24.
21. *Koulutuksen ja tutkimuksen tietostrategia*,
http://www.minedu.fi/toim/koul_tutk_tietostrat/welcome.html (luettu 27.02.2002).
22. *Tytöt, pojat ja verkko-oppimisympäristöt*,
<http://www.cs.uta.fi/ipopp/www/ipopp2001/haka/sis.htm> (luettu 12.09.2003).
23. *Virtuaalikoulu ja Internet*,
<http://www.kangasala.inforengas.net/amaenpaa/varis.htm> (luettu 12.09.2003).
24. *FYKE-virtuaalikoulu*,
<http://www.malux.edu.helsinki.fi/malu/koulutus/virtuaalikoulu/> (luettu 12.09.2003).
25. *Kemia tänään projektista*,
http://www.chemind.fi/kemianteollisuus/tietotori/yhteistyohankkeet/kemia_tanaan/ (luettu 10.03.2002).
26. *LUMA- projektista*, <http://www.edu.fi/projektit/luma/> (luettu 12.09.2003).
27. Lavonen, J. & Meisalo, V., *Luonnontieteiden opetuksen kokeellisuus ja mittausautomaatio*, 1997.
28. Lavonen, J., Meisalo, V. & Lähdeniemi, T. *LUONTI - Luonnontieteiden opetuksen teknologiset innovaatiot -projekti, Lukuvuosi 1995-96*, Projektikertomus, Helsinki, 1996.
29. *Virtuaalikoulu*,
<http://www.malux.edu.helsinki.fi/malu/tutkimus/luontiplus/main.htm> (luettu 10.03.2002).
30. *Virtuaaliyliopiston matemaattisten aineiden opettajien pedagoginen koulutus*,
<http://www.malux.edu.helsinki.fi/malu/koulutus/virmat/main.htm> (luettu 12.09.2003).

31. *Pythagoras projekti*, <http://www.kas.utu.fi/projects/pythagoras/> (luettu: 26.02.2002).
32. *Laskennallista kemiaa kouluihin -projektista*, <http://www.physics.helsinki.fi/~lundell/compchem/> (luettu 12.09.2003).
33. Lehtinen, E. *Verkkopedagogiikka*, Oy Edita Ab, 1997.
34. Aksela M. ja Juvonen R., *Kemian Opetus Tänään -tutkimus*, Opetushallitus, Edita, Helsinki, 1999.
35. Loimaranta O. *Tietoyhteys* 4(5) (2000) s. 8.
36. Lehväslaiho, H. *Tietoyhteys* 4(2) (2000) s. 22.
37. Jukka, L. *Tietoyhteys* 4(2) (2000) s. 8.
38. Turunen, A. *Tietoyhteys* 4(5) (2000) s. 18.
39. Heikkinen, E. & Mattila, K. *Bio-opas 2000* www.csc.fi/oppaat/bio/bioopas.pdf (luettu 01.02.2002).
40. Opetushallitus. *Lukion opetussuunnitelman perusteet*. Painatuskeskus, Helsinki, 1994.
41. *Opetussuunnitelman uudistustyöstä*, <http://www.oph.fi/ops/valmistelu/lukio-opetus/> (luettu 12.2.2002).
42. Leino, J. *Tietokone opetuksen kehittämisessä I. Tutkimus opettajien perehdyttämisestä tietokoneiden käyttöön*, Helsingin Yliopisto, Kasvatustieteen laitos, Tutkimuksia 112, 1987.
43. Leino, J. *Tietokone opetuksen kehittämisessä 3. Tietokone oppilaiden opiskeluvälineeksi*, Helsingin Yliopisto, Kasvatustieteen laitos, Tutkimuksia 118, 1988.
44. Lehtinen, J. *Tietokone opetusvälineenä*, Valtion koulutuskeskus-valtion painatuskeskus, julkaisusarja B No. 38, 1985.
45. Leino, J. *Tietokone opetuksen kehittämisessä 2. Tutkimus Tietokoneen didaktisen käytön sisäistämiprozessista*, Helsingin Yliopisto, Kasvatustieteenlaitos, Tutkimuksia 114, 1987.
46. Laitinen, A. *Tietokoneavusteinen opetus*. Helsinki: ATK- instituutti. Valtion painatuskeskus, 1988.
47. Becker, H., *A Model for Improving Performance of Integrated Learning Systems: Mixed Individualized/Group/Whole Class Lessons, Cooperative Learning, and Organizing Time for Teacherled Remediation of Small Groups*, *Educational Technology*, XXXI (8), 1992, s. 44-48.

48. Duffy, T. & Jonassen, D., *Constructivism and the technology of instruction: A conversation*, Hillsdale, NJ: Lawrence Erlbaum Associates, 1992.
49. Savery, J. & Duffy, T., *Problem Based Learning: An Instructional Model and Its Constructivist Framework*, Ed. Tech. 9-10, 1995, s. 31–37.
50. Kallonen-Rönkkö, M. *Tietokoneavusteinen opetus ala-asteen oppimisympäristön. Osa I Tietokoneavusteisen opetuksen kehitys ja kokeilut*. Oulun yliopiston Kajaanin opettajankoulutuslaitoksen julkaisuja. Sarja A: Tutkimuksia 3, 1993.
51. Kallonen-Rönkkö, M. *Tietokoneavusteinen opetus ala-asteen oppimisympäristön. Osa II Tietokoneavusteiset opetusohjelmat*. Oulun yliopiston Kajaanin opettajankoulutuslaitoksen julkaisuja. Sarja A: Tutkimuksia 4, 1994.
52. Tella, S., *Verkko-opetuksen lähtökohtia ja perusteita*, <http://www.edu.helsinki.fi/media/trio/loppuraportti/Tella.pdf> (luettu 04.03.2002).
53. Opetushallitus. *Lukion opetussuunnitelman perusteet 2003*. <http://www.oph.fi> (luettu 29.09.2003).
54. Tella, S., *Tietokoneperustaisesta opetuksesta verkostopohjaiseen oppimiseen*. Aikuiskasvatus 4, 1997, s. 258-266.
55. Lehtinen, E., *Verkkopedagogiikka: Verkostuva viestintä- ja tiedonhallintaympäristö opiskelun tukena*, Oy Edita Ab, 1997, s. 41-59.
56. Lintula A., *Vuorovaikutusta verkkoympäristössä. (Interaction in a Network Environment.)* Kasvatus 30 (3), 1999, s.240–253.
57. Vahtivuori S., *Kohti yhteisöllisen ja kokemuksellisen verkko-opetuksen suunnittelua - käyttäjät suunnittelun polttopisteessä* <http://www.edu.helsinki.fi/media/trio/loppuraportti/Vahtivuori.pdf> (luettu 26.02.2002).
58. Khan, B.H., *Web-based Instruction*, Educational Technology Publications, USA, 1997, s.5.
59. Ackermann, E. *Direct and Mediated Experience: Their Role in Learning*. Teoksessa (toim.) Lewis, R. & Mendelsohn, P. *Lessons from Learning*. Amsterdam: North Holland, 1994.
60. Jonassen, D. & Reeves, T., *Learning with Technology: Using Computers as Cognitive Tools*, In Jonassen, D. (ed.) *Handbook on Research for Educational*

- Communications and Technology. New York: Simon & Schuster Macmillan, 1996, s. 693–719.
61. Tella, S. & Mononen-Aaltonen, M., *Developing Dialogic Communication Culture in Media Education: Integrating Dialogism and Technology*. University of Helsinki. Department of Teacher Education. Media Education Centre. Media Education Publications 7. <http://www.helsinki.fi/~tella/mep7.html>, 1998.
 62. Tella, S. *Mediakasvatus – aikamme arvoinen. (Media education for our times.)* Kasvatus 30 (3), 1999, s. 205–221.
 63. Väisänen, L. *Erityisopettajien tietokoneen opetuskäytön omaksuminen: Innovaation toteutumiseen liittyvän muutosprosessin kuvaus*, Helsingin kaupungin opetusviraston julkaisusarja B8, 1997.
 64. Lehtinen, E., *Verkkopedagogiikka: Miltä näyttää www-maailma oppimisympäristönä*, Oy Edita Ab, 1997, s. 101-111.
 65. Kozma & Jonassen, D. H.: "*Constructing Knowledge with Learning Tool*". *Cognitive Tools for Learning*, ed. Kommers, P. A. M., Jonassen, D., H., Mayes, J. T., NATO ASI Series, vol. 81, Berlin, Springer-Verlag, Berlin, 1992.
 66. Varjola, I., *Internetin käyttö kemian opiskelussa: Neljä tapaustutkimusta peruskoulussa ja lukiossa*, liseniaattitutkielma, tiivistelmä, Helsingin Yliopisto kemian laitos, 2000.
 67. Chiou, G., *Situated Learning, Metaphors and Computer-based Learning Environments*, Educational Technology, XXXII(8), 1992, s. 7-11.
 68. Lehtinen, E., *Verkkopedagogiikka*, Edita, 1997.
 69. Sahlberg P. & Sharan S. *Yhteistoiminnallisen oppimisen käsikirja*, WSOY, 2002.
 70. Hans Christian von Baeyer, *Kesyttetty Atomi*, suomentanut: K. Pietiläinen, Art House 1993, s. 11-73.
 71. John Hudson, *Suurin Tiede Kemian Historia*, suomentanut: K. Pietiläinen, Art House 1995.
 72. Saari, H. & Viiri, J., *Kokeellisuus ja mallintaminen luonnontieteissä*, Hakapaino, 1998.
 73. *Bohrin elämäkerta*, <http://www-groups.dcs.st-and.ac.uk/~history> (luettu 12.09.2003).

74. Arvonen A., Erätuuli M., Hella A., Kalkku I., Makkonen J., Mustonen L. & Näsäkkälä E., *Koulun Kemia 8 opettajanopas*, 1.-2.painos, Otava 1987, s.13.
75. Lahtela-Kakkonen M., *Kemian Nobel-palkinto*,
<http://www.csc.fi/lehdet/atcsc/atcsc5-98/maiija2.html> (luettu 12.09.2003).
76. Goodman, J. M. *Chemical Applications of molecular modeling*, The Royal Society of Chemistry, Redwood Books 2, Trowbridge, UK, 1998.
77. *Fysikaalisen kemian kurssit*, <http://www.chem.jyu.fi/physchem/kurssit> (luettu 13.09.2003).
78. Tanaka, Y., Ohtom, N. & Arakawa, K. Bulletin of the Chemical Society of Japan. *The Structure of liquid alcohols by neutron diffraction. II. Molecular structure of ethyl alcohol*. Res. Inst. Appl. Electr., Hokkaido Univ., Sapporo, Japan. 1984, 57(9), 2569-73.
79. Dewar, M. J. S., Jie, C. & Yu, J., *The First of New Series of General Purpose Quantum Mechanical Molecular Models*, Tetrahedron 49, 1993, 5003-38.
80. Atkins, P. W. *Physical Chemistry*, 6. painos, Oxford University Press, 1998.
81. *Johdatus atomistisiin simulointeihin -kurssi 1999*,
<http://beam.helsinki.fi/~knordlun/atomistiset/index99.html> (luettu 12.09.2003).
82. Hollas, J.M. *Modern Spectroscopy*, 3. painos, Wiley, Bath, 1996.
83. Young, D. *Computational Chemistry*. Wiley, John & Sons, Incorporated, 2001.
84. *HyperChem, Computational Chemistry: Practical Guide and Theory and Methods*, Hypercube, Inc. 1996.
85. *Johdatus atomistisiin simulaatioihin*,
<http://beam.helsinki.fi/~knordlun/atomistiset/index99.html> (luettu 12.09.2003).
86. Koponen, J. & Mattila K., Tietoyhteys. No.3, 2003, s. 20.
87. Kalliorinne K., Kankaanperä A., Kivinen A. & Liukkonen S., *Fysikaalinen Kemia I: Kvanttikemia ja Spektroskopia*, Kirjayhtymä, Rauma 1988, s. 142, 155.
88. *Maol-taulukot*, Otava, Keuruu, 1993.
89. Murto J., *Spektroskopia*, Helsingin yliopiston fysikaalisen kemian laboratorion monisteita, No. 18. 1987.

IX Liitteet

Cd-rom: Laskennallisen Kemian Tutkimustori