

Molekyyylimallinnus ja kokeellisuus

**Helsingfors Universitet
Kemilärarytbildningsenheten**

Opiskelija 1
Opiskelija 2
Opiskelija 3
Opiskelija 4

Sisällysluettelo

1 Inledning.....	3
2 Elevers uppfattning om löslighet enligt forskningar.....	3
3 Datorstödd molekylmodellering.....	5
3.1 Datorstödd molekylmodellering i kemiundervisningen.....	5
4 OPS kytKentä.....	6
5 Liukoisuuden mallinnusta tietokoneella yläkouluun.....	7
5.1 Spartan tutuksi.....	7
5.1.1 Aloittaminen.....	7
5.1.2 Taustaväri.....	8
5.1.3 Molekyylin luominen.....	9
5.1.4 Molekyylin liikuttelu ja koon muuttaminen.....	10
5.1.5 Molekyylin tarkastelu eri malleilla.....	11
5.1.6 Molekyylin tasapainotilan laskeminen.....	12
5.1.7 Sidospituus ja -kulma.....	12
5.1.8 Elektronipinnan määrittäminen.....	14
6 Liukeneeko?.....	16
6.1 Virittäytyminen.....	16
6.1.1 Mallinnus Veden elektronipinta	16
6.1.2 Tutkimus Vesi ja etanoli.....	17
6.1.3 Mallinnus Mallinnetaan ruudulle vesi ja etanoli.....	17
6.1.4 Tutkimus Liukeneeko etanoli veteen?.....	17
6.1.5 Mallinnus Liukeneeko etanoli veteen?.....	18
6.2 Tutkimus Bensiini ja vesi.....	18
6.2.1 Mallinnus Bensiini ja vesi.....	19
6.3 Tutkimus Heksaani ja bensiini.....	20
6.3.1 Mallinnus Heksaani ja bensiini.....	20
6.4 Mallinnus Vesi ja oktanoli.....	20
6.4.1 Tutkimus Vesi ja oktanoli.....	20
7 Tutki elektronipintojen avulla!.....	21
8 Ota selvää!.....	21
9 Johtopäätökset ja pohdinta.....	21

1 Inledning

Laborativ kemi är en självklar del av kemiundervisningen i Finland. I vilken mån laborationer och experimentellhet utnyttjas i de finländska skolorna beror långt på skolans resurser då det gäller utrymmen och material. Enligt Aksela (2005) får experimentet dock inte vara ett trick, utan experimentet bör ha en mening, ett syfte, ett mål. För att bättre nå dessa mål och syftet förs här experimentellheten ett steg vidare genom att koppla samman det laborativa experimentet med datorstödd molekylmodellering.

Datorer kan användas på många sätt i kemiundervisningen, men speciellt datorstödd molekylmodellering har fått ett speciellt fotfäste i Finland. Ämnet har forskats i både den finländska kemiundervisningen och kemilärarutbildningen sedan 2000-talets början (bl.a. Aksela & Lahtela-Kakkonen, 2001; Lundell & Aksela, 2003; Lundell & Aksela, 2007 och Meisalo *et al.*, 2007).

Syftet med detta projekt är att presentera ett sätt på vilket man kan koppla samman det laborativa arbetet med datorstödd molekylmodellering.

2 Elevers uppfattning om löslighet enligt forskningar.

Prieto *et al.* (1989) utförde i Spanien en undersökning bland 11-14-åringar, om deras uppfattning om löslighet och ämnens lösningar. Forskarna konstaterade att elevernas uppfattning baserar sig på deras vardagserfarenheter och endast marginellt på den undervisning de fått. Därför var de exempel som togs upp bland elever begränsade till speciella fasta ämnen som löses upp i vätskor. Vidare visade det sig att studerande riktade sin uppmärksamhet mot det lösta ämnet och antog att själva lösningsmedlet hade en passiv roll. Det var mycket liten skillnad i terminologin som beskriver löslighet mellan sjätte och åttonde klassister. Vetenskapliga termer som används i böcker fanns inte med i studerandenas vokabulär. Först i slutet av den omtalade studieperioden visar sig begreppet löslighet komma med i studerandes studier och idéer. I många fall uppfattade eleverna mekaniska aktiviteter (s.a.s. omrörning, skakning och uppvärmning) som avgörande för ämnens löslighet.

I Turkiet utfördes en forskning bland elever i ålder 14-15 år (Kabapinar *et al.*, 2004) med inriktning på begreppet löslighet. Målet med undersökningen var att utreda inverkan på studerandes förståelse av löslighet genom att introducera en enkel partikel modell i ämnet.

Tre principer genomsyrar utformningen av undervisningsmetoden.

Den första principen relaterar till att ha god inblick i de fördelar som andra forskningsresultat givit om undervisning och inläring av begreppet löslighet (Lijnse *et al.*, 1990 och Méheut, 1998).

Den andra principen tar ett konstruktivistisk perspektiv. Eleverna introduceras att tänka och diskutera i nya banor omkring den naturliga världen. Vygotskys (1987) har en föreställning om hur elevens nuvarande kunskap växelverkar med ny kunskap som erhålles på det sociala planet i klassrummet. Det tredje perspektivet granskar skillnaden mellan vardagens sociala språk bland studerande och språket som används inom skolvetenskapen.

I undersökningen hade man två grupper av elever som jämfördes. Den ena gruppen undervisades enligt den designade metoden de andra på traditionellt vis.

Då man i forskningsresultatet reflekterar över inverkan på elevernas inläring enligt den designade metoden jämfört med elever som fått en så kallad "typisk" undervisning kunde man dra vissa slutsatser men dock inga betydande skillnader.

Summering av resultaten:

- Det är möjligt att utveckla en undervisningsmetod som introducerar en enkel partikel modell av ämnen på ett sätt så att eleverna kan förstå begreppet löslighet och förklara det.
- Eleverna som deltog i den specialdesignade undervisningen kunde bättre förklara processen om upplösning av ämnen än den andra gruppen. De klarade också bättre av att förklara skillnaden mellan smältning och upplösning.
- Ingen större skillnad mellan grupperna kunde märkas då det gällde bevarande av massa vid upplösning av ämnen.
- Det finns några bevis på att behållningen av vissa idéer hos studerandena kan leda till att undervisningsmodellen används i fortsättningen.

På frågan om vi kan säga att undervisningsmetoden designad med enkel partikel modell är bättre än den ”typiska” undervisningen kan vi konstatera följande:

Man bör till först konstatera att undervisning kan klassificeras som ”bättre” bara då man jämför innehåll med explicita mål. I denna forskning var ett mål att undervisningen med den alternativa metoden inte fick ta längre tid än med den traditionella metoden, så att studierna inte skulle bli ofördelaktiga med tanke på de tester som används i Turkiet.

Problemlösning och utvecklande forskning kunde inte användas då undervisningen designades och genomfördes, på grund av de praktiska restriktionerna (Lijnse, 1995 och Lijnse, 2000).

Kelly (2008) utförde en forskning på hurdan förmåga att överföra det begreppsliga förståendet till nya situationer är bland studerande som erhållit kunskapen genom att se animationer av molekylreaktioner. Ett område som det än så länge har gjorts endast lite forskning om. Forskningen utfördes bland 18 elever som läste allmän kemi på andra stadiet av sin utbildning.

Denna studie utreder hur studerande som hade sett videoanimation på molekylnivå om natriumkloridens upplösning i vatten hade förmåga att överföra sin kunskap om saltets upplösning då de en vecka senare skulle beskriva hur en vattenlösning av natriumklorid som reaktant reagerar med silverklorid och bildar en fällning.

I den första fasen av undersökningen såg studerande animationer om natriumkloridens upplösning och därefter gjordes en hands-on aktivitet om samma händelse. Därefter ritade och berättade studerande om sin egen uppfattning de fått om fenomenet. Det visade sig vid analys av de bilder studerande åstadkommit i sina förklaringar, att de innehöll kännetecknen från animationen. De ritade vattenmolekylerna runt de dissocierade saltjonerna.

Denna studie fokuserar på den andra fasen i forskningen, då eleverna kommer en vecka efter första fasen och ser en video som demonstrerar en fällningsreaktion på makroskopisk nivå.

Den egentliga forskningsfrågan lyder alltså: vilka egenskaper av sina förklaringar om natriumkloridens upplösning kan eleverna överföra i sin förklaring om fällningsreaktionen de ser på en video där natriumklorid är ena reaktantlösningen.

I detta fall misslyckades alla i testgruppen att illustrera vattnets hydratisering runt saltjonerna. Studerandena kunde inte bekräfta det faktum att natriumkloriden var upplöst i vattnet. Forskarna förde flera diskussioner med studerandena och först då de hänvisade till den första animationen med upplösning av saltet natriumklorid och berättade att just denna lösning var reaktant i fällningsreaktionen med silverklorid ändrade studerande på sin syn på sina förklaringar till denna fällningsreaktion.

Slutledningen i forskningen är att studerande lär sig innefatta vissa egenskaper de ser i en animation och de godkänner den i sin egen förklaring, men slutligen har de svårigheter med att överföra förståendet i nya situationer. Då studerandes tankar diskuterades djupare kunde de beskriva den första studien men alltså inte koppla ihop natriumkloridlösningen med fällningsreaktionen.

Slutsatsen är alltså att elever behöver ofta återkommande bekräftelse på vetenskapliga termer. Eleverna behöver också hjälp med att koppla samman begrepp som de kan med ny kunskap de erhåller. Då animationer används i klassrum kan läraren hjälpa eleven att processera den nya informationen med att ge exempel på meningsfyllda samband i andra kemiska system.

3 Datorstödd molekyllmodellering

Användning av datorer i kemiundervisningen är inget nytt fenomen. I kemiundervisningen har datorer använts sedan 1950-talet (Aksela, 2005). I dagens läge är datorerna oersättliga hjälpmedel i undervisning och forskning av naturvetenskaper. Datateknik används till bland annat simuleringar, modelleringsprogram, mättingsautomatik, ordbehandlings- och multimedieproduktions program, samt informationssökning, kommunikation via elektronisk post och publicering via Internet (Webb 2005).

3.1 Datorstödd molekyllmodellering i kemiundervisningen

Molekyllmodellering och beräkningskemi med hjälp av datorn är en del av vardagen för en kemist, men vilken nytta har vi av molekyllmodelleringen i kemiundervisningen?

Kemiska fenomen kan betraktas på tre till varandra förknippade nivåer: mikro-, makro- och symboliska nivåer (Gabel, 1999). Enligt Aksela (2005) kan eleverna ofta förklara gjorda observationer på makronivå med hjälp av symboler, trots att de inte nödvändigtvis förstår dessa observationer på mikronivå. Lärarens roll är central under laborativa arbeten för att eleverna skall lära sig och inte endast utföra arbetet manuellt. Enligt Barton (2004) bör läraren stöda eleverna så att de uppnår den förståelse som förväntas och så att eleverna kopplar ihop fenomenet de observerat på makronivå med kemin på mikronivå. Datorstödd molekyllmodellering, ihopkopplat med det laborativa arbetet, kunde tänkas vara en arbetsmetod som stöder detta.

Enligt Justi & Gilbert (2002) ger datorstödd molekyllmodellering möjligheten att öka elevernas förståelse för kemin och dess modeller, samt att öka elevernas förmåga att själva konstruera sina kemiska modeller. Justi & Gilbert (2002) menar vidare att kemiska modeller och molekyllmodellering hjälper eleverna att kritiskt ta ställning till kemirelaterade diskussioner, samt förstå kemins natur och olika teman inom kemin. En annan undersökning (Ealy, 1999) visar att molekyllmodelleringen ger möjlighet till förstärkta visuella analyser hos elever.

Den datorstödda molekyllmodelleringen har även andra fördelar. En färsk undersökning (Jääskeläinen 2008) visar att grundskoleelever på de högre klasserna uppfattar användningen av datorstödd molekyllmodellering som intressant. Det är alltså motiverat att lärarna, för att öka elevernas intressenivå, åtminstone borde överväga att utöka användningen av datorstödd molekyllmodellering som en arbetsmetod i grundskolan.

Trots många fördelar, så har den datorstödda molekyllmodelleringen även sina utmaningar. En aspekt är dess distraherande verkan. Undervisningens egentliga syfte förbises lätt vid användning av tekniska hjälpmedel i undervisningen (Barton 2004). Därför får datorstödda inlärningsmetoder inte vara det enda sättet på vilka naturvetenskaperna undervisas utan i stället ett komplement till den traditionella undervisningen (Wellington 2004).

En annan utmaning är lärarnas osäkerhet och bristfälliga kunskap. Användningen av datorer i kemiundervisningen har varit ett önskat ämne för fortbildningen av kemilärare de senaste tio åren i Finland (Aksela & Karjalainen, 2008; Aksela & Juvonen, 1999).

Man har valt att angripa detta problem genom att utbilda så kallade mentorer, ett projekt som satts igång som ett samarbete mellan Helsingfors Universitet och Jyväskylä Universitet (Aksela, Lundell & Pernaa, 2008). Målet med projektet ”Molekylmodellering i kemiundervisningen” är; att utbilda mentorer runt om i Finland, som sedan vidare utbildar andra lärare på sitt område inom molekylmodellering, att bilda ett nationellt nätverk som stöd för undervisning av molekylmodellering, att tillsammans med lärare producera material för olika utbildningsstadier, att forska kring molekylmodellering och dess inflytelse i undervisningen och inläringen av kemi. (Aksela, Lundell & Pernaa, 2008)

4 OPS kytkentä

Kemian opetuksen tulee ohjata oppilasta luonnontieteille ominaiseen ajatteluun. Kokeellista lähestymistapaa elinympäristöön liittyvien ilmiöiden havaitsemisessa sekä tutkimisessa painotetaan, ja tieto- ja viestintätekniikan osaaminen mainitaan kemian tavoitteissa. (POPS, 2003) Lähtökohtana työllemme onkin edellä mainitut asiat. Pyrimme opetussuunnitelman perusteita noudattaen lähtien kokeellisesta työskentelystä siirtyen tieto- ja viestintätekniikkaa hyväksikäyttäen tekemään luonnontieteellistä tutkimusta, jossa tarkoituksena on havainnoida elinympäristöön liittyviä ilmiöitä sekä kuvailemaan ja mallintamaan niitä. Eri aineiden liukoisuuksia toisiinsa tutkittaessa kokeellisuuden ja tieto- ja viestintätekniikan avulla toteutamme useita perusopetuksen opetussuunnitelmien tavoitteista ja sisällöistä, sekä niiden yhdistäminen on omiaan innostamaan oppilaita luonnontieteiden ja erityisesti kemian opiskeluun. Lisäksi oppilas työn tekemisen jälkeen oppilas ymmärtää paremmin aineiden liukenemista toisiin aineisiin ja (toivottavasti) osaa soveltaa oppimaansa myöhemmissä elämänsä vaiheissa.

Työtämme voidaan eri opetussuunnitelmien mukaan myös soveltaa toisen asteen oppilaitoksiin. Lukion opetussuunnitelman perusteissa sanotaan, että opetuksen tarkoituksena on ”luonnontieteellisen ajattelun ja nykyaikaisen maailmankuvan kehittyminen” monipuolisen yleissivistyksen osana sekä monipuolisen kemiakuvan välittäminen. Työmme voidaan nähdä toteuttavan juuri näitä periaatteita sekä sen voidaan toteuttavan myös kestävä kehityksen periaatteita paremmin, jos työ tehdään ainoastaan mallintamalla. Myös aineiden ominaisuuksien havaitseminen sekä ilmiöiden kokeellinen tutkiminen sekä tulkitseminen heijastuvat työssämme. Mallinnus toimii lukioon erinomaisesti, jos kerran tavoitteena on perehtyä tieto- ja viestintätekniikan mahdollisuuksiin mallintamisen välineenä (LOPS, 2003). Sopii esimerkiksi kursseille KE1: Ihmisen ja elinympäristön kemia, KE2:Kemian mikromaailma tai KE3: reaktiot ja energia

Ammatillisen koulutuksen opinnoissa työtä voidaan käyttää useiden eri alojen yhteydessä näyttämään kokeellisuuden ja tieto- ja viestintätekniikan yhteensopivuutta sekä havainnollistamaan molekyylihallinnuksen hyötyjä myös ammatillisessa, enemmän käytäntöön painottuvassa koulutusohjelmassa.

5 Liukoisuuden mallinnusta tietokoneella yläkouluun

Mallinnuksen tavoitteet:

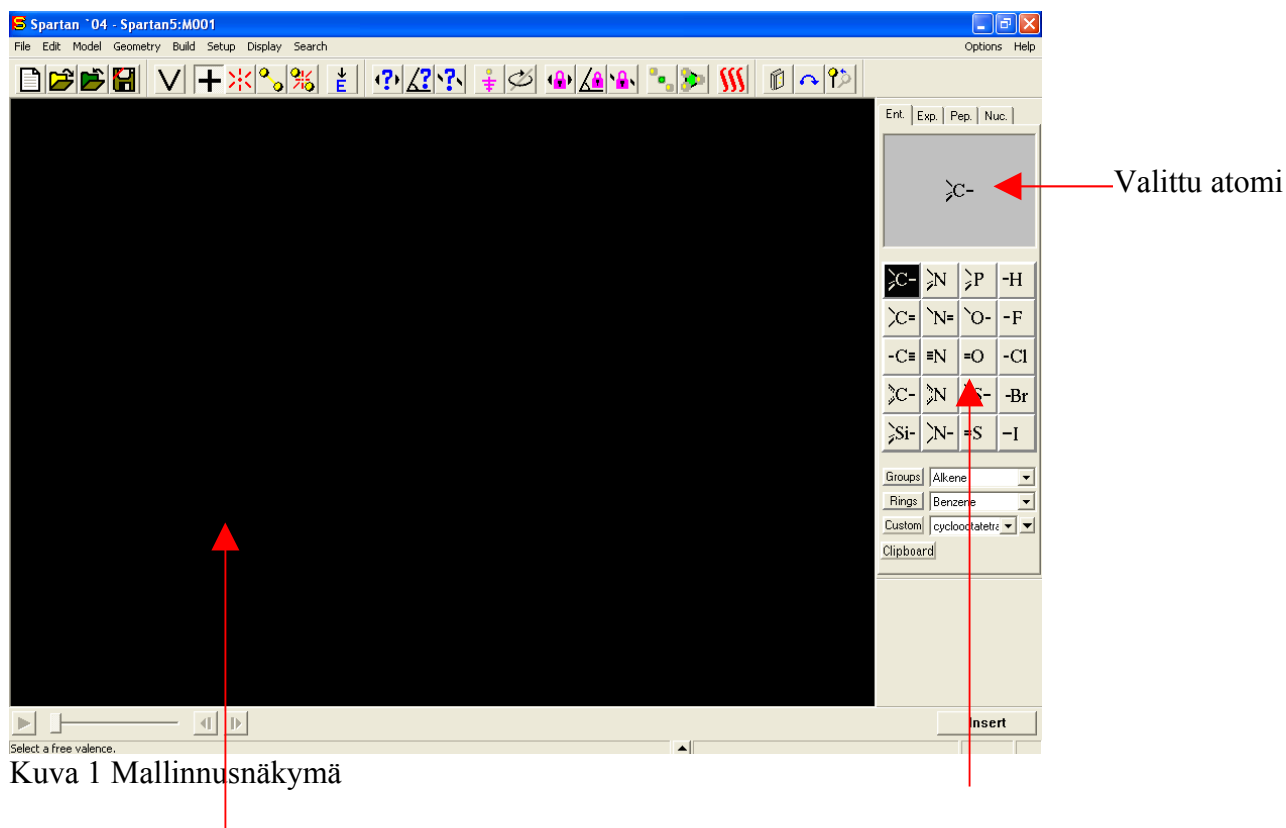
- Oppilas oppii tekemään mallinnuksen avulla päättelyitä ja ennustuksia aineiden liukoisuudesta
- Oppilas ymmärtää, mikä merkitys molekyylin varauksen jakautumisella on liukoisuuteen
- Oppilas ymmärtää, mitä liukenemisessä tapahtuu molekyyllitasolla
- Oppilas oppii tekemään yleistyksiä ja johtopäätöksiä mallinnuksen avulla

Mallinnus koostuu kolmesta vaiheesta: Ensimmäisessä opetellaan Spartan molekyylimallinnus ohjelman peruskäyttöä, toisessa kokeellisuuteen yhdistettynä mallinnetaan yhdessä molekyyliä ja pohditaan niiden liukoisuutta. Kolmannessa osiossa oppilaat saavat itse tehdä päätelmiä aineiden liukoisuudesta. Viimeisenä on vielä vapaavalintainen tehtävä, jonka oppilaat voivat tehdä esimerkiksi kotitehtävänä syventämään opittua. Spartan tutuksi osion voi jättää väliin, jos ohjelmaa on käytetty aikaisemmin. Liukoisuuden mallinnuksessa ei tarvita osioiden 1.5 ja 1.7 tietoja, joten ne voi halutessaan jättää väliin.

5.1 Spartan tutuksi

5.1.1 Aloittaminen

Avaa Spartan -molekyylin mallinnusohjelma. Valitsemalla **file** ja **new**, avautuu alla oleva näkymä.



Mallinnusikkuna Atomivalikko

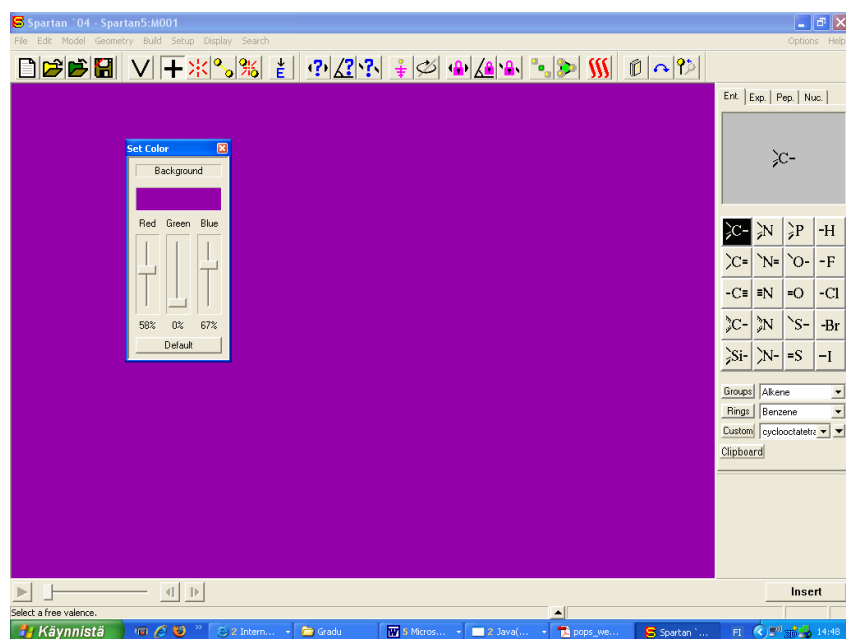
Oikealla on atomivalikko. Voit vaihtaa orgaanisen kemian valikon myös epäorgaanisia alkuaineita käsittäväksi valikoksi painamalla **Exp.** näppäintä valikon yläreunasta. Alussa käytämme kuitenkin orgaanista **Ent.** -valikkoa.

Aktiivisena oleva alkuaine on mustalla pohjalla valikossa ja se näkyy pienellä ruudulla valikon yläpuolella.

5.1.2 Taustaväri

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

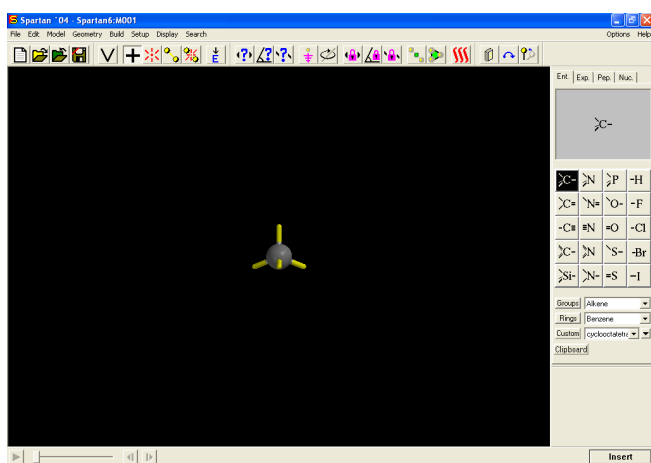
Vinkki: Kannattaa välttää kirkkaan punaista, harmaata, kirkkaan vihreää ja oranssia, jotta atomit erottuisivat taustasta.



Kuva 2 Taustavärin vaihto

5.1.3 Molekyylin luominen

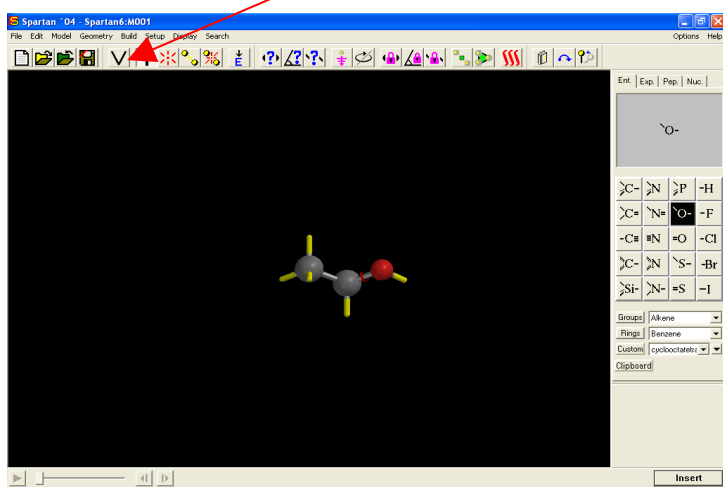
Mallinnetaan ruudulle ensimmäinen molekyyli. Valitse atomivalikosta hiiliatomi, jolla on neljä yksinkertaista sidosta. Klikkaa hiiren vasemmalla näppäimellä mallinnusikkunaan. Atomin tulisi ilmestyä mallinnusikkunaan.



Kuva 3 Molekyylin rakentaminen

Voit liittää atomiin toisen hiiliatomin klikkaamalla hiiren vasemmalla näppäimellä keltaisen sidoksen päähän. Valitse atomivalikosta happi atomi, jolla on kaksi yksinkertaista sidosta. Klikkaa toisen hiiliatomin yhden sidoksen päähän.

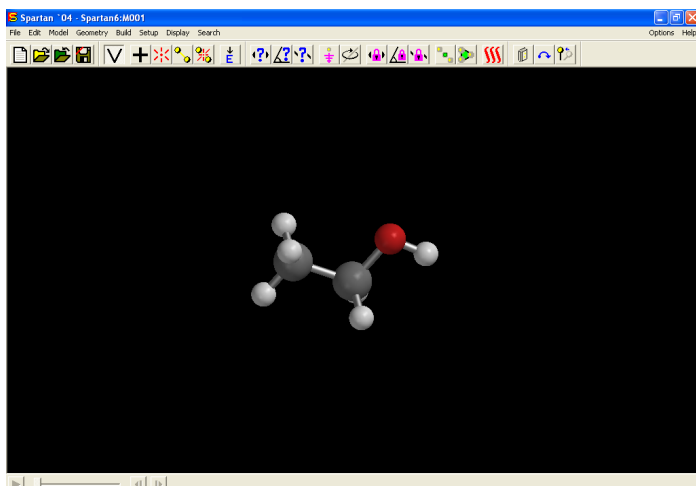
Tarkkailutilaan siirtyminen



Kuva 4 etanoli rakennustilassa

Sinulla on nyt mallinnettuna ruudulla lähes valmis etanoli. Koska Spartan on nimenomaan orgaanisen kemian tutkimukseen kehitetty ohjelma, se lisää automaattisesti vedyt paikoilleen kun

siirrytään molekyylin tarkkailutilaan painamalla ylhäältä ikonivalikosta V. Vedyt ilmestyvät paikoilleen ja atomivalikko katoaa. Jos haluat muuttaa molekyyliä, pääset takaisin rakennusvalikkoon painamalla ylhäältä ikonivalikosta +.



Kuva 5 Etanoli tarkkailu tilassa

5.1.4 Molekyylin liikuttelu ja koon muuttaminen

Voit liikutella molekyyliä pitämällä hiiren vasemman näppäimen pohjassa ja liikuttamalla hiirtä. Molekyyliä siirretään painamalla hiiren oikea näppäin pohjaan ja liikuttamalla hiirtä.

Kokoa saa suurennettua painamalla näppäimistöstä shift pohjaan ja liikuttamalla hiirtä vasen näppäin pohjassa ylöspäin. Vastaavasti molekyyli pienenee liikuttamalla hiirtä alaspäin.

Pohdinta.

Minkä värisiä atomit ovat luonnossa? Vastaavatko värit Spartanin värejä?

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

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

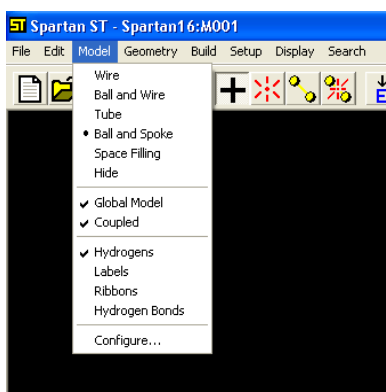
5.1.5 Molekyylin tarkastelu eri malleilla

Pohdinta:

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

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

Seuraavassa katsomme etanolia viidellä eri mallilla.



Kuva 6 Model valikko

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

Pohdinta:

Mitä malleista käyttäisit jos haluaisit

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

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

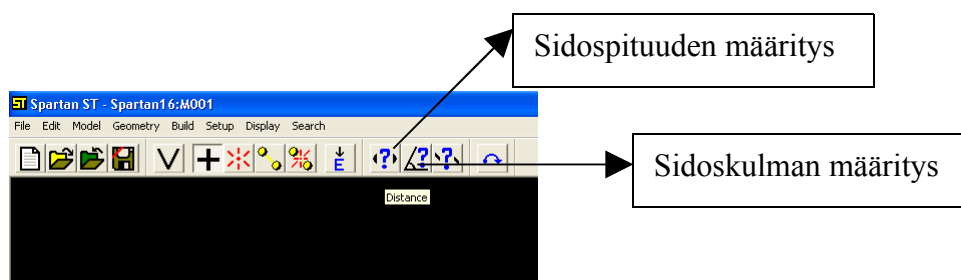
5.1.6 Molekyylin tasapainotilan laskeminen

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

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

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

5.1.7 Sidospituus ja -kulma



Kuva 7 Sidospituus ja -kulma ikonit

Jotta saat tarkemmat sidospituudet ja -kulmat määritettyä, on sinun laskettava ensin molekyylille **tasapainotila**. Valitse **setup** valikko ja sieltä *calculations*. Varmista, että *calculate* kohdassa on valittuna equilibrium geometry (tasapaino geometria) ja että laskutasona *with* kohdassa on Hartree-Fock ja seuraavassa valikossa 3-21G(*). Hartree -Fock 3-21G(*) on laskutaso, jolla ohjelma laskee molekyylin ominaisuuksia. Paina **submit** ja tallenna nimellä etanoli. Ruutuun ilmestyy ikkuna, joka ilmoittaa laskun alkaneen. Kun lasku on valmis, ruutuun ilmestyy ikkuna, jossa ohjelma ilmoittaa laskun päättyneen onnistuneesti.

Sidospituus

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

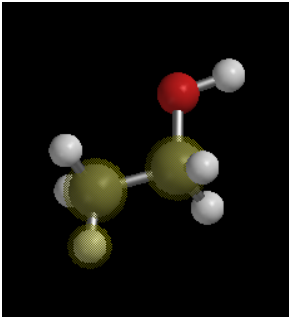
Siduskulma

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

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

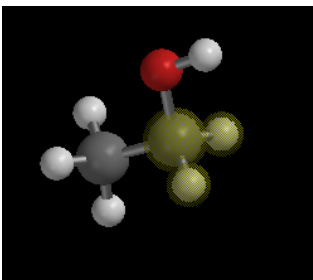
- Lyhin sidos löytyy hapen ja vedyn väliltä. Hapen ja vedyn välinen sidos on lyhyempi kuin vedyn ja hiilen välinen koska happi on *elektronegatiivisempi* kuin hiili ja siis vetää sidoselektroneja voimakkaammin puoleensa, jolloin sidospituus lyhenee hieman.
- Pisin sidos on hiiliatomien välillä.

Suurin kulma löytyy hiiliatomien ja yhden vedyn muodostamasta kulmasta.



Kuva 8 Etanolin suurin sidoskulma

Pienin kulma löytyy hiilen ja vetyjen väliltä hiiliatomista, johon happi on liitetty.

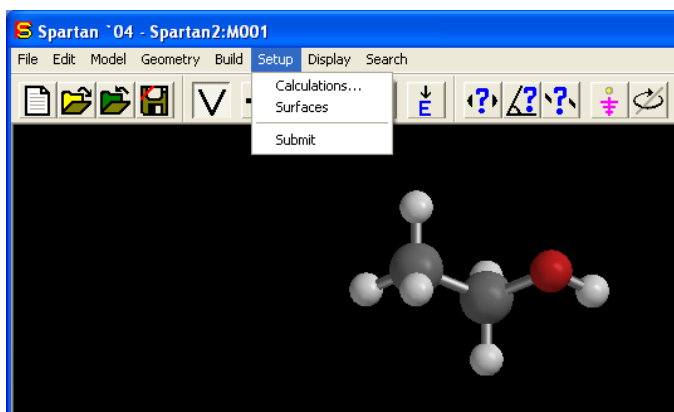


Kuva 9 Etanoli pienin sidoskulma

5.1.8 Elektronipinnan määrittäminen

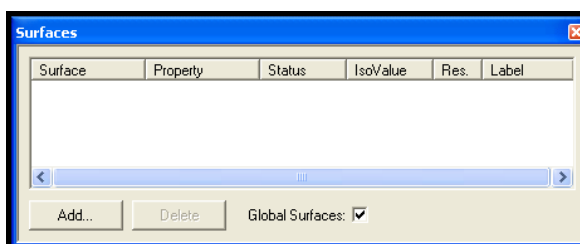
Elektronit ovat liima, joka sitoo molekyylin atomit toisiinsa. Kaikki reaktiot tapahtuvat elektronien myötävaikutuksesta. On siis tärkeä kemian kannalta ymmärtää, kuinka elektronit ovat molekyyliin sijoittuneet.

Jotta saat laskettua yhdisteelle elektronipinnan valitse setup –valikko ja sieltä surfaces.



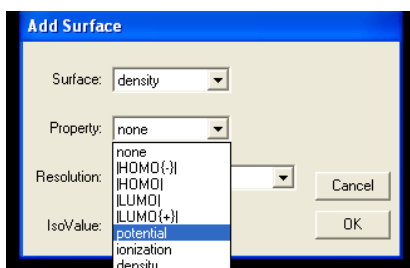
Kuva 10 Setup -valikko

Ruudulle avautuu **surface** ikkuna.



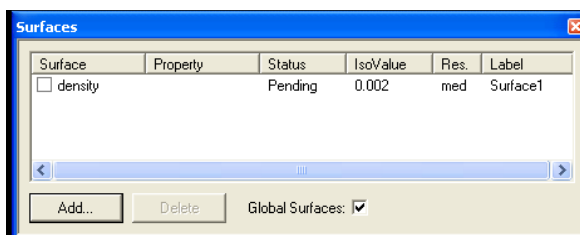
Kuva 11 Surface ikkuna

Valitse **Add**. Sinulle avautuu **Add surface** ikkuna.



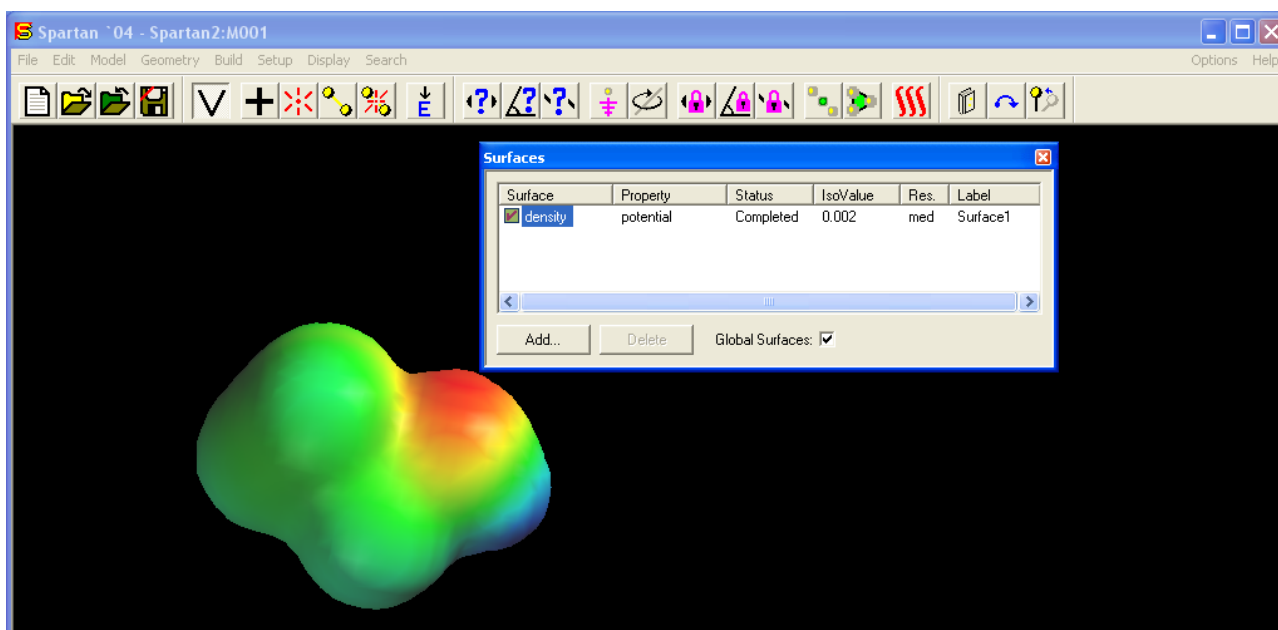
Kuva 12 Add surface ikkuna

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



Kuva 13 Surface ikkunassa elektronipinta laskua varten

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



Kuva 14 Etanolin elektronipinta

6 Liukeneeko?

Seuraavassa tutkimme aineiden liukoisuutta sekä vedämme johtopäätöksen elektronipintojen sekä liukoisuuden välisestä yhteydestä.

6.1 Virittäytyminen

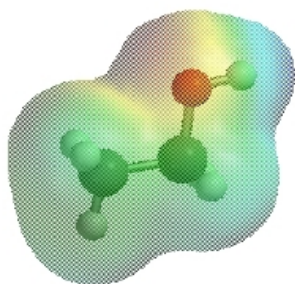
Mittaa dekantterilasiin 100 ml vettä. Punnitse ja merkitse tulos ylös. Punnitse 5 grammaa ruokasuolaa ja liuota se veteen. Tee hypoteesi, mikä veden, liunneen suolan ja dekantterilasin massa on. Punnitse.

Pohdi, mitä ruokasuolalle tapahtui.

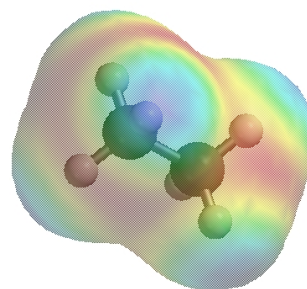
6.1.1 Mallinnus Veden elektronipinta

Mallinnetaan ruudulle vesimolekyyli. Mallinnetaan vesimolekyyliä elektronipinta. Minkä atomin kohdalla on eniten punaista? Mitä punainen väri tarkoittaa?

- Elektronipinnassa on punaisella merkitty alueet, joissa elektronien esiintyminen on todennäköisintä. Jos molekyylissä on voimakkaat epäsymmetriset punaiset alueet, sen sanotaan olevan *poolinen* molekyyli eli molekyylissä varaus on epätasaisesti jakautunut. Esimerkkinä etanoli ja etaani (Kuvat 15 ja 16)



Kuva 15 Poolinen etanoli



Kuva 16 Pooliton etaani

Etanolissa on selkeästi havaittavissa punainen alue keskittyneenä etanolissa olevan hapen ympäristöön. Etaanissa taas punainen alue on tasaisesti jakautunut.

6.1.2 Tutkimus Vesi ja etanoli

Sekoitetaan 50ml vettä 50 ml etanolia. Kuinka paljon vesi-etanoliseosta syntyy?

- Seosta ei tule 100 ml vaan vähemmän.

6.1.3 Mallinnus Mallinnetaan ruudulle vesi ja etanoli.

Pohditaan kokoeroja. Veden ja etanoli sekoituksessa tuleva ilmiö on sama kuin suurten kivien ja hiekan analogia: Jos ämpärissä on nyrkin kokoisia kiviä (etanoli) ja kaadat sekaan hiekkaa (vesi), hiekka soljuu kivien lomaan ja niiden vaatima yhteistilavuus on pienempi kuin alkuperäisten tilavuuksien summa.

6.1.4 Tutkimus Liukeneeko etanoli veteen?

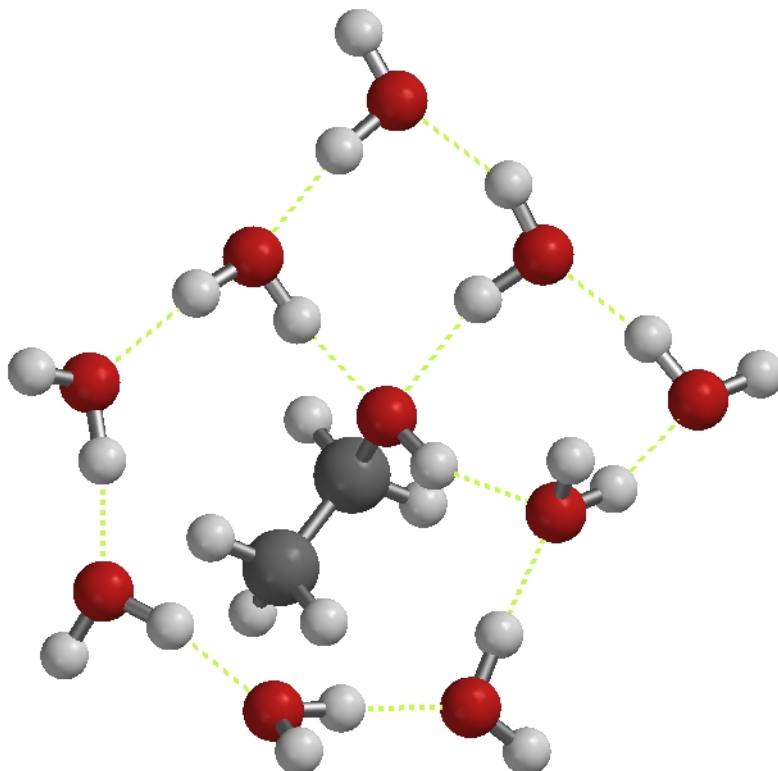
Edellinen koe osoittaa, että etanoli liukenee veteen. Poistetaan vesi -molekyylit ruudulta ja tutkitaan etanolin elektronipintaa. Mitä yhteneväisyyttä niissä on?

- Yhteen kohtaan keskittyneet punaiset alueet, jotka tarkoittavat näillä alueilla elektronien suurta esiintymistodennäköisyyttä.

6.1.5 Mallinnus Liukeneeko etanoli veteen?.

Mallinna ruudulle useita vesimolekyyliä. Jotta saat mallinnettu samalle ruudulle useamman molekyylin, on sinun painettava atomivalikon alapuolelta INSERT.

Mallinna vesimolekyylien joukkoon etanoli. Paina ikonivalikostosta Etä, jonka päällä on nuoli. Tämä minimoi rakenteen. Mallinna havainnollisuuden lisäksi vielä vetysidokset. (Model valikko → hydrogen bonds) Vetysidokset osoittavat vuorovaikutukset molekyylien välillä vesiliuoksessa.



Kuva 17 Etanoli liuenneena veteen.

6.2 Tutkimus Bensiini ja vesi

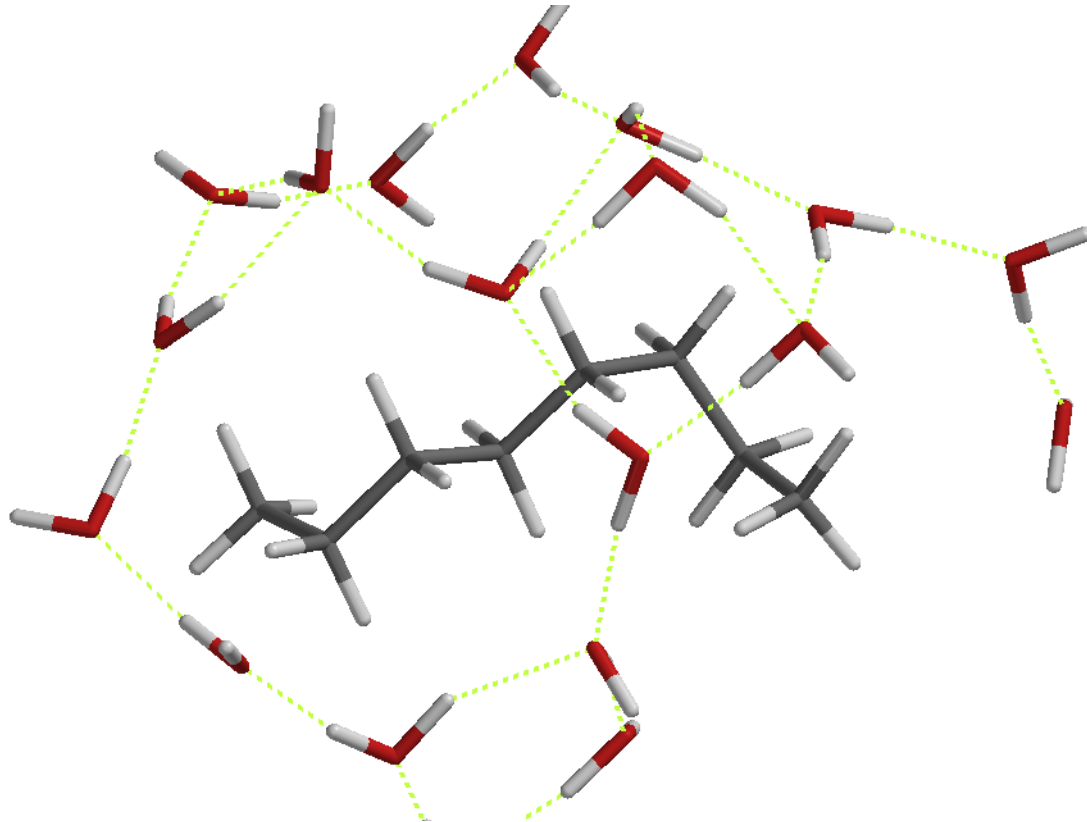
Liukeneeko bensiini veteen? Koeputkeen laitetaan vettä ja bensiiniä. Muista korkki! Tutkitaan mitä tapahtuu.

Vesi ei liuota bensiiniä. Mallinnetaan bensiini molekyyli (C_8H_{18}) ja tutkitaan sen elektronipintaa. Mitä havaitaan? Bensiini molekyylissä ei ole selkeitä punaisia elektronivilkkaita alueita.

6.2.1 Mallinnus Bensiini ja vesi

Mallinnetaan bensiinimolekyyli liuenneena veteen.

Mallinna ruudulle bensiini C_8H_{18} . Laske bensiinille tasapainotila. (Setup $\rightarrow$ calculations $\rightarrow$ submit)
Mallinna bensiinin ympärille useita vesimolekyyliä. Minimoi rakenne ikonivalikostaon E:stä.
Mallinna vielä vetysidokset. Minkä eron havaitset etanoliin verrattuna?



Kuva 18 Bensiini molekyyli vedessä

Vesimolekyylit eivät ole vuorovaikutuksessa bensiinin kanssa. Liukenemista ei siis tapahdu.

6.3 Tutkimus Heksaani ja bensiini

Liukeneeko heksaani bensiiniin? Laitetaan koeputkeen heksaania ja bensiiniä. Korkki päälle! Mitä havaitaan. Heksaani liukenee bensiiniin.

6.3.1 Mallinnus Heksaani ja bensiini

Tutkitaan heksaanin mallia ja mallinnetaan sille elektronipinta.

6.4 Mallinnus Vesi ja oktanoli

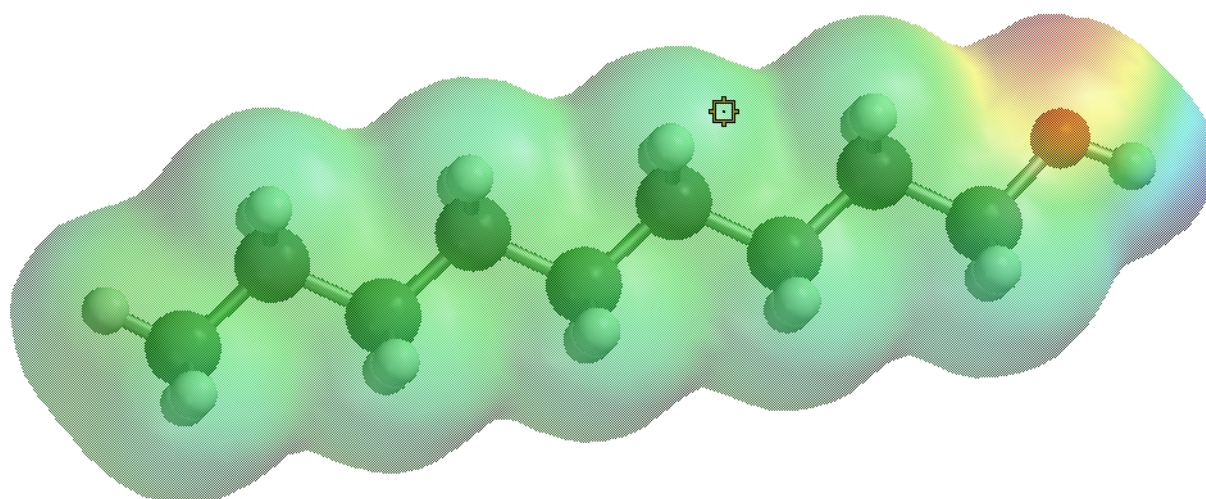
Tutkitaan ensin elektronipinnoilla liukeneeko oktanoli veteen vai bensiiniin paremmin. Tehdään hypoteesi elektronipintojen avulla.

6.4.1 Tutkimus Vesi ja oktanoli

Laitetaan vettä ja oktanolia yhteen koeputkeen ja bensiiniä ja oktanolia toiseen koeputkeen. Tutkitaan tapahtuuko liukeneminen.

Vesi ei liuota oktanolia. Bensiini liuottaa. Oktanolissa on kuitenkin toisessa päässä punainen elektronivilkas alue. Miksi se ei siltikään liukene veteen?

- Oktanolissa on huomattavasti suurempi varaukseton osa (vihreä) kuin varautunut osa (punainen) , joten se liukenee paremmin varauksettomiin aineisiin.



Kuva 19 Oktanolin elektronipinta

Vedä johtopäätös, mikä yhteys elektronipintojen ominaisuuksilla on aineiden liukoisuuteen.

7 Tutki elektronipintojen avulla!

Liukeneeko ruokasuola bensiiniin?

Liukeneeko trikloorimetaani veteen?

Liukeneeko glyseroli veteen?

8 Ota selvää!

Majoneesissa on mm. vettä ja öljyä, joiden ei pitäisi liueta toisiinsa. Kuitenkin valmiissa majoneesissa vesi ja öljy ovat yhdessä faasissa. Miten tasainen majoneesi-emulsio voidaan saada aikaan?

9 Johtopäätökset ja pohdinta

Aineen liukoisuus on oiva aihe kokeellisuuden ja mallintamisen yhdistämiseksi. Syvällisempi pohdinta ja työstä tehdyt johtopäätökset suoritamme projektin seuraavassa vaiheessa, jossa olemme saaneet vertaispalautetta.

Lähdeluettelo

- Aspholm, Hirvonen, Lavonen, Penttilä, Saari, Viiri & Hongisto (2007). *Oktetten*, Gummerus Printing, Jyväskylä.
- Aksela, M. (2005). Supporting Meaningful Chemistry Learning and Higher-order Thinking Trough Computer-Assisted Inquiry: A Design Reasearch Approach. Helsinki: Helsingin Yliopiston kemian laitos.
- Aksela, M. & Lahtela-Kakkonen, M. (2001). Molekyylitason teknologiaa opetuksessa, *Kemia-Kemi* 28 (3) 2001.
- Aksela, M., Lundell, J. & Pernaa, J. (2008). Molekyylimallinnuksen mentoreita kemian opetuksen ja oppimisen tueksi, Kemian Opetuksen Päivät 2008: Uusia oppimisympäristöjä ja ongelmalähtöistä oppimista, <http://www.jyu.fi/science/laitokset/kemia/muut%20yksikot/ope/kop2008/artikkeli_7>, luettu 6.3.2009
- Barton, R. (2004). *Closing remarks* teoksessa Barton, R. (red.) Teaching Secondary Science with ICT. Maidenhead: Open University Press.
- Gabel, D. (1999). Improving Teaching and Learning trough Chemistry Education Research: A look to the Future, *J Chem Ed* 76 (4), 548-553.
- Ealy, J. B., 1999, A Student Evaluation of Molecular Modeling in First Year College Chemistry, *J Sci Ed Tech* 8 (4), s. 309-321.
- Justi, R. & Gilbert, J.K. (2002). Models and Modelling in Chemical Education. i publikationen Gilbert, J.K., De Jong, O., Justi, R., Treagust, D. F. & Van Driel, J. H., Chemical Education: *Towards Reasearch-based Practice*. Dordrecht: Kluwer, 47-68.
- Jääskeläinen, P. (2008), Kiinnostuksen tukeminen perusopetuksessa: molekyylimallinnus työtapana, Kemian opettajankoulutusyksikkö, Kemian laitos, Helsingin yliopisto.
- Kabapinar, F., Leach, J. ja Scott, P. (2004), The design and evaluation of a teaching-learning sequence addressing the solubility concept with Turkish secondary school students, *Int J Sci Ed*, 26(5), s. 635-652.
- Kelly, R.M. ja Jones, L.L. (2008), Investigating Students' Ability To Transfer Ideas Learned from Molecular Animations of the Dissolution Process, *J Chem Ed* 85(2), s. 303-309.
- Lijnse, P. (1995), "Developmental research" as a way to an empirically-based "didactical structure" of science. *Sci Ed* 79(2), s. 189-199.
- Lijnse, P. (2000), Didactics of Science:the Forgotten Dimension in Science education research? In R. Millar, J. Leach and J. Osborne (eds.) *Improving Science Education: The Contribution of Reasearch* (Buckingham: Open Univerity Press).

Lijnse, P., de Vos, W., Waarlo, A.J. (1990), *Relating Macroscopic Phenomena to Microscopic Particles: A Central Problem in Secondary Science Education*. (Utrecht:CDβ Press).

Lukion opetussuunnitelma (2004)

Lundell, J. & Aksela, M. (2003). Molekyylimallinnus kemian opetuksessa osa 1: Molekyylimallinnus ja kemian opetus, *Dimensio* 67(5), 47-49.

Lundell, J. & Aksela, M. (2004). Tietotekniikka mullistaa kemian opetusta, *Kemia-Kemi* 31(7), 41.

Méheut, M. 1998,

Meisalo, V., Lavonen, J., Juuti, K. & Aksela, M. (2007). *Information and communication technology in school science in Finland*. Teoksessa Pehkonen, E., Ahtee M. & Lavonen J. How Finns learn mathematics and Science. Sense Publishers. Alankomaat.

Peruskoulun opetussuunnitelma (2003).

Prieto, T., Blanco, A. & Rodriguez, A. (1989), The Ideas of 11 to 14-year-old students about the nature of solutions, *Int J Sci Ed* 11(4), 451-463.

Vygotsky, L.S. (1987), Rieber R.W. & Carton A.S. (eds.), Minick, N. (trans.) *The Collected Works of L.S.Vygotsky, Volume 1* (New York:Plenum).

Webb, M. E. (2005). Affordance of ICT in science learning: implications for an integrated pedagogy, *Int J Sci Ed* 27 (6), 705-735.

Wellington, J. (2004). *Multimedia in science teaching* teoksessa Barton, R. (eds.) Teaching Secondary Science with ICT. Maidenhead: open university Press.