

Molekyylimallinnuksen avulla kohti syvempää kemian ymmärtämistä

Eero Jalonen

Mallit ja mallintaminen ovat keskeisiä tekijöitä kemiallisessa ajattelussa ja tieteellisen tiedon kehityksessä, joten niiden pitäisi näkyä hyvin myös kemian opettamisessa. Tässä artikkelissa tarkastellaan tietokoneavusteisen molekyylimallinnuksen mahdollisuuksia kemian opettamisen ja oppimisen tukena. Siinä perustellaan molekyylimallinnuksen tarpeellisuus ja tuodaan esille, mitä hyötyä molekyylimallinnuksesta on sekä opettajalle että oppilaalle.

Kemialliset käsitteet ovat luonteeltaan abstrakteja ja siten haastavia havainnollistaa ymmärrettävällä tavalla. Lisää haastetta kemian oppimiseen tuo kolminkertainen esitystapa näkyvällä makrotasolla, näkymättömällä submikroskooppisella tasolla ja symbolisella tasolla (Johnstone, 1993). Makrotasolla tapahtuu kemiallisen ilmiön havaitseminen ja näkeminen. Submikrotasolla perustellaan ja havainnollistetaan aineen näkyviä ominaisuuksia atomeilla, molekyyileillä ja ioneilla (esim. molekyylimallinnuksen avulla). Symbolitasolla esitetään makro- ja mikrotason ilmiöitä merkkien, kaavojen ja yhtälöiden avulla. Opettajan tulee tiedostaa "kolmoissuhde" ja välittää sen merkitys opiskelijoille, sillä kun opettaja siirtyy sujuvasti tasolta toiselle opiskelija voi hämmentyä ja saada kemiasta pirstaleisen näkemyksen (Gabel, 1999).

Näkymätön submikroskooppinen taso, jonka ilmiöt ja käsitteet ovat vaikeasti yhdistettävissä opiskelijoiden havaintopiiriin ja elinympäristöön, tuottaa opiskelijoille erityisesti ongelmia (Hinton & Nakhleh, 1999). Opiskelijat tarvitsevat sen takia käyttöönsä erilaisia kemian malleja, analogiamalleja ja tietokonegrafiikkaa, joiden avulla näkymätön voidaan tehdä näkyväksi (Barnea, 2000).

Koska mallit ja mallintaminen ovat keskeisiä kemiallisessa ajattelussa ja tieteellisen tiedon kehityksessä, niiden pitäisi näkyä myös kemian opettamisessa. Kemian oppimisen pitäisi sisältää (a) olemassa olevien mallien sekä niiden pätevyysalueitten ja rajoitusten tuntemisen (b) mallien roolin ymmärtämisen kemian tutkimuksen tulosten pätevoittäjänä ja levittäjänä sekä (c) yksilön tai ryhmän tekemien kemiallisten mallien testaamisen (Justi & Gilbert, 2002).

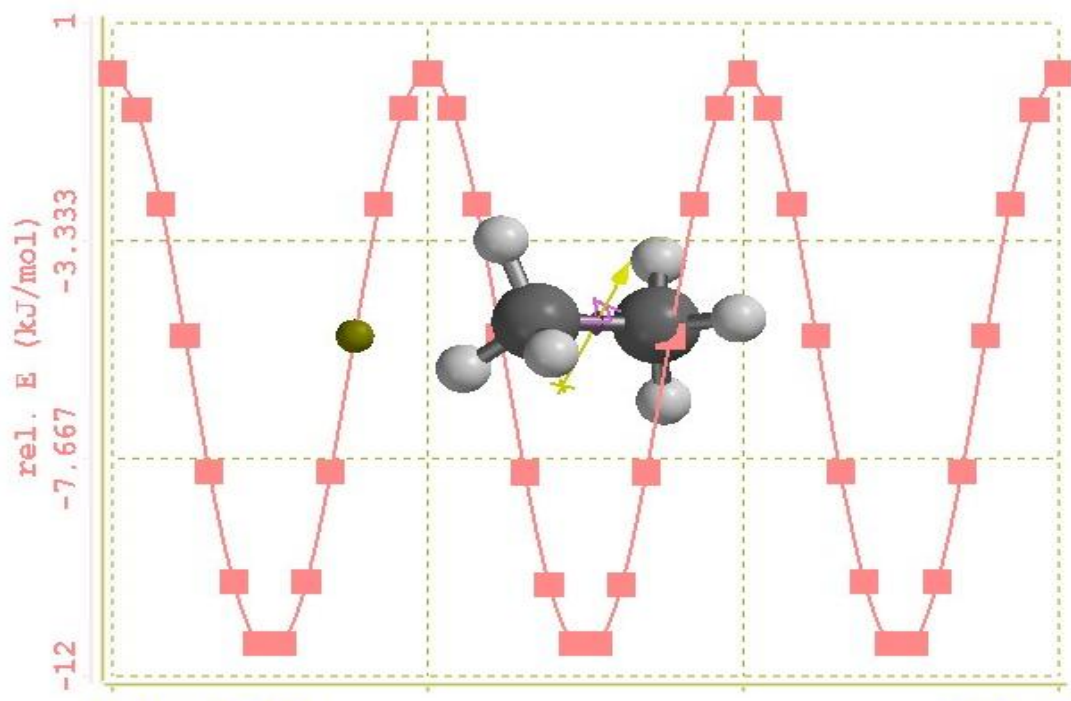
Visualisointien avulla voidaan muodostaa oikeita mentaalimalleja (henkilökohtainen mielen malli) opeteltaessa vaikeita käsitteitä ja mikrotason ilmiöitä. Sen takia oppilaan visualisointitaitoja, erityisesti avaruudellista hahmottamiskykyä, tulisi kehittää. Tietokonepohjainen molekyylimallinnus on auttanut erilaisia oppijoita parantamaan omia visualisointitaitojaan ja auttanut heitä ymmärtämään mallin käsitettä, kolmiulotteisia molekyylirakenteita ja kemiallisia sidoksia (Barnea, 2000).

Molekyylimallinnusohjelmat ja tietokoneavusteiset oppimateriaalit luovat uudenlaisen oppimisympäristön, jossa kemian käsitteitä ja ilmiöitä voidaan tarkastella ja hahmottaa uudella tavalla. Samalla tietokoneavusteiset menetelmät luovat uusia toimintatapoja ja kulttuureja, joiden avulla hankalaksi koettuja kemian asioita voidaan selventää ja yksinkertaistaa. Virtuaalimalleja ja visualisointeja voidaan muokata opetuksen ja oppimisen tarpeiden mukaan (Jalonen, Lundell, & Aksela, 2007).

vaan työskentely tietokoneen kanssa on sidottava osaksi opetusta. Tehtävien laadinalla, suoritusohjeilla ja kysymyksillä voidaan ohjata oppijan mielenkiintoa ja toimintaa, jotta se tukisi mahdollisimman hyvin käsiteltävän asian oppimista ja harjaannuttaisi kemian syvällisessä ymmärtämisessä tarvittavia korkeamman tason ajattelutaitoja (Aksela & Lundell, 2007).

Nykyiset oppimiskäsitykset korostavat oppimista aktiivisena kokemukseen perustuvana vuorovaikutusprosessina. Molekyylimallinnuksen käytöllä opetuksessa on mahdollista tukea kemian käsitteiden ymmärtämistä, harjoittaa erilaisia opiskelutaitoja sekä motivoida oppilaita opiskelemalla autenttisisessa modernissa tutkimusympäristössä (Lundell & Aksela, 2003). Maksullisia kemian molekyylimallinnusohjelmia ovat esimerkiksi Spartan (www.wavefun.com) ja HyperChem (www.hyper.com), ilmaisia ovat esim. ChemSketch (www.acdlabs.com), ArgusLab (www.arguslab.com), Symyx Draw (www.symyx-draw.en.softonic.com), Avogadro (www.avogadro.en.softonic.com) ja MarvinSketch (www.chemaxon.com). Edumol (www.edumol.fi) puolestaan on avoin, selaimessa toimiva molekyyliä mallinnus- ja visualisointiympäristö.

Oppilaiden ajattelua ja käsityksiä molekyylimallinnuksesta on tutkittu vain vähän. Tutkimusten mukaan lukiolaiset ovat ymmärtäneet tietokoneavusteisen molekyylimallinnuksen avulla paremmin molekyyliä geometriaa ja sitoutumista (Barnea & Dori, 1996) sekä mallin käsitettä, isomeriaa ja funktionaalisia ryhmiä (Dori & Barak, 2001). Meneillään olevassa väitöskirjatutkimuksessa kehitetään mielekästä (vastakohtana ulkoa oppimiselle) opetusmallia lukion kemian kovalenttisen sidoksen opettamiseen molekyylimallinnuksen avulla. Tutkimuksessa kehitetään myös virtuaalisia molekyylimalleja ja tutkitaan niiden vaikuttavuutta oppilaiden kovalenttisen sidoksen oppimiseen ja kemian syvälliseen ymmärtämiseen (ks. kuva 2).



Kuva 2. Etäänimolekyylin sigma(C-C)-sidoksen kiertymisen vaikutus molekyylin energiaan.

Eero Jalonen

tohtorikoulutettava, FM (kemian ja matematiikan aineenopettaja)
Lempäälän lukio

eero.jalonen@lempaala.fi

Erytisoaaminen: mikrotason ilmiöiden mallintaminen ja visualisointi tieto- ja viestintätekniikkaa hyödyntämällä. Väitöskirjan aiheena on mielekäs kovalenttisen sidoksen opettaminen ja oppiminen tietokoneavusteisen molekyyllimallinnuksen avulla.

Lähteet

- Aksela, M., & Lahtela-Kakkonen, M. (2001). Molekyyllitason teknologiaa opetukseen. *Kemia-Kemi*, 28(3), 200-203.
- Aksela, M., & Lundell, J. (2007). Kemian opettajien kokemuksia tietokoneavusteisesta molekyyllimallinnuksesta. Kirjassa M. Aksela & M. Montonen (toim.), *Uusia lähestymistapoja kemian opetukseen perusopetuksesta korkeakouluihin* (s. 226-247). Helsinki: Yliopistopaino. <http://www.helsinki.fi/kemma/data/kop-2007-osa3.pdf>
- Barnea, N. (2000). Teaching and Learning about Chemistry and Modelling with a Computer managed Modelling System. Kirjassa J. K. Gilbert & C. J. Boulter (toim.), *Developing Models in Science Education*, (s. 307-323). Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
- Barnea, N., & Dori Y. J. (1996). Computerized Molecular Modeling as a Tool To Improve Chemistry Teaching. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 36(4), 629-636.
- Dori, Y. J., & Barak, M. (2001). Virtual and Physical Molecular Modeling: Fostering Model Perception and Spatial Understanding. *Educational Technology and Society*, 4(1), 61-74. https://moodle.technion.ac.il/pluginfile.php/112649/mod_resource/content/0/winter_2008/articles/Dori_Barak_2001.pdf
- Dori, Y. J., & Kaberman, Z. (2012). Assessing High School Chemistry Students' Modeling Sub-Skills in a Computerized Molecular Modeling Learning Environment. *Instructional Science: An International Journal of the Learning Sciences*, 40(1), 69-91.
- Gabel, D. (1999). Improving Teaching and Learning through Chemistry Education Research: A Look to the Future. *Journal of Chemical Education*, 76(4), 548-554. ftp://swift.sonoma.edu/pub/references/Gabel_Improving_Chemistry_Ed_through_ER.pdf
- Hinton, M. E., & Nakhleh, M. B. (1999). Student's microscopic, macroscopic and symbolic representations of chemical reactions. *The Chemical Educator*, 4(4), 1-29.
- Jalonen, E., Lundell, J., & Aksela, M. (2007). Molekyyllimallinnus lukion kemian opetuksessa. Kirjassa M. Aksela & M. Montonen (toim.), *Uusia lähestymistapoja kemian opetukseen perusopetuksesta korkeakouluihin* (s. 148-154). Helsinki: Yliopistopaino. <http://www.helsinki.fi/kemma/data/kop-2007-osa2.pdf>
- Johnstone, A. H. (1993). The Development of Chemistry Teaching: A changing response to a changing demand. *Journal of Chemical Education*, 70(9), 701-705.
- Justi, R., & Gilbert, J. K. (2002). Models and Modelling in Chemical Education. Kirjassa J. K. Gilbert ym. (toim.), *Chemical Education: Towards Research-based Practice* (s. 47-68). Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
- Lundell, J., & Aksela, M. (2003). Molekyyllimallinnus kemian opetuksessa, osa 1: Molekyyllimallinnus ja kemian opetus, *Dimensio*, 67(5), 47-49.
- Pernaa, J., Aksela, M., & Lundell, J. (2009). Kemian opettajien käsityksiä molekyyllimallinnuksen käytöstä opetuksessa. Kirjassa M. Aksela & J. Pernaa (toim.), *Arkipäivän kemia, kokeellisuus ja työturvallisuus kemian opetuksessa perusopetuksesta korkeakouluihin: IV Valtakunnalliset kemian opetuksen päivät* (s. 195-204). Helsinki: Yliopistopaino. <http://www.helsinki.fi/kemma/data/kop-2009.pdf>