



HELSINGIN YLIOPISTO
HELSINGFORS UNIVERSITET
UNIVERSITY OF HELSINKI

Tietokoneavusteinen molekyylimallinnus kemian opetuksen tukena

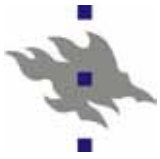
Johannes Pernaa

Jenni Västinsalo

Kemian opettajankoulutusyksikkö

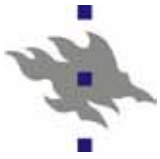
Kemian laitos

Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta

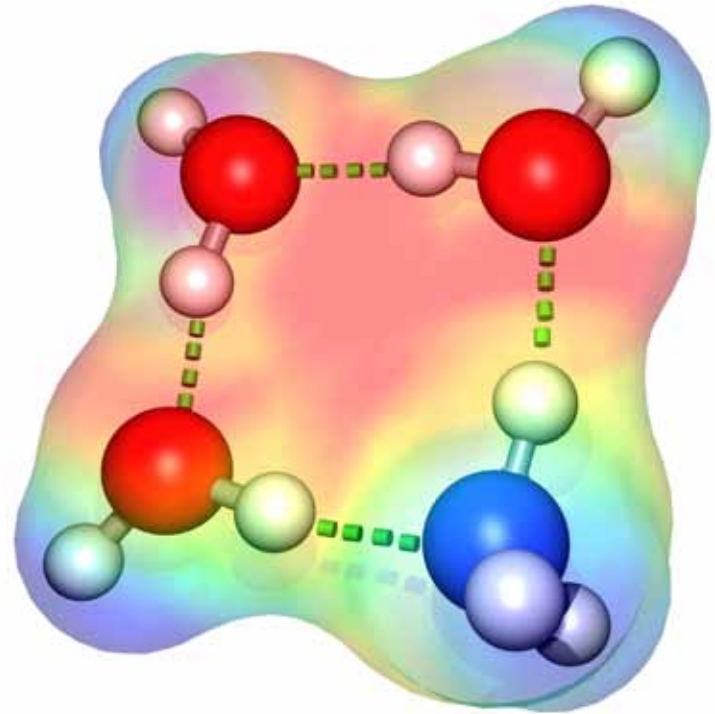
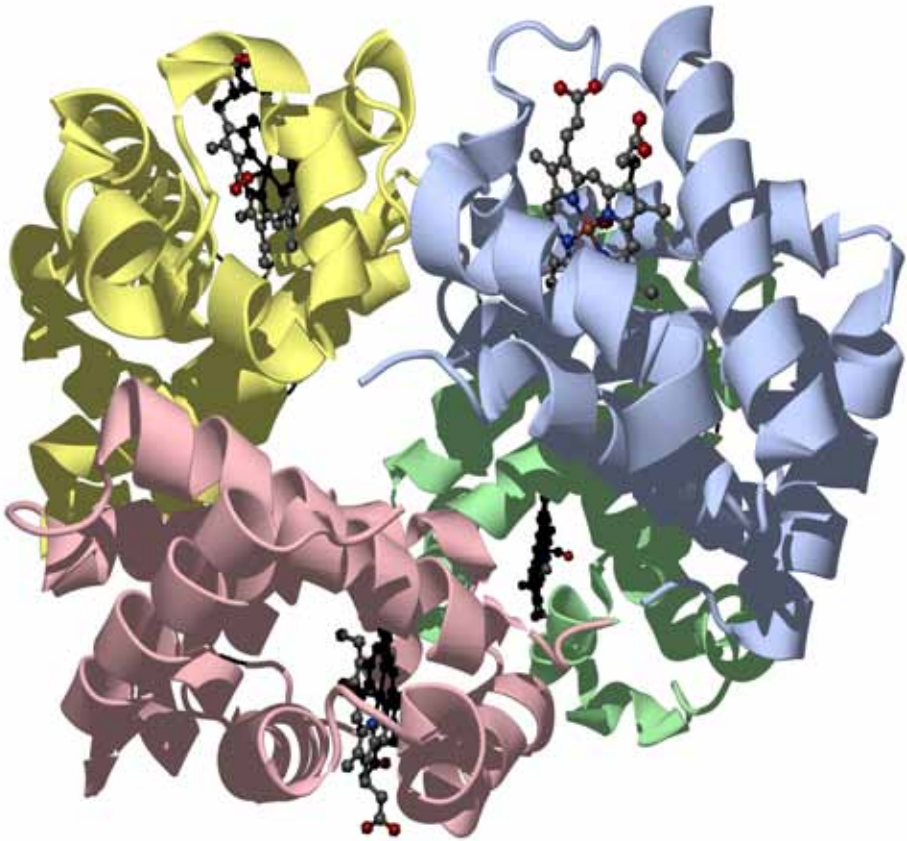


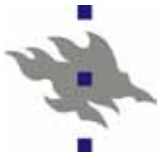
Työpajan tavoitteet

- Esitellä molekyylimallinnusta
 - Mitä se on?
 - Miten sitä tehdään?
 - Mitä lisäarvoa kemian opetukselle ja oppimisella?
 - Molekyylimallinnus ja tutkimustieto
 - Esimerkkinä kokeellisuus
 - Molekyylimallinnus ja OPS
 - Missä ja koska opiskella?
 - Konkreettisia esimerkkejä
 - Vesiliukoisuus (Spartan)
 - Verkkopohjaiset biomolekyylit (Jmol)



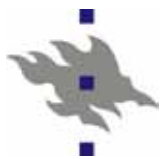
Mitä molekyylimallinnus on?





Miten molekylimallinnetaan?

- Ajattelemalla
- Eleillä
- Kynällä ja paperilla
- Tanssimalla
- Tietokoneilla
 - Ohjelmistoja
 - Spartan (maksullinen), www.wavefun.com
 - Arguslab (ilmainen), www.arguslab.com
 - Jmol (ilmainen), www.jmol.sourceforge.net

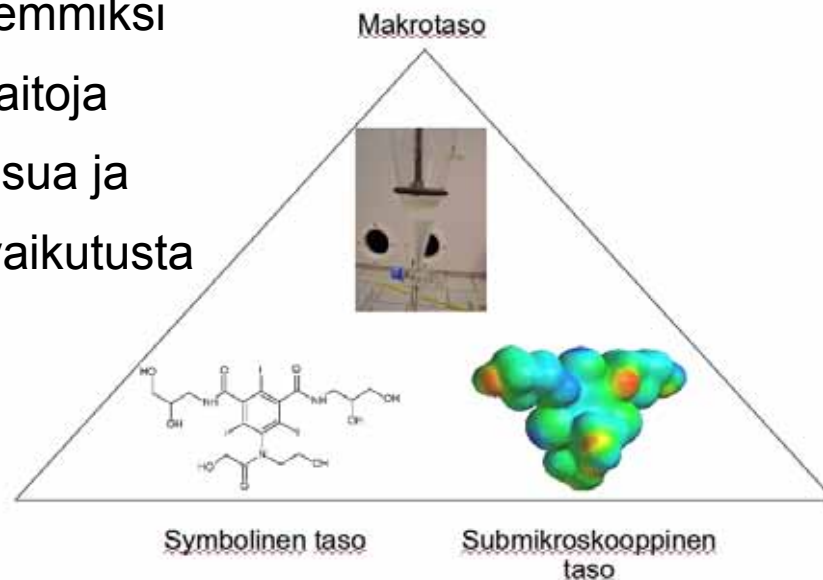


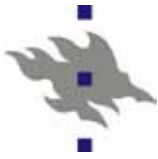
Mitä lisäarvoa kemian opetukselle ja oppimiselle? (tutkimustieto)

- Kemiallisen tiedon kolmen tason välisten yhteyksien tukeminen
- Tutkimusten mukaan mallinnus tukee kemian opetusta kaikilla asteilla.

Esim.

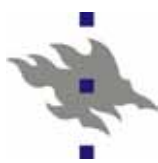
- Mahdollistaa keskustelun molekulaarisella tasolla
- Lisää sekä mielekästä vertais- että opiskelija-opettaja keskustelua
- Kehittää mentaalimalleja dynaamisemmiksi
- Aktivoi korkeamman tason ajattelutaitoja
- Esittelee tieteellistä ongelmanratkaisua ja siihen liittyvää sosiaalista vuorovaikutusta
- Motivoi



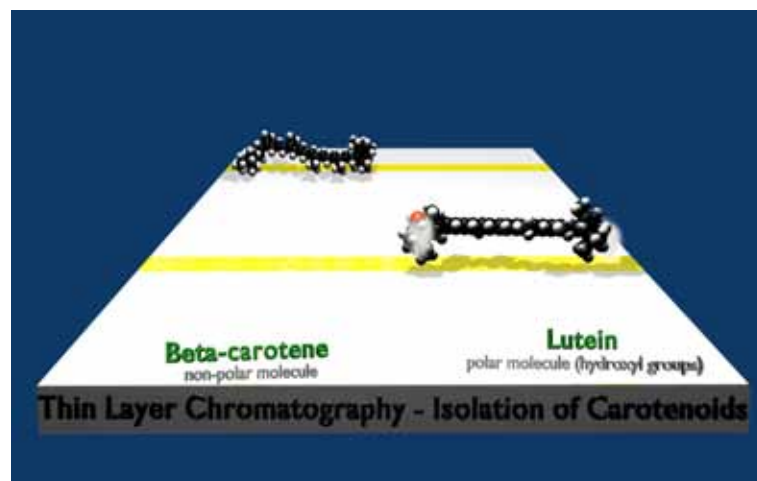


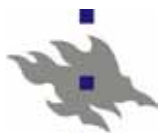
Mitä lisäarvoa kemian opetukselle? (esimerkkinä kokeellisuus)

- Kysymykset ja hypoteesien tekeminen
 - Opiskelijat tulevat tietoisiksi omasta ajattelustaan ja näkevät ajattelun kehitymisprosessin
- Tutkimusten ja prosessien suunnittelu
 - Opiskelijat osallistuvat suunnitteluprosessiin ja oppivat mm. valitsemaan välineitä ja analyysimenetelmiä
- Laitteiden kokoaminen ja tutkimuksen tekeminen käytännössä
 - Mitä tietoa saadaan mitenkin, mikä on tärkeää, millaista tietoa jää puuttumaan jne..
- Datan analysointi ja arviointi
 - Korkeamman tason ajattelutaitojen aktivointi
→ miksi?
- Tulosten esittäminen
 - Korkeamman tason ajattelutaitojen aktivointi ja vuorovaikutus
→ Muille esittäminen?

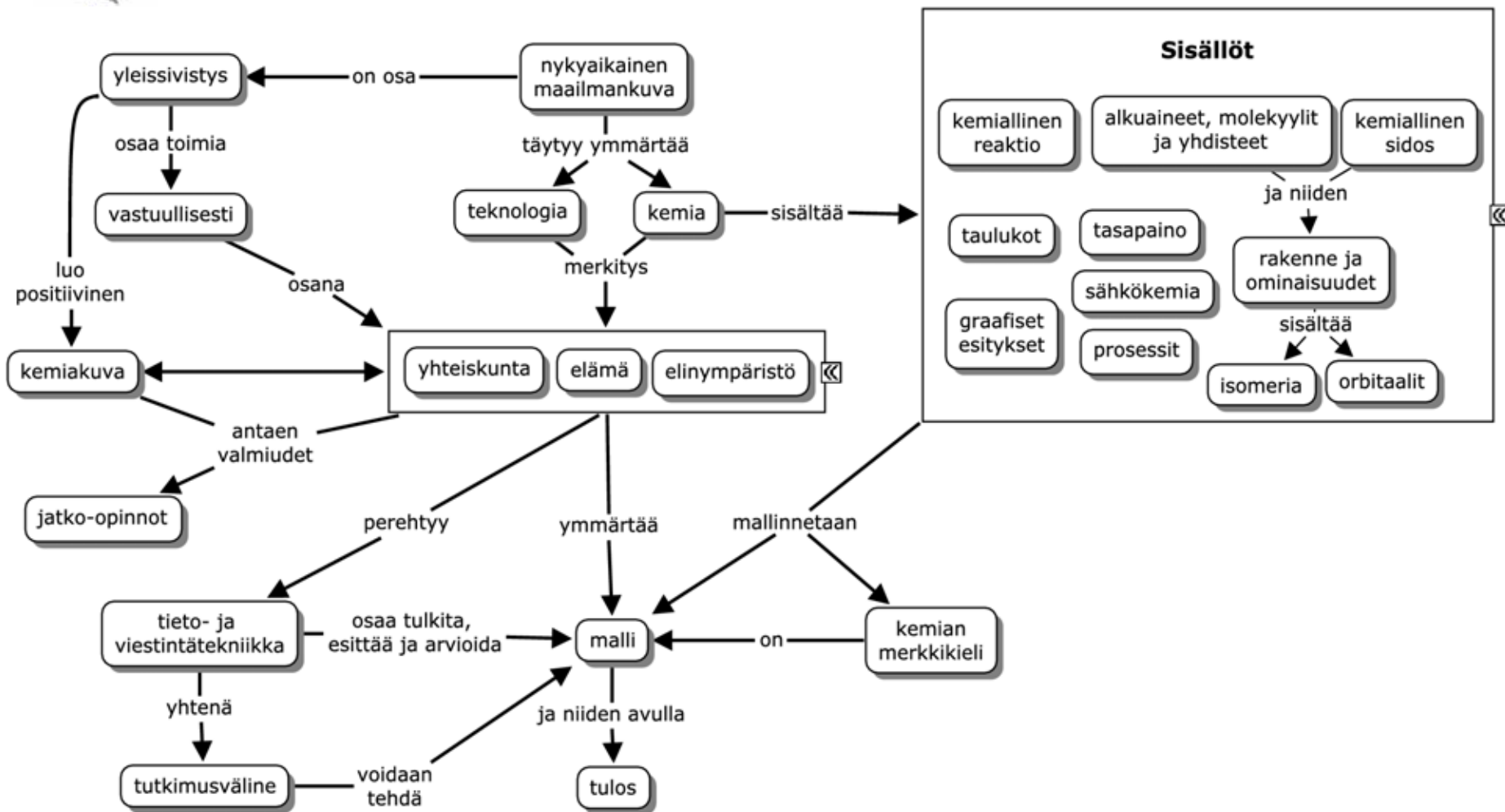


Esimerkki mallinnuksen ja kokeellisuuden yhdistämisestä : Makrotaso ja molekulaarinen taso

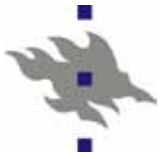




Molekyylimallinnus ja OPS



Pernaa, J., Aksela, M., & Lundell, J. (2009). Kemian opettajien käsityksiä molekyylimallinnuksen 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.



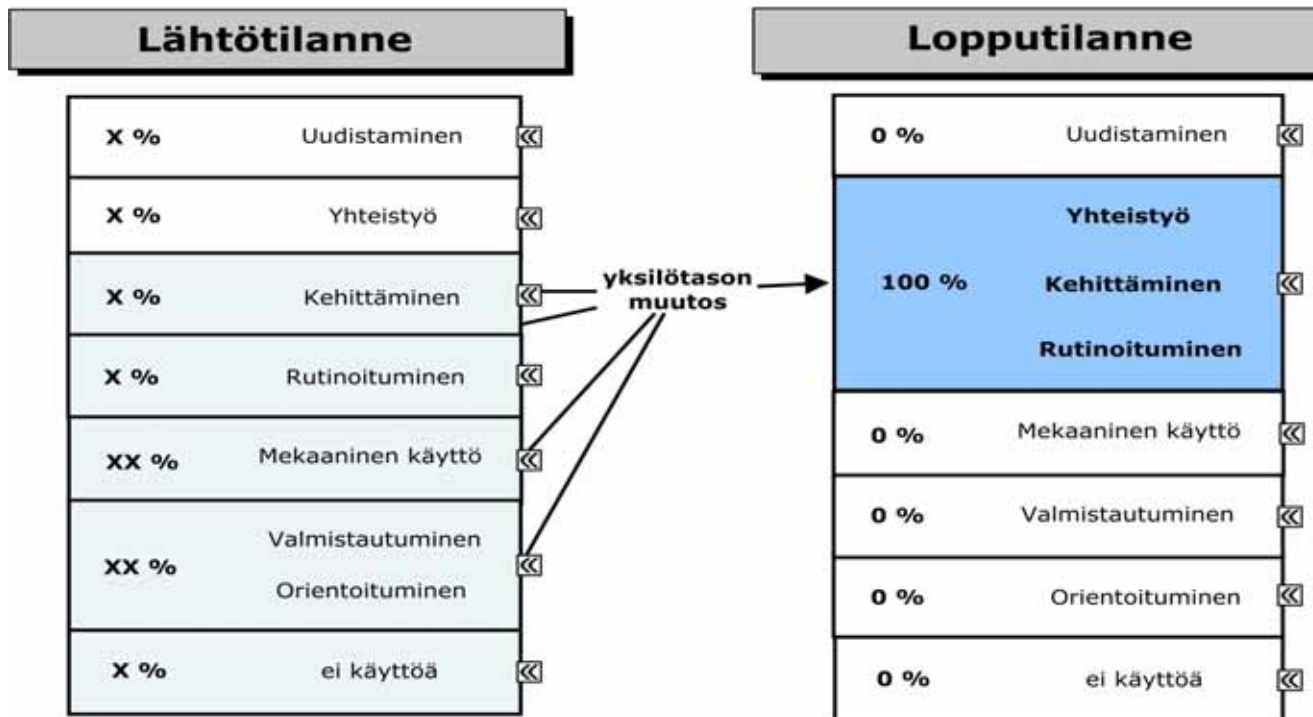
Molekyylimallinnuskurssi: Kemian mallit ja visualisointi 5 op

- ymmärtää kemian mallien erilaisia luonteita, niiden rooleja sekä niiden käyttöä kemiassa ja kemian opetuksessa
- osaa käyttää erilaisia malleja kemian opetussuunnitelman perusteiden mukaisten keskeisten käsitteiden visualisoinnissa
- ymmärtää molekyylimallinnuksen perusteet lukiotasolla
- osaa käyttää erityisesti tieto- ja viestintäteknikkaa kemian mallien visualisoinnissa ja mielekkäästi kemian opetuksessa
- pystyy tukemaan molekyylimallinnuksen avulla lasten ja nuorten kemian oppimista
- opitaan tekemään vertaisarviointeja sekä saamaan ja antamaan vertaispalautetta
- saa innostusta ja elämyksiä aiheesta kouluopetukseen.



Kurssi sisältää

- Luentoja
- 5 tutkimusartikkelia
 - 5 Vertaisarviointia
- 5 mallinnusharjoitusta
- Projektityö pareittain
([Linkki materiaaleihin](#))
- Etäkurssimahdollisuus keväällä 2012
- Lisäksi täydennyskoulutukset





Konkreettinen mallinnusesimerkki (1): Vesiliukoisuus

- **Tavoitteet**
 - Tutustua Spartan molekyylinmallinnusohjelmaan
 - Nähdä yksi tapa havainnollistaa liukoisuutta oppilaille
 - Saada ideoita hyödyntää mallinnusta omassa työssä



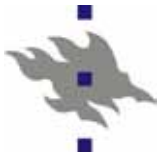
Spartanin peruskäyttö

- Molekyylien luominen
- Liikuttelu
- Sidospituus ja kulma
- Eri mallit

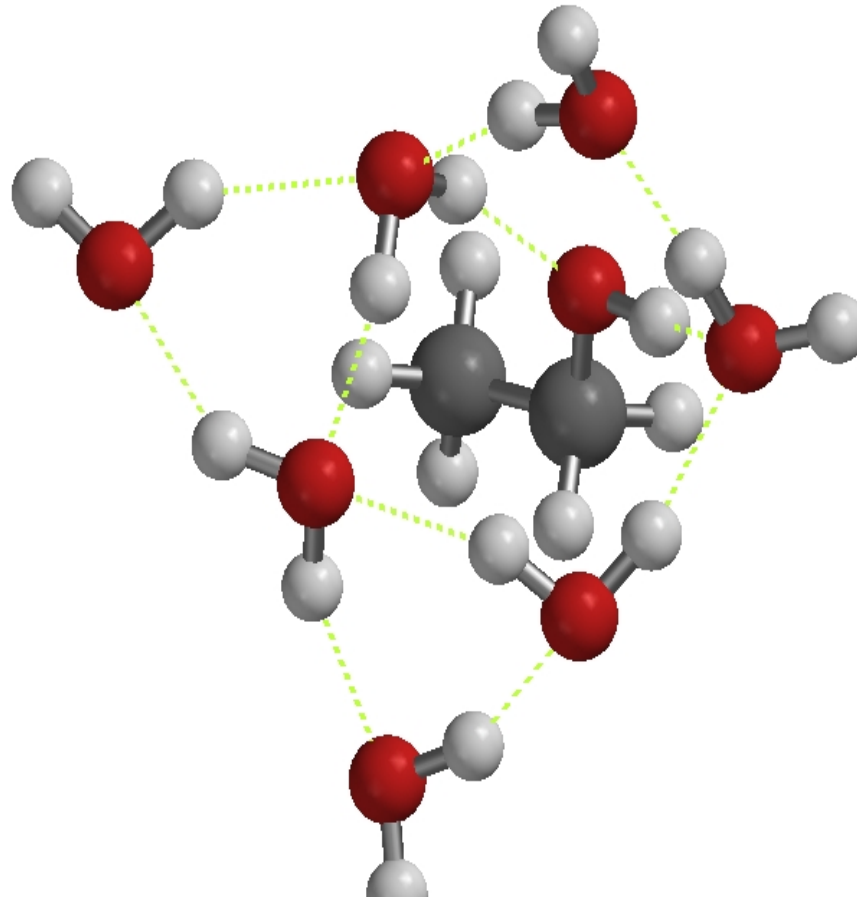


Liukoisuuden mallinnus

- Seuraavassa mallinnuksessa tutkitaan eri aineiden vesiliukoisuutta
- Mallinnus perustuu molekyylien varauksien tutkimiseen elektronipintamallien avulla sekä molekyylien välisien vuorovaikutusten mallintamiseen.
- Mallinnus soveltuu hieman varioituna 5-6- luokille, yläkouluun ja lukioon.

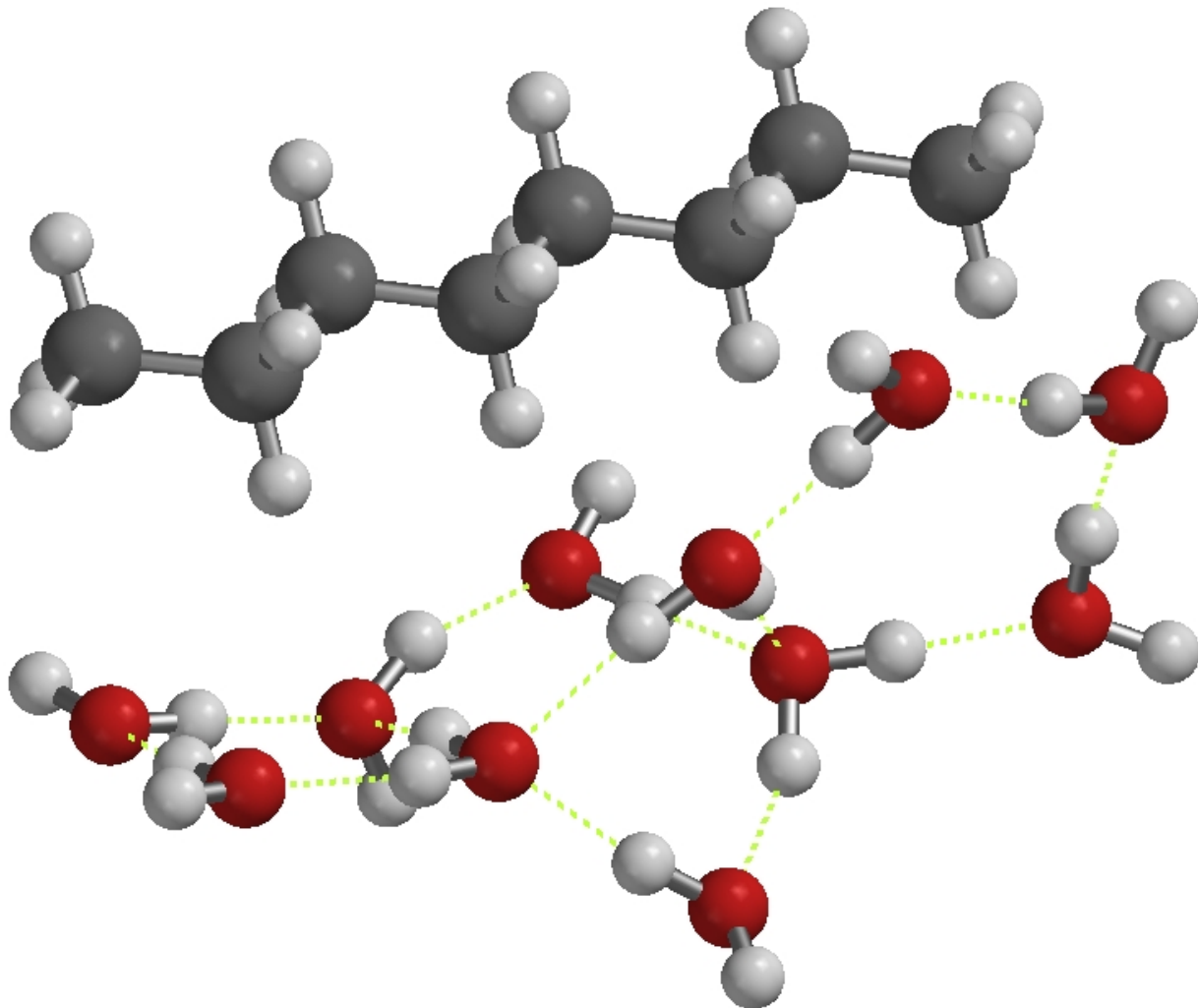


Vesi ja etanoli



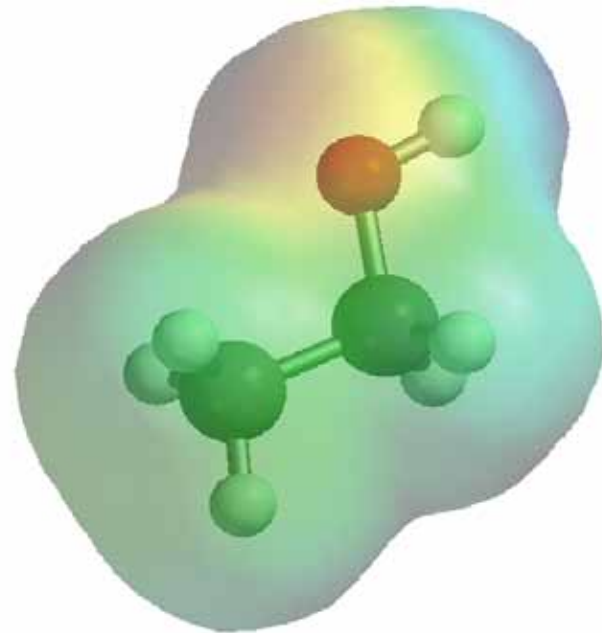
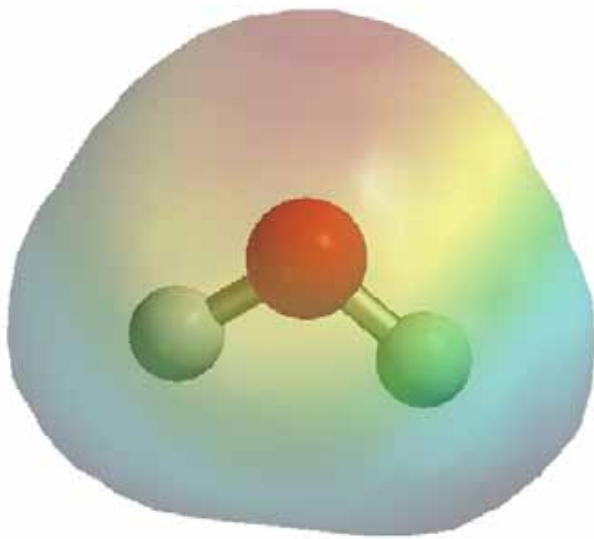


Vesi ja heksaani



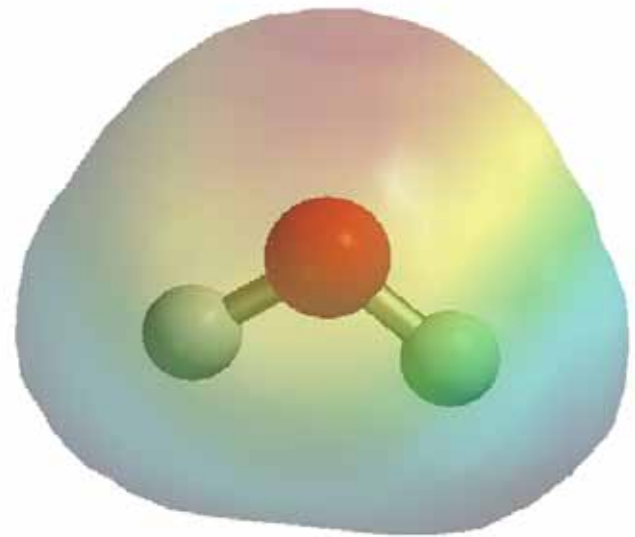
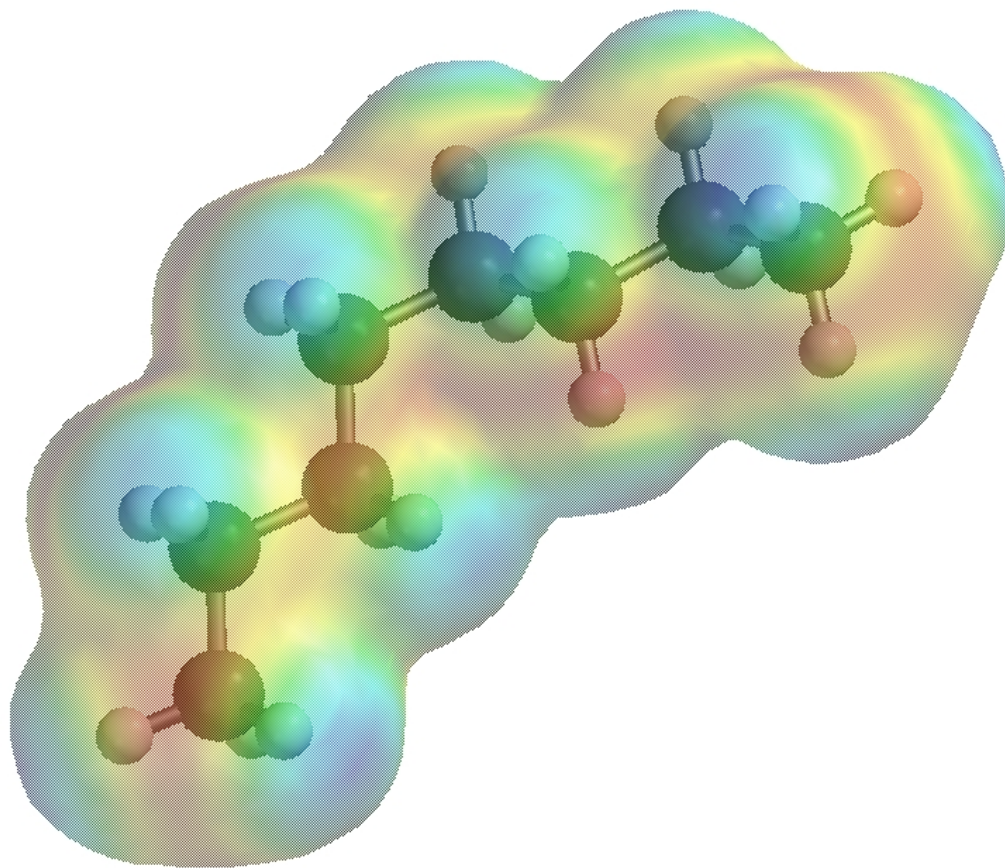


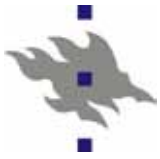
Veden ja etanolin elektronipinnat





Veden ja heksaanin elektronipinnat





Konkreettinen esimerkki 2: Verkkopohjaiset biomolekyylit

- Avataan Internet -selain
 - Googlataan “Hemoglobiini”
 - Tutkitaan Wikipediaa
 - Tutkitaan Proteiinidatapankkia
 - Tehdään Jmollilla kuva
 - Ladataan hemoglobiini pdb:nä ja avataan Spartanissa