

Kehittämistutkimus: kolmiulotteisesti tulostetut molekyylimallit optisen isomerian opetuksessa

Tapio Rajala
18.12.2018
Kemian opettajankoulutusyksikkö
Kemian osasto
Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta
Helsingin Yliopisto
Ohjaajat: Maija Aksela ja Johannes Pernaa

Tiedekunta – Fakultet – Faculty Matemaattis-luonnontieteellinen tiedekunta		Laitos – Institution– Department Kemian osasto
Tekijä – Författare – Author Tapio Rajala		
Työn nimi – Arbetets titel – Title Kehittämistutkimus: Kolmiulotteisesti tulostetut molekyylimallit optisen isomerian opetuksessa		
Oppiaine – Läroämne – Subject Kemia		
Työn laji – Arbetets art – Level Pro gradu -tutkielma	Aika – Datum – Month and year 18.12.2018	Sivumäärä – Sidoantal – Number of pages 69+28
Tiivistelmä – Referat – Abstract		
<p>Molekyylimallien kehittäminen kolmiulotteisen tulostuksen (3D-tulostus) avulla sisältää vaiheita, jotka vaativat tietotekniikan, tulostimen ja fyysisten kappaleiden viimeistelyn hallintaa. Lisäksi prosessi edellyttää ymmärrystä molekyylimallinnuksesta sekä molekyylien ominaisuuksista. Tässä tutkimuksessa perehdytään asioihin, joita tulee ottaa huomioon laadukkaiden fyysisten molekyylimallien kehittämisprosessissa.</p> <p>Kolmiulotteinen tulostus tekniikkana mahdollistaa uudenlaisten pedagogisten tuotteiden kehittämisen, mutta sisältää myös rajoitteita. Tässä tutkimuksessa selvitetään myös oppimateriaalin tuottamiseen liittyviä mahdollisuuksia ja haasteita. Pedagogisen tuotteen käytännön soveltamisen selvittämiseksi toteutettiin empiirinen testi, jossa arvioitiin kehitettyjen molekyylimallien hyödyntämistapoja ja laatua optisen isomerian tehtävissä.</p> <p>Optinen isomeria valittiin kontekstiksi, koska arvioitiin, että laadukkailla ja tarkoilla kolmiulotteisesti tulostetuilla molekyylimalleilla voisi olla käytännön hyötyä aiheen opiskelussa. Tätä kehittämistutkimusta ohjasivat seuraavat tutkimuskysymykset:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Millaisia asioita tulee ottaa huomioon tarkkojen ja laadukkaiden molekyylimallien 3D-tulostusprosessissa? • Millaisia mahdollisuuksia ja haasteita 3D-tulostettujen molekyylien opetuskäyttöön liittyy? <ul style="list-style-type: none"> ○ Mitkä ovat tulostamisen ajalliset ja taloudelliset kustannukset? ○ Millaiseksi oppilaat arvioivat molekyylimallien laadun? • Miten oppilaat hyödyntävät fyysisiä molekyylimalleja stereoisomerian tehtävissä? <p>Tämä tutkimus toteutettiin kehittämistutkimuksena, koska tutkimusmenetelmä mahdollistaa käytännönläheisen lähestymisen optisen isomerian opetukseen siten, että sillä voidaan luoda käyttöönotettavia oppimateriaaleja todelliseen tarpeeseen.</p> <p>Tutkimuksessa selvisi, että 3D-tulostuksen avulla voidaan luoda kustannuksiltaan kohtuullisia, toimivia ja visuaalisia molekyylimalleja optisen isomerian opetukseen. Kehitettyjä molekyylimalleja hyödynnettiin optisen isomerian oppimistehtävissä monipuolisesti, kunhan tehtävänanto oli suunniteltu siten, että niiden käyttö oli tarpeellista. Tässä tutkimuksessa käytetty menetelmä fyysisten molekyylimallien tuottamiseksi osoittautui kuitenkin työlääksi ja aikaa vieväksi, joten jäi perusteltu epäily käytännön soveltuvuudesta opetustyöhön. Myös SLA-tulostustekniikalle, jota tutkimuksessa käytettiin, löytyy parempia vaihtoehtoja turvallisuusnäkökulmasta. Oppimateriaalin kehitysprosessista selvisi erityisesti se, että 3D-tulostettujen sovellusten kehittäminen voi olla aikaa vievä prosessi ja sisältää useita, pieniä kehittämissyklejä, joihin löydetään ratkaisu yritys-erehdys-menetelmällä kokeillen.</p>		
Avainsanat – Nyckelord – Keywords 3D-tulostus, kehittämistutkimus, optinen isomeria, molekyylimallinnus		
Ohjaaja tai ohjaajat – Handledare – Supervisor or supervisors Maija Aksela, Johannes Pernaa		

Sisällys

1. Johdanto.....	1
2. Kehittämistutkimus	2
2.1. Kehittämistutkimus tutkimusmenetelmänä	2
2.2. Tutkimuskysymykset	3
3. Teoreettinen ongelma-analyysi	4
3.1. Enantiomeerit stereoisomeriassa	4
3.2. Optisen isomerian opetuksen haasteet	8
3.3. Kolmiulotteisen tulostuksen ratkaisuja kemian opetuksen tutkimuksissa	10
3.3.1. Kolmiulotteisten tulostimien hinta ja käyttötarkoitus.....	10
3.3.2. Molekyylimallien kehittämismenetelmät	12
3.4. Kolmiulotteisen tulostuksen tekniikkaa.....	15
3.4.1. FDM-tulostus.....	15
3.4.2. Stereolitografia.....	17
3.4.3. Tulostuksen turvallisuus.....	19
3.4.3.1. Kolmiulotteisen tulostuksen yleiset turvallisuusnäkökulmat	19
3.4.3.2. ANYCUBIC PHOTON -tulostimen turvallisuus	20
3.5. Teoreettisen ongelma-analyysin yhteenveto	21
4. Empiirinen ongelma-analyysi	22
4.1. Mooli 2: Ihmisen ja elinympäristön kemiaa (2005)	22
4.2. Mooli 2: Ihmisen ja elinympäristön kemiaa (2016)	23
4.3. Empiirisen ongelma-analyysin yhteenveto	24
5. Kehittämisprosessi	25
5.1. Kolmiulotteisesti tulostetut molekyylimallit.....	25
5.2.1 Tietokoneavusteinen suunnittelu	26
5.2.3. Slicer-ohjelmiston käyttö	29
5.2.4. Tulostus	31
5.2.5. Tulosteiden viimeistely	34
5.3. Oppimateriaali.....	41
6. Kehittämistuotos.....	42
6.1. Tapaustutkimus.....	43
6.2. Havainnointi ja haastattelu tiedonkeruumenetelmänä.....	43
6.3. Molekyylimallien laatu ja hyödyntämistavat	45

6.3.1. Molekyylimallien laatu	45
6.3.2. Molekyylimallien hyödyntämistavat	46
6.4. Tapaustutkimuksen tulokset ja johtopäätökset.....	48
7. Jatkokehittäminen.....	51
7.1. Molekyylimallien kehittäminen	51
7.2. Oppimateriaalin kehittäminen.....	53
7.2.1. Tehtävä 3.....	53
7.2.2. Tehtävä 4.....	54
8. Johtopäätökset ja pohdinta	55
8.1. Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen optisen isomerian opetuksessa	56
8.2. Haasteet ja mahdollisuudet 3D-tulostettujen molekyylimallien opetuskäytössä	56
8.3. Laadukkaiden molekyylimallien kehittämisprosessi	57
8.4. Luotettavuus ja vahvistettavuus	59
8.5. Pohdinta	61
Lähteet	64

Lyhenneluettelo

ABS	Akrylinitriilibutadieenistyreeni
PLA	Polylaktidi
UFP	Ultrapieni hiukkanen (Ultrafine particle)
VOC	Helposti haihtuva orgaaninen yhdiste (Volatile organic compound)
CAD	Tietokoneavusteinen suunnittelu (Computer aided design)
SLA	Stereolithografia
UV	Ultravioletti
FDM	Fused deposition modeling

1. Johdanto

Ensimmäiset kolmiulotteiset tulostimet (3D-tulostimet) kehitettiin 1980-luvulla. Sen aikaisia laitteita käytettiin mm. teollisuudessa prototyyppien valmistuksessa. Varhaiset 3D-tulostimet olivat kuitenkin kooltaan suuria sekä käytettävyydeltään kömpelöitä ja kalliita. 2000-luvulla 3D-tulostimet ovat kehittyneet nopeasti käytettävyydeltään ja hinnat ovat laskeneet niin, että myös kotitaloudet, tutkimuksen ja teollisuuden ohella, ovat ottaneet niitä kiihtyvissä määrin käyttöön. (Lipson & Kurman, 2013)

Myös oppilaitokset ovat kiinnostuneet 3D-tulostuksen mahdollisuuksista. Nykyään niitä käytetään kaikilla luokka-asteilla aina peruskouluista yliopistoihin. 3D-tulostuksen pedagogisilla sovelluksilla on väitetty olevan potentiaalia mm. luovuuden, teknologisen tietotaidon sekä työelämätaitojen kehittäjänä. (Lipson & Kurman, 2013) Konkreettisia tutkimuksia 3D-tulostuksen hyödyistä opetuksessa on kuitenkin edelleen niukasti. Kemian opetuksessa 3D-tulostusta on tutkittu pääasiassa molekyylihallinnuksen osana - 3D-tulostuksella voidaan kehittää oppimateriaaleja, joiden avulla oppilaat pääsevät tutustumaan esimerkiksi atomihilarakenteisiin fyysisten mallien avulla. (Rodenbough, Vanti, & Chan, 2015) Tutkimuksia näiden opetusmateriaalien käytöstä todellisissa opetustilanteissa on kuitenkin vähän - tutkimus on keskittynyt enemmän tulostusprosessien kehittämiseen. Erityisesti muiden kuin yliopistotason opiskelijoiden kokemuksia näistä oppimateriaaleista on niukasti.

Tässä tutkimuksessa selvitetään, miten tutkimukseen osallistuneet opiskelijat hyödynsivät 3D-tulostettuja molekyylihallinnalle optisen isomerian oppimistehtävissä. Lisäksi tutkitaan 3D-tulostuksen mahdollisuuksia ja haasteita opetuksessa ja oppimateriaalin tuottamisessa sekä tämän kehittämistutkimuksen prosessia. Tällä tutkimuksella on erityinen merkitys siitä syystä, että 3D-tulostusta kemian opetuksessa on edelleen tutkittu vähän - konkreettisia, toimivia sovelluksia tarvitaan 3D-tulostuksen potentiaalin saavuttamiseksi. Työn tavoitteena onkin tuottaa laadukkaiden 3D-tulostettujen molekyylihallinnalle lisäksi oppimateriaali, jotta fyysisiä molekyylihallinnalle voidaan hyödyntää todellisessa oppimistilanteessa.

2. Kehittämistutkimus

Tässä tutkimuksessa kehitetään oppimateriaali optisen isomerian opetukseen, jossa hyödynnetään kolmiulotteisesti tulostettuja molekyylimalleja. Kehitetyn pedagogisen tuotteen, fyysisten molekyylimallien, hyödyntämistapoja optisen isomerian oppimistehtävissä tutkittiin pienellä opiskelijaryhmällä. (Luku 6)

Kehittämistutkimusta varten hankittiin ANYCUBIC PHOTON -3D-tulostin. Pedagogisen näkökulman lisäksi kolmiulotteista tulostamista opetusmateriaalin tuottamisessa. Tarkoituksena on selvittää 3D-tulostukseen liittyviä haasteita ja mahdollisuuksia kuten taloudellisia ja ajallisia kustannuksia, molekyylimallien laatua ja 3D-tulostuksen turvallisuutta. Kehittämistutkimuksen prosessi kuvaillaan luvuissa 8.2.

Kehittämistutkimus (luku 2.1.) arvioitiin soveltuvaksi tähän tutkimukseen, sillä kolmiulotteisesta tulostuksesta kemian opetuksesta on edelleen niukasti tutkimustietoa ja uusia 3D-tulostusta hyödyntäviä oppimateriaaleja on rajoitetusti tarjolla. Tutkimuskysymykset esitetään luvussa 2.2.

2.1. Kehittämistutkimus tutkimusmenetelmänä

Kehittämistutkimuksella opetuslalla tarkoitetaan iteratiivista kehittämissprosessia, jossa pyritään tuottamaan toimivia menetelmiä käytännön opetustyöhön. (Collins, Joseph, & Bielaczyc, 2004; Juuti & Lavonen, 2012) Kehittämistutkimuksella pyritään vastaamaan perinteiseen tutkimukseen liittyvään ongelmaan, jossa tutkimustieto ei kohtaa kentällä tehtävää työtä. (Collins ym., 2004; Pernaa, 2013) Edelsonin (2002) mallin mukainen kehittämissutkimus toteutetaan kolmessa eri vaiheessa:

- Ongelma-analyysi
- Kehittämissprosessi
- Kehittämissuotos

Kehittämiprosessiin liittyy tyypillisesti kehittämistuotoksen iterointi, jolla tarkoitetaan sykleittäin etenevää kehittämistuotoksen parantamista empiiristen testien ja teorian tiedon ohjaamina. Tavoitteena onkin luoda käytännön työhön soveltuva tuotos, jolla vastataan ongelma-analyysissä ilmenneisiin tarpeisiin. (Edelson, 2002)

Kehittämistutkimuksen haasteina pidetään tutkimuksen luotettavuutta ja yleistettävyyttä, sillä kehittämistutkimus toteutetaan yksilölliseen toimintaympäristöön. (Pernaa, 2013) Tästä syystä tutkimuksen toteutus täytyy kuvailla tarkasti, jotta voidaan arvioida missä määrin kehittämistutkimusta voidaan yleistää. (Edelson, 2002) Kehittämistutkimuksen vahvuudet liittyvät vastaavasti tutkimuksen toteutustapaan. Kehittämistuotos tuotetaan vastaamaan todellisiin ongelmiin ja sitä tutkitaan mahdollisimman hyvin todellista opetustyötä vastaavassa tilanteessa. (Collins ym., 2004; Juuti & Lavonen, 2012)

2.2. Tutkimuskysymykset

Tässä kehittämistutkimuksessa pyritään löytämään vastauksia seuraaviin kysymyksiin:

- Millaisia asioita tulee ottaa huomioon tarkkojen ja laadukkaiden molekyylimallien 3D-tulostusprosessissa?
- Millaisia mahdollisuuksia ja haasteita 3D-tulostettujen molekyylien opetuskäyttöön liittyy?
 - Mitkä ovat tulostamisen ajalliset ja taloudelliset kustannukset?
 - Millaiseksi oppilaat arvioivat molekyylimallien laadun?
- Miten oppilaat hyödyntävät fyysisiä molekyylimalleja stereoisomerian tehtävissä?

Molekyylimallien laatua ja fyysisten molekyylimallien hyödyntämistä optisen isomerian oppimistehtävissä tutkittiin tapaustutkimuksena pienellä opiskelijaryhmällä (Luku 6).

3. Teoreettinen ongelma-analyysi

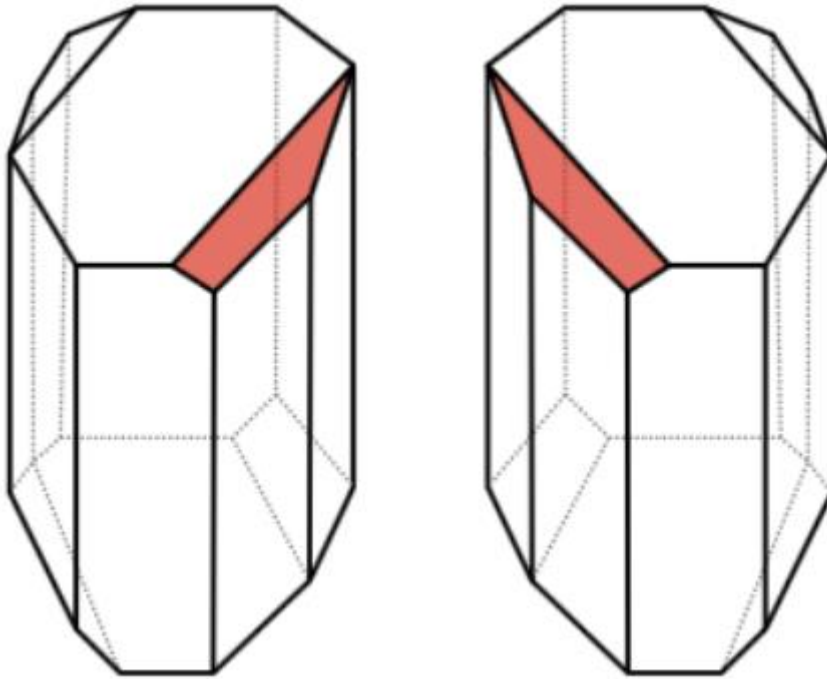
Teoreettinen ongelma-analyysi on osana luomassa kokonaiskuvaa kolmiulotteisesta tulostamisesta ja stereoisomerian opettamisesta. Tässä luvussa perehdytään ensin optiseen isomeriaan käsitteenä luvussa 3.1. Kemian opetuksen tutkimuksiin tutustutaan luvussa 3.2., jossa kuvaillaan nykyaikaisia käsityksiä stereoisomerian opettamisesta ja oppimisesta.

Kolmiulotteista tulostusta kemian opetuksen tutkimuksessa käsitellään luvussa 3.3. Tämän tarkoituksena on muodostaa käsitystä siitä, millaisiin käyttötarkoituksiin ja millaisin menetelmin 3D-tulostinta on päädytty hyödyntämään kemian opetuksessa. Tässä luvussa arvioidaan alan julkaisujen perusteella myös 3D-tulostettujen molekyyli mallien taloudellisia kustannuksia ja laatua.

Luvussa 3.4. tutustutaan kehittämistutkimuksessa käytettyyn 3D-tulostustekniikkaan ja 3D-tulostuksen turvallisuuteen yleisesti. Luvussa 3.5. esitetään teoreettisen ongelma-analyysin johtopäätökset.

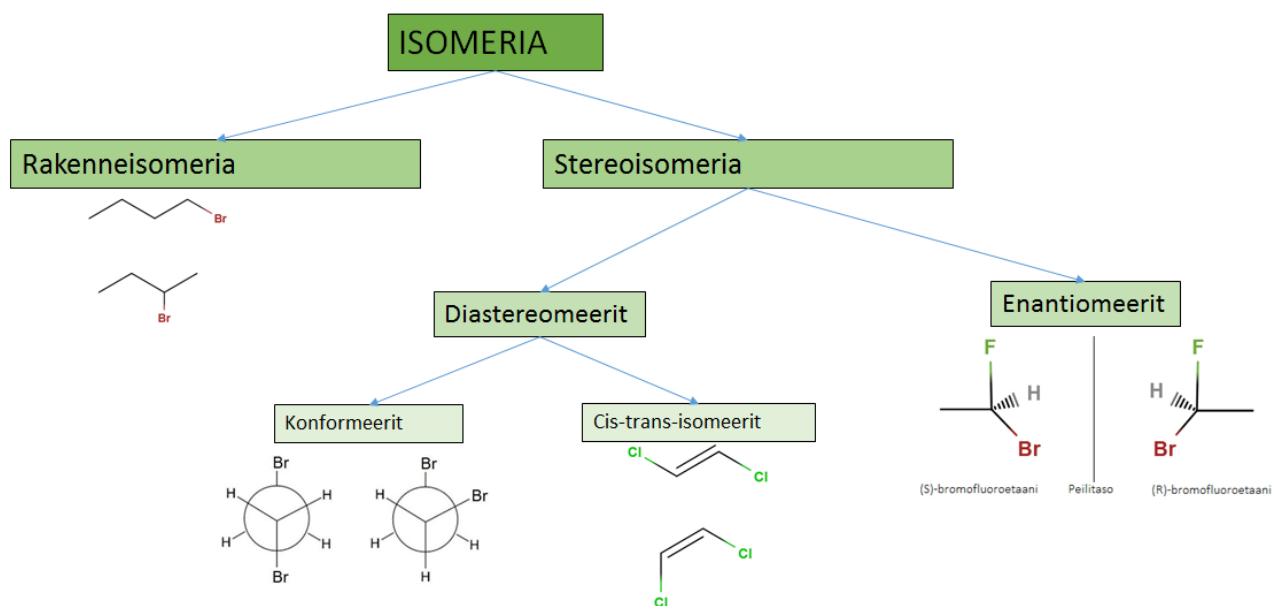
3.1. Enantiomeerit stereoisomeriassa

Jo 1800-luvulla havaittiin, että aineilla, jotka koostuvat samoista alkuaineista voi olla erilaisia ominaisuuksia. Ranskalainen kemisti Louis-Joseph Gay-Lussac (1778-1859) esitti, että atomien erilainen järjestys voisi selittää ilmiön. Tuolloin varsinaista selitystä ei pystytty kuitenkaan vielä tarjoamaan. Atomien erilaista järjestystä pidettiin kuitenkin parhaana selityksenä myös optisesti aktiivisten aineiden ominaisuudelle. (Esteban, 2008) 1830-luvulla havaittiin, että viinihapolla on kolme toisistaan poikkeavaa muotoa; kaksi isomeeria, jotka kääntävät tasopolarisoitua valoa eri suuntiin sekä isomeeri, joka on optisesti inaktiivinen (Geison & Secord, 1988) Myöhemmin nämä pystyttiin erittelemään R,R-viinihapoksi, S,S-viinihapoksi sekä mesoviinihapoksi, joka on viinihapon optisesti inaktiivinen diastereomeeri. Merkittävän läpimurron teki Louis Pasteur 1840-luvulla tutkiessaan viinihapon suolojen kiderakenteita. Suurikokoisista kiteistä hän pystyi erottamaan muotoja (kuva 1), jotka olivat toistensa peilikuvia. Tuolloin Pasteur alkoi pohtimaan optisen aktiivisuuden ja peilikuvamuotojen välistä yhteyttä. (Geison, 2002)



Kuva 1. Viinihapon suolan, natriumammoniumparatartraatin, peilikuvaisomeerit. (Murphy, 2007)

Orgaanisten yhdisteiden isomeria voidaan jaotella rakenneisomeriaan ja stereoisomeriaan. (kuva 2) Stereoisomerian eräs muoto ovat enantiomeerit eli yhdisteet, jotka ovat toistensa peilikuvia. Tästä stereoisomerian muodosta käytetään myös nimitystä optinen isomeria. (Moss, 1996)



Kuva 2. Isomerian eri tyypit.

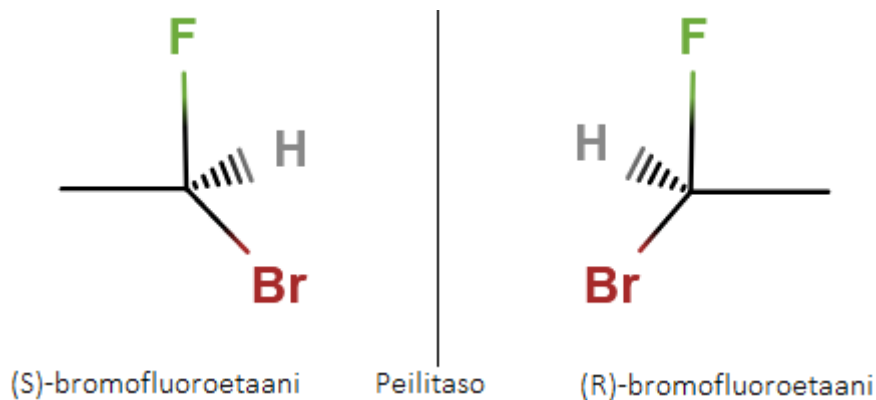
Tässä tutkimuksessa esitellään enantiomeereja orgaanisen kemian kontekstissa, jossa kiraliakeskus on tyypillisesti hiiliatomi. Optisesti aktiivisia kiraalisia yhdisteitä tunnetaan myös muissa yhdisteissä, kuten epäorgaanisissa metallikomplekseissa ja nanopartikkeleissa.

Enantiomerialla tarkoitetaan stereoisomerian muotoa, jossa kaksi molekyyliä ovat muuten samanlaisia, mutta ne ovat toistensa peilikuvia. Tätä voikin verrata kätisyyteen - oikeakätisen ja vasenkätisen peltisaksien (kuva 3) voidaan approksimoida olevan muuten samanlaisia, mutta ne ovat toistensa peilikuvia.



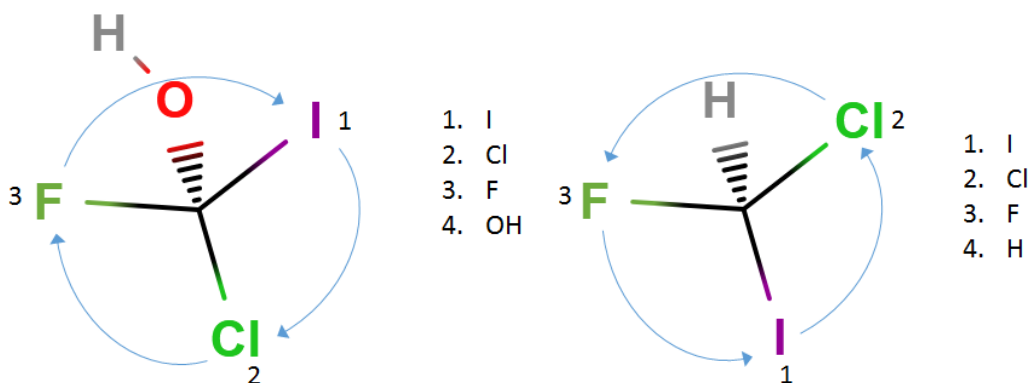
Kuva 3. Oikealle ja vasemmalle leikkaavat peltisakset (Motonet, 2018) ovat toistensa peilikuvia. Oikealle leikkaavat peltisakset soveltuvat kierresaumaputken (Bauhaus, 2018) leikkaamiseen myötäpäivään ja vasemmalle leikkaavat vastapäivään.

Stereoisomeriaa voi esiintyä silloin, kun atomiin on sitoutunut neljä erilaista atomien ryhmää tai atomia. Tällaista atomia kutsutaan yhdisteen kiraliakeskukseksi (kuva 4). Stereoisomerian käsite liitetäänkin yleisimmin kiraaliseen hiiliatomiin. Molekyylit, jotka ovat toistensa peilikuvia kutsutaan enantiomeereiksi,



Kuva 4. 1,1-bromofluoroetaanin kiraliakeskukseen, asymmetriseen hiileen, on kiinnittynyt kolme erilaista atomia tai atomiryhmää (Br, F, CH₃ ja H).

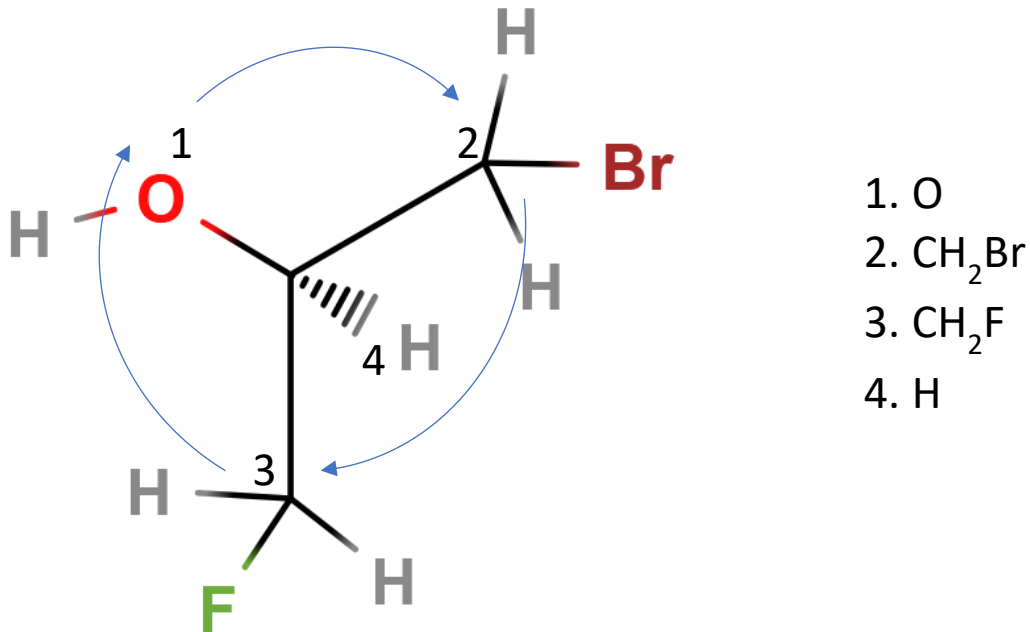
Enantiomeerit nimetään systemaattisesti R- tai S -isomeereiksi. Nimeäminen (kuva 5) perustuu kiraliakeskukseen liittyvien atomien asettamiseen atomiluvun mukaiseen prioriteettijärjestykseen.



Kuva 5. Myötäpäivään kiertävä prioriteettijärjestys (kuvassa vasemmalla) on R-isomeeri ja vastapäivään kiertävä prioriteettijärjestys (kuvassa oikealla) S-isomeeri.

Prioriteettijärjestys muodostetaan siten, että atomikooltaan suurin atomi saa prioriteetiltaan suurimman arvon (nro 1) ja muut atomit vastaavasti saavat pienemmän prioriteetin atomikoon pienentyessä. Mikäli yhdisteen kiraliakeskukseen on kiinnittynyt samanlaiset atomit (kuva 6), kiinnittyneen atomiryhmän prioriteetti määräytyy seuraavan atomin prioriteetin perusteella tai kunnes atomiryhmässä ero löytyy.

Prioriteettijärjestyksen selvittyä molekyyli rakenne piirretään siten, että alimman prioriteetin omaava atomi on piirrettynä pois päin (kuva 6). Prioriteettijärjestyksen (1-2-3) kiertäessä numerojärjestyksessä myötäpäivään molekyyli on R-isomeeri ja vastapäivään S-isomeeri.



Kuva 6. Prioriteettijärjestys määräytyy atomiluvun perusteella. Vaikka kiraliakeskukseen on kiinnittynyt kaksi hiiliatomia, niin prioriteettijärjestys voidaan kuvan molekyylin tapauksessa selvittää kyseisiin hiiliatomeihin sitoutuneista bromi- ja fluoriatomeista.

3.2. Optisen isomerian opetuksen haasteet

Optinen isomeria määräytyy kiraalisen molekyylin kolmiulotteisesta suuntautumisesta. Kolmiulotteisten molekyylien hahmottamiseen liittyvät haasteet on tunnettu kemian opetuksen tutkimuksissa (Rochford, 1987; Rozzelle & Rosenfeld, 1985; Small & Morton, 1983) jo vuosikymmeniä ja aihe on edelleen ajankohtainen. Oppilaiden kyky visualisoida molekyylien kolmiulotteista rakennetta on yhteydessä siihen, kuinka ymmärretään rakenteen ja reaktioiden välinen yhteys. (Copolo & Hounshell, 1995) Kemian kirjallisuudessa molekyylit esitetään tyypillisesti kaksiulotteisina viivakaavoina ja Fischer-projektioina, jolloin oppilaan täytyisi mielessään pystyä rakentamaan kolmiulotteinen malli kaavasta. Copolon (1995) mukaan orgaanisten yhdisteiden isomeerien kolmiulotteisen rakenteen eroja on vaikea hahmottaa mielessä, mutta se on välttämätöntä yhdisteiden tunnistamiseksi.

Abrahamin, Varghesen & Tangin (2010) stereokemian opetuksen keskittyvässä tutkimuksessa korostetaan, että stereokemia on tärkeä aihe orgaanisessa kemiassa ja siihen liittyy oleellisesti molekyylien avaruudellinen suuntautuminen. Abrahamin ym. (2010) mukaan oppilailla voi olla vaikeuksia yhdistää kirjojen kaksiulotteinen esitys kolmiulotteiseen rakenteeseen. Tutkimuksessa selvitettiin 139:n oppilaan osaamista stereokemian tehtävillä. Tutkijoiden tarkoituksena oli selvittää miten erilaiset molekyylirepresentaatiot voivat vaikuttaa stereokemian aiheiden oppimiseen. Oppilaat jaettiin kolmeen ryhmään ja he opiskelivat asioita seuraavin menetelmin:

- Molekyylihallinnusohjelmistojen avulla
- Käsinkosketeltavien pallotikkumallien avulla
- Paperisten, kaksiulotteisten oppimateriaalien avulla.

Oppilaat olivat yliopiston orgaanisen kemian peruskurssin opiskelijoita. Oppilaiden suorittamat tehtävät arvioitiin ja heidän oppimisen tasoaan arvioitiin kaksi viikkoa opetustuokion jälkeen. Tuloksista ilmeni, että oppilaat, jotka olivat käyttäneet molekyylihallinnusohjelmistoja, vastasivat parhaiten stereokemian kysymyksiin. Paperisista oppimateriaaleista ja käsinkosketeltavista malleista opiskelleet suoriutuivat lähes yhtä hyvin. Heikoiten suoriutui vertailuryhmä, joka ei ollut saanut ylimääräistä opetusta tämän tutkimuksen johdosta, vaan olivat luentojen ja itseopiskelun varassa. Abrahamin ym. (2010) tutkimustuloksista ilmenee, että molekyylihallinnusohjelmistot ovat tehokas työkalu stereokemian opiskeluun. Tutkimuksen pohdintaosiossa mainitaan myös, että käsin kosketeltavia pallotikkumalleja tulisi soveltaa opetuksessa niin, että oppilailla olisi mahdollisuus niiden avulla yhdistää kolmiulotteinen rakenne kaksiulotteiseen esitykseen, jolloin niistä voisi olla enemmän hyötyä. Pohdinnoissa mainitaankin, että erityisesti molekyylihallinnusohjelmistoissa kaksiulotteisen esityksen ja kolmiulotteisen esityksen yhdistäminen toteutui systemaattisesti.

Molekyylihallinnusohjelmistojen vaikutuksia stereokemian oppimiseen vertailtiin myös Dorin ja Barakin (2001) tutkimuksessa, jossa selvitettiin miten virtuaaliset ja fyysiset molekyylihallinnusohjelmit vaikuttavat lukiolaisten avaruudelliseen hahmotuskykyyn. Tutkimuksessa käytettiin yhdessä fyysisiä ja virtuaalisia molekyylihallinnusohjelmistoja orgaanisen kemian opetuksen yhteydessä. Tutkimukseen osallistuneet opiskelijat oppivat vertailuryhmää paremmin isomeriasta ja funktionaalisista ryhmistä. Heidän arvioitiin suoriutuvan paremmin myös symbolisen,

makroskooppisen ja mikroskooppisen kemian tasojen yhdistämisessä. Dori ja Barak (2001) suosittelivat virtuaalisten ja fyysisten molekyyli mallien yhdistämistä orgaanisen kemian opetukseen.

3.3. Kolmiulotteisen tulostuksen ratkaisuja kemian opetuksen tutkimuksissa

Kolmiulotteisen tulostuksen menetelmiä on hyödynnetty kemian opetuksessa mm. tuottamalla opetuksellisia tutkimusvälineitä (Kosenkov, Shaw, Zuczek, & Kholod, 2016; Porter Jr, Washer, Hakim, & Dallinger, 2016), matemaattisia kuvaajia (Kaliakin, Zaari, & Varganov, 2015; Lolur & Dawes, 2014; Teplukhin & Babikov, 2014) sekä fyysisiä malleja molekyyleistä, kidehiloista ja biomolekyyleistä (Carroll & Blauch, 2017; Griffith, Cataldo, & Fogarty, 2016; Jones & Spencer, 2017; Meyer, 2015; Paukstelis, 2017; Penny ym., 2017; Rodenbough ym., 2015; Rossi, Benaglia, Brenna, Porta, & Orlandi, 2015; Scalfani & Vaid, 2014; Smiar & Mendez, 2016). Tässä luvussa arvioidaan aiemmissä tutkimuksissa 3D-tulostettuja molekyyli malleja seuraavista näkökulmista:

- Molekyyli mallien taloudelliset kustannukset
- Molekyyli mallien kehittämismenetelmät
- Molekyyli mallien käyttötarkoitus

3.3.1. Kolmiulotteisten tulostimien hinta ja käyttötarkoitus

3D-tulostimien hinnat ovat pudonneet 2000-luvulla niin että kotitalouksien ja oppilaitosten on mahdollista hankkia niitä kohtuulliseen hintaan. (Lipson & Kurman, 2013) Tulostimien hinnoissa ja laaduissa on kuitenkin merkittäviä eroja. Taulukossa 1 esitetään, minkä hintaisilla laitteilla on kehitetty fyysisiä molekyyli malleja kemian opetukseen.

Taulukko 1. Molekyyylimallien tulostamiseen käytetyt laitteet ja niiden hinnat.

Laite	Hinta ¹	Käyttötarkoitus
Projet 7000 HD SLA	201 450 €	Molekyyylimallit ja proteiinit (Jones & Spencer, 2017)
Stratasys Dimension Elite	25703 €	Molekyyylimallit ja kidehilarakenteet (Scalfani & Vaid, 2014)
MakerBot Replicator 2X	2000 €	Proteiinimallit (Meyer, 2015)
MakerBot Replicator 2X MakerBot Mini Ultimaker 2	2000 € 1041€ 1442 €	Orgaanisen kemian molekyyylimallit ja orbitaalit (Penny ym., 2017)
Sharebot NG	1 432 €	Mallit molekyyleistä ja proteiineista (Rossi ym., 2015)
Makerbot Replicator 2	1288 €	Kidehilarakenteet, alkeiskopit (Rodenbough ym., 2015)
FlashForge Creator Pro	724 €	Fyysiset mallit Bohrin atomimallista, sidoksen polaarisuudesta ja hybridisaatiosta (Smiar & Mendez, 2016)
FlashForge Creator Pro	724 €	Molekyyylimallit ja elektroniorbitaalipinnat (Carroll & Blauch, 2017)
FlashForge Creator Pro Hictop Prusa i3	724 € 321 €	Molekyyylimallit (Paukstelis, 2017)
ANYCUBIC PHOTON	437 €	Kolmiulotteisesti tulostetut molekyyylimallit optisen isomerian opetuksessa

¹Hinta on 3/2018 googlen hakupalvelulla etsitty ensimmäinen myyntitarjous

Jones & Spencerin (2017) tutkimuksessa käytettiin 201 450 € hintaista Projet 7000 HD SLA -tulostinta, jolla tulostettiin malleja suurikokoisista proteiineista ja biomolekyyleistä. Heidän käyttämänsä laite on selvästi kallein selvitetystä tutkimuksesta. Edullisimpia tulostimia olivat Flashforge Creator Pro (724 €) ja Hictop Prusa i3 (321 €), joilla tulostettiin molekyylimalleja orgaaniseen kemiaan (Carroll & Blauch, 2017; Paukstelis, 2017) sekä

fyysiset mallit Bohrin atomimallista, sidoksen polaarisuudesta ja hybridisaatiosta (Smiar & Mendez, 2016).

Molekyylien laatua arvioidaan selvitettyissä tutkimuksissa niukasti, mutta silmämääräisesti arvioiden tutkimuksissa (taulukko 1) tulostetut molekyylimallit ovat visuaalisia ja tarkoituksenmukaisia. Tässä kehittämistutkimuksessa käytettävä ANYCUBIC PHOTON asettuu halvimpaan hintaluokkaan. Huomioitavaa on, että ANYCUBIC PHOTON on kalleimman 201 450 € maksavan ProJet 7000 HD SLA:n ohella ainut laite, joka käyttää SLA-tekniikkaa tulostamiseen. Näissä laitteissa käytettäviä UV-kovetteisia hartseja pidetään hinnaltaan kohtuullisina, mutta termoplastisia muoveja kalliimpana vaihtoehtona. (Grieser, 2018) Tästä syystä tulostamisen kokonaiskustannukset voivat poiketa eri tutkimusten välillä merkittävästi tulostusmateriaalien hintaeroista johtuen. Tässä kehittämistutkimuksessa tulostetun molekyylimallisetin materiaalikustannuksia arvioidaan luvussa 5.2.4.

3.3.2. Molekyylimallien kehittämismenetelmät

Kolmiulotteisen tulostuksen avulla kehitetyt fyysiset molekyylimallit on tuotettu kemian opetuksen alalla periaatteeltaan samankaltaisesti. Alan tutkimuksissa (mm. Carroll & Blauch, 2017; Jones & Spencer, 2017; Paukstelis, 2017) virtuaaliset molekyylimallit ladattiin molekyylimallinnusohjelmistoista tai molekyylien tietokannoista CAD-ohjelmistoihin, jossa niille tehtiin halutunlaiset muutokset. Tulostettavaksi suunnitellut molekyylimallit säädettiin edelleen 3D-tulostimen vaatimiksi tiedostomuodoiksi erilaisilla Slicer-ohjelmistoilla. Selvitetyissä tutkimuksissa käytetyt ohjelmistot esitetään taulukossa 2.

Taulukko 2. Ohjelmistot, käyttötarkoitus ja viittaukset tutkimuksiin

Käytetyt CAD-ohjelmat ja molekyylimallinnusohjelmat		Slicer-ohjelmat		Käyttötarkoitus
Ilmainen		Ilmainen		
Tinkercad	x	MakerBot Desktop	x	Orgaaniset molekyylimallit ja orbitaalit (Penny ym., 2017)
		Cura	x	
Virtual Molecular Dynamic	x			Mallit molekyyleistä ja proteiineista (Rossi ym., 2015)
Netfabb	x			
Virtual Molecular Dynamic	x	Blender	x	Molekyylimallit ja elektroniorbitaalipinnat (Carroll & Blauch, 2017)
123D Design	x			
Perkin Elmer Chem3DPro	x			Molekyylimallit ja kidehilarakenteet (Scalfani & Vaid, 2014)
Python Molecular Viewer	x			
USCF Chimera	x			
Netfabb Cloud	x			
VESTA	x	Makerbot Desktop	x	Kidehilarakenteet, alkeiskopit (Rodenbough ym., 2015)
Blender	x			
MeshLab	x	Makerbot Desktop	x	Proteiinimallit (Meyer, 2015)
PyMOL	x			
Visual Molecular Dynamics	x			Molekyylimallit ja proteiinit (Jones & Spencer, 2017)
Materials Studio Visualizer				
MolPrint3D	x			Molekyylimallit (Paukstelis, 2017)
Blender	x			

Taulukosta voidaan havaita, että 3D-tulostettujen molekyyli mallien suunnittelijat ovat hakeneet virtuaalisen mallin erilaisista molekyyli mallinnusohjelmista ja orgaanisten yhdisteiden tietokannoista. CAD-ohjelmiston rooli molekyyli mallien kehittämisessä on ollut lähinnä virtuaalisen mallin muokkaaminen tulostettavaksi. Koottavia molekyyli malleja varten tutkijat (mm. Penny, 2017; Paukstelis 2018) ovat hyödyntäneet CAD-ohjelmistoja (Tinkercad, MolPrint3D, Blender) myös sopivien sidospalikoiden ja atomien reikien luomiseksi. Käyttökelpoisia ohjelmistoja vaikuttaa olevan taulukko 2:n perusteella laajasti saatavilla. Molekyyli mallien suunnittelussa on käytetty pääasiassa ilmaisohjelmistoja, kuten Blenderiä, MolPrint3D:tä, Netfabbia ja Tinkercadia.

Suurimmassa osassa taulukossa 2 esitetyistä tutkimuksista on käytetty tulostusmateriaaleina termoplastisia muoveja (ABS ja PLA). Jones & Spencer (2018) ovat hyödyntäneet SLA-tekniikkaa, jonka etuna pidettiin tulostuksen tarkkuutta, kohtuullista hintaa ja korkeaa laatua.

3.4. Kolmiulotteisen tulostuksen tekniikkaa

Kolmiulotteinen tulostus hyödyntää tietokoneavusteista suunnittelua (CAD), jonka avulla virtuaalinen malli voidaan tuottaa fyysiseksi objektiksi. 3D-tulostus sisältää tyypillisesti seuraavat vaiheet:

- Kappaleen suunnittelu ja piirtäminen CAD-ohjelmistossa
- CAD-ohjelmistossa suunnitellun virtuaalisen mallin siirtäminen viipalointiohjelmistoon (Slicer)
- Tiedoston avaaminen 3D-tulostimen omassa laiteohjelmistossa (firmware) ja kappaleen tulostaminen
- Tulostetun kappaleen viimeistely.

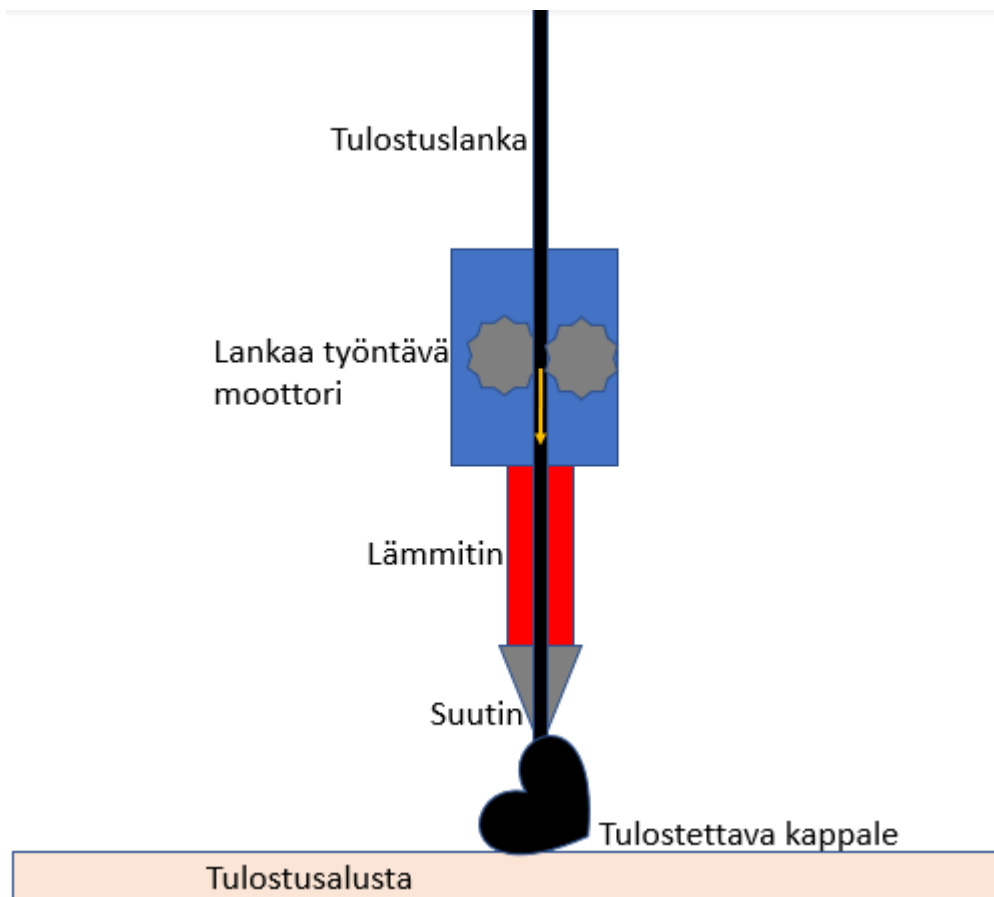
Tässä luvussa perehdytään yleisesti käytettyyn FDM-tulostustukseen (Fused deposition modeling) sekä SLA-tulostustekniikkaan, jota hyödyntää tässä kehittämistutkimuksessa käytetty ANYCUBIC PHOTON -3D-tulostin. Erilaisissa 3D-tulostustekniikoissa on etunsa ja rajoitteensa, joiden perusteella valitaan käyttötarkoituksen mukainen laite. Osaltaan tämän luvun tietojen perusteella voidaan edelleen pohtia mitä 3D-tulostustekniikkaa kannattaisi hyödyntää jatkossa opetuksessa esimerkiksi turvallisuusnäkökulmasta.

FDM-tulostusta ja SLA-tulostusta arvioitiin erityisesti seuraavista näkökulmista:

- Tulostuksen tarkkuus ja laatu
- Tulostuksen turvallisuus
- Tulostimen käyttömahdollisuudet.

3.4.1. FDM-tulostus

FDM-tulostus (kuva 7) perustuu termoplastisen muovin sulattamiseen ja uudelleen jäähmettämiseen halutunlaiseen muotoon. FDM-tulostimet sulattavat termoplastista muovia lämpövastuksessa, jonka 3D-tulostin edelleen ohjaa suunnitelluksi rakenteeksi 3D-tulostimelle ladatun tiedoston ohjeiden mukaisesti. Sula muovi jäähmettyy tulostuslevylle ohuena nauhana, jonka päälle ohjataan ohuen suuttimen kautta kerroksittain lisää termoplastista muovia.



Kuva 7. Moottori ohjaa tulostuslankaa lämmittimeen, jossa se sulaa. Suuttimen kautta sulatettu muovi ohjataan tulostusalustalle ohuena lankana. Kerroksittaisesta muovista muodostuu kolmiulotteinen kappale.

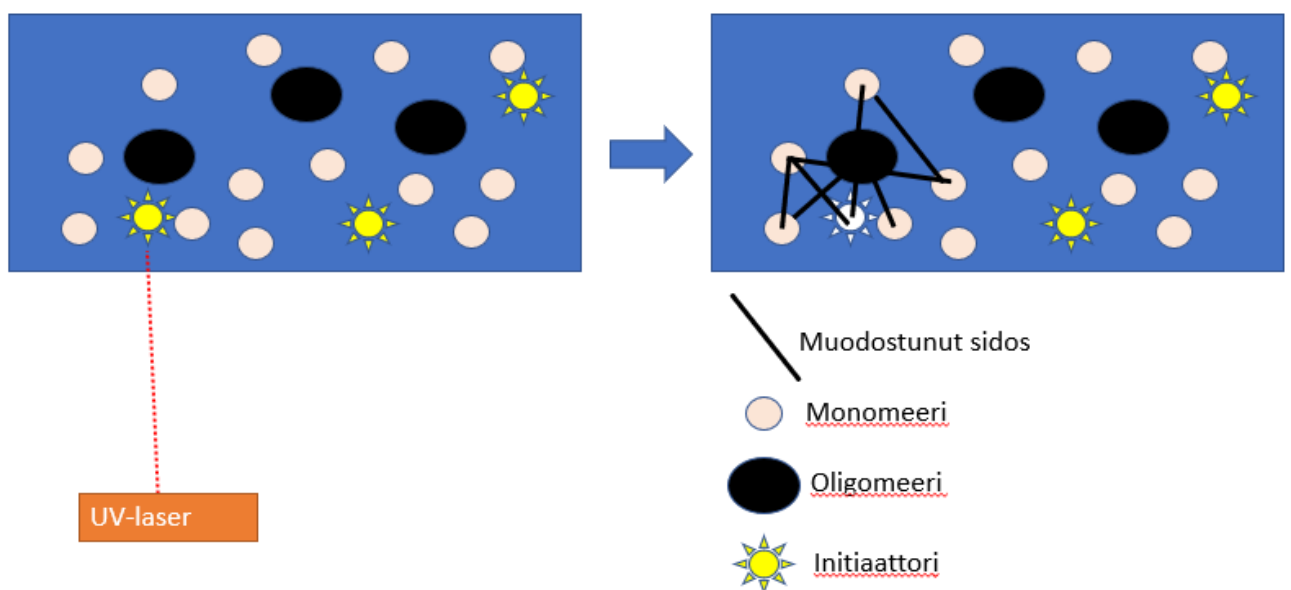
FDM-menetelmä on käytetyin 3D-tulostustekniikka, koska materiaalikustannukset ovat pienet (Simplify3D, 2018), tulostusmateriaalivalikoima on laaja (Simplify3D, 2018) ja tulostaminen on suhteellisen turvallista ja helppoa (Lipson & Kurman, 2013). Erityisesti SLA-tekniikkaan verrattuna erityinen vahvuus ovat monipuoliset materiaalit, joita voidaan valita käyttötarkoituksen mukaan. Simplify3D (2018) on koonnut FDM-tulostimissa yleisesti käytetyt materiaalit:

- Akryliniiriilibutadieenistyreeni (ABS)
- Termoplastiset elastomeerit (TPE)
- Polylaktidi (PLA)
- Iskunkestävä polystyreeni (HIPS)

- Polyetyleenitereftalaatti (PET)
- Glykoli-modifioitu polyetyleenitereftalaatti (PETG)
- Polyamidi (Nailon)
- Hiilikuitu
- Akrylonitriilistyreeniakrylaatti (ASA)
- Polykarbonaatti (PC)
- Polypropyleeni (PP)
- Metallitäytteiset muovikuidut
- Puutäytteiset muovikuidut
- Polyvinyylialkoholi (PVA)

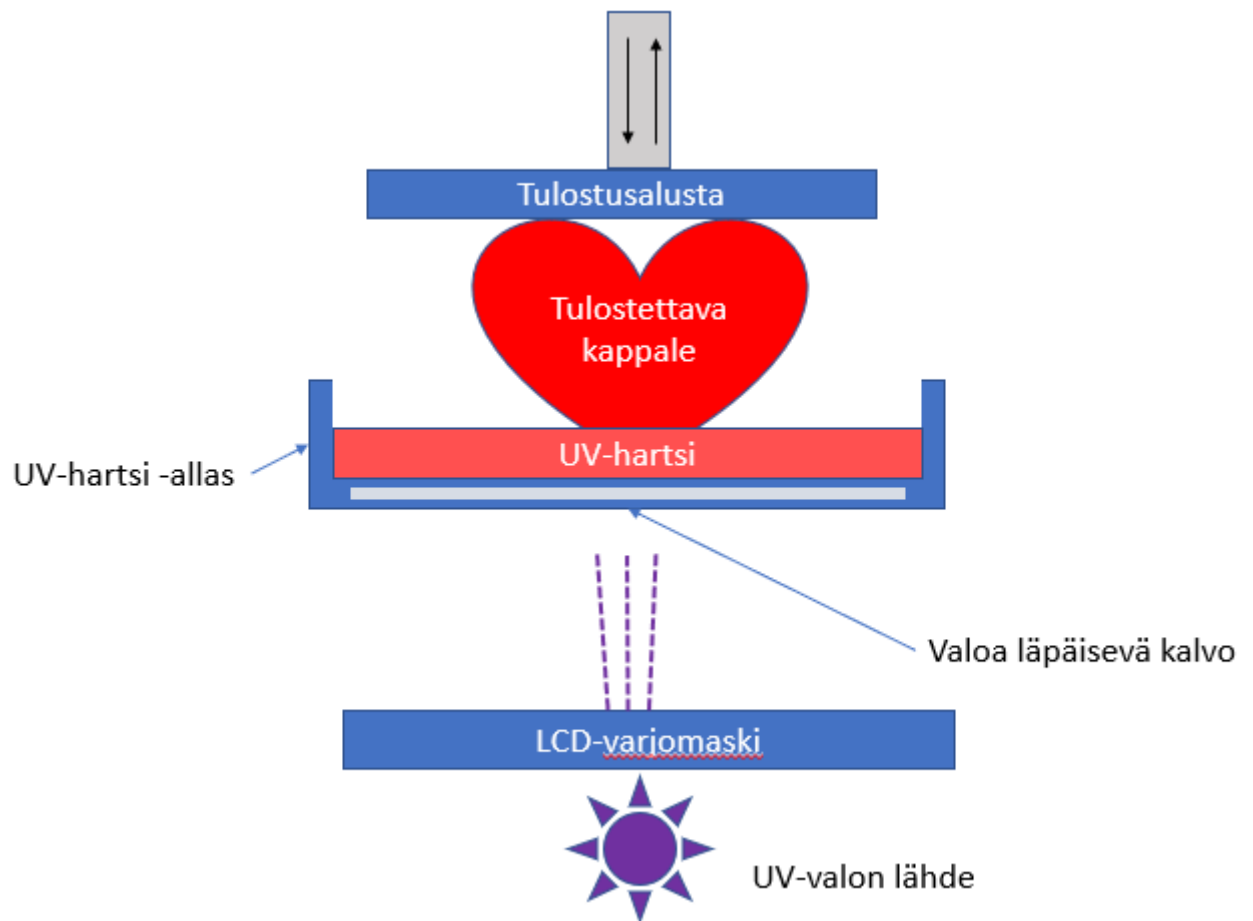
3.4.2. Stereolitografia

Stereolitografia (SLA) perustuu fotosensitiivisen nesteen jähmettymiseen tarkasti kohdistetun UV-valon avulla. (Kuva 8) Menetelmässä fotopolymeraatio tapahtuu paikallisesti haluttuun kohteeseen, jolloin neste jähmettyy suunnitelluksi kiinteäksi kappaleeksi. UV-hartsissa oleva initiaattori käynnistää polymerointireaktion, kun siihen kohdistetaan UV-valoa. (Phillips, 1984)



Kuva 8. SLA-tulostuksen polymerointireaktio perustuu kohdistettuun ultraviolettivaloon.

SLA-tulostimien (kuva 9) toiminta perustuu pystysuunnassa liikkuvaan tulostusalustaan, johon kohdistetaan alapuolelta UV-valoa. Kohdistaminen voi tapahtua ohjautuvalla UV-laserilla, digitaalisen projektorin avulla tai UV-valoa varjostavan LCD-maskin avulla. (Frey, 2017) Tässä tutkimuksessa käytetty ANYCUBIC PHOTON hyödyntää LCD-varjomaskia. (Team ANYCUBIC, 2018)



Kuva 9. LCD-varjomaski päästää UV-valon niihin kohtiin, joihin polymeroinnin on tarkoitus tapahtua.

SLA-tulostuksen kustannukset ovat pudonneet viime vuosina (Grieser, 2018), ja tulostimia onkin saatavilla jo alle 500 €:n hintaan. UV-hartsien rajoitteena voidaan pitää termoplastista muovia kalliimpaa hintaa, rajoittunutta käyttöaluetta (vain kovia tulosteita), tulosteiden haurautta sekä viimeistelyyn ja käyttöön liittyvää työläyttä. Sen sijaan SLA-tekniikalla on mahdollista tulostaa paremmalla tarkkuudella monimutkaisia rakenteita, joihin FDM-tekniikalla ei yllä. (Grieser, 2018)

3.4.3. Tulostuksen turvallisuus

Laadukkaiden tulosteiden ja käyttökustannuksien lisäksi on perusteltua arvioida myös 3D-tulostuksen turvallisuutta – erityisesti opetusympäristössä tapahtuvassa toiminnassa. Tulostusprosessi sisältää vaiheita, jotka voivat olla terveydelle haitaksi. Tutkimuksissa on havaittu, että termoplastisen muovin sulaessa ilmaan haihtuu merkittäviä määriä pienihiukkasia (Bharti & Singh, 2017). Lisäksi joidenkin tulostusmateriaalien, kuten nestemäisten UV-hartsien käsittely vaatii erityistä varovaisuutta ja suojavälineitä. (Bharti & Singh, 2017; RadTech International, 2018; Team ANYCUBIC, 2018). Tässä luvussa esitellään 3D-tulostuksen turvallisuutta yleisellä tasolla (luku 3.4.3.1.) ja tutkimuksessa käytetyn laitteen osalta erikseen (Luku 3.4.3.2.)

3.4.3.1. Kolmiulotteisen tulostuksen yleiset turvallisuusnäkökulmat

Kemian opetuksen alalla huolenaihe koskettaa yleisimmin käytettävien tulostusmateriaalien, PLA:n ja ABS:n, turvallisuutta. PLA:n tulostuksen aikana on havaittu sisäilmasta nanopartikkeleita (UFP) ja helposti haihtuvia orgaanisia yhdisteitä (VOC). PLA:n on arvioitu olevan turvallisuusnäkökulmasta kuitenkin parempi vaihtoehto kuin ABS:n, sillä PLA voidaan tulostaa alhaisemmassa lämpötilassa ja tulostusalustaa ei tarvitse lämmittää. ABS-muovin tulostuksen aikana on havaittu myös enemmän tulostuksesta aiheutuneita pienihiukkasia sisäilmassa. ABS-muovin tulostus voi aiheuttaa epämiellyttävää hajua, pääkipuja ja silmäoireita (Bharti & Singh, 2017)

Yleisohjeiksi 3D-tulostuksessa on ehdotettu (Bharti & Singh, 2017) seuraavia varotoimenpiteitä:

1. Ennen uuden 3D-tulostimen ostamista tulee tehdä asianmukainen turvallisuusriskiselvitys, jossa tulisi huomioida tulostin, käytettävät materiaalit, tulostimen sijainti ja ilmanvaihto.
2. Valmistajan ohjeita tulee noudattaa 3D-tulostuksen aikana ja tulostimessa saa käyttää vain valmistajan suosittelemia materiaaleja. Turvallisuusohjeet tulee olla saatavilla ja luettavissa myös kaikista käytössä olevista tulostusmateriaaleista. Niistä tulisi ilmetä materiaalien käsittely, säilytys ja suojautuminen.

3. Käyttäjät tulisivat olla koulutettu asianmukaiseen ja turvalliseen käyttöön. Käyttäjien tulisi olla tietoisia tulostamisesta aiheutuvista mahdollisista terveysriskeistä.
4. 3D-tulostimia ei tulisi käyttää yli 2-3 tuntia pienissä huoneissa, joissa ei ole tehokasta ilmanvaihtoa. Varsinaisissa tulostushuoneissa tulisi olla hyvä ilmanvaihtojärjestelmä ja huoneilman pitäisi vaihtua vähintään neljä kertaa tunnissa.
5. Tulostusalueella ja tulostusmateriaalien läheisyydessä ei saa olla elintarvikkeita eikä juotavaa. Tulostuksen aikana tulostimen liikkuvia osia ei saa koskea eikä häiritä.
6. Tulostushuoneen koko rajoittaa sitä, kuinka monta tulostinta tilassa saa olla. Toimistohuoneen kokoisessa tilassa ei tulisi olla kuin yksi tulostin. Jos mahdollista, niin ABS-materiaalin tulostus tulisi tehdä vetokaapissa.
7. Erikoismateriaalien kuten termoplastisten muovien, fotopolymeerien, nailonin, iskunkestävän polystyreenin, jauheiden, metallien ja biologisten aineiden käytössä täytyy noudattaa erityistä huolellisuutta.
8. Vaarallisia materiaaleja, kuumia pintoja ja tiettyjä tulostusmateriaaleja käsiteltäessä tulee käyttää asianmukaisia henkilösuojaimia. Silmäsuojaus on tarpeen, jos on riski sille, että ilmassa on lentäviä pienkappaleita tai materiaalia voi roiskua silmiin.
9. Silmäsuihku tulee olla käytettävissä sellaisissa tulostusprosesseissa, joissa käytetään emäksisiä liuoksia tukimateriaalien poistamiseksi.
10. Emäksisiä nesteitä käytettäessä tulee pukeutua laboratoriotakkiin, kumihanskoihin ja suojalaseihin.
11. Jätteenkeräys ja siivous tulee olla järjestetty asianmukaisesti siten, että tulostuspaikalta löytyvät kemikaalien siivousliinat, pesuaineet, jätteenkeräyspussit, kemikaalijättemerkinnät. Emäksisiä nesteitä käytettäessä tulostuspaikalla tulisi olla varauduttu myös niiden neutralointiin.
12. Emäksinen jäte tulee eritellä vaarallisiin jätteisiin, sillä viemäristä se voi kulkeutua vesistöihin, joissa osa aineista voi olla haitallisia vesieliöille.

3.4.3.2. ANYCUBIC PHOTON -tulostimen turvallisuus

ANYCUBIC PHOTONin toiminta perustuu fotopolymerointiin, jonka käyttö vaatii Bhartin ja Singhin (2017) mukaan erityistä huolellisuutta. Laitteen käyttöturvallisuusohjeissa (Team ANYCUBIC, 2018) kehoitetaan käyttämään suojakäsineitä ja hengityssuojainta UV-hartsin käsittelyn aikana. Ohjeiden mukaan laite tulee pitää lasten ulottumattomissa ja säilytettävä huoneenlämmössä pölyttömässä tilassa, johon ei kohdistu suoraa auringonvaloa. Käyttäjien

huolenaiheena ovat yleensä SLA-tulostimien aiheuttama haju, joka voi olla häiritsevän voimakas.

Radtech (UV-valo ja -elektronisuihkututkimukseen keskittynyt ei-kaupallinen yhdistys) esittää UV-hartsin käsittelylle ANYCUBICin käyttöturvaohjetta laajempia varotoimenpiteitä. Radtechin (RadTech International, 2018; liite 1) mukaan UV-hartsia käsittelevän 3D-tulostajan tulisi huomioida seuraavat asiat:

- Valmistajan ohjeiden ja turvallisuustietolomakkeen määräyksien noudattaminen
- Henkilökohtaisista suojavarusteista huolehtiminen
- Turvallisen, siistin ja hyvin ilmastoidun tulostustilan järjestäminen
- Varmistuminen siitä, että hartsia ei kulkeudu tulostustilan ulkopuolelle
- Henkilökohtaisesta hygieniasta huolehtiminen
- Jätteiden asianmukaisesta hävittämisestä huolehtiminen
- Ensiaputoimenpiteiden tunteminen altistumisen jälkeen
- Hartsin asianmukaisesta säilyttämisestä huolehtiminen.

3.5. Teoreettisen ongelma-analyysin yhteenveto

Teoreettinen viitekehys on osaltaan tukemassa oppimateriaalin kehittämistä sekä turvallisen 3D-tulostuksen toteuttamista. Ongelma-analyysin perusteella voidaan tehdä seuraava yhteenveto:

- Optisen isomerian opetus sisältää haasteita, jotka liittyvät ennen kaikkea kolmiulotteisten molekyylien hahmottamiseen ja sen yhdistämiseen rakennekaavaan
- Kolmiulotteinen tulostus on nykypäivänä taloudellisesti mielekäs ratkaisu fyysisten molekyylimallien valmistusmenetelmänä
- Kolmiulotteisen tulostuksen avulla voidaan valmistaa toimivia ja visuaalisia molekyylimalleja
- Kolmiulotteisen tulostuksen turvallisuus on merkittävä käytössä huomioitava asia. Erityisesti tässä tutkimuksessa käytetyn ANYCUBIC PHOTON -tulostimen käyttö vaatii perehtyneisyyttä ja soveltuvia työtiloja.

4. Empiirinen ongelma-analyysi

Empiirisin ongelma-analyysin tarkoituksena on saada käsitys siitä, miten optista isomeriaa opetetaan lukioissa. Selvitys tehtiin tutustumalla kahteen yleisesti lukioissa käytettyyn oppikirjaan (Vuoden 2005 ja vuoden 2016 Mooli 2). Oletukseksi asetettiin, että opettajat käyttävät yleisesti kyseisiä oppikirjoja opetusmateriaalinaan ja optinen isomeria opiskellaan pääasiassa kirjan tarjoaman sisällön mukaisesti.

Empiirisen ongelma-analyysin tarkoituksena oli etsiä oppikirjojen sisällöistä vajavaisuuksia, jotka voivat olla esteenä optisen isomerian oppimiselle. Puutteita verrataan teoreettisessa ongelma-analyysissä ilmenneisiin seikkoihin:

- Kiraalisten molekyylien kolmiulotteisen rakenteen hahmottaminen
- Kiraalisten molekyylien kolmiulotteisen rakenteen yhteys piirrettyyn viivakaavaan
- Kiraalisten molekyylien tunnistaminen.

Arvioitava sisältö keskittyykin ensi sijassa kirjojen molekyylirepresentaatioihin optista isomeriaa käsittelevissä kappaleissa ja tehtävissä. Empiirinen ongelma-analyysi on tässä yhteydessä merkityksellinen, jos voidaan löytää puutteita nykyisestä oppikirjoista ja kehittää sen tueksi tai tilalle uusia opetusmateriaaleja.

4.1. Mooli 2: Ihmisen ja elinympäristön kemiaa (2005)

Vuoden 2005 opetussuunnitelmaan perustuvassa oppikirjassa optinen isomeria esitellään esimerkin avulla; luonnossa esiintyvällä maitohappomolekyylillä on avaruusisomeerit, jotka ovat toisensa peilikuvia. Käsitteellisesti optisesta isomeriasta mainitaan optinen aktiivisuus ja tasopolarisoidun valon kääntyminen, asymmetrinen hiili ja kiraalisuus sekä enantiomeerit ja raseeminen seos. (Lehtiniemi & Turpenoja, 2005)

Kiraalisten molekyylien representaatioista MOOLI 2:ssa esitetään rakennekaava, joiden viereen on piirretty kolmiulotteiset mallit vastaavista molekyyleistä. Enantiomeerien tunnistamisesta mainitaan L-isomeeri, jonka määräytymistä ei kuitenkaan käsitellä.

Kirjan tehtävissä painotetaan asymmetrisen hiilen löytämistä ja optisen isomerian esiintymisen tunnistamista. Asymmetrisen hiilen löytämistä harjoitellaan rakennekaavoista ja molekyylikaavoista. Kahdessa tehtävässä annetaan tehtäväksi piirtää rakennekaavat enantiomeereista ja yhdessä tehtävässä tulee arvioida optisen isomerian esiintymisen mahdollisuutta annettujen atomimassaosuuksien perusteella. (Lehtiniemi & Turpeenoja, 2005)

4.2. Mooli 2: Ihmisen ja elinympäristön kemiaa (2016)

Vuoden 2016 opetussuunnitelmaan pohjautuvassa MOOLI-sarjan kirjassa optinen isomeria esitellään asymmetriseen hiileen perustuvan määritelmän avulla. (Lehtiniemi & Turpeenoja, 2016) Optista isomeriaa käsittelevässä kappaleessa esitetään seuraavat käsitteet; tasopolarisoitu valo, optinen aktiivisuus, kiraalisuus, peilikuvaisomeria ja enantiomeria. Optisen aktiivisuuden yhteydessä esitetään myös enantiomeerien nimeämiseen liittyvät l- ja d-etuliitteet.

Enantiomeerien rakennekaavan ja kolmiulotteisen rakenteen yhteys esitetään maitohappomolekyylienesimerkin avulla – samoin kuin vuoden 2005 painoksessakin. Lisäksi kirjassa esitetään diastereomeria viinihappomolekyylienesimerkin avulla. Kaksi kiraliakeskusta mainitaan diastereoisomerian vaatimukseksi, mutta diastereomeerien ja atomien sitoutumisjärjestyksen välistä yhteyttä ei avata muuta kuin pallotikkumallin yhteydessä lyhyenä mainintana.

Optiseen isomeriaan liittyvät tehtävät painottavat – vanhemman painoksen tapaan – optisesti aktiivisten yhdisteiden tunnistamista ja kiraliakeskuksen löytämistä rakennekaavoista ja molekyylikaavoista. Lisäksi harjoitellaan peilikuvaisomeerien piirtämistä ja optiseen isomeriaan liittyvien käsitteiden tunnistamista lauseentäydennystehtävällä.

4.3. Empiirisen ongelma-analyysin yhteenveto

MOOLI 2 –kirjat esittävät optisen isomerian oleelliset käsitteet. Teoriatieto yhdistetään esimerkkeihin, joissa käytetään pienikokoisia kiraalisia molekyyliä. Niiden representaatiot (rakennekaava ja kolmiulotteista rakennetta kuvaava pallotikkumalli) kuvataan vierekkäin. Sen voi arvioida mahdollistavan rakennekaavan ja kolmiulotteisen rakenteen välisen yhteyden havaitsemisen. Kirjojen sisältö ei käsittele kuitenkaan asioita, joita pidetään (Abraham ym., 2010; Copolo & Hounshell, 1995; Dori & Barak, 2001) tärkeinä kemian opetuksen tutkimuksessa:

- Enantiomeerien identifiointi rakennekaavasta
- Kolmiulotteisen rakenteen hahmottaminen rakennekaavasta (kirja ei esittele atomien ja atomiryhmien sitoutumisjärjestystä)
- Enantiomeerien systemaattinen nimeäminen rakennekaavasta (R/S-isomeriaa ei käsitellä kirjoissa).

MOOLI 2 -kirjat painottavat harjoitustehtävissä kiraalisen hiilen tunnistamista rakennekaavoista ja molekyylikaavoista. Myös optiseen isomeriaan liittyviä käsitteitä harjoitellaan tehtävissä, mutta kolmiulotteisen rakenteen yhdistäminen rakennekaavaan jää kirjojen teoriaosuuksissa käytännössä käsittelemättä, eikä sitä harjoitella myöskään tehtävissä. Tämä asia voidaan arvioida oleellisimmaksi puutteeksi MOOLI 2 –kirjoissa. Tämä ja muut edellä mainitut puutteet vaikuttavat luvussa 5 käsiteltävään pedagogisen tuotteen suunnitteluun, sillä uusi oppimateriaali voisi täydentää oppikirjojen sisältöä.

5. Kehittämisprosessi

Optisen isomerian oppimiseen liittyvät tarpeet, 3D-tulostuksen mahdollisuudet ja rajoitteet sekä käytetty 3D-tulostin (ANYCUBIC PHOTON) vaikuttivat konkreettisesti suunniteltavan oppimateriaalin kehittämiseen. Oppimateriaalin tavoitteeksi asetettiin kolmiulotteista hahmottamiskykyä haastava kokonaisuus, jossa hyödynnetään visuaalisia ja laadukkaita 3D-tulostettuja molekyylimalleja. Kokonaisuus toteutettiin seuraavassa järjestyksessä

1. Molekyyylimallien kehittäminen
2. Oppimismateriaalin kehittäminen
3. Oppitunnin suunnittelu

5.1. Kolmiulotteisesti tulostetut molekyylimallit

Molekyyylimallien tulostamista varten hankittiin ANYCUBIC PHOTON -3D-tulostin, koska sillä on mahdollista tulostaa tarkkoja ja kestäviä kappaleita. SLA-tekniikkaa hyödyntävä ANYCUBIC PHOTON ylittää vaikuttavaan 0,047 mm tulostustarkkuuteen (Team ANYCUBIC, 2018), joka arvioitiin tärkeäksi tulostettaessa laadukkaita, koottavia molekyylimalleja.

Optisen isomerian representaatiota varten tarvitaan erilaisia atomeita ja atomiryhmiä. Tätä varten suunniteltiin molekyyylimallisesti (taulukko 3), joka sisältää hiiliatomien ja vetyatomien lisäksi halogeeneja sekä happea sisältäviä funktionaalisia ryhmiä. Erilaisten atomien ja atomiryhmien lisääminen molekyyylimallisesti arvioitiin tuovan fyysisiin molekyylimalleihin monipuolisuutta, visuaalisuutta ja riittävästi variaatiomahdollisuuksia. Atomien ja funktionaalisten ryhmien lisäksi molekyyylimallisesti tarvitaan atomien välisiä kovalenttisia sidoksia mallintavat putket.

Taulukko 3. Molekyylimallisetin rakennuspalikat.

Atomit ja funktionaaliset ryhmät	Määrä
H	10
C (sp ³)	5
F	1
Br	1
OH	1
Kovalenttiset sidokset	
C-H	10
C-C	5
C-OH	1
C-F	1
C-Br	1

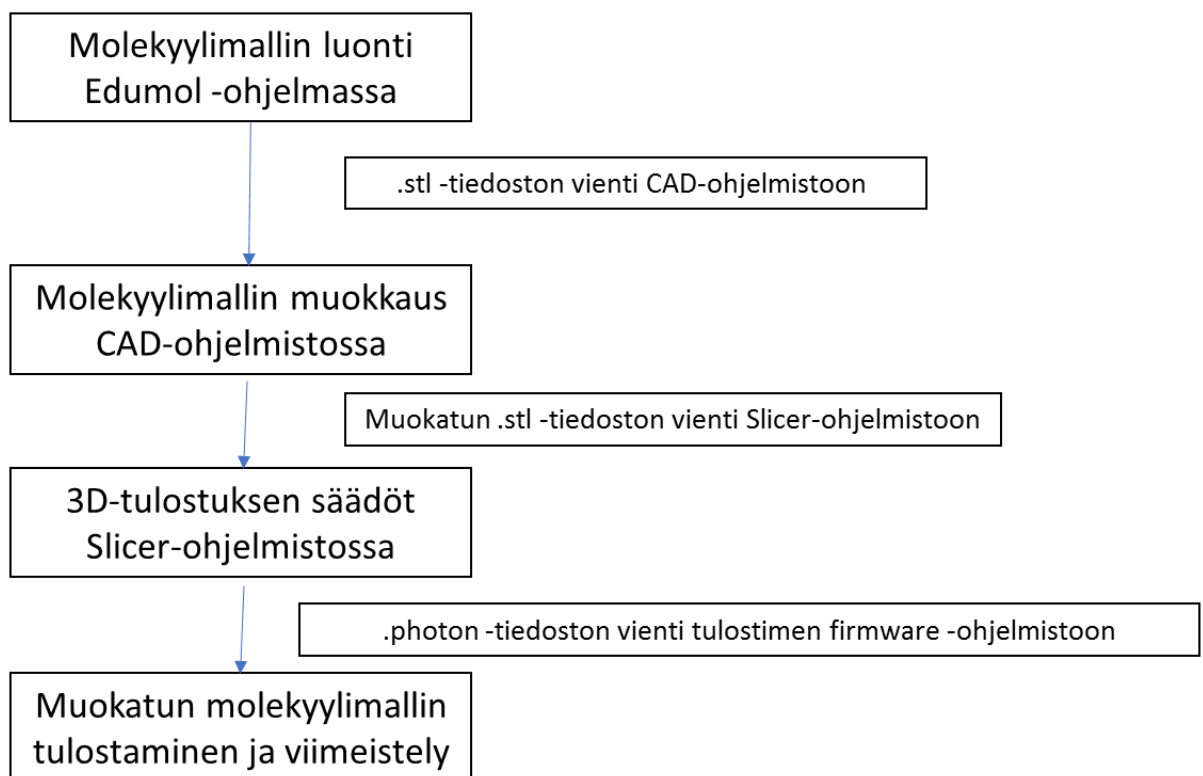
Molekyylimallien suunnittelua jatkettiin CAD-ohjelmistolla, kun taulukon 3 mukaiset rakennuspalikat päätettiin valmistaa.

5.2.1 Tietokoneavusteinen suunnittelu

Kolmiulotteisen tulostuksen hyödyntäminen alkoi ideasta luoda oppimista tukevia, fyysisiä molekyylimalleja. CAD-ohjelmiston, joilla voidaan luoda ja muokata kolmiulotteisia virtuaalimalleja fyysisistä kappaleista, arvioitiin mahdollistavan koottavien molekyylimallien toteuttamisen. Tulostettaville molekyylimalleille asetettiin seuraavat vaatimukset:

1. Riittävä kestävyys
2. Havainnollistavuus
3. Helppo koottavuus
4. Molekyyligeometrian säilyminen
5. Ulkonäkö

Edumol (selainpohjainen molekyylihallinnusohjelmisto) otettiin avuksi, jotta voitiin tulostaa fyysisiä molekyylimalleja, joiden sidoskulmat, sidosten pituudet ja atomien approksimoitu säde vastaavat laskennallisia mittasuhteita. Edumol -ohjelmisto mahdollistaa molekyylihallinnon tallentamisen .stl -muodossa. Virtuaaliset molekyylihallinnat muokattiin edelleen Tinkercad-ohjelmassa koottaviksi paloiksi: molekyylien välisiksi sidoksiksi, atomeiksi ja funktionaaliksi ryhmiksi. CAD-ohjelmistolla suunnitellut mallit siirrettiin edelleen Slicer-ohjelmistoon lopullisia 3D-tulostussäätöjä varten (luku 5.2.3.). Tulostettujen kappaleiden viimeistelyä käsitellään luvussa 5.2.5. Koottavan molekyylihallinnon kehittäminen esitetään kuvassa 10.



Kuva 10. Koottavan molekyylihallinnon kehittämiskaavio.

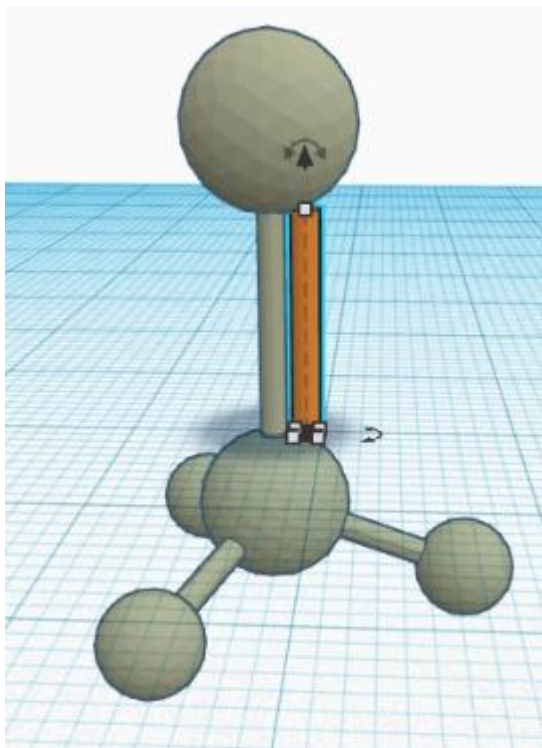
CAD-suunnittelusta ei ollut aiempaa kokemusta ennen tätä tutkimusta, joten CAD-ohjelmistoksi valittiin ilmainen, selainpohjainen Tinkercad, koska sitä pidetään yleisesti helppokäyttöisenä aloittelevan 3D-tulostajan työkaluna.

Edumol, selainpohjainen ohjelmisto toimi apuna erityisesti siinä, että molekyylihallinnasta voitiin tuottaa laskennallista molekyylihallinnaa vastaavia kappaleita. (Kuvat 11 ja 12) Edumolin tietokannasta haettiin taulukko 4:n mukaisesti molekyylihallinnat ja siirrettiin CAD-

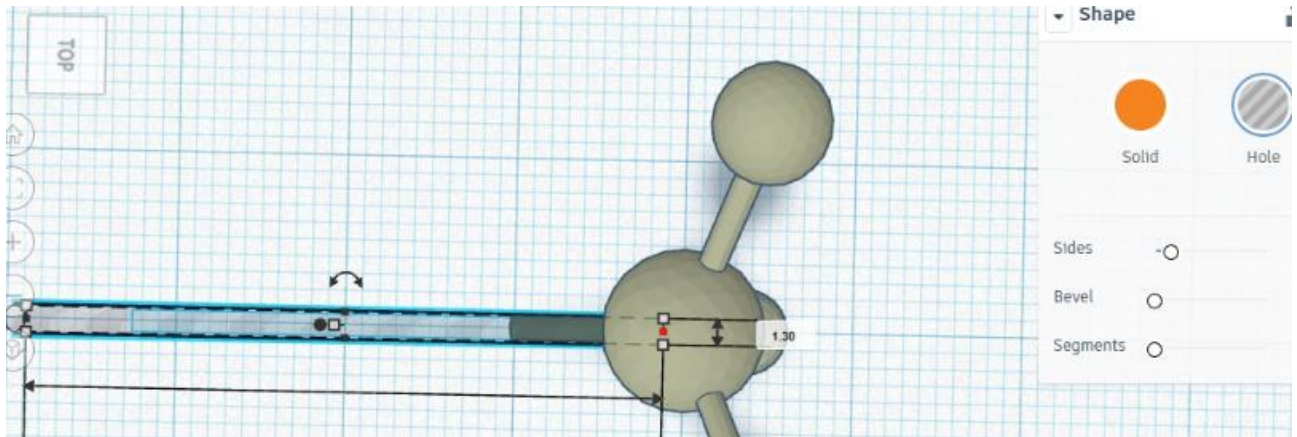
ohjelmistoon. Näistä molekyyleistä voitiin muokata halutut atomit, sidokset ja funktionaaliset ryhmät.

Taulukko 4. Eri molekyyliä pilkottiin CAD-ohjelmistossa atomeiksi ja sidoksiksi

Molekyyli	Atomi/funktionaalinen ryhmä	Sidos
Metaani	C (sp ³), H	C-H
Etaani		C-C
Eteeni	Alkeeni-ryhmä	>C=C<
Metanoli	Hydroksidi	C-OH
Asetoni	Ketoni	-CO-
Fluorometaani	Fluori	C-F
Bromometaani	Bromi	C-Br



Kuva 11. Esimerkki molekyyligeometrian säilyttämisestä: Edumolista ladatun bromoetaanimallin avulla voitiin luoda mittasuhteita vastaava C-Br -sidos (kuvassa oranssilla)



Kuva 12. Sp^3 -hybridisoituneen hiilen orientaatio säilyy, kun ”Hole”-työkalu asetetaan tekemään sidosten reiät molekyyli mallin sidoksia vastaavaan kulmaan.

Taulukossa 4 mainittuja kappaleita iteroitiin Tinkercadissa viidessä syklissä, sillä tulostuksen (luku 5.2.4) jälkeen havaittiin kehittämistarpeita seuraavissa muuttujissa:

- Kappaleiden koko
- Sidosputken paksuus
- Atomin reiän sopivuus sidosputkeen

5.2.3. Slicer-ohjelmiston käyttö

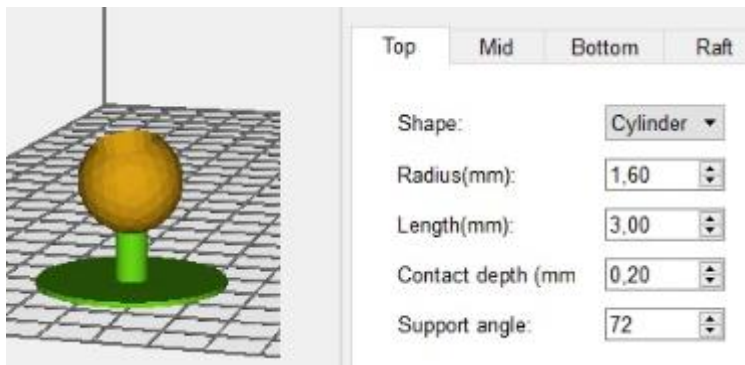
Slicer on ohjelmisto, joka viipaloi virtuaaliset kappaleet tulostettaviksi kerroksiksi ja tulostimen ymmärtämäksi tiedostomuodoksi. Photonslicer-ohjelmistolla .stl -tiedostot muutettiin .photon -tiedostomuotoon, joka vaaditaan ANYCUBIC PHOTON -tulostimen firmware-ohjelmistoa varten. (Kuva 10) Photonslicerissa voidaan lisäksi muokata tukirakenteita, UV-valon kestoa, kerrosten paksuutta, tulostuksen tarkkuutta, skaalata kappaleiden kokoa sekä siirtää ja kääntää niitä tulostamista varten sopivaan asentoon.

Slicer-ohjelman säätöjä (taulukko 5) iteroitiin 4 kertaa paremman tulostusjäljen saavuttamiseksi. Slicer-säätöjen avulla pystyttiin vaikuttamaan seuraaviin tulostuksessa havaittuihin ongelmiin:

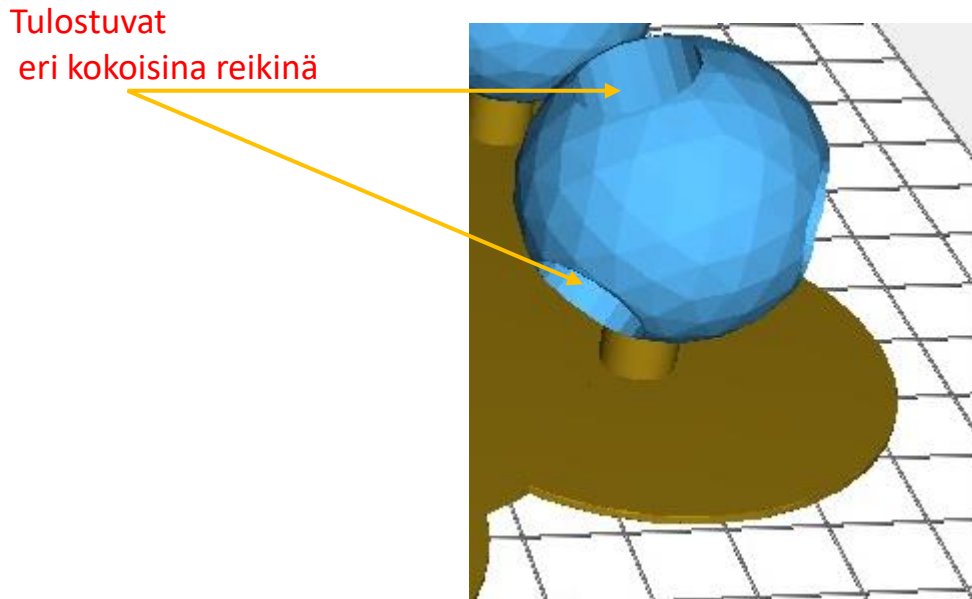
- Tulostusalustasta tippuvat kappaleet
- Liian tiukasti tulostusalustaan kiinnittynyt tukipohja.

Taulukko 5. Slicer-säätöjen muuttujat, vaikutukset ja ratkaisut

Muuttuja	Vaikutus/vaihtoehdot	Ratkaisu
Tulostuskerroksen paksuus	Tarkkuus, vaadittava polymerointiaika	Vakioitiin (0,05 mm)
Pohjakerroksen polymerointiaika	Tulosteen kiinnittyminen alustaan: <ul style="list-style-type: none"> • liian lyhyt ->tulosteet tippuvat • liian pitkä -> tuloste on vaikea irrottaa 	Säädettiin 60 s
Kerrosten polymeroitumisaika	Kappaleen polymeroitumisaste, tulostusaika	Vakioitiin (9 s)
Tukipohjan koko	Tulosteen kiinnittyminen alustaan <ul style="list-style-type: none"> • liian pieni → tuloste tippuu • liian suuri → hartsia kuluu tarpeettomasti 	Kappaleen halkaisijaa säädettiin suuremmaksi 1,5 mm paksuksi sylinteriksi (kuva 13)
Kappaleiden kiinnitys tukipohjaan tukirakenteilla	Kappaleiden kiinnittyminen tukipohjaan	Yksi sylinterinmallinen 1,6 mm säteinen tukirakenne (kuva 13)
Tulostettavien atomien reikien asento tulostuspohjaan nähden	Erikokoiset kiinnitysreiät	Ei korjattavissa Slicer-säädöillä (kuva 14)



Kuva 13. Sopiva tukirakenne vetyatomille.



Kuva 14. Tulostettavien reikien läpimittaan vaikuttivat reikien orientaatio.

5.2.4. Tulostus

Tulostettavat .photon -tiedostot siirrettiin tulostimelle muistitikulla, jonka jälkeen 3D-tulostimen tulostussäiliö täytettiin tarvittavalla määrällä UV-hartsia. Suunnitellun pedagogisen tuotteen osat tulostettiin kahdessa osassa. ANYCUBIC PHOTONin tulostustilavuus on 115 mm (leveys) x 65 mm (syvyys) x 155 mm (korkeus) ja koska haluttiin varmistua tasalaatuisesta tulostusjäljestä niin tulostustilaa ei täytetty äärimmilleen. Yhden molekyyliä tulostus kesti yhteensä 7 h 17 min ja kulutti 1,5 dl UV-hartsia. Kulutus arvioitiin mittaamalla kuluneen UV-hartsin tilavuus. Hartsin kulutukseen vaikuttavat tulostettuihin kappaleisiin kuluneen aineen lisäksi tulostusprosessissa höyrystyvä aine, tulosteiden pinnalle jäävä aine sekä kierrätysvaiheessa hartsisäiliöön ja suodattimeen jäänyt hartsi. Taulukko 6:ssa eritellään kappaleiden tulostusaika, materiaalin kulutus sekä molekyyliä hinta.

Taulukko 6. Tulostettujen kappaleiden tulostusaika ja UV-hartsin kulutus

Tulostetut kappaleet		Tulostuksen kesto	Materiaalin kulutus
Määrä			
C-H	10	3 h 7 min	0,6 dl
C-C	5		
C-B	1		
C-F	1		
C-OH	1		
Vetyatomeita	10		
Hiiliatomeita	5	4 h 10 min	0,9 dl
Ketoniryhmä	1		
Hydroksyyli-ryhmä	1		
Fluoriatomi	1		
Bromiatomi	1		
		Yht. 7 h 17 min	Yht. 1,5 dl
			Molekyylisetin hinta¹
			15,50 €

¹UV-hartsia ostettiin hintaan 51,72 € / 500ml

Tulostetut kappaleet (kuva 16) irrotettiin tulostusalustasta muovilastalla. Kappaleille sopivat tulostussäädöt etsittiin kokeiluluontoisesti vaihtelemalla eri muuttujia Tinkercadissa ja Photonslicerissa, jotka vaikuttavat tulostettavien kappaleiden laatuun. Epäsopivat säädöt aiheuttivat mm. tulosteiden tippumista, liian voimakasta kiinnittymistä alustaan (kuva 16) ja huonolaatuisia tulosteita (kuva 15). Löydetyt säädöt soveltuvat tässä kehittämistutkimuksessa tulostettuihin kappaleisiin, kun käytetään Photoresin sensitive – UV-hartsia ja PHOTON ANYCUBIC –3D-tulostinta.



Kuva 15. Tavoitellut 2,6 mm reiät eivät pysyneet aukinaisina tulostusprosessissa vaan täyttyivät polymeeristä. Liian useat pienet tukirakenteet haittasivat kappaleen viimeistelyä.



Kuva 16. Kolmen molekyyliidoksen ja kolmen hiiliatomin onnistunut tulostus. Kappaleet pysyvät kiinni tukirakenteissa ja ovat muodoltaan tavoiteltuja. Tukipohja ei kuitenkaan irronnut tulostusalustasta helposti, koska pohjakerroksen polymeeroitumisaika oli säädetty liian pitkäksi.

5.2.5. Tulosteiden viimeistely

Tulostusteiden viimeistelyyn kuuluvat huuhtelu, polymeroinnin kovetus, kappaleiden irrotus tukirakenteista ja pintojen siistiminen. Lisäksi molekyylimallien atomit maalattiin eri värein visuaalisuuden parantamiseksi. Viimeistelyvaiheisiin käytetyt aineet ja välineet ilmenevät taulukosta 7.

Taulukko 7. Tulostuksen viimeistelyn vaiheet.

Viimeistelyn vaihe	Käytetyt välineet/aineet
Huuhtelu	Pihdit, Lasol-tuulilasinpesuneste
Polymeroinnin viimeistely	Original kynsiuuni
Irrotus tukirakenteista	Pihdit, puukko, Dremel-monitoimityökalu
Pintojen viimeistely	Puukko
Maalaus	Kynsilakka

ANYCUBIC PHOTON-tulostimen käyttöohjeessa mainitaan, että tulostetut kappaleet tulisi huuhdella 95% etanolilla tulostuksen jälkeen. Huuhteluaineeksi valittiin 80-100% etanolia (Lasol 100, 2015) sisältävä Lasol-tuulilasinpesuneste. Sininen, denaturoitu Lasol (kuva 17) ei vaikuttanut silmin havaittavasti tulosteiden väriin eikä muotoon ja arvioitiin kustannuksiltaan perustelluksi vaihtoehdoksi.



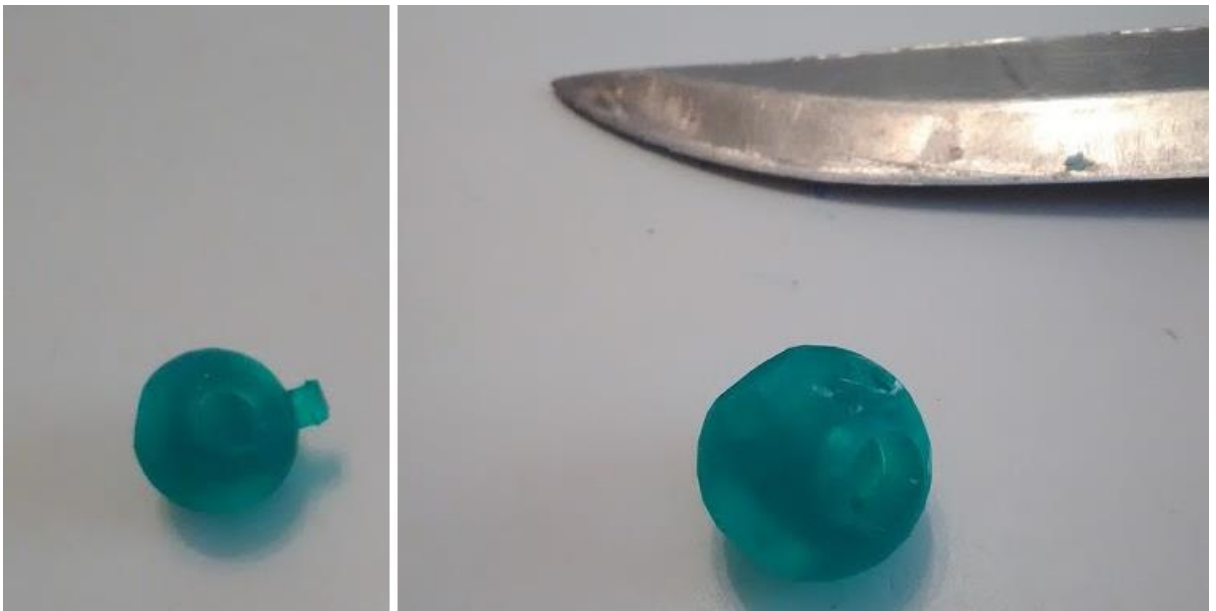
Kuva 17. Tulosteiden huuhtelu Lasolilla.

Huuhdeltujen tulosteiden polymerointi viimeisteltiin UV-kynsiuunissa (kuva 18). Rakennegeelikynsien kovettamiseen suunniteltu laite kovetti myös 3D-tulostetut molekyylimallit onnistuneesti 5 min altistuksella. Markkinoilla saatavilla olevista kynsigeeliuuneista valittiin laite, jonka altistusajan voi säätää manuaalisesti, koska tarvittava altistusaika varsinkin suurikokoisemmille kappaleille voi olla huomattavasti pidempi kuin valmistajien asettama automaattiajastin mahdollistaa.

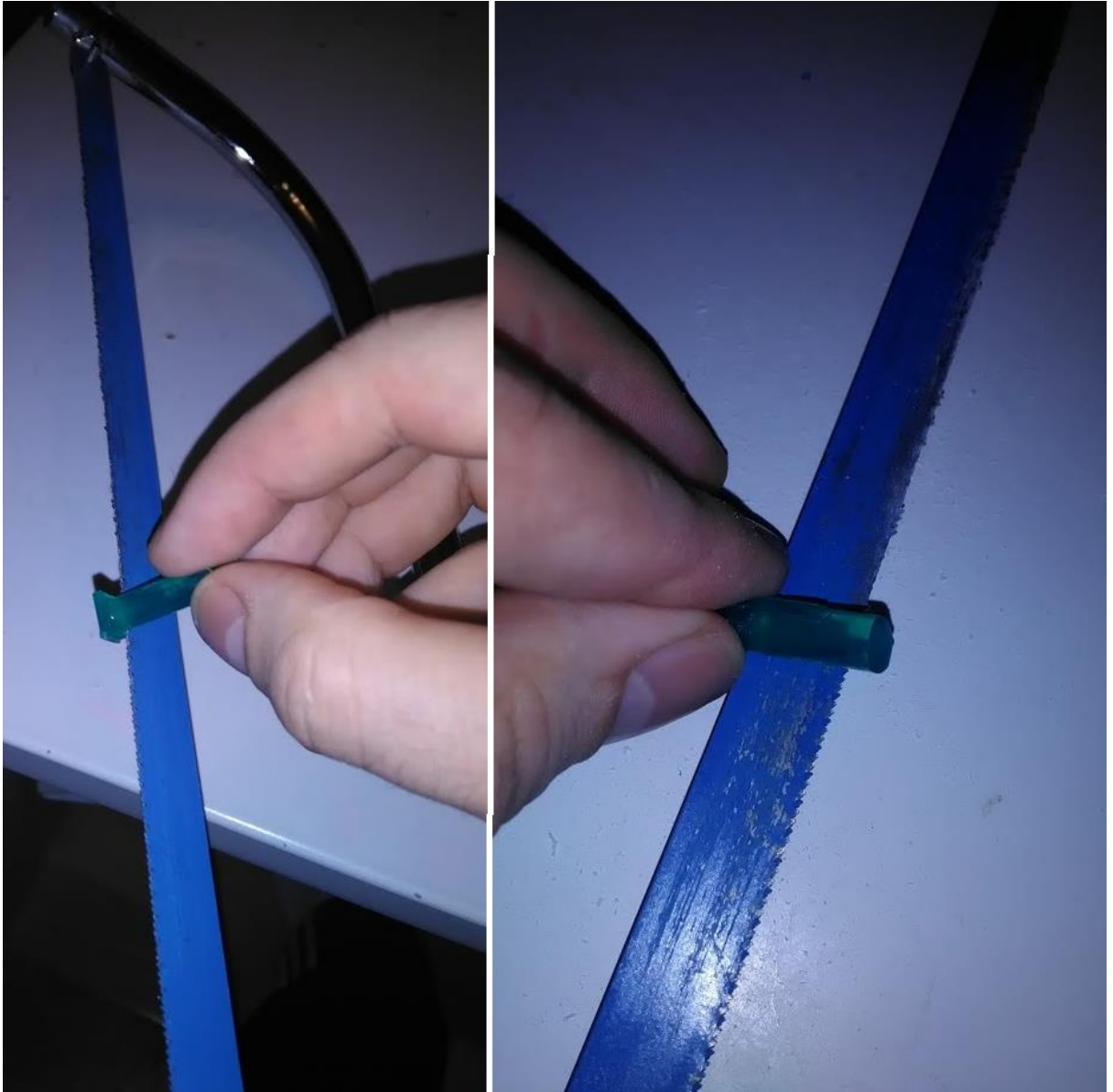


Kuva 18. UV-uunissa tehtiin polymeroinnin viimeistely

Kynsiuunissa kovettunut tuloste irrotettiin tukirakenteista puukolla (kuva 19), rautasahalla (kuva 20) tai Dremel-monitoimityökalulla (kuvat 21 ja 22). Atomimallien irrotus onnistui helposti terävällä puukolla veistämällä ja sidosten irrottamiseen soveltui parhaiten monitoimityökalun katkaisulaikka.



Kuva 19. Vasemmalla yhden 2 mm säteisen sylinteritukirakenteen varassa tulostettu hiiliatomi. Tukirakenne irtoaa terävällä puukolla varovasti vuolemalla.



Kuva 20. Sidosputken pohjatuki voidaan sahata irti rautasahalla. Kuvassa oikealla sahatun sidosputken pinta. Putken paksuudesta (6 mm) johtuen sahaaminen on työlästä. Rautasaha jätti pinnan hieman epätasaiseksi.



Kuva 21. Molekyylisidoksia mallintavien putkien irrottamiseen tukirakenteista käytettiin Dremelin katkaisulaikkaa kierrosnopeudella 30 000 r/min.



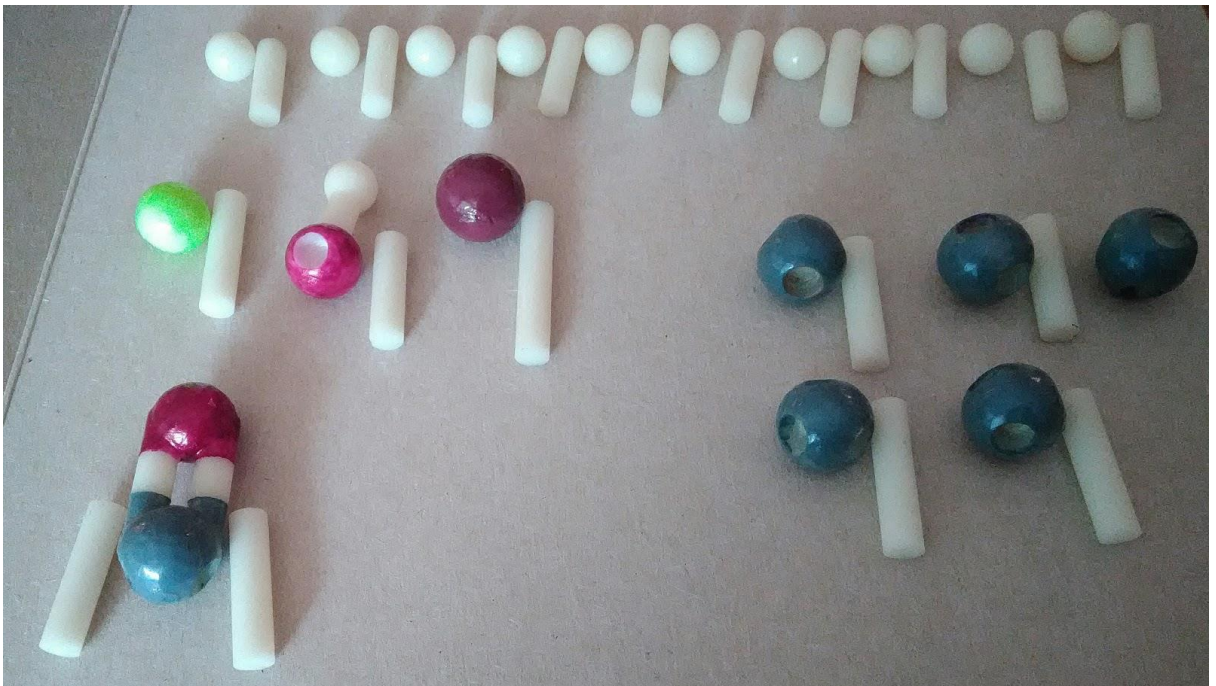
Kuva 22. Tukirakenteessa olevat putket voidaan leikata turvallisesti pitämällä tukevaa otetta pihdeistä. Oikealla leikatun putken pinta vaikuttaa silmännähdessä tasaiselta ja suoralta.

Tasaisiksi viimeisteltyjen pintojen maalaaminen (kuva 23) visuaaliseksi malleiksi toteutettiin erivärisillä kynsilakoilla. Maalaamista varten hankittiin tarpeelliset värit hiiliatomia (harmaa), bromiatomia (ruskea), fluoriatomia (vihreä), sekä hydroksyyliiryhmää ja ketoniryhmää varten (punainen).



Kuva 23. Maalauksen ajaksi laitettiin väliaikaiset suojat estämään kynsilakan joutumisen reikiin. Sp^3 -hybridisoitunut hiili on helppo jättää kuivumaan kolmijalan varaan.

Valmiissa molekyyli mallisettiä (kuva 24) on riittävästi erilaisia atomeita ja hiilivetyketjun osia kiraalisten yhdisteiden rakentamiseksi.



Kuva 24. Valmis molekyyli mallisetti.

5.3. Oppimateriaali

Opiskelijaryhmällä testattava pedagoginen tuote on tässä kehittämistutkimuksessa kirjalliset tehtävät (liite 2), joissa käytetään apuna molekyyli mallisettiä, sekä aiheeseen johdattelevaa teoriaosuutta esimerkkeineen. Suunnittelussa hyödynnettiin 3D-tulostettujen molekyyli mallien mahdollisuuksia ja teoriatietoa isomerian opettamisesta. Pedagogiselle tuotteelle asetettiin seuraavia vaatimuksia:

- Stereoisomerian käsite opetetaan lyhyesti ja ytimekkäästi.
- Enantiomeerien määrittämistä varten on selkeä ohje.
- Tehtävissä keskitytään harjoittelemaan kaksiulotteisen esityksen yhdistämistä kolmiulotteiseen molekyyli rakenteeseen.
- Oppilaat saavat tehtäväkseen ongelmatehtäviä, joissa haastetaan kolmiulotteista hahmotuskykyä.
 - Tehtäviä on riittävästi ja niistä löytyy eritasoisia haasteita.
 - Osa tehtävistä vaatii myös muiden kemian osa-alueiden soveltamista.

Yllä listattujen tavoitteiden pohjalta voidaan asettaa aikataulu oppitunnille. Ajallisesti päädyttiin ratkaisuun, jossa suurin osa ajasta käytetään tehtävien tekemiseen, koska tavoitteena on ennen kaikkea oppia stereoisomeriaa fyysisiä molekyyli malleja hyödyntäen. Oppitunnin rakenne esitetään taulukossa 8.

Taulukko 8. Oppitunnin aikataulu ja aktiviteetit

Aktiviteetti	Tarkoitus	Aika (min)
Optisen isomerian käsite ja isomeerien nimeäminen opettajajohtoisesti	Tehtäviä varten vaadittava teoriatieto	0-15
Tehtävien tekemistä pareittain	Isomerian ja kolmiulotteisen rakenteen ymmärtäminen	15-55
Keskustelua tehtävistä	Pohdintaa ja epäselviksi jääneiden tehtävien läpikäynti yhdessä	55-75

6. Kehittämistuotos

Kehitettyjen molekyylimallien hyödyntämistapojen ja laadun arvioimiseksi järjestettiin empiirinen testi, johon saapui viisi ensimmäisen vuoden yliopisto-opiskelijaa. Opiskelijaryhmään kutsuttiin opiskelijoita sillä perusteella, että heillä olisi tarve syventää ymmärrystään stereoisomeriasta. Molekyylimallien hyödyntämistapoja tutkittiin kvalitatiivisena tapaustutkimuksena ja analyysi suoritettiin havainnoimalla oppilaiden tekemistä ja haastattelemalla heitä.

Tapaustutkimusta ohjasivat seuraavat tutkimuskysymykset:

- Miten molekyylimalleja hyödynnetään oppimistehtävissä?
 - Miten molekyylimalleja hyödynnettiin kiraalisten molekyylien kolmiulotteista hahmottamista haastavissa tehtävissä?
 - Miten molekyylimalleja hyödynnettiin kiraalisten molekyylien välisen vuorovaikutuksen hahmottamista vaativissa tehtävissä?
- Millainen on kolmiulotteisesti tulostettujen oppimateriaalien laatu?
 - Millaiseksi oppilaat kokivat molekyylimallien käytettävyyden ja ulkonäön?

Kiraalisten molekyylien välinen vuorovaikutus aiheena vaatii oppilailta optisen isomerian ymmärtämisen lisäksi sen soveltamista toiseen kontekstiin. Se ennakoitiin mahdolliseksi haasteeksi. Tämän vuoksi tutkimuskysymys, molekyylimallien hyödyntäminen oppimistehtävissä, jaettiin kahteen osaan.

Luvussa 6.1. esitellään mitä tapaustutkimus tarkoittaa ja perustellaan, miksi sitä käytetään tässä tutkimuksessa. Luvussa 6.2. esitellään havainnointi ja haastattelu tapaustutkimuksen tiedonkeruumenetelmänä ja esitetään, miten niitä sovellettiin tässä tapaustutkimuksessa.

6.1. Tapaustutkimus

Tapaustutkimus voi soveltua tutkimusmenetelmäksi, kun selvitetään rajattuun tapahtumaan liittyviä piirteitä. Tällöin tutkimuskysymykset ovat tyypillisesti aseteltu “miten” ja “miksi” -muotoihin.(Yin, 2015) Yksityiskohtaisen, tarkan ja totuudenmukaisen kuvailun tueksi voidaan tarvita rajallista määrää osallistujia. Tapaustutkimuksessa tyypillisesti pyritään myös luomaan luonnollista ympäristöä vastaava tutkimustilanne. (Hirsjärvi & Hurme, 2000) Huomioitavaa on kuitenkin se, että tapaustutkimuksen tulokset voivat olla heikosti yleistettävissä; tutkimuksen merkitys onkin enemmänkin tutkimuskohteeseen liittyvien piirteiden syvälinen ymmärtäminen. (Yin, 2015)

Tapaustutkimus arvioitiin soveltuvan tässä tutkimuksessa molekyylihallien hyödyntämistapojen arviointiin, sillä tutkimuskohteena on erityinen prosessi - miten fyysisiä molekyylihallia käytetään optisen isomerian oppistehtävissä. Tutkimus toteutettiin luokkahuoneessa pienellä määrällä oppilaita ja oppitunti pyrittiin luomaan siten, että se voisi olla stereoisomeriaa käsittelevä oppitunti. Tällä vastataan Hirsjärven ym. (2000) vaatimukseen luonnollisesta ympäristöstä tutkimustilanteessa. Tutkimuskysymykset on asetettu siten, että niiden avulla pyritään saamaan kokonais käsitys tavoista, joita käytetään stereoisomerian oppimistehtävissä.

6.2.Havainnointi ja haastattelu tiedonkeruumenetelmänä

Optisen isomerian oppimisen havainnointivälineenä käytettiin ensisijaisesti videokameraa, jolla nauhoitettiin oppilaiden tehtävien tekeminen. Tämän tarkoituksena oli saada luotettavaa ja yksityiskohtaista tietoa siitä, miten oppilaat hyödyntävät fyysisiä molekyylihallia tehtävien tekemisessä. Tehtävät olivat luonteeltaan itsenäisesti parityönä tehtäviä, joten alun teoriaosuuden jälkeen tutkijan rooli tapaustutkimuksessa oli puhtaasti havainnoitsija. Oppilaiden itsenäisen roolin ja videokameran arvioitiin parantavan havainnoinnin objektiivisuutta, joka on Hirsjärven ym. (2000) mukaan havainnointiin liittyvä haaste.

Anttilan (1996) ja Flickin (2014) mukaan tapaustutkimuksessa voidaan tehdä teoreettiseen tietoon pohjautuen perusteltuja arvioita siitä, mitä tutkimuksessa tulee tapahtumaan ja millaisiin asioihin tutkimuksessa kannattaa kiinnittää huomioita. Tällöin havainnoille tulee olla selkeät tavoitteet ja havainnointi voidaan kohdistaa siten, että kerätty aineisto voidaan järjestää tutkimuskysymyksiä vastaaviin teemoihin. (Anttila, 1996; Flick, 2014) Havainnot järjesteltiin tapaustutkimuksessa tutkimuskysymyksiä vastaaviin teemoihin

- Molekyylimallien hyödyntämistavat
- Molekyylimallien laatu

Myös haastattelulla kerättiin aineistoa yllämainittuihin. Tutkimukseen liitettyjen n. 5 minuutin haastatteluosuuksien avulla pyrittiin keräämään edelleen tietoa siitä, miten opiskelijat hyödynsivät fyysisiä molekyylimalleja tehtävien ratkaisemisessa ja millaiseksi he kokivat 3D-tulostettujen molekyylimallien käytön. Haastattelu yhdistettynä havainnointiin parantaakin tapaustutkimuksen luotettavuutta ja selkeä tutkimuskysymysten ohjaama haastattelu voi tuottaa relevanttia aineistoa. (Hirsjärvi & Hurme, 2000)

Tässä tapaustutkimuksessa oletettiin ennakolta, että opiskelijat voivat muodostaa erilaisia ratkaisumenetelmiä annettuihin tehtäviin. Tästä syystä haastattelukysymykset (liite 6) jätettiin melko avoimiksi ja oppilaat saivat omin sanoin kertoa, miten he päätyivät ratkaisuihinsa. Hirsjärven ja Hurmeen (2000) mukaan onkin perusteltua käyttää avoimia vastausvaihtoehtoja ja tarpeen mukaan strukturoimattomia haastattelukysymyksiä tilanteessa, jossa vastaukset eivät ole täysin ennalta-arvattavia. Haastateltavat olivat vapaaehtoisesti tutkimukseen ilmoittautuneita yliopisto-opiskelijoita, joten heillä oletettiin olevan riittävät sosiaaliset taidot ja motivaatio haastattelussa vaadittavaan sanalliseen vuorovaikutukseen, jota pidetään tärkeänä Hirsjärven ja Hurmeen (2000) mukaan tutkimuksen onnistumisen kannalta.

Haastattelu toteutettiin teoriaohjautuvana teemahaastatteluna. Teoreettisen ongelmanalyysin aiheista (luku 3.2.) erityisesti kolmiulotteisen hahmottamiskyvyn haasteet ohjasivat haastattelun tavoitteita, kuten koko kehittävää oppimateriaaliakin. Haastattelukysymykset esitetään tehtäväkohtaisesti liitteessä 6. Haastatteluista ja havainnoista ilmenneet asiat tulkittiin ja luokiteltiin laadullisen sisällönanalyysin menetelmin.

6.3. Molekyylimallien laatu ja hyödyntämistavat

Tutkimusryhmän opiskelijoiden tehtävien suorittamista seurattiin tehtävä kerrallaan, jonka jälkeen heitä haastateltiin ryhmänä n. 5 min/tehtävä. Molekyylimallien hyödyntämistapojen (luku 6.3.2) ja laadun (luku 6.3.1) arvioimista tukemaan tuotettiin alaluokkia, joihin liitettiin havaintoja ja haastattelussa ilmenneitä seikkoja. Luokat ja alaluokat olivat seuraavat:

- Molekyylimallien laatu
 - Molekyylimallin käytettävyys
 - Molekyylimallin ulkonäkö
- Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
 - Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa
 - Molekyylimallin käyttö kiraalisten molekyyliden välisen vuorovaikutusten hahmottamisessa.

Haastatteluista ja havainnoista ilmenneet oleelliset seikat esitetään narratiivisesti kunkin tehtävän kohdalta erikseen. Niistä muodostetut päätelmät esitetään luvussa 6.4.

6.3.1. Molekyylimallien laatu

Tehtävästä 1 havaittiin, että ensimmäisten 5 min aikana kummallakin parilla tapahtui seuraavaa:

- Molekyylimalleista tippui osia lattialle (yht. 5 kertaa)
- Molekyylimallien kiinnittämiseen jouduttiin käyttämään aikaa, eli ne eivät painuneet kiinni sujuvasti
- Molekyylimallit saatiin koottua asianmukaisesti kaikkien ryhmän jäsenten toimesta.

Tehtävän 1 haastattelusta ilmeni seuraavaa:

- Molekyylimallit olivat toimivia, mutta hieman kömpelöitä
- Molekyylimallit näyttivät asiallisilta.

Tehtävistä 2-4 havaittiin, että molekyylimallit saatiin kiinnitettyä vaivattomasti, eivätkä molekyylimallit tipahdelleet enää. Silmämääräisesti arvioiden perusteella osa sidosputkista oli kuitenkin liian tiukkoja kiinnittää, jolloin opiskelijat joutuivat käyttämään ylimääräistä aikaa molekyylimallin osien kokoamiseen.

6.3.2. Molekyylimallien hyödyntämistavat

Tässä luvussa luetellaan haastatteluista ja havainnoista ilmenneet seikat tehtäväkohtaisesti. Tehtävä 5 (liite 2) jäi pois tapaustutkimuksesta ajan loppumisen vuoksi.

Tehtävästä 1 havaittiin, että kumpikin ryhmä rakensi molekyylimallin ohjeiden (liite 2) mukaisesti, jonka jälkeen he käänsivät molekyylin kädessään pienin prioriteetti poispäin. Tämän jälkeen he piirsivät yhdisteen viivakaavan.

Tehtävän 2 ensimmäisestä molekyylikaavasta (liite 2) havaittiin, että opiskelijat nimesivät suoraan kysytyn isomeerin ja piirsivät peilikuvaisomeerin rakentamatta molekyylimallia.

Tehtävän 2 toisen molekyylikaavan (liite 2) kohdalla yksi opiskelija nimesi kysytyn enantiomeerin käyttämättä molekyylimallia. Seuraavissa viivakaavoissa hyödynnettiin fyysisiä molekyylimalleja kaikkien toimesta. Opiskelijat rakensivat molekyylimallin, käänsivät alimman prioriteetin poispäin itsestään ja piirsivät sekä nimesivät isomerian. Peilikuvaenantiomeerin piirtämiseen käytettiin kahta tapaa:

- Molekyylimalli rakennettiin peilaamalla fyysistä molekyylimallia tehtävän rakennekaavaan, jonka jälkeen malli käännettiin kädessä alin prioriteetti poispäin. Tämän jälkeen molekyylimallin perusteella piirrettiin viivakaava.
- Molekyylimalli rakennettiin samaan asentoon kuin tehtävän rakennekaava, jonka jälkeen kaksi atomia/atomiryhmää vaihdettiin keskenään. Tämän jälkeen molekyylimalli käännettiin kädessä alin prioriteetti poispäin, josta piirrettiin viivakaava.

Tehtävän 2 haastattelusta ilmeni seuraavaa:

- Opiskelijat kokivat hyödylliseksi sen, että paperilla esitettyjen rakennekaavojen atomit olivat samanvärisiä kuin molekyylimallien atomit.
- Molekyylimallit autoivat toisessa molekyylissä, jossa vety oli ylöspäin.

- Isomerian tunnistaminen poikkesi tällä menetelmällä aiemmin opitusta tavasta, jossa S/R-isomeria selvitetään yksinkertaisesti vaihtamalla isomeria toiseksi tapauksessa, jossa vety on ylöspäin.
- Molekyyylimallit auttoivat molekyyliässä 3, jossa fluori oli pois päin.
- Molekyyylimallien käyttö toi uuden tavan ymmärtää isomeria.

Tehtävästä 3 havainnointiin seuraavia asioita:

- Opiskelijat rakensivat molekyyliä, jotka toinen opiskelija käänsi kädessään alin prioriteetti alaspäin. Molekyylit sisälsivät aina vetyatomia.
- Opiskelijat piirsivät suoraviivaisesti molekyylin viivakaavaksi, kun molekyyli oli halutussa asennossa.

Tehtävän 3 haastattelusta ilmeni seuraavia seikkoja:

- S/R -isomeria selvitettiin kääntämällä molekyyli vety pois päin ja katsomalla molekyyliä.
- Käsin kääntämällä molekyyli oikeaan asentoon isomerian selvittäminen oli helppoa, vaikka parin antama molekyyli olisikin ollut aluksi vaikeasti hahmotettavassa asennossa.

Tehtävästä 4 havainnointiin seuraavia asioita:

- Opiskelijat rakensivat ja piirsivät nopeasti tehtävänannossa vaaditun molekyylin.
- Opiskelijat rakensivat toisen molekyylimallin vertaamalla sitä ensiksi rakennettuun molekyylimalliin. Tämän jälkeen opiskelijat käänsivät tämän molekyylin kädessään alin prioriteetti pois päin ja piirsivät viivakaavan näkemänsä perusteella.
- Toiseen kiraaliseen yhdisteeseen laitettiin hydroksyyli - ja ketoniryhmiä.
- Opiskelijat eivät käyttäneet poolittomia osia muodostaakseen hydrofobisia vuorovaikutuksia.

Tehtävän 4 haastattelusta ilmeni seuraavaa:

- Kahdella molekyyllillä kokeiltiin molekyylien välisiä vuorovaikutuksia.
- Opiskelijat laittoivat molekyyliinsä mahdollisimman paljon happea vetysidosten saamiseksi

- Opiskelijat eivät rakentaneet poolittomia osia, mutta heidän mukaansa niitä olisi voinut käyttää.
- Opiskelijat eivät pohtineet molekyylissä olevia negatiivisia ja positiivisia osittaisvarauksia katsoessaan ja suunnitellessaan molekyylimalleja.

Vapaasta loppuhaastelussa ilmeni seuraavia asioita

- Fyysisiä molekyylimalleja pidettiin parhaimpana menetelmänä oppia aihetta sen kokemuksen pohjalta mitä opiskelijoilla oli.
- Fyysiset molekyylimallit selvensivät sitä, miten molekyyli käännetään mielessä ja selvitetään R/S-isomeria siinä tapauksessa, kun viivakaavassa alin prioriteetti ei ole alaspäin.
- Yliopiston orgaanisen kemian luennoilla esitetty tapa selvittää R/S -isomeria kaksiulotteisesta viivakaavasta ei ollut yhtä havainnollistava kuin fyysisten molekyylimallien käyttäminen tehtävissä.

6.4. Tapaustutkimuksen tulokset ja johtopäätökset

Tapaustutkimuksen tulokset ja johtopäätökset esitetään tässä luvussa erikseen molekyylimallien laadun sekä molekyylimallien hyödyntämistapojen osalta. Molekyylimallien hyödyntämistä käsitellään edelleen tehtäväkohtaisesti, sillä tehtävät olivat luonteeltaan erilaisia ja niistä tehtiin merkittävästi toisistaan poikkeavia päätelmiä. Molekyylimallien hyödyntämisestä ilmenneet seikat luokiteltiin teoriaohjaavan analyysin perusteella ala- ja yläluokkiin (liite 3).

Molekyylimallien laatua voidaan arvioida niin haastattelujen kuin havaintojenkin perusteella. Niistä ilmenneet asiat tukevat toisiaan, sillä havaittiin että molekyylimallit olivat varsinkin alussa ajoittain vaikeita kiinnittää ja ne tippuivat lattialle, mutta ensimmäisen tehtävien jälkeen käyttö sujuvoitui. Myös tutkimusryhmän opiskelijat totesivat molekyylimallien olevan hieman kömpelöitä, mutta kuitenkin olevan toimivia ja ajavan asiansa. Laadusta ilmenneet seikat järjestettiin myös teoriaohjaavan analyysin perusteella (liite 4).

Pedagogisesta oppimateriaalista havaitut asiat olivat tehtäväkohtaisia ja osin tavoiteltuja. Tehtävän 2 (liite 2) hahmottamistehtävä sai ainoastaan positiivista palautetta haastatteluissa, sillä sen koettiin olevan uusi, parempi ja havainnollistava tapa oppia optista isomeriaa. Havaintojen perusteella oppilaat käyttivät molekyylimalleja aktiivisesti tehtävien ratkaisemisessa kahdella eri tavalla. Tästä päätellen tehtävä 2 mahdollistaa molekyylimallien mielekkään käytön optisen isomerian hahmottamistehtävissä monipuolisesti; kolmiulotteista hahmottamiskykyä haastettiin ja niihin löydettiin ratkaisu fyysisiä molekyylimalleja hyödyntäen. Teoriaosuudessa esitetyt esimerkit saivat kiitosta värien käytön vuoksi – visuaalisia esimerkkejä hyödynnettiin yhdessä molekyylimallien kanssa 2-tehtävän ratkaisemiseksi haastattelun perusteella. Tästä päätellen teoriaosuuden esimerkit olivat onnistuneita ja tarpeellisia. Tehtävän 2 ensimmäisissä tehtävissä oppilaat eivät tarvinneet välttämättä molekyylimalleja ratkaisun löytämiseksi. Tämä selittyy sillä, että helpompien rakennekaavojen tapauksessa ratkaisu oli mahdollista löytää aiemmista opinnoista tutuin menetelmin.

Tehtävän 3 (liite 2) haastattelusta ilmeni, että optinen isomeria oli helppo löytää kääntämällä työparin rakentama molekyyli oikeaan asentoon ja piirtämällä siitä rakennekaava. Myös havainnot tukivat tätä – oppilaat eivät käyttäneet aikaa pohtiakseen kolmiulotteista rakennetta, vaan käänsivät molekyylimallin haluamaansa asentoon ja piirsivät asianmukaisen rakennekaavan. Tehtävän tavoitteena oli kuitenkin, että oppilaat olisivat joutuneet miettimään kolmiulotteista rakennetta sellaisesta asennosta, josta isomerian hahmottaminen ei ole niin yksinkertaista (alin prioriteetti muualle kuin pois päin katsojasta). Tästä päätellen tehtävänanto oli epäselvä eikä tavoittanut oppimistavoitteita, sillä tehtävä ei haastanut opiskelijoiden kolmiulotteista hahmottamiskykyä.

Tehtävän 4 (liite 2) haastattelusta ilmeni, että fyysiset molekyylimallit olivat apuna kiraalisen yhdisteen suunnittelussa; suunniteltavaa molekyyliä peilattiin toiseen molekyyliin, jonka jälkeen suunniteltu molekyylimalli piirrettiin rakennekaavaksi. Havainnot tukivat haastattelusta ilmenneitä asioita, sillä oppilaat käsittelivät kahta fyysistä molekyylimallia toisiaan vasten, jonka jälkeen he piirsivät molekyylistä rakennekaavan. Oppilaat eivät kuitenkaan arvioineet molekyyliä suunnitellessaan sähköisten osittaisvarausten vaikutuksia eivätkä hydrofobista vuorovaikutusta, joten tehtävänanto ei siltä osin vastannut tavoitteita, joka oli molekyylien välisen vuorovaikutuksen soveltaminen kiraaliseen yhdisteeseen. Tehtävänannossa ja tutkimuksen teoriaosuudessa ei kerrattu

erilaisia molekyylien välisiä vuorovaikutuksia, joten tehtävänannon parempi suunnittelu voisi parantaa oppilaiden valmiuksia suunnitella asianmukaisia molekyyliä.

Tapaustutkimuksen yhteenvedona voidaan todeta seuraavaa:

- Kolmiulotteisesti tulostetut molekyylimallit olivat toimivia, mutta niissä on parantamisen varaa
- Fyysisiä molekyylimalleja voidaan käyttää tarkoituksenmukaisesti ja monipuolisesti stereoisomerian oppimistehtävien ratkaisemiseksi, mutta se riippuu siitä, kuinka hyvin tehtävä on suunniteltu.
 - Tehtävissä 1 ja 2 opiskelijat hyödynsivät monipuolisesti ja tavoitellusti molekyylimalleja.
 - Tehtävän 3 tehtävänanto oli epäselvä ja opiskelijat käyttivät molekyylimalleja löytääkseen nopean ja helpon ratkaisun.
 - Tehtävä 4 vaatii toimiakseen paremman pohjustuksen molekyylien välisiin vuorovaikutuksiin tehtävän ratkaisemiseksi; oppilaat suunnittelivat kiraalisen molekyylin molekyylimallia hyödyntämällä, mutteivat keksineet asianmukaisia funktionaalisia ryhmiä.
- Tehtäviin johdattelevaa havainnollistavaa teoriaosuutta voidaan käyttää yhdessä molekyylimallien kanssa tehtävien ratkaisemiseksi.

7. Jatkokehittäminen

Oppimismateriaalin jatkokehittämisen tarkoituksena on parantaa edelleen tuotetta tapaustutkimuksen (luku 6) perusteella. Parannuksia voidaan tehdä perustellusti 3D-tulosteiden laatuun (luku 7.1.) ja oppimismateriaaliin (luku 7.2.).

7.1. Molekyylimallien kehittäminen

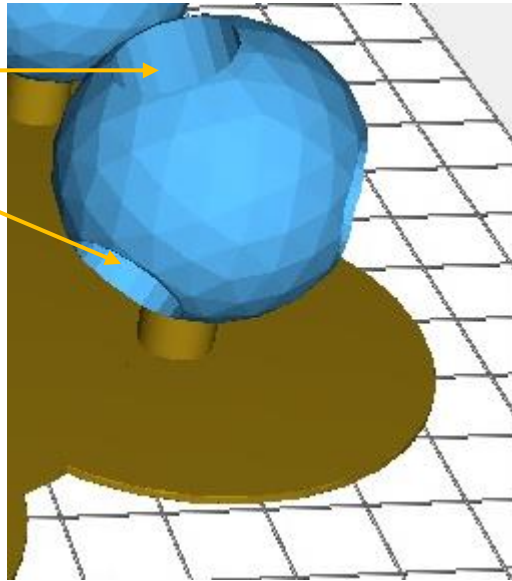
Tapaustutkimuksen perusteella kehitetyt molekyylimallit olivat riittävän visuaalisia ja opiskelijoilta tulikin positiivista palautetta siitä, että tehtävämönisteiden esimerkit oli luontevaa yhdistää fyysisiin molekyylimalleihin käytettyjen värien vuoksi; paperilla olleiden viivakaavojen atomit olivat havaittavasti saman värisiä kuin fyysisten molekyylimallien vastaavat atomit.

Molekyylimallien kokoamisessa havaittuihin haasteisiin (tippuvat osat ja liian tiukat liitokset) voidaan puuttua seuraavin tavoin:

- Kehittämällä uudenlainen liitos
- Hiomalla sidosreiät riittävän suuriksi viimeistelyvaiheessa käsityönä
- Tarkentamalla sidosputkien ja sidosreikien läpimittaa CAD-suunnitteluvaiheessa

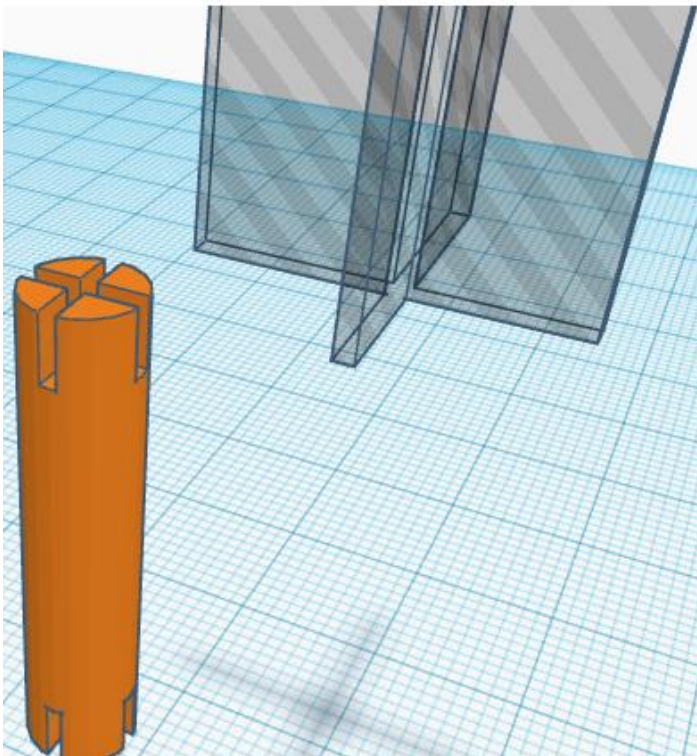
Sidosreikien hiominen käsityönä on liian työläs ja aikaa vieväksi menetelmä, sillä kehittämistutkimuksen tavoitteena on tarjota mahdollisimman valmiita materiaaleja muiden 3D-tulostajien ja opettajien käytettäväksi. Sidospukien ja sidosreikien mittojen tarkentaminen ei puolestaan vastaa havaittuun ongelmaan, joka liittyy erityisesti sp^3 -hybridisoituneen hiiliatomimalliin; ANYCUBIC PHOTON tulosti eri asennossa olevat sidosreiät eri kokoisiksi. Erityisesti niin, että tulostusalustaan nähden vastakkaisella puolella olevat reiät tulostuvat suhteessa suuremmiksi kuin muut reiät. (Kuva 25)

Tulostuvat
eri kokoisina reikinä



Kuva 25. Samansuuruisi CAD-ohjelmistossa suunnittelut reiät tulostuvat läpimitaltaan erilaisiksi riippuen siitä, missä asennossa ne ovat tulostuspohjaan nähden.

Ratkaisumenetelmäksi valittiin uudenlaisen liitosputken (kuva 26) kehittäminen, jonka tarkoituksena on korjata tulostuksessa aiheutuvat epätarkkuudet.



Kuva 26. Lovetun, hieman joustavan, sidosputken arvioitiin toimivan ratkaisuna liian tiukkojen kappaleiden kiinnittämiseen. Kuvassa vasemmalla lovettu C-C -sidos ja oikealla apuna käytetty objekti, jolla virtuaalinen molekyylisidos lovettiin.

Uuden sidosputken havaittiin joustavan hieman ja asettuvan paremmin läpimitaltaan poikkeaviin reikiin.

7.2. Oppimateriaalin kehittäminen

Kehitetyn oppimateriaalin parantaminen kohdistettiin puutteisiin, joita esiintyi opiskelijaryhmällä tehdyn tapaustutkimuksen tulosten (luku 6.4) perusteella. Uudelleenkehitetty oppimateriaali (liite 5) on tässä kehittämistutkimuksessa lopullinen pedagoginen tuote, jota tarjotaan vapaasti käytettäväksi opetuskäyttöön.

7.2.1. Tehtävä 3

Kolmiulotteista hahmotuskykyä haastetaan, kun oppilas joutuu mielessään kääntämään kiraalisen molekyylin asentoon, josta hän voi päätellä optisen isomerian. (Abraham ym., 2010) Luvussa 6.4 tehtyjen päätelmien perusteella tehtävänanto tulee muuttua sellaiseksi, että helppoa ratkaisua ei voida muodostaa yksinkertaisesti kääntämällä molekyylimalli haluttuun asentoon kädessä. Uuden tehtävänannon tavoitteet ovatkin seuraavat:

- Oppilas saa selkeämmät ja lyhyemmät ohjeet.
- Oppilas joutuu pohtimaan molekyylin kolmiulotteista rakennetta mielessään.

Tämän perusteella tehtävänanto muokattiin seuraavanlaiseksi:

Tehtävä 3. Kiraalisen yhdisteen R/S-isomerian tutkiminen parityönä

1. Istu työpariasi vastapäätä. Rakenna nyt haluamasi kiraalinen yhdiste ja aseta se pöydälle.
2. Selvittäkää R/S -isomeria piirtämällä molekyylin rakennekaava alin prioriteetti alaspäin. Molekyylimallia ei saa kääntää pöydällä.
3. Verratkaa piirtämiänne rakennekaavoja. Päädyttyänne yhteiseen ratkaisuun toinen parista rakentaa uuden kiraalisen molekyylin.

Tehtävänannon tavoitteena on ilmaista selkeästi, että oppilaat eivät saa keksiä ratkaisua kääntämällä molekyyliä kädessään, koska se on tapaustutkimuksen perusteella liian helppo ratkaisu. Sen sijaan he joutuvat kääntämään molekyylin mielessään.

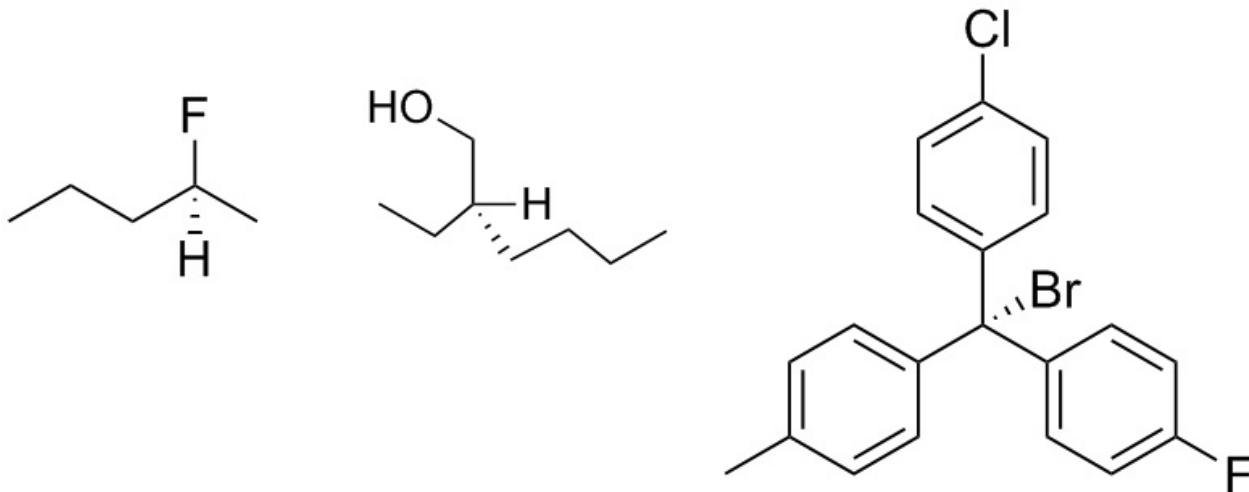
7.2.2. Tehtävä 4

Soveltava tehtävä, jossa yhdistettiin aihealueita molekyylien välisestä vuorovaikutuksesta ja kiraalisuudesta, tuotti haasteita. Opiskelijoilla ei ollut aikaa perehtyä ja kerrata molekyylien välisiin voimiin liittyviä aiheita kuten sähköisiä osittaisvarauksia ja Van der Waalsin voimaa.

Kuten aiemmin mainittua, oppitunnin teemaksi valittiin kiraalisuus, jonka haastekohtana voidaan pitää kolmiulotteista hahmottamiskykyä. Tästä syystä tehtävä 4 suunniteltiin täysin uusiksi ja aihetta paremmin tukevaksi. Perustellusti siis molekyylien välisiä vuorovaikutuksia voidaan harjoitella toisessa kontekstissa ja tehtävä 4 muotoiltiin uudelleen haastamaan edelleen kolmiulotteista hahmotuskykyä. (Kuva 27; liite 5)

Tehtävä 4.

- Määritä alla olevien molekyylien isomeria ilman, että käytät fyysisiä molekyyylimalleja apuna. VINKKI: Kuvittele mielessäsi, miltä molekyyli näyttää, kun katsoisit sitä alin prioriteetti itsestäsi pois päin.



Kuva 27. Tehtävän 4 tarkoituksena on, että opiskelija pyrkisi hahmottamaan mielessään molekyylin kolmiulotteisen rakenteen.

8. Johtopäätökset ja pohdinta

Kolmiulotteisen tulostuksen mahdollisuudet kemian opetuksen osalta tulevat tässä kehittämistutkimuksessa osaltaan esiin. Oppimismateriaali keskittyy optisen isomerian opetukseen, jossa fyysisten molekyyylimallien osuus on lähinnä kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisen tukeminen. Oppilaslähtöisesti ajatellen oppimisen tukeminen on kuitenkin tärkein peruste, jos 3D-tulostusta aiotaan hyödyntää opetuksessa. Kehittämistutkimuksessa ilmenneet molekyyylimallien hyödyntämistavat esitetään luvussa 8.1.

Kolmiulotteisen tulostuksen haasteet ja mahdollisuudet (luku 8.2.) ovat oleellinen osa tätä kehittämistutkimusta, koska se antaa viitteitä siitä kuinka relevanttia 3D-tulostuksen käyttöönotto on optisen isomerian opetuksen kontekstissa. Luvussa 8.2. tehdäänkin päätelmiä siitä, miten järkevää fyysisten molekyyylimallien 3D-tulostus on taloudelliset ja ajalliset resurssit huomioon ottaen.

Kehittämisprosessia kuvaavan luvun 8.3. tarkoituksena on antaa kokonaiskuva tämän kehittämistutkimuksen ominaispiirteistä. 3D-tulostusta sisältävien oppimateriaalien kehittäminen sisältää erityislaatuisia piirteitä, sillä suunnittelu vaatii tietoteknisen osaamisen lisäksi useiden eri laitteiden hallintaa, sopivia työtiloja, tietämystä tulostusmateriaaleista, luovuutta, sekä käsitystä siitä miten oppimista edistävä pedagogiikka ja 3D-tulostus yhdistetään.

Kehittämistutkimuksen tuote – oppimismateriaali – testattiin pienellä opiskelijaryhmällä laadullisena tutkimuksena osana koko kehittämistutkimuksena. Luvussa 8.4. keskitytään erityisesti luotettavuuden arviointiin ja yleistettävyyteen. Lisäksi luvussa pohditaan missä määrin oppimateriaalia voidaan siirtää käyttöön oppilaitoksissa.

Luvussa 8.5. pohditaan kehitetyn oppimateriaalin jatkosovelluskohteita sekä 3D-tulostuksen muita jatkotutkimuskohteita opetuksessa. 3D-tulostin on laite, joka maksaa ja jolla on paljon potentiaalia - sitä ei kannata jättää varaston pöydälle toimettomaksi.

8.1. Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen optisen isomerian opetuksessa

Tapaustutkimuksen (luku 6) perusteella molekyylimalleja voidaan hyödyntää eri tavoin stereoisomerian oppimistehtävissä. Fyysisten molekyylimallien käyttäminen tulee yhdistää kuitenkin huolellisesti opetettavaan sisältöön, kuten on havaittu myös aiemmissa tutkimuksissa (Abraham, Varghese & Tang, 2010; Dori, 2001), joissa pidettiin oleellisena kaksiulotteisen esityksen ja kolmiulotteisen rakenteen yhdistämistä. Tässäkin tutkimuksessa havaittiin, että tehtävät, jotka haastoivat opiskelijoiden kolmiulotteista hahmotuskykyä, koettiin hyödylliseksi ja tarpeelliseksi, joten tutkimus tukee aiempien tutkimusten tuloksia. Lisäksi ilmeni seuraavia oleellisia piirteitä:

- Tehtävien ja esimerkkien rakennekaavojen visualisointi samoin värein kuin fyysisissä molekyylimalleissa nopeuttaa ja helpottaa tehtävässä etenemistä.
- Avaruudellista hahmotuskykyä haastavat tehtävät tulee suunnitella siten, että molekyylimalli ei tarjoa ns. suoria ratkaisuja.
- Fyysisiä molekyylimalleja voidaan käyttää tarkoituksenmukaisesti ja eri tavoin R/S-isomerian määrittämisessä.

Voidaankin todeta, että kolmiulotteisesti tulostetut, fyysiset molekyylimallit voidaan yhdistää mielekkäästi optisen isomerian opetukseen. Harjoitusten tehtävänanto tulee kuitenkin suunnitella siten, että molekyylimallit ovat tukena erityiseen optiseen isomerian oppimiseen liittyvässä haasteessa – kolmiulotteisen rakenteen ja kaksiulotteisen esityksen yhdistämisessä.

8.2. Haasteet ja mahdollisuudet 3D-tulostettujen molekyylimallien opetuskäytössä

Tämä kehittämistutkimus tarjoaa valmiit .stl -tiedostot, joita käyttäjät voivat ladata vapaasti käyttöönsä. Ajallisia kustannuksia koituu kuitenkin merkittävässä määrin seuraavista työvaiheista:

- Slicer-säätöjen tekeminen
- Tulostaminen
- Tulosteiden huuhtelu
- Polymeerin kovetus

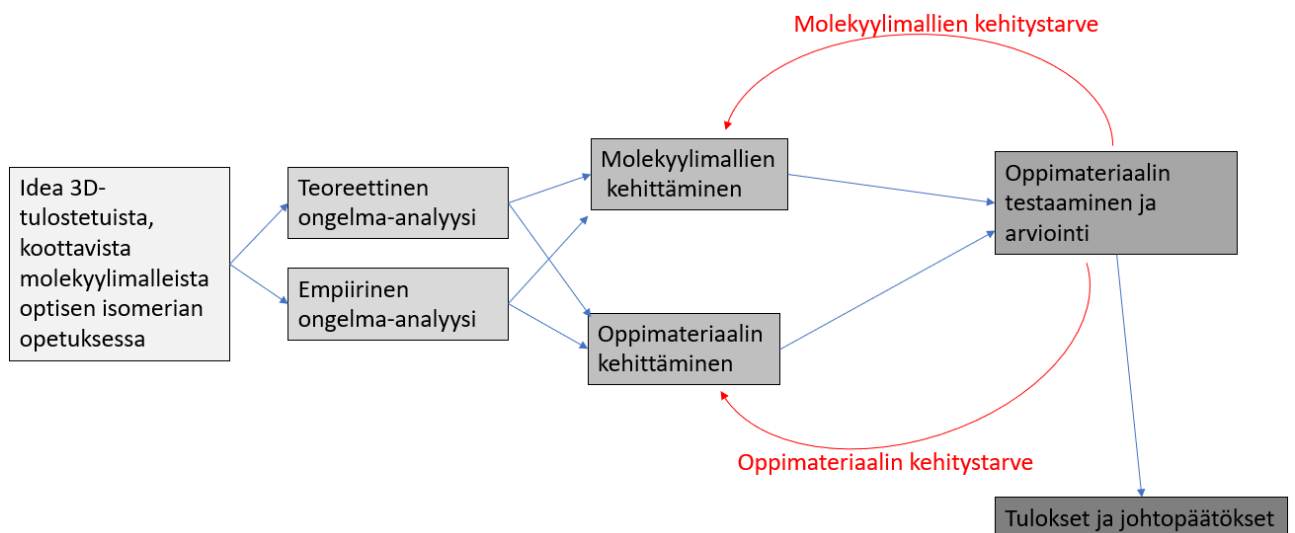
- Kappaleiden irrotus tulostusalustasta ja pintojen viimeistely käsityönä
- Tulosteiden maalaaminen.

Näiden työvaiheiden kuormittavuutta on vaikea arvioida käyttäjätasolla, mutta voidaan kuitenkin todeta, että tämän kehittämistutkimuksen laitteella ja valmistusmenetelmällä ei voida valmistaa helposti ja nopeasti käyttöönotettavaa molekyyliä.

Tässä kehittämistutkimuksessa taloudellisia kustannuksia arvioitiin tulostimen ostohinnan ja kuluneen UV-hartsin hinnan perusteella. Voidaan todeta, että tarkkaa tulostusjälkeä tekevä, alle 500 € hintainen SLA-tulostin voi olla taloudellisesti järkevä valinta. Pienikokoiset tulosteet ovat myös tulostusmateriaalikustannuksiltaan edullisia. Kehittämistutkimuksen molekyyliä materiaalikustannuksiksi arvioitiin 15,50 €, joka voi arvioida kohtuulliseksi, vaikkakin markkinoilla on saatavilla edullisempiäkin molekyyliä.

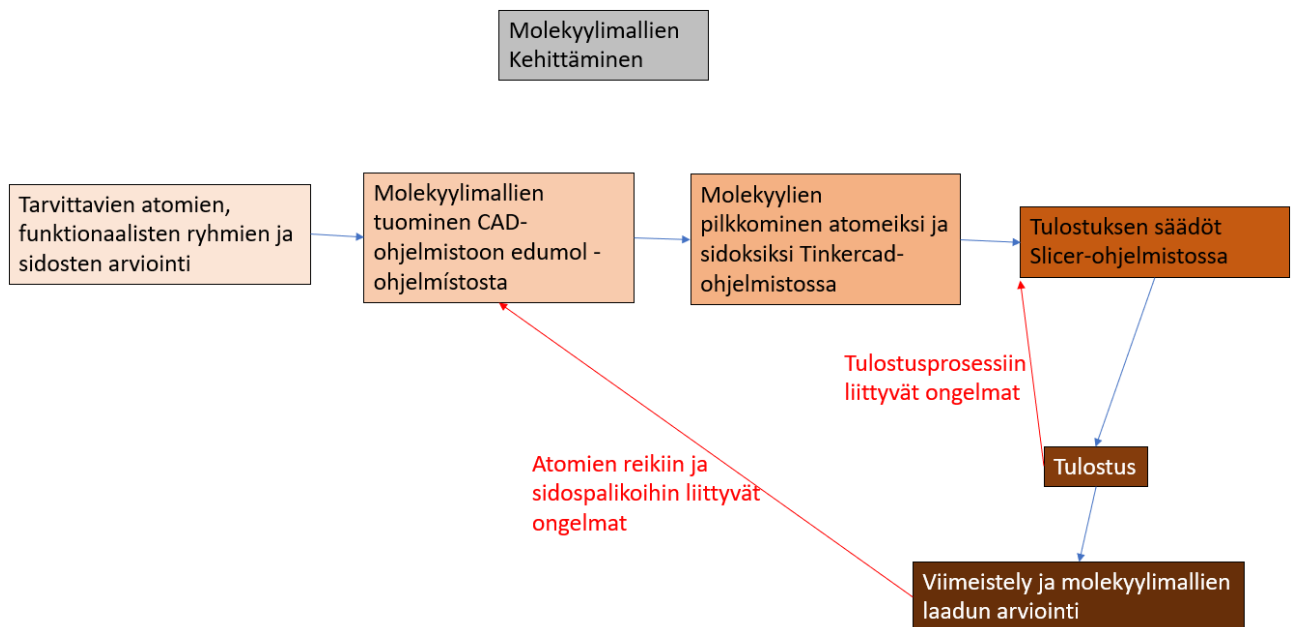
8.3. Laadukkaiden molekyyliä kehittämisen prosessi

Tässä tutkimuksessa toteutettua molekyyliä kehittämistä kuvaa osuvasti yrityksen ja erehdyksen kautta tekeminen. 3D-tulostustekniikka ja laitteet olivat ennestään tuntemattomia, joten tästä tutkimuksesta voi saada arvokasta tietoa esimerkiksi oppimateriaalien tuottajille, jotka haluavat hyödyntää 3D-tulostusta osana työtään. Tapaustutkimus oli tärkeänä osana jatkokehittäessä oppimateriaalia paremmin oppimista tukeväksi. Tässä luvussa kuvaillaan koko kehittämisen prosessia, koska laadukkaiden molekyyliä kehittämisen on tiiviisti yhteydessä niiden käytännön sovelluksiin, joka on tässä tutkimuksessa optisen isomerian opetuskonteksti. Tässä luvussa keskitytään erityisesti asioihin, jotka tuottivat haasteita. Kuvassa 28 esitetään kehittämisen vaiheet.



Kuva 28. Kehittämisprosessi lineaarisesti esitettynä.

Molekyylimallien ja oppimateriaalin testaaminen ja arviointi olivat oleellisessa osassa oppimateriaalin kehittämistä. Tehtävien sisältöä kehitettiin suoraviivaisesti tapaustutkimuksen tulosten perusteella. Myös molekyylimallien kehittämiseen vaikuttivat vahvasti tapaustutkimuksessa ilmenneet seikat, mutta 3D-tulostimen käyttö ja molekyylimallien kehittäminen (kuva 29) ennen tapaustutkimusta sisälsivät itsessään useita iteroiteja.



Kuva 29. Molekyylimallien CAD-suunnittelua iteroitiin paremmaksi viisi kertaa ja tulostuksen slicer-säätöjä neljä kertaa.

Molekyyylimallien tulostuksen onnistuttua riittävän hyvin molekyyylimallien kehittämisestä voitiin siirtyä varsinaiseen oppimateriaalin testaamiseen. 3D-tulostukseen liittyvän syklisen kehitysprosessin osuus koko kehittämistutkimuksesta vei huomattavan osan ajasta. Kolmiulotteisen tulostuksen suunnitteluun ja siihen liittyvään tietoon huolellinen perehtyminen voisikin olla hyödyllinen tapa säästää aikaa itse tulostusprosessista.

Laadukkaiden molekyyylimallien tuottamiseen liittyy teknisen tietotaidon ja soveltuvan käyttötarkoituksen lisäksi turvallisuusnäkökulmien huolellinen arviointi. Turvallisuusseikat rajoittavat yleisesti 3D-tulostimien käyttöä. FDM-tulostimien ja SLA-tulostimien käyttöön sisältyy yhtäläisiä vaatimuksia:

- Hyvin ilmastoitu, riittävän suuri tila
- Käyttäjien huolellinen perehdyttäminen laitteeseen.

Kehittämistutkimuksessa käytettyyn ANYCUBIC PHOTON-tulostimeen sisältyy lisäksi erityisiä turvallisuusriskejä käytettävän UV-hartsin vuoksi. Luvussa 3.4.3. ja liitteessä 1 esitettyjen varotoimenpiteiden vuoksi SLA-tulostimia onkin turvallista käyttää vain valvotuissa olosuhteissa, joissa voidaan varmistua hartsin turvallisesta käsittelystä, varastoinnista ja tulostamisesta. Sellainen tila voisi olla esimerkiksi koulujen kemianluokka, joissa on vetokaapit ja kemikaalivarasto. Turvallisuusnäkökulmasta koulujen ja oppilaiden käyttöön soveltuisi parhaiten FDM-tulostin, jossa käytetään PLA:a tulostusmateriaalina. Mahdollisimman turvallinen tulostinvalinta laajentaisi 3D-tulostimen käyttäjäkuntaa myös kemianluokan ulkopuolelle.

8.4. Luotettavuus ja vahvistettavuus

Kehittämistutkimuksen tulosten yleistettävyyks on rajoitettua, sillä tuotettua oppimismateriaalia testattiin vain yhdellä 5:n hengen ryhmällä ilman kontrolliryhmää. Tutkimuksessa ilmenneet seikat tukeutuvat toisaalta vahvasti tutkimuskirjallisuuteen. Tapaustutkimukseen osallistuneilla opiskelijoilla oli haasteita kiraalisuuteen liittyvän kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa ja fyysisiä molekyyylimalleja pystyttiin hyödyntämään aihetta tukevissa tehtävissä, kuten aiemmissakin tutkimuksissa (Abraham ym., 2010; Dori & Barak, 2001) on havaittu.

Molekyylimallien hyödyntämistapojen arviointi jäi lyhyiden (5 min/tehtävä) pituisten haastatteluiden ja havainnoinnin varaan eikä aineistoa kertynyt kattavasti määrällistä arviointia varten. Tästä syystä ilmenneet seikat voivat vääristyä tutkijan arvioidessa oppimistilannetta mahdollisesti subjektiivisesti. Kemian opetuksen tutkimusta onkin kritisoitu (Teo, Goh, & Yeo, 2014) siitä, että kvalitatiiviset tutkimukset toteutetaan tyypillisesti vain yhdelle ryhmälle ja vain muutamia tutkimuksia toteutetaan tiettyä aihetta kohden. Tämä on Teon ym., (2014) mukaan vaikuttanut siihen, että tutkimustuloksia ei voida välttämättä varmistaa. Molekyylimallien hyödyntämiseen liittyvät piirteet olivat tässä tutkimuksessa kuitenkin varsin yksiselitteisiä; kaikki tutkimukseen osallistuneet opiskelijat suhtautuivat opetusmenetelmään positiivisesti ja hyödynsivät molekyylimalleja niin havaintojen kuin haastatteluidenkin perusteella. Tämän perusteella 3D-tulostettujen molekyylimallien hyödyntämistä optisen isomerian opetuksessa voidaan pitää järkevänä vaihtoehtona suurella todennäköisyydellä. Lukion orgaanisen kemian kurssi voisikin resurssien puitteissa järjestää lisäopetusta optiseen isomeriaan hyödyntämällä fyysisiä molekyylimalleja ja tutkimuksessa tuotettua oppimateriaalia (liite 5), sillä empiirisen ongelma-analyysin perusteella lukion oppikirjat eivät pureudu syvällisesti kiraalisuuden ja kolmiulotteisen rakenteen väliseen yhteyteen.

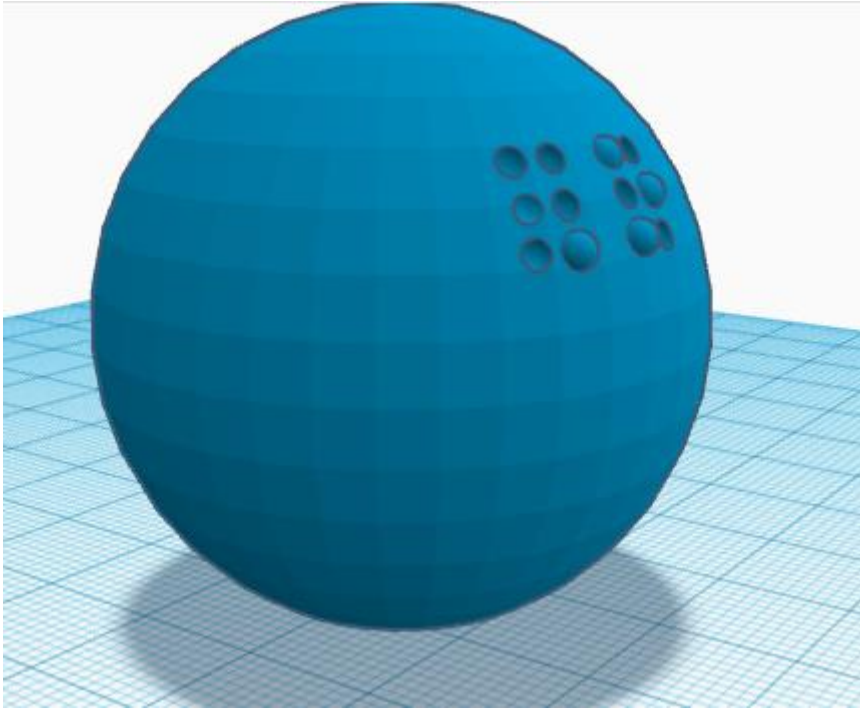
Kolmiulotteisten molekyylimallien laatua ei ole aiemmissa tutkimuksissa tutkittu systemaattisesti opiskelijaryhmällä kuten tässä kehittämistutkimuksessa tehtiin. Kehitettyjen molekyylimallien laatu ja visuaalisuus voidaan arvioida olevan epäilemättä hyvä, sillä opiskelijat pitivät niitä toimivina ja niistä pystyy rakentamaan laskennallisia mittasuhteita vastaavia molekyylirepresentaatioita.

Molekyylimallien kehittämisprosessi oli tutkimuskohteena ainutkertainen ja merkittävä siinä mielessä, että se voi kuvata varsin osuvasti tilannetta, jossa kemian opettaja tai tutkija soveltaa uutta teknologiaa opetuksessaan. Kehittämisprosessin etenemiseen vaikuttavat ensisijaisesti tutkijan omat tiedot ja taidot, käytössä olevat välineet ja resurssit sekä oma kiinnostus aiheeseen, joten kehittämisprosessia ei voida pitää yksiselitteisenä ohjeena siitä, kuinka 3D-tulostettuja molekyylimalleja tulisi kehittää kemian opetukseen. Tämän tutkimuksen prosessia voi pitää kuitenkin osaltaan teoriaan pohjautuvana, sillä molekyylimallien kehittämisprosessi eteni rakenteellisesti samoin kuin aiemmissa tutkimuksissa. (mm. Paukstelis, 2017; Penny ym., 2017)

8.5. Pohdinta

Koottavia molekyyli mallisettejä on markkinoilla tarjolla laajasti ja edullisempaan hintaan kuin tässä tutkimuksessa pystyttiin tuottamaan. Valmiina ostetut setit ovat sellaisenaan käyttövalmiita eivätkä vaadi muuta kuin pedagogisen idean niiden hyödyntämiseksi. Tästä syystä kolmiulotteisen tulostamisen hyödyntäminen relevanssi fyysisten molekyyli mallien tuottamisessa voidaan perustellusti kyseenalaistaa; massatuotannolla voidaan valmistaa täysin käyttökelpoisia ja tasalaatuisia tuotteita edullisemmin ja vaivattomammin. Tässä kehittämistutkimuksessa valmistettu molekyyli mallisetti on valmistettu atomien ja sidosten laskennallisiin mittasuhteisiin perustuen – siinä mielessä kehitetyt mallit tuovat kehitystä ja uudistusta muihin vaihtoehtoihin verrattuna. Toisaalta molekyyli mallinnusohjelmistot voivat esittää molekyylien ominaisuuksia yhtä lailla tehokkaasti pedagogisesta näkökulmasta (elleivät jopa paremmin, kuten Abraham ym. (2010) esittävät) ja monipuolisemmin. Molekyyli mallinnusohjelmien avulla voidaan esittää mm. elektronitiheyspintoja, jotka olisivat kenties haastava toteuttaa fyysisillä molekyyli mallieilla.

Kolmiulotteisen tulostuksen vahvuudet liittyvät siihen, että CAD-ohjelmistoilla voidaan suunnitella yksilöllisiin tarpeisiin soveltuvia tuotteita kilpailukykyiseen hintaan. Esimerkiksi oppimismateriaalit, joita ei kysynnän vähyden vuoksi ole tarjolla markkinoilla yleisesti voivat olla potentiaalisia kolmiulotteisen tulostuksen sovelluskohteita. Suomessa erityisryhmät kuten näkövammaiset tarvitsevat yksilöllisen tilanteensa mukaan apua koulunkäyntiin, opiskelumateriaaleihin ja elämiseen yleisesti - heillä on siihen myös lain turvaama oikeus. (Näkövammaisten liitto ry, 2018) Sokeille fyysiset molekyyli mallit (kuva 30) voivat olla kenties ainoita harvoja sovelluksia, joiden avulla voidaan käsittää molekyylien kolmiulotteinen suuntautuminen ja niiden käyttömahdollisuudet voisivat osaltaan korvata esimerkiksi molekyyli mallinnusohjelmistojen tarjoamia representaatioita.



Kuva 30. Kolmiulotteinen tulostus mahdollistaisi esimerkiksi pistekirjoituksen yhdistämisen molekyylimalleihin. Kuvassa virtuaalinen malli happiatomista.

Kolmiulotteisen tulostuksen hyödyntäminen yleisesti oppimisvälineenä mahdollistaisi luovien ongelmanratkaisutehtävien toteuttamisen. Kuten tämänkin kehittämistutkimuksen prosessissa, oppilaat voisivat ratkaista ongelmia järjestelmällisen tutkimuksen tapaan:

1. Ongelman määrittäminen
2. Ongelmaan liittyviin asioihin perehtyminen
3. Ongelman ratkaisun suunnittelu ja toteuttaminen
4. Ratkaisun arviointi.

Kolmiulotteinen tulostus ongelmanratkaisuvälineenä voisi sopia tämänkaltaisiin oppimistehtäviin, koska sillä pystytään kehittämään menetelmiä pienistä arjen haasteista (kuten hajonnut muoviosa) aina suuriin globaaleihin ongelmiin (esimerkiksi maailman kasvavat muovijätevuoret). Kemian osuus fyysisten kappaleiden tuottamisessa voisivat liittyä tulostusmateriaalivalintoihin (Simplify3D, 2018), kappaleiden viimeistelyyn (esimerkiksi ABS-muovien asetonikäsittely (Woods, 2017)) ja muovien ympäristövaikutusten pohtimiseen. Kolmiulotteista tulostusta sisältävät ongelmanratkaisutehtävät voisivatkin olla luovuutta ja teknisiä taitoja edistäviä oppiainerajat ylittäviä teemaopintoja kaikilla luokka-asteilla peruskouluista yliopistoihin.

Toivottavasti tämä todelliseen kehitystyöhön ja oppimissovellukseen perustuva kehittämistutkimus avaa 3D-tulostusta hyödyntävien tahojen näkemystä kolmiulotteisen tulostuksen haasteista ja mahdollisuuksista. Opetustyöhön sovellettuna 3D-tulostuksella on paljon potentiaalia, mutta käyttö vaatii huolellista suunnittelua ja asiantuntemusta.

Lähteet

- Abraham, M., Varghese, V., & Tang, H. (2010). Using molecular representations to aid student understanding of stereochemical concepts. *Journal of chemical education*, 87(12), 1425–1429.
- Anttila, P. (1996). Tutkimisen taito ja tiedon hankinta. *Helsinki: Akatiimi Oy*.
- Bauhaus. (2018). Kierresaumakanava Europlast 100 mm Sinkitty. Kuva. Ladattu 10. joulukuuta 2018 osoitteesta <https://www.bauhaus.fi/kierresaumakanava-europlast-100-mm-sinkitty.html>
- Bharti, N., & Singh, S. (2017). Three-dimensional (3D) printers in libraries: Perspective and preliminary safety analysis. *Journal of chemical education*, 94(7), 879–885.
- Carroll, F. A., & Blauch, D. N. (2017). 3D Printing of Molecular Models with Calculated Geometries and p Orbital Isosurfaces. *Journal of Chemical Education*, 94(7), 886–891.
- Collins, A., Joseph, D., & Bielaczyc, K. (2004). Design research: Theoretical and methodological issues. *The Journal of the learning sciences*, 13(1), 15–42.
- Copolo, C. E., & Hounshell, P. B. (1995). Using three-dimensional models to teach molecular structures in high school chemistry. *Journal of science education and technology*, 4(4), 295–305.
- Dori, Y. J., & Barak, M. (2001). Virtual and physical molecular modeling: Fostering model perception and spatial understanding. *Educational Technology & Society*, 4(1), 61–74.
- Edelson, D. C. (2002). Design research: What we learn when we engage in design. *The Journal of the Learning sciences*, 11(1), 105–121.

- Esteban, S. (2008). Liebig–Wöhler Controversy and the Concept of Isomerism. *Journal of Chemical Education*, 85(9), 1201.
- Flick, U. (2014). *An introduction to qualitative research*. Sage.
- Frey, S. (2017, maaliskuuta 23). Laser SLA vs DLP vs Masked SLA 3D Printing Technology. Luettu 27. marraskuuta 2018, osoitteesta <https://theorthocosmos.com/laser-sla-vs-dlp-vs-masked-sla-3d-printing-technology-compared/>
- Geison, G. L. (2002). *Louis Pasteurin Salattu tiede*. Helsinki: Art House.
- Geison, G. L., & Secord, J. A. (1988). Pasteur and the process of discovery: The case of optical isomerism. *Isis*, 79(1), 6–36.
- Grieser, F. (2018, syyskuuta 3). FDM vs SLA – 3D Printing Technologies Compared. Luettu 27. marraskuuta 2018, osoitteesta <https://all3dp.com/fdm-vs-sla/>
- Griffith, K. M., Cataldo, R. de, & Fogarty, K. H. (2016). Do-it-yourself: 3D models of hydrogenic orbitals through 3D printing. *Journal of Chemical Education*, 93(9), 1586–1590.
- Hirsjärvi, S., & Hurme, H. (2000). *Tutkimushaastattelu: Teemahaastattelun teoria ja käytäntö*. Yliopistopaino.
- Jones, O. A., & Spencer, M. J. (2017). A Simplified Method for the 3D Printing of Molecular Models for Chemical Education. *Journal of Chemical Education*, 95(1), 88–96.
- Juuti, K., & Lavonen, J. (2012). Design-based research in science education: One step towards methodology. *Nordic studies in science education*, 2(2), 54–68.
- Kaliakin, D. S., Zaari, R. R., & Varganov, S. A. (2015). 3D printed potential and free energy surfaces for teaching fundamental concepts in physical chemistry. *Journal of Chemical Education*, 92(12), 2106–2112.

- Kosenkov, D., Shaw, J., Zuczek, J., & Kholod, Y. (2016). Transient-Absorption Spectroscopy of Cis–Trans Isomerization of N, N-Dimethyl-4, 4'-azodianiline with 3D-Printed Temperature-Controlled Sample Holder. *Journal of Chemical Education*, 93(7), 1299–1304.
- Lasol 100. (2015, joulukuuta 15). Käyttöturvallisuustiedote Lasol 100. Luettu 28. marraskuuta 2018 osoitteesta
https://app.ecoonline.com/app/api/document/v1/sds/17195723/pdf?accesskey=25f_AbN6_AIADzkTyvjJ6u4rSk5AyDbz1BFd/hntTVlv6zrke_AFYprwYCPwjAdFmJj&applicationID=7&int_status=0
- Lehtiniemi, K., & Turpeenoja, L. (2005). *Mooli 2: Ihmisen ja elinympäristön kemiaa* (2.-10., Vsk. 2005). Helsinki: Kustannusosakeyhtiö Otava.
- Lehtiniemi, K., & Turpeenoja, L. (2016). *Mooli 2: Ihmisen ja elinympäristön kemiaa* (1.-4., Vsk. 2016). Helsinki: Kustannusosakeyhtiö Otava.
- Lipson, H., & Kurman, M. (2013). *Fabricated: The new world of 3D printing*. John Wiley & Sons.
- Lolur, P., & Dawes, R. (2014). 3D printing of molecular potential energy surface models. *Journal of Chemical Education*, 91(8), 1181–1184.
- Meyer, S. C. (2015). 3D printing of protein models in an undergraduate laboratory: leucine zippers. *Journal of Chemical Education*, 92(12), 2120–2125.
- Moss, G. P. (1996). Basic terminology of stereochemistry (IUPAC Recommendations 1996). *Pure and applied chemistry*, 68(12), 2193–2222.
- Motonet. (2018). Peltisakset ” Aviation”. Kuva. Ladattu 10. joulukuuta 2018, osoitteesta
<https://m.motonet.fi/fi/tuote/803361/Peltisakset--Aviation-vasen>

- Murphy, T. (2007, maaliskuuta 28). Dextro and levorotary forms of tartrate. Kuva. Ladattu 10. joulukuuta 2018 osoitteesta
https://en.wikipedia.org/wiki/Louis_Pasteur#/media/File:Pcrystals.svg
- Näkövammaisten liitto ry. (2018, marraskuuta 28). Lapsen koulunkäynti. Luettu 28. marraskuuta 2018 osoitteesta
https://www.nkl.fi/fi/etusivu/palvelut_nakovammaisille/opiskelu/lapsen_koulunkaynti
- Paukstelis, P. J. (2017). *MolPrint3D: Enhanced 3D Printing of Ball-and-Stick Molecular Models*. ACS Publications.
- Penny, M. R., Cao, Z. J., Patel, B., Sil dos Santos, B., Asquith, C. R., Szulc, B. R., ... Hilton, S. T. (2017). Three-Dimensional Printing of a Scalable Molecular Model and Orbital Kit for Organic Chemistry Teaching and Learning. *Journal of Chemical Education*, 94(9), 1265–1271.
- Pernaa, J. (2013). *Kehittämistutkimus opetuslalla*. PS-Kustannus.
- Phillips, R. (1984). Photopolymerization. *Journal of photochemistry*, 25(1), 79–82.
- Porter Jr, L. A., Washer, B. M., Hakim, M. H., & Dallinger, R. F. (2016). *User-friendly 3D printed colorimeter models for student exploration of instrument design and performance*. ACS Publications.
- RadTech International. (2018, marraskuuta 27). PROPER HANDLING OF UV CURABLE 3D PRINTING RESINS. Luettu 27. marraskuuta 2018, osoitteesta
<https://www.radtech.org/health-safety/proper-handling-of-uv-resins>
- Rochford, K. (1987). Students' Visual Learning Disabilities and Under-Achievement in Selected Science Subjects.

- Rodenbough, P. P., Vanti, W. B., & Chan, S.-W. (2015). 3D-printing crystallographic unit cells for learning materials science and engineering. *Journal of Chemical Education*, 92(11), 1960–1962.
- Rossi, S., Benaglia, M., Brenna, D., Porta, R., & Orlandi, M. (2015). *Three dimensional (3D) printing: a straightforward, user-friendly protocol to convert virtual chemical models to real-life objects*. ACS Publications.
- Rozzelle, A. A., & Rosenfeld, S. M. (1985). Stereoscopic projection in organic chemistry: Bridging the gap between two and three dimensions. *Journal of Chemical Education*, 62(12), 1084.
- Scalfani, V. F., & Vaid, T. P. (2014). 3D printed molecules and extended solid models for teaching symmetry and point groups. *Journal of Chemical Education*, 91(8), 1174–1180.
- Simplify3D. (2018, marraskuuta 27). Filament Properties Table. Luettu 27. marraskuuta 2018, osoitteesta <https://www.simplify3d.com/support/materials-guide/properties-table/>
- Small, M. Y., & Morton, M. E. (1983). Research in College Science Teaching: Spatial Visualization Training Improves Performance in Organic Chemistry. *Journal of College Science Teaching*, 13(1), 41–43.
- Smiar, K., & Mendez, J. D. (2016). Creating and Using Interactive, 3D-Printed Models to Improve Student Comprehension of the Bohr Model of the Atom, Bond Polarity, and Hybridization. *Journal of Chemical Education*, 93(9), 1591–1594.
- Team ANYCUBIC. (2018, marraskuuta 27). ANYCUBIC PHOTON User Manual. Luettu 27. marraskuuta 2018 osoitteesta <http://www.anycubic3d.com/support/show/594032.html>

- Teo, T. W., Goh, M. T., & Yeo, L. W. (2014). Chemistry education research trends: 2004–2013. *Chemistry Education Research and Practice*, 15(4), 470–487.
- Teplukhin, A., & Babikov, D. (2014). Visualization of potential energy function using an isoenergy approach and 3D prototyping. *Journal of Chemical Education*, 92(2), 305–309.
- Woods, S. (2017, lokakuuta 18). Acetone Polishing (Smoothing) of ABS and ASA – a step-by-step guide. Luettu 2. joulukuuta 2018 osoitteesta <https://rigid.ink/blogs/news/acetone-vapor-smoothing>
- Yin, R. K. (2015). *Qualitative research from start to finish*. Guilford Publications.

Liitteet

Liite 1: PROPER HANDLING OF UV CURABLE 3D PRINTING RESINS (RadTech International, 2018)

CONSULT MANUFACTURER DOCUMENTATION

Consult Safety Data Sheets (SDSs) provided by suppliers of UV curable resins as the primary safety and handling documents.

3D printers have built-in safety features that are designed to prevent operator exposure to uncured photopolymers and UV wavelengths – do not try to change or disable these features.

USE PERSONAL PROTECTIVE EQUIPMENT [PPE]

Wear appropriate chemical-resistant gloves (nitrile or neoprene) – DO NOT use latex gloves.

Use safety glasses/goggles with UV protection.

Wear a dust mask when sanding or post-finishing parts.

FOLLOW GOOD HOUSEKEEPING PROCEDURES

DURING SET UP

Avoid placing a 3D printer over carpeted areas or use a barrier to avoid the possibility of carpet damage.

Do not expose UV curable resin to heat (at or above 110°C/ 230°F), flames, sparks or any source of ignition.

3D Printers and uncured, open resin vats should be stored and operated in a well-ventilated area.

If UV curable resin comes in a sealed cartridge:

Inspect the cartridge before loading it into the printer

Do not use a cartridge that is leaking or damaged. Dispose of it according to local regulations and contact the supplier.

If the UV curable resin is in a pourable bottle, carefully pour the liquid from the storage bottle into the printer tray, avoiding spills and drips.

Tools that may be contaminated with the material should be cleaned prior to reuse with window cleaner, or plenty of denatured or isopropyl alcohol, followed by a thorough washing with soap and water.

Keep work area clean.

AFTER PRINTING

Wear gloves when handling parts directly from the printer.

Wash the parts before post-cure using a manufacturer's recommended solvent, such as isopropyl or rubbing alcohol.

Post-cure using UV light as recommended by the manufacturer should follow the wash before the printed object is handled without gloves.

Ensure that all 3D printed objects are fully post-cured by exposure to a UV light source after forming, in accordance with the printer manufacturer's recommendations.

PRACTICE PERSONAL HYGIENE

Do not eat, drink or smoke in work area. Remove jewelry (rings, watches, bracelets) prior to handling uncured UV curable materials.

Avoid direct contact with any UV curable resins or contaminated surfaces, including any parts of the body or clothing. Do not touch the resin without wearing protective gloves and do not get it on your skin.

Wash hands, face or any body parts that may contact UV curable resin with mild skin cleanser and soaps after handling – do not use solvents.

Remove and wash contaminated clothing or jewelry; do not reuse any contaminated personal items until properly cleaned with detergent. Discard contaminated shoes and leather goods.

CLEAN UP WORK AREA

Use absorbent rags to clean spills immediately.

Clean any contacted or exposed surfaces to prevent contamination. Clean with window cleaner, or a denatured or isopropyl alcohol, followed by a thorough washing with soap and water.

KNOW FIRST AID PROCEDURES

Flush contaminated eyes or skin thoroughly with plenty of water for 15 minutes. Wash skin with soap and plenty of water or waterless cleaner if needed.

If skin irritation or rash occurs, seek qualified medical attention.

If ingested, do not induce vomiting. Seek medical attention immediately.

PREPARE FOR DISPOSAL

Fully cured resin can be disposed of with household items.

Cure unreacted UV curable resins by leaving them in sunlight for a few hours or expose them to a UV light.

Partially cured or uncured resin waste may be classified as hazardous waste. Please check your state's website for disposal of chemical waste. Do not pour into the sink or dispose into the water system.

Clean-up materials containing UV curable resins should be isolated in sealed, labeled containers and disposed of as hazardous waste. Do not pour these materials down the drain or into a water system.

STORE CORRECTLY

Keep UV curable resins sealed tightly in their containers, out of direct sunlight and within the temperature range suggested by the manufacturer.

A small headspace of air is needed to keep the resin from gelling. Do not fill resin containers to the top of the opening.

Do not pour used, uncured resin back into new resin bottles.

Do not store uncured resin in refrigerators used for food and beverage storage.

The information provided in Safe Handling of UV Curable 3D Printing Resins is believed to be current at the date of publication. The guidelines found in this Guide may not cover all applicable legal requirements. RadTech is not responsible for the conditions of use of particular 3D printing systems. It is the user's responsibility to determine the safe conditions of use of a particular 3D printing system. The guide is offered in good faith and is believed to be reliable; however it provided neither warranties nor representations for any of the products it mentions. RadTech disclaims any and all liability for the damages incurred directly or indirectly through the use of this document. Nothing contained herein should be considered a recommendation to use any particular company's product. Contact your chemical and equipment supplies for additional information. © 2017

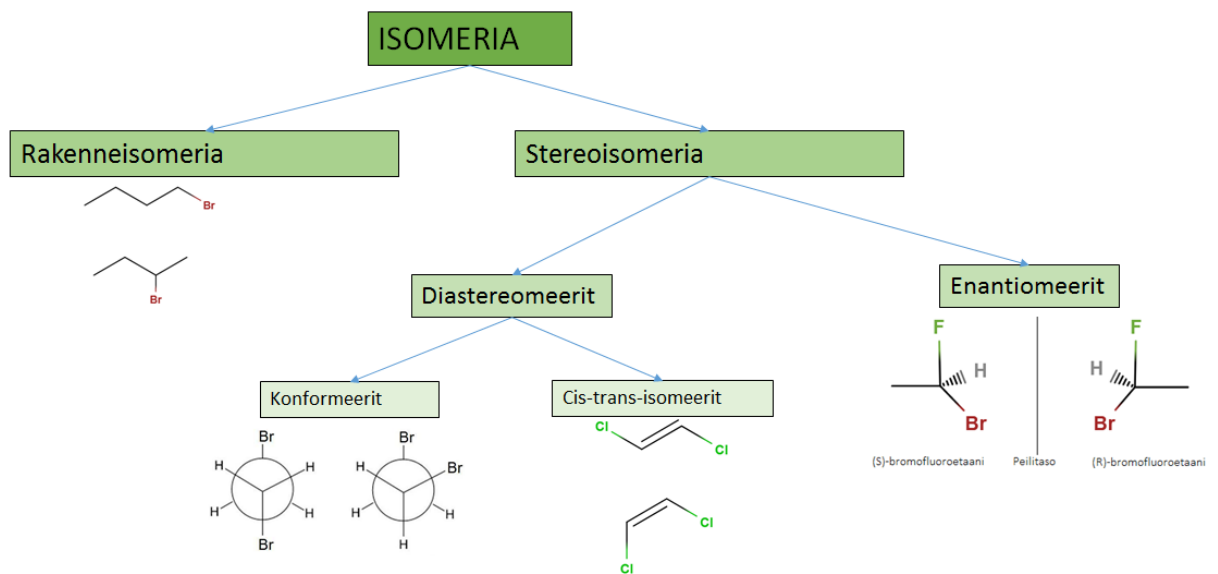
Liite 2: Ensimmäinen versio oppimateriaalista

STEREOISOMERIA

Stereoisomeriassa atomien sitoutumisjärjestys on sama isomeerien kesken, mutta niiden avaruudellinen suuntautuminen eroaa. Stereoisomeria voidaan jaotella

- Enantiomeereihin
- Diastereomeereihin

Enantiomeerit ovat optisesti aktiivisia yhdisteitä ja niissä on tyypillisesti kiraliakeskuksena sp^3 -hybridisoitunut hiili.



R/S-isomerian määrittäminen

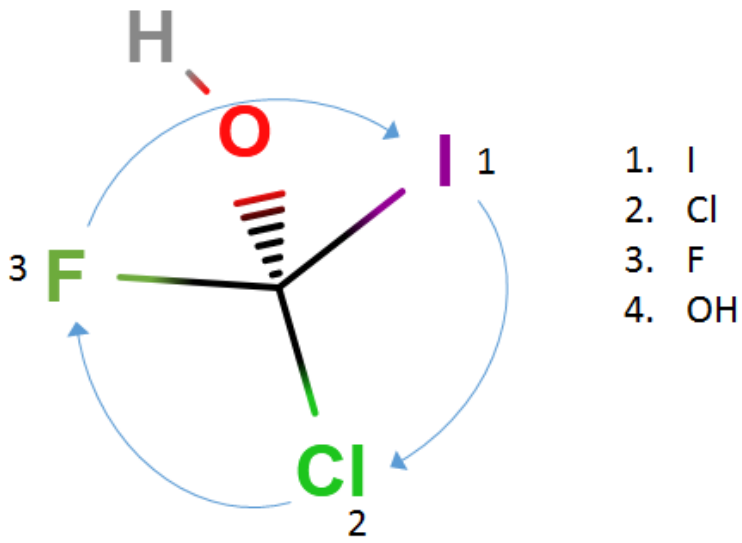
Kiraalisen sp^3 -hybridisoituneen hiiliatomin R/S-isomeria määräytyy seuraavasti:

- Molekyyliä käännetään niin, että prioriteetiltään pienin atomi/atomiryhmä on katsojasta poispäin.
- Kiraliakeskuksen atomit tai atomiryhmät merkitään prioriteettijärjestykseen.
- Prioriteettijärjestyksen (1-2-3) kiertäessä myötäpäivään tarkoittaa R-isomeeriä ja vastapäivään S-isomeeriä.

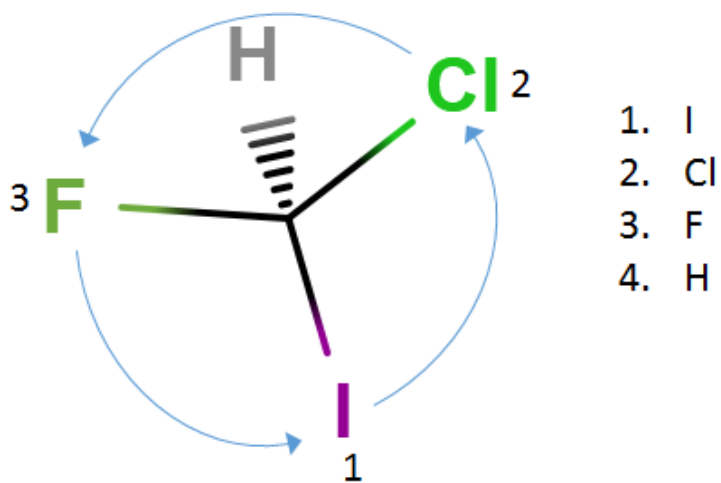
Prioriteetti määräytyy atomiluvun mukaan; atomiluvultaan suurin on prioriteetiltään ensimmäinen ja pienin viimeisenä.

- Jos kiraliakeskukseen on kiinnittynyt kaksi samaa atomia, niin prioriteetti määräytyy näihin substituentteihin kiinnittyneen atomin/atomiryhmän mukaan.
- Edelleen, mikäli kiinnittyneet atomit ovat samoja, niin substituenttiin kiinnittyneitä atomeita seurataan niin pitkälle, kunnes prioriteetin merkitsevä ero atomeissa löytyy.

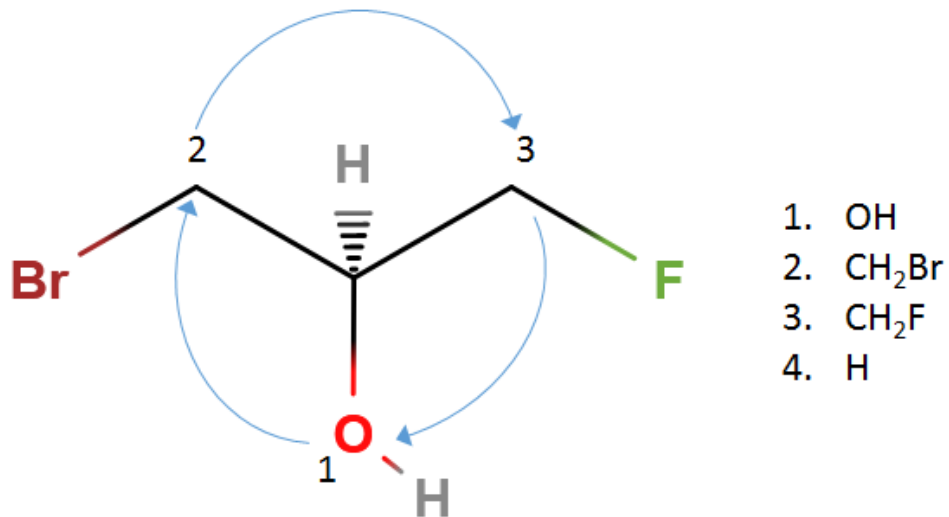
Esim. 1. R-isomeeri



Esim. 2: S-isomeeri



Esim. 3. R-isomeeri

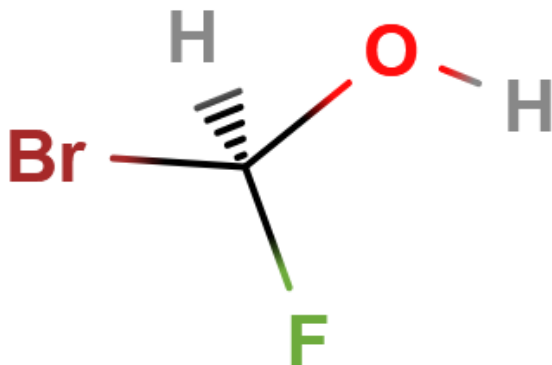


Tehtävä 1. Enantiomeerit, eli peilikuvaisomeerit parityönä.

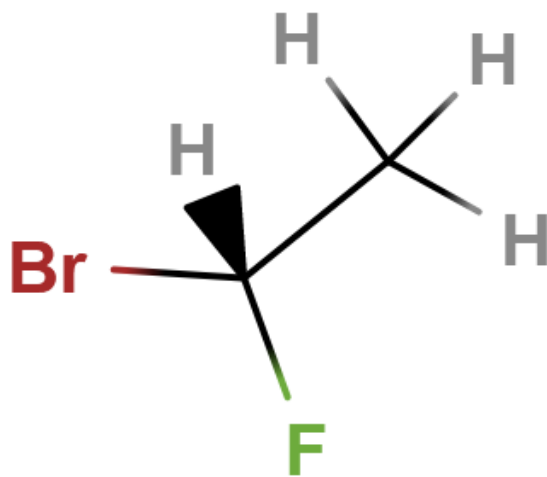
- Rakentakaa kiraalinen yhdiste, jossa on
 - 2 hiiltä
 - 1 hydroksyyliiryhmä
 - 1 bromi ja 1 fluori
 - 4 vetyä
- Piirtäkää yhdisteen viivakaava. (vety pois päin katkoviivalla) Onko yhdiste S- vai R - enantiomeeri?

Tehtävä 2.

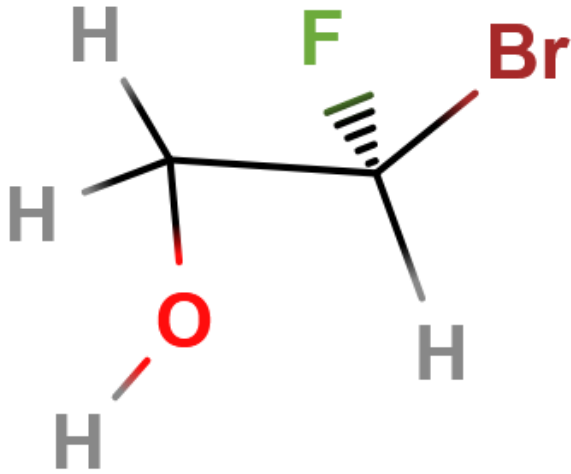
Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri. (vety pois päin)



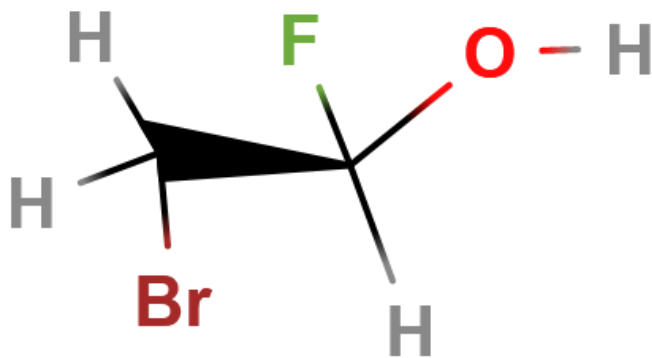
Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri (vety pois päin).



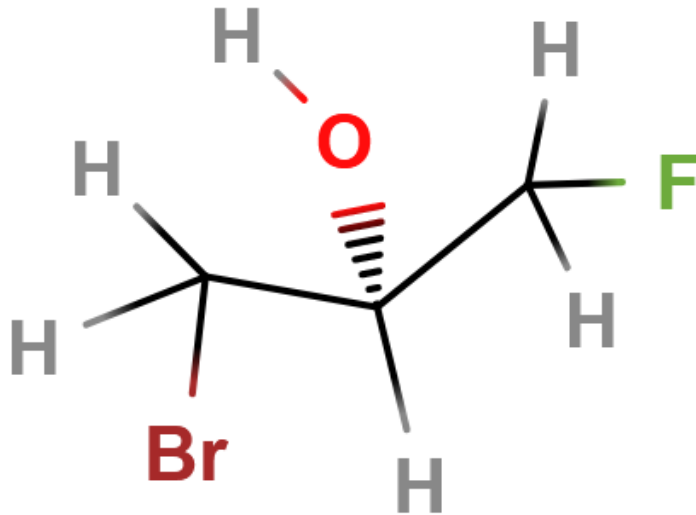
Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri (vety pois päin)



Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri (vety pois päin)



Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri (vety pois päin)



Tehtävä 3. Kiraalisten yhdisteiden välinen vuorovaikutus (parityö)

1. Toinen parista rakentaa halumansa kiraalisen yhdisteen ja näyttää sitä toiselle parista alin prioriteetti parista poispäin. Toinen parista piirtää molekyylin viivakaavana paperille ja määrittää S/R -isomerian.
2. Toinen parista vaihtaa kahden atomin/atomiryhmän paikkaa niin, että kiraalisuus muuttuu. Toinen parista määrittää molekyylin S/R -isomerian.
3. Toinen parista kääntää molekyyliä eri asentoon TAI vaihtaa molekyyliä TAI tekee kumpaakin yhtä aikaa, ja toisen tehtävänä on päätellä onko kyse S vai R -enantiomeerista.

Tehtävä 4. Kahden kiraalisen yhdisteen välinen vuorovaikutus.

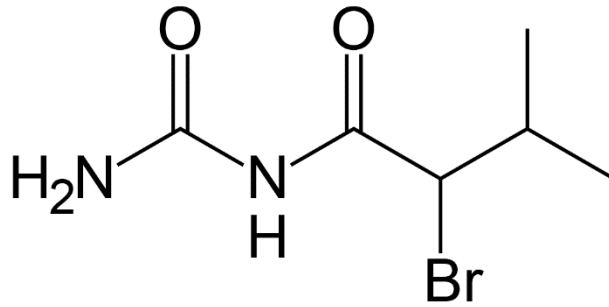
1. Rakentakaa pieni kiraalinen yhdiste, jonka kiralikeskukseen on kiinnittynyt vety, metyyliiryhmä, bromi ja fluori. Piirtäkää yhdiste.
2. Rakentakaa nyt kiraalinen yhdiste, jonka atomiryhmät muodostavat mahdollisimman voimakkaat molekyylien väliset sidokset. Piirtäkää yhdisteet viivakaavana ja kuvatkaa katkoviivoin molekyylien välisiä sidoksia.
3. Vaihtakaa atomeita/atomiryhmiä siten, että kiraalisten molekyylien välille muodostuu repulsiivisia vuorovaikutuksia. Piirtäkää yhdiste.

Tehtävä 5. Muuntohuume

Taustaa:

Bromisovaali (2-bromi-N-karbamoyyli-3-metyylibutanamidi), tunnettu tavallisemmin nimellä bromivalenyyliurea on uni- ja rauhoittavana lääkkeenä käytetty bromipohjainen vanha unilääke. Sen on kehittänyt Knoll vuonna 1907, ja se on patentoitu vuonna 1909.

Bromisovaali aiheuttaa väärinkäytettynä voimakkaita psyykkisiä ja neurologisia haittavaikutuksia.

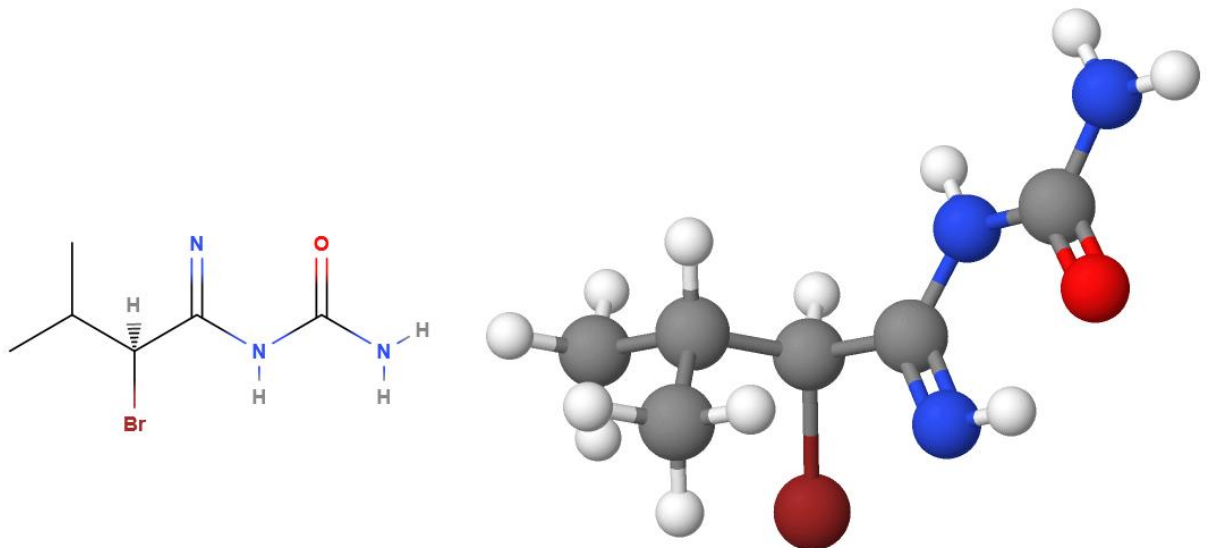


Kuva. Bromisovaali

Molekyylin suunnittelu

Kuvitteellinen tilanne

- Bromisovaalista on kehitetty muuntohuume, jossa yksi ketoniryhmistä on korvattu imiini-ryhmällä. (Kuva) Yhdisteen S-enantiomeeri on hengenvaarallinen. Tehtävänänne on suunnitella molekyyli, joka sitoutuu siihen ja estää sen haitallisen toiminnan elimistössä.



Kuva. Bromisovaalista kehitetyn muuntohuumeen S-enantiomeeri

1. Suunnitelkaa kiraalinen yhdiste, joka sitoutuu molekyylien välisiin sidoksiin muuntohuumeen (NIMI) S-enantiomeerin kiraliakeskukseen
2. Piirtäkää suunnittelemanne yhdiste. Onko yhdiste S- vai R-enantiomeeri?
3. Kuvatkaa muuntohuumeen ja suunnittelemanne molekyylin välisiä sidoksia katkoviivoin.
4. Pohtikaa muuntohuumeiden merkitystä terveydellisesti ja yhteiskunnallisesti.

Liite 3. Fyysisten molekyyli mallien hyödyntäminen sisällönanalyysin perusteella.

Molekyyli mallien hyödyntäminen			
Alkuperäinen havainto	Havainnon tulkinta	Alaluokka	Yläluokka
Opiskelijat käänsivät molekyylin kädessään pienin prioriteetti pois päin. Tämän jälkeen he piirsivät yhdisteen viivakaavan. (Tehtävä 1)	Molekyyli malleja hyödynnettiin rakennekaavan piirtämiseksi	Molekyyli mallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyyli mallien hyödyntäminen
Ensimmäisestä molekyyli kaavasta havaittiin, että opiskelijat nimesivät suoraan kysytyn isomeerin ja piirsivät peilikuvaisomeerin rakentamatta molekyyli mallia. (Tehtävä 2)	Molekyyli malleja ei tarvinnut hyödyntää tehtävän ratkaisemiseksi	Molekyyli mallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyyli mallien hyödyntäminen
Toisen molekyyli kaavan kohdalla yksi opiskelija nimesi kysytyn enantiomeerin käyttämättä molekyyli mallia. (Tehtävä 2)	Molekyyli malleja ei tarvinnut hyödyntää tehtävän ratkaisemiseksi	Molekyyli mallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyyli mallien hyödyntäminen Fyysisten molekyyli mallien hyödyntäminen
Seuraavissa rakennekaavoissa (kolmas, neljäs ja viides) hyödynnettiin fyysisiä molekyyli malleja kaikkien toimesta (Tehtävä 2)	Molekyyli malleja hyödynnettiin vaativampien rakenteiden selvittämisessä.	Molekyyli mallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyyli mallien hyödyntäminen
Opiskelijat rakensivat molekyyli mallin, käänsivät alimman prioriteetin pois päin itsestään ja piirsivät sekä nimesivät isomeerin. (Tehtävä 2)	Molekyyli malli rakennettiin R/S-isomerian selvittämiseksi.	Molekyyli mallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyyli mallien hyödyntäminen

Molekyylimalli rakennettiin peilaamalla fyysistä molekyylimallia paperin kuvaan, jonka jälkeen malli käännettiin kädessä alin prioriteetti poispäin, josta piirrettiin viivakaava. (Tehtävä 2)	Molekyylimalli rakennettiin rakennekaavan peilikuvaksi ja molekyylimallista selvitettiin R/S-isomeria	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Molekyylimalli rakennettiin samaan asentoon kuin kirjan kuvassa, jonka jälkeen kaksi atomia/atomiryhmää vaihdettiin keskenään. Tämän jälkeen molekyylimalli käännettiin kädessä alin prioriteetti poispäin, josta piirrettiin viivakaava. (Tehtävä 2)	Molekyylimalli rakennettiin vastaavaksi kuin rakennekaava, jonka jälkeen enantiomeeri selvitettiin sen tiedon perusteella, että kahta atomiryhmää vaihtamalla kiraalisuus muuttuu.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Opiskelijat rakensivat molekyyliä, jotka toinen opiskelija sitten käänsi kädessään alin prioriteetti alaspäin. Molekyylit sisälsivät aina vetyatomin. (Tehtävä 3)	Ratkaisu tehtävään löydettiin kääntämällä molekyylimalli helppoon asentoon.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Opiskelijat piirsivät suoraviivaisesti molekyylin viivakaavaksi, kun molekyyli oli halutussa asennossa. (Tehtävä 3)	Rakennekaava piirrettiin samaan asentoon kuin edessä oleva molekyylimalli.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Opiskelijat rakensivat ja piirsivät nopeasti tehtävänannossa vaaditun molekyylin. (Tehtävä 4)	Molekyylimalli rakennettiin rakennekaavan mukaiseksi	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Opiskelijat rakensivat toisen molekyylimallin vertaamalla sitä ensiksi rakennettuun	Kiraalinen molekyyli suunniteltiin rakentamalla molekyylimalli ja vertaamalla	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen

molekyylimalliin. Tämän jälkeen opiskelijat käänsivät tämän molekyylin kädessään alin prioriteetti pois päin ja piirsivät viivakaavan näkemänsä perusteella. (Tehtävä 4)	sitä toiseen kiraaliseen molekyylimalliin.		
Toiseen kiraaliseen yhdisteeseen laitettiin hydroksyyli - ja ketoniryhmiä. (Tehtävä 4)	Hydroksyyli- ja ketoniryhmät rakennettiin molekyylin välisten vuorovaikutusten muodostamiseksi.	Molekyylimallin käyttö kiraalisten molekyylin välisen vuorovaikutusten hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Opiskelijat eivät käyttäneet poolittomia osia muodostaakseen hydrofobisia vuorovaikutuksia	Poolittomien osien vuorovaikutusta ei käytetty hyödyksi molekyylin suunnittelussa	Molekyylimallin käyttö kiraalisten molekyylin välisen vuorovaikutusten hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Haastattelu			
Oli hyödyllistä, että paperilla esitettyjen rakennekaavojen atomit olivat samanvärisiä kuin molekyylimallien atomit. (Tehtävä 2)	Visuaaliset rakennekaavatesimerkit helpottivat molekyylimallien käyttöä.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Molekyylimallit auttoivat toisessa molekyylissä, jossa vety oli ylöspäin. (Tehtävä 2)	Molekyylimalli auttoi löytämään molekyylin R/S-isomerian.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen
Isomerian tunnistaminen poikkesi tällä menetelmällä aiemmin opitusta tavasta, jossa S/R-isomeria selvitetään yksinkertaisesti vaihtamalla isomeria toiseksi tapauksessa, jossa vety on ylöspäin. (Tehtävä 2)	Molekyylin R/S-isomeria selvitettiin näkemällä molekyylimallista atomien ja atomiryhmien sitoutumisjärjestys.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen

Molekyylimallit auttoivat molekyyliässä 3, jossa fluori oli pois päin. (Tehtävä 2)	Atomien sitoutumisjärjestys hahmotettiin molekyylimallin avulla.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen.
S/R -isomeria selvitettiin kääntämällä molekyyli vety pois päin ja katsomalla molekyyliä. (Tehtävä 3)	Atomien sitoutumisjärjestys löydettiin kääntämällä molekyyli helposti tulkittavaan asentoon.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen.
Käsin kääntämällä molekyyli oikeaan asentoon isomerian selvittäminen oli helppoa, vaikka parin antama molekyyli olisikin ollut aluksi vaikeasti hahmotettavassa asennossa. (Tehtävä 3)	Atomien sitoutumisjärjestys löydettiin kääntämällä molekyyli helposti tulkittavaan asentoon.	Molekyylimallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen.
Kahdella molekyyliillä kokeiltiin molekyylien välisiä vuorovaikutuksia. (Tehtävä 4)	Kahden molekyylimallin avulla pyrittiin selvittämään molekyylien väliset vuorovaikutukset.	Molekyylimallin käyttö kiraalisten molekyylien välisen vuorovaikutusten hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen.
Laitoimme molekyyliin mahdollisimman paljon happea vetysidosten saamiseksi. (Tehtävä 4)	Molekyylimalliin kiinnitettiin hydroksidi- ja ketoniryhmiä vetysidosten mudoostamiseksi.	Molekyylimallin käyttö kiraalisten molekyylien välisen vuorovaikutusten hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen.
Ei käytetty poolittomia osia, mutta niitä olisi voinut käyttää. (Tehtävä 4)	Molekyylimalliin ei rakennettu poolittomia osia.	Molekyylimallin käyttö kiraalisten molekyylien välisen vuorovaikutusten hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen.
Ei pohdittu molekyyliässä olevia negatiivisia ja positiivisia osittaisvarauksia suunniteltaessa molekyylimalleja. (Tehtävä 4)	Molekyylimallia käyttämällä ei herännyt ajatusta sähköisistä osittaisvarauksista.	Molekyylimallin käyttö kiraalisten molekyylien välisen vuorovaikutusten hahmottamisessa.	Fyysisten molekyylimallien hyödyntäminen.

<p>Fyysiset molekyyli­mallit selvensivät sitä, miten molekyyli käännetään mielessä ja selvitetään R/S-isomeria siinä tapauksessa, kun viivakaavassa alin prioriteetti ei ole alaspäin. (Vapaa loppuhaastattelu)</p>	<p>Molekyyli­mallit auttoivat kolmiulotteisen rakenteen hahmottamista ja atomien sitoutumisjärjestyksen selvittämistä.</p>	<p>Molekyyli­mallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa.</p>	<p>Fyysisten molekyyli­mallien hyödyntäminen</p>
<p>Yliopiston orgaanisen kemian luennoilla esitetty tapa selvittää R/S -isomeria kaksiulotteisesta viivakaavasta ei ollut yhtä havainnollistava kuin fyysisten molekyyli­mallien käyttäminen tehtävissä.</p>	<p>Molekyyli­mallit olivat havainnollistava tapa nähdä atomien sitoutumisjärjestys.</p>	<p>Molekyyli­mallin käyttö kolmiulotteisen rakenteen hahmottamisessa.</p>	<p>Fyysisten molekyyli­mallien hyödyntäminen.</p>

Liite 4. Molekyyylimallin laatu sisällönanalyysin perusteella.

Molekyyylimallien laatu			
Alkuperäinen havainto	Pelkistetty ilmaus	Alaluokka	Yläluokka
Oppilaat pystyivät rakentamaan tavoitellut molekyylit	Molekyyylimallit ovat käyttökelpoisia	Molekyyylimallien käytettävyys	Molekyyylimallien laatu
Molekyyylimallit tippuivat ensimmäisessä tehtävässä	Molekyyylimallien laadussa on kehitettävää	Molekyyylimallien käytettävyys	Molekyyylimallien laatu
Molekyyylimallit olivat ajoittain hankala kiinnittää	Molekyyylimallien laadussa on kehitettävää	Molekyyylimallien käytettävyys	Molekyyylimallien laatu
Molekyyylimallien käyttö sujuvoitui tehtävissä edetessä	Molekyyylimallit ovat käyttökelpoisia	Molekyyylimallien käytettävyys	Molekyyylimallien laatu
Molekyyylimalleja hyödynnettiin yhdessä visuaalisten esimerkkien kanssa tehtävässä 2	Molekyyylimallit olivat visuaalisia	Molekyyylimallien ulkonäkö	Molekyyylimallien laatu
Haastattelu			
Teoriaosuuden visuaaliset esimerkit yhdessä molekyyylimallien kanssa auttoivat tehtävien ratkaisemisessa	Molekyyylimallit olivat visuaalisia	Molekyyylimallien ulkonäkö	Molekyyylimallien laatu
Molekyyylimallit ajoivat asiansa	Molekyyylimallit ovat käyttökelpoisia	Molekyyylimallien käytettävyys	Molekyyylimallien laatu
Molekyyylimallit näyttivät ”ookoolta”	Molekyyylimallit ovat ulkonäöltään riittävän hyviä	Molekyyylimallien ulkonäkö	Molekyyylimallien laatu

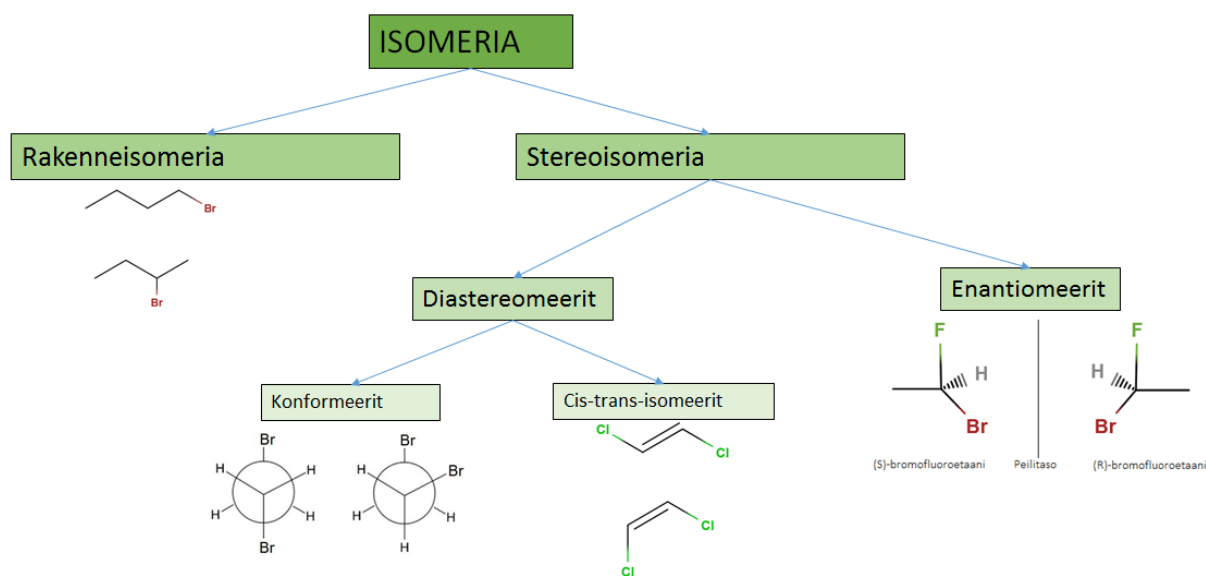
Liite 5: Lopullinen oppimateriaali

STEREOISOMERIA

Stereoisomeriassa atomien sitoutumisjärjestys on sama isomeerien kesken, mutta niiden avaruudellinen suuntautuminen eroaa. Stereoisomeria voidaan jaotella

- Enantiomeereihin
- Diastereomeereihin

Enantiomeerit ovat optisesti aktiivisia yhdisteitä ja niissä on tyypillisesti kiraliakeskuksena sp^3 -hybridisoitunut hiili.



R/S-isomerian määrittäminen

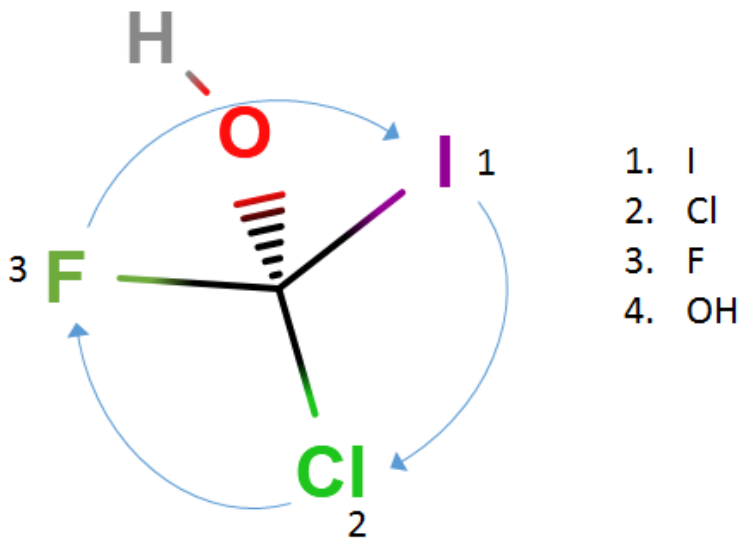
Kiraalisen sp^3 -hybridisoituneen hiiliatomin R/S-isomeria määrittyy seuraavasti:

- Molekyyliä käännetään niin, että prioriteetiltään pienin atomi/atomiryhmä on katsojasta poispäin.
- Kiraliakeskuksen atomit tai atomiryhmät merkitään prioriteettijärjestykseen.
- Prioriteettijärjestyksen (1-2-3) kiertäessä myötäpäivään tarkoittaa R-isomeeriä ja vastapäivään S-isomeeriä.

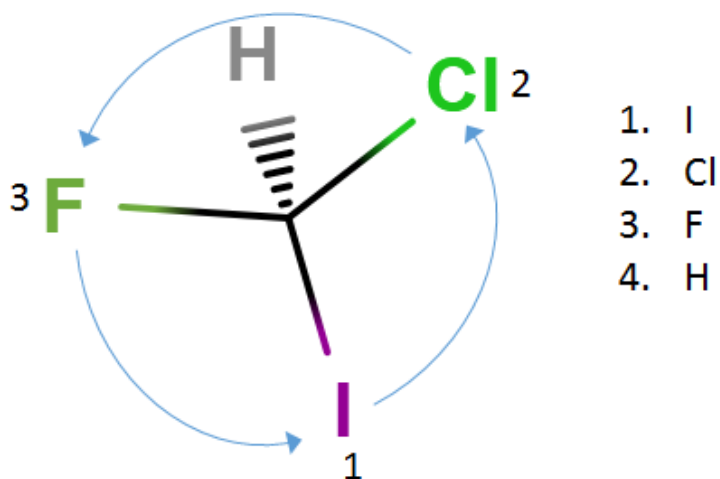
Prioriteetti määrittyy atomiluvun mukaan; atomiluvultaan suurin on prioriteetiltään ensimmäinen ja pienin viimeisenä.

- Jos kiraliakeskukseen on kiinnittynyt kaksi samaa atomia, niin prioreiteetti määräytyy näihin substituentteihin kiinnittyneen atomin/atomiryhmän mukaan.
- Edelleen, mikäli kiinnittyneet atomit ovat samoja, niin substituenttiin kiinnittyneitä atomeita seurataan niin pitkälle, kunnes prioriteetin merkitsevä ero atomeissa löytyy.

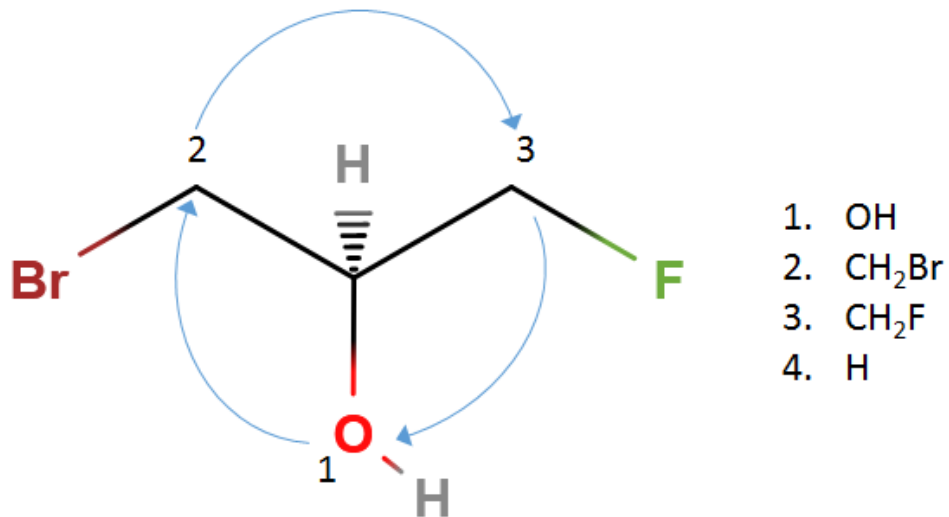
Esim. 1. R-isomeeri



Esim. 2: S-isomeeri



Esim. 3. R-isomeeri

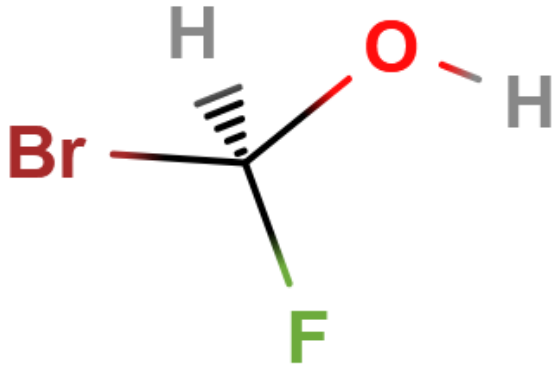


Tehtävä 1. Enantiomeerit, eli peilikuvaisomeerit parityönä.

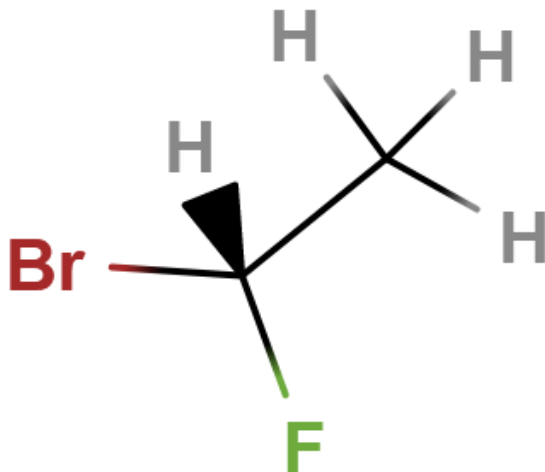
- Rakentakaa kiraalinen yhdiste, jossa on
 - 2 hiiltä
 - 1 hydroksyyli-ryhmä
 - 1 bromi ja 1 fluori
 - 4 vetyä
- Piirtäkää yhdisteen viivakaava. (vety pois-pään katkoviivalla) Onko yhdiste S- vai R- enantiomeeri?

Tehtävä 2.

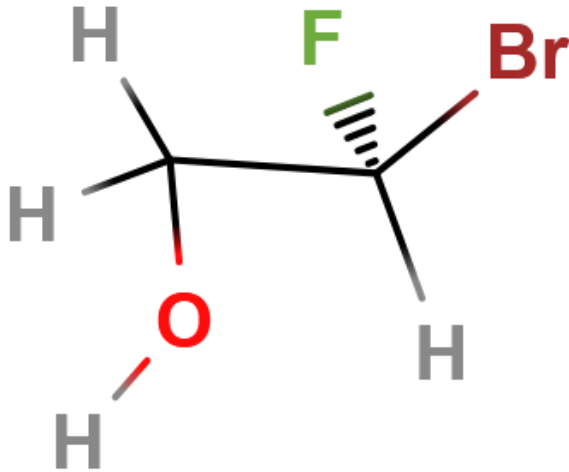
Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri. (vety pois päin)



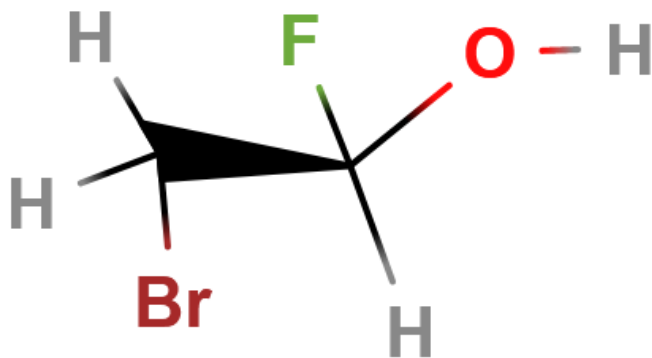
Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri (vety pois päin).



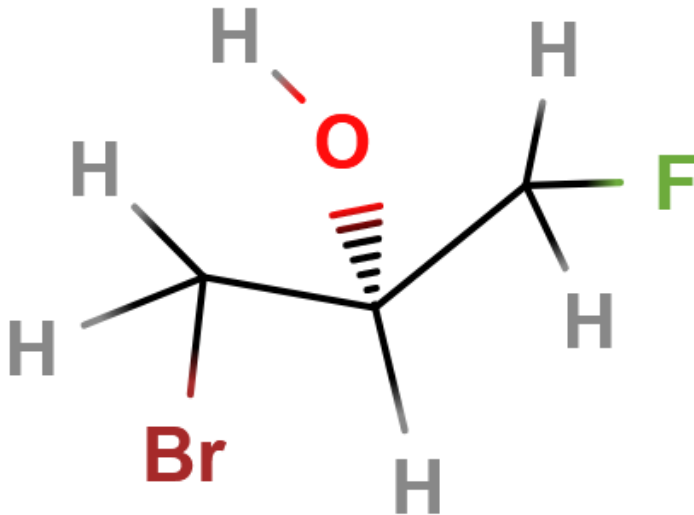
Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri (vety pois päin)



Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri (vety pois päin)



Mikä enantiomeeri on kuvassa? Piirtäkää yhdisteen peilikuvaisomeeri (vety pois päin)

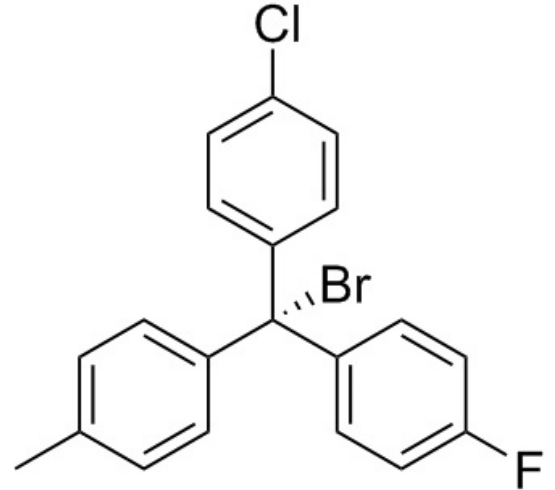
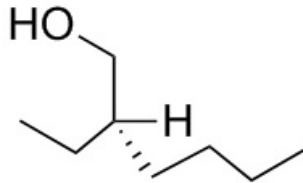
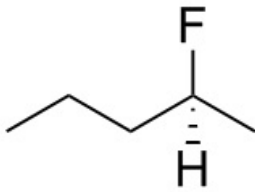


Tehtävä 3. Kiraalisen yhdisteen R/S-isomerian tutkiminen parityönä

1. Istu työpariasi vastapäätä. Rakenna nyt haluamasi kiraalinen yhdiste ja aseta se pöydälle.
2. Selvittäkää R/S -isomeria piirtämällä molekyylin rakennekaava alin prioriteetti alaspäin. Molekyylimallia ei saa kääntää pöydällä.
3. Verratkaa piirtämiänne rakennekaavoja. Päädyttyänne yhteiseen ratkaisuun toinen parista rakentaa uuden kiraalisen molekyylin.

Tehtävä 4.

- Määritä alla olevien molekyylien isomeria ilman, että käytät fyysisiä molekyyylimalleja apuna. VINKKI: Kuvittele mielessäsi, miltä molekyyli näyttää, kun katsoisit sitä alin prioriteetti itsestäsi poispäin.

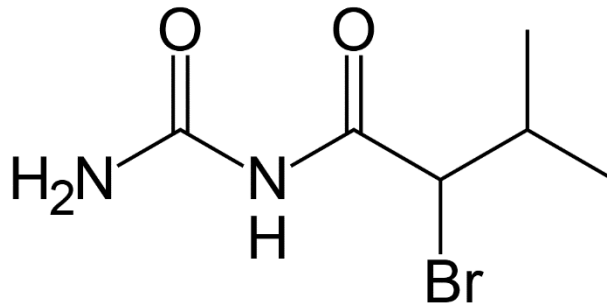


Tehtävä 5. Muuntohuume

Taustaa:

Bromisovaali (2-bromi-N-karbamoyyli-3-metyylibutanamidi), tunnettu tavallisemmin nimellä bromivalenyyliurea on uni- ja rauhoittavana lääkkeenä käytetty bromipohjainen vanha unilääke. Sen on kehittänyt Knoll vuonna 1907, ja se on patentoitu vuonna 1909.

Bromisovaali aiheuttaa väärinkäytettynä voimakkaita psyykkisiä ja neurologisia haittavaikutuksia.

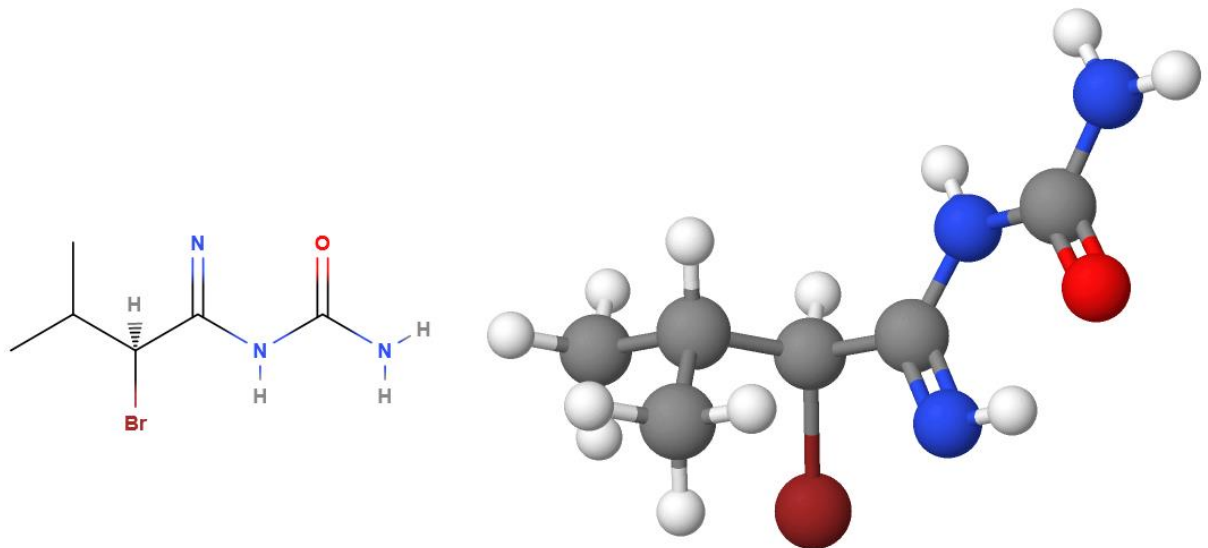


Kuva. Bromisovaali

Molekyylin suunnittelu

Kuvitteellinen tilanne

- Bromisovaalista on kehitetty muuntohuume, jossa yksi ketoniryhmistä on korvattu imiini-ryhmällä. (Kuva) Yhdisteen S-enantiomeeri on hengenvaarallinen. Tehtävänänne on suunnitella molekyyli, joka sitoutuu siihen ja estää sen haitallisen toiminnan elimistössä.



Kuva. Bromisovaalista kehitetyn muuntohuumeen S-enantiomeeri

- Suunnitelkaa kiraalinen yhdiste, joka sitoutuu molekyylien välisiin sidoksiin muuntohuumeen (NIMI) S-enantiomeerin kiraliakeskukseen
- Piirtäkää suunnittelemanne yhdiste. Onko yhdiste S- vai R-enantiomeeri?
- Kuvatkaa muuntohuumeen ja suunnittelemanne molekyylin välisiä sidoksia katkoviivoin.
- Pohtikaa muuntohuumeiden merkitystä terveydellisesti ja yhteiskunnallisesti.

Liite 6: Haastattelukysymykset

Tehtävä 1.

- Millaisena koitte molekyylimallien käytön?
- Näkikö molekyylimalleista mitä atomia tai ryhmää niillä tarkoitettiin?
- Millaista niitä oli käsitellä?
- Miten ratkaisitte tehtävän?

Tehtävä 2.

- Miten ratkaisitte kakkostehtävän enantiomeerit?
- Millä tavalla hyödynsitte molekyylimalleja?
- Oliko jokin tehtävän molekyyleistä sellainen, missä molekyylimalleista oli erityisesti apua?

Tehtävä 3.

- Miten löysitte S/R-isomerian tehtävässä?
- Koitteko tehtävän ratkaisemisen hankalaksi?
- Millä tavalla hyödynsitte molekyylimallia?

Tehtävä 4.

- Miten löysitte sopivan kiraalisen yhdisteen?
- Olisiko tehtävässä auttanut, jos atomeita olisi ollut enemmän käytössä?
- Pohditteko tehtävässä sähköisiä osittaisvarauksia?
- Rakensitteko molekyyliin poolittomia osia?

Vapaa loppuhaastattelu

- Millaiselta tämä oppitunti teistä tuntui?
- Miten koitte, että onko fyysiset molekyylimallit järkevä tapa opiskella optista isomeriaa?
- Onko tässä jotain uutta aiempaan verrattuna?
- Mitä muuta teille tuli mieleen tästä?