

# KEMIAN TIEDEKASVATUS: KEMINFORMATIIKAN TUTKIMUKSEN ONTOLOGINEN ASEMOINTI

Tämä artikkeli on jatkoa edellisessä Kemiauutisissa julkaistulle artikkelille (Pernaa & Aksela, 2021), jossa esittelimme keminformatiikan kemian ja sen tiedekasvatuksen tutkimusalana, ja esittelimme tutkimusryhmämme aikaisempaa tutkimusta aiheen parissa. Olemme työskennelleet keminformatiikan tutkimuksen parissa ohjelmistokehityksessä (Pernaa, 2015; Pernaa & Aksela, 2011), mutta emme vielä silloin tienneet keminformatiikan olemassaolosta. Viime vuosina ryhmämme ymmärrys keminformatiikasta on kasvanut, ja osaamme entistä paremmin muotoilla keminformatiikkaan pohjautuvia tutkimuskysymyksiä kemian tiedekasvatuksessa. Tästä yhtenä esimerkkinä on alkuvuodesta 2022 julkaistu tutkimusartikkeli kansainvälisessä Journal of Chemical Education -lehdessä (Pernaa, 2022). Selvästi keminformatiikan tutkimus tiedekasvatuksessa vaatii vielä paljon metatyötä ja yhteistyötä kemian tutkijoiden kanssa. Päämääränämme on vahvistaa tutkimusperustaisesti keminformatiikan osaamista sekä kansallista ja kansainvälistä tutkimusyhteistyötä kemian ja sen tiedekasvatuksen asiantuntijoiden kanssa. Tässä artikkelissa määrittelemme keminformatiikan tutkimuksen ontologisen aseman kemian tiedekasvatuksen osana.

**Ontologia on tieteenfilosofinen termi, jolla viitataan olemassaolon kysymysten tutkimiseen.**

## **Kemian tiedekasvatuksen tutkimuksen päämäärä**

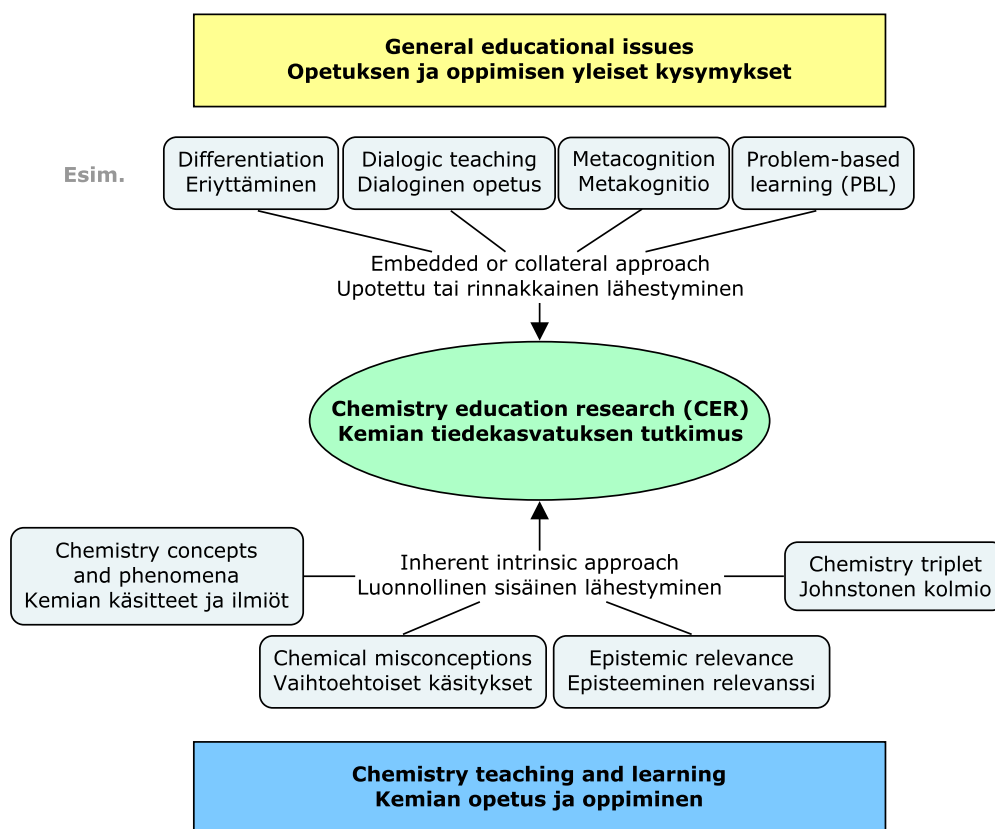
Kemian tiedekasvatuksen (engl. *chemistry education*) tutkimusta on tehty maailmalla muutamia vuosikymmeniä (Gabel, 1999; Gilbert ym., 2003). Tutkimusalana se on kehittynyt ja vahvistunut vuosien varrella. Keminformatiikka on muun muassa uusi avaus tutkimusaiheena, ja siksi käsittelemme sitä tarkemmin tässä artikkelissa.

Suomessa kemian tiedekasvatusta on edistetty

eri tavoin noin 30 vuotta. Suomalaisia asiantuntijoita on osallistunut muun muassa ensimmäiseen alan ECRICE-tutkimuskonferenssiin vuonna 1992 Ranskassa. Professori Aksela on ollut myös alan kutsupuhujana em. konferenssissa. Kemian tiedekasvatusta on tutkittu kemian osastolla 20 vuotta vuodesta 2001 alkaen. Kymmeniä tieteellisiä julkaisuja on julkaistu yhteistyössä kansallisten ja kansainvälisten tutkijoiden kanssa. Viimeksi yhteistyötä on tehty muun muassa chileläisten kemian tutkijoiden kanssa (Cáceres-Jensen ym., 2021; Rodriguez-Becerra ym., 2020). SECO-tutkimusryhmästä on valmistunut tähän mennessä 15 väitöskirjaa, uusin keväällä 2022. Kemia tieteenä, moderni teknologia ja kestävyys ovat olleet muun muassa kiinnostuksen kohteitamme vuosien varrella.

Kemian tiedekasvatuksen päämääränä on kemian tiedeosaamisen vahvistaminen tutkimusperustaisesti. Yksi hyvä luokittelu kemian tiedekasvatuksen tutkimuksen päämäärästä ja merkityksestä on Taberin (2017) julkaisu. Siinä tutkimusfokus voidaan jakaa kolmeen luokkaan:

- sisäinen (engl. *inherent*) fokus: Kemian tiedekasvatusta tutkitaan tieteen sisäisistä kysymyksistä lähtien, kuten esimerkiksi kemian oppiminen kemiallisia ilmiöitä mallintamalla ja visualisoimalla.
- upotettu (engl. *embedded*) fokus: Kemian tiedekasvatusta tutkitaan jonkin muun tieteenalan kontekstissa, kuten esimerkiksi kemian oppimisen tukeminen ongelmalähtöisellä oppimisella.
- rinnakkainen (engl. *collateral*) fokus: Jonkin muun tieteenalan tutkimusta, joka mahdollistaa työskentelyn kemian tiedekasvatuksen kontekstissa. Rinnakkaista tutkimusta olisi esimerkiksi erilaisten oppijoiden oppimishaasteiden kartoitus, joka toteutetaan laboratorioympäristössä.



Kuva 1. Kemian tiedekasvatuksen tutkimuksen yksi luokittelutapa (Taber, 2017).

Luokittelu osoittaa kemian tiedekasvatuksen tutkimuksen monimuotoisuuden. Alalle mahtuu tutkijoita, jotka rakentavat tutkimusongelmia enemmän kasvatustieteisiin nojaten sekä tutkijoita, jotka lähestyvät tutkittavia ilmiöitä kemian tieteenalan sisäisten kysymysten kautta (ks. kuva 1). Me Kemian opettajankoulutusyksikössä kuulumme tähän jälkimmäiseen ryhmään – olemme koulutukseltamme kemistejä, ja sijoituspaikkamme on kemian osasto matemaattis-luonnontieteellisessä tiedekunnassa. Kemian tiedeosaamisen edistäminen on kemian tiedekasvatuksen tutkimusessamme päämääränä. Pyrimme löytämään erilaisia tapoja saada kemia kiinnostavasti eri kohderyhmille sopivaksi. Teemme yhteistyötä muiden luonnontieteiden kanssa monitieteisissä kysymyksissä (esim. kestävyys, keminformatiikka), ja LUMA-yhteistyössä. LUMA-tiedeluokka, Kemianluokka Gadolin on yksikön tutkimus- ja kehittämislaboratorio.

#### **Keminformatiikan opetuksen tutkimuksen päämäärä**

Keminformatiikka tarjoaa mahdollisuuden kehittää kemian tiedekasvatusta erityisesti sisäisellä fokuksella (Taber, 2017). Siinä kemian tiedonalan sisäinen lähestyminen on keminformatiikan opetuksen tutkimukselle luonnollista, sillä sen perimmäinen tarkoitus aina ratkaista kemialliseen informaatioon liittyviä kysymyksiä. Poikkitieteellistä yhteistyötä siinä voidaan tehdä esimer-

## **Keminformatiikan perimmäinen tarkoitus aina ratkaista kemialliseen informaatioon liittyviä kysymyksiä.**

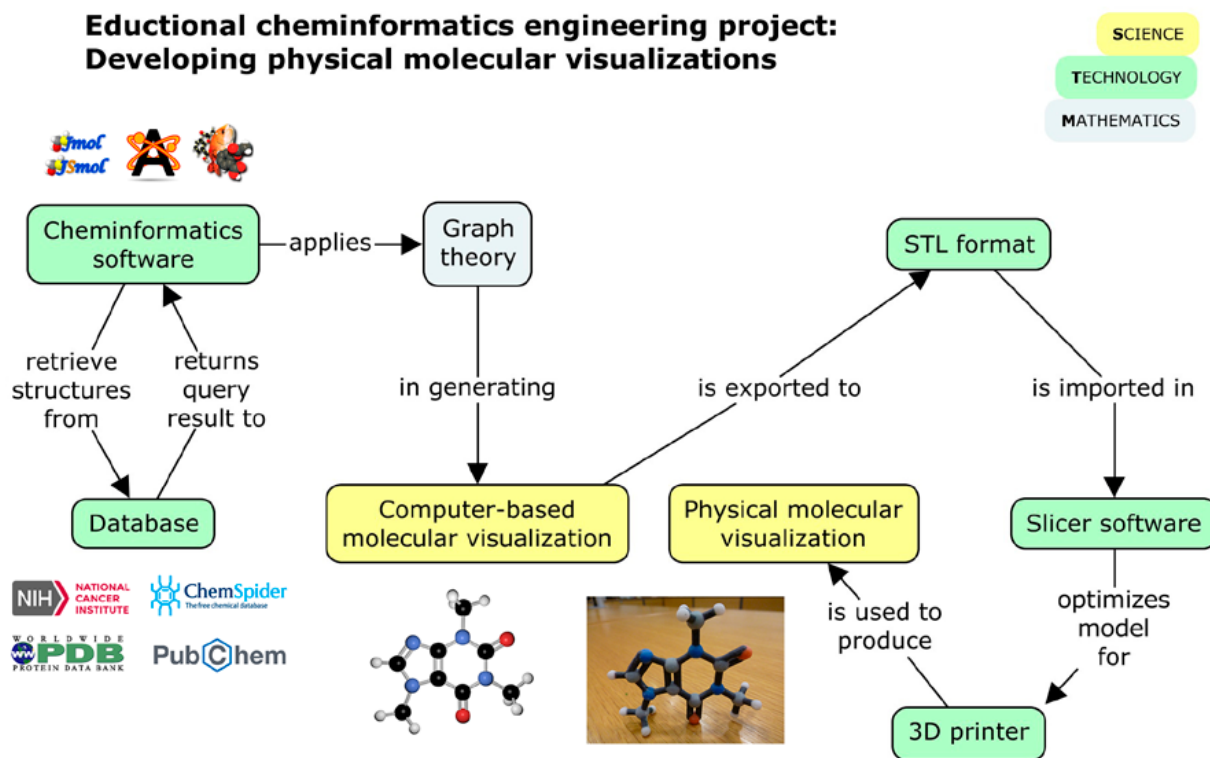
kiksi tietojenkäsittelytieteen ja matematiikan sekä tilastotieteen kanssa.

Tietokoneavusteiset molekyyllimallit ovat yksi konkreettinen keminformatiikan sovellus, joka on levinnyt laajalle kemian opetuksen jokaiselle opetusasteelle. Tästä meidän tutkimusryhmällämme on yli 20 vuoden tutkimuskokemus (Aksela & Lahtela-Kakkonen, 2001). Olemme tarkastelleet kemian tiedekasvatusta mallien ja molekyyllimallintamisen avulla (Aksela & Lundell, 2008), ja nykyisin myös mallien tuottamista keminformatiikan työkaluja hyödyntäen (Pernaa, 2022). Pääfokus siinä oli poikkitieteellinen LUMA-opetus (engl. *STEM*) keminformatiikan kontekstissa (ks. kuva 2).

#### **Tervetuloa mukaan yhteistyöhön**

Kemian tiedekasvatuksen tutkimuksen kehittyminen keminformatiikan osalta vaatii sisäisen tutkimusfokuksen (Taber, 2017) vahvistamista kemian tieteen näkökulmasta. Pidämme erittäin tärkeänä yhteistyötä kemian

## Educational cheminformatics engineering project: Developing physical molecular visualizations



Kuva 2. Poikkitieteellinen keminformatiikan tutkimus (Pernaa, 2022).

## Kemian alan sisäisten näkökulmien vahvistaminen edellyttää yhteistyötä kemian tutkimusryhmien kanssa.

tutkimusryhmien kanssa, ja pyydämme aiheesta kiinnostuneita tulemaan mukaan tutkimusyhteistyöhön. Yhteistyöstä meillä on kokemusta sekä kansainvälisellä (esim. Rodriguez-Becerra ym., 2020) että kansallisella tasolla lukuisten opinnäytetöiden kautta (esim. Kämpö, 2020). Yhteistyötyöskentely vaikuttaa uuden tutkimusalan kehittämiseen. Yhdessä olemme enemmän! ●

### Johannes Pernaa

Yliopistonlehtori, kemian tiedekasvatuksen dosentti

### Maija Aksela

Luonnontieteellisen tiedekasvatuksen professori  
Kemian opettajakoulutusyksikön ja tutkimusryhmän johtaja

Kemian opettajankoulutusyksikkö:

<https://blogs.helsinki.fi/kem-ope>

SECO-tutkimusryhmä: [helsinki.fi/seco](https://blogs.helsinki.fi/seco)

### Lähteet

- Aksela, M., & Lahtela-Kakkonen, M. (2001). Laskennallisen kemian mahdollisuuksia. *Dimensio*, 65(2), 34–37.
- Aksela, M., & Lundell, J. (2008). Computer-based molecular modelling: Finnish school teachers' experiences and views. *Chemistry Education Research & Practice*, 9(4), 301–308. <https://doi.org/10.1039/B818464J>
- Cáceres-Jensen, L., Rodríguez-Becerra, J., Jorquera-Moreno, B., Escudey, M., Druker-Ibañez, S., Hernández-Ramos, J., Díaz-Arce, T., Pernaa, J., & Aksela, M. (2021). Learning Reaction Kinetics through Sustainable Chemistry of Herbicides: A Case Study of Preservice Chemistry Teachers' Perceptions of Problem-Based Technology Enhanced Learning. *Journal of Chemical Education*, 98(5), 1571–1582. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c00557>
- Gabel, D. (1999). Improving Teaching and Learning through Chemistry Education Research: A Look to the Future. *Journal of Chemical Education*, 76(4), 448–554. <https://doi.org/10.1021/ed076p548>
- Gilbert, J., Jong, O., Justi, R., Treagust, D. F., & Driel, J. H. (Toim.). (2003). *Chemical Education: Towards Research-based Practice*. Springer Netherlands.
- Kämpö, V. (2020). *Kehittämistutkimus: Ioniset nesteet koellisen työn kontekstina* [Maisterintutkielma, Helsingin yliopisto]. <http://hdl.handle.net/10138/316592>
- Pernaa, J. (2015). Edumol: Avoin ja ilmainen molekyyli mallinnussovellus kemian opetuksen tueksi. *LUMAT: International Journal on Math, Science and Technology Education*, 3(7), 960–975. <https://doi.org/10.31129/lumat.v3i7.977>
- Pernaa, J. (2022). Possibilities and Challenges of Using Educational Cheminformatics for STEM Education: A SWOT Analysis of a Molecular Visualization Engineering Project. *Journal of Chemical Education*, 99(3), 1190–1200. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.1c00683>
- Pernaa, J., & Aksela, M. (2011). Kehittämistutkimus: Kemian kouluopetukseen soveltuvan molekyyli mallinnusympäristön kehittäminen. Teoksessa M. Aksela, J. Pernaa, & M. Happonen (Toim.), *Kansainvälinen kemian vuosi: Kemia osaksi hyvää elämää* (ss. 110–121). Kemian opetuksen keskus, Kemian laitos, Helsingin yliopisto.
- Pernaa, J., & Aksela, M. (2021). Uusi kemian tiedekasvatuksen tutkimushanke – keminformatiikka kemian opetuksessa. *Kemia uutiset KemiNyheter ChemistryNews*, 13(1), 61–63.
- Rodríguez-Becerra, J., Cáceres-Jensen, L., Díaz, T., Druker, S., Bahamonde Padilla, V., Pernaa, J., & Aksela, M. (2020). Developing technological pedagogical science knowledge through educational computational chemistry: A case study of pre-service chemistry teachers' perceptions. *Chemistry Education Research and Practice*, 21(2), 638–654. <https://doi.org/10.1039/C9RP00273A>