

Presentation av datorstödd molekylmodellering för gymnasiet

Patricia Nevanko

(patricia.nevanko@helsinki.fi)

&

Susanne Bergström-Nyberg

(susanne.bergstrom-nyberg@mattliden.fi)

10.4.2008

INNEHÅLLSFÖRTECKNING

INLEDNING

1. MÅLSÄTTNING

2. MOLEKYLMODELLERING OCH VISUALISERING

Datorer och kemi

Introduktion av molekylmodelleringsprogrammet Spartan

Övning

3. SAMMANFATTNING

Sammanfattning av utvärderingsblanketten

Sammanfattning av svaren

SLUTLEDNING

REFERNSER

BILAGA

Utvärderingsblankett

INLEDNING

Enligt läroplanen för gymnasiet (2004) är syftet med undervisningen i kemi att ge en mångsidig allmänbildning. Detta innebär att förutom att kunna gestalta kemin som en central naturvetenskap skall eleven kunna beskriva fenomen med hjälp av modeller, strukturer och med kemins symbolspråk, samt konstruera modeller av kemiska fenomen och bearbeta dem matematiskt.

Som mål har man i den senaste läroplanen för gymnasiet nedtecknat att eleverna skall kunna söka fram information och uppställa modeller som de kan presentera och diskutera. Eleven bör kritiskt kunna bedöma informationens tillförlitlighet och betydelse. Studenten skall bli insatt i informations- och kommunikationsteknikens möjligheter att använda dessa som verktyg vid informationssökning och vid uppställandet av modeller.

Användning av datorer i kemiundervisningen är inget nytt fenomen. I kemiundervisningen har datorer använts sedan 1950-talet (Aksela, 2005). I dagens läge är datorerna oersättliga hjälpmedel i undervisning och forskning av naturvetenskaper. Datateknik används till bland annat simuleringar, modelleringsprogram, mätningautomatik, ordbehandlings- och multimedieproduktionsprogram, samt informationssökning, kommunikation via elektronisk post och publicering via Internet (Webb, 2005). Datorstödd kemi förknippas med utmaningar. Undervisningens egentliga syfte förbises lätt vid användning av tekniska hjälpmedel i undervisningen (Barton, 2004). Därför får datorstödda inlärningsmetoder inte vara det enda sättet på vilka naturvetenskaperna undervisas utan i stället ett komplement till den traditionella undervisningen (Wellington).

En hel del kemilärare använder kemiska modeller och modelleringar i undervisningen, men de "glömmer" att nämna att detta bara är en modell. Dessutom borde modellen förklaras noggrant och det skulle vara viktigt att betona modellens bristfälligheter. Många lärare har bristande kunskap i ämnet, eftersom de själva inte har utbildats i molekylmodellering. Det behövs forskning och utveckling inom ämnet molekylmodellering i skolundervisningen. Textböcker behöver uppdateras och utbildningen för kemilärare bör utvecklas så att de blivande lärarna förstår effekten och betydelsen av datorstödd molekylmodellering i undervisningen. Kemiska modeller och molekylmodellering hjälper eleverna att kritiskt ta

ställning till kemirelaterade diskussioner, samt förstå kemins natur och olika teman inom kemin (R.Justi & J.Gilbert).

Helsingfors Universitet står för ett brett och mångsidigt samarbete mellan universitet och skola. De samarbetar inte bara med gymnasier utan även med grundskolor. Helsingfors Universitet står också för fortbildning av lärare, där de betonar utveckling och utvärdering av arbetsmetoder, och spridning av dessa arbetsmetoder via informationsnätet. Allt material som framställts publiceras på Internets www-sidor och är tillgängliga för allmänheten. För tillfället är Helsingfors Universitet det enda universitet i Finland som utbildar lärare inom beräkningskemi. De utbildar blivande lärare, ordnar fortbildning för behöriga lärare, samt ordnar molekylmodellerings sessioner för skolklasser (Aksela, M. & Montonen, M. 2007).

1. MÅLSÄTTNING

Målsättningen med denna demonstration var att presentera användningen av datorer i kemi. Vi ville visa vilka möjligheter vi har att förklara och visualisera olika kemiska modeller och fenomen och ge alternativa modeller för att studera kemi. En annan målsättning var att hjälpa eleverna att bättre förstå mikronivån i kemin, samt att förknippa mikro-, makro- och symboliska nivåer. Därtill ville vi skapa inspiration, innovation och kreativitet hos eleverna. Den viktigaste målsättningen var att vi själva skulle få en inblick i undervisningen av molekylmodellering.

2. MOLEKYLMODELLERING OCH VISUALISERING

2.1 Datorer och kemi

Kemiska fenomen kan betraktas på tre till varandra förknippade nivåer: mikro-, makro- och symboliska nivåer (Gabel, 1999). Eleverna kan ofta förklara gjorda observationer på makronivå med hjälp av symboler, trots att de inte nödvändigtvis förstår dessa observationer på mikronivå (Aksela, 2005).

Molekylmodellering, eller beräkningskemi, är i dagens läge ett av de viktigaste verktygen en kemist har. Molekylmodelleringen förklarar, visualiserar och förutspår – det är frågan om en hypotes, en modell. Olika modeller har olika begränsningar. Beroende på vilken information man är intresserad av appliceras en lämplig modell.

Med beräkningskemi kan man studera kemiska strukturer (bindningslängder och –vinklar och rymdstruktur) kemiska egenskaper (laddningsfördelning, elektrondensitet och spektroskopi) och kemisk reaktivitet (reaktionsmekanismer och –hastigheter).


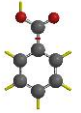

Molekylmodelleringen utförs stegvis. Modellen för molekylmodelleringen väljs enligt det kemiska fenomenet man vill beskriva. Därefter utförs beräkningsarbetet som tidsmässigt kan ta allt ifrån några sekunder till dagar. Då beräkningsarbetet är avslutat analyseras det erhållna resultatet.

2.2 Introduktion av molekylmodelleringsprogrammet Spartan (studentversion 4)

Före själva övningen tränas basfunktionerna i Spartan, som är ett molekylmodelleringsprogram ämnat för forskning av beräkningar för organiska molekyler. Under själva övningen uppbyggs aspirinmolekylen steg för steg. Då molekylen är uppbyggd får eleverna betrakta den ur olika vinklar och i olika storlekar, samt bekanta sig med de olika sätten att visualisera molekylen. För att studera elektronfördelningen i molekylen minimeras energin och de semi-empiriska beräkningarna utförs. Slutligen betraktar vi molekylen fingerprint i infraröd-området.

2.3 Övning

I. Vi bygger aspirinmolekylen

1. Bygg bensenringen 
2. Tillsätt karbonylgruppen 
3. Tillsätt en alkoholgrupp 

4. Tillsätt en karbonylgrupp (även =O)



5. Tillsätt en sp^3 -hybridiserad kolatom



6. Förlyttar oss bort från editorial och påbörjar modelleringen

II. Flyttandet av molekylerna i Spartan:

- Vänd på molekylerna – musens vänstra tangent nertryckt
- Flytta på molekylerna i arbetsområdet – musens högra tangent nertryckt
- Förstora, förminska molekylerna – shift + musens högra tangent nertryckt
- Vänd på molekylerna i arbetsområdet – shift + musens vänstra tangent nertryckt

III. Putsa steriska hinder

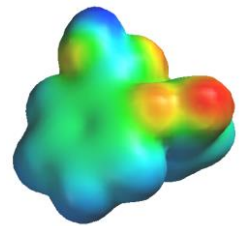
IV. Studerar olika presentationssätt från menyn ”model”

V. Optimering

- Söker ett energetiskt minimum för molekylerna - minimerar elektronernas energi
- Välj ”Setup” → ”Calculations”
Calculate: **Equilibrium Geometry with Semi Empirical**
Compute: **IR**
Total Charge: **Singlet**
Välj slutligen: ”**Submit**”
- ”Display” → ”Properties” visar energetiska egenskaper för den minimerade strukturen
- Mät bindningslängder och vinklar (blåa ?-knapparna och välj de atomer du vill betrakta; det frågade resultatet syns till höger i nedre hörnet)

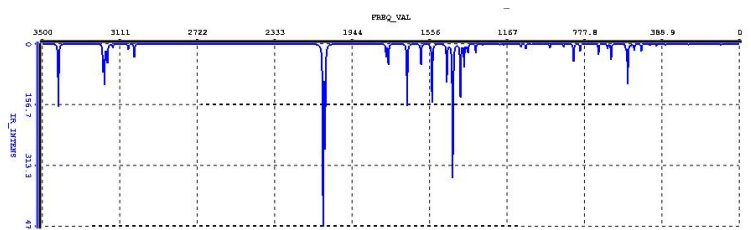
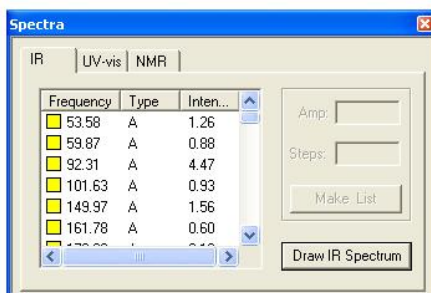
VI: Elektrontäthet

- Vi studerar elektronernas fördelning i molekylen
- Välj "Setup" → "Surfaces"
Surface: **Density**
Property: **Potential**
Välj slutligen "OK"
- Välj "Setup" → "Submit", med vilken den valda ytan beräknas (Den gula lådan i "Surfaces" fönstret berättar om den beräknade ytan)
- Klicka på den gula ytan, varvid ytan syns
- Klicka på ytan med musens vänstra tangent, varvid du kan ändra på ytans presentationssätt nere i det högra hörnet



VII. Granskning av spektret

- Granskar molekylens fingerprint inom infraröd området
- Välj "Display" → "Spectra"
Fönstret som öppnas presenterar de räknade vibrationsfrekvenserna och – intensiteterna
- Genom att klicka på den gula lådan animeras den ifrågavarande vibrationen
- Klicka på "Draw IR Spectrum" i fönstret, varvid du samtidigt får fram det experimentella spektret



3. SAMMANFATTNING

3.1 Sammanfattning av utvärderingsblanketten

I vår demonstration av molekylmodelleringsprogrammet Spartan deltog elever från Grankulla gymnasium. Efter lektionen gjorde eleverna en utvärdering. Utvärderingsblanketten innehöll både öppna och slutna frågor. Utvärderingsblanketterna utdelades personligt till utvärderarna av studiematerialet. Med utvärderingen ville vi kartlägga elevernas allmänna datorkunskap, samt hur mycket de använder datorer i samband med kemistudierna, om de över huvudtaget använder datorer i detta sammanhang. Det andra syftet med utvärderingen var att få återkoppling till vår presentation. Informationen från utvärderingsblanketterna kunde inte analyseras kvantitativt eftersom antalet deltagande elever enbart var tre stycken. Den kvalitativa analysen är sammanställd i textform. Analysens tillförlitlighet minskar eftersom antalet deltagande elever enbart var tre stycken. Tillförlitligheten minskar även för att eleverna har samma bakgrund.

3.2 Sammanfattning av svaren

Ingen av deltagarna hade erfarenhet av molekylmodelleringsprogram, däremot var användningen av dator väl bekant för alla.

Eleverna tyckte att det var enkelt att konstruera en molekyl med Spartan, eftersom handledningen var tillräcklig och det var enkelt att följa instruktionerna. Molekylmodelleringsprogrammet Spartan berömdes för att vara logiskt uppbyggt.

Visualiseringen och möjligheten att se molekylen tredimensionellt uppfattades som intressant av eleverna. Eleverna tyckte också att det var intressant att jämföra IR-spektrumet på sin själv syntetiserade aspirin med Spartans IR-spektrum för aspirinmolekylen.

Eleverna upplevde att de lärde sig nya saker om bindningsvinklar och –längder, samt om funktionella grupperns inverkan på molekylens uppbyggnad.

En elev visste inte om hon skulle använda programmet i framtiden om hon hade möjlighet. De andra tyckte att det skulle vara ett bra komplement i skolundervisningen, speciellt i samband med att molekyler behöver visualiseras.

En utav eleverna tyckte att hon inte fick någon helhetsbild över vad molekylmodelleringsprogrammet Spartan egentligen erbjuder. Andra kommentarer var att konstrueringen av en egen molekyl och IR-spektras energier uppfattades som ointressanta.

SLUTLEDNING

Över lag var eleverna väldigt positiva. De saker som vi bör förbättra är att till exempel att anknyta molekylerna på ett lämpligt sätt till vardagen och på det sättet ge en klarare bakgrundsbild för användningen av programmet. Ett lämpligt sätt att anknyta aspirinmolekylen till vardagen är att berätta om dess egenskaper och historia.

I samband med att studerandena fick "öva fritt" användningen av Spartan-programmet fanns inte den inspiration och kreativitet som vi väntade oss. I stället för att eleverna själv fick välja hurdan molekyl de ville bygga upp och upprepa liknande mönster som vi gjorde tillsammans med aspirinmolekylen, borde de ges i uppgift att bygga en specifik molekyl och arbeta med den.

Förklaringen av IR-spektrat måste vara tydligare, men ändå lättförståelig. Man bör komma ihåg att i detta program betraktas en ensam molekyl, medan man i verkligheten har många molekyler som samverkar.

Som en första demonstration får vi vara nöjda med vår presentation, men faktum är att övning ger färdighet.

REFERENSER

- Aksela, M. 2005. Supporting Meaningful Chemistry Learning and Higher-order Thinking Trough Computer-Assisted Inquiry: A Design Reasearch Approach. Helsinki: Helsingin Yliopiston kemian laitos.
- Aksela, M. & Montonen, M. 2007. Uusia lähestymistapoja kemian opetukseen perusopetuksesta korkeakouluihin. Opetushallitus. Yhteistyötä lukion ja yliopiston välillä, 41-44.
- Barton, R. 2004. Closing remarks. I publikationen Barton, R. (red.) Teaching Secondary Science with ICT. Maidenhead: Open University Press
- Gabel, D. 1999. Improving Teaching and Learning trough Chemistry Education Research: A look to the Future. Journal of Chemical Education 76 (4), 548-553.
- Justi, R. & Gilbert, J.K. 2002. Models and Modelling in Chemical Education. I publikationen Gilbert, J.K. m.a. ... et al (red.) Chemical Education: Towards Reasearch-based Practice. Dordrecht: Kluwer, 47-68.
- Webb, M. E. 2005. Affordance of ICT in science learning: implications for an integrated pedagogy. International Journal of Science Education 27 (6), 705-735.
- Wellington, J. 2004. Multimedia in science teaching. I publikationen Barton, R. (red.) Teaching Secondary Science with ICT. Maidenhead: open university Press.

DATORSTÖDD MOLEKYLMODELLERING FÖR GYMNASIET

UTVÄRDERINGSBLANKETT

DATUM:

- | | Ja | Nej | Vet ej |
|---|--------------------------|--------------------------|--------------------------|
| 1. Har du tidigare erfarenhet av molekylmodelleringsprogram?
I så fall vad heter det? | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| <hr/> | | | |
| 2. Är du van att använda dator? | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 3. Kändes det svårt att hitta tangenterna? | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| 4. Var det enkelt/svårt att konstruera molekylen i Spartan?
Varför? | | | |
| <hr/> | | | |
| <hr/> | | | |
| 5. Vad tyckte du var mest intressant med molekylmodelleringen?
Varför? | | | |
| <hr/> | | | |
| <hr/> | | | |
| 6. Vad tyckte du var minst intressant med molekylmodelleringen?
Varför? | | | |
| <hr/> | | | |
| <hr/> | | | |
| 7. Lärde du dig någonting nytt om molekyler?
Vad? | | | |
| <hr/> | | | |
| <hr/> | | | |
| 8. Skulle du använda molekylmodelleringsprogram i framtiden om du
har möjlighet?
I så fall var / hur? | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> | <input type="checkbox"/> |
| <hr/> | | | |
| <hr/> | | | |

Tack för dina åsikter!