

Eszterházy Károly Egyetem, Eger

**A számítógépes molekulamodellezés
és a kémiai kötés elméletének
oktatása**

Habilitációs dolgozat

Készítette:

PaedDr. Juhász György, PhD.

ISBN 978-963-7692-78-9

Eger, 2016

TARTALOMJEGYZÉK

BEVEZETÉS	7
1. Infokommunikációs technológiák az oktatásban	10
1.1. Az IKT a kémiaoktatásban a szlovákiai magyar iskolákban – kiindulási állapot	16
1.2. A számítógépes oktatóprogramok megjelenése a kémiatanítás módszertanában ...	21
1.3. Az IKT és a kémiaoktatás kapcsolata – szlovákiai tapasztalatok	25
1.3.1. Gyomorégés – számítógéppel támogatott kísérlet	26
1.3.2. A redoxi reakciók és a számítógép	29
1.3.3. Periciklusos reakciók és a számítógép	31
2. A kémia tanításának és tanulásának módszerei és a molekulamodellezés.....	34
2.1. Molekulamodellezés a kémiaoktatásban.....	36
2.2. A gondolkodási képességek fejlesztése és a számítógépes molekulamodellezés	45
3. A kémiai kötés elmélete.....	51
3.1. Hullámmechanikai atommodell	51
3.2. Kémia kötés – alapfogalmak	56
3.3. A kémia kötés modern elméletei.....	58
3.4. Hückel-féle MO elmélet	63
3.5. A számításoknál használt báziskészletek	67
4. A számítógépes molekulamodellezés gyakorlati alkalmazása a kémiaoktatásban ...	72
4.1. A számítógépes molekulamodellezés a kémiaoktatásban a szlovákiai magyar középiskolákban	72
4.2. Szemelvények a kémiai kötés elmélete és a kémiai fizika modern oktatásából....	79
4.2.1. POAR modell – Köríven mozgó részecske modellje	85
4.3. A számítógépes molekulamodellezés gyakorlati oktatási alkalmazása	87
4.3.1. Feladatok a számítógépes molekulamodellezés gyakorlati oktatási alkalmazására.....	91
BEFEJEZÉS.....	110
Felhasznált irodalom.....	113

Bevezetés

A mai gyorsan változó világunkban a jól működő iskolarendszerek egyik legfontosabb eleme, hogy a diákok olyan tudást kapnak az általános és középiskolákban, amely elégséges alapot ad számukra a későbbi szakmai életútjuk során. A szlovákiai és ezen belül a szlovákiai magyar iskolák fejlődését meghatározó legfontosabb tényezők közé soroljuk a 2008-ban elkezdett és mára már aktualizált iskolareformot, a többszörösen módosított oktatási törvény idevonatkozó passzusait, amelyek az oktatásba olyan új elemeket is bevezettek, mint az Állami Oktatási Program, az iskolai oktatási programok, az ISCED, a pedagógus továbbképzés új modellje stb.. Az ilyen új elemek azonban nem jelentenek gyógymódot iskolarendszerünk minden problémájára, amit a bevezetés óta eltelt néhány év során is tapasztalhattunk. Ma már elmondható, hogy a kezdeti tankönyvhiány megoldottnak látszik (kérdéses azonban a tankönyvek minősége tekintettel a megírásukkal járó időzavarra). Újonnan a szlovákiai magyar oktatásügy egyik legnagyobb problémájává a demográfiai mutatókra és más folyamatokra is visszavezethető diákhány válik, amely már nemcsak egyes kisiskolák, hanem teljes felépítésű 9 osztályos iskolák létét is fenyegeti. Az egyik kiút ebből a „gödörből” a színvonalas oktatás, amely összehasonlítva a szlovák tannyelvű iskolákba járó diákok tudásával a magyar iskolát látogató diákok számára is versenyképes tudást biztosít. Ez azonban olyan szakmailag felkészült oktatókat igényel, akik ismerik saját tudományáguk új kompetenciáit, azokat alkalmazni tudják és ismerik azokat a módszereket és taneszközöket, amelyekkel ezt a tudást átadhatják diákjaiknak. Bátran kijelenthetjük azonban, hogy a diákok helyzete sem egyszerű. Ha feltesszük a kérdést, mi az, amit tudniuk kéne, és miben vannak hiányosságok, akkor teljességgel kiindulhatunk az ún. PISA tesztek eredményeiből.

Mint tudjuk, az OECD (Gazdasági Együttműködési és Fejlesztési Szervezet angolul Organisation for Economic Co-operation and Development) hároméves intervallumokban méri a diákok tudásszintjét a munkaerőpiac szempontjából az ún. PISA (Programme for International Student Assessment – Nemzetközi Tanulói Teljesítménymérés Program) program keretén belül. A vizsgálatba 65 országból mintegy 510 000 – köztük körülbelül 4600 magyarországi és közel 5700 szlovákiai

– 15 éves tanuló került be, akik szövegértési, matematikai és természettudományi feladatokat tartalmazó tesztfüzeteket, valamint szociális, gazdasági és kulturális helyzetükre, tanuláshoz és iskolához fűződő viszonyukra, továbbá tanulási szokásaikra vonatkozó kérdéseket tartalmazó háttérkérdőíveket töltenek ki. A PISA mérések során tehát nem az azonos évfolyamba járó diákok tudásszintjét méri, hanem az azonos életkorú diákokat, akik egy adott évben születtek. A mérés során a diákok egy négyszer félórás tesztet töltenek ki. A teszt a tudásmérésen kívül a műveltségi területtel kapcsolatos tanulói attitűdökre vonatkozó kérdéseket is tartalmaz. Magyarország 1996 óta tagja az OECD-nek, Szlovákia 2000-től, így elmondhatjuk, hogy mindkét ország a 2003-as tesztelésbe kapcsolódott be első alkalommal közösen, amikor a fő téma az alkalmazott matematikai műveltség felmérése volt. 2006-ban a természettudomány volt a kiemelt terület, majd 2009-ben újra a szövegértés. 2012-ben – 2003 után először – ismét a matematika volt a középpontban, így ebben a ciklusban nemcsak a matematikai eredmények részletes elemzésére, hanem e terület kilencéves trendjeinek részletesebb bemutatására is lehetőség nyílt. A PISA-vizsgálatot azzal a céllal hozta létre az OECD, hogy az oktatási rendszerek teljesítményét és egyéb jellemzőit mérje oly módon, hogy a modern, tudás alapú munkaerőpiac szempontjából fontos képességek – a szövegértés, az alkalmazott matematikai, valamint az alkalmazott természettudományi műveltség – területén vizsgálja a tanköteles kor végéhez közeledő, 15 éves tanulók tudását. A PISA felmérés tehát egy egységes rendszerben kezeli a három fő műveltségterületet, az olvasást-, szövegértést, a matematikát és a természettudományt. A PISA felméréseknek azonban nemcsak az a céljuk, hogy a diákok tudását mérje, hanem az is, hogy az egyes országok iskolarendszereinek eredményeit, azok változásait és trendjeit figyelje és ezek alapján új javaslatokat fogalmazzon meg az oktatáspolitikai terén. Mint már említettük 2009-ben a szövegértés, 2012-ben a matematika, 2015-ben pedig a természettudomány volt a kiemelt terület. E felsorolás kapcsán is látjuk, hogy melyek azok a tudományterületek, amelyek oktatására az állami oktatási rendszerben fontos szerepet kell szánni. Szlovákiában már a 2012-es kormányprogram is tartalmazott olyan részt, amely a természettudományi és a műszaki jellegű tantárgyak és ismeretek oktatását segítené elő – beleértve az ehhez nélkülözhetetlen matematikai apparátus alkalmazásához szükséges tudás megszerzését is. Ez, sajnos, nagyrészt csak az ígérek szintjén maradt! Ha azonban ebben nem lesz előrelépés, akkor a továbbiakban is lemaradunk a fejlett iskolarendszerrel rendelkező OECD és EU országok mögött.

Ha részletesebben megnézzük a szerző számára hazainak számító szlovákiai iskolarendszer PISA eredményeinek részletes eredményeit a 2003-2012-es időszakban, amelyeket az ún. Nemzeti PISA Jelentés tartalmaz, akkor bizonyos trendeket veszünk észre. 2006-ban a természettudományi ismeretek voltak a vizsgálat fő tárgyai. A természettudományt a PISA úgy értelmezi, mint az egyénnek azt a képességét, hogy a természettudományi ismeretek és azok alkalmazása segítségével kérdéseket tesz fel, új ismereteket sajátít el, képes magyarázni természettudományi jelenségeket és megfogalmazni természettudományi problémákkal kapcsolatos, bizonyítékokkal alátámasztott következtetéseket. Az egyén megérti az emberi tudásként és emberi felfedezőmunkaként is értelmezhető természettudományok jellemző tulajdonságait, valamint azt, hogy a természettudományok és a technika hogyan alakítja fizikai, szellemi és kulturális környezetünket. A 2006-os vizsgálat során 500 pontban rögzítették az akkori OECD országok tanulóinak természettudományos teszten elért átlageredményeit. A 2006-os természettudományi tesztelés számszerű eredménye az volt, hogy a szlovákiai diákok statisztikailag jelentősen alacsonyabb teljesítményt nyújtottak ezen a területen, mint az OECD országok átlaga. A szlovák és magyar nyelven kiadott tesztek eredményeiben nem voltak megállapíthatóak statisztikailag szignifikáns eltérések, tehát ebből arra következtethetünk, hogy a szlovákiai magyar tannyelvű iskolákban tanuló diákok természettudományi ismeretei is az OECD átlag alatt voltak. Ebben az évben a kelet-közép-európai térségben csak Szlovénia és Csehország haladta meg az OECD országok átlagát. A magyarországi diákok megismételték 2000-es és 2003-as eredményüket, amely az OECD-országok átlagánál számszerűleg valamivel magasabb, ám statisztikailag az átlaggal egyenértékű volt. A 2009-es eredmények is azt mutatják, hogy a szlovákiai diákok természettudományi PISA eredményei az OECD átlag alatt voltak, tehát stagnálást tapasztalunk e tudományterület oktatásában. Hogy lássuk a trendeket, részletesebben bemutatjuk a 2012-es természettudományi eredményeket. Az európai országok közül – néhány skandináv országtól eltekintve (Svédország, Izland, Norvégia) – az átlagosnál jobb és átlagos természettudományi eredményt a gazdaságilag fejlettebb országok értek el. Az OECD-országok átlagánál jobb eredményt Finnország, Észtország, Lengyelország, Liechtenstein, Németország, Hollandia, Írország, Svájc, Szlovénia, az Egyesült Királyság, Csehország, valamint Belgium ért el.

Az OECD-országok 501 pontos átlagával egyenértékű eredményt öt ország ért el: Ausztria, Lettország, Franciaország, Dánia, valamint az Egyesült Államok. Két csoportra célszerű osztani azokat az országokat, amelyek természettudományos eredményei elmaradtak az OECD-országok átlagától.

1. Az 501 pontos átlagtól legfeljebb 50 képességponttal elmaradó országok. Ezek közé tartoznak:

- a fejlett dél-európai államok: Spanyolország, Olaszország, Portugália és Görögország;
- a meglepetésre gyengébb teljesítményt nyújtó skandináv országok: Norvégia, Svédország, Izland;
- a kelet-közép-európai térség néhány állama: Litvánia, Magyarország, Horvátország, Oroszország, Szlovákia.

Míg Magyarország 7 képességponttal maradt el az OECD átlagtól, addig Szlovákia 30 értékponttal. Látjuk tehát, hogy a kialakult irányvonal nem kedvező sem Magyarországnak, sem pedig Szlovákiának. Éppen ezért Szlovákia kormánya 2013. április 10-én, a korábban lefolytatott nyilvános véleményezés alapján elfogadott egy olyan ajánlásomagot, amelyet a 15 éves diákok PISA eredményeit is figyelembe véve fogalmazott meg. Látván, hogy a szlovákiai diákok már hosszabb ideje az OECD átlagnál rosszabbul teljesítenek, a kormány javaslatot tett a matematika kulcsfontosságú tantárgyként való oktatására az alapiskolák felső tagozatán (5-9. osztály), egyben vállalta a magasabb matematikai és természettudományi óraszámú működő középiskolák anyagi támogatását is. Az említett célokból adódik, hogy ezeket a tárgyakat szakmailag felkészült tanítók és tanárok oktassák, így a kormány támogatni fogja a természettudományokat (beleértve a matematikát) és műszaki tudományokat hallgató egyetemistákat is. (Balázsi, 2013), (Ferencová, 2015)

1. Infokommunikációs technológiák az oktatásban

Az utolsó hatvan év a számítástechnika és az informatika folyamatos fejlődésével telt el. Talán nincs még egy olyan tudományterület, amelyik ilyen gyorsan fejlődne. Négy-ötévente az ismeretek nagy része elavul, újabb és újabb ismeretek, szoftverek és ezekkel kapcsolatos eljárások kerülnek elő.

A XX. század végére a számítógépek és az erre épülő technológiák egyre inkább a hétköznapi élet részeként voltak jelen mindennapjainkban. Az Internet széles körben elérhetővé vált, ma már nemcsak a diákok, és az ifjabb korosztály, hanem a nagymamák is használják eme kor tudományos és technológiai vívmányait. Megszokottá válik, hogy a híreket, új információkat és ismereteket, érdekességeket az Internet segítségével könnyebben és gyorsabban lehet megszerezni, mint az ez idáig alkalmazott hagyományos úton. A társadalmi kommunikáció nagy része napjainkban már az Internet segítségével az egyes szociális hálózatokon (Facebook, Twitter) zajlik.

Az informatika és szélesebb értelemben az információs és kommunikációs technológiai, vagy röviden infokommunikációs technológiai (továbbiakban IKT, angolul Information and Communication Technology, ICT) eszközök alapvetően befolyásolják korunkat, így az oktatás technológiájában is jelentős változásokat hoznak. Az informatika jelentős hatással van az egyes tantárgyak szerkezetére, de a tantárgyak között kialakult jelenlegi egyensúlyi helyzetre is. Érezhetően módosítja a tanulók vonzódását a gyorsan alkalmazkodó tantárgyak javára. Ma már az alapiskola tanulói számára is nélkülözhetetlen segédeszköz a különböző prezentációk, projekt feladatok elkészítésénél. Az IKT környezetnek közvetlen befolyása van az oktatásra, nevelésre is. Az Internet használatának elterjedésével elkerülhetetlen, hogy ez a kommunikáció áttörjön a tanítás-tanulás folyamatába is. A fiatalok szervezett felkészítése a digitális korszakra elsősorban az iskolákban kell hogy megtörténjen. A tanárok tehetnek a legtöbbet azért, hogy a gyerekek értelmesen, életesélyeik növelésére használják ki majd az új IKT eszközöket. (Kárpáti, 2003)

Az elmúlt két évtized fejlődése gyökeres változásokat hozott az emberek mindennapi szokásaiban és életében. Az érintkezési- és kommunikációs

formákban megjelent a mobiltelefon, az SMS, az e-mail, a videó konferencia, a Facebook stb.. Az Internet lehetővé tette új ismeretanyagok, adatbázisok elérhetőségét. Megjelentek az új tanulási formák lehetőségei. A mobil kommunikáció, számítógépes irányítás elmélete, az adatbázisok elmélete és a nanotechnológiák napjaink legfontosabb kutatási területeivé léptek elő, mint ezt a RIS3 SK kutatási stratégia is bizonyítja.

Az informatika betört a kutatás területére is. Még a hagyományos mérőeszközök és a régebbi műszerek is digitális kijelzéssel rendelkeznek, ilyen pl. a tömeg mérésére szolgáló gyors- vagy analitikai mérleg. A hosszúság mérésére is lézeres távolságmérő eszközöket használhatunk. A hőmérők (de a lázmérők) újabb változatai is már LCD kijelzővel rendelkeznek.

A természettudományos kutatások bizonyos részénél az egyes szimulációs és optimalizációs módszerek alkalmazásánál nélkülözhetetlen a modern, ún. szuperszámítógépek alkalmazása. Ezek kimenetei háromdimenziós grafikai ábrázolást tesznek lehetővé, amelyekkel a továbbiakban foglalkozunk. (Bérczes, 2011)

A kommunikáció elektronikus formái így a természettudományok tanításában nem jelentenek már újdonságot. Az elektronikusan elérhető oktatási segédanyagok, amelyek egyrészt a számítógép adatbázis-kezelő és feladatgeneráló funkciójának kiteljesedéseként jöhettek létre a huszadik század második felétől kezdve, a felhasználásuk alapján már nem különülnek el élesen a hagyományos könyvektől és más tanulmányi segédanyagoktól, az eltérést azonban elsősorban az elektronikus adattárolásból következő változtathatóság és interaktivitás jelenti.

A kémia – mint tantárgy – jövője is nagyrészt attól függ, hogyan tudjuk ezeket az eszközöket (IKT) bevonni az oktatás menetébe. Mivel a kémia törzsanyagának megtanítása és megtanulása eléggé időigényes feladat, az IKT eszközökre nem csupán mint egy újabb metodikai eszközre kell hogy tekintsünk, hanem egy jól átgondolt és felépített rendszerben kell működtetnünk. Olyan rendszerben, melyben a tradicionális módszerek mellett kényelmesen elfér a számítógépes kémiaoktatás. Ennek feltétele olyan témák, jelenségek kiválasztása, melyek tanítása során az IKT-módszerek hatékonyak. (Kárpáti, 2003)

Természetesen az IKT-módszerek alkalmazása akár a kémia-, akár a természettudományok oktatásának terén nem csupán pedagógiai, módszertani kérdés, hanem technikai és anyagi probléma is. S itt felvetődik az a kérdés, hogy milyen felszereltség szükséges ahhoz, hogy az IKT módszerei hatékonyan alkalmazhatóak legyenek az oktatás folyamatában. (Kárpáti, 2003)

Az IKT eszközök bevezetése lehetővé teszi a tanítási folyamat állandó tökéletesítését (az ismeretszerzési és művelődési feladatkörének szélesítését), továbbá az ismeretek ismételtesének, kiegészítésének és bővítésének a folyamatát. Eme műszaki fejlődés célja az oktatók és diákok oktatási tevékenységének az optimalizációja. (Feszterová, 2010)

Az IKT használata során szükséges olyan műszaki feltételek teljesítése, amelyek lehetővé teszik a létező multimédiás szoftverek használatát, s ezek összekapcsolását a hagyományos szemléltető eszközökkel. A műszaki feltételek mellett szükségesek továbbá a számítógépes alapfelhasználói programokon kívül olyan szoftverek is, amelyek módszertanilag jól kimunkáltak és beilleszthetők az oktatás folyamatába. Ezen kívül ajánlott a számítógépek kapcsolódása az internetre is. (Kárpáti, 2003), (Juhász, Matulík, 2001)

A 21. század digitális társadalmával, annak kompetenciáival és a kialakuló ún. digitális állampolgárság egyes neveléstudományi vetületeivel Ribble (*Ribble, 2011*) foglalkozott, aki szerint a kialakuló 21. századi digitális állampolgárságnál kulcsfontosságú szerepet játszik majd:

- a tanulók tanulási és tudományos teljesítménye
- a digitális hozzáférés (teljes elektronikus részvétel a társadalmi, közösségi folyamatokban és tevékenységekben: kompetencia és technikai háttér)
- a digitális műveltség (információmenedzsment, adekvát eszközhasználat)
- a digitális kommunikáció (az információk elektronikus úton történő cseréje, közvetítése)

Ezt a Ribble által kialakított modellt Magyarországon az ELTE PPK IZOK kutatócsoportja átértelmezte (*Ollé, 2012*) abba az irányba, hogy az újraalkotott modellben az alábbi három kompetenciaterület jelenik meg, amely részkompetenciákra tagozódik tovább:

1. Kommunikáció és eszközhasználat
2. Tevékenység és viselkedés
3. Értékteremtés és produktivitás.

Ebből a modellből számunkra a legnagyobb jelentőségű kompetencia a kommunikáció és az eszközhasználat. A digitális eszközhasználat kompetenciája Habók és Czirfusz szerint (*Habók–Czirfusz, 2013*) magába foglalja, hogy az egyén az internetes tevékenységéhez leginkább illeszkedő eszközt választja, és hatékonyan használja annak érdekében, hogy önmaga vagy mások számára

értékes tartalmat hozzon létre. Az egyénnek képesnek kell lennie tudatosan, meghatározott cél érdekében és produktívan használni a digitális eszközöket.

A természettudományok és a matematika oktatói számára ma már nélkülözhetetlenek a digitális eszközök és ezen belül az IKT eszközök. A fellebb említett okok miatt a természettudományokat oktató tanítók, tanárok és egyetemi oktatók számára is szükséges a saját szakterület mellett az informatika alapjai és az egyes alkalmazott szoftverek felhasználói ismereteinek az elsajátítása. Ez azonban elég igényes feladat (idő és szakmai felkészültségre egyaránt), mivel nagyszámú szoftver és hardver áll a rendelkezésünkre, amelyeket a műszaki és a természettudományi oktatásban is felhasználhatunk.

Mint már említettük, a tanítás gyakorlatában ma már mindennapos a prezentációk felhasználása. Ennek keretén belül olyan „slide show” programokat használunk, amelyek képsorok vetítésével ismertetik a közlésre váró információkat (szöveg, grafika, animáció). A leggyakrabban alkalmazott szoftvercsomag az ilyen prezentációk készítésére az MS PowerPoint, amely már csaknem minden Windows operációs rendszerrel ellátott számítógép alapszoftvercsomagjának a tartozéka.

Komenczi (Komenczi, 2013) szerint „Az elektronikus tanulási környezetek értő megközelítéséhez, a bennük rejlő innovációs potenciál felismeréséhez széles körű szakirodalmi tájékozottság szükséges.” Ezért a 21. század elején tevékenykedő tanárnak, akit akár digitális pedagógusnak is nevezhetünk, olyan műveltséggel és ez által kialakított modern világszemlélettel kell rendelkeznie, ami képessé teszi arra, hogy megértse a mai korunk információs társadalmát (amelyet későmodern kornak is nevez), ezen belül felismerje a folyamatosan bővülő infokommunikációs eszköztár által kirajzolódó lehetőség-horizontot, és ennek alapján tanári munkájában adekvát és konstruktív megoldásokat valósítson meg. (Komenczi, 2013)

Komenczi is úgy látja, hogy az új elektronikus/digitális tanulási környezetek kialakítása, ezek működtetése és folyamatos innovációja új kihívásokat hoz az ezt használó tanárok személyének. A digitális tanulási környezetek új tanári tudáselemeket, attitűdöket és kompetenciákat igényelnek. Átértékelődik a tanár szerepe, így a hagyományos információközvetítő és tanulásirányító szerep mérséklődik, viszont a tanácsadó-segítő, továbbá a tanulási környezet hatásrendszerét megtervező tevékenységformák válnak meghatározóvá.

Ezek voltak az alapfeltételek és kiindulási ismeretek a 20. század végén és a 21. század elején, azonban mint Bérczes György (Bérczes, 2011) írja, a

gyors amortizáció miatt a néhány évente változó, gyakran a módszertani elvárásoknak sem megfelelő eszközökkel kísérletezni lehet, de hosszú távra tervezni nem. Ezt csak céleszközökkel szabad, amelyek közé azokat a tanulói kísérletezésre is alkalmas céleszközöket sorolja, amelyek sajnos ma hiánycikkek a magyarországi, de a szlovákiai iskolákban is. Sajnálatos módon ezek beszerzését mind a mai napig kiszorítják a számítógépek és a velük kapcsolatos technológiák beszerzései, így ugyanúgy, mint a múltban, a jelen is azt mutatja, hogy nem jut elegendő forrás a hagyományos, hosszú időn át is használható, gyorsan munkára fogható eszközökre. Ezek a tények ahhoz a kérdéshez vezethetnek, amelyet Bérczes is megfogalmazott az IKT használatával kapcsolatban, hogy milyen mértékben, mire, hogyan használjuk a számítógépet, az Internetet és azokat a várhatóan rövid élettartamú oktatási módszereket, amelyek speciális informatikai eszközökre épülnek. Erre a kérdésre is igyekszünk választ találni ebben a kötetben, természetesen nem az egész természettudományi oktatást és ezen belül a kémia oktatást felölelve, hanem csak az általános kémia bizonyos témaköreit és azok egyes részeinek az oktatását figyelembe véve. Ezen témakörök elengedhetetlen alapul szolgálnak a kémia mint egységes egész ismeretanyagának a megismeréséhez és megértéséhez.

Az ilyen, hosszú időn át is használható, gyorsan munkára fogható eszközök közé sorolhatjuk a szenzorokkal felszerelt, olyan laboratóriumi bemutató kísérleteket segítő eszközöket, amelyeket a számítógépre csatlakoztatva az eredmények kiértékelése is megoldottá válik. Csehországban és Szlovákiában már több mint egy évtizede igyekeznek bevezetni az iskolai oktatásba azokat a rendszereket, amelyek a diákok számára az IKT segítségével közelebb hozzák a kémia, fizika és a biológia kísérleteit. A számítógéppel támogatott kísérletek (Computer aided experiments) ma már kivitelezhetőek a legtöbb közép- és általános iskolában. Ehhez olyan eszközök beszerzését támogatta az állam, mint az ISES, Vernier, PASCO, IP Coach. Az ilyen rendszerek kiváltságai közé tartozik, hogy nagyszámú szenzort tartalmaznak, amelyek felhasználhatóak a kémiai, a fizikai és a biológiai kísérleteknél egyaránt. A kísérletek munkamenetének és elméleti alapjainak a leírása megtalálható számos web felületen, amely lehetővé teszi a széles körű oktatásba való bevezetésüket. (Kekule, 2008).

1.1 Az IKT a kémiaoktatásban a szlovákiai magyar iskolákban – kiindulási állapot

A szlovákiai magyar kémiatanárképzés nagy hányada a múlt század 70-es és 80-as éveiben az akkori nyitrai Pedagógiai Karon (nem volt betagozódva egyetlen felsőoktatási intézménybe sem) valósult meg, melyet azonban a 80-as évek végére a megszűnés fenyegetett a karon működő Kémia Tanszékkal egyetemben. Ezen intézmény végzősein kívül már csak a szlovák egyetemeken képzett magyar anyanyelvű kémiatanár szakos hallgatók voltak azok, akik kémiatanári képesítést szerezhettek, és a magyar tannyelvű alap- és középiskolákban kémiát oktathattak. A bársonyos forradalom (1989) után a nyitrai intézmény vezetése a tanszék munkájának folytatása mellett döntött, és a kedvező társadalmi hangulat a magyar részleg megerősödését is magával hozta. Ennek köszönhetően a mai szlovákiai magyar alap- és középiskolákban kémiát oktató tanítók és tanárok nagy része ebből az intézményből került ki. A tanszék magyar részlegének megújításában és továbbfejlesztésében elvülhetetlen szerepe volt prof. Cornides István tanár úrnak, az ELTE címzetes egyetemi tanárának, aki hosszú éveken át egészen addig, amíg betegsége ebben nem akadályozta meg, oktatta a jövőendő szlovákiai magyar kémia- és fizikatanárokat.

A szerző a 90-es évek elején, mint a tanszék kémiatanári képesítéssel rendelkező fiatal oktatója, affinitást mutatott az új technológiák bevezetésére a kémia oktatásába, ezek megismertetésére a kémiatanári pályára készülő fiatalokkal. Mivel azonban nem állt rendelkezésre olyan felmérés, amely elemezte volna az akkori állapotokat, így ezzel a lépéssel kellett kezdeni.

A felmérés során, amely 1993-ban valósítottunk meg, egy kérdőívvel fordultunk a szlovákiai magyar gimnáziumok felé, amelyben a számítógépek mint módszertani segédeszközök felhasználásának, vagy nem használásának az okait és lehetőségeit térképeztük fel. Azért választottuk a szlovákiai magyar gimnáziumokat mint a felmérés alanyait, mert akkor még kellő osztály és diáklétszámmal rendelkeztek, a technológiai újítások hamarabb eljutottak ezekbe az intézményekbe, mint az alapiskolákba, amelyeknek az akkori módszertani segédeszközökkel való ellátottsága nagyon differenciált volt.

Összehasonlítva a természettudományi és a módszertani kutatásokat elmondhatjuk, hogy a természettudományi kutatások túlnyomó többségében megfelelő műszerek segítségével gyűjtjük az információkat a vizsgált rendszerről.

Azonban a tantárgy-pedagógiai kutatásokban mérőeszközökön általában kérdőíveket értünk. A természettudományos vizsgálat jelenségei általában determinisztikusak, míg a tantárgy-pedagógiában – a társadalomtudományokhoz hasonlóan – többnyire valószínűségi folyamatokkal találkozhatunk. Ellentétben a természettudományi megfigyelésekkel, kísérletekkel, a tantárgy-pedagógiai megfigyelések, kísérletek lényegében megismételhetetlenek, hiszen alanyai – a tanulók vagy más, oktatásban részt vevő tényezők – állandóan változnak. Bár mérni tudunk bármit, ami létezik, könnyű belátni, hogy a tömeget, a hosszúságot vagy akár a koncentrációt is sokkal könnyebb megmérni, mint pl. a tanulók tudásszintjét, már csak azért is, mert a természettudományokban az a tulajdonság, amit mérni szeretnénk, sokkal jobban definiált, mint a tantárgy-pedagógiában, vagy általában a társadalomtudományban. (Balázs Katalin, 2015)

A papíralapú kérdőívünk az alábbi zárt- és nyíltvégű kérdéseket tartalmazta:

Az első kérdésben a számítógéppel való felszereltségre kérdeztünk rá. Kértük, hogy írják meg, hány akkori PMD-85-ös, PP-06-os vagy modernebb PC-XT/AT számítógéppel rendelkezik az iskola

A második kérdés egy feleletválasztós zártvégű kérdés volt. A számítógépek alkalmazására kérdeztünk rá a hagyományos kémiai tanítási órán, egy választ kellett megjelölni az alábbi lehetőségek közül:

- igen, gyakran alkalmazzuk (hetente)
- igen, néha alkalmazzuk (kb. havonta egyszer)
- nem alkalmazzuk.

A harmadik kérdés során a számítógép nem alkalmazásának okára voltunk kíváncsiak. Feleletválasztós módszerrel, vagy rövid szóbeli leírással lehetett válaszolni:

- nincs számítógép hozzáférhető helyen
- nincsen megfelelő módszertani számítógépes program (oktatási szoftver)
- nincs kellő tapasztalatom a számítógép kezeléséhez
- egyéb ok:

A negyedik kérdésnél arra kerestük a választ, hogy a kémiát oktató tanár a számítógépet mint módszertani segédeszközt

- fontosnak tartja-e, mivel ösztönzőleg hat a diákokra
- fontosnak tartja-e, mivel áttekinthetővé teszi a tananyagot
- nem tartja-e fontosnak, mert eddig is megvoltak nélküle
- egyéb:

Az ötödik kérdésnél rákérdeztünk az iskola kémiai oktatási szoftverrel való ellátottságára, amelyre a következő feleletekből lehetett választani:

- nagyon jó, minden típusú számítógépre
- jó, de csak a PMD-85-s típusú számítógépre
- jó, de csak a PC-XT/AT típusú számítógépre
- nem jó, nem rendelkezünk oktatási szoftverrel

A hatodik kérdésnél arra a kérdésre, hogy milyen nyelvű oktatási szoftverrel rendelkeznek, ezt a három lehetőséget adtuk meg:

- csak szlovák
- szlovák és magyar
- csak magyar.

A hetedik kérdésnél információt gyűjtöttünk arról, hogy a tanárok tudnak-e olyan cégekről, szervezetekről, ahol be lehet szerezni módszertani programokat. A kérdésre igennel vagy nemmel lehetett válaszolni.

A nyolcadik kérdésnél arra kerestük a választ, hogy ha nem ismernek ilyen cégeket, van-e olyan szándékuk, hogy szeretnének hozzájutni oktatási szoftverhez. Igennel vagy nemmel lehetett válaszolni.

Kilencedik kérdés: Mivel Szlovákiában akkoriban csak szlovák nyelvű oktatási szoftver volt forgalomban, rákérdeztünk, hogy be tudnak-e szerezni magyar nyelvű oktatási szoftvert is. Szintén igennel vagy nemmel lehetett válaszolni.

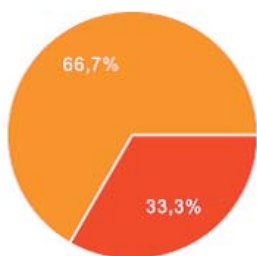
A tizedik kérdés az előbbire csatlakozott, mégpedig olyan formában, hogy ha a válaszadó nemmel válaszolt arra a „*be tudnak-e szerezni magyar nyelvű oktatási szoftvert*” kérdésre, akkor szeretné-e, ha Szlovákiában is készülnének ilyen programok. A választási lehetőségek a következők voltak:

- igen, és a továbbiakban, ha jó minőségűek lennének, használnám ezeket
- igen, de nem használnám
- nem, úgysem használnám.

Válaszokat 15 szlovákiai magyar gimnáziumból kaptunk (20-nak küldtük ki) Dunaszerdahelytől Nagykaposig. Így a kérdőívre kapott feleleteket és a kiértékelt eredményeket reprezentatívnak tekintettük az akkori szlovákiai magyar középiskolai hálózat tekintetében.

Az első kérdésre, hogy hány számítógéppel rendelkezik az iskola, 14-es átlagot kaptunk, azonban voltak nagy eltérések. Valamelyik iskola 6 számítógépet mutatott ki, egy másik 26-ot és volt olyan iskola, hogy 45-öt. Tehát a számítógépes felszereltség az adott időben nem volt megfelelő és egyenletes eloszlású az egyes intézményekben.

A második kérdés válaszait, hogy milyen mértékű a számítógépek alkalmazása a hagyományos kémiai tanítási órán, a következőképpen értékelhetjük:



igen, gyakran alkalmazzuk (hetente)	0	0%
igen, néha alkalmazzuk (kb. havonta egyszer)	5	33.3%
nem, nem alkalmazzuk	10	66.7%

Tehát látjuk, hogy abban az időben egyáltalán nem alkalmazták a számítógépeket a kémiatanítás folyamatában.

A harmadik kérdésnél a számítógép nem alkalmazásának okát jelölték meg a megkérdezettek feleletválasztós módszerrel, amelynél több lehetőséget is kiválaszthattak a válaszadók. A megkérdezés során a következő eredményt kaptuk:

nincs számítógép hozzáférhető helyen	5	38.5%
nincs megfelelő módszertani számítógépes program (oktatási szoftver)	7	53.8%
nincs kellő tapasztalat a számítógép kezeléséhez	5	38.5%
egyéb ok	4	30.8%

Az egyéb válaszok közül a válaszadók főleg az időhiányra panaszkodtak, vagy arra, hogy a tananyag mennyisége és a kémiaórák száma nem engedi meg a számítógépek használatát, mert még így is csak alig képesek átvenni a tanárok a tananyagot.

A negyedik kérdés válaszait kiértékelve azt kaptuk, hogy kémiát oktató tanár a számítógépet mint módszertani segédeszközt

fontosnak tartja, mivel ösztönzőleg hat a diákokra	8	53,3%
fontosnak tartja, mivel áttekinthetővé teszi a tananyagot	6	40%
nem tartja fontosnak, eddig is megvoltunk nélküle	1	6,7%

Az ötödik kérdés válaszait kiértékelve azt kaptuk, hogy az iskola kémiai oktatási szoftverrel való ellátottsága:

nagyon jó, minden típusú számítógépre	0	0%
jó, de csak a PMD-85-s típusú számítógépre	8	53,3%
jó, de csak a PC-XT/AT típusú számítógépre	1	6,7%
nem jó, nem rendelkezünk oktatási szoftverrel	6	40%

Látjuk, hogy abban az időben csak a nagyon gyenge teljesítményű, hazai gyártású PMD-85 típusú számítógépekre alkalmazható oktatási szoftver volt hozzáférhető, de az iskolák nagy részén még erre sem volt mód.

A hatodik kérdés válaszait kiértékelve azt a tényt állapíthattuk meg, hogy a szoftverek közül is 90 %-ban csak szlovák oktatási szoftverrel rendelkeztek a gimnáziumok, mindössze 10%-uk rendelkezett mindkét nyelven oktatási szoftverrel. A tanárok több mint 70%-a nem tudott olyan cégekről, szervezetekről, ahol be lehet szerezni módszertani programokat, azonban több mint 80%-uk szeretett volna hozzájutni ezekhez. A válaszadók csaknem 100%-a úgy jelezett vissza, hogy nem tud beszerezni magyar nyelvű oktatási szoftvert, azonban, ha jó minőségűek lennének, használná ezeket.

Amint látjuk, a kiindulási helyzet az IKT kémiaoktatási felhasználására a szlovákiai magyar iskolákban nem volt kedvező és sok munka várt mindenkire, aki ebben segíteni, vagy lépni akart. Sajnos egy későbbi felmérésből (lásd tovább) láthatjuk, hogy a helyzet mind a mai napig nem változott meg gyökeresen, és még mindig van tennivaló ezen a téren, de vegyük sorjában....

1.2 A számítógépes oktatóprogramok megjelenése a kémiatanítás módszertanában

A 90-es évek végén, az Interneten fellelhető információk általános felhasználásához elég volt a keresőprogramok és azon keresztül a nagyobb web portálok használatának ismerete. A 2000-es évek elején a kémia, főleg a kémiaoktatás módszertana esetében – és nagyon sok más tantárgy esetében is – már azonban nem volt ilyen könnyű a feladat. Az Interneten nehéz volt és még ma is nehéz a hasznos információkat tartalmazó oldalak kiszűrése, ez bizonyos jártasságokat és kompetenciákat igényel, amelyek nélkülözhetetlenek a jelzett tevékenységhez.

Az Európai Parlament csak 2006 decemberében sorolta fel a digitális kompetenciát a kulcskompetenciákat tartalmazó ajánlásában (2006/962/EC). Ez a kulcskompetencia a magyar Nemzeti Alaptanterv 2007-es módosításában is szerepel, valamint a 2012-ben megjelent új dokumentum is tartalmazza. Ez a kompetencia megjelenik a Szlovák Állami Oktatási Programban is (Štátny vzdelávací program – ISCED) mint az egyik alapvető kulcskompetencia az elemi szintű oktatástól kezdve a középiskolai szintig végződve. Ez a kulcskompetencia ma már megkérdőjelezhetetlen fejlesztési cél, azonban nagyon sokféle módon jelenhet meg az oktatásban.

Az Internet és a www oldalak felhasználásának lehetőségei a 90-es évek végén azonban az oktatás folyamatában sokrétűnek mutatkoztak. Az Internetet és a www oldalakat felhasználhattuk mint:

1. Oktatási segédeszközt
2. Motivációs eszközt a tanulásra
3. Eszközt a diákok hatékonyabb önfejlesztésére a www oldalak segítségével
4. Az ismeretek tesztelésére, visszacsatolásra
5. A tananyag kiegészítésre
6. A tanárok felkészülési folyamatában (diagramok, adatbázisok, naprakész információk, prezentációk) (Brestenská, 1998), (Takeuchi, 2000)

A számítógép, az Internet és általánosan az IKT felhasználásának módszertani hátterét a tanítás-tanulási folyamatban minden tantárgynak meg kell találnia. Ezen folyamat legáltalánosabb összefüggéseit didaktikai alapelveknek nevezzük. A didaktikai alapelvek tehát a tanítási-tanulási folyamat legáltalánosabb, legalapvetőbb törvényszerűségeinek, tételeinek az összessége, melyek időről-

időre módosulnak az adott kor, társadalmi berendezkedés, nevelési szokások, iskolatípus stb. igényei szerint. Az első alapelvek Comenius nevéhez fűződnek, aki már a saját korában is olyan didaktikai és metodikai alapelveket állapított meg, melyek az idők folyamán az iskolai gyakorlat szerves részévé váltak. Alapelvei a következők voltak: a szemléletesség, a tudatosság, a rendszeresség, a következetesség és a tananyag koncentrikus bővítésének elve. (Pukánszky, Németh, 1996)

Legismertebbek és a mai napig leggyakrabban használtak a következő alapelvek: Az elmélet és gyakorlat összekapcsolásának elve (Gyakorlati felhasználás), A tudatos és aktív elsajátítás elve (Motiválás, Aktivizálás), A rendszeresség és folytonosság elve (Érthetőség, Fokozatosság), A szemléletesség elve, Az ismeretek és készségek alapos elsajátításának elve, Hozzáférhetőség és egyéni foglalkoztatás elve (Differenciálás), A visszacsatolás biztosításának elve és a Megerősítés. Az általános elvek összefonódnak, kölcsönösen feltételezik egymást és a didaktikai alapelvek általános rendszerét alkotják. Ezen felosztáson kívül természetesen ismerünk más csoportosításokat is, de számunkra és az IKT oktatásban történő felhasználásának céljait megfogalmazva ez a megfelelő.

Barabási Tünde (Barabási, 2007) szerint a szemléletesség alapelve azt a követelményt fejezi ki, hogy a tanulást konkrét-érzéki alapon kell megszervezni úgy, hogy a tanítási-tanulói folyamatnál a különböző tárgyakkal, anyagokkal, modellekkel, játékokkal, laboratóriumi eszközökkel és felszereléssel való cselekvés a diák számára élményt jelentsen. A szemléletesség az észlelést, megfigyelést igényli, és a valóság tárgyainak, jelenségeinek vagy azok ábrázolásának, modellezésének konkrét felhasználásával történik.

Falus Iván a szemléltetést az olyan oktatási módszerek közé sorolta, amelynek során a „*tanulmányozandó tárgyak, jelenségek és folyamatok észlelése és elemzése történik*”. A szerző szerint a szemléltetés módszerének a fogalomtanulásban és az absztrakt ismeretek elsajátításában is nagy szerepe van. Így ez a módszer hozzájárul a képszerű - szemléletes gondolkodás fejlesztéséhez, a tanult jelenségek rendszerezéséhez és a tanulók motiválásához. Végül, de nem utolsósorban pedig a tanult ismeretek alkalmazásához, amihez példaként említhetjük a számítógépes molekulamodellézést is. (Falus, 2003)

Ha feltesszük a kérdést, miért van szükség a megfelelő szemléltetésre, azt válaszolhatjuk, hogy főleg annak a célnak az elérése érdekében, hogy a tanuló

a tanulmányozott tárgyakról és jelenségekről közvetett vagy közvetlen észlelés alapján pontos és helyes képzeteket alakíthasson ki, amely alapját képezi a képzeletvilágában a helyes fogalmak kialakulásának. Számunkra nyilvánvaló, hogy minél több érzékszerv vesz részt magában a tanulási folyamatban, a tanulás annál hatékonyabbá válik, annál könnyebben és gyorsabban tanul a gyermek. A tanár előtt áll azonban az a fontos feladat, hogy a megfigyelést pedagógiaileg irányítsa, a látottakat elemezze és így az absztrakt gondolkodást is fejlessze.

Ha a fenn említett didaktikai alapelveket levetítjük az Interneten is megtalálható kémiai oktatóprogramok, vagy a jelenleg is forgalomban lévő oktatóprogramok készítési folyamatába, akkor ebben a folyamatban a didaktikai alapelvek a következőképpen alkalmazhatóak:

- 1/ Hozzáférhetőség és az egyéni foglalkoztatás alapelve (differenciálás) – mindenkinek, aki oktatási célokra szánt oktatóprogramot készít, elsőként meg kell jelölnie a célcsoportot, akik majd a programot használni fogják, pontosítani kell a korbéli és az iskolai besorolásukat az oktatási rendszerben. Tehát az oktatóprogramok készítésénél is számolni kell a felhasználók életkorával, előzetes felkészültségükkel. Mint már említettük egy életkoron belül is nagyfokú egyéni eltérésekkel találkozhatunk, így fontossá válik a differenciálás szükségessége. Az oktatóprogramok segítenek az egyéni foglalkoztatás lehetőségeinek bővítésében és így biztosíthatják a tanulók hajlamainak és képességeinek optimális fejlesztését.
- 2/ A rendszeresség és folytonosság és Szemléletesség alapelve – az oktatóprogramban az új fogalmakat következetesen csak egymásra épülve használjuk. Nem vezethetünk be új fogalmakat a kiindulási ismeretek feltérképezése és ezek kellő magyarázata nélkül. Az oktatóprogramokban a mondatoknak, bekezdéseknek és fejezeteknek áttekinthetőeknek, egymásra kapcsolódóaknak és érthetőeknek kell lenniük. Be kell tartani az oktatóprogram nyelvének nyelvtani szabályait is, mert a nyelvtani hibák zavarólag hatnak. Minden új fogalmat, idegen szavat és rövidítést igyekezzünk megmagyarázni.

Az oktatóprogram felhasználásának céljából további három alapelvet kell megemlítenünk:

1. Az univerzális felhasználhatóság alapelve – ma már nagymértékben használják, azonban vannak még szoftverfejlesztők, akik megfedkeznek róla. Az elkészült oktatóprogram jó, ha univerzálisan alkalmazható az összes operációs rendszerű gépen, legyen az Windows, Mac OS, Linux, Unix, Be OS, stb.. Ha nem is lehetséges olyan programot szerkeszteni, amely kompatibilis a többségi Windows vagy Linux felhasználók gépekre, akkor igyekezzünk mindkét platformra megszerkeszteni a programot. Ma már ugyanúgy problémát okozhat a webböngésző milyensége. Arra is oda kell figyelni a programok készítésénél, hogy az oktatóprogramok indíthatóak legyenek a leggyakrabban használt html alapú böngészővel. A leggyakoribbak az MS Internet Explorer (újonnan Edge), Netscape, Mozilla, Google Chrome.
2. Az elérhetőség alapelve – az oktatóprogramnak elérhetővé kell válnia a célcsoport minden tagja számára. A terjesztésnek két formája lehet: CD-ROM vagy on-line az Interneten keresztül. Ma már az oktatóprogram terjesztésének piaci háttere az, amely meghatározza a terjesztési formát. A szabadon elérhető szoftverek az Interneten érhetőek el, a kommersz alapon írottak pedig CD vagy DVD adathordozókon kerülnek forgalomba.
3. „User friendly“ alapelv – ma már ennek az alapelvnek az alkalmazása fényévekre van a néhány évvel ezelőtti állapotoktól. Mivel a piacon megjelentek olyan oldalak, mint a Facebook, Twitter, Google, a számítógépes alkalmazások elérhetővé váltak azon célcsoportok számára is, akikkel a szoftverfejlesztő cégek azelőtt nem számoltak. Így a programok dizájn elemei is lényegre törőek, kevésbé zavaróak. A programoknak, amelyeket oktatási célokra használunk, áttekinthetőnek, könnyen kezelhetőnek kell lennie. Olyan menüsort kell használnunk, amely könnyen navigál minket a programban és segít megtalálni azt a kiindulási biztos pontot, ahová bármikor visszatérhetünk.

1.3 Az IKT és a kémiaoktatás kapcsolata – szlovákiai tapasztalatok

Mint az előző fejezetekben is írtuk, a természettudományok oktatásában gyakran felmerülnek azok a kérdések az IKT használatával kapcsolatban, hogy milyen mértékben, mire, hogyan használjuk a számítógépet, az Internetet és azokat a várhatóan rövid élettartamú oktatási módszereket, amelyek speciális informatikai eszközökre épülnek. Ahogy említettük, a hosszú időn át is használható, gyorsan munkára fogható eszközök közé sorolhatjuk az olyan, szenzorokkal felszerelt, a laboratóriumi bemutató kísérleteket segítő eszközöket, amelyeket a számítógépre csatlakoztatva az eredmények kiértékelése is megoldottá válik. Csehországban és Szlovákiában már több mint egy évtizede igyekeznek bevezetni az iskolai oktatásba azokat a rendszereket, amelyek a diákok számára az IKT segítségével közelebb hozzák a kémia, fizika és a biológia kísérleteit. A szerző és kollégái már régebben foglalkoztak (Matulík, Juhász, 1998) az IKT kémiaoktatásba való bevezetésével, szintén egy ilyen rendszer laboratóriumi segédeszközként való bevezetését vizsgálva. Az eszköz a Philip Harris hardvercsomag (DL Plus, továbbá a következő szenzorok: konduktivitásmérő szenzor, oxigénszintmérő szenzor, hőmérsékletmérő szenzor, fényszint mérő szenzor). Munkánk során kísérleteket vezettünk be a kémiatanári oktatásba, leírtuk ezen kísérletek menetét és bevezettük a fizikai kémiai laboratóriumi gyakorlat tanmenetébe, továbbá az Iskolai kísérletek módszertana kurzus tanmenetébe is. Minden kísérlet a következő ismertetőt tartalmazta:

1. A felhasznált hardver leírása
2. A hardvercsomaghoz tartozó DataDiscPro szoftver leírása
3. A kísérletek leírása, amelyeknél mindegyik tartalmazta a következő pontokat:
 - a) A kísérlet célja
 - b) A felhasznált módszerek elméleti leírása
 - c) Felhasznált eszközök
 - d) Munkamenet
 - e) Kontroll eredmények
 - f) Következtetések
 - g) Felhasznált és javasolt irodalom.

A kísérletek kiválasztásánál és kivitelezésénél abban az időben a Sheffield Hallam University „Schools OnLine” projektje inspirált bennünket. Mint ízelítőt és a szakmai gyakorlatban ma is felhasználható kísérletet a „Gyomorégés” című kísérlet leírását mutatjuk be, amely egy potenciometriás titrálási kísérlet.

1.3.1. Gyomorégés – számítógéppel támogatott kísérlet

Mindannyiunk átélte már azt a kellemetlen érzést, amelyet gyomorégésnek nevezünk. A gyomorégést a gyomorsav túltermelése okozza. Gyomorégés akkor jön létre, ha a gyomor olyan sok gyomorsavat termel, hogy a záróizom, amely azt normál esetben a gyomorban tartja, nem képes már megfelelően zárni, és a sav egy része a nyelőcső alsó részébe kerül. A savas kémhatású gyomorsav elegyet a gyomor nyálkahártyája termeli, amelynek egyik legfontosabb alkotórésze a $0,1 - 0,01 \text{ mol.dm}^{-3}$ koncentrációjú sósav. A gyomor naponta átlagosan 2 liter gyomorsavat termel, amelynek a pH-ja 1,6 körül mozog. Nyugalmi állapotban óránként $1,5 - 2,5 \text{ mmol.h}^{-1}$ választódik ki a gyomorban. A sósav fő élettani hatása abban nyilvánul meg, hogy dezinfikálja a felvett táplálékot (megöli a táplálékban található mikroorganizmusok nagy részét), segíti a fehérjék denaturációját. A gyomorsav túltengésre, a gyomorsav semlegesítésére, termelődésének csökkentésére, az emésztés segítésére számos gyógyszer is rendelkezésére áll, vagy esetlegesen speciális diétákat is alkalmazhatunk.

Feladat:

Határozzák meg a HCl oldat koncentrációját NaOH-val történő potenciometriás titrálással.

Alapelv:

Mint már említettük, a gyomorsav legfontosabb alkotórésze a $0,01 \text{ mol.dm}^{-3}$ koncentrációjú sósav. Ha a NaOH oldatba, amely univerzális indikátor oldatot is tartalmaz, folyamatosan cseppenként híg sósav oldatot adagolunk, akkor az oldat kék elszíneződése gyengül és enyhén zöld színre változik. Semleges kémhatású oldat keletkezik, melynek a pH értéke 7. Az oldat hőmérséklete emelkedik. Ha elpárologtatnánk a vizet, fehér kristályos NaCl maradna fel. Az ilyen reakciók a semlegesítési (neutralizációs) reakciók, amely során sav és bázis reagál, víz, só és hő keletkezik. A reakciót a következő alapegyenlet írja le:



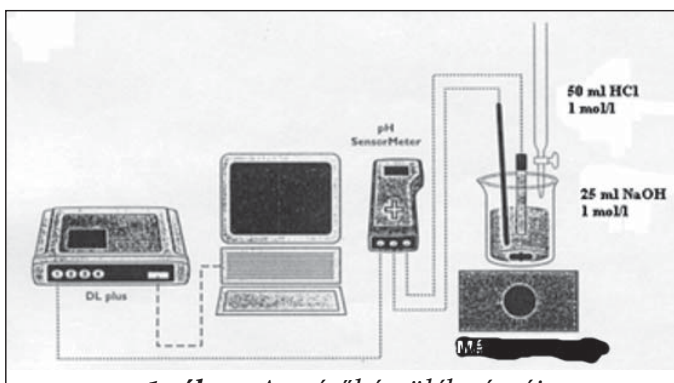
Az ekvivalenciapont meghatározására a vizuális módszer mellett más fizikai-kémiai módszereket is használhatunk, ilyen pl. a pH értékének mérése a titrálás

folymán. A potenciometriás titrálások végpontjának a megállapításához ábrázoljuk az $\text{pH} = f(V)$ függvényt, ahol pH a titrált oldat pH-ja; V az adagolt NaOH mérőoldat térfogata.

Eszközök és vegyszerek:

pH-méter üvegelektóddal, DL Plus, PC DataDiscPro szoftvercsomaggal, elektromágneses keverő, Erlenmeyer lombik, főzőpoharak, buretta (50 ml), pipetta (25 ml), hőmérő vegyszerek: NaOH 0,1 mol.dm⁻³ koncentrációjú mérőoldata HCl 0,1 mol.dm⁻³ koncentrációjú mérőoldata, desztillált víz, fenolftalein, puffer oldat pH=7

A készülék sémája: (1. ábra)



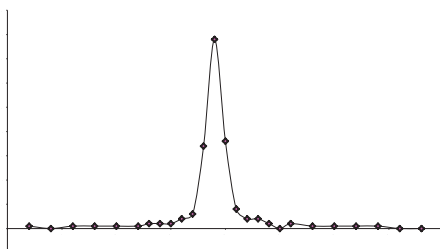
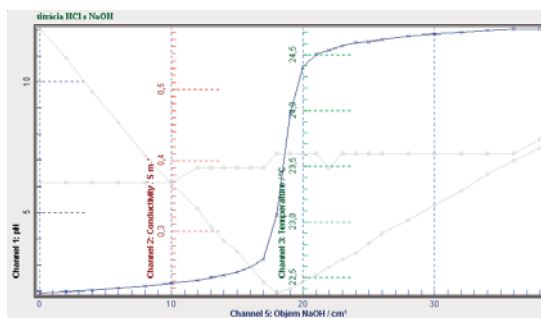
1. ábra: A mérőkészülék sémája.

Munkamenet:

- 1) Kapcsolják a pH elektródot és a hőmérsékletmérő szenzort a pH méterhez és kapcsolják össze a DL plusszal, az 1-es kanálison kapcsolják be a pH-métért.
- 2) Mérjenek le 25 cm³ HCl oldatot a lombikba.
- 3) Először a puffer oldattal (pH =7) kalibrálják be a SensorMeter-t. A kalibrálás után öblítsék le az elektródot desztillált vízzel.
- 4) Kapcsolják össze a DL plus-t a számítógéppel és indítsák el a DatadiscPro programot.
- 5) Állítsák össze a készüléket az adott séma szerint (a bürettát töltsék fel az ismert koncentrációjú NaOH oldattal).
- 6) Figyelembe véve a kezelési útmutatót, mérjék és rögzítsék a HCl oldat pH értékének változását a hozzáadott NaOH térfogat függvényében.

- 7) Ha befejezték a mérést (ESC gombbal) és elmentették a merevlemezre, akkor a Graph menu Join points menüpontjának kiválasztásával ábrázolni lehet a mért adatokat.
- 8) A potenciometriás titrálás grafikonjából meghatározzuk a grafikon inflexiós pontját (vagy egyenesen a grafikonból, vagy a függvény derivációjából – az ekvivalenciapont a derivált függvény maximuma) és kiszámítjuk a HCl koncentrációját az ekvivalenciapontban.
- 9) Szükség esetén kinyomtatjuk az eredményeket és a grafikonot.

Mérés modell:



2.-3. ábra: A mérés eredményeinek kiértékelő grafikonjai.

A NaOH mérőoldat koncentrációja (oxálsav mérőoldatával standardizálva):

$$c(\text{NaOH}) = 0,016 \text{ mol.dm}^{-3}$$

A titrált HCl oldatának térfogata: $V(\text{HCl}) = 25 \text{ ml}$

A NaOH térfogata az ekvivalenciapontban (a potenciometrikus titrálási görbéből meghatározva):

$$V(\text{NaOH}) = 18,5 \text{ ml}$$

A HCl koncentrációjának kiszámítása: $\text{NaOH} + \text{HCl} \rightarrow \text{NaCl} + \text{H}_2\text{O}$

$$c(\text{HCl}) = \frac{c(\text{NaOH}) \cdot V(\text{NaOH})}{V(\text{HCl})}$$

$$c(\text{HCl}) = \frac{0,016 \text{ mol.dm}^{-3} \cdot 18,5 \text{ ml}}{25 \text{ ml}} = 0,012 \text{ mol.dm}^{-3}$$

További feladatok:

1. Ismételjék meg a gyakorlatot:

$\text{HCl} + \text{NH}_3$, $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{NaOH}$, $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{NH}_3$ titrálási sav-bázis kombinációban!

Az eredményeket hasonlítsák össze és válaszolják meg, milyen a különbség az erős és gyenge sav-bázis párok titrálása között! (Jindra, 1985), (Garaj, 1987), (Philipp Harris, 1994), (Vollárová, 1990)

Egy hasonló kísérlet található az (Matulík, Juhász, 1998) irodalomban is, ahol a savas esők modellezésére egy konduktivitást mérő konduktometriás titrálási modellt mutattunk be.

1.3.2 A redoxi reakciók és a számítógép

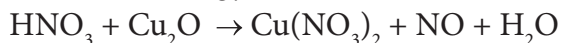
További kezdeményezéseink (2003) között szerepelt továbbá az az oktatóprogram, amely valójában nem is oktatóprogram volt, hanem inkább a tanulás azon folyamatában lehet felhasználni, amely az ismeretek elsajátításának ellenőrzésénél valósult meg.

Az oktatóprogramot Radko Holub informatika-kémia szakos hallgatóval készítettük, azonban az előző fejezet 3., 4. és az 5. pontban foglalt alapelvei sajnos nem kellő mértékben jellemezték ezt a programot. Az oktatóprogram az akkor még eléggé elterjedt Turbo Pascal programozó nyelvben készült, de a felhasználói felület és maga a program elkészítése mellett a vegyészek számára annál érdekesebb a sztöchiometriai együtthatók meghatározására alkalmazott modell. Az eddig leggyakrabban használt modell a redoxi reakciók sztöchiometriai együtthatónak meghatározására az oxidációs számok modellje volt.

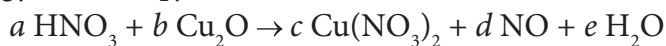
A másik modell a lineáris egyenletrendszerek megoldásán alapuló modell. Ez már azonban nemcsak a redoxi folyamatokra használható modell, hanem más kémiai reakciókra egyaránt. A modell alapja, hogy bármely kémiai reakciót, amelynek a sztöchiometriai együtthatóit keressük, átalakíthatjuk paraméteres megoldású homogén lineáris egyenletrendszerre. A megoldásokat a természetes számok halmazán kell hogy megkapjuk, amely némely esetben nem létezik.

A modellt egy egyszerű példán mutathatjuk be, amelyet papíron pár perc alatt meg tudunk oldani, ha ismerjük a mátrixműveleteket.

Adott a következő kémiai reakcióegyenlet, amelyben meg kell határozni a sztöchiometriai együtthatókat.



A sztöchiometriai együtthatókat általánosan $a.b.c\dots$ -vel jelöljük. Így a következő egyenletet kapjuk:



Az együtthatóknak a következő feltételeknek kell megfelelniük:

$$a, b, c, d, \dots \in \mathbb{N}$$

a reakcióban résztvevő elemek sztöchiometriai együtthatóira érvényes:

$$\text{N: } a = 2c + d$$

$$\text{Cu: } 2b = c$$

$$\text{H: } a = 2e$$

$$\text{O: } 3a + b = 6c + d + e$$

Ezen egyenletek alapján a homogén lineáris egyenletrendszer következő mátrixegyenlet alakban írhatjuk fel:

$$\mathbf{AX} = \mathbf{B},$$

ahol az $\mathbf{A}$, $\mathbf{X}$ és a $\mathbf{B}$ mátrixok.

Ha az egyenleteket olyan alakra hozzuk, hogy a jobb oldaluk egyenlő lesz 0-val, akkor az $\mathbf{A}$ mátrix a következő:

$$\mathbf{A} \approx \begin{pmatrix} 1 & 0 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -2 \\ 3 & 1 & -6 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Az $\mathbf{X}^T$ transzponált mátrixot a következő alakban írhatjuk fel:

$$\mathbf{X}^T \approx (a \ b \ c \ d \ e), \text{ a } \mathbf{B} \text{ mátrix pedig a zérómátrix, tehát:}$$

$$\mathbf{B} \approx (0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0)$$

Az $\mathbf{A}$ mátrixot ekvivalens sorműveletekkel a mátrixot a következő alakra hozzuk:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -4 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -7 & 2 \end{pmatrix}$$

Visszahelyettesítve az eredeti mátrixegyenletbe a következő egyenleteket kapjuk:

$$-7d + 2e = 0$$

ebből:

$$d = \frac{2}{7} e$$

A többi együtthatót is kifejezzük az e sztöchiometriai együttható segítségével:

$$c + 4d - 2e = 0$$

ebből:
$$c = \frac{6}{7}e$$

A b és az a együtthatót a következőképpen számoljuk ki:

$$b + 2d - e = 0 \Rightarrow b = \frac{3}{7}e$$

$$a + 2c - d = 0 \Rightarrow a = \frac{14}{7}e$$

Az egyenlet paraméteres megoldása így:

$$a = \frac{14}{7}k, b = \frac{3}{7}k, c = \frac{6}{7}k, d = \frac{2}{7}k, e = k$$

$k=7$ esetében:

$$a = 14, b = 3, c = 6, d = 2, e = 7$$

Az együtthatókat behelyettesítve a következő egyenletet kapjuk:



Ennek a modellnek a segítségével készítettük a Turbo Pascal alapú oktatóprogramot, amely akár széleskörű felhasználásra számíthatott volna, ha nem MS-DOS felületen futott volna. (Holub, 2003)

1.3.3 Periciklusos reakciók és a számítógép

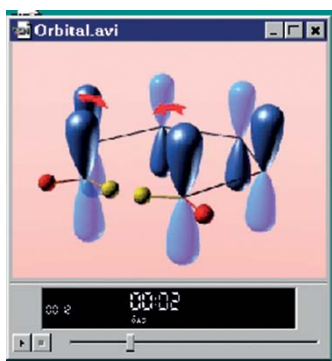
A gyűrűs átmeneti állapoton keresztül, köztitermék képződése nélkül, egyetlen lépésben lejátszódó reakciókat Woodward javaslatára periciklusos reakcióknak nevezzük. A periciklusos reakciók hőhatásra vagy UV-fény hatására játszódhatnak le. Ezeknek több csoportját ismerjük. A legfontosabbak:

1. Elektrociklusos reakciók: konjugált diének vagy poliének záródása gyűrűs olefinekké (poliolefinekké), illetve ez utóbbiak gyűrűfelnylási reakciója.
2. Cikloaddíciós és cikloreverziós reakciók: két olefin vagy konjugált polién addíciója gyűrűs vegyületté (pl. Diels-Alder-addíció), illetve a fordított irányú átalakulás.

3. Szigmatrop átrendeződés: egy telített szénatomhoz σ -kötéssel kapcsolódó atom vagy csoport vándorlása a szomszédos konjugált π -rendszer mentén.

A periciklusos reakció számos esetében figyeltek meg sztereoszelektivitást. Az elektro-ciklusos reakciók sztereoszelektivitására Woodward és Hoffmann a molekulapályák szimmet-riasajáttságaiiban találtak magyarázatot.

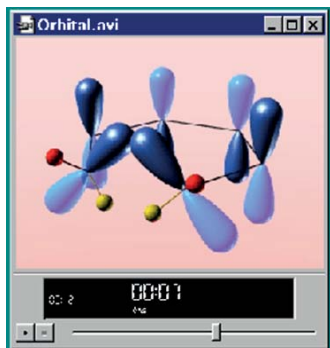
A periciklusos reakciók fontosságára vall az a tény is, hogy a mechanizmusuk helyes magyarázatáért R. Hofmann és K. Fukui 1981-ben a kémia Nobel-díjat kaptak. A reakciómechanizmusok helyes oktatása és megértése azonban problémákba ütközik. Ezeket a problémákat a térbeli látás (a molekulák térszerkezete, szimmetriaelemek) és a kötéselmélet kvantummechanikai alapismereteinek (ez alatt a Hückel-féle MO-elmélet alapjait értjük) a hiánya okozhatja. További problémát okozhat a Hückel-féle MO elméletnél használatos matematikai apparátus ismerete (mátrixok, polinomikus egyenletek megoldása). Ezért több próbálkozást tettünk a témával kapcsolatos reakciómechanizmusok vizualizációjára és mélyebb elsajátítására. A Hückel-féle MO-elmélettel és a periciklusos reakciókkal még bővebben foglalkozunk a következő fejezetekben, azonban a 90-es évek végén végzett módszertani munkánk eredményeként olyan videóanimációk (4-6. ábra) láttak napvilágot (Juhász, Matulík, 1999), amelyek sajnos ma már nem hozzáférhetőek a világhálón, azonban olyan progresszív irányt mutattak, melyet napjainkban a kvantumkémiai modellező programok segítségével sokkal könnyebben tudunk szemléltetni.



4. ábra:

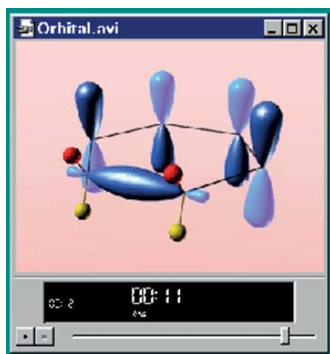
Az electrociklusos reakció animációja.

A nyilak a diszrotációs mechanizmust mutatják.



5. ábra:

Az electrocikusos reakció animációja.



6. ábra:

A ciklohexadién kötő π -molekulapályájának a keletkezése az 1,3,5- hexatrién HOMO π -molekulapályájából.

2. A kémia tanításának és tanulásának módszerei és a molekulamodellezés

Bari (Bari, 1980) szerint a módszerek a közös munka külső formai oldalai, tehát többé vagy kevésbé a tanár és a tanulók közös eljárásai.

Pais (Pais, 1967) szerint a módszer alatt olyan eljárásokat értünk, amelyek lehetővé teszik, hogy a tanulók ismereteket, jártasságokat és készségeket szerezzenek, képességeiket rendszeresen fejlesszék. A módszer lényegében az oktatás állandóan változó tartalmának formája, amely elválaszthatatlan a tárgy tartalmi anyagától.

A módszerek megválasztását meghatározó tényezők a következők:

- a) Nevelési cél: Ha átalakítjuk az oktatási cél által meghatározott feladatrendszert, adódik az a következtetés, hogy a diákokkal folytatott közös munka legyen módszerekben minél gazdagabb.
- b) Tartalom: A kémiai tananyagból sok mindent lehet szóbeli módszerekkel ismertetni, bemutatni és szemléltetni pl. az elemek és vegyületek tulajdonságait, de vannak olyan ismeretek, mint pl. a kőolaj, földgáz keletkezése, melyet csak elbeszélés útján tudunk elmondani.
- c) A tanulók fejlettsége: Az általános iskolai korú tanulóknak többnyire sokoldalú bemutatásra van szükségük az ismeretszerzéshez, de az előadás módszere csupán kismértékben használható. A középiskolások tananyagának elsajátítására más módszerek szükségeltetnek.
- d) A kémia tantárgy sajátosságai: a kémia jellege alapján döntő jelentőségű a tanári bemutatás és kísérlet, azonban ez nem sorolható a módszerek közé.

A tanítási–tanulási folyamat egy-egy mozzanata olykor megoldható egyetlen módszer alkalmazásával (pl. tanári elbeszélés). Az esetek jelentős részében azonban 2 vagy több módszer párhuzamosan alkalmazható (pl. részösszefoglalás beszélgetéssel, vázlatkészítéssel), így a tanítás ún. módszerkombinációval valósul meg. (Bari, 1984)

A módszerek felosztása sokrétű, azonban a feldolgozott témakörben a legcélszerűbb a módszerek következő rendszerét alkalmazni: motivációs módszerek, szóbeli módszerek, szemléltető módszerek, a tanulók csoport- és individuális munkájának módszerei. Ezek közül bővebben csak a motivációs és a szemléltető módszerekkel fogunk foglalkozni.

Motivációs módszerek:

Az oktatási-nevelési célok csak a diákok aktív részvételével teljesíthetőek. Ha a diákok a tanításban passzívak, a tananyag megértése és megjegyzése nagyon behatárolt. Ha a diákok érdeklődéssel és odafigyeléssel dolgoznak, akkor sokkal jobban elsajátítják a tananyagot. Ezért fontos, hogy a tanítás folyamatában felébresszük a diákok érdeklődését a tananyag iránt, azaz motiváljuk őket.

A motiválás folyamatában a következő lehetőségeket használhatjuk fel:

- Megismertetjük a diákokkal a munkánk célját, pl. a kémiai képletek elsajátításával bonyolult és nehéz feladatokat tudnak megoldani, megérthetik a kémiai reakciók menetét és mechanizmusát.
- Rámutatni az ismertett tananyag szélesebb körű jelentőségére, pl. arra, hogy milyen szerepet játszanak a kémiai számítások a kémiai tudományban.
- Megválaszolni olyan kérdéseket, amelyekre az ismereteik alapján nem tudják a választ és érdekelheti a diákokat, pl. az ecetsav és a kénsav oldat pH-ja miért alacsonyabb, mint a kénsavé.

Mint motivációt felhasználhatjuk a kémiai kísérleteket is, főleg az olyanokat, amelyek eredményképpen új problémát kapunk, motivációként felhasználhatunk más audio-vizuális eszközöket vagy olyan cselekvéseket (feleltetés, tesztelés), amelyek érintik a tananyagot.

Szemléltető módszerek:

Jelentőségük abban rejlik, hogy a kémiai anyagfajták és változásainak tanulmányozása azok megfigyelésével kezdődik. Azonban a bemutatás nem önálló módszer, más módszerekkel kell ötvöznünk. A tanári bemutatás keretén belül bemutathatjuk közvetlenül az objektív valóságot, azonban bizonyos esetekben szükségszerű az ezeket helyettesítő modellek, rajzok, képek, animációk bemutatása. Ilyenkor a megismerés tárgyról közvetett módon alakítunk ki képzeteket. A sztatikus közvetett bemutatások közé soroljuk a grafikai eszközök és a vizuális információhordozók mellett a modelleket is.

2.1 Molekulamodellezés a kémiaoktatásban

A szemléltetés az ismeretközvetítés legtermészetesebb módja. Mivel minden tudás kezdetben a megfigyelésből indul ki. Ennek széleskörű gyakorlásával módot és lehetőséget kell nyújtani a tanulóknak ahhoz, hogy az élet minden területén, tanári vezetés nélkül is tudjanak új ismereteket szerezni. (Mojzes, 1984) A materiális modellek legtöbbször olyan kiegészítő információkkal szolgálnak a tanítás során, amelyet az ismeretszerzés elemzési stádiumában tudunk felhasználni. A kísérleti tapasztalat értelmezése során rendszerint a tanulók eljutnak a szerkezeti okok kereséséhez, ahol az anyagi modellek segítenek a szerkezet elképzelésében, érzékeltetésében. A modellek alapvető ténybeli információt nyújtanak az anyag megismeréséhez. A rácsmodelleknek, vagy másképpen statikus modelleknek tehát főleg a demonstrálás a szerepük (Myška, 2002a,b)

A sztatikus modelleket leggyakrabban a kristályrácsok fajtáinak és felépítésének a bemutatására használjuk, ilyenek pl. a gyémánt, a konyhasó vagy a grafit modelljei, azonban a modellek segítségével a molekulák egyéb tulajdonságait is be tudjuk mutatni, mint pl. a molekulák térszerkezetét, a kötések fajtáit, izomér szerkezetek stb..

A modellek használata több tévképzet kialakulásához is vezethet, mint pl. az olyan elképzeléshez, hogy az atomok színesek, minden kötés hossza egyforma, mivel a pálcamodellek estében ez így van szemléltetve. A sztatikus modellek másik nagy hátránya, hogy a tanuló csak külső szemlélője és nem aktív résztvevője a modellezés folyamatának.

A számítógépes molekulamodellezés éppen ezeket a hátrányokat igyekszik kompenzálni.

A molekulamodelleket leggyakrabban a molekulák térszerkezetének (kovalens és a másodrendű kémiai kötések kialakulása), valamint a szerves kémia egyes fejezeteinek az oktatása során tudjuk alkalmazni. A számítógépes molekulamodellezés segítségével ki tudjuk szűrni az említett tévképzeteket, és így könnyebben válik megismerhetővé a molekulák térszerkezete, az ebből adódó kémiai és fizikai tulajdonságok, továbbá az atomok és a molekulák közti kölcsönhatások.

A kémia tantárgy igényli a sokrétű kémiai modellek használatát. Mellőzésükkel nem alakulhat ki a tanulóban reális kép az anyagokról, azok szerkezetéről. Nélkülük üres, verbális ismeretekre tesznek csak szert. A modellek didaktikai

funkciója sokrétű. Elsődleges és legfontosabb szerepük a kiegészítő információk szolgáltatása. Ezen túl a motivációs szerepük is jelentős. Segítik a tanulóknak rögzíteni az új ismereteket, ugyanis a legtöbb tanuló vizuális típus. A demonstrációk folyamán érdemes mindig a valósághoz legközelebb álló modelleket használni, figyelembe véve a tanulók fejlesztési szintjét.

Modellezésnek nevezzük a megismerés olyan elméleti módszereit, amelyek a modellek kialakítására, alkalmasságuk ellenőrzésére, modellekkel való kísérletek lebonyolítására és a modellezett objektumról szerzett ismeretek alkalmazására irányulnak. Modellezés alatt azt a célirányos tevékenységet értjük, amely a rendszer tulajdonságairól szerez információkat a modellen keresztül. A modellezés abból a szempontból is fontos, hogy olyan bonyolult rendszereket vizsgálhatunk, amelyeknek a direkt vizsgálata problematikus. A modellezés néha az egyetlen rendelkezésünkre álló eszköz, hogy információkat szerezzünk a tanulmányozott objektumról.

Az IKT intenzív fejlődésének korszaka előtt a modellezés alatt különböző anyagokból álló (műanyagok, fémek, papír...), anyagi eredetű modelleket értettünk. Az ilyen modellek, amelyeket főleg a kémiában, a fizikában és a biológiában alkalmaztunk, hozzávetőlegesen jól mutatták pl. a molekulák térszerkezetét, de már nem tudtunk olyan információkhoz jutni, amelyek pl. a reaktivitásról is szóltak.

A modell fogalma bonyolult történelmi fejlődésen ment keresztül. A modell mint fogalom elsőként a római építészetben bukkant fel (P.M:Vitruvius), ahonnan átkerült a középkori építészet világába. Jelentésbelileg a mértéket, mintát és a módot jelentette.

Az idő múlásával a modellek egyre gyakrabban használatosak lettek az egyes tudományágakban, bonyolultabbakká vált az alakjuk, szerkezetük és a funkciójuk. (Zelenický, 2005).

A modell fogalmának meghatározása az irodalomban nagyon sokrétű, azonban ennek ellenére a modellezésben el van rejtve a természet és a tudományosság egységes logikai felépítése. Több olyan értelmezése van a fogalomnak, amely az egyes szerzők előző meglátásait tükrözi. Néhány olyan értelmezést is leírunk, amelyet a mikrovilág jelenségeinek vizsgálatainál a legcélszerűbb használni.

Bari (Bari, 1980) szerint a makrotestek tulajdonságainak megismeréséhez és az anyagi halmazok változásainak megértéséhez meg kell ismernünk az anyagok mikroszerkezetét is. A szerkezetek különböző szinteken történő

kutatása s ezeknek szoros kapcsolata: a tulajdonság, szerkezet, dinamika, energia összefüggő komplex szemléletének kialakítását teszi lehetővé. Ehhez azonban olyan absztrakció szükséges, amelyhez valamilyen formában valóságtartalomnak is kell társulnia. A valóságmegfeleltetésre legjobban felhasználható segédeszközök az oktatási modellek.

Ennek alapján a modell a megismerés objektumát reprodukáló vagy visszatükröző anyagi rendszer, amely a megismerési folyamatban azt helyettesíti. A kémiában olyan anyagi vagy strukturális modelleket alkalmazhatunk, amelyek segítségével ismereteket szerezhetnek a tanulók az anyagok és vegyületek szerkezetéről, az ebből vonatkoztatható tulajdonságokról, és ennek kapcsán speciális folyamatokat is modellezhetünk.

Az oktató számára tehát a modell olyan segédeszköz, amely segítségével – a megértés és a gondolkodási tevékenységen keresztül – megismertetheti a valóságot.

A klasszikus iskolai kémiaoktatásban a szemléltetést biztosító modellek három típusát különböztettük meg:

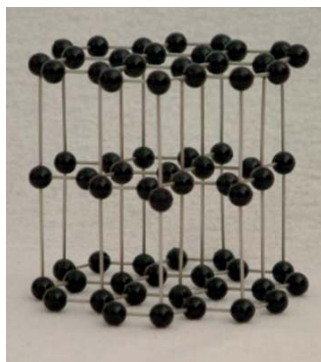
- Kristályrácsmodellek
- Molekulamodellek
- Mágneses applikációs modellek.

Közös módszertani jellemzőjük abban rejlett, hogy változatos formában nyújtottak új információkat és ismereteket az anyagok szerkezetéről, ez által pedig fejlődött a megfigyelő és kiválasztó, azaz absztraháló és összehasonlító képességük is.

Röviden az oktatás folyamatában használt egyes modelltípusokról.

A *kristályrácsmodellek* az egyik legismertebb modelltípusok voltak a múlt évszázad vége felé, és majdnem minden oktatási célra használt kémiai laboratóriumban találkozhattunk velük. A kémiai ismereteinkből kifolyólag tudjuk, hogy az anyag halmazállapota szerveződése során alakul ki a kristályrács. A kristályos szilárd anyagok térrácsos szerkezetűek, így ezek a modellek is háromdimenziós modellek voltak. Annak függvényében, hogy az egyes kristályok rácspontjaiban milyen anyagi részecskék találhatók, megkülönböztetünk: *atom-, ion-, molekula- és fémrácsokat*.

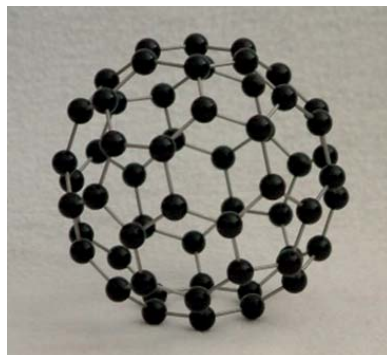
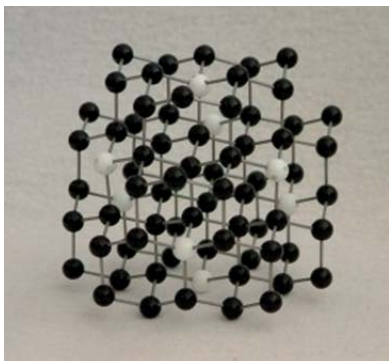
A rétegrácsos kristályok modellje közül a legismertebb a grafit modellje (7. ábra), ahol az egyes rácspontokban gömbökkel szimbolizált sp^2 hibridállapotú szénatomok helyezkednek el.



Forrás: http://www.miramodus.com/html/teaching_models.html (2016)

7. ábra: A grafit rétegrácsos kristályrácsmodellje

A gyémánt a szén második allotróp módosulata, amely szintén atomrácsos kristályrács modell formájában szemléltethető (8. ábra). Itt már látjuk, hogy az egyes sp^3 hibridállapotú szénatomok tetraéderes szerkezetbe rendeződnek, meg tudjuk becsülni a kötésszögeket is, de a kötéstávolságok meghatározása a modell nagyobbítási léptékének ismerete nélkül megoldhatatlan feladatot ró a diákokra. Ha figyelembe vesszük a harmadik allotróp módosulat, a fullerén modelljét (9. ábra), ahol a szénatomok szintén sp^2 hibridállapotban vannak, akkor ez a feladat csak nehezedik.

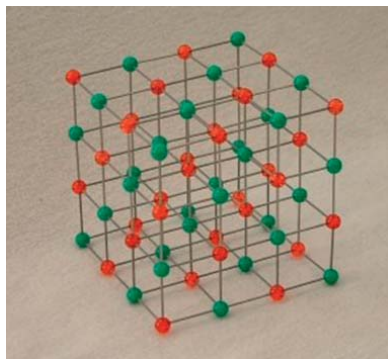


Forrás: http://www.miramodus.com/html/teaching_models.html (2016)

8. és 9. ábra: A gyémánt és a fullerén rétegrácsos kristályrácsmodellje

Látjuk, hogy a klasszikus kristályrácsmodellek nehezen voltak alkalmazhatóak az egyes vegyületek és elemek tulajdonságainak megismerésére és főleg elemzésére (pl. kötéstávolság, kötésszögek), mert ehhez más kiindulási ismeretanyagra is szükség volt.

Ugyanez a helyzet a ionrácsos kristályrácsoknál is, ahol a kristályrácsmodelleket felépítő gömbök már nem atomokat, hanem ionokat szimbolizálnak. Ezek közül a legismertebb a mindmáig használatos NaCl ionrácsos kristályrácsmodell (10. ábra), amelynél a konyhasó kristálya meghatározott rendben elhelyezkedő Na^+ és Cl^- ionokból épül fel. Ezeken a modelleken jól érzékelhetők, hogy az azonos ionok egymástól távol, a különbözőek pedig egymáshoz közel helyezkednek el.



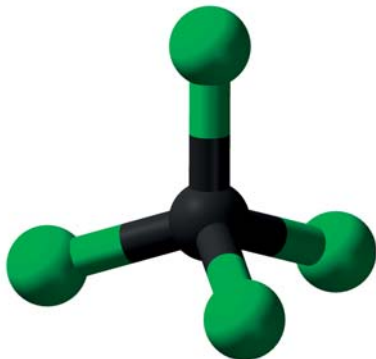
Forrás: http://www.miramodus.com/html/teaching_models.html (2016)

10. ábra: A NaCl kristályrácsmodellje

A kristályrácsmodellek, mivel nagyméretűek, főleg a tanári bemutatásnál alkalmazhatóak, de vannak olyan modellek, amelyek gyurmából kis méretben a diákok által is elkészíthetők.

Fontosabbak a kémia oktatási tantárgyként való céljainak megvalósításánál a *pálcamodellek*. Az ilyen típusú modell a molekulák térszerkezetét, a kötéstávolságokat, ill. a kötésszögeket mutatja be szemléletesen és áttekinthető módon. A pálcamodellel vagy vázmodell elemei kis gömbök vagy hengerek (atómtörzscentrumok), amelyeken egy vagy több csap ágazik az egyes atomok hibridizációs állapotának függvényében. A csapok száma és az egymással bezárt szög egyben a kötésorientációt jelzi. Ezeket a modelleket főleg a tanulói tevékenységeknél tudtuk alkalmazni. Az egyes készleteknél a tanulóknak lehetőségük volt az atomok kiválasztására, az egyes molekulák jellemző térirányú atómtörzseinek a kiválasztására. Az azonos minőségű atómtörzsek általában azonos színűek voltak. Ez a nemzetközi szabvány szerint történt: fehér a hidrogénatom, piros az oxigénatom, fekete a szénatom, zöld a klóratom, kék a nitrogénatom, sárga a kénatom modellje. A pálcikamodellekészletben többnyire zöld, piros és fehér műanyag csövek találhatók a kötések

kialakítására. Célszerű következetesen a zöld csöveket a σ -, a fehéreket a π -, a pirosakat a hidrogénkötések jelzésére használni, de ez nem minden esetben van betartva (11-13. ábra). Az ilyen készletek az egyedi molekulák felépítésén kívül alkalmasak voltak kristályrácsok és atomrácsok összeállítására is. (Bari, 1980)



Forrás: <https://wattsupwiththat.files.wordpress.com/2014/08/carbon-tetrachloride-3d-balls1.png> (2016)

11. ábra: A CCl_4 pálcamodellje

A múlt század végén az oktatásban a leggyakrabban a *kalottamodelleket* használták. Ezzel a demonstrációs segédeszközzel az atomokból kovalens kötéssel létrehozott molekulák tökéletes térkitöltését szemléltethetjük. Ezek a modellek az atomokat szimbolizáló gömböket úgy kapcsolják össze, hogy a szerkezeti elemek között nem marad üres tér. (Bari, 1980)



Forrás: <https://www.mozaweb.com> (2016)

12-13. ábra: A CH_4 kalotta és pálcamodellje

Varga Attila (Varga, 1984) hasonlóképpen az előbb felsorolt felosztással összhangban a múlt század 80-as éveiben használatos modelleket elemzi. A tanulmány célja az volt, hogy felhívja a figyelmet a pálcikamodellek alkalmazásának lehetőségeire, továbbá némi gyakorlati tanácsokkal is szolgált. Az általános iskolában használatos modelleket 5 csoportba osztja:

1. Applikációs modellek (atomok, ionok, molekulák) – a részletes szerkezet szemléltetésére szolgálnak
2. Kalottamodell (molekulák) – térkötés és méretarány szemléltetésére szolgálnak
3. Pálcikamodell (molekulák, atomrácsok) – a méretarány és kötőszög szemléltetésére szolgálnak
4. Kristályszerkezeti modell (ionrácsok, atomrácsok)
5. Régi modellek (gömb és félgömb új tartalommal).

Munkájában bővebben a pálcikamodellekkel foglalkozik, melynek jelentőségét az általános iskolai oktatásban a következőekben foglalta össze:

- A pálcikamodell hűen szemlélteti a kötőszögeket és a molekulákon belüli kötésviszonyokat
- Ha méretarányosan vannak elkészítve a modellek, akkor lehetővé teszi a molekulák méret szerinti összehasonlítását is
- A pálcikamodell alkalmas nagyobb molekulák modellezésére is
- A pálcikamodell alkalmas a molekulák térszerkezetének modellezésére és tanulmányozására is
- A pálcikamodell viszonylag könnyen kezelhető és összeállítható
- A pálcikamodell alkalmazható tanári bemutató céljaira és tanulói munkáltatásra egyaránt
- Sok kémiai folyamat modellezésére alkalmas.

A modellek egyszerű bemutatásával azonban Varga szerint nem lehet elég hatékony a megfigyelés, az észlelés. Itt is szükség van a tanulók aktív tevékenységére, a tanulókísérletekhez hasonlóan a modellekkel is foglalkoztathatjuk a tanulókat. Így a továbbiakban az alkalmazások lehetőségeit tárgyalja. Ebből számunkra a molekulák szemléltetésével és összeállításával foglalkozó rész lehet érdekes. Az általános iskolai szerves kémiai oktatásban visszaszorultnak látta a pálcikamodellek használatát. Csak néhány esetben, pl. a víz molekula, vagy

kén-dioxid molekula pálcikamodelljeinek elkészítését és bemutatását látta reálisnak. A szerves kémia tárgyalása során azonban már más a helyzet, ezen tananyag tárgyalásánál már a pálcikamodelleket használhatjuk az atomrácsok szemléltetésénél, továbbá a szénvázak összeállításánál, a homológ sorok szemléltetésénél és a szénhidrogén-származékok levezetésénél pl. metánból – metil-alkohol.

Riedel M. (Balázs, 2015) szerint a valóság egyszerűsített mását nevezzük modellnek. A természettudományos kutatásban kiterjedten alkalmazunk modelleket. Magát az embert a 18. században óraműnek, a 19. században hőerőgépnak, a 20. században pedig számítógépnak látják bizonyos kutatók. A modell a láthatatlant, a nehezen elképzelhetőket segít valószínűsíteni, ezért nagy szerepe van az oktatásban. Elég realiztikusnak kell lennie ahhoz, hogy tükrözze a valóságot bizonyos aspektusból, ugyanakkor elég egyszerűnek kell lennie, hogy megértsük, átlássuk. A sikeres modellt könnyű összetéveszteni a valósággal. Pl. 7-8. osztályban egy idő után, ha többször használjuk az atommodell-készletet, akkor a gyerekek gyakran piros oxigénatomról beszélnek, mert minden készletben piros idomok szimbolizálják az oxigénatomot.

Riedel a következő pontokban foglalta össze, mit tudunk szemléltetni a modellek segítségével:

A vegyület térszerkezetét: a molekulát alkotó atomok méretarányát, azok egymáshoz viszonyított helyzetét, a molekulában található jellegzetes atomcsoportokat, a molekula alakját, a rácsszerkezetet.

A kötések fajtái leolvashatók a molekulamodellről, ha következetesen használjuk a különböző színű kötőelemeket. A nemkötő elektronpárok száma is megállapítható.

A szerves kémiában az izoméria fogalmának kialakítása szinte elképzelhetetlen a modellek használata nélkül. Egyszerűbb kémiai reakciók is követhetők a modellekkel, például a sav-bázis vagy a szubsztitúciós reakciók.

Mojzes János (Mojzes, 1984) szerint a materiális modellek olyan kiegészítő információkkal szolgálhatnak, amelyeket az ismeretszerzés elemzési folyamatában tudunk felhasználni. A kémiai kísérletezés során olyan tapasztalatokhoz juthatunk, amelyek szerkezeti sajátságok következményei és így az anyagi modellek (de ugyanúgy a virtuális modellek is) segíthetnek a szerkezet megértésében és a mikrovilág törvényszerűségeinek megismerésében. Mojzes szerint a rácsmo-
dellek, ill. a gyűjtőfogalomként használt statikus modellek szerepe az oktatásban a demonstrálás,

azaz a bemutatás, s így a tanítási órán főleg a magyarázat szemléltetésére szolgálnak. Ettől eltérően a virtuális modelleket a diákok nemcsak a klasszikus tanári-tanulói megbeszélő órán használhatják, hanem a tanulási folyamatban olyan segédeszközként, amely segíti a tananyag megértési folyamatát.

Metodológiai szempontból fontos Mojzes János megjegyzése, amely szerint azokat a molekulamodelleket, amelyekből csak egy példányt tudunk összeállítani, demonstrációs céllal vehetjük igénybe. Mivel egy összetett molekuláról van szó, így ezen a modellen sok minden látható, ezért úgy kell irányítani a tanulók figyelmét, mint kísérletezéskor, hogy logikus sorrendben szerezzék meg a kellő információkat a modellről. Lényeges momentum, hogy a kísérleti tények után a modell segítségével próbáljuk megmutatni a tapasztalattal összefüggő magyarázatot, mert a molekulamodell összehasonlítva pl. a szerkezeti képlettel közelebb áll a valósághoz. A modell azonban segítségül szolgálhat a szerkezeti képlet megalkotásához, mert használatával és elsődleges szerepének hangsúlyozásával a tanulók térbeli látása is fejlődik. Ugyanezek a metodikai megjegyzések érvényesek a számítógépes molekulamodellek használata terén is, azonban itt a materiális modell helyett a virtuális molekulamodellt alkalmazzuk.

Zelenický (Zelenický, 2005) szerint metodológiai szempontból a modell és a modellezett objektum közötti kapcsolat a következő három feltételt kell teljesítse:

1. A modell a vizsgált objektumot helyettesíti az anyagi és a szellemi tevékenység folyamatában (a reprezentáció feltétele)
2. A modell és az eredeti objektum egybevágóak (hasonlóság), amelynek a formája pontosan meghatározott (a pontosított analógia feltétele)
3. A modell vizsgálatával információkat szerzünk az eredeti objektumról is (az extrapoláció feltétele)

A valódi helyzetek modellezett reprezentációja különböző formájú lehet, pl.:

- **Fizikai** – példaként a folyadékok részecskemodelljét hozhatjuk fel, amely lehetővé teszi annak vizsgálatát, hogy hogyan viselkednek a folyadékok molekulái pl. a hőmérséklet növekedésénél.
- **A számítógépes modellezés (szimuláció)** alatt olyan szoftvercsomagok használatát értjük, amely segítségével vizsgálhatjuk az állapotváltozók vagy más tényezők változásainak kihatását a rendszer tulajdonságaira. (Zelenický, 2005)

2.2 A gondolkodási képességek fejlesztése és a számítógépes molekulamodellezés

Az utóbbi évtizedben tapasztalhatjuk (bár ez egy korábban kezdődött tendenció), hogy a fizika és a kémia a legkevésbé kedvelt tantárgyak közé sorolható a középiskolás korú diákok körében. Mi vezetett ennek a kialakulásához? Miért nem szeretik a diákok a természettudományos tantárgyakat? Minden ország iskolarendszerében más-más ok-okozati összefüggések vezettek ide, azonban a válaszok ezekre a kérdésekre sok esetben néhány tényezőre vezethetők vissza. Szlovákiában az egyik ilyen ok a matematika térvesztése (nem kötelező érettségi tantárgy) és az ebből fakadó problémák megjelenése a logikus gondolkodás terén. Mint tudjuk a kémia és a fizika is olyan tantárgyak, amelyek igénylik a logikus és az absztrakciós gondolkodást is. Ezeknél a természettudományos tárgyaknál a foglalmak bevezetése és használata logikusan épül egymásra, az egyik ismerete nélkül nem tudjuk megismerni és megtanulni a ráépülő új fogalmat és jelenséget. Sok esetben viszont a mikrovilág jelenségeit csak bizonyos absztrakció segítségével ismerhetjük meg, aminek segítésére modelleket használhatunk. Látjuk tehát, hogy a logikus és az absztrakciós gondolkodás képességének fejlesztése előfeltétele a kémia és a fizika ismeretanyagának a jó elsajátításához, megértéséhez és ahhoz, hogy a tantárgy közelebbre kerüljön a tanulókhoz.

Dori és Kabermann (Dori, Kabermann, 2012) idézi Gabelt és Johnstonet, akik szerint a kémia három jól elkülöníthető szinten írható le: makroszkopikus (érzékelhető) szinten (látható/megfogható jelenségek), mikroszkopikus szinten (atomáris/molekuláris részecskék) és szimbolikus szinten (az anyagi szint megjelenítése képletek és egyenletek formájában). A negyedik, „folyamati”, vagy jelenségszintet a tanulmány szerint Dori egy korábbi munkájában (2003) javasolta, és ezen a szinten vegyileg tiszta anyagok képződnek, bomlanak le vagy reagálnak más anyagokkal. A diák szellemi tevékenysége visszacsatolásának tekinthető jelenségi szinten, ha két feltétel teljesül: a diák megérti a reakciót, amelyen keresztül egy új vegyület keletkezik, bomlik, vagy kölcsönhatásba lép más vegyületekkel, továbbá képes arra, hogy megmagyarázza a reakciót az első két absztrakciós gondolkodási szint szempontjából. (Dori, Hameiri, 2003) (Gabel, 1998) (Johnstone, 1991).

Balázs Katalin szerint a kémia tantárgy népszerűtlenségének az egyik oka az absztrakciós gondolkodás szükségessége. A kémia szerinte az a tantárgy,

ahol nemcsak a megfigyelhető, megtapasztalható jelenségekről beszélgetünk (makroszkopikus világ vagy szint, amint a fentiekben írtuk), hanem „bele kell látnunk” az anyag belsejébe, és számunkra soha meg nem tapasztalható szerkezetekről, részecskékről gondolkodunk (mikroszkopikus világ, nanovilág). Elvárjuk azonban azt a tanulóktól, hogy a jelenségszinten megtapasztalható anyagi tulajdonságokat, változásokat összekapcsolják a gondolatban elképzelt, sosem látott szerkezetekkel, és ezt a kettőt összefüggéseiben, ok-okozatban értelmezzék. Egy elképzelt szerkezet segítségével adjanak értelmezést bizonyos tulajdonságoknak, azaz alkossanak modellt. Így a kémia oktatásában modelleket kell alkalmaznunk, hogy ezt a fajta absztrakciós gondolkodást segítsük. A bemutatott modellekről azonban tudniuk kell a tanulóknak, hogy azok nem egy az egyben ábrázolják a valóságot, hanem annak csak néhány, általunk fontosnak, lényegesnek ítélt jellemzőjét mutatják meg. A modellezés tehát egy újabb absztrakciós szint, amelyet összefüggésbe kell hozni a valóságban megtapasztalható jelenségszinttel. Mindezekre még ráépül egy szimbólumrendszer: az anyagokat vegyjelekkel, képletekkel írjuk le (ez tehát a szimbolikus szint); a változásokat, folyamatokat reakcióegyenletekkel – amelyek természetesen mennyiségi viszonyokat is jelölnek.

A kémia tantárgyról tudni kell, hogy képes az absztrakciós gondolkodást fejleszteni, ha megfelelő módszereket alkalmazunk. Először is érdemes meghatározni a tanítandó tananyagban lévő absztrakciós szinteket: a jelenségszinttől elkülöníteni a szerkezeti szintet és a szimbólumok szintjét. Ebből az okból kifolyólag az absztrakciós gondolkodás fejlesztésével kapcsolatban Balázs a következő tanulságokat fogalmazza meg:

- a) Mindig különítsük el a jelenségszintet, a megtapasztalható „makrovilágot” az összes többi absztrakciós szinttől (pl. kísérletezés során a tapasztalat és a magyarázat egyértelmű megkülönböztetése).
 - b) A jelenségszintet mindig kapcsoljuk össze – apró, elemi logikai lépéseken keresztül – az adott absztrakciós szinttel (pl. egy anyag tulajdonsága és szerkezete közötti kapcsolat értelmezése).
 - c) Segítsük a tanulók önálló modellalkotását, és a modell alkalmazását, értelmezését (pl. animációs filmek vetítése, modellkészítés, szerepjáték).
- (Balázs, 2015).

Kozma és Russell, akiket Dori és Kabermann idéznek, úgy érvelt hogy a kémia megértése arra támaszkodik, hogy értelmezzük a láthatatlant és az érinthetlent. A kémia nagy része molekuláris szinten létezik, amely megközelíthetetlen az érzékszerveinknek, ezért a kémia eredendően reprezentációkat vagy szimbólumokat használó tudományág. A kutatók felvetették azt a kérdést, hogy vajon a kémiát tanuló diákok megértik-e a kémiában használt reprezentációk és szimbólumok kommunikatív tartalmát, amelyet a vegyészek a modern tankönyvekben használnak. Felmerült az a kérdés is, hogy a diákok rendelkeznek-e szükséges kiindulási ismeretekkel ahhoz, hogy megértsék a kémiai alapelveket a képek, képletek, diagramok és grafikonok segítségével. (Kozma és Russell, 1997)

A vegyészeknél és a kémiával foglalkozó szakembereknél többnyire kifejlődött az a képesség, hogy képként lássák a képzeletükben a molekulákat és azok leképzéseit (szerkezeti képlet, térszerkezet). Így a vizualizáció alatt a fizikai világban található tárgyak érzékelhető szimbolikus képeit értjük, amelyek a jelenségek különböző aspektusait mutatják be annak érdekében, hogy a láthatatlan látható legyen. A kémikusok különböző reprezentációkat fejlesztettek ki (pl. a modelleket) azzal a szándékkal, hogy vizsgálják a természeti jelenségeket a molekulák, atomok, szubatomi részecskék és a köztük lévő kapcsolatok magyarázatával.

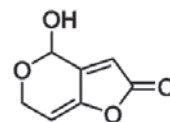
A számítógépes modellezési környezet és megjelenítési mód befolyásolhatja azon mentális modellek szerkezetét, amelyeket a diákok a tanulás során szereznek, egyben besegít abban, hogy a diákok jobb betekintést nyerjenek a szerkezet és a kémiai folyamatok közti kapcsolat különbözőségeibe. A molekulamodellező szoftverek lehetővé teszik nem csupán a kis-, de a nagy atomszámú molekulák pálcika-, kalott- vagy éppen elektron sűrűségi modellek interaktív felépítését is. Az interaktív modellező programok lehetővé teszik molekulák felépítését atomokból, továbbá megtalálni az energiaminimumhoz tartozó optimális térszerkezetet, ennek segítségével pedig meghatározni a kötéstávolságokat és kötésszögeket. Ezen programok segítségével tudjuk forgatni a molekulákat a térben, s figyelhetjük meg őket különböző szemszögből. (Kozma és Russell, 2005).

A modellezés képessége csak az intenzív gyakorlással sajátítható el. A kémiai kötés és a molekulák térszerkezete a legfontosabb témakörök egyike a kémia tananyagban a középiskolás diákok számára, azonban megállapíthatjuk, hogy még mindig hiányos a kémiai kötés alapos megértése ezen diákoknál. Ennek a megállapításnak a fényében javasolhatjuk azt, hogy a tanárok több időt szenteljenek a szimbolikus – jelenségi szint átmenet megmagyarázására, és dolgozzanak ki jól felépített érvelési rendszereket, amelyek magukba foglalják a kémia tudományág legalább három említett szintjét a négyből, amely szükséges a kémia megértéséhez. Az ilyen érvelés lehetővé teszi a diákok számára, hogy szabályozzák a tanulási folyamatukat és ellenőrizzék a válaszaik teljességét, a tanár számára pedig lehetőséget ad arra, hogy azonosítsa a tanulók téves képzeit és ismereteit és kijavítsa azokat.

Dori és Kabermann 2012-ben olyan tanulmányt hozott nyilvánosságra, amely egy új virtuális modellezési környezet oktatási és tanulási aspektusait írja le. Kutatásaiknak céljai között szerepelt, hogy megvizsgálják az ún. CMM (Computerized Molecular Modeling learning environment) virtuális tanulási környezet hatását a diákok modellezési képességeire, amely a CCL (Case-based Computerized Laboratories) virtuális laboratóriumban valósul meg. Mint tudjuk, a képességek alatt a cselekvés (és tevékenység) olyan automatizált elemét értjük, amely a tudat közvetlen ellenőrzése nélkül funkcionál. A modellező képességet a szerzők úgy értelmezték, mint a molekulák térbeli szerkezetének a megértését és annak képességét, hogy ezt az ismeretet áttanszformálják a kémia megértési szintjére.

A kutatás során, amely a modellezési képességeket volt hivatott felmérni, olyan 5 feladatot tartalmazó tesztet adtak a diákoknak, amelyek közül az utolsó kettő így hangzott:

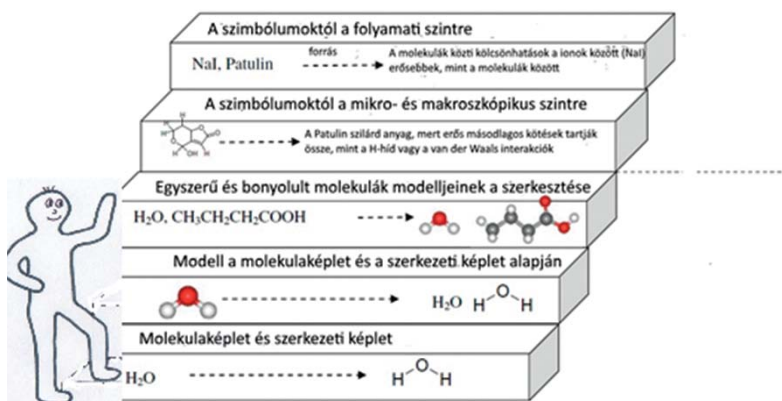
1) A patulin elektronszerkezeti képlete a következő:



Magyarázzák meg, miért szilárd halmazállapotú a patulin szobahőmérsékleten a patulinban található kötések és a szerkezet alapján!

- 2) A NaI fehér kristályos anyag, móltömege 150 g/mol, olvadáspontja 662°C, miközben a patulin móltömege 154 g/mol az olvadáspontja pedig 110°C. Írják le a NaI és a patulin olvadásának folyamatát és magyarázzák meg a két folyamat közti különbséget!

A két feladat megoldásánál használt képességeket és szub- vagy alképességeket hierarchikusan egyre nehezedő sorrendben a következő ábra szemlélteti. Ahogy a diákok egyre feljebb jutnak a lépcsőn, mindig magasabb szintű modellezési képességeket és jártasságot kell felmutatniuk, amely képességek a legalsó lépcsőfoknál a molekulaképlet szerkezeti képletté való áttanszformálásával kezdődnek, míg a legfelső szinten már eljutunk azokhoz a képességekhez is, hogy a szimbólumoktól a jelenségi szinten megmagyarázzuk a patulin és NaI olvadásának a folyamatát.



Forrás: (Dori, Kabermann, 2012)

14. ábra: A modellező képességek hierarchiája

Minden egyes lépcsőfok egy új modellezési készséget értelmez és igényel, míg a lépcsőfokok függőleges részén mindig egy példa található azokra az alkészésekre, amelyek a kérdőívben fellelhető modellezési feladatok megoldásához szükségesek.

A CMM környezet a szerzők szerint elősegíti a tanulók azon képességeit, hogy a molekuláris reprezentáció segítségével megértsék a tananyagot, tehát a

szimbolikus absztrakciós szinttől eljussanak a jelenségi szintig. Ha megfigyeljük a 14. ábrát, akkor látjuk, hogy a hierarchia legalján a diáknak meg kell érteni a molekulaképletet és ennek segítségével eljutni a szerkezeti képletig. A hierarchia legfelső lépcsőfokán pedig a diák már képes megmagyarázni az olvadás jelenségét mindkét esetben (molekularács, ionrács) és össze tudja hasonlítani ezeket a jelenségeket.

A szerzők tapasztalata alapján, miután megismertették a hallgatókkal a számítógépes molekulamodellezés egyes lehetőségeit, ezek a hallgatók egyre jobb képességekre tettek szert a szerkezeti képletek írása, a térszerkezetek ábrázolása, a molekulák különböző tulajdonságainak vizsgálata során. Jobban használták továbbá az érvelési folyamatban a kémiai gondolkodás egyes megértési szintjeit – szimbolikus, makroszkopikus és jelenségi-szintet, ami a tudásint mérhető növekedéséhez is vezetett. (Dori, Kabermann, 2012)

3. A kémiai kötés elmélete

Mint tudjuk a molekula a legkisebb mikroszkopikus egység, amely önnálóan létezhet a Földünkön. Molekulákból tevődnek össze az anyagok, amelyek az élő és élettelen természetet alkotják. Hosszú út vezetett addig, amíg az emberiség elért a molekulák és az általuk alkotott anyagok tulajdonságainak a leírásához. A 20. század elején a kvantummechanika és a relativitáselmélet a statisztikai fizika ismereteivel együtt alkották a modern természettudományos nézetek alapját, amelyek a mikrovilág tulajdonságai alapján írták le a látható makrovilág és így modhatnánk, hogy az egész univerzum törvényszerűségeit. Valójában fizikai elméletekről van szó, amelyeket mind a mai napig az anyagok, köztük a biomolekulák és más bonyolult kémiai és biokémiai rendszerek fizikai és kémiai tulajdonságainak a leírására használunk.

Az atomelméletet és a relativitáselméletet a 20. század modern fizikája állapotállapításként tekintjük. A mai modern fizikában az elemi részecskék vizsgálatában egyesül a makrovilág, univerzum és a mikrovilág sajátosságai. De a fizikusok nagy árat fizettek ezért. Át kellett értékelniük a hagyományos fizika elméletét, a fogalmaknak új értelmezést kellett adni és el kellett sajátítani a bonyolult matematikai apparátus használatát. Ezért sok tudós azt állította, hogy a mikrovilágot érintő elméleteket csak a specifikus fizikai és matematikai ismeretekkel rendelkező szakemberek sajátíthatják el, ezért ezeket az ismereteket nem vonhatjuk be a középiskolai oktatásba. (Pišút, 1998)

Ma már tudjuk, hogy ez nem teljesen így van, a kémiai kötés elmélete, amely a kvantummechanika ismeretein alapszik ma már szerves része a kémia oktatásnak. Ehhez természetesen bizonyos approximációkat (egyszerűsítéseket) kell alkalmaznunk, amely segít a kötés kialakulásának a mechanizmusát megismerni. Ismerkedjünk meg ezért ezekkel az alapvető ismeretekkel.

3.1 Hullámmechanikai atommodell

A hullámmechanikai atommodellhez vezető úton több fontos lépcsőfokot kellett megjárni, több fontos kísérleti eredményt kellett megmagyarázni az akkori ismeretek alapján. Ilyen alapkísérletek közé soroljuk az abszolút feketetest sugárzását, továbbá a fotoeffektust.

A forró objektumok elektromágneses sugarakat bocsátanak ki. Magas hőmérsékleten jól érzékelhető, hogy a sugárzás egy része a látható színek tartományba esik, és a rövid hullámhosszú, kék színű komponens aránya a hőmérséklet emelésével nő. Ez mutatkozik meg abban is, hogy a vörösen izzó vasrúd fehérre vált át, ha tovább hevítjük. Az abszolút fekete test minden frekvencián egyenletesen képes elnyelni és kibocsátani az elektromágneses sugárzást. (Atkins, 1992, 291)

Planck (1900) német fizikus jutott arra a következtetésre, hogy az abszolút fekete test nem folytonosan bocsátja ki az energiát, hanem bizonyos diszkrét értékekben (kvantumokban) és kifejezte az elemi kvantum értékét, amely a frekvenciától függ.

$$\varepsilon_f = h \cdot \nu = h \cdot \frac{c}{\lambda} \quad (1)$$

ahol a h a Planck állandó, $h = 6,626176 \cdot 10^{-34}$ J.s.

A kvantumelmélet alapgondolata tehát az, hogy a test energiája csak az elemi energiakvantum bizonyos egészszámú szorzatának mértékében változhat. Ez az energiakvantum nem konstans, hanem a frekvenciával változik.

Az elektromágneses sugárzás kvantum jellegét bizonyította az Einstein által megmagyarázott jelenség (1905), amely a fotoeffektus vagy fényelektromos hatás elnevezést kapta. Albert Einstein ennek a jelenségnek a magyarázatát adta meg azzal, hogy Planck kvantumhipotézisét a fényjelenségekre is kiterjesztette.

Az Einstein-féle ekvivalencia-elv és a kvantumelmélet kapcsolata szoros. Így ennek értelmében a részecskejellegű rendszer és a ν frekvenciájú elektromágneses sugárzás interakciójánál fellépő tömeg - és energiacsere során a rendszer ΔE energiaváltozása a frekvenciától függ, továbbá ennek az ekvivalenciaalapelvnek az értelmében a fotonnak mint részecskének tömeget (valójában impulzust - $p_f = c \cdot m_f$) rendelhetünk:

$$m_f = \frac{\varepsilon_f}{c^2} = \frac{h \cdot \nu}{c^2} = \frac{h}{c \cdot \lambda} \quad (2)$$

azaz

$$p_f = c \cdot m_f = \frac{h \cdot \nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (3)$$

Ezekből az összefüggésekből világosan kitűnik, hogy a λ hullámhosszú elektromágneses sugárzás fotonja úgy viselkedik, mint egy olyan részecske, amelynek p impulzusa van. A foton tömege tehát kb. 10^{-35} kg, ami kb. ötrendbelileg kisebb, mint az elektron tömege, amely 10^{-30} kg. Ma már általánosan elfogadott nézet, hogy a fény dualisztikus jellegű, azaz részecske- ν jellege (*korpuszkuláris* – $h \cdot \nu$ energiájú fotonnyaláb) és egyben hullámjellege is van.

A Rutherford-féle planetáris atommodellből kiindulva és a kvantumelmélet eredményeit alkalmazva Niels Bohr (1913) megalkotta a saját atommodelljét, amelynek meg voltak a saját korlátai, de megmagyarázta a H atom vonalspektrumát. A Bohr-féle atommodell a klasszikus fizika nézeteiből indult ki, amely alapján a negatív töltésű részecskék bizonyos diszkrét energiájú pályákon keringenek az atommag körül. A klasszikus fizika ismereteivel meg lehetett magyarázni a H atom vonalspektrumát, azonban azt nem, hogy az elektron energiája miért diszkrét értékeket vehet csak fel (tehát miért kvantált).

Az elemi részecskékkel végzett további kísérletek is azt mutatták, hogy ezek dualisztikus jellegűek, hasonlóan a fényhez, amit már korábban említettünk.

Ezeket a feltételezéseket foglalta össze L. De Broglie (1924) francia fizikus abban a gondolatában, amelyben kifejtette, hogy bármilyen részecske mozgása (impulzusa) összefüggésben van a hullámjelleggel is. De Broglie a fotonanalógiából indult ki, így a fény esetére levezetett összefüggés általánosításával minden mozgó elemi részecskéhez egy hullámhosszt lehetett hozzárendelni. Ezzel a gondolatával a hullámmechanika alapítójává vált, ugyanis a de Broglie egyenlet a mikrorészecskék hullámmechanikájának alapegyenlete.

$$p = m \cdot v = \frac{h}{\lambda} \quad (4)$$

Ebből az összefüggésből megkapjuk a részecskék mozgásából adódó De Broglie-féle hullámok hullámhosszát,

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m \cdot v} \quad (5)$$

Az elektron sebességét a kinetikai energia képletéből fejezhetjük ki:

$$E_k = \frac{1}{2} m_e \cdot v^2 \quad (6)$$

Ha az elektron E összenergiája a kinetikai és a potenciális energiából tevődik össze, akkor a v sebességgel mozgó elektronra λ hullámhosszára a következő kifejezést kapjuk:

$$\lambda = \frac{h}{m_e \cdot v} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m_e \cdot (E - E_p)}} \quad (7)$$

Az elektron hullámjellegét 1925-ben Erwin **Schrödinger** fogalmazta meg az ő nevét viselő hullámegyenletében. A Schrödinger-egyenlet (továbbiakban SE) egy differenciális egyenlet, amely valójában a hullámmozgásra használt Laplace- és Maxwell-egyenletek (elektromágneses sugárzás) alkalmazása. Ezekbe az összefüggésekbe helyettesítjük a (7) – os összefüggést és így az alábbi egyenletet kapjuk:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} (E - E_p) \psi = 0 \quad (8)$$

A (8) egyenletben egy új változó szerepel – **hullámfüggvény** ψ , amely az elektront írja le, miközben az elektron helyzetének a függvénye.

A hullámfüggvény fizikai értelmezése komplikált. A klasszikus mechanikában a hullámfüggvény négyzete az energiasűrűséget adja meg, a hullámmechanikai értelmezés szerint a ψ^2 a statisztikailag vett átlagos elektronsűrűséget adja meg (valószínűségi sűrűség) az r pontban és a dV térfogati elemmel való kiszorzásával az e^- jelenlétének a valószínűségét kapjuk ebben a térfogatelemben.

$$\int \Psi \Psi^* dV = 1 \quad (9)$$

A következő lépésben szétválasztjuk a hullámfüggvény szögtől és sugártól függő (radiális) részét:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} (E - E_p) \psi = 0 \quad (10)$$

A SE megoldásaként az energiaminimumokhoz tartozó különböző E energiaértékeket kapunk a hozzátartozó ψ hullámfüggvényekkel. A hidrogénszerű atomok esetében az energiaértékeket a következő összefüggésből számoljuk ki, amelyet a SE megoldásaként kapunk:

$$E_n = -\frac{m_e \cdot e^4}{8 \cdot \varepsilon_0^2 \cdot n^2 \cdot h^2} \quad (11)$$

Ahol e az elektron töltése, ε_0 a vákuum permitivitása, és az n az ún. főkvantumszám. Az összefüggésből látható, hogy az elektron az atomban csak bizonyos diszkrét értékű energiájú lehet (amelyet az n főkvantumszám értéke határoz meg) és amit úgy fejezünk ki, hogy az elektron csak bizonyos diszkrét értékű atompályákon mozoghat, ugyanis a hidrogénszerű atomok hullámfüggvényeit atomi pályáknak nevezzük.

Az atomi pályák hullámfüggvényeit a (10) egyenlet megoldásaként kapjuk a következő alakban: $\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi)$.

Minden ilyen hullámfüggvényt, amely a SE megoldása három függvény szorzataként írhatunk fel, amelyekből az egyik az r függvénye, a másik a ϑ függvénye a harmadik pedig a φ függvénye:

$$\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r) U_{l,m}(\vartheta) V_m(\varphi) \quad (12)$$

Az utolsó két függvényt gyakran összevonjuk és a következő alakban írjuk fel:

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = U_{l,m}(\vartheta) V_m(\varphi) \quad (13)$$

Ebből a következő összefüggést kapjuk:

$$\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) \quad (14)$$

A $R_{n,l}(r)$ tagot a radiális hullámfüggvénynek nevezzük, a $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ tagot pedig a hullámfüggvény szögtől függő része, amely a gömbfüggvény elnevezést kapta. Mindegyik pályát három kvantumszámmal – n, l, m_l – határozhatjuk meg. Amikor az elektron állapotát a hullámfüggvény leírja, akkor azt mondjuk, hogy az elektron a megfelelő atomi pályán tartózkodik. Tehát ha az elektront a $\Psi_{2,0,0}$ hullámfüggvény írja le, akkor az elektron az $n = 2$, $l = 0$ és $m_l = 0$ értékek által meghatározott pályán tartózkodik. A kvantumszámokból tehát kettő (l és m_l) a szögtől függő megoldáskomponensből származik, a harmadik kvantumszám neve pedig a 11 egyenletnél a főkvantumszám, amelynek az értéke $n = 1, 2, \dots$ lehet és az atomi pálya energiáját határozza meg.

A három kvantumszám közti relációt a következő módon tudjuk kifejezni:

$$n > l \geq |m| \quad (15)$$

tehát a kvantumszámok a következő értékeket vehetik fel:

$$n=1, 2, 3, \dots; \quad l=0, 1, 2, 3, \dots, n-1; \quad m=-l, \dots, 0, 1, \dots, +l$$

A három kvantumszám teljes mértékben jellemzi az egyes atomi pályákat, azonban az elektronok jellemzésére az atomi pályákon Stern és Gerlach kísérlete alapján bevezették az s spinkvantumszámot is, amely $s = \pm \frac{1}{2}$ értékeket veheti fel. (Atkins, 1992)

3.2 Kémia kötés – alapfogalmak

Kémiai kötésen azt a kölcsönhatást értjük, amellyel két vagy több atom, vagy atomcsoport együttesének olyan állapota alakul ki, amely minimális energiával rendelkezik, és pedíg kisebb, mint amennyi a tökéletesen elszigetelt atomok vagy atomcsoportok energiáinak összege. Ha az atomokat közelítjük egymáshoz, a rendszer helyzeti energiája a távolság függvényében minimumon halad át. Megkülönböztetünk elsődleges és másodlagos kémia kötések. Az elsődleges kémiai kötések közé sorolhatóak az ionkötés, a kovalens kötés és a fémes kötés, a másodlagos kémiai kötések közé pedig a H-híd kötés, a Van der Waals-kölcsönhatás, a dipólus-dipólus kölcsönhatás és a diszperziós kölcsönhatás.

Az elsődleges kémiai kötéseknel a kémiai kötést létesítő atomok elektronegativitásának a különbsége határozza meg az adott atomok közötti kémiai kötés minőségét. Munkánkban az atomok közt kialakult kovalens kötések lesznek a mérvadóak, azért ezen kötéstípussal kapcsolatos alapfogalmakat ismertetjük az olvasóval.

A kovalens kötés kialakulásakor szabad atomokból molekulák jönnek létre. A molekulák létrejötte mindig energiacsökkenéssel jár.

Azokat a vegyértékelektronokat, amelyek részt vesznek a kémiai kötés kialakításában, *kötő elektronoknak*, azokat pedig, amelyek nem vesznek részt, *szabad* vagy *nemkötő elektronoknak* nevezzük.

A kovalens kötés egyik speciális esete, ha a kovalens kötés két elektronját az egyik atom adja (*donor*), a másik atom, amely befogad, az *akceptor*. Az így létrejövő kötést *koordinatív* (datív) *kötésnek* nevezzük. A kialakulás feltétele, hogy a donor atomnak szabad elektronpárja (i) legyen, az akceptor atomnak legalább két elektronja hiányozzék a stabilis nemesgáz konfigurációjához.

Két atom között, ha két-két vagy három-három párosítatlan elektronnal rendelkeznek, többszörös kovalens kötés jöhet létre, amely két párosítatlan elektron esetében kétszeres kovalens kötés vagy három párosítatlan elektron esetében háromszoros kovalens kötés. Kétszeres kovalens kötés kialakítására a C, N, O és S, háromszoros kovalens kötés kialakítására csak a C és N atom képes. A kémiai kötés kialakulásakor az atommagok közel kerülnek egymáshoz, így kölcsönhatásba lépnek, miközben a potenciális energiájuk csökken. Ha az atommagok a kovalens kötés egyensúlyi hosszánál közelebb kerülnek egymáshoz, az azonos töltéssel rendelkező atommagok közötti taszító erők lépnek fel. A két atommag közötti egyensúlyi távolságot a kovalens kötés kialakulásánál *kötéshossznak* vagy *kötéstávolságnak* nevezzük.

A *kötési energiának* vagy a kémiai kötés *disszociációs energiájának* nevezzük azt az energiát, amely 1 mol adott kovalens kötés felszakításához szükséges. Ennek az energiának az abszolút értéke a potenciális energia minimuma energiaértékének felel meg. A kovalens kötésnél kisebb a kötéstávolság, azaz minél közelebb vannak egymáshoz az atomok és erősebben vannak kötve, annál nagyobb a kötési energia. Ez az eset áll fenn a többszörös kovalens kötések esetében is, ahol kisebb a kötéstávolság és így a molekula képződésekor több energia szabadul fel.

Az amerikai Lewistől származott az a feltevés, hogy 2 azonos atom közti kötés kialakulásánál a 2 különböző atomtól származó 2 kötőelektron a 2 atomnak a közös elektronpárjává válik, tehát a kötés két elektronja mindkét atomhoz egyaránt tartozik (Lewis-féle elektronpár). Ő vezette be a kovalens kötés fogalmát is, továbbá a többszörös kötés fogalmát is. Ez a Lewis-féle elképzelés bizonyos javításokkal pl. a konjugált π -rendszerekre vonatkozóan mind a mai napig a szerkezeti képletek felírásának alapját alkotja.

Ha két azonos atom között jön létre kovalens kötés, akkor a molekulában a töltéseloszlás egyenletes lesz, így a kötést létrehozó két atom körüli elektronsűrűség is azonos lesz. Ezáltal a kovalens kötés *apoláris* lesz. Ha a kötés két különböző elektronegativitású atom között jön létre, a töltéseloszlás nem lesz egyenletes. A molekulában az atomok elektronegativitásának a függvényében kialakul egy parciális negatív (δ^-) és egy részleges pozitív (δ^+) töltés, a kovalens kötés *poláris*sá válik.

A molekulák polaritását a kovalens kötés polaritása mellett a molekula szimmetriája is befolyásolja. Ha a kovalens kötés apoláris, akkor a molekulának nincs dipólus momentuma, azaz a molekula apoláris. Poláris molekulákban – mint láttuk – az elektronok eloszlása aszimmetrikus, a pozitív és a negatív elektromosság súlypontja nem esik egybe: a molekula *permanens dipólusként* viselkedik. Ha a pozitív és a negatív töltés súlypontja d távolságra van egymástól, akkor a dipólus hatását jellemző permanens *dipólusmomentum*: $\mu = Q \cdot d$. Ez vektor jellegű mennyiség, a kötés mentén az elektronegatívabb atom felé mutat. Leggyakrabban használt mértékegysége a debye (D), $1D = 3,34 \cdot 10^{-30}$ C.m. (Žúrková, 1984)

3.3 A kémia kötés modern elméletei

A hullám-mechanika ismeretein alapszik, azonban a vegyészek számára problémák merülhetnek fel ennek az elméletnek az értelmezésével és megértésével. Mint látni fogjuk, az elmélet levezetéséhez bizonyos matematikai apparátust is használnunk kell, továbbá a vegyészeknek, de ugyanúgy a kémiatanári pályára készülő hallgatók számára is problémát okozhat az elektron dualisztikus jellegének (hullám-részecske) pontos megértése és az ismeretek helyes alkalmazása. A hullám mint az energiaátvitel és konzerválás egyik legjelentősebb eszköze azonban nehezen szemléltethető, mivel az emberi tapasztalat inkább a makroszkopikus testekre vonatkozik.

A VB – Valence Bond – Vegyértékkötés-elmélet szerint a kémiai kötést az ellentétes spinnel párosított elektronok hozzák létre. Heitler és London a kvantummechanika eszközeit alkalmazták a H_2 molekula szerkezetének leírására, és a számításaik alapján két eltérő hullámfüggvénnyel leírható állapot létezik.

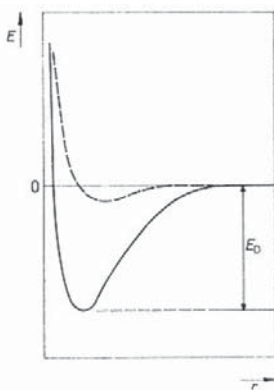
A hidrogén molekulát úgy tanulmányozhatjuk, hogy megoldjuk a SE-t mindkét hidrogén atomra és aztán egymáshoz közelítjük őket. Vegyük a H_A és a H_B hidrogén atomokat, amelyek olyan távol vannak egymástól, hogy nincs közöttük semminemű kölcsönhatás. Ha a H_A atom elektronját 1-el a H_B atom elektronját pedig 2-el jelöljük, akkor a két atomi pályát, amelyeken az elektronok vannak, így írhatjuk le: $\psi_A(1) \psi_B(2)$.

Ha a két atomot közelítjük egymáshoz egy bizonyos távolságnál, amely a potenciális energia görbéjének minimumának felel meg (15. ábra), mindkét elektron mindkét atommag vonzáskörébe kerül, és mivel az elektronok megkülönböztethetetlenek, így fel is cserélődhetnek: $\psi_A(2) \psi_B(1)$.

Ez az állapot, amikor az atommag vonzaskörében egy e^- van, azonban ezek felcserélődhetnek, a következő hullámfüggvénnyel írható le:

$$\phi_{VB} = \psi_A(1)\psi_B(2) \pm \psi_A(2)\psi_B(1) \quad (16)$$

A VB-elmélet szerint tehát az elektronok tulajdonképpen az atompályákon maradnak, de ezek átfedése következtében kötés jön létre. A Valence Bond-módszer a számításokban kevésbé elterjedt, ugyanakkor a kémiai szemlélethez közelebb áll: a kötésekhez (atompárokhoz) rendel függvényeket – s ezekből épül fel a teljes hullámfüggvény.



15. ábra: A H_2 molekula kialakulásának potenciálgörbéje (Vacík, 1986)

A hidrogén molekula kötéseinek megmagyarázására alkalmazott következő hullámmechanikai elmélet a Mulliken és Hund nevéhez fűződő MO (molekulapálya) módszer. A diák megismerési folyamatának szempontjából itt a hozzáállás fordított, mint a VB elméletnél. A molekula keletkezését egy hipotetikus – elméleti atom létezéséből vezetjük le, amelynek azonos számú elektronja van és olyan magja, amely felhasadásával az új molekula mindkét atomját megkaphatjuk. A H_2 molekula esetében az ilyen hipotetikus atom magjában A és B protonokat tartalmaz és az elektronburokban $2 e^-$ van. Ha a két protont kötéstávolságra távolítjuk el egymástól, akkor a hipotetikus atomból H_2 molekula keletkezik, miközben mindkét e^- az A és a B magok vonzaskörében lesz. Az ilyen állapotot leíró hullámfüggvényt molekulapályának (MO) nevezzük és ϕ_{MO} -val jelöljük. A megoldásra váró probléma az, hogyan kapjunk egy ilyen molekulapályát. Erre használjuk az atompályák lineáris kombinációját (LCAO – Linear Combination of Atomic Orbitals). Ebben az esetben az elektron

leírásának megközelítési módszerét használjuk. Tehát ha az 1-es számú elektron az A jelzésű atommag közelében van, azt a $\psi_A(1)$ hullámfüggvénnyel írhatjuk le. Ha a B jelzésű atommag közelében van, akkor $\psi_B(1)$ hullámfüggvényt használunk. Az elektron viselkedésének a leírására mindkét mag közelében az LCAO módszert használjuk, így megkapjuk a $\phi(1)$ molekulapályát, mint az atomi pályák lineáris kombinációját.

$$\phi(1) = c_1\psi_A(1) + c_2\psi_B(1) \quad (17)$$

A molekula szimmetriájából adódik, hogy, a következő két molekulapályát kapjuk:

$$\phi(1) = \psi_A(1) \pm \psi_B(1) \quad (18)$$

Analóg módon a másik elektront is leírhatjuk:

$$\phi(2) = \psi_A(2) \pm \psi_B(2) \quad (19)$$

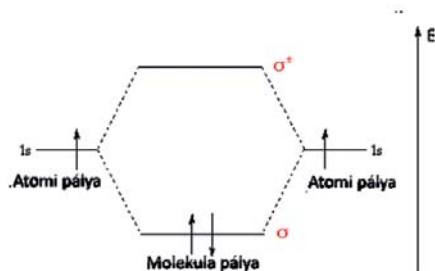
Az elektronok mozgását mindkét atommag vonzáskörében a teljes hullámfüggvény írja le:

$$\begin{aligned} \phi_{MO} = \phi(1)\phi(2) &= [\psi_A(1) \pm \psi_B(1)][\psi_A(2) \pm \psi_B(2)] = \psi_A(1)\psi_A(2) + \\ &\psi_B(1)\psi_B(2) \pm \psi_A(1)\psi_B(2) \pm \psi_A(2)\psi_B(1) \end{aligned} \quad (20)$$

A $\psi_A(1)\psi_A(2)$ tag azt az állapotot írja le, amikor mindkét elektron az A atommag vonzáskörében van, tehát a $H_A^-H_B^+$ ionállapotot írja le, a $\psi_B(1)\psi_B(2)$ pedig a $H_A^+H_B^-$ ionállapotot. Ez a két tag a két H atom közt kialakult kötés ionos hozzájárulását írja le, míg a $\psi_A(1)\psi_A(2) + \psi_B(1)\psi_B(2)$ pedig a kötés kovalens részét írja le. A levezetésből látjuk, hogy a VB elmélet a kötés ionos hozzájárulását elhanyagolja, míg az MO elmélet pedig felülértékeli. Ezt az approximációt nevezzük az egyelektronos molekulapálya leírásnak, amikor is figyelembe vesszük minden elektront viselkedését az atommagok és a többi elektron környezetében. Ha nem ezt a megközelítést alkalmazzuk, akkor a molekulapálya hullámfüggvényét a következő egyszerűbb módon írhatjuk le (Vacík, 1986, 58-60):

$$\phi_{MO\pm} = \psi_A \pm \psi_B \quad (21)$$

A $\phi_{MO\pm}$ kombinációt kötő molekulapályának nevezzük, míg a ϕ_{MO-} pedig a lazító molekulapálya. A két hullámfüggvény lineáris kombinációjaként σ -pályáknak nevezzük, amelyeket az jellemez, hogy a két magot összekötő tengelyre nézve hengerszimmetrikusak (Žúrkova, 1984). A molekulapályák kialakulását az atompályákból ún. energiaszint diagrammal szemléltetjük. Pld. a hidrogénmolekula esetében ez így néz ki (csillaggal jelöljük a lazító pályákat):



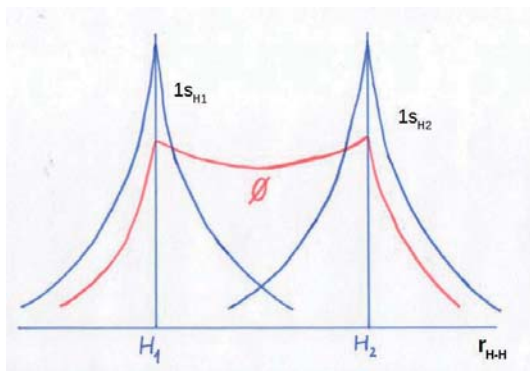
16. ábra: A H_2 molekula molekulapályáinak energiadagrammja

Hullámmechanikai szempontból a kötés kialakulását úgy közelíthetjük meg, mint a két hidrogénatom vegyértékelektronjainak közeledését egymáshoz (vagy általánosan két olyan hullámfüggvényekkel leírt elektronállapot közeledését és kölcsönhatását), amelyek $1s_H$ állóhullámokkal vannak leírva – ezek az $1s_H$ atompályák (AO). Ha két hullám közeledik egymáshoz, kölcsönhatásba lépnek. A H_2 molekula esetében, ha két $1s_H$ AO közeledik egymáshoz és fázisban interferál (17. ábra), akkor egy ún. „molekulahullám” keletkezik, amelyet kötő molekulapályának nevezünk (MO):

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2}} \times [1s_{H_1} + 1s_{H_2}] \quad (22)$$

Ha a két $1s_H$ AO közeledik egymáshoz és ellenfázisban interferálnak, akkor lazítópálya (MO - ϕ^*) keletkezik:

$$\phi^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \times [1s_{H_1} - 1s_{H_2}] \quad (23)$$



Forrás: saját ábra

17. ábra: Az $1s_H$ atompályák interferenciájának és a ϕ molekulapálya keletkezésének sémája

Az elektronsűrűséget a kvantummechanikában a hullámfüggvény négyzetével fejezzük ki, tehát egy MO esetében mint a kötő molekulapálya négyzetét, azaz ϕ^2 . A két vegyértékhéjon található $1s_H$ AO közti fázisban történő (vagy kötő) interferencia következménye az elektronsűrűség megnövekedése a két atom közti térben, ami a valóságban a kovalens kötés kialakulását okozza. Az elektronsűrűség megnövekedését a következőképpen fejezhetjük ki:

$$\Delta\rho = 2\phi^2(r) - [1s_{H_1}^2(r) + 1s_{H_2}^2(r)] \quad (24)$$

A $\Delta\rho$ valójában az elektronsűrűség (változását – növekedését vagy csökkenését) fejezi ki a hidrogén molekulában (pl. az r helyzeti vektorral meghatározott pontban) összehasonlítva az eredeti „izolált” hidrogénatomok elektronűrűségével, tehát azzal az esettel, mintha az $1s_{H_1}$ és $1s_{H_2}$ atomorbitálok hullámfüggvényei a közeledés folyamán nem interferálnának. (Kysel, 2004)

Mint láthatjuk, ezek az összefüggések nem bonyolultak, azonban látni ezen összefüggések mögött a fizikai lényegét, és megmagyarázni a kémiai kötés kialakulását a molekulában a hallgatóknak olykor elég nehéz feladat, ezért szükséges az olyan módszerek és eszközök bevezetése a kémiatanár képzésbe, amelyek ezt lehetővé teszik.

3.4 Hückel-féle MO elmélet

A molekulapálya modellel természetes módon vizsgálhatóak nagy molekulák és kiterjedt atomrendszerek. Az egyik ilyen eset a konjugált molekulák, amelyek szénláncában egyes és kettős kötések váltakoznak.

A konjugált molekulák π -molekulapályáinak számításaival Erich Hückel foglalkozott. Az általa bevezetett közelítő módszer segítségével megszerkeszthetjük a π -molekulapályák energiadiagrammját, és kiszámíthatjuk az egyes pályakoefficienseket is. A Hückel-féle megközelítésben a π -molekulapályákat a σ -molekulapályáktól függetlenül vizsgáljuk. A σ -molekulapályák adják az egyes molekulák vázát, amely meghatározza a molekula térbeli elrendeződését is. A molekula vázában minden C atomot azonos módon kezelünk, így a kételektronintegrálokat (Coulomb-integrálokat), melyekben a pályák egy atomon vannak, azonosnak tekintjük és α -val jelöljük. A Coulomb-féle integrál egyszerűsített formában az elektron potenciális energiájaként interpretálható. A kétatomos kételektronintegrálok közül azokat, melyek egymáshoz σ -kötéssel kötött atomok között vannak, β -val jelöljük. Pl. az etén esetében, ha a σ -vázat rögzítettnek vesszük, akkor a számításokat csak a 2 π -molekulapálya jellemzőinek meghatározására összpontosítjuk. A 3 C atomot tartalmazó (a π -elektronok számában az ózonnal izoelektronos szerkezetű) allil anion esetében a 3 π -molekulapálya jellemzőinek meghatározása a célunk. A meghatározott energiaszintek alapján célunk megállapítani az elnyelt UV elektromágneses sugárzás hullámhosszát.

A π -molekulapályákat az MO-LCAO elv alapján a szén atomok 2 p_z atompályáinak lineáris kombinációjával kapjuk meg. Pl. az etén esetében:

$$\psi = c_A\psi_A + c_B\psi_B \quad \psi = c_A\psi_A + c_B\psi_B \quad (25)$$

Az allil anion esetében:

$$\psi = c_A\psi_A + c_B\psi_B + c_C\psi_C \quad (26)$$

a butadién esetében pedig:

$$\psi = c_A\psi_A + c_B\psi_B + c_C\psi_C + c_D\psi_D \quad (27)$$

Az egyenletekben a ψ_A , ψ_B , ψ_C , ψ_D , az A, B, C, D szénatomokon centrált $2p_z$ atompályák hullámfüggvényei a c_A , c_B , c_C , c_D pedig az adott C atomok kiszámított együtthatói.

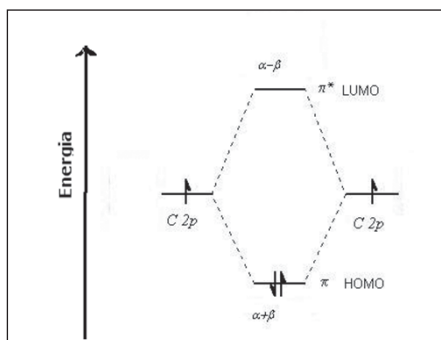
A Hückel féle megközelítésnél az optimális energiákat és együttthatókat az ún. variációs módszerrel határozzuk meg, amelynél felírjuk az ún. szekuláris determinánst ($\alpha_A = \alpha_B = \alpha_C = \alpha_D = \alpha$ egyszerűsítéssel), amely egyenlő nullával.

Az etén esetében a szekuláris determináns a következő:

$$\begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & \beta \\ \beta & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

Az egyenlet gyökei pedig:

$$\varepsilon_{\pm} = \alpha \pm \beta$$



Forrás: Saját ábra

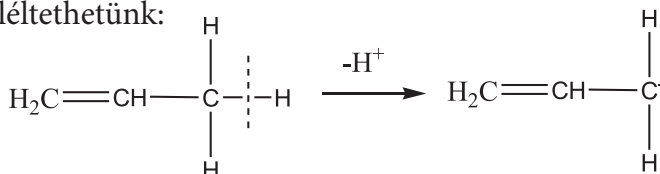
18. ábra: Az etén molekulapályáinak energiadiagrammja

A + előjel a kötő kombinációnak (kötő molekulapályának) felel meg, a – pedig a lazító kombinációnak (18. ábra).

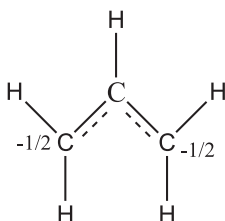
A β értéke paraméter, a $\pi(C 2p_z, C 2p_z)$ átfedés esetében durván -75 kJ/mol, azaz -0,8 eV-nak felel meg.

A legnagyobb energiájú betöltött π -molekulapályát az angol megfelelőjéből HOMO-nak nevezzük, a legkisebb energiájú betöltetlen molekulapályát pedig az angol megfelelőjéből LUMO-nak nevezzük. Ez a két molekulapálya együttesen a molekula határpályái, amelyek sok fontos jellemzőt határoznak meg, köztük a molekulák kémia és spektroszkópiai sajátságait is. (Atkins, 1992)

Az allil rendszerek a propén molekulából keletkeznek, amit a következő módon szemléltethetünk:



Ha nem vesszük figyelembe az egyes rezonanciás határszerkezeteket, akkor megállapíthatjuk, hogy az allil anion valóságos szerkezete a következő:



Az allil anion esetében a szekuláris determináns:

$$\begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & \beta & 0 \\ \beta & \alpha - \varepsilon & \beta \\ 0 & \beta & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

Az $x = \frac{\alpha - \varepsilon}{\beta}$ helyettesítéssel a következőképpen egyszerűsödik a szekuláris determináns:

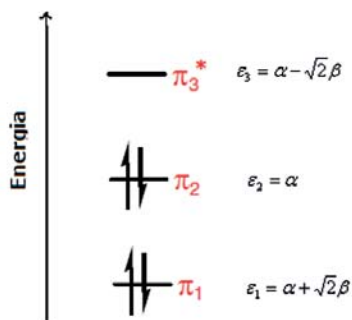
$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 \\ 1 & x & 1 \\ 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

Az adott egyenlet gyökei: $x = -\sqrt{2}$, $x = 0$, $x = \sqrt{2}$.

A gyökökhöz tartozó energiaszintek pedig a következők:

$$\varepsilon_1 = \alpha + \sqrt{2}\beta, \varepsilon_2 = \alpha, \varepsilon_3 = \alpha - \sqrt{2}\beta.$$

Az ε_1 energiaszinthez tartozó π_1 -molekulapálya a kötőpálya, a π_2 -molekulapálya nem kötő pálya a π_3^* -molekulapályát pedig a lazító pályák közé soroljuk. (19. ábra)

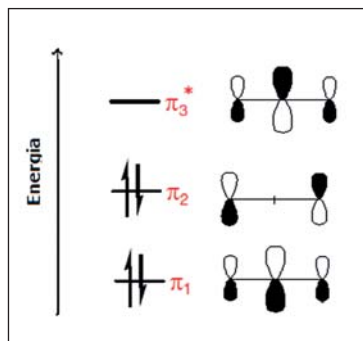


Forrás: Saját ábra

19. ábra: Az allil anion molekulapályái és pályae energiái

Az egyes molekulapályák hullámfüggvényeit az alábbi módon írhatjuk fel és ábrázolhatjuk (20. ábra):

$$\psi(\pi_1) = \frac{1}{2}(p_1 + \sqrt{2}p_2 + p_3), \psi(\pi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 - p_3), \psi(\pi_3) = \frac{1}{2}(p_1 - \sqrt{2}p_2 + p_3)$$



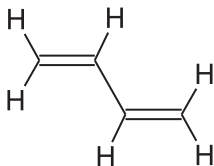
Forrás: Saját ábra

20. ábra: Az allyl anion Hückel-féle molekulapályái

Butadién

A páros számú C-atom számú konjugált rendszerek közül a butadién az egyik modellszerű π -rendszer, mivel a C atomok száma 4, a szekuláris determináns típusa 4×4 , így bizonyos approximációkkal megoldható. Megoldásaként megkapjuk a szekuláris egyenletek gyökeit, a hozzá tartozó energiaszinteket és a molekulapályák együtthatóit. (Streitwieser, 1968)

Ha nem vesszük figyelembe az egyes rezonanciás határszerkezeteket, akkor megállapíthatjuk, hogy a butadién valóságos szerkezete a következő:



A butadién esetében a szekuláris determináns:

$$\begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha - \varepsilon & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha - \varepsilon & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

Az $x = \frac{\alpha - \varepsilon}{\beta}$ helyettesítéssel a következőképpen egyszerűsödik a szekuláris determináns:

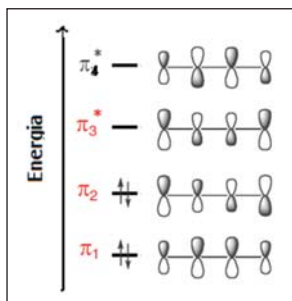
$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 0 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 0 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

Az adott egyenlet gyökei: $x_1 = -1,62$, $x_2 = -0,62$, $x_3 = 0,62$, $x_4 = 1,62$.

A gyökökhöz tartozó energiaszintek pedig a következők: $\varepsilon_1 = \alpha + 1,62 \beta$, $\varepsilon_2 = \alpha + 0,62 \beta$, $\varepsilon_3 = \alpha - 0,62 \beta$, $\varepsilon_4 = \alpha - 1,62 \beta$. Az ε_1 , ε_2 energiaszintekhez tartozó π_1 és π_2 -molekulapálya a kötőpálya, a π_3 és π_4 -molekulapálya molekulapályákat pedig a lazító pályák közé soroljuk.

Az egyes molekulapályák hullámfüggvényeit az alábbi módon írhatjuk fel és ábrázolhatjuk (21. ábra):

$$\psi(\pi_1) = \frac{1}{2}(p_1 + p_2 + p_3 + p_4), \quad \psi(\pi_2) = \frac{1}{2}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4), \quad \psi(\pi_3) = \frac{1}{2}(p_1 - p_2 - p_3 + p_4), \quad \psi(\pi_4) = \frac{1}{2}(p_1 - p_2 + p_3 - p_4)$$



Forrás: Saját ábra

21. ábra: A butadién Hückel-féle molekulapályái

3.5 A számításoknál használt báziskészletek

Röviden és olyan mértékben ismertetjük a kvantumkémiai számításoknál használatos hullámfüggvény bázisokat is, hogy ezt használni tudjuk a feladatok megoldásánál. Ha vesszük az atomszerkezet fizikai értelmezését, akkor látjuk, hogy ez a szemlélet csak az atomtörzs elektronjainak atompályáit és a vegyértékhéj atompályáit veszi figyelembe, betartva a Pauling-féle tilalmi elvet, tehát hogy max. 2 párosított spinű elektron foglalhat el egy atomorbitált (AO). Leegyszerűsítve, az ilyen atompályák (atomorbitálok) csoportja alkotja a minimális bázist. Az ilyen bázis segítségével megkapjuk a teljes hullámfüggvényt, amely felhasználásával

azonban nem kapunk pontos eredményeket. Ezért a pontosabb és megbízhatóbb eredmények elérése érdekében jobb hullámfüggvényt kell konstruálnunk, tehát egy nagyobb számú hullámfüggvényt tartalmazó báziskészletet szükséges használnunk. A minimális bázis hasonlít leginkább a köznapi értelemben vett atompálya fogalmához, ekkor ugyanis pl. a hidrogénen a bázis egy darab s típusú függvényből áll, a lítiumon egy 1s és egy 2s típusú függvényből, a szénatomon pedig egy-egy 1s, 2s, $2p_x$, $2p_y$ és $2p_z$ típusú függvényből atompályából. Az ún. kétszeres zéta (double zeta, DZ) bázis az atompályákat megkétszerezi, tehát a szénen az atompálya függvények: 1s, 1s', 2s, 2s', $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$, $2p_x'$, $2p_y'$, $2p_z'$. Hasonlóképpen a TZ, QZ, PZ bázisokban a függvények száma három-, négy-, ill. ötszöröse a minimális bázis függvényeinek. Jelenleg leggyakrabban a Gauss-függvények által leírt Gauss-típusú pályák (Gaussian type orbital, GTO) báziskészleteit használjuk, tehát a ma használatos bázisok túlnyomó többsége a Gauss-függvényeken alapul. A másik típusú báziskészlet a Slater típusú pályák (Slater type orbital, STO) hullámfüggvényein alapul. A számítási tapasztalat azt mutatja, hogy a könnyű és gyors integrálás ellentételezése a nagyobb bázis, ahhoz azonban, hogy az STO-k minőségét elérjük, 2-4-szer annyi GTO-ra van szükség, de a számítási gépidők azt mutatják, hogy még így is megéri ezeket használni!

A GTO-k segítségével a három vagy négy atomra centrált integrálok számítása két atomra centrált integrálokra redukálódhat, amely nagy számítási előny. Az STO-kat tehát GTO-kal helyettesíthetjük pl. az alábbi képlet alapján:

$$\exp(-r) = \sum_{k=1}^N a_{1k} x. \exp(-\alpha_{1k} r^2) \quad (28)$$

vagy

$$r \times \exp(-r) = \sum_{k=1}^N a_{2k} x. \exp(-\alpha_{2k} r^2) \quad (29)$$

Az a és az α együtthatókat a lineáris regresszió módszereivel határozhatjuk meg. A GTO-k száma – n – alapján, amelyekkel az STO-kat helyettesítjük a bázis STO- n G jelölést kap. Tehát ez egy minimális bázis, melyben minden atompályát (STO-t) n darab primitív Gauss-függvény lineáris kombinációjából rakunk össze. Példának felhozhatjuk, hogy a STO-3G bázis a 70-es években nagy népszerűségnek örvendett, azonban ma már csak ritkán használják.

1. Pople és munkatársai dolgozták ki az ún. felhasított vegyérték (split valence) bázist, melynek lényege, hogy a belső héjak egyszeres zeta, a vegyértékhéjak DZ vagy TZ minőségűek. Pl. a 3-21G bázisban az első szám a belső pályák összetételét, a következő két szám a vegyértékhéjat jellemzi. A relatív kis 4-31G, 6-31G vagy 3-21G bázisok esetében csak a vegyértékhéj atompályái hasadnak fel, így az ilyen típusú bázisok sokkal flexibilisebbek, mint a minimális bázisok, és jobban leírják az elektroneloszlást molekulákban a kémiai kötés kialakulásánál.
2. A bázisokat kiegészíthetjük polarizációs és diffúz függvényekkel is. A polarizációs függvények valójában a bázisfüggvények deriváltjait helyettesítik. A derivált számításával az atom környezetére kapunk információt, így helyettesíthetjük ezzel a módszerrel az atomok közé elhelyezett bázisfüggvényeket is. Így tehát a hidrogénatom esetében a polarizációs függvény p vagy d típusú, a második sor atomjai esetén d, f,... típusú lehet. Ezek a hozzáadott függvények a bázist – mint már az előbb említettük – flexibilisebbé teszik, hatásuk pedig észrevehetően javítja az elektronszerkezet leírását, sokszor pedig nélkülözhetetlenek. A polarizációs függvényeket vagy a bázis neve után tett *-gal, vagy zárójelben megfelelő betűkkel jelöljük. Pl. a 6-31G* ill. 6-31G(d) azt jelenti, hogy a molekula minden atomján 6-31G bázist használunk, és a nem-hidrogén atomokon egy sorozat (6 darab) d-típusú függvényt. A 6-31G** ill. 6-31G(d,p) esetében az előző bázist még kiegészítjük a H-atomokon 3-3 p-típusú függvénnyel is. A 6-31G (2d, 2p) bázis esetén a 6-31G bázist a hidrogének 2 sorozat (2×3) p-pályával, a nem-hidrogének 2 sorozat (2×6) d-pályával egészítjük ki. (Veszprémi, Fehér, 2000)

A számításokban használt bázist általában a módszer után tüntetjük fel, a módszer és a bázis közé ferde vonalat téve, pl. HF/6-31G*, UHF/aug-cc-pVDZ, stb.

A gyenge molekulák (A és B molekula) közti kölcsönhatások energiája egyszerűen a végtermék (AB) a szupermolekula energiájának és a kiindulási komponensek energiájának a különbségeként számítható:

$$\Delta E_{int} = E^{AB} - E^A - E^B \quad (30)$$

A számításnál alkalmazott bázisnak garantálnia kell minden résztvevő molekulán belül a hullámfüggvény pontos leírását. Ha teljes bázist használunk, akkor ennek a követelménynek eleget teszünk. Az említett véges számú hullámfüggvényt

használó bázisok esetében viszont problémák adódhatnak még akkor is, ha a módszer méretkonzisztens. Ugyanis a szupermolekula egyik komponense – a kölcsönhatás egyik molekulája – által fel nem használt bázisfüggvényeket (virtuális pályákat) a szupermolekula másik fele még használhatja, ugyanúgy, mint a másik molekula által nem használt bázisfüggvényeket a szupermolekula első molekulája. Ezt a tényt egyértelműen meg tudjuk határozni a molekulapályák lineáris együtthatóiból. Az izolált monomerek (A és B) viszont csak a saját báziskészletükkel gazdálkodhatnak. Ennélfogva a szupermolekula bázisa formálisan kiterjedtebb, mint a monomereké. Így tehát ha bármely véges számú hullámfüggvényt tartalmazó bázist alkalmazunk a szupermolekula tulajdonságainak kvantumkémiaili kiszámítására, a kapott eredmény elvileg nem konzisztens a különálló monomerek tulajdonságainak ugyanazon bázisban végzett kvantumkémiaili számításaival. Mivelhogy az teljes energiát (Total energy) a variációs elv alapján számoljuk ki, így a nagyobb bázis alacsonyabb értékű teljes energiához, ennél fogva a kiszámított kölcsönhatási energia a valóságosnál nagyobb lesz. Ezt a hibát a bázis szuperpozíciós hibának nevezik (Base Superposition System Error, BSSE). A szupermolekulában lévő kisebb monomer egységek egymásnak „kölsönzött” bázisai, nem okoznak hibát. A hiba oka a monomer és a dimer bázisainak kiegyensúlyozatlanságából következik. A BSSE csökken a bázis növelésével. Azonban megessik az is, hogyha azonos nagyságú bázis mellett nagyobb pontosságú számításokat alkalmazunk, akkor a BSSE is gyakorta növekszik. Ennek az oka az, hogy a nagyobb pontosságú számítások nagyobb mértékben használják a virtuális pályákat. Amennyiben a bázis nem megfelelő nagyságú, a BSSE értéke gyakran a kölcsönhatási energia nagyságát közelíti meg, ezért figyelembevétele, illetve kompenzálása elengedhetetlen a számítások pontossága végett. Ez különösen a gyenge kölcsönhatások (hidrogén-híd kötés, Van der Waals-komplexek) során fordul elő.

A BSSE becslésére és korrigálására a leggyakrabban használt módszer a Boys és Bernardi által kidolgozott ún. counterpoise (CP) módszer (Boys, Bernardi, 1979). A módszer szerint a szupermolekula monomer egységeit a szupermolekula teljes bázisával számítjuk, ezáltal a BSSE kiküszöbölhető:

$$\Delta E_{cp} = E^{AB} - E^{A(AB)} - E^{B(AB)} \quad (31)$$

Az $E^{A(AB)}$ és $E^{B(AB)}$ a monomerek teljes energiája a szupermolekula teljes energiájának számításakor használt bázisban. Módszertanilag tehát úgy járunk el, hogy az első molekula bázisához hozzáillesztjük a második molekula bázisfüggvényeit, még hozzá a második molekula atomjainak a szupermolekulában optimalizált helyeire, úgy, hogy nem vesszük figyelembe a második molekula atomjait. Ezek az ún. szellem – ghost pályák. Az így kiegészített bázissal számítjuk az első molekula energiáját $E^{A(AB)}$ -t majd ugyanígy a második molekulára $E^{B(AB)}$ -t, és ezek alapján a BSSE-t:

$$E_{\text{BSSE}} = E^{A(AB)} - E^{B(AB)} - E^A - E^B \quad (32)$$

4. A számítógépes molekulamodellezés gyakorlati alkalmazása a kémiaoktatásban

A következő fejezetben a számítógépes molekulamodellezés gyakorlati alkalmazását kívánjuk bemutatni iskoláinkon, kiindulva a szlovákiai magyar középiskolákon szerzett visszajelzésekből. Ha számba vesszük a felmérés eredményeit és a saját szakmai tapasztalatainkat, megállapíthatjuk, hogy a szemléltetés eme módszere csak gyerekcipőben jár iskoláinkon. A logikus és az absztrakciós gondolkodás erősítése céljából azonban elhanyagolhatatlan és kihagyhatatlan a kémiaoktatás tanmenetéből. Ezért a módszer elsajátítását a kémiatanári pályára készülőknel kell elkezdni, erre mutatunk be ebben a fejezetben néhány szemléltető feladatot alacsonyabb nehézségi foktól nehezebb feladatokig. Bonyolultabb, kvantumkémiailag alapismeretek is igénylő feladatokat találhatunk a (Foresman, 1996) és (Hehre, 1993) irodalomban, továbbá a kvantumkémiailag programcsomagok mellékleteként. Az ilyen feladatok megoldása azonban már túlzott nehézségeket okozhat a kémiatanári pályára készülőknek, így ilyen nehézségi fokú feladatokat nem tüntetünk fel az ajánlott feladatok között.

4.1. A számítógépes molekulamodellezés a kémiaoktatásban a szlovákiai magyar középiskolákban

Az 1993-as felmérés megmutatta azokat a hiányosságokat, amelyekkel a szlovákiai magyar gimnáziumok küzdöttek, beleértve a kétnyelvűségből eredő hiányosságokat, de az anyagi és eszközi ellátottságban megmutatkozó problémákat is. Mivel azóta „sok víz lefolyt a Dunán”, közben csatlakoztunk az Európai Unióhoz, megnöttek a hozzáférhető források keretei, nagy, központilag irányított programok indultak be, mint pl. az Infovek, így 2016-ban próbáltuk felmérni, hogyan mutatkozott meg az eltelt időszak a vívmányaival együtt az eredeti bemutatott állapoton. Mivel ez alatt az idő alatt új, modernebb eszközöket és módszereket is használhatunk a kémiaoktatás során, így a kérdőívbe beépítettünk olyan új kérdéseket, amelyek az egyik ilyen felhasználható eszközzel, a számítógépes molekulamodellezéssel foglalkoznak. Tehát rákérdeztünk a számítógépek, mint módszertani segédeszközök felhasználásának, vagy nem felhasználásának az okaira és lehetőségeire, valamint szerettük volna feltérképezni a számítógépes molekulamodellezés alkalmazását a kémiaoktatásban a szlovákiai magyar gimnáziumokban több

mint 20 év távlatából. Sajnos az azóta eltelt időszakban a szlovákiai magyar gimnáziumokban – a felmérés alanyainál – új problémák jelentek meg. 20 éve még kellő osztály- és diáklétszámmal rendelkeztek, azonban jelenleg a többségük a fennmaradásért küzd, kevés a diák és előfordul, hogy az új osztályok nyitása is csak a fenntartó megyei önkormányzatok jóindulatán múlik. Az eltelt 20 évben az alapiskolákhoz hasonlóan a technológiai újítások is eljutottak ezekbe az intézményekbe. Több európai uniós fejlesztési projekt is megvalósult ebben az időszakban, így kíváncsiak voltunk, hogyan mutatkozik meg ez a kémia tantárgy oktatásában.

Haladva a korral, elektronikus levélben egy elektronikusan kitölthető (Google Drive alapú) kérdőívvel szólítottuk meg azon szlovákiai magyar középiskolákat, amelyek válaszoltak a kérdőívünkre az első felmérésnél, megszólítottuk továbbá azokat az új egyház, vagy más jogi személy által alapított intézményeket is, amelyek az idő óta jelentősebb diáklétszámmal dolgoznak. Az elektronikus kérdőívünk az alábbi zárt- és nyíltvégű kérdéseket tartalmazta:

Az első kérdésben a számítógéppel való felszereltségre kérdeztünk rá. Kérdésünk az volt, hogy rendelkezik-e az iskola számítógépes oktatási teremmel? Igennel vagy nemmel lehetett válaszolni.

A második kérdésben az iránt érdeklődtünk, hogy használják-e ezt a tantermet a kémia oktatása keretén belül? Igennel vagy nemmel lehetett válaszolni.

A harmadik kérdésben visszatértünk az első felmérésre, ahol rákérdeztünk a számítógépek alkalmazására a hagyományos kémiai tanítási órán. Válaszként meg kellett jelölni egyet az alábbi lehetőségek közül:

- igen, gyakran alkalmazzuk (hetente)
- igen, néha alkalmazzuk (kb. havonta egyszer)
- nem, nem alkalmazzuk.

A további kérdésben a számítógép nem alkalmazásának okát kellett megjelölni feleletválasztós módszerrel, vagy röviden leírni szóban:

- nincs számítógép hozzáférhető helyen
- nem rendelkezünk megfelelő oktatási szoftverrel, amelyet alkalmazni tudnánk
- nincs kellő tapasztalatom a rendelkezésre álló szoftverek felhasználásához
- egyéb ok.

Az ötödik kérdésnél újfent arra kerestük a választ, hogy a kémiát oktató tanár a számítógépet mint módszertani segédeszközt

- fontosnak tartja-e motivációs tényezőként
- fontosnak tartja-e, mivel szemléletessé teszi az oktatási folyamatot
- nem tartja-e fontosnak, mivel nem használják
- egyéb ok

A hatodik kérdésnél rákérdeztünk az iskola kémiai oktatási szoftverrel való ellátottságára, amelyre a következő lehetőségekből lehetett választani:

- nagyon jó, jó minőségű és felhasználható oktatási szoftverrel rendelkezünk
- jó, de nem tudjuk felhasználni a rendelkezésünkre álló szoftvereket
- nem jó, nem rendelkezünk jó minőségű és felhasználható oktatási szoftverrel.

A hetedik felvetésnél arra a kérdésre, hogy milyen nyelvű oktatási szoftverrel rendelkeznek, a következő három lehetőséget adtuk meg:

- magyar
- szlovák
- angol.

A következő kérdésnél rákérdeztünk, hogy problémát okoz-e a jó oktatási szoftver beszerzése. Igennel vagy nemmel lehetett válaszolni. A következő kérdés során szóban meg lehetett indokolni a nemleges választ.

A további kérdéseknél arra kerestük a választ, hogy ha magyar nyelvű oktatási szoftvert használnak, akkor honnan szerzik azt be.

A következő kérdéscsomag már a számítógépes molekulamodellezésre, annak felhasználására a középiskolai oktatásban és az elérhető szoftvercsomagokra vonatkozott. A válaszadókat megkérdeztük, hogy használnak-e számítógépes molekulamodellező szoftvert a kémia órán. Ha nem, akkor miért. Ezeket a lehetőségeket adtuk meg:

- Nem vásároltunk ilyen jellegű szoftvert,
- Nem ismerek ilyen szoftvereket,
- Bonyolult a használata az ilyen szoftvereknek,
- Nem tudjuk beilleszteni az oktatásba,
- Egyéb.

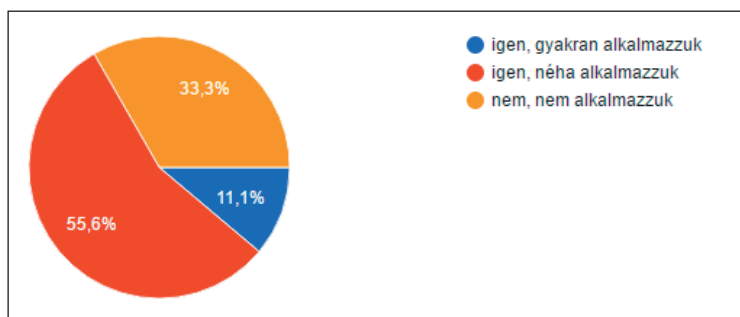
Ha azonban használnak ilyen szoftvereket, feltüntettünk néhány ilyen szoftvercsomagot, amely alkalmazható lehet a gimnáziumi oktatásban, és kértük a tanárokat, jelöljék meg, melyeket ismerik és használgák. Rákérdeztünk arra is, hogy a kémiát oktató tanár fontosnak tartaná-e a számítógépes molekulamodellező szoftverek bevonását a kémia oktatásába. Ha igen, akkor megkérdeztük azt is, hogy melyik tananyagrésznél.

Kérdőívünket a megszólított 15 szlovákiai magyar gimnáziumból 9 töltötte ki, így az eredmények nem teljesen reprezentatívak, azonban ha figyelembe vesszük, hogy visszajelzést kaptunk a legnagyobb diáklétszámú iskoláktól is, akkor a további munkánkhoz kiindulási alapként tekinthetünk erre a felmérésre.

Az első kérdésre, hogy rendelkezik-e az iskola számítógépes oktatási teremmel, minden válaszadó igennel felelt. Látjuk tehát az elmúlt 20 év fejlődését, bár nem kérdeztünk rá a számítógépek korára és teljesítménye sem. Tudjuk azonban, hogy a szoftverpiacon és más forrásokból is hozzáférhetőek olyan oktatóprogramok, amelyek hardverigénye nem a legigényesebb. Így erre a kérdésre a választ – összehasonlítva a kiindulási helyzettel – kielégítőnek tartjuk.

A második kérdés, amelyben arra kérdeztünk rá, hogy használják ezt a tantermet a kémia oktatása keretén belül, a következő eredményt hozta: 45% válaszolt igennel és 55% nemmel. Látjuk tehát, hogy a kémia órák nagy része még ma is hagyományos keretek között, a tanítási órán, a kémiai szaktanteremben vagy az osztályon belül megy végbe.

A harmadik, a számítógépek alkalmazása a hagyományos kémiai tanítási órán kérdésre a válaszok a következőképpen osztódtak meg:



Megfigyelhető tehát, hogy míg 20 évvel ezelőtt egyáltalán nem alkalmazták a számítógépeket a kémiatanítás folyamatában, addig a ma iskolájában már szerepet kap a kémia órákon is, bár nem rendszeresen.

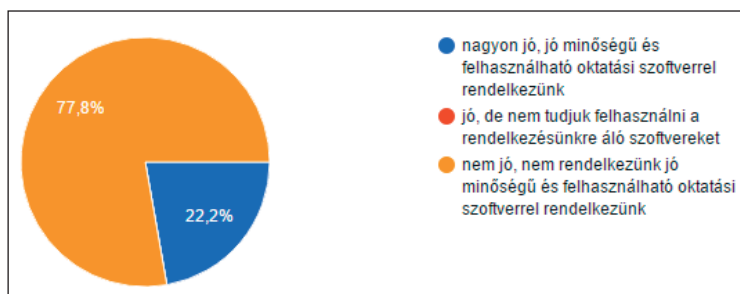
A következő kérdésnél, mely során a számítógép nem alkalmazásának okát kellett megjelölni feleletválasztós módszerrel, és több lehetőséget is ki lehetett választani, a következő eredményt kaptuk:

- nincs számítógép hozzáférhető helyen – a válaszadók 25%-a jelölte meg
- nem rendelkezünk megfelelő oktatási szoftverrel, amelyet alkalmazni tudnánk
 - a válaszadók 85%-a jelölte meg
- nincs kellő tapasztalatom a rendelkezésre álló szoftverek felhasználásához
 - a válaszadók 25%-a jelölte meg.

Amint tapasztaljuk és összehasonlítjuk a korábbi eredménnyel, látjuk, hogy a két leg súlyosabb probléma még ma is az, hogy az iskolák nem rendelkeznek megfelelő oktatási szoftverrel, amelyet alkalmazni tudnának, de sajnos hiányzik az oktatók jártassága is a rendelkezésre álló szoftverek felhasználásához.

A számítógépet mint módszertani segédeszközt viszont változatlanul minden válaszadó fontosnak tartotta, mivel szemléletesebbé teszi az oktatási folyamatot, 33%-uk pedig fontos motivációs tényezőnek tartja a számítógépeket a kémia oktatásánál.

A hatodik kérdésnél, ahol rákérdeztünk az iskola kémiai oktatási szoftverrel való ellátottságára, az iskolák válaszait kiértékelve azt kaptuk, hogy az iskola kémiai oktatási szoftverrel való ellátottsága:

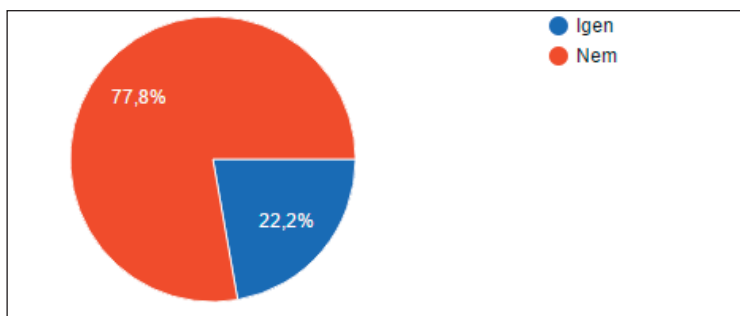


Látjuk, hogy míg 20 éve az oktatási szoftver csak a nagyon gyenge teljesítményű, hazai gyártású PMD-85 típusú számítógépekre volt hozzáférhető, de az iskolák nagy részén még erre sem, addig ma az iskolák nagy része úgy válaszol, hogy az ellátottság nem jó és nem rendelkeznek jó minőségű és felhasználható oktatási szoftverrel.

A további kérdésre, hogy milyen nyelvű oktatási szoftverrel rendelkeznek, csak 7-en válaszoltak, akiknek a válaszait kiértékelve azt kaptuk, hogy javarészt (több mint 70%-ban) ma már magyar oktatási szoftverrel rendelkeznek. A

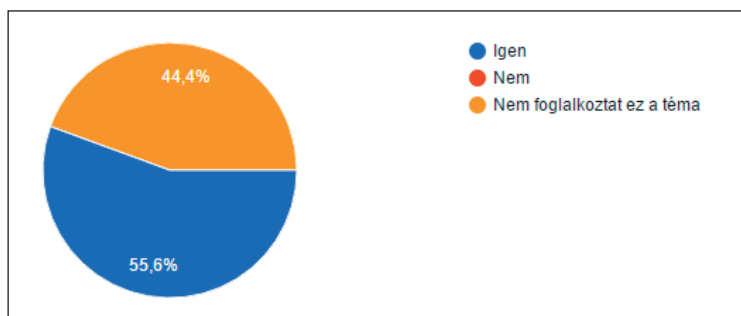
válaszadók közül mindössze ketten jelölték meg a szlovákokat, és egy válaszadó a szlovák és magyar nyelvű oktatási szoftvert egyaránt. Mivel 20 éve nagyrészt (tehát majdnem 90 %-ban) csak szlovák oktatási szoftverrel rendelkeztek a gimnáziumok, a felvázolt állapot nagy változás a szlovákiai magyar iskolák ellátottságában. Megfigyelhető, hogy iskoláink erős affinitást mutatnak az anyaországi magyar nyelvű segédeszközök és taneszközök iránt, ami nagyban segítheti az oktatói-nevelői munkájukat. Nem változott azonban a helyzet az oktatási szoftverek beszerzése terén, hiszen arra a kérdésre, hogy problémás-e a jó oktatási szoftver beszerzése, a kémia tanárok 2/3-a igennel válaszolt. A válaszadók mindössze 1/3-a válaszolt nemmel. Az igennel válaszolók közül csaknem mindenki az okot firtató miéltre azzal válaszolt, hogy kevés az iskolák anyagi forrása ezekre a taneszközökre, így nem tudják beszerezni. Akik viszont hozzáférnek az oktatási szoftverekhez, azok többségében Magyarországról szerzik be ezeket a segédeszközöket.

Érdekesebb és sokkal egyértelműbb a helyzet a számítógépes molekulamodellezés kémiaoktatási felhasználásának a terén a szlovákiai magyar gimnáziumokban. Arra a kérdésre, hogy használnak-e számítógépes molekulamodellező szoftvert a kémia órán, a válaszadók majdnem 80%-a nemmel válaszolt, csak 2 igen választ kaptunk.



A számítógépes molekulamodellező szoftver nem alkalmazásának az okaként a válaszadók többsége (több mint 60%) azt a válaszlehetőséget jelölte meg, hogy nincs megvásárolva ilyen jellegű szoftverük, a többi lehetőségre már csak egy-egy jelölést kaptunk. A feltüntetett molekulamodellező szoftverek közül is csak néhányan ismerték az ACD/ChemSketch-et, és főleg a különböző webapplikációkat tüntették fel a tanítási órán használható molekulamodellező szoftverként. A válaszadók több mint a fele viszont fontosnak tartaná a

számítógépes molekulamodellező szoftverek bevonását a kémia oktatásába. Az ezt vitató kérdésre így válaszoltak:



Arra a kérdésre, hogy melyik tananyagrésznél, a következő válaszokat kaptuk: kémiai kötések, molekulák térbeli alakja, molekulák térszerkezete, reakciók mechanizmusa.

Amint látjuk, a helyzet a szlovákiai magyar középiskolákban az IKT kémiaoktatásban történő felhasználása terén nem sokat változott. A mai napig fennmaradt a hagyományos módszereken és taneszközökön alapuló kémiaoktatás, nehéz bevezetni az innovatív, új módszereket, mert vagy nincs meg a hozzá alkalmas eszköztár, vagy hiányzik az azt alkalmazni tudó tanár. A helyzetelemzéshez hozzátartozik, hogy magyar nyelvű kémiatanár-képzés, amely a múlt század 90-es éveiben újrakezdődött Nyitrán, 2010-re ebben az intézményben teret vesztett, nem nyíltak magyar csoportok, így nem lehetett külön foglalkozni a magyar hallgatókkal. A helyzet gyökeresen 2012-ben változott meg, amikor elindult a magyar nyelvű kémiatanárképzés a komáromi Selye János Egyetemen, ahol jelenleg elsőéves mesterfokú hallgatóknak igyekszünk ezeket az ismereteket is átnyújtani. Nehéz feladat vár azonban az államilag fenntartott módszertani központokra is, hogy a modern ismereteket és módszereket megismertessék a már oktató tanárokkal, akik bizony néha nehéz helyzetben vannak az állandó kredithajszolás miatt, mi több az anyagi és erkölcsi megbecsülésük is vitatható. Az eredményekből kitűnik, hogy a számítógépes molekulamodellezés jelenleg nem tartozik a leggyakrabban alkalmazott motivációs tényezők közé a szlovákiai magyar, de általánosságban a középiskolai kémiaoktatásban, bár a tanárok egy része látja benne a motivációs tényezőt és jó meglátással fedezi fel azokat a témaköröket is, amelyek alkalmasak a modellező szoftvercsomagok alkalmazására. Ezekből az eredményekből az

tűnik ki, hogy a felkészítést a felsőoktatásban a tanárképzésnél kell kezdeni, olyan kurzusokkal és választható tantárgyakkal, amelyek erre alkalmasak. A következő részben ezért néhány olyan témakör elméleti leírását és ezzel kapcsolatos számítógépes molekulamodelllezési feladatot ismertetünk meg, amelyek beilleszthetők a kémiatanár-képzés kurzusainak egyes témaköreibe. Mint említettük, ehhez csatoljuk azokat a kiindulási kémiai ismereteket, amelyek nélkül a feladatok nem megoldhatóak és megérthetőek. Olyan témaköröket és feladatokat választottunk, amelyekkel a gondolkodás absztrakciós szintjei közötti átmenetet is demonstrálhatjuk, bemutatva, hogyan hatnak a mikrovilágban uralkodó törvényszerűségek a makrovilágban tapasztalható tulajdonságokra és jelenségekre.

4.2. Szemelvények a kémiai kötés elmélete és a kémiai fizika modern oktatásából

R. T deSouza egy teljesen új szemszögből közelítette meg a kémiai fizika alapjainak oktatását a kémia alapképzésben résztvevő tehetséges hallgatónál. A hallgatók az addigi gyakorlat alapján csak az utolsó éves tanulmányaikban találkoztak a kvantummechanika alapjaival, ahol a megismerési folyamat nagy része a matematikai apparátus helyes használatát jelentette, ezzel viszont elvesztették az új ismeretek fizikai értelmezésének fonalát. A tanulmány szerzői egy új választható tantárgy (honors courses) bevezetését javasolták már az alapképzés első évfolyamába „A kémia és a biokémia alapelvei” cím alatt, ahol a kémiában használatos fizikai elméleteket ismertették meg a hallgatókkal. A hallgatók erre a kurzusra csak felvételi teszt alapján juthattak be, ahol a tesztelők kb. 5% -át választották ki az eredményeik alapján. Azok a hallgatók, akik nem feleltek meg a követelményeknek, a hagyományos kémiai bevezető kurzusokon vettek részt. A szerzők ennek az eljárásnak több előnyét is megnevezték, mégpedig elsőként azt, hogy ha a kémiai elméleteket és folyamatokat a kvantummechanika ismereteinek segítségével írjuk le, akkor ezt elvileg nem a matematikai apparátus hibátlan használatával kell megközelítenünk. Így az oktatók azokra a törvényszerűségekre és leírásukra összpontosíthattak, amelyek segítségével megmagyarázhatják, hogyan és milyen alapelvek szerint működik a mikrovilág. Ha a hallgatók a későbbi tanulmányaik során találkoztak a kvantummechanikával és annak ismeretanyagával, előnyükre vált, hogy már ismerték a kvantummechanika formalizmusát. Újabb előnyként könyvelték el azt is, hogy azok a diákok, akik

affinitást éreztek a fizika iránt, könnyebben és korábban megismerkedtek a fizika azon alapelveivel, amelyek a kémiában is használatosak. Felmerülhet bennünk a kérdés, hogy melyek azok a fizika tudományterületéről vett témakörök, amelyek ezen az indianai egyetemen nélkülözhetetlenek a kémiai folyamatok megismerésénél és már az egyetemi képzés első évfolyamában bevezetésre kerültek? Ezek a fizikai alapismeretek a következő témaköröket foglalták magukba: A fotoeffektus; A Schrödinger-egyenlet és a dobozba zárt részecske modell; A hullámfüggvények; Kötő és lazítópályák az MO elméletben és a hulláminterferencia; Szimmetriaelemek és a többváltozós függvények; A harmonikus oszcillátor és potenciálja. A számítógépes molekulamodellezés szempontjából két témakört ragadunk ki a javasolt tervezetből. Ez a két témakör a Kötéselmélet (MO - molekulapályák) és a dobozba zárt részecske modellje, ugyanis ezek a témakörök szorosan kapcsolódnak a Schrödinger-egyenlet és a hullámfüggvény fogalmának megismeréséhez és értelmezéséhez. A két témakörben tárgyalt fogalmak és elméletek egymástól elválaszthatatlanok és nélkülözhetetlenek a mikrovilág törvényszerűségeinek és jelenségeinek vizsgálatánál. Ezek alapos ismerete a kémiatanári pályára készülő hallgatók számára fontos, és tapasztaltuk, hogy a kiindulási ismereteik elégségesek ahhoz, hogy az adott ismeretanyagot elsajátíthassák a kellő (megtanulható és alkalmazható) matematikai apparátus felhasználásának a segítségével. (deSouza R.T , 2013)

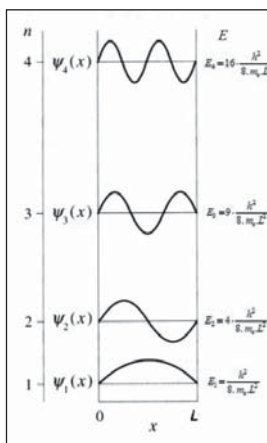
A dobozba zárt részecske modellt (vagy más megközelítésben haladó mozgást határok között) sok egyéb alkalmazás mellett a konjugált diének és kettős kötéssel rendelkező molekulák spektroszkópiai tulajdonságainak vizsgálatára is fel tudjuk használni. A modell tanítása során a hallgatókban felmerülhet a kérdés, hogy mi a doboz fizikai értelmezése, továbbá felmerül az a kérdés is, hogyan mozoghat az elektron, mint részecske a dobozban. Így szembesülnek az elektron dualisztikus jellegével és megismerik az állóhullám fogalmát. Az alapfogalom, amelyet a hallgatónak meg kell érteni azonban a hullámfüggvény fogalma. Tudjuk, hogy a kötött részecskék (pl. az atommag Coulomb-terében kötött elektronok) állapotát leíró hullámfüggvények az állóhullámok. Az ilyen hullámfüggvények sokszor intuitív módon is leírhatóak, a Schrödinger-egyenletet megoldása nélkül, tehát elkerülhetjük a bonyolult kvantummechanikai számításokat.

A dobozba zárt részecske modellnél az alapkérdés az, hogyan határozhatjuk meg egy olyan mikrorészecske esetleges hullámfüggvényeit, amely részecskét a lehető legegyszerűbb formában kötöttük meg úgy, hogy egy merev falú képzeletbeli dobozba zártuk. Ha a doboz egydimenziós, a részecske csak egy $<0,L>$ intervallummal meghatározott tartományban tud mozogni (azaz egy L szélességű dobozban), de onnan ki nem léphet. A probléma egzakt megoldásához a $<0,L>$ tartományban az időtől független Schrödinger-egyenlet megoldása vezet. Az adott részecske energiája stacionárius állapotban csak az E_n értékek valamelyikével egyenlő, amelyet így kapunk meg:

$$E_n = n^2 \cdot \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} \quad (33)$$

Látjuk tehát, hogy az energia kvantálttá válik, mégpedig azért, mert a részecske térbeli mozgását korlátoztuk. Az L szakaszon kötött részecske lehetséges állapotfüggvényei a Schrödinger-egyenlet megoldása szerint állóhullámok. Az állóhullámok leírásához egy analógiát fogunk használni, mégpedig a húrmodellt. Képzeljük el az L hosszúságú, mindkét végén befogott rugalmas húron kialakult állóhullámokat. A húron létrejövő állóhullám amplitúdója olyan, mint az L hosszúságú szakaszra kényszerített részecskét jellemző $\psi(x)$ állapotfüggvény. (Atkins, 1992a)

Az egyes hullámalakokat és a hozzájuk tartozó energiákat (22. ábra) a következőképpen ábrázolhatjuk (Atkins, 1992):



22. ábra: A dobozba zárt részecske állóhullámai és energiaszintjei

A hullámfüggvény fogalmával kapcsolatban sokan azt a téves gondolatot követik, hogy a hullámfüggvény leegyszerűsítve a valószínűség négyzetgyöke, miközben az alapmennyiség a valószínűség. Feltehetjük a kérdést, miből alakulhatott ki ez a téves magyarázat? A kvantummechanikai magyarázat értelmében az anyaghullámok leíró $\varphi(x)$ állapotfüggvény ismeretében megmondható, hogy az adott részecske a térnek valamely kis ΔV tartományában milyen valószínűséggel mutatható ki. A részecske megtalálási valószínűsége a térnek valamely kis ΔV térfogati tartományban egyenesen arányos a hullámfüggvény adott helyen vett abszolút értékének négyzetével. Ebből adódik, hogy hullámfüggvény négyzete a részecske térbeli megtalálási valószínűsége sűrűségét jellemzi. Innen a téves értelmezés.

Az oktatás során felmerülő további gyakori téves képzetek forrása a következő kérdés helytelen megválaszolásában rejlik: Hogyan jut el a részecske a doboz egyik (bal) oldaláról a jobb oldalára az első gerjesztett állapotban ($n=2$), miközben az állóhullám közepén egy csomópont van? (22. ábra) A magyarázatnál kiindulhatunk a fent említett húrmodellből, vagy hasonlatot vonhatunk a víz hullámai és a kvantummechanikai hullámfüggvény között. R.T deSouza szerint a hallgatók a fentiekben említett kérdésekre keresve a választ megértik, hogy a hullámfüggvény a fundamentális jelentőségű mennyiség, ellentétben a valószínűsége sűrűséggel, ugyanis a hullámfüggvénynek van egy fontos tulajdonsága, mégpedig az, hogy előjele van (vagy fázisa, amely a komplex számokból ered) . (deSouza , 2013)

A hullámfüggvény alapvető jellege tehát nem csak azért kulcsfontosságú, hogy megértsük, hogyan interferálhat két hullám azonos fázisban vagy ellenfázisban és hogyan jöhet létre kémiai kötés, hanem azért is, hogy megértsük a molekulán belüli elektronátmeneteket, amelyek az egyes anyagok spektroszkópiai tulajdonságait határozzák meg. Ezekből az alapismeretekből, mint már említettük a diákok arra az alapelvre következtethetnek, hogy a részecske mozgásának a behatárolása a dobozban kvantáltságához vezet, azaz az egydimenziós dobozba való bezártság egy kvantumszám bevezetését eredményezi, amely a zérusponti energiában is megmutatkozik (Zero-point energy – ZPE – energia a legalacsonyabb energiájú állapotban, akár az abszolút 0 fokon is rendelkezik ezzel a részecske). Mivel az n nem lehet zérus, így a ZPE sem lehet zérus. A ZPE kifejezése:

$$E_n = \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} \quad (34)$$

Ebben a kifejezésben láthatjuk a *Heisenberg-elv* érvényesülését is: mert ha a kinetikus energia zérus lenne, akkor az impulzus biztosan zérus lenne, és a részecske helyzete teljesen bizonytalan lenne. Ám a részecske helyzete nem teljesen bizonytalan, mert „dobozba zárt”, azaz véges tartományban mozog, így impulzusa sem biztosan zérus, mert az $E \neq 0$.

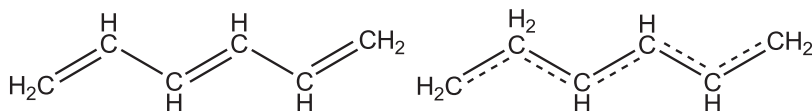
A szomszédos energiaszintek távolságát a következő összefüggés alapján számolhatjuk ki:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = [(n+1)^2 - n^2] \frac{h^2}{8m_e L^2} \quad (35)$$

Tehát, ha ez a különbség a doboz szélességének növekedésével csökken, és ha $L \rightarrow \infty$, akkor $\Delta E \rightarrow 0$. Tehát a végtelen távoli falak esetében a $\Delta E = 0$. Ez a megállapítás megfelel annak a tapasztalatnak, hogy a makrovilágban a haladó mozgás kinetikus energiája folytonosan változik és nem kvantált. (Atkins, 1992)

Az eddig felsorolt kvantummechanikai ismeretek jó elsajátításával és alkalmazásával sok olyan kémiai alapelvet, és a kémiai rendszerek működésének törvényszerűségét ismerhetjük és érthetjük meg, mint pl. a konjugált poliének rezonanciás határszerkezetei vagy a kémiai kötések kialakulása és az MO elmélet.

A konjugált poliének rezonanciós határszerkezetei mintapéldaként szolgálhatnak a dobozba zárt részecske modell alkalmazására és a rezonanciós stabilizáció bemutatására. A hallgatók már ismerik az alkének és a konjugált diének, poliének rezonanciós határszerkezeteit a szerves kémiai kurzusból, így könnyen felismerik, hogy az 1,3,5 hexatrién két határszerkezetben létezhet, az egyikben lokalizáltak az egyes és kettes kötések, míg a másik határszerkezetnél ezen kötések π -elektronjai delokalizálódnak (azaz szétfolynak) a σ -váz felett és így a kötések konjugálódnak. (deSouza, 2013)



A dobozba zárt részecske modellt mint említettük, felhasználhatjuk a delokalizációs (stabilizációs) energia kiszámítására is. Ha a 1,3,5 hexatrién azon határszerkezetét vesszük, amelynél a három kettes kötés lokalizált a szén atomok között, akkor – ahogy azt az ábra is mutatja – három dobozt különböztetünk meg, mindhárom hossza $L = a$, így a három doboz hosszát külön vesszük, tehát $L_1 = L_2 = L_3 = a$. A dobozba zárt részecske modell szerint a hat π elektron az $n=1$ kvantumszámmal jellemzett π -molekulapályákon található páronként lokalizálva a 2 π kötéseken. Így a lokalizált rendszer modell szerinti összenergiája behelyettesítve a 33-as képletbe:

$$E_{tot,lok} = \frac{n^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L_1^2} + \frac{n^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L_2^2} + \frac{n^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L_3^2} = 2 \cdot \frac{1^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot a^2} + 2 \cdot \frac{1^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot a^2} + 2 \cdot \frac{1^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot a^2} = 6 \cdot \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot a^2}$$

A másik delokalizált hexatrién határszerkezet esetében a doboz szélessége $L = 5a$, és mivel az π -elektronok (2+2+2 a három π -kötőmolekulapályáról) az egész doboz szélességében „mozoghatnak“, a hat π -elektron a következőképpen osztódik meg. Két elektron az $n=1$ kvantumszámmal jellemzett energiaszinten, két elektron az $n=2$ és további két elektron az $n=3$ kvantumszámmal jellemzett állóhullám energiaszintjén található meg, így az ábra alapján a delokalizált rendszer esetében a teljes energiát a következőképpen számolhatjuk ki:

$$\begin{aligned} E_{tot,delok} &= 2 \frac{n_1^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} + 2 \frac{n_2^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} + 2 \frac{n_3^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} \\ &= 2 \cdot \frac{1^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot (5a)^2} + 2 \cdot \frac{2^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot (5a)^2} + 2 \cdot \frac{3^2 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot (5a)^2} = \\ &= 2 \cdot \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot 25a^2} + 2 \cdot \frac{4 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot 25a^2} + 2 \cdot \frac{9 \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot 25a^2} \\ E_{tot,delok} &= \frac{28}{25} \cdot \frac{h^2}{8 \cdot m_e \cdot a^2} \end{aligned}$$

ahol az m_e az elektron tömege ($m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}$ kg), h a Planck állandó ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js), az L pedig a doboz szélessége, azaz a molekula kötéseit figyelembe vevő összhossza.

Ha összehasonlítjuk a két állapot energiáját, látjuk, hogy a $\left(\frac{28}{25}\right) < 6$, így a delokalizált állapot adja meg az energiaminimumot és így ez biztosan a stabilabb állapot!

A dobozba zárt részecske modellje szerint, ha a molekula fotont abszorbál, az elektron az n_i kvantumszámmal jellemzett állapotból az n_f kvantumszámmal jellemzett energiaállapotba kerül. Az abszorbált foton energiája ($E_{fot} = h \cdot \nu$) jellemzi a két energiaállapot közti energiakülönbséget, így az elektronátmenet energiáját is (ΔE_{atm}). Az átmenet energiájának kiszámításához a következő képletet használhatjuk:

$$E_{atm} = E_f - E_i = E_{fot} = h \cdot \nu = h \cdot c \cdot \check{\nu} = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (36)$$

A dobozba zárt részecske specifikus esetében a képlet a következőképpen alakul:

$$E_{fot} = \Delta E_{atm} = E_f - E_i = \frac{(n_f^2 - n_i^2) \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2} \quad (37)$$

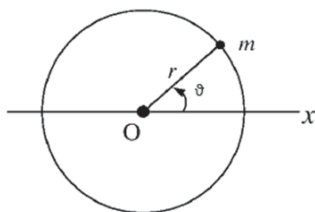
ahol az m_e az elektron tömege ($m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}$ kg), h a Planck állandó ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js), az L pedig a doboz szélessége, azaz a molekula kötéseit figyelembe vevő összhossza.

4.2.1. A POAR modell – Köríven mozgó részecske modellje

A POAR modell (Particle On A Ring) (Anderson, 2012) a részecske kétdimenziós mozgását írja le, amely a köríven történő mozgásra szűkül le. Ezt a modellt tehát csak a ciklusos molekulák tulajdonságainak leírására használhatjuk fel, ilyenek pl. a benzolgyűrűs molekulák, amelyek konjugált π -kötéseket tartalmaznak. Ebben az esetben a hullámfüggvényt a következő alakban írhatjuk le:

$$\varphi = e^{-im_l \vartheta} \quad (38)$$

ahol az m_l kvantumszám, az i a komplex szám imaginárius összetevője és a ϑ a részecske helyzetét írja le a köríven a következő séma szerint:



23. ábra: A részecske kétdimenziós mozgása a köríven - modell

A Schrödinger egyenlet megoldásával a köríven mozgó részecskére a következő egyenlet alapján kapjuk meg az energia saját értékeit:

$$E = \frac{m_l^2 \cdot h^2}{2 \cdot m_e \cdot r^2} \quad (39)$$

ahol $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, m_e az elektron tömege, h a redukált Planck-állandó, vagy másik nevén Dirac-állandó $h/2\pi$, és az r pedig a kör sugara. Az m_l kvantumszám előjele attól függ, hogy a részecske mozgása az óramutatóval megfelelő vagy ellentétes irányú. Ha a sugár helyett a körív hosszát vesszük, amelyet l -el jelölünk, akkor az összefüggés a következő alakot veszi fel:

$$E = \frac{m_l^2 \cdot h^2}{2 \cdot m_e \cdot l^2} \quad (40)$$

Castanho (Castanho, 2002) az N π -elektront tartalmazó rendszerek ΔE az elektronátmeneti energiájára az alábbi több egyszerűsítést tartalmazó összefüggést vezette le:

$$\Delta E_{atm} = \frac{(2m_l + 1) \cdot h^2}{2 \cdot m_e \cdot l^2} \quad (41)$$

ahol az m_l és az m_{l+1} az alapállapot és az első gerjesztett állapot kvantumszámai, amelyeket az alábbi egyszerűsített összefüggések alapján számolhatunk ki:

$$m_l \cong \left(\frac{N}{4}\right) \text{ ahol } N \text{ páros szám}$$

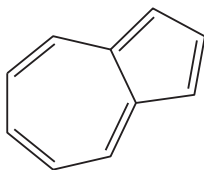
$$m_{l+1} \cong \left(\frac{N}{4}\right) + 1 \text{ ahol } N \text{ páros szám}$$

miközben a $\cong$ megjelölés alatt mindig az alsó egész számú érték felé való kerekítést értjük. Végezetül behelyettesítünk a 36-os képletbe:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{\Delta E}$$

ahol a ΔE a legnagyobb energiájú betöltött π -molekulapálya (HOMO) és a legkisebb energiájú betöltetlen molekulapálya (LUMO) közti energiakülönbséget határozza meg. Az $(N/4)$ kerekítést azért használjuk, mert a ciklusos konjugált poliéneknél a π -molekulapályák energiaszintjei kétszeresen degeneráltak (kivéve a legalacsonyabb energiaszintet – lásd benzol), így az egyes betöltött energiaszinteken 4 π -elektron helyezkedhet el. Ezzel a közelítéssel meg tudjuk határozni a HOMO és a LUMO molekulapályák n kvantumszámait.

Castanho (Castanho, 2002) az azulén molekulán mutatta be a modell alkalmazását.



Az azulén molekula $N = 10$ π -elektront tartalmaz, a körív hosszát a benzol molekulában vett C-C atomok közti távolságból számolta ki $10 \times 138 \text{ pm} = 1380 \text{ pm}$. Ha behelyettesítünk a képletbe, akkor $\lambda = 314 \text{ nm}$ értéket kapunk. Ez az érték beletartozik az azulén abszorpciós molekulaszpektrumába, azonban a pontatlanság okaként feltüntethetjük a modell közelítő jellegét, továbbá azt a tényt, hogy ez a modell nem számol az elektron korrelációval, és csak a szingulett állapotokat veszi figyelembe. Az oktatás folyamatában azonban mint modell az anyagok spektroszkópiai tulajdonságainak ismertetésére jól használható, amint ezt majd egy másik feladaton bemutatjuk a számítógépes molekulamodellezés segítségével.

Visszahelyettesítve az átmenet energiáját kifejező egyenletbe, megkapjuk az elektronátmenethez tartozó maximális abszorbancia hullámhosszát λ_{max} .

4.3 A számítógépes molekulamodellezés gyakorlati oktatási alkalmazása

A számítógépes molekulamodellezés gyakorlati oktatási alkalmazását három szoftvercsomag segítségével mutatjuk be. Mivel a szoftverpiacon számtalan olyan alkalmazás van, amely az Interneten molekulamodellezés címszó alatt kikereshető, így saját tapasztalatunkból kiindulva három olyan szoftvercsomagot javasunk a kémiantár-képzésben felhasználni, amelyek különböző, általunk felállított kritériumoknak megfelelnek. Az első kritérium a hozzáférhetőség, ugyanis a felmérésünkben is tapasztaltuk, hogy az iskolaügyben nem prioritásként kezelik az ilyen oktatási célokra is használható szoftvercsomagok beszerzését. Az általunk javasolt számítógépes programok vagy ingyenesen letölthetőek, vagy rendelkeznek olyan akadémiai licensszel, amely jóval olcsóbbá teszi ezeket a szoftvereket az egyetemek és más oktatási intézmények számára. A második fontos kritérium, hogy a szoftver tartalmazzon olyan oktatási célokra is felhasználható alkalmazásokat, amelyek beilleszthetőek a kémiantár-képzésbe

és bizonyos egyszerűsítésekkel a középiskolai szintű kémiaoktatásba is. További fontos kritérium, hogy a szoftver olyan grafikus felhasználói felülettel (GUI – Graphic User Interface) rendelkezzen, amely könnyen kezelhetővé teszi a felhasználók számára.

Felmerül a kritériumok megfogalmazásánál a tanári kompetenciák kérdése is az egyes szoftvercsomagok oktatási felhasználásánál. Melyek azok a képességek, jártasságok, amelyek elengedhetetlenül szükségesek a számítógépes molekulamodellezési szoftvercsomag implementálására az oktatási folyamatba?

Az oktatás tartalmi és módszertani részének kompetenciái:

- Megérteni a számítógépes molekulamodellezés pedagógiai és pszichológiai aspektusait
- A didaktikai alapelveket helyesen figyelembe véve beilleszteni a számítógépes molekula modelleket és a modellezést az oktatási folyamatba
- Képesnek lenni implementálni a számítógépes molekulamodellezést az oktatás bármely fázisába (Brestenská, 2009)

További fontos kompetenciák közé sorolhatjuk az oktatás feltételeinek megteremtéséhez szükséges jártasságokat, amelyek nélkül az oktató nem érheti el a kitűzött oktatási célokat:

- A hardver és szoftvercsomagok alapvető ismerete
- Az egyes programcsomagok telepítésének képessége az egyes operációs rendszerekbe
- A rendelkezésre álló hardverek (vetítő, notebook, interaktív tábla) használata
- Specifikus képességek: ismerni az adott szoftver alapvető funkcióit
- Megnyitni vagy elkészíteni egy új molekula modellt tartalmazó állományt
- Megkeresni az Interneten a számunkra szükséges molekula szabadon hozzáférhető állományait
- Beolvasni (importálni) ezeket az állományokat a felhasználható kiterjesztésben (.mol, .xyz, .sdf állományok)
- Elmenteni a létrehozott állományokat
- Felépíteni egy új molekulát, optimalizálni a geometriáját és leolvasni a tulajdonságait
- Kiválasztani a modellek 3D vizualizációjának formáját (Juhász, 2015b)

Mint már az előző fejezetekben írtuk, Az Ollé János és kollégái (Ollé, 2013) által újraalkotott kompetenciamodellben az alábbi három kompetenciaterület jelenik meg, amely részkompetenciákra tagozódik tovább:

1. Kommunikáció és eszközhasználat
2. Tevékenység és viselkedés
3. Értékteremtés és produktivitás

A szerzők szerint ez a három terület olyan kompetenciákat jelöl, amelyekkel bizonyos szinten minden, digitális eszközökkel kiegészített tevékenységet végző személy rendelkezik. Az egyes kompetenciákat azonban részkompetenciákra osztották. A számítógépes molekulamodellezés oktatási folyamatban történő felhasználásának fő kompetenciaterülete a kommunikáció és eszközhasználat, amely részkompetenciái a következők:

- a. digitális kommunikáció
- b. digitális hozzáférés
- c. digitális eszközhasználat.

A digitális kommunikáció alatt az információk elektronikus cseréjét vagy közvetítését értjük, önkifejezés, információátadás vagy másokkal való együttműködés céljából. A digitális kommunikáció azonban nemcsak szöveges lehet, hanem ugyanúgy lehetőségünk van kép- és mozgóképalapú, hangalapú, videóalapú, helymeghatározó koordinátákon alapuló kommunikációra és információ megosztására is. A digitális hozzáférés az egyén elektronikus részvételét jelenti a társadalmi, életvezetési és munkafolyamatokban. Mint már említettük, a digitális eszközhasználat kompetenciája Habók és Czirfusz szerint (Habók–Czirfusz, 2013) magában foglalja, hogy az egyén az internetes tevékenységéhez leginkább illeszkedő eszközt választja, és hatékonyan használja annak érdekében, hogy önmaga vagy mások számára értékes tartalmat hozzon létre. Az egyénnek képesnek kell lennie tudatosan, a meghatározott cél érdekében és produktívan használni a digitális eszközöket.

Figyelembe véve ezen kompetenciamodellt és részkompetenciákat, továbbá az általunk felállított három fontos kritériumot, a gyakorlati oktatási alkalmazásokat a következő három szoftvercsomag segítségével mutatjuk be: HyperChem 7.0 a Hypercube, Inc. terméke, Avogadro (Avogadro, 2015) programcsomag és Chemcraft kvantumkémiai programcsomag (Chemcraft, 2016).

A HyperChem Release 7.0 programcsomag olyan Windows alapú molekulamodellező szoftver, amelynek legújabb verziója a HyperChem Release 8.0, azonban számunkra ez a verzió volt elérhető. A HyperChem Release 7.0 programcsomagban implementálásra kerültek a molekuláris mechanika és dinamika módszerei, szemiempirikus és ab-initio számítási módszerek, továbbá a DFT (sűrűség-funkcionál elmélet) egyes funkcionáljai. A program segítségével lehetőség nyílik protein szimulációkra, molekulák viselkedésének modellezésére mágneses térben, szerkezeti, sebességi állandók és spektrumok számítására. A programba importálni lehet más programok által generált fájlokat is. A HyperChem alkalmazható makromolekulák, valamint kis molekulák tulajdonságainak számítására és szkriptek írására is. Ami a hozzáférhetőséget illeti, szabadon nem letölthető, elérhető viszont egy demóverziója (regisztráció szükséges hozzá), amely használata időben behatárolt. A teljes verzió ára 995\$ + ÁFA, azonban oktatási célokra elégséges a HyperChem 8.0 Student Edition licenszének megvásárlása, amely jelenleg (2016) mindössze 89 \$ + ÁFA-ba kerül gépenként. A Student Edition diákverzióhoz egyetemek, vagy más oktatási intézmények és annak diákjai férhetnek hozzá, azonban az árból adódóan bizonyos redukciókat tartalmaz. Ilyenek pl., hogy az ab-initio és DFT számítások maximálisan 12 atommal futhatnak le, a szemiempirikus számítások 36 atomos molekuláig mehetnek végbe, az MM számítások pedig 100 atomig. Tehát kis összegért olyan lehetőséget kapunk, amely elégséges lehet az oktatási céljaink eléréséhez.

A következő ajánlott szoftver a GNU GPL licenc alatt szabadon hozzáférhető (open-source) Avogadro (Avogadro, 2015), amely azon kívül, hogy szabadon terjeszthető, engedélyezi a működésének tanulmányozását és esetleges javítását. A szoftvercsomag „cross-platform“- jellegű, azaz egyaránt működik az MS Windows, Linux a Mac OS X operációs rendszerek alatt is. Az Avogadro programcsomagba beépített funkciók megközelítik az olyan üzleti alapon hozzáférhető szoftvercsomagok lehetőségeit, mint a Chemcraft és a GaussView, bár a felhasználói felület még hagy némi kívánnivalót maga után. További hiányosságai közé sorolhatjuk a programba implementált számítási modellek kínálatát, amelyek közül főleg a molekulák térszerkezetének optimalizálására alkalmas módszerek hiányosak. Erre a célra csak a molekula-dinamika bizonyos force-fieldjei vannak implementálva, így ha pl. orbitálokat akarunk szemléltetni, akkor más kvantumkémiai szoftvercsomagok (amelyek képesek ab-initio vagy DFT módszerek alkalmazására is) kimeneti állományait kell

használnunk. A programcsomag azonban sok molekula bemeneti paramétereit tartalmazza, amelyeket felhasználhatunk az oktatás során.

A harmadik ajánlott szoftver újra egy kommersz alapú szoftver, amely azonban szabadon letölthető és 150 napig ingyenesen használható. A Chemcraft egy rendkívüli jó grafikai felhasználói felülettel rendelkező szoftver, amely kvantumkémiai számítások eredményeinek grafikus ábrázolására szolgál. Nagyon hasznos eszköz a kiszámított eredmények vizualizálására és új kvantumkémiai számítások input fájljainak elkészítésére. Két fő kvantumkémiai program interfészeként szolgál, ezek a GAMESS és a Gaussian programcsomagok. A más programokkal való kommunikációt a molekulák koordinátáinak az importja vagy exportja segítheti elő. A Chemcraft magában nem futtat kvantumkémiai számításokat, azonban jelentősen elősegítheti más kvantumkémiai programcsomagok használatát. Windows és Linux verzióban is hozzáférhető.

Mit tud tehát a Chemcraft szoftver:

- a háromdimenziós molekulamodellek szabad paraméterváltoztatását (pl. kötéstávolság, kötésszögek)
- Gamess, Gaussian, NWChem, ADF, Molpro, Dalton, Jaguar, Orca, QChem kvantumkémiai programok output fájljainak vizualizációját: optimalizált geometria, vibrációs módok animációja, molekulapályák vizualizációja, spektrumok vizualizációja stb.

Fontos előnye a programnak, hogy publikálásra alkalmas molekulákat ábrázoló képeket menthetünk le a program segítségével. A szoftver jelenlegi (2016) ára 160 USD+ÁFA. A Chemcraft szoftvercsomag segítségével bonyolultabb számítások eredményeit tudjuk vizualizálni, amit szintén kihasználhatunk az oktatás folyamán.

4.3.1 Feladatok a számítógépes molekulamodellezés gyakorlati oktatási alkalmazására

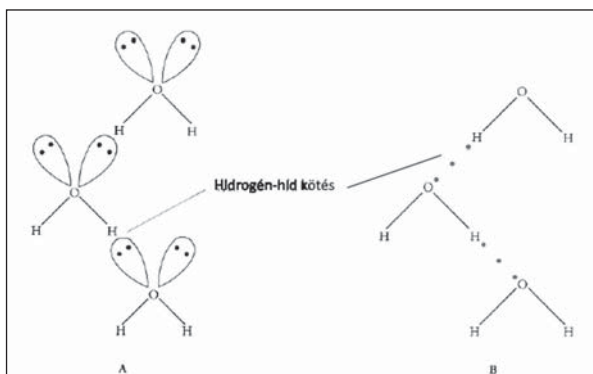
A számítógépes molekulamodellezés gyakorlati alkalmazása a kémiatanárképzésben sokrétű lehet. Alkalmazhatjuk az egyes kémiai diszciplínák oktatása során, mint pl. kötéselmélet az általános kémiában, periciklusos reakciók a szerves kémiában, spektrumok számítása a fizikai kémiában stb. A mai Bologna-i rendszerű osztott tanárképzés mesterszintjén azonban szlovákiai viszonylatban

minden kémiatanár-képzéssel foglalkozó intézmény tantárgykínálatában van olyan tantárgy, amely magában foglalja ezt a problémakört is. Ilyen tantárgyak pl. a Nyitrai Konstantin Filozófus Egyetemen a Számítógépes molekulamodellezés a kémiában, a Besztercebányai Bél Mátyás Egyetemen a Számítógép a kémiaoktatásban és a Komáromi Selye János Egyetemen a Kémiai és módszertani szoftverek tantárgy. Ezeken belül lehetőség nyílik mélyebben megismerkedni a számítógépes molekulamodellezés egyes programjaival és gyakorolni olyan feladatokat, amelyek közelebb hozzák a hallgatóknak az egyes általunk is felvázolt témakörök megismerését és megértését, ez viszont nagyban hozzájárul a kémiai alapfogalmak és kémiai alapelvek későbbi helyes használatához.

Az előző fejezetekben kifejtettük, hogy a számítógépes molekulamodellezés szempontjából két témakör: a Kötélmélet (MO - molekulapályák) és a Dobozba zárt részecske modellje azok a témakörök, amelyek szorosan kapcsolódnak a Schrödinger-egyenlet és a hullámfüggvény fogalmának megismeréséhez és értelmezéséhez. A két témakörben tárgyalt fogalmak és elméletek egymástól elválaszthatatlanok és nélkülözhetetlenek a mikrovilág törvényszerűségeinek és jelenségeinek vizsgálatánál. A két témakör absztrakciós gondolkodási szintje is igen sokrétű, amely során eljuthatunk a változásokat befolyásoló mikroszkopikus absztrakciós szint magyarázata alapján a makroszkopikus világ jelenségszintjéhez. A feladatokat az előző fejezetekben leírt elméleti kémiai bevezető ismeretekre építjük, nem térünk ki a részletes matematikai és kvantumkémiai apparátusra, amely a feladatok megoldásához szükséges, hanem a kémiai szempontból fontos tulajdonságok, jelenségek és alkalmazások megmagyarázására összpontosítunk. Ennek eszközeként a számítógépes molekulamodellzési programokat fogjuk használni a feladat nehézségi fokához mérten. Az egyes feladatok megoldására használt számítási módszereket is ennek alapján választjuk meg. A feladatok modellként szolgálhatnak más ilyen jellegű feladatok megoldásához, ugyanis célunk egy későbbi kiadványban egy feladatgyűjtemény megszerkesztése, amely on-line is elérhető lesz a hallgatók számára.

1. Feladat: A H-híd kötés és a víz tulajdonságai

A gyenge molekulák közti kölcsönhatások kulcsfontosságúak a kondenzált folyékony halmazállapotú szerkezetek és az egyes szilárd fázisú anyagok tulajdonságai szempontjából. Fontos szerepük van abban is, hogy megértsük az élő és élettelen természet anyagainak, továbbá a szintetikus anyagok szerkezetét. Az élő természetben a legnagyobb szerepet a hidrogén-híd gyenge molekulák közötti kölcsönhatás játssza, amelyet egyszerűen hidrogén-híd kötésnek nevezünk. A hidrogén-híd kötés két olyan molekula között jöhet létre, mint pl. a víz, vagy víz és más elektronegatív atomot tartalmazó molekula. Az ilyen molekulákban a H-atom egy nála jelentősen nagyobb elektronegativitással rendelkező jelű atomhoz (F, O, N) kapcsolódik, az elektronsűrűség redistribúciójára kerül sor, a hidrogén atomon részleges pozitív, az elektronegatívabb atomon pedig részleges negatív töltés keletkezik. A részleges pozitív töltésű proton kölcsönhatásba lép a szomszédos molekulák elektronegatívabb atomjaival, amely elektrosztatikus jellegű és így két molekula között hidrogén-híd kötés alakul ki (24. ábra).



24. ábra: A hidrogén-híd kötés kialakulása a H_2O molekulák között

Feladvány:

Használják a HyperChem Release 7.0 programcsomagot és keressék meg a víz molekula optimális térszerkezetét az ab-initio SCF és a DFT/B3LYP funkcionálja segítségével a következő báziskészletekben: 6-31G*, 6-31G**, 6-311G*, 6-31+G*, 6-31++G*. A kapott optimális térszerkezetek esetében határozzák meg a víz molekula következő jellemzőit: kötéstávolság, kötésszög, dipólus momentumot és ezeket hasonlítsák össze a táblázati értékekkel! A következő lépésben optimalizáljanak két víz molekulát együttesen! A kapott optimális

térszerkezet eredményeinek alapján határozzák meg a két víz molekula közti H-híd kötés kötéstávolságát és kötési energiáját mindkét kvantumkémiai modell segítségével (A DFT/B3LYP esetében különböző bázisokban) és hasonlítsák össze az experimentálisan mért értékekkel!

A megoldás menete

1. Az első lépésben megrajzoljuk a víz molekulát: a *Build* menüből a *Default element* kiválasztásával a megjelenő periódusos táblázatból kiválasztjuk az oxigén atomot. Utána a *Build* menüből az *Add hydrogen* menüpont kiválasztásával kiegészítjük a víz molekulát.

2. Optimalizáljuk a víz molekula geometriáját – a *File*-menüben kiválasztjuk a *Start Log* lehetőséget és elmentjük a kimeneti adatokat tartalmazó log fájlt az általunk választott név alatt. Utána a *Setup*ban kiválasztjuk az SCF majd a további számításoknál *Density Functional módszert* és a DFT esetében pontosítjuk, melyik funkcionállal szeretnénk számolni, ezek után kiválasztjuk a megfelelő bázist. Ha ezzel is elkészültünk, akkor a *Compute* menüből kiválasztjuk a *Geometry Optimization*-t, az opciók kiválasztása után elindítjuk a számítást.

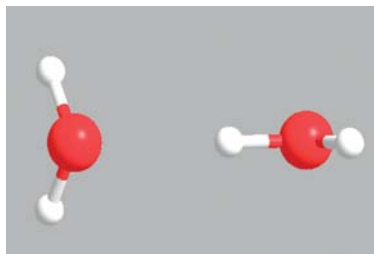
3. Ha a program befejezte a számításokat, akkor leállítjuk a kimeneti adatok exportálását a log fájlba úgy, hogy a *File*-menüben kiválasztjuk a *Stop Log-ot*. Az eredményeket az elmentet log fájlból kiolvassuk, és táblázatba foglaljuk.

Eredmények és megvitatás:

	SCF	DFT/B3LYP				<i>Kísérleti érték</i>
	6-31G*	6-31G*	6-31G**	6-31+G*	6-31++G**	
r (O-H) Å	0.947509	0.968514	0.965098	0.968764	0.965090	0.965*
α (H-O-H)	105.4235°	103.6713°	103.7716°	105.5092°	105.7532°	104.27°*
μ- (D)	2.2004	2.0950	2.0424	2.2490	2.1859	1.854*
E _{tot} (H)	-76.0107463	-76.4089532	-76.4197365	-76.4225723	-76.4341234	

r – kötéshossz $1\text{Å} = 1.10^{-10}\text{m}$, α – kötésszög, μ-Dipólus momentum, E- teljes energia 1Hartree = $4,3598144 \cdot 10^{-18}\text{ J}$, * táblázati érték (Lide, 2003)

1. Táblázat: Az optimalizált víz molekulák eredményei (Juhász, Varga, 2005)



Forrás: (Juhász, Varga, 2005)

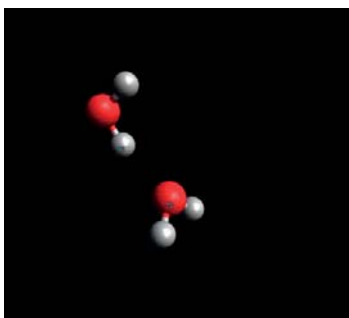
25. ábra: A víz dimérjének Hyperchem 7.0 program által optimalizált geometriája

Mivel a víz molekula fizikai és kémiai tulajdonságai jól feltérképezettek, így a hozzájuk tartozó kísérleti értékek táblázatokban vagy akár az Interneten is könnyen kikereshetőek. Ez egy fontos szempont az első feladat összeállításánál, mert az eredmények kiértékelésének ismeretében a későbbiekben tudni fogjuk, milyen optimalizációs módszereket és bázisokat alkalmazzunk. A víz molekula esetében a kiszámított kötéstávolságok 0.01-0.02 Å intervallumon belül térnek el a táblázati értéktől (1. táblázat), azonban látjuk, hogy a DFT módszerekkel bázisfüggetlenül pontosabb eredményeket kapunk mint az SCF (ab-initio) módszerrel, így az ilyen jellegű feadatok megoldására a későbbiekben a DFT egyes funkcionáljainak az alkalmazását javasolhatjuk. Az eredmények nagyobb mértékű pontosságát azzal magyarázhatjuk, hogy a DFT modell B3LYP funkcionálja figyelembe veszi a korrelációs energiát, míg az SCF módszer elhanyagolja azt. A kötésszögek esetében is a B3LYP/6-31G** módszer bizonyult a legpontosabbnak összehasonlítva a kísérleti eredménnyel, így ez is alátámasztja az előbbi állításainkat.

Két víz molekulát érintő feladványok eredményei megtalálhatóak a jelzett (Juhász, Varga, 2005) irodalomban. A víz molekula dimérjének (25. ábra) esetében az egyes víz molekulák ugyanolyan számolási pontosságot és egyben eltéréseket is mutatnak, mint a monomer estében. A H-híd kötэшossza a kísérleti eredmények szerint 1,77 Å. Ezt legjobban a DFT/B3LYP/6-31G** módszerrel kapott számítási eredmények közelítik meg, azonban a nagyobb bázisok használata nem pontosítja az eredményt. Más a helyzet a H-híd kötés energiájának a számításánál. A legpontosabb módszerekkel mért experimentális érték (Ch'ng, L. C.; 2012) 15 kJ/mol. A DFT/B3LYP modellel vett számítások ebben az esetben is csak nagy bázisokban adnak a szuperpozíciós korrekció figyelembevételével kevésbé pontos eredményt (≈ 25 kJ/mol). Ebben az esetben a felhasznált módszerekkel csak megközelíthetjük a kísérleti értéket. A pontosabb eredmények eléréséhez más ab-initio módszereket kell használnunk, amelyek számítási idő igénye jóval nagyobb. Ilyenek pld. perturbációs módszerek (pl. MP2), azonban ezek bemutatása nem célja ennek a feladatnak.

Módszertani útmutató

A feladatot megoldhatjuk más molekulamodellező programok segítségével is, így a víz molekula dimérijének a modellezésére bátran használhatjuk az Avogadro szoftvercsomagot is. Mivel ebben a programban nincsenek implementálva a kért számítási módszerek, a rendelkezésre álló MMFF94 force-field segítségével optimalizálni tudjuk a víz molekulát és dimérjét is. A H-híd kötés így kiszámított távolsága 1,778 Å (26. ábra), amely nagyon közeli a kísérleti értékhez. Tehát látjuk, hogy az MMFF94-es force-fieldben implementált potenciálok alkalmassá teszik a programot az ilyen jellegű optimalizálásokra. A H-híd kötés energiájának és további más jellemzők kiszámítására azonban a program ugyanúgy nem alkalmas.



26. ábra: A víz dimérijének az Avogadro program által optimalizált geometriája, feltüntetve az atomok közti távolságot

2. Feladat: Az acetamid oldódása a vízben

A fehérjékben amid kötés található (peptid kötésnek is nevezik), ilyen van például az N-metil-acetamidban is. A fehérjék és az amidok is erős savban jól hidrolizálhatóak. Ha az amidokban a nitrogénatomhoz legalább egy hidrogénatom kötődik, akkor a molekulák között erős hidrogén-híd kötések alakulnak ki (több molekulából álló asszociátumok), ezért a szerves molekulavegyületek között az amidok a legmagasabb olvadáspontúak (csak a formamid folyékony, már az acetamid is szilárd).

Vízben az acetamid igen jól oldódik, mert hidrogén-híd kötések alakulnak ki az acetamid és a víz molekulák között.

Feladvány:

Használják a HyperChem Release 7.0 programcsomagot és keressék meg az acetamid és víz molekula optimális térszerkezetét az DFT/B3LYP funkcionálja

segítségével a következő báziskészletben: 6-31G**! Határozzák meg az egyes monomerek energiáját és töltéseloszlását! Ezek után optimalizálják DFT/B3LYP/6-31G** módszerrel az acetamid és a víz szupermolekulájának térszerkezetét! Az optimalizált térszerkezet eredményei alapján határozzák meg a szupermolekulában a H-híd kötés kötéstávolságát és kötési energiáját! Határozzák meg, hogyan változott meg az egyes molekulákban a töltéseloszlás!

A számítást ismételjék meg a Hyperchem 7.0 programba implementált MM módszer segítségével! Hasonlítsák össze a két modell által kapott eredményt!

A megoldás menete:

1. Az első lépésben megrajzoljuk a víz molekulát: a Build menüből a Default element kiválasztásával a megjelenő periódusos táblázatból kiválasztjuk az oxigén atomot. Utána a Build menüből az Add hydrogen menüpont kiválasztásával kiegészítjük a víz molekulát.
2. Optimalizáljuk a víz molekula geometriáját – a File-menüben kiválasztjuk a Start Log lehetőséget és elmentjük a kimeneti adatokat tartalmazó log fájlt az általunk választott név alatt. Setupban al Density Functional módszert és a DFT esetében pontosítjuk, hogy a B3LYP funkcionállal optimalizálunk, ezek után kiválasztjuk a 6-31G** bázist. Ha ezzel is elkészültünk, akkor a Compute menüből kiválasztjuk a Geometry Optimizationt, az opciók kiválasztása után elindítjuk a számítást, majd ha a program befejezte a számításokat, leállítjuk a kimeneti adatok exportját a log fájlba és mentjük az optimalizált geometriát. A lépéssorozatot megismételjük az acetanhidrid estében is.
3. A két molekula optimalizált geometriáját egy felületen ábrázoljuk a File menu Merge gombjával és optimalizáljuk ezt a rendszert is az előző leírás alapján. Az eredményeket kiértékeljük.
4. A molekulamechanika (erőtér, force field) klasszikus mechanikán alapuló módszerei használatosak nagyméretű rendszerek (például több tízezer atomot tartalmazó biomolekulák és szolvatált rendszerek) modellezésére, szimulációjára. Ezt a módszert azonban alkalmazhatjuk kisebb atomszámú rendszerekre is, mint a miénk. A számítás elindításához a Setup menü Molecular Mechanics menüpontját választjuk ki, aztán ebből az Ambert módszert a beállított paraméterekkel. Először a víz molekulát válasszuk ki (Select) és optimalizáljuk a geometriáját, miután ez megtörtént, szüntessük meg a víz molekula kijelölését és optimalizáljuk az egész rendszer geometriáját.

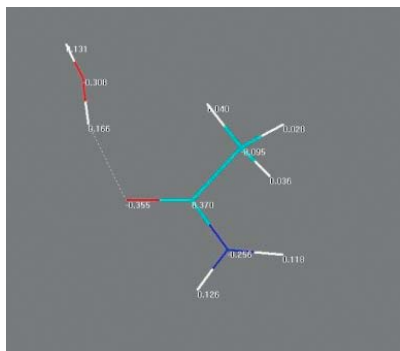
A H-híd kötést a Display menu Recompute H Bonds és Show H Bond gombjaira kattintva tudjuk bemutatni.

Eredmények és megvitatás:

	Víz	Acetamid	Víz + acetamid	Kísérleti érték
DFT(B3LYP)/6-31G**				
r(C-O--H) Å			1,89266	1,77 *
E_{tot}	-76,4266039	-209,2293274	-285,67218	
E_{int}			42,6 kJ/mol	
MM(Amber)				
r(C-O--H) Å			1,786	1,77*

r (C-O--H) – Hidrogén-híd kötőhossz $1 \text{ Å} = 1.10^{-10} \text{ m}$, E_{int} - Hidrogén-híd kötés energiája, *táblázati érték
 $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{O}$ (Lide, 2003)

2. Táblázat: Az optimalizált acetamid és víz molekulák kiszámított eredményei

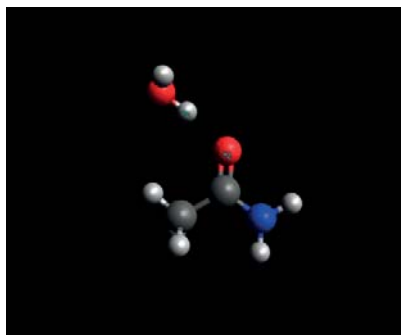


27. ábra:

Az acetamid és víz dimérjének Hyperchem 7.0 program által optimalizált geometriája (H-híd kötés kijelölésével)

Az acetamid és a víz molekula dimérjének esetében látni, hogy a két molekula között erős hidrogén-híd kötés alakulhat ki. A 27. ábrán látjuk a töltéeloszlást is, így látható és szemléltethető a parciális negatív töltés kialakulása az elektronegatívabb oxigén atomon, míg a hidrogén atomon parciális pozitív töltés alakul ki. A két töltés közti elektrosztatikus kölcsönhatás felelős a hidrogén-híd kötés kialakulásáért. A H-híd kötőhossza két víz molekula között a kísérleti eredmények szerint 1,77 Å. A DFT(B3LYP)/6-31G** módszerrel kapott számítási

eredmények megközelítik ezt az eredményt (2. táblázat), bár a kötés hosszára kihatással vannak a C atomhoz kötődő N és C atomok. A C atom metil csoportja elektrondonorként léphet fel, így növeli a parciális negatív töltést az oxigénen, és így csökkenti a hidrogén-híd kialakításában részt vevő O és a H atom közti távolságot, összehasonlítva a víz dimérjével. A H-híd kötés energiájának számításánál nem vettük figyelembe a szuperpozíciós hibát, így kevésbé pontos eredményt (≈ 43 kJ/mol) kaptunk. Ebben az esetben is a felhasznált módszerekkel csak megközelíthetjük a kísérleti értéket. A pontosabb eredmények eléréséhez más ab-initio módszereket kell használnunk, amelyek számítási idő igénye jóval nagyobb. Ilyenek pl. az említett perturbációs módszerek (pl. MP2), azonban ezek bemutatása nem célja ennek a feladatnak. Az Avogadro programcsomag MMFF94-es force-fieldje által kapott geometria a 28. ábrán található és látjuk, hogy ebben az esetben is a force-fieldben implementált potenciálok alkalmassá teszik a programot az ilyen jellegű optimalizálásokra.



28. ábra: Az acetamid és víz dimérjének az Avogadro program által optimalizált geometriája

3. Feladat: A π -delokalizált rendszerek molekulapályáinak ábrázolása

Visszatérve a kémiai kötéssel foglalkozó elméleti bevezetőre a konjugált molekulák π -molekulapályáinak számításaival Erich Hückel foglalkozott. Az általa bevezetett közelítő módszer segítségével megszerkeszthetjük a π -molekulapályák energiadiagramját, és kiszámíthatjuk az egyes pályakoefficienseket is. A Hückel féle megközelítésben a π -molekulapályákat a σ -molekulapályáktól függetlenül vizsgáljuk. A legnagyobb energiájú betöltött π -molekulapályát az angol megfelelőjéből HOMO-nak nevezzük, a legkisebb energiájú betöltetlen molekulapályát pedig az angol megfelelőjéből LUMO-nak nevezzük. Ez a két molekulapálya együttesen a molekula határmolekulapályái (vagy egyszerűbben határpályái), amelyek sok fontos jellemzőt határoznak meg, köztük a molekulák

kémia és spektroszkópiai sajátosságait is. (Atkins, 1992) A Hückel féle MO elmélet alapján a π -delokalizált rendszerekhez tartozó molekulapályák energiájának és molekulapályák együtthatóinak kiszámítására szolgál a Calgary Egyetem honlapján található java applet (<http://www.chem.ucalgary.ca/SHMO/>), amely egyben lehetővé teszi a HOMO és LUMO molekulapályák szemléltetését is. Mivel mindkét felvázolt molekulapálya együttesen a molekula határpályáit alkotja, így a szimmetriájuk nagyon fontos a további kémiai tulajdonságok szempontjából, ugyanis ez a paraméter határozza meg a periciklusos reakcióknál (pl. elektrociklizációs reakciók) a végbemenő folyamat mechanizmusát. (Woodward, Hoffman, Fukui féle szabályok).

Feladvány:

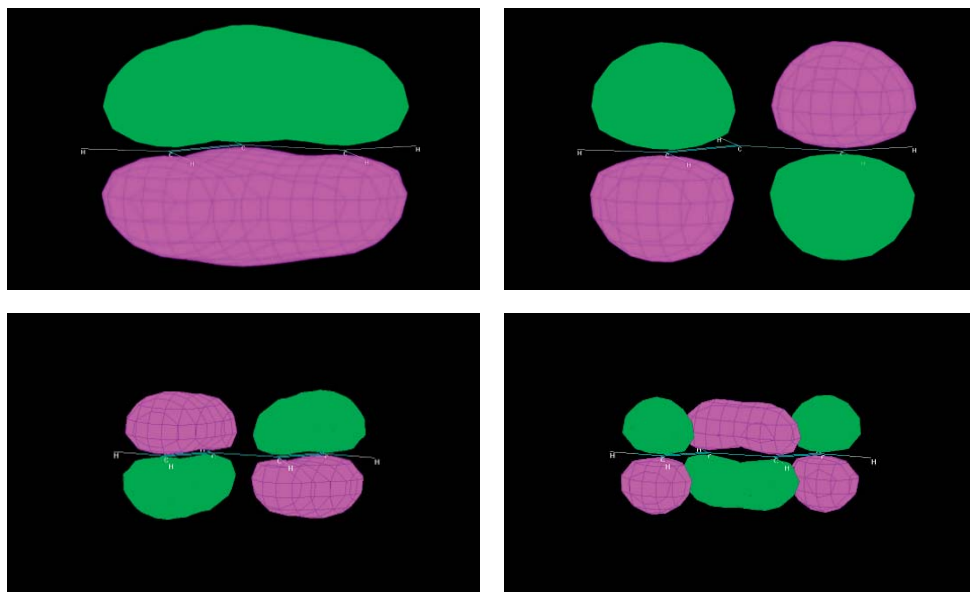
A Hyperchem 7.0 program segítségével vizualizálják az allil kation és a butadién π -MO határpályáit (HOMO, LUMO)! Ugyanezt tegyék meg az Avogadro program segítségével is! Vitassák meg a két szoftvercsomag előnyeit és hátrányait ennek a feladatnak a megoldásánál!

A megoldás menete

1. Az első lépésben megrajzoljuk a butadién molekulát a következőképpen: Megnyitjuk a Hyperchem mappa Samples almappáját, ezen belül pedig az NMR almappát. Kiválasztjuk az ethylene.hin állományt és az etén molekula segítségével megrajzoljuk a butadién molekulát és a butadién molekula segítségével pedig az allil kationt.
2. A molekula geometriájának optimalizálására a CNDO szemiempirikus módszert alkalmazzuk. A Hyperchemben implementált CNDO módszer nem számol az atomtörzs orbitáljaival, csak a vegyértékhéjon található atompályákkal. Így a C atom esetében csak a 2s és 2p pályákat veszi figyelembe a H atom esetében pedig az 1s atompályákat.
3. Az optimalizált geometria kiszámítása után a Compute menuben az Orbital gombra kattintva a kiugró ablakon kiválasztjuk a HOMO vagy a LUMO orbitált, és kikeressük azt a π -MO határpályát, amelyet ábrázolni szeretnénk.

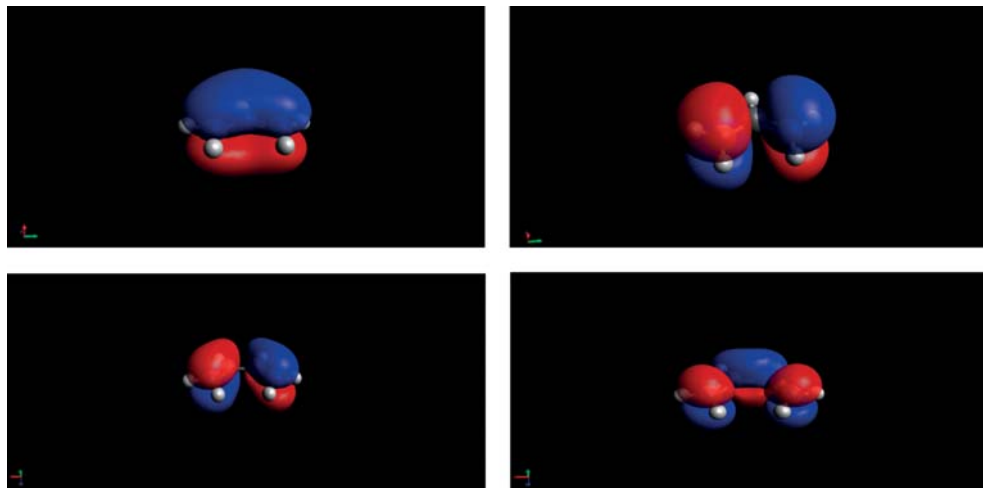
Eredmények és megvitatás:

A Hyperchem 7.0 program segítségével a következőképpen vizualizálhatjuk az allil kation és a butadién határpályáit (HOMO, LUMO):



29-32. ábra: Az allil kation és a butadién határpályáinak (HOMO, LUMO) vizualizációja a Hyperchem 7.0 programcsomag segítségével

Az Avogadro programcsomag szintén tartalmazza a molekulapályák vizualizációjának a lehetőségét. Az Avogadro hátránya azonban az, hogy a molekulák optimalizációjára csak a molekula-dinamika bizonyos force-fieldjei vannak implementálva. Ezért a molekulák optimális geometriájának meghatározására, továbbá a molekulapályák paramétereinek kigenerálására más kvantumkémiai szoftvereket kell alkalmaznunk, amelyek *ab-initio* vagy DFT módszereket használnak. A legalkalmasabb erre a feladatra a Gaussian09 (M.J. Frisch, 2009) kvantumkémiai szoftvercsomag, vagy a Gamess ingyeneses futtatható szoftvercsomag, amelyek segítségével olyan input fájlokat generálhatunk, amelyek a molekulapályák vizualizációját segítik elő. Az allil kation szerkezetének, továbbá az allil kation HOMO és LUMO molekulapályájának a vizualizációja az Avogadro programcsomag segítségével a 33-36. ábrákon találhatóak.



33-36. ábra: Az allil kation és a butadién határpályáinak (HOMO, LUMO) vizualizációja az Avogadro programcsomag segítségével

Módszertani útmutató

A 33-36. ábrák alapján meg tudjuk állapítani a molekula szimmetriaelemeit, be tudjuk mutatni a programcsomag segítségével a C_2 szimmetriatengely körüli forgatást, továbbá azt, hogy a molekulák térszerkezete planáris, amely kihat a további kémiai tulajdonságaira. Az oktatási folyamatban az oktatónak nem szükséges az egész matematikai apparátus alkalmazása a szekuláris determinánsok és egyenletek megoldására, hanem a határpályák vizualizációjának segítségével szemléltetheti a molekulapályák szimmetriáját, a Fukui-féle szabályok segítségével pedig meg tudja határozni a periciklusos reakciók sztereokémiáját. Mivel ezen kvantumkémiai szoftvercsomagok használata bizonyos szakmai tudást és jártasságot igényel, így a távlati terveink között szerepel olyan webes platform létrehozása, ahonnan az oktatók letölthetnék ezeket a fájlokat és így alkalmazni tudnák az oktatási folyamatban.

4. Feladat: A π -delokalizált rendszerek molekulaszpektrumai

A $C=C$ kettős kötés esetében a fényabszorpció a π elektront a π^* lazítópályára juttatja. Az átmenet energiája nem konjugált kettős kötéseknel 7 eV körül mozog, ami az ultraibolya tartományban 180 nm-es abszorpciónak felel meg. Ha konjugált szénhidrogének kettős kötéseit vizsgáljuk, akkor a π -molekulapályák energiája egymáshoz közelebb van, így a $\pi \rightarrow \pi^*$ vagy az $n \rightarrow \pi^*$ elektronátmenet

a látható fény tartományába mehet át. Egyes átmenetek a szimmetria miatt tiltottak, azonban a következő modellnél elhanyagoljuk ezt a tényt.

A konjugált diének spektroszkópiai tulajdonságainak vizsgálatára az előző fejezetekben bemutatott dobozba zárt részecske modellt fogjuk használni. A feladat során egy rövidebb szénláncú és egy élettani jelentőségű hosszabb szénláncú konjugált π -rendszer spektroszkópiai tulajdonságait fogjuk a számítógépes molekulamodellzés segítségével vizsgálni.

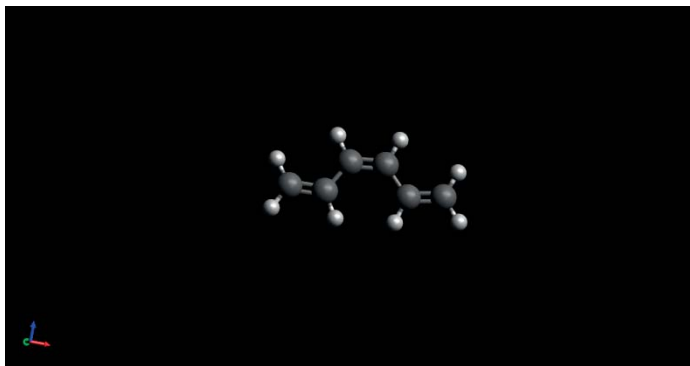
Az első molekula az előző fejezetben már bemutatott 1,3,5- hexatrién molekula a másik molekula pedig a beta-karotin, az A-vitamin növényekben előforduló provitaminja, amely a legfontosabb szabadgyökfogók közé tartozik, így képes megkötni a szervezetben előforduló instabil oxidánsokat. Az antioxidáns hatás mellett bőrvédő tulajdonságai is vannak, megtalálható az élénk narancssárga zöldségekben és gyümölcsökben (pl. sárgabarack, sárgarépa, sütőtök, sárgadinnye).

Feladvány:

A dobozba zárt részecske modell segítségével határozzák meg az 1,3,5-hexatrién és a beta-karotin $\pi \rightarrow \pi^*$ elektronátmeneteihez tartozó abszorpciós hullámhossz tartományait a két vegyület molekulaspektrumában, ha tudjuk, hogy a molekulaspektroszkópia az ismert energiájú elektromágneses sugárzásnak a molekulákon létrehozott hatásával foglalkozó tudomány, amely mérési eredményeképpen molekulaspektrumot kapunk. A doboz szélességét mindkét molekula estében az Avogadro programcsomagot felhasználva határozzák meg. Az eredményt hasonlítsák össze a kísérleti értékekkel!

A megoldás menete és eredmények

1. A 3-hexén molekula elmentett állománya része az Avogadro letöltött programcsomagnak egyéb más szerves és szervetlen molekulák térszerkezetével együtt. Az első lépésben megnyitjuk a 3-hexén molekula elmentett állományát az Avogadro programcsomag fragments/alkene almappjából. A modellt módosítjuk két kettes kötés átrajzolásával, majd optimalizáljuk a geometriát (37. ábra).
2. A View menüpont alatt található Propertis (Tulajdonságok) pontra kattintva és kiválasztva a Bond properties (Kötés tulajdonságok) menüpontot láthatjuk az egyes kötések hosszát (38. ábra). Kiválasztjuk a C-C kötések és összeadjuk az egyes kötéshosszakat. Így a doboz szélessége, a C-C kötések által meghatározott σ -váz hossza, amelyen a π -elektronok mozoghatnak, $L = 6,909 \cdot 10^{-10}$ m.



37. ábra: 1,3,5-hexatrién molekula vizualizációja az Avogadro programcsomag segítségével

Bond Properties						
	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)
Bond 1	H-C	H	C	1	No	1,09011
Bond 2	C-C	C	C	1	Yes	1,44531
Bond 3	C-C	C	C	2	No	1,34211
Bond 4	C-H	C	H	1	No	1,09007
Bond 5	C-C	C	C	1	Yes	1,44427
Bond 6	C-C	C	C	2	No	1,33865
Bond 7	C-C	C	C	2	No	1,33867
Bond 8	C-H	C	H	1	No	1,08598
Bond 9	C-H	C	H	1	No	1,08531
Bond 10	C-H	C	H	1	No	1,0856
Bond 11	C-H	C	H	1	No	1,08597
Bond 12	C-H	C	H	1	No	1,08531

38. ábra: 1,3,5-hexatrién molekula kötéhosszainak meghatározása az Avogadro programcsomag segítségével

3. Behelyettesítünk a 37-es képletbe:

$$E_{fot} = \Delta E_{atm} = E_f - E_i = \frac{(n_f^2 - n_i^2) \cdot h^2}{8 \cdot m_e \cdot L^2}$$

ahol $n_i = 3$ és $n_f = 4$ a 4.1 fejezetben kifejtett modell leírása alapján, továbbá m_e az elektron tömege ($m_e = 9,109 \cdot 10^{-31}$ kg), h a Planck állandó ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Js), az L pedig a doboz szélessége, azaz a molekula kötéseit figyelembe vevő összhossza.

$$\Delta E_{atm} = E_f - E_i = \frac{(4^2 - 3^2) \cdot (6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{8 \cdot 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (6,909 \cdot 10^{-10} \text{ m})^2}$$

Behelyettesítés után az elektronátmeneti energiára a következő eredményt kapjuk:

$$\Delta E_{atm} = 9,033 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Behelyettesítve a 36-os képletbe megkapjuk az UV-VIS molekulaszpektrumban az elektronátmenethez tartozó λ hullámhosszat:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E_{atm}} = 220 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 220 \text{ nm}$$

Az 1,3,5-hexatrién UV spektrumában a $\pi \rightarrow \pi^*$ átmenethez tartozó kísérleti érték 258 nm (Freidel, 1950), így az általunk kiszámolt érték jó összhangban van ezzel az értékkel, figyelembe véve a modell korlátait. Pontosabb eredményt kapnánk, ha más kvantumkémiai módszerekkel meghatároznánk az egyes molekulapályák energiaszintjeit és ennek segítségével kiszámítanánk a HOMO $\rightarrow$ LUMO elektronátmenet energiáját.

A beta-karotin esetében az eredményeket hasonlóképpen kapjuk meg, mint az 1,3,5-hexatrién esetében. Az eredmények pontos leírása megtalálható az irodalomban (Juhász, 2015a). Az Avogadro számítógépes molekulamodell segítségével meghatározzuk a doboz szélességét (a molekula C-C σ -vázának hosszát). A modell segítségével látjuk, hogy a molekulában 11 π -kötés található, azaz 22 π -elektron, amelyek 22 π -molekulapályán helyezkednek el. Ebből a fele π -kötőpálya a fele pedig π -lazítópálya. A számunkra fontos $\pi \rightarrow \pi^*$ elektronátmenet a $\pi_{11} \rightarrow \pi^*_{12}$ elektronátmenet, így $n_f = 12$, $n_i = 11$. A számítógépes molekulamodell által meghatározott doboz szélessége: $18,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}$, így behelyettesítve a 37-es és a 36-os képletbe a béta karotin kiszámított látható fény tartományába eső $\pi \rightarrow \pi^*$ elektronátmenethez tartozó λ értéke 491 nm, amely érték megközelíti a kísérletileg meghatározott $\lambda_{\max} = 470 \text{ nm}$ értéket. Ez az érték is a dobozba zárt részecske modell felhasználhatóságát igazolja az egyes konjugált diének spektrális tulajdonságainak meghatározásánál.

5. Feladat: Az aromás π -delokalizált rendszerek molekulaszpektrumai

Az aromás π -delokalizált rendszerek molekulaszpektrumai $\pi \rightarrow \pi^*$ elektronátmeneti energiájának a meghatározására a POAR – Köríven mozgó részecske modellt alkalmazhatjuk. Az előző fejezetben bemutattuk ezt a modellt az azulén molekula elektronátmeneti energiájának kiszámolására, az irodalomban (Juhász, 2015b)

megtalálható a modell felhasználása a naftalin molekula esetében. A piridint a heterociklusos aromás vegyületek közé soroljuk. Ez a vegyület és az egyes piridin származékok (pl. *o*-amino-piridin) tulajdonságaival a szerző egy más tanulmányban mélyebben is foglalkozott (Juhász, 2013). A piridin aminoszármazékairól viszont tudjuk, hogy erősítik az idegrostokon tovaterjedő ingerületet okozó elektromos jelet, s mivel befolyásolni tudják ezt a folyamatot, anesztetikumként, izomrelaxáló gyógyszerként használhatjuk a piridin ezen származékait.

A piridin aromás gyűrűjének az elektronkonfigurációja megegyezik a benzolgyűrűjével. Hat π -elektron konjugációjáról beszélünk ebben az esetben is, azonban nitrogén atom szabad elektronpárja merőleges a π -kötő molekulapályára, így nem lép kölcsönhatásba ezen orbitál π -elektronjaival. Ez a nitrogén bázisos jellegét erősíti, így a piridin erősebb bázis mint a pirrol és az anilin. Mivel a nitrogén atom elektronegatívabb, mint a szén atomok, így jobban vonzza az elektronokat, ezzel megváltozik a töltéeloszlás és a kötések hossza is, összehasonlítva a benzol molekulával. Mivel a POAR modell segítségével pontosan meg tudjuk határozni az egyes kötéhosszakait, így ez fontos szerepet játszik az elektronátmeneti energia meghatározásánál.

Feladvány:

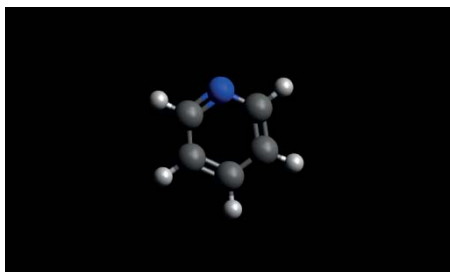
1. A POAR modell segítségével határozzák meg a piridin $\pi \rightarrow \pi^*$ elektronátmenetéhez tartozó abszorpciós hullámhossz tartományait. A körív hosszát a piridin molekula esetében az Avogadro programcsomag segítségével határozzák meg.
2. Az eredmények verifikálására végezzenek el egy bonyolultabb kvantumkémiai módszereken alapuló számítást a következő képpen:
 - Optimalizálják a piridin geometriáját DFT/B3LYP/ cc-pVDZ módszerrel, ahol a cc-pVDZ a bázisok leírásánál használatos ún. kétszeres zéta (double zeta, DZ) bázis.
 - A kimenetből generálják ki az egyes molekulapályák energiaszintjeit a gerjesztett állapotok meghatározása végett, a molekulaorbitál diagrammot szemléltessék a Chemcraft programcsomag segítségével.
 - A molekulaszpektrum modellezéséhez használják a Gaussian programcsomagba implementált CIS módszert, amely az egyelektronos excitációkat veszi figyelembe.
 - A Chemcraft programcsomag segítségével vizualizálják a piridin spektrumát és hasonlítsák össze a kísérleti eredményekkel.

A megoldás menete

1. Megszerkesztjük a piridin molekula modelljét az Avogadro programcsomag segítségével, optimalizáljuk a geometriáját és egy Gaussian09 bemeneti (ún. input) fájlt generálunk az Extensions (Kiterjesztés) menüpont Gaussian gombjának kiválasztásával, és az egyes paraméterek helyes megválasztásával. Az optimalizációt lefuttatjuk a Gaussian09 programcsomag segítségével.
2. Az optimalizált geometriát beolvassuk az Avogadro programba és meghatározzuk az egyes kötéshosszakat a következő képpen: A View menüpont alatt található Propertis (Tulajdonságok) pontra kattintva és kiválasztva a Bond properties (Kötés tulajdonságok) menüpontot láthatjuk az egyes kötések hosszát. Kiválasztjuk a C-C és a C-N kötéseket és összeadjuk az egyes kötéshosszakat. Ennek az értéknek a segítségével kiszámítjuk a $\lambda_{\max}$ értékét.
3. Az optimalizációs kimenetből kigeneráljuk az egyes molekulapályák energiaszintjeit a gerjesztett állapotok meghatározása végett a Chemcraft programcsomag Tools/Orbitals/ Show MO energies diagram menüpontsorozat kiválasztásával.
4. Az optimalizált geometria koordinátáit igénybe véve a CIS módszer segítségével kiszámítjuk és vizualizáljuk a Chemcraft program segítségével a piridin molekulaszpektrumát.

Eredmények

1. A körív hosszát, amelyen a π -elektronok mozoghatnak, az Avogadro molekulamodell (39-40. ábra) segítségével határoztuk meg: $l = 8,270 \cdot 10^{-10}$ m.



Bond Properties						?	×
	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)	
Bond 1	C-C	C1	C2	2	No	1,39826	
Bond 2	C-N	C1	N	1	No	1,34044	
Bond 3	C-H	C1	H1	1	No	1,09566	
Bond 4	C-C	C2	C3	1	No	1,39633	
Bond 5	C-H	C2	H2	1	No	1,08203	
Bond 6	C-C	C3	C4	2	No	1,39629	
Bond 7	C-H	C3	H3	1	No	1,09275	
Bond 8	C-C	C4	C5	1	No	1,39826	
Bond 9	C-H	C4	H4	1	No	1,08203	
Bond 10	C-N	C5	N	2	No	1,34041	
Bond 11	C-H	C5	H5	1	No	1,09566	

39-40. ábra: A piridin molekula vizualizációja és a molekula kötéshosszainak meghatározása az Avogadro programcsomag segítségével

Castanho (Castanho, 2002) számítási módszere alapján behelyettesítünk a 41-es képletbe. Előtte meghatározzuk az m_l és az m_{l+1} kvantumszámok értékét az N π -elektront tartalmazó rendszerek számára a következő képletek alapján:

$$m_l \cong \left(\frac{N}{4}\right) \text{ ahol } N \text{ páros szám}$$

$$m_{l+1} \cong \left(\frac{N}{4}\right) + 1 \text{ ahol } N \text{ páros szám}$$

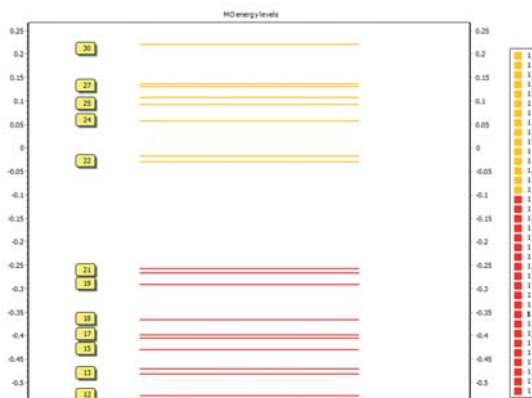
Így az $m_l = 1$, $m_{l+1} = 2$. Behelyettesítve a 41-es képletbe:

$$\Delta E_{atm} = \frac{(2+1) \cdot (6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s})^2}{2,9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot (8,27 \cdot 10^{-10} \text{ m})^2} = 10,572 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Behelyettesítve a 36-os képletbe megkapjuk az UV-VIS molekulaszpektrumban az $\pi \rightarrow \pi^*$ elektronátmenethez tartozó λ hullámhosszát:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E_{atm}} = 188 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 188 \text{ nm}$$

2. Az egyes molekulapályák energiaszintjeit a Chemcraft programcsomag Tools/Orbitals/Show MO energies diagram menüpontsorozat használatával ábrázolhatjuk a következőképpen:

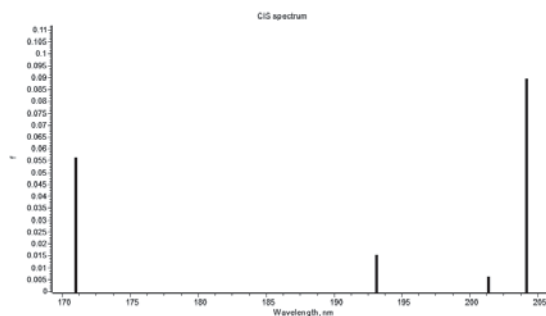


41. ábra: A piridin molekula molekulapálya diagrammja a Chemcraft programcsomag segítségével

A program kiszámítja a HOMO-LUMO energiakülönbséget is, amely ebben az esetben (41. ábra) $\Delta E = 0,227191775 \text{ A.U} = 9,90556139 \cdot 10^{-19} \text{ J}$. Behelyettesítve a 36-os képletbe:

$$\lambda = \frac{h \cdot c}{E_{atm}} = 188 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 200 \cdot 10^{-9} \text{ m} = 200 \text{ nm}$$

A CIS módszer segítségével kiszámított molekulaszpektrum az alábbi ábrán található:



42. ábra: A piridin molekula CIS molekulaszpektrumának vizualizációja a Chemcraft programcsomag segítségével

A legintenzívebb átmenet a kiszámított spektrumban 204,09 nm hullámhossznál jelenik meg (42. ábra), azonban kisebb intenzitású átmenetek vannak 193,05 nm-nél és 170 nm-nél. Ezek az átmenetek az alacsonyabb energiájú π -molekulapályák $\pi \rightarrow \pi^*$ elektronátmeneteihez vonatkoztathatóak, azonban a POAR modell segítségével kapott 188 nm a modell korlátait figyelembe véve jól használható a piridin spektroszkópiai tulajdonságainak szemléltetésére.

A piridin kísérletileg mért spektrumában (Kaljurand, 2000) két nagy intenzitású abszorpciós csúcsot találhatunk, az egyik 204 nm-nél a másik pedig 256-nm-nél. Látjuk, hogy mindkét módszer, amelyet használtunk közelítő módszerek, ugyanis mindkét módszernél approximációkat (egyszerűsítéseket) használunk, így a pontosabb eredmények elérése érdekében a kutatással foglalkozó vegyészek más pontosabb számítási módszereket alkalmaznak, mint pl. TDDFT vagy CC2 módszer. Ezek leírása és gyakorlati alkalmazásuk bemutatása megtalálható más kvantumkémiai kötetekben. (Veszprémi, Fehér, 2000)

Befejezés

A XX. század második felében a civilizált világ országaiba beköszöntött az informatikai forradalom, a számítástechnika, az infokommunikációs technológiák mindennapi életünk részévé váltak. Nem volt kivétel ez alól az oktatás és ezen belül a kémiaoktatás sem. A számítástechnika fejlődésének további nagy hozadéka, hogy emberközelivé tette a mikrovilág törvényszerűségeit leíró tudományágat, a kvantummechanikát. Ennek a fejlődésnek köszönhetjük, hogy bár bizonyos közelítő (approximációkat használó) módszerekkel, de meg tudjuk oldani a kvantummechanika alapegyenletét a Schrödinger-egyenletet. Ennek következtében a kvantumkémia is óriási fejlődésen ment át az elmúlt 50 évben, aminek egyik jele az 1998-ban Walter Kohnnak és John Poplenak odaítélt kémiai Nobel díj. Kiszélesedett a kvantumkémiai eszköztár olyan mértékben, hogy a szoftverpiacon hozzáférhető áron találunk már olyan programcsomagokat is, amelyeket fel tudunk használni a kémiaoktatás folyamatában is. Vannak azonban szabadon terjesztett és hozzáférhető molekulamodellező programok, amelyeket kompatibilisek a leggyakrabban használt kvantumkémiai programokkal.

A kötetben saját tapasztalatunkból kiindulva kitértünk a számítógépek kezdetleges felhasználására a kémiaoktatás keretein belül, felmértük a szlovákiai magyar középiskolák helyzetét ezen a téren a múlt század 90-es éveinek elején és a jelenlegi helyzetet is. Ennek alapján arra a következtetésre jutottunk, hogy az IKT technológiák bevezetését a középiskolai kémiaoktatásba a felsőoktatásban megvalósuló kémiatanárképzésnél kell kezdeni. A nemzetközi szakirodalom alapján áttekintettük, hogyan és milyen témaköröket feldolgozva foglalkoznak ezzel a problémával a világ más országaiban, és ennek alapján közelebbről bemutattuk a Schrödinger-egyenlet megoldásával összefüggő Dobozba zárt részecske modellt és bővebben foglalkoztunk a kémiai kötés elméletével is. A kötet végén feladatokat javasoltunk a számítógépes molekulamodellezés gyakorlati alkalmazására a kémiaoktatásban a fenn említett két témakörben, amelyek hozzáférhető szoftverek segítségével oldhatóak meg. A gyakorlati feladatok megoldása során igyekeztünk olyan digitális eszközöket alkalmazni, amelyeket valóban hatékonyan tudtunk használni annak érdekében, hogy önmagunk vagy mások számára értékes tartalmat hozzunk létre. Ehhez azonban nélkülözhetetlenek azok a tanári kompetenciák, jártasságok és készségek,

amelyek ezt lehetővé tették, és amelyekkel bővebben is foglalkoztunk az egyes fejezetekben. Reményeink szerint a kötet eljut a kémiatanárképzésben résztvevő hallgatókon kívül a gyakorlatban tevékenykedő középiskolai kémiatanárokhoz is, akiknek egy újabb támpont lehet a kémiaoktatás innovációjához és ezzel a tantárgy szélesebb körű megszerettetéséhez a diákok körében!

Felhasznált irodalom

1. Anderson B.D (2012): Cyclic Polyynes as Examples of the Quantum Mechanical Particle on a Ring, In: *Journal of Chemical Education*, 2012, 89(6), 724-727.
2. Atkins P.W.(1992): Fizikai kémia II., Tankönyvkiadó, (1992),Budapest 291,316-320, 352-355, 402-404, 412-418.
3. Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool. Version 1.XX. [Online] Available at <http://avogadro.openmolecules.net/>(Letöltés ideje: 2016. június 1.)
4. Balázs Katalin, Csenki József, Főző Attila László, Labancz István, Riedel Miklós, Rózsahegyi Márta, Schróth Ágnes, Szalay Luca, Tóth Zoltán, Wajand Judit (2015): *A kémiatanítás módszertana*, ELTE, Budapest, 74-76, 120-122, 209-211, 220-222, 310-312.
5. Balázi Ildikó, Ostorics László, Szalay Balázs, Szepesi Ildikó, Vadász Csaba (2013): *PISA2012 Összefoglaló jelentés*. Oktatási Hivatal, ISSN 2064-3772
6. Barabási Tünde (2007): *Az oktatási rendszer és az oktatás folyamata*. In. Birta-Székelly Noémi – Fóris-Ferenczi Rita (szerk.): *Pedagógiai kézikönyv*. Ábel Kiadó, Kolozsvár, 104-110 o.
7. Bari Róbert, Deák György, Hoffer József, Nagy Zsuzsa (1980): *A kémia korszerű tanítása az általános iskolában*, Tankönyvkiadó, Budapest, 65-70, 176-184.
8. Bérczes György (2011): *Informatika és a természettudományok (a tanításban)*. In: *Természettudományok tanítása - korszerűen és vonzóan*. - Budapest : ELTE TTK, 86-97.
9. Boys. S.F, Bernardi F. (1970): The calculation of small molecular interactions by the differences of separate total energies. Some procedures with reduced errors, *Molecular Physics*, 19(4), 553-566.
10. Brestenská Beata., Nagy Tibor (1998): *Internet ako nové informačné a komunikačné médium a jeho možnosti využitia vo vyučovaní chémie*. In: *Aktuálne problémy vyučovanie chémie –zborník DIDCHEM*, Štátny pedagogický ústav, Bratislava, 204-209.
11. Brestenská Beata, Szarka Katarína (2009): *Strategies of student's competence assessment in the ICT supported process of learning*, In: ICETA, 7th International Conference on Emerging eLearning Technologies and Applications, 157-161.
12. Czirfusz D. – Habók L. (2013): Információcsere a digitális korban – a kommunikáció modellje, eszközei és kommunikációs helyzetek a digitális térben. In: *Oktatás-Informatika*, 2013/1-2. szám. <http://www.oktatas-informatika.hu/2013/11/habok-lilla-czirfusz-dora-informaciocsera-a-digitalis-korban-a-kommunikacio-modellje-eszkozei-es-kommunikacios-helyzetek-a-digitalis-terben/> (Letöltés ideje: 2016. június 1.)
13. Castanho M.A.R.B (2002): Teaching Molecular Applications of the Particle-in-a-Ring Model Using Azulene, In: *Journal of Chemical Education*, 2002, 79 (9), 1092-1093.

14. deSouza Romualdo T., Iyengar Srinivasan S. (2013): Using Quantum Mechanics To Facilitate the Introduction of a Broad Range of Chemical Concepts to First-Year Undergraduate Students, In: *Journal of Chemical Education*, 90, 717–725.
15. Dori, Y. J., & Hameiri, M. (2003). Multidimensional analysis system for quantitative chemistry problems – symbol, macro, micro and process aspects. In: *Journal of Research in Science Teaching*, 40, 278–302.; idézi Dori Y. J., Kaberman Z. (2012): Assessing high school chemistry students' modeling sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment, In: *Instructional Science*, 40(1), 69–91.
16. Dori Y. J., Kaberman Z. (2012): Assessing high school chemistry students' modeling sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment, In: *Instructional Science*, 40(1), 69–91.
17. Falus Iván (szerk) (2003): *Didaktika – Elméleti alapok a tanítás tanuláshoz*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 274-275.
18. Ferencová Jana, Stovičková Jana, Galádová Andrea (2015): *PISA 2012 Národná správa Slovensko*. Národný ústav certifikovaných meraní vzdelávania, Bratislava.
19. Feszterová Melánia (2010): Využitie e-learningu pri vyučovaní disciplíny Nebezpečné látky a procesy. In. *Media4u Magazine*, 7. évfolyam, 3. szám, 143-146.
20. Freidel R.A, Orchin M. (1950): *Ultraviolet Spectra of Organic Compounds*, Wiley, New York
21. Frisch M.J., et al (2009):, Gaussian 09, Revision A.1, Gaussian, Gaussian Inc., Wallingford, CT.
22. Foresman, James B.; Frisch, AEleen (1996): *Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian*, Second Edition, Publisher: Gaussian, Inc. Pittsburgh, PA.
23. Gabel, D. L. (1998). *The complexity of chemistry and implications for teaching*. In: B. J. Fraser & K. J. Tobin (Eds.), *International handbook of science education*, Kluwer, London 233–248.; idézi Dori Y. J., Kaberman Z. (2012): Assessing high school chemistry students' modeling sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment, In: *Instructional Science*, 40(1), 69–91.
24. Garaj, Bustin, Hladký(1987): *Analytická chémia*, Alfa Bratislava.
25. Holub Radko (2003): *Tvorba chemického výučbového programu na báze programovacieho jazyka Turbo Pascal*, Diplomová práca, UKF Nitra.
26. Hehre Warren J., Burke L. D., Pietro W. J., Shusterman A. J. (1993): *Experiments in computational organic chemistry*, Published by Wavefunction, Inc., Irvine, Ca.
27. Ch'ng, L. C.; Samanta, A. K.; Czakó, G.; Bowman, J. M.; Reisler, H. (2012): Experimental and Theoretical Investigations of Energy Transfer and Hydrogen-Bond Breaking in the Water Dimer, In: *Journal of American Chemical Society*, 134, 15430-15435.
28. Chemcraft (<http://www.chemcraftprog.com/index.html>) /(Letöltés ideje: 2016. június 1.)
29. Jindra, A. a kol. (1985) : *Biochémia*, Osveta, Martin.

30. Juhász Juraj, Matulík Daniel, Obrcian Milan (1999): *Pericyklické reakcie - počítačom podporovaná výučba*. In: 51. zjazd chemických spoločností. Zborník príspevkov 1. Bratislava: STU v Bratislave, K-P15.
31. Juraj Juhász, Daniel Matulík (1999a): Školské pokusy s počítačom, In: Aktuálne problémy vyučovania chémie na základných a stredných školách: Zborník z medzinárodnej konferencie DIDCHEM., Štátny pedagogický ústav, Bratislava, 224-230.
32. Juhász Juraj, Matulík Daniel (2001): *Nové trendy vo vyučovaní chémiepomocou internetu*. In: Aktuální otázky výuky chemie X., Gaudeamus, 154-155.
33. Juhász György, Varga Gabriel (2005): *Molecular modeling in chemistry curriculum*. In: Modelling in Science Education., UKF, Nitra, 21-26.
34. Juhász György (2015a): *A számítógépes molekulamodellezés és a környezetpedagógia közös aspektusai*. In: A környezetpedagógia elmélete és gyakorlata.: Palatia Nyomda és Kiadó, Győr, 185-200.
35. Juhász György, SZARKA Katarína (2015b): Spektroszkopické vlastnosti molekúl - výučba pomocou IKT. (Molekulák spektroszkópiai tulajdonságai - IKT oktatás) In: Zborník medzinárodnej vedeckej konferencie Univerzity J. Selyeho - 2015: "Inovácia a kreativita vo vzdelávaní a vede" - Sekcie ekonomických vied a IKT. Komárno: Univerzita J. Selyeho, 212-217
36. Johnstone, A. H. (1991). Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem. In: *Journal of Computer Assisted Learning*, 7, 75–83 ; idézi Dori Y. J., Kaberman Z. (2012): Assessing high school chemistry students' modeling sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment, In: *Instructional Science*, 40(1), 69-91.
37. Kaljurand I , Rodima T, Leito I, Koppel I, Schwesinger R. (2000): Self-consistent spectrophotometric basicity scale in acetonitrile covering the range between pyridine and DBU. *J Org Chem.*65(19), 6202-6208.
38. Kárpáti Andrea (2003): *Informatikai eszközök a kémia oktatásában*, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Budapest, 37- 55.
39. Kekule Martin, Pöschl, R., Žák Vojtech (2008): *Jak to vidí žáci*. In DVOŘÁK, I. Lze učit fyziku zajímavěji a lépe? Praha: Matfyzpress, 2008, 13-50.
40. Kozma, R. B., & Russel, J. (1997). Multimedia and understanding: Expert and novice responses to different representations of chemical phenomena. In: *Journal of Research in Science Teaching*, 34, 949–968.; idézi Dori Y. J., Kaberman Z. (2012): Assessing high school chemistry students' modeling sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment, In: *Instructional Science*, 40(1), 69-91.
41. Kozma, R., & Russell, J. (2005). *Students becoming Chemists: Developing representational competence*. In J. K. Gilbert (Ed.), *Visualization in science education*, Springer, Dordrecht, 121–145.; idézi Dori Y. J., Kaberman Z. (2012): Assessing high school chemistry students' modeling sub-skills in a computerized molecular modeling learning environment, In: *Instructional Science*, 40(1), 69–91.

42. Kysel' Ondrej (2004): *Elektrónová štruktúra molekuloých systémov I.*, UKF Nitra, 91-93.
43. Lide D.R. (2003): *Handbook of Chemistry and Physics*, 83th ed. CRC Press, 10.
44. Mach Pavel, Juhász György, Kysel' Ondrej (2013): Theoretical study of electronic absorptions in aminopyridines - TCNE CT complexes by quantum chemical methods, including solvent. *Journal of Molecular Modeling*. 19(11), 4639-4650.
45. Matulík Daniel, Juhász Juraj (1998): *Computer aided experiments in Science*, In: Science Teacher Training 2000 : Conference. Banská Bystrica: Project Tempus, 209-213.
46. Mojzes János (1984): *Módszerek és eljárások a kémia tanításában*. Tankönyvkiadó, Bp., 1984, 76-78, 144-146.
47. Myška Karel, Kolář Karel (2002a): *Struktura a reaktivita organických sloučenin - počítačové modely*. In: Profil učitele chemie II., Gaudeamus, 192-196.
48. Myška, K., Vedlich, J., Kolář K. (2002b): *Nové směry ve znázorňování chemických struktur na www stránkách*. In: Profil učitele chemie II., Gaudeamus, 173-175.
49. Ollé János (2012): A digitális állampolgárság értelmezése és fejlesztési lehetőségei. In: *Oktatás-Informatika*, 2013/1-2. <http://bit.ly/15BA4h1> (Letöltés ideje: 2016. június 1.)
50. Ollé János, Lévai Dóra, Domonkos Katalin, Szabó Orsi, Papp-Danka Adrienn, Czirfusz Dóra, Habók Lilla, Tóth Renáta, Takács Anita, Dobó István (2013): Digitális állampolgárság az információs társadalomban, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, 13-16.
51. Pais István Dr., Biczók Ferencné Dr. (1967): *A kémia tanításának módszertana*, Tankönyvkiadó, Budapest.
52. Philip Harris System – User Manual and Teachers Notes / Abington G.C. 1994/
53. Pišút Ján, Zajac R. (1988): *O atónoch a kvantovaní*, Alfa, Bratislava, 10, 186
54. Pukánszky Béla, Németh András (1996): *Neveléstörténet*, Nemzeti Tankönyvkiadó Rt., Budapest
55. Ribble, M. (2011): *Digital Citizenship in Schools*. Second Edition. International Society for Technology in Education. Eugene, Oregon, Washington, D.C.
56. Streitwieser, A.Jr. (1968): *Teória molekuloých orbitov v organickej chémii*, SAV, Bratislava
57. Takeuchi, Y. (2000): *Virtual chemical education network - novel teaching by means of internet*. In: 16th International Conference on Chemical Education (16th ICCE) – Book of abstracts, Budapest 2000, 21-24.
58. Varga Attila (1984): A pálcikamodellek alkalmazása az általános iskolai kémiatanításban, In: *A kémia tanítása*, XXIII. évfolyam, 1. szám, 12-18.
59. Veszprémi Tamás, Fehér Miklós(2000): *A kvantumkémia alapjai és alkalmazása*, Műszaki Könyvkiadó Kft., Budapest,

60. Vollárová Olga, Grančičová Viera(1990): Cvičenia z metód fyzikálnej chémie, PvF UK Bratislava,
61. Vacík J. (1986): Obecná chemie, Státní pedagogické nakladatelství, Praha, 58-60
62. Zelenický Lubomír (2005): *Modelovanie a poznávanie vo vyučovaní fyziky*, FPV UKF v Nitre, 38-39, 47.
63. Žúrková Ľudmila, Fischer Oldřich, Pacák Jozef, Sopková Anna, Stanek Zdenko (1984): Všeobecná chémia, SPN, Bratislava, 82-88.