

ESZTERHÁZY KÁROLY EGYETEM
NEVELÉSTUDOMÁNYI DOKTORI ISKOLA

A SZÁMÍTÓGÉPES MOLEKULAMODELLEZÉS ÉS A KÉMIAI KÖTÉS ELMÉLETÉNEK
OKTATÁSA

HABILITÁCIÓS ÉRTEKEZÉS TÉZISEI

PaedDr. Juhász György, PhD.

Eger, 2016

TARTALOM

Előzmények és célok	3
Az értekezés tárgya	5
A felmérés módszere – adatgyűjtés	7
Eredmények és javaslatok a számítógépes molekulamodellőzés gyakorlati oktatási alkalmazására	9
Összefoglalás	10
Hivatkozott irodalom	12
A szerző tudományos tevékenységének az értekezés témaköréhez kapcsolódó adatai	13
Az értekezés témakörében megjelent publikációk	13
Az értekezés témaköréhez kapcsolódó tudományos előadások	15

Előzmények és célok

A szlovákiai és ezen belül a szlovákiai magyar iskolák fejlődését meghatározó legfontosabb tényezők közé sorolhatjuk 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). Újjonnan 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.

A szlovákiai magyar kémiantanárképzés 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 Tanszékkel együtt. Ezen intézmény végzősein kívül már csak a szlovák egyetemeken képzett magyar anyanyelvű kémiantanár szakos hallgatók voltak azok, akik kémiantanári 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 elévülhetetlen szerepe volt prof. Cornides István tanár úrnak, az ELTE címzetes egyetemi tanárának, aki hosszú éveken át

egészen addig, amíg betegsége ebben meg nem akadályozta, oktatta a jövő szlovákiai magyar kémia- és fizikatanárokat.

A helyzetelemzéshez hozzátartozik, hogy magyar nyelvű kémiatanárképzés, amely a múlt század 90-es éveiben újrakezdődött Nyitrán, 2010-re ebben az intézményben teret veszített, nem nyíltak magyar csoportok, így nem lehetett külön foglalkozni a magyar anyanyelvű 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.

A tézisek összeállítója 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. Későbbiekben kvantumkémiailag számításokkal foglalkozva közel került azokhoz a kvantumkémiailag módszerekhez és eljárásokhoz, amelyek a számítógépes molekulamodellizálás alapjául szolgálnak. A gyenge molekulák közötti kölcsönhatások elméleti vizsgálata lehetővé tette számára alkalmazni azokat az *ab-initio*, szemempirikus és DFT kvantumkémiailag módszereket, amelyek a báziskészletek megismerésével együtt lehetővé teszik az olyan felhasználóbarát molekulamodellizáló programok használatát, mint amelyeket a munkánkban ajánlunk (Hyperchem, Avogadro).

Munkánk több cél elérését tűzte ki célul. Elsődlegesen az elmúlt húsz év során bekövetkezett szakmai fejlődésünket szeretnénk bemutatni, beleértve a gyakorlati pedagógiai szakterületet és a kutatási részt is. Következő célunk felmérni a szlovákiai magyar iskolák innovatív potenciálját a kémiaoktatás modernizálására és szemléletesebbé tételére. Kiindulva egy húsz évvel ezelőtti felmérésből összehasonlítani a számítógéppel támogatott kémiaoktatás területén a jelenlegi állapotokat a húsz évvel ezelőttivel, nagy hangsúlyt fektetve a számítógépes molekulamodellizálásra, mint a szemléltetés egyik modern eszközére. További céljaink közé tartozik áttekintve az elérhető hazai és külföldi szakirodalmat kiválasztani azokat a kémiaoktatásban nélkülözhetetlen tudományterületi témaköröket, amelyek alkalmasak a számítógépes molekulamodellizálás gyakorlati alkalmazására a kémiatanárképzésben. Végezetül célként tüntetjük fel a számítógépes molekulamodellizálás olyan gyakorlati alkalmazását, amelyet az általunk végzett felmérésekből és a szakirodalom áttekintéséből nyert kiindulási ismeretek alapján állítottunk össze, és amely a modern egyetemi kémiatanárképzésben alkalmazható vagy

speciális szemináriumok keretén belül, vagy pedig a kémia olyan tudományágainak az oktatásánál is, mint a szerves kémia vagy a kémiai kötéselmélet.

Az értekezés tárgya

Az értekezés címében megjelölt tárgyból adódik a tárgyalt téma sokoldalú megközelítése és tárgyalása. Kiindulási alapként áttekintjük Szlovákia és Magyarország eredményességét az OECD által szervezett PISA felméréseken, nagy figyelmet szentelve az egyik vizsgált területre, az alkalmazott természettudományi műveltség területére. Mint a 2012-es eredményekből kitűnik, mindkét országnak van még sok tennivalója ezen a szakterületen, ahhoz, hogy kiemelkedjen az OECD átlagból és az eredményes országok közé csatlakozzon. 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 anyagilag támogatni fogja a természettudományokat (beleértve a matematikát) és műszaki tudományokat hallgató egyetemistákat is, ami az utóbbi években meg is valósult. (Balácsi, 2013), (Ferencová, 2015)

Az első fejezetben az infokommunikációs eszközök szerepét vizsgáljuk az oktatásban, különös tekintettel a kémiaoktatásra. Kiindulási alapként szolgál a már említett felmérés, amely a szlovákiai magyar gimnáziumokba valósult meg 1993-ban. Megállapíthatjuk, 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. Az oktatási szoftverek közül is többségében csak szlovák verzióval rendelkeztek a gimnáziumok, mindössze kis hányaduk rendelkezett mindkét nyelvű (szlovák és magyar) oktatási szoftverrel. A tanárok több nagy része azonban nem tudott olyan cégekről, szervezetekről, ahol be lehet szerezni módszertani szempontból fontos oktatási számítógépes programokat, azonban szeretettek volna hozzájutni ezekhez.. Ebben a fejezetben a továbbiakban

elemezzük a digitális állampolgárság fogalmát, kitérünk a digitális eszközhasználat egyes kompetenciáira és saját tapasztalatunkból kiindulva bemutatjuk azokat a kezdeményezéseket, amelyek úttörő jellegűek voltak a múlt század 90-es éveinek vége felé. (Ollé, 2012), (Habók–Czirfusz, 2013)

A második fejezetben a modellezés és a kémiaoktatás kapcsolatát boncolgatjuk, rávilágítva, hogy a szemléltetés az ismeretközvetítés legtermészetesebb módja (Mojzes, 1984). A továbbiakban áttekintjük a kémiaoktatásban használt materiális modellekhez kapcsolódó didaktikai szemléleteket, ezek fejlődési görbét, kiindulva a múlt (XX.) század végi módszertani értelmezésekből eljutva a mai kor szemléletéig. 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 leírtunk, amelyet a mikrovilág jelenségeinek vizsgálatainál a legcélszerűbb használni. A fejezet fontos része a gondolkodási képességek fejlesztése és a számítógépes molekulamodellezés közti kapcsolat tárgyalása, amely főleg Dori és Kabermann (Dori, Kabermann, 2012), továbbá Balázs Katalin (Balázs, 2015, 122) tanulmányaiból indul ki, és amelyben rávilágítunk arra a tényre, hogy az absztrakt gondolkodás egyes fázisai hogyan illeszthetőek be a kémiaoktatás és a modellezés kapcsolatrendszerébe. Bemutatjuk továbbá azt az oktatási modellt, amelyet a Dori és Kabermann (Dori, Kabermann, 2012) vezetett be a kémiaoktatás támogatására a számítógépes molekulamodellezés segítségével, kielemezve a használt modell előnyeit és hátrányait. Balázs Katalin (Balázs, 2015, 120-122) szerint a kémia tantárgy népszerűtlenségének az egyik oka az absztrakciós gondolkodás szükségessége. A modellezés pedig egy újabb absztrakciós szint, amelyet összefüggésbe kell hozni a valóságban megtapasztalható jelenség szinttel. 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 következő fejezet kronológiai sorrendben próbálja bemutatni a kémiai kötés elméletének fejlődését a kezdetektől napjainkig. A kémiai kötés modern elmélete, amely a kvantummechanika ismeretein alapszik ma már szerves része a kémiaoktatásnak. Ehhez természetesen bizonyos approximációkat (egyszerűsítéseket) kell alkalmaznunk, amely segít a

kötés kialakulásának a mechanizmusát megismerni. A fejezetben bemutatjuk a hullámmechanikai atommodell alapjait, megismerkedünk a kémiai kötéssel kapcsolatos alapfogalmakkal és részletesebben foglalkozunk a Hückel-féle molekulapálya elmélettel. Röviden ismertetjük a számításoknál használt báziskészletek leírását és alkalmazási lehetőségeit.

A negyedik fejezet a számítógépes molekulamodellezés gyakorlati alkalmazását hivatott bemutatni. Újra visszatérünk a szlovákiai magyar középiskolákba felmérni, milyen mértékben használják ezt a modern eszközt a molekulák mikroszkopikus tulajdonságainak szemléltetésére. Az eredményekből kitűnik, hogy a számítógépes molekulamodellezés jelenleg nem tartozik a leggyakrabban alkalmazott motivációs tényezők közé a szlovákiai magyar, de általánosságban sem a középiskolai kémiaoktatásban, bár a tanárok egy része látja benne a motivációs lehetőségeket és jó meglátással fedezi fel azokat a témaköröket is, amelyek alkalmasak a modellező szoftvercsomagok alkalmazására. Ezekből az eredményekből kitűnik továbbá az, hogy a felkészítést a felsőoktatásban a tanárképzésnél kell kezdeni, olyan kurzusokkal és választható tantárgyakkal, amelyek erre alkalmasak.

Áttekintve a nemzetközi szakirodalomban ezzel a témakörrel foglalkozó tanulmányokat kiválasztottuk azokat a témaköröket, amelyek alkalmasak a molekulamodellező szoftvercsomagok alkalmazására a kémiaoktatásban. Ezért ebben a fejezetben néhány olyan témakör elméleti leírását és ezzel kapcsolatos számítógépes molekulamodellzési 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.

A felmérés módszere – adatgyűjtés

Összehasonlítva a természettudományi és a módszertani kutatásokat elmondhatjuk, hogy a természettudományi kutatások során túlnyomó többségében megfelelő műszerek segítségével gyűjtjük az információkat a vizsgált rendszerről. A tantárgy-pedagógiai kutatásokban viszont a

mérőeszközökön általában kérdőíveket értjük. Balázs Katalin szerint a természettudományos vizsgálat jelenségei általában pontosan meghatározhatóak, 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 a természettudományi kísérleteknél tudunk bármilyen tulajdonságot mérni, addig pl. a tanulók tudásszintjét sokkal nehezebb megmérni, 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, 310)

Két felmérést valósítottunk meg. Az első felmérés során 1993-ban 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. 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.

Mivel 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 megmutatózó problémákat is, 2016-ban egy újabb felmérésben igyekeztünk a számítógépek, mint módszertani segédeszközök felhasználásának, vagy nem használásának az okait és lehetőségeit vizsgálni a szlovákiai Magyar gimnáziumokban, valamint szeretnénk volna feltérképezni a számítógépes molekulamodellőzés alkalmazását a kémiaoktatásban ugyanitt 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.

Eredmények és javaslatok a számítógépes molekulamodellezés gyakorlati oktatási alkalmazására

2016-os 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 jó kiindulási alapként tekinthetünk erre a felmérésre. Mivel a kérdések bizonyos hányada megegyezett az 1993-as felmérés kérdéseivel, így össze tudtuk hasonlítani az akkori és a jelenlegi állapotot és láthatóvá váltak a trendek is az IKT és a kémiaoktatás kapcsolatában a szlovákiai magyar gimnáziumokban.

Az első kérdésre, hogy rendelkezik-e az iskola számítógépes oktatási teremmel, minden válaszadó igennel felelt. Látjuk tehát az elmúlt 20 év fejlődését, köszönhetően az Európai Unió programoknak és annak, hogy ezzel megnőttek a más hozzáférhető források keretei is. Nagy, központilag irányított programok indultak be, mint pl. az Infovek és más eszközbeszerzéses (táblagépek) programok. Így a hardver rendelkezésre áll, és bár nem kérdeztünk rá a számítógépek korára és teljesítménye sem, ismerjük azt a tényt, 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 felmérés további fontos kimenetei közé sorolhatjuk azokat a tényeket, hogy beigazolódott, hogy a kémiai oktatóprogramok (főleg a magyar nyelvű oktatóprogramok) beszerzése még mindig nagy problémát jelent gimnáziumaink számára, ennek az egyik oka a forráshiány a másik pedig a hozzáférhető oktatóprogramok hiánya. A számítógépes molekulamodellezés oktatási alkalmazása terén hasonló a helyzet. A felmérés alapján az iskolák majdnem 80%-ban nem használnak ilyen szoftvereket a molekulák egyes tulajdonságának szemléltetésére.

Amint látjuk, a helyzet a szlovákiai magyar középiskolákban az IKT kémiaoktatásban történő felhasználása terén nem sokat változott az elmúlt húsz évben. 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. Így megállapíthatjuk, hogy a felkészítést a felsőoktatásban a tanárképzésnél kell kezdeni, olyan kurzusokkal és választható tantárgyakkal, amelyek erre alkalmasak. A habilitációs dolgozat következő részben ezért néhány olyan témakör elméleti leírását és ezzel kapcsolatos számítógépes molekulamodelllezési feladatot ismertettünk meg, amelyek beilleszthetőek a kémiatanár-képzés kurzusainak egyes témaköreibe. Ehhez csatoltuk 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.

Felmerülhet bennünk a kérdés, hogy melyek azok a témakörök, amelyek nélkülözhetetlenek a kémiai folyamatok megismerésénél és már az egyetemi kémiatanárképzés első évfolyamában bevezetésre kerülhetnek? Egy indianai egyetemi kutatás eredményeit (deSouza R.T , 2013) is figyelembe véve megállapíthatjuk, hogy ezek a fizikai alapismeretek a következő témaköröket foglalják 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. Mi a számítógépes molekulamodellzés szempontjából két témakört ragadunk ki a javasolt tervezetből. Ez a két témakör a Kötélmélet (MO - molekulapályák) és a dobozba zárt részecske modellje, ugyanis ezek a témakörök szorosan kapcsolódnak a Schrödinger-egyenlet és a hullámfüggvény fogalmának megismeréséhez és értelmezéséhez.

Összefoglalás

A habilitációs dolgozatban 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 dolgozat végén feladatokat javasoltunk a számítógépes molekulamodellzés 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 dolgozat eredményei és feladatai eljutnak 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!

Hivatkozott irodalom

1. Balázs Katalin, Csenki József, Főző Attila László, Labancz István, Riedel Miklós, Rózsahegyi Márta, Schróth Ágnes, Szalay Luca, Tóth Zoltán, Wajand Judit (2015): A kémia tanítás módszertana, ELTE, Budapest.
2. Balácsi Ildikó, Ostorics László, Szalay Balázs, Szepesi Ildikó, Vadász Csaba (2013): *PISA2012 Összefoglaló jelentés*. Oktatási Hivatal, ISSN 2064-3772
3. 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-informaciocsere-a-digitalis-korban-a-kommunikacio-modellje-eszkozei-es-kommunikacios-helyzetek-a-digitalis-terben/> (Letöltés ideje: 2016. június 1.)
4. 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.
5. 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.
6. Ferencová Jana, Stovíčková Jana, Galádová Andrea (2015): *PISA 2012 Národná správa Slovensko*. Národný ústav certifikovaných meraní vzdelávania, Bratislava
7. Mojzes János (1984): *Módszerek és eljárások a kémia tanításában*. Tankönyvkiadó, Bp., 1984, 76-78, 144-146.
8. 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.)

A szerző tudományos tevékenységének az értekezés témaköréhez kapcsolódó adatai

Az értekezés témakörében megjelent publikációk

1. Juhász J., Matulík D., Szakáll T.(1997): Využitie multimedialneho softvéru vo vyučovaní chémie, In: Peter Konečný, Veronika Stoffová (szerk.) MEDACTA 97,Vzdelávanie v meniacom sa svete: (Education in the changing world), Nitra: Slovidac, 1997. pp. 349-351.
2. Matulík D., Juhász J.(1999):Computer aided experiments in science, In: Stanislav Holec, Miroslav Murin, Jana Raganová (szerk.) Proceedings of the Conference Science Teacher Training 2000., Banská Bystrica: Matej Bel University, 1999. pp. 209-213.
3. Juhász J., Matulík D.(1999): Školské pokusy s počítačom, In: Brestenská Beáta, Siváková Mária, Csóka Ester, Ganajová Mária, Cejpek Kamil (szerk.), Aktuálne problémy vyučovania chémie na základných a stredných školách: Zborník z medzinárodnej konferencie DIDCHEM, Bratislava: Štátny pedagogický ústav, 1999. pp. 224-230.
4. Juhász J., Matulík D.(2001): Nové trendy vo vyučovaní chémie pomocou internetu, In: Martin Bílek (szerk.) Aktuální otázky výuky chemie X., Hradec Kralove: Gaudeamus, 2001. pp. 154-155.
5. Kysel' O., Juhász Gy., Mach P.(2003): Theoretical Study of Solvent Effect on π -EDA Complexation I. SCF and DFT Calculations Within Polarized Continuum Model on TCNE-Benzene Complex, COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 68:(12) pp. 2355-2376. (2003)
6. Kysel' O., Juhász Gy., , Jozeková M. (2004):Theoretical study of TCNE-(benzene)₂ complex formation by DFT and PCM models, CHEMICKÉ LISTY 98:(8) p. 722. 1 p. (2004)
7. Juhász Gy., Varga G.(2005): Molecular modeling in chemistry curriculum, In: L'ubomir Zelenický (szerk.), Acta didactica 8: Modelling in Science Education. Nitra: Constantine the Philosopher University, 2005. pp. 21-2
8. Juhász Gy., Kysel' O., Hegedús O.(2006):Molekulové modelovanie v príprave budúcich učiteľ'ov chémie, In: Karel Myška, Pavel Opatrný (szerk.) Soudobé trendy v chemickém vzdělávání (Mezinárodní seminář). Hradec Kralove: Gaudeamus, 2006. pp. 85-89.
9. Kysel' O., Juhász G., Mach P., Kosik G.(2007): Theoretical study of solvent effect on π -EDA complexation II. Complex between TCNE and two benzene molecules, CHEMICAL PAPERS / CHEMICKÉ ZVESTI 61:(1) pp. 66-72. (2007)
10. Juhász György (2011): A számítógépes molekulamodellezés helye a kémiatanár-képzésben: The role of computer-aided molecular modelling the initial training of chemistry teachers, In: Tasnádi Péter, et al: Természettudomány tanítása korszerűen és

- vonzóan: motiváció, tehetséggondozás, tanárképzés, az előadások és poszterbemutatók szerkesztett anyaga., Budapest: ELTE TTK, 2011. pp. 573-576.
11. Juhász György(2012): Nové technológie a výučba chemickej väzby, In: Veronika Stoffová (szerk.) Education for information and knowledge based society: Vzdelávaine pre informačnú a vedomostnú spoločnosť. Komárno: Univerzita J. Selyeho, 2012. pp. 204-209.
 12. Juhász Gy.: Implementácia poznatkov z chemickej fyziky do prípravy budúcich učiteľov chémie, In: Ján Reguli (szerk.) Aktuálne trendy vo vyučovaní prírodných vied [Recent Trends in Science Education], Trnava: Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity, 2012. pp. 285-288.
 13. Mach, P., Juhász, Gy., Kysel' O.(2013):Theoretical study of electronic absorptions in aminopyridines: TCNE CT complexes by quantum chemical methods, including solvent, JOURNAL OF MOLECULAR MODELING 19:(11) pp. 4639-4650. (2013)
 14. Juhász Gy.(2013) : Vyučovanie prírodovedných disciplín a IKT, In: Juhász György et al (szerk.): Új kihívások a tudományban és az oktatásban - Pedagógia- és Humántudományi szekciók: Zborník medzinárodnej vedeckej konferencie Univerzity J. Selyeho – 2013: Komárno: Selye János Egyetem, 2013. pp. 436-442.
 15. Szarka K., Juhász Gy. (2014): Model učenia interaktívnym molekulovým modelovanym na ZŠ In: Martin Bílek (szerk.): Research, theory and practice in chemistry didactics/Science and technology education for the 21st century: proceedings of the 23rd International Conference on Chemistry Education and 9th Regional IOSTE Symposium for Central and Eastern Europe, Hradec Králove: Gaudeamus, 2014. pp. 362-373.
 16. Szarka K., Brestenská B., Juhász Gy.(2015) : Analýza aspektov hodnotenia autentických výstupov a komplexného monitorovania žiackych prác v chémii: Analysis the Aspects of Assessment Authentic Learning Outcomes and their Complex Evaluation in Chemistry Education In: Hana Cídlová (szerk.) XXIV. Mezinárodní konference o výuce chemie: Didaktika chemie a její kontexty: Sborník příspěvků z conference, Brno: Masarykova Univerzita, 2015. pp. 200-208.
 17. Mach P., Budzak S., Juhász Gy., Medved' M., Kysel' O. (2014):Theoretical study (CC2, DFT and PCM) of charge transfer complexes between antithyroid thioamides and TCNE: electronic CT transitions, JOURNAL OF MOLECULAR MODELING 20:(6) Paper 2312. 16 p. (2014)
 18. Juhász Gy., Szarka K.(2015): A számítógépes molekulamodellzés alkalmazása a π -delokalizált rendszerek MO elméletének oktatásánál, In: Námesztovszki Zsolt, Vinkó Attila (szerk.): 21. Multimédia az oktatásban és 2. IKT az oktatásban konferencia - 21. Naučna konferenci ja „Multimediji u obrazovanju” i 2. Naučna konferencija „IKT u obrazovanju., Szabadka: Újvidéki Egyetem Magyar Tannyelvű Tanítóképző Kar, 2015. pp. 98-101.
 19. Juhász Gy. (2015): A számítógépes molekulamodellzés és a környezetpedagógia közös aspektusai, In: Kováts-Németh Mária, Bodáné Kendrovics Rita (szerk.): A

környezetpedagógiai elmélete és gyakorlata. Győr: Palatia Kiadó, 2015. pp. 185-200. (ISBN:978-963-7692-64-2)

20. Juhász Gy.(2016): A számítógépes molekulamodellzés és a kémiai kötés elméletének oktatása, Győr: Palatia Kiadó, 2016., (ISBN 978-963-7692-78-9)

Az értekezés témaköréhez kapcsolódó tudományos előadások

1. Juhász György, Matulík D., Szakáll T.(1997): Využitie multimedialneho softvéru vo vyučovaní chémie (Multimediális szoftverek felhasználása az oktatásban), MEDACTA 97, Medzinárodná konferencia, Vzdelávanie v meniacom sa svete: (Education in the changing world). Konferencia helye, ideje: Nitra, Szlovákia, 1997.06.10-1997.06.13.
2. Juhász György, Matulík D.: Školské pokusy s počítačom (Számítógépes iskolai kísérletek), DIDCHEM – Nemzetközi kémiaoktatási konferencia, Konferencia helye, ideje: Tatranská Štrba, Szlovákia, 1998.10.07-1998.10.09.
3. Juhász György, Matulík Daniel: Magyar nyelvű előadás: Internet a kémiaoktatásban – szlovákiai tapasztalatok, Angol nyelvű poszter: Visualisation in teaching of mechanisms of organic reactions, 16. Kémiaoktatási Világkonferencia (16th International Conference on Chemical Education -16th ICCE) és XIX. Magyar Kémia tanári Konferencia, Konferencia helye, ideje: Budapest, 2000.aug.5-10,
4. Juhász György, Matulík Daniel: Nové trendy vo vyučovaní chémie pomocou internetu (Új trendek a kémiaoktatás és az Internet kapcsolatában), Aktuální otázky výuky chemie X (A kémiaoktatás aktuális kérdései – X.) Konferencia helye, ideje: Hradec Králové, Csehország, 2000.09.05-2000.09.07.
5. Juhász György, Kysel' O., Hegedűs O. : Molekulové modelovanie v príprave budúcich učiteľ'ov chémie (A molekulamodellzés és a kémiatanárképzés), Soudobé trendy v chemickém vzdelávaní - Mezinárodní seminář (A kémiaoktatás jelenkori irányjai - Nemzetközi szeminárium), Konferencia helye, ideje: PdF UHK Hradec Králové, Csehország, 2006. 09. 14
6. Juhász György: A számítógépes molekulamodellzés helye a kémiatanár-képzésben: The role of computer-aided molecular modelling the initial training of chemistry teachers, 1. Természettudomány tanítása korszerűen és vonzóan: motiváció, tehetséggondozás, tanárképzés: nemzetközi konferencia magyarul tanító tanárok számára az ELTE Természettudományi Oktatásmódszertani Centrum és az InfoPark Alapítvány szervezésében : Budapest, 2011. augusztus 23-25.
7. Juhász György: Výučba teórie chemickej väzby pomocou nových technológií (A kémiai kötés elméletének oktatása az új technológiák segítségével, XXV. D I D M A T T E C H 2012., Konferencia helye, ideje: Komárom, Szlovákia, 2012.09.10-2012.09.13.
8. Juhász György: Implementácia poznatkov z chemickej fyziky do prípravy budúcich učiteľ'ov chémie (A kémiai-fizika ismeretanyagának felhasználása a

- kémia tanárképzésben), 2. Aktuálne trendy vo vyučovaní prírodných vied [Recent Trends in Science Education]: Konferencia helye, ideje: Smolenice, Szlovákia, 2012.10.15-2012.10.17.
9. Juhász György: A természettudományi tárgyak oktatása és az IKT, Új kihívások a tudományban és az oktatásban, A Selye János Egyetem Nemzetközi Tudományos Konferenciája, Konferencia helye, ideje: Komárom, Szlovákia, 2013.09.17-2013.09.18.
10. Szarka Katarína., Brestenská Beata., Juhász György.(2015) : Analýza aspektov hodnotenia autentických výstupov a komplexného monitorovania žiackych prác v chémii: Analysis the Aspects of Assessment Authentic Learning Outcomes and their Complex Evaluation in Chemistry Education, XXIV. Mezinárodní konference o výuce chemie, (XXIV. Nemzetközi kémiaoktatási konferencia), Konferencia helye, ideje: Univerzitní centrum Šlapanice, Csehország, 20.–21. 5. 2015. május 20-21.