

Är abstraktion hemskt – eller hemskt bra? Ett problem kan bli en möjlighet inom kemiundervisningen.

Sture Nordholm och William Eek
Institutionen för Kemi, Göteborgs Universitet

Resumé:

Kemin är central bland vetenskaperna med kraftiga inslag av både matematik och fysik å ena sidan och biologi, geologi och medicin å den andra sidan. Lärandet och forskandet innehåller därför både matematisk abstraktion och konkret experimentell metodik och empiri. Detta vida spann är en stor utmaning för elever, studenter och kemister i allmänhet. Här redovisas resultatet av ett projekt som haft till mål att reducera barriärer i lärandet av abstrakta begrepp inom kemin. Tre olika metoder har utnyttjats: förenkling, nyttjande av analogier och visualisering med hjälp av dator. Exempel redovisas kortfattat och läsaren hänvisas till skrifter och datorprogram.

Introduktion

Inom naturvetenskaperna finns en inneboende process för generering och förädling av kunskap som i bilden nedan.

Observation \Rightarrow Systematik \Rightarrow Teori \Rightarrow Förståelse

Kemin erbjuder många bra exempel på den förädlingsprocess som leder från observation till förståelse. Ett sådant är det periodiska systemet som började med observationer av atomers egenskaper som sedan av Mendeléev systematiserades till det periodiska system som sitter på många väggar i klassrum runt om i världen. Dock visade det sig redan för 80 år sedan att periodiciteten i sin tur kunde förklaras som konsekvens av kvantmekanikens grundlagar applicerade på elektroners rörelser runt atomkärnor. Kunskapen förädlades härigenom till form av teori. Det slutliga steget att nå förståelse betyder i princip att man inte längre behöver använda matematiska beräkningar för att förutspå eller förklara atomernas egenskaper och beteende. Man känner mekanismer som teorin baseras på så väl att man kan förutse resultat utan beräkning.

Denna förädlingsprocess innebär både stora fördelar i varje steg till höger, främst i den ökande generaliteten och vidare tillämpligheten, men också en ökande grad av abstraktion som kan upplevas svår. Således är det uppenbarligen så att många känner till atomerna och deras mest dominerande egenskaper. Ett stort antal känner dessutom till det periodiska systemet men betydligt färre kan använda kvantmekanikens Schrödingers ekvation för att beräkna atomers egenskaper. Till sist är det betydligt lättare att göra sådan kvantmekaniska beräkningar för atomer – särskilt nu när snabba datorer och kommersiella program är lätt tillgängliga - än att förstå de mekanismer som kommer till uttryck tillräckligt att kunna förutse resultaten.

Kvantkemin och termodynamiken är rika källor till viktiga abstrakta begrepp vars lärande kan för många elever och studenter vara förenat med stora svårigheter och frustration. Lika fullt är dessa delområden av kemin enormt viktiga. Vi har därför arbetat i ett projekt med målet att minska dessa ”abstraktionsbarriärer” som upplevs och dessutom göra våra studenter mer kapabla att abstrahera. Vi har haft tre olika vägar till detta generella mål. Den första är att ompröva den teori som upplevs abstrakt och svårförståelig och utveckla ny teori som förenklar utan att förlora sin riktighet. Teorier är nämligen inte unika än mindre dess härledning. Man kan därför ofta finna ekvivalenta men enklare teorier som är lättare att lära.

Faktum är att sökandet efter enkelhet också är en del av arbetet som lägger grund för djupare teoribildning. En andra väg är att utnyttja en abstraktions generalitet för att med en väl vald analogi illustrera dess innehåll. Även detta är en ofta använd metod för lösning av problem. Man abstraherar först tills problemet får en mer generell form. Då upptäcker man att denna problemform genereras även från andra specifika ämnesområden. Till sist finner man att någon redan löst det generella problemet. Om inte gläds man åt att få hjälpa till att lösa problem inte bara för sitt eget ämnesområde.

Den tredje vägen är att utnyttja datorernas möjlighet att åskådliggöra abstrakta begrepp genom visualisering och simulering av abstrakta modeller och mekanismer. Modern forskning utnyttjar simulering och visualisering i mycket hög utsträckning men i vårt arbete tillkommer målet att förenkla lärandet. Vi vill försöka visa bilder och förlopp som motsvarar de som erfarna lärare ser i egen tankevärld när man förstått ett fenomen.

Ett antal skrifter och verktyg har producerats som utnyttjar de tre vägar mot målet som sammanfattats ovan. De är kort beskrivna i det följande och rekommenderas till egna studier.

Termodynamik

Allt sedan sin födelse för cirka 150 år sedan har termodynamiken varit lika viktig som abstrakt och därigenom svår för både lärande och lärare. Begreppet energi är på allas läppar men det än viktigare begreppet är entropi enligt termodynamiken. Tyvärr är både den andra huvudsatsen som introducerar begreppet och begreppet i sig självt bland det mest abstrakta som finns i kemin och i naturvetenskap i allmänhet.

Analogi: Vi har visat att man kan med fog säga att begreppen Energi och Entropi i termodynamiken motsvarar begreppen Pengar och Frihet i vårt ekonomiska vardagsliv [1]. Det borde bli genast uppenbart att dessa begrepp har en dominerande ställning i sina respektive områden och åtminstone ett av dessa områden är vi väl bekanta med.

Simulering och visualisering: Vi har utvecklat ett program GAS SIMULATOR [2] som låter oss se och manipulera en gas bestående av partiklar, antingen ideala punktpartiklar eller hårda sfärer, som rör sig i en rätvinklig låda avslutad med en – om vi så vill – rörlig kolv i ena lådriktningen. Härmed kan inses hur energi och temperatur reflekteras i partikelrörelsen, hur tryck uppkommer genom partikelkollisioner med vägg och hur entropi förknippas med volym och ökar med ökande volym. Även gasens värmekapacitet kan beräknas.

Kvantkemi

Kvantmekaniken upplevs av många kemistuderande som en särskilt matematisk form av fysik som smugit sig in i kemin och där gör livet svårt för dem. Likafullt är det så att kemin till sina fundamentala delar, t. ex. atomstruktur, molekyler och kemiska bindningar, vilar på kvantmekaniken. Den går alltså inte att förkasta utan att därmed kraftigt begränsa förmågan att förädla kunskaperna i kemi enligt progressionen illustrerad i figuren ovan. Vi har därför tagit oss an att göra kvantmekaniken och kvantkemin mer tillgänglig.

Endimensionell kvantmekanik – Visualiserade beräkningar:

Vi har skapat ett program 1DQM [3] som tillåter oss att för en förutbestämd eller egendefinierad endimensionell potential beräkna ett antal av de lägst liggande energiegenvärdena som visas inplacerade som nivålinjer i motsvarande potentialenergigrup. Energiegenfunktionerna kan även visas liksom motsvarande sannolikhetstätheter. Beräkningen utförs med finita bassetsmetoden som ingår i undervisningen från andra universitetsåret och uppåt. Metoden beskrivs i medföljande information och programmet blir därmed en inte svart utan genomskinlig låda. Programmet låter också eleverna undersöka potentialer som inte beskrivs i kurslitteraturen. Eleverna kan på så sätt testa och förädla sin kunskap.

Atomstruktur – Teoriförenkling och visualiserad beräkning:

Väteatomen går som tur är att behandla exakt med analytiska metoder men atomer med två och flera elektroner presenterar ett olösligt problem för exakta metoder. De måste hanteras med approximationer som behandlar växelverkan mellan elektronerna och därmed tyvärr blir svåra att förstå. Härav följer att de flesta kemister och studenter i kemikurser upplever en kraftig förståelsebarriär bortom det periodiska systemet och de empiriska Aufbau reglerna. Vi har visat [4,5] att effekten av elektron-elektron repulsionen i en neutral atom kan med god noggrannhet beskrivas om vi använder en skärmad atompotential som exponentiellt reducerar den effektiva kärnladdningen från Ze vid kärnan till e för stora avstånd. Avklingningskonstanten är i atomära enheter lika med $Z^{1/3}$. Motsvarande beräkningar av atomorbitaler och energier kan enkelt utföras med vårt program VisQMChem [6] som illustrerar resultaten grafiskt. Även i detta program löses Schrödingers ekvationen med finita basmetoden.

Molekyler och kovalent bindning - Teoriförenkling och visualiserad beräkning:

Atomers viktigaste egenskap är reaktivitet som leder till att molekyler bildas i mycket specifika stökiometrier och selektiva geometriska strukturer. Detta är kemins centrala fundament. Vi säger att atomer medelst kovalenta bindningar bildar molekyler. Tyvärr visar sig begreppet kovalent bindning vara lika subtilt som viktigt. Vi har visat att mekanismen är av dynamisk karaktär och relaterad till valenselektronernas rörelser mellan atomerna (delokalisering) i molekylen. Dessa rörelser avspeglas i egenskaperna hos de molekylorbitaler som i enklare former av kvantkemi utgör grunden för beräkning av energi och struktur. Således är kovalent bindning associerad med molekylorbitaler som sträcker sig över minst två atomer. I de fall när vi har resonansstabilisering är molekylorbitalerna ytterligare delokaliserade, dvs. över mer än två atomer. Styrkan i bindningen beror också på avståndet i energi mellan molekylorbitalerna. Större energiskillnad mellan molekylorbitalerna motsvarar starkare bindning. Enklaste modellen för att omsätta denna förståelse i beräkning är Hückels molekylorbitalmodell som beskriver π -elektronernas rörelser och energibidrag till plana konjugerade kolvätemolekyler. Den dynamiska karaktären av den kovalenta bindningsmekanismen som uttryckt i Hückelteorin för π -elektroner har nyligen beskrivits [7] och ett datorprogram HÜCKEL [8] tillåter plana kolvätemolekyler att konstrueras på datorskärmen för att sedan bli föremål för en beräkning enligt Hückelteorin. Både π -orbitalerna och motsvarande orbitalenergier visas grafiskt på skärmen. För att inse motsvarande elektronrörelser kan man i programmet placera en elektron på en av kolatomerna och sedan starta rörelsen. Man ser då hur elektronen, vars läge beskrivs av ett vågpaket enligt kvantmekaniken, delokaliseras över de delar av molekylen som sammanlänkas av molekylorbitalerna.

För det generella fallet av molekylbildning genom kovalent bindning finns två ytterligare pedagogiska program utvecklade. För de minsta molekylerna H_2^+ och H_2 finns ett datorprogram HYDROGEN [9] som grafiskt illustrerar resultatet av en enkel kvantkemisk beräkning i ett basset bestående av de två väte 1s-atomorbitalerna med möjlighet att ändra koefficienten i exponentialfunktionen till ett valt värde eller låta programmet optimera denna koefficient så att energin minimeras. Man kan sedan med hjälp av datorgrafik studera bindningsenergin, såväl som dess komponenter i form av potentialenergi och kinetisk energi, som funktion av avståndet mellan protonerna för olika sätt att behandla koefficienten i bassetts exponentialfunktion. Resultaten visar att beroende på hur man väljer att behandla koefficienten i basfunktionerna kan man få vitt skilda roller för potentialenergin och den kinetiska energin i den kovalenta bindningen medan i samtliga fall den dynamiska analysen i termer av delokaliserade och energisplittrade molekylorbitaler behåller sin giltighet [10].

Härigenom kan man inse att debatten som förekommer om huruvida den kovalenta bindningen ska anses följa av elektrostatisk attraktion eller kinetisk energiminskning är onödig då en djupare förklaringsmodell visar att denna komponent analys av bindningsmekanismen inte är fundamental. Bakom den förvirring som uppstått kring elektrostatisk visavi kinetisk stabilisering av den kovalenta bindningen ligger ett paradoxalt beteende hos coulombattraktionen mellan elektron och kärna som tidigare noterats [11].

För större molekyler finns möjlighet att beräkna molekylorbitaler, bindningsenergier och molekylgeometrier med hjälp av en en-elektronanalys baserad på de skärmade atompotentialer som diskuterats ovan. I programmet VisQMChem [6] sätts dessa samman till en motsvarande skärmad molekylpotential för vilken sedan molekylorbitaler, molekylenergi och molekylgeometri kan beräknas och grafiskt återges på datorskärmen. Härvid visar det sig att den så kallade självinteraktionskorrektionen (SIC) spelar en betydande roll och den måste behandlas med eftertanke. I programmet finns ett antal olika sätt att fördela det hål som en given elektron lämnar i den övriga elektrontätheten för att därigenom eliminera självinteraktion. Detta problem motsvarar en analys av elektronkorrelation och måste därför inses ha en betydande komplexitet. Dock visar sig även mycket enkla former av SIC fungera tillräckligt bra att en god förståelse av kovalent bindning kan sägas inrymmas i denna typ av förenklad en-elektronteori. Slutsatsen blir därför att kovalent bindning i grunden är en en-elektronmekanism även om kvantitativt noggranna resultat kräver en insiktsfull behandling av elektronkorrelation om än bara i formen av en korrektion för självinteraktion.

Slutord

Kemins abstraktioner har en viktig roll att spela. Dels låter de oss klä av problem oväsentliga kläder och se dem i reducerad form som låter sig behandlas med matematikens och datorernas alla faciliteter. Härigenom blir mångt fler problem lösbara. Samtidigt krymper behovet av erfarenhetsbaserade kunskaper och det blir möjligt att tygla det annars orimligt växande behovet av minneskunskaper inom kemin. Vi måste därför försöka göra kemins många abstraktioner så lättillgängliga som möjligt. De försök som kort redovisats ovan har lett till en rad artiklar och datorprogram som är tillgängliga för alla. Våra nya teorier och förklaringsmodeller för kvantmekanik och kvantkemi finns sammanfattade i en nyutkommen bok "Kvantmekanik för Kemister – På spaning efter atomers egenskaper och molekylers bindningar" [12]. Programmen HÜCKEL, HYDROGEN, 1DQM och VisQMChem finns tillgängliga via förlaget Studentlitteraturs hemsida. Programmet GAS SIMULATOR finns att tillgå via författarna. Vi hoppas de ska hjälpa att förmedla och förklara abstrakta begrepp och förädla kunskaper inom sina respektive områden av kemin. En mindre undersökning har gjorts där eleverna har använt programmen 1DQM och VisQMChem för att lösa ett antal inlämningsuppgifter [13]. Av resultatet i undersökningen framgår att merparten av eleverna tyckte att programmen bidrog till en bättre förståelse av kursens innehåll. Av undersökningen framgår också att eleverna tyckte att mer lektionstid skulle avsättas till programmen även om dom var tveksamma till att använda programmen i datalaborationer.

Tacksamhetsskuld: Finansieringen av detta arbete har under de senaste två åren kommit från Myndigheten för Nätverk och Samarbete inom Högre Utbildning (NSHU). Många ej nämnda kollegor och studenter har bidragit till utvecklingen av de pedagogiska verktyg som beskrivits ovan.

Referenslista:

1. S. Nordholm, J. Chem. Ed. **74**, 273 (1997).
2. H. Greberg, J. Ulander och S. Nordholm, freeware (ksjn@chem.gu.se).

3. B. Freasier, G. Nyman, W. Eek och S. Nordholm, freeware (Studentlitteratur).
4. W. Eek, S. Nordholm och G. Bacskay, Chem. Educator **11**, 235 (2006).
5. W. Eek och S. Nordholm, Theor. Chem. Acc. **115**, 266 (2006).
6. W. Eek, G. B. Bacskay and S. Nordholm, freeware (Studentlitteratur).
7. A. Bäck, S. Nordholm and G. B. Bacskay, J. Chem. Ed., **84**, 1201 (2007).
8. M. Simonson, H. Greberg och S. Nordholm, freeware (Studentlitteratur).
9. J. Reimers och G. B. Bacskay, freeware (Studentlitteratur).
10. G. B. Bacskay, J. Reimers and S. Nordholm, J. Chem. Ed. **74**, 1494 (1997).
11. S. Nordholm, J. Chem. Phys. **86**, 363 (1987); J. Chem. Ed. **65**, 581 (1988).
12. S. Nordholm, G. Nyman, W. Eek och G. B. Bacskay, "Kvantmekanik för Kemister – På spaning efter atomers egenskaper och molekylers bindningar" (Studentlitteratur, Lund, 2009).
13. W. Eek, "Understanding Atoms and Covalent Bonds - An Exploration by Thomas-Fermi and One-Electron Theories", Doktorsavhandling inskickad till Göteborgs universitet, (2008).