

DIDAKTICKÉ ASPEKTY INTERAKTÍVNEHO MOLEKULOVÉHO MODELOVANIA NA ZŠ

SZARKA, Katarína, SK

Resumé: Pred niekoľkými rokmi škola ako inštitúcia vzdelávania bola primárnym prameňom informácií. Rápidny rozvoj technológií v oblasti informačno-komunikačných a multimediálnych prostriedkov podnecovali zmeny paradigiem vzdelávania, zdôrazňujúc aktívne učenie ako proces konštruovania vlastného poznatku žiakom, bez ohľadu na formu realizácie učebnej aktivity. Kompetentnosť vo využití nástrojov interaktívne sa stáva prirodzeným atribútom novej generácie, ak prostriedky, nástroje a technológie budú aktívne implementované do vzdelávania vytvárajúc interaktívne učebné prostredie. Počítačové modelovanie molekúl nie je novum vo vzdelávaní chémie. Svojou funkcionalitou softvérové produkty molekulového modelovania jednoznačne podporujú vedu a výskum a dajú sa využiť aj vo vysokoškolskom vzdelávaní chémie. Našou snahou je poukázať na dôležitosť názornosti pri rozvíjaní abstraktného myslenia v chemickom vzdelávaní. Predstavujeme softvér Avogadro- molekulový editor a vizualizér - ako virtuálne učebné prostredie. Naším zámerom je analyzovať možnosti implementácie interaktívneho molekulového modelovania do kontextu vzdelávania chémie na ZŠ, z pohľadu učebných štandardov chémie, z hľadiska základných učiteľských IKT zručností a z perspektívy fáz triedno-hodinovej formy vzdelávania. Výsledkom analýz je návrh modelu učenia pozostávajúci z učebných aktivít realizovaných vo virtuálnom konštruktivistickom učebnom prostredí softvéru Avogadro.

Key words: molekulové modelovanie, učenie podporované s IKT, editor molekúl, vizualizer molekúl, softvér Avogadro

DIDACTICAL ASPECTS OF INTERACTIVE MOLECULAR MODELLING IN UPPER PRIMARY EDUCATION

Abstract: The schools as the institutes have been the primary base of getting information and source of knowledge before several ten years. The technology developments have produced new tools and apps to acquire information, support learning and gain the new knowledge therefore the status of school, the paradigm of teaching and learning process have to change. The new attitude of education for the needs of information society and change the old paradigm of learning process, which will be able to give the starting position for our children. It puts the active learning as the constructive process of gaining personal knowledge in forefront of aims, nevertheless gives opportunities for formal and informal learning process. Using information-communication tools and several technologies interactively and be competent in its applying or to acquire these competencies can come true if the technologies are actively put into learning environment or the learning process is realized by ICT interactively. We have an intention in this paper to characterize the active learning process, to indicate the importance of visualizing in abstract learning process. We would like to introduce and describe molecule editor and visualizer software called Avogadro. Furthermore we have an intention to present the results of our analysis, which have focused on finding out the opportunities of implementation Avogadro software in chemistry primary education as an interactive visualizer learning environment from perspectives of teacher competencies, the chemical topic words determined as content standards in schools educational programs in Slovakia for level ISCED 2 and from

perspective of phases the classroom activities. We would like to present a learning model implementing into computer based molecular modelling environment.

Key words: molecular modelling, computer based learning, molecule editor, molecule visualizer, software Avogadro

1 Úvod

V dobe hromadnej digitálnej komunikácie, keď sa prehodnocujú staré paradigmy pedagogiky, keď už informačno-komunikačné technológie nie sú kuriozitou a sme po eufórii z prvého údivu moderných digitálnych prostriedkov, je už čas naučiť sa kde, kedy a do akej miery tieto prostriedky didakticky vhodne a efektívne používať.

Informačné a komunikačné technológie by nemali byť len nástrojom administrácie vyučovania, ale mali by zabezpečiť učebné prostredia pre aktívne učenie sa žiakov s podporou učiteľa.

2 Vyučovanie chémie a modelovanie

Chémia, ako prírodovedný predmet svojim experimentálnym a bádateľským charakterom značne podporuje myšlienku konštruktívneho a aktívneho učenia. Možnosť experimentovania, bádania po novom a neznámom má silnú motivačnú silu, čo je pozitívnym atribútom predmetu z hľadiska vzbudenia záujmu, ako prvého kroku pri aktivizovaní učiaceho. Na druhej strane niektoré tematické oblasti predmetu chémie majú abstraktný charakter. Vo všeobecnosti ťažkosti učenia sa prírodovedných predmetov, v našom prípade chémie je spojené chemickým myslením v trojici: makroskopickej-, submikroskopickej a symbolickej hladiny interpretácie konceptu. (Johnstone, 1991)

V závislosti od vývinovej zrelosti dieťaťa aj od ranného detstva je možnosť empirického bádania, ako aj manipulácie konkrétnymi objektmi reálneho sveta, ktorá je však obmedzená na hladinu makroskopickej interpretácie prírodných vied.

Pochopenie existenciu resp. súvislosti, ako aj vysvetlenie fungovania týchto systémov si vyžaduje schopnosť narábania s formálnymi operáciami nezávisle od fyzickej reality, ktoré sa nazýva abstraktné myslenie kognitívnom vývinovom procese jedinca. (Veselský, 2007)

Oblasti chémie, ktoré vyžadujú abstraktné myslenie od učiaceho sa a korešpondujú aj s témami nižšieho a vyššieho sekundárneho vzdelávania sú napríklad: svet elementárnych častíc, chemická väzba a typy chemických väzieb, geometrické konfigurácie molekúl, chemické reakcie a mechanizmy rôznych chemických reakcií a ďalšie.

Žiaci základných škôl, t.j. nižšieho sekundárneho vzdelávania, práve prechádzajú podľa teórie kognitívneho vývinu zo štádia konkrétnych operácií do štádia formálnych operácií. Začiatok chemického vzdelávania, objavenie chémie, ako učebného predmetu v školskom systéme Slovenska, časovo korešponduje vekom dieťaťa, ktoré z vývinového štádia konkrétnych operácií prechádza do štádia formálnych operácií. Je to obdobie, keď nemôžeme očakávať od každého žiaka danej vekovej kategórie rovnakú intelektuálnu zrelosť, ako ani rovnakú pripravenosť na abstraktné myslenie. Zohľadnenie vývinových odlišností a na zabezpečenie vhodného prostredia pre podporu kvalitnej tvorby a kontinuálneho rozvoja abstraktného myslenia v praxi často používame rôzne schémy, vzory, modely, ktoré dokážu ľudskými vnemami nevnímateľné systémy a procesy zviditeľniť, napodobniť, dať možnosť na zmysluplné interpretácie spoznávať sveta. Konceptuálne chemické myslenie si vyžaduje od učiaceho sa schopnosť popísať a preložiť chemické problémy makroskopickej-, submikroskopickej a symbolickej hladiny interpretácie (Gabel, 1999) (Hoffmann, 1991) (Tregust, 2003).

Žiaci vo vyučovaní chémie na Slovensku tripletom interpretácie chémie sa stretávajú už v rámci nižšieho sekundárneho vzdelávania. Prepojenosť medzi jednotlivými hladinami

chemickej interpretácie pre žiakov na začiatku ich chemického vzdelávania je náročný a komplexný proces. Nedôslednosť prepájania trojice interpretácie pri didaktickom spracovaní chemického učiva v dôsledku neprimeranej úrovne didaktickej pripravenosti učiteľov môže u žiakov viesť k miskoncepciám (Wong, 2013). Preto v súčasnosti sa zdôrazňuje potreba učenie sa orientované na viacúrovňovú reprezentáciu (Multiple Level Representations-Based Learning) (Rahmawati, 2015) priblíženia chemického konceptu v prepojenosti makroskopického, submikroskopického a symbolického vysvetlenia.

V súčasnosti hypermediálnych a smart prostriedky ponúkajú softvéry a on-line aplikácie na vizualizáciu ľudskými vnemami nevnímateľné systémy a procesy, teda riešenie interpretácie chemického problému na úrovni submikroskopickej, podporujúc svojim virtuálnym svetom učebné prostredie, ktoré umožňuje interaktívne konštruovať vlastný poznatok učiaceho sa (Gilbert, 2008) (Tang, 2016). Avšak nemôžeme prehliadnúť ani potenciálne riziká nepremyslenej a klamlivej vizualizácie statických či už dynamických prostriedkov (Eilks, 2012).

3 Počítačové modelovanie molekúl - Avogadro

Informatizácia sa postupne stala prirodzenou súčasťou našich škôl, priniesla však aj fenomén „digitálnej priepasti“ (Kalaš, 2013), ktorá sa charakterizuje ako technická bariéra vzniknutá s nerovnomerným prístupom k IKT. Dôvody „digitálnej priepasti“ môžu byť rôzne, ale hlavnú príčinu môžeme hľadať v absencii finančných prostriedkov škôl a v neprimeranej počítačovej gramotnosti učiteľov. Napriek týmto finančným problémom škôl, chceme poukázať na existenciu aplikácií, ktoré ponúkajú bezplatné „open-source“, freeware softvéry prístupné pre vzdelávacie účely. Potrebné je iba odbúrať bariéru učiteľských zábran používať ich a nasadiť do vzdelávania.

Vo vzdelávaní prírodovedných predmetov vizualizácia a učebné aktivity spojené názornosťou vždy mali opodstatnenie a zámer, ktorý smeroval k vytváraniu konceptu a osvojovaniu prírodovedných poznatkov abstraktného charakteru resp. oblasti, ktoré technicky neumožňujú priame bádanie a skúmanie. Softvéry resp. aplikácie zabezpečujúce zásadu názornosti vyučovania umožňujú animáciu, simuláciu, editovanie resp. modelovanie vo virtuálnom svete napodobňovaním reálny svet, podporujúc abstraktné myslenie a získavanie poznatku formálnymi myšlienkovými operáciami (Gilbert, 2008).

Do kategórie multimediálnych učebných prostriedkov zaraďujeme aj softvérové aplikácie zamerané na modelovanie molekúl, ktoré vznikli zo začiatku výlučne pre vedecko-výskumné účely, ale v súčasnosti však nájdu uplatnenie aj v edukačnom procese nižšieho a vyššieho sekundárneho vzdelávania. Molekulové modelovanie pomocou počítača vytvára nové príležitosti k prezentácii obtiažnych tematických celkov vo výučbe chémie. Vo výučbe je možné použiť rozličné typy počítačových modelov, ktoré sprístupňujú predovšetkým stereochemiu molekúl vo vzťahu k reaktivite. Modely znázorňujúce elektrónové hustoty a elektrostatické potenciály dovoľujú bližšie spoznať rozloženie elektrónových hustôt v molekulách, a v dôsledku toho usudzovať ich fyzikálne, chemické i biologické vlastnosti. (Juhász, 2011) Na základe tohto štúdia chceme prezentovať softvér molekulového modelovania a jeho atribúty z hľadiska implementácie do nižšieho sekundárneho vzdelávania.

Softvér Avogadro (Hanwell, 2012), je otvorený zdroj editora a vizualizéra molekúl, pod licenciou GNU GPL, riešená na báze multiplatformových softvérov (cross-platform).

Výhodou softvéru Avogadro, ako open-source softvéru pod GNU GPL licenciou okrem toho, že je voľne šíriteľný, dovoľí štúdium jeho fungovania – možnosťou meniť, vylepšovať a vylepšovanie zdieľať a zároveň použiť program na akýkoľvek účel. Ďalšou výhodnou stránkou softvéru je „cross-platform“-ový charakter, ktorý ponúka fungovanie programu na báze viacerých operačných systémov, ako je MS Windows, Linux a Mac OS X.

Popísané technické riešenia softvéru prispievajú k znižovaniu „digitálnej priepasti“ škôl aspoň z finančno-technického hľadiska, totiž bezplatný-, open-source charakter a možnosť spúšťania softvéru na rozhraní rôznych OS (operačných systémov) do určitej miery znižuje finančné nároky spojené aplikáciou a implementáciou softvéru molekulového modelovania.

Vynára sa otázka kompetencií učiteľa, ako užívateľa softvéru Avogadro pri projektovaní vyučovania na nižšom sekundárnom vzdelávaní: Aké schopnosti, zručnosti potrebuje učiteľ na použitie softvéru Avogadro implementovať do edukačného procesu?

Kompetencie na sprostredkovanie obsahu vzdelávania, didaktické spracovanie pre potreby učebného prostredia a učenia sa žiaka:

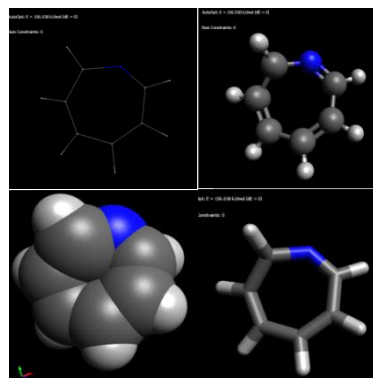
- Schopnosť pochopiť psychologicko-pedagogické aspekty molekulového modelovania.
- Zmysluplne včleniť molekulové modely resp. činnosť modelovania do edukačného procesu.
- Vedieť implementovať do ľubovoľnej fázy vyučovania.

Kompetencie vytvárania podmienok učenia a učenia sa:

- Základná počítačová gramotnosť hardvérového a softvérového vybavenia
 - ✓ schopnosť nainštalovať program na PC/notebook vo zvolenom OS,
 - ✓ schopnosť prepojenie PC/notebook k premietaciu zariadeniu – najlepšie k interaktívnej tabuli
- Špecifické schopnosti - poznať základné funkcie softvéru
 - ✓ otvoriť nový a existujúci projekt modelovania,
 - ✓ uložiť projekt vo formáte programu,
 - ✓ vložiť atómy, skupiny atómov rôznych chemických prvkov,
 - ✓ vybrať spôsob vizualizácie 3D molekúl (viď. Obr.1),
 - ✓ manipulovať s objektmi – premiestniť, zväčšiť/zmenšiť, otáčať model atómov/molekúl,
 - ✓ vizualizovať násobné väzby,
 - ✓ optimalizovať priestorové usporiadanie molekúl,
 - ✓ exportovať výstup projektu do formátu raster – resp. vektorovej grafiky.

Kompetencie na ovplyvňovanie rozvoja osobnosti žiaka:

- ovplyvňovať personálny rozvoj žiaka,
- rozvíjať prirodzenú zvedavosť,
- schopnosť experimentovať,
- riešiť problém,
- rozvíjať IKT zručnosti žiaka.



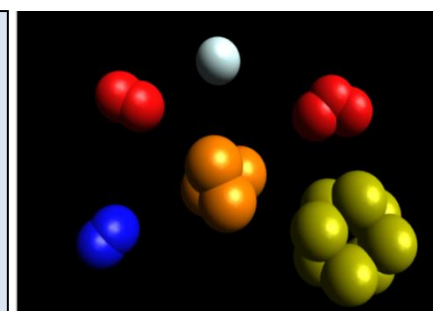
Obr. 1: Možnosti 3D vizualizácie molekúl

4 Model implementácie softvéru Avogadro do vyučovania chémie

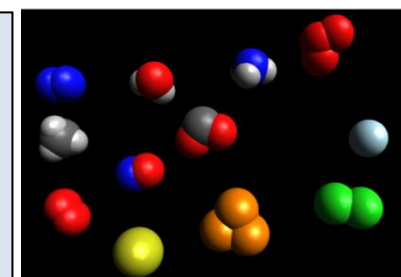
Pri hľadaní možnosti integrácie softvéru do vzdelávania nás motivovalo niekoľko faktorov, ktoré tvorili základnú kostru modelu učenia softvérom Avogadro: podporovať rozvoj abstraktného myslenia u žiakov ZŠ, vytvárať učebné prostredie aktívneho učenia a učenia sa podporované s IKT, rozvíjať kompetencie interaktívneho využívania nástrojov a prostriedkov, integrovať softvérové prostredie do procesu hodnotenia. Vychádzajúc zo zámeru skvalitniť proces rozvoja abstraktného myslenia, považujeme za dôležité implementovať modelovanie molekúl do ranných fáz chemického vzdelávania, kde primeraná a vhodná názornosť môže byť rozhodujúca pre ďalší intelektuálny vývin a úspechy žiaka z učenia sa.

Implementácia IKT znamená súčasne aj interaktívne použitie nástroja. Informačné a komunikačné technológie, ako aj multimediálne prostriedky majú značný potenciál interaktívnosti, v prípade že sú úzko spojené ľudskou činnosťou a dochádza medzi človekom a nástrojom k aktívnej interakcii. Teda medzi žiakom a nástrojom v procese učenia sa prebieha aktívna interakcia. Zámer integrácie IKT do vzdelávania chápeme aj ako interaktívne narábanie s pojmami a vyvolávanie konceptuálnych zmien u žiakov. Učebné prostredie, kde sa uskutoční aktívne učenie sa žiaka resp. skupiny žiakov v interakcii s nástrojom, alebo dialógom medzi žiakmi podporované interaktívnymi prostriedkami je prostredie, ktoré sa najviac približuje k predstavám konštruktivistického vzdelávania.

Modely vyučovacích aktivít implementovaných do triedno-hodinovej jednotky vzdelávania chémie, sú orientované podľa zámeru učebných aktivít – a predstavujú aktivitu motivačného, poznávacieho, fixačného a reflexného charakteru. Uvedieme niekoľko ukážok z učebných aktivít (viď. Obr.2-3.)

<p>Aktivita: Podľa možností žiaci pracujú samostatne resp. vo dvojiciach alebo spoločne pracuje celá trieda pri interaktívnej tabuli.</p> <p>Zadania: Namodelujte nasledujúce chemicky čisté látky – Chemické prvky: Časticu/atóm hélia Kyslík pozostávajúci z 2 častíc/atómov Kyslík pozostávajúci z 3 častíc/atómov Dusík pozostávajúci z 2 častíc/atómov Fosfor pozostávajúci z 4 častíc/atómov Síra pozostávajúca z 8 častíc/atómov Vaše riešenie exportujte do súboru vektor grafického formátu!</p>	
---	---

Obr. 2: Ukážka učebnej aktivity na tvorbu homogénnych molekúl.

<p>Aktivita: Žiaci pracujú súborom predtým vytvorených molekúl</p> <p>Zadania: Analyzujte zmes chemických látok! Rozdeľte ich do skupín chemických látok! Vaše riešenie uložte exportovaním do vektor grafického formátu!</p>	
---	--

Obr. 3: Ukážka učebnej aktivity na úlohu divergentného charakteru.

Záver

Pochopiteľne nie každý intelektuálne zdravý a zrelý mladý človek je schopný využívať a rozvíjať svoje intelektuálne schopnosti rovnako. Rôzne formy vzdelávania ako aj kvalita edukácie však môže podporovať a usmerniť intelektuálny vývin žiakov. Naším prioritným zámerom bolo analyzovať možnosti implementácie interaktívneho molekulového modelovania do kontextu vzdelávania chémie na ZŠ, vytvorením virtuálneho konštruktivistického učebného prostredia.

Na základe komparácie vybraných softvérových aplikácií môžeme skonštatovať, že program je vhodný na modelovanie a optimalizovanie geometrie jednoduchých anorganických a organických molekúl a keďže je voľne šíriteľný, tak môže nájsť uplatnenie na našich základných a stredných školách.

Bibliography

- [1] *Avogadro: an open-source molecular builder and visualization tool.* Version 1. XX. [Online] <http://avogadro.openmolecules.net/>. [Accessed on: May 8, 2016]

- [2] BRESTENSKÁ, B. and SZARKA, K. *Hodnotenie v modernej triede*. [aut. knihy] Brestenská, B. a kol. Premena školy s využitím informačných a komunikačných technológií. Košice : elfa s.r.o., 2010, s. 134-153.
- [3] EILKS, I., WITTECK, T. and PIETZNER, V. *The role and potential dangers of visualisation when learning about sub-microscopic explanations in chemistry education*. CEPS Journal. 2012, Zv. 2, 1, pp. 125-145.
- [4] GABEL, D. *Improving Teaching and Learning through Chemistry*. Education Research: A Look to the Future. Journal of Chemical Education. April, 1999, Zv. Vol. 76, No. 4.
- [5] GILBERT, J. K., REINER, M. and NAKHLEL, M. *Visualization: Theory and Practice in Science Education*. 3. s.l.: Springer Netherlands, 2008. ISBN: 978-1-4020-5266-8 (Print) 978-1-4020-5267-5 (Online).
- [6] HANWELL, M.D., CURTIS, E.D., LONIE, D. C., VANDERMEERSCH, T., ZUERK, E. and HUTCHISON, G.R. *Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform*. Journal of Cheminformatics. 4:17, 2012.
- [7] HOFFMANN, R., LASZLO, P. *Representation in Chemistry*. s.l.: Angew. Chem. Int. Ed. Engl., 30: 1-16. , 1991. doi: 10.1002/anie.199100013.
- [8] HRÁSKOVÁ, S. and BRESTENSKÁ, B. *Analýza súčasného stavu digitálnych kompetencií učiteľov vo vyučovaní chémie na slovenských školách a návrh požadovaných digitálnych kompetencií pre učiteľov chémie*. Chemické rozhľady. - Roč. 11, mimor. č. 5, pp. 155-162.
- [9] JOHNSTONE, A. H. *Why is science difficult to learn? Things are seldom what they seem*. Journal of Computer Assisted Learning. 1991, 7, pp. 75-83.
- [10] JUHÁSZ, Gy. *A számítógépes molekulamodellezés helye a kémiatanár-képzésben*. Budapest: ELTE, 2011. In: Természettudományok tanítása - korszerűen és vonzóan. pp. 573-576. ISBN 978-963-284-224-0.
- [11] JUHÁSZ, Gy., KYSEI, O. and HEGEDŰS, O. *Molekulové modelovanie v príprave budúcich učiteľov*. Mezinárodní seminář - Soudobé trendy v chemickém vzdělávání: Univerzita Hradec Králové. 2006, s. 85-89.
- [12] KALÁŠ, I. et al. *Premeny školy v digitálnom veku*. 1.vyd. Bratislava: Slovenské pedagogické nakladateľstvo - Mladé Letá, 2013. pp. 252, ISBN 978-80-10-02409-4.
- [13] RAHMAWATI, A. *The Impact of Multiple Level Representation-Based Learning on Students' understanding about Chemistry Concepts*. [ed.] University of PGRI Semarang Post Graduate Program. International Conference: Enhancing Education Quality. In Facing Asian Community. 2015, pp. 381-387.
- [14] TANG, H. and ABRAHAM, M.R. *Effect of Computer Simulations at the Particulate and Macroscopic Levels on Students' Understanding of the Particulate Nature of Matter*. Journal of Chemical Education. 2016, Zv. 93, 1, pp. 31-38.
- [15] TREAGUST, D., CHITTLEBOROUGH, G. and MAMIALA, T. *The Role of Submicroscopic and Symbolic Representations in Chemical Explanations*. International Journal of Science Education. 2003, Zv. Vol.25, 11, pp. 1353-1368.
- [16] VESELSKÝ, M. *Pedagogická psychológia 1. Teória a prax*. Bratislava: Univerzita Komenského Bratislava, 2007. ISBN 978-80-223-2273-7.
- [17] WONG, S. and WONG, A.S.L. *The impact of teachers' pedagogical knowledge of triplet relationship on their decision to teaching triplet in chemistry*. eBook Proceedings of The ESERA 2013 Conference: Science Education Research For Evidence Coherence in Learning.

Lectured by: PaedDr. Krisztina Czaková, PhD.

Contact address:

Katarína Szarka, Mgr. Ph.D.,
 Department of Chemistry , Faculty of Education, J. Selye University, SK-945 01 Komárno,
 Bratislavská cesta 3322, Slovakia,
 phone: +421-35-3260683, e-mail: szarkak@uj.sk