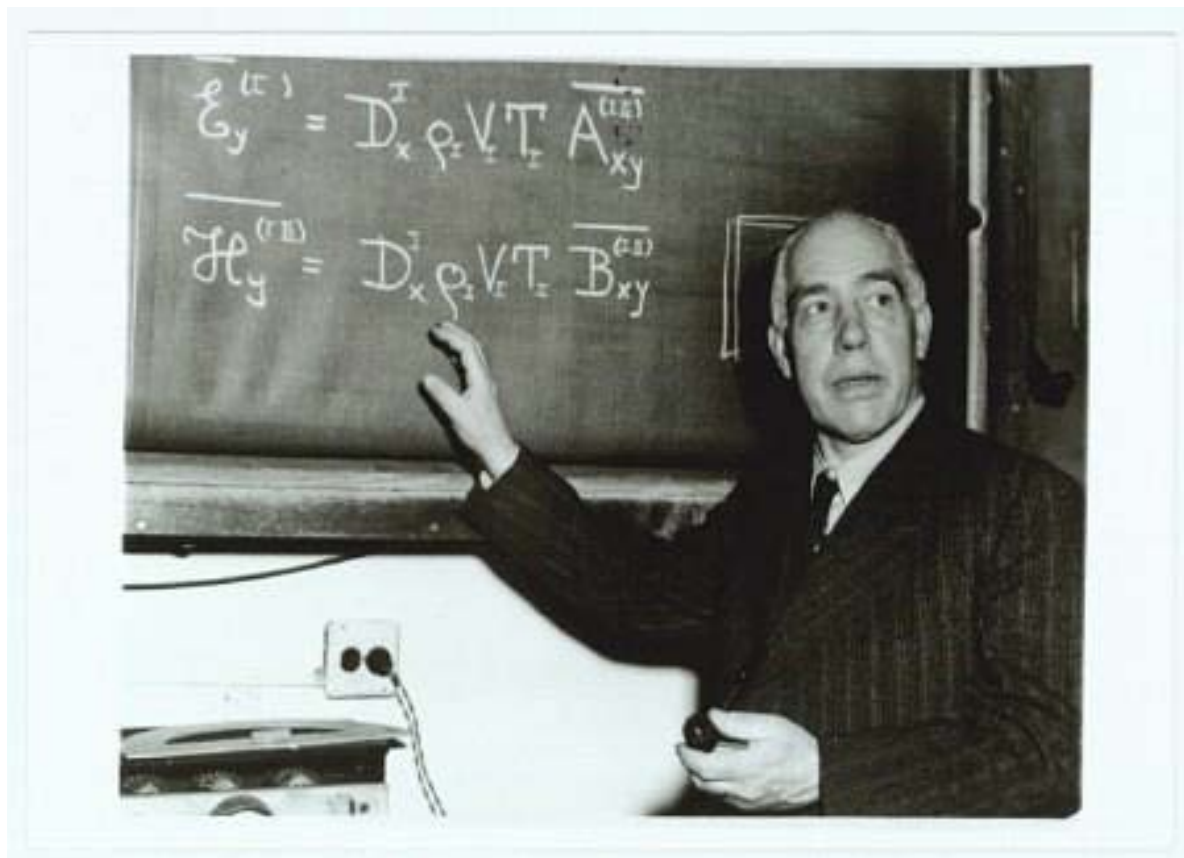




Kvantekemi i gymnasiet

Tilrettelæggelse, udførelse og evaluering af et undervisningsforløb



Morten C. B. Persson
Bachelorprojekt

April 2013

IND's studenterserie nr. 29

IND's studenterserie

1. Ellen Berg Jensen: 15-åriges viden om klimaforskelle (2007)
2. Martin Sonnenborg: The Didactic Potential of CAS (2007)
3. Karina Søgaard og Sarah Kyhn Buskbjerg: Galoisteori i Gymnasiet (2007)
4. Ana Hesselbart: Mathematical reasoning and semiosis (2007)
5. Julian Tosev: Forskningslignende situationer (2007)
6. Niels Nørskov Laursen: En Covarians-tilgang til Variabelssammenhænge i gymnasiet (2007)
7. Katja Vinding Petersen: Lyd og Liv (2007)
8. Jesper Bruun: Krop og computer i fysikundervisning (2008)
9. Jakob Svendsen: Matematiklærerens forberedelse (2009)
10. Britta Hansen: Didaktik på tværs af matematik og historie (2009)
11. Nadja Ussingkær: En didaktisk undersøgelse af brudte lineære funktioner i rammerne af tysk fritidsmatematik (2009)
12. Thomas Thrane Design og test af RSC-forløb om vektorfunktioner og bevægelse
13. Flemming Munch Hansen: Samspil omkring differentialregningens elementer i gymnasiets matematik og fysik (2009)
14. Hasan Ademovski og Hatice Ademovski: Proportionalitet på mellemtrinnet - Design af didaktiske situationer baseret på stofdidaktisk analyse (2009)
15. Philipp Lorenzen: Hvem er de nye studenter? Baggrund, interesse & uddannelsesstrategi (2010)
16. Signe Ougaard: Logiske strukturer i matematisk analyse på gymnasieniveau. Et forløb om kvantorer og ϵ - δ -definition af grænseværdi (2010)
17. Jesper Winther Sørensen: Abstrakt algebra i gymnasiet - design, udførelse og analyse af undervisning i gruppeteori (2010)
18. Sofie Stoustrup: En analyse af differentiallyigninger på A-niveau i STX ud fra den antropologiske didaktiske teori (2010)
19. Jan Henrik Egballe Heinze: Eksponentialfunktioner i STX (2010)
20. Mette Beier Jensen: Virtuelgalathea3.dk i biologiundervisningen i gymnasiet (2010)
21. Servet Dönmez: Tosprogede elever og matematik i gymnasiet (2011)
22. Therese Røndum Frederiksen: Designing and implementing an engaging learning experience about the electric sense of sharks for the visitors at Danmarks Akvarium (2011)
23. Sarah Elisabeth Klein: Using touch-tables and inquiry methods to attract and engage visitors (2011)
24. Line Kabell Nissen: Matematik for Sjøv – Studie- og forskningsforløb i en eksperimentel kontekst (2011)
25. Jonathan Barrett: Trigonometriske Funktioner i en Gymnasial Kontekst – en epistemologisk referencemodel (2011)
26. Rune Skalborg Hansen: Et studie i læringsopfattelse og -udbytte - om fysik C kursister på Københavns VUC (2011)
27. Astrid Camilus: Valideringssituationer i undervisningsforløb om differentiallyigninger og radioaktivitet (2012)
28. Niven Adel Atie: Didaktiske situationer for fuldstændiggørelse af kvadratet i andengrads ligningen (2013)
29. **Morten C. B. Persson: Kvantekemi i gymnasiet - Tilrettelæggelse, udførelse og evaluering af et undervisningsforløb (2013)**

Abstract

Emnet kvantekemi er stort set ikke repræsenteret i gymnasiernes kemipensum. Dette er måske u hensigtsmæssigt da det udgør en væsentlig del af hvad kemifaget er og er tæt forbundet med andre dele. Derfor undersøges i denne opgave muligheden for at introducere emnet på gymnasialt niveau. Dette gøres gennem planlægning, udførelse og evaluering af et undervisningsforløb, tilrettelagt efter 6F-modellen for undersøgelsesbaseret undervisning. Derfor er det både opgavens formål at teste tilgængeligheden af emnet kvantekemi for gymnasieelever og at teste modellens anvendelighed i denne sammenhæng.

Det konkluderes at emnet godt kan introduceres på gymnasieniveau, men at det bestemt kræver et vist eksisterende vidensniveau indenfor fysik og matematik. Desuden er det nødvendigt, for at fremhæve nytten af en sådan introduktion, at lægge vægt på emnets samspil med andre dele i gymnasiets naturvidenskabelige pensum. Det er ikke muligt på baggrund af projektet at konkludere hvor vidt 6F-modellen fordrer god indlæring hos eleverne, men den er helt sikkert effektiv med hensyn til at engagere eleverne i en aktiv læringsproces. Det konkluderes også at en anderledes anvendelse af modellen måske kunne have ført til bedre resultater.

IND's studenterserie består af kandidatspecialer og bachelorprojekter skrevet ved eller i tilknytning til Institut for Naturfagenes Didaktik. Disse drejer sig ofte om uddannelsesfaglige problemstillinger, der har interesse også uden for universitetets mure. De publiceres derfor i elektronisk form, naturligvis under forudsætning af samtykke fra forfatterne. Det er tale om studenterarbejder, og ikke endelige forskningspublikationer. Se hele serien på: www.ind.ku.dk/publikationer/studenterserien/

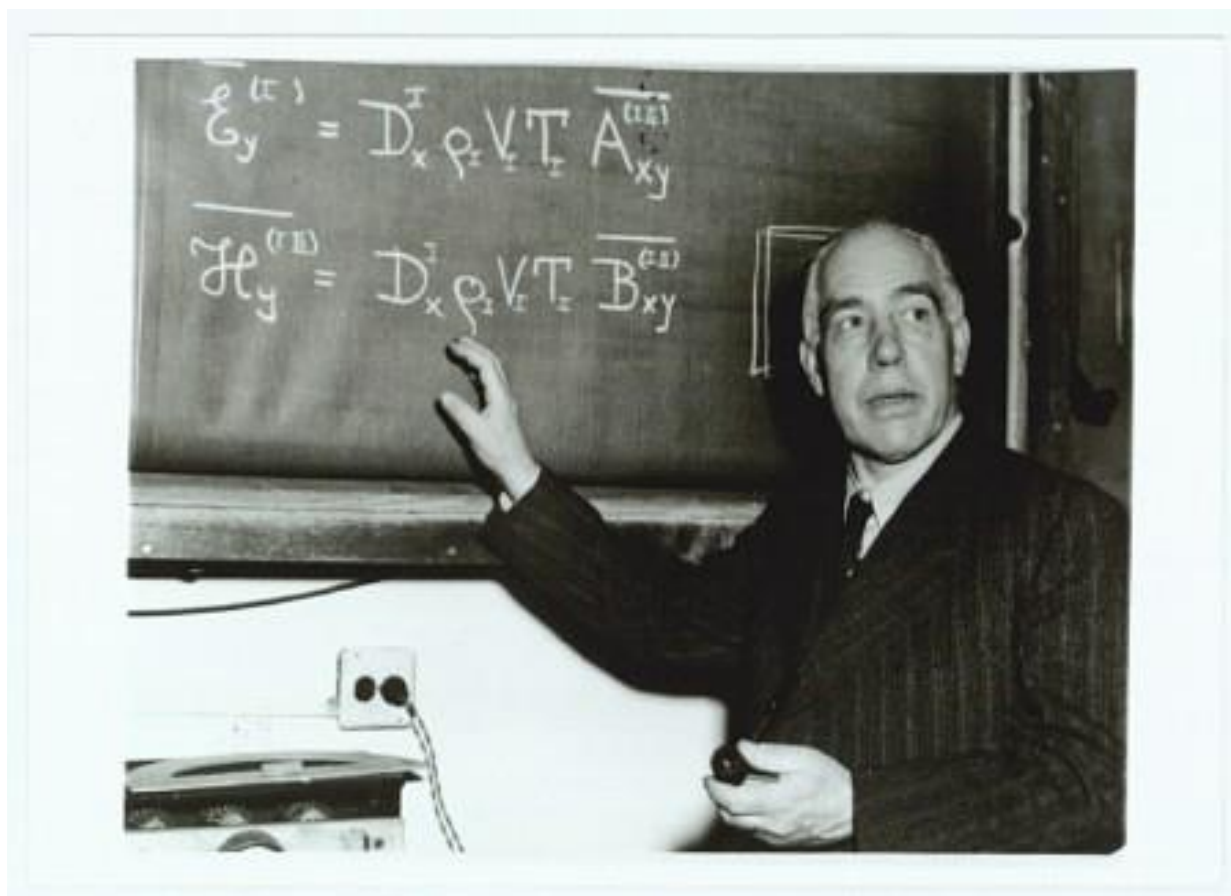


Bachelorprojekt

Morten C. B. Persson

Kvantekemi i gymnasiet

Tilrettelæggelse, udførelse og evaluering af et undervisningsforløb



Vejleder fra Kemisk Institut: Stephan P. A. Sauer (associate professor)

Vejleder fra Institut for Naturfagernes Didaktik: Lene M. Madsen (lektor)

Projekt udarbejdet i blok 1 & 2, 2012/2013

Abstract

Quantum chemistry is not part of the chemistry curriculum in Danish gymnasiums, even for advanced level students. This is unfortunate seeing as the subject constitutes an important part of what chemistry is, and is entwined with many other chemical topics. Thus this project seeks to ascertain whether the subject may be introduced to students at the gymnasium level in a form that is meaningful to them. This is done through the planning, execution and evaluation of a teaching unit in quantum chemistry for gymnasium students, which is structured around the 6F-model of inquiry instruction. In addition to testing the accessibility of the subject matter to the students, the project also assesses the usefulness of the instructional model in teaching the concepts. Assessing the worth of having been introduced to quantum chemistry for the students in relation to their later studies goes beyond the scope of this project.

The conclusion is that the subject may indeed be introduced at the gymnasium level, but also that certain background knowledge of physics and mathematics is a prerequisite for the students, and that the relevancy and applications of the theories of quantum mechanics in relation to the rest of the science curriculum need to be emphasized. The project is inconclusive in regards as to whether or not the use of the 6F-model is beneficial to the learning of the students, but it shows that the model is effective in engaging the students in active learning. It also suggests that a different application of the model might have yielded better learning results than the ones observed.

Indholdsfortegnelse

Abstract	2
Indledning.....	4
Uddybning af problemformuleringen	4
Metode	4
Motivation	5
Teori.....	6
Konstruktivisme og læring.....	7
Undersøgelsesbaseret undervisning	9
Forløbets faglige indhold.....	14
Evaluering	15
Elevernes forudsætninger	15
Klassens faglige forudsætninger.....	16
Undervisningsforløbet	17
Læringsmål	17
Forløbets struktur.....	18
Erfaringer fra forløbet	24
Elevernes faglige udbytte	24
Relevans for eleverne	26
Forløbets struktur.....	27
Diskussion	28
Konklusion	32
Litteraturliste	34

Appendikser: *Appendiks I, powerpoint fra undervisningen (19 s); Appendiks II, noter til undervisningen (13 s); Appendiks III, IR spektre (9 s); Appendiks IV, IR tabel (1 s); Appendiks V, elevernes hypoteser (1 s); Appendiks VI, logbog over undervisningen (5 s); Appendiks VII, spørgeskema om elevernes oplevelse af forløbet (4 s); Appendiks VIII, spørgeskema om elevernes faglige udbytte (5 s).*

Indledning

Kemi er et bredt fag som ofte spiller tæt sammen med andre naturfag. Derfor udbyder landets uddannelsesinstitutioner en bred vifte af videregående uddannelser som beskæftiger sig med kemi på forskellige måder. En fyldestgørende kemiundervisning i gymnasiet må derfor have en bred orientering så eleverne får forkundskaber der kvalificerer dem til alle disse uddannelser, og til at vælge mellem dem. En således bredt orienteret kemiuddannelse bør berøre så mange af de store kemiske delområder som muligt, og derfor ønsker jeg med dette projekt at undersøge muligheden for at introducere emnet kvantekemi allerede på gymnasialt niveau.

Dette vil jeg gøre ved at tilrettelægge et undervisningsforløb og afprøve det på en gymnasieklasse. Da emnet almindeligvis betragtes som værende svært tilgængeligt, forventer jeg at det bliver udfordrende at få eleverne til at forstå de nye koncepter. Derfor vil jeg forsøge at hjælpe forståelsen på vej ved at anvende undersøgelsesbaseret undervisning (6F-modellen) til at opnå mine læringsmål. Hovedspørgsmålet som projektet skal besvare er derfor:

- Kan et undervisningsforløb i kvantekemi tilrettelagt som undersøgelsesbaseret undervisning anvendes til at introducere emnet på gymnasialt niveau?

Uddybning af problemformuleringen

Problemstillingen er todelt idet jeg dels ønsker at undersøge muligheden for og nyttigheden af at undervise i kvantekemi på gymnasialt niveau, og dels anvendeligheden af 6F-modellen i denne sammenhæng. De centrale spørgsmål i forbindelse med førstnævnte problemstilling er:

- Har gymnasieelever tilstrækkeligt med matematisk, fysisk og kemisk baggrundsviden til at man kan undervise dem i kvantekemi på et meningsfyldt niveau, og så de får et rimeligt udbytte af det?
- Kan undervisningen i kvantekemi gøres relevant i forhold til den almene kemiundervisning?

I forhold til 6F-modellen ønsker jeg at undersøge:

- Hjælper modellen til at engagere eleverne i undervisningen?
- Bliver kvantekemien gennem denne type forløb formidlet på en måde, så det sikrer en god indlæring hos eleverne?

Metode

For at besvare disse spørgsmål har jeg undersøgt det læringsteoretiske grundlag for 6F-modellen med henblik på at finde frem til hvordan den kunne bidrage til det undervisningsforløb jeg har tilrettelagt og afprøvet. For at kunne anvende modellen hensigtsmæssigt måtte jeg først have en god forståelse for modellen og dens baggrund. Resultatet af dette er præsenteret i afsnittet 'Teori'. En anden forudsætning for et godt undervisningsforløb var at jeg kendte til elevernes

forudsætninger, og derfor har jeg forudgående taget kontakt til klassens lærere og spurgt til dette. Det der har haft betydning for tilrettelæggelsen af mit undervisningsforløb er sammenfattet i afsnittet 'Elevernes forudsætninger'.

Derefter har jeg tilrettelagt undervisningsforløbet med udgangspunkt i læringsteoretiske overvejelser og i hvilket stof, jeg mener, er essentielt. I den forbindelse har jeg udarbejdet lektionsplaner, læsestof mm., og forløbet er beskrevet i afsnittet 'Undervisningsforløbet'. Undervejs i selve undervisningen har jeg ført logbog, og efter forløbet har jeg foretaget en skriftlig evaluering af elevernes udbytte af det. Til sammen er dette materiale brugt til at evaluere mit forløb og besvare problemformuleringens spørgsmål, og dette er beskrevet i afsnittet 'Erfaringer fra forløbet' og sammenfattet i opgavens konklusion.

Motivation

I det følgende forklares min baggrund for at ville forsøge at undervise i kvantekemi i gymnasiet både på et personligt og et mere generelt niveau. I den forbindelse vil jeg argumentere for nyttigheden af at undervise i emnet.

Læreplanerne: Når jeg læser læreplanerne for kemi på A-niveau på de gymnasiale uddannelser ser jeg de fleste kemiske hovedområder repræsenteret på listen over kernestof: Organisk kemi, uorganisk kemi, analytisk kemi, osv. Kvantekemien synes til gengæld at være forsømt. Den er kun repræsenteret overfladisk i form af tolkning af infrarøde spektrere og NMR spektrere, samt en introduktion til atom- og molekylstrukturer¹, og det mener jeg er utilstrækkeligt til at give eleverne et fyldestgørende billede af kemifaget.

Kvantemekanikken i det hele taget er en vigtig naturvidenskabelig opdagelse, og kendskab til den bør være en væsentlig del af den naturvidenskabelige dannelse studenter gerne skal tage med sig fra gymnasiet. Da magasinet *Aktuel Naturvidenskab* i 2006, med hjælp fra en række forskere, skulle sammensætte en liste over de 10 vigtigste naturvidenskabelige opdagelser, var denne da også en af dem². Og selvom læreplanen i fysik for STX (på B- og A-niveau) inkluderer et par kvantemekaniske emner (Radioaktivitet, partikel/bølge-dualitet)³, mener jeg ikke kernestoffet giver eleverne tilstrækkeligt indblik i teorien. De skal også være klar over teoriens applikationer, ikke mindst at den også er anvendelig i kemien (og faktisk danner teoretisk grundlag for andre emner). At undervise i kvantekemi i kemifaget vil også give eleverne indblik i et væsentligt samspilsområde mellem fysik- og kemifagene.

Selv blev jeg overrasket over at møde kvantekemien i mit første år på kemiuddannelsen på Københavns Universitet. Jeg kendte intet til emnet på forhånd, og blev derfor meget overvældet af de mange nye koncepter. Denne oplevelse deler jeg med flere medstuderende. Derfor ville jeg

¹ STX-bekendtgørelsen, bilag 30 & HTX-bekendtgørelsen, bilag 17

² *Aktuel Naturvidenskab* (2006: 5 & 26-27)

³ STX-bekendtgørelsen, bilag 23 & 24

personligt have fundet det nyttigt at være blevet introduceret for fagområdet i løbet af min gymnasieuddannelse.

Fagkonsulentens synspunkt: Keld Nielsen, der er fagkonsulent for kemifaget, giver mig ret i at 'kvantekemi er en meget grundlæggende og fundamental teori for kemi som videnskabsfag', og at emnet giver mulighed for et godt samspil mellem kemi, fysik og matematik⁴. Til gengæld nævner han også at der er mange andre emner man kunne gøre plads til i kernestoffet, så der er så og sige konkurrence om pladserne. Desuden skal kernestoffet være udgangspunkt for den skriftlige prøve i kemi, og da det ikke er alle elever med kemi på A-niveau der har fysik på højt niveau, er kvantekemi uegnet i dette henseende. Det indgår derfor kun i form af fortolkning af spektre⁵.

Keld Nielsen understreger endvidere udfordringen i at kvantekemi er 'et relativt abstrakt' emne som kræver en god forudgående forståelse for kemi. Fordi det samtidig kræver et højt niveau i matematik og fysik, foreslår han at emnet gør sig bedre som et valgfrit emne for de elever der også har disse forudsætninger, end som en del af kernestoffet for alle der har kemi på højt niveau⁶. Her har han en god pointe, men hvis kvantekemi virkeligt er så nyttigt for elever med alle tre fag på højt niveau burde underviserne i de klasser måske tilskyndes til at vælge at medtage emnet. Man kunne f.eks. forestille sig at flere lærere ville vælge at inddrage emnet hvis det var inkluderet i lærebøgerne.

Lærebøger: Ser man på lærebøger i kemi på gymnasialt niveau er det generelle billede at man beskæftiger sig meget perifert med kvantekemien. Lærebøgerne har afsnit om spektroskopi, men her er fokus på fortolkning og anvendelse af teknikkerne (hvilket dog bestemt også er nyttigt og lever op til kravene til fagets kernestof) frem for en dybdegående forståelse af den teoretiske baggrund. Når teorien diskuteres er det uden afsæt i kvantekemi og dermed uden en forklaring på hvor teorien kommer fra. Der er også gerne afsnit om kemisk bindingsteori (i bogen 'Aurum – kemi for gymnasiet 3' endda under titlen 'Kvantekemi'), som omhandler orbitaler, elektronkonfigurationer og det periodiske system, men bøgerne går ikke i dybden med teorierne bag⁷. Jeg synes det er ærgerligt at man ikke går det skridt videre og introducerer kvantekemien for eleverne for jeg tror ikke det er meget der skal til for at give eleverne en fornemmelse for emnet som vil være anvendelig senere. Det er det jeg vil teste i dette projekt.

Teori

I dette afsnit vil jeg redegøre for den undervisningsteoretiske baggrund for undervisningsforløbet, og for hvilken betydning det har for forløbets udformning, samt argumentere for hvorfor jeg har valgt denne tilgang. Afsnittet indeholder desuden mine overvejelser omkring udvalget af det faglige indhold, og omkring hvordan jeg vil evaluere forløbet.

⁴ Personlig korrespondens med fagkonsulent Keld Nielsen, december 2012

⁵ Personlig korrespondens med fagkonsulent Keld Nielsen, december 2012

⁶ Personlig korrespondens med fagkonsulent Keld Nielsen, december 2012

⁷ Jeg har set på 'Kend Kemien 3', 'Aurum – kemi for gymnasiet 3', 'Kemi 2000, A-niveau 1' og 'Basiskemi A'

Konstruktivisme og læring

Udgangspunktet for min tilgang til undervisningen er de konstruktivistiske læringsteorier, hvis kerne er at 'Knowledge is constructed in the mind of the learner'⁸, altså at viden er personlig og skal opbygges af den enkelte. God undervisning opbygger derfor en ramme indenfor hvilken der er gode forudsætninger for at de lærende kan konstruere viden – det er ikke tilstrækkeligt at introducere eleverne for en 'rigtig' eller 'officiel' udgave af den viden de skal tilegne sig og så regne med at de derved lærer. Dette kan gøres på flere måder, og genfindes i flere fagdidaktiske teorier og læringsmodeller, f.eks. undersøgelsesbaseret undervisning i form af learning cycles, som uddybes nedenfor, og teorien om didaktiske situationer (TDS), som hævder at læring sker i to trin: Først udvides den enkeltes personlige viden, og derefter gøres denne i en formaliseringsproces forenelig med den officielle viden⁹.

Læring er en proces hvori den lærende bearbejder den nye viden i relation til sin eksisterende viden. Derfor er kendskab til denne eksisterende viden fuldstændig essentiel for underviseren. Læringspsykologen David Ausubel udtrykte det således: 'If I had to reduce all of educational psychology to just one principle, it would say this: The most important single factor influencing learning is what the learner already knows. Ascertain this and teach him accordingly.'¹⁰ Her skal man være opmærksom på at viden er et vidt begreb. Når Ausubel taler om 'what the learner already knows' tænkes ikke blot på deklarativ viden, altså viden om hvad noget er, men også på procedural viden, dvs. viden om hvordan man gør noget¹¹.

Så hvis læring skal forankres i eksisterende viden gennem en proces, hvordan foregår så denne proces? Udviklingspsykologen Jean Piaget forklarer dette ud fra såkaldte mentale strukturer. Hver gang man gør en erfaring, forsøger man at passe denne ind i sine eksisterende mentale strukturer, sin for forståelse, ved en proces kaldet assimilation. Det vil sige at man prøver at forstå den nye erfaring ved at behandle den som et eksempel på noget i forvejen kendt. Noget læring sker på denne måde. Men når dette ikke kan lade sig gøre, oplever man en forstyrrelse der fører til at ens forståelse bringes ud af ligevægt. Ligevægten genoprettes ved en bearbejdning af de mentale strukturer kaldet akkommodation. Den nye erfaring rejser nogle spørgsmål der kun kan besvares hvis man omstrukturerer sin forståelse, og derved konstrueres ny viden¹². Skal man lære nogle elever noget der kræver en ny forståelse, skal man derfor udfordre deres for forståelse, så der skabes en uligevægt og dermed et behov for akkommodation.

Man skal dog være varsom med på hvilken måde man udfordrer eleverne. Hvis akkommodationsprocessen skal kunne forløbe, må man sikre sig at den nye viden ikke ligger for fjernt fra den lærende. Læring foregår bedst i 'zonen for nærmeste udvikling', et begreb udviklet

⁸ Bodner, G. M. (1986) – quoted in Fay et. al. (2007: 212)

⁹ Winsløw (2006: 134)

¹⁰ Ausubel D. P. (1978) – quoted in Lawson (2009: 54)

¹¹ Lawson (2009: 55)

¹² Dolin (2006: 158-159) og Lawson (2009: 62-63)

af Lev Vygotsky. Med det menes at den lærende skal udfordres lige nøjagtigt tilstrækkeligt til at det ikke er trivielt, og så der derfor opstår et behov for at lære, men ikke så meget at det er uoverkommeligt¹³. Det betyder overordnet set for en underviser at det er vigtigt at udvælge stof og fremgangsmåde i en rækkefølge så eleverne arbejder i denne zone – noget som sjældent er uniformt på tværs af en klasse. Derfor bør man også være opmærksom på undervisningsdifferentiering, og på at eleverne har behov for forskellige grader af stilladsering.

En anden pointe der er vigtig i relation til hvordan eleverne udfordres er at tankevirksomhed foregår på forskellige trin, i hvert fald ifølge Piaget. Med sin stadieteori inddeler han sindets udvikling i såkaldte 'operational stages', der fortæller noget om dets kapacitet til at gøre forskellige slutninger. Det kan f.eks. være om man er i stand til at klassificere ting og relatere dem til hinanden og i hvor høj grad man er i stand til at forstå sammenhæng mellem årsag og udfald¹⁴. Man kan godt være på forskellige operationelle stadier indenfor forskellige områder, dvs. at ens evne til at tænke på bestemte måder godt kan være situeret til bestemte sammenhænge eller situationer. Det der har særlig relevans for naturfagsundervisningen er at ikke alle elever har nået de sidste stadier, det formelle operationelle stadie og det postformelle operationelle stadie (sidstnævnte er ikke en del af Piagets teori, men kommer af en videreudvikling af denne). Det betyder at ikke alle elever er i stand til at overskue alle de variable der er til stede i et forsøg, og at ikke alle er i stand til at ræsonnere på baggrund af usynlige årsager (non-perceptible causal agents)¹⁵. Det sidstnævnte har naturligvis meget stor betydning i mit projekt, og i kemiundervisningen generelt, fordi mange fænomener i kemien netop forklares ud fra atomer og molekyler, som vi ikke er i stand til at opfatte. Professor A. H. Johnstone foreslår, i sammenhæng med studerendes oplevelse af undervisningen, at 'Learners need to start with concepts built from tangible experience and developed later to include inferred concepts.'¹⁶

Betydning for forløbet

Alt dette betyder for mit undervisningsforløb at jeg vil sørge for at relatere det nye vidensområde, kvantekemien, til allerede eksisterende viden. Det virker oplagt for mig, idet eleverne lige op til mit forløb arbejder med spektroskopi¹⁷, at lægge stor vægt på kvantekemiens betydning for teoretisk spektroskopi. På den måde kan den nye viden bindes sammen med den eksisterende viden, både den deklarative og den procedurale. Den deklarative viden bindes sammen ved at kvantekemien skal bygge videre på hvad eleverne allerede ved om emnet spektroskopi (ikke bare ved at emnet placeres i forlængelse af dette, men også ved aktivt at inddrage elevernes forståelse for emnet), mens den procedurale viden bindes sammen ved at eleverne i forvejen kan anvende

¹³ Dolin (2006: 169)

¹⁴ Lawson (2009: 47-49)

¹⁵ Lawson (2009: 52-54)

¹⁶ Johnstone, A. H. (2007) – quoted in Tsapalis et. al. (2010: 108)

¹⁷ Se afsnittet 'Elevernes forudsætninger'

spektre til stofidentifikation men nu også udfordres til at anvende dem på anden måde, hvor de får brug for at anvende deres eksisterende procedurale viden om sammenhænge og variable.

Jeg ønsker ikke at forløbet om kvantekemi kun skal være et forløb for klassens dygtigste elever – derfor er det vigtigt at jeg skaber mulighed for undervisningsdifferentiering, og at jeg er opmærksom på udfordringen i at emnet er meget abstrakt og stiller krav til at man kan tænke ud fra ikke-synlige årsager. At relatere kvantekemi til spektroskopi er også hjælpsomt i dette henseende, fordi det i det mindste giver nogle konkrete, synlige objekter, spektrene, som vi kan tage udgangspunkt i (de ikke-synlige årsager kan vi ikke komme udenom, men på denne måde tager vi udgangspunkt i noget mere konkret).

Undersøgelserbaseret undervisning

Et godt udgangspunkt for at leve op til alt det der er skitseret ovenfor er undersøgelsesbaseret undervisning (inquiry instruction) fordi 'Activities that engage students in scientific inquiry facilitate their construction of knowledge.'¹⁸ Essensen i denne type undervisning er at eleverne først selv udforsker et emne eller fænomen på en måde der fører til nye opdagelser som eleverne ikke er i stand til at forklare ud fra deres eksisterende viden. De nye ideer er så udgangspunktet for at eleverne dernæst hjælpes til at koble disse til de relevante termer og derved konstruerer ny viden, nye koncepter. Til sidst skal dette anvendes både i gamle og nye kontekster så ligevægten i elevernes forståelse genoprettes¹⁹. Det sidste skridt hjælper også til at opnå transfer²⁰, som forklares nærmere nedenfor²¹. Undersøgelserbaseret undervisning er som sagt en nyttig måde at introducere ny viden på, men udover dette er selve arbejdsformen meget beslægtet med forskerens arbejdsgang, så eleverne tilegner sig undervejs procedural viden der knytter sig til det at arbejde videnskabeligt²².

Undersøgelserbaseret undervisning opstilles ofte som såkaldte læringscykler (learning cycles), f.eks. SCIS læringscyklen²³, 5E-modellen og 7E-modellen²⁴. Princippet i disse er at uddybe den proces som er ridset op ovenfor, så man sikrer at undervisningens trin tilrettelægges i den rækkefølge der giver optimale betingelser for læring. Nedenfor vil jeg forklare faserne i 6F-modellen (som i princippet er ækvivalent med 5E og 7E), som jeg har opbygget mit undervisningsforløb omkring.

Konkrete forløb opbygget som læringscykler kan endvidere opdeles i flere forskellige typer baseret på hvad eleverne gør: Deskriptive læringscykler, hvor fokus er på at eleverne beskriver deres observationer; empirisk-abduktive læringscykler, hvor eleverne endvidere formulerer hypoteser

¹⁸ Fay et. al. (2007: 212)

¹⁹ Lawson (2009: 99 & 102)

²⁰ Eisenkraft (2003: 58-59)

²¹ Se '6F-modellen' – 'forlæg'

²² Bass et. al. (2009: 91-92)

²³ Bass et. al. (2009: 90)

²⁴ Eisenkraft (2003: 56-59)

omkring observationerne og hypotetisk-prediktive læringscykler, hvor eleverne systematisk udforsker og afprøver hypoteserne med henblik på at be- eller afkræfte dem²⁵. Alle typerne fortsætter naturligvis med introduktion af termer og efterfølgende anvendelse af de nye koncepter.

6F-modellen

6F er en undervisningsmodel hvor undervisningen bygges op som en læringscykel i seks faser: Forudsætning, fang, forsk, forklar, forlæng og feedback. Den er en dansk udgave af de lignende 5E- og 7E-modeller, der har henholdsvis 5 og 7 faser, men lægger vægt på de samme elementer.

Forudsætning: Den første fase handler om at blive opmærksom på elevernes forudsætninger og at synliggøre dem. Dette gøres dels ved formativ evaluering, og dels ved at man indleder et forløb med en samtale med afsæt i 'hvad tror I?'-spørgsmål²⁶. Som nævnt tidligere er det vigtigt at være opmærksom på elevernes udgangspunkt og bruge dette i undervisningen. Som Arthur Eisenkraft, der netop er fortaler for en 'elicit'-fase i 7E-modellen, skriver: 'Recognizing that students construct knowledge from existing knowledge, teachers need to find out what existing knowledge their students possess.'²⁷

Fang: Denne fase handler om at gøre emnet interessant for eleverne og fange deres opmærksomhed. I den forbindelse defineres også fokus for de efterfølgende faser²⁸. Den går hånd i hånd med 'forudsætning'-fasen, idet man, når man skal fange elevernes opmærksomhed, også må tage udgangspunkt i elevernes synspunkt. En 'fang'-fase kan f.eks. gøre brug af kreative eller levende virkemidler, i form af film, billeder, historier, virkelige problemstillinger mm., eller gøre eleverne interesserede ved at lægge op til spørgsmål som er relevante for dem. Pointen med en 'fang'-fase er at gøre ny viden relevant for den lærende, og er således også en forudsætning for den 'personliggørelse af viden', der er central i TDS, som har meget til fælles med 6F-modellen²⁹.

Forsk: Her udforsker eleverne selv emnet, samler data og udvikler hypoteser, mens underviseren hjælper når eleverne har spørgsmål, har brug for et skub eller eventuelt har brug for at blive udfordret yderligere³⁰. Det er vigtigt at læreren lader eleverne selv udforske på baggrund af deres egen forståelse og ikke påtager sig ansvaret for løsningen af opgaven. Det essentielle er at eleverne selv gør sig nogle erfaringer og udvikler nogle ideer som de termer og uddybelser læreren senere kommer med kan hænges op på. Det er en god idé at sætte eleverne til at

²⁵ Lawson (2009: 102-108)

²⁶ Eisenkraft (2003: 57)

²⁷ Eisenkraft (2003: 57)

²⁸ Bass et. al. (2009: 91)

²⁹ Winsløw (2006: 134-135)

³⁰ Bass et. al. (2009: 91-92) og Lawson (2009: 123)

nedskrive deres observationer, spørgsmål og hypoteser da dette hjælper dem til at organisere deres tanker om emnet og til at huske det på et senere tidspunkt³¹.

Forklar: Her deler eleverne deres observationer, hypoteser og konklusioner med hinanden, og med afsæt i dette introducerer læreren officielle forklaringer og termer (evt. suppleret af tekstbøger eller andet læsestof)³². En nyttig teknik i forbindelse med denne introduktion, i tilfælde af at eleverne ikke finder den/de rigtige forklaringer selv, er selv at bringe hypoteser på banen, både rigtige og forkerte, som kan være en del af diskussionen på lige fod med elevernes hypoteser. Dette kan være nyttigt til at udfordre elevernes evner til at argumentere for og imod hypoteser, og det kan være et godt alternativ til blot at forkaste elevernes hypoteser og give den rigtige forklaring³³. Det er i alle tilfælde meget essentielt at udgangspunktet i denne fase er elevernes erfaringer fra 'forsk'-fasen og en diskussion af disse, så der bygges på elevernes egen forståelse. Elevernes nye forståelse skal efterfølgende bruges til at forklare deres erfaringer³⁴.

Forlæng: Denne fase handler om anvendelsen af den nye viden. Hvis ikke ny viden bliver anvendt på rette tidspunkt, bliver den mindre anvendelig i fremtiden, og muligheden for transfer af viden svækkes³⁵. Anvendelsen af ny viden kan f.eks. bestå i opgaveløsning i relation til både kendte og ukendte problemstillinger eller formulering af nye spørgsmål eller hypoteser til testning. Arthur Eisenkraft fremhæver i sin tekst 'Expanding the 5E model' at det er meget væsentligt at denne anvendelse ikke kun består i 'elaboration', altså anvendelsen af den nye viden på kendte problemstillinger eller nye opgaver, men også bør indeholde 'extension', dvs. at anvende den nye viden i nye sammenhænge³⁶. Pointen med dette er at opnå transfer, hvilket handler om at sikre sig at viden ikke bliver situeret. Situeret viden er viden der er bundet i en bestemt kontekst og som man ikke er i stand til at anvende i anden sammenhæng³⁷.

Feedback: 'Feedback' er ikke på samme måde en fase i modellen. Dette element knytter sig til den løbende proces, der altid bør foregå i undervisningssammenhæng, hvor underviseren og eleverne løbende evaluerer hinanden og sig selv (gennem summativ evaluering, formativ evaluering og self-assessment). Pointen er at underviseren undervejs bliver opmærksom på dels hvilke elementer af undervisningen der fungerer godt og hvilke der ikke gør det, og dels hvor meget eleverne lærer³⁸. Der er et klart samspil mellem 'forudsætning' og 'feedback', fordi evalueringsprocessen gør læreren bevidst på elevernes forudsætninger og udviklingen i disse, så der kan tages højde for det i undervisningen. Desuden er løbende evaluering også et værktøj til stilladsering og undervisningsdifferentiering.

³¹ Bass et. al. (2009: 92)

³² Bass et. al.(2009: 92-93)

³³ Lawson (2009: 74-77)

³⁴ Bass et. al. (2009: 92-93)

³⁵ Bass et. al. (2009: 93)

³⁶ Eisenkraft (2003: 58-59)

³⁷ Dolin (2006: 147)

³⁸ Bass et. al. (2009: 93)

Denne evalueringsproces er mange ting. For det første bør læreren løbende være opmærksom på om eleverne gør fremskridt og på hvilke spørgsmål de stiller undervejs. For det andet bør læreren selv løbende stille spørgsmål (især i 'forsk'- og 'forklar'-faserne), både for at tjekke elevernes forståelse (evaluering) og for at hjælpe dem hvor det er nødvendigt (stilladsering). Spørgsmålene bør være overvejende divergente når formålet er at fremvirke diskussion og evaluere elevernes evne til at ræsonnere, mens konvergente spørgsmål er gode når eleverne har brug for et skub i den rigtige retning. Når eleverne er tilbage på sporet bør man dog vende tilbage til de divergente spørgsmål for at stimulere udforskning af problemet og selvstændig tænkning. Med hensyn til spørgeteknik er det også en god idé at give eleverne lidt tænketid, før man beder om et svar (wait-time I) og også efter et svar (wait-time II), især ved klassesdiskussioner, da dette fører til flere og bedre svar³⁹.

Kritik af undersøgelsesbaseret undervisning

Den undersøgelsesbaserede tilgang til undervisning er ikke ukritiseret. Ian Abrahams og Robin Millar, der har undersøgt effektiviteten af praktisk arbejde i skolernes naturfagsundervisning i England⁴⁰, argumenterer for at elevernes praktiske arbejde stort set kun er nyttigt i forbindelse med at lære dem om observable og procedurer, og ikke hjælper dem til at forstå videnskabelige ideer⁴¹. Grunden til at udbyttet mht. ideer ikke er som forventet er at underviserne i for høj grad forventer at ideerne vil udspringe af sig selv fra elevernes observationer, hvilket sjældent er tilfældet. Abrahams og Millar mener derfor at praktisk arbejde er mere nyttigt når eleverne på forhånd er blevet introduceret til de relevante videnskabelige ideer så de kan anvende dem under deres egne undersøgelser⁴². Selvom mange undervisere introducerer ideerne efterfølgende med udgangspunkt i elevernes observationer, mener de to forskere at elevernes udbytte af det praktiske arbejde bliver markant indskrænket når de ikke undervejs kan forstå de opdagelser de gør sig gennem de relevante ideer⁴³.

Jeg ser dog også, fra et konstruktivistisk synspunkt, nogle problemer med Abrahams og Millar's foreslåede tilgang. At introducere eleverne til koncepterne på forhånd har det problem at eleverne så ikke har mulighed for selv at konstruere ideer som disse koncepter kan hæfte sig på. Man kan så sige at hvis man nu efter en indledende introduktion til koncepterne og efterfølgende praktisk arbejde tog koncepterne op igen, så ville koncepterne måske have et endnu bedre fundament fordi de ideer eleverne så har dannet sig er dannet ud fra et forsøg på at forstå deres observationer gennem koncepterne. Spørgsmålet er så om ikke det er lettere for eleverne at tilegne sig ideer på et mere personligt grundlag end ud fra nogle halvt forståede koncepter.

³⁹ Lawson (2009: 117)

⁴⁰ Abrahams & Millar (2008)

⁴¹ Abrahams & Millar (2008: 1945)

⁴² Abrahams & Millar (2008: 1965)

⁴³ Abrahams & Millar (2008: 1965-1966)

Abrahams og Millar har dog en god pointe i at det er væsentligt at sikre sig at man skaber gode rammer for at eleverne kan koble observationer og teori. Det er ikke kun elevernes evne til at reproducere de ønskede resultater der er formålet med praktisk arbejde, men også udviklingen af relaterede videnskabelige ideer, og aktiviteterne skal derfor planlægges med dette for øje⁴⁴. Men jeg vil mene at det netop er dette man forsøger at gøre med læringscyklerne. Hvis disse implementeres på en passende måde, med alle de essentielle elementer og en god løbende evaluering, muliggør de netop elevernes sammenkobling af egne observationer og den eksisterende videnskabelige viden. Det er hele pointen i metoden.

Kirschner, Sweller og Clark, der taler stærkt imod undersøgelsesbaserede undervisningsmetoder, bygger deres modstand på en lang række undersøgelser der viser at mere instrueret læring er mere effektiv end ikke-guede inquiry-metoder⁴⁵ samt teorier om den menneskelige hukommelse og dens begrænsninger⁴⁶. I deres kritiske artikel fra 2006 lægger de vægt på det forkerte i at antage at 'novice learners' kan ræsonnere på samme niveau som de forskere de emulerer i undersøgelsesbaseret undervisning⁴⁷, og fremhæver at mens den konstruktivistiske beskrivelse af læring er god, så er de konstruktivistisk baserede tilgange til læring ikke velfunderede i den eksisterende viden om læring⁴⁸.

I selvsamme artikel nævner de dog også at ikke-guede tilgange lader til at være mere effektive for mere trænede lærende⁴⁹, og at disse metoder bliver væsentligt forbedret med passende stilladsering⁵⁰. Så deres fremstilling er ikke helt entydig. Det lader til at undersøgelsesbaseret undervisning godt kan være nyttig hvis den har de rigtige rammer, men måske er det rigtigt at det ikke er godt blindt at stræbe efter så lidt instruktion som muligt. Artiklen rejser en interessant kritik som kan være god at have i baghovedet når man tilrettelægger undervisning.

Betydning for forløbet

Jeg vil altså, på trods af den igangværende debat omkring undervisningsmetoder, opbygge mit forløb i 6F-modellens faser. Det konkrete indhold⁵¹ bygger på overvejelser omkring formålet med faserne, elevernes forudsætninger og de centrale læringsmål jeg ønsker eleverne skal nå. Forløbet er et eksempel på en empirisk-abduktiv læringscykel⁵², hvor eleverne både skal gøre observationer ud fra nogle eksperimenter (eller rettere, data fra nogle eksperimenter, nemlig IR spektre) og formulere sammenhænge, spørgsmål og hypoteser på baggrund af dem. Der bliver ikke tale om at eleverne selv skal planlægge eksperimenter, men idet der er flere spektre tilgængelige end dem

⁴⁴ Abrahams & Millar (2008: 1965-1967)

⁴⁵ Kirschner et. al. (2006: 79-80)

⁴⁶ Kirschner et. al. (2006: 76-78)

⁴⁷ Kirschner et. al. (2006: 79)

⁴⁸ Kirschner et. al. (2006: 78)

⁴⁹ Kirschner et. al. (2006: 81)

⁵⁰ Kirschner et. al. (2006: 79)

⁵¹ Se afsnittet 'Undervisningsforløbet'

⁵² Jf. Lawson (2009: 103-104 & 108)

jeg først uddeler, er der mulighed for at eleverne selv er med til at vælge i hvilken retning de vil fortsætte deres undersøgelser. Da eleverne ikke tidligere har arbejdet med en undersøgelsesbaseret tilgang til læring på denne måde, forventer jeg at der bliver behov for en høj grad af stilladsering til at guide dem på rette vej – noget der også skal være med til at modvirke de mulige negative konsekvenser af denne undervisningstilgang og derved styrke undervisningen.

Forløbet kommer også på nogle punkter til at falde lidt udenfor modellen. For at introducere nogle af kvantekemiens grundlæggende principper kommer 'forklar'-fasen til at indeholde mere lærerstyret tavleundervisning end hvad der måske er helt hensigtsmæssigt mht. begrebsdannelse hos eleverne. Jeg vil forsøge at afhjælpe dette ved at kæde denne del af undervisningen tæt sammen med elevernes observationer, at trække på elevernes eksisterende viden om f.eks. orbitaler og at inkorporere mindre læringscykler i disse faser, hvor eleverne f.eks. får lov til selv at 'udforske' Schrödingerligningen.

Forløbets faglige indhold

De faglige mål for forløbet er sammenfattet i de læringsmål, jeg har opstillet⁵³. De er opstillet med baggrund i at der skal være mulighed for at tilrettelægge forløbet efter 6F-modellen, men først og fremmest har jeg fokuseret på at eleverne skal introduceres for noget af grundlaget for kvantekemien, og skal kunne se hvilken betydning og hvilke anvendelsesmuligheder det har i relation til spektroskopi. Det har været centralt for mig at eleverne stifter bekendtskab med Schrödingerligningen, og hvad den kan bruges til, og at de får en forståelse for hvad bølgefunktioner og energiniveauer er. Det er også væsentligt at eleverne bliver i stand til at relatere disse begreber til hinanden, og til deres eksisterende viden fra kemi- og fysikundervisningen. Nogen af de matematiske begreber, f.eks. operatorer og normering, vil vi ikke beskæftige os med, da de umiddelbart ikke bidrager så meget til den grundlæggende forståelse jeg forsøger at give eleverne. At beherske kvantekemiske beregninger ser jeg ikke som centralt – det er den konceptuelle forståelse der skal spire så et senere møde med kvantekemien kan blive mere frugtbar, og så eleverne får en fornemmelse for hvad feltet drejer sig om.

Der er selvfølgelig også praktiske overvejelser på spil. Jeg har undersøgt elevernes faglige forudsætninger⁵⁴ og forsøgt at tage højde for dem i tilrettelæggelsen af forløbet. Idet, f.eks., at eleverne ikke i gymnasiets pensum har stiftet bekendtskab med funktioner af flere variable, har jeg valgt at begrænse mig til at betragte én-dimensionale systemer. Der er desuden en bestemt tidsramme for forløbet, og det har selvfølgelig også betydning for hvor meget stof jeg har valgt at inddrage, og for hvor fleksibel jeg kan være med hensyn til at besvare alle de spørgsmål eleverne stiller i 'forsk'-fasen. Dette har også betydning for mit valg af afsluttende evalueringsform for forløbet fordi nogle former for evaluering tager markant længere tid end andre.

⁵³ Se 'Læringsmål' under afsnittet 'Undervisningsforløbet'

⁵⁴ Se afsnittet 'Elevernes forudsætninger'

Evaluering

Når forløbet er overstået, ønsker jeg at evaluere både elevernes oplevelse af forløbet og deres faglige udbytte af det. Det første evalueres umiddelbart efter forløbet med et spørgeskema der spørger til elevernes oplevelse af sværhedsgraden, strukturen, egen læring mm.⁵⁵ Dette skal mest hjælpe mig til, i samspil med mine observationer undervejs i forløbet, at evaluere mit valg af fagligt indhold, og hvor vidt det er lykkedes mig at gøre det relevant for eleverne, samt hvor nyttigt det har været at anvende 6F-modellen.

Det faglige udbytte evalueres ligeledes med et spørgeskema⁵⁶, men dette udfylder eleverne først noget tid efter forløbet da jeg ønsker at se hvor vidt det lærte hænger fast. Ligesom Abrahams og Millar⁵⁷ såvel som Kirchner, Sweller og Clark⁵⁸, mener jeg ikke noget kan betragtes som værende 'lært' hvis det ikke også kan genkaldes på et senere tidspunkt. Spørgeskemaet er udformet som en multiple choice test, en evalueringsform der umiddelbart ikke er så velegnet til at teste konceptuel forståelse. Problemet med denne type tests er at man ofte kun får testet eleverne på lavere taksonomiske niveauer, f.eks. ved at teste elevernes evne til at huske bestemte fakta. Derfor har jeg udformet testen så der kan være flere rigtige svar på et spørgsmål, hvilket tilfører kompleksitet og tvinger eleverne til at tænke mere over svarene. Desuden har jeg forsøgt også at udfordre elevernes evne til at anvende det de har lært i en kontekst så de f.eks. ikke bare skal huske at vibrationer af bindinger mellem atomer med større masse absorberer lys ved lavere frekvenser, men i stedet skal anvende denne viden på nogle bestemte bindinger og rangere dem korrekt. Af samme grund spørger jeg ikke blot til hvad begrebet kvantisering betyder, men i stedet til hvad det konkret har af indflydelse på udseendet af et IR spektrum. Testen er stadig ikke ideel, men da det heller ikke må tage for meget tid, mener jeg at det er min bedste mulighed for at lave en summativ evaluering af elevernes faglige udbytte. Denne test bliver også anvendt i samspil med mine observationer undervejs.

Elevernes forudsætninger

At blive opmærksom på kemiholdets eksisterende faglige forudsætninger har været et essentielt udgangspunkt for tilrettelæggelsen af undervisningsforløbet i kvantekemi fordi jeg i høj grad ønsker at drage klare paralleller mellem det nye stof og det øvrige pensum, samt mellem de nye koncepter og elevernes forforståelse⁵⁹. Behovet for at kende elevernes forudsætninger allerede i planlægningsfasen er et man som lærer almindeligvis vil have dækket på forhånd, idet man kender eleverne fra den tidligere undervisning (det kan dog være nyttigt alligevel at få præciseret og synliggjort disse forudsætninger i selve undervisningen⁶⁰). Men for mit vedkommende har jeg

⁵⁵ Se Appendiks VII

⁵⁶ Se appendiks VIII

⁵⁷ Abrahams & Millar (2008: 1961)

⁵⁸ Kirchner et. al. (2006: 77)

⁵⁹ Se afsnittet 'Teori'

⁶⁰ Se '6F-modellen' – 'Forudsætning' under afsnittet 'Teori'

været nødt til at undersøge dette forud for undervisningen. Det har jeg gjort ved at tage kontakt til klassens (3. X's) lærere i matematik, fysik og kemi og spurgt dem til det gennemgåede pensum. Dette er naturligvis en lidt overfladisk metode (fordi jeg kun undersøger hvad eleverne *burde* have lært), men det har været det mest praktiske (det kunne have været en fordel, hvis de praktiske rammer havde tilladt det, også at have anvendt en form for test som en summativ evaluering af elevernes kundskaber på en række områder). Resultatet af min korrespondens med lærerne har jeg sammenfattet nedenfor så klassens faglige udgangspunkt står klart.

Det er desuden værd at bemærke at klassen ikke tidligere har arbejdet med undersøgelsesbaseret undervisning. Derfor har jeg bestræbt mig på at tage højde for at eleverne ikke kender dette koncept på forhånd.

Min undersøgelse af elevernes forudsætninger har beroet på at jeg oprindeligt troede at jeg udelukkende skulle undervise elever fra 3. X. Jeg er senere blevet gjort opmærksom på at der også er elever på holdet fra klassen 3. W, hvis forudsætninger jeg ikke tilsvarende har undersøgt. Det er værd at bide mærke i da det har haft nogen betydning i løbet af forløbet⁶¹.

Klassens faglige forudsætninger

Mht. matematikundervisningen har det været relevant for mig at kende elevernes viden om differentialligninger og funktioner af flere variable. Eleverne har arbejdet med differentialligninger af første orden i matematikundervisningen, herunder lineære differentialligninger og logistisk vækst. Funktioner af flere variable har de til gengæld ikke arbejdet med da det ikke indgår i pensum⁶². Dette har jeg taget højde for når jeg har skullet planlægge hvordan der skulle arbejdes med Schrödingerligningen.

Mht. fysikundervisningen har jeg ønsket at vide hvor meget klassen i forvejen kendte til kvantemekanik idet det i et vist omfang indgår som en del af fagets pensum. Klassen er blevet undervist i atomets opbygning og atomspektre, radioaktivitet, kvanter, lys som bølger og som fotoner, partikel/bølge-dualitet, kort om Heisenbergs ubestemthedsrelation og så har de hørt Schrödingerligningen nævnt, men de har ikke arbejdet med den⁶³. Dette har været vigtigt for undervisningsforløbet så jeg ikke antog nogen forkundskaber der ikke var der, og heller ikke planlagde at bruge unødigt tid på at undervise i stof som eleverne kendte i forvejen.

Det relevante fra kemipensum er at eleverne tidligere er blevet undervist i spektrofotometri, og at de netop før undervisningsforløbet i kvantekemi har gennemgået et forløb om spektroskopi (IR og

⁶¹ Se afsnittet 'Erfaringer fra forløbet' og Appendiks VI

⁶² Personlig korrespondens m. matematiklærer Ole Helweg-Larsen, oktober 2012

⁶³ Personlig korrespondens m. fysiklærer Leif Horn Nielsen, september 2012

H-NMR)⁶⁴. Det har haft stor betydning for min tilrettelæggelse af forløbet da jeg har forsøgt at bygge videre på elevernes viden om netop spektroskopi.

Undervisningsforløbet

I det følgende vil jeg skitsere undervisningsforløbets læringsmål, tilrettelæggelse og indhold. Undervejs argumenteres for mine valg. De konkrete undervisningsmaterialer der henvises til findes i appendiks I, II, III og IV.

Læringsmål

Formålet med forløbet er at give eleverne en introduktion til kvantekemien og at illustrere dens relation til andre områder af kemien (og fysikken). Det er ikke tanken at eleverne skal opnå kompetencer til at behandle kvantekemiske problemstillinger og løse avancerede opgaver, men de skal have en forståelse for nogle af de grundlæggende koncepter. Eleverne skal efter forløbet kunne:

- Forklare de molekylære bevægelser, der ligger til grund for IR spektroskopi. Herunder skal eleverne kunne redegøre for indflydelsen af masse og bindingstype på absorptionsfrekvenser og bruge dette til at lave forudsigelser og fortolkninger, samt forklare beskrivelsen/tilnærmelsen af molekylære vibrationer som 'den harmoniske oscillator'.
- Relatere den kvantekemiske, teoretiske tilgang til IR spektroskopi til deres egne 'eksperimentelle' resultater/observationer, og i den forbindelse vurdere kvaliteten af deres hypoteser.
- Forklare hvorfor længden af et konjugeret system af dobbeltbindinger i et organisk molekyle har indflydelse på stoffets farve i relation til stoffets interaktion med lys og tilnærmelsen som 'partiklen i en 1-dimensionel kasse'.
- Redegøre for begrebet 'kvantisering' og bruge det i relation til Bohrs frekvensbetingelse og spektroskopi.
- Genkende Schrödingerligningen og forklare hvad den bruges til.
- Redegøre for begreberne 'bølgefunktion' og 'energiniveauer' og deres indbyrdes relation.
- Redegøre for hvorledes alle typer spektroskopi bygger på Schrödingerligningen og Bohrs frekvensbetingelse, inklusive atomspektre, som eleverne har set i fysikundervisningen.

Set i forhold til Blooms taksonomi⁶⁵ stiller læringsmålene krav til at eleverne er i stand til at arbejde på alle niveauer. Det er klart at forløbet vil introducere dem til en del nye begreber og teorier som de skal være i stand til at genkende og gengive (Blooms første trin, viden), men samtidig stilles også i høj grad krav til at være i stand til at forklare og anvende den nye viden

⁶⁴ Personlig korrespondens m. kemilærer Mette Rude, 2012

⁶⁵ Dolin (2006: 333-335)

(Blooms andet og tredje trin). Eleverne skal også i stort set alle faser arbejde på taksonomiens tre højeste trin, idet de kommer til at sammenligne og vurdere metoder og teorier. Dette sker i særdeleshed i kraft af undervisningens tilrettelæggelse som et 6F-forløb⁶⁶, hvor eleverne selv skal foretage observationer, formulere hypoteser og anvende den nye viden på andre problemstillinger.

Forløbets struktur

Forløbet afprøves i to uger i oktober/november (uge 44-45) med en klasse på 18 elever⁶⁷. Jeg har fire undervisningsmoduler a' 100 minutter (inkl. 10 min pause) til rådighed, og har struktureret forløbet så der er tid til at tidsplanen kan skride lidt. Forløbet er bygget op som et 6F-forløb, og nedenfor beskrives hver fase, og hvorledes de er placeret i de fire moduler. Sammen med beskrivelsen af aktiviteterne i hver fase er også en beskrivelse af lærerens og elevernes roller i denne fase, samt en argumentation for mange af de valg der er truffet i forbindelse med planlægningen.

Undervisningen er centreret omkring en Powerpoint-præsentation⁶⁸ der vises for eleverne via projektor. Bemærk at flere slides er lavet med funktioner, så nogle objekter og noget tekst kommer frem løbende ('Flyv ind'-funktionen).

Efter hvert modul får eleverne lektier til næste gang, som beskrevet i de respektive afsnit.

Første Lektion: I første lektion lægges ud med en kort præsentation af kvantekemi – Hvad beskæftiger man sig med i feltet, hvad kan det anvendes til, hvorfor er det nyttigt? Dette præsenteres af mig, og eleverne kan stille spørgsmål. Dette anser jeg som et vigtigt punkt da elever som regel gerne vil have indblik i hvad der skal foregå og hvorfor. Det er et vigtigt element i 'den didaktiske kontrakt' at eleverne kan se formålet med det de laver så de ønsker at engagere sig i undervisningen⁶⁹.

Herefter tager vi fat på 6F-modellens 'forudsætning'- og 'fang'-faser som skal tjene til at fange elevernes interesse for emnet og binde dette nye emne sammen med kendt stof. Det skal munde ud i 'forsk'-fasen, hvor eleverne selv kommer til at arbejde med at besvare nogle af de spørgsmål som opstår i 'fang'-fasen.

'Forudsætning': For det første er elevernes forudsætninger vurderet ud fra hvilket pensum der er gennemgået i fysik-, matematik- og kemiundervisningen⁷⁰. Desuden vurderes elevernes forudsætninger løbende⁷¹, f.eks. indeholder forløbets 'fang'-fase et vist element af forudsætning,

⁶⁶ Se '6F-modellen' under afsnittet 'Teori'

⁶⁷ Resultatet af dette er sammenfattet i afsnittet 'Erfaringer fra forløbet'

⁶⁸ Appendiks I

⁶⁹ Winsløw (2006: 145-146)

⁷⁰ Se afsnittet 'Elevernes forudsætninger'

⁷¹ Se også 'feedback' under 'fjerde lektion'

idet den indledende øvelse omkring IR spektre både skal vække elevernes interesse i at forklare principperne, men også hjælpe til at afklare deres evner til at fortolke sådanne spektre. Ud over at afklare elevernes evner for min skyld, skal det også synliggøre dem for eleverne selv så de bliver bevidste om hvad de ved, og hvad de kan lære gennem forløbet.

'Fang': Elevernes interesse for at undersøge teorien bag spektroskopi skal vækkes ved en fælles fortolkning af et IR spektrum af eddikesyre⁷². Spektret vises som dias, og eleverne får lov til selv at byde ind med fortolkningsforslag. I den forbindelse vil jeg stille åbne spørgsmål til spektret og elevernes svar, som f.eks. 'Hvordan ved vi at det absorptionssignal netop skyldes den gruppe?', 'Hvordan ville spektret så ændre sig, hvis vi erstattede det atom med det atom?', 'Hvilke grunde kunne der være til at det signal er stærkere end det signal?' og 'Hvad skyldes signalerne i fingeraftrykområdet?'. Før jeg tager elevsvar, gives passende tænketid ('wait time 1')⁷³. Flere af spørgsmålene forventes eleverne ikke at være i stand til at besvare (i hvert fald ikke dybdegående), og netop derfor går vi i gang med at undersøge sammenhænge i IR spektre. Inden da vises selvfølgelig strukturen af stoffet så vi kan se om de fundne grupper (hydroxygruppe i carboxylsyregruppe, carbonylgruppe, oxogruppe, carbon/hydrogen-enkeltbindinger) er til stede.

I denne fase vil jeg lede diskussionen, men eleverne får som udgangspunkt lov til selv at fortolke spektret. Mine spørgsmål skal ikke være en hjælp til at fortolke spektret (det forventes eleverne at være i stand til selv) – de skal netop rejse spørgsmål, som vi kan forsøge at besvare i 'forsk'-fasen og 'forklar'-fasen. Derfor er det essentielt at der stilles divergente spørgsmål⁷⁴ der åbner diskussionen, og sætter eleverne i gang med at tænke.

'Forsk': I denne fase får eleverne mulighed for at arbejde med nogle IR spektre⁷⁵ og finde sammenhænge mellem variationer i molekylerne og de observerede absorptionsfrekvenser (og andre aspekter af spektrene). Spektrene indeholder markeringer der hjælper eleverne med at identificere nogle af gruppefrekvenserne fordi det ikke er formålet med denne øvelse at opøve genkendelsen af signaler som tilhørende bestemte grupper og dermed deducere strukturer af molekyler, men at finde sammenhænge mellem absorptionsfrekvenser og struktur.

Eleverne bliver delt i grupper (6 grupper a' 3 elever) som hver for sig arbejder med spektrene og formulerer sammenhænge. Jeg vurderer at dette er en passende gruppestørrelse fordi små grupper er en fordel i undersøgelsesbaseret undervisning idet det sikrer en lavere grad af passivitet hos nogle gruppemedlemmer⁷⁶. Men samtidig ønsker jeg også en vis sparring i grupperne, så jeg mener grupper a' 2 elever vil være for små.

⁷² Se appendiks I, s. 2

⁷³ Lawson (2009: 117 & 169)

⁷⁴ Lawson (2009: 117)

⁷⁵ Appendiks III, s. 1-3

⁷⁶ Lawson (2009: 170)

Opgaven præsenteres for eleverne, og de får til at starte med 3 spektre⁷⁷: Iodethan, methylacetat og chlorethen. De bliver bedt om at kigge efter sammenhænge mellem struktur og absorptionsfrekvens, og evt. andre mønstre i spektrene. En række andre spektre er tilgængelige; disse er opskrevet i et dias så eleverne kan se hvilke materialer de har til rådighed⁷⁸.

Når eleverne så foreslår sammenhænge ud fra de første spektre, vil de få udleveret spektre efter ønske, der er relevante i forhold til de foreslåede sammenhænge og/eller kan pege på andre sammenhænge. Eleverne kan også guides, om nødvendigt, ved at få udleveret spektre som jeg vurderer, er relevante. Spektrene skal tjene både til at bekræfte/afkræfte hypoteser og til at inspirere alternative konklusioner. Denne fremgangsmåde giver mulighed for undervisningsdifferentiering, idet nogle kan få lov at bruge mere tid på få spektre, eller på at afdække en enkelt sammenhæng, i stedet for at skulle kastes ud i mange på en gang.

Eleverne bliver bedt om undervejs at notere deres observationer og de spørgsmål og hypoteser der opstår undervejs. Vi tager så udgangspunkt i disse i næste fase. Nedskrivningen hjælper dels eleverne til at formulere nogle konkrete hypoteser, og dels til at huske hvad de har lavet i næste modul/næste fase⁷⁹.

Fasens længde er meget afhængig af hvad eleverne tager fat på, og hvor hurtigt de arbejder. Hurtigt arbejdende grupper vil kunne få ekstra spørgsmål at undersøge (hvis ikke de endda selv stiller dem), f.eks. til intensiteten af signaler eller antallet af signaler. Til udforskning af sidstnævnte spørgsmål er der også en tabel tilgængelig med strukturer af nogle stoffer og antal vibrationssignaler i deres respektive spektre⁸⁰ (hvilket ikke umiddelbart kan tælles på spektrene selv). Som udgangspunkt ses her kun på ikke-lineære molekyler, men data for nogle lineære er også tilgængelige.

Min opgave i denne fase vil være først at præsentere opgaven og dernæst at cirkulere mellem grupperne og besvare spørgsmål, samt hjælpe eleverne lidt på vej uden at udpege sammenhænge for dem⁸¹. Desuden skal jeg uddele yderligere spektre undervejs. Dette vil klassens kemilærer også hjælpe til med. Eleverne skal undersøge spektrene, diskutere dem i grupperne og formulere hypoteser. Går arbejdet helt i stå for flere grupper afbrydes arbejdet eventuelt, og vi snakker fælles om hvordan man kan gå til værks med opgaven.

Det er væsentligt at jeg i denne fase er opmærksom på dels hvilke spørgsmål og hypoteser der bliver formuleret, så jeg kan tilpasse det videre forløb til dette, og dels på hvilke grupper der ser på hvad, så jeg kan spørge grupperne i en hensigtsmæssig rækkefølge i 'forklar'-fasen. Hvis f.eks. en gruppe kun når at formulere en enkel hypotese er det hensigtsmæssigt at de får lov til at

⁷⁷ Se appendiks III, s. 1-3

⁷⁸ Appendiks I, s. 4 og appendiks III, s. 4-9

⁷⁹ Se '6F-modellen' – 'forsk' under afsnittet 'Teori'

⁸⁰ Appendiks IV

⁸¹ Se 'feedback' under 'fjerde lektion'

fremstætte denne i 'forklar'-fasen. Så kan nogle af de grupper der er nået længere få lov at fremstætte nogle af deres andre hypoteser.

Til næste gang skal eleverne også læse s. 1-3 i notearkene⁸², som til del er en opsummering af dagens stof og til dels en genopfriskning af noget der er lært tidligere i fysik og kemi (Kvantekemi, Bohrs frekvensbetingelse, energiniveauer & overgange, det elektromagnetiske spektrum & spektroskopi). For at tjekke at de har forstået stoffet, skal de løse opgave A & B.

Anden lektion: Denne lektion vil evt. starte med en fortsættelse af 'forsk'-fasen, hvis ikke vi bliver færdige i første lektion, og eventuelle spørgsmål til hjemmeopgaverne og det læste stof. Er der ingen spørgsmål stiller jeg selv et par spørgsmål til det centrale i noterne (Bohrs frekvensbetingelse, energien af en foton) for at tjekke at eleverne har forstået det. Derefter går vi videre til 'forklar'-fasen med en fælles gennemgang.

'Forklar': Eleverne får nu mulighed for først at formulere deres observationer, hypoteser og eventuelle spørgsmål, som alle kommer på tavlen. Hvilken rækkefølge grupperne får lov til at bidrage i skal vælges således at så mange som muligt får mulighed for at bidrage (ved at jeg f.eks. starte med at vælge dem der ikke er nået så langt). Det betyder at jeg ikke bare kan starte med at vælge de mest ivrige elever med hånden i vejret da dette kan føre til at nogle elever bidrager for meget på bekostning af andre elever, der så ikke kommer til at bidrage⁸³.

Rigtigheden i de hypoteser⁸⁴ der kommer på tavlen diskuteres ikke før eleverne er færdige med at komme med bidrag. Undervejs tilføjer jeg eventuelt selv mulige sammenhænge, både rigtige og forkerte, hvis jeg føler det er nødvendigt⁸⁵. Det er væsentligt at sammenhængene "større masse giver lavere absorptionsfrekvens" og "større bindingsorden giver større absorptionsfrekvens", og eventuelt afarter deraf kommer på tavlen, men også gerne "mononukleare diatomige molekyler absorberer ikke" og "molekyler med flere atomer giver flere signaler". Dernæst diskuteres alle forslagene, og vi prøver at afklare hvilke der kan være hold i, og hvilke der ikke kan være hold i, eller hvordan man eventuelt kan undersøge dem nærmere. I løbet af diskussionen håber jeg også at vi kan komme ind på noget mere generelt om hypoteser – hvornår er en hypotese bevist? Påvist? Modbevist?

Når hypoteserne er diskuteret tilstrækkeligt, snakker vi om partikel/bølge-dualitet og tager fat på kernen i kvantekemien: Schrödingerligningen og bølgefunktioner. Ligningen vises⁸⁶, og eleverne bliver nu bedt om at give deres bud på hvad de forskellige dele af ligningen betyder. Vi snakker f.eks. om funktioner, (kinetisk og potentiel) energi, differentialligninger, konstanter og variable. Dernæst forklarer jeg ligningen og dens anvendelse. Begrebet bølgefunktion introduceres, og

⁸² Appendiks II, s. 1-3

⁸³ Lawson (2009: 175-176)

⁸⁴ Hypoteserne, både 'rigtige' og 'forkerte', er sammenfattet i appendiks V

⁸⁵ Se '6F-modellen' – 'forklar' under afsnittet 'Teori'

⁸⁶ Se appendiks I, s. 5

eleverne bliver bedt om at forklare hvad en orbital er. Jeg supplerer forklaringen, og bruger orbitaler som eksempel på bølgefunktioner. Denne fase er mere lærerstyret, men jeg vil forsøge at tage udgangspunkt i elevernes forståelse, og så supplere deres egne forklaringer. Man kan også sige at dette indgår mere eller mindre uafhængigt af 6F-modellen, men det er et nødvendigt grundlag for at vi senere kan se på teorien bag IR spektroskopi.

Som supplement til denne gennemgang skal eleverne læse s. 4-5 i noterne til næste gang (Schrödingerligningen, bølgefunktioner & energiniveauer)⁸⁷.

Tredje Lektion: Hvis der er hængepartier fra sidste gang, tager vi først fat på dem. Dernæst fortsættes 'forklar'-fasen, og vi tager hul på 'forlæng'-fasen, hvor eleverne skal bruge det lærte i en ny sammenhæng: 'Den 1-dimensionelle kasse'. Dette skal gøre den nye viden mere anvendelig og illustrere hvordan principperne kan anvendes i mange situationer⁸⁸. Desuden binder dette den nye viden sammen med farver og UV/vis spektroskopi, som eleverne er stødt på tidligere.

'Forklar', fortsat: Vi tager nu fat på det der egentlig har forbindelse til det eleverne har beskæftiget sig med i 'forsk'-fasen: Molekylære vibrationer. Schrödingerligningen for den harmoniske oscillator vises⁸⁹ og forklares, grænsebetingelserne for situationen forklares, og jeg viser løsningen (energiniveauerne)⁹⁰. Den fundne sammenhæng mellem k , μ og frekvens/bølgetal diskuteres i relation til elevernes hypoteser⁹¹, og vi ser i hvilket omfang matematikken stemmer overens med observationerne. Vi snakker evt. også kort om molekylære frihedsgrader, og der vises en animation af ethanols vibrationer⁹² som skal illustrere teorien. Dernæst snakkes evt. kort om udvalgsregler for vibrationsovergange hvis det er relevant i forhold til elevernes spørgsmål og hypoteser. Her er det hovedsageligt mig der forklarer, men eleverne opfordres til at stille spørgsmål, og der trækkes spor tilbage til 'forsk'-fasen når jeg spørger ind til overensstemmelse mellem matematikken og observationerne.

'Forlæng': Som indledning til næste fase snakker vi om farver, elektronisk spektroskopi og spektrofotometri. Vi kommer ind på Bohrs frekvensbetingelse, det elektromagnetiske spektrum, farver, energiniveauer og orbitaler. Her får eleverne lov til selv at fortælle hvad de ved, og jeg supplerer.

Strukturen af 1,3-butadien vises for klassen som eksempel på et system af konjugerede dobbeltbindinger⁹³, og jeg fortæller om PI-bindinger, og hvorledes man kan bruge "den 1-dimensionelle kasse" som model når man vil beregne elektroniske overgange i systemet. Klassen får til opgave at opstille Schrödingerligningen for dette system og komme med bud på hvilke

⁸⁷ Appendiks II, s. 4-5

⁸⁸ Bass et. al. (2009: 93)

⁸⁹ Se appendiks I, s. 9

⁹⁰ Se appendiks I, s. 10

⁹¹ Sammenfattet i Appendiks V

⁹² Kyoroskichannel 'Vibrations of an Ethanol Molecule'

⁹³ Appendiks I, s. 15

funktioner der evt. kunne være løsninger (eksponentialfunktioner, trigonometriske funktioner). Dette får de lidt tænketid til, og de opfordres til at diskutere det med sidemanden. Vi snakker om hvilke randbetingelser der er, og jeg viser løsningen⁹⁴.

Hjemme skal eleverne læse s. 6-9 i noterne⁹⁵ (Den harmoniske oscillator, vibrationer, UV/Vis spektroskopi). De skal desuden, som tjek for at de har forstået teksten, løse opg. C, D & E.

Fjerde Lektion: Sidste time er planlagt lidt kortere så der er plads til at tidsplanen kan skride lidt. Vi begynder med spørgsmål til lektierne og fortsætter dernæst hvor vi slap i tredje lektion.

'Forlæng': 'Den 1-dimensionelle kasse' vises igen, og eleverne bliver nu bedt om i grupper at finde energiniveauerne for partiklen i kassen. Som indledning til denne øvelse spørger jeg klassen om, hvordan man griber opgaven an så jeg kan sikre mig at alle forstår hvad opgaven går ud på.

Derefter vises billeder af to stoffer med hver deres farve (rødt og orange), samt billeder af strukturen af β -caroten og astaxanthin⁹⁶. Igen i grupper skal eleverne nu bruge resultatet fra før til at forudsige hvilket stof der har hvilken farve. I denne forbindelse uddeles notesiderne 10-12, som også indeholder en formulering af opgaven⁹⁷. Ideen er at man vil kunne beregne absorptionsfrekvenser for HOMO/LUMO π -elektronovergangene i molekylerne og dermed finde frem til hvilket molekyle der absorberer lys af højeste og laveste frekvens, og dermed hvilket der vil have hvilken farve (β -caroten er orange og astaxanthin er rødt).

Det viser sig, at rækkefølgen godt kan forudsiges, men at frekvenserne/bølgelængderne afviger en del fra det observerede. Er der overskydende tid, snakker vi derfor nu om modellens begrænsninger, og derefter viser jeg resultatet baseret på en mere sofistikeret regnemetode (DFT/MRCI⁹⁸). Vi snakker nu lidt generelt om tilnærmelser og modeller (atommodeller), og opsummerer evt. på forløbet hvis der er tid til overs.

'Feedback': Undervejs i hele forløbet, især i 'forsk'-fasen, stilles spørgsmål til eleverne for at hjælpe dem på vej. Som udgangspunkt stilles divergente spørgsmål såsom 'Hvilke forskelle ser I mellem spektrene?' og 'Hvordan kan man teste om den hypotese holder?', men når det skønnes at eleverne har behov for yderligere vejledning anvendes især konvergente spørgsmål til at pejle eleverne i den rigtige retning, f.eks. 'Hvilken af disse bindinger giver anledning til den højeste absorptionsfrekvens?' og 'Hvad er forskellen mellem disse to bindinger?' Elever der hurtigt ser sammenhænge udfordres tilsvarende med yderligere divergente spørgsmål såsom 'Hvad med elektronegativitetsforskellen, er den ens i de to bindinger? Er der andre forskelle? Og hvordan vil I så bestemme hvilken forskel der er afgørende?' Erfaringer fra denne fase skal også hjælpe til at afklare hvor meget stilladsering der er behov for når eleverne skal fremsætte teorier.

⁹⁴ Appendiks I, s. 16

⁹⁵ Appendiks II, s. 6-9

⁹⁶ Appendiks I, s. 18

⁹⁷ Appendiks II, s. 10-12

⁹⁸ Cerón-Carrasco et. al. (2010: 101)

De hypoteser og spørgsmål eleverne fremsætter i 'forklar'-fasen skal være med til at forme det videre forløb. Hvis ingen har set på f.eks. intensiteten af signalerne i spektrene, vil jeg ikke komme ind på dette i de følgende faser. Dog er nogle hypoteser essentielle⁹⁹.

På samme måde tages også spørgsmål i de andre faser og i forbindelse med opgaveløsning. Alt efter hvor problemer opstår, bruges feedbacken også til at udpege de koncepter der er brug for at vi bruger mere tid på, og forløbet justeres tilsvarende¹⁰⁰.

Erfaringer fra forløbet

I dette afsnit vil jeg redegøre for de erfaringer jeg har gjort mig gennem undervisningsforløbet. Disse erfaringer er gjort på baggrund af min egen oplevelse af undervisningen, skitseret i min logbog¹⁰¹, og de to spørgeskemaer eleverne har udfyldt efter undervisningen¹⁰². Efter redegørelsen, opdelt i afsnit om elevernes faglige udbytte, indholdets relevans for eleverne og forløbets struktur, følger en diskussion af de mest centrale problemer jeg har identificeret.

Elevernes faglige udbytte

I min vurdering af elevernes faglige udbytte har jeg taget udgangspunkt i den test eleverne har besvaret en måneds tid efter forløbet¹⁰³. Det bør bemærkes at en del af eleverne muligvis ikke har forstået at der i flere af opgaverne skulle afkrydses flere rigtige svar. I hvert fald har 8 ud af 16 elever højst afkrydset et svar ved hvert spørgsmål, men det er selvfølgelig også en mulig forklaring at eleverne simpelthen ikke har fundet flere rigtige svar. Spørgsmål 12 ser ligeledes ud til at være misforstået – opgaven er lavet således at nogle kasser skal forbindes med mere end en kasse på modsatte side, hvilket også fremgår af opgaveformuleringen, men 12 ud af 16 elever har højst forbundet kasserne en til en. Igen er det selvfølgelig ikke sikkert at der foreligger en misforståelse, og da jeg ikke har mulighed for at afgøre dette må jeg som udgangspunkt antage at eleverne ikke kunne de korrekte svar. Erfaringerne nedenfor er derfor gjort ud fra en antagelse af at testen er forstået korrekt.

IR spektroskopi: Samtlige elever har svaret delvist korrekt på testens første spørgsmål, idet de har afkrydset enten svarmulighed b eller e. De har altså tilsyneladende forstået hvilke bevægelser der undersøges med IR spektroskopi, hvilket også understøttes af at 12 elever korrekt har forbundet IR spektroskopi med vibrationer i spørgsmål 12. Til gengæld har eleverne ikke kunnet gennemskue at vibrationer af et molekyle og kernernes relative bevægelser er det samme, så om eleverne virkelig har forstået hvad det er der foregår, er ikke helt sikkert.

⁹⁹ Se 'forsk' under 'første lektion'

¹⁰⁰ Se 'Erfaringer fra forløbet'

¹⁰¹ Appendiks VI

¹⁰² Appendiks VII og VIII

¹⁰³ Appendiks VIII

At eleverne har en god forståelse for IR spektroskopi anfægtes noget af deres besvarelser af spørgsmål 3-6. Spørgsmål 3 og 4, der knytter sig til elevernes evne til at anvende sammenhænge mellem hhv. bindingsorden og frekvens og masse og frekvens, har hhv. 9 og 15 svaret forkert på. Disse sammenhænge husker eleverne altså ikke selvom de selv har fundet frem til dem, har set hvordan de resulterer af løsningen af Schrödingerligningen for den harmoniske oscillator og faktisk havde set dem i undervisningen i spektroskopi forud for mit forløb. Lidt bedre er det gået med spørgsmål 5 og 6, om hvilke bindings vibrationer der ikke absorberer ved IR og hvordan man beregner kraftkonstanter på baggrund af IR, men helt godt ser det ikke ud for elevernes forståelse for hvilke faktorer der har indflydelse på et IR spektrum.

Spektroskopiformer: Besvarelsen af spørgsmål 12 viser at eleverne ikke har helt tjek på hvilke spektroskopiformer der knytter sig til hvilke fænomener. Man ser dog tydeligt at de har arbejdet mere med NMR og især IR da der er flere der har forbundet disse kasser korrekt. Jeg observerede også undervejs i forløbet at eleverne havde problemer med at skelne mellem de forskellige systemer vi arbejder med (den harmoniske oscillator, partiklen i kassen, elektronorbitaler). Måske er det også denne forvirring der kommer til udtryk i spørgsmål 11 hvor en del elever har valgt svarmulighed e, som er forkert her, men gælder for den harmoniske oscillator.

Når det kommer til forholdene mellem de energiforskelle der er på spil i de forskellige spektroskopiformer (spørgsmål 8) er der heller ikke mange elever der svarer rigtigt. Dette er heller ikke noget vi har brugt meget tid på – men måske det netop kunne have været nyttigt til at hjælpe eleverne med at skelne mellem spektroskopiformerne hvis de havde arbejdet mere med de involverede energier.

Bohrs frekvensbetingelse og kvantisering: Ud over at teste elevernes forståelse for de forskellige spektroskopiformer skulle spørgsmål 12 også teste om eleverne har forstået at Bohrs frekvensbetingelse danner grundlag for alle spektroskopiformer. Det har de tilsyneladende ikke, for der er ikke én eneste der har forbundet alle spektroskopiformerne med Bohrs frekvensbetingelse. Dog har mange elever rigtigt valgt svarmulighed b i spørgsmål 7, så de er godt klar over at forskellene mellem energiniveauer og energien af de absorberede fotoner hænger sammen. Jeg havde da også i forløbet antaget et kendskab fra fysikundervisningen til bl.a. Bohrs frekvensbetingelse som det viste sig at ikke alle elever havde, og selvom vi har brugt en del tid på konceptet, var det jo ikke det eleverne selv fik lov at udforske i forløbet.

Mht. kvantisering er det heller ikke alle elever der har forstået begrebets betydning. 8 ud af 16 elever har svaret fuldstændigt forkert på spørgsmål 2 hvor eleverne skulle afgøre princippets betydning i en kontekst. Så det lader til at nogle af de koncepter der har stået mest centralt i mine læringsmål faktisk ikke er lært af ret mange elever.

Schrödingerligningen og bølgefunktioner: Schrödingerligningen og bølgefunktioner er også helt centrale koncepter i undervisningsforløbet. Spørgsmål 10 viser at de fleste elever har en idé om hvad man anvender bølgefunktioner til, hvilket var et vigtigt læringsmål. I hvert fald har de fleste

afkrydset b. Der er dog kun få elever der har valgt c, så de har ikke 100 % styr på det. Jeg havde også håbet at støtte elevernes forståelse for bølgefunktioner ved at anvende orbitaler som et 'kendt eksempel' de kunne relatere begrebet til, men det viste sig at de ikke havde det forventede kendskab til orbitaler. Derfor skabte det i stedet nogle ekstra spørgsmål, så det undrer mig ikke at begrebet ikke er helt forstået.

Spørgsmål 9 viser at det kun er halvdelen af eleverne der kan genkende Schrödingerligningen. Man kan så sige at spørgsmålet også udelukkende tester deres evne til at huske en ligning, og ikke tester om de har en forståelse for ligningen, men ved introduktionen til ligningen lagde jeg vægt på at vi diskuterede ligningens form, og håbede at de ville kunne huske den vha. deres forståelse for den. Det er så kun lykkedes med halvdelen af eleverne. Jeg fik ellers et ret positivt indtryk af deres fornemmelse for ligningen i undervisningen, hvor det lod til at min fremgangsmåde med at lade eleverne selv dechifrere ligningen fungerede godt, og virkede afmystificerende. Samtidig lod det også til at eleverne faktisk havde en god fornemmelse for hvordan de skulle arbejde med ligningen. De gav i hvert fald gode bud på funktioner der kunne være løsninger til ligningen, og efter en genopfriskning af hvordan man differentierer sammensatte funktioner gik de også fornuftigt til opgaven med at finde energierne ud fra bølgefunktionerne. Vi havde dog ikke helt tid nok til opgaven, så måske mangler eleverne at arbejde lidt mere med ligningen.

Elevernes egen opfattelse: I spørgeskemaet om elevernes oplevelse af forløbet¹⁰⁴ har jeg stillet nogle spørgsmål til deres egen opfattelse af deres læring. Her svarer eleverne overvejende positivt på spørgsmål 1.2 og 1.4 om hvor vidt de føler de har fået større forståelse for kvantekemi og for andre områder af kemi og fysik. Så eleverne mener selv at de har lært noget, og de fleste har da også fundet indholdet interessant, jf. spørgsmål 1.1. Det er selvfølgelig positivt at eleverne føler sådan, men også lidt pudsigt da deres besvarelser af det andet spørgeskema umiddelbart ikke giver et helt så positivt billede. Eleverne anderkender da også at forløbet har været svært og er gået meget hurtigt, jf. spørgsmål 1.6 og 1.8 og kommentarerne fra elev 8 og 12, så det har tydeligvis været udfordrende for eleverne. Tempo og sværhedsgrad hænger sammen på den måde at hvis eleverne havde haft mere tid til at forstå stoffet ville det måske have været lettere for dem, så måske har forløbet simpelthen introduceret for meget nyt stof på for kort tid.

Relevans for eleverne

Det har været vigtigt for mig at eleverne har skullet kunne relatere kvantekemi til andet stof, og at de har skullet se det som værende relevant for dem at beskæftige sig med. Som det ses af spørgsmål 1.3, har de tilsyneladende i nogen grad set kvantekemis relevans i forhold til gymnasiestoffet. Til gengæld er det kun få elever der virkelig ser det at blive introduceret for kvantekemi som værende relevant i relation til studievalg, jf. spørgsmål 1.5 – det er måske også meget at forlange af eleverne at de skal kunne overskue det på nuværende tidspunkt.

¹⁰⁴ Appendiks VII

Elev 4 nævner i sin kommentar på forløbet at 'det [de] gennemgik nogen gange kom meget "langt væk" fra spektrene, som netop var, hvad [de] ville kunne bruge en forståelse af kvantekemien til'. Dette illustrerer dels elevens opfattelse af at kvantekemi er relevant for spektroskopi, hvilket er positivt i forhold til mit formål, dels at eleven opfatter kvantekemi som udelukkende relevant for spektroskopi, hvilket er mindre heldigt, og dels at sammenhængen i forløbet ikke altid har været tydelig nok. Det sidste, den manglende sammenhæng i forløbet, kan måske, hvis det er en opfattelse flere elever deler, have været medvirkende til at alle elever ikke altid har virket lige engagerede i forløbet. Hvis eleverne ikke har kunnet se sammenhængen, og dermed relevansen af stoffet, kan det have virket demotiverende.

Forløbets struktur

Nyttigheden af forløbets strukturelle opbygning og elementer er vurderet ud fra dels elevernes holdning til det og dels ud fra min egen oplevelse gennem forløbet.

Elevernes undersøgelser: Elevernes arbejde i 'forsk'-fasen var meget udbytterigt. Det resulterede i en god diskussion af spektrene med nogle fornuftige overvejelser fra elevernes side og nogle fine hypoteser¹⁰⁵, som stort set alle elever bidrog til. De muligheder for undervisningsdifferentiering der lå i forløbet fungerede godt idet alle elever fik arbejdet med noget meningsfyldt der gav resultater. Det var dog tydeligt at arbejdsmåden var ny for eleverne, så det krævede lidt ekstra forklaring til mange af grupperne at få alle til at forstå opgaven. En mere udførlig opgaveintroduktion kan ifølge Lawson afhjælpe dette problem¹⁰⁶.

Til gengæld er de koncepter og sammenhænge der blev arbejdet med i 'forsk-fasen' (indflydelser på udseendet af et IR spektrum, bl.a. absorptionsfrekvensens afhængighed af masse og bindingsorden) faktisk noget af det eleverne har haft sværest ved at anvende i multiple choice testen. Så selvom 'forsk'-fasen lod til at fungere godt har den ikke rigtigt givet det ønskede faglige udbytte. Om det så er 'forsk'-fasens skyld, eller om det skyldes at ideerne ikke efterfølgende er godt nok gennemarbejdet i læringscyklen, er så det store spørgsmål.

Engagement og interesse: De fleste elever har fundet forløbet interessant, og de har også i nogen grad syntet det var sjovt, jf. spørgsmål 1.1 og 1.7. Der var da også et rigtigt godt elevengagement i det første undervisningsmodul, hvor det virkede som om den indledende gennemgang af IR spektret gjorde eleverne interesserede i at vide mere, og hvor arbejdsformen tydeligvis appellerede til eleverne. I de efterfølgende moduler faldt engagementet dog mærkbart, nogle gange så meget at det egentlig kun var en tredjedel af eleverne der deltog aktivt.

I sidste modul blev dette dog noget forbedret. Her var jeg også blevet mere opmærksom på at huske at engagere eleverne i stoffet ved at tage udgangspunkt i deres forforståelse, og jeg gav eleverne længere tid til at tænke når jeg stillede spørgsmål. Det gav en del flere hænder i vejret og

¹⁰⁵ Se appendiks V

¹⁰⁶ Lawson (2009: 171)

et bedre elevinput. Desuden indeholdt dette modul mere selvstændigt elevarbejde – måske har den store overvægt af tavleundervisning i forbindelse med 'forklar'-fasen været en faktor i det manglende elevengagement. Især det tredje modul var domineret af lærerstyret tavleundervisning, og her var elevdeltagelsen lav. Det hjalp dog noget på det da jeg viste en Youtube-video¹⁰⁷ for at illustrere molekulære vibrationer.

Sammenhæng i forløbet: Elev 6 nævner i spørgeskemaet at opsummeringen fra sidst i begyndelsen af hvert modul var godt. Denne opsummering tog udgangspunkt i dagens lektier, og det var egentlig mit indtryk at der ikke var mange der fik lavet dem, men opsummeringen har åbenbart alligevel været nyttig. Til gengæld efterlyser elev 9 en afsluttende opsummering på forløbet. Det ville helt sikkert også have været meget nyttigt hvis der har været tid til det, og det kunne måske have hjulpet eleverne til at få afklaret et par spørgsmål og få overblik over hvad de har lært.

Desværre er det ikke helt lykkedes mig at skabe en sammenhæng mellem alle forløbets elementer. Fra diskussionen af elevernes hypoteser fra 'forsk'-fasen sprang vi direkte til Schrödingerligningen da denne var et nødvendigt grundlag for at vi kunne bekræfte elevernes hypoteser om IR spektroskopi, selvom den repræsenterede et helt nyt koncept. Elev 4 nævner da også at forløbet til tider bevægede sig 'langt væk' fra udgangspunktet, som var IR spektre.

Utilfredshed med strukturen: Selvom størstedelen af eleverne udtrykker tilfredshed med forløbets struktur i spørgsmål 1.9, er der også nogle der er utilfredse. Elev 7 kunne godt have tænkt sig 'nogle flere fælles beregninger før man selv skulle begynde at beregne' mens elev 12 ønsker sig at læse på stoffet selv før vi beskæftiger os med det i klassen. Dette ser jeg som udtryk for en usikkerhed på at prøve sig frem og et ønske om at kunne støtte sig til 'det korrekte', noget jeg også observerede i 'forsk'-fasen hvor nogle elever søgte svar i deres lærebøger i stedet for at undersøge spektrene. Nogle elever føler altså at de lærer bedre på en anden måde. Der opstår derfor en udfordring i at få disse elever til alligevel at deltage aktivt i den undersøgelsesbaserede undervisning.

Diskussion

Alt i alt giver mine erfaringer et blandet indtryk af effektiviteten af undervisningsforløbet. Jeg har identificeret tre hovedområder (som dog ikke er helt uafhængige af hinanden) der har givet anledning til nogle problemer: Elevernes engagement, forløbets interne sammenhæng og det faglige indhold. Disse punkter diskuteres nedenfor, og i den forbindelse gives også forslag til forbedringer.

Engagement: Et af hovedproblemerne i forløbet har været en mangel på elevengagement i 'forklar'-fasen. En stor del af eleverne bidrog næsten ikke til klassediskussionerne og var i perioder

¹⁰⁷ Kyoroskichannel 'Vibrations of an Ethanol Molecule'

ret uopmærksomme. Da læring i udpræget grad fremmes ved aktiv deltagelse¹⁰⁸ udgør dette et stort problem, og det kan bestemt have været medvirkende til det begrænsede læringsudbytte der kommer til udtryk i besvarelserne af multiple choice testen.

Engagementet og interessen var noget højere i første modul, som blev introduceret af 'fang'-fasen. Måske dette er nøglen, og det derfor ville være en fordel at indlede hvert modul med et 'fang'-element – forløbet er jo forholdsvis langt og introducerer ikke blot et koncept, men et helt fagområde, og derfor er en vis tilpasning af 6F-modellen nok på sin plads.

Abrahams og Millar nævner i forbindelse med deres undersøgelse af effektiviteten af praktisk arbejde i undervisningen at det fungerer bedst (forstået som at det efterfølgende huskes bedst) når det indeholder et fængende element, som f.eks. en alternativ præsentation af opgaven, eller komponenter der appellerer kraftigt til sanserne, så som 'flashes, bangs or smells'¹⁰⁹. Så lektioner (i hvert fald praktiske lektioner) erindres bedre når de kan huskes på et 'fang'-element. Lawson nævner dog at 'puzzling observations' som rejser spørgsmål (f.eks. mit 'fang' i første modul) også virker som et effektivt 'fang'¹¹⁰, så 'fang'-elementer kan altså have mange forskellige former. Det er måske især den sidstnævnte type der er anvendelig i relation til kvantekemi som ikke umiddelbart lægger op til 'flashy' komponenter. Dog kan man f.eks. anvende video, hvilket også havde en tydelig motiverende effekt i det tredje modul af undervisningsforløbet.

Nu handler det jo ikke kun om indledningsvis at engagere eleverne, men også om at fastholde elevernes interesse i løbet af undervisningen. Jeg har oplevet en større interesse og elevdeltagelse når jeg selv, ved hjælp af den måde jeg har stillet spørgsmål på, har gjort meget ud af at inkludere eleverne. For det første har jeg fået meget mere respons fra eleverne når jeg har taget udgangspunkt i divergente spørgsmål til deres egen forståelse for noget stof, f.eks. i 'fang'-fasen og da jeg introducerede dem til Schrödingerligningen, og for det andet har det vist sig at ventetid efter et spørgsmål er stillet ('wait-time 1'), hvilket jeg forsøgte at praktisere i højere grad i fjerde modul, fik flere elever til at række hånden i vejret. Lawson nævner også netop en forbedret spørgeteknik i form af anvendelsen af divergente spørgsmål og 'wait-time 1' som faktorer der kan forbedre elevdeltagelse¹¹¹. Endvidere foreslår Lawson at man også venter lidt efter et svar er givet ('wait-time 2') for at vise at man overvejer det givne svar, og at man lader tilfældige elever svare frem for at vælge de elever der har hånden i vejret¹¹². En øget anvendelse af disse teknikker kan måske hjælpe på problemet. F.eks. ville det have været hensigtsmæssigt hvis jeg i tredje modul havde taget udgangspunkt i elevernes forforståelse for lys og farver i stedet for bare selv at 'forelæse' om emnet og i de forbindelse havde givet dem tilstrækkelig med tid til at formulere svar på mine spørgsmål.

¹⁰⁸ Se 'konstruktivisme og læring' og 'undersøgelsesbaseret undervisning' under afsnittet 'Teori'

¹⁰⁹ Abrahams & Millar (2008: 1962)

¹¹⁰ Lawson (2009: 168-169)

¹¹¹ Lawson (2009: 117 & 169-170)

¹¹² Lawson (2009: 117 & 169-170)

Eleverne har desuden deltaget mere når undervisningen også bød på muligheder for at de kunne arbejde selv, som i første og fjerde modul. Ved længere perioder med tavleundervisning oplevede jeg et fald i interessen. Her kunne en udvidet brug af gruppe- eller pararbejde måske implementeres. F.eks. kunne eleverne i tredje modul i grupper selv havde diskuteret hvorledes det vi havde udledt om IR spektroskopi vha. kvantekemi relaterede sig til deres hypoteser, i stedet for at jeg selv styrede sammenligningen. Det ville måske have hjulpet på deres forståelse for stoffet, som baseret på spørgeskemaet må siges ikke at være helt god, såvel som på deres engagement i undervisningen.

Sammenhæng: For nogle elevers vedkommende kan det manglende engagement også skyldes at relevansen af eller formålet i nogle af undervisningens elementer ikke altid har stået klart, hvilket fører mig til det næste punkt: Sammenhængen i forløbet har ikke altid været lige god, eller lige tydelig for eleverne, og det samme gælder sammenhængen mellem forløbet og gymnasiestoffet. Dele af stoffet, Schrödingerligningen og bølgefunktioner, blev da også introduceret i 'forklar'-fasen mere eller mindre uafhængigt af 6F-forløbet, og dets relevans blev først synligt meget senere, da vi anvendte det på den harmoniske oscillator.

Derfor kunne det være en god idé at hjælpe eleverne med at få overblik over forløbet dels ved at gøre formålet og strukturen klar fra begyndelsen af forløbet og dels ved at indlede hvert modul med en opsummering fra sidst (hvilket jeg delvist gjorde) og en gennemgang af dagens disposition. Opsummeringen skal hjælpe eleverne til at få overblik over hvad de har lært, og dermed kan det måske også hjælpe til at hindre misforståelser som f.eks. den der observeres ved spørgsmål 11 i multiple choice testen hvor mange elever har valgt svarmuligheder, som gælder for den harmoniske oscillator, men ikke for partiklen i kassen. Samtidig kan opsummeringen, når den efterfølges af en præsentation af dagens agenda, medvirke til at tydeliggøre sammenhængen mellem undervisningselementerne. Og dispositionen kan i sig selv hjælpe eleverne til at få overblik over 'hvor de skal hen', så formålet med undervisningen bliver mere tydelig.

Fagligt indhold: Overordnet set har elevernes udbytte mht. læringsmålene ikke været optimalt. Det kan der være mange grunde til, bl.a. de der er fremhævet under de to foregående punkter. En anden faktor der spiller ind er at mange af eleverne ikke har læst lektierne og løst opgaverne. Dette kunne måske forbedres ved i højere grad at 'tjekke op' på eleverne i forbindelse med opsummeringen i begyndelsen af hvert modul. F.eks. kunne jeg spørge tilfældige elever til lektierne, så eleverne føler at de er nødt til at være forberedt.

Som nævnt tidligere har eleverne selv følt at de har lært meget. Men da de i virkeligheden ikke har opnået læringsmålene udgør dette i virkeligheden et problem fordi de så ikke ser nødvendigheden i at arbejde videre med det stof de ikke har forstået. Dette problem er svært at tackle, men en mulig løsning kunne være at lægge større vægt på opgaveløsning i forløbet fordi det tilskynder

'self-regulation'¹¹³. Hvis eleverne selv skal løse opgaver hvor de skal anvende de nye koncepter, bliver de udfordret og opdager måske, enten i deres forsøg på at løse opgaven eller i den efterfølgende klassegennemgang, at stoffet ikke er helt forstået. Nyttige opgaver i relation til læringsmålene kunne f.eks. bestå i at anvende ligninger, hvilket kan hjælpe eleverne til at opnå (nær) transfer så de bedre kan anvende de fundne sammenhænge. Det kunne også være opgaver hvor man skal anvende nye koncepter til at diskutere et spørgsmål, f.eks. kunne en nyttig opgave i forbindelse med kvantisering bestå i at man skulle argumentere for eller imod at man kan sige at vægten af vand er kvantiseret. Denne opgave træner også transfer, og kan ved en efterfølgende klasses Diskussion afsløre om eleverne har forstået konceptet og anvender det korrekt.

Hovedproblemet med forløbets faglige indhold vil jeg dog mene simpelthen er mængden af nyt stof, hvilket har givet anledning til en del forvirring, og har betydet at der har været mindre tid til hvert koncept, til opgaveløsning og til opsummering. I mit forsøg på at planlægge hele introduktionen til kvantekemi som ét sammenhængende 6F-forløb har jeg brugt modellen på en mindre nyttig måde (fordi hvert koncept ikke bliver introduceret gennem faserne), og jeg har medtaget meget stof som egentlig ikke er essentielt for at give eleverne et indblik i emnet. F.eks. kunne jeg have præciseret opgaven i 'forsk'-fasen til at eleverne skulle finde ud af hvilke faktorer der har indflydelse på absorptionsfrekvenserne i et IR spektrum. En mere præciseret opgave ville have været lettere for eleverne at gå til, og den ville have sikret at vi ikke også kom ind på f.eks. intensiteten og antallet af signaler som kræver en mere udvidet introduktion til teorien at forklare. For selvom det ville være ærgerligt på den måde at begrænse elevernes udforskningsmuligheder, så ville det samtidig være med til at sikre at 'forklar'-fasen ikke behøvede være så lang, og at vi fik fokuseret på de centrale koncepter.

Jeg vil mene at projektet her viser hvordan en *for* fri udforskningsfase kan skabe forvirring hos eleverne fordi de så er i gang med at konstruere flere forskellige koncepter end de magter på én gang. Kirchner, Sweller og Clark påstår at inquiry-undervisning ofte placerer en for stor byrde på de lærendes 'working memory', og at de derved lærer dårligere¹¹⁴, og det er måske netop det der er sket i 'forsk'-fasen i mit forløb. Jeg vil dog ikke mene at dette betyder at undersøgelsesbaseret undervisning ikke er nyttigt, men blot at man skal tilrettelægge det således at eleverne ikke belastet med for meget på én gang.

Skulle jeg lave forløbet igen ville jeg derfor i stedet tilrettelægge det som små, mere fokuserede 6F-forløb (f.eks. et der introducerer eleverne til kvantisering og et hvor eleverne ser på faktorer der har indflydelse på absorptionsfrekvenserne i et IR spektrum). Dette ville kunne begrænse forløbets omfang og sikre at al teorien bliver introduceret gennem en undervisning der giver god mulighed for at de lærende kan konstruere meningsfulde koncepter uden undervejs at blive for belastet på en gang. Det ville også give en mere afvekslende undervisning med mange skift mellem

¹¹³ Lawson (2009: 238)

¹¹⁴ Kirchner et. al. (2006: 77)

faserne og deres arbejdsformer, og det ville på en naturlig måde gøre det muligt at integrere de foreslåede forbedringer mht. flere 'fang'-elementer og opsummeringer.

Konklusion

Efter at have planlagt, udført og evalueret et undervisningsforløb i kvantekemi på et gymnasium mener jeg at kunne besvare opgavens hovedspørgsmål med et ja. Et undervisningsforløb i kvantekemi tilrettelagt som undersøgelsesbaseret undervisning kan godt anvendes til at introducere emnet på gymnasialt niveau. Det er dog et ja med visse forbehold, hvilket uddybes i min besvarelse af problemformuleringens delspørgsmål herunder.

Elevernes faglige fundament: De elever jeg har undervist har, for de flestes vedkommende, tilstrækkelig med fysisk, matematisk og kemisk baggrundsviden til at de kan undervises i kvantekemi. Dog lader det til at nogle koncepter der introduceres i fysikundervisningen på B-niveau (bølger, Bohrs frekvensbetingelse mm.) er en nødvendig forudsætning da man ellers bliver nødt til også at bruge uhensigtsmæssig lang tid på disse koncepter i kemiundervisningen.

Elevernes matematiske baggrundsviden var fuldt ud tilstrækkelig til at de kunne arbejde med kvantekemi på en meningsfyldt måde. Derfor kan man roligt lægge større vægt på beregninger i undervisningen i kvantekemi end jeg har gjort, så anvendelsen af kvantekemi bliver mere klar for eleverne. Beregningerne vil kunne gøre eleverne mere fortrolige med koncepterne og give dem en større forståelse for feltets arbejdsmåder. Som det ses af undervisningsforløbet kan man godt introducere kvantekemien uden at inddrage matematik der ligger ud over gymnasiet pensum. Således kan man altså godt undervise i kvantekemi uden at inddrage operatorer, funktioner af flere variable og komplekse tal.

Det har været tydeligt i forløbet at eleverne lettere har kunnet relatere stoffet til spektroskopi end til andre kemiske delområder. Dette illustrerer at det er en fordel hvis nogle kemikoncepter kendes på forhånd så den efterfølgende forklaring ved hjælp af kvantekemi kan knyttes til noget mindre abstrakt.

Emnets relevans: Eleverne føler at de har fået en større forståelse for andre emner i kemi og fysik gennem forløbet om kvantekemi, så emnets relevans for det øvrige pensum har i nogen grad været synligt. Især stoffets relevans for spektroskopi har været tydelig for eleverne.

Emnets store nytte som gymnasiestof kommer sig dog, som jeg ser det, især af hvordan det kan binde flere kemiske (og fysiske) delområder sammen. Derfor kunne det have været en fordel, i stedet for at introducere kvantekemi i et selvstændigt, afskåret forløb, at undervise i emnet løbende i forbindelse med andre emner. Således kunne man f.eks. introducere bølgefunktioner i forbindelse med undervisning i atomstrukturer og den kvantekemiske harmoniske oscillator i forbindelse med IR spektroskopi, muligvis gennem 6F-forløb.

6F-modellens effekt på elevengagement: Jeg må bestemt svare ja til spørgsmålet om hvorvidt 6F-modellen hjælper til at engagere eleverne i undervisningen. 'Fang'-fasen virkede tydeligt motiverende på eleverne, og det samme gjorde det når jeg tog udgangspunkt i elevernes forståelse, både ved hjælp af en konstruktivistisk funderet spørgeteknik og ved hjælp af modellens struktur. Det elevarbejde der ligger i modellen, især i 'forsk'-fasen, er også noget der tydeligt vækker og fastholder elevernes interesse.

Dog har eleverne ikke på samme måde været interesserede i den meget lange 'forklar'-fase. På grund af forløbets anderledes anvendelse af modellen kunne det have været en fordel i højere grad at integrere 'fang'-elementer og elevarbejde i de senere faser. En anden, muligvis bedre, tilgang hvis man vil anvende modellen ville være at bygge forløbet op som flere små 6F-forløb fordi modellens styrker, både mht. at engagere eleverne og fremme læring, da bliver bedre anvendt.

Kvantekemi formidlet gennem 6F-modellen: Jeg må konkludere at eleverne ikke helt har opnået de læringsmål jeg har opstillet, og dermed at min formidling af kvantekemi gennem 6F-modellen ikke har været en ubetinget succes. Det har været både svært og tidskrævende at konstruere et forløb så eleverne får tilstrækkelig mulighed for selv at udforske de nye koncepter når emnet er så abstrakt som det er, og indeholder så mange nye koncepter som det gør. Endvidere er de koncepter eleverne faktisk har fået mulighed for at udforske selv nogle af dem færrest har lært.

Dog er det svært på denne baggrund at afvise modellens nytte. Modellen er i dette forløb, set i lyset af min nye forståelse for den, ikke anvendt helt korrekt. Den kan ikke på denne måde anvendes til at introducere et helt emne på én gang, men er mere anvendelig til at lære eleverne enkelte koncepter. Man kan så sige at de koncepter der faktisk blev introduceret ud fra modellens principper heller ikke er lært af mange elever, men her må man huske på at denne introduktion blev blandet sammen med introduktionen af mange andre koncepter og dermed ikke skete som en sammenhængende læringscykel.

Kvantekemi kan altså godt introduceres på gymnasieniveau. Det er dog væsentligt at emnets relevans for resten af gymnasiestoffet gøres tydelig for at gøre det vedkommende for eleverne, og at undervisningen i emnet ligger på et tidspunkt hvor eleverne har det nødvendige faglige fundament. Nyttens i denne introduktion for eleverne senere i deres uddannelsesforløb har projektet dog ikke undersøgt, og det er ikke muligt for mig at give et endegyldigt svar på om 6F-modellen giver den bedste tilgang til undervisningen i emnet.

Litteraturliste

- Abrahams, Ian & Robin Millar (2008): *Does Practical Work Really Work? A study of the effectiveness of practical work as a teaching and learning method in school science*. International Journal of Science Education, 30:14, p. 1945-1969
- Aktuel Naturvidenskab (2006): *De største naturvidenskabelige erkendelser – Temanummer*. Aktuel Naturvidenskab nr. 3
- Bass, J.E., T. L. Contant & A. A. Carin (2009): *Teaching Science as Inquiry*. Allyn & Bacon, Boston 2009 (ch. 4 – p. 87-95)
- Cerón-Carrasco, J. P., Alberto Requena & Christel M. Marian (2010): *Theoretical study of the low-lying excited states of b-carotene isomers by a multireference configuration interaction method*. Chemical Physics 373, p. 98–103
- Dolin, Jens (2006): *Læringsteorier*, kap. II.3 (s. 140-180) i Damberg, Erik, Jens Dolin, & Gitte Holten Ingerslev: *Gymnasiepædagogik*. Hans Reitzels Forlag, 1. udg. København 2006
- Dolin, Jens (2006): *Progression*, kap. IV.7 (s. 330-340) i Damberg, Erik, Jens Dolin, & Gitte Holten Ingerslev: *Gymnasiepædagogik*. Hans Reitzels Forlag, 1. udg. København 2006
- Eisenkraft, Arthur (2003): *Expanding the 5E Model*. The Science Teacher 70, 6, p. 56-59
- Fay, Michael E., Nathaniel P. Grove, Marcy Hamby Towns & Stacey Lowery (2007): *A Rubric to Characterize Inquiry in the Undergraduate Chemistry Laboratory*. Chemistry Research and Practice 8 (2), p. 212-219
- HTX-bekendtgørelsen af 23. Juni 2010: *Læreplanen i kemi A*, bilag 17.
<https://www.retsinformation.dk/Forms/R0710.aspx?id=132640>
- Kirschner, Paul A., John Sweller & Richard E. Clark (2006): *Why Minimal Guidance During Instruction Does Not Work: An Analysis of the Failure of Constructivist, Discovery, Problem-Based, Experiential, and Inquiry-Based Teaching*. Educational Psychologist 41 (2), p. 75-86
- Kyroskitchannel: *Vibrations of an Ethanol Molecule*. Video fra Youtube,
<http://www.youtube.com/watch?v=O5dulWd-OnQ> Uploadet 7/11 – 2011,
vist 2/11 – 1012
- Lawson, Anton E. (2009): *Teaching Inquiry Science in Middle and Secondary School*. Sage Publications, California 2009
- The National Institute of Science and Technology (NIST) Chemistry Webbook.
<http://webbook.nist.gov/chemistry/>

STX-bekendtgørelsen af 23. Juni 2010: *Læreplanerne i kemi A, fysik A og fysik B*, bilag 23,24 og 30.

<https://www.retsinformation.dk/Forms/R0710.aspx?id=132647>

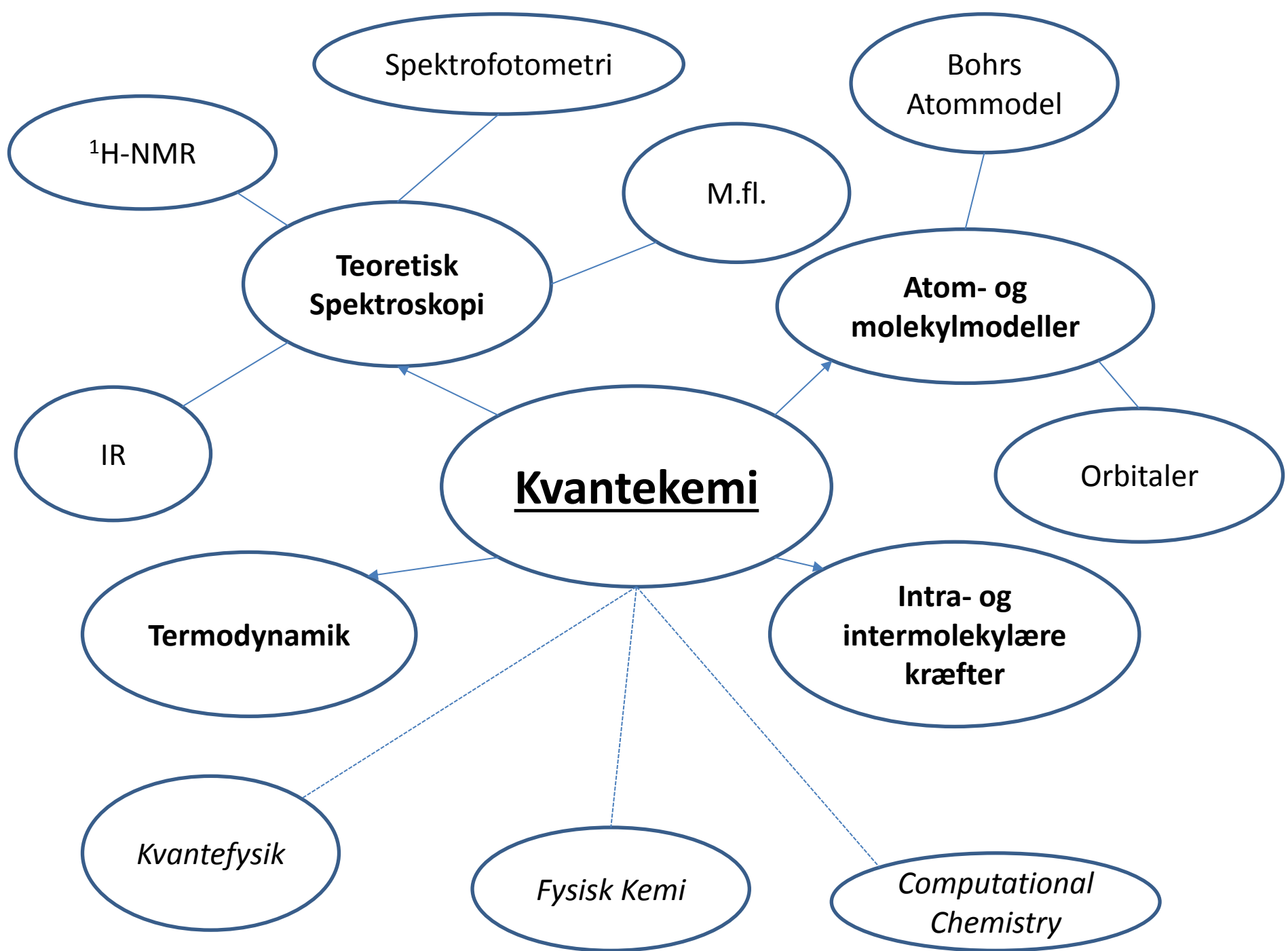
Tsaparlis, Georgios, Dimitrios Kolioulis & Eleni Pappa (2010): *Lower-secondary introductory chemistry course: a novel approach based on science-education theories, with emphasis on the macroscopic approach, and the delayed meaningful teaching of the concepts of molecule and atom*. Chemistry Education Research and Practice 11, p. 107-117

Winsløw, Carl (2006): *Didaktiske elementer – en indføring i matematikkens og naturfagenes didaktik*. Biogolia, Frederiksberg 2006 (kap. 7)

Opgavens forsidebillede er fra det kongelige biblioteks hjemmeside og forestiller Niels Bohr ved tavlen.

Appendiks I

Powerpoint fra undervisningen



INFRARED SPECTRUM

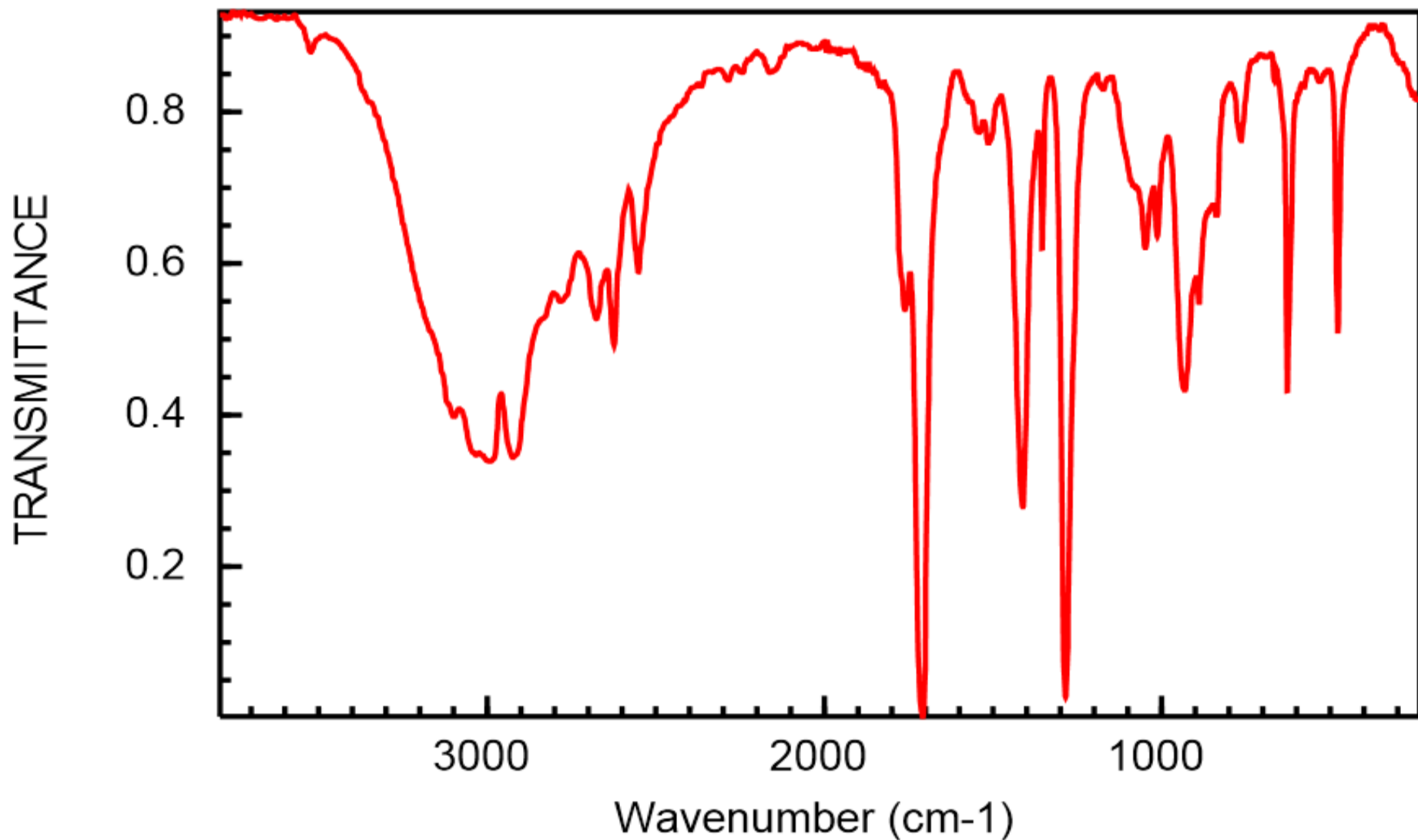
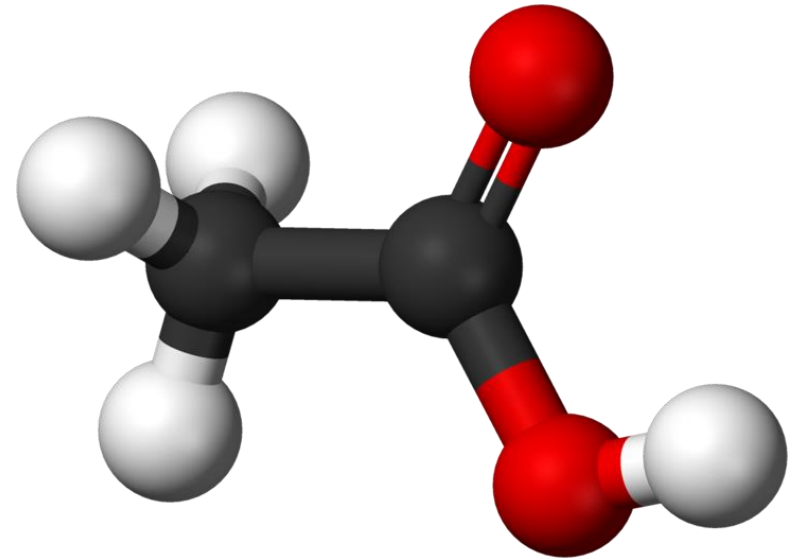
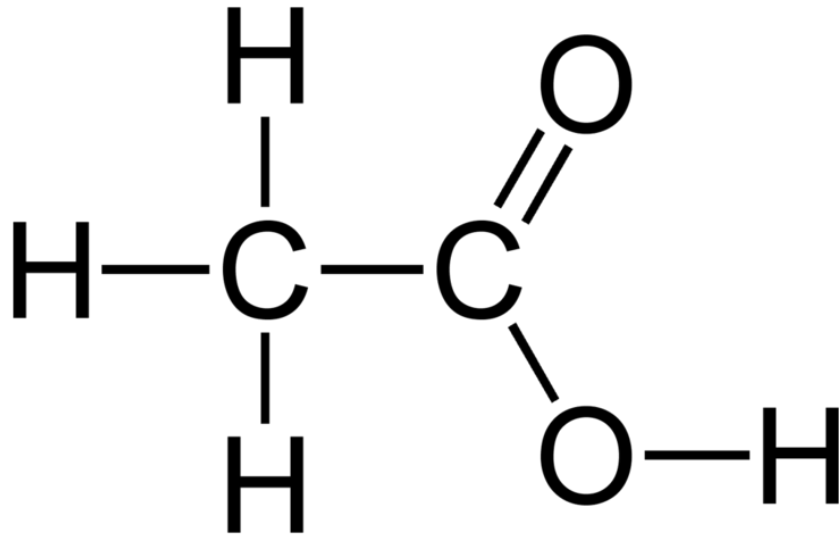
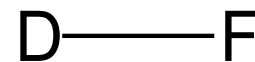
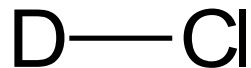
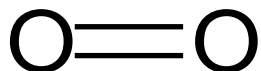
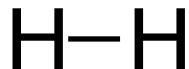
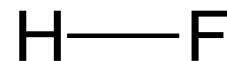
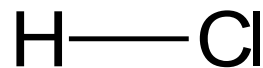
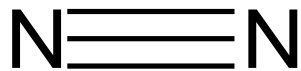
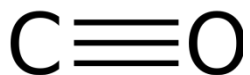
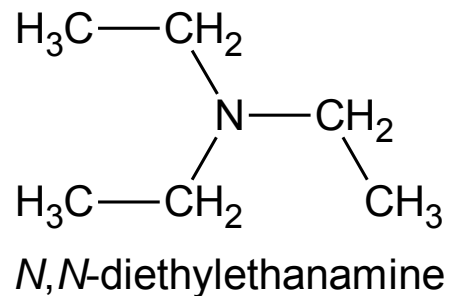
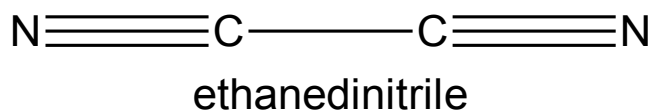
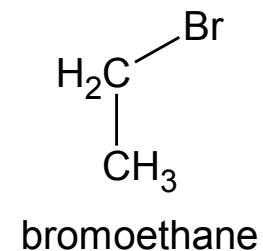
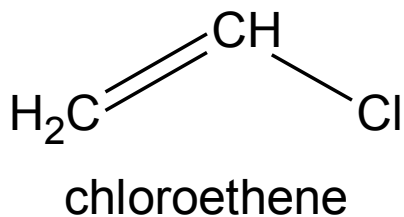
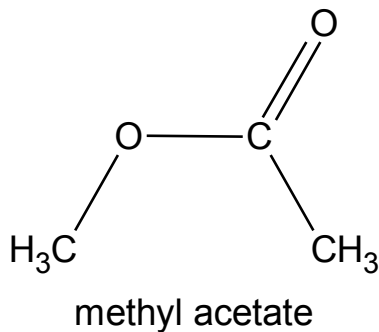
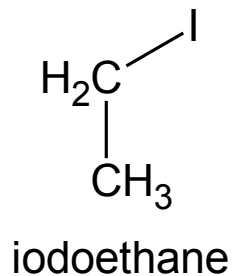


Figure from NIST Chemistry Webbook, <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Spec=C64197&Index=2&Type=IR&Large=on&SVG=on>

Eddikesyre (ethansyre)



Opgave med IR-spektre



Schrödingerligningen

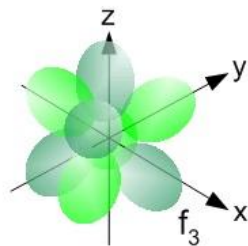
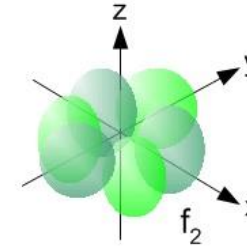
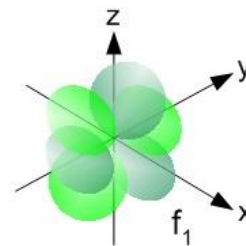
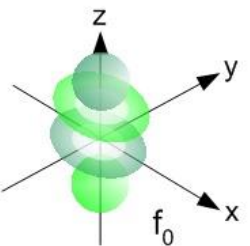
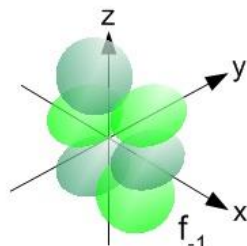
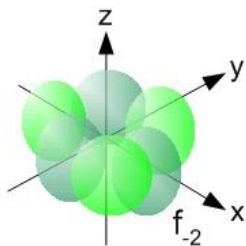
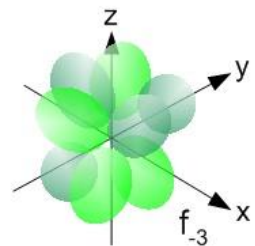
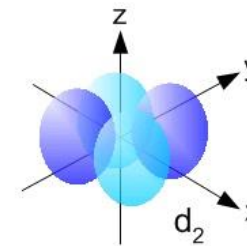
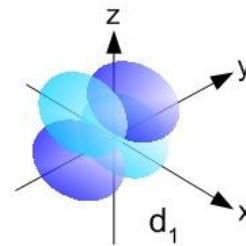
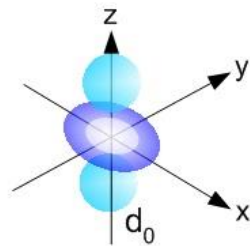
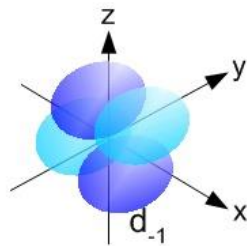
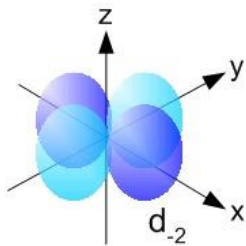
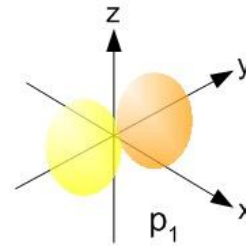
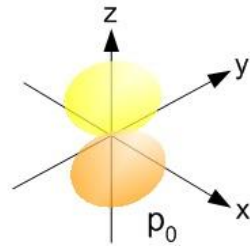
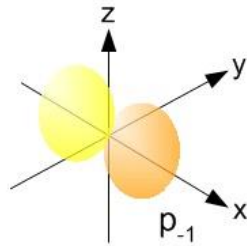
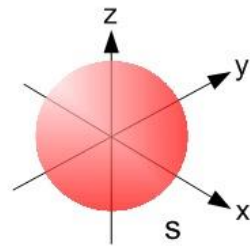
- $$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x) \cdot \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$$

- Bølgefunktion, $\Psi(x)$: Funktion der indeholder al information om et system (position, energi, etc.)
- Observabel: En egenskab for systemet, noget observerbart, f.eks. energi (E).
- Orbitaler er bølgefunktioner(!) for en elektrons bevægelse i et atom eller et molekyle.
- Ligningen har flere løsninger, f.eks. har vi jo både s-, p-, d- og f-orbitaler.



Erwin Schrödinger

Orbitaler



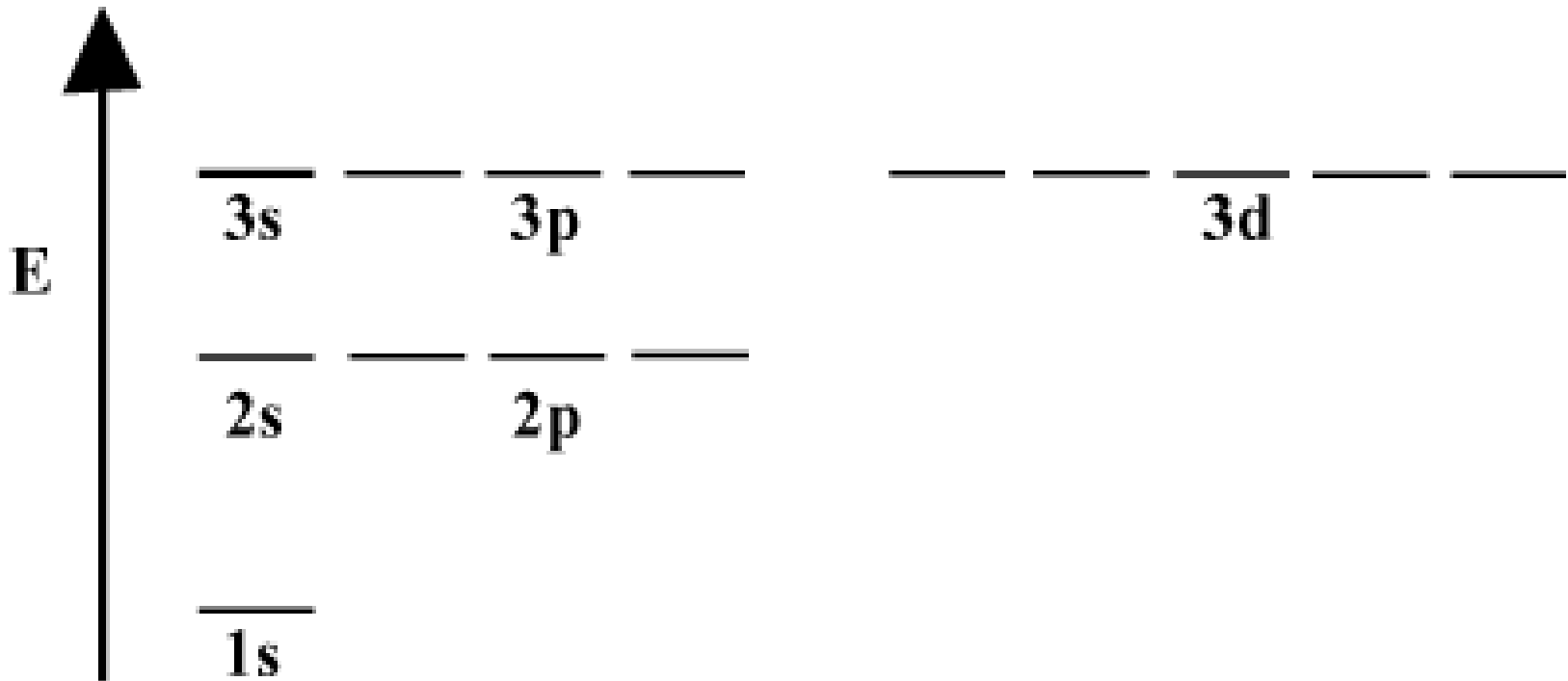
Løsningerne til Schrödingerligningen

- Bølgefunktioner og energier -> Kvantisering. Det er bestemte funktioner med bestemte energier, der er løsninger. Hver løsning tilordnes et kvantetal (1, 2, 3, osv.). Løsningerne beskriver hver en tilstand af systemet.
- Der findes bølgefunktioner for f.eks. Elektronens bevægelse i et atom eller et molekyle (orbitaler), vibrationer i molekyler og rotation i molekyler.
- Spektroskopi undersøger vha. lys energiforskellene mellem energiniveauer, jf. Bohrs frekvensbetingelse $\Delta E = h \cdot f$

Niels Bohr



Orbitalernes energiniveauer



Der kan være 2 elektroner i hver orbital, med modsat spin. Dvs. at de to elektroner har samme energi og samme sandsynlighedsfordeling i rummet.

Molekylære Vibrationer

- $-\frac{\hbar^2}{2\cdot\mu} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + V(x) \cdot \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$
- $\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ $V(x) = \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2$ Harmonisk oscillator

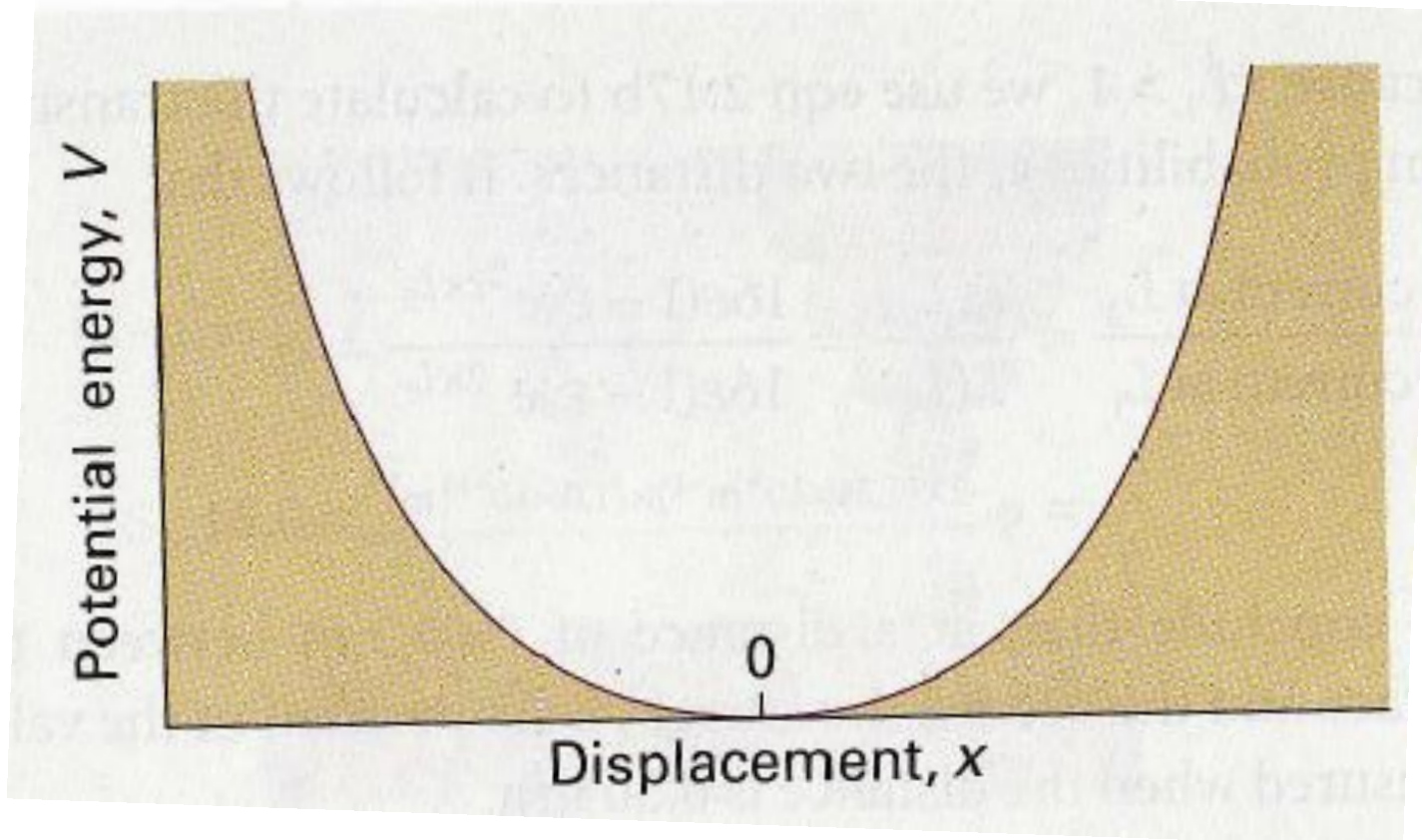


Fig. 2.16 fra Atkins et.al. *Quanta, Matter & Change*, Oxford University Press 2009

Molekylære Vibrationer, løsningerne

- $$-\frac{\hbar^2}{2\cdot\mu} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2 \cdot \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$$
- $$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar \cdot \omega \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

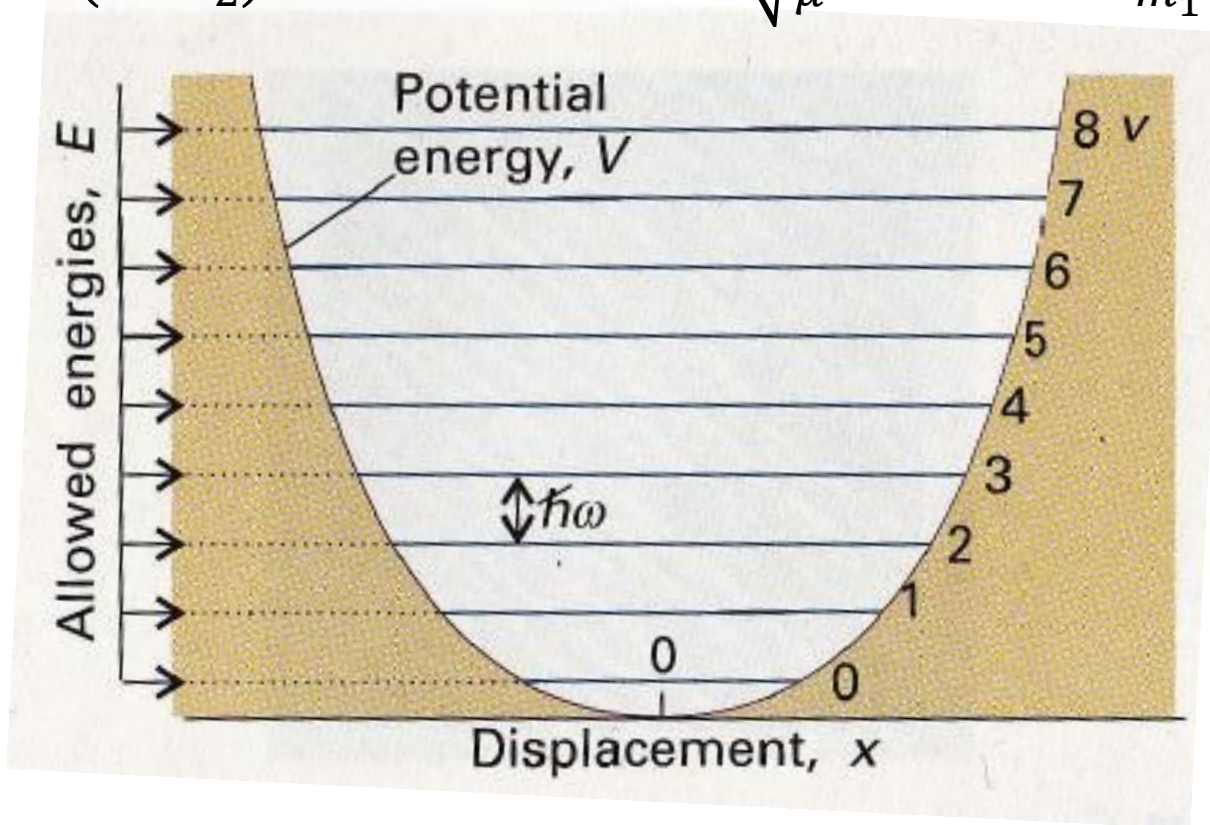


Fig. 2.17 fra Atkins et.al. *Quanta, Matter & Change*, Oxford University Press 2009

Vibrationer af polyatomiske molekyler

Molekylære frihedsgrader: På hvor mange måder kan molekylet bevæge sig?

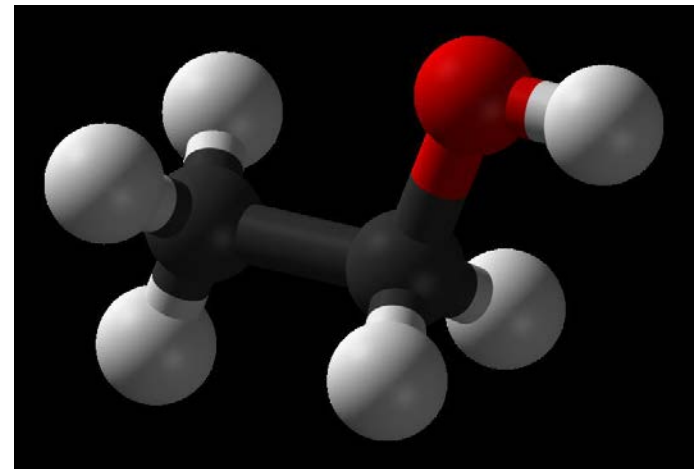
$3N$, hvor N er antal atomer

Vibrationelle frihedsgrader: På hvor mange måder kan molekylet vibrere?

Vibrationer = Frihedsgrader - Bevægelse gennem rummet - Rotationer

$3N - 6$ for de fleste molekyler

$3N - 5$ for lineære molekyler



Billede af ethanol fra <http://en.wikipedia.org/wiki/File:Ethanol-3D-balls.png>

Udvalgsregler

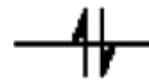
- Regler for hvilke overgange, der er tilladte – altså mellem hvilke energiniveauer kan man skifte ved absorption af lys?
- Man kan med perturbationsteori (teori om, hvad der sker med et system, når det interagerer med lys) finde frem til:
 - 1) Bohrs frekvensbetingelse. Lyset skal have en bestemt frekvens for at kunne skabe en overgang, $\Delta E = h \cdot f$
 - 2) Man får de stærkeste vibrationsovergange, når $\Delta v = 1$. Dvs. man hopper et enkelt energiniveau.
 - 3) Man får stærkere overgange, jo mere molekylets polaritet skifter ved vibrationen.
 - 4) Skifter polariteten ikke, observerer man slet ikke overgangen (!)

Farver og spektroskopi

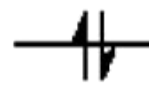
Energy



LUMO



HOMO



Elektroniske overgange, dvs. excitation af en elektron fra en orbital til en anden, svarer til lys i UV-vis området – derfor kan de give anledning til farver

HOMO-LUMO overgange giver stærk absorption. Husk at hver orbital kan besættes af 2 elektroner med modsat spin

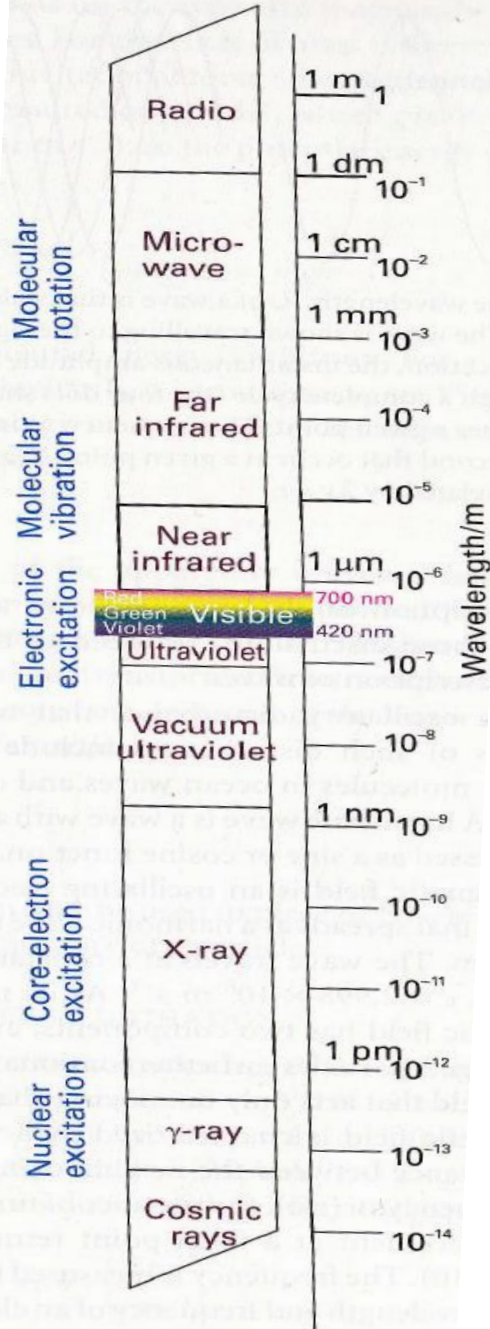



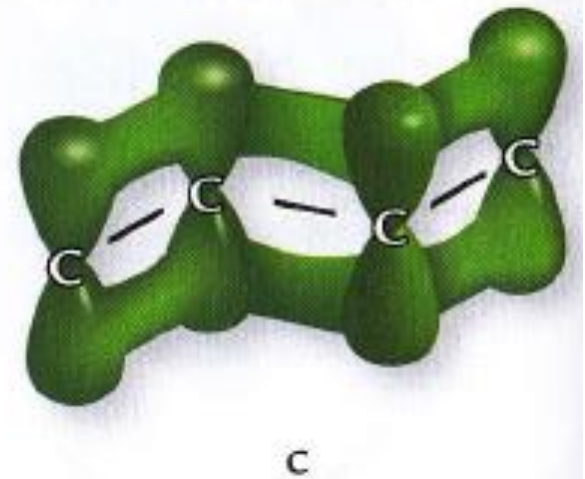
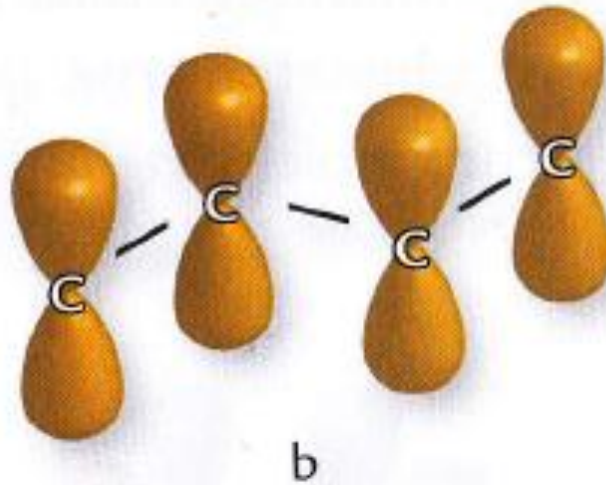
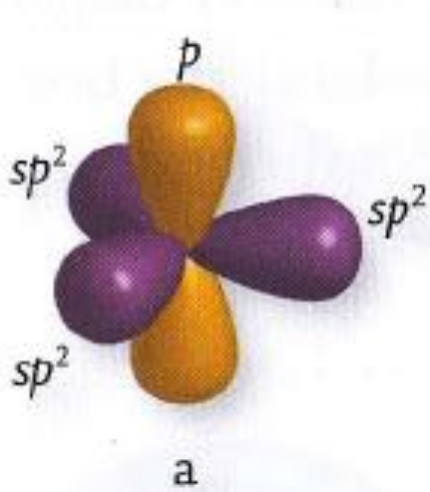
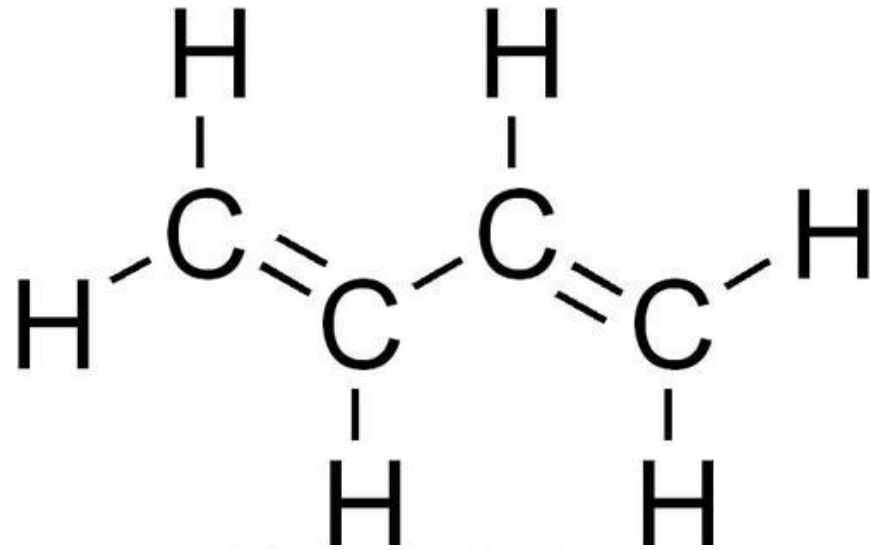
Fig. F.11 fra Atkins et al. *Quanta, Matter & Change*, Oxford University Press 2009
 Figur m. energiniveauer fra <http://www.chem.ucalgary.ca/courses/350/Carey5th/Ch10/ch10-6-0.html>

Lys og farver

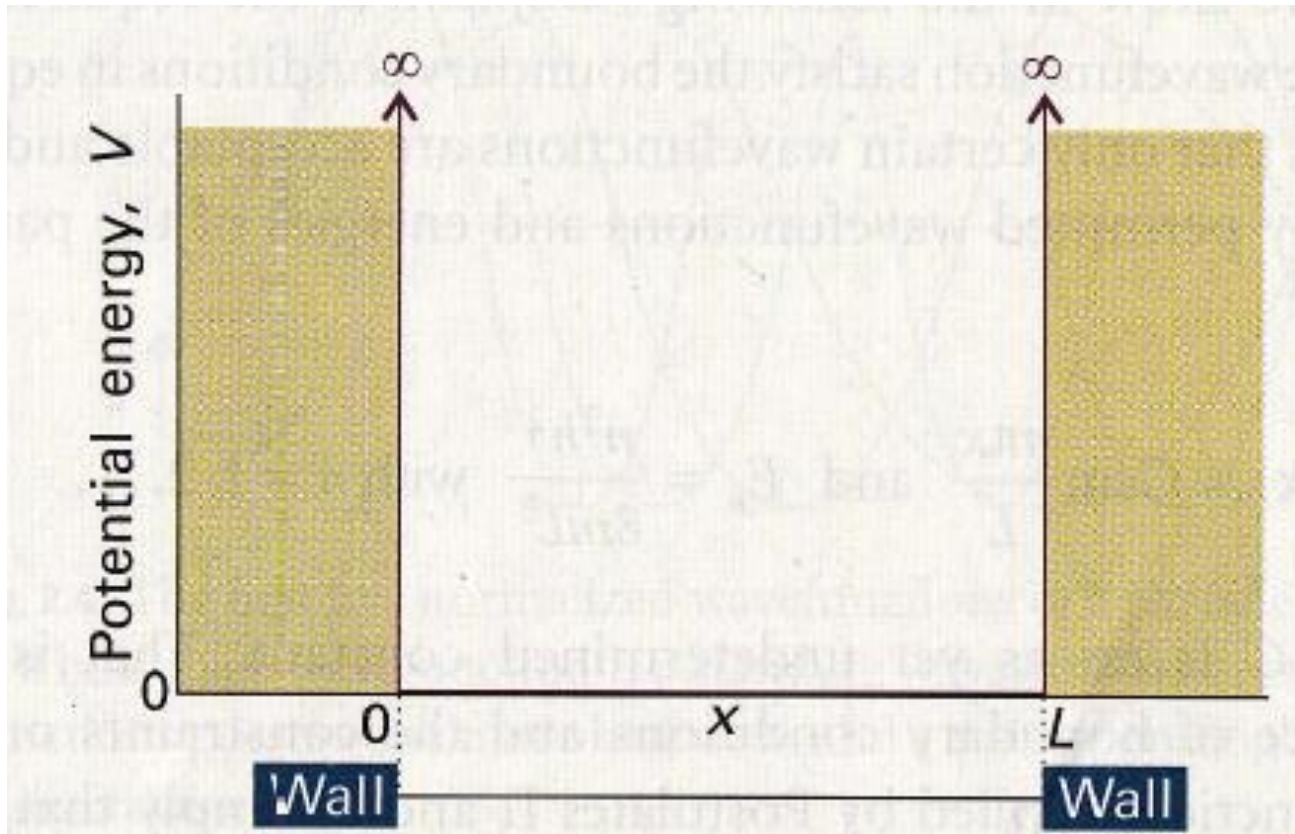
Colour of light absorbed	Approximate wavelength ranges / nm	Colour of light transmitted, i.e. complementary colour of the absorbed light	In a 'colour wheel' representation, complementary colours are opposite to one another
Red	700–620	Green	
Orange	620–580	Blue	
Yellow	580–560	Violet	
Green	560–490	Red	
Blue	490–430	Orange	
Violet	430–380	Yellow	

- Den farve vi ser, er den der ikke absorberes!
- Lys med mere energi har højere frekvens men kortere bølgelængde. Violet lys har altså højere energi end rødt.
- Hvis vi ser noget rødt og noget gult, hvad absorberer så lys med mest energi?

1,3-butadien



Partiklen i en "1-dimensionel kasse"



$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E \cdot \Psi(x) \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}$$

Energierne for partiklen i kassen

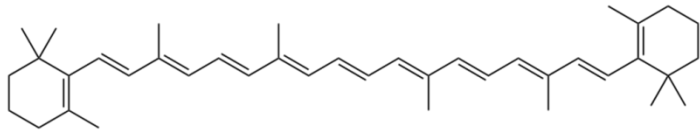
$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = E \cdot \Psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{n \cdot \pi \cdot x}{L} = E \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}$$

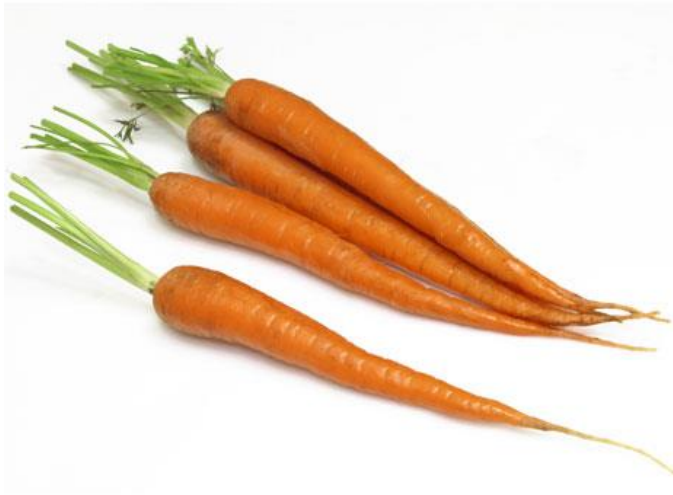
$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{n \cdot \pi}{L} \frac{d}{dx} \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \cos \frac{n \cdot \pi \cdot x}{L} = E \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}$$

$$\frac{\hbar^2}{2 \cdot m \cdot 4 \cdot \pi^2} \cdot \frac{n^2 \cdot \pi^2}{L^2} \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{n \cdot \pi \cdot x}{L} = E \cdot \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}$$

$$E_n = \frac{n^2 \cdot \hbar^2}{8 \cdot m \cdot L^2} \quad E_{n+1} - E_n = (2 \cdot n + 1) \cdot \frac{\hbar^2}{8 \cdot m \cdot L^2}$$



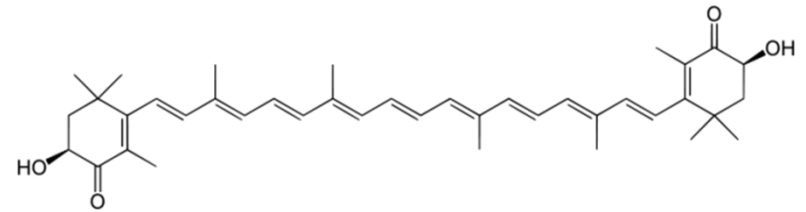
β -caroten



$$\lambda_{1DBox} = 1239 \text{ nm}$$

$$\lambda_{exp} = 450 \text{ nm}$$

$$\lambda_{DFT/MRCI} = 457 \text{ nm}$$



Astaxanthin



$$\lambda_{1DBox} = 1496 \text{ nm}$$

$$\lambda_{exp} = 487 \text{ nm}$$

Appendiks II

Noter til undervisningen

Hvad er kvantekemi?

Kemien som forskningsfelt og vidensområde kan inddeles i en række underområder, f.eks. organisk kemi, uorganisk kemi, fysisk kemi, biokemi og analytisk kemi. Disse områder har en del overlap, også med helt andre fag (f.eks. fysik og biologi). Et af de underområder der især overlapper fysik er kvantekemi.

I kvantekemi anvender man kvantemekanik på kemiske problemstillinger. Kvantemekanikken er en fysisk teori udviklet i begyndelsen af 1900-tallet, der beskæftiger sig med egenskaberne af små partikler, der udviser både partikel- og bølgeegenskaber (f.eks. elektroner, atomer og molekyler – derfor er det af stor relevans for kemien). Det viser sig nemlig at den klassiske (Newtonske) mekanik ikke er i stand til at forklare dette. Teorien er udviklet af en række store videnskabsmænd, bl.a. Albert Einstein, Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Paul Dirac og vores egen nationalhelt Niels Bohr.

I kvantekemien bruger man så denne teori til at beskrive (bl.a.):

- Teoretisk Spektroskopi: Interaktionen mellem partikler (atomer eller molekyler) og lys og anvendelsen af dette til at afdække partiklers egenskaber, f.eks. molekylstrukturer.
- Atom- og molekylmodeller: F.eks. Bohrs atommodel, valensbåndsteori og orbitalteorier.
- Intra- og intermolekylære kræfter: Forklaringer på hvordan atomer hænger sammen i molekyler og hvordan molekyler hænger sammen med hinanden.
- Termodynamik: Læren om varme og energi, indenfor kemien selvfølgelig især i relation til kemiske reaktioner.

Flere af disse emner overlapper også andre grene af kemi og fysik, f.eks. fysisk kemi og computational chemistry (computere anvendt til teoretisk kemi). Viden om kvantekemi er nyttigt indenfor flere forskellige forskningsområder, bl.a. kemi, fysik og nanoteknologi.

Elektromagnetisk stråling

Lys er elektromagnetiske bølger, og det defineres ved enten sin frekvens eller sin bølgelængde. Frekvensen (f) er antal svingninger per sekund (med SI-enheden Hertz, 'per sekund': Hz) og bølgelængden (λ) er afstanden mellem bølgetoppe (med SI-enheden meter: m). I spektroskopien anvendes desuden ofte det såkaldte bølgetal ($\tilde{\nu}$), der som regel angives i reciprokcentimeter: cm^{-1} . Ligningerne på næste side viser sammenhængen mellem de tre og lysets hastighed (c). Vær opmærksom på at anvende passende enheder, når I bruger ligningerne! Hvis I anvender SI-enheder, skal bølgetallet anvendes i reciprokmeter, m^{-1} . Der går 100 reciprokmeter på en reciprokcentimeter: $1 \text{ cm}^{-1} = 100 \text{ m}^{-1}$.

$$c = \lambda \cdot f$$

$$\tilde{\nu} = \frac{f}{c} = \frac{1}{\lambda}$$

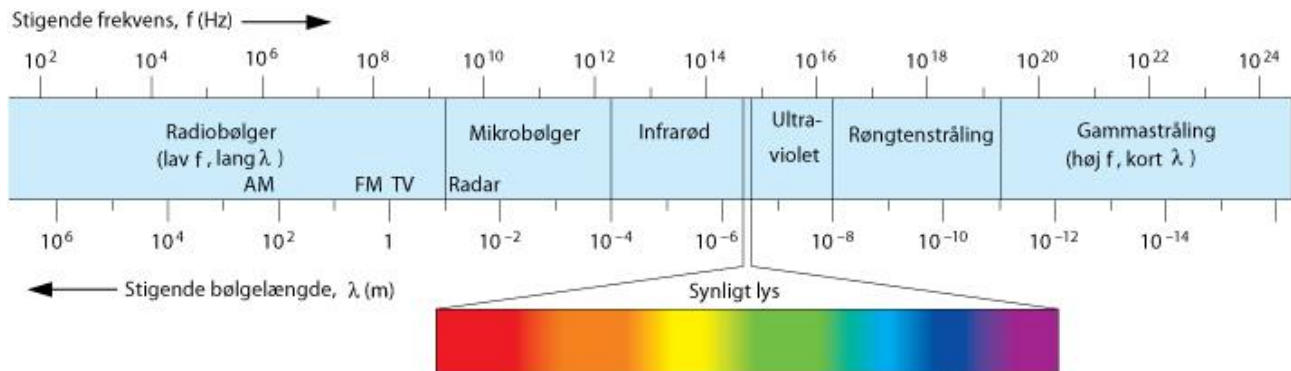
Lys udviser dog også partikelegenskaber og kan beskrives som 'små energipakker' eller 'energikvant' kaldet fotoner. Energien (E) af en foton afhænger af frekvensen (men kan selvfølgelig også defineres ud fra bølgelængden eller bølgetallet):

$$E = h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda} = h \cdot c \cdot \tilde{\nu}$$

Energien er altså proportional med frekvensen, med proportionalitetsfaktoren h (Plancks konstant). Værdien af Plancks konstant og af nogle af de andre konstanter der anvendes i kvantekemi er opskrevet i tabellen herunder:

Lysets hastighed, c	Ca. $2,998 \cdot 10^8 \frac{m}{s}$
Plancks konstant, h	Ca. $6,626 \cdot 10^{-34} J \cdot s$
'h streg' (Plancks konstant divideret med 2π), \hbar	Ca. $1,055 \cdot 10^{-34} J \cdot s$
Lysets hastighed gange Plancks konstant, $h \cdot c$	Ca. $1,986 \cdot 10^{-25} J \cdot m$
Den atomiske masseenhed, m_u	1 unit=ca. $1,661 \cdot 10^{-27} kg$
Massen af en elektron, m_e	Ca. $9,109 \cdot 10^{-31} kg$
Bohr-radiussen, a_0	Ca. $5,292 \cdot 10^{-11} m$

Elektromagnetisk stråling inddeles gerne i en række områder afhængigt af sin energi. Denne inddeling kaldes det elektromagnetiske spektrum:



http://www.emu.dk/gsk/fag/fys/ckf/fase2/2uine/universet_og_jordens_udvikling/straalingen_fra_universet/index.html

Man anvender forskellige typer af stråling (altså stråling med forskellig energi) til forskellige typer af spektroskopi, f.eks. anvendes infrarød stråling til vibrations-spektroskopi (som derfor også kaldes IR spektroskopi) og ultraviolet og synligt lys til elektronisk spektroskopi (som derfor også kaldes UV/vis spektroskopi).

Spektroskopi

En af konsekvenserne af kvantemekanikken er, at molekyler og andre partikler ikke kan have vilkårlige energier. Faktisk kan energien af et molekyle kun antage ganske bestemte værdier og ikke nogen som helst værdier derimellem. Man kalder disse tilladte energier for energiniveauer, og molekylerne kan kun skifte mellem disse niveauer, hvis de tilføres lige netop den mængde energi, som svarer til forskellen mellem dem. Det kan ske ved absorption af lys med denne energi (og dermed med en bestemt frekvens), jf. Bohrs frekvensbetingelse:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h \cdot f$$

Ved at undersøge ved hvilke frekvenser et molekyle absorberer lys, kan man derfor sige noget om afstandene mellem energiniveauerne i molekylet, og det kan fortælle en masse om molekylets struktur og egenskaber. Det er disse undersøgelser, der kaldes spektroskopi, og resultatet kaldes et spektrum.

Opgaver

Opg. A

Afstanden mellem to energiniveauer for vibrationen af et HCl-molekyle er ca. $5,77 \cdot 10^{-20} \text{ J}$. Beregn bølgelængden (i nanometer, $\text{nm} = 10^{-9} \text{ m}$), frekvensen (i hertz, Hz) og bølgetallet (i reciprokcentimeter, cm^{-1}) af den stråling der absorberes ved denne vibrationsovergang. Hvilken type stråling er der tale om (UV, synligt, IR, mikrobølger, etc.)?

Opg. B

Ved en overgang fra et energiniveau med en energi på $5,00 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ til et højere energiniveau blev der absorberet lys med en bølgelængde på 500 nm. Hvad er energien af det øvre niveau? Hvilken type stråling er der tale om (UV, synligt, IR, mikrobølger, etc.)?

Schrödingerligningen

Ethvert kvantemekanisk system kan beskrives ved sin bølgefunktion, en matematisk funktion der indeholder al information om systemet. Bølgefunktionen finder man ved hjælp af Schrödingerligningen, opkaldt efter østrigeren Erwin Schrödinger, der fremsatte den i 1926. Ligningen er en differentialligning, der helt generelt for alle én-dimensionale systemer (som er det eneste vi kommer til at beskæftige os med) kan skrives således:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

$\psi(x)$ er bølgefunktionen, som man finder, når man løser ligningen. Det første led (med dobbelt differentiation) er et udtryk for den kinetiske energi af systemet, $V(x)$ er en funktion for den potentielle energi af systemet og E er systemets totale energi. Når man løser ligningen, finder man samtidig energien. Som med andre differentialligninger har Schrödingerligningen flere løsninger, dvs. flere funktioner og energier.

Det første man gør når man skal lave beregninger på et kvantemekanisk system er at opskrive ligningen, dvs. at man skal finde ud af, hvad den potentielle energi, $V(x)$, er i dette tilfælde. Nu kan ligningen løses, og man finder bølgefunktionerne og deres tilhørende energier. Det er dog almindeligvis ikke alle funktionerne og energierne, der kan bruges – det hele bliver yderligere kompliceret af, at en bølgefunktion gerne skal overholde nogle *grænsebetingelser*.

Grænsebetingelser ser vi nærmere på, når vi ser på nogle bestemte systemer, men det betyder at man yderligere kan indsnævre sit udvalg af bølgefunktioner og energier. Resultatet er, at kun enkelte funktioner og energier er tilladte – man siger at løsningerne er kvantiserede. Den lange række af løsninger adskilles ved at give dem hver et tal; dem kalder man *kvantetal*, men det er ikke andet end at man kalder dem løsning 1, 2, 3, 4, osv. Man skriver f.eks. den første løsning som $\psi_1(x)$ og den anden som $\psi_2(x)$, med de tilhørende energier E_1 og E_2 . Nogen gange klassificerer man løsningerne med flere forskellige kvantetal, men princippet er det samme.

Hydrogenatomet

Alt dette kan virke temmeligt kompliceret og abstrakt, så lad os tage et eksempel på et kvantekemisk system: Hydrogenatomet. Dette består som bekendt af to partikler, en elektron der bevæger sig omkring en proton (kernen). Vi ser på elektronens bevægelse i forhold til kernen. Ifølge Bohrs atommodel, som I kender, kredser elektronen i en bane omkring kernen. Radius i den bane er Bohr-radiussen $a_0 = 5,292 \cdot 10^{-11}m$.

Schrödingerligningen for dette system er lidt mere kompliceret, end for de systemer vi ellers skal beskæftige os med, for sådan et system er selvfølgelig 3-dimensionelt – til gengæld kender I faktisk løsningerne i forvejen! Den potentielle energi består i tiltrækningen mellem den positivt ladede kerne og den negativt ladede elektron. Schrödingerligningen for elektronen ser således ud (lad være med at tænke over de mærkelige symboler, i princippet er det den samme som I så ovenfor):

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \nabla^2 \psi - \frac{Z \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r} \cdot \psi = E \cdot \psi$$

Man får en uendelig lang række løsninger til ligningen, som kategoriseres med 3 kvantetal: n , l og m . Disse løsninger, bølgefunktioner, kender I faktisk i forvejen: Det er nemlig dem, man kalder orbitaler. Den første løsning (med den laveste energi) er således 1s-orbitalen (med $n=1$, $l=1$ og $m=1$), den næste er 2s-orbitalen (med $n=2$, $l=1$ og $m=1$), så kommer de tre 2p-orbitaler (med $n=2$, $l=2$ og $m=-1, 0$ og 1), osv. Orbitalerne har hver deres energi, som man kan beregne med ligningen eller finde eksperimentelt ved hjælp af spektroskopi.

På hvilken måde indeholder orbitalerne (og bølgefunktioner generelt) al information om systemet? For det første kan man ved hjælp af Schrödingerligningen finde partiklens energi. Og som I nok ved kan man også bruge orbitalerne til at udtrykke hvor elektronen er. Den præcise placering kan man dog ikke sige noget om, fordi elektronen også opfører sig som en bølge. Man kan dog til gengæld sige noget om, hvor det er sandsynligt at finde elektronen. Tager man den første løsning, 1s-orbitalen, og beregner hvor man har størst sandsynlighed for at finde elektronen, når den er i denne orbital, finder man netop, at det er når afstanden fra kernen er lig med Bohr-radiussen a_0 . Så ham Bohr var ikke helt gal på den, da han opstillede sin model!

Molekylære vibrationer; den harmoniske oscillator

Når man skal se på molekylære vibrationer, bruger man en model kaldet 'den harmoniske oscillator'. Her beskriver man bindingen mellem to atomer som en fjeder, der kan strækkes ud og trække sig sammen. Den potentielle energi for sådan en fjeder kan udledes fra Hooke's lov:

$$F = -k \cdot x \Rightarrow V(x) = \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2$$

I dette udtryk er x afstanden fra ligevægtsafstanden (altså et udtryk for hvor meget fjederen er strakt ud), og k er kraftkonstanten, som angiver hvor stærk fjederen er. Grafisk afbildes den potentielle energi som en parabel:

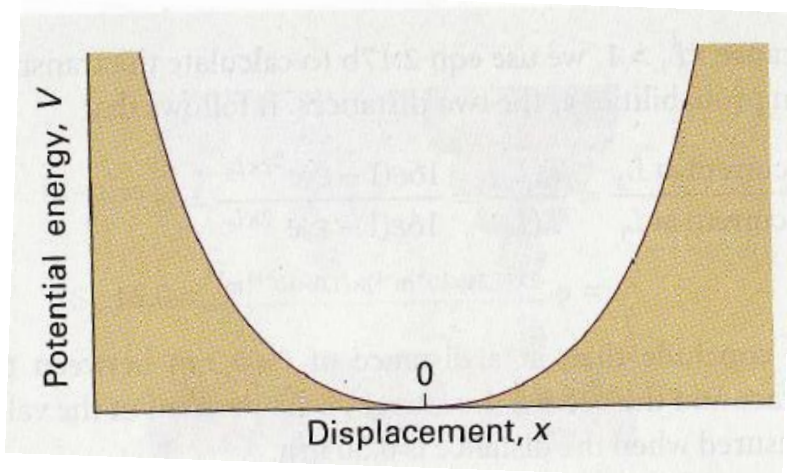


Fig. 2.16 fra Atkins et.al. *Quanta, Matter & Change*, Oxford University Press 2009

Den potentielle energi bliver altså større og større, jo længere man kommer fra ligevægtsafstanden. Til venstre for ligevægt ($x < 0$) bliver fjedren presset sammen, til højre for ligevægt ($x > 0$) bliver den strakt ud.

Nu har vi et udtryk for den potentielle energi, og så er det bare at indsætte det i Schrödingerligningen:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot \mu} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} \cdot k \cdot x^2 \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Bemærk at m (massen) er erstattet med μ (den reducerede masse). Dette skyldes at vi ikke længere ser på én partikel, men på to (de to atomer der holdes sammen af fjederen). Den reducerede masse af masserne m_1 og m_2 er givet ved udtrykket:

$$\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

Okay, nu har vi Schrödingerligningen – så skal vi bare finde ud af, hvad grænsebetingelserne er. Vi ved at den harmoniske oscillator har en uendelig stor potentiel energi, når x går mod plus eller minus uendelig, altså når bindingen presses sammen eller strækkes ud uendeligt meget. Derfor kan bindingen ikke presses eller strækkes i det uendelige. Matematisk kan grænsebetingelserne skrives: $\psi(x) = 0$ for $x = \pm\infty$. Så kan ligningen løses. Bølgefunktionerne for den harmoniske oscillator er lidt komplicerede, så dem vil vi ikke se på, men udtrykket for energierne bliver:

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar \cdot \omega \quad , \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

Når et molekyle absorberer lys sker der en overgang mellem to energiniveauer, så derfor er det interessante i forhold til spektroskopi netop afstanden mellem energiniveauerne. For den harmoniske oscillator er denne afstand:

$$E_{v+1} - E_v = \hbar \cdot \omega$$

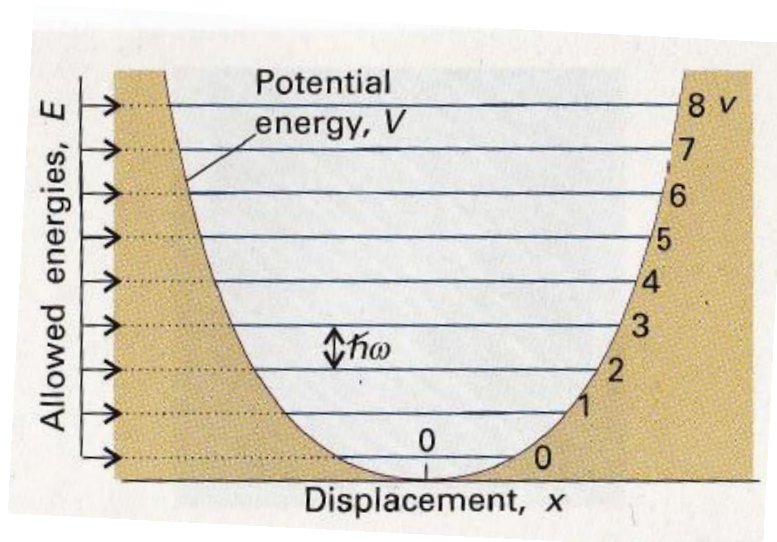
Illustreret i et diagram ser energiniveauerne ud som vist til højre.

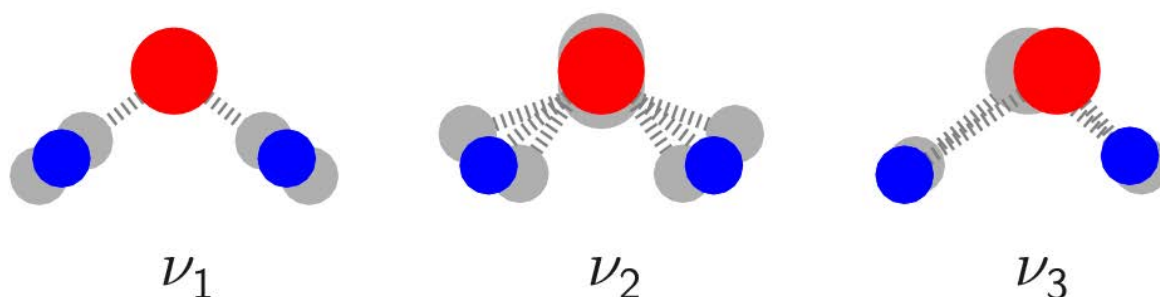
Det vil altså sige, at energien af det absorberede lys afhænger af ω , der så igen afhænger af k (kraftkonstanten) og af μ (den reducerede masse).

Derfor absorberer stærkere bindinger (hvor k er større) stråling med en højere energi (og dermed en højere frekvens, et højere bølgetal og en lavere bølgelængde). Styrken af en binding afhænger først og fremmest af bindingsordenen (trippelbindinger er stærkere end dobbeltbindinger, som så er stærkere end enkeltbindinger), men også af andre faktorer, f.eks. bindingens polaritet (generelt, jo mere polær bindingen er, jo stærkere er bindingen). I så f.eks. på IR-spektrene, at en carbon-oxygen dobbeltbinding (en carbonylgruppe) absorberer stråling ved ca. 1700 cm^{-1} , mens en tilsvarende enkeltbinding absorberer stråling ved ca. 1250 cm^{-1} .

Det betyder også, at en større masse af atomerne (eller mere præcist, en større reduceret masse) medfører at bindingen absorberer lys med en lavere energi. På IR-spektrene så f.eks. at CO (carbonmonooxid) absorberer stråling ved ca. 2170 cm^{-1} , mens CS (carbonmonosulfid) absorberer stråling ved ca. 1280 cm^{-1} . Svovl er jo meget tungere end oxygen.

Egentlig passer ligningerne her kun på diatomige molekyler, altså hvor der bare er to atomer, der vibrerer i forhold til hinanden. Det viser sig dog (ved hjælp af noget mere kompliceret matematik), at de også passer nogenlunde på strækningen af bindinger i polyatomiske molekyler. Man skal dog være lidt varsom, fordi vibrationerne i sådanne molekyler afhænger af hinanden – der hænger jo noget mere end bare et enkelt atom i enden af fjederen! Og bindingerne i polyatomiske molekyler kan også vibrere på flere forskellige måder, hver med sin helt egen frekvens. F.eks. kan et vandmolekyle vibrere på 3 forskellige måder, kaldet 'symmetrisk strækning', 'bøjning' og 'asymmetrisk strækning', som illustreret i figuren på næste side.





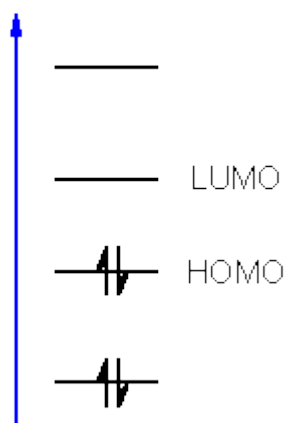
Figur fra <http://backreaction.blogspot.dk/2009/01/water-is-blue-because-water-is-blue.html>

Mere generelt kan et molekyle vibrere på $3 \cdot N - 6$ forskellige måder, hvor N er antallet af atomer. Dog kan lineære molekyler (f.eks. OCS og HCl) vibrere på hele $3 \cdot N - 5$ forskellige måder. Hvorfor nu det? Jo, positionen af hvert atom kan angives med 3 koordinater (x , y og z), så der er $3 \cdot N$ 'frihedsgrader', altså måder molekylet kan bevæge sig på. Ud af disse frihedsgrader er der 3, der svarer til at hele molekylet flytter sig i rummet (man kan angive positionen af molekylets centrum med 3 koordinater), og hvis molekylet ikke er lineært, er der 3 frihedsgrader, der svarer til at molekylet roterer (det kan drejes omkring 3 akser). De resterende frihedsgrader svarer til vibrationer. Et lineært molekyle kan kun rotere på to forskellige måder, så derfor kan det vibrere på en måde mere. For IR-spektrene betyder det (som udgangspunkt), at molekyler med flere atomer har flere forskellige signaler end molekyler med færre atomer.

Elektronisk Spektroskopi og farver

Elektronisk spektroskopi, også kaldet UV/vis-spektroskopi fordi den anvendte stråling hører til denne del af det elektromagnetiske spektrum, undersøger overgange mellem orbitaler (elektroniske overgange), altså hvor en elektron flyttes (exciteres) fra en orbital til en anden. Hvis man vil vide ved hvilken frekvens i dette område af det elektromagnetiske spektrum et molekyle absorberer, skal man altså se på energiforskellene mellem orbitaler. Som regel sker den stærkeste absorption mellem den yderste besatte orbital (kaldet HOMO = Highest Occupied Molecular Orbital) og den første ubesatte orbital (kaldet LUMO = Lowest Unoccupied Molecular Orbital). Husk at hver orbital kan besættes af to elektroner, da elektroner kan have to forskellige spin. Princippet er illustreret i energidiagrammet herunder:

Energy



Hver streg repræsenterer et energiniveau (en orbital), og pilene repræsenterer elektronerne i dem. En opadvendt pil er en elektron med 'spin op' og en nedadvendt pil er en elektron med 'spin ned'. Ved en elektronisk overgang kan den ene elektron i HOMO'en exciteres til LUMO'en.

Fordi energiforskellene mellem orbitaler ofte svarer til synligt lys, er det disse energiforskelle, der giver stoffer farver. Almindeligt (hvidt) lys består af stråling med alle mulige bølgelængder og dækker bl.a. hele det synlige spektrum (ca. 380-700 nm). Når dette lys rammer et molekyle, der absorberer ved en af de bølgelængder, vil det lys der kastes tilbage til os mangle den farve. Derfor vil det for os se ud som om, molekylet har den modsatte (komplementære) farve. Absorberer et molekyle f.eks. rødt lys, vil det se grønt ud. Absorberer det blå lys, vil det se orange ud. Princippet er illustreret i følgende tabel:

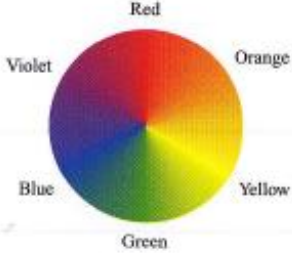
Colour of light absorbed	Approximate wavelength ranges / nm	Colour of light transmitted, i.e. complementary colour of the absorbed light	In a 'colour wheel' representation, complementary colours are opposite to one another
Red	700–620	Green	
Orange	620–580	Blue	
Yellow	580–560	Violet	
Green	560–490	Red	
Blue	490–430	Orange	
Violet	430–380	Yellow	

Table 11.2 fra Housecroft & Constable: *Chemistry*, Pearson Education 2010

Opgaver

Opg. C

Afstanden mellem to energiniveauer for vibrationen af et HCl-molekyle er ca. $5,77 \cdot 10^{-20} \text{ J}$.
Beregn kraftkonstanten k (enheden er Newton per meter, $\frac{\text{N}}{\text{m}}$).

Opg. D

Vil bindingen i PO (phosphormonooxid) eller i NO (nitrogenmonooxid) absorbere lys med mest energi? Hvad med en carbon-carbon enkeltbinding og en carbon-carbon dobbeltbinding?

Opg. E

Hvis et molekyle absorberer lys med en bølgelængde på 600 nm, hvilken farve er molekylet så?
Hvis absorptionen skyldes en overgang fra molekylets HOMO til dets LUMO, hvad er da energiforskellen mellem de to energiniveauer (i Joule)?

Partiklen i en '1-dimensionel kasse'

'Den 1-dimensionelle kasse' er en simpel kvantemekanisk model, hvor man betragter en partikel der kun kan bevæge sig i én dimension, og kun indenfor et afgrænset område (en 'kasse'). Grafisk kan man illustrere modellen således:

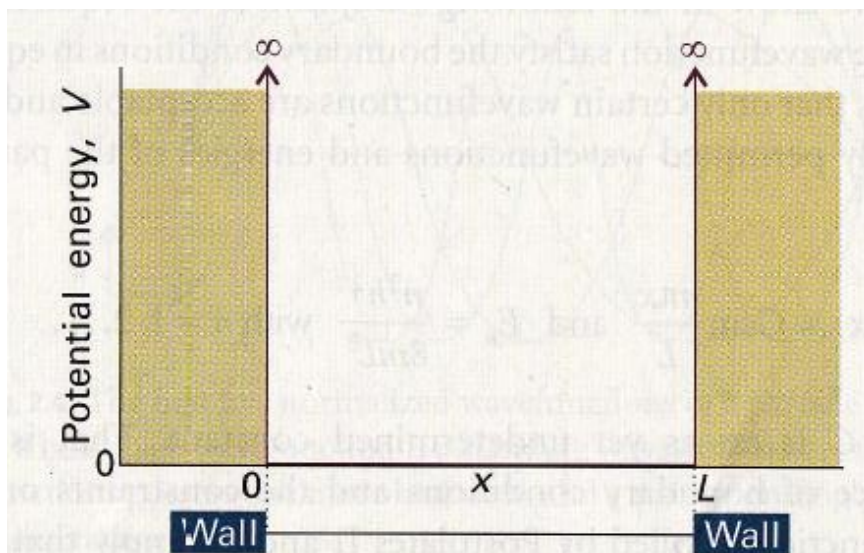


Fig. 2.1 fra Atkins et.al. *Quanta, Matter & Change*, Oxford University Press 2009

Partiklen (f.eks. en elektron) bevæger sig langs x-aksen i 'kassen' afgrænset af $x=0$ og $x=L$. Indenfor kassen har partiklen ingen potentiel energi; uden for kassen har den uendelig potentiel energi (det betyder, at den ikke kan komme ud). Vi ser kun på partiklens bevægelse indenfor kassen. Som med ethvert kvantekemisk system starter vi med at opskrive Schrödingerligningen for systemet. I dette tilfælde er det særligt simpelt, for den potentielle energi, $V(x)$, er nul:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E \cdot \psi(x)$$

Løser man denne ligning får man i første omgang bølgefunktionerne for en partikel, der kan bevæge sig frit i én dimension (dvs. der er ikke nogen kasse). Påtvinger vi nu funktionen grænsebetingelserne, at partiklen ikke kan komme ud af kassen (dvs. at bølgefunktionen skal være nul for $x \leq 0$ og for $x \geq L$), får vi løsninger for partiklen i kassen:

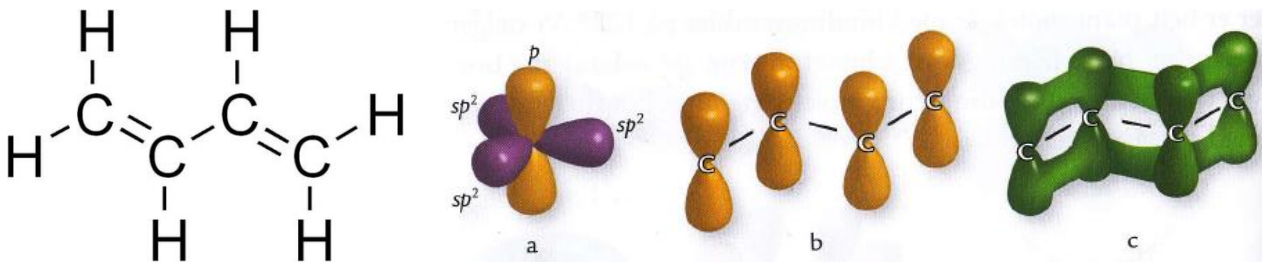
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{n \cdot \pi \cdot x}{L}$$

$$E_n = \frac{n^2 \cdot h^2}{8 \cdot m \cdot L^2}$$

Ligesom med molekylære vibrationer er det interessante i forhold til spektroskopi energiforskelle. Disse er givet ved:

$$E_{n+1} - E_n = (2 \cdot n + 1) \cdot \frac{h^2}{8 \cdot m \cdot L^2}$$

'Den 1-dimensionelle kasse' kan bruges som en simpel model på bl.a. en elektron i et carbonnanorør og på elektroner i et konjugeret π -elektronsystem. Vi skal prøve det sidste. Et konjugeret π -elektronsystem opstår, når p-orbitalerne i naboatomer kan overlape med hinanden. Dette sker f.eks. i konjugerede polyener, dvs. kæder af carbonatomer med skiftevis enkelt- og dobbeltbindinger mellem carbonatomerne. Det mest simple eksempel er 1,3-butadien:



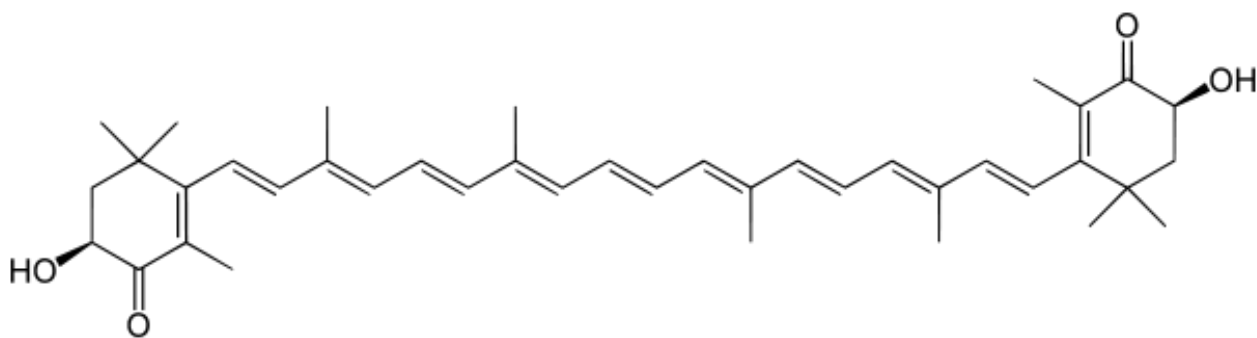
Billede fra Nielsen & Axelsen: *Basiskemi A*, Haase & Søns Forlag 2011, s. 118

Fig. A viser de yderste orbitaler i et sp^2 -hybridiseret carbonatom. Fig. B viser hvordan p-orbitalerne orienterer sig i forhold til hinanden i en konjugeret kæde. Fig. C viser π -elektronsystemet, hvor p-orbitalerne overlapper. Sådant et overlap af p-orbitalerne kan også ske med oxygenatomer og nitrogenatomer, så disse atomer kan også indgå i et π -elektronsystem.

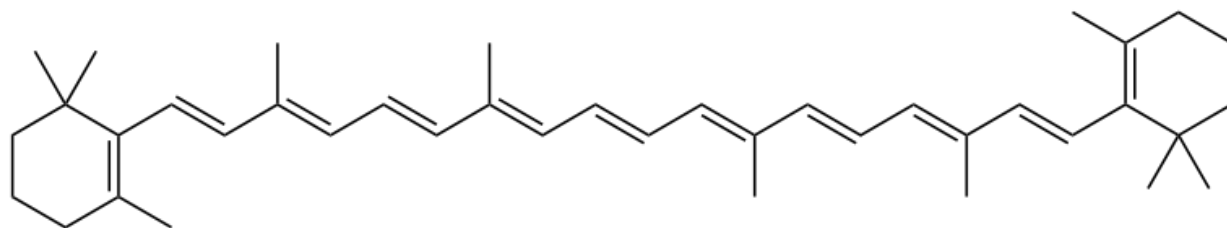
Bruger man modellen på sådan et system (hvilket er en grov tilnærmelse!), antager man at elektronerne i π -systemet bevæger sig langs en linje, dannet af carbon-carbon bindingerne (evt. også bindinger til oxygen og nitrogen). Massen i modellen er her massen af en elektron, og længden er længden af kæden af konjugerede bindinger. Man går ikke helt galt i byen, hvis man antager at hver binding i kæden er ca. 140 pm, dvs. $140 \cdot 10^{-12}m$.

Opgave

Prøv at bruge modellen til at finde ud af hvilket af stofferne astaxanthin og β -caroten, der er illustreret på hvilket af billederne på tavlen. Antag en bindingslængde på 140 pm. Husk at hvert atom i π -systemet bidrager med én elektron til systemet, og at der kan være to elektroner i hvert energiniveau.



Astaxanthin



β -Caroten

Facitliste

Opg. A

$$\begin{aligned}\lambda &= 3,44 \cdot 10^{-6} m = 3440 \text{ nm} \\ f &= 8,71 \cdot 10^{13} \text{ Hz} \\ \tilde{\nu} &= 29,05 \cdot 10^4 m^{-1} = 2905 \text{ cm}^{-1}\end{aligned}$$

IR-stråling.

Opg. B

$$\begin{aligned}\Delta E &= 3,97 \cdot 10^{-19} J \\ E_2 &= 8,97 \cdot 10^{-19} J\end{aligned}$$

Synligt (blågrønt) lys.

Opg. C

$$\begin{aligned}\mu &= 1,63 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \\ k &= 487,6 \frac{N}{m}\end{aligned}$$

Opg. D

NO vil absorbere lys med mere energi end PO, jf. de reducerede masser:

$$\mu_{NO} = 1,24 \cdot 10^{-26} \quad \mu_{PO} = 1,75 \cdot 10^{-26}$$

Dobbeltbindingen vil absorbere lys med mere energi, fordi kraftkonstanten er større (stærkere binding).

Opg. E

Molekylet er blå, da det absorberer orange lys.

$$\Delta E = 3,31 \cdot 10^{-19} J$$

Opgave med konjugerede π -elektronsystemer

β -caroten: $n=11$ (der er 22 elektroner i π -elektronsystemet, så 11 energiniveauer er besat),

$$L = 140 \cdot 10^{-12} \cdot 21 \text{ (der er 21 bindinger)}, \Delta E = 1,60 \cdot 10^{-19} J, \lambda = 1239 \text{ nm}$$

Astaxanthin: $n=13$ (26 elektroner, 13 besatte niveauer), $L = 140 \cdot 10^{-12} \cdot 25$ (25 bindinger),

$$\Delta E = 1,33 \cdot 10^{-19} J, \lambda = 1496 \text{ nm}$$

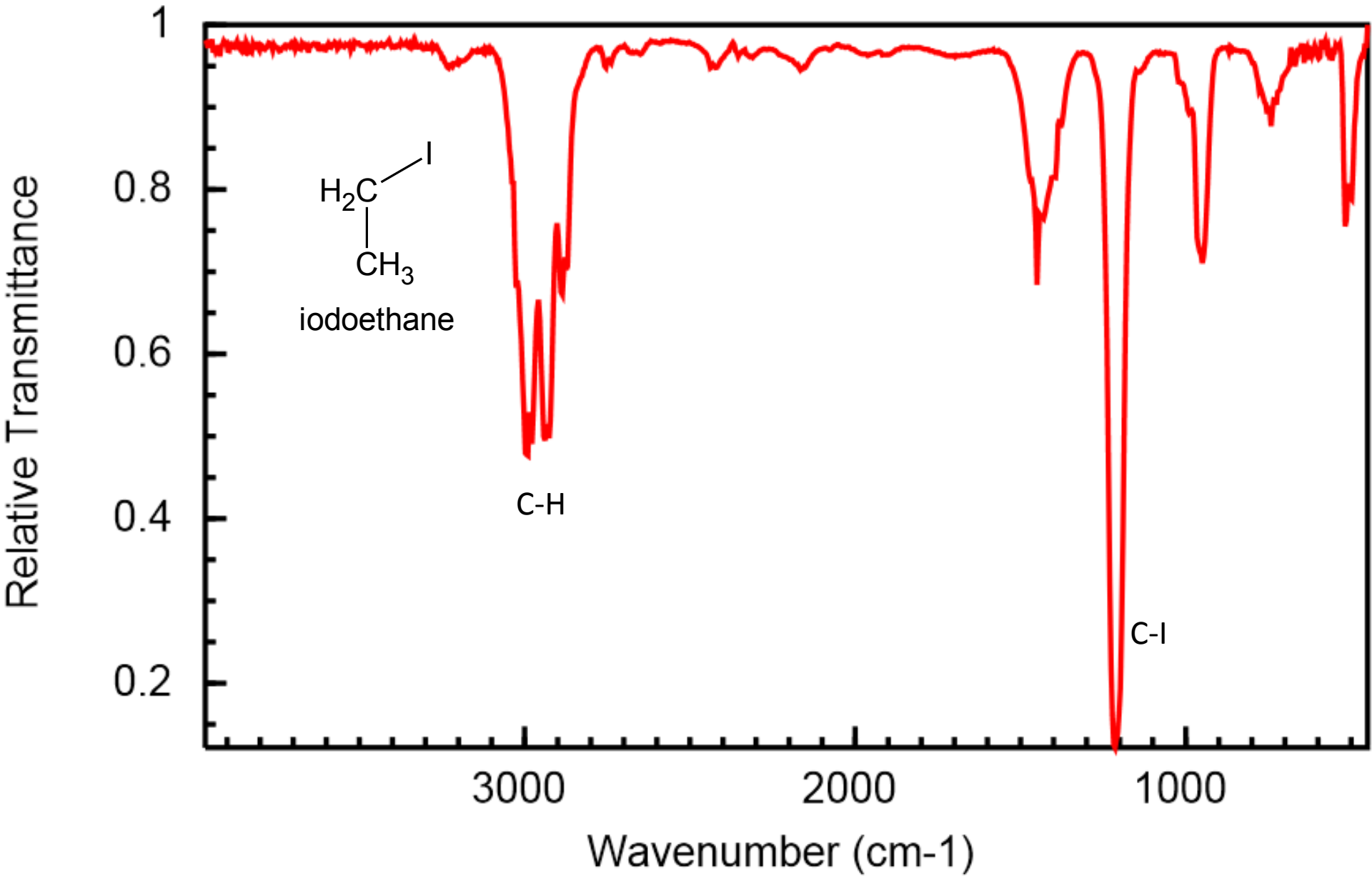
Astaxanthin må være det røde stof, da det absorberer ved højest bølgelængde; β -caroten det orange. Dog er afvigelsen fra de faktiske bølgelængder stor!

Appendiks III

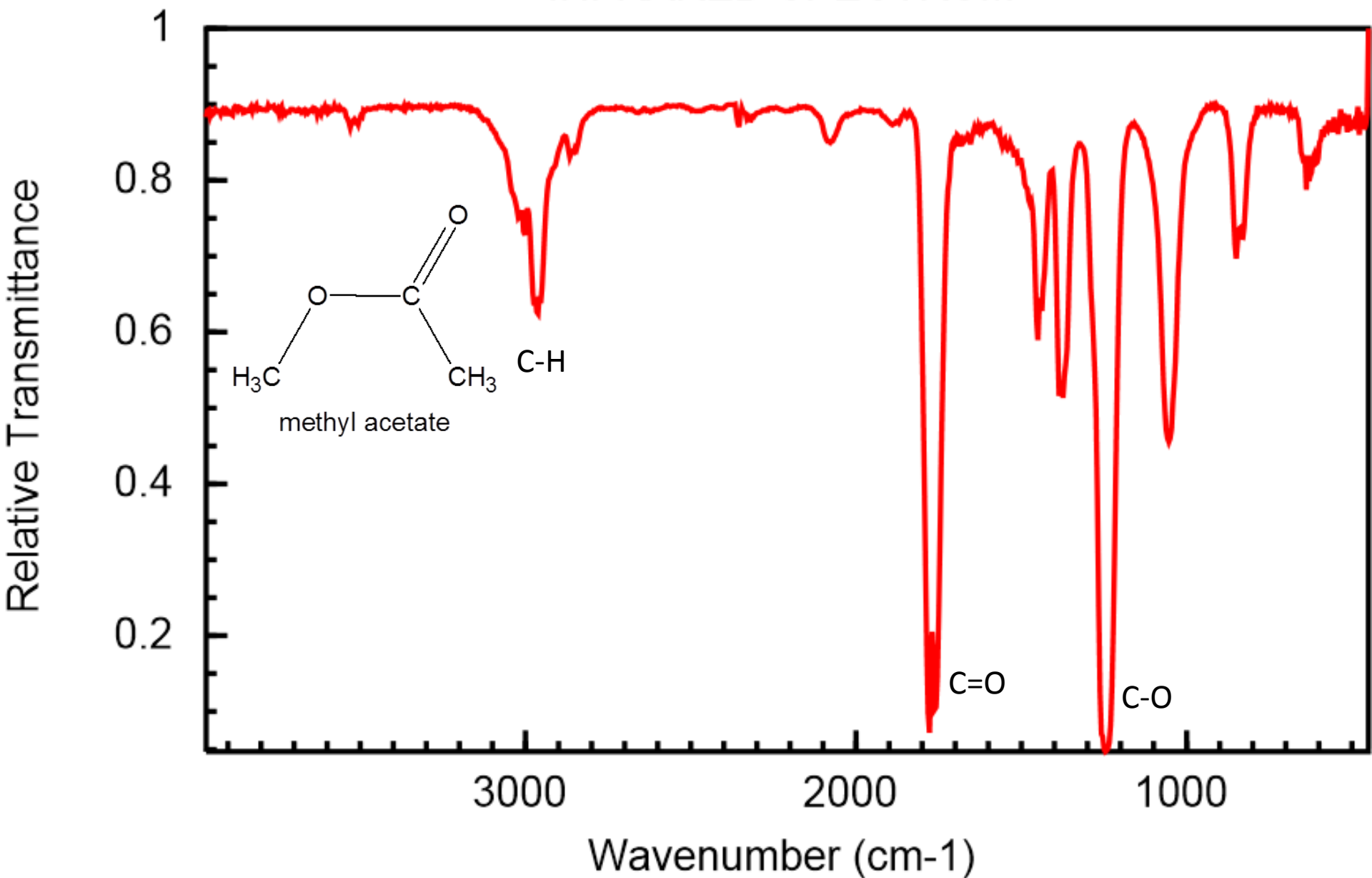
IR-spektre

Kilde: NIST Chemistry Webbook

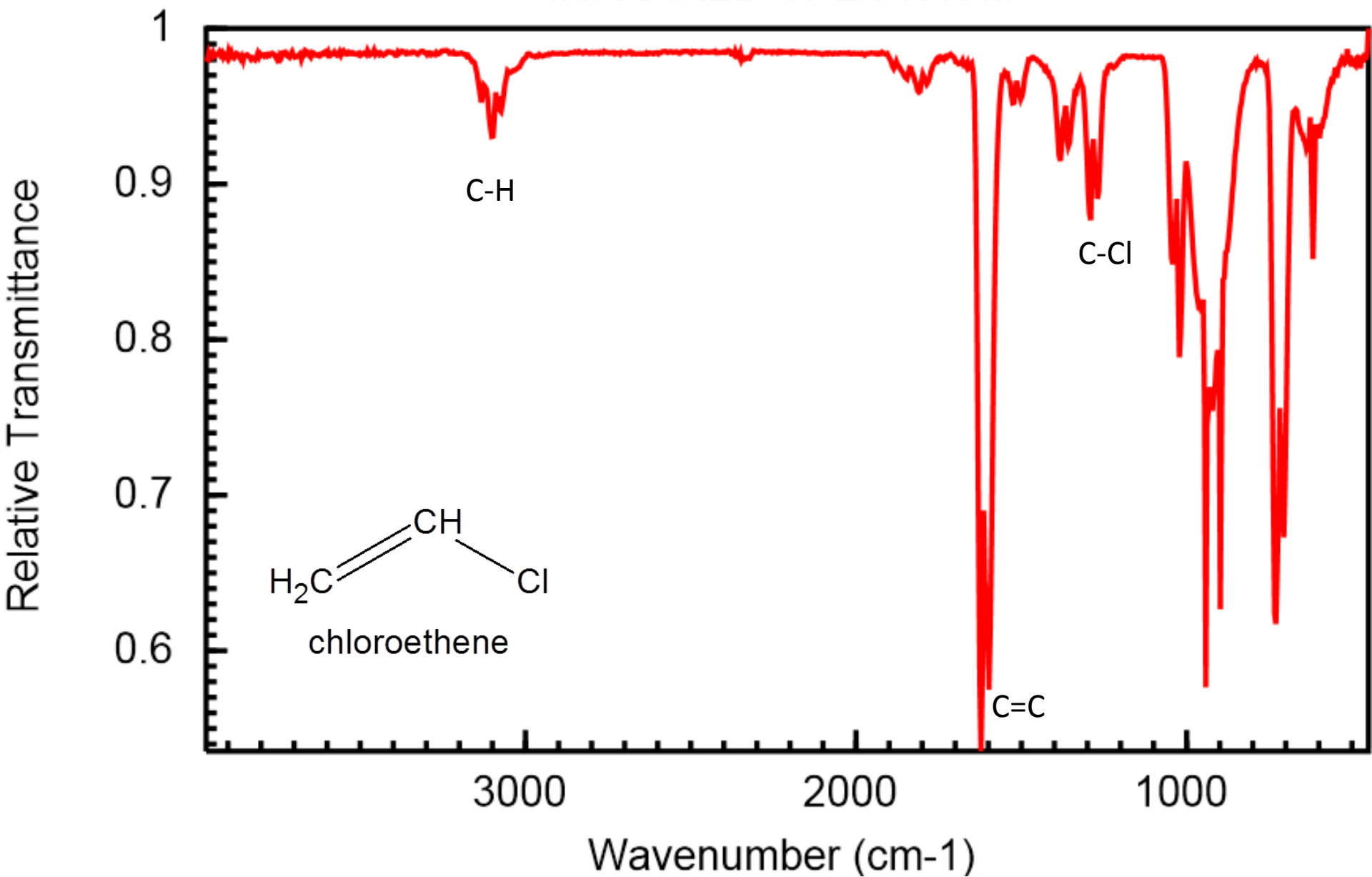
Ethane, iodo-
INFRARED SPECTRUM



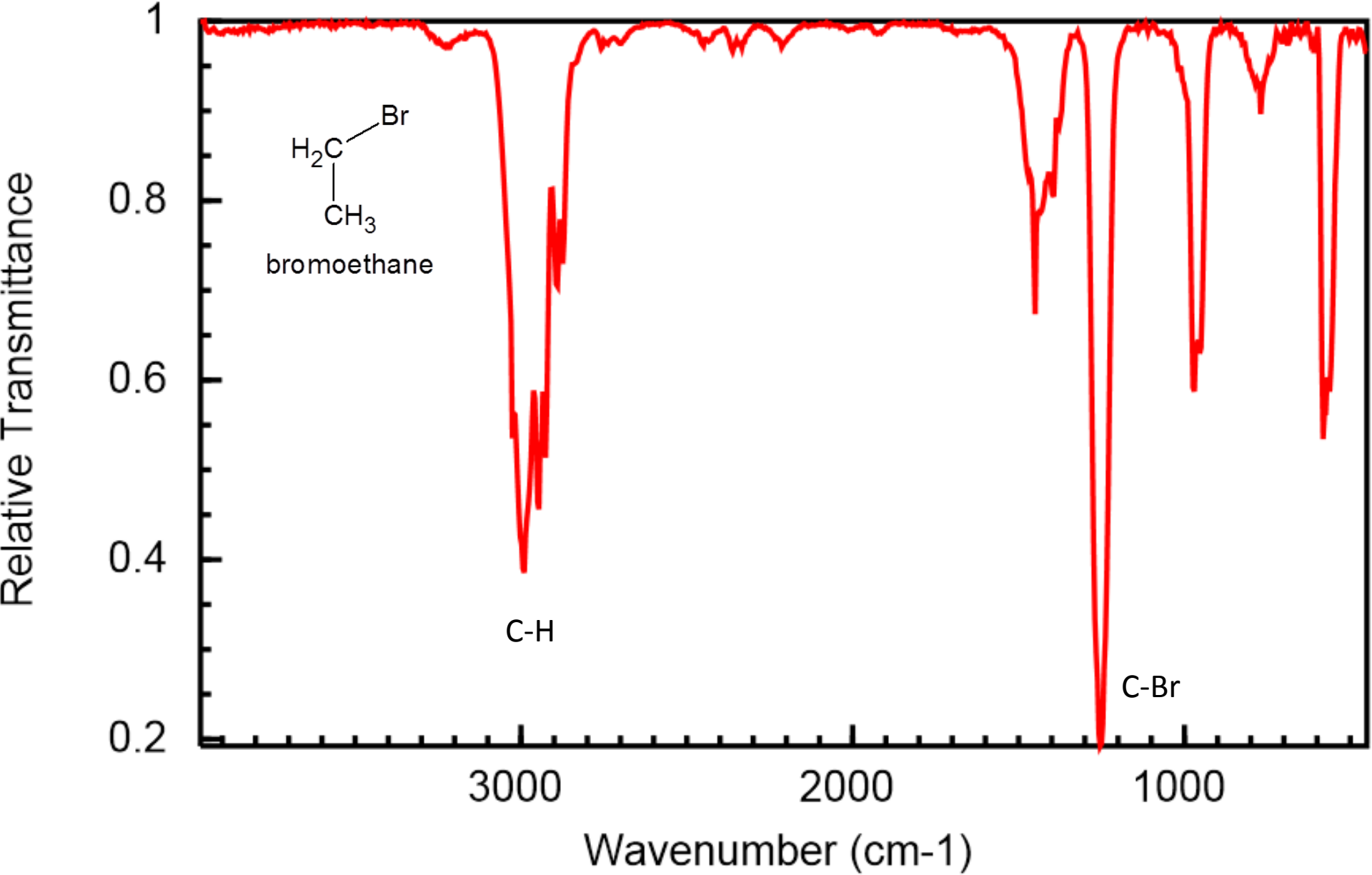
Acetic acid, methyl ester
INFRARED SPECTRUM



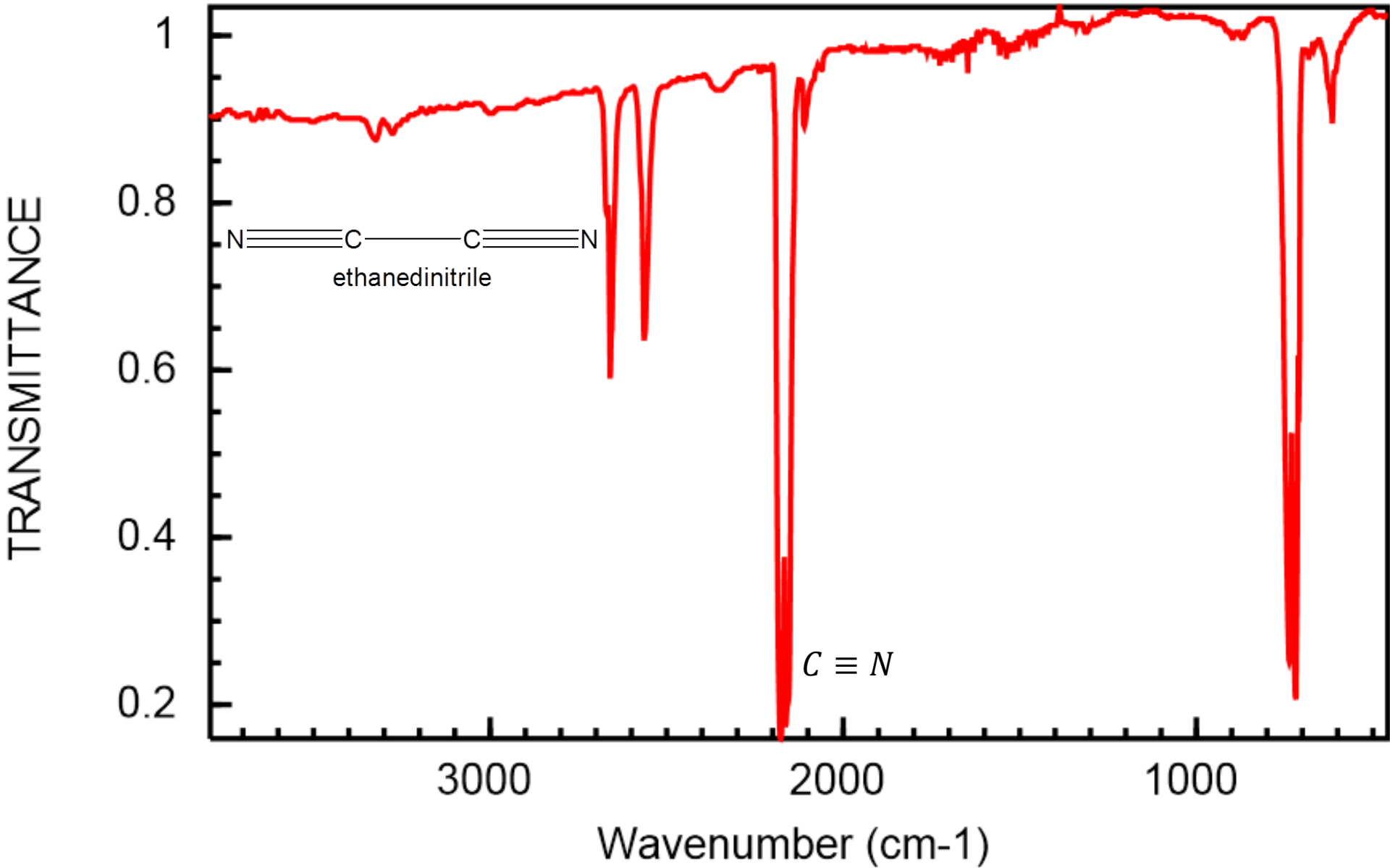
Ethene, chloro- INFRARED SPECTRUM



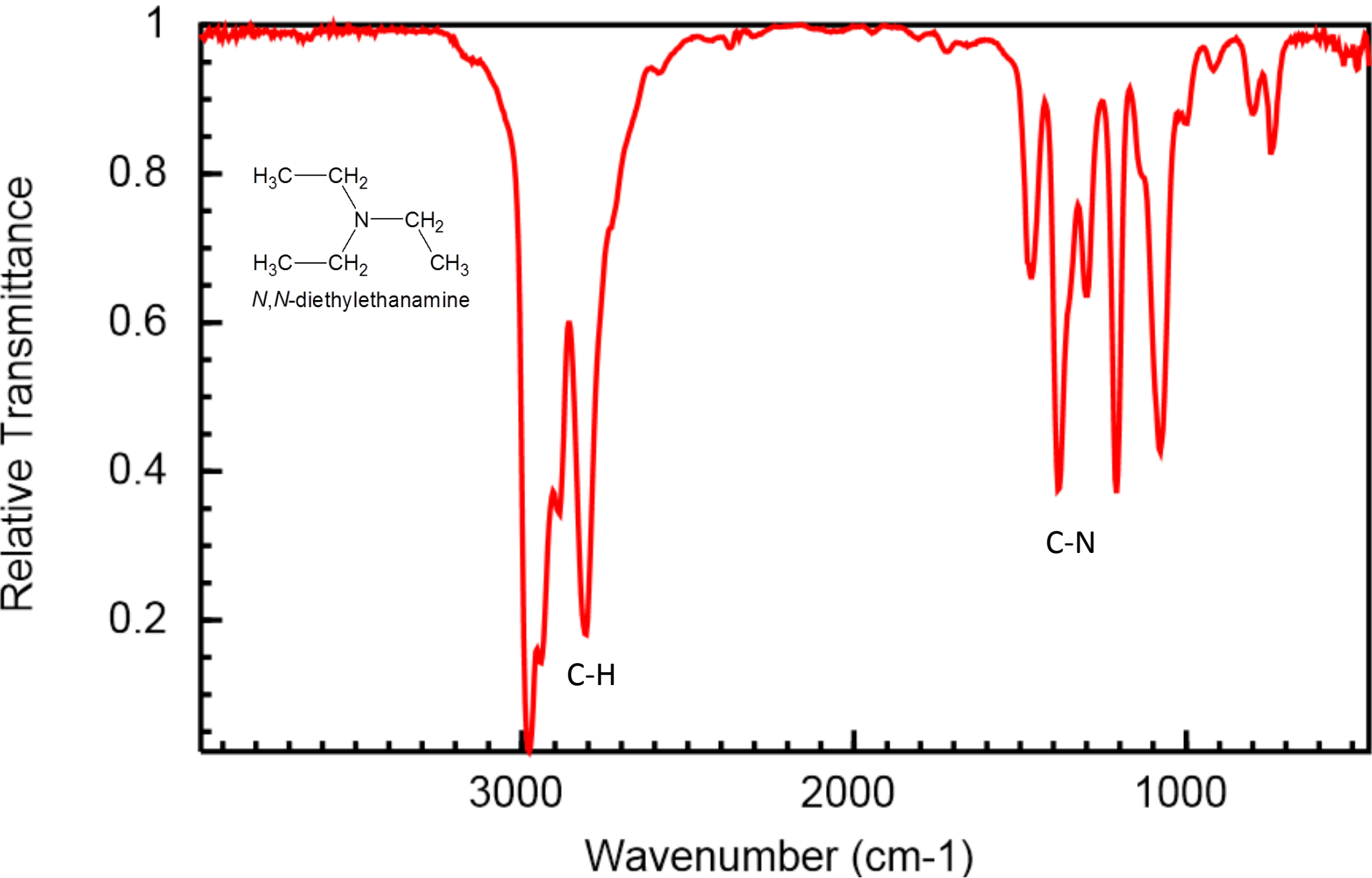
Ethane, bromo- INFRARED SPECTRUM



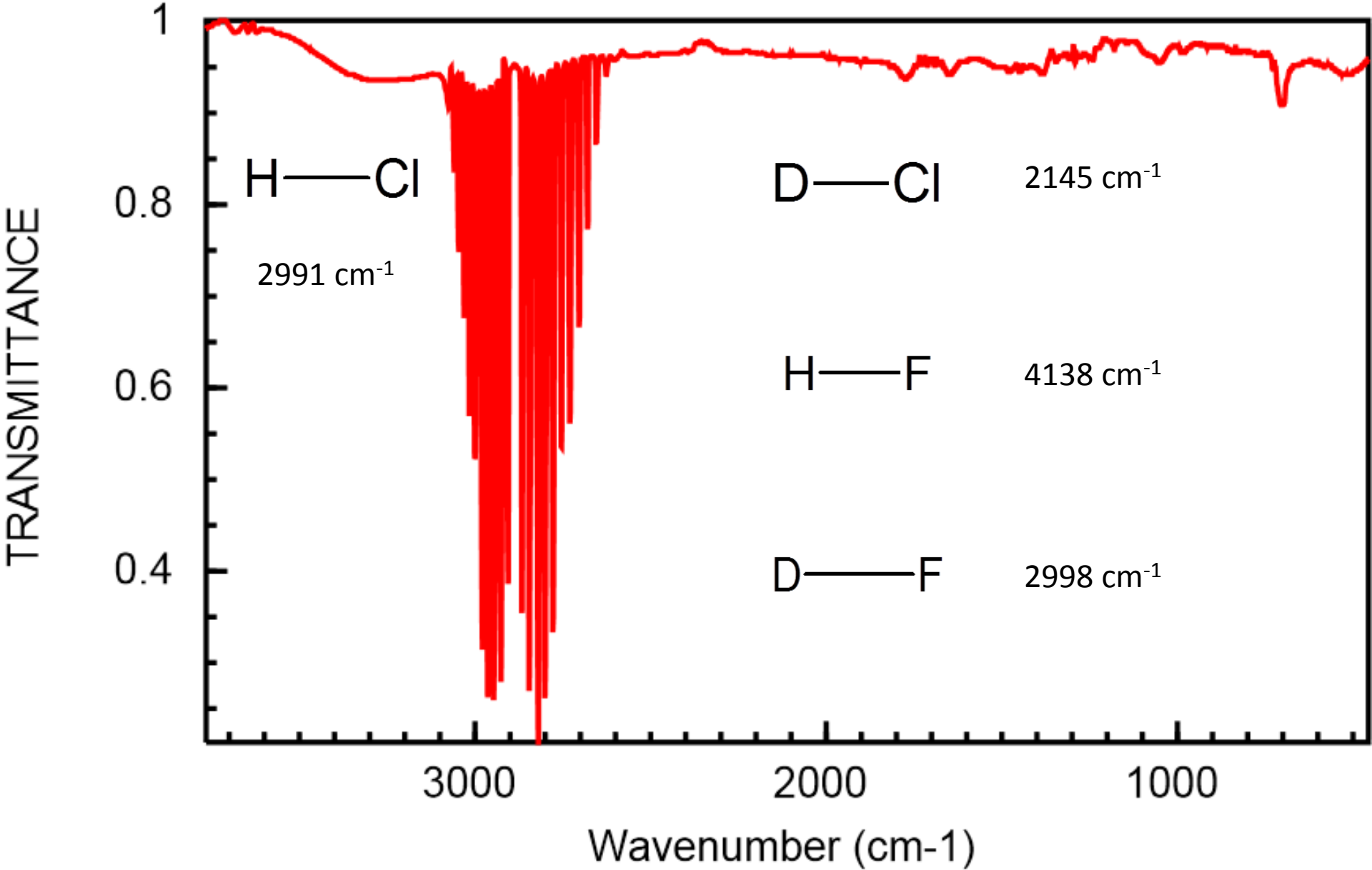
ETHANEDINITRILE INFRARED SPECTRUM



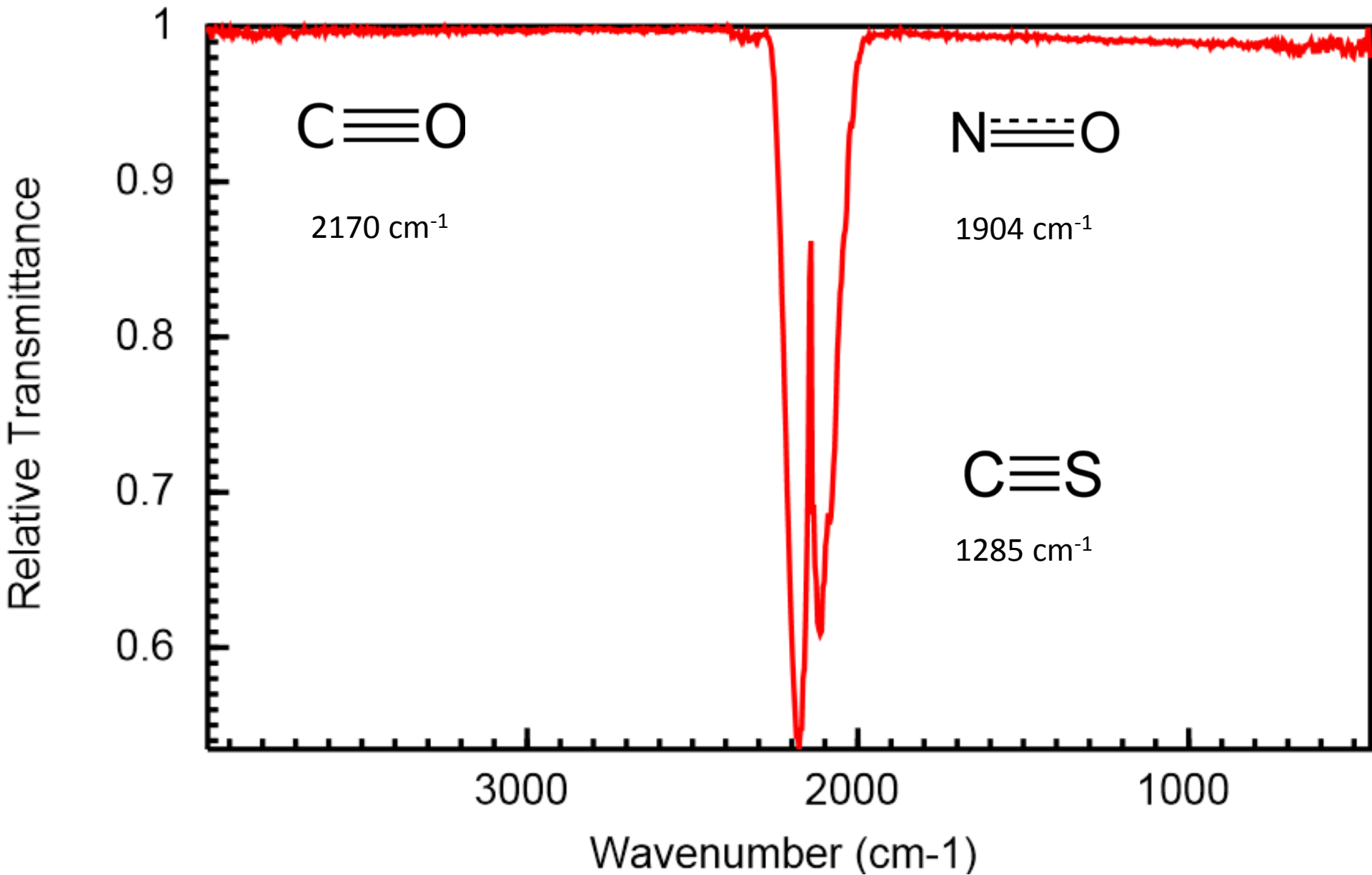
Triethylamine INFRARED SPECTRUM



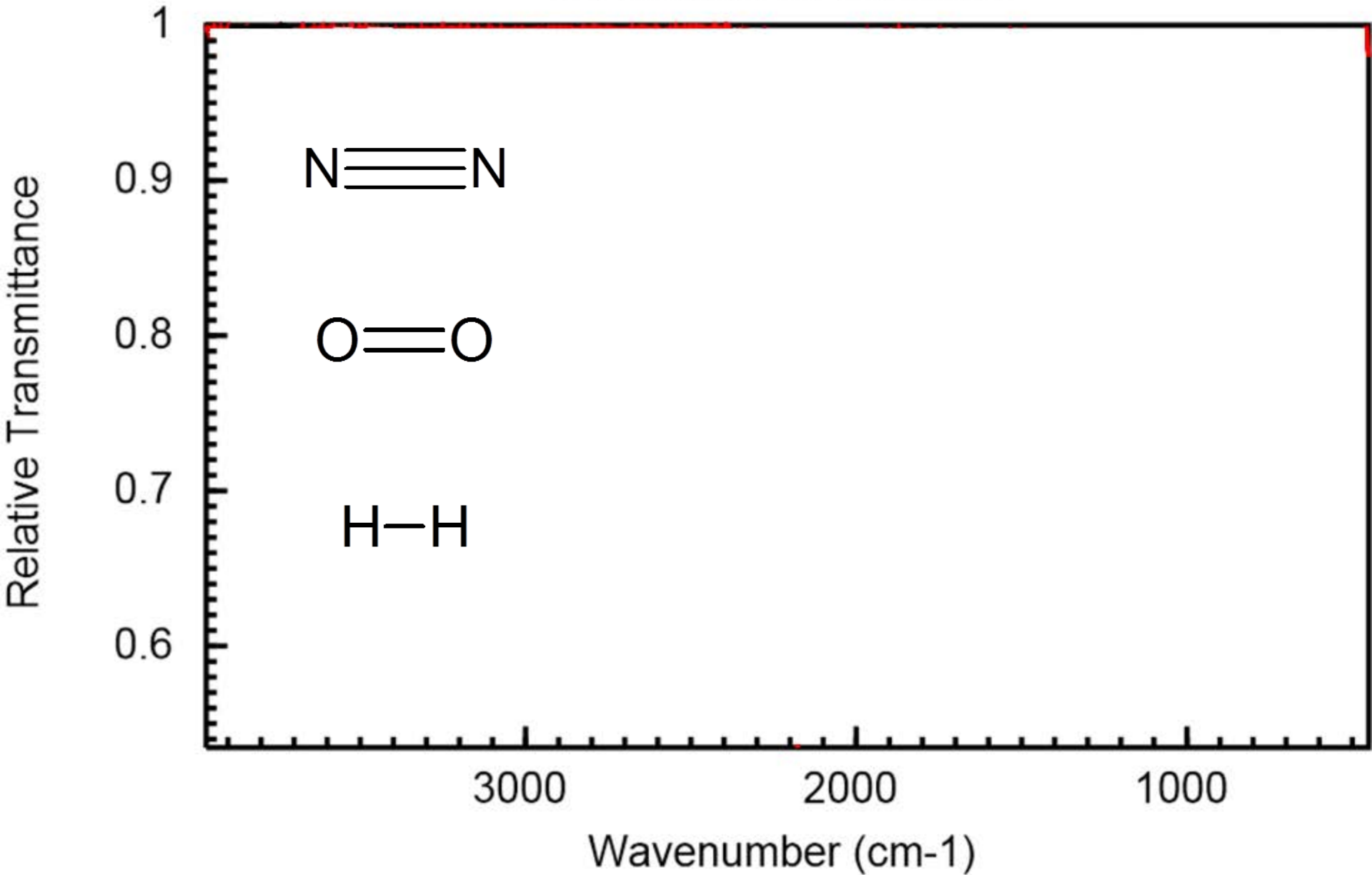
HYDROGEN CHLORIDE INFRARED SPECTRUM



Carbon monoxide
INFRARED SPECTRUM



INFRARED SPECTRUM



Appendiks IV

IR-tabel

Kilde: NIST Chemistry Webbook

Molekyle	Vibrationsfrekvenser
$\begin{array}{c} \text{H}-\text{O} \\ \\ \text{H} \end{array}$	3
$\begin{array}{c} \text{S} \\ / \quad \backslash \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	3
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \end{array}$	6
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{C}=\text{N} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	9
$\begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	15
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{N}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	15
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{H} \end{array}$	21
$\begin{array}{c} \text{H} \quad \text{H} \\ \quad \\ \text{H}-\text{C}-\text{C}-\text{H} \\ \quad \\ \text{H} \quad \text{O} \end{array}$	24
$\text{H}-\text{F}$	1
$\text{C}\equiv\text{O}$	1
$\text{H}-\text{H}$	0
$\text{O}=\text{O}$	0

Appendiks V

Elevernes hypoteser

Hypoteser om IR-spektroskopi

Af holdet 3. G Kemi, Nørre G 2012

- Højere samlet masse af atomerne i en binding giver en lavere absorptionsfrekvens
- Højere bindingsorden medfører en højere absorptionsfrekvens
- Større elektronegativitetsforskel (større polaritet i bindingen) giver en højere absorptionsfrekvens (passede ikke med alle observationer)
- Flere atomer medfører flere absorptionssignaler
- Symmetri i en binding betyder at man ikke får noget signal
- Større elektronegativitetsforskel (større polaritet i bindingen) fører til en større intensitet af absorptionen, altså en lavere transmittans (passede ikke med alle observationer)
- Bindinger mellem atomer med flere elektroner absorberer ved en højere frekvens (passede ikke med alle observationer)

Appendiks VI

Logbog over undervisningen

Logbog over undervisning med holdet 3. G Kemi på Nørre Gymnasium

1. Modul (Mandag d. 29/10 8.00-9.40): Holdets lærer Mette Rude præsenterede mig kort for klassen. Derefter fortalte jeg selv om, hvorfor jeg var der, og hvad det skulle handle om (kortfattet). Det førte mig til mit første dias (om kvantekemi). Jeg fortalte om emnet og dets overlap med andre emner. Jeg fortalte, at vi ville fokusere på teoretisk spektroskopi og relatere det til det, de havde lært i forvejen omkring IR spektroskopi.

Vi tog så fat på analysen af et IR spektrum af eddikesyre. I starten var der kun få elever, der meldte sig på banen med tolkningsforslag og spørgsmål. Disse førte til en diskussion af både det konkrete spektrum og spektre generelt ('Der er en syregruppe' 'Hvordan kan vi se det?' 'Der er et bredt signal omkring 3000 cm^{-1} ' 'Ok! Hvorfor ved vi, at det indikerer en syregruppe?'). Efterhånden som diskussionen skred frem, kom flere elever på banen af sig selv. Men næste gang skal jeg måske også prøve at spørge elever, der ikke selv rækker hånden i vejret.

Tolkningen af spektret forløb helt fint, det havde eleverne vist meget godt styr på. Der opstod dog også mange spørgsmål undervejs (det var jo også formålet). Jeg spurgte selv ind til fingeraftryksområdet og intensiteten af signalerne. Det sidste førte til en genopfriskning af Lambert-Beers lov. Farver blev også nævnt. En elev spurgte til de mindre intense signaler i spektret – hvad skyldes de, og hvorfor analyseres ikke på dem? En anden spurgte til bredden af signalerne, og i den forbindelse redegjorde en klassekammerat for hydrogenbindingernes effekt på bredden af O-H signaler. Der blev også spurgt til, hvorfor man ser så mange signaler (og så kun analyserer få).

I denne fase bidrog efterhånden omtrent halvdelen af klassen, men hvis jeg næste gang prøver at inddrage elever, der ikke selv rækker hånden i vejret, kan det måske forbedres.

Vi holdt nu en pause, hvor eleverne også blev bedt om at danne grupper til næste fase. Derefter præsenterede jeg opgaven: Eleverne blev bedt om at sammenligne signaler i IR-spektre med hinanden og forsøge at finde sammenhænge mellem spektre og molekylær struktur. Jeg bad dem om at nedskrive observationer, hypoteser og spørgsmål og forklarede at de fik 3 spektre til at starte med, og kunne bede om flere (vist på tavlen). En elev spurgte til tidsrammen for opgaven, og jeg præciserede, at de bare skulle se, hvor langt de kunne nå.

Det lod til at flere elever ikke helt havde forstået opgaven, så starten af fasen gik med at jeg måtte præcisere opgaven for de fleste grupper. Jeg skulle nok have brugt lidt længere tid på at forklare opgaven og sikre mig, at alle havde forstået den, før vi gik i gang med opgaven. En udspecificering af, hvad jeg mente med 'hypoteser' ville nok have været nyttigt (foreslog Mette). Men efter lidt yderligere forklaring til flere grupper, gik arbejdet fint.

Som forudset arbejdede grupperne i forskellige tempi. Nogle nåede at se på alle spektre (og en enkelt gruppe nåede også at se på skemaet over antallet af vibrationssignaler), andre så på færre,

men alle fik formuleret nogle gode hypoteser. Det overraskede mig, at flere grupper straks begyndte at se på mere komplicerede sammenhænge, f.eks. sammenhæng ml. bølgetal og forskellen mellem massen af atomerne i en binding frem for sammenhæng ml. bølgetal og samlet masse.

Nogle elever brugte også deres lærebøger undervejs og/eller støttede sig til, hvad de allerede havde lært (de ledte efter de rigtige svar i stedet for bare at undersøge spektrene). Jeg forklarede, at de skulle prøve at finde sammenhænge selv (men jeg bad dem ikke lægge bøgerne væk – hvis de følte behov for at støtte sig til dem, synes jeg det var fint, så længe hypoteserne blev formuleret ud fra observationerne), og derefter gik det fint. Der var dog i højere grad brug for, at jeg udvalgte spektre til grupperne, end jeg havde regnet med, men når grupperne fik nye spektre, kunne de godt se, hvordan de kunne bruge dem.

Jeg noterede i denne fase hvilke hypoteser, der blev snakket om, og hvilke spørgsmål, der blev diskuteret, samt hvilke grupper der nåede hvor langt. Fasen tog den forventede tid, og inden vi afsluttede, spurgte jeg til, om nogen grupper mente, de havde noget mere de gerne ville nå at se på. Det gjorde de ikke. Jeg bad dem om at læse notesiderne 1-3 til næste gang og løse opgave A & B for at sikre, at de havde forstået stoffet.

I løbet af denne dag erfarede jeg, at der var større forskel i holdets baggrund, end jeg troede. Eleverne fra 3. X (størstedelen) havde de forventede forudsætninger, men eleverne fra 3. W havde ikke haft lige så meget fysik (de afslutter først fysik B til sommer) – det vil jeg forsøge at tage højde for i de næste moduler ved at bruge lidt mere tid på fysikken. Dette kan også vise sig at være nyttigt for eleverne fra 3. X, da de derved får genopfrisket deres viden. Jeg vil forsøge at tage udgangspunkt i den viden, for i højere grad at inkludere eleverne, så det i mindre grad blot bliver mig selv, der forklarer ved tavlen.

2. Modul (Onsdag d. 31/10 12.05-13.45): Onsdag startede jeg med at opridse forløbets struktur for eleverne (noget jeg nok burde have gjort mandag), så de var med på, hvor vi skulle hen, og hvorfor de havde lavet mandagens opgave. Derefter spurgte jeg til lektierne – var der nogen spørgsmål til stoffet eller opgaverne? Der var ingen der meldte sig, så for en sikkerheds skyld spurgte jeg til nogen af de centrale punkter (Bohrs frekvensbetingelse, energien af en foton). Det viste sig at være en god idé, for flere af eleverne havde ikke helt tjek på det. Eleverne fra 3. W havde heller ikke lært det i fysikundervisningen.

Efter en kort diskussion om elektromagnetisk stråling gik vi videre til 'forklar'-fasen: Jeg opskrev elevernes hypoteser på tavlen, efterhånden som eleverne formulerede dem. Jeg startede med at spørge en gruppe, der ikke var nået så langt, og efterhånden fik alle grupper budt ind med noget. Efter hver hypotese blev skrevet op, spurgte jeg den gruppe, der havde formuleret den, om hvilke observationer, der underbyggede den. Jeg opfordrede eleverne til også at nævne de hypoteser, de havde set ikke stemmede overens med samtlige spektre.

Da alle hypoteserne var på tavlen, diskuterede vi dem (hvad kunne være (delvist) rigtigt, og hvordan kunne de eventuelt undersøges nærmere?). Vi diskuterede også generelt, hvad der skal til for at bevise/afvise en hypotese (altså, at de i princippet aldrig kan endegyldigt bevises ud fra observationer. Dette blev formuleret af eleverne selv).

Efter en pause tog vi hul på Schrödingerligningen, energiniveauer og bølgefunktioner. Præsentationen af ligningen gik godt – jeg lod eleverne se lidt på ligningen og selv byde på, hvad den (eller dele af den) betød. Det lod til at virke afmystificerende, som jeg havde håbet på. Derefter blev det dog hurtigt klart for mig, at eleverne ikke havde de forudsætninger, jeg først havde antaget. De kendte ikke nær så meget til orbitaler, som jeg havde regnet med (det havde Mette også fortalt mig om mandagen, men jeg prøvede alligevel. Eleverne skal videre med emnet efter mit forløb, så det var nok også nyttigt for dem at se), så da jeg forsøgte at bruge dem som et kendt eksempel, rejste det nærmest flere spørgsmål, end det besvarede. Det var dog gode spørgsmål, som det godt kunne betale sig at bruge tid på. Derfor besluttede jeg også at tage dette stof op igen fredag, efter eleverne havde læst notesiderne 4-5 samt s. 100-103 (plus figuren s. 104) i deres grundbog (Basiskemi A) hjemme.

3. Modul (Fredag d. 2/11 13.55-15.35): Fredag tegnede jeg et orbitalenergidiagram på tavlen (til og med 3. skal) samt de tilhørende bølgefunktioner og nogle noter til, hvordan man får denne information fra Schrödingerligningen. Samtidig viste jeg via projektor mit dias med orbitaler.

Jeg brugte nu disse illustrationer til at forklare stoffet en gang til, og bad eleverne om at markere, når der var noget, de havde spørgsmål til. Det førte til en god og udførlig gennemgang og diskussion, der lod til at opklare en del forvirring (hvad har energidiagrammet med bølgefunktionerne at gøre? Hvordan kommer det fra Schrödingerligningen? Hvad sker der ved absorption af en foton? Etc.).

Vi var nu lidt bagud i forhold til tidsplanen, men jeg tror den ekstra tid var godt brugt. Fortsættelsen gik i hvert fald noget hurtigere, og eleverne lod til at have forstået det grundlæggende, der var nødvendigt for at forstå det næste stof.

Jeg viste eleverne modellen 'den harmoniske oscillator' og den tilhørende Schrödingerligning. Da jeg havde vist løsningen (energiene), så vi på elevernes egne hypoteser, og jeg bad dem forklare, hvordan de hang sammen med løsningen. Det klarede de rigtigt godt, og nogle kunne med det samme se, at kraftkonstanten k hang sammen med flere af deres hypoteser (bindingsorden, polaritet), så sammenhængen er lidt mere kompleks.

Derefter var der et par spørgsmål til energidiagrammet for vibrationer. Vi fik opklaret et par misforståelser omkring relationen mellem det diagram og energidiagrammet for orbitaler (det er to forskellige systemer, to forskellige Schrödingerligninger der løses).

Nu gik vi videre til polyatomiske molekyler, og eleverne fandt (ved hjælp af spørgsmål fra mig) frem til ligningerne for antallet af frihedsgrader og antallet af vibrationer (vi sammenlignede også med en gruppes hypotese om, at flere atomer betød flere absorptionssignaler). Nogle fysiske rekvisitter kunne måske have bidraget til forklaringen på rotationsfrihedsgrader. Vi brugte ligningerne på ethanolmolekylet – jeg bad nogle af de mindre engagerede elever om at udregne antallet af frihedsgrader og fandt derved ud af, at ikke alle havde forstået ligningerne. Nogle af de andre elever forklarede ligningerne igen, og vi fandt at ethanol har 21 vibrationelle frihedsgrader. Derefter viste jeg en Youtube-video af ethanols vibrationer, som eleverne syntes var sjov. Det hjalp tilsyneladende til at vække nogle af de mere trætte elever, og det gav eleverne en forklaring på, hvorfor kun nogle absorptionssignaler skyldes enkelte bindinger i molekylet og andre er lidt sværere at tolke på.

Jeg fortalte nu om udvalgsreglerne for vibrationelle overgange, og vi brugte det i relation til elevernes hypoteser (sammenhæng ml. intensitet og polaritet og symmetri), samt til at besvare deres spørgsmål fra første modul omkring små signaler i spektrene (nogle af dem er overtoner) og indflydelsen af temperatur på spektroskopi (varmebånd).

Til sidst i modulet nåede vi også at snakke om UV-vis spektroskopi, HOMO-LUMO overgange og farver, og jeg gav eleverne lektier til næste gang (s. 6-9 og opg. C, D & E).

Eleverne virkede trætte allerede ved starten af modulet, hvilket var ærgerligt, fordi vi skulle nå meget stof, og hele modulet var planlagt som tavleundervisning (Mette påpegede efter modulet det uheldige i at have denne type undervisning i sidste modul fredag, men mente at det var gået ok alligevel). Jeg prøvede undervejs at inddrage eleverne så meget som muligt ved at stille spørgsmål (især i relation til deres hypoteser), men det kunne nok godt have været gjort i større grad (jeg glemte at tage udgangspunkt i, hvad de selv havde at sige, da vi nåede til stoffet om farver).

Der var dog i hvert fald en tredjedel af eleverne, der bidrog rigtigt fint, og efter Youtube-videoen fik jeg også vækket nogle flere. Vi er nu næsten tilbage på tidsplanen, men jeg vil alligevel begynde næste modul med nogle repetitionsspørgsmål, for at sikre at så mange som muligt er med. Jeg håber at eleverne også kan nå at udfylde spørgeskemaerne i sidste modul, ellers må de gøre det på nettet (Lectio).

4. Modul (Tirsdag d. 6/11 13.55-15.35): Dette modul begyndte jeg med at tage et hængeparti op fra sidst, hvor jeg ikke fik forklaret princippet med dipolmomentet, der varierer ved vibrationer, godt nok.

Derefter spurgte jeg ind til lektierne, og det viste sig, at der havde været lidt problemer med at løse nogle af opgaverne. Vi brugte derfor lidt tid på opgaveregning og opgavegennemgang, og vi fik i den sammenhæng repeteret noget af stoffet fra sidst (den reducerede masse og kraftkonstanten og deres indflydelse på IR-spektre, Schrödingerligningen).

Efter en pause viste jeg et dias med butadien og forklarede hvorledes man kan (som en grov tilnærmelse) betragte elektronerne i π -elektronsystemet som elektroner, der bevæger sig på en linje. Jeg viste dernæst 'den 1-dimensionelle kasse' og bad eleverne finde Schrödingerligningen for partiklen i kassen. De fik et par minutter at tænke/diskutere i. Det gik ok, men nogle elever lod til at have svært ved at forstå, at denne Schrödingerligning ikke havde noget med Schrödingerligningen for vibrationer at gøre (de prøvede at tage udgangspunkt i den, i stedet for den generelle Schrödingerligning). Nogle fandt dog svaret og forklarede det for klassen.

Nu bad jeg eleverne gætte på, hvilke funktioner, der kunne være løsninger til ligningen. Igen fik de lidt betænkningstid, og flere havde gode bud. Sinusfunktioner og eksponentialfunktioner blev nævnt, samt logaritmefunktioner, der dog måtte afvises, efter vi prøvede at differentiere den. Jeg spurgte (lidt ledende) til, om der måske var funktioner beslægtet med de to på tavlen, der kunne bruges, og en elev foreslog så også cosinusfunktioner.

Jeg viste nu løsningen (jeg glemte faktisk at nævne grænsebetingelserne) og spurgte til, hvordan man så kan finde energierne. Det kunne eleverne straks se, og jeg bad dem forsøge at gøre det. Det gik ikke helt, som jeg havde håbet. Jeg skulle nok først have spurgt eleverne til, hvordan man differentierer en sammensat funktion. Jeg afbrød arbejdet undervejs, for at alle lige kunne høre det. Derefter gik det bedre, men da vi var ved at løbe tør for tid, afbrød jeg arbejdet lidt hurtigt, og sammen med en af de hurtigere elever, viste jeg så hvordan man finder energierne. Jeg vurderer, at hvis vi lige havde genopfrisket differentiation af sammensatte funktioner først og så havde brugt lidt mere tid på det (et kvarter måske), så var de fleste nok nået frem til svaret. Der var dog også nogle elever, der arbejdede lidt hurtigere, og derfor kunne det være nyttigt at have en ekstraopgave i baghånden – f.eks. kunne jeg bede hurtige elever om også at beregne forskellen mellem energiniveauer.

Den sidste opgave i 'forlæng'-fasen havde vi desværre ikke tid til at lave. Jeg forklarede opgaven og bad eleverne bruge et par minutter til at tænke over, hvordan man ville kunne løse den. Det bad jeg dem så om at give bud på, og så viste jeg (lidt hurtigt) løsningen. Denne opgave skulle eleverne nok også have haft 15-20 minutter til at løse. Igen kunne en ekstraopgave være nyttig – f.eks. kunne jeg jo bede hurtige elever om også lige at regne på 1,3-butadien.

Samlet set gik dette modul godt, selvom vi godt kunne have brugt mere tid til det sidste. Eleverne deltog meget fint, og tilsyneladende hjalp det på antallet af elever, der var klar til at besvare spørgsmål, at jeg huskede at give dem lidt længere betænkningstid (wait time 1, Lawson). Jeg fik taget afsked med klassen og deres lærer og bad dem udfylde spørgeskemaerne (de vil bruge tid på det i en time). Jeg fik lidt positiv respons med på vejen, og en elev bad mig også at uploade den sidste dags materiale til dem.

Appendiks VII

Spørgeskema om elevernes oplevelse af undervisningen

Appendiks VII

Spørgeskema om elevernes oplevelse af undervisningen, besvaret 13/11 2012

1.1 Nyt spørgsmål

I hvor høj grad synes du forløbet har været interessant?

1 - i meget lav grad	(1 - 5,9%)
2 - i lav grad	(2 - 11,8%)
3 - i nogen grad	(6 - 35,3%)
4 - i høj grad	(5 - 29,4%)
5 - i meget høj grad	(2 - 11,8%)
Ubesvaret	(1 - 5,9%)

1.2 Nyt spørgsmål

Føler du at du har fået en større forståelse for kvantekemi

1 - i meget lav grad	(1 - 5,9%)
2 - i lav grad	(2 - 11,8%)
3 - i nogen grad	(6 - 35,3%)
4 - i høj grad	(6 - 35,3%)
5 - i meget høj grad	(2 - 11,8%)
Ubesvaret	(0 - 0%)

1.3 Nyt spørgsmål

Føler du at kvantekemi er relevant i forhold til resten af det stof, du har mødt i gymnasiet?

1 - i meget lav grad	(0 - 0%)
2 - i lav grad	(2 - 11,8%)
3 - i nogen grad	(10 - 58,8%)
4 - i høj grad	(4 - 23,5%)
5 - i meget høj grad	(1 - 5,9%)
Ubesvaret	(0 - 0%)

1.4 Nyt spørgsmål

Synes du at det nye stof har givet dig en større forståelse for andre områder af kemien og fysikken (lys, atommodeller, spektroskopi, osv.)

1 - i meget lav grad	(1 - 5,9%)
2 - i lav grad	(1 - 5,9%)
3 - i nogen grad	(8 - 47,1%)
4 - i høj grad	(6 - 35,3%)
5 - i meget høj grad	(1 - 5,9%)
Ubesvaret	(0 - 0%)

1.5 Nyt spørgsmål

Føler du at kvantekemi er relevant i forhold til dit fremtidige studievalg?

1 - i meget lav grad	(4 - 23,5%)
2 - i lav grad	(4 - 23,5%)
3 - i nogen grad	(6 - 35,3%)
4 - i høj grad	(1 - 5,9%)
5 - i meget høj grad	(2 - 11,8%)
Ubesvaret	(0 - 0%)

1.6 Nyt spørgsmål

Hvordan synes du sværhedsgraden i forløbet har været?

1 - det har været meget nemt	(0 - 0%)
2 - det har været nemt	(1 - 5,9%)
3 - det har været tilpas for mig	(4 - 23,5%)
4 - det har været svært	(9 - 52,9%)
5 - det har været meget svært	(3 - 17,6%)
Ubesvaret	(0 - 0%)

1.7 Nyt spørgsmål

Synes du forløbet har været sjovt?

1 - i meget lav grad	(1 - 5,9%)
2 - i lav grad	(2 - 11,8%)
3 - i nogen grad	(9 - 52,9%)
4 - i høj grad	(4 - 23,5%)
5 - i meget høj grad	(1 - 5,9%)
Ubesvaret	(0 - 0%)

1.8 Nyt spørgsmål

Hvordan synes du tempoet i undervisningen har været (Gik vi for hurtigt frem til at man kunne nå at forstå stoffet, eller kunne det godt være gået hurtigere?)

1 - vi kunne godt være gået meget hurtigere frem	(0 - 0%)
2 - vi kunne godt være gået lidt hurtigere frem	(1 - 5,9%)
3 - det har været meget passende	(9 - 52,9%)
4 - det gik lidt for hurtigt	(5 - 29,4%)
5 - det gik alt for hurtigt	(2 - 11,8%)
Ubesvaret	(0 - 0%)

1.9 Nyt spørgsmål

Synes du om forløbets struktur? (Hvordan det har været bygget op, hvordan I/vi har arbejdet)

1 - i meget lav grad	(0 - 0%)
2 - i lav grad	(2 - 11,8%)
3 - i nogen grad	(7 - 41,2%)
4 - i høj grad	(7 - 41,2%)
5 - i meget høj grad	(1 - 5,9%)
Ubesvaret	(0 - 0%)

1.10 Kommentarer

Har du nogen yderligere kommentarer til forløbet? Noget der kunne gøres bedre, noget der har været særligt godt?

Respondent #2	anonym	:)
Respondent #4	anonym	En god tålmodighed fra Mortens side. Om det skyldes kvantekemien i sig selv eller noget andet ved jeg ikke, men det var som om, at det vi gennemgik nogen gange kom meget "langt væk" fra spektrene, som netop var, hvad vi ville kunne bruge en forståelse af kvantekemien til.
Respondent #6	anonym	Særlig godt var, at vi i starten af modulet fik genopfrisket, hvad vi lavede i sidste modul. - Det dannede et overblik over forløbet.
Respondent #7	anonym	Jeg kunne godt have tænkt mig nogle flere fælles beregninger før man selv skulle begynde at beregne.
Respondent #8	anonym	At man gik lidt langsommere frem!
Respondent #9	anonym	Jeg synes, det var lidt uklart ud fra forløbet at vurdere hvad der er relevant i forhold til en eksamen i kemi. Hvad er det vi skal kunne, og hvad er bare godt at vide? Det var en ret sjov tilgang til forløbet, at vi startede med at snakke om hvad vi vidste om kvantekemi. Det kunne være sjovt og lærerigt hvis vi havde sluttet forløbet med det samme powerpoint slide som vi startede med, for så at se hvad vi havde lært. Jeg synes der manglede lidt en opsummering i slutningen af forløbet over hvad vi havde gennemgået. Jeg synes, det var godt at vi selv opstillede hypoteser om IR-spektret, og bagefter gennemgik spektrene i klassen og af- og bekræftede hypoteserne. Det kunne have været godt, hvis vi i denne forbindelse også havde fået et lille ark med oversigt over de bekræftede hypoteser med begrundelser for hvorfor disse hypoteser er rigtige.
Respondent #12	anonym	Næste gang vi har sådan et svært forløb, så burde vi læse først også få det forklaret, i stedet for omvendt... for så vi en bedre forståelse af det hele.. Jeg synes ikke, at jeg har fået så meget ud af

		<p>det, og var det her pensum, så ville jeg undersøge det hele selv igen, for fik virkelig intet som helst ud af det...</p> <p>Men det har nok også noget at gøre med, at jeg er mere humanistisk en naturvidenskabelig, så måske forstod resten af klassen det bedre end jeg - jeg interesserer mig jo ikke for kemi og fysik - hvilket det her forløb har været en blanding af.</p>
Respondent #14	anonym	Vedrørende spørgsmål 1.8 så er svaret i forhold til mig selv.
Respondent #16	anonym	Synes at det var ærgerligt at vi ikke holdte os inden for det pensum der kræves af 3g, det var nogle fine formler osv, men vi kunne have brugt tiden bedre på ting som vi rent faktisk skal kunne til eksamen.
Respondent #17	anonym	NEJ

Appendiks VIII

Spørgeskema om elevernes faglige udbytte

Appendiks VIII

Test af elevernes faglige udbytte, besvaret 7/12 2012

Nedenunder ses den test eleverne har besvaret. Ved hvert spørgsmål er de rigtige svar markeret med et kryds (x), og efter hvert spørgsmål er besvarelsene opgjort (*kursiv*). Da mange af spørgsmålene i testen har flere rigtige svar, er besvarelsene bedømt som følger: Opgaver der er afkrydset helt korrekt bliver regnet som 'korrekte'; opgaver hvor der er afkrydset et eller flere rigtige svar, men ikke alle rigtige svar, eller alle rigtige svar samt op til et forkert svar bliver regnet som 'delvist korrekte' og resten som 'forkerte', inklusive opgaver hvor ingen eller samtlige svar er afkrydset. 16 elever har taget testen.

Evaluering af kvantekemiforløb

Hvert spørgsmål har en række svarmuligheder, og de rigtige skal krydses af. Nogle af spørgsmålene har flere rigtige svar, så der må gerne sættes flere kryds. Der må anvendes et periodisk system og en lommeregner ved besvarelsen.

Værdien af h (Plancks konstant) er ca. $6,6 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ (den kan måske være nyttig ved løsningen af nogle opgaver).

God fornøjelse, og tak for hjælpen!

1) Hvilken type molekyllære bevægelser undersøges med infrarød (IR) spektroskopi?

- a) Rotationerne af et molekyle
- b) Vibrationerne af et molekyle (x)
- c) Et molekyles bevægelse gennem rummet
- d) Elektronernes bevægelse i et molekyle
- e) De relative bevægelser af atomkernerne i et molekyle (x)

Rigtige: 0, delvist rigtige: 16, forkerte: 0

2) Hvad betyder kvantisering for IR spektroskopi?

- a) Kun bestemte intensiteter af absorptioner (absorbanser) er mulige
- b) Det er kun organiske molekyler, der absorberer infrarødt lys
- c) Kun bestemte linjebredder (bredden af absorptionsbånd) er mulige
- d) Vibrationerne af molekyler giver kun overgange i det infrarøde område
- e) Kun bestemte absorptionsfrekvenser er mulige (x)

Rigtige: 4, delvist rigtige: 4, forkerte: 8

3) Antag at alle de følgende bindinger eksisterer. Rangér dem efter absorptionsfrekvensen af deres vibrationsovergange, med den der absorberer ved den største frekvens først: Si-Si, Si=Si, Si≡Si, Ge-Ge

- a) Ge-Ge, Si-Si, Si=Si, Si≡Si
- b) Si-Si, Si=Si, Si≡Si, Ge-Ge
- c) Si≡Si, Si=Si, Si-Si, Ge-Ge (x)
- d) Ge-Ge, Si≡Si, Si=Si, Si-Si
- e) Alle siliciumbindingerne absorberer ved samme frekvens, og germaniumbindingen absorberer ved en lavere frekvens

Rigtige: 7, delvist rigtige: 0, forkerte: 9

4) Antag at alle de følgende bindinger eksisterer. Rangér dem efter absorptionsfrekvensen af deres vibrationsovergange, med den der absorberer ved den største frekvens først: B-F, B-Cl, B-Br, Al-Br

- a) B-F, B-Cl, B-Br, Al-Br (x)
- b) Al-Br, B-Br, B-Cl, B-F
- c) Al-Br, B-F, B-Cl, B-Br
- d) B-Br, B-Cl, B-F, Al-Br
- e) Alle bindingerne til bor absorberer ved samme frekvens, og bindingen til aluminium absorberer ved en lavere frekvens

Rigtige: 1, delvist rigtige: 0, forkerte: 15

5) Hvilke(n) af følgende bindingers vibrationer absorberer ikke elektromagnetisk stråling ved vibrationsovergange?

- a) C=O i CH₂O (methanal)
- b) N≡N i N₂ (dinitrogen) (x)
- c) C-I i CH₃I (iodmethan)
- d) C-C i CH₃CH₃ (ethan) (x)
- e) C-C i CH₂ClCH₃ (chlorethan)

Rigtige: 0, delvist rigtige: 13, forkerte: 3

6) Hvilke af følgende oplysninger er nødvendige for at man kan beregne kraftkonstanten for en binding i et diatomigt molekyle ud fra vibrationsspektroskopi?

- a) Energien af den stråling der absorberes ved en vibrationsovergang (x)
- b) Atomernes masse (x)
- c) Atomernes størrelse
- d) Intensiteten af absorptionen
- e) Det samlede antal elektroner i molekylet

Rigtige: 1, delvist rigtige: 13, forkerte: 2

7) I rotationsspektroskopi, som vi ikke har beskæftiget os med, er de typiske frekvenser for overgange omkring $1,5 \cdot 10^{10}$ Hz – Hvad kan man ud fra denne oplysning sige om rotationsspektroskopi?

- a) Det laveste energiniveau for rotationer er ved ca. $4,4 \cdot 10^{-44}$ J
- b) De fotoner der absorberes ved rotationsspektroskopi har en frekvens på ca. $1,5 \cdot 10^{10}$ Hz (x)
- c) Energiniveauet af rotationer er ved ca. $9,9 \cdot 10^{-24}$ J
- d) Der absorberes synligt lys ved rotationsspektroskopi
- e) Forskelle mellem energiniveauer for rotationer er ca. $9,9 \cdot 10^{-24}$ J (x)

Rigtige: 0, delvist rigtige: 10, forkerte: 6

8) Rangér følgende spektroskopiformer efter størrelsen på de energiforskelle der undersøges, med den der undersøger de største energiforskelle først: Vibrationsspektroskopi, Elektronisk spektroskopi, NMR spektroskopi

- a) Vibrationsspektroskopi, NMR spektroskopi, elektronisk spektroskopi
- b) Vibrationsspektroskopi, elektronisk spektroskopi, NMR spektroskopi
- c) NMR spektroskopi, vibrationsspektroskopi, elektronisk spektroskopi
- d) NMR spektroskopi, elektronisk spektroskopi, vibrationsspektroskopi
- e) Elektronisk spektroskopi, NMR spektroskopi, vibrationsspektroskopi
- f) Elektronisk spektroskopi, vibrationsspektroskopi, NMR spektroskopi (x)

Rigtige: 3, delvist rigtige: 0, forkerte: 13

9) Hvilke(n) af følgende ligninger er en Schrödingerligning?

- a) $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$ (x)
- b) $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$
- c) $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x)\psi(x) = E$
- d) $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi(x) = E\psi(x)$
- e) $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) = E\psi(x)$

Rigtige: 8, delvist rigtige: 0, forkerte: 8

10) Hvad kan man finde ved hjælp af en bølgefunktion?

- a) Størrelsen på partiklerne i et system
- b) Energien af partiklerne i et system (x)
- c) Sandsynlighedsfordelingen for positionen af partiklerne i et system (x)
- d) Ladningen af partiklerne i et system
- e) Massen af partiklerne i et system

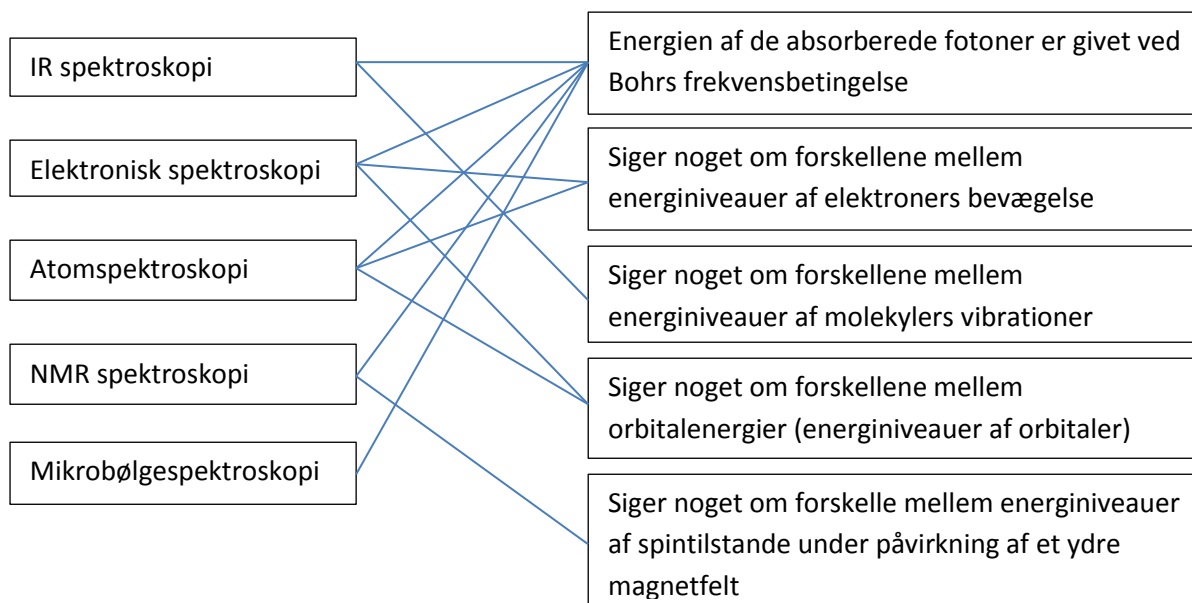
Rigtige: 2, delvist rigtige: 12, forkerte: 2

11) Hvilke aspekter af et konjugeret system af enkelt- og dobbeltbindinger i et organisk molekyle har, ifølge modellen 'partiklen i en 1-dimensionel kasse', indflydelse på stoffets farve?

- a) Massen af de atomer, der danner det konjugerede system
- b) Længden af det konjugerede system (x)
- c) Hvor mange forskellige grundstoffer, det konjugerede system består af
- d) Antallet af π -elektroner i det konjugerede system (x)
- e) Bindingsstyrken af bindingerne i det konjugerede system

Rigtige: 0, delvist rigtige: 7, forkerte: 9

12) Forbind spektroskopiformerne herunder med det/de udsagn, der passer til (et udsagn kan godt passe til mere end en spektroskopiform, og der kan godt være mere end et udsagn, der passer til hver form).



Besvarelserne af dette spørgsmål kan ikke vurderes ud fra samme kriterier grundet opgavens form. Opsummerende kan siges at ingen har besvaret opgaven helt korrekt, og at alle har sat alt for få streger. Dog har 12 ud af 16 korrekt forbundet boks 1 til venstre med boks 3 til højre, og 9 ud af 16 har korrekt forbundet boks 4 til venstre med boks 5 til højre.