

■ ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟΥ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΤΟΥ ΣΕ ΘΕΜΑΤΑ ΣΥΜΜΕΤΡΙΑΣ ΚΑΙ ΚΑΝΟΝΙΚΩΝ ΤΡΟΠΩΝ ΔΟΝΗΣΗΣ ΤΩΝ ΜΟΡΙΩΝ

Νικόλας Δ. Χαριστός
nicharis@chem.auth.gr

Μιχάλης Π. Σιγάλας
sigalas@chem.auth.gr

Εργαστήριο Εφαρμοσμένης Κβαντικής Χημείας
Τμήμα Χημείας
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

Περίληψη

Στην εργασία αυτή παρουσιάζονται δύο εκπαιδευτικά λογισμικά μοριακής μοντελοποίησης που απευθύνονται στην Τριτοβάθμια Εκπαίδευση. Το πρώτο, 3DMolSym, έχει ως στόχο την εξοικείωση των διδασκόμενων με τα στοιχεία συμμετρίας. Το αποτέλεσμα της εφαρμογής κάθε στοιχείου συμμετρίας σε ένα μοριακό μοντέλο γίνεται με τέτοιο τρόπο ώστε ο διδασκόμενος να διαπιστώνει τη μετατόπιση κάθε ατόμου ή δεσμού. Το πρόγραμμα διαπραγματεύεται το σύνολο των στοιχείων συμμετρίας μιας μεγάλης σειράς μορίων, τα οποία έχουν επιλεγεί με βάση τη διδακτική σκοπιμότητα τους. Το δεύτερο, 3DNormalModes διαπραγματεύεται τους κανονικούς τρόπους δόνησης των μορίων. Για μια σειρά ανόργανων και οργανικών μορίων δίδεται η πειραματική συχνότητα δόνησης για κάθε κανονικό τρόπο δόνησης, ο χαρακτηρισμός του, και η συμμετρία του, καθώς και η πραγματική δόνηση του μορίου. Και στα δύο προγράμματα ο διδασκόμενος – χρήστης καθορίζει άμεσα τη θέση και τον προσανατολισμό του μορίου στο τρισδιάστατο χώρο, την ταχύτητα της μετατόπισης των ατόμων και δεσμών, καθώς και άλλες παραμέτρους.

Λέξεις Κλειδιά

Μοριακή μοντελοποίηση, Συμμετρία, Κανονικοί Τρόποι Δόνησης.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η Χημεία θεωρείται ως η πλέον οπτική (visual) επιστήμη. Μια από τις σημαντικότερες προκλήσεις κατά τη διδασκαλία της Χημείας είναι η εμπλοκή των διδασκόμενων στην εξερεύνηση των ιδιοτήτων της μοριακής δομής. Η οπτικοποίηση της δομής ενός μορίου στο διδιάστατο χώρο μιας τυπωμένης σελίδας συναντά σημαντικές δυσκολίες και απαιτεί πολύ φαντασία. Η χρήση πλαστικών μοντέλων στην τάξη θα μπορούσε να βοηθήσει, αλλά απαιτεί τη χρήση τους από κάθε έναν από τους διδασκόμενους και όχι μόνον από τον διδάσκοντα. Οι δυσκολίες αυτές αυξάνονται όταν καλείται κανείς να διδάξει τη μοριακή συμμετρία και τη δονητική φασματοσκοπία. Στην πρώτη περίπτωση ο στόχος είναι η αναγνώριση των διαφόρων στοιχείων συμμετρίας μιας μοριακής δομής. Στη δεύτερη, η αναγνώριση της σχέσης μεταξύ φασματοσκοπικών μεταπτώσεων και των κανονικών τρόπων δόνησης των μορίων.

Σύμφωνα με τον Casanova (Casanova, 1993) και άλλους (McCormick, 1987, Box, 1991, Sauers, 1991, Weber, 1992 και Gotwals, 1995) η μοριακή μοντελοποίηση απαιτεί ένα λογισμικό χειρισμού τρισδιάστατων μοριακών γραφικών. Τα ψηφιακά μοριακά μοντέλα προσφέρουν μια πλούσια πηγή οπτικής και ποσοτικής πληροφορίας και έτσι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον εμπλουτισμό της διδασκαλίας. Οι διδασκόμενοι μπορούν να τα χρησιμοποιήσουν με πολλούς τρόπους για να μάθουν και να εξερευνήσουν τη μοριακή δομή και τη Χημεία. Έτσι, τις τελευταίες δεκαετίες η χρήση λογισμικών μοριακής μοντελοποίησης ως εκπαιδευτικά εργαλεία έχει προκαλέσει εξαιρετικό ενδιαφέρον (Jarret, 1990, Lipkowitz, 1984, Rosenfeld, 1991, Sauers, 1991 και Simpson, 1989).

Τα προγράμματα που αναπτύξαμε στο Εργαστήριο Εφαρμοσμένης Κβαντικής Χημείας στα πλαίσια τη παρούσας εργασίας καλύπτουν τα γνωστικά αντικείμενα της μοριακής συμμετρίας και των κανονικών τρόπων δόνησης των μορίων. Τα δύο αυτά γνωστικά αντικείμενα αναφέρονται σε ιδιότητες της μοριακής δομής και ειδικότερα στη δυναμική φύση της μοριακής δομής. Απαιτούν από το διδασκόμενο να δομήσει τρισδιάστατα δυναμικά νοητικά μοντέλα της μοριακής δομής και συνεπώς να χρησιμοποιεί σε μεγάλο βαθμό την οπτικοχωρική σκέψη.

Στα κλασσικά διδακτικά βοηθήματα και βιβλία που καλύπτουν αυτά τα γνωστικά αντικείμενα χρησιμοποιείται μια πληθώρα δισδιάστατων συμβολικών αναπαραστάσεων για να περιγράψουν τις σχετικές χημικές έννοιες. Από την κλασσική προσέγγιση για τη διδασκαλία των αντικειμένων αυτών προκύπτουν τα παρακάτω προβλήματα και περιορισμοί:

- Σε ένα κλασσικό βιβλίο μοριακής συμμετρίας παρατίθενται λίγα χαρακτηριστικά παραδείγματα τα οποία δεν είναι επαρκή για να καλύψουν τα διδασκόμενα θέματα.
- Η οπτικοποίηση των αντίστοιχων εννοιών με δισδιάστατες συμβολικές αναπαραστάσεις είναι δύσκολη και μπορεί να εφαρμοστεί μόνο για απλές μοριακές δομές. Υπάρχουν αρκετές χαρακτηριστικές περιπτώσεις στη μοριακή συμμετρία, όπως για παράδειγμα τα στοιχεία και οι διεργασίες συμμετρίας των μορίων της ομάδας σημείου I_h , τα οποία δε μπορούν να αναπαρασταθούν σε τυπωμένο χαρτί. Η δισδιάστατη συμβολική αναπαράσταση των κανονικών τρόπων δόνησης μορίων με περισσότερα από 5 άτομα είναι ιδιαίτερα απαιτητική και σπάνια συναντάται σε διδακτικά βιβλία.
- Η δημιουργία τρισδιάστατων δυναμικών νοητικών μοντέλων των διεργασιών συμμετρίας και των κανονικών τρόπων δόνησης των μορίων από τους διδασκόμενους είναι ιδιαίτερα απαιτητική διεργασία και απαιτεί ανεπτυγμένη οπτικοχωρική σκέψη. Τα επιφανειακά χαρακτηριστικά των δισδιάστατων συμβολικών αναπαραστάσεων δεν είναι επαρκή για να μεταδώσουν τη δυναμική φύση των διεργασιών συμμετρίας και των κανονικών τρόπων δόνησης των μοριακών δομών.
- Δε δίνεται η δυνατότητα ή είναι ιδιαίτερα δύσκολο για τους διδασκόμενους να πειραματισθούν νοητικά και να διερευνήσουν τις ιδιότητες συμμετρίας και τους κανονικούς τρόπους δόνησης των μοριακών δομών.

Τα προγράμματα 3DNormalModes και 3DMolSym αναπτύχθηκαν για να καλύψουν αυτά τα κενά. Είναι προγράμματα τρισδιάστατης μοριακής οπτικοποίησης που μοντελοποιούν τις ιδιότητες συμμετρίας και τους κανονικούς τρόπους δόνησης της μοριακής δομής. Έτσι τα προγράμματα αυτά παρέχουν:

- Μια πληθώρα χαρακτηριστικών μορίων που καλύπτουν όλες τις περιπτώσεις στα γνωστικά αντικείμενα της μοριακής συμμετρίας και των κανονικών τρόπων δόνησης.
- Παραδείγματα τα οποία δεν έχουν οπτικοποιηθεί ποτέ ως σήμερα, όπως για παράδειγμα τα στοιχεία και οι διεργασίες συμμετρίας μορίων που ανήκουν στην ομάδα σημείου I_h .
- Τρισδιάστατη οπτικοποίηση των μοριακών δομών και των αντίστοιχων χημικών εννοιών. Ο χρήστης είναι ελεύθερος να χειριστεί τα μοριακά μοντέλα, να τα περιστρέψει, να τα μετακινήσει και να αυξομειώσει το μέγεθός του ώστε να αντιληφθεί με τον καλύτερο τρόπο τη δομή και τη δυναμική φύση των διεργασιών συμμετρίας και των κανονικών τρόπων δόνησης των μορίων.
- Νέα και πρωτότυπα συμβολικά συστήματα με δυναμικά επιφανειακά χαρακτηριστικά που επιτρέπουν τη νοητική σύνδεση των οπτικοποιήσεων με τις υποκείμενες χημικές έννοιες.
- Ελεύθερη και διερευνητική πρακτική εξάσκηση με τις οπτικοποιημένες χημικές έννοιες.
- Δυναμική οπτικοποίηση της εσωτερικής κίνησης και παραμόρφωσης των μοριακών δομών.

Τα προγράμματα αυτά δεν αποτελούν ολοκληρωμένη πρόταση για τη διδασκαλία των εν λόγω γνωστικών αντικειμένων, ούτε σκοπεύουν στην αντικατάσταση των παραδοσιακών διδακτικών μέσων. Αντίθετα, μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως συμπληρωματικό διδακτικό υλικό για τα αντίστοιχα βιβλία. Μπορούν να χρησιμοποιηθούν από τον καθηγητή στη διάλεξη για τη παρουσίαση των αντίστοιχων χημικών εννοιών ή από το φοιτητή ως εργαλείο ατομικής διερευνητικής μάθησης. Εξάλλου, ένα περιβάλλον μοριακής οπτικοποίησης δεν αποτελεί από μόνο του διδακτικό μέσο. Θα πρέπει να συνδυαστεί με τους κατάλληλους γνωστικούς πόρους που παρέχονται από τα κλασικά διδακτικά βιβλία, ώστε να δημιουργούνται εννοιολογικοί σύνδεσμοι ανάμεσα στις οπτικοποιήσεις και τις χημικές έννοιες που σχετίζονται με αυτές.

Βασική απαίτηση της εργασίας ανάπτυξης ήταν ο σχεδιασμός εύχρηστων γραφικών διεπαφών χρήστη (GUI, Graphical User Interface). Η ευχρηστία είναι ένας από τους σημαντικότερους παράγοντες που καθορίζουν την ποιότητα ενός λογισμικού. Ως έννοια η ευχρηστία είναι αρκετά ασαφής, είναι δύσκολο να αξιολογηθεί και αδύνατο να μετρηθεί (Bevan, 1994). Η ευχρηστία της διεπαφής χρήστη ενός λογισμικού χαρακτηρίζεται από πέντε βασικές ιδιότητες: ευκολία μάθησης, αποτελεσματικότητα, απομνημονευσιμότητα, ικανοποίηση και αποφυγή λαθών (Nielsen, 1993). Κατά καιρούς έχουν δοθεί διάφοροι κανόνες ευχρηστίας (usability heuristics) και σχεδιασμού (design rules) εύχρηστων αλληλεπιδραστικών γραφικών διεπαφών (Smith, 1997). Οι πιο βασικοί που λήφθηκαν υπόψη και κατά το σχεδιασμό της διεπαφής των προγραμμάτων είναι η χρήση αλληγοριών (Metaphors), η έναρξη και έλεγχος του χρήστη (Initiation, User Control), η ευελιξία (Flexibility), η πολυπλοκότητα των επιλογών (Option Complexity), η συνέπεια, σταθερότητα και ομοιογένεια (Consistency, Perceived Stability), η λιτότητα, η ανάδραση και επικοινωνία (Feedback), η ελαχιστοποίηση και διαχείριση λαθών (Error Handling), η αισθητική αριότητα (Aesthetic Integrity) και η ελαχιστοποίηση του γνωστικού φορτίου.

Κάθε γραφική διεπαφή χρήστη έχει μια χαρακτηριστική όψη και αίσθηση, οι

οποίες προκύπτουν από την οπτική σχεδίαση των αλληλεπιδραστικών παραθυρικών αντικειμένων (widgets, WinDowObjEcTS), τη συμπεριφορά τους και τις αλληγορίες που εκφράζουν. Η όψη και η αίσθηση μιας διεπαφής πρέπει να προδιαθέτει το χρήστη για τη λειτουργικότητα του προγράμματος και να δημιουργεί τις κατάλληλες προσδοκίες.

ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ 3DNormalModes

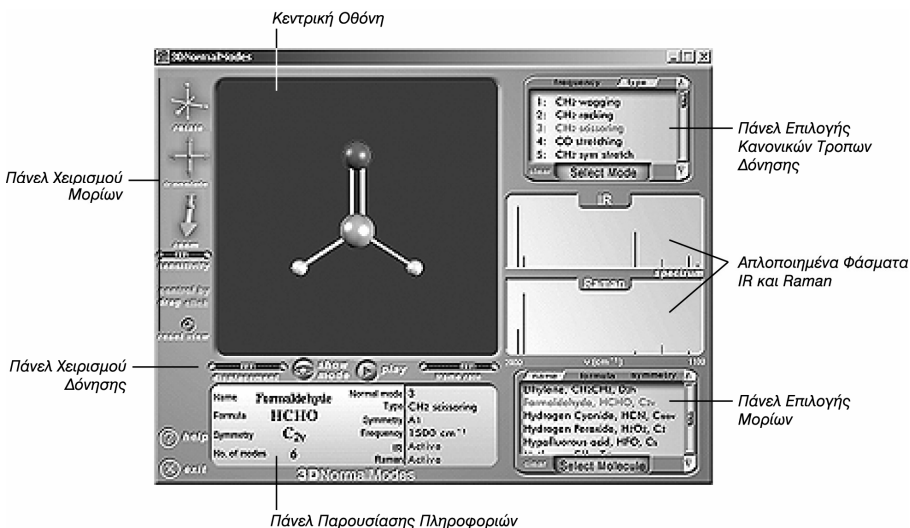
Το πρόγραμμα 3DNormalModes είναι ένα λογισμικό τρισδιάστατης οπτικοποίησης των κανονικών τρόπων δόνησης των μορίων. Με το πρόγραμμα 3DNormalModes ο χρήστης μπορεί να απεικονίσει ένα μοριακό μοντέλο σε τρισδιάστατο αλληλεπιδραστικό περιβάλλον και να ενεργοποιήσει τη δονητική κίνηση που εκτελεί το μόριο σύμφωνα με έναν κανονικό τρόπο δόνησης, όταν αυτό απορροφήσει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία της αντίστοιχης θεμελιώδους συχνότητας στην περιοχή του υπέρυθρου (IR) φάσματος. Περιέχει μια βάση δεδομένων με πληροφορίες που αφορούν στη γεωμετρία, τις πειραματικές τιμές των συχνοτήτων και τους αντίστοιχους κανονικούς τρόπους δόνησης 28 οργανικών και ανόργανων μορίων. Οι γεωμετρίες και οι κανονικοί τρόποι δόνησης κάθε μορίου υπολογίστηκαν με τη χρήση του πακέτου κβαντοχημικών υπολογισμών Gaussian 98W στο επίπεδο θεωρίας *ab initio* με τη μέθοδο HF/3-21G. Το κύριο περιβάλλον εργασίας του προγράμματος δίνεται στο Σχήμα 1.

Συνοπτικά ο χρήστης του 3DNormalModes μπορεί να εκτελέσει τις παρακάτω ενέργειες:

- Να απεικονίσει το μοριακό μοντέλο ενός από τα 28 μόρια της βάσης δεδομένων σε ένα τρισδιάστατο αλληλεπιδραστικό περιβάλλον.
- Να περιστρέψει, να μετακινήσει και να αυξομειώσει το μέγεθος του μοριακού μοντέλου ελεύθερα, ώστε να το παρατηρεί από οποιοδήποτε προσανατολισμό.
- Να ενεργοποιήσει την κίνηση κάθε κανονικού τρόπου δόνησης ενός επιλεγμένου μορίου.
- Να καθορίσει την ταχύτητα της κίνησης.
- Να απεικονίσει τα διανύσματα μετατόπισης των ατόμων σε κάθε κανονικό τρόπο δόνησης.
- Να καθορίσει το μήκος των διανυσμάτων μετατόπισης των ατόμων.
- Να απεικονίσει αλληλεπιδραστικά απλοποιημένα φάσματα υπέρυθρου και Raman του επιλεγμένου μορίου με τη μορφή φασματικών γραμμών.
- Να δει πληροφορίες για το επιλεγμένο μόριο και τον επιλεγμένο κανονικό τρόπο δόνησης.

Η διάταξη της διεπαφής φαίνεται στο Σχήμα 1. Εργασίες που σχετίζονται μεταξύ τους βρίσκονται σε καθορισμένες περιοχές. Η διεπαφή χωρίζεται κάθετα σε τρεις περιοχές. Στη δεξιά περιοχή βρίσκονται τα παραθυρικά αντικείμενα που σχετίζονται με την επιλογή μορίων και κανονικών τρόπων δόνησης. Κάτω δεξιά βρίσκεται το πάνελ επιλογής μορίων, στη μέση τα απλοποιημένα φάσματα IR και Raman, και πάνω δεξιά βρίσκεται το πάνελ επιλογής κανονικών τρόπων δόνησης. Στην κεντρική περιοχή βρίσκεται η οθόνη απεικόνισης των μοριακών μοντέλων, τα παραθυρικά αντικείμενα ελέγχου της δονητικής κίνησης και η περιοχή πληροφοριών. Στην αριστερή περιοχή βρίσκονται τα παραθυρικά αντικείμενα διαχείρισης (περιστροφή, μετατόπιση, αυξομείωση μεγέθους) του μοριακού μοντέλου, καθώς και τα κουμπιά βοήθειας και εξόδου. Αυτή η χωρική κατανομή βοηθά το χρήστη να εστιάζει την προσοχή και

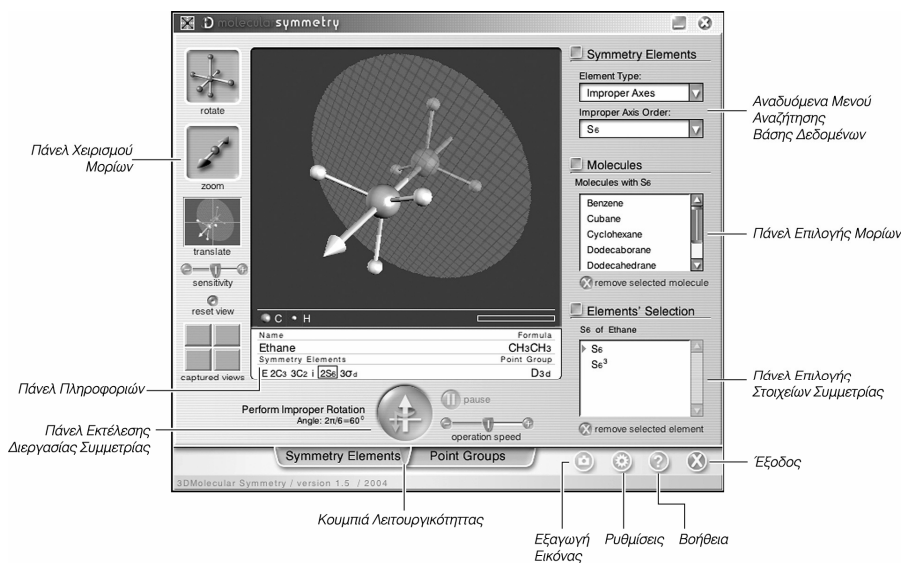
το ενδιαφέρον του σε συγκεκριμένες περιοχές ανάλογα με τις εργασίες που εκτελεί.



Σχήμα 1. Το κύριο περιβάλλον εργασίας του προγράμματος 3DNormalModes.

ΤΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ 3DMolSym

Το 3DMolSym είναι ένα εκπαιδευτικό λογισμικό που σχεδιάστηκε για να οπτικοποιεί τα στοιχεία συμμετρίας των μορίων και την κίνηση των αντίστοιχων διεργασιών συμμετρίας, μέσα σε ένα τρισδιάστατο αλληλεπιδραστικό περιβάλλον πραγματικού χρόνου.



Σχήμα 2. Η γραφική διεπαφή του 3DMolSym.

Περιέχει μια βάση δεδομένων με στοιχεία για τη γεωμετρία και τη συμμετρία 48 οργανικών και ανόργανων μορίων, που ανήκουν σε όλες τις ομάδες σημείου με χημικό ενδιαφέρον. Ο χρήστης μπορεί να ψάξει τη βάση δεδομένων του προγράμματος και να ταξινομήσει τα μόρια ανάλογα με τα στοιχεία συμμετρίας που περιέχουν ή την ομάδα σημείου που ανήκουν, να επιλέξει ένα μόριο, να φορτώσει οποιοδήποτε στοιχείο συμμετρίας του και να εκτελέσει την αντίστοιχη διεργασία συμμετρίας.

Συνοπτικά, ο χρήστης με το 3DMolSym μπορεί να εκτελέσει τις παρακάτω ενέργειες:

- Να απεικονίσει κάθε στοιχείο συμμετρίας και να εκτελέσει την αντίστοιχη διεργασία συμμετρίας, σε ένα τρισδιάστατο αλληλεπιδραστικό περιβάλλον.
- Να απεικονίσει κάθε μόριο σε μορφή Ball and Stick ή Wireframe.
- Να περιστρέψει, μετακινήσει και μεγεθύνει κάθε μόριο ελεύθερα.
- Να αποθηκεύσει και ανακαλέσει ανά πάσα στιγμή 4 επιλεγμένους προσανατολισμούς του μορίου.
- Να ρυθμίσει την ταχύτητα και να παγώσει την κίνηση μιας διεργασίας συμμετρίας.
- Να δει πληροφορίες για τα στοιχεία συμμετρίας και την ομάδα σημείου κάθε μορίου.
- Να αποθηκεύσει εικόνες των μοριακών μοντέλων.

Το 3DMolSym ακολουθεί τις ίδιες σχεδιαστικές αρχές στις οποίες βασίσθηκε η γραφική διεπαφή του 3DNormalModes. Έτσι, το 3DMolSym υιοθετεί την αλληγορία των φορητών ηλεκτρονικών συσκευών (gadgets). Δίνει την αίσθηση μιας ψηφιακής συσκευής που εκτελεί μια συγκεκριμένη εργασία: την οπτικοποίηση των στοιχείων και διεργασιών συμμετρίας των μορίων. Φαίνεται, λοιπόν, σαν ένας οπτικοποιητής στοιχείων και διεργασιών μοριακής συμμετρίας. Η γραφική διεπαφή του 3DMolSym παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Bevan, N., Macleod, M. (1994) Usability measurement in context, *Behaviour and IT*, 13, 132-145.
- Box, V. G. S. (1991). Computer-assisted molecular modeling for undergraduate organic chemistry students. *Journal of Chemical Education*, 68, 662-664.
- Casanova, J. (1993). Computer-based molecular modeling in the curriculum. *Journal of Chemical Education* 70, 904-909.
- Gotwals, Jr., R. R. (1995). Scientific visualization in chemistry, better living through chemistry, better chemistry through pictures: Scientific visualization for secondary chemistry students. Scientific Visualization in Mathematics and Science Teaching, In Thomas, D. A. (Ed.), *Association for the Advancement of Computing in Education*, (Service No. ED 361171 ERIC Document Reproduction), Charlottesville, Virginia.
- Jarret, R. M., and Sin, N. (1990). Molecular mechanics as an organic chemistry laboratory exercise. *Journal of Chemical Education*, 67, 153-155.
- Lipkowitz, K. (1984). Using the QCPE holdings in chemical education. *Journal of Chemical Education*, 61, 1051-1052.
- McCormick, B. H., DeFanti, T. A., and Brown, M. (Eds.) (1987). Visualization in scientific computing. *Computer Graphics*, 21, I-D-8.
- Nielsen, J. (1993) Usability Engineering, *Academic Press*, London.
- Rosenfeld, S. (1991). Molecular modeling as an integral part of an advanced lab course. *Journal of Chemical Education*, 68, 488-489.

- Sauers, R. S. (1991). Molecular mechanics in the Undergraduate curriculum. *Journal of Chemical Education*, 68, 816–818.
- Simpson, J. M. (1989). Molecular mechanics/computer graphics experiment for the undergraduate organic chemistry laboratory. *Journal of Chemical Education*, 66, 406–407.
- Smith, A. (1997) *Human Computer Factors: A Study of Users and Information Systems*, McGraw-Hill, London.
- Weber, J., Fluekiger, P., and Morgantini, P-Y. (1992). Molecular graphics and chemistry. *Educational Media International*, 29, 247–53.