

מעבדות חקר ממוחשבות והדמיה מולקולרית בכימיה

אורית הרשקוביץ, צביה קברמן, עירית שעון יהודית דורית*
המחלקה להוראת הטכנולוגיה והמדעים, הטכניון, חיפה



רקע

טכנולוגיות מידע ותקשורת מהוות חלק נכבד מחיי היום יום של הפרט ושל החברה שהוא חי בה. הן משנות את אופן החשיבות והלמידה שלנו כמו גם את נושא הלימוד. התמורות החלות בחברה משפיעות על בת-הספר ועל המוסדות האקדמיים (המהווים מתווכים בין הפרט והחברה), אשר נמצאים היום בעיצום של שינויים במבנה ההוראה/למידה. בשנים האחרונות נרשמו התקדמות מהירה בפיתוח אמצעים טכנולוגיים, המאפשרים תיאור גрафי וдинמי של מרכיבים שונים במדוע. שילוב המחשב בעבודת המעבדה מקובל כיום הן במכון מחקר והן בתעשייה. הוא מאפשר איסוף נתונים רציף במהלך הניסויים, ניתוח תוצאותיהם והציגן בדרך מושכלת תוך הסקת מסקנות מחד גיסא, ושילוב הדמויות מולקולריות ושימוש במאגרי מידע ממוחשבים, מאידך גיסא.

מחקרדים רבים מציבים על החשיבות בשילוב טכנולוגיות מתקדמות בהוראה ועל השפעתן על מיזמנויות חשיבה ולמידה בקרבת תלמידים. למורים, בהווים סוכני שני, תפקיד מרכזי בהחדרתם ובהתמעתם של השינויים הנדרשים בהוראה לצורך שילוב הטכנולוגיות.

על רקע זה, פותחה תוכנית לשילוב מעבדות חקר ממוחשבות והדמיה מולקולרית בהוראת הכימיה. התוכנית פותחה בטכניון, במחלקה להוראת הטכנולוגיה והמדעים, בקבוצת הכימיה והסביבה, והוא מיושמת זו השנה השלישייה בערך בשלושים בת-ספר בארץ.

תוכנית מעבדות חקר ממוחשבות והדמיה מולקולרית בכימיה

התוכנית מתאפיינת בגישה הרווחת בהוראה בכלל ובהוראה המדעים בפרט, והיא הרחבת תוכניות לימודים המעודדות פיתוח כישורי חשיבה גבוהים ו怛גתת הקשר בין מדע, חברה וטכנולוגיה. זאת במטרה להכין את התלמידים, שהם אזרחי המחר, לח'ם Dorit, Sasson, Kaberman, & Herscovitz, 2003) במסגרת התוכנית, מתנסים התלמידים ביצוע ניסוי חקר ממוחשבים תוך שימוש בטכנולוגיית MBL, הכוללת אוגר נתונים וחישונים המוחברים למחשב.

איך 1 : אוגר הנתונים וחישוני טמפרטורה
במערכת ניסוי

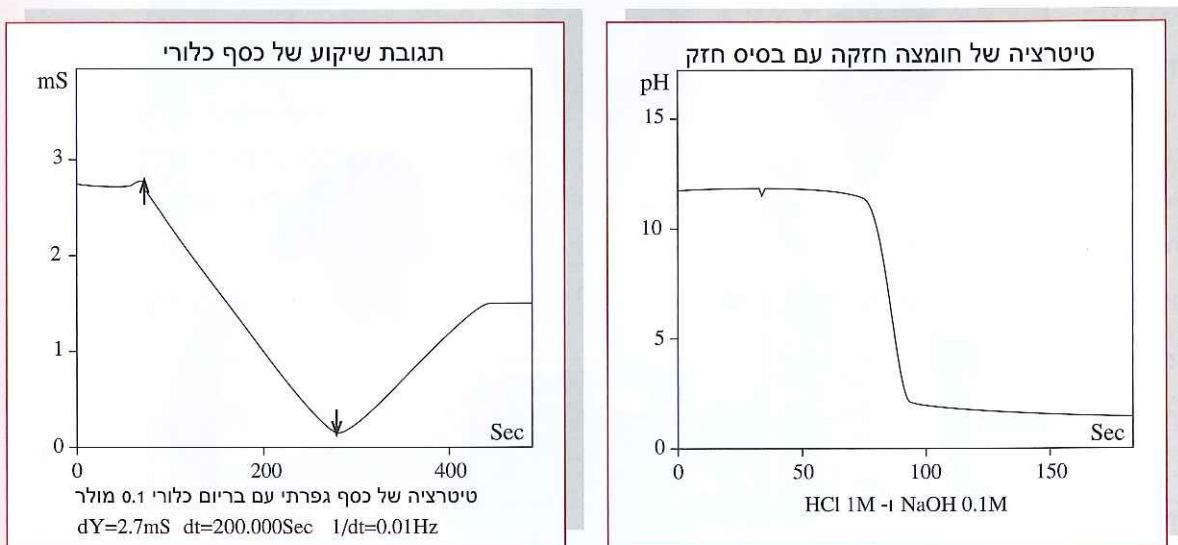
* פרופ' יהודית דורית - ראש מל"מ טכניון, מרכזת לימודי הסמכה במחלקה להוראת הטכנולוגיה והמדעים בטכניון וראש פרויקט מעבדות חקר ממוחשבות.

ד"ר אורית הרשקוביץ - מרצה במחלקה להוראת הטכנולוגיה והמדעים בטכניון ומרכזת צוות פיתוח התוכנית ויושמה בשיטה. צביה קברמן ועירית שעון - צוות הפיתוח, מורות לכימיה וอกטורנטיות במחלקה להוראת הטכנולוגיה והמדעים בטכניון.



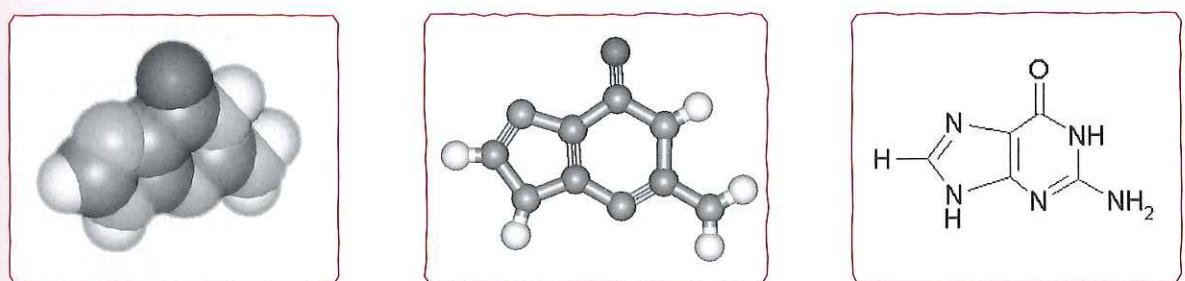
תוכנית מעבדות חקר הממוחשבות כוללת (הרשקובי, קברמן, שושן והור, 2002 א+ב):

- חמש יחידות מעבדה בונשאים: תכונות של נזלים ותמיוסות, שיקוע מלחים, חומצות ובסיסים, אנרגיה כימית ותהליכי דיפוזיה ואוסמוזה. יחידות אלו כוללות שלושה-עשר ניסויים המוצגים בגישה החקר והגלו. התלמיד נדרש לנסה שאלת חקר, להעלות השערות, לzechות משתנים ולבצע ניסוי באמצעות חישונים המוחברים למחשב בזמן אמיתי.
- איסוף, עיבוד וניתוח נתונים אשר מוצגים בתצורה גרפית ממוחשבת



איור 2: דוגמאות לגרפים המתקבלים בניסויים

- פעילות עם מודלים והדמיה ממוחשבת ועריכת פרויקט חקר ממוקד הדמיה.

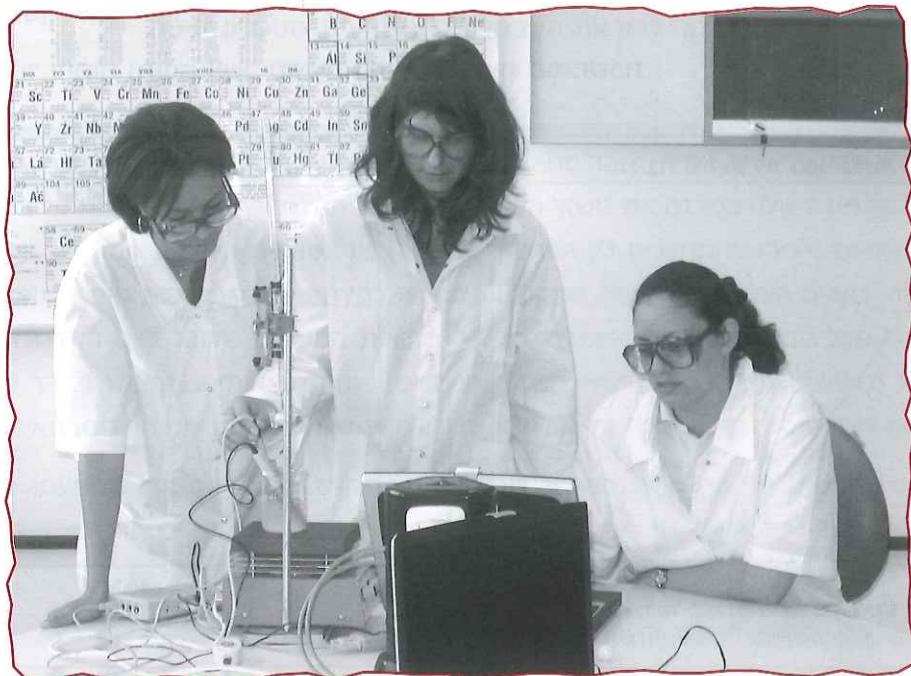


איור 3: נוסחת מבנה ומודלים של כדורי-מקל וממלא מרחב, כפי שהם מוצגים בתוכנות ההדמיה

- פיתוח מיומנויות חשיבה לוגית ביחסם אירועים מתחומי מדע-טכנולוגיה-חברה. מיומנויות אלו כוללות: שאלות שלאלות, קישור לידע כימי קודם, ניתוח מידע באربע רמות הבנה בכימיה, תרגום מידע לצורות יצוג שונות וחשיבה ביקורתית ויצירתית.



ייחודה של סביבת הלמידה בתוכנית הוא השימוש של ניסויי חקר ממוחשבים עם חקר אירועים (הרשקובייך ודורי, 1996; Dori & Herscovitz, 1999). באמצעות חקר אירוע הרלוונטיים לעולמו, מוצגים לתלמיד נושאי חקר שונים בהתאם לנושאי הלימוד בכימיה בהיקף של 3 ו- 5 יחידות לימוד. התלמיד מעמיק את ידיעותיו בנושא, ומבצע תהליכי חקר הcoilלים שאלת חקר, תכנן ניסוי ממוחשב, ביצעו והסקת מסקנות.



איור 4: תלמידים מבצעים ניסויי חקר ממוחשבים במעבדה

גישה של חקר מאפיינית גם את הפעולות הממוחשבות בהדמיה מולקולרית. במסגרת פעילויות אלה, מתרנס התלמיד בדרכים מגוונות של ייצוג מולקולות, אשר להן שימושים שונים בח'י היום יום.

שילוב פעילויות הוראה/למידה, המבוססות על חקר אירועים מאפשר לערוב את הלומד בתהילך הלמידה, לפתח בו מיומניות חשיבה גבוזה ולהציג הבנה של תהליכי ויישום בעקבות יומיומיות. האירועים לקוחים מהמציאות היום-יומית הרלוונטית לתלמיד. במהלך התמודדות התלמיד עם האירוע, הוא נדרש לישם ידע קודם בכימיה, להתמודד עם שאלות/משימות ברמות חשיבה שונות ולהתיחס לרמות ההבנה בכימיה. לעיתים, נדרש התלמיד גם להביע את דעתו בצורה ביקורתית ולהציג פתרונות אפשריים לבעה המועלית באירוע תוך הפעלת חשיבה ערכית ויצירתית. בכל אירוע ישנו מוקד כימי מרכזי הקשור בתגובה או במולקולה או בקבוצות חומרים, עליהם מצטרף בהמשך חקר ממוחשב במעבדה או חקר מבנה ממוחשב, באמצעות הדמיה מולקולרית.

מבנה יחידות המעבדה

יחידות המעבדה הן בלתי תלויות האחת בשנית, וכל אחת מהוות מכלול של פעילויות משולבות בניסויים ברמות חקר שונות. הפעולות הקשורות לאחד מנושאי הלימוד בכימיה ואורך כל יחידת מעבדה הוא שלושה עד חמישה שיעורים.

יחידת מעבדה כוללת:

חלק א' - פעילות פיתחה - פעילות הכנה לקרהת המעבדה, הכוללת חקר אירוע ופעולות מלאה (ראה נספח עמ' 36).

חלק ב' - ניסויי חקר מודרך וחצי מודרך - סדרת ניסויים הכלולים הנקראות בגייסת חקר: ניסוח שאלה/ות חקר, העלאת השערות, הגדרת משתנים וגורמי בקרה, תכנון מהלך ניסוי ואיסוף נתונים. איסוף הנתונים מתבצע באופן רציף באמצעות חישונים המוחברים למחשב, דבר המאפשר את הצגתם בתצורה גרפית. בעקבות הניסויים, ניתוחם והסקת המסקנות, מוצגת "הזמןה לחקר נסף" הכוללת הצעות כלליות למספר כיווני חקר עצמאיים שקשורים לנושא המעבדה.

חלק ג' - הרחבה - חקר אירוע ופעולות מלאה, המאפשרים הרחבה והעמקה נוספת לסיכון המעבדה.
דף מידע - מכילים מושגים בסיסיים הקשורים לנושאים שבהם עוסקת יחידת המעבדה. חלקם מוכרים לתלמיד וחלקם מהווים הרחבה של מושגים אשר אינם נכללים בתוכנית הלימודים אך דרושים למעבדה.

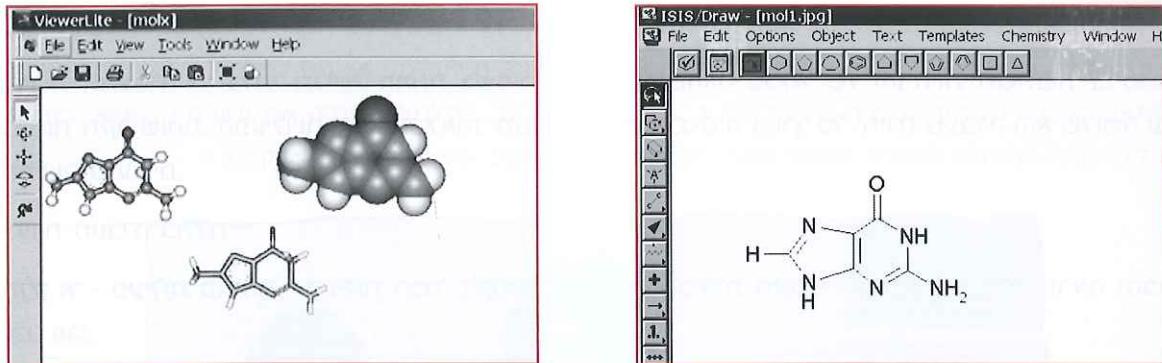
חקר בשילוב הדמיה מולקולרית ממוחשבת - מולקולות מחיי היום-יום

הדמייה מולקולרית ממוחשבת, (CMM - Computerized Molecular Modeling), מאפשרת בניית מודלים וירטואליים תלת ממדיים בנוחות ובפשטות. ניתן לבנות מודלים של מולקולות בגודלים שונים, כאשר האטומים מייצגים עצבים שונים ובגדלים שונים על-פי קנה מידה. הדמיה מולקולרית ממוחשבת מתאפשרת בדיקוך רב של אורך הקשרים והזווית בין האטומים, ומאפשרת לסובב את המודלים ולהתבונן בהם בצורות ייצוג שונות כגון כדור ממלא מרחב ומסגרת.

במחקריהם השונים, שביהם שלבה הדמיה מולקולרית ממוחשבת בהוראת הכימיה בחטיבות העליונות נמצאו, כי הוראת נושאים כגון מבנה וקשרו כימי ותכרכובות הפחמן באמצעות הדמיה מולקולרית ממוחשבת הביאה לשיפור בהישגי התלמידים. עוד נמצא כי הלמידה בגישה זו עודדה הבנה ארבע רמות הбанה בכימיה: הרמה המאקרוסקופית - הבנת תופעות כימיות הנთנות לצפיה, הרמה המיקרוסקופית - הבנת תופעות ברמה האטומית והמולקולרית, רמת הסמל - הבנת סמלים ונוסחות ורמת התהילה - הבנת תהליכיים ומנגנוני תגובה כימיות (Barnea, 2000; Dori & Barnea, 1997; Dori, & Barak, 2001).

בתוכניות המעבדות הממוחשבות משולבות תשע פעילויות בהדמיה מולקולרית בנושא תרכובות הפחמן. הפעולות מלויות בחקרים אירוע וכל אירוע ממוקד במולקולה מוכרת מחיי היום-יום ושאלות מוחשות שביניהן גם חקר מבנה המולקולה במחשב, המבוסס על ידע התלמידים במבנה וקשרו כימי.





איור 5: דוגמאות למסכי מחשב של תוכנות הדמיה המשולבות בתוכנית

דרכי הערכה בתוכנית

הערכתה בתוכנית מגוונת ומתחילה ב漫长的 המילויים הבאות לידי ביטוי במעבדה. התלמידים מנהלים פרוטופולו (תיק עבודות) לאורך השנה, שאותו מעריך המורה במהלך השנה. בסיום השנה מגישים התלמידים למורה פרוטופולו מסכם ובו מגוון פעוליות לפי בחירתם (בהתאם להנחיות) כגון: חקר אירוע, ניתוח תוצאות ניסויים הממוחשבים (כולל ניתוח גרפי התוצאות), דוח מפורט של ניסוי החקיר הפתוח, דוחות הפעולות בהדמיה ופרויקט חקר מולקוללה בהדמיה. הערכה כוללת גם מבחן מיומנויות, המבוסס על חקר אירוע, והוא מהוויה חלק מצוין התלמיד ביחידת המעבדה.

תודות

לפרופ' יצחק אפליג, נשיא הטכניון, על הייעוץ המדעי בשלב פיתוח התוכנית.

רשימת מקורות

- הרשקוביץ, א. ודור, י. (2000). גישה מערכתית בהוראת מדעים - תיאוריה, יישום והערכתה של התנסות מורי מדע וטכנולוגיה בנושא המסתובט. הלכה למעשה בתכנון לימודים, 15, 47-50.
- הרשקוביץ א., קברמן צ., שושן ע. ודורו י. (2002א). מעבדות חקר ממוחשבות והדמיה מולקולרית בכימיה - חברה לתלמיד. הוצאת המחלקה להוראת הטכנולוגיה והמדעים, טכניון, חיפה.
- הרשקוביץ א., קברמן צ., שושן ע. ודורו י. (2002ב). מעבדות חקר ממוחשבות והדמיה מולקולרית בכימיה - מדריך למורה. הוצאת המחלקה להוראת הטכנולוגיה והמדעים, טכניון, חיפה.
- Barnea, N. (2000). Teaching and Learning About Chemistry and Modeling with Computer Managed Modeling System.. In: Gilbert, J.K. & Boultter C.J. (Ed.), *Developing Models in Science Education*, Kluwer Academic Pub. 307-323.

Dori, Y.J. & Barak, M. (2001). Virtual and Physical Molecular Modeling: Fostering Model Perception and Spatial Understanding. *Educational Technology & Society*, 4(1), 61-74.

http://ifets.ieee.org/periodical/vol_1_2001/dori.pdf

Dori, Y. J. & Barnea, N. (1997). In Service Chemistry Teachers Training: The Impact of Introducing Computer Technology on Teachers Attitudes. *International Journal in Science Education*. 19(5), 577 – 592.

Dori, Y.J. & Herscovitz, O. (1999). Question Posing Capability as an Alternative Evaluation Method: Analysis of an Environmental Case Study. *Journal of Research in Science Teaching*, 36(4), 411-430.

<http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/abstract/55001987/START>

Dori, Y.J., sasson, I., Kaberman, T. & Herscovitz, O. (2003). Integrating Case-based Computerized Laboratories into High School Chemistry. *The Chemical Educator*, In press.

לקבالت מידע נוספת על התוכנית ולרכישת החומרה, ניתן לפנות לקבוצת הכימיה והסביבה -

טלפון: 04-8293796, 04-8292159 (מעבדה), 04-8292171 (מעבדה)

fax: 04-8295634 (בעבור ד"ר אורית הרשקבוביץ)

דואר אלקטרוני: orither@tx.technion.ac.il

פורום מעבדה ממוחשבת:

<http://edu.technion.ac.il/Projects/ce/forum>

גאומטריה אקזיטית כווניה פיזיקאלית
סמלים אלו משלבים פיזיקה כימיה
ונטאות אלו מגדירים מלחיך או ניטראלי



נספח: קטיעים מחקר אירוע ופעילות מלואה (חוברת לתלמיד, עמ' 105 - 107)

(AIRURE ZAH, LEA FEUILLES DE L'APPRENTISSAGE, SHIMSH COMBACH MIYOMONIOT B'SHANA "L" TASHS"A)

תוספַּת הדָּלָק MTBE - תועלת לסייע או נזק אפשרי?

במנועי דלק מתחבצעת שריפה של הדלק הפחמייני באמצעות חמצן מהאוויר במטרה להפוך אנרגיה כימית לאנרגיה המאפשרת את תנועת הרכב. שריפה מלאה תביא לתוצריים "הרצויים" פחמן דו-חמצני ומימן, אך כאשר שריפת הדלק במנוע אינה מלאה (היחס בין החמצן לבין הדלק אינו מתאים) נפלט גם הגז הבלתי רצוי פחמן חד חמצני - CO. ריכוזים גבוהים של CO באוויר עלולים לגרום נזקים חמורים לנושמים אותנו. על מנת להוריד את רמת פליטת גז ה- CO מכליל-רכב, נהוג להוסיף תוספי דלק חמוצים, המעשירים את הדלק בكمויות חמצן גדולות יותר בהשוואה להרכבו המקורי. העשרה זו בחמצן מסייעת ביצירת יחסים נכונים יותר של דלק וחמצן ובהורדת רמת המזהמים הנפלטים כתוצאה ששריפה לא מושלמת במנוע.

החל משנת 1979 נכנס החומר MTBE (Methyl Tertiary Butyl Ether) לשימוש בארץ במקום תרכובת של עופרת, שנמצא כי היא גורמת לזיהום אוויר. בטמפרטורות הגבוהות השוררות במנוע, מתפרק ה- MTBE ליסודותיו ומעשיר את הדלק בחמצן. למרות זה- MTBE נחשב לפחות רעל מוחדרים אחרים הנמצאים בדלקים, קיים חשש בנוגע להשפעתו על מי השתייה. כאשר מתרחשת דיליפת דלק תת קרקעית, ה- MTBE יכול לנوع במהירות גבוהה יחסית למרכיבי הדלק האחרים, בגל מסיטות הגובה במים. הוא מגע לבארות מי שתיה מרוחקים ממוקם הדיליפה ויוצר שטח מזוהם רחב יחסית לשטח מזוהם מדיליפת דלק אשר לא טופל ב- MTBE.

עדין קיימים חילוקי דעתות באשר לסכנות מהחומר MTBE. מהוראה שהוציאה מדינת קליפורניה - למצוא תחליף ל- MTBE עד שנת 2002, ומספר מחקרים שנערכו, ניתן להסיק כי אכן קיימת סכנה ממשית מחדירת החומר MTBE למי השתייה. לעומת זאת, יש מי שגורסים כי בעיותיה היחידות הקיימות ב- MTBE היא השפעתו על הטעם והריח של מי השתייה והוצאה החומר משימוש, ללא מציאות תחליף הולם, תגרום לנזק אדיר לאיכות האויר.

1. נסחו 3 שאלות המתעוררות בעקבות קריית האירוע:

2. הדלק מורכב מתערובת פחמיינים אלקלניים, שהעיקרי בהם הוא אוקטן: C_8H_{18} . נסחו את תגובת שריפת המלאה של חומר זה בחמצן.

3. לפניכם נסחת מבנה של החומר MTBE.

א. מהי הקבוצה הפונקציונלית של תרכובת זו? כיצד מכונים חומרים בעלי קבוצה פונקציונלית ייחודית זו?

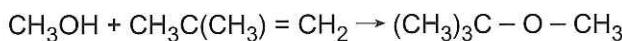
ב. הסבירו במונחים של מבנה וקיים מודיע מסיס ה- MTBE במים.

4. פעילות בהדמיה מולקולרית:

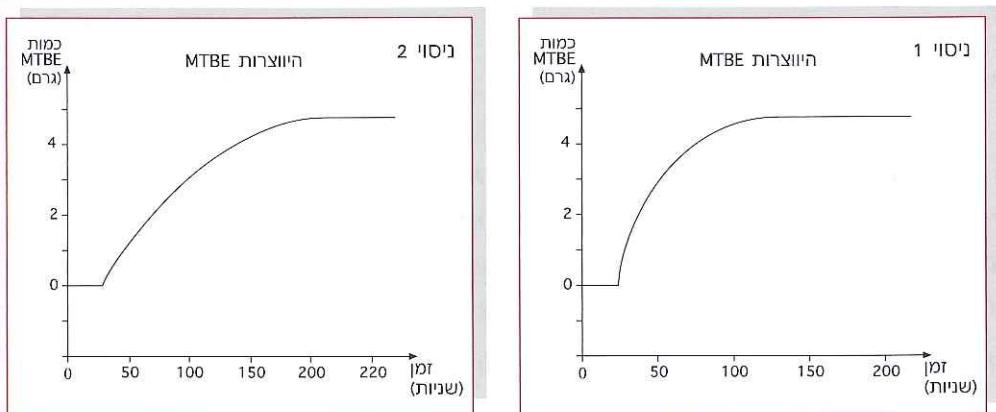
א. בנו בתוכנת ISIS את המולקולה - ללא מימנים.

ב. העבירו אותה ל- WebLab, הוסיפו מימנים וצפו בה בשלוש צורות הייצוג.

- ג. הוסיפו מימנים לציר המולקולה ב- SIOS (היעזרו בכפתור A בסרגל השמאלי).
- ד. העבירו לקובץ word את ציר המולקולה ואת המבנה המרחבי שלה בצורות הייצוג השונות.
- ה. בנו בתוכנת SIOS את האיזומר הקוווי של ה- MTBE - ללא מימנים
- ו. העבירו ל- WebLab, הוסיפו מימנים וצפו בה בשלוש צורות הייצוג.
- ז. מתוך השוואת המבנים המרחביים של שני המולקולות, הסבירו את ההבדל בחזק הקשרים הבין- מולקולריים שלחן ובהתאם, את נקודות הרתיחה שלחהן.
- ח. חברים בצוות כימאים במעבדת מחקר, הצעתם להשתמש ב- אתanol - HOCH_2C כתוסף לדלק במקום ה- MTBE השני במחלוקת.
- א. הסבירו מבחינה כימית, מדוע יכול האתanol להוות תחליף ל- MTBE?
- ב. פרטו את השיקולים אשר הביאו לבחירת אתanol כתוסף לדלק במקום ב- MTBE.
- ט. על-פי האירוע שקרהתם, כיצד יראה, לדעתכם, גרפ של השתנות כמות ה- CO הנפלטה מכל רכב לאוויר כפונקציה של ריכוז ה- MTBE בדלק? עליו השערות אפשריות וצרפו שרטוטים. צרפו גם הסבר.
- ז. את תוסף הדלק MTBE מייצרים מחומר מתאנול ומתייל פרופן על-פי התגובה הבאה:



התגובה מתרכשת בנסיבות זיה חומצית.
לפניכם גрафים, שהתקבלו משני ניסויים שונים, המתארים את מהלך הייצור ה- MTBE מחומר מתאנול. שלו (על-פי התגובה שתוארה לעיל) עם הזמן.



- א. מה לדעתכם דומה ומה שונה בין הגрафים בניסוי 1 ובניסוי 2.
- ב. מהם עשויים לנבוע ההבדלים בין שני הגрафים?
- ג. חוקרים ביצעו את הניסויים 1 ו- 2 במטרה לבדוק את השפעתו של גורם מסוים על המשנה הבלתי. מה, לדעתכם, ביקשו החוקרים לבדוק? נטו לנתח את מטרת בדיקת החוקרים באמצעות שאלת חקר מדעית.
- מיהו המשנה הבלתי תלוי בניסויים ומיהו המשנה הבלתי?
 - אילו גורמים הותירו החוקרים קבועים? לשם מה?
 - על-פי שני הגрафים והשערה שלכם, מה לדעתכם הסיקו החוקרים מההבדלים שמצאו בין שני הגрафים?

