

Fizička hemija: nastavni program 2004. i na dalje Physical Chemistry: A Curriculum for 2004 and Beyond

Theresa Julia Zielinski^{*,†} i Richard W. Schwenz[‡]

Fakultet za hemiju, medicinsku tehnologiju i fiziku, Univerzitet Monmouth, West Long Branch, New Jersey, 07764,
tzielins@monmouth.edu i

Fakultet za hemiju i biohemiju, Univerzitet Northern Colorado, Greeley, Colorado, 80639,
Richard.Schwenz@unco.edu

Apstrakt: Obrazovanje iz fizičke hemije kombinuje sadržaj fizičke hemije sa pedagoškim dostignućima u nastavi. Apstraktnu prirodu sadržaja treba prevazići kreativnim rešenjima kako predavati i selektovati sadržaj u okviru vremenskog ograničenja nastavnog programa. U ovom radu bavimo se sadržajem fizičke hemije koji je potrebno obuhvatiti predavanjima i laboratorijskim vežbama, i pitanjem šta pedagogija sugerise o tome kako studenti uče i koje nastavne metode doprinose povećanju znanja studenata. Razmatra se i uključivanje tehnoloških nastavnih sredstava u nastavni program. Sugerisemo strukturu časa fizičke hemije sa brojnim nastavnim sredstvima, uključujući tradicionalno predavanje, zadatke koji se zajednički rešavaju, kompjuterski softver, moderno osmišljene laboratorije i šemu ocenjivanja koja podstiče učenje.

1. Uvod

Svako razmatranje nastave fizičke hemije u 21. veku zahteva definiciju fizičke hemije. Koristićemo onu koju je razvilo Francusko hemijsko društvo – Odeljenje za fizičku hemiju (Société Française de Chimie - Division de Chimie Physique). Francusko hemijsko društvo je napisalo [1],

Cilj fizičke hemije jeste razumevanje strukture, svojstava i transformacije materije, od makroskopskog opšteg ponašanja do mehanizama na molekularnom nivou. Uloga fizikohemičara jeste da prikupi, poredi i analizira eksperimentalne podatke iz svih grana hemije i da pravi modele za predviđanje. Kao takva, fizička hemija čini osnovu moderne nauke i pokretačka je sila dostignuća u veoma širokom rasponu oblasti. Bazirajući se na podacima i pojmovima iz hemije, fizike i matematike, fizička hemija biva stimulisana od strane, i doprinosi razvoju, raznorodnih naučnih oblasti poput medicine, molekularne biologije, biohemije, molekularnog inženjerstva, hemijskog inženjerstva, nauke o materijalima i geonauka.

Još opštije rečeno, fizička hemija je ono što rade fizikohemičari. Fizička hemija je doživela dramatične promene u domašaju discipline sa srazmernim povećanjem broja i tipa istraživačkih oblasti. Nastavni program fizičke hemije je takođe doživeo značajne promene od materijala iz udžbenika Glasstone-a [2], od čega se dosta nalazi u savremenoj opštoj hemiji, do velikog obima dostupnih materijala u 2004. [3-5]. Nastavna pomagala i učionice za fizičku hemiju su se takođe promenila od logaritamskih računala, logaritamskih tablica, table i krede do kalkulatora za crtanje grafika, kompjutera sa simboličkom algebram i softverom za računarsku hemiju, internet resursa i interaktivne, elektronske table (smart boards). Takođe se moraju uzeti u obzir i promene u shvatanjima studenata i našem razumevanju načina na koji studenti uče.

Uprkos povećanom sadržaju udžbenika, vreme određeno za fizičku hemiju u standardnom programu na nivou osnovnih studija hemije i dalje sprečava proučavanje svih preporučenih tema. Takođe postoji problem koliko temeljno može da se pređe bilo koja tema u 90 nastavnih sati kursa koji traje godinu dana, kako stepen pripremljenosti studenata za kurs određuje sadržaj i produbljenost studija, kako se hemijski pojmovi i pedagogija spajaju kako bi stvorili modernu sliku o fizičkoj hemiji dok se i dalje bavimo fundamentalnim temama. Moraju se dalje razmotriti razni nastavni programi koji zahtevaju kurs fizičke hemije. Oni su u rasponu oblasti od biologije, hemijskog inženjerstva i sudske medicine do prava. Postoji znatna razlika između kursa za mali

procenat studenata koji pohađaju fizičku hemiju kako bi postali fizikohemičari, kursa koji pruža opšti pregled onoga šta fizikohemičari rade i kursa koji pruža studentima priliku da koriste sredstva moderne fizičke hemije. Na kraju, zato što fizička hemija spaja kurseve fizike, hemije i matematike, to je kurs na kome studenti mogu da razviju složene veštine kritičkog mišljenja potrebne naučnicima koji rade na projektima interdisciplinarnog karaktera.

2. Polazne činjenice

Obrazovanje iz fizičke hemije se značajno promenilo u proteklih stotinak godina, baš kao što se i sama disciplina menjala. [6]. Prvobitno osnovana kao disciplina fokusirana na termodinamiku i elektrohemiju, oblast sada obuhvata podoblasti suviše brojne da bi se navele i doprinosi proučavanju skoro svih ostalih poddisciplina hemije, međudisciplinskih oblasti u okviru hemije i mnogih multidisciplinarnih oblasti čiji deo čini hemija.

Iako je obrazovanje iz fizičke hemije razmatrano od samog nastanka discipline [6-8], u ovom pregledu ćemo se fokusirati na ono što je objavljeno od 1980. Počinjemo sa rezultatima pozivne radionice Američkog hemijskog društva iz 1984. [9] u kojoj je grupa hemičara i hemijskih inženjera razmatrala stanje obrazovanja iz fizičke hemije, dala nekoliko preporuka o tome gde pojedini pojmovi pripadaju okviru fizičke hemije i sugerisala izbacivanje nekoliko tema iz nastavnog programa. Među ovim preporukama je bilo premeštanje elektrohemije u kurseve analitičke hemije, uključivanje lasera i kompjutera u nastavni program i upotrebu relevantnijih primera hemijskog inženjeringa. Rezultat radionice bila je knjiga sa referentnim materijalima za nastavnike fizičke hemije [10] koja opisuje mišljenja nekoliko hemičara i hemijskih inženjera o temama fizičke hemije, posebno u vezi dodirnih tačaka između hemije i hemijskog inženjerstva.

Rad "Problem sa fizičkom hemijom" [11] se 1992. ponovo suočio sa pitanjem šta treba uključiti u nastavni program fizičke hemije. Autori ovog rada su naveli da je veoma važno da nastavni program fizičke hemije odražava ono šta fizikohemičari rade i da nastavni program predavanja i laboratorijskih vežbi zahteva zamenu mnogih zastarelih vežbi savremenim eksperimentima primenom moderne tehnike i instrumenata. Kao dodatak tome, autori su preporučili pomeranje naglaske predavanja sa klasičnih oblasti kako bi se stvorio prostor za relevantne/aktuelne naučne primere i takođe za veći naglasak na kinetiku i kvantnu mehaniku. Istaknuti materijal treba da takođe u potpunosti uključi upotrebu molekularnog modeliranja, simulacije i softer za vizuelizaciju u nastavni program. Monografija koja sadrži materijale sa projekata finansiranih od strane NSF-a (Nacionalne fondacije za nauku) i Pew fondacije [12] pružila je korisne naznake za predavanja i detaljne eksperimentalne pojedinosti za niz laboratorijskih vežbi. Ovi eksperimenti su i dalje relevantni i mogu odmah biti usvojeni od strane nastavnika koji razvijaju osavremljeni nastavni program fizičke hemije za rad u laboratoriji.

Komitet za stručnu obuku (CPT) Američkog hemijskog društva je 2003. objavio revidiranu grupu smernica za osnovne studije fizičke hemije [13]. Ove smernice podrazumevanju fokusirani program na kraju koga će studenti razumeti osnovne pojmove fizičke hemije. Oni takođe treba da steknu jasno razumevanje međusobnog odnosa raznih delova fizičke hemije, kao i odnos prema drugim poddisciplinama hemije i raznih oblasti kojima fizička hemija pruža fundamentalnu podršku.

Kao deo projekta za sistemsku reformu nastavnog programa New Traditions (jedan od pet projekata sistemske reforme nastavnog programa hemije koji finansira NSF), grupa fizikohemičara se sastala kako bi razmotrila stanje i budućnost obrazovanja iz fizičke hemije [14]. Zaključili su da problemi postoje unutar nastavnog programa, naročito zbog preterane upotrebe matematike i

srazmerno nedovoljnog naglaska na konceptualni razvoj. Kao dodatak tome, vrsta nastave koja se primenjuje u kursu treba biti više usmerena ka studentima putem interaktivnih strategija učenja.

Čak i kako se nastavni program modernizovao, novi razvoji u teorijama učenja, tehnologiji koja se primenjuje u učionici i samoj nauci su ponovo doveli do zahteva za uključivanjem dodatnih tema u nastavni program. Među njima su hemija polimera [15, 16], nauka o materijalima [17-19] i nanomaterijali, oblasti koje sve zahtevaju temeljno razumevanje fizičke hemije.

3. Savremena fizička hemija

Nedavni napredak u profesionalnim obavezama fizikohemičara su za posledicu imali zahteve za uključivanje još više materijala iz savremenih istraživačkih metoda u nastavni program predavanja i laboratorijskih vežbi fizičke hemije. Bez nabiranja svih ovih projekata, vredi razmatrati nekoliko dostignuća koja će najverovatnije uticati na nastavni program.

Teoretska dostignuća i razvoj hardvera i softvera su promenili prirodu hemije razvojem novih modela i primenom postojećih modela na složenije sisteme. Razvoj računarskih metoda funkcionala gustine (density functional techniques) [20] za računanje energije molekula je imao ogroman uticaj na način izračunavanja. Kod ovih računarskih metoda, slika molekularne orbite je odbačena u korist direktnog utvrđivanja gustine elektrona unutar molekula. Set jednačina koje opisuju gustinu elektrona se rešava direktno, umesto korišćenja kompleksno konjugovane talasne funkcije. Kada nisu potrebni podaci o konkretnim orbitalnim energijama, ovi proračuni su se pokazali efikasnijim od tradicionalnih ab initio metoda, pri čemu ipak pružaju rezultate koji su prikladni za poređenje sa eksperimentom. Još jedan važan pomak, bolje računarske metode i veća snaga kompjutera, su skratili vreme i uloženi trud. Smanjen je i broj aproksimacija potrebnih da bi se izvršilo računanje [20]. Sada fizikohemičari mogu rutinski da koriste sredstva kvantne mehanike za proučavanje srednje velikih molekula i metode klasične mehanike kako bi ispitali ravnoteže konformacija u biomolekulima [21]. Kao dodatak tome, teoretičari kao i eksperimentatori su u mogućnosti da ispituju kvantnu dinamiku reaktivnih sistema do sve većih detalja, čak do nivoa dinamičkih rezonanci pojedinih kvantnih stanja pri određenim energijama [22].

Kako se svakodnevno širi interes za velike molekule i veće skupine molekula, potrebno je razvijati i odgovarajući teoretski tretman. Klasična mehanika pruža upravo takvo sredstvo, putem razvoja polja sile među atomima unutar i između molekula. Molekularna mehanika i molekularni dinamički algoritmi se koriste za pravljenje modela molekula uravnotežne strukture. Ovo se može koristiti za razumevanje spektra tema od konformacione ravnoteže proteina [23, 24] do rasejanja svetlosti od strane malih molekula u rastvoru [25].

Proučavanje dinamike molekularnih sudara je znatno napredovalo razvojem brzih metoda ispitivanja atomskog kretanja na vremenskoj skali od pikosekunde do femtosekunde. Na vremenskoj skali femtosekunde, postaju dostupni razmatranju detalji atomskog kretanja tokom sudara [26], kao i efekti kvantne interferencije u okviru posmatranog stanja [22]. Drugi važan momenat jeste mogućnost da se posmatraju i oslikaju reakcije na površinama. Razvoj metoda za ispitivanje površina morfoloških eksperimenata može da pruži uvid u delovanje katalitičkih površina i važnost dislokacija na površinama [27].

Kako se polje fizičke hemije širilo, oblasti na koje fizička hemija ima uticaj sada se kreću od otkrića i karakterizacije fulerena [28] i Boze-Ajnštajnovih kondenzata [29] do modeliranja složenih atmosferskih sistema [30] i dizajna reaktivnih sistema [30, 31]. Čak i dobro poznato polje termodinamike doživljava renesansu primenom kod materijala na mikro i makroskopskim nivoima [32].

4. Pitanja nastave

a. Osnovni pojmovi i kritičko mišljenje u savremenoj fizičkoj hemiji. Koji su ciljevi kursa fizičke hemije? Prvo, fizikohemičari moraju da prenesu ključne ideje ove discipline, a da pritom ne izgube iz vida da se celokupni sadržaj ne može uključiti u kurs koji traje godinu dana. Drugo, nastavnici moraju da razviju kod studenata osnovne veštine za primenu matematičkih modela i razumevanje njihovog značaja i ograničenja. Treće, nastavnici fizičke hemije imaju zadatak da dalje razvijaju kod studenata one kritičke veštine razmišljanja koje se odnose na razumevanje toga kako hemija funkcioniše.

Ključne oblasti osnovnog nastavnog programa uključuju termodinamiku, hemijsku kinetiku, kvantnu hemiju i osnovnu ravnotežnu statističku mehaniku. Ove oblasti su obično podeljene u semestre pri čemu su termodinamika ili kvantna hemija dominantni, a statistička termodinamika ili dinamika se sabijaju u nekoliko nedelja. Termodinamika obuhvata tradicionalnu skupinu funkcija stanja, idealne i realne gasove i hemijsku i faznu ravnotežu. Teme kvantne hemije uključuju nešto istorijskih osnova, Šredingerovu jednačinu, modelne sisteme, vodonične i multielektronske atome, modernu teoriju molekularnih orbita i spektroskopiju. Hemijska kinetika obično sadrži kinetičku molekularnu teoriju, transportna svojstva, reakcije jednostavnih redova, teoriju prelaznog stanja i teoriju aktiviranog kompleksa, dok se statistička termodinamika obrađuje sume stanja kao proizvoda elektronskog, translacionog, rotacionog i vibracionog doprinosa. Kao dodatak tome, neki bi se zalagali za uključivanje hemije polimera, naročito biomakromolekula, hemije čvrstog stanja, kristalografije [33, 34], teorije grupa ili čak i uvoda u molekularnu mehaniku ili molekularnu dinamiku [35, 36]. Bilo bi izuzetno zanimljivo proučavati kinetiku koristeći molekularnu dinamiku, najnoviju primenu klasičnih koncepata, kao fokus veoma modernog kursa.

U fizičkoj hemiji, od nastavnika se takođe traži da pruže osnovni pregled matematike i da preuzmu odgovornost za ispunjavanje uslova za pisani deo kursa za diplomce putem laboratorijskih zadataka koji zahtevaju veliku količinu pisanog rada. Jasno je da bi nastavnik morao veoma brzo da priča, koristi najbolja elektronska nastavna pomagala i deli brojni štampani materijal studentima kako bi ispunio sva moguća očekivanja od kursa. Posledice takvih postupaka su retko pozitivne, naime otuđuju studente i frustriraju nastavnike, dovode do loših rezultata na ispitima i slabo usvajanje koncepata. Ovakve posledice navode na potragu za drugačijim i efikasnijim nastavnim metodama.

Jedan faktor koji utiče na to kako predajemo jeste mera u kojoj studenti razumeju ono šta ih učimo, tj. da su pojmovi fizičke hemije uvreženi u um studenta i povezani sa prethodno usvojenim znanjem. Kako bi pokazali da su pojmovi usvojeni i povezani, studenti moraju da pokažu da razumeju značenje tekstovnog materijala, matematičkih jednačina i tekstuelnih zadataka sa predavanja i laboratorijskih vežbi. Pokazivanje sposobnosti razumevanja različitih načina predstavljanja koncepata i izvođenja su dalji dokazi logičke/apstraktne sposobnosti rezonovanja potrebne za uspeh u fizičkoj hemiji.

Stoga još jedan cilj kursa fizičke hemije jeste da pomogne studentima da razviju logičko razmišljanje dok stimuliše njihovu sposobnost obrađivanja apstraktnijih informacija. Ovaj cilj je širi od složenog pravilnog razmišljanja ka čemu je usmerena tradicionalna nastava rešavanja problema [37-39]. Oblikovanje složenog pravilnog razmišljanja na predavanjima, gde je fokus na predstavljanju koncepata i algoritama za rešavanje standardnih problema, je lako. Logičko razmišljanje zahteva sposobnost praćenja putanje od principa do zaključaka. Kritičko razmišljanje nadmašuje ovo zahtevajući rasuđivanje o validnosti dokaza i analizu svih ograničenja zaključka ili modela [40]. U fizičkoj hemiji, logičko razmišljanje se korsiti za stvaranje modela u matematičkom

obliku dok kritičko razmišljanje dopušta razmatranje raspona primenljivosti modela pri čemu se pokušava da se dođe do njegovog najelegantnijeg oblika. Nije dovoljno govoriti studentima o oblastima važenja i granicama, oni moraju da vežbaju primenu sopstvenih misaonih procesa kako bi usvojili i efikasno koristili ovu veštinu.

Ovde se krug završava. Osnovni pojmovi se moraju predavati na takav način da studenti razviju neophodne misaone veštine. Odabrane teme moraju da dopuste dublje razumevanje i sadržaja i intelektualnih procesa. Izvodjenja moraju biti malobrojna i vršena samo za najvažnije pojmove. Na primer, ne treba oduzimati vreme od časa radi izvođenja Poazejeve jednačine za laminarni protok ili jednačine sniženja tačke mržnjenja.

b. Vremenska ograničenja i selektivnost nastavnog programa. Važno pitanje za nastavnike fizičke hemije jeste šta predstaviti u okviru obima jednogodišnjeg kursa. Očigledno, nije moguće predstaviti sve pojmove sadržane u tekstovima fizičke hemije studentima u okviru dopuštenog vremena. Vremenska ograničenja postaju čak i važnija u formama učenja sa interaktivnom nastavom ili kooperativnim učenjem. Ključ leži u odgovarajućem odabiru tema.

Raspon aktivnosti kojima se bave savremeni hemičari i uloga fizičke hemije u radu svih hemičara pruža neke smernice u vršenju izbora nastavnog programa. U bilo kojoj grupi od 100 studenata hemije samo mali procenat će se baviti fizičkom hemijom. Ostali će postati organski hemičari, biohemičari, analitički hemičari, lekari ili zubari, itd. Studenti i njihovo potencijalno zanimanje određuje odabir materijala. Teme uključene u nastavni program treba da budu one koje su ključne za uspeh studenta kao naučnika koji misli. Kurs koji je usmeren na osnovne pojmove termodinamike i ravnoteže sa opširnim proučavanjem kinetičke teorije i hemijske kinetike i jakim naglaskom na kvantnoj hemiji koja se primenjuje u spektroskopiji bi bio odličan. Nema potrebe za detaljnim proučavanjem problema velikog broja čestica u potencijalnoj jami. Iako je jasan pregled rešenja atoma vodonika ključan, kompletni podaci se mogu prebaciti u dodatak osnovnih studija. Važniji je razvoj razumevanja funkcije verovatnoće raspodele elektrona koja dovodi do konceptata vezivanja. Student koji završava godinu dana fizičke hemije treba da poznaje dovoljno kvantne hemije da bi razumeo osnovne pojmove koji se koriste u molekulskom modeliranju i računskoj hemiji. Studenti treba da znaju zašto postoji osnovni set i neke od računskih metoda i njihova ograničenja [41]. Oni treba da znaju šta je polje sile i da budu u stanju da koriste model harmonijskog oscilatora za istezanje i savijanje veza. Treba da razumeju prirodu potencijalnih energetske površine kako se koriste u organskoj hemiji i da budu u stanju da lociraju prelazna stanja i da tumače sedla na površima potencijalne energije. Kao dodatak prethodno spomenutim pojmovima, jak naglasak na spektroskopiji i njenoj primeni u rešavanju hemijskih problema je ključan za sve hemičare.

U nastavi za inženjere treba da postoji veći naglasak na standardnoj hemijskoj termodinamici i tradicionalnim temama ravnoteže faza. Ozbiljna doza hemijske kinetike, uključujući upotrebu stohastičkog modeliranja reaktivnih sistema bi bila veoma poželjna [42]. Studenti inženjerstva treba da steknu čvrstu osnovu modernih računskih tehnika sa naglaskom na upotrebu simboličke algebre i ispitivanju matematičkih metoda. Kvantna hemija treba da se bavi matematičkim modelima koji leže u osnovi svake spektroskopske tehnike. Studenti hemije treba da budu dobro obučeni u ovom okvirno opisanom nastavnom programu.

Na kursu sa velikim brojem studenata biohemije, postoji potreba za većim naglaskom na termodinamici i primeni spektroskopije na biohemijske probleme. Studenti moraju biti dobro upoznati sa upotrebom standardnog fiziološkog stanja. Fazno pravilo i elektrohemija postaju manje važni osim kako se ne primenjuju pri određivanju konstanti ravnoteže. Polimerske i

makromolekulske teme treba da dominiraju u korišćenim primerima. Veći naglasak na molekularnom kretanju, membranskom transportu i koligativnim svojstvima zajedno sa modernim tehnikama za određivanje molekulske težine makromolekula jeste presudan. S obzirom na važnost kristalografije [34] i masene spektrometrije [43] u proučavanju makromolekula, temeljan uvod u ove tehnike ne sme biti zanemaren. Nekoliko novijih tekstova [44, 45] sadrži pogodan izbor tema za osnovni kurs fizičke hemije ili biofizičke hemije.

c. Osnove matematike i fizike. Matematička priprema za studente fizičke hemije je već dugo važno pitanje [7, 46-48]. Grupa hemičara razmatrala je odnos između nastavnih programa matematike i hemije u 2000. Među pozvanim hemičarima bili su fizikohemičari koji u velikoj meri koriste matematiku u svojim predmetima i istraživanjima. Očito, solidna osnova iz matematike je potrebna za sve studente hemije. Njihova preporuka [49], kao i ona od strane ACS CPT-a, je bila da svi studenti hemije treba da uče račun kroz funkcije više varijabli. Za potencijalne doktorante, dodatni kursevi iz matematike, uključujući linearnu algebru i/ili diferencijalne jednačine, se veoma preporučuju.

Tokom skupa 2000, izneti su predlozi obogaćivanja matematičkih osnova za studente hemije. Odgovornost za integralni i diferencijalni račun, stvaranje, primenu i tumačenje grafikona, pravljenje procena i pretpostavki, upotrebu iterativnih tehnika, rukovanje različitim koordinatnim sistemima, primenu numeričkih metoda, upotrebu sistema brojeva i manipulaciju 3-D geometrijom leži u potpunosti na matematičarima koji predaju računarstvo i druge kurseve. Studenti moraju da otpočnu kurseve fizičke hemije sa fleksibilnim veštinama i sposobnošću da nadgrade te veštine po potrebi. Malo studenata će doći na fizičku hemiju sa dobro uvežbanim matematičkim veštinama jer kursevi matematike i fizičke hemije mogu biti vremenski razdvojeni.

Fizikohemičari ne treba da posmatraju kurs fizičke hemije kao kurs matematike. Imamo odgovornost da upoznemo naše studente sa dodatnim matematičkim pojmovima u određenoj meri, ali ne i da obučavamo matematičare. Prvo moramo da podsetimo studente na osnovne veštine računanja potrebne svim studentima fizičke hemije. Totalni i parcijalni diferencijali se mogu uvesti tokom razvijanja tema kursa. Tehnike crtanja grafika treba uvoditi tokom celog kursa. Studentima više koristi ako su u stanju da tumače i primenjuju grafike nego što im služe izvodjenja zakona koji se uče na opštoj hemiji. Ne postoji razlog da današnji studenti vrše računanje rukom, poput primene Simpsonovog pravila. Potrebno je rutinski primenjivati brze procene oblasti ili softverski generisane kvantitativne procene [49]. Studenti moraju biti upoznati sa statistikom (više od nivoa koji se primenjuje na kursovima kvantitativne analize) koja uključuje proizvoljnost, verovatnoću, distribucije, Monte Karlo metode kako se primenjuju u hemiji [50] i multidimenzionalne Gausovske i Maksvel-Bolcmanove raspodele. Studenti moraju da razviju sposobnost da vizuelizuju sisteme na molekularnom nivou i da primenjuju modele koji predstavljaju procese na molekularnom nivou. Ostale teme za uvođenje studentima u kontekstu fizičke hemije su upotreba operatora, matričnog računa, osnovnih funkcija, ortonormalnih funkcija, funkcijske simetrije i linerane i nelinearne tehnike fitovanja krivih.

d. Priroda reforme računarskih metoda. Nema sumnje da se nastava fizičke hemije oslanja na razumevanje fizike i matematike. Tradicionalno predavani kursevi se dosta oslanjaju na sposobnost studenata da vrše algebarske proračune, da analitički procenjuju izvodjenja i višestruke integrale, da rešavaju neke jednostavne probleme diferencijalnih jednačina, u linearnoj algebri i kompleksnim varijablama. Obično, matematika koja je potrebna za poslednjih nekoliko tema se predaje u kontekstu fizičke hemije u kom se koristi.

Tokom 1980tih nastava matematike je bila pod jakim uticajem finansiranog projekta reforme računarstva (NSF), reforme koja sada takođe prožima nastavu matematike u godinama koje

prethode i slede nastavu računarstva [51]. Studenti "novog računarstva" obično provode manje vremena rešavajući probleme analitički, fokusirajući se umesto toga na geometrijsko značenje prvog izvoda kao nagiba krive i integrala kao površine ispod krive. Takođe, studenti koji uče po ovom novom nastavnom programu lakše koriste softver za simboličku algebru, kao što su Mathematica, Maple ili Mathcad ili za crtanje grafika jer oni obično čine sastavni deo nastave. Postoji manji naglasak na nekim veštinama, naročito veštini algebarskih izračunavanja. Ostaje pitanje da li novi način nastave računarstva povećava sposobnost studenata u tradicionalno predavanom kursu fizičke hemije. Kod kurseva koji naglašavaju numeričke metode za rešavanje problema, očekuje se da nova vrsta nastave poboljša sposobnost studenata da izvršavaju zadatke koji se od njih očekuju. S druge strane, manji naglasak na algebri može da oteža studentima da prate logičko predstavljanje matematičkih modela u standardnim tekstovima fizičke hemije.

5. Laboratorijske vežbe

a. Dihotomija između preciznosti merenja i razumevanja koncepata. U prošlosti, jedan razlog za korišćenje matematike u fizičkoj hemiji je bio naglasak na redukciji broja potrebnih podataka, analizi grešaka i statističkoj analizi potrebnoj za obuku hemičara. Studenti su provodili mnoge sate vršeći računanja koja se sada rutinski obavljaju koristeći odgovarajući softver. Nije jasno da li su te laboratorijske vežbe imale za posledicu bolje razumevanje analize grešaka ili koncepata koji su u osnovi prikupljenih podataka. Ostatak ovog pristupa jeste naglasak na preciznosti prikupljanja podataka naročito u pripremi rastvora i upotrebi volumetrijskih posuda. Kao primer navodimo eksperiment hidrolize metilacetata sa brojnim titracijama i eksperimente koji se fokusiraju na upotrebi viskozimetara, piknometara i merača površinskog napona. S obzirom na veliki raspon industrijskih i akademskih struka za fizikohemičare, diskutabilno je da li eksperimenti koji se fokusiraju na merenje fizičkih svojstava i daljoj analizi grešaka mnogo doprinose nastavnom programu za rad u laboratoriji. Detalje analize grešaka je najbolje ostaviti kursevima fizike i analitičke hemije u laboratoriji i onda ih preneti na kurs fizičke hemije. Laboratorija fizičke hemije treba da bude mesto gde se ispituju hemijski pojmovi zasnovani na podacima dobijeni putem pažljivih eksperimenata. Dobijeni rezultati uključujući i analizu grešaka nemaju smisla ako studenti ne razumeju hemijske pojmove.

S obzirom da laboratorijske vežbe iz fizičke hemije treba da budu konceptualno osmišljene, onda treba postaviti pitanje koje pojmove treba uključiti i kako ih razviti. Većina katedri mora maksimalno da iskoristi ograničena sredstva. Stoga nastavni program moderne laboratorije može biti formiran oko nekoliko promišljeno odabranih instrumenata uključujući UV-VIS spektrometre, FTIR spektrometre, kalorimetre, kompjutere, računarski hemijski softver i nešto laserske opreme. Drugi instrumenti, kao što su polarimetar i spektrometar za fluorescenciju, bi bili takodje korisni. Nastavno osoblje može koristiti i druge instrumente, na primer FTNMR i GC-masene spektrometre. Katedre sa ograničenim sredstvima mogu da se udruže kako bi imale pristup NMR-u visoke rezolucije [52]. Cene malih lasera čvrstog stanja i aparata za cirkularni dihiroizam i Ramanskih spektrometara ih čine uređajima prikladnim za nastavu na osnovnim studijama [12, 53, 54].

b. Tradicionalni fizikohemijski eksperimenti. Ne postoji razlog za odbacivanje tradicionalnih eksperimenata. Neki od njih su odličan izbor za tumačenje važnih zakona, pri čemu pomažu nastavnicima da se ne izgube u pokušajima da održe korak sa nastavnim programom koji se stalno razvija. Među njima su analiza HCl/DCI IR spektra, NMR određivanje keto-enolne tautometrijske ravnoteže i UV-VIS eksperimenta. Analiza podataka za mnoge druge standardne eksperimente može biti prerađena da obhvatata veću primenu kompjutera. Na primer, kinetika

inverzije saharoze se može osavremeniti uključivanjem nelinearnog fitovanja krivih u analizu podataka i izostavljanjem merenja optičke rotacije za beskonačno vreme. Šabloni za nelinearno fitovanje krivih se lako razvijaju koristeći softver za simboličku algebru. Još jedan primer starijeg eksperimenta koji se može osavremeniti jeste viskozimetrijsko određivanje molekulske težine polimera, polistirola ili proteina - goveđeg seruma albumina, u rastvoru. Ova vrsta eksperimenta je naročito pogodna za laboratoriju koja čini deo programa biohemije. Primeri potencijalno odgovarajućih eksperimenata sa polimerima mogu se naći u literaturi [55]. Među klasičnim primerima su primena polarimetrije u određivanju temperature proteinskog prelaza heliks-nasumična zavojnica [56] ili titrimetrije i UV-VIS spektroskopije za određivanje konstante ravnotežne za cistein [57]. Na kraju, nastavni program može biti poboljšán upotrebom simulacionog softvera za predavanje složenih zakonitosti dinamike i modeliranja [42, 58-60].

c. Moderne tehnike. Studenti hemije nalaze posao u raznim oblastima i moraju da se oslone na veštine razvijene tokom osnovnih i postdiplomskih studija. Učenje modernih tehnika fizičke hemije je ključno za sve studente. Studenti treba da iskuse aktivnosti izvođenja zakonitosti koje uključuju upotrebu lasera, kinetičkih metoda i softvera za računarsku hemiju. Čak i oni koji ne planiraju da budu fizikohemičari moraju da steknu nešto iskustva sa softverom za modeliranje i ograničenjima računarskih metoda pre primene ovih pomagala na istraživačkim projektima.

Laboratorija je idealno mesto za uvođenje molekulskog modeliranja u nastavu fizičke hemije osnovnih studija. Modeli molekularne mehanike primenjuju ključne pojmove fizike i matematike na hemijski problem. Izračunavanje energije molekula omogućavaju procenu promene slobodne energije, konstanti ravnoteže i reakcionih koordinata. Na primer, kada studenti uče o vodoničnim vezama koristeći softver za modeliranje sa odgovarajućim metodama vizuelizacije, mogu se usredsrediti na strukturu i svojstva važnih molekula i makromolekula. Tavki pristupi su važni pošto se sve veći broj hemičara obučava za rad koji je na granici između biologije i hemije. Studenti treba da nauče osnovne termine koji se koriste u modernoj računarskoj hemiji na kursu fizičke hemije. Savremeni hemičar koji čita literaturu mora da zna šta je Gausovska funkcija ili kako se koriste STO-nG funkcije, itd. za stvaranje molekulskih orbitala [61-66].

Povezivanje računarske hemije sa spektroskopijom je prirodni cilj savremene laboratorije fizičke hemije osnovnih studija. Eksperiment sa UV-VIS spektrima konjugovanih boja sa kvantno-mehaničkim računanjem energetskog nivoa čestice u pravougaonoj potencijalnoj jami koji je praćen modeliranjem strukture familije boja koristeći procenjenu vezu i širinu potencijalne jame dovodi do toga da studenti steknu bolje razumevanje HOMO-LUMO koncepta i njihovog odnosa sa UV-VIS spektroskopijom. U drugim eksperimentima, studenti mogu da računaju vibracione frekvencije za grupu molekula, da ispituju normalne tipove vibracije i istražuju prelazna stanja u proučavanju reakcionih koordinata.

Tradicionalni FTIR rotacioni/vibracioni spektar za HCl se lako izračunava. Pokazujući efekat svakog poboljšanja matematičkog modela spektra koristeći Mathcad, studenti stižu bolji uvid u efekte Bolcmanove raspodele, degeneracije i sume stanja na spektralne karakteristike. Dalje studije mogu da uključe centrifugalni doprinos istežuće vibracije. Čak bi i prošireno ispitivanje Morzeovog potencijala povećalo pojamovni značaj eksperimenta, uz mali dodatni trud iznad onog potrebnog za dobijanje softvera i lako podesivih šablona. Prednost jeste da su studenti u svakom koraku aktivno uključeni u otkrivanje značaja svake komponente modela i da znatno uvećavaju svoje razumevanje IR spektroskopije.

U skorije vreme, usavršavanja kompjuterskih simulacija dopuštaju studentima da ispituju i stižu razumevanje vremenski zavisnih spektara koristeći Mathcad šablon za modeliranje femtohemijske laserske spektroskopije [67]. Ovde važna, a privlačna studentima, jeste animacija vremenske

evolucije naseljenih stanja I_2 molekula ekscitovanih impulsnim laserom. Ova vežba je prirodni dodatak proučavanju zasnovanom na talasnim dužinama „vrućih traka“ I_2 uključujući i Frenk-Kondonove faktore [68-71].

Spektroskopija i termodinamika se mogu istovremeno istraživati putem fizičko-hemijskih eksperimenata. Ravnoteže kompleksa između fluorescentnih boja i β -ciklodekstrina se mogu proučavati kao funkcija temperature praćenjem spektralnih pomaka [72-74]. Takvi eksperimenti se mogu sprovoditi korišćenjem CD fluorescentnog spektrometra [74]. Alternativa ciklodekstrinskom eksperimentu za određivanje konstante ravnoteže kao funkcije temperature je tradicionalni eksperiment keto-enolne tautomerije koristeći FTNMR visoke rezolucije [52].

Na kraju, laserska spektroskopija treba da bude deo laboratorije osnovnih studija fizičke hemije. Takvi eksperimenti se mogu naći u literaturi [12]. Jeftini laserski sistem takođe može da omogućiti studentima uvod u Ramanovu spektroskopiju [53, 54].

d. Zašto predajemo laboratorijske kurseve i šta bi studenti trebalo da nauče u laboratoriji?

Laboratorijski kursevi imaju višestruku svrhu u nastavi fizičke hemije. Prvi je učenje osnovnih manipulativnih veština. Veštine, uključujući pravilne tehnike pravljenja rastvora, merenja i analiza statističkih podataka, su preduslov za uspeh u fizičkoj hemiji. Iskustvo u korišćenju instrumenata sa kompjuterskim interfejsima se razvija i kroz kurseve fizičke hemije i instrumentalne analize. Druga svrha jeste upoznavanje studenata sa složenijim spektroskopskim tehnikama i preciznim merenjima fizičkih svojstava. U laboratoriji fizičke hemije studenti rutinski koriste instrumente uključujući FTIR i UV-VIS spektrometre u primenama pored dobijanja spektra, određivanja jedinjenja ili dobijanja njegove koncentracije. Fokus u fizičkoj hemiji se pomera ka suštinskom razumevanju modela koji su osnovi raznih spektroskopskih metoda. Treća svrha laboratorije jeste da pruži studentima priliku da vrše složenije eksperimente koji zahtevaju više nivoa logičkog razmišljanja i integraciju brojnih koncepata. Fokus više nije na tumačenju vrste i razloga za konkretne rezultate dobijene instrumentalnim metodama. U fizičkoj hemiji, eksperimenti se stavljaju u širi kontekst. Nekoliko hemijskih koncepata se može kombinovati u jedan eksperiment. Česti su detaljni laboratorijski izveštaji po uzoru na članke iz časopisa [75]. Nadalje slede primeri laboratorijskih aktivnosti sa širim kontekstima.

U proučavanju kompleksiranja boje sa β -ciklodekstrinom, studenti prave razliku između apsorpcione i fluorescentne spektroskopije, potvrđuju da Berov zakon važi za fluorescentnu spektroskopiju i određuju konstantu ravnoteže za reakciju kompleksiranja. U ovoj tački, spektroskopija i termodinamika se stapaju sa standardnim analitičkim tehnikama, uključujući i nelinearno fitovanje. Kao dodatak tome studenti proučavaju konstantu ravnoteže kao funkciju temperature da bi se uveli dodatni termodinamički pojmovi. Tumačenje znaka ΔH i ΔS daje studentima uvid u svojstva bojenih grupa koja deluju na istim osnovnim molekulama [72-74].

Još jedan primer jeste ispitivanje međuzvezdanih klastera ugljenika koristeći ab initio računarske metode [76]. Studenti proučavaju grupe C_3 , C_4 i C_5 konstruišući izomere, predviđajući toplotu nastajanja koristeći MO proračune, određujući najverovatnije kandidate za podudaranje posmatranih spektara sa izračunatim, optimizujući geometriju odabranih izomera i predviđajući vibracione frekvencije. Aktivnosti ovog tipa kombinuju mnoge elemente moderne fizičke hemije. Studenti koriste i razmatraju prikladnost različitih nivoa molekulano-orbitalnih izračunavanja. Oni određuju energetske minimume i sedla na osnovu izračunatih vibracionih frekvencija. Na kraju projekta, studenti biraju određeni C_5 izomer kao onaj koji su astronomi opazili.

Atmosferska hemija može biti integrisana u nastavu fizičke hemije koristeći ciljni eksperiment sa matematičkim modeliranjem. Harvey i Sweeney primenjuju ovaj pristup Čepmanovom ciklusu za

razlaganje ozona [77, 78]. Prvo, studenti koriste istovremeno rešavanje jednačina u Mathcad-u da bi ispitali efekte temperature, ukupnog pritiska, početne koncentracije, na ciklus. Nakon toga sledi složeniji rad koji proširuje ispitivanje na efekte NO_x , HO_x i ClO_x u ozonskim reakcionim ciklusima. Kroz sve to, šabloni Mathcad-a pomažu studentima da se fokusiraju na hemijske zakonitosti i da steknu uvid u kompleksne matematičke prikaze zanimljivih hemijskih sistema a da ne moraju da razvijaju složene sisteme diferencijalnih jednačina, jer bi to bila više matematička vežba nego doprinos razumevanju hemijske suštine. Još jedna složenija vežba je istraživanje doprinosa Cl_2O_4 u stratosferskom razlaganju ozona. U ovom projektu studenti primenjuju teoriju grupe, spektara iz literature, RHF kalkulacije sa različitim osnovnim setovima i MP2/6-31G(d) nivo kalkulacije za određivanje najverovatnije strukture Cl_2O_4 i za predviđanje spontanosti moguće reakcije koja uništava ozon [79].

e. Ispitivanje, otkrivanje i potvrđivanje. Važna karakteristika moderne laboratorije fizičke hemije se razvija iz primera datih u prethodnom odeljku. Svaki primer se zasniva na ciljnom ispitivanju i otkriću hemijski zanimljivih zakonitosti. Ni jedan od ovih eksperimenata nije potvrda klasičnih postojećih podataka iz nekadašnjih eksperimenata za gustinu, viskozitet i površinski napon. Svaki eksperiment uključuje upotrebu spektroskopije i modernih računara uključujući i ab initio kalkulacije i/ili matematičko modeliranje što dovodi do dubljeg razumevanja primenjenog hemijskog modela.

f. Cena sprovođenja nastavnog programa. Iznenadjuće, cena sprovođenja modernizovanog nastavnog programa fizičke hemije je manja nego što bi se moglo pomisliti. Većina katedara ima nešto od potrebnih instrumenata. Pristup kompjuterima je retko kada problem. Cena po kompjuteru je manja od 1000 dolara uključujući i dovoljno velike monitore, operativne sisteme i softver poput programskog paketa MSOffice. Moderni nastavni program takođe zahteva softver za računarsku hemiju poput Spartan [80], Gaussian [81], CAChe [66] ili Hyperchem [63], dodajući još od 500 do 1000 dolara po kompjuteru. Mathcad [82], Maple [83] ili Mathematica [84] dodaju još 500 do 1000 dolara po kompjuteru. Ostali softver za predavanje osnovnih koncepata molekularnog modeliranja i računanja je dostupan na internetu. Takođe, pošto mnoge škole već imaju umrežene verzije softvera koje koriste katedre za inženjerstvo ili matematiku, mnogi studenti su već upoznati sa njima. Kursevi fizičke hemije mogu da iskoriste ova sredstva. Kada se cena softvera za simboličku algebru umanji za njen vek trajanja i prema broju studenata, konačan trošak za katedru po studentu je približan onome što se izdvaja za potrošni materijal ili hemikalije. Učinak, pak, je neprocenljiv.

6. Pedagogija

Postoji nekoliko relevantnih pedagoških pitanja za razmatranje, naime, modeli učenja studenata, metodi nastave, primena ciljeva i zadataka i procena.

a. Konstruktivistički model. Konstruktivistički model je nastavak rada Piaget-a koji se može sažeti u ovom iskazu: znanje se konstruiše u mozgu onoga koji uči [85, 86]. Ovaj iskaz podrazumeva da učenje zahteva aktivno stanje uma. Model je potvrđen iskustvom – aktivni studenti uče više od pasivnih. Takođe objašnjava zašto studenti zadržavaju različita shvatanja koja su otporna na nastavu naročito putem predavanja. Literatura nam takođe govori da ako oni koji uče ne povežu pojmove sa već postojećim strukturama znanja, ovi pojmovi se odbacuju [40, 87]. Nalaze stručnjaka iz obrazovanja kao što su Piaget [88], Bloom [89], Perry [90], King i Kitchner [91], Paul [92], Schulman [93] i Herron [94] treba uvesti u praksu u učionici. Važnost nastavnih metoda "znanje u ruke/znanje u glavu" (hands on/minds on) potiče od istraživanja vršenog u nastavi

fizike od strane Hestines-a [95, 96] čija su istraživanja koristeći Force Concept Inventory (procena koliko su studenti usvojili pojmove iz fizike) pokazala da studenti ne usvajaju pojmove ili prelaze sa Aristotelovskog u Njutnovski okvir shvatanja fizike tako što pasivno slušaju predavanja. Studenti su morali da aktivno učestvuju u izgradnji ovih koncepata i da ih uključuju u svoje intelektualne okvire.

Kako bi došlo do učenja, učenik mora da organizuje svoje iskustvo prema sopstvenom konceptu. Učenje postaje unošenje novih podataka u stare misaone okvire. Ona iskustva koja ne odgovaraju postojećim okvirima dovode do modifikovanja starih znanja. Znanje (pojmovi, ideje, teorije i modeli) se ponovo grade i podležu daljem testiranju. To je naročito važno za studente fizičke hemije kojima stalno dovode u pitanje njihova predubeđenja sa ranijih kurseva hemije kada se od njih traži da konstruišu logičko-matematičke modele prirode. Ovaj tip konstruisanja znanja se ne može preneti u celini iz mozga predavača u mozak studenta [97]. Zapravo, predavač mora da se pretvori u nekoga ko pomaže usvajanje znanja, ko stvara sredinu gde može doći do izmena postojećih okvira.

b. Perry-ev model. Nekoliko modela intelektualnog razvoja studenata se može koristiti kada govorimo o nastavi i učenju studenata. Možda najkorisniji je predložio Perry [90] na osnovu proučavanja muških studenata na Harvardu. Slična studija za žene sprovedena je od strane Belenky et al. [98]. Ideje su kasnije primenjene na nastavu hemije [99, 100].

Prema Perijevom modelu (kako su ga prilagodili Belenky et al.), studenti se kreću nizom od devet stupnjeva tokom svoje akademske karijere. Prvih pet stupnjeva se odnose na razvoj unutar discipline, dok se četiri kasnija stupnja odnose na razvoj etike i identiteta. Četiri stupnja od važnosti za razvoj mladih muškaraca (žena) hemičara su: dualizam (primljeno/prihvaćeno znanje), mnogostrukost (subjektivno znanje), relativizam (proceduralno znanje) i posvećenost (konstruisano znanje). Dualista smatra nastavnike i udžbenike krajnjim izvorom tačnih informacija i oni su jedina istina. U stupnju mnogostrukosti istina je mnogo proizvoljnija i razne istine su podjednako važne. U relativističkom stupnju studenti su u stanju da procesiraju i prate procedure i primenjuju "pravila prikladnosti" na informacije, procene i shvatanja. Konačno, oni u stupnju posvećenosti su aktivno uključeni u konstruisanje znanja i dodavanje ovog znanja u svoje konceptualne okvire.

Studenti su na dualističkom nivou [101] i u najboljem slučaju, većina studenata hemije je na relativističkom stupnju (proceduralno znanje) nakon četiri godine fakulteta. To znači da je većina studenata koji pohađa fizičku hemiju i dalje na dualističkom ili moguće nivou mnogostrukosti. Stoga nije iznenađujuće što mnogi studenti ostaju da rešavaju algoritamske probleme tokom celokupnih osnovnih studija.

Važan cilj nastave jeste razvoj sposobnosti studenata da postavljaju bitna pitanja. To ih odvodi od rešavanja veštačkih algoritamskih problema [37, 38] ka rešavanju kompleksnih pravih problema. [102]. U suštini, studenti moraju biti u stanju da nešto razumeju, da promisle stvari do kraja. To zahteva pomeranje fokusa sa sadržaja na intelektualne sposobnosti putem primene elemenata rasuđivanja, razumevanja osobina mislećeg uma i održavanje standarda rasuđivanja [92]. Zato je fizička hemija toliko teška za mnoge studente. Ona traži od studenata da rade ono za šta nisu pripremljeni. Moramo preusmeriti nastavni program kako bi rešili ovaj problem tako da se razviju potrebne veštine rasuđivanja zajedno sa izgradnjom pojmova fizičke hemije.

c. Nastavne metode. Nastava se često smatra sinonimom za predavanje, čime se podrazumeva da bismo bili u stanju da dobro predajemo, moramo imati jasna i zanimljiva predavanja, uključujući nešto učešća studenata, sa dobrom primenom nastavnih sredstava kao što su prezentacije na tabli ili u elektronskom obliku, itd. Ipak, kao što Angelo i Cross [103] ističu: "učenje može i često se i

dešava bez nastave – a nekad uprkos njoj – ali ne postoji nešto što se zove uspešna nastava u odsustvu učenja". Kao posledica toga nedostatak uspeha studenta može dovesti do frustracije i razočarenja sa obe strane katedre. Novije nastavne metode pružaju mogućnost poboljšanja učenja u samoj učionici. Ove metode se različito nazivaju uključujući aktivno učenje [104], kooperativno učenje [105], ciljno ispitivanje [106, 107], strukturisano vođeno čitanje (T.J. Zielinski, neobjavljeno), učenje procesa [109, 110], laboratorijski projekti sa kooperativnim učenjem [109, 110] i laboratorije otkrića [111].

Dalje, logički redosled koji slede predavanja fizičke hemije nije uvek najbolji redosled za učenika. Ovaj redosled, koji se razvio iz pažljivog restrukturiranja koncepata koga su vršili nastavnici i pisci udžbenika, se ne poklapa sa sposobnošću početnika da procesira informacije i stvara veze unutar postojećih okvira. Zapravo, brižljivo pripremljeno predavanje će najverovatnije učvrstiti dualistički način razmišljanja dok pruža oblik zabave. Tek kada se studenti sami suoče sa domaćim zadatkom, onda shvate da ne razumeju kako da rade fizičku hemiju. Problemi sa dugim nizovima podataka ili nekoliko konceptualnih delova su naročito frustrirajući za studente. Predavanja čine sigurnu zonu za studente. Učenje zahteva stepen intelektualne nelagodnosti. Trenutno važeći pojmovi moraju biti dovedeni u pitanje kako bi prokrčili put za početak dijaloga koji vodi do dubljeg razumevanja. Remećenje pojmova dopušta studentima da budu spremniji da razmatraju nove ideje i objašnjenja.

d. Ciljevi i zadaci. Uspešna nastava i učenje zahteva pažljivo određivanje ciljeva i zadataka za kurs. Iako većina nastavnika ne pravi razliku između ciljeva i zadataka i čak i rečnici definišu jedan termin onim drugim, ovi termini se u nastavi razlikuju. Generalno gledano, cilj jeste glavna svrha nastave, ono što želimo za studente. Na primer, jedan cilj u fizičkoj hemiji jeste da studenti dublje razumeju matematičke modele koje koriste hemičari. Zadaci su konkretniji ishodi nastave i učenja. Zadaci su merljivi, procenjujemo uspeh studenata kroz zadatke. Zadaci su vezani za reči delovanja koje opisuju ono šta studenti mogu da urade nakon što su naučili taj deo sadržaja kursa. Ove reči delovanja uključuju: nacrtati, izvesti, objasniti, izračunati, diskutovati, uporediti i uočiti kontrast, itd. Zadatak kvantne hemije može glasiti "Studenti će biti u stanju da objasne relativne talasne dužine apsorpcionih maksimuma za seriju boja koristeći model čestice u pravougaonoj potencijalnoj jami". Naravno, ne koristi svaki nastavnik iste termine da predstavi ono što nazivamo ciljevima i zadacima. Nekada se zadaci mogu

Tabela 1. Termohemija - Ciljevi i zadaci

Ciljevi	Zadaci	Vežbanja
Preispitati osnovne KONCEPTe fizike i opšte hemije.	Objasniti pojmove C_V i C_P sa odgovarajućim primerima. Izračunati temperature ravnoteže kada su dva materijala u kontaktu. Opisati zakon očuvanja energije u smislu procesa konstantne zapremine i konstantnog pritiska.	Pročitati tekst i odgovoriti na pitanja iz priručnika. Uraditi zadate probleme kako bi se utvrdilo savladavanje ovih tehnika.
Poboljšati poznavanje upotrebe tabela termodinamičkih podataka. Poboljšati veštine tumačenja grafikona. Razumeti energetske uslove za zagrevanje čistih supstanci.	Odrediti i tumačiti fazne promene u graficima yavisnosti C_V i C_P od T . Izračunati ΔH i ΔU za zagrevanje čiste supstance kada ne dolazi do fazne promene ili kada dođe do fazne promene. Izračunati ΔH za reakciju pri 298K.	Napisati odgovore na zadata pitanja, uporediti rezultate sa ostalima u grupi i usaglasiti odgovore koji će biti predstavljeni ostalima na času. Proučiti zadate grafikone, odrediti fazne promene, uporediti C_P za različite faze. Uraditi zadate probleme. Usavršiti. Proveriti odgovore i metode sa ostalima iz grupe.
Bolje upoznati kompjutersko algebarsko sredstvo.	Fitovati C_P ili C_V vrednosti za specifični temperaturni raspon pomoću polinoma.	Primeniti nelinearne tehnike fitovanja krivih. Primeniti odgovarajuća statistička merenja.
Razumeti ΔH kao funkciju stanja.	Izračunati ΔH za zagrevanje supstance kada se	Odrediti dve funkcije dajući C_P kao funkciju T .

Razumeti Hesov zakon.	zavisnost C_p od T prikazuje polinomom ili nekom drugom funkcijom T . Upotreba cikličnih dijagrama za predstavljanje promena ΔH u sistemu.	Koji kriterijumi određuju kada se koja koristi? Uraditi zadate probleme. Usavršiti. Odrediti i zabeležiti mesta potencijalnih grešaka rešenja.
Koristiti tabulirane termodinamičke podatke za računanje ΔH za bilo koju reakciju pri bilo kojoj temperaturi.	Napraviti razliku između raznih tipova ΔH koji se nalaze u objavljenim tabelama.	Izračunati $\Delta_{rxn}H(298\text{ K})$ za navedene reakcije. Usavršiti. Upotrebiti dati Mathcad šablon i bazu podataka za računanje $\Delta_{rxn}H(298)$ za nekoliko reakcija. Izračunati $\Delta_{rxn}H(800\text{ K})$ za sintezu NH_3 . Proširiti ovaj šablon za računanje $\Delta_{rxn}H(T)$ za sintezu NH_3 za bilo koju T .

nazivati kriterijumima performanse ili nastavnim ishodima. Ponekad se ciljevi nazivaju zadacima, ipak, koji god da se termin koristi, poruka je jasna. Nastavnici žele da studenti nauče neke stvari i da pokažu naučeno tako što će raditi neke stvari. Nastavnici su ti koji određuju uslove u kojima studenti mogu da uče i pokažu ono što su naučili. Tabela 1. sadrži primer ciljeva i zadataka za nastavu fizičke hemije iz oblasti termohemije.

e. Da li smo uspešni? Treba primeniti tri različita mehanizma za procenu uspešnosti nastavne metodologije. Prvo, postoji stalno procenjivanje metodologije u odnosu na ispunjenje ciljeva nastavnika. Drugi se odnosi na to da li nastavnik određuje da se evaluacija uspeha studenata podudara sa nastavnim zadacima nastavnog programa. Ova kategorija sadrži ispite i laboratorijske izveštaje studenata. Treći mehanizam jeste evaluacija kursa gde studenti navode svoja iskustva kursa i koliko smatraju da je nastava bila dobra. Postoji praznina jer je većina pitanja za evaluaciju kursa podešena za format tradicionalne nastave sa predavanjima. Kao dodatak tome, zato što su studenti najbolje upoznati sa predavanjima i nisu u mogućnosti da procene postignuti nivo naučenog u netradicionalnom obliku časa, važno je da nastavnici usklade evaluaciju kursa sa pedagogijom kursa.

f. Procenjivanje. Procenjivanje delotvornosti nastave/učenja uključuje više od samo ispita i evaluacije kursa. Prvo, procena i evaluacija se razlikuju. Procena je proces u kome se proučava delotvornost neke aktivnosti. Formativna je u tome što pomaže da se modifikuje praksa u svetlu tekućeg procesa. Procenjivanje ne pruža ocene, već daje informacije za vršenje korekcija na kursu koje dovode do efikasnijeg učenja. Na primer, ako nastavnik uoči da studenti ne razumeju čas, može da zastane i da ponovi nešto ili da pita studente da napišu nešto o onome šta nisu razumeli. Nastavnik koristi te informacije za modifikovanje predavanja ili aktivnosti na času na osnovu komentara studenata. Problem je u tome što se gubi na vremenu, čas se prekida i smanjuje se materijal koji se može preći. S druge strane, koja je korist od prelaženja gradiva ako ga studenti ne razumeju. Bolje je preći manje, raditi na dubljem razumevanju osnovnih koncepata i promovisati dugoročno usvajanje novih ideja u konceptualni okvir studenata. Kao dodatak tome, vreme provedeno u pomaganju studentima da razumeju neko pitanje razvija njihove veštine intelektualnog procesiranja, tako da postaju bolje obučeni za nezavisno učenje i postižu dugoročno zadržavanje koncepata i veština. Jedna stvar koja pomaže nastavnicima da poboljšaju učenje jeste vreme koje se provodi na početku teme za utvrđivanje postojećeg nivoa razumevanja koji studenti poseduju. Time se pruža idealna prilika za otpočinjanje dijaloga u učionici koji dovodi do bolje komunikacije i učenja.

g. Vrednovanje učenja studenata. Evaluacija je proces određivanja koliko su studenti naučili. Uspeh studenata se prevashodno vrednuje putem ispita, laboratorijskih izveštaja, istraživačkih radova, usmenih izlaganja i praćenjem usvojenih laboratorijskih veština. Neki nastavnici mogu

koristiti portfolije studenata za merenje postignutog, dok drugi mogu davati usmene ispite ili uključiti samo-evaluaciju pri davanju konačne ocene.

To dovodi do nekoliko važnih oblasti za diskusiju. Prvo, uzmimo u obzir laboratoriju gde su glavni metod evaluacije izveštaji studenata. Ovi izveštaji mogu biti dugi, sa 10 ili više strana teksta i analizom podataka. U kursu sa jednim kreditnim poenom sa 8 ili više eksperimenata, ocenjuje se 80 strana pisanog rada. Nije iznenađujuće da je laboratorija fizičke hemije često određena kao fakultetski kurs koji zahteva veliku količinu pisanja. Ovo može čak i biti dopunjeno obaveznim usmenim izlaganjima pisanih izveštaja. Ovaj scenario je nepotreban i opterećujući, manji broj izveštaja može za posledicu imati savladavanje većeg broja fizičko-hemijskih zakonitosti.

Postoje sugestije da se ograniči broj eksperimenata na pet po satu kredita. Zadavanjem nekih eksperimenata koji traju dve ili tri nedelje, studentima se pruža iskustvo sa procesima sa više koncepata i koraka, dok su tehnike koje zahtevaju integrisanje pojmova u jedan laboratorijski izveštaj odraz onoga što rade zreli hemičari. Takođe mora da postoji veće preklapanje eksperimenata sa temama predavanja kako bi se umanjila opterećenost studenata. Ponekad nije moguće izbeći uvođenje pojma prvo u laboratoriju, ipak kada je tema dobro razvijena u laboratoriji, treba smanjiti vreme za predavanje teme. Stavljanje primene simboličkog softvera i molekularno modeliranje na početak laboratorijskih vežbi, ostavlja vremena da se predavanja razvijaju do tačke u kojoj su laboratorija i predavanja bolje usaglašeni.

Primarni metod evaluacije u učionici jesu ispiti. Polugodišnji ispiti obično obuhvataju teme nekoliko nedelja nastave. Na svakom ispitu od studenata se očekuje da tačno odgovore na nekoliko pitanja u rasponu od jednostavnih proračuna do zapamćenih ili prilagođenih izvođenja. Zanimljivo je da studenti hemije nisu uspešni na ispitima fizičke hemije, čak i kada se od njih traži da ponove primer sa časa ili domaćeg. Da li je to posledica namernog nemara, neadekvatne nastave ili nekog drugog faktora [112]? Studenti izgleda razumeju ono šta se radi na tabli i mogu isto uraditi pod našim nadzorom. Šta se ovde događa? Ono što se možda događa jeste oblik "Fejmanovog efekta". Studentima je veoma udobno i uživaju u dobrim predavanjima. Smatraju da su nešto naučili jer razumeju ono o čemu im nastavnik govori, ali kada su sami i bore se sa domaćim ili izveštajem otkriju da nisu u stanju da ponove ono šta je nastavnik radio na času. Prepreku pravi nedostatak prakse ili iskustva sa pojmovima. Još predavanja im neće pomoći. Ono što im je potrebno jeste paradigmatičko pomeranje sa nastave koja je usmerena ka nastavniku, ka nastavi usmerenoj ka studentu koja ima za cilj da poveća sposobnosti studenata da uče fizičko-hemijske pojmove.

Prvo da bi pomogli studentima da uče, nastavnici moraju da im objasne ciljeve i zadatke kursa i svakog časa u okviru kursa. Ove ciljeve i zadatke treba napisati i podeliti sa studentima kako je prikazano u Tabeli 1. Studenti takođe moraju da se podsete na veštine potrebne za taj čas. Dok iskusni studenti umeju da sačine sopstvene liste zadataka, mnogi ne poseduju tu veštinu. Najbolje služimo potrebama studenata tako što im pružamo zadatke koji ih dovode do stupnja u kojima mogu da određuju zadatke na osnovu našeg predavanja ili zadatog rada. Dalje, studenti treba da su u stanju da prelaze neka poglavlja fizičke hemije samostalno, analizirajući materijal sami i određujući ciljeve i zadatke za taj materijal.

Nakon završetka časa koristeći jasno određene ciljeve i zadatke, studenti treba da znaju tačno šta da očekuju na testu. Mogu da rade na usavršavanju veština određenih u zadacima putem domaćeg, proučavanjem primera iz raznih dostupnih tekstova, ili radom u grupama sa drugim studentima. Nastavnik ima jasnu obavezu da se usmeri na zadatke pri sastavljanju ispita. Svrha ispita jeste utvrđivanje onoga šta je student naučio, a ne šta bi najbolji studenti mogli biti u stanju da zaključie tokom jednog sata koncentrisanog napora. Jedno merilo uspeha u podudaranju kvaliteta ispita sa učinkom studenta, jeste da vredni prosečni student treba da bude u stanju da dobije 8 (C) na

apsolutnoj skali. Ocene ispita sa prosekom u rasponu između 20% i 40% nisu korisna sredstva evaluacije. Malo je verovatno da će pomoći nastavniku da modifikuje nastavu ili pomoći studentima da rade ka boljem učinku. Ovako niske ocene zahtevaju primenu normi (podešavanje) pri određivanju konačnih ocena. Ovako ocenjivanje ne pravi razliku između studenata sa različitim nivoima postignutog. Studenti takođe brzo nauče da uče selektivno. Ako se više učenja ne isplati boljim ocenama, studenti će se pre zadovoljiti sa 8 ili 7 nakon podešavanja kako bi završili osnovne studije hemije pre nego što će pokušati da usavrše znanje. Ovakav stav nije dobar za hemijsku struku ili stavove koji se prenose na buduće generacije studenata.

Još jedan metod evaluacije su ACS DivCHED standardizovani ispiti iz fizičke hemije. Direktor ACS DivCHED Instituta za ispite obično bira predsedavajućeg komisije, naučnika koji se aktivno bavi istraživanjima iz fizičke hemije i nastavom, koji onda bira fizikohemičare za sastavljanje ovog ispita. Članovi komisije se biraju na osnovu distribucije koja odražava veličinu i geografsku lokaciju škola i oblast stručnost [113]. Svi članovi komisije volontiraju.

Cilj ispitne komisije jeste da sastavi ispite na osnovu određenih kriterijuma, uključujući vrste polaznika, glavni predmet i teme. Vrste polaznika određuju škole koje pružaju nastavu fizičke hemije, prevashodno studentima inženjerstva, hemije, biologije, itd. Ispiti ne traže od nastavnika da njihova predavanja sadrže iste teme. Pošto ispit pokriva širok raspon tema, moguće je da 20% pitanja na pojedinom ispitu ne bude pokriveno nekim kursom fizičke hemije. Shodno tome bespredmetno je koristiti rezultate ACS ispita za određivanje kvaliteta nastave. To bi podsticalo nastavnike da predaju kako sadržaj ispita diriguje. Ipak, većina tema zastupljenih na ispitu treba da bude obuhvaćena predavanjima. ACS CPT takođe pruža spisak tema [13] mada sa naglaskom na starijem nastavnom programu. Iz ovih tematskih izvora može se napraviti relativno dobar izbor sadržaja.

Ispiti iz fizičke hemije se nacionalno normiraju koristeći do 500 ili više ispita studenata. U nekim slučajevima, kao što je obuhvatni obrazac za fizičku hemiju, može se koristiti samo 200 studentskih ispita za određivanje normi. Postoje i prednosti i mane pri primeni normiranih ispita umesto onih baziranih na standarima. Prvo, normiranje podataka zavisi od toga da pojedinačni nastavnici obaveštavaju Institut za ispite o rezultatima svojih studenata. To može otežati dobijanje normi koje predstavljaju različite nastavne sredine i nivo uspeha studenata. Ipak, dobija se dobro poređenje jedne grupe studenata sa velikom grupom studenata iz širokog spektra nastavnih sredina. Najvažnija prednost jeste što sastavljanje ispita koje vrši komisija eliminiše neobjektivnost jednog autora/nastavnika i zato što se ispiti detaljno proveravaju i iščitavaju, tako da postoje samo minimalne greške. Potrebno je oko pet godina za razvijanje i normiranje svake grupe ispita fizičke hemije. Priroda ispita fizičke hemije se promenila u proteklih 20 godina. Ove promene odražavaju razvoj discipline u temama i njihovom međusobnom odnosu, strategijama nastave i procenjivanja, stilu reprodukovanja i tehnološkoj upućenosti studenata. Pojava kalkulatora koji omogućuju komunikaciju sa osobama van ispitne prostorije preusmerila je ispite u formu koja onemogućuje upotrebu ovakve komunikacije. To čini ispite više usmerene ka suštini, gde postoji naglasak na tumačenju grafikona i fundamentalnom razumevanju zakonitosti. Komisija takođe radi na stvaranju ujednačenog ispita sa lakim prelazom sa starijih na nove teme tokom godina. Na ovaj način komisija vrši mali pritisak kako bi podstakla modernizaciju nastavnog programa.

h. Kvalitativna naspram kvantitativne ocene. Jedan od važnih načela u istraživanju obrazovanja u oblasti hemije jeste paradigmatiski pomak od ispitivanja onoga što se predaje studentima ka razumevanju onoga što su studenti naučili. Ispiti i laboratorijske vežbe pružaju jednu mernu tačku onoga što je naučeno. Drugi izvor informacija jeste razgovor, bilo strukturisani ili u slobodnom obliku, na određene teme. Takvi razgovori se fokusiraju na problem predstavljen studentu, a

metode koje student primenjuje pri rešavanju problema, u sredini u kojoj se razgovara sa ispitivačem, se snimaju [114, 115]. Ankete [116, 117] i pisanje studenata [118] pružaju dodatne mehanizme za bolje ocenu shvatanja gradiva od strane studenata. Novija tehnika analizira pismenu komunikaciju iz arhiviranih diskusija koristeći softver kursa tokom projekata unutar fakulteta ili sa drugim fakultetima. Takva analiza stvara pregled učestalosti i lakoće interakcije studenata. Kada se to doda analizi sadržaja otkrivaju se nivoi razumevanja koje nije moguće opaziti tradicionalnim ispitima [119].

7. Kritična pitanja

a. Predstavljanje onoga šta danas rade fizičkohemičari. Suštinski interes istraživanja iz oblasti fizičke hemije se ogleda u učenju onoga što objavljuju aktivni fizikohemičari, ne istorijskim dostignućima Ostwalda i drugih [6].

b. Osnove i van njih. Nastavni program hemije zahteva da se pruži nastava o pojmovima fizičke hemije koji leže u osnovi rada svih hemičara. Kako savladati ovaj veliki raspon konceptualnog znanja? Da li da se usmernimo ka predstavljanju pojmova na standardni način na koji smo svi navikli? Ili da izmislimo nove načine prenošenja tako što ćemo ih ugraditi u relevantne hemijske kontekste? Smatramo da je verovatnije da će studenti naučiti i zadržati osnovne pojmove ako su ugrađeni u bogatu sumu modernih istraživačkih tema fizičke hemije. I dok su potrebne znatne količine vremena za predstavljanje osnovnih pojmova kako se primenjuju na moderne hemijske probleme, mora se paziti da se ne stvara lažna sigurna zona za studente koji mogu naučiti kontekst ali nemati jasno razumevanje pojmova. Potrebna je ravnoteža pri primeni konteksta kao odskočne daske do jasnog savladavanja pojma. To dopušta studentima da iskuse uzbudljivost sadašnjeg istraživanja hemije i potrebe dobrog razumevanja fizičke hemije. Treba takođe da postoji veći naglasak na biohemijskoj primeni pojmova i metoda fizičke hemije. Mnogi od najzanimljivih naučnih problema koji proističu za sadašnje i buduće generacije studenata hemije će uključivati biohemiju. Većina studenata prirodnih nauka su u programima biologije ili biohemije. Takođe postoji potreba povezivanja sa drugim disciplinama poput nauke o materijalima.

c. Primena tehnologije. Nije moguće zamisliti nastavu fizičke hemije bez instrumenata ili kompjutera [120]. Prvo, kompjutere treba koristiti za prikupljanje podataka u svim eksperimentima u laboratoriji. Beleženje podataka rukom oduzima mnogo vremena, podložno je greškama u beleženju i gubi se dragoceno vreme za učenje studenata. Na sreću, većina instrumenata ima kompjuterski interfejs ili se mogu priključiti na kompjutere. Nakon prikupljanja podataka, svi studenti moraju biti dobro upoznati sa redukovanjem broja podataka, svi izveštaji moraju biti pripremljeni koristeći softver za procesiranje teksta i pravila prethodno primenjena na ručno nacrtane grafike se moraju koristiti u pripremi digitalnih grafika za podatke.

Kod nastave fizičke hemije, nastavnici treba da koriste kompjutere u učionici. Sredstvo poput PowerPoint-a može biti korisno, ali su korisniji tabelarni prikazi i softver za simboličku algebru. Kada se koriste u učionici, ova sredstva pružaju načine kako da se uživo radi računanje na velikim nizovima podataka što nije moguće sa kredom ili olovkom i papirom. Animacija ili prikazivanje i modifikacija matematičkih funkcija pomažu studentima da uoče odnose i da ih razumeju i lako ih koriste. Još bolje jeste da studenti koriste isti softver, dok učestvuju u aktivnostima sa ciljnim ispitivanjem za istraživanje i stvaranje solidnog razumevanja teme. Postoje brojni resursi za primenu simboličke algebre u fizičkoj hemiji. Korisnici Mathematica-e imaju niz knjiga i elektronskih resursa [121, 122] kao i korisnici Maple-a [123, 124]. Najkorisniji resursi, ipak, su možda Mathcad zbirke [125], sve veća nacionalna digitalna biblioteka hemijskih resursa [126],

knjige koje uključuju Mathcad vežbanja ili primere za fizičku hemiju [127, 128]. Pošto kucanje fajlova iz simboličke algebre ili radnih lista ili velikih setova podataka oduzima puno vremena, najbolje je da studenti koriste šablone i datoteke podataka koje su osmislili nastavnici. To dopušta studentima da se fokusiraju na plodotvorno ispitivanje koncepata umesto na frustrirajuće aktivnosti kucanja i uklanjanja grešaka.

Pored softvera za algebarska izračunavanja, studenti treba da umeju da koriste programe za obradu tabela poput Sigma Plot, PsiPlot, itd. Dobro poznavanje softvera za analizu laboratorijskih podataka može da nadoknadi slabije poznavanje algebre. Pažljivo sastavljene tabele su takođe ubedljiva sredstva za bolje usvajanje matematičkih modela na kursevima fizičke hemije.

Još jedna veština za studente fizičke hemije jeste poznavanje komputacionog hemijskog softvera. Svi studenti hemije moraju biti u stanju da vizuelno prikažu molekule i da izvrše račune iz kvantne hemije kako bi utvrdili molekulska svojstva. Studenti treba da znaju, putem upotrebe softvera, pojmove koji leže u osnovi poluempirijskih, ab initio i molekularno-dinamičkih proračuna. Ove veštine moraju biti integrisane u ceo nastavni plan, ali njihove matematičke osnove treba da se nalaze u kursu fizičke hemije. Nakon završetka fizičke hemije, studenti treba da su u stanju da opišu osnovni set metoda i da prave razliku između ab initio i poluempirijskih proračuna. Treba da razumeju strukturu ovih komputacionih pristupa. To ne znači da studenti treba da budu komputacioni hemičari, već da budu na dobrom putu da pametno koriste rezultate komputacione hemije.

Neki i dalje smatraju da je sposobnost pisanja kodova za Basic, Fortran i C od ključne važnosti. Mi ne mislimo tako. Fizikohemičari koji razvijaju softver mogu da nauče programerske veštine van nastavnog programa hemije. Logičko razmišljanje i precizno izražavanje se podjednako dobro savladavaju putem softvera koji rade sa tabeliranim podacima. Student hemije možda čak neće ni morati da piše kodove za prikupljanje podataka od instrumenta. U svakom slučaju, oni koji moraju da savladaju ovaj nivo pisanja kodova će imati koristi od iskustva sa simboličkim softverom ili softverom za obradu tabela.

Kompjuter je ključno sredstvo komunikacije. Ne samo što moraju da pišu izveštaje, studenti takođe treba da su u stanju da traže, nalaze i procenjuju hemijske informacije iz mnogih izvora. Moraju biti u stanju da komuniciraju sa drugim hemičarima putem diskusionih foruma. Zato što studenti obično nerado koriste kompjutere za komunikaciju u vezi nauke, ostaju konzumenti informacija koje dobijaju na predavanjima, ipak od njih će se očekivati da razmenjuju stručnost i da uspešno komuniciraju sa drugima u raznim stručnim sredinama. Odličan način poboljšanja komunikacionih sposobnosti studenata jeste da učestvuju u projektima koji zahtevaju značajnu interakciju preko interneta sa drugim studentima sa istog ili drugog fakulteta.

Aktivnosti unutar i između fakulteta su u fokusu udruženja Physical Chemistry Online proteklih sedam godina [129]. Kroz ovaj projekat studenti fizičke hemije istražuju stare i nove teme iz hemije. Ove teme potiču iz standardnog repertoara ili novonastalih sadržaja. U ovim projektima, studenti vrše eksperimente dok komuniciraju sa drugim studentima sa udaljenih fakulteta kako bi razmenili podatke i razgovarali o naučnim pojmovima. Najteži aspekt se pokazao promovisanje komunikacije među studentima i ekonomizacija programa fakulteta [109, 119, 130, 131].

Kao dodatak matematičkom modeliranju i komputacionim hemijskim paketima, dostupni su i drugi tehnološki resursi. Internet pruža razne vrste pedagoških i naučnih resursa za one kojima tehnologija nije prepreka. Komercijalni izdavači takođe počinju da distribuiraju svoje verzije MathCAD™ šablona [127,132] ili zbirke [133]. U budućnosti, vidimo DVD-ove sa modernim fizikohemijskim temama koje nastavnici mogu da koriste na kursevima. U jednom takvom projektu, proizvodi se interaktivni DVD povezan sa internetom, koji sadrži diskusiju o primenama

moderne fizičke hemije, razgovore sa naučnicima koji vrše eksperimente, propratni materijal, primere podataka iz eksperimenta, strukturisana pitanja o teoriji, eksperimentu i rezultatima uzoraka. DVD naglašava praktične aspekte fizičke hemije u medicinskim, ekološkim i drugim kontekstima koje studenti mogu da razumeju i koristi interfejs koji dopušta studentima različite načine učenja. Prvi moduli su pri kraju, a komplet od 10 modula je najavljen za kraj 2005 [134]. Još jedan budući resurs je elektronski udžbenik iz fizičke hemije koji sadrži slike, multimedijalne pojmove i algebarske manipulacije [135].

8. Zaključak

S obzirom na prirodu kursa koji se naziva fizička hemija, teško je pružiti jednoobrazni standard za nastavni program usaglašen između interesa fizikohemičara i potreba za poznavanjem fizičke hemije u mnogim interdisciplinarnim naukama. U najboljem slučaju možemo pružiti smernice za nastavnike ovog ključnog nastavnog dela osnovnih studija.

Ove smernice određuju da fizička hemija treba da odražava ono šta fizikohemičari rade danas:

- (a) Pruža ključna znanja velikoj većini studenata koji neće biti fizikohemičari
- (b) Obogaćuje osnovne pojmove važnim savremenim primerima iz literature
- (c) Značajno povećava prilike za tumačenje eksperimentalnih podataka i primenu modela na podatke
- (d) Optimalno koristi informacionu tehnologiju i kompjuterske resurse
- (e) Koristi dobru pedagošku praksu kako bi se ubrzalo učenje i poboljšao razvoj kritičnih interdisciplinarnih veština kod studenata.

Postdiplomska nastava treba da dalje usavršava nastavne modele koje koriste savremeni fizikohemičari, dok istovremeno proširuje stručnost postdiplomaca hemije koristeći osnovne pojmove fizičke hemije u širokom rasponu interdisciplinarnih nauka sa dubljim razumevanjem. Svi postdiplomci hemije treba da istražuju jednu ili više specijalizovanih oblasti fizičke hemije. Postdiplomci fizičke hemije treba da dobro poznanju kvantnu hemiju, molekularno modeliranje, hemijsku kinetiku, termodinamiku i spektroskopiju radi uspešnog rada na svojoj doktorskoj disertaciji. Proučavanje fizičke hemije treba da studentima pruži sredstvo sa kojim će se dalje služiti u nezavisnom radu u svojoj oblasti i srodnim oblastima kako je neophodno za stručnost u disciplini i fleksibilnosti znanja.

Zahvalnica. Hteli bismo da se zahvalimo Nacionalnoj fondaciji za nauku i Američkom hemijskom društvu za podršku reforme obrazovanja fizičke hemije tokom godina. TJZ se zahvaljuje na delimičnoj podršci za razne projekte navedene u ovom radu koje je pružilo Odeljenje Nacionalne fondacije za nauku za obrazovanje na osnovnim studijama putem grantova DUE #9354473, DUE #9950809, DUE #0127291, New Traditions projektu pri Univerzitetu Wisconsin, Madison, putem NSF DUE #9455928 i preko projekta Digitalne biblioteke "The Journal of Chemical Education" putem granta DUE #0226244. Uz to uživali smo u kontaktima sa brojnim saradnicima koji su nam pomogli da oblikujemo svoje ideje tokom godina. Posebno se zahvaljujemo Masayuki Shibata-i i Lynn Geiger, našim stalnim izvorima podrške i inspiracije.

Reference i beleške

1. Pignataro, S. *La Chimica e l'Industria* **1998**, 80, 1282-1284.
2. Glasstone, S. *Textbook of Physical Chemistry*, 2nd ed.; D. Van Nostrand Co. Inc.: New York, 1946.
3. Atkins, P.; dePaula, J. *Physical Chemistry*, 7 ed.; W. H. Freeman and Company: New York, 2002.
4. Berry, R. S.; Rice, S. A.; Ross, J. *Physical Chemistry*, 2nd ed.; Oxford University Press: New York, 2000.
5. McQuarrie, D. A.; Simon, J. D. *Physical Chemistry: A Molecular Approach*; University Science Books: Sausalito, CA, 1997.
6. Servos, J. W. *Physical Chemistry from Ostwald to Pauling*; Princeton University Press: Princeton, NJ, 1990.
7. Daniels, F. J. *Chem. Educ.* **1958**, 35, 322-333.
8. Cartledge, G. H. J. *Chem. Educ.* **1924**, 1, 119-127.
9. *Content of Undergraduate Physical Chemistry Courses*, American Chemical Society: Washington DC, 1984.
10. Lippincott, W. T., Ed. *Essays in Physical Chemistry*; American Chemical Society: Washington, DC, 1988.
11. Moore, R. J.; Schwenz, R. W. *J. Chem. Educ.* **1992**, 69, 1001-1002.
12. Schwenz, R. W.; Moore, R. J. *Physical Chemistry: Developing a Dynamic Curriculum*; American Chemical Society: Washington DC, 1993.
13. American Chemical Society 2004. http://www.chemistry.org/portal/a/c/s/1/acdisplay.html?DOC=education\cpt\ts_physchem.html (accessed Feb 2004).
14. New Traditions Physical Chemistry Curriculum Planning Group 1995. <http://newtraditions.chem.wisc.edu/PRBACK/pchem.htm> (accessed Feb 2004).
15. PolymerCoreCourseCommittee *J. Chem. Educ.* **1985**, 62, 780.
16. PolymerCoreCourseCommittee *J. Chem. Educ.* **1985**, 62, 1030.
17. White, M. A. *Properties of Materials*; Oxford University Press: New York, 1999.
18. Ellis, A. B.; Geselbracht, M. J.; Johnson, B. J.; Lisensky, G. C.; Robinson, W. R. *Teaching General Chemistry: A Materials Science Companion*; American Chemical Society: Washington, DC, 1993.
19. Ellis, A. B. *J. Chem. Educ.* **1997**, 74, 1033-1039.
20. Cramer, C. J. *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*; Wiley: New York, 2002.
21. Shea, J.-E.; Brooks II, C. L. *Ann. Rev. Phys. Chem.* **2001**, 52, 449-535.
22. Liu, K. *Ann Rev Phys Chem* **2001**, 52, 139-164.
23. Tropsha, A.; Bowen, J. P. In *Using Computers in Chemistry and Chemical Education*; Zielinski, T. J.; Swift, M. L., Eds.; American Chemical Society: Washington DC, 1997, pp 309-330.
24. Northrup, S. H. In *Using Computers in Chemistry and Chemical Education*; Zielinski, T. J.; Swift, M. L., Eds.; American Chemical Society: Washington DC, 1997, pp 283-308.
25. Ladanyi, B. M. In *Theoretical Methods of Condensed-Phase Chemistry*; Schwartz, S. D., Ed.; Kluwer: Dordrecht, 2000, pp 207-233.
26. Zewail, A. H. *Femtochemistry-Ultrafast Dynamics of The Chemical Bond*, Vols. I and II; World Scientific: Singapore, 1994.
27. McCash, E. M. *Surface Chemistry*; Oxford University Press: Oxford, 2001.
28. Shinar, J.; Vardeny, Z. V.; Kafafi, Z. H., Eds. *Optical and Electronic Properties of Fullerenes and Fullerene-Based Materials*; M. Dekker: New York, 2000.
29. JILA BEC Homepage. <http://jilawww.colorado.edu/bec/> (accessed Feb 2004)
30. Finlayson-Pitts, B. J.; James N. Pitts, J. *Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere: Theory, Experiments, and Applications*; Academic: San Diego, 2000.
31. Hinsberg, W. D.; Wallraff, G.; Houle, F. A.; Morrison, M.; Frommer, J.; Beyers, R.; Hutchinson, J. In *Organic Thin Films*; Frank, C., Ed.; American Chemical Society: Washington DC, 1998, pp 344-359.
32. Ott, J. B.; Boerio-Goates, J. *Chemical Thermodynamics: Advanced Applications*; Academic Press: New York, 2000; Vol. II.
33. Kastner, M. E.; Vasbinder, E.; Kowalczyk, D.; Jackson, S.; Giammalvo, J.; Braun, J.; DiMarco, K. *J. Chem. Educ.* **2000**, 77, 1247-1248.
34. Rhodes, G. *Crystallography Made Crystal Clear: A Guide for Users of Macromolecular Models*, 2 ed.; Academic: San Diego, CA, 2000.
35. Karplus, M.; McCammon, J. A. *Nature Struct. Biol.* **2002**, 9, 646-652.
36. Gao, J. *Acc. Chem. Res.* **1996**, 29, 298-305.
37. Bodner, G. M. *J. Chem. Educ.* **1987**, 64, 513-514.
38. Frank, D. V.; Baker, C. A.; Herron, J. D. *J. Chem. Educ.* **1987**, 64, 514-515.
39. Bunce, D.; Heikkinen, H. *J. Res. Sci. Teach.* **1986**, 23, 11-20.
40. Arons, A. B. *Liberal Education* **1985**, 71, 141-158.
41. Pople, J. A. *Rev. Mod. Phys.* **1999**, 71, 1267-1274.
42. Hinsber, W.; Houle, F. http://www.almaden.ibm.com/st/computational_science/ck/msim/?overview (accessed Feb 2004).
43. Johnstone, R. A. W.; Rose, M. E. *Mass Spectrometry for Chemists and Biochemists*; Cambridge University Press: New York, 1996.
44. Tinoco, I., Jr.; Sauer, K.; Wang, J. C.; Puglisi, J. D. *Physical Chemistry: Principles and Applications in Biological Sciences*, 4th ed.; Prentice Hall: Upper Saddle River, NJ, 2002.

45. Bergethon, P. R. *The Physical Basis of Biochemistry*; Springer-Verlag: New York, 1998.
46. Daniels, F. *Mathematical Preparation for Physical Chemistry*; McGraw Hill: New York, 1928.
47. Daniels, F. *J. Chem. Educ.* **1929**, 6, 254-259.
48. Francl, M. *Survival Guide for Physical Chemistry*; Physics Curriculum & Instruction: Lakeville, MN, 2001.
49. Craig, N. C. *J. Chem. Educ.* **2001**, 78, 582-586.
50. Topper, R. Q.; Freeman, D. L.; Bergin, D.; LaMarche, K. In *Reviews in Computational Chemistry*; Lipkowitz, K. B.; Larter, R.; Cundari, T., Eds.; John Wiley and Sons: New York, 2003; Vol. 19, in press.
51. Ganter, S. L. *Changing Calculus: A Report on Evaluation Efforts and National Impact from 1988-1998*. The Mathematics Association of America, 2001.
52. Grushow, A.; Zielinski, T. J. *J. Chem. Educ.* **2002**, 79, 707-714.
53. DeGraff, B. A.; Hennip, M.; Jones, J. M.; Salter, C.; Schaertel, S. A. *Chem. Educator* **2002**, 7, 15-18; DOI 10.1333/s00897020531a.
54. Lorigan, G. A.; Patterson, B. M.; Sommer, A. J.; Danielson, N. D. *J. Chem. Educ.* **2002**, 79, 1264-1266.
55. Hodgson, S. C.; Bigger, S. W.; Billingham, N. C. *J. Chem. Educ.* **2001**, 78, 555-556.
56. Garland, C. W.; Nibler, J. W.; Shoemaker, D. P. In *Experiments in Physical Chemistry*, 7th ed.; McGraw-Hill: Boston, 2003, pp 328-335.
57. Akins, D. A.; Bailey, R. A.; Giachino, G. B.; Moore, J. A.; Tomkins, T. P. T. In *Integrated Experimental Chemistry: Principles and Techniques*; Allyn and Bacon: New York, 1978; Vol. 2.
58. Kutz, H. D.; Copeland, J. H.; Mathai, G. T. C. *J. Chem. Educ. Software* **2003**, 80, 106.
59. Lacks, D. R. D. *J. Chem. Educ. Software* **2003**, 4C2.
60. Grushow, A. *J. Chem. Educ.* **2000**, 77, 1527.
61. Foresman, J. B.; Frisch, A. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*, 2nd ed.; Gaussian: Pittsburgh, 1996.
62. Hehre, W. J.; Radom, L.; Schlyer, P. V. R.; Pople, J. A. *Ab Initio Molecular Orbital Theory*; Wiley: New York, 1986.
63. Caffery, M. L.; Dobosh, P. A.; Richardson, D. M. *Laboratory Exercises using Hyperchem*; Hypercube: Gainesville, Florida, 1998.
64. Foresman, J. B. In *Using Computers in Chemistry and Chemical Education*; Zielinski, T. J., Swift, M. L., Eds.; American Chemical Society: Washington DC, 1997, pp 243-256.
65. Hehre, W. J. In *Using Computers in Chemistry and Chemical Education*; Zielinski, T. J.; Swift, M. L., Eds.; American Chemical Society: Washington DC, 1997, pp 257-281.
66. Wong, C.; Currie, J., Eds. *Teaching with CAChe: Exercises on Molecular Modeling in Chemistry*; Fujitsu Limited: Beaverton, OR, 2001.
67. Ellison, M. D. *J. Chem. Educ.* **2003**, 80, 581.
68. Zielinski, T. J.; Shalhoub, G. M. *J. Chem. Educ.* **1998**, 75, 1192.
69. Zielinski, T. J. *J. Chem. Educ.* **1998**, 75, 1191.
70. Wright, J. C.; Zielinski, T. J. *J. Chem. Educ.* **1999**, 76, 1367-1373.
71. Shalhoub, G. M.; Zielinski, T. J. *J. Chem. Educ.* **1998**, 75, 1192.
72. Valero, M.; Rodriguez, L. J.; Velázquez, M. M. *J. Chem. Educ.* **1999**, 76, 418.
73. Crane, N. J.; Mayrhofer, R. C.; Betts, T. A.; Baker, G. A. *J. Chem. Educ.* **2002**, 79, 1261.
74. Zielinski, T. J.; Grushow, A.; Shalhoub, G. 2002. <http://bluehawk.monmouth.edu/~tzielins/PCOLWEB/Cyclodextrin2002/>. (accessed Feb 2004).
75. Ticich, T. M. In *Physical Chemistry: Developing a Dynamic Curriculum*; Schwenz, R. W., Moore, R. J., Eds.; American Chemical Society: Washington, DC, 1993, pp 462-470.
76. Whisnant, D. M.; Howe, J. J.; Lever, L. S. *J. Chem. Educ.* **2000**, 77, 199-201.
77. Harvey, E.; Sweeney, R. *J. Chem. Educ.* **1999**, 76, 1309.
78. Harvey, E.; Sweeney, R. *J. Chem. Educ.* **1999**, 76, 1310.
79. Whisnant, D. M.; Lever, L. S.; Howe, J. J. *J. Chem. Educ.* **2000**, 77, 1648.
80. Wavefunction. <http://www.wavefunction.com/> (accessed Feb 2004).
81. Gaussian Inc. <http://www.gaussian.com/> (accessed Feb 2004).
82. Mathcad.Mathsoft Inc. <http://www.mathcad.com/> (accessed Feb 2004).
83. Maplesoft. <http://www.maplesoft.com/> (accessed Feb 2004).
84. Mathematica. <http://www.wolfram.com/> (accessed Feb 2004).
85. Bodner, G. M. *J. Chem. Educ.* **1986**, 63, 873.
86. Bodner, G. M. *J. Chem. Educ.* **1991**, 68, 385-388.
87. Chinn, C. A.; Brewer, W. F. *Rev. Educ. Res.* **1993**, 63, 1-49.
88. Herron, D. J. *J. Chem. Educ.* **1975**, 52, 146.
89. Bloom, B. S., Ed. *Taxonomy of Educational Objectives: The Classification of Educational Goals*; D. McKay: NY, 1956.
90. Perry, W. G., Jr. *Forms of Intellectual Development in the College Years: A Scheme*; Holt Rinehart, and Winston: New York, 1970.
91. King, P. M.; Kitchener, K. S. *Developing Reflective Judgment: Understanding and Promoting Intellectual Growth and Critical Thinking in Adolescents and Adults*; Jossey-Bass: San Francisco, 1994.

92. Paul, R. *Critical Thinking-What Every Person Needs to Survive in a Rapidly Changing World*, Revised 2nd ed.; The Foundation for Critical Thinking: Santa Rosa, CA, 1992.
93. Shulman, L. S. *Educational Researcher* **1986**, 15, 4-14.
94. Herron, J. D. *The Chemistry Classroom: Formulas for Successful Teaching*; American Chemical Society: Washington, DC, 1996.
95. Hestenes, D.; Wells, M.; Swackhamer, G. *Physics Teacher* **1992**, 30, 141-158.
96. Hestenes, D. H.; Halloun, I. *Physics Teacher* **1995**, 33, 502.
97. Hayes, J. *The Complete Problem Solver*; Erlbaum: Hillsdale NJ, 1981.
98. Belenky, M. F.; Clinchy, B. M.; Goldberger, N. R.; Tarule, J. M. *Women's Ways of Knowing-The Development of Self, Voice, and Mind*; Basic Books, Inc., 1986.
99. Finster, D. C. J. Chem. Educ. **1989**, 66, 659-661.
100. Finster, D. C. J. Chem. Educ. **1991**, 68, 752-756.
101. Welfel, E. J. J. Coll. Stu. Pers. **1982**, 23, 490-497.
102. Zoller, U. J. Chem. Educ. **1987**, 64, 510.
103. Angelo, T. A.; Cross, K. P. *Classroom Assessment Techniques*, 2nd ed.; Jossey-Bass Publishers: San Francisco, 1993.
104. Johnson, D. W.; Johnson, R. T.; Smith, K. A. *Active Learning: Cooperation in the College Classroom*; Interaction Book Co.: Edina, MN, 1991.
105. Felder, R. M. J. Chem. Educ. **1996**, 73, 832-836.
106. Spencer, J.; Moog, R. S.; Farrell, J. J. *Physical Chemistry: A Guided Inquiry-Thermodynamics*, 1st ed.; Houghton Mifflin, 2004.
107. Moog, R. S.; Spencer, J. N.; Farrell, J. J. *Physical Chemistry: A Guided Inquiry-Atoms, Molecules, and Spectroscopy*, 1st ed.; Houghton Mifflin: New York, 2004.
108. Duncan-Hewitt, W.; Mount, D. L.; Apple, D. *A Handbook on Cooperative Learning*, 2nd ed.; Pacific Crest: Corvallis, OR, 1995.
109. Towns, M.; Sauder, D.; Whisnant, D.; Zielinski, T. J. J. Chem. Educ. **2001**, 78, 414.
110. Sauder, D.; Towns, M.; Derrick, B.; Grushow, A.; Kalow, M.; Long, G.; Miles, D.; Shalhoub, G.; Stout, R.; Vaksman, M.; Pfeiffer, W.; Weaver, G.; Zielinski, T. J. Chem. Educator **2000**, 5, 77-82; DOI 10.1333/s00897000369a.
111. Ricci, R. W.; Van Doren, J. M. J. Chem. Educ. **1997**, 74, 1372.
112. Zielinski, T. J.; Brooks, D. W.; Crippen, K. J.; March, J. L. J. Chem. Educ. **2001**, 78, 714-715.
113. Holme, T. J. Chem. Educ. **2003**, 80, 594-596.
114. Thomas, P. L.; Schwenz, R. W. J. Res. Sci. Teach. **1998**, 35, 1151.
115. Lang, P. L.; Towns, M. H. J. Chem. Educ. **1998**, 75, 506.
116. Nicoll, G.; Francisco, J. S. J. Chem. Educ. **2001**, 78, 99.
117. Patron, F. In *Chemistry*; Purdue University: West Lafayette, IN, 1997.
118. Beall, H. J. Chem. Educ. **1994**, 71, 1056.
119. Slocum, L. E.; Towns, M. H.; Zielinski, T. J. J. Chem. Educ.; in press.
120. Zielinski, T. J.; Swift, M. L. Chem. Educator **1997**, 2(3); S1430-4171(97)03124-5; DOI 10.1333/s00897970124a
121. Cropper, W. H. *Mathematica Computer Programs for Physical Chemistry*; Springer: New York, 1998.
122. Francl, M. M. Mathematica Information Center 2000. *Introduction to Statistical Mechanics*. <http://library.wolfram.com/infocenter/MathSource/814> (accessed Feb 2004).
123. Scarlete, M. 1998. WWW Living-Book of Physical Chemistry (CD-ROM version). <http://chemlog.ubishops.ca/newserie/toc.htm> (accessed Feb 2004).
124. <http://www.maplesoft.com/publications/books/indexby/category/Chemistry.shtml> (accessed Feb 2004).
125. Zielinski, T. J. 2003. Mathcad Documents for Physical Chemistry. <http://bluehawk.monmouth.edu/~tzielins/mathcad/index.htm> (accessed Feb 2004).
126. NSDL. Journal of Chemical Education National Science Digital Library Collection. <http://jce.divched.org/JCEDLib/> (accessed Feb 2004).
127. Cady, M. P.; Trapp, C. A. *A Mathcad Primer for Physical Chemistry*; W. H. Freeman and Company: New York, 2000.
128. Noggle, J. H. *Physical Chemistry Using Mathcad*; Pike Creek Publishing: Newark, DE, 1997.
129. PCOL. <http://pcol.ch.iup.edu/> (accessed Feb 2004).
130. Towns, M. H.; Kreke, K.; Fields, A. J. Chem. Educ **2000**, 77, 111.
131. Towns, M. H.; Kreke, K.; Sauder, D.; Stout, R.; Long, G.; Zielinski, T. J. J. Chem. Educ. **1998**, 75, 1653.
132. Atkins, P.; dePaula, J. *Explorations in Physical Chemistry: A Resource for Users of Mathcad*; WH Freeman: New York, 2002.
133. Holmes, Jon L.; Gettys, Nancy S. J. Chem. Educ. **2003** 80 1222 <http://jchemed.chem.wisc.edu/JCESoft/Programs/ACC/index.html> (accessed Mar 2004).
134. Weaver, G. C., Physical Chemistry in Practice, DVD. This DVD can be obtained from Gabriela Weaver the author. Purdue University, Department of Chemistry, 560 Oval Drive, West Lafayette, IN 47907-2084.
135. Hanson, D. M.; Harvey, E.; Sweeney, R.; Zielinski, T. J. 2003. Quantum States of Atoms and Molecules. <http://bluehawk.monmouth.edu/~tzielins/QuantumStates/index.htm> (accessed Feb 2004); beta version available from the authors.