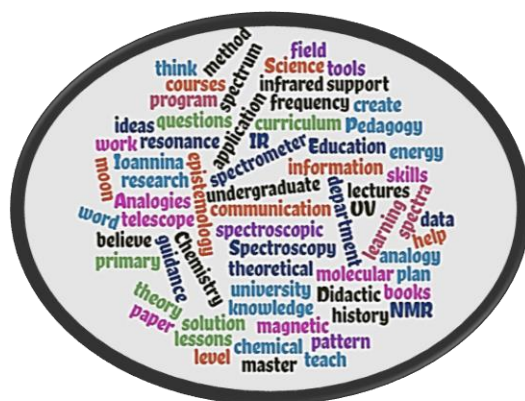


**Οι αντιληπτές ικανότητες και η δηλωτική γνώση
προπτυχιακών φοιτητών Χημείας ως προς
μερικές βασικές πλευρές και έννοιες της
φασματοσκοπίας. Μία προτεινόμενη διδακτική
αναλογία για τη διακριτική ικανότητα ενός
φασματομέτρου.**



ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: ΓΕΡΟΘΑΝΑΣΗΣ ΙΩΑΝΝΗΣ

0

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ
ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
ΙΣΤΟΡΙΑ, ΕΠΙΣΤΗΜΟΛΟΓΙΑ ΚΑΙ ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΤΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Οι αντιληπτές ικανότητες και η δηλωτική γνώση
προπτυχιακών φοιτητών Χημείας ως προς μερικές
βασικές πλευρές και έννοιες της φασματοσκοπίας.
Μία προτεινόμενη διδακτική αναλογία για τη
διακριτική ικανότητα ενός φασματομέτρου.

Σταμπουλή Όλγα
ΧΗΜΙΚΟΣ

Επιβλέπων Καθηγητής
Γεροθανάσης Ιωάννης, Ομότιμος Καθηγητής
Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Ιωαννίνων
Τομέας Οργανικής Χημείας και Βιοχημείας

Εξεταστική Επιτροπή: 1. Ομότιμος Καθηγητής, Ιωάννης Γεροθανάσης
2. Ομότιμος Καθηγητής, Γεώργιος Τσαπαρλής
3. Καθηγητής, Μιχαήλ Σίσκος

ΙΩΑΝΝΙΝΑ 2024

Ευχαριστίες

Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Γεροθανάση Ιωάννη, Ομότιμο Καθηγητή του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων για την υποστήριξη, κατανόηση και την επιστημονική καθοδήγηση κατά τη διάρκεια της μεταπτυχιακής διατριβής. Επιπρόσθετα, η παρακολούθηση των διαλέξεων του κ. Ι. Γεροθανάση, στα πλαίσια του μαθήματος “Σύγχρονες Φασματοσκοπικές Μέθοδοι για την ταυτοποίηση Οργανικών Μορίων”, εκτός από τις επιπλέον πληροφορίες και γνώσεις, που μου παρείχε, μου έδωσε τη δυνατότητα να έρθω σε επαφή με τους προπτυχιακούς φοιτητές, να συζητήσω μαζί τους και να θέσω ερωτήματα.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τους διδάσκοντες Μιχαηλίδη Άδωνη, Παπαγεωργίου Γεώργιο, Σίσκο Μιχαήλ και Τάση Δημήτριο, οι οποίοι επέτρεψαν τη διανομή ερωτηματολογίων στους φοιτητές κατά τη περίοδο των μαθημάτων τους. Σε αυτό το σημείο, θέλω να ευχαριστήσω όλους τους προπτυχιακούς φοιτητές, οι οποίοι αφιέρωσαν χρόνο για να συμπληρώσουν το ερωτηματολόγιο, καθώς χωρίς τη συμμετοχή τους δεν θα μπορούσε να πραγματοποιηθεί οποιαδήποτε έρευνα.

Ιδιαίτερες ευχαριστίες θα ήθελα να εκφράσω στον Ομότιμο καθηγητή κ. Τσαπαρλή Γεώργιο για τις πολύτιμες συμβουλές του κατά τη διάρκεια των μεταπτυχιακών μου σπουδών. Μέσα από τις συζητήσεις, που ως κύριο θέμα είχαν τη Διδακτική και τη Διδασκαλία, γνώρισα το δάσκαλο πίσω από τον καθηγητή. Όπως οφείλει κάθε δάσκαλος στο μαθητή του, έτσι και ο κύριος Τσαπαρλής μου παρείχε εκτός από ακαδημαϊκής φύσεως πληροφορίες και εκείνες, που στηρίζονταν στις εμπειρίες του ως εκπαιδευτικός.

Ακόμη, θα ήθελα να ευχαριστήσω την κα. Πέγκα Σοφία για τη συμβολή της στην έρευνα και τη δημοσιευθείσα εργασία μας στο διεθνές περιοδικό JCE.

Τέλος, ιδιαίτερες ευχαριστίες θέλω να εκφράσω στο σύντροφό μου, Δημήτρη, για την αμέριστη υποστήριξη και κατανόηση καθ’ όλη τη διάρκεια των σπουδών, αλλά και στους γονείς μου Αντώνιο και Κωνσταντίνα, που όλα αυτά τα χρόνια μου συμπαραστέκονται με αγάπη ηθικά και οικονομικά και με στηρίζουν σε όλες τις αποφάσεις, που έχω πάρει μέχρι και σήμερα.

Σταμπουλή Όλγα
Ιωάννινα 2024

Περιεχόμενα

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες.....	2
Περιεχόμενα.....	3
Σκοπός	6
Περίληψη.....	7
Abstract	9
Κεφάλαιο 1: ΒΑΣΙΚΑ ΘΕΜΑΤΑ ΔΙΔΑΚΤΙΚΗΣ ΤΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ.....	10
1.1 Διδακτική και Θεωρίες Μάθησης	10
1.1.1 Η Επιστήμη της Διδακτικής	10
1.1.2 Η έννοια της Μάθησης.....	13
1.1.3 Θεωρητικές Επιρροές στη Διδακτική της Χημείας.....	16
1.1.3.α Συμπεριφορισμός.....	17
1.1.3.β Θεωρία J. Piaget	17
1.1.3.γ Θεωρία L. Vygotsky.....	19
1.1.3.δ Θεωρία Επεξεργασίας Πληροφοριών	20
1.1.3.ε Η Θεωρία του Ausubel.....	21
1.1.4 Εποικοδομισμός και Μοντέλα στη Διδασκαλία της Χημείας	23
1.1.5 Εναλλακτικές ιδέες μαθητών	26
1.1.6. Εννοιολογική Αλλαγή	28
1.1.7 Μοντέλα και Διδασκαλία	30
1.1.7.α. Τα Διδακτικά Μοντέλα στη Χημεία.....	31
1.2 Η Διδασκαλία της Χημείας στην Ανώτατη Εκπαίδευση	36
1.2.1 Η Εκπαίδευση στην Ελλάδα	36
1.2.2 Η Διδασκαλία στην Τριτοβάθμια Εκπαίδευση.....	37
1.2.3 Η ιδιαιτερότητα της Χημείας ως διδασκόμενο μάθημα	39
1.2.4 Το μάθημα της Φασματοσκοπίας στην Τριτοβάθμια Εκπαίδευση	40
Κεφάλαιο 2: ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ ΚΑΙ ΘΕΜΑΤΑ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑΣ	44
2.1 Φασματοσκοπία.....	44
2.1.1 Τι είναι η Φασματοσκοπία	44
2.1.2 Τι είναι το Φάσμα.....	46
2.1.3 Φάσμα Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας.....	48

2.1.4 Παράγοντες, που επηρεάζουν τη μορφή των φασμάτων	49
2.1.5 Πρακτικά ζητήματα στη Φασματοσκοπία.....	52
2.2 Φασματοσκοπία Υπεριώδους (UV)	52
2.2.1 Φύση και βασική οργανολογία	52
2.2.2 Αρχές της Φασματοσκοπίας Υπεριώδους	54
2.2.3 Επίδραση διαλύτη στη Φασματοσκοπία Υπεριώδους.....	56
Επιλογή κατάλληλου διαλύτη	56
2.2.4 Εφαρμογές της Φασματοσκοπίας Υπεριώδους	57
2.3 Φασματοσκοπία Υπερύθρου (IR)	58
2.3.1 Φύση και βασική οργανολογία	58
2.3.2 Αρχές της Φασματοσκοπίας Υπερύθρου	60
2.3.3 Τύποι δονήσεων πολυατομικών μορίων	61
2.3.4 Εφαρμογές της Φασματοσκοπίας Υπερύθρου	64
2.4 Φασματοσκοπία Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (NMR)	65
2.4.1 Φύση και βασική οργανολογία	65
2.4.2 Αρχές της Φασματοσκοπίας Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού	67
2.4.3 Βασικά Χαρακτηριστικά Φάσματος NMR	71
2.4.3.α. Χημική Μετατόπιση	71
2.4.3.β. Σύζευξη spin – spin.....	75
Κεφάλαιο 3: ΜΕΘΟΔΟΣ - ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	77
3.1 Εισαγωγή – Στόχος Έρευνας.....	77
3.2 Το δείγμα της Έρευνας.....	77
3.3 Κωδικοποίηση και Ανάλυση των δεδομένων	78
A. Πρώτο μέρος Ερωτηματολογίου.....	78
B. Δεύτερο μέρος Ερωτηματολογίου	83
3.4 Διδακτική παρέμβαση σε βασικές έννοιες Φασματοσκοπίας.....	89
3.4.1 Κυματάριθος	89
3.4.2 Ολοκλήρωση	91
3.4.3 Κλίμακα δ - Μονάδα ppm	92
3.4.4 Διακριτική Ικανότητα	93
Κεφάλαιο 4: ΑΝΑΛΟΓΙΑ ΚΑΙ ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΠΑΡΕΜΒΑΣΗ	95
4.1 Τι είναι η Αναλογία.....	95
4.2 Διάκριση Αναλογίας από συγγενικές έννοιες	98
4.3 Είδη Αναλογιών	100

4.4 Ο ρόλος των Αναλογιών στην εκπαίδευση	101
4.5 Η συμβολή των διδακτικών αναλογιών στην κατανόηση εννοιών των Φυσικών Επιστημών	102
4.6 Πλεονεκτήματα και περιορισμοί στη χρήση Αναλογιών στην εκπαιδευτική διαδικασία	105
4.7 Η Χρήση Αναλογίας για την κατανόηση της διακριτικής ικανότητας στη Φασματοσκοπία NMR.....	107
Κεφάλαιο 5: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	110
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	112
Αναφορές	112
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	121

Σκοπός

Σκοπός της παρούσας ερευνητικής εργασίας είναι αρχικά, να ελέγξει κατά πόσο είναι κατανοητές ορισμένες βασικές έννοιες της Φασματοσκοπίας σε προπτυχιακούς φοιτητές του Τμήματος Χημείας Πανεπιστημίου Ιωαννίνων. Για το λόγο αυτό εξετάζουμε τις αυτοαντιλήψεις των φοιτητών σχετικά με τις γνώσεις τους για διάφορες πτυχές της φασματοσκοπίας. Επιπλέον, ασχολούμαστε με τη δοκιμή της δηλωτικής γνώσης των μαθητών σχετικά με ορισμένες βασικές έννοιες των φασματοσκοπικών μεθόδων UV, IR, NMR και MS.

Σύμφωνα με αυτό, βασικά ερωτήματα που ακολουθούν την ερευνητική μας μελέτη είναι: «Οι προπτυχιακοί φοιτητές έχουν αντιληφθεί βασικές Φασματοσκοπικές έννοιες;» «Ποια είναι η πραγματική δηλωτική γνώση των μαθητών τόσο σε βασικό επίπεδο (αναπαραγωγή γνώσης/πληροφορίας) όσο και σε υψηλό επίπεδο (πρωτότυπη εξήγηση) σχετικά με τις παρακάτω έννοιες: (1) συντεταγμένες στους άξονες ενός φάσματος; (2) η διεύρυνση των φασματικών γραμμών; (3) η φυσική σημασία του “κυματάριθμου” στη φασματοσκοπία IR και του “ppm” στη φασματοσκοπία NMR; (4) η ολοκλήρωση στο φάσμα; (5) το “μητρικό ιόν”; και (6) η “διακριτική ικανότητα” των παραπάνω φασματοσκοπικών μεθόδων.» «Είναι απαραίτητη η Διδακτική παρέμβαση, στο αντικείμενο της Φασματοσκοπίας;», «Ποια ή ποιες από τις Διδακτικές μεθόδους μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε στη Τριτοβάθμια εκπαίδευση;»

Τέλος, στόχος της έρευνας είναι να διαπιστώσει αν η Διδακτική παρέμβαση στο αντικείμενο της Φασματοσκοπίας είναι απαραίτητη για τη βαθύτερη κατανόηση των εννοιών. Να γίνει επιλογή και χρήση μιας κατάλληλης Διδακτικής μεθόδου στην εκπαιδευτική διαδικασία και να προτείνει, επιπρόσθετα, τη χρήση ενός Ανάλογου, το οποίο θα δώσει τη δυνατότητα, μετέπειτα, στους φοιτητές που ασχολούνται με το αντικείμενο της Φασματοσκοπίας, να αντιληφθούν καλύτερα την έννοια της διακριτικής ικανότητας ενός φασματομέτρου.

Περίληψη

Οι φασματοσκοπικές μέθοδοι προσδιορισμού και ανάλυσης της μοριακής δομής αποτελούν μέρος όλων των κλάδων της Χημείας, όπως της ανόργανης, οργανικής, αναλυτικής και φυσικοχημείας, τόσο στα προγράμματα σπουδών προπτυχιακής όσο και μεταπτυχιακής εκπαίδευσης στα Τμήματα Χημείας και παρεμφερών επιστημών.

Παρά την ευρεία χρήση, τη σημαντικότητα των φασματοσκοπικών μεθόδων στην ανάλυση και την πολυπλοκότητα των σχετικών εννοιών, μόλις πρόσφατα άρχισαν να εμφανίζονται μελέτες σχετικά με τη φασματοσκοπία στη βιβλιογραφία της εκπαίδευσης. Πολλοί ερευνητές και διδάσκοντες στη χημική εκπαίδευση λοιπόν έχουν επικεντρωθεί στα οφέλη της ανάλυσης και της ερμηνείας των φασμάτων UV, IR και NMR. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να επιτρέπει στους σπουδαστές να αναλύουν πιο εύκολα ένα φάσμα όσον αφορά τις μοριακές παραμέτρους και τελικά τις μοριακές δομές, ενώ δυσκολεύονται να κατανοήσουν βασικές έννοιες και χαρακτηριστικά της φασματοσκοπίας, όπως η φασματοσκοπική αναλυτική/διακριτική ικανότητα. Για το λόγο αυτό, ο σκοπός αυτής της έρευνας ήταν να ασχοληθεί με περαιτέρω θεμελιώδη ζητήματα που υποκρύπτονται στη φασματοσκοπία και δεν είναι εύκολα αντιληπτά από τους φοιτητές.

Αρχικά παρουσιάζονται οι αντιλήψεις των φοιτητών σχετικά με τις γνώσεις τους για διάφορες πτυχές της φασματοσκοπίας, όπως ο βαθμός κατανόησής τους για τις βασικές έννοιες της UV, IR, NMR και MS. Επιπλέον, εξετάζεται η δηλωτική γνώση των φοιτητών σχετικά με τις βασικές έννοιες και τα χαρακτηριστικά της φασματοσκοπίας και τα αποτελέσματα δείχνουν ότι η φασματομετρία μάζας θεωρείται η λιγότερο κατανοητή μέθοδος, ενώ η IR θεωρείται η καλύτερα κατανοητή. Οι φοιτητές θεωρούν ότι η ικανότητά τους να προσδιορίσουν τη φασματοσκοπική μέθοδο που χρησιμοποιήθηκε για την απόκτηση ενός φάσματος είναι σχετικά ικανοποιητική, όπως επίσης και η ικανότητά τους να εξαγάγουν πληροφορίες από το φάσμα, αν και σε μικρότερο βαθμό. Οι φοιτητές αξιολογούν την κατανόησή τους για τις διαφορές μεταξύ των τεσσάρων φασματοσκοπικών μεθόδων ως μέτρια. Ενώ, όσον αφορά τη δηλωτική γνώση των φοιτητών, σχετικά με τις βασικές έννοιες και τα χαρακτηριστικά

της φασματοσκοπίας, όπως η φυσική σημασία του “κυματάριθμου” στη φασματοσκοπία IR, του “ppm” στη φασματοσκοπία NMR, η “έννοια της ολοκλήρωσης” και η “διακριτική ικανότητα” ενός φασματομέτρου, η ανάλυση των απαντήσεων των φοιτητών, έδωσε αποτελέσματα, τα οποία ήταν κυρίως απογοητευτικά.

Τέλος, προκειμένου να γίνει πιο κατανοητή η έννοια ‘διακριτική ικανότητα’ ενός φασματομέτρου προτείνεται μια διδακτική αναλογία.

Abstract

Title: Undergraduate chemistry students' perceived abilities and declarative knowledge on some basic aspects and concepts of spectroscopy. Plus, a proposed instructional analogy for the resolving power of a spectrometer.

Spectroscopic methods for determining and analyzing molecular structure are part of all sectors of Chemistry, such as inorganic, organic, analytical, and physical chemistry, both in undergraduate and graduate curricula in Chemistry departments and related sciences. Despite their widespread use, the significance of spectroscopic methods in analysis, and the complexity of the related concepts, studies on spectroscopy in the education literature have only recently begun to emerge. Many researchers and educators in chemical education have therefore focused on the benefits of analyzing and interpreting UV, IR, and NMR spectra. This results in allowing students to more easily analyze a spectrum in terms of molecular parameters and ultimately molecular structures, while they struggle to understand basic concepts and characteristics of spectroscopy, such as spectroscopic analytical/discriminatory capability. For this reason, the purpose of this research was to address further fundamental issues underlying spectroscopy that are not easily perceived by students. Initially, the students' perceptions regarding their knowledge of various aspects of spectroscopy are presented, such as their level of understanding of the basic concepts of UV, IR, NMR, and MS. Additionally, the declarative knowledge of students regarding the basic concepts and characteristics of spectroscopy is being examined, and the results show that mass spectrometry is considered the least understood method, while IR is regarded as the best understood. Students believe that their ability to identify the spectroscopic method used to obtain a spectrum is relatively satisfactory, as is their ability to extract information from the spectrum, although to a lesser extent. The students assess their understanding of the differences between the four spectroscopic methods as moderate. While, regarding the declarative knowledge of students about the basic concepts and characteristics of spectroscopy, such as the physical significance of "wavenumber" in IR spectroscopy, "ppm" in NMR spectroscopy, the "concept of integration," and the "resolution" of a spectrometer, the analysis of students' responses yielded results that were primarily disappointing. Finally, in order for the above concepts to be better understood by the students, a teaching intervention is proposed. The teaching intervention was carried out by the instructor Mr. Ioannis Gerothanasis, regarding the concepts: wave number, ppm, completion, and a teaching analogy was used for a better understanding of the 'resolution' of a spectrometer. The ratio is between the most advanced international optical telescope (the Gran Telescopio Canarias) and the NMR spectrometer with the highest resolution (the AVANCE 1000).

Κεφάλαιο 1: ΒΑΣΙΚΑ ΘΕΜΑΤΑ ΔΙΔΑΚΤΙΚΗΣ ΤΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

1.1 Διδακτική και Θεωρίες Μάθησης

1.1.1 Η Επιστήμη της Διδακτικής

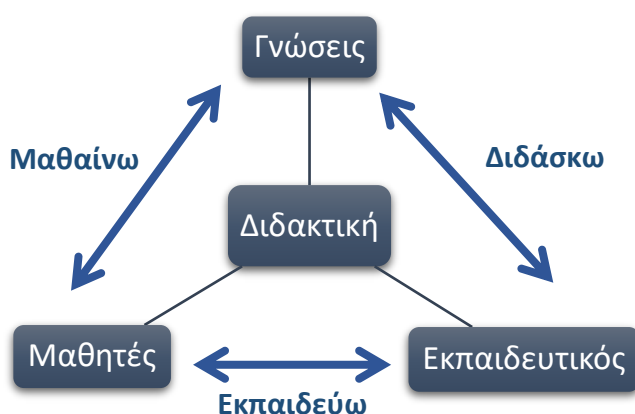
Ο όρος «Διδακτική» πρωτοεμφανίστηκε στον Ευρωπαϊκό χώρο τον 17^ο αιώνα, όπου αναφερόταν στις μεθοδολογικές προτάσεις χωρίς να υπάρχει ένα συγκροτημένο διδακτικό σύστημα και ένα ορισμένο πλαίσιο αρχών. Το 19^ο αιώνα δεν παρατηρήθηκε διαφοροποίηση απλά μια εξέλιξη του όρου και τέλος τον 20^ο αιώνα σχετίστηκε με τη σωκρατική μέθοδο, όπου διαμορφώθηκε το στοιχείο του ελέγχου της εγκυρότητας με την ένταξη της ερευνητικής μεθοδολογίας.

Η Διδακτική ως επιστήμη δεν πρέπει να συγχέεται με την «Διδασκαλία». Η διδακτική ασχολείται με τις θεωρίες που εξηγούν και εξετάζουν τη διδασκαλία των μαθημάτων, λαμβάνοντας υπόψη τις δύο κύριες διαστάσεις της, την κοινωνική και την περιεχομένου, καθώς και τους στόχους, τους σκοπούς, τις προϋποθέσεις και τις αιτιολογήσεις της. Επιπλέον, η διδακτική ασχολείται με τα ερωτήματα: Τι, Γιατί, Πότε, Πού, Σε ποιον και με Ποια μέσα. Ο κεντρικός της στόχος είναι να βελτιώσει και να οργανώσει τη μαθησιακή διαδικασία, καθώς και τις συνθήκες, τις μεθόδους, τις επιδράσεις και τις αρχές που διέπουν τη διδασκαλία. (Κόκκοτας, 1989)

Η Διδακτική σήμερα είναι η επιστήμη, η οποία προετοιμάζει τους εκπαιδευτικούς, τους βοηθά και συμβάλλει στο έργο τους, συνιστά δηλαδή έναν επιστημονικό τομέα που συνεισφέρει στην ακαδημαϊκή μόρφωση και την επαγγελματική κατάρτιση των υποψηφίων και των υπηρετούντων εκπαιδευτικών. Διακρίνεται σε Γενική Διδακτική, η οποία ασχολείται γενικά με τα προβλήματα που ανακύπτουν κατά τη διάρκεια της διδασκαλίας και σε Ειδική Διδακτική, η οποία ασχολείται με τα προβλήματα της διδασκαλίας του κάθε αντικειμένου ειδικά (Γιαννούλης, 1993). Η Διδακτική μελετά τις διαδικασίες με τις οποίες συντελείται η μετάδοση και η οικοδόμηση της γνώσης καθώς και η καλλιέργεια δεξιοτήτων στο πλαίσιο είτε ατομικών είτε συλλογικών

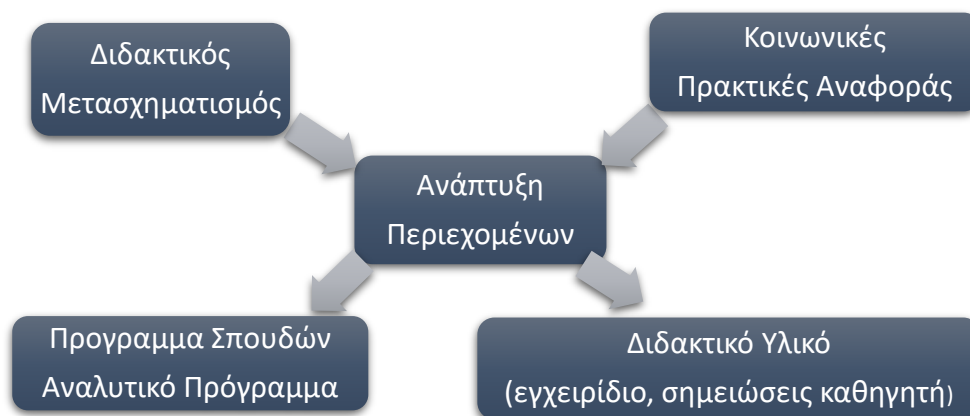
εκπαιδευτικών/μαθησιακών καταστάσεων, με απώτερο σκοπό τη βελτίωση των διαδικασιών αυτών. (Komorek & Kattmann, 2008)

Η Διδακτική των Επιστημών εμφανίζει ραγδαία πρόοδο και συνίσταται κυρίως στη δημιουργία ενός θεωρητικού πλαισίου που βασίζεται στις επικοδομητικές και κοινωνικοπολιτισμικές ψυχολογικές θεωρίες. Όπως και κάθε άλλη επιστήμη, έτσι και η Διδακτική, χρειάζεται τις δικές της βασικές έννοιες προκειμένου να προσεγγίσει κάθε προβληματισμό που ανακύπτει με τους δικούς της όρους και να περιγράψει με σαφήνεια και περιεκτικότητα όλες τις πτυχές της. Η Διδακτική αναπαρίσταται με ένα τρίγωνο (Εικόνα 1) που συμβολίζει το σύστημα που συνδέει τις γνώσεις, το μαθητή και τον εκπαιδευτικό (Τσαπαρλής, 1991).



Εικόνα 1.1: Το Τρίγωνο της Διδακτικής (Τσαπαρλής, 1991)

Το διδακτικό τρίγωνο μας επιτρέπει να εξετάσουμε τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των κορυφών του, που αποτελούν το κεντρικό ζήτημα της διδακτικής. Αυτό περιλαμβάνει τις γνώσεις, τον τρόπο με τον οποίο μεταδίδονται από τους εκπαιδευτικούς και τον τρόπο που οικοδομούνται από τους μαθητές, μέσα από μια συνεχή σχέση μεταξύ εκπαιδευτικών και μαθητών (Ματσαγγούρας, 2006). Αυτό που μας ενδιαφέρει είναι η μελέτη των διαφόρων τομέων που συνδέουν τις επιμέρους κορυφές του διδακτικού τριγώνου. Το βασικό πεδίο μελέτης είναι η ανάπτυξη των περιεχομένων δηλαδή η διδακτέα ύλη και το διδακτικό υλικό. Οι κύριοι ερευνητικοί άξονες στη διδακτική φαίνονται στην παρακάτω εικόνα (Εικόνα 1.2).



Εικόνα 1.2: Η Εξάρτηση των κύριων ερευνητικών αξόνων στην Διδακτική. (Γεωργιάδου & Τσαπαρλής, 1999)

Συγκεκριμένα η Διδακτική της Χημείας αποτελεί ένα επιστημονικό πεδίο που εστιάζει στη μελέτη και τη βελτίωση της ποιότητας της διδασκαλίας της Χημείας σε όλες τις βαθμίδες της επίσημης εκπαίδευσης, καθώς και στις διάφορες μορφές άτυπης μάθησης. Είναι ένα σχετικά νέο επιστημονικό αντικείμενο, με συγκεκριμένους σκοπούς, καθορισμένες έννοιες, όρους και θεωρητικά πλαίσια, καθώς και ανεξάρτητες ερευνητικές μεθόδους. Διαθέτει διεθνείς και εθνικές επιστημονικές κοινότητες, περιοδικά, συνέδρια και αναγνωρισμένες θέσεις σε εκπαιδευτικά και ερευνητικά ιδρύματα. Η Διδακτική της Χημείας εντάσσεται στο ευρύτερο πλαίσιο της Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών, αξιοποιώντας την πολύχρονη έρευνα που έχει αναπτυχθεί παγκοσμίως στον τομέα αυτό. Χαρακτηρίζεται από διεπιστημονικότητα, αντλώντας μεθόδους και τεχνικές από άλλες φυσικές επιστήμες, οδηγώντας σε πλούτο ερευνητικών προσεγγίσεων. Σχετίζεται, επίσης, με τη Φιλοσοφία και την Ιστορία της Χημείας, καθώς και με την Παιδαγωγική και την Ψυχολογία, προσφέροντας τρόπους ανάλυσης της φύσης της Χημείας και της συμβολής της στην κατανόηση του κόσμου. Η Παιδαγωγική και η Ψυχολογία παρέχουν τα μέσα για να κρίνουμε αν ένα συγκεκριμένο θέμα αξίζει να διδαχθεί καθώς και να διεξάγουμε διάφορες εμπειρικές έρευνες για το αν το θέμα αυτό μπορεί να γίνει κατανοητό από τους μαθητές. Επιπλέον, θα μπορούσαμε να αναφέρουμε ότι και άλλες επιστήμες όπως η Γλωσσολογία και η Κοινωνιολογία

δίνουν τη δυνατότητα να προσεγγίσουμε τη Χημεία ως εισαγωγή σε μία νέα γλώσσα (Χριστιάς, 2001) (Τσαπαρλής, 1991).

Στην παρούσα εργασία θα δοθεί έμφαση σε μία έννοια της διδακτικής, την διδακτική τεχνική. Η «διδακτική τεχνική» είναι ένα παιδαγωγικό «εργαλείο» το οποίο αξιοποιείται στο πλαίσιο των διδακτικών και μαθησιακών δραστηριοτήτων. Οι διδακτικές τεχνικές δίνουν τη δυνατότητα στους μαθητές να σκεφτούν, να γράψουν, να διαβάσουν, να σχολιάσουν και να ασκηθούν ομαδικά ή ατομικά (Ματσαγγούρας, 2006). Ο όρος διδακτική τεχνική είναι συνώνυμος με τους όρους «τεχνική διδασκαλίας» ή «εκπαιδευτική τεχνική». Κρίνεται σκόπιμο να χρησιμοποιούνται διάφορες διδακτικές τεχνικές, ανάλογα με τους διδακτικούς στόχους, τις συνθήκες, τις απαιτήσεις και τις ανάγκες των μαθητών, ώστε να επιτυγχάνονται τα βέλτιστα μαθησιακά αποτελέσματα και να κινητοποιείται/διατηρείται το μαθησιακό ενδιαφέρον. Επιπλέον, η αξιοποίηση πολλαπλών διδακτικών τεχνικών στη διδασκαλία ικανοποιεί τις ανάγκες και το στιλ μάθησης των μαθητών, αυξάνοντας την προσαρμοστικότητά τους, καθώς εξασκούνται σε εναλλακτικές συνθήκες μάθησης (Ρέππα & Ιωάννου, 2015).

1.1.2 Η έννοια της Μάθησης

Η μάθηση είναι ένα σύνθετο εσωτερικό βιολογικό και πνευματικό φαινόμενο που έχει μελετηθεί από διάφορους κλάδους της επιστήμης όπως η ψυχολογία, η παιδαγωγική, η ιατρική και η βιολογία. Οι διαδικασίες της μάθησης είναι τόσο ποικιλόμορφες και διαφορετικές, με αποτέλεσμα να είναι αδύνατη η ένταξη τους σε μία και μοναδική κατηγορία. Ο (Χαραλαμπίδης, 2001) επισημαίνει ότι ως βιολογική διαδικασία, η μάθηση παρατηρείται στα ζώα και στους ανθρώπους και είναι αποτέλεσμα μακράς άσκησης και επανάληψης. Ενώ, ως πνευματική διαδικασία η μάθηση παρατηρείται μόνο στον άνθρωπο, η οποία κατευθύνεται σε μεγάλο βαθμό από τον ίδιο και εκδηλώνεται στη συμπεριφορά του.

Προκειμένου να ολοκληρωθεί μέσα σε έναν ανθρώπινο εγκέφαλο η διαδικασία κατά την οποία αυτός μαθαίνει, απαιτούνται πολλά και διαδοχικά, με εξαιρετική

σημασία στην σειρά διαδοχής τους, στάδια. Αυτά τα στάδια αποτελούν αντικείμενο μελέτης πολλών διαφορετικών επιστημονικών κλάδων και συχνά προκαλούν αντιπαραθέσεις μεταξύ των επιστημόνων, καθώς προκύπτουν συνεχώς νέες θεωρίες και συμπεράσματα σχετικά με τη διαδικασία της μάθησης και τον ρόλο που παίζει κάθε στάδιο μεμονωμένα. Οι διάφορες επιστημονικές θεωρίες που προσπαθούν να εξηγήσουν το φαινόμενο της μάθησης βασίζονται στη λειτουργία του εγκεφάλου και στον τρόπο με τον οποίο οι πληροφορίες προσλαμβάνονται, κωδικοποιούνται και διατηρούνται, ώστε κάθε άτομο να προσαρμόζεται στο περιβάλλον του. Το κοινό χαρακτηριστικό αυτών των προσεγγίσεων είναι ότι ερευνούν πώς το περιβάλλον επηρεάζει τον ανθρώπινο εγκέφαλο μέσω συγκεκριμένων μαθησιακών διαδικασιών, με στόχο την επίτευξη, σε μικρότερο ή μεγαλύτερο βαθμό, της μάθησης. Ο Τριλιανός (Τριλιανός, 2003) σημειώνει ότι υπάρχει μεγάλη διάσταση απόψεων μεταξύ των ερευνητών για τον προσδιορισμό της έννοιας της μάθησης. Κατά καιρούς, η μάθηση ορίστηκε ως δημιουργία υποκατάστατων ανακλαστικών (Pavlov), ως δοκιμή και πλάνη (Thorndike), ως επανάληψη μιας αντίδρασης μετά από θετική ενίσχυση (Skinner), ως ενόραση (Kohler), ως μίμηση προτύπου (Bandura), ως επεξεργασία των πληροφοριών (Neisser, Seymour, Gagné) και ως προσωπική ερμηνεία στις νεοαποκτηθείσες πληροφορίες (Maslow, Rogers) (Bigge, 1990).

Ο ακριβέστερος ορισμός της μάθησης μπορεί να δοθεί όταν αναλυθούν όλοι οι τομείς της ζωής ενός ατόμου. Επομένως, η μάθηση αφορά τόσο το ψυχοκινητικό τομέα (κινητικές δεξιότητες), το γνωστικό τομέα (σύνθεση, αποτύπωση, αναπαραγωγή πληροφοριών και γνώσεων), όσο το συναισθηματικό τομέα (δημιουργία στάσεων και συναισθηματικών εκδηλώσεων) και τον κοινωνικό τομέα (δεξιότητες κοινωνικοποίησης και συνεργασίας) (Δημητρόπουλος & Καλούρη - Αντωνοπούλου, 2003).

Προσπαθώντας να ορίσουμε την μάθηση σύμφωνα με τις αρχές της γνωστικής ψυχολογίας, θα μπορούσαμε να πούμε ότι η μάθηση είναι μία διαδικασία η οποία πραγματοποιείται στον εσωτερικό κόσμο καθενός και έχει σαν αποτέλεσμα την τροποποίηση της συμπεριφοράς του. Η μάθηση εξαρτάται από τις προηγούμενες γνώσεις, το υπόβαθρο, τις εμπειρίες, την ιδιοσυγκρασία και το στυλ μάθησης του κάθε ενδιαφερόμενου που θέλει να την αποκτήσει (Καφετζόπουλος, 1995).

Παρά την στενή αλληλεπίδραση μάθησης και διδασκαλίας (Τριλιανός, 2003) η ύπαρξη της μιας δεν συνεπάγεται αυτόματα και την ύπαρξη της άλλης ούτε το αντίστροφο. Άλλωστε για να είναι χρήσιμη η διδασκαλία πρέπει ο εκπαιδευτικός να μπορεί να λάβει υπόψη του τις αρχές και τους νόμους της μάθησης και μέσα από το σύνολο των ενεργειών που θα εφαρμόσει να ενεργοποιήσει και να προωθήσει τη μάθηση (Φλουρής, 2003).



Εικόνα 1.3: Επιμέρους στοιχεία που συνθέτουν τη μάθηση. (Γιαννούλης, 1993)

Μελετώντας λοιπόν τις θεωρίες μάθησης που επικράτησαν διαχρονικά κατά την εξελικτική πορεία των πειραμάτων και εφαρμογών των επιστημών της παιδαγωγικής και διδακτικής οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι μάθηση είναι μία έννοια που ορίζεται με βάση τις επανειλημμένες παρατηρήσεις συμπεριφοράς. Αυτή τη παρατήρηση της συμπεριφοράς την προσεγγίζουν οι διάφορες θεωρίες από διαφορετικές όψεις και έτσι βλέπουν τα πράγματα από διαφορετική οπτική γωνία. Ο κάθε εκπαιδευτικός θεωρείται πλέον ότι οφείλει να είναι ενήμερος για τις βασικές θεωρίες μάθησης, τις αρχές τους και τη μεθοδολογία τους ώστε να μπορέσει να κρίνει και τελικά να επιλέξει ώστε να τις εφαρμόσει στην τάξη (Φλουρής, 1984). Άλλωστε κάθε είδους διδασκαλία σχετίζεται με ορισμένες παραδοχές για το τι πρέπει

να μάθει ο μαθητευόμενος και το πώς είναι καλύτερο να το μάθει, δηλαδή τους στόχους, το περιεχόμενο και τη διαδικασία της μάθησης (Ράπτης & Ράπτη, 2003).

Οι θεωρίες μάθησης που θα αναπτυχθούν στην συνέχεια (Ενότητα 1.1.3) είναι οι επικρατέστερες και οι πλέον αντιπροσωπευτικές στον τομέα της εκπαίδευσης. Ορισμένες από αυτές είναι η προσέγγιση στην μάθηση: με τον συμπεριφορισμό, με τον εποικοδομητισμό και τις γνωστικές θεωρίες γενικότερα, οι κοινωνικοπολιτισμικές θεωρίες για τη γνώση και οι ψυχολογικές θεωρίες μάθησης.

1.1.3 Θεωρητικές Επιρροές στη Διδακτική της Χημείας

Όπως και στις άλλες περιοχές της επιστήμης, έτσι και στην περιοχή της μάθησης υπάρχουν διάφορες θεωρίες που προσπαθούν να ερμηνεύσουν τις βασικές της διεργασίες. Οι θεωρίες αυτές διαφέρουν κατά πολύ στη μέθοδο και στο συμπέρασμα, γιατί έχουν συγκεντρώσει την προσοχή τους αποκλειστικά σε ορισμένες όψεις της όλης διεργασίας της μάθησης και έτσι βλέπουν τα πράγματα από διαφορετική οπτική γωνία (Φλουρής, 2003). Η ανάπτυξη μιας ενιαίας θεωρίας μάθησης, η οποία θα παρέχει μια «φόρμουλα» γενικής εφαρμογής για κάθε διδακτική κατάσταση, είναι ανέφικτη, εξαιτίας της ποικιλίας των μαθησιακών συνθηκών που χαρακτηρίζουν τη διδασκαλία.

Με τον όρο «θεωρία μάθησης» εννοούμε μια ολοκληρωμένη συστηματική άποψη για τη φύση της διαδικασίας μέσα από την οποία οι άνθρωποι σχετίζονται με το περιβάλλον τους με τέτοιο τρόπο, ώστε να επαυξάνουν την ικανότητά τους να χρησιμοποιούν πιο αποτελεσματικά τόσο τον εαυτό τους όσο και το περιβάλλον τους (Φράγκος, 1983).

Η Εκπαιδευτική Ψυχολογία στηριζόμενη στην Αναπτυξιακή και στη Γνωστική Ψυχολογία διερευνά και αναπτύσσει θεωρίες για τη μάθηση. Στην ενότητα αυτή θα αναπτύξουμε τις κυριότερες θεωρίες της Εκπαιδευτικής Ψυχολογίας που επέδρασαν στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών γενικότερα και στη Διδακτική της Χημείας ειδικότερα.

1.1.3.α Συμπεριφορισμός

Η πρώτη θεωρητική προσέγγιση της μάθησης είναι αυτή του συμπεριφορισμού. Ο συμπεριφορισμός (behaviorism) προσεγγίζει τη μελέτη των ψυχολογικών φαινομένων υιοθετώντας τη βασική θέση πως η συμπεριφορά μπορεί να μελετηθεί με συστηματικό και παρατηρήσιμο τρόπο χωρίς καμία αναφορά σε εσωτερικές νοητικές καταστάσεις. Κατά την διάρκεια της μάθησης δεν δίνεται τόσο μεγάλη σημασία στις εσωτερικές διεργασίες που λαμβάνουν χώρα, αλλά στις αλλαγές που συντελούνται στην εμφανή συμπεριφορά του μαθητευομένου. Η αλλαγή συμπεριφοράς προκύπτει λόγω των εμπειριών που αποκτούνται. Στον συμπεριφορισμό, η συμπεριφορά θεωρείται ως αντίδραση σε ένα ερέθισμα και η μάθηση ορίζεται ως η αλλαγή αντιδράσεων (Σμυρναίου, 2010).

Η βασική θέση του συμπεριφορισμού, ότι η ψυχολογία πρέπει να ασχοληθεί μόνο με τη μελέτη της παρατηρήσιμης συμπεριφοράς και όχι των νοητικών καταστάσεων αμφισβητήθηκε από την Κεντρική Ευρώπη όπου αναπτύχθηκαν θεωρίες της αναπτυξιακής ψυχολογίας για την εξήγηση των νοητικών λειτουργιών. Οι πιο γνωστές από αυτές είναι των J. Piaget και L. Vygotsky.

1.1.3.β Θεωρία J. Piaget

Ο Jean Piaget υποστηρίζει ότι η γνωστική ανάπτυξη ακολουθεί μια καλά προκαθορισμένη ακολουθία η οποία χαρακτηρίζεται από τέσσερα διαφορετικά στάδια. Το κάθε στάδιο αποτελείται από μία διαφορετική δομή γνώσης και χαρακτηρίζεται από διαφορετικές συμπεριφορές (Πίνακας 1.1). Στην θεωρία του Piaget δίνεται ιδιαίτερη έμφαση στην έννοια της προσαρμογής και υποστηρίζεται ότι οι αλλαγές στη συμπεριφορά των οργανισμών κατά τη διάρκεια της μακράς πορείας εξέλιξης σχετίζονται με τις αλλαγές στη συμπεριφορά των οργανισμών από τη στιγμή της γέννησης μέχρι το τέλος της ζωής τους. Στην πρώτη περίπτωση, οι αλλαγές είναι αποτέλεσμα βιολογικής προσαρμογής στο περιβάλλον, ενώ στη δεύτερη περίπτωση, οι αλλαγές είναι αποτέλεσμα της προσπάθειας του ανθρώπου να προσαρμόσει τη συμπεριφορά του σύμφωνα με τις απαιτήσεις του περιβάλλοντος (Κουτσουβανού, 2012) (Piaget, 1999).

Στη θεωρία του Piaget οι έννοιες που ο μαθητής μπορεί να αναπαραστήσει και ο τρόπος με τον οποίο το πραγματοποιεί καθορίζεται από το είδος των νοητικών λογικών ενεργειών που είναι σε θέση να εκτελέσει στο αναπτυξιακό στάδιο στο οποίο βρίσκεται. Καθώς ο μαθητής περνά σε ανώτερο στάδιο λογικών ενεργειών καθίσταται ικανός να αναπαραστήσει έννοιες πιο σύνθετες σε όλο και πιο αφηρημένο επίπεδο (Τσαπαρλής, 1991) (Bigge, 1990).

Τα στάδια που ενδιαφέρουν τη Διδακτική της Χημείας είναι το στάδιο των συγκεκριμένων λογικών ενεργειών και το στάδιο των αφηρημένων (τυπικών) λογικών ενεργειών. Στο στάδιο των λογικών ενεργειών ο μαθητής αναπτύσσει την ικανότητα της ταξινόμησης και της διατήρησης. Δεν μπορεί να αιτιολογήσει ωστόσο αντικείμενα και γεγονότα που ο ίδιος δεν έχει προσωπική εμπειρία. Αυτό σημαίνει ότι για να κατανοήσει τη Χημεία έχει ανάγκη από εποπτεία, πειράματα τα οποία όχι μόνο να παρακολουθεί ως θεατής, αλλά και να είναι ο ίδιος εκτελεστής. Στο στάδιο των αφηρημένων λογικών ενεργειών ο μαθητής αναπτύσσει την ικανότητα συλλογισμού με φράσεις, με υποθέσεις και όχι με αντικείμενα παρόντα. Σημαντικό χαρακτηριστικό του σταδίου αυτού είναι η δυνατότητα του μαθητή να ορίζει το πιθανό (Bliss, 2001).

ΣΤΑΔΙΟ ΝΟΗΤΙΚΗΣ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ	ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΜΑΘΗΤΗ
1. Αισθησιοκινητικό (Γέννηση έως 2 ετών)	Διαφοροποιεί τον εαυτό του από τους άλλους. Αναπτύσσει την έννοια της μονιμότητας του αντικειμένου.
2. Προεγνοιολογικό (2 έως 7 ετών)	Μαθαίνει να χρησιμοποιεί τη γλώσσα και να αναπαριστάνει τα αντικείμενα με εικόνες και λέξεις. Η σκέψη του είναι ακόμα εγωκεντρική.
3. Συγκεκριμένων λογικών ενεργειών (7 έως 12 ετών)	Μπορεί να σκέφτεται λογικά για τα γεγονότα και τα αντικείμενα. Επιτυγχάνει τη διατήρηση του αριθμού, της μάζας και του βάρους.
4. Τυπικών λογικών ενεργειών (12 ετών και άνω)	Μπορεί να σκέφτεται λογικά για αφηρημένες έννοιες και να ελέγχει τις υποθέσεις συστηματικά.

Πίνακας 1.1: Τα στάδια της νοητικής ανάπτυξης σύμφωνα με τη θεωρία του Piaget. (Piaget, 1999)

Παρόλο που η συμβολή του Piaget στη Διδακτική είναι μεγάλη, καθώς αυτός ήταν ο πρώτος που υποστήριξε ότι ο μαθητής δεν δέχεται παθητικά ερεθίσματα από το

περιβάλλον του, αλλά ότι είναι ένας ενεργός πλάστης της γνώσης, η θεωρία του αποτέλεσε αντικείμενο αυστηρής κριτικής. Τα κυριότερα σημεία της κριτικής αυτής αναφέρουν ότι η θεωρία του μπορεί να χαρακτηριστεί ως θεωρία ανάπτυξης και όχι ως θεωρία μάθησης, καθώς δεν λαμβάνει υπόψη την επίδραση του κοινωνικού και πολιτισμικού περιβάλλοντος. Επίσης, πολλές έρευνες έχουν αποδείξει ότι στην ηλικία των 16 ετών το 50% των μαθητών δεν έχουν φτάσει στο στάδιο των τυπικών λογικών σκέψεων. Συνεπώς, ξεκίνησαν στη γνωστική ψυχολογία να αναπτύσσονται νέες θεωρίες για τη μάθηση (Driver, Guesne, & Tiberghien, 1985).

1.1.3.γ Θεωρία L. Vygotsky

Ο Vygotsky το 1934 υποστήριξε ότι ο μηχανισμός της ατομικής αλλαγής έχει τις ρίζες του στην κοινωνία και το πολιτισμό. Ο Vygotsky συμφωνούσε με τον Piaget όσον αφορά τη θεωρία του ότι ο μαθητής διαδραματίζει ενεργητικό ρόλο στη διαμόρφωση της γνώσης του (Howe, 1996). Παράλληλα όμως, αποδίδει μεγάλη σημασία στο παιδαγωγικό και πολιτισμικό περιβάλλον του μαθητή και θεωρεί ότι διαμέσου της γλώσσας αναπτύσσεται η σκέψη του. Η σημασία που αποδίδει ο Vygotsky στην επίδραση του κοινωνικοπολιτισμικού περιβάλλοντος στη μάθηση φαίνεται από την κεντρική θέση που έχει στη θεωρία του η «ζώνη της επικείμενης ανάπτυξης», δηλαδή η περιοχή εκείνη που αποτελεί τη διαφορά ανάμεσα στην πραγματική νοητική ηλικία του μαθητή και στο επίπεδο στο οποίο μπορεί να φτάσει καθοδηγούμενος από το περιβάλλον (Vygotsky, 1987).

Η καθοδήγηση πραγματοποιείται με τη χρήση υποστηρικτικών δομών που παρέχονται από ανθρώπους (εκπαιδευτικός, άλλος ενήλικας, μαθητές με περισσότερες γνώσεις και ικανότητες) ή εργαλεία (π.χ. διδακτικά εγχειρίδια, υπολογιστής) (Scott, 1998). Οι υποστηρικτικές αυτές δομές λειτουργούν κάθε φορά σαν «σκαλωσιά» που επιτρέπει στους μαθητές να επιτύχουν ανώτερο επίπεδο κατανόησης και αντιμετώπισης προβλημάτων μέσα στη ζώνη επικείμενης ανάπτυξης (ZEA) (Vygotsky, 1987). Απαραίτητη προϋπόθεση για να επιτευχθεί (προωθηθεί) η κατανόηση, είναι η σκαλωσιά μάθησης να βρίσκεται μέσα στα όρια της ήδη

υπάρχουσας ΖΕΑ του μαθητή και να περιέχει τις απαραίτητες πληροφορίες ώστε ο μαθητής να επιτύχει το επιθυμητό βήμα προόδου (Shepardson, 1999).

1.1.3.δ Θεωρία Επεξεργασίας Πληροφοριών

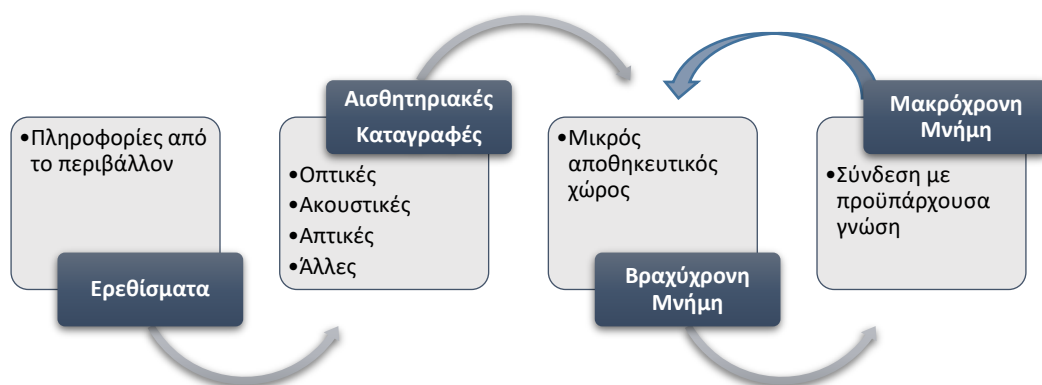
Σύμφωνα με τη θεωρία επεξεργασίας των πληροφοριών, τα ερεθίσματα από το περιβάλλον εισέρχονται στο γνωστικό σύστημα και γίνονται αντικείμενο επεξεργασίας από μία σειρά επιμέρους συστημάτων όπως η αντίληψη και η μνήμη (Μπαμπλέκου, 2007). Η αντίληψη ορίζεται ως η διαδικασία ερμηνείας των πληροφοριών που εισέρχονται στον εγκέφαλο μέσω των αισθητηριακών οργάνων, για τη σχηματοποίηση εικόνων, ήχων και προτάσεων. Ενώ, η μνήμη θεωρείται ως μία λειτουργία που αποτελείται από τρία στάδια: την κωδικοποίηση, την αποθήκευση και την ανάσυρση (Μάνιου - Βάκαλη, 1995).

Με την κωδικοποίηση οι εισερχόμενες αισθητηριακές πληροφορίες τοποθετούνται μέσα στο μνημονικό σύστημα σε διάφορους μνημονικούς κώδικες. Η αποθήκευση αναφέρεται στη διατήρηση των πληροφοριών για μεγάλο χρονικό διάστημα. Τέλος, η ανάσυρση των αποθηκευμένων πληροφοριών γίνεται με την αναγνώριση και στην συνέχεια με την ανάκληση.

Η σημαντικότερη λειτουργία της μνήμης είναι η αποθήκευση, δηλαδή η συγκράτηση των πληροφοριών για αρκετό χρόνο, με σκοπό να τις επεξεργαστεί περαιτέρω. Η «βραχύχρονη μνήμη» ή μνήμη εργασίας είναι το μέρος του μνημονικού συστήματος που επιτρέπει λεπτομερέστερη αναπαράσταση και ανάλυση των πληροφοριών που πρόκειται να χρησιμοποιηθούν. Το εύρος της πληροφορίας που μπορεί να αποθηκευτεί στη βραχύχρονη μνήμη συνήθως είναι μικρό αλλά μεταβάλλεται ανάλογα με τις προϋπάρχουσες γνώσεις και την ικανότητα κωδικοποίησης της πληροφορίας που έχει το κάθε άτομο. Ο μέγιστος χρόνος αποθήκευσης στη βραχύχρονη μνήμη είναι δεκαοκτώ δευτερόλεπτα (Baddeley, 2009).

Σε αντίθεση με τη μνήμη εργασίας, η ικανότητα αποθήκευσης της μακρόχρονης μνήμης είναι εξαιρετικά μεγάλη. Στην Εικόνα 4 παρατηρούμε τον τρόπο με τον οποίο συνδέονται η βραχύχρονη με την μακρόχρονη μνήμη. Το διπλό βέλος δηλώνει μία ισορροπία ανάμεσα στα στοιχεία που μετακινούνται μεταξύ των δύο αυτών

περιοχών. Συνεπώς, υλικό που έχει επεξεργαστεί στη μνήμη εργασίας εισέρχεται στη μακρόχρονη μνήμη για αποθήκευση και στον ίδιο χρόνο υλικό ανακαλείται από τη μακρόχρονη μνήμη για να βοηθήσει την επεξεργασία που γίνεται στην βραχύχρονη (Παπανικολάου, 2007).



Εικόνα 1.4: Μοντέλο Επεξεργασίας Πληροφοριών (Μαυρόπουλος, 2004)

1.1.3.ε Η Θεωρία του Ausubel

Ο Ausubel διατύπωσε για πρώτη φορά τη θεωρία του το 1963. Σύμφωνα με τη θεωρία αυτή: «η απόκτηση και η συγκράτηση της γνώσης είναι προϊόν μιας ενεργητικής και αλληλεπιδραστικής διαδικασίας, με δυναμική ενσωμάτωσης, ανάμεσα στο διδακτικό υλικό και στις σχετικές με αυτό ιδέες στη γνωστική δομή του ατόμου που μαθαίνει. Η διαδικασία απόκτησης νέων νοημάτων με τρόπο ώστε αυτά να συσχετίζονται με τις ήδη προϋπάρχουσες ιδέες θεωρείται σύμφυτη με την ουσιαστική μάθηση, που θεωρείται ποιοτικά διαφορετική από τη μηχανιστική μάθηση, όσον αφορά τη μη αυθαίρετη και μη κατά λέξη αναπαραγωγή του προς μάθηση περιεχομένου.» (Ausubel, 2000)

Μια περαιτέρω εξήγηση της θεωρίας του Ausubel προσπάθησε να δώσει ο Novak, ο οποίος θεωρεί ότι η ουσιαστική μάθηση στο ένα άκρο του συνεχούς απαιτεί καλά οργανωμένη σχετική δομή και αποτελεσματικότητα στην αναζήτηση σχέσεων ανάμεσα στο νέο υλικό και στην προϋπάρχουσα γνώση. Ενώ, η μηχανιστική μάθηση στο άλλο άκρο του συνεχούς είναι το αποτέλεσμα της περιορισμένης σχετικής

γνώσης η οποία είναι με φτωχό τρόπο οργανωμένη και η προσπάθεια ενσωμάτωσης της νέας γνώσης στην ήδη προϋπάρχουσα δεν αποδίδει (Novak, 2002).

Τα σημαντικά σημεία της γνωστικής θεωρίας του Ausubel είναι:

1. η ενσυνείδητη επιλογή του ατόμου να μάθει. Η ενσωμάτωση της γνώσης είναι αποτέλεσμα ενεργητικής και όχι παθητικής αλληλεπίδρασης με το νέο υλικό. Το άτομο επιλέγει ενσυνείδητα να μαθαίνει μη μηχανικά, ώστε να ενσωματώνεται κατάλληλα η νέα γνώση. Αν το άτομο επιλέγει να μαθαίνει αποκλειστικά με μεθόδους απομνημόνευσης, ουσιαστικά καμία συγχώνευση νέων εννοιών και νοημάτων δε συμβαίνει, και το υπάρχον γνωστικό σύστημα δεν εμπλουτίζεται και δεν αναδομείται (Novak, 2002).

2. η ποιότητα της προϋπάρχουσας γνωστικής δομής. Μάθηση εξελίσσεται με επιτυχία, όταν η προϋπάρχουσα γνωστική δομή διαθέτει σημεία σύνδεσης σταθερά, σαφή, καλά οργανωμένα και διαθέσιμα, στα οποία να μπορούν να συνδέονται οι νέες γνώσεις (Κολλιάδης, 1997).

3. ο εξατομικευμένος χαρακτήρας της μάθησης.

4. η ικανότητα του ατόμου να μεταφέρει τη νέα γνώση σε διαφορετικά περιβάλλοντα. Η μάθηση με κατανόηση λαμβάνει χώρα όταν ο μαθητής μεταφράζει τη νέα πληροφορία, τη συνδέει με προϋπάρχουσα γνώση και τη χρησιμοποιεί στην επίλυση των προβλημάτων. Η ποσότητα και η ποιότητα των γνωστικών δομών που οικοδομεί ο μαθητής καθορίζει την ικανότητά του να μεταφέρει αυτή τη γνώση για χρήση σε νέα συμφραζόμενα (Novak, 2002).

Συνεπώς, η υψηλής ποιότητας μάθηση με κατανόηση οδηγεί σε δόμηση καλά ενσωματωμένων εννοιολογικών δομών, που προάγουν καλύτερα τη μάθηση και τη δημιουργική επίλυση προβλημάτων.

1.1.4 Εποικοδομισμός και Μοντέλα στη Διδασκαλία της Χημείας

Ο εποικοδομισμός (constructivism) είναι μια ιδιαίτερα σημαντική γνωσιακή θεωρία μάθησης, με ευρύτατες εφαρμογές στην εκπαίδευση. Χρησιμοποιήθηκε ως επιστημολογικό θεωρητικό πλαίσιο από τις αρχές του 20^{ου} αιώνα στο χώρο των Φυσικών Επιστημών, αλλά και στην Ανθρωπολογία, Κοινωνιολογία, Παιδαγωγική, Ψυχολογία, Τέχνες και σε άλλες ανθρωπιστικές επιστήμες (Κρίβας, 2005). Ο όρος constructivism έχει μεταφρασθεί στα ελληνικά με τους όρους κονστρουκτιβισμός, εποικοδομητισμός, εποικοδομισμός ή περιφραστικά ως η θεωρία της εποικοδόμησης. Υπάρχει αρκετά εκτενής βιβλιογραφία σχετικά με τη θεωρία του εποικοδομισμού και τις πολλαπλές εφαρμογές του στην εκπαίδευση, αλλά και σχετικά με τις φιλοσοφικές και επιστημολογικές της παραμέτρους (ενδεικτικά αναφέρονται: Bigge 1990, Driver 1994, Nola 2003, Τσαπαρλής 2002, Κόκκοτας 2000, 2002, Βλάχος 2004, Κολιάδης 1997, Ματσαγγούρας 2004, Βοσνιάδου 2002).

Ο εποικοδομισμός έχοντας ως αρχικό και κύριο πεδίο έρευνας τις Φυσικές Επιστήμες, στηρίζεται και δίνει βαρύτητα στις προϋπάρχουσες ιδέες, αντιλήψεις και αναπαραστάσεις των μαθητών σε σχέση με το γνωστικό περιεχόμενο που διδάσκονται κάθε φορά. Συνεπώς, η εμφάνιση της εποικοδομητικής θεωρίας οφείλεται στην εξέλιξη της ψυχολογίας με τη θεωρία και τις εργασίες του Piaget, αλλά και της επιστημολογίας που σε συνδυασμό επηρέασαν σε σημαντικό βαθμό την παιδαγωγική σκέψη και τον προσανατολισμό της εκπαιδευτικής έρευνας (Σολομωνίδου, 2012).

Η ραγδαία εξέλιξη των επιστημών καθώς και των απαιτήσεων της κοινωνίας, απαιτεί από τον σύγχρονο πολίτη ικανότητες επίλυσης προβλήματος και κατανόησης της ανθρώπινης συμπεριφοράς. Ο σκοπός της εκπαίδευσης σε αυτή τη νέα εποχή είναι να προετοιμάσει τους μαθητευόμενους κατά τέτοιο τρόπο ώστε να είναι ικανοί να αξιοποιούν τις γνώσεις, τις δεξιότητες και τις ικανότητές τους για την επίλυση πραγματικών προβλημάτων. Επιπλέον, οι μαθητές δεν μπορούν να διδαχθούν στις Φυσικές επιστήμες πώς να λύνουν όλα τα προβλήματα δεδομένου ότι πολλά από αυτά είναι ανοιχτού τύπου και δεν υπάρχει προκαθορισμένος συστηματικός τρόπος για να επιλυθούν. Κατά τη διδασκαλία του γνωστικού αντικείμενου των Φυσικών

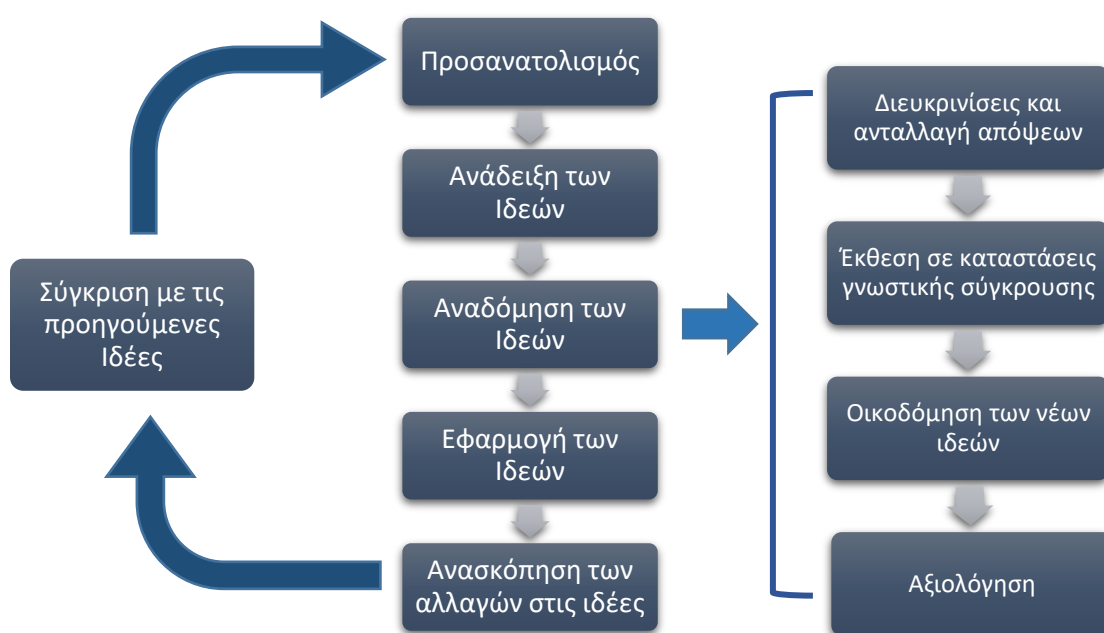
Επιστημών, αλλά και κατά τη διδασκαλία της Χημείας πρέπει να καλλιεργούνται στους μαθητές ικανότητες επίλυσης προβλημάτων και ανάπτυξης κριτικού τρόπου σκέψης. Οι μαθητές θα πρέπει να ενθαρρύνονται ώστε να μην ακολουθούν παθητικά και να μην περιορίζονται στα βήματα ενός βοηθήματος το οποίο είναι πιθανό να έχει δοθεί από τον εκπαιδευτικό.

Στην εποικοδομητική προσέγγιση της διδασκαλίας ο ρόλος του εκπαιδευτικού είναι πολύπλευρος. Ποικίλει στη διάρκεια της προσέγγισης, από το στάδιο του προσανατολισμού ως το τέλος του σταδίου της ανασκόπησης. Αυτός ο ρόλος στη διάρκεια της σειράς των δραστηριοτήτων γίνεται συμβουλευτικός. Χρειάζονται ποικίλες στρατηγικές προκειμένου οι μαθητευόμενοι να ξεδιαλύνουν αυτό που ήδη γνωρίζουν, να το σκεφτούν και να το συζητήσουν. Ένα βασικό ερώτημα που πρέπει να θέτει ένας εκπαιδευτικός που υποστηρίζει το εποικοδομητικό μοντέλο είναι: «Πώς μπορούν να αναδομηθούν οι αντιλήψεις των μαθητών, ώστε να συμβιβάζονται με το επιστημονικό πρότυπο;» (Γαγάτσης, 1991). Ο εκπαιδευτικός λοιπόν, που υιοθετεί την εποικοδομητική προσέγγιση είναι υποχρεωμένος να αντιμετωπίζει κριτικά οτιδήποτε συμβαίνει μέσα στην αίθουσα της διδασκαλίας. Ακόμη είναι απαραίτητο να προτείνει τρόπους διαφοροποίησης της διδακτικής προσέγγισης, ώστε να βελτιώνεται το επίπεδο μάθησης και να κρίνει αν η νέα διδακτική προσέγγιση είναι αποδοτικότερη από την παραδοσιακή. Πρέπει επίσης να είναι σε θέση να αντλεί συμπεράσματα από αυτά, ώστε οι αποφάσεις του να βασίζονται σε δεδομένα και όχι σε εντυπώσεις (Κόκκοτας, 2008).

Στην εποικοδομητική θεωρία της μάθησης κύριο μέλημα είναι να αναδειχθούν και να ταξινομηθούν οι ιδέες των μαθητών ώστε να γίνει η προσπάθεια μετατροπής τους κατά τη διάρκεια της διδασκαλίας. Κατά συνέπεια τα λάθη μπορεί να θεωρηθούν ως εναλλακτικές ιδέες που πολλές φορές θεωρούνται επαρκείς για την ερμηνεία πολλών φαινομένων. Στην εποικοδομητική προσέγγιση η χρήση των αντιλήψεων των μαθητών απενοχοποιεί τη λανθασμένη άποψη. Τα λάθη αυτού του είδους δεν είναι ακανόνιστα ή απρόβλεπτα, αλλά συνίστανται σε εμπόδια. Στη λειτουργία της μάθησης το λάθος είναι συστατικό στοιχείο της αποκτημένης γνώσης (Καραγιαννοπούλου, 2007). Με την εποικοδομητική προσέγγιση η μάθηση στις Φυσικές Επιστήμες γίνεται μια φυσική και λογική διαδικασία. Συνδυάζει την

κατανόηση των φυσικών εννοιών με την ανάπτυξη δεξιοτήτων στις επιστημονικές διαδικασίες και παράλληλα την απόκτηση επιστημονικής νοοτροπίας από τους μαθητές.

Οι Driver και Oldham (1985) πρότειναν ένα μοντέλο εποικοδομητικής προσέγγισης για τη μάθηση και τη διδασκαλία που περιλαμβάνει τις εξής φάσεις (Εικόνα 1.5):



Εικόνα 1.5: Διδακτικό Μοντέλο των Driver και Oldham (Κόκκοτας, 2005)

Η εποικοδομητική προσέγγιση της γνώσης οδηγεί στη λήψη πρωτοβουλιών από τους μαθητές, σε σημαντική βελτίωση στη στάση τους για το μάθημα, σε ελαχιστοποίηση των προβλημάτων συμπεριφοράς καθώς και στη δημιουργία αισθήματος ασφαλείας και ανάπτυξης αυτοεκτίμησης μέσα από τον διάλογο) και την ομαδοποίηση (Κώτσης, 2005).

Τελικά η μάθηση είναι προϊόν της εννοιολογικής αλλαγής που επέρχεται στους μαθητές λόγω γνωστικής σύγκρουσης στην οποία υποβάλλονται (Κόκκοτας, 2008). Τα στοιχεία που έχουν συγκεντρωθεί από ένα μεγάλο πλήθος ερευνών δείχνουν ότι η εποικοδομητική προσέγγιση ως μέθοδος διδασκαλίας έχει να προσφέρει πολλά στην εκπαίδευση. Καταλήγοντας στο συμπέρασμα ότι η θεωρία που στηρίζει περισσότερο

από κάθε άλλη τη σύγχρονη Διδακτική Φυσικών Επιστημών είναι ο εποικοδομισμός (Τσαπαρλής, 2002) (Taber, 2000).

1.1.5 Εναλλακτικές ιδέες μαθητών

Ένα πολύ σημαντικό τμήμα της θεωρίας του εποικοδομισμού αποτελεί η συζήτηση που είναι σχετική με τις «ιδέες» (Βλάχος, 2018) των ατόμων που μαθαίνουν και ιδιαίτερα τις εναλλακτικές ιδέες των μαθητών αλλά και των ανθρώπων γενικότερα. Αν μπορούσαμε να γνωρίζουμε τις ιδέες των μαθητών τότε θα ήταν εύκολο να βρούμε κατάλληλες δραστηριότητες τις οποίες να εκτελέσουν οι μαθητές και να πειστούν αυτόβουλα να αλλάξουν άποψη, δηλαδή να αποβάλλουν τις ιδέες τους και να δεχθούν αυτό που η επιστήμη δέχεται, τότε αυτό θα αποτελούσε μάθηση (Τσαπαρλής, 1991).

Οι ιδέες των μαθητών (Εικόνα 6), οι οποίες αποκλίνουν από την επιστημονική γνώση, αποκαλούνται από πολλούς ερευνητές παρανοήσεις, εναλλακτικές ιδέες ή ιδέες που βασίζονται στην "κοινή λογική" (Knight, 2006). Συγκεκριμένα από την Ausubel (1968) αναφέρονται ως προαντιλήψεις, από τον Novac (1990) ως παρανοήσεις ή εσφαλμένες αντιλήψεις και ως εναλλακτικές ιδέες από τους Driver και Easley (1978) (Σπυροπούλου-Κατσάνη, 2005). Όποιος όρος και να χρησιμοποιηθεί περιγράφεται ένα είδος εννοιολογικής δυσκολίας που αντιμετωπίζει ο μαθητής. Στην ουσία με τον όρο παρανοήσεις ή λανθασμένες αντιλήψεις θα εννοούνται οι λανθασμένες γνώσεις.

Η σημασία των παρανοήσεων είναι ότι η παρουσία τους αναπόφευκτα εμποδίζει την προσπάθεια του μαθητή να ενσωματώσει τη νέα σωστή γνώση που πρέπει να μάθει σε αυτό που ήδη γνωρίζει. Επιπλέον, η σημασία των προϋπάρχουσων ιδεών είναι πολύ σπουδαία στις περαιτέρω μαθησιακές δραστηριότητες, διότι ο τρόπος με τον οποίον οι μαθητές παρατηρούν και ερμηνεύουν τα διάφορα γεγονότα και φαινόμενα, επικοινωνούν ή δέχονται τις νέες πληροφορίες, έχει σχέση με τις ιδέες αυτές. Για το λόγο αυτόν πολλοί ερευνητές, όπως οι Driver και Easley (1978), η Viennot (1979), ο Arons (1992), κ.ά., θεωρούν ότι οι προϋπάρχουσες ιδέες των

μαθητών πρέπει να βρίσκονται στο επίκεντρο του ενδιαφέροντος (Σπυροπούλου-Κατσάνη, 2005).



Εικόνα 1.6: Παράγοντες που επηρεάζουν και συντελούν στην ανάπτυξη ιδεών (Σπυροπούλου, Κατσάνη, 2005)

Η σημασία των παρανοήσεων είναι ότι η παρουσία τους αναπόφευκτα εμποδίζει την προσπάθεια του μαθητή να ενσωματώσει τη νέα σωστή γνώση που πρέπει να μάθει σε αυτό που ήδη γνωρίζει. Επιπλέον, η σημασία των προϋπάρχουσων ιδεών είναι πολύ σπουδαία στις περαιτέρω μαθησιακές δραστηριότητες, διότι ο τρόπος με τον οποίον οι μαθητές παρατηρούν και ερμηνεύουν τα διάφορα γεγονότα και φαινόμενα, επικοινωνούν ή δέχονται τις νέες πληροφορίες, έχει σχέση με τις ιδέες αυτές. Για το λόγο αυτόν πολλοί ερευνητές, όπως οι Driver και Easley (1978), η Viennot (1979), ο Arons (1992), κ.ά., θεωρούν ότι οι προϋπάρχουσες ιδέες των μαθητών πρέπει να βρίσκονται στο επίκεντρο του ενδιαφέροντος (Σπυροπούλου-Κατσάνη, 2005).

Η μάθηση απαιτεί την αναδιοργάνωση των νοητικών μοντέλων που ήδη υπάρχουν, για να διοργανωθούν οι παρανοήσεις και συγχρόνως απαιτεί την επέκταση των μοντέλων ώστε να συμπεριληφθούν οι νέες έννοιες. Με αποτέλεσμα,

η μάθηση συχνά να αναφέρεται και ως διαδικασία εννοιολογικής αλλαγής (Σμυρναίου, 2010).

1.1.6. Εννοιολογική Αλλαγή

Αρκετές πληροφορίες είναι διαθέσιμες σήμερα σχετικά με τις παρανοήσεις των μαθητών σε διάφορα θέματα Χημείας και από αυτές μπορούμε να εξάγουμε συμπεράσματα που συμβάλουν στη βελτίωση της διδασκαλίας. Σκοπός της διδασκαλίας είναι να ξεπεράσουν οι μαθητές τις παρανοήσεις τους και να φτάσουν να μοιράζονται, τουλάχιστον σε κάποιο βαθμό, τις επικρατούσες θεωρίες της επιστήμης.

Όπως αναφέρουν οι Χατζηνικήτα και Χρηστίδου (2001), βασικός σκοπός της σύγχρονης Διδακτικής των Φυσικών Επιστημών είναι η δημιουργία κατάλληλων διδακτικών μοντέλων και κατάλληλου υλικού για διδασκαλία, ώστε με την εφαρμογή τους, να επιτυγχάνεται εννοιολογική αλλαγή.

Ο όρος εννοιολογική αλλαγή αναφέρεται στη διαδικασία κατά την οποία οι "εναλλακτικές αντιλήψεις" των μαθητών μετατρέπονται σε επιστημονική γνώση (Χατζηνικήτα & Χρηστίδου, 2001). Συγκεκριμένα, ο όρος εννοιολογική αλλαγή χρησιμοποιείται για να χαρακτηρίσει το είδος της μάθησης που απαιτείται όταν οι νέες πληροφορίες που πρόκειται να μαθευτούν έρχονται σε σύγκρουση με την προϋπάρχουσα γνώση των μαθητών η οποία έχει αποκτηθεί συνήθως από τις καθημερινές τους εμπειρίες. Τότε απαιτείται μια μεγαλύτερη αναδιοργάνωση της προϋπάρχουσας γνώσης, η εννοιολογική αλλαγή (Τσαπαρλής, 2002).

Οι απόψεις των ερευνητών για τους τρόπους με τους οποίους διαμορφώνεται η εννοιολογική αλλαγή, συγκλίνουν στη θεωρία του εποικοδομισμού, ως μοντέλου μάθησης στη Διδακτική Φυσικών Επιστημών, από τις αρχές του 1980 (Posner, 1982) μέχρι και σήμερα. Επομένως, η εννοιολογική αλλαγή είναι αναντίρρητα μια μορφή μάθησης, αλλά είναι σημαντικό να διαφοροποιηθεί (διακριθεί) από τα άλλα είδη μάθησης επειδή απαιτεί διαφορετικούς μηχανισμούς και διαφορετικές διδακτικές παρεμβάσεις για να πραγματοποιηθεί. Η περισσότερη μάθηση είναι αθροιστική και

ως τέτοια εμπεριέχει τον εμπλουτισμό της προϋπάρχουσας γνώσης. Η εννοιολογική αλλαγή δεν μπορεί ωστόσο να επιτευχθεί μέσω αθροιστικών μηχανισμών, αλλά μόνο με γνωστική σύγκρουση, καθώς η χρήση αθροιστικών μηχανισμών σε καταστάσεις όπου απαιτείται εννοιολογική αλλαγή είναι μία από τις κύριες αιτίες των παρανοήσεων (Ραβανής, 2001).

Στη Διδακτική των Φυσικών Επιστημών αναφέρονται τρία είδη γνωστικής σύγκρουσης (Ραβανής, 2001):

α) Οι *απλές γνωστικές συγκρούσεις* οι οποίες συμβαίνουν, όταν οι αρχικές υποθέσεις για ένα ερώτημα των Φυσικών Επιστημών, διαψεύδονται μετά από πειραματική δραστηριότητα.

β) Οι *διεργασιακές συγκρούσεις* οι οποίες συμβαίνουν, όταν στη σκέψη του μαθητή αντιπαρατίθενται δυο νοητικά σχήματα διαφορετικού ποιοτικού επιπέδου. Για παράδειγμα, όταν ο μαθητής καλείται να δώσει απάντηση σε ένα ερώτημα των Φυσικών Επιστημών, δημιουργείται από τη νόησή του ένα νοητικό σχήμα που θα τον βοηθήσει να διατυπώσει τον συλλογισμό του. Ωστόσο, είναι δυνατόν να δημιουργηθεί στον ίδιο μαθητή δεύτερος συλλογισμός που είναι αντιμέτωπος του πρώτου και προέρχεται από νοητικό σχήμα ανώτερου επιπέδου. Τότε προκαλείται διεργασιακή σύγκρουση μεταξύ των δυο συλλογισμών, ενώ συνήθως κυριαρχεί ο δεύτερος περισσότερο εξελιγμένος συλλογισμός.

γ) Οι *κοινωνιογνωστικές συγκρούσεις* συμβαίνουν, όταν οι συλλογισμοί των μαθητών που συμμετέχουν στην εκπαιδευτική διαδικασία τεθούν αντιμέτωποι, προκειμένου να απαντήσουν σε κάποιο προβληματισμό των Φυσικών Επιστημών.

Τέλος, για να επιτευχθεί εννοιολογική αλλαγή είναι απαραίτητο οι καθηγητές να ξεκινούν από τις ιδέες των μαθητών τους, να σχεδιάζουν προβλήματα και να παροτρύνουν τους μαθητές τους να τα επιλύσουν να προβλέπουν τρόπους προκειμένου οι μαθητές τους να συνειδητοποιήσουν τις εναλλακτικές ιδέες τους και να αξιολογούν συνεχώς την πρόοδο των μαθητών σχετικά με την κατανόηση των εννοιών και τις δυνατότητες αξιοποίησης ενός ερμηνευτικού πλαισίου συμβατού με την επιστημονική γνώση (Duit & Treagust, 2003) (Ebrahim, 2012) (Nilsson, 2009).

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι οι αντιλήψεις των μαθητών (ή εναλλακτικές ιδέες) για έννοιες και φαινόμενα που μελετούν οι μαθητές στο αντικείμενο της Χημείας, είναι σημαντικό να γίνονται γνωστές πριν τη διδασκαλία, ώστε με την εισαγωγή του κατάλληλου διδακτικού εργαλείου, να επιτυγχάνεται μέσω γνωστικής σύγκρουσης η εννοιολογική αλλαγή και τελικά η πραγματική γνώση.

Για να ξεκινήσει ο εκπαιδευτικός τη διδακτική παρέμβαση θα πρέπει πρώτα να κατηγοριοποιήσει τις ερωτήσεις, σύμφωνα με τη δηλωτική γνώση, τη διαδικαστική γνώση και τη μεταγνώσια (Πίνακας 1.2).

ΔΗΛΩΤΙΚΗ ΓΝΩΣΗ	
ΒΑΣΙΚΟ ΕΠΙΠΕΔΟ	ΥΨΗΛΟ ΕΠΙΠΕΔΟ
Αναπαραγωγή γνώσης/πληροφορίας. Ομοιότητες και διαφορές. Κατηγοριοποίηση δεδομένων. Περιγραφή φαινομένων.	Αρχική εξήγηση Συμπεράσματα Δικαιολόγηση γνώμης
Διαδικαστική Γνώση	Μεταγνώση
Δικαιολόγηση της προτίμησης μιας διαδικασίας αντί μιας άλλης. Δημιουργία μιας υπόθεσης. Παρατήρηση. Καταγραφή δεδομένων, φτάνοντας σε συμπεράσματα.	Αυτόνομη σκέψη και δράση. Αυτοαξιολόγηση ερωτήσεων. Περιγραφή διαδικασιών.

Πίνακας 1.2: Αναπαράσταση της Γνώσης και αναφορά της ικανότητας σε κάθε επίπεδο.

1.1.7 Μοντέλα και Διδασκαλία

Για την εμπλοκή των μαθητών σε μία ολοκληρωμένη εμπειρία μάθησης, ο εκπαιδευτικός χρησιμοποιεί διδακτικές τεχνικές. Στόχος, μιας διδακτικής τεχνικής είναι να ενεργοποιηθούν οι γνωσιακές διεργασίες των μαθητών, οι οποίες θα βοηθήσουν στην επεξεργασία χρήσιμων πληροφοριών, ώστε οι ίδιοι να αναπτύξουν βελτιωμένα νοητικά μοντέλα για τα φαινόμενα που μελετούν και να αναπτύξουν σχετικές δεξιότητες. Ανάλογα με τους διδακτικούς στόχους, τις συνθήκες, τις

απαιτήσεις και τις ανάγκες των μαθητών, κρίνεται σκόπιμο να χρησιμοποιούνται διάφορες διδακτικές τεχνικές, ώστε να επιτυγχάνονται τα βέλτιστα μαθησιακά αποτελέσματα και η ανάπτυξη των κατάλληλων νοητικών μοντέλων.

Ειδικότερα, μοντέλο ορίζεται η αναπαράσταση μιας ιδέας, ενός αντικειμένου, ενός γεγονότος, μιας διαδικασίας ή ενός συστήματος (Coll & Taylor, 2005). Το μοντέλο αποτελεί μια απλοποιημένη εικόνα ενός πολύπλοκου «πρωτοτύπου». Το πολύπλοκο «πρωτότυπο» και το μοντέλο που αντιστοιχεί σ' αυτό είναι δύο διαφορετικές οντότητες με διαφορετικά χαρακτηριστικά η καθεμιά. Υπάρχει, ωστόσο, μία συνεχής συσχέτιση ανάμεσα στο αντικείμενο και το μοντέλο, τόσο στη φάση της κατασκευής του, όσο και στη μετέπειτα χρήση του (Gilbert, 1982).

Τα διάφορα είδη μοντέλων που χρησιμοποιούνται (τόσο στην επιστήμη όσο και στην καθημερινή ζωή) μπορούν να ομαδοποιηθούν ως ακολούθως (Gericke & Hagberg, 2007) στα:

- 1) Νοητικά μοντέλα.
- 2) Εκφρασμένα μοντέλα.
- 3) Συναινετικά (consensus) μοντέλα.
- 4) Διδακτικά μοντέλα.

Τα μοντέλα είναι σημαντικά στην επιστημονική έρευνα και στη διατύπωση υποθέσεων που είναι προς διερεύνηση, καθώς και στην περιγραφή των επιστημονικών φαινομένων. Η αξία των μοντέλων στην έρευνα και την εκπαίδευση των Φυσικών Επιστημών έχει αναγνωριστεί εδώ και πολλά χρόνια. Στην παρούσα φάση, τα μοντέλα και η μοντελοποίηση θεωρούνται αναπόσπαστα τμήματα του επιστημονικού εγγραμματισμού. Με την αναγνωρισμένη σημασία των μοντέλων στην εκπαίδευση των Φυσικών Επιστημών, δημιουργείται η ανάγκη για μια θεωρία για τη μάθηση και τη διδασκαλία που στηρίζεται στα μοντέλα (Bigge, 1990) (Gericke & Hagberg, 2007) (Ioannides & Vosniadou, 2002) (Γιαννούλης, 1993) (Rapp, 2005).

1.1.7.α. Τα Διδακτικά Μοντέλα στη Χημεία

Διδακτικά μοντέλα ορίζονται αυτά που αναπτύσσονται και χρησιμοποιούνται από τους εκπαιδευτικούς και τους συγγραφείς των προγραμμάτων σπουδών και έχουν ως

σκοπό την προώθηση της κατανόησης ενός συστήματος «στόχων» (targets). Η χρήση μοντέλων είναι συμβατή με την εποικοδομητική άποψη ότι η γνώση θα πρέπει να δομηθεί μέσα στο μυαλό του καθενός χωριστά, καθώς επίσης και συλλογικά, μέσα στην επιστήμη και την κοινωνία (Glynn, 1994). Στις Φυσικές Επιστήμες, τα διδακτικά μοντέλα αποτελούν πολύτιμο και συχνότατο εργαλείο οργάνωσης και αναδιοργάνωσης γνώσεων και πληροφοριών.

Εκπαιδευτικοί και μαθητές κατά τη διάρκεια της διδασκαλίας για να παρουσιάσουν τις ιδέες και τις γνώσεις τους χρησιμοποιούν, μεταξύ άλλων, μοντέλα. Τα νοητικά μοντέλα των μαθητών και αυτά των εκπαιδευτικών διαφέρουν βέβαια στη φύση, στη δομή, στην κατασκευή, στην πληρότητα και στην ορθότητα τους (Ogborn & Martins, 1996) (Eilam, 2004). Συγκεκριμένα, τα νοητικά μοντέλα των εκπαιδευτικών είναι πιο πλήρη και πιο πολύπλοκα από αυτά των αρχαρίων μαθητών γεγονός που θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη κατά τη διδακτική διαδικασία (Rapp, 2005). Τα μοντέλα μπορεί να διευκολύνουν την κατανόηση επιστημονικών εννοιών (όταν είναι έγκυρα) ή να την εμποδίζουν, οπότε αποδεικνύονται αναξιόπιστα. Στη δεύτερη περίπτωση εντάσσονται τα μοντέλα που συγκροτούνται στη βάση εναλλακτικών αντιλήψεων που διαθέτουν οι μαθητές πριν από την έναρξη της τυπικής εκπαίδευσης.

Κατά τη διάρκεια της διδακτικής διαμεσολάβησης επιχειρείται η προσέγγιση, κατανόηση και τελικά κατάκτηση νέων επιστημονικών εννοιών, με τη βοήθεια των διδακτικών και των νοητικών μοντέλων. Επομένως, κατά τη χρήση διδακτικών μοντέλων θυσιάζεται η απόλυτη ρεαλιστικότητα για χάρη της απλοποίησης, γεγονός που βοηθά να αναγνωριστούν οι βασικές πτυχές της προς κατάκτηση επιστημονικής έννοιας (Κόκκοτας, 2008). Η επεξεργασία των πληροφοριών και η κατάκτηση της νέας γνώσης οργανώνεται σε νοητικά μοντέλα, δομώντας νέα ή τροποποιώντας και αναθεωρώντας τα ήδη υπάρχοντα (Χατζηνικήτα & Χρηστίδου, 2001).

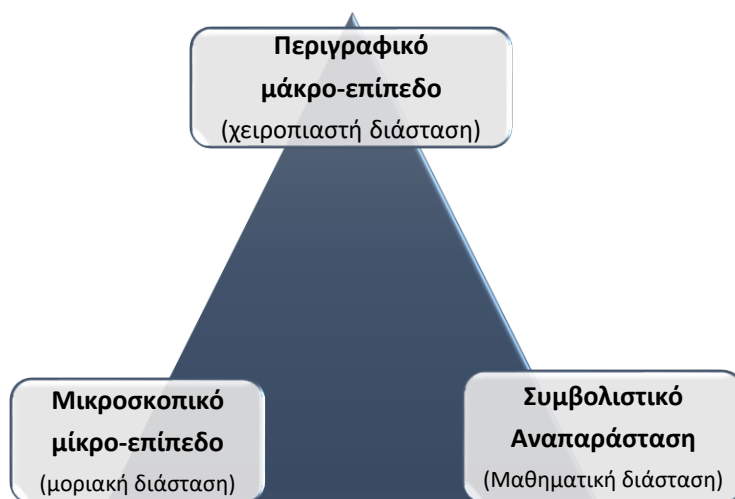
Επειδή οι έννοιες της Χημείας γενικά συνδέονται ή βασίζονται στη δομή της ύλης, η Χημεία χαρακτηρίζεται δυσνόητο γνωστικό αντικείμενο από πολλούς μαθητές. Η επιστήμη της Χημείας περιέχει αφηρημένες έννοιες που συνήθως είναι προαπαιτούμενες για τη μάθηση, περαιτέρω εννοιών της Χημείας ή άλλων

επιστημών. Έτσι, αν αυτές οι αφηρημένες αλλά βασικές έννοιες δεν κατακτηθούν από τους μαθητές, καθίσταται προβληματική η προσέγγιση και η κατανόηση των υπόλοιπων εννοιών στη συνέχεια των σπουδών τους. Η φύση των εννοιών της Χημείας απαιτεί από τους μαθητές της υψηλού επιπέδου δεξιότητες για την κατανόησή τους (Chiu, 2007).

Η κατάκτηση κάθε έννοιας στο αντικείμενο της Χημείας περιλαμβάνει τρία επίπεδα (Harrison & Treagust, Conceptual change using multiple interpretive perspectives: Two case studies in secondary school chemistry., 2001) (Σμυρναίου, 2010) (Κόκκοτας, 2008) (Τσαπαρλής, 2002):

1. το περιγραφικό ή μακρο - επίπεδο που αντιστοιχεί στον ορατό κόσμο της καθημερινότητας. Προσεγγίζουμε τα χημικά και φυσικά φαινόμενα με τις αισθήσεις μας.
2. το μικροσκοπικό ή μικρο – επίπεδο που αντιστοιχεί στον αόρατο «κόσμο» των δομικών σωματιδίων της ύλης. Ερμηνεύουμε τα χημικά και φυσικά φαινόμενα με τη βοήθεια μικροσκοπικών σωματιδίων όπως τα άτομα και τα ηλεκτρόνια προσεγγίζοντάς αυτά με τη χημική θεωρία, καθώς είναι ασύλληπτα με τις αισθήσεις μας.
3. το συμβολικό ή επίπεδο αναπαραστάσεων που περιλαμβάνει απεικονίσεις και μοντέλα των δύο προηγούμενων. περιγράφουμε το παρατηρούμενο φαινόμενο με τη χρήση συμβόλων ή και μοντέλων που εμπνεύστηκαν και καθιερώθηκαν από τους χημικούς κατά την εξέλιξη της επιστήμης.

Η ιδιαιτερότητα του μαθήματος της Χημείας έγκειται στο γεγονός ότι η εννοιολογική κατανόηση απαιτεί την ικανότητα να σκέφτεται κανείς σε μικροσκοπικό επίπεδο, ώστε να εξηγεί τα φαινόμενα στο μακροσκοπικό επίπεδο και να χρησιμοποιεί τα επιστημονικά σύμβολα για να τα περιγράψει (Γεωργιάδου & Τσαπαρλής, 1999). Επομένως, οι αλληλεπιδράσεις και οι διακρίσεις μεταξύ αυτών των τριών επιπέδων (Εικόνα 1.7) είναι απαραίτητα για τη μάθηση και την κατανόηση ορισμένων εννοιών στο αντικείμενο της Χημείας. Συχνά παρατηρείται οι μαθητές έχουν δυσκολία σε ένα από αυτά τα επίπεδα, με αποτέλεσμα να επηρεάζεται η δυνατότητα κατανόησης και στα υπόλοιπα.



Εικόνα 1.7: Τρίγωνο του Johnstone. Τα τρία επίπεδα στα οποία κινείται η γνώση της Χημείας – και η εκμάθησή της. Πηγή: (Τσαπαρλής, 2002).

Στην τριτοβάθμια εκπαίδευση, οι φοιτητές είναι περισσότερο εξοικειωμένοι με τα τρία επίπεδα προσέγγισης της Χημείας σε σχέση πάντα με τους μαθητές μικρότερων ηλικιών. Με αποτέλεσμα, οι διδάσκοντες πολλές φορές να θεωρούν ότι οι φοιτητές δεν αντιμετωπίζουν κανένα πρόβλημα μετακινούμενοι από το ένα επίπεδο στο άλλο, δεδομένου ότι έχουν προηγηθεί ήδη πέντε (5) χρόνια διδασκαλίας της Χημείας σύμφωνα με το υπάρχον αναλυτικό πρόγραμμα της Ελλάδας. Όμως από έρευνες που ασχολούνται με τη Διδακτική της Χημείας έχει παρατηρηθεί, ότι ακόμα και στο επίπεδο της ανώτατης εκπαίδευσης, υπάρχει ελλιπής κατανόηση του μικροσκοπικού και συμβολικού επιπέδου αναπαραστάσεων και μη ανεπτυγμένη αναπαραστασιακή επιδεξιότητα. (Barnea et. al. 2003). Αυτό ερμηνεύεται τις περισσότερες φορές με δεδομένο ότι στα πανεπιστημιακά μαθήματα, από τη μία γίνεται μεγαλύτερη εμβάθυνση σε ήδη υπάρχουσες έννοιες και από την άλλη εισάγονται νέες (και κατ' επέκταση νέοι συμβολισμοί) με τις οποίες δεν υπάρχει προηγούμενη ενασχόληση και εμπειρία. Για παράδειγμα, αντικείμενο ενασχόλησης των φοιτητών στο τμήμα Χημείας αποτελεί η Φασματοσκοπία και οι φασματομετρικές τεχνικές, αντικείμενο που οι φοιτητές δεν έχουν έρθει σε επαφή από τη νεότερη τους ηλικία.

Συνεπώς, είναι απαραίτητο στην ανώτατη εκπαίδευση να προτείνονται και να χρησιμοποιούνται διδακτικά μοντέλα, τα οποία θα έχουν στόχο την κατανόηση βασικών εννοιών. Και για τα τρία επίπεδα (Εικόνα 1.7), που αναφέρθηκαν

προηγουμένως, χρησιμοποιούνται διδακτικά μοντέλα με σκοπό την οπτικοποίηση χημικών εννοιών και διαδικασιών (Johnstone, 1984). Στη συσχέτιση του μακροσκοπικού και του μικροσκοπικού επιπέδου μπορούν να χρησιμοποιηθούν λεκτικά ή και εικονικά μοντέλα αναπαραστάσεων, όπως για παράδειγμα οι αναλογίες που θεωρούνται μια υποκατηγορία διδακτικών/νοητικών μοντέλων και με αυτές θα ασχοληθούμε στη συνέχεια της εργασίας μας.

1.2 Η Διδασκαλία της Χημείας στην Ανώτατη Εκπαίδευση

1.2.1 Η Εκπαίδευση στην Ελλάδα

Το εκπαιδευτικό σύστημα της Ελλάδας αποτελείται από τρία επίπεδα εκπαίδευσης: την Πρωτοβάθμια, τη Δευτεροβάθμια (κατώτερη και ανώτερη) και την Τριτοβάθμια εκπαίδευση. Η εκπαίδευση είναι υποχρεωτική για όλα τα παιδιά από 6 έως 15 ετών, καλύπτοντας το Δημοτικό και το Γυμνάσιο. Στην μετα-υποχρεωτική Δευτεροβάθμια Εκπαίδευση περιλαμβάνονται τα Γενικά Λύκεια και τα Τεχνικά Επαγγελματικά Εκπαιδευτήρια (Τ.Ε.Ε.). Επίσης, σε αυτό το επίπεδο ανήκουν και τα Ινστιτούτα Επαγγελματικής Κατάρτισης (Ι.Ε.Κ.), που παρέχουν επίσημη αλλά μη βαθμολογημένη εκπαίδευση. Τέλος, η δημόσια Τριτοβάθμια Εκπαίδευση περιλαμβάνει τα Ανώτατα Εκπαιδευτικά Ιδρύματα (ΑΕΙ) και το Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο.

Τα τελευταία χρόνια στην Ευρώπη, υπάρχει μια κινητοποίηση πρωτοφανών αλλαγών στον τομέα της Εκπαίδευσης. Οι Υπουργοί Παιδείας των κρατών-μελών της Ε.Ε αποφάσισαν πως μέχρι το 2020, η Ευρώπη πρέπει να καταστεί η πιο ανταγωνιστική οικονομία της γνώσης. Η επίτευξη του στόχου αυτού απαιτούσε μια συνολική στρατηγική που να στοχεύει στην:

- Βελτίωση της πρόσβασης στην ανώτερη εκπαίδευση.
- Βελτίωση των επιπέδων και της ποιότητας της εκπαίδευσης που προσφέρεται.
- Αύξηση των συνολικών δαπανών για την ανώτατη εκπαίδευση και αποδοτική αξιοποίηση των διαθέσιμων πόρων, μέσω προγραμμάτων ΕΣΠΑ.

Η αναγκαιότητα υιοθέτησης και υλοποίησης ενός τέτοιου προγράμματος στρατηγικών στόχων, σχετίζεται άμεσα με την πρόκληση για ποιοτική ανανέωση της Ευρωπαϊκής Ένωσης στο ρεύμα των εξελίξεων που δημιουργούν η παγκοσμιοποίηση της οικονομίας και η αυξανόμενη σημασία των τεχνολογιών των πληροφοριών και των επικοινωνιών (ΤΠΕ). (Γκόβαρης & Ρουσάκης, 2008)

Καταλαβαίνει κανείς ότι το ευρωπαϊκό πανεπιστήμιο εισέρχεται σε μια νέα εποχή, καθώς διαμορφώνεται ένα κοινό πλαίσιο αρχών, με απώτερο σκοπό την

προώθηση της κινητικότητας και της απασχολησιμότητας. Η χώρα μας, ως μέλος της Ευρωπαϊκής Ένωσης, επηρεάζεται από τις συνθήκες αυτές και έχει πραγματοποιήσει τα τελευταία χρόνια βήματα εκσυγχρονισμού της εκπαίδευσης, ώστε να συμβαδίζει με τα ευρωπαϊκά πρότυπα. Παρόλο που η ευθύνη για την εκπαίδευση ανήκει κυρίως στην κεντρική διοίκηση και δεν εξαρτάται αποκλειστικά από τα πανεπιστήμια ή τα επιμέρους τμήματά τους, έχει προταθεί τα ίδια τα ανώτατα εκπαιδευτικά ιδρύματα να αναλαμβάνουν πρωτοβουλίες. Αυτές οι πρωτοβουλίες στοχεύουν στην υλοποίηση προγραμμάτων που θα βελτιώνουν την ποιότητα της παρεχόμενης εκπαίδευσης, ώστε οι σπουδές να καλύπτουν τόσο τις ανάγκες της αγοράς εργασίας όσο και τις εκπαιδευτικές ανάγκες των φοιτητών.

1.2.2 Η Διδασκαλία στην Τριτοβάθμια Εκπαίδευση

Όταν κανείς σκέφτεται πως διεξάγεται ένα πανεπιστημιακό μάθημα, η εικόνα που έρχεται αυτομάτως στη σκέψη του είναι εκείνη του αμφιθεάτρου όπου ο καθηγητής μιλά και ένα ακροατήριο από φοιτητές παρακολουθεί σιωπηλά και κρατάει σημειώσεις.

Η διάλεξη ως τρόπος διδασκαλίας πρωτοεμφανίζεται την εποχή του Μεσαίωνα και έχει τις ρίζες τις στα πρώτα πανεπιστήμια που λειτούργησαν στην Ευρώπη. Η κυριολεξία της γερμανικής λέξης για τη διάλεξη «Vorlesung» είναι «διαβάζω ένα βιβλίο μπροστά σε άλλους». Βέβαια, αυτή η μέθοδος διδασκαλίας δεν επιλέχθηκε βάση των παιδαγωγικών αρχών αλλά ήταν κυρίως μια πρακτική επιλογή, σε μια εποχή όπου τα βιβλία ήταν ακριβά και δύσκολα προσβάσιμα.

Η διάλεξη παραμένει ο κυρίαρχος τρόπος διδασκαλίας ακόμα και σήμερα. Στην χειρότερη της μορφή, πρόκειται για μια απλή διαδικασία μεταφοράς γνώσεων όπου ο διδάσκων μοιάζει να «πυροβολεί» τους φοιτητές με πληροφορίες, τις οποίες οι φοιτητές πρέπει να απορροφήσουν και να θυμούνται στο μέλλον. (Eilks & Byers, 2010). Με άλλα λόγια χαρακτηρίζεται ως μία δασκαλοκεντρική προσέγγιση.

Δεν πρέπει να ξεχνάμε βέβαια την ύπαρξη εργαστηριακών ασκήσεων, ειδικά όταν μιλάμε για τα Τμήματα Χημείας, καθώς το εργαστήριο είναι αναπόσπαστο κομμάτι

της επιστήμης. Θα επικεντρωθούμε, όμως, στο κομμάτι που αφορά τις διαλέξεις που δίνονται στα Ανώτατα Εκπαιδευτικά Ιδρύματα (ΑΕΙ) της χώρας. Στις πανεπιστημιακές διαλέξεις, ακολουθείται ο παραδοσιακός τρόπος διδασκαλίας, η λεγόμενη δασκαλοκεντρική προσέγγιση, όπως αναφέραμε και προηγουμένως. Οι διαλέξεις περιλαμβάνουν μετωπική διδασκαλία σε μαυροπίνακα, με ελάχιστη ή καθόλου χρήση πολυμέσων. Ο διδάσκων έχει το ρόλο του φορέα της πληροφορίας, ενώ οι φοιτητές συμμετέχουν ελάχιστα στην όλη διαδικασία.

Θα μπορούσαμε να πούμε ότι αυτός ο τρόπος διδασκαλίας στο πανεπιστημιακό περιβάλλον είναι σε ένα βαθμό κατανοητός, ή ακόμα και επιβεβλημένος, αν σκεφτούμε τα εξής:

- Οι διαλέξεις γίνονται σε μεγάλο ακροατήριο κάτι που καθιστά δύσκολη την αλληλεπίδραση του διδάσκοντα με τους φοιτητές. Οποιοσδήποτε έχει παρακολουθήσει μια τέτοια διάλεξη, εύκολα αντιλαμβάνεται τόσο τη δυσκολία τους διδάσκοντα να «πλησιάσει» τους φοιτητές, όσο και τη δυσκολία των φοιτητών να εκφράσουν ακόμα και απορίες, πόσο μάλλον να συμμετέχουν ενεργά στην όλη διαδικασία.
- Σε πολλές περιπτώσεις, δεν υπάρχουν οι κατάλληλες υποδομές και τα απαιτούμενα τεχνικά μέσα τα οποία θα έδιναν στους διδάσκοντες τη δυνατότητα να εμπλουτίσουν τη διδασκαλία τους με χρήση ΤΠΕ.
- Τα πανεπιστήμια είναι υπερβολικά εστιασμένα στην έρευνα, η οποία επισκιάζει τη διδασκαλία που κινδυνεύει να θεωρηθεί κάτι το δεδομένο, με όλες τις αρνητικές επιπτώσεις που αυτό συνεπάγεται.

Συνεπώς, η διδασκαλία στην τριτοβάθμια εκπαίδευση οφείλει να θέτει τις βάσεις για τη δια-βίου μάθηση, και αυτό δε μπορεί να γίνει αν δεν κατανοήσουμε τις συνθήκες κάτω από τις οποίες μαθαίνουν οι εκπαιδευόμενοι και χωρίς να λάβουμε υπόψη μας τα κίνητρά τους. Σήμερα, περισσότερο από ποτέ, υπάρχει η ανάγκη για βελτίωση του διδακτικού επιπέδου, ώστε από τα πανεπιστήμια να αποφοιτούν άνθρωποι που θα γνωρίζουν πώς να ανταποκριθούν στις πιεστικές ανάγκες της εποχής και να βρουν λύσεις που θα βοηθήσουν όχι μόνο τον εαυτό τους αλλά και την κοινωνία γενικότερα.

1.2.3 Η ιδιαιτερότητα της Χημείας ως διδασκόμενο μάθημα

Οι μαθητές πολύ συχνά παραπονιούνται ότι τα μαθήματα των θετικών επιστημών είναι βαρετά και δυσνόητα, καθώς μπλέκονται σε έναν κυκλώνα μαθηματικών τύπων και ποικίλων συμβολισμών που απαιτούν μεγάλη προσήλωση από πλευράς των διδασκομένων. Ειδικότερα, η Χημεία ως μάθημα παραπέμπει τους περισσότερους, σε μια στείρα απομνημόνευση συμβόλων, τύπων και αντιδράσεων. Στο επίπεδο της τριτοβάθμιας εκπαίδευσης τα πράγματα γίνονται ακόμα πιο οξυμένα, καθώς ο χρόνος που αφιερώνουν οι διδάσκοντες στο να κάνουν το μάθημα ελκυστικότερο, και άρα μαθησιακά αποδοτικότερο για τους φοιτητές, εξαρτάται από την έκταση της ύλης που πρέπει να διδαχθεί στο εκάστοτε ωρολόγιο πρόγραμμα.

Η ιδιαιτερότητα του μαθήματος της Χημείας έγκειται στο γεγονός ότι η εννοιολογική κατανόηση απαιτεί την ικανότητα να σκέφτεται κανείς σε μικροσκοπικό επίπεδο, ώστε να εξηγεί τα φαινόμενα στο μακροσκοπικό επίπεδο και να χρησιμοποιεί τα επιστημονικά σύμβολα για να τα περιγράψει. Ο διαχωρισμός των τριών επιπέδων προσέγγισης των χημικών φαινομένων έγινε από τον Johnstone (Johnstone, 2006), όπως έχουμε αναφέρει σε προηγούμενη ενότητα. Έτσι, ένας Χημικός επιστήμονας πρέπει να έχει την ικανότητα να σκέφτεται ταυτόχρονα και στα τρία αυτά επίπεδα (μακροσκοπικό, μικροσκοπικό, συμβολικό).

Στην τριτοβάθμια εκπαίδευση, οι φοιτητές είναι περισσότερο εξοικειωμένοι με τα τρία επίπεδα προσέγγισης της Χημείας σε σχέση πάντα με τους μαθητές μικρότερων ηλικιών. Πολλές φορές λοιπόν, οι διδάσκοντες θεωρούν ότι οι φοιτητές δεν αντιμετωπίζουν κανένα πρόβλημα μετακινούμενοι από το ένα επίπεδο στο άλλο, δεδομένου ότι έχουν προηγηθεί ήδη 5 χρόνια διδασκαλίας της Χημείας (στο υπάρχον αναλυτικό πρόγραμμα της Ελλάδας, η διδασκαλία της Χημείας ως διακριτό μάθημα εισάγεται για πρώτη φορά στη Β΄ Γυμνασίου). Εάν μάλιστα εξετάσουμε φοιτητές ενός τμήματος Χημείας, οι οποίοι, θεωρητικά τουλάχιστον, επέλεξαν να συνεχίσουν τις σπουδές τους στη συγκεκριμένη επιστήμη, δε θα περιμέναμε να συναντήσουμε ιδιαίτερα προβλήματα στη χρήση συμβόλων, μαθηματικών τύπων, προσομοιωτικών μοντέλων μοριακής δομής κτλ. Όμως έχει παρατηρηθεί, ότι ακόμα και στο επίπεδο της ανώτατης εκπαίδευσης, υπάρχει ελλιπής κατανόηση του μικροσκοπικού και

συμβολικού επιπέδου αναπαραστάσεων και μη ανεπτυγμένη αναπαραστασιακή επιδεξιότητα. (Barnea et. al. 2003). Αυτό θα μπορούσε να ερμηνευθεί αν σκεφτούμε ότι στα πανεπιστημιακά μαθήματα, από τη μία γίνεται μεγαλύτερη εμβάθυνση σε ήδη υπάρχουσες έννοιες και από την άλλη εισάγονται και νέες – και κατ’ επέκταση και νέοι συμβολισμοί – με τις οποίες δεν υπάρχει προηγούμενη ενασχόληση και εμπειρία.

1.2.4 Το μάθημα της Φασματοσκοπίας στην Τριτοβάθμια Εκπαίδευση

Η φασματοσκοπία χρησιμοποιείται σε πληθώρα χημικών εφαρμογών, η σημαντικότερη των οποίων είναι η ταυτοποίηση μορίων. Ο λόγος για την ανάπτυξη φασματοσκοπικών τεχνικών είναι ότι επιτρέπουν τη διερεύνηση της μικροσκοπικής δομής των μορίων, χωρίς την καταστροφή του δείγματος, κάτι που αποτελεί τον ακρογωνιαίο λίθο της χημικής επιστήμης.

Εξαιτίας της σπουδαιότητας της φασματοσκοπίας, σε πάρα πολλά τμήματα των εγχώριων ΑΕΙ υπάρχουν μαθήματα φασματοσκοπίας, ενταγμένα στα προγράμματα σπουδών τους.

Για να προσεγγίσει όμως ένας φοιτητής τον τομέα της Φασματοσκοπίας, θα πρέπει να καταλάβει τόσο τις θεωρητικές της αρχές όσο και την πρακτική της εφαρμογή. Για αυτό το λόγο, στα προγράμματα σπουδών, αφιερώνεται αρκετός χρόνος στις διαλέξεις, στις οποίες παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο των φασματοσκοπικών τεχνικών, ενώ οι φοιτητές καλούνται αργότερα να ασκηθούν και στο εργαστήριο, εφαρμόζοντας τη θεωρία στην πράξη. Σκοπός των εργαστηριακών ασκήσεων είναι να μάθουν οι φοιτητές τη λειτουργία και τις βασικές τεχνικές αρχές των φασματοφωτομέτρων.

Όσον αφορά στη διδακτική προσέγγιση της θεωρίας της Φασματοσκοπίας, ακολουθείται κυρίως ο παραδοσιακός τρόπος διδασκαλίας. Οι φοιτητές καλούνται να παρακολουθήσουν διαλέξεις, οι οποίες περιλαμβάνουν τις βασικές αρχές των φασμάτων. Όπως αναφέρουν οι Lau και Fitri, (2002) το μαθησιακό περιβάλλον είναι πάντα παθητικό, και οι φοιτητές αναφέρουν ότι χάνονται όταν ασχολούνται με πιο

τεχνικές και επιστημονικές έννοιες και αρχές οι οποίες τείνουν να είναι ακατανόητες. Οι συμβατικές διδακτικές προσεγγίσεις δίνουν ελάχιστα περιθώρια για κριτική σκέψη των θεμάτων που παρουσιάζονται στο αμφιθέατρο, και οι φοιτητές είναι απασχολημένοι κυρίως με το να κρατούν σημειώσεις.

Είναι γεγονός, ότι η επιτυχία μιας τέτοιας διάλεξης, τελικά επαφίεται στην ικανότητα του καθηγητή να καθηλώσει το ακροατήριό του, κατά τη διάρκεια της διάλεξης. Ειδικά στην περίπτωση της φασματοσκοπίας, στην οποία εμπλέκονται αρχές της φυσικοχημείας και της κβαντικής, με περίπλοκους πολλές φορές μαθηματικούς τύπους, ο καθηγητής και οι φοιτητές θα πρέπει να αντιμετωπίζουν το αντικείμενο με τη δέουσα προσοχή.

Πολλές ερευνητικές μελέτες έχουν εξετάσει διδακτικές καινοτομίες για τη διδασκαλία και την κατανόηση (κατά κύριο λόγο: NMR και IR) και έχουν προσφέρει εμπειρικές γνώσεις σχετικά με το πώς η διδασκαλία μπορεί να ενισχύσει την αντίστοιχη κατανόηση. Αυτές οι μελέτες χρησιμοποίησαν μια σειρά θεωρητικών και εννοιολογικών πλαισίων, μεθόδων συλλογής και ανάλυσης δεδομένων, και μελέτησαν πληθυσμούς με διάφορα επίπεδα εμπειρίας, γνώσης και εκπαίδευσης. Επιπλέον, πολλές διδακτικές καινοτομίες έχουν αναπτυχθεί για να υποστηρίξουν τη μάθηση, συγκεκριμένα των προπτυχιακών φοιτητών. Ο τρόπος με τον οποίο γινόταν η διδασκαλία στις περισσότερες έρευνες στηριζόταν στη συνεργατική μάθηση με ομάδες, όπου οι φοιτητές είχαν τη δυνατότητα να επικοινωνήσουν μεταξύ τους, να θέσουν ερωτήματα και να καταφέρουν να λύνουν τα προβλήματα που προκύπτουν.

Μετά από τη βιβλιογραφική ανασκόπηση παρατηρούμε διάφορες διδακτικές παρεμβάσεις. Για παράδειγμα, Ο Juriševič και οι συνεργάτες του (Juriševič, Vrtačnik, Kwiatkowski, & Gros, 2012) πρότειναν ότι οι δάσκαλοι θα πρέπει να παρέχουν στους μαθητές εξατομικευμένες μαθησιακές καταστάσεις που να είναι προκλητικές τόσο σε γνωστικό όσο και σε επίπεδο κινητοποίησης και να ενθαρρύνουν τη μάθηση με κατανόηση ακόμη και μέσα σε πολύ αφηρημένες και γνωστικά σύνθετες μαθησιακές εργασίες. Τα ανεστραμμένα μαθήματα οργανικής χημείας και φασματοσκοπίας, επίσης, από τον Flynn (Flynn, 2015) οδήγησαν στην ανάπτυξη σύντομων βίντεο και διαδικτυακών και δια ζώσης δραστηριοτήτων μάθησης και εργαλείων αξιολόγησης,

σε συμφωνία με τους επιδιωκόμενους μαθησιακούς στόχους. Η θεωρία πολλών μεθόδων φασματοσκοπίας βασίζεται κυρίως στην κβαντική χημεία, αλλά και στη στατιστική θερμοδυναμική. Η κβαντική χημεία μελετά τις ιδιότητες απομονωμένων μορίων, ενώ η στατιστική συμπεριφορά μεγάλων συνόλων μορίων μελετάται με τις μεθόδους της στατιστικής θερμοδυναμικής. Για τον λόγο αυτό ο Partanen (Partanen, 2018) πρότεινε μια προσέγγιση που επικεντρώνεται στον μαθητή για τη διδασκαλία της κβαντικής χημείας και της φασματοσκοπίας, η οποία επεκτείνει τις αρχές της ενεργητικής μάθησης πέρα από τις διαλέξεις του μαθήματος και έχει ως αποτέλεσμα σημαντική βελτίωση στα αποτελέσματα μάθησης σε σύγκριση με μια προηγούμενη τάξη. Ο Moon και οι συνεργάτες του (Moon, Zotos, Finkenstaedt-Quinn, Gere, & Shultz, 2018) εξέτασαν πώς οι φοιτητές μαθαίνουν και κατανοούν τις θεμελιώδεις έννοιες της κβαντικής χημείας, όπως η ποσοτικοποίηση της ενέργειας, η ηλεκτρονική δομή και η αλληλεπίδραση φωτός-ύλης, και διαπίστωσαν ότι η δραστηριότητα "γραφή για μάθηση" βελτίωσε σημαντικά τις εξηγήσεις των φοιτητών σχετικά με την έννοια των φασματικών μεταπτώσεων και την συνολική τους αυτοπεποίθηση στην κατανόησή τους.

Οι μαθητές του Stowe και του Cooper (Stowe & Cooper, 2019) χρειάζονταν σημαντική υποστήριξη για να χρησιμοποιήσουν τη διαδικαστική τους γνώση προκειμένου να κατασκευάσουν και να κριτικάρουν ισχυρισμούς που υποστηρίζονται από φασματοσκοπικά στοιχεία.

Οι (Wright & Oliver-Hoyo, 2020) μελέτησαν τις υποθέσεις και τα νοητικά μοντέλα των μαθητών που συναντώνται στη διδασκαλία της IR και ανέφεραν μια σύνδεση μεταξύ των συμμετεχόντων με πιο εξελιγμένα νοητικά μοντέλα και εκείνοι που χρησιμοποίησαν πολυδιάστατη σκέψη.

Σύμφωνα με τους συγγραφείς, η φασματοσκοπία IR θα πρέπει να διδάσκεται μέσα από μια εννοιολογική προοπτική για να καθοδηγεί τη μάθηση σχετικά με την αλληλεπίδραση της ενέργειας και της ύλης. Οι συμμετέχοντες ήταν επίσης πιο πιθανό να είναι επιτυχείς όταν συγκρίνουν τα φάσματα. Οι Limniou και οι συνεργάτες του (Limniou, Papadopoulos, Gavril, Touni, & Chatziapostolidou, 2021) δημιούργησαν μια

εικονική προσομοίωση φασμάτων IR με στόχο να υποστηρίξουν αλλά όχι να αντικαταστήσουν την πρακτική εμπειρία των φοιτητών που αποκτούν μέσω του εργαστηρίου και των διαλέξεων.

Τέλος, ας προσθέσουμε ένα ακόμη σημαντικό θέμα στη φασματοσκοπία, το οποίο δεν ήταν μέρος αυτής της μελέτης και στο οποίο ίσως δεν δίνεται η δέουσα προσοχή στη διδασκαλία. Αφορά το ρόλο των κανόνων επιλογής στη φασματοσκοπία και τη σύνδεσή τους με την ένταση των φασματικών γραμμών. Σε μια φασματοσκοπική μετάβαση, ένα άτομο ή μόριο εκπέμπει ή απορροφά ένα φωτόνιο, οπότε θα υπάρξει μια αλλαγή της γωνιακής ορμής του συστήματος κατά μία μονάδα.

Κεφάλαιο 2: ΒΑΣΙΚΕΣ ΕΝΝΟΙΕΣ ΚΑΙ

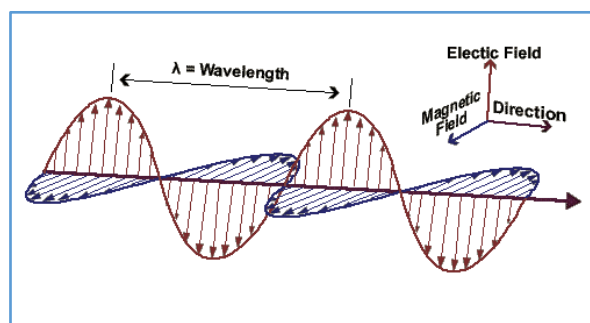
ΘΕΜΑΤΑ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑΣ

2.1 Φασματοσκοπία

2.1.1 Τι είναι η Φασματοσκοπία

Φασματοσκοπία είναι η καταγραφή των ενεργειακών μεταβολών, που αντιστοιχούν σε μεταβάσεις μεταξύ επιτρεπτών ενεργειακών καταστάσεων κβαντικών συστημάτων, όπως των ηλεκτρονίων στο άτομο, το μόριο ή τα ιόντα, αλλά και των πρωτονίων στον πυρήνα. Με άλλα λόγια η φασματοσκοπία εξετάζει την αλληλεπίδραση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με την ύλη, τα αποτελέσματα αυτής της αλληλεπίδρασης και τον τρόπο με τον οποίο τα αξιοποιούμε για να μελετήσουμε συγκεκριμένα βασικά χαρακτηριστικά της ύλης σε ατομικό ή μοριακό επίπεδο. Αποτέλεσμα είναι η μεταβολή της ενεργειακής κατάστασης της ύλης, η οποία αντιστοιχεί σε φωτόνια αντίστοιχης ενέργειας (Καλδούδη & Ελευθεριάδης, 2015). Μελετώντας τη σχετική ένταση του φωτός σε κάθε επιμέρους συχνότητα, παίρνουμε έμμεση πληροφορία για τις επιτρεπόμενες ενεργειακές καταστάσεις της ύλης, κι επομένως για τη σύσταση, τη δομή και άλλες ιδιότητες της ύλης. Γενικά, ένα φάσμα είναι ένα δισδιάστατο γράφημα της έντασης φωτός ως προς τη συχνότητα. Επομένως, τεχνικά η φασματοσκοπία αφορά ανάλυση φωτός σε επιμέρους συχνότητες και καταγραφή της έντασης σε κάθε συχνότητα. (McMurry, 2017)

Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία (φως) αποτελείται λοιπόν από κύματα ενέργειας, που είναι συνδυασμός ηλεκτρικών και μαγνητικών πεδίων, τα οποία διαδίδονται στο χώρο με την ταχύτητα του φωτός ($3 \times 10^8 \text{m/s}$) σχηματίζοντας μεταξύ τους γωνία 90° μοιρών. Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία διαδίδεται (μετατοπίζεται) κατά μήκος του άξονα z ενός καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων x, y, z . Επειδή αυτή διαδίδεται κατά μία μόνο κατεύθυνση, θεωρείται ευθύγραμμο πολωμένη.



Εικόνα 2.1.: Μετάδοση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας στο χώρο, ως συνδυασμός εναλλασσόμενων πεδίων. (Seamount, n.d.)

Η ηλεκτρική συνιστώσα μπορεί να περιγραφεί με στοιχειώδη τρόπο ως ένα επίπεδο κύμα, το οποίο διαδίδεται προς μία κατεύθυνση (π.χ. την κατεύθυνση z στο επίπεδο xz). Το πλάτος του κύματος x μεταβάλλεται με το χρόνο t και την απόσταση z σύμφωνα με την εξίσωση:

$$x = A\eta\mu[2\pi(\tilde{\nu}z - vt)] \quad (\text{Εξίσωση 2.1})$$

A: μέγιστο πλάτος κύματος, είναι η προβολή ενός οποιουδήποτε σημείου του κύματος πάνω στον άξονα x .

v: συχνότητα, εκφράζει τον αριθμό κυμάτων ανά δευτερόλεπτο.

Μονάδα συχνότητας είναι ο κύκλος ανά δευτερόλεπτο (s^{-1}) και συμβολίζεται με Hz. Συνήθως η συχνότητα εκφράζεται σε πολλαπλάσια του Hz, όπως το MHz ($=10^6$ Hz), το GHz ($=10^9$ Hz), και το THz ($=10^{12}$ Hz). Η συχνότητα της δέσμης ακτινοβολίας καθορίζεται από την πηγή και παραμένει αμετάβλητη.

$\tilde{\nu}$: κυματάρηθος ($1/\lambda$), όπου λ η απόσταση μεταξύ δύο κυμάτων.

Αν και η πρότυπη μονάδα μήκους κύματος είναι το μέτρο (m), αυτή μπορεί να εκφραστεί και σε πολλαπλάσια ή υποπολλαπλάσιά του, ανάλογα με την περιοχή του φάσματος στην οποία ανήκει η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία.

Η ταχύτητα και το μήκος κύματος της ακτινοβολίας εξαρτώνται από τη σύσταση του υλικού μέσω του οποίου διαδίδεται.

Η Εξίσωση 2.1 μπορεί να γραφεί ξεχωριστά για την ηλεκτρική και τη μαγνητική συνιστώσα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας ως:

$$E_x = A_x\eta\mu[2\pi(\tilde{\nu}z - vt)] \quad (\text{Εξίσωση 2.2})$$

$$H_y = A_y\eta\mu[2\pi(\tilde{\nu}z - vt)] \quad (\text{Εξίσωση 2.3})$$

Όπου A_x και A_y είναι τα μέγιστα πλάτη της ηλεκτρικής και μαγνητικής συνιστώσας αντίστοιχα.

Σημαντικές ακόμη κυματικές παράμετροι είναι η ισχύς και η ένταση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Η ισχύς, P , εκφράζει την ενέργεια της δέσμης που φθάνει σε μια επίπεδη επιφάνεια ανά δευτερόλεπτο, ενώ η ένταση, E , είναι η ισχύς της ακτινοβολίας ανά μονάδα στερεάς γωνίας. Οι ποσότητες αυτές είναι ανάλογες του τετραγώνου του πλάτους, A , της ακτινοβολίας. (Τσεκουράς, 2023)

Ωστόσο, το 1900 ο Max Planck κατέληξε στο συμπέρασμα ότι η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία συμπεριφέρεται μερικές φορές σαν δέσμη κινούμενων σωματιδίων. Τα σωματίδια αυτά το ονόμασε φωτόνια. Όλα τα φωτόνια κινούνται με την ίδια ταχύτητα, την ταχύτητα του φωτός, αλλά έχουν διαφορετική ενέργεια, η οποία εξαρτάται από τη συχνότητα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας ($E = h\nu$). Όπου h σταθερά αναλογίας του Planck ίση με $6,6262 \times 10^{-34}$ J·s. Αν στη σχέση, που δίνει την ενέργεια αντικατασταθεί η συχνότητα με τον κυματάρηθο, τότε η ενέργεια δίνεται από τη σχέση $\tilde{\nu} = \frac{E}{hc}$.

Η αλληλεπίδραση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με την ύλη μπορεί να προκαλέσει ανακατεύθυνση της ακτινοβολίας ή και μεταβάσεις μεταξύ των ενεργειακών σταθμών των ατόμων ή των μορίων. Η αλλαγή κατεύθυνσης της ακτινοβολίας λόγω της αλληλεπίδρασής της με την ύλη ονομάζεται σκέδαση, και μπορεί να περιλαμβάνει και μεταφορά ενέργειας. Η μετάβαση από ένα ενεργειακό επίπεδο προς ένα υψηλότερο με μεταφορά ενέργειας από την ακτινοβολία προς το άτομο ή το μόριο ονομάζεται απορρόφηση, ενώ η διαδικασία μετάβασης από ένα ενεργειακά υψηλότερο επίπεδο σε ένα χαμηλότερο ονομάζεται εκπομπή, όταν συνοδεύεται από μεταφορά ενέργειας στην μορφή ακτινοβολίας. (Gammon, 2023)

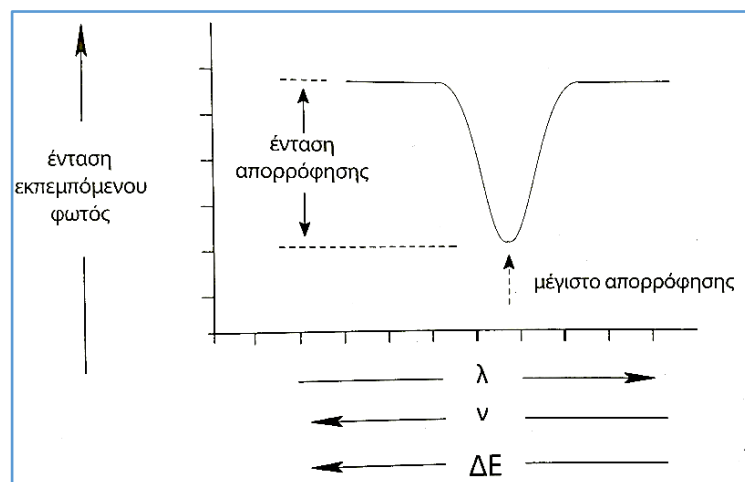
2.1.2 Τι είναι το Φάσμα

Στην οπτική φάσμα είναι η κατανομή της ακτινοβολίας στον χώρο της ενέργειας, που συνήθως εκφράζεται με την συχνότητα (ν) ή το μήκος κύματος (λ), καθώς η ενέργεια του φωτονίου της ακτινοβολίας είναι ίση με το γινόμενο της κάθε συχνότητας επί τη σταθερά του Planck. Το φάσμα προκύπτει από την ανάλυση του φωτός που εκπέμπεται από μια φωτεινή πηγή σε όλα τα μήκη κύματος (ή χρώματα) της. Αυτή η ανάλυση, γνωστή και ως χρωματική διασπορά του φωτός, επιτυγχάνεται με πρίσματα και άλλα συστήματα διάθλασης, καθώς το διαθλαστικό μέσο έχει διαφορετικό δείκτη διάθλασης για τα διάφορα μήκη κύματος του φωτός. Έτσι, ορίζεται γενικότερα ότι: *φάσμα είναι το σύνολο των μονοχρωματικών ακτινοβολιών, που προκύπτουν από ανάλυση φωτός καθώς και το σύνολο των εκπεμπόμενων, απορροφημένων και διαχεόμενων ακτινοβολιών, που συμβαίνουν σε ορισμένες συνθήκες.*

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, μπορεί να υπάρξει απορρόφηση και εκπομπή της ακτινοβολίας. Σωματίδια όπως άτομα, ιόντα και μόρια μπορούν να βρίσκονται σε συγκεκριμένες, διακριτές καταστάσεις με καθορισμένα επίπεδα ενέργειας. Όταν απορροφούν ή εκπέμπουν ακτινοβολία για να μεταβούν από μια ενεργειακή κατάσταση σε άλλη, η συχνότητα (ν) ή το μήκος κύματος (λ) της ακτινοβολίας συνδέεται με τη διαφορά ενέργειας μεταξύ των δύο καταστάσεων ($\Delta E = E_1 - E_0 = h \cdot \nu = h \cdot c / \lambda$). Όταν ένα σωματίδιο αλλάζει την κατάστασή του, απορροφά ή εκπέμπει μια ποσότητα ενέργειας ακριβώς ίση με την ενεργειακή διαφορά μεταξύ των δύο καταστάσεων. Φάσματα απορρόφησης και εκπομπής λοιπόν, παρουσιάζουν άτομα, ιόντα και μόρια ουσιών. Αν σε αέρια κατάσταση, άτομα μπορούν να απορροφήσουν ή να εκπέμψουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, τότε αυτά δίνουν ατομικά φάσματα. Ενώ, αν μόρια απορροφούν ή εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, δίνουν μοριακά φάσματα. Στη συνέχεια της εργασίας θα μας απασχολήσει η μοριακή φασματοσκοπία. (Atkins, 2018)

Το φάσμα απορρόφησης παρουσιάζεται όταν πολυχρωματική ακτινοβολία προσπέσει σε μία ουσία (στερεή, υγρή ή αέρια), με αποτέλεσμα να απομακρυνθούν εκλεκτικά με απορρόφηση μερικές συχνότητες, εξαιτίας της μεταφοράς ενέργειας

στα μόρια. Η παρατήρηση επομένως της εναπομένουσας ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, δίνει το φάσμα απορρόφησης.



Εικόνα 2.2: Σχηματική αναπαράσταση φάσματος απορρόφησης. (Θωμαΐδης, 2015)

Μία ζώνη απορρόφησης χαρακτηρίζεται κυρίως από το μήκος κύματος, στο οποίο συμβαίνει η μέγιστη απορρόφηση και από την ένταση της απορρόφησης σε αυτό το μήκος κύματος.

Είναι γνωστό ότι, ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία εκπέμπεται όταν διεγερμένα σωματίδια επανέρχονται σε χαμηλότερα ενεργειακά επίπεδα αποδίδοντας την περίσσεια της ενέργειάς τους ως φωτόνια. Όταν, όμως, λαμβάνεται ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία απευθείας από την πηγή, που την εκπέμπει, έχουμε φάσμα εκπομπής.

Οι συχνότητες απορρόφησης ή εκπομπής είναι χαρακτηριστικές για κάθε άτομο ή μόριο και επιτρέπουν με απόλυτη αξιοπιστία την ανίχνευσή του. Ο λόγος, που τα μόρια απορροφούν ή εκπέμπουν ακτινοβολία, σχετίζεται με την ύπαρξη κινητικής ενέργειας, όταν αυτά κινούνται ελεύθερα στο χώρο. Επίσης, τα μόρια παρουσιάζουν και δονητική ενέργεια, καθώς ο δεσμός δονείται σαν ένα ελατήριο και δεν είναι άκαμπτος και περιστροφική ενέργεια, καθώς το μόριο περιστρέφεται γύρω από το κέντρο μάζας του. Ένας τέταρτος τύπος ενέργειας, που έχει το μόριο είναι η ηλεκτρονική ενέργεια, που οφείλεται στη διάταξη των ηλεκτρονίων στα διάφορα μοριακά τροχιακά. Η δονητική, η περιστροφική και η ηλεκτρονική ενέργεια αποτελούν τη συνολική εσωτερική ενέργεια του μορίου, που είναι κβαντισμένη και ενδιαφέρει τη φασματοσκοπία.

Εκτός όμως από τα φάσματα απορρόφησης και εκπομπής, υπάρχουν και τα φάσματα συντονισμού, τα οποία προκύπτουν από την αλληλεπίδραση της μαγνητικής διπολικής ροπής των πυρήνων με ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Αλλά και τα φάσματα Raman, τα οποία οφείλονται στη σκέδαση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. (Ferraro & Nakamoto, 1994)

2.1.3 Φάσμα Ηλεκτρομαγνητικής Ακτινοβολίας

Για να υπάρξει μηχανισμός αλληλεπίδρασης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και του χημικού μορίου πρέπει οι πυρηνικές και ηλεκτρονικές μεταβολές του, να προκαλέσουν κάποιο ηλεκτρικό ή μαγνητικό αποτέλεσμα, το οποίο να καθορίσει στη συνέχεια τα ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία της ακτινοβολίας. Η περιοχή των ενεργειών της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας είναι ευρεία. Εκτείνεται από τις πιο χαμηλές ενέργειες, δηλαδή από τα πιο μεγάλα μήκη κύματος, μέχρι τις πιο ψηλές ενέργειες. Αυτή η περιοχή των ενεργειών ή μηκών κυμάτων ονομάζεται φάσμα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

Ο διαχωρισμός του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος σε περιοχές είναι κατά κάποιον τρόπο αυθαίρετος, αν και κάθε περιοχή σχετίζεται με συγκεκριμένες μοριακές, πυρηνικές ή ηλεκτρονικές αλλαγές που προκαλούν κβαντικές ενεργειακές μεταβολές στις καταστάσεις των χημικών μορίων (Βαλαβανίδης, 2008). Ωστόσο, τα όρια μεταξύ των περιοχών του φάσματος δεν είναι αυστηρώς καθορισμένα. Η διαίρεση του φάσματος δεν σημαίνει ότι υπάρχουν κάποιες θεμελιώδεις διαφορές μεταξύ των διαφόρων περιοχών, αλλά είναι χρήσιμη γιατί δείχνει την ενέργεια, που απαιτείται για να συμβεί μια ορισμένη ενεργειακή μεταβολή στο μόριο. (Douglas & Hollingsworth, 1985)

Οι περιοχές του φάσματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας είναι:

Α) Περιοχή Ραδιοσυχνότητας (Radiofrequency): 3×10^6 - 3×10^8 Hz ή 10m – 100cm. Η ενεργειακή μεταβολή στην περιοχή αυτή αφορά το spin του πυρήνα ή του ηλεκτρονίου (NMR και EPR). Η περιστροφή του πυρήνα ή του ηλεκτρονίου γύρω από τον άξονά τους δημιουργεί ένα μικροσκοπικό μαγνητικό δίπολο (φορτισμένα σωματίδια). Αλλαγές στο spin προκαλούν μεταβολές στο δίπολο και φυσικά διαφορετική επίδραση επί της ακτινοβολίας, που οδηγούν σε φάσματα απορρόφησης ή εκπομπής.

Β) Περιοχή Μικροκυμάτων (Microwave): 3×10^{10} - 3×10^{12} Hz ή 1cm – 100μm. Περιοχή απορρόφησης ή εκπομπής ακτινοβολίας λόγω της περιστροφής των μορίων.

Γ) Περιοχή Υπερύθρου (Infrared): 3×10^{12} - 3×10^{14} Hz ή 100μm – 1μm. Περιοχή όπου κυρίως παρατηρούνται δονήσεις ή στρεβλώσεις της δομής των μορίων (IR). Η δόνηση των μορίων (ασύμμετρη/συμμετρική δόνηση τάσης, δόνηση κάμψης) δημιουργεί αλλαγές στην ηλεκτρονική διπολική ροπή τους και κατά συνέπεια επίδραση επί του κυματοειδούς ηλεκτρονικού πεδίου της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

Δ) Περιοχή Ορατού και Υπεριώδους (Visible, Ultra Violet): 3×10^{14} - 3×10^{16} Hz ή 1μm – 10nm. Η διέγερση των ηλεκτρονίων σθένους (τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής τροχιάς)

προκαλεί μεταβολές της ηλεκτρονικής δομής και αλλαγή της ηλεκτρικής διπολικής ροπής του μορίου. Η μεταβολή αυτή της ηλεκτρικής διπολικής ροπής αλληλοεπιδρά με το ηλεκτρικό πεδίο της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (UV, Vis).

Ε) Περιοχή Ακτινών Χ (x-ray): 3×10^{16} - 3×10^{18} Hz ή 10 nm – 100 pm. Οι ενεργειακές μεταβολές στην περιοχή αυτή αφορούν τα εσωτερικά ηλεκτρόνια του ατόμου ή του μορίου.

ΣΤ) Περιοχή Ακτινών γ (γ-ray): 3×10^{18} - 3×10^{20} Hz ή 100 pm – 1 pm. Στην περιοχή αυτή παρατηρούνται ανακατατάξεις των πυρηνικών σωματιδίων.

Ζ) Περιοχή Κοσμικών Ακτινών (cosmic rays): $\approx 10^{22}$ Hz ή 0.01 pm. Η περιοχή αυτή δεν έχει παρουσιάσει φασματοσκοπικό ενδιαφέρον στη Χημεία. (Νταής, 2001)

2.1.4 Παράγοντες, που επηρεάζουν τη μορφή των φασμάτων

Ορισμένοι από τους παράγοντες, οι οποίοι επιδρούν στη μορφή του φάσματος, που λαμβάνεται από μία φασματοσκοπική μέθοδο είναι: η διεύρυνση των σημάτων (broadening), η ένταση των φασματικών γραμμών (intensity), η ύπαρξη θορύβου (signal to noise ratio) και η διακριτική ικανότητα (resolving power) κάθε μεθόδου.

Η διεύρυνση των σημάτων των φασματικών γραμμών στη φασματοσκοπία, εκτός από το εύρος της σχισμής εξόδου και την ευαισθησία του ανιχνευτή, οφείλεται και σε άλλες αιτίες. Αρχικά, οφείλεται στις συγκρούσεις ατόμων και μορίων, καθώς στην αέρια και υγρή φάση τα μόρια κινούνται ακατάπαυστα, προκαλούνται ορισμένες παραμορφώσεις στο σχήμα τους και μεταβολές στις ενεργειακές τους στάθμες (εξωτερικά ηλεκτρόνια). Αυτός είναι ο λόγος, που εξηγεί σε σημαντικό βαθμό τη διεύρυνση των φασματικών γραμμών στο ορατό και υπεριώδες φάσμα, που συνδέονται άμεσα με τα ηλεκτρόνια σθένους. Επίσης, οι συγκρούσεις παραμορφώνουν τη δόνηση και την περιστροφή των ατόμων και των μορίων, επηρεάζοντας έτσι τις φασματικές γραμμές στην περιοχή μικροκυμάτων και υπερύθρου. Οι συγκρούσεις μεταξύ των μορίων είναι πιο έντονες στην υγρή φάση σε σχέση με την αέρια φάση, γι' αυτό τα φάσματα στην αέρια φάση εμφανίζουν πιο αιχμηρές γραμμές.

Επιπλέον, η διεύρυνση των σημάτων στη φασματοσκοπία μπορεί να οφείλεται στο φαινόμενο Doppler, όπου παρατηρείται αλλαγή στη συχνότητα του ήχου ή της ακτινοβολίας λόγω της κίνησης της πηγής σε σχέση με τον παρατηρητή (ο οποίος, στην περίπτωση της φασματοσκοπίας, είναι ο ανιχνευτής). Οι κινήσεις των ατόμων και μορίων γίνονται και προς τις δύο κατευθύνσεις, με αποτέλεσμα ο ανιχνευτής να δέχεται περιοχή συχνοτήτων, αντί μίας και μόνο συχνότητας, διευρύνοντας τη

φασματική γραμμή. Το φαινόμενο αυτό συνήθως είναι πιο εμφανές στην περίπτωση των αερίων.

Η διεύρυνση των φασματικών γραμμών οφείλεται ακόμη και στην αρχή της αβεβαιότητας του Heisenberg, η οποία δηλώνει ότι δεν είναι δυνατό να προσδιορίσουμε με ακρίβεια τη θέση και την ορμή (ταχύτητα) ενός σωματιδίου την ίδια χρονική στιγμή. Ακόμα και σε ένα μοναχικό ακίνητο μόριο ή άτομο, οι στάθμες ενέργειας δεν προσδιορίζονται με μεγάλη ακρίβεια. Εάν για παράδειγμα σε ένα σύστημα, που βρίσκεται σε μία ενεργειακή κατάσταση για ορισμένο χρόνο dt (sec), τότε σύμφωνα με την αρχή της αβεβαιότητας, η ενέργεια E στην κατάσταση αυτή θα έχει αβεβαιότητα:

$$dE \cdot dt \approx h/2\pi \approx 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} \text{ (όπου } h \text{ είναι η σταθερά Planck).} \quad (\text{Εξίσωση 2.4})$$

Στη θεμελιώδη κατάσταση, ένα μόριο μπορεί να παραμείνει, εάν δεν διαταραχθεί, για απεριόριστο χρόνο $dt=\infty$, τότε $dE=0$. Αλλά, εάν διεγερθεί για χρόνο, περίπου 10^{-8} sec, τότε η ενεργειακή αβεβαιότητα είναι:

$$dE=h/2\pi dt=10^{-34}/10^{-8}=10^{-26} \quad (\text{Εξίσωση 2.5})$$

Εάν η ενεργειακή αυτή αβεβαιότητα μεταφραστεί σε συχνότητα ακτινοβολίας τότε γίνεται:

$$d\nu = dE/h \approx h/2\pi h dt \approx 2\pi dt \quad (\text{Εξίσωση 2.6})$$

εάν $dt = 10^{-8}$ s, τότε $d\nu = 10^8$ Hz. Δηλαδή, η αβεβαιότητα για τη συχνότητα είναι αρκετά μεγάλη. Για φαινόμενα λοιπόν, που παρουσιάζονται σε συχνότητες $10^8 - 10^9$ Hz, όπως οι μεταβολές του spin ενός ηλεκτρονίου, τότε η αρχή αβεβαιότητας του Heisenberg παίζει σημαντικό ρόλο στη διεύρυνση. (Kuhn, Forsterling, & Waldeck, 2000)

Όσον αφορά την ένταση των φασματικών γραμμών, αυτή μπορεί να συσχετιστεί με την πιθανότητα μετάβασης των ηλεκτρονίων από μία ενεργειακή στάθμη σε μία άλλη. Εάν μια μετάβαση είναι δυνατή ή όχι, μπορεί να συμβάλει στην θεωρητική πρόβλεψη της θέσης και της έντασης των φασματικών γραμμών. Επιπρόσθετα, ο πληθυσμός των καταστάσεων μπορεί να εξηγήσει την ένταση διάφορων απορροφήσεων. Εάν υπάρχουν δύο ενεργειακές στάθμες σε ένα μόριο, που έχουν ίσες πιθανότητες μετάβασης σε μία τρίτη, τότε είναι φανερό ότι η πιο έντονη φασματική γραμμή θα προκύψει από την ενεργειακή στάθμη με το μεγαλύτερο πληθυσμό μορίων. Η κατανομή των μορίων σε δύο ενεργειακές καταστάσεις καθορίζεται από το νόμο κατανομής Boltzmann, ο οποίος αναφέρει ότι σε σύνολο αριθμού N μορίων, $N_{\text{κατ}}$ μόρια, στην κατώτερη ενεργειακή κατάσταση και $N_{\text{ανωτ}}$ μόρια, στην ανώτερη, τότε η στατιστική ανάλυση των δύο πληθυσμών στην κατάσταση ισορροπίας είναι:

$$\frac{N_{\alpha\nu\omega\tau}}{N_{\kappa\alpha\tau\omega\tau}} = e^{-\Delta E/kT} \quad (\text{Εξίσωση 2.7})$$

όπου $\Delta E = E_{\alpha\nu\omega\tau} - E_{\kappa\alpha\tau\omega\tau}$, T = απόλυτη θερμοκρασία (K) και k είναι η σταθερά του Boltzmann με $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$.

Η ένταση των φασματικών γραμμών εξαρτάται, επίσης, από τη συγκέντρωση του δείγματος της ουσίας και το πάχος της δειγματοληπτικής κυψελίδας, ιδιαίτερα στην περίπτωση της ορατής και της υπεριώδους φασματοσκοπίας. Η απώλεια έντασης (dI) φωτός ή ακτινοβολίας, που προσπίπτει πάνω στο δείγμα με αρχική ένταση I και περνάει μέσα από υλικό πάχους dx και συγκέντρωση $C(\text{mol/l})$ δίνεται από την εξίσωση

$$dI = -\alpha \cdot C \cdot I \cdot dx \quad (\text{Εξίσωση 2.8})$$

όπου α = συντελεστής απορρόφησης, που εξαρτάται από τη μοριακή δομή της ουσίας και τη συχνότητα του φωτός. Η εξίσωση γράφεται επίσης ως:

$$dI/I = -\alpha \cdot C \cdot dx \quad \text{ή} \quad d\ln I = -\alpha \cdot C \cdot dx \quad (\text{Εξίσωση 2.9})$$

και εφαρμόζεται για κάθε λεπτό στρώμα της ουσίας, στο οποίο μπορεί να διαιρεθεί. Εάν η ένταση του φωτός που εξέρχεται από το δείγμα, με μήκος είναι σε cm, και η ένταση του προσπίπτοντος είναι I_0 , τότε η εξίσωση γίνεται:

$$\int_{I_0}^I d\ln I = - \int_0^l \alpha C dx \quad (\text{Εξίσωση 2.10})$$

Εφόσον η συγκέντρωση είναι ομοιογενής στο δείγμα τότε χρησιμοποιείται ο νόμος Beer-Lambert-Bouguer:

$$\log(I/I_0) = -\epsilon \cdot C \cdot l \quad (\text{Εξίσωση 2.11})$$

όπου $\epsilon = \alpha/2.303$, καλείται συντελεστής απόσβεσης της ουσίας για ορισμένη συχνότητα φωτός. (Hollas, 2004)

Παράλληλα, η σχέση σήματος – θορύβου είναι μια από τις σημαντικές πηγές κακής ποιότητας των φασμάτων. Όλα τα φασματομέτρα παρουσιάζουν το πρόβλημα αυτό. Το σήμα που παράγεται στον ανιχνευτή πρέπει να ενισχυθεί ηλεκτρονικά, κάτι που μπορεί να προκαλέσει τυχαίες αυξομειώσεις του ηλεκτρονικού σήματος στον ανιχνευτή ή στον ενισχυτή. Αυτές οι αυξομειώσεις ονομάζονται «θόρυβος». Για να επιτευχθεί καλός διαχωρισμός των σημάτων από το θόρυβο, η έντασή τους πρέπει να είναι τουλάχιστον τριπλάσια από αυτή του θορύβου. Τέλος, ο βαθμός διαχωρισμού ή η διακριτική ικανότητα του φασματομέτρου είναι επίσης σημαντικός. Γενικά, οι μοριακές απορροφήσεις δεν συμβαίνουν σε μία μόνο συχνότητα, αλλά συνήθως σε μια μικρή περιοχή που περιλαμβάνει πολλές συχνότητες. Η έννοια της διακριτικής ικανότητας θα αναλυθεί σε επόμενο κεφάλαιο.

2.1.5 Πρακτικά ζητήματα στη Φασματοσκοπία

Οι τέσσερις σπουδαιότερες φασματοσκοπικές μέθοδοι UV, IR, NMR και MS, έχουν καθιερωθεί ως τα κυριότερα εργαλεία για τον προσδιορισμό της δομής των οργανικών ενώσεων, επειδή ανιχνεύουν μία ευρεία ποικιλία δομικών στοιχείων. Τα όργανα και οι δεξιότητες, που απαιτούνται για τη χρήση των τεσσάρων φασματοσκοπικών μεθόδων είναι ευρέως γνωστά, ωστόσο η ευκολία της απόκτησης αλλά και της ερμηνείας των δεδομένων από κάθε μέθοδο ποικίλουν κάτω από πραγματικές εργαστηριακές συνθήκες.

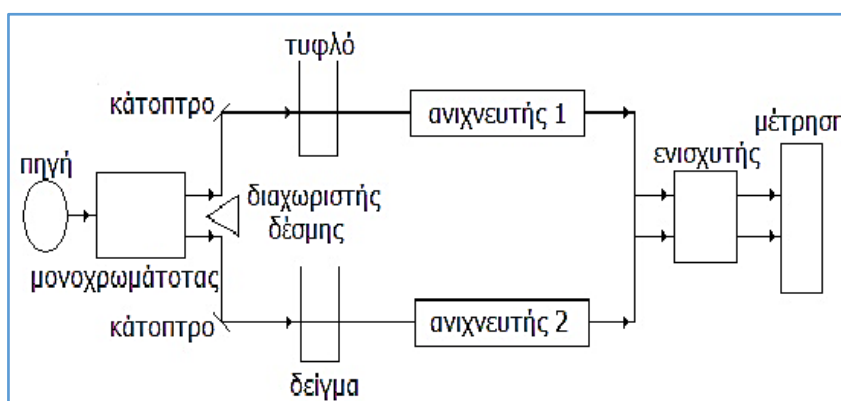
Με λίγα λόγια, το κόστος κάθε τύπου οργάνου, η ευκολία χρήσης και το πεδίο εφαρμογής κάθε μεθόδου ποικίλλουν. Σε γενικές γραμμές το κόστος των οργάνων MS και NMR είναι πολύ πιο δαπανηρά σε σύγκριση με τα φασματόμετρα UV και IR. Καθώς, η αύξηση του κόστους συνοδεύεται από την αυξανόμενη δυσκολία στη συντήρηση και το απαιτούμενο θεωρητικό υπόβαθρο του χειριστή κάθε τύπου οργάνου. Όσον αφορά το πεδίο εφαρμογής κάθε φασματοσκοπικής μεθόδου, αυτό καθορίζεται από την ποσότητα των χρήσιμων πληροφοριών, που παρέχει. Στην πραγματικότητα το πεδίο εφαρμογής κάθε μεθόδου στηρίζεται στη συνάρτηση των πληροφοριών, που μπορούν να αποκτηθούν και στο ποσοστό δυσκολίας ερμηνείας των δεδομένων (NMR>MS>IR>UV). (Serway, Moses, & Moyer, 2002)

2.2 Φασματοσκοπία Υπεριώδους (UV)

2.2.1 Φύση και βασική οργανολογία

Ο όρος φασματοσκοπία UV αναφέρεται γενικά σε ηλεκτρονιακές μεταπτώσεις, οι οποίες συμβαίνουν στη περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος, με εύρος 10-380nm. Στον συγκεκριμένο τύπο φασματοσκοπίας, τα εξωτερικά ηλεκτρόνια είναι αυτά που, με την ανύψωση ή πτώση τους από μία τροχιά σε άλλη, προκαλούν απορρόφηση ενέργειας σε διακριτές, κβαντωμένες ποσότητες. Οι αλλαγές στην ηλεκτρομαγνητική ενέργεια του μορίου μιας χημικής ένωσης οδηγούν σε μεταβολές της διπολικής ροπής του, και αυτή η μεταβολή είναι υπεύθυνη για την αλληλεπίδραση του χημικού μορίου με την ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Έτσι, η ηλεκτρονική φασματοσκοπία μας επιτρέπει να ταυτοποιούμε χαρακτηριστικές ομάδες ατόμων εντός του μορίου μιας χημικής ένωσης. Το τμήμα του μορίου που ευθύνεται για την απορρόφηση ονομάζεται χρωμοφόρο, και η απεικόνιση της απορρόφησης σε σχέση με το μήκος κύματος παρέχει το φάσμα απορρόφησης της ουσίας που προσδιορίζεται. (Βαλαβανίδης Α. , 2006)

Η βασική οργανολογία στη φασματοσκοπία UV αποτελείται βασικά από μία πηγή ενέργειας, την κυψελίδα για το δείγμα, μία συσκευή διασποράς (πρίσμα) και έναν ανιχνευτή, τα οποία διατάσσονται σε μία σειρά.



Εικόνα 2.3: Σχηματική αναπαράσταση ενός φασματομέτρου UV. (Κόκκινος, 2001)

Η κίνηση του πρίσματος συγχρονίζεται με τον άξονα x του καταγραφέα, ο οποίος τροφοδοτεί απευθείας τον υπολογιστή, έτσι ώστε να δείχνει το μήκος κύματος της ακτινοβολίας, που φτάνει στον ανιχνευτή. Το σήμα από τον ανιχνευτή μεταδίδεται στον άξονα y του καταγραφέα ή του υπολογιστή και δείχνει την ποσότητα της ακτινοβολίας, που απορροφάται από το δείγμα σε κάθε συγκεκριμένο μήκος κύματος. Στην πράξη τα όργανα διπλής δέσμης χρησιμοποιούνται όταν η απορρόφηση της κυψελίδας αναφοράς, η οποία περιέχει μόνο το διαλύτη, αφαιρείται από την απορρόφηση της κυψελίδας με το μετρούμενο δείγμα. Τα όργανα διπλής δέσμης (Εικόνα 2.3) αφαιρούν, επίσης, την απορρόφηση της ατμόσφαιρας στην οπτική διαδρομή.

Η πηγή ενέργειας πρέπει να είναι κατάλληλη για τα μήκη κύματος της ακτινοβολίας, που σαρώνονται. Οι πηγές ακτινοβολίας αποτελούνται από υλικά, που διεγείρονται σε υψηλές ενεργειακές καταστάσεις, πράγμα που επιτυγχάνεται με ηλεκτρικές εκκενώσεις υψηλής τάσης ή με ηλεκτρική θέρμανση. Κατά την επιστροφή τους σε χαμηλότερες ενεργειακές στάθμες εκπέμπουν φωτόνια χαρακτηριστικών ενεργειών, που διεγείρουν το δείγμα και επομένως μειώνεται η ένταση της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας. Μία πηγή θεωρείται ιδανική όταν εκπέμπει συνεχές φάσμα υψηλής και ομοιόμορφης έντασης σε όλη την περιοχή μήκους κύματος που είναι σημαντική για την ανάλυση του δείγματος. Ενώ, τα υλικά από τα οποία αποτελούνται η συσκευή διασποράς και ο ανιχνευτής, απαιτείται να είναι όσο το δυνατόν πιο διαφανή, στα μήκη κύματος, που σαρώνονται.

Στην υπεριώδη και ορατή περιοχή του φάσματος τα δείγματα, που εξετάζονται είναι αέρια ή διαλύματα και τοποθετούνται σε κυψελίδες. Λόγω της διαφορετικής διαπερατότητας των διάφορων υλικών χρησιμοποιούνται στην υπεριώδη περιοχή

κυψελίδες από χαλαζία, ενώ στην ορατή, κυψελίδες από κοινό γυαλί ή διαφανές πλαστικό. Οι κυψελίδες υγρών έχουν μήκος από 1 έως 10 cm, ωστόσο μεγάλη προσοχή πρέπει να δίνεται στη διαύγεια των παραθύρων μιας κυψελίδας ώστε να μη γίνονται σφάλματα στις μετρήσεις απορρόφησης.

Ο τρόπος με τον οποίο γίνεται η επιλογή κατάλληλου διαλύτη εξαρτάται από δύο σημαντικούς παράγοντες. Ο διαλύτης λοιπόν απαιτείται να διαλύει το δείγμα, αλλά και να μην απορροφά στη μελετώμενη περιοχή μήκους κύματος. Σε επόμενη ενότητα θα αναλυθεί εκτενέστερα η επίδραση του διαλύτη στο μήκος κύματος της απορρόφησης στην φασματοσκοπία υπεριώδους. (Κόκκινος, 2001)

Τέλος, το ηλεκτρικό σήμα, που παράγεται από έναν ανιχνευτή πρέπει να ενισχυθεί, έτσι ώστε να μπορεί να ερμηνευθεί εύκολα. Ο ενισχυτής αποτελείται από ένα κύκλωμα, το οποίο χρησιμοποιείται για την ενίσχυση των σημάτων ανιχνευτών, που παράγουν ηλεκτρικό ρεύμα. Ο ενισχυτής παίρνει ένα σήμα εισόδου E από το κύκλωμα ανίχνευσης. Το σήμα σε αυτή την περίπτωση είναι η πτώση της τάσης κατά μήκος μιας αντίστασης R , που παρεμβάλλεται στο κύκλωμα εισόδου. Μετά από μία σειρά διαδικασιών παράγεται ένα σήμα εξόδου E' , το οποίο είναι επίσης ηλεκτρική τάση και είναι πολύ μεγαλύτερο από το σήμα της εισόδου. Ο λόγος $G=E'/E$ είναι ο παράγοντας ενίσχυσης και ονομάζεται *κέρδος (gain)* του ενισχυτή.

2.2.2 Αρχές της Φασματοσκοπίας Υπεριώδους

Η φασματοσκοπία υπεριώδους, στηρίζεται στα ηλεκτρονικά φάσματα, όπου τα ηλεκτρόνια σθένους διεγείρονται και μεταβαίνουν από τη δεσμική στην αντιδεσμική κατάσταση. Κατά τη μετάβαση αυτή όμως δεν μεταβάλλεται ο κύριος κβαντικός αριθμός. Η δεσμική και αντιδεσμική κατάσταση ή διαφορετικά το δεσμικό και αντιδεσμικό μοριακό τροχιακό αντίστοιχα σχηματίζονται όταν δύο άτομα ενωθούν μεταξύ τους με έναν δεσμό. Έτσι τα ηλεκτρόνια και από τα δύο άτομα συμμετέχουν στο δεσμό και καταλαμβάνουν ένα νέο τροχιακό (μοριακό). Τα ατομικά τροχιακά και από τα δυο συνδεόμενα άτομα ενώνονται και σχηματίζουν το δεσμικό χαμηλής ενέργειας τροχιακό και το αντιδεσμικό τροχιακό υψηλής ενέργειας (η ηλεκτρονική πυκνότητα βρίσκεται συγκεντρωμένη εκτός της περιοχής μεταξύ δύο πυρήνων). Στη περίπτωση που τα ατομικά τροχιακά είναι s τότε σχηματίζεται ένα δεσμικό σ και το αντίστοιχο σ^* αντιδεσμικό τροχιακό. Ενώ, αν τα δύο τροχιακά είναι p τότε προκύπτουν ένα π δεσμικό και το αντίστοιχο π^* αντιδεσμικό. Τα ηλεκτρόνια σθένους που δεν συμμετέχουν στους χημικούς δεσμούς των μορίων αναφέρονται ως μη δεσμικά ή ηλεκτρόνια. (Lang, 1971-1976)

Γνωρίζουμε ότι, τα σ ηλεκτρόνια είναι πιο σταθερά, προσκολλημένα στους πυρήνες και απαιτούν μεγαλύτερη ενέργεια για να μεταβούν σε άλλα ενεργειακά

επίπεδα, ενώ για τα π και τα n ηλεκτρόνια απαιτείται μικρότερη ενέργεια. Συνήθως, αλλά όχι πάντοτε, τα n ηλεκτρόνια απαιτούν μικρότερη ενέργεια από τα π ηλεκτρόνια. Η ποσότητα ενέργειας, που απαιτείται για τη διέγερση των ηλεκτρονίων αφορά την εμφάνιση απορροφήσεων στην περιοχή φάσματος UV/Vis. Έτσι η μετάβαση $\sigma \rightarrow \sigma^*$ απαιτεί ενέργεια της οποίας το μήκος κύματος πέφτει στην άπω υπεριώδη περιοχή, οι μεταβάσεις $\pi \rightarrow \pi^*$ και $n \rightarrow n^*$ εμφανίζονται στη διαχωριστική γραμμή της άπω υπεριώδη και υπεριώδη περιοχή, ενώ η μετάβαση $n \rightarrow \pi^*$ στην υπεριώδη και ορατή περιοχή. Οι πιο ενδιαφέρουσες απορροφήσεις είναι για τις μεταβάσεις $n \rightarrow \sigma^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$ και $n \rightarrow \pi^*$. Οι κορεσμένοι υδρογονάνθρακες, που έχουν μόνο $\sigma \rightarrow \sigma^*$ μεταβάσεις, δίνουν απορροφήσεις στην άπω UV, που είναι μικρής πρακτικής σημασίας από αναλυτικής πλευράς. (Κονταρίδης, 2015)

Η ένταση των ζωνών απορρόφησης, που εμφανίζονται στα φάσματα εξαρτάται από το αν μία ηλεκτρονική μετάπτωση είναι «επιτρεπτή» ή «απαγορευμένη». Για παράδειγμα, οι μεταπτώσεις που προκαλούν αλλαγή της στροφορμής (spin) του ηλεκτρονίου είναι απαγορευμένες. Αυτό δεν σημαίνει ότι αυτές οι μεταπτώσεις δεν θα συμβούν ποτέ, αλλά ότι η πιθανότητά τους είναι χαμηλή, με αποτέλεσμα η ένταση μιας τέτοιας ζώνης απορρόφησης να είναι μικρή. Αντίθετα, οι διεγέρσεις που έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να συμβούν χαρακτηρίζονται από ταινίες απορρόφησης υψηλής έντασης. Επιπλέον, η ένταση της απορρόφησης εξαρτάται από τη μεταβολή της πολικότητας κατά τη διαδικασία της διέγερσης και αυξάνεται με την αύξηση της πολικότητας. Η ένταση της απορρόφησης συνήθως εκφράζεται με το μοριακό συντελεστή απόσβεσης ($A = \epsilon cd$).

Σημαντικό είναι να αναφερθεί ότι οι ηλεκτρονικές διεγέρσεις συνοδεύονται κυρίως από διεγέρσεις δόνησης και περιστροφής. Επομένως, δεν υπάρχει μία μόνο διέγερση συγκεκριμένης διαφοράς ενέργειας αλλά πολλές που διαφέρουν ελάχιστα μεταξύ τους. Για το λόγο αυτό τα φάσματα στη φασματοσκοπία απορρόφησης παρουσιάζουν κορυφές μεγάλου εύρους και μικρής διαχωριστικής ικανότητας.

Με τα κοινά φασματόμετρα υπεριώδους μελετώνται οι ηλεκτρονικές μεταπτώσεις, που βρίσκονται στην περιοχή κοντά στα 200nm. Στη περιοχή αυτή δίνουν φάσματα οι αυξόχρωμες και οι χρωμοφόρες ομάδες. Οι αυξόχρωμες ομάδες είναι δραστικές ομάδες, που έχουν μη δεσμικά ηλεκτρόνια σθένους και αντιστοιχούν όπως αναφέρθηκε προηγουμένως σε μεταπτώσεις $n \rightarrow \sigma^*$. Οι χρωμοφόρες ομάδες είναι και αυτές δραστικές και αποτελούν μέρος ενός κορεσμένου μορίου, το οποίο δεν απορροφά ακτινοβολία και δεν έχει ελεύθερα μη δεσμικά ηλεκτρόνια σθένους. Όταν μία αυξόχρωμη ομάδα είναι ενωμένη με μία χρωμοφόρα, παρατηρείται μετατόπιση της ζώνης απορρόφησης της χρωμοφόρας ομάδας σε μεγαλύτερο μήκος κύματος $\lambda_{\max}$, αυξανόμενης παράλληλα και της μοριακής απορροφητικότητας $\epsilon_{\max}$. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται βαθυχρωμία. Ενώ, το αντίθετο ακριβώς φαινόμενο

ονομάζεται υπερχρωμία και εμφανίζεται λόγω αύξησης της πολικότητας του διαλύτη ή της εισαγωγής θετικού φορτίου στο μόριο. (Penkampus, 1992)

Χρωμοφόρος ομάδα	Μετάβαση	$\lambda_{\max}$ (nm)	Χρωμοφόρος ομάδα	Μετάβαση	$\lambda_{\max}$ (nm)
R—OH	$n \longrightarrow \sigma^*$	180	R—NO ₂	$n \longrightarrow \pi^*$	271
R—O—R	$n \longrightarrow \sigma^*$	180	R—CHO	$\pi \longrightarrow \pi^*$	190
R—NH ₂	$n \longrightarrow \sigma^*$	190	R—CHO	$n \longrightarrow \pi$	290
R—SH	$n \longrightarrow \sigma^*$	210	R ₂ C=O	$\pi \longrightarrow \pi^*$	180
R ₂ C=CR ₂	$\pi \longrightarrow \pi^*$	175	R ₂ C=O	$n \longrightarrow \pi^*$	280
R—C≡C—R	$\pi \longrightarrow \pi^*$	170	RCOOH	$n \longrightarrow \pi^*$	205
R—C≡N	$n \longrightarrow \pi^*$	160	RCOOR'	$n \longrightarrow \pi^*$	205
R—N=N—R	$n \longrightarrow \pi^*$	340	RCONH ₂	$n \longrightarrow \pi^*$	210

Εικόνα 2.4.: Απορροφήσεις χρωμοφόρων ομάδων (Κονταρίδης, 2015)

Ακόμη, σημαντικές αλλαγές στα φάσματα UV/Vis προκαλούνται με την παρουσία δύο ή περισσότερων διπλών δεσμών στα οργανικά μόρια. Εάν οι δεσμοί είναι συζυγείς, δηλαδή εναλλασσόμενοι με απλούς δεσμούς, τότε οι μεταβάσεις $\pi \rightarrow \pi^*$ και $n \rightarrow \pi^*$ ενισχύονται σε μεγάλο βαθμό και οι απορροφήσεις τους παρουσιάζονται σε μεγαλύτερο μήκος κύματος. Η διαφορά είναι μεγαλύτερη όσο περισσότεροι συζυγείς δεσμοί υπάρχουν στην οργανική ένωση.

2.2.3 Επίδραση διαλύτη στη Φασματοσκοπία Υπεριώδους

Επιλογή κατάλληλου διαλύτη

Για να χρησιμοποιηθεί κατάλληλος διαλύτης, απαιτείται να μην απορροφά στην ίδια θέση με την ουσία που μελετάται. Η παρουσία όμως του διαλύτη επηρεάζει ελαφρά στη θέση της μεγίστης απορρόφησης. Σύμφωνα με την Αρχή Franck–Condon, μια ηλεκτρονική μετάβαση γίνεται τόσο γρήγορα ώστε η ενδοατομική απόσταση σε ένα μόριο να παραμένει σχεδόν σταθερή κατά τη διάρκεια της μετάβασης. Ωστόσο τα ηλεκτρόνια της διαλυμένης ουσίας και του διαλύτη αναδιοργανώνονται, με αποτέλεσμα να πραγματοποιούνται περισσότερες διεγέρσεις. Στην περίπτωση, για παράδειγμα της $\pi \rightarrow \pi^*$, δημιουργείται μια διεγερμένη κατάσταση, που είναι πιο πολική από τη θεμελιώδη.

Η αλληλεπίδραση διπόλου-διπόλου ανάμεσα σε έναν πολικό διαλύτη και τη διαλυμένη ουσία έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση της ενέργειας της διεγερμένης κατάστασης και την αύξηση του μήκους κύματος απορρόφησης. Πειραματικά φαίνεται ότι υπάρχει μετατόπιση προς τα μεγαλύτερα μήκη κύματος της τάξης των 10-20nm σε διαλύματα αιθανόλης (πολικός διαλύτης), σε σχέση με τα διαλύματα εξανίου (μη πολικός διαλύτης). Όταν ο διαλύτης αντίθετα δεν σχηματίζει δεσμούς

υδρογόνου με τα μόρια της διαλυμένης ουσίας εμφανίζει μικρή επίδραση στη μέγιστη απορρόφηση και μικρή πιθανότητα μετακίνησης σε χαμηλότερα μήκη κύματος. Ακόμη, η διαφορά μεταξύ πολικών και μη πολικών διαλυτών είναι ότι οι πολικοί διαλύτες δημιουργούν δεσμούς υδρογόνου με τη διαλυμένη ουσία και εξασθενίζουν την λεπτή υφή του φάσματος, ενώ με τους πολικούς διαλύτες η λεπτή υφή παραμένει, όπως στο φάσμα της ουσίας σε αέρια κατάσταση.

Συνήθως οι διαλύτες, που δεν έχουν συζυγιακούς διπλούς δεσμούς είναι οι πιο κατάλληλοι στη φασματοσκοπία υπεριώδους. Οι πιο κοινοί διαλύτες, που χρησιμοποιούνται είναι: το νερό, 95% αιθανόλη και το εξάνιο, καθώς δεν απορροφούν στην περιοχή του υπεριώδους των περισσότερων οργανικών ενώσεων. Άλλοι διαλύτες, οι οποίοι συχνά χρησιμοποιούνται είναι: το ακετονιτρίλιο, το χλωροφόρμιο, το 1,4-διοξάνιο και το ισοοκτάνιο. (Jaffe & Orchin, 1962)

2.2.4 Εφαρμογές της Φασματοσκοπίας Υπεριώδους

Η φασματοσκοπία UV χρησιμοποιείται κυρίως για ποσοτικούς προσδιορισμούς ουσιών με τη χρήση του νόμου Lambert Beer. Στην ουσία, γνωρίζοντας το μήκος κύματος απορρόφησης της υπό ανάλυση ουσίας, μετριέται η απορρόφηση της σε συνάρτηση με τη συγκέντρωση, δίνοντας μία καμπύλη αναφοράς. Έπειτα με τη μέτρηση της απορρόφησης του άγνωστου δείγματος και την καμπύλη αναφοράς, εύκολα μπορεί να προσδιοριστεί η συγκέντρωση του άγνωστου δείγματος. Μερικά παραδείγματα εφαρμογής της συγκεκριμένης μεθόδου είναι ο προσδιορισμός ιχνοστοιχείων στην κλινική χημεία, στην ανάλυση τροφίμων αλλά και στην περιβαλλοντική χημεία.

Επιπλέον, με τη φασματοσκοπία UV μπορεί να γίνει ο προσδιορισμός ενός συμπλόκου, με τον προσδιορισμό του αριθμού των υποκαταστατών γύρω από το μεταλλοκατιόν, μεταβάλλοντας συνεχώς τη συγκέντρωση του και μετρώντας την απορρόφηση μέχρι τη μέγιστη τιμή της. Η μέθοδος αυτή βοηθά τους συνθετικούς χημικούς στην ανόργανη χημεία.

Τέλος, η φασματοσκοπία υπεριώδους στον τομέα της οργανικής χημείας δίνει τη δυνατότητα κατανόησης περισσότερο της φύσης των λειτουργικών ομάδων. Υπό ορισμένες συνθήκες βοηθά στην εξαγωγή συμπερασμάτων σχετικά με την ηλεκτρονική δομή των οργανικών ενώσεων. Ωστόσο, όπως θα αναφερθεί και παρακάτω υπάρχουν φασματοσκοπικές μέθοδοι, οι οποίες πληροφορούν με μεγαλύτερη ακρίβεια για τη δομή και τη σύσταση μιας άγνωστης ένωσης. (Gillan & Stern, 1958)

2.3 Φασματοσκοπία Υπερύθρου (IR)

2.3.1 Φύση και βασική οργανολογία

Το 1903 ξεκίνησε η πειραματική μελέτη των φασμάτων απορρόφησης καθαρών ουσιών από τον W. Coblentz και από το 1930 η φασματοσκοπία υπερύθρου θεωρείται μία βασική μέθοδος ταυτοποίησης οργανικών κυρίως ενώσεων. Η υπέρυθρη περιοχή του φάσματος βρίσκεται μεταξύ της ορατής περιοχής και της περιοχής των μικροκυμάτων και διακρίνεται σε τρεις κατηγορίες: το εγγύς IR, με περιοχή 0,8μm έως 2,5μm, το κύριο IR, με περιοχή 2,5μm έως 50μm και το άπω IR, με περιοχή 50μm έως 1000μm. (Derrick, Stalk, & Landry, 1999)

Τα φασματόμετρα υπερύθρου του εμπορίου, που χρησιμοποιούνται σε εργαστήρια χημείας, αφορούν το κύριο IR, όπου παρατηρούνται οι βασικές μεταβολές στη δόνηση των μορίων λόγω απορρόφησης ακτινοβολίας. Τα φάσματα απορρόφησης υπερύθρου είναι βαθμονομημένα σε μήκη κύματος εκφρασμένα σε μικρόμετρα (1μm= 10⁻⁶m) ή σε κυματάρια, που σχετίζονται με τη συχνότητα και είναι τα αντίστροφα των μηκών κύματος.

$$\text{κυματάρια } \tilde{\nu} \text{ (cm}^{-1}\text{)} = \frac{1 \times 10^4}{\text{μήκος κύματος (σε } \mu\text{m)}} \quad (\text{Εξίσωση 2.12})$$

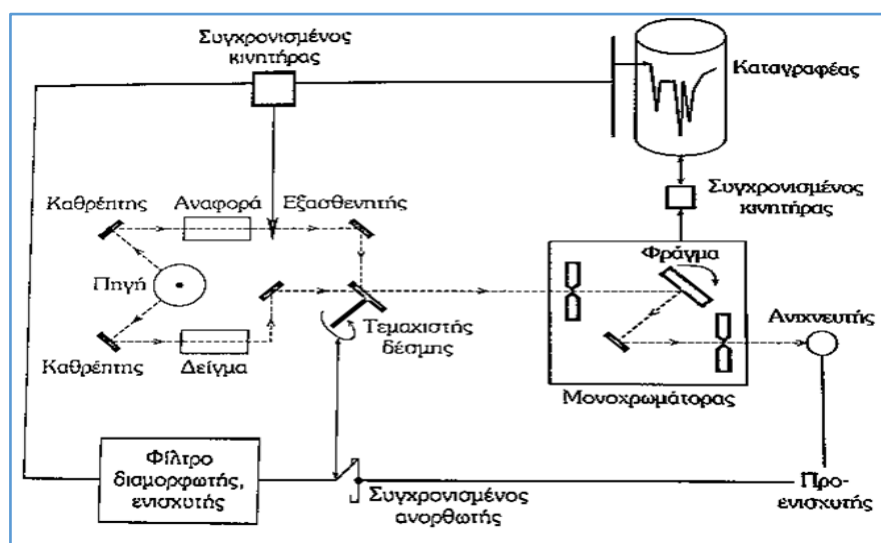
Σύμφωνα με την εξίσωση 2.12, φαίνεται το πλεονέκτημα, που εμφανίζει η χρήση του κυματάρια, έναντι της συχνότητας και του μήκους κύματος, καθώς στα φάσματα απορρόφησης, βοηθά το γεγονός ότι ο κυματάριας είναι ακέραιος αριθμός χωρίς να αναφέρονται πολλαπλάσια στον οριζόντιο άξονα. Η περιοχή, που καλύπτουν τα κοινά όργανα είναι 4000 έως 666 cm⁻¹. Οι εντάσεις των απορροφήσεων στο υπέρυθρο, σπάνια προσδιορίζονται ποσοτικά, αλλά ταξινομούνται ως ισχυρές s (strong), μεσαίες m (medium) ή ασθενείς w (weak). Γενικά το φάσμα απορρόφησης υπερύθρου αποτελεί θεμελιώδη ιδιότητα κάθε μορίου και χρησιμεύει κυρίως στην ποιοτική ανάλυση, των ατόμων που βρίσκονται στο μόριο και τη διάταξη τους στο χώρο, δίνοντας το δακτυλικό αποτύπωμα.

Η φασματοσκοπία υπερύθρου, βασίζεται στην απορρόφηση υπέρυθρης ακτινοβολίας από τα μόρια μιας ένωσης, τα οποία διεγείρονται σε υψηλότερες δονητικά στάθμες. Ενεργά υπέρυθρες ενώσεις είναι αυτές στις οποίες οι δονήσεις και η περιστροφές των ατόμων τους παρουσιάζουν συνεχή μεταβολή της διπολικής ροπής. Η περιοδική μεταβολή της διπολικής ροπής επιτυγχάνεται σε ορισμένες συχνότητες και απορρόφηση πραγματοποιείται όταν η προσπίπτουσα ακτινοβολία έχει την ίδια συχνότητα του διπλού. (Stuart, 2004)

Το φασματόμετρο υπερύθρου στηρίζεται σε παρόμοιες αρχές με εκείνο του υπεριώδους, ωστόσο παρουσιάζει ορισμένες διαφορές. Ως πηγή ακτινοβολίας χρησιμοποιείται κυρίως νήμα Nernst (ZrO) ή λάμπα υδραργύρου. Το κυριότερο

μειονέκτημα των πηγών φωτός είναι η άνιση κατανομή ενέργειας σε σχέση με το μήκος κύματος και η χαμηλή τους ένταση. Η λάμπα Globar, για παράδειγμα, έχει σημαντικά μεγαλύτερη ένταση (κατασκευάζεται από καρβίδιο του πυριτίου) και χρησιμοποιείται σε καλής ποιότητας φασματοόμετρα IR. Επίσης, χρησιμοποιείται στα φασματοόμετρα IR με μετασχηματισμό Fourier (Fourier Transform IR). (Stone, 2021)

Το φράγμα περίθλασης στα σύγχρονα μηχανήματα αντικατέστησε τα πρίσματα NaCl καθώς ήταν ευαίσθητα στην υγρασία. Το φράγμα αναλύει ή σκεδάζει την ακτινοβολία στα συστατικά της μήκη κύματος μέσω ενός συστήματος παράλληλων γραμμικών αυλακώσεων, που είναι τοποθετημένες σε ίσες αποστάσεις μεταξύ τους, πάνω σε μια γυαλιστερή μεταλλική επιφάνεια που λειτουργεί ως καθρέπτης. Έτσι, κάθε αυλακωτή γραμμή μετατρέπεται σε μία πηγή ενέργειας. Ακτινοβολίες διαφορετικών μηκών κύματος μπορούν να ληφθούν περιστρέφοντας το φράγμα σε σχέση με την κατεύθυνση της δέσμης του φωτός από την πηγή, σαρώνοντας έτσι τις διάφορες συχνότητες της ακτινοβολίας IR. Ένα ακόμη σημαντικό τμήμα του φασματομέτρου είναι ο θερμικός ανιχνευτής, που δέχεται τη δέσμη μετά το φράγμα περίθλασης και ανιχνεύει ποσοτικά το ποσοστό της απορροφούμενης ακτινοβολίας από το δείγμα της ουσίας. (Κόκκινος, 2001)



Εικόνα 2.5: Διάταξη φασματομέτρου IR (Κόκκινος, 2001)

Τα φάσματα διαλυμάτων λαμβάνονται σε κυψελίδες και ως διαλύτες χρησιμοποιούνται ενώσεις, που δεν απορροφούν έντονα στην περιοχή του υπέρυθρου. Τα φάσματα ενώσεων σε στερεή κατάσταση παίρνονται σε μορφή διαφανών δισκίων KBr, εναλλακτικά λαμβάνονται με τη μορφή αλοιφής με μία σταγόνα παραφινέλαιου, το οποίο απορροφά έντονα στους $2920, 2860$ και 1460cm^{-1} .

2.3.2 Αρχές της Φασματοσκοπίας Υπερύθρου

Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενη ενότητα, η φασματοσκοπία υπερύθρου οφείλεται σε διεγέρσεις δόνησης, παραμόρφωσης και κάμψης των δεσμών. Με την απορρόφηση της υπερύθρης ακτινοβολίας αυξάνονται οι δονήσεις των μορίων, των οποίων τα άτομα είναι συνδεδεμένα μεταξύ τους με δεσμούς όμοιους προς ελατήρια. Σύμφωνα με την κλασική θεωρία του αρμονικού ταλαντωτή, η δόνηση ενός διατομικού μορίου μπορεί να συσχετιστεί με ένα σύστημα δύο σωματιδίων ορισμένης μάζας, τα οποία είναι συνδεδεμένα με ένα ελατήριο. Επομένως για τη συχνότητα των δονήσεων των ατόμων ισχύει ο νόμος του Hooke.

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (\text{Εξίσωση 2.13})$$

όπου k η σταθερά του ελατηρίου ή η σταθερά δύναμης του δεσμού dynes/cm και μ η ανηγμένη μάζα, δηλαδή ο αρμονικός μέσος όρος των δύο ατομικών μαζών ($\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$).

Από την εξίσωση 2.13 γίνεται αντιληπτό ότι με την αύξηση της μάζας των ατόμων, δηλαδή την αύξηση της ανηγμένης μάζας του συστήματος, η συχνότητα ταλάντωσης ελαττώνεται. Ακόμη, είναι σαφές ότι η συχνότητα δόνησης εξαρτάται από τη φύση του δεσμού. Μικρότερου μήκους και ισχυρότεροι δεσμοί δίνουν δονήσεις δίνουν δονήσεις σε υψηλότερη ενέργεια από ότι οι μεγαλύτερου μήκους και ασθενείς δεσμοί.

Σύμφωνα με την κβαντομηχανική η ενέργεια ενός αρμονικού ταλαντωτή μπορεί να έχει μόνο ορισμένες τιμές ενέργειας. Το μόριο με την απορρόφηση της ακτινοβολίας διεγείρεται σε υψηλότερες στάθμες δόνησης, που είναι κβαντισμένες. Οι επιτρεπτές μεταπτώσεις δόνησης καθορίζονται από την εξίσωση Schrodinger, που ισχύει για έναν αρμονικό ταλαντωτή.

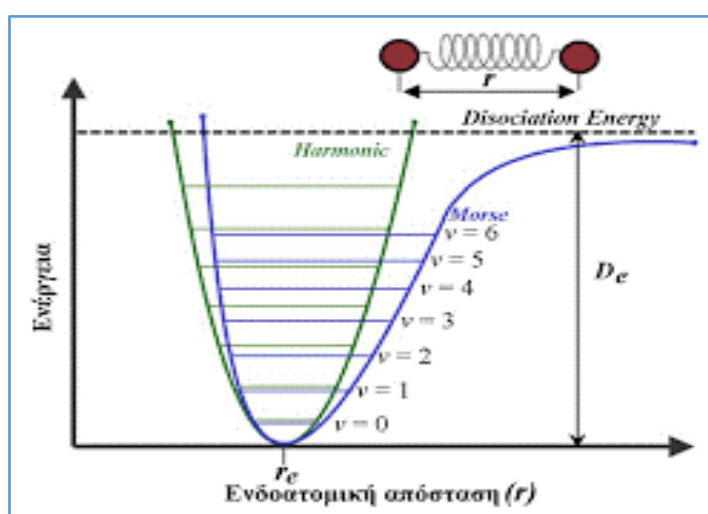
$$E_v = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu \quad (\text{Εξίσωση 2.14})$$

όπου n ο δονητικός κβαντικός αριθμός, ο οποίος λαμβάνει ακέραιες τιμές. Η τιμή του δονητικού κβαντικού αριθμού ορίζει μία ενεργειακή στάθμη δόνησης, στην οποία η ενέργεια και η συχνότητα δόνησης του δεσμού είναι αυστηρά καθορισμένες. Η ενέργεια στην εξίσωση 2.14 εκφράζεται σε Joule/mol και αντιστοιχεί σε κυματάριθμο όταν διαιρεθεί με το γινόμενο της σταθεράς του Planck και της ταχύτητας του φωτός.

Η στάθμη δόνησης με κβαντικό αριθμό $n=0$ ονομάζεται βασική ή θεμελιώδης στάθμη δόνησης, ενώ οποιαδήποτε άλλη στάθμη με $n>0$ που χαρακτηρίζεται από μεγαλύτερη ενέργεια, είναι μία διεγερμένη στάθμη δόνησης. Οι μεταπτώσεις μεταξύ δονητικών σταθμών είναι επιτρεπτές μόνο όταν γίνονται μεταξύ διαδοχικών σταθμών δόνησης, δηλαδή όταν ο δονητικός κβαντικός αριθμός αυξάνεται ή

ελαττώνεται κατά μία μονάδα. Στη συνήθη θερμοκρασία το μεγαλύτερο πλήθος των μορίων βρίσκεται στη βασική στάθμη, συνεπώς, απορρόφηση του δεσμού στο υπέρυθρο σημαίνει διέγερση της μορφής $n=0 \rightarrow n=1$. Η διέγερση αυτή καλείται βασική δόνηση τάσης, ενώ οι διεγέρσεις $n=0 \rightarrow n=2$, $n=0 \rightarrow n=3$ είναι απαγορευμένες.

Επίσης, σημαντικό είναι να αναφερθεί ότι οι εξισώσεις 2.13 και 2.14 περιγράφουν ικανοποιητικά την ταλάντωση μόνο για μικρές εκτάσεις και συμπίεσεις των δεσμών. Αν η έκταση ή η συμπίεση γίνει μεγαλύτερη από το 10% του μήκους του δεσμού, τότε η ταλάντωση παύει να είναι αρμονική. Ο μη αρμονικός ταλαντωτής συμπεριφέρεται όπως και ο αρμονικός ταλαντωτής μόνο για μικρές τιμές του δονητικού κβαντικού αριθμού. Για μεγαλύτερες τιμές, η ενεργειακή διαφορά μεταξύ των δονητικών επιπέδων γίνεται διαδοχικά μικρότερη, ώσπου το μόριο διασπάται σε άτομα.

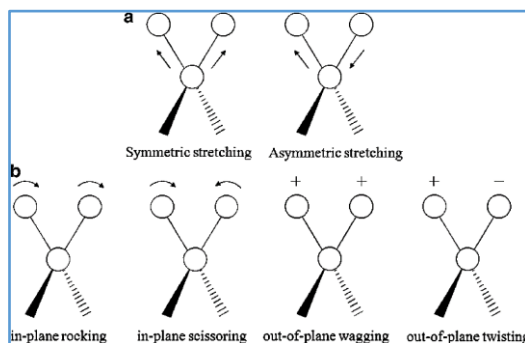


Εικόνα 2.6: Διακριτές δονητικές καταστάσεις ενός αρμονικού και ενός μη αρμονικού ταλαντωτή. (Θωμαΐδης, 2015)

2.3.3 Τύποι δονήσεων πολυατομικών μορίων

Είναι προφανές ότι, στα πολυατομικά μόρια το φάσμα IR γίνεται πολύπλοκο λόγω της επίδρασης των συχνοτήτων δόνησης και περιστροφής του μορίου στις διάφορες περιοχές απορρόφησης. Σε ένα μη γραμμικό μόριο, το οποίο αποτελείται από N άτομα, η θέση κάθε ατόμου στο χώρο καθορίζεται από τις τρεις ισότιμες συντεταγμένες x , y και z . Ο ολικός αριθμός των τιμών των συντεταγμένων είναι $3N$, δηλαδή το μόριο έχει $3N$ βαθμούς ελευθερίας κινήσεων στο χώρο. Η κίνηση του μορίου χρησιμοποιεί 3 από τους $3N$ βαθμούς ελευθερίας, αφήνοντας $3N-3$ αχρησιμοποίητους. Με τον καθορισμό των τριών κάθετων αξόνων συμμετρίας απαιτούνται επιπλέον τρεις βαθμοί ελευθερίας. Έτσι, για ένα μη γραμμικό μόριο μπορούν να υπάρξουν $3N-6$ θεμελιώδεις δονήσεις. (Hollas, 2004)

Οι δονήσεις τάσης είναι οι δονήσεις κατά τις οποίες δύο συνδεδεμένα άτομα πάλλονται συνέχεια, μεταβάλλοντας τη μεταξύ τους απόσταση (μήκος δεσμού) χωρίς όμως να αλλάζουν τον άξονα ή τις γωνίες δεσμού. Γενικά απαιτούν μεγαλύτερες ενέργειες από τις δονήσεις κάμψης. Οι δονήσεις κάμψης περιγράφουν μια συνεχή μεταβολή της γωνίας μεταξύ δύο δεσμών.



Εικόνα 2.7: Δονήσεις δεσμών σε μόριο τριών ατόμων. Α: Δονήσεις τάσης (1. Συμμετρική 2. Ασύμμετρη). Β: Δονήσεις κάμψης (1. Αιώρησης 2. Ψαλιδοειδής 3. Σείσης 4. Συστροφής). (Φαραντός, 1999)

Οι ενεργειακές μεταβολές στις στάθμες περιστροφής χαρακτηρίζονται κβαντισμένες. Αλλά πολύ μικρών ενεργειακών διαφορών. Επομένως, τα φάσματα περιστροφών μπορούν να παρατηρηθούν μόνο όταν το δείγμα βρίσκεται στην αέρια κατάσταση. Στην υγρή φάση ενώνονται οι λεπτές ζώνες απορρόφησης, λόγω περιστροφής, σε μία φαρδιά ζώνη απορρόφησης.

Ομάδα	Συχνότητα $\bar{\nu}$ (cm^{-1})	Ομάδα	Συχνότητα $\bar{\nu}$ (cm^{-1})
O-H	3550-3650	C=C	1620-1680
O-H(σζευγμ.)	3200-3550	C=C (αρωμ.)	1580-1610
N-H	3300-3500	C=N	1620-2660
=C-H	3200-3300	-NO ₂	1550-1570 και 1320-1360
=C-H	3000-3100	S=O	1300-1400
C-H	2850-2960	C-O-C	1000-1300
C=C	2100-2250	C-H	μονοϋπ. 690 και 730-770
C≡N	2200-2260	(αρωμ. εκτός επιπέδου)	ο- 730-770
			μ- 750-800 και 690-710
			π- 810-840
C=C=O	2100-2150	C-F	1000-1100
-N ₃	2120-2160	C-Cl	800-850
		C-Br	500-680
		C-I	200-500
C=O { κετόνης	1735-1760		
αλδεϋδης	1700-1750		
εστέρα	1730-1750		
οξέος	1700-1780		
αμιδίου	1640-1690		

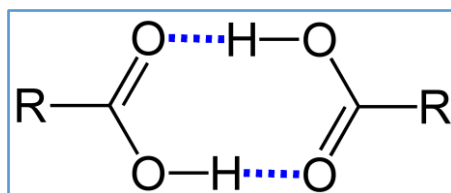
Εικόνα 2.8: Χαρακτηριστικές απορροφήσεις λειτουργικών ομάδων στο IR. (Κρήτης, 2007)

Από την εικόνα 2.7 φαίνεται ο τρόπος με τον οποίο η ανηγμένη μάζα επιδρά στις δονήσεις τάσης. Έχοντας ως πρότυπο την απορρόφηση της δόνησης τάσης του

δεσμού C – H, φαίνεται ότι όταν το υδρογόνο υποκαθίσταται με άτομα αυξανόμενου ατομικού αριθμού (αύξηση ανηγμένης μάζας), τότε παρατηρείται ελάττωση της συχνότητας συντονισμού. Επιπλέον, πολύ υψηλή συχνότητα δόνησης παρατηρείται στους δεσμούς O – H και N – H, που αποδίδεται κατά κύριο λόγο στη μικρή ανηγμένη μάζα, λόγω του υδρογόνου.

Από την άλλη πλευρά, παρατηρούνται μεταβολές που οφείλονται στην ισχύ του δεσμού. Γενικά, οι τριπλοί δεσμοί είναι ισχυρότεροι των διπλών, οι οποίοι είναι ισχυρότεροι των απλών δεσμών μεταξύ των ίδιων ατόμων. Αυτό, όπως φαίνεται και στην εικόνα 2.8, αλλά και όπως προκύπτει από την εξίσωση 2.13, επιφέρει σημαντική μεταβολή στη συχνότητα δόνησης, με αυξανόμενη συχνότητα με αύξηση της ισχύς του δεσμού.

Ακόμη, παρατηρείται ιδιαίτερα σημαντική επίδραση των δεσμών υδρογόνου στη δόνηση τάσης των ομάδων O – H και N – H. Ένα παράδειγμα, που εξηγεί το φαινόμενο αυτό, είναι το ελεύθερο O – H που δίνει μία οξεία κορυφή κοντά στους 3600 cm^{-1} , ενώ το συζευγμένο με διαμοριακούς δεσμούς υδρογόνου O – H, δίνει μία ευρεία και ισχυρή απορρόφηση στους $3500\text{--}3100\text{ cm}^{-1}$. Προφανώς, η μετατόπιση σε χαμηλότερες συχνότητες δόνησης τάσης οφείλεται στην εξασθένηση της ισχύς του δεσμού κατά τη δημιουργία δεσμών υδρογόνου. Η ύπαρξη εξαιρετικά ευρείας κορυφής στη δόνηση τάσης της ομάδας O – H στα καρβοξυλικά οξέα και σε πυκνά διαλύματα αλκοόλης, οφείλεται στο σχηματισμό διαμοριακών δεσμών υδρογόνου, όπως φαίνεται στην εικόνα 2.9.



Εικόνα 2.9: Απεικόνιση διαμοριακών δεσμών υδρογόνου σε διάλυμα καρβοξυλικού οξέος. (March, 1992)

Τέλος, η επίδραση των υποκαταστατών και της στερεοχημικής παρεμπόδισης, στην απορρόφηση διάφορων ομάδων εξαρτάται από το επαγωγικό και συζυγιακό ηλεκτρονικό φαινόμενο. Για παράδειγμα, στις κυκλικές κετόνες η αύξηση της συχνότητας απορρόφησης της καρβονυλικής ομάδας, οφείλεται στην τάση του δακτυλίου, να επιφέρει αποσταθεροποίηση των δεσμών C – C και ισχυροποίηση των C – H και C = O, εξωτερικών δεσμών.

2.3.4 Εφαρμογές της Φασματοσκοπίας Υπερύθρου

Το φάσμα απορρόφησης, το οποίο λαμβάνεται με τα όργανα IR, είναι ένα διάγραμμα με τεταγμένη τη διαπερατότητα του δείγματος επί τοις 100% και τετμημένη τον κυματάριθμο σε cm^{-1} . Οι βασικότεροι παράμετροι μιας ζώνης απορρόφησης στο IR είναι:

Η θέση της ζώνης, η οποία ορίζεται ως ο κυματάριθμος της μέγιστης απορρόφησης. Το πλάτος ημιζώνης, το οποίο αναφέρεται στο πλάτος σε cm^{-1} στο ήμισυ του ύψους ($T/2$ %). Η ένταση της κορυφής ή η μοριακή απορροφητικότητα, που μετριέται στο μέγιστο της κορυφής και η ολοκληρωμένη ένταση, δηλαδή η μέτρηση του εμβαδού της κορυφής. Οι παράμετροι αυτοί εκτός από τη θέση της ζώνης εξαρτώνται από την ταχύτητα σάρωσης του φάσματος και από το πλάτος σχισμής του μονοχρωμάτορα. (Χατζηιωάννου, 1990)

Επομένως, η ερμηνεία των φασμάτων υπερύθρου χρησιμοποιείται περισσότερο για την ποιοτική ανάλυση, παρά για την ποσοτική. Η ποιοτική ανάλυση δίνει τη δυνατότητα ταυτοποίησης ολόκληρου του μορίου, με τη βοήθεια των απορροφήσεων των χαρακτηριστικών ομάδων αλλά και από την περιοχή δακτυλικού αποτυπώματος. Στην περιοχή δακτυλικού αποτυπώματος εμφανίζονται απορροφήσεις με συχνότητες, που οφείλονται κυρίως σε δονήσεις κάμψης των μορίων. Η ακρίβεια ποσοτικών μετρήσεων με τη φασματοσκοπία IR είναι αρκετά μικρή περίπου 5 – 10% και περιορίζεται από τη χαμηλή ενέργεια της υπέρυθρης ακτινοβολίας (μικροί συντελεστές μοριακής απορρόφησης) και από τη δυσκολία να ορισθεί μια πραγματική γραμμή αναφοράς με 100% διαπερατότητα T . Ακόμη, η φασματοσκοπία IR παρουσιάζει προβλήματα στους ποσοτικούς προσδιορισμούς με τους διαλύτες, τη συγκέντρωση της ουσίας, το πάχος της κυψελίδας και για αυτό χρησιμοποιείται όταν οι άλλες μέθοδοι δεν είναι ικανοποιητικές.

Οι κυριότερες εφαρμογές της φασματοσκοπίας υπερύθρου αφορούν τη διελεύκανση της δομής οργανικών και ορισμένων ανόργανων ενώσεων. Επιπρόσθετα, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον έλεγχο της καθαρότητας ουσιών, αλλά και τη συνεχή παρακολούθηση αέριων ρύπων, χρησιμοποιώντας μη διασπείροντα φασματομέτρα IR. Η χρήση φασματομέτρων FTIR μετασχηματισμού Fourier και η αντικατάσταση των συμβατικών φασματομέτρων διασποράς, επέφερε αρκετά πλεονεκτήματα στη φασματοσκοπία IR. Με τη μέθοδο FTIR απαιτείται αρχικά μικρή ποσότητα δείγματος (0,01%), ενώ οι μετρήσεις πραγματοποιούνται σε λίγα δευτερόλεπτα. Με αποτέλεσμα πλέον η φασματοσκοπία IR να εφαρμόζεται για τον έλεγχο ποιότητας παραγωγικών διαδικασιών, όπως επίσης σε κινητικές μελέτες.

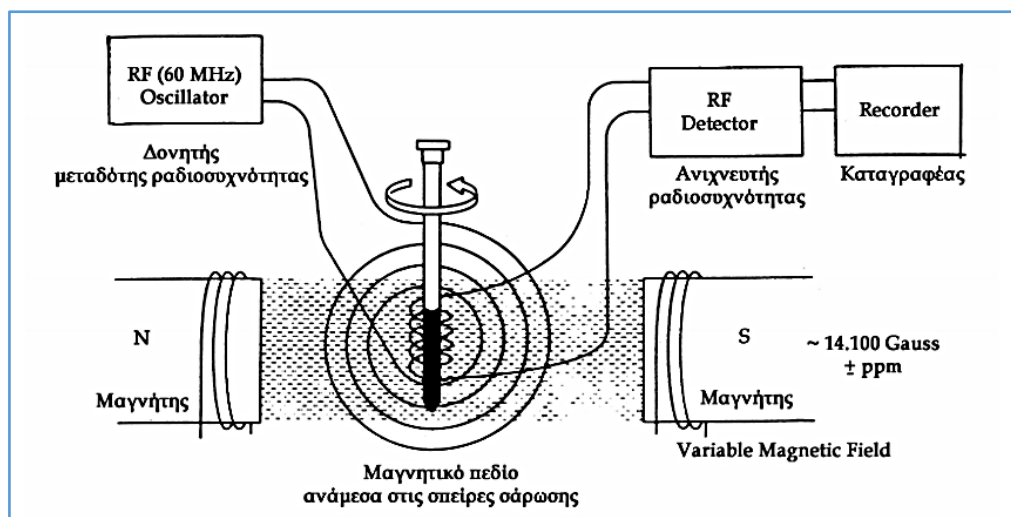
2.4 Φασματοσκοπία Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (NMR)

2.4.1 Φύση και βασική οργανολογία

Τα πρώτα επιτυχή πειράματα Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (Nuclear Magnetic Resonance, NMR) διεξήχθησαν το 1945 από τον Bloch και τους συνεργάτες του Hansen και Packard στο πανεπιστήμιο Stanford της Καλιφόρνιας και το Purcell της Μασαχουσέτης. Η τεχνική του NMR αναγνωρίστηκε σύντομα ως μία από τις πιο σημαντικές φασματοσκοπικές τεχνικές για την πιστοποίηση της δομής χημικών ενώσεων, λαμβάνοντας οι παραπάνω επιστήμονες, το 1952, Βραβείο Νόμπελ. Το 1953 παρουσιάστηκε το πρώτο εμπορικό όργανο NMR για τη μελέτη χημικών δομών και η μέθοδος αυτή αναπτύχθηκε ταχύτατα με ποικίλες εφαρμογές κυρίως στην οργανική χημεία και βιοχημεία.

Τα φασματόμετρα NMR που χρησιμοποιούνται είναι δύο ειδών. Τα φασματόμετρα συνεχούς κύματος (CW, continuous wave) και τα φασματόμετρα παλμικής τεχνικής μετασχηματισμού Fourier (FT-NMR, Pulse Fourier Transform Spectrometer). Στα φασματόμετρα συνεχούς κύματος η συχνότητα της πηγής ή διαφορετικά το εφαρμοζόμενο εξωτερικό πεδίο σαρώνονται αργά καταγράφοντας τα αντίστοιχα σήματα απορρόφησης. Στα παλμικά φασματόμετρα, το δείγμα ακτινοβολείται κάθετα προς το μαγνητικό εξωτερικό πεδίο με περιοδικούς παλμούς ραδιοσυχνοτήτων, προκαλώντας αποσβεννύμενο σήμα στο χρονικό διάστημα μεταξύ των παλμών.

Τα κυριότερα τμήματα των φασματομέτρων NMR είναι η γεννήτρια ραδιοσυχνοτήτων, ο προενισχυτής, ο μαγνήτης, ο αισθητήρας, ο ανιχνευτής και ο καταγραφέας, όπως φαίνεται και στην εικόνα 2.10. Η πηγή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, παράγει ακτινοβολία ραδιοσυχνοτήτων, η οποία μέσω ενός ενισχυτή μετατρέπεται σε έντονο και αναπαραγώγιμο παλμό ραδιοσυχνότητας μικρής διάρκειας, που επιδρά στο δείγμα. Για να επιτευχθεί συντονισμός, η ακτινοβολία ραδιοσυχνοτήτων μεταβάλλεται σιγά-σιγά κατά τη σάρωση. Το δείγμα, το οποίο περιβάλλεται από ένα πηνίο, διαλύεται σε κατάλληλο διαλύτη και τοποθετείται σε ένα γυάλινο σωλήνα, ανάμεσα στους δύο πόλους του μαγνήτη. Έτσι, όλοι οι πυρήνες μιας ένωσης διεγείρονται συγχρόνως, στο δείγμα. Το σήμα της απορρόφησης RF συλλαμβάνεται από τον ανιχνευτή, ενισχύεται και καταγράφεται. Το φασματογραφικό χαρτί NMR είναι ειδικά βαθμολογημένο και η καταγραφή του φάσματος γίνεται αφού προηγουμένως ρυθμιστεί το 'μηδέν' με μία ουσία αναφοράς, συνήθως το τετραμεθυλοπυρίτιο (tetramethylsilane, TMS). (Skoog, 2021)



Εικόνα 2.10: Διάταξη ενός φασματόμετρου NMR. (Παπαδογιάννης & Σαμανίδου, 2001)

Το σημαντικότερο και ακριβότερο τμήμα των οργάνων NMR είναι ο μαγνήτης, διότι τόσο η ευαισθησία όσο και η διαχωριστική ικανότητα αυξάνονται με αύξηση της έντασης του μαγνητικού πεδίου. Η σταθερότητα και η ομοιογένεια του μαγνήτη και της πηγής ραδιοσυχνοτήτων είναι σημαντικοί παράγοντες για την υψηλή διαχωριστική ικανότητα του οργάνου. Μαγνήτης υψηλού μαγνητικού πεδίου μπορεί να προκαλέσει διαχωρισμό κορυφών με διαφορά 0,01ppm και λιγότερο. Επειδή όμως πρέπει να διατηρηθεί η διαχωριστική ικανότητα αυτή σε όλο το μήκος του δείγματος, ο γυάλινος σωλήνας περιστρέφεται με τη βοήθεια ρεύματος αέρα. Ο μόνιμος μαγνήτης ή ηλεκτρομαγνήτης μπορεί να φτάσει τα 25 KGauss, αλλά με υπεραγώγιμα πηνία, σε χαμηλές θερμοκρασίες, μπορούν να επιτευχθούν ισχυρότερα μαγνητικά πεδία. Οι υπεραγώγιμοι μαγνήτες κατασκευάζονται από σύρμα νιοβίου-κασιτέρου ή νιοβίου-τιτανίου και διατηρούνται σε περιβάλλον υγρού ηλίου και όλο το σύστημα εμβαπτίζεται σε εξωτερικό δοχείο Dewar με υγρό άζωτο.

Τα παλαιά όργανα, για φάσματα ^1H NMR, λειτουργούσαν σε 60, 80, 90, 100 MHz, ενώ με υπεραγώγιμα πηνία αρχίζουν από 200, 300, ενώ πρόσφατα από 500 έως και 1000 MHz. Παλαιότερα η ομοιογένεια επιτυγχάνονταν με μαγνήτες, που οι πόλοι τους είχαν διάμετρο 20cm και καλά γυαλισμένες επιφάνειες. Επίσης χρησιμοποιούνταν ειδικά ηλεκτρικά δευτερεύοντα πηνία γύρω από το μαγνήτη, μέσα από τα οποία περνούσαν ασθενή ηλεκτρικά ρεύματα, που διόρθωναν τις εκτροπές από την ομοιογένεια. Σήμερα, για την αντιστάθμιση των διακυμάνσεων του μαγνητικού πεδίου μετά τη διάρκεια της μέτρησης, χρησιμοποιείται η τεχνική κλειδώματος στη συχνότητα συντονισμού ενός πυρήνα αναφοράς. Επιπλέον, μέσα στον κύριο πυρήνα υπάρχουν διορθωτικά πηνία, τα οποία παράγουν ασθενή μαγνητικά πεδία, που αντισταθμίζουν τις ανομοιογένειες του βασικού μαγνητικού πεδίου. Τέλος, κατά τη διάρκεια της λειτουργίας του μαγνήτη παράγεται θερμότητα επομένως, απαιτείται θερμοστάτης με σύστημα ψύξης. (Παπαδογιάννης & Σαμανίδου, 2001)

Οι διάφοροι πυρήνες μπορούν να μελετηθούν με το ίδιο όργανο (multinuclear NMR) με απλή αλλαγή του κρυσταλλικού ταλαντωτή, που παράγει συγκεκριμένη ραδιοσυχνότητα, συνήθως για πυρήνες όπως το υδρογόνο, το φθόριο και ο φώσφορος.

2.4.2 Αρχές της Φασματοσκοπίας Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού

Στη φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού πολλά είδη πυρήνων περιστρέφονται γύρω από έναν άξονα. Το περιστρεφόμενο φορτίο μπορεί να θεωρηθεί ως ηλεκτρικό ρεύμα κινούμενο κυκλικά, οπότε να συμπεριφέρεται ως μαγνητικό δίπολο, που εμφανίζει μαγνητική ροπή. Η μαγνητική ροπή ορίζεται ως ένα διάνυσμα συγγραμικό με το διάνυσμα της στροφορμής και είναι ανάλογη της στροφορμής. Παρουσία όμως ενός ισχυρού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, οι πυρήνες αποκτούν συγκεκριμένους προσανατολισμούς, επομένως παρουσιάζεται και επίδραση στη μαγνητική ροπή. Για να εκφραστεί αυτή η μαγνητική ροπή χρησιμοποιείται ως μονάδα το πυρηνικό μαγνητόνιο Bohr, που δίνεται από τη σχέση:

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi M_\pi c} \quad (\text{Εξίσωση 2.15})$$

όπου h η σταθερά του Planck, e το φορτίο του πυρήνα, M_π η μάζα του πυρήνα και c η ταχύτητα του φωτός.

Η τιμή της πυρηνικής ιδιοστροφορμής είναι κβαντισμένη και καθορίζεται από τον κβαντικό αριθμό της πυρηνικής ιδιοστροφορμής. Η τιμή του κβαντικού αριθμού I εξαρτάται από τη σύσταση του πυρήνα, δηλαδή πυρήνες με περιττό αριθμό μάζας παρουσιάζουν κβαντικό αριθμό, που είναι πολλαπλάσιο του $\frac{1}{2}$ των πρώτων περιττών αριθμών, πυρήνες με άρτιο αριθμό μάζας και περιττό ατομικό αριθμό παρουσιάζουν κβαντικό αριθμό ίσο με την μονάδα, ενώ πυρήνες με άρτιο αριθμό μάζας και άρτιο ατομικό αριθμό παρουσιάζουν κβαντικό αριθμό, που είναι ίσος με το μηδέν. Επομένως, ο κβαντικός αριθμός πυρηνικής ιδιοστροφορμής μπορεί να είναι διαφορετικός για κάθε ισότοπο του κάθε στοιχείου. Πυρήνες με $I=0$ δεν εμφανίζουν μαγνητικές ιδιότητες και είναι ανενεργοί στη φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού. (Γεροθανάσης, 2000)

Εκτός ισχυρού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου το διάνυσμα της στροφορμής μπορεί να έχει οποιοδήποτε προσανατολισμό. Εντός όμως ομογενούς μαγνητικού πεδίου, για έναν ορισμένο πυρήνα, υπάρχουν $2I+1$ δυνατές στάθμες ή προσανατολισμοί, στο μαγνητικό πεδίο. Οι στάθμες διαφέρουν μεταξύ τους ως προς το ποσό της ενέργειας και παριστάνονται σχηματικά με το διάγραμμα ενεργειακών σταθμών. Για παράδειγμα, οι πυρήνες με κβαντικό αριθμό spin (κβαντικός αριθμός πυρηνικής στροφορμής) ίσο με $\frac{1}{2}$, όπως του ^1H και ^{13}C εμφανίζουν μόνο δύο

προσανατολισμούς, τον παράλληλο με μικρότερη ενέργεια και τον αντιπαράλληλο, προς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, με μεγαλύτερη ενέργεια. Η διακοπή του εκφυλισμού και ο διαχωρισμός των ενεργειακών σταθμών του πυρηνικού spin εντός μαγνητικού πεδίου ονομάζεται φαινόμενο Zeeman.

Αν οι πυρήνες ακτινοβοληθούν με κατάλληλη ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία ορισμένης συχνότητας, απορροφάται ενέργεια από τους πυρήνες της χαμηλότερης ενέργειας. Με απορρόφηση ενέργειας οι πυρήνες μεταβαίνουν στην κατάσταση υψηλότερης ενέργειας με αναστροφή του spin και επέρχεται συντονισμός. Τα φάσματα NMR οφείλονται λοιπόν σε διεγέρσεις πυρήνων μεταξύ ενεργειακών σταθμών με απορρόφηση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, η οποία πρέπει να έχει ενέργεια ίση με την ενεργειακή διαφορά ΔE των δύο σταθμών. Η συχνότητα που απαιτείται για το συντονισμό δίνεται από τη σχέση:

$$\nu_0 = \frac{\Delta E}{h} = \left(\frac{\gamma}{2\pi}\right)B_0 \quad (\text{Εξίσωση 2.16})$$

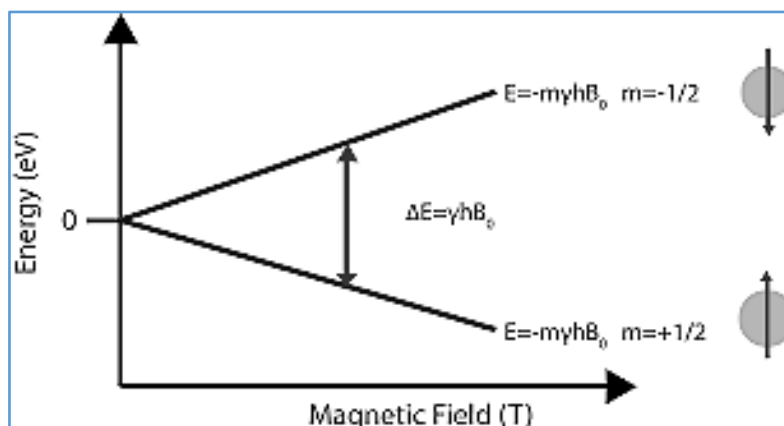
όπου γ ο γυρομαγνητικός λόγος του πυρήνα, μία σταθερά χαρακτηριστική για τον πυρήνα κάθε ισότοπου και B_0 η ένταση του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Η συχνότητα που απαιτείται για το συντονισμό, σύμφωνα με την παραπάνω σχέση, εξαρτάται από την ισχύ του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου αλλά και από το είδος του πυρήνα. Όσο αυξάνεται η ισχύς του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου τόσο αυξάνεται και η ενεργειακή διαφορά μεταξύ της παράλληλης και αντιπαράλληλης διάταξης των πυρήνων, με αποτέλεσμα να απαιτείται ακτινοβολία υψηλότερης ενέργειας για την αναστροφή του spin. Αν το εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο διατηρείται σταθερό απαιτείται μία συγκεκριμένη συχνότητα για το συντονισμό ενός πυρήνα. Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή του γυρομαγνητικού λόγου τόσο πιο μεγάλη είναι η συχνότητα συντονισμού και επομένως τόσο πιο εύκολη η παρατήρηση του συγκεκριμένου πυρήνα.

Η διαφορά ενέργειας ΔE (Εικόνα 2.11), που αντιστοιχεί στις διεγέρσεις των πυρήνων είναι εξαιρετικά μικρή της τάξης 10^{-3} cal/mol. Επομένως, υπάρχουν πολλοί πυρήνες με αρκετή ενέργεια, που είναι ικανοί να μεταπέσουν στη διεγερμένη κατάσταση, λόγω της θερμικής τους κίνησης. Για το λόγο αυτό υπάρχει πολύ μικρή περίσσεια των πυρήνων, που βρίσκονται στη βασική κατάσταση σε σχέση με τη διεγερμένη. Ο λόγος του αριθμού των πυρήνων της βασικής κατάστασης προς τον αριθμό των πυρήνων που βρίσκονται στη διεγερμένη κατάσταση δίνεται από την κατανομή Boltzmann:

$$\frac{N_{-1/2}}{N_{+1/2}} = e^{-\frac{\Delta E}{kT}} = e^{-\frac{2\mu B_0}{kT}} \quad (\text{Εξίσωση 2.17})$$

όπου k σταθερά Boltzmann και T η απόλυτη θερμοκρασία.

Παρόλο που η διαφορά πληθυσμού μεταξύ των δύο ενεργειακών καταστάσεων είναι πολύ μικρή, αυτή είναι ικανή για την ύπαρξη συντονισμού. Επομένως, είναι λογικό η φασματοσκοπία NMR να εμφανίζει πολύ μικρότερη ευαισθησία σε σχέση με άλλες φασματοσκοπικές μεθόδους. Ακόμη δύο παράγοντες οι οποίοι επιδρούν στην ευαισθησία της συγκεκριμένης φασματοσκοπικής μεθόδου είναι η τιμή του γυρομαγνητικού λόγου και η αφθονία των ισοτόπων των πυρήνων στη φύση. Οι πυρήνες με μικρούς γυρομαγνητικούς λόγους ή χαμηλή αφθονία στη φύση παρουσιάζουν χαμηλή ευαισθησία.



Εικόνα 2.11: Μεταβολή της ενεργειακής διαφοράς ΔE , με τη μεταβολή της έντασης του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου B_0 . (level, n.d.)

Η φασματοσκοπία NMR δεν θα εμφάνιζε πρακτικό ενδιαφέρον εάν δεν υπήρχαν μηχανισμοί αποκατάστασης της ισορροπίας Boltzmann, δηλαδή μηχανισμοί αποδιέγερσης. Σε αντίθεση με άλλες φασματοσκοπικές μεθόδους, η αποδιέγερση των πυρήνων μετά τον συντονισμό δεν είναι αυθόρμητη, αλλά εξαναγκασμένη. Οι χρόνοι περιστροφικής και δονητικής αποδιέγερσης είναι της τάξεως $10^{-9} - 10^{-4}$ δευτερολέπτων, ενώ οι χρόνοι αποδιέγερσης μετά το συντονισμό είναι της τάξεως των δευτερολέπτων. Λόγω της μικρής τιμής πλεονάσματος Boltzmann, η αποδιέγερση είναι πολύ πιο σημαντική για τη φασματοσκοπία NMR, σε αντίθεση με άλλες φασματοσκοπικές μεθόδους. Εάν χρειάζεται ελάχιστος χρόνος για να χαλαρώσουν τα πυρηνικά spin μετά τη διέγερσή τους, δηλαδή η αποδιέγερση είναι πολύ απότομη, τότε τα σήματα που παρατηρούνται στο φάσμα είναι ευρεία. Εάν όμως η αποδιέγερση είναι πολύ αργή, οι πυρήνες του δείγματος καθίστανται κορεσμένοι και παρατηρείται ένα ασθενές σήμα. (Γεροθανάσης, 2000)

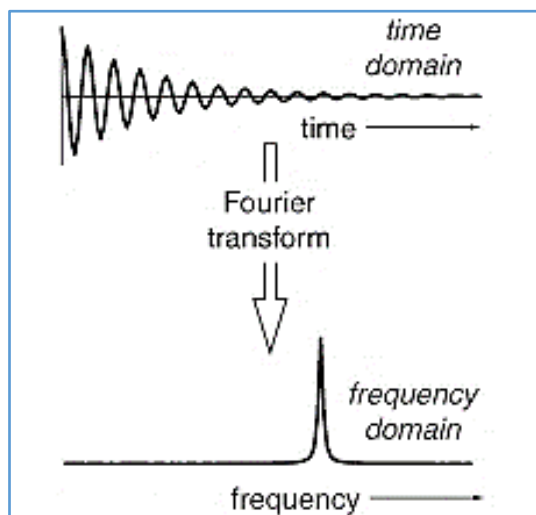
Η αποδιέγερση πυρήνων γίνεται με δύο διεργασίες αποδιέγερσης. Κατά την πρώτη διεργασία, ο διεγερμένος πυρήνας αλληλεπιδρά με τοπικά μαγνητικά πεδία, που δημιουργούνται εξ επαγωγής από το ατομικό και ηλεκτρονικό περιβάλλον του. Η συχνότητα αυτών των πεδίων μεταβάλλεται και είναι αποτέλεσμα της μοριακής κίνησης στο διάλυμα. Οι κινήσεις των μορίων διακρίνονται σε γρήγορες στις οποίες κατατάσσονται οι ηλεκτρονιακές κινήσεις και οι μοριακές δονήσεις και σε βραδύτερες κινήσεις στις οποίες κατατάσσονται οι περιστροφικές κινήσεις των

μορίων και οι μεταφορικές κινήσεις διάχυσης, που συμβάλλουν στις πυρηνικές πορείες αποδιέγερσης. Όταν η συχνότητα των τοπικών πεδίων γίνει ίση με την συχνότητα του πυρήνα, δηλαδή όταν ο πυρήνας αλληλεπιδρά με το περιβάλλον του και αναγκάζεται να αποβάλλει την ενέργεια την οποία απορρόφησε κατά τη διέγερση, τότε προκαλείται η αποδιέγερση spin – πλέγματος. Η αποδιέγερση spin-πλέγματος χαρακτηρίζεται από το χρόνο αποδιέγερσης T_1 , ο οποίος αποτελεί το χρόνο παραμονής των πυρήνων στην υψηλότερη ενεργειακή κατάσταση. Ο χρόνος T_1 εξαρτάται από το γυρομαγνητικό λόγο των πυρήνων καθώς και από το ιξώδες του διαλύματος. Πιο συγκεκριμένα, όσο μεγαλύτερο είναι το ιξώδες του διαλύματος, και επομένως η κινητικότητα είναι μικρή, τόσο μεγαλύτερος είναι και ο χρόνος T_1 . Αντίθετα, όταν η κινητικότητα είναι μεγάλη, αυξάνεται η πιθανότητα επίτευξης κατάλληλης μαγνητικής διακύμανσης ικανής να προκαλέσει αποδιέγερση, και η τιμή του T_1 μειώνεται.

Κατά τη δεύτερη διεργασία αποδιέγερσης, ο πυρήνας ανταλλάσσει ενέργεια με γειτονικούς πυρήνες, που βρίσκονται στη θεμελιώδη κατάσταση. Όταν δύο γειτονικοί πυρήνες, εμφανίζουν ίδιες ταχύτητες αποδιέγερσης και βρίσκονται σε διαφορετικές μαγνητικές κβαντικές καταστάσεις, προκαλείται αλληλεπίδραση των μαγνητικών τους πεδίων και ανταλλαγή ενεργειακών καταστάσεων μεταξύ τους. Αυτό, έχει σαν αποτέλεσμα ο πυρήνας ο οποίος βρίσκεται στη χαμηλότερη ενεργειακή κατάσταση να διεγερθεί, ενώ αυτός ο οποίος βρίσκεται στη διεγερμένη κατάσταση να επιστρέψει στο χαμηλότερο ενεργειακό επίπεδο. Με τον τρόπο αυτό, οι πληθυσμοί των ενεργειακών καταστάσεων παραμένουν αμετάβλητοι. Αυτή η διεργασία ονομάζεται αποδιέγερση spin – spin και η διάρκεια της ορίζεται από τον εγκάρσιο χρόνο αποδιέγερσης T_2 . Ο μηχανισμός ανταλλαγής spin- spin αποτελεί κύριο μέσο αποδιέγερσης για μόρια χαμηλής κινητικότητας, όπως για παράδειγμα σε στερεά δείγματα. Οι χρόνοι αποδιέγερσης T_1 και T_2 συμβάλουν σημαντικά στη μελέτη της κινητικότητας των μορίων. Ο Block απέδειξε ότι το εύρος ενός NMR σήματος είναι ανάλογο του λόγου $1/\pi T_2$. Μέσω αυτής της προσέγγισης εξηγείται γιατί τα μόρια τα οποία κινούνται αργά και επομένως έχουν μικρό T_2 , εμφανίζουν ευρείες κορυφές σε ένα φάσμα NMR. (Μαυρομούστακος, και συν., 2018)

Το κλασσικό μονοδιάστατο NMR φάσμα προκύπτει από το μετασχηματισμό Fourier της FID. Στο συγκεκριμένο φάσμα, κάθε κορυφή αντιστοιχεί σε διαφορετικό πυρήνα με χαρακτηριστικό T_2 και επομένως χαρακτηριστικό εύρος σήματος. Στο φάσμα NMR με μετασχηματισμό Fourier χρησιμοποιείται ένας ισχυρός αλλά σύντομος παλμός ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας με σκοπό να διεγερθούν ταυτόχρονα όλοι οι πυρήνες, που βρίσκονται σε ένα δείγμα. Έτσι μειώνεται ο χρόνος σάρωσης ενός εύρους συχνοτήτων. Τα περισσότερα φάσματα NMR περιέχουν πολυάριθμα σήματα και εμφανίζονται στο πεδίο του χρόνου ως μία υπέρθεση ενός αριθμού μεμονωμένων σημάτων, όπως φαίνεται στην Εικόνα 2.12. Τέτοιου είδους φάσματα δεν μπορούν να ερμηνευτούν με απλή εξέταση. Για τη μετατροπή τους σε

συνηθισμένα φάσματα στο πεδίο συχνότητας είναι απαραίτητος ο μετασχηματισμός Fourier. Έτσι, η κλίμακα χρόνου (time scale) ενός πειράματος ελαττώνεται και είναι της τάξης των δευτερολέπτων, κατά τη διάρκεια της οποίας η μαγνήτιση μπορεί να μετρηθεί μερικές χιλιάδες φορές.



Εικόνα 2.12: Φάσμα NMR στο πεδίο του χρόνου (CW) και στο πεδίο συχνότητας (FT) (Venkatesh)

2.4.3 Βασικά Χαρακτηριστικά Φάσματος NMR

2.4.3.α. Χημική Μετατόπιση

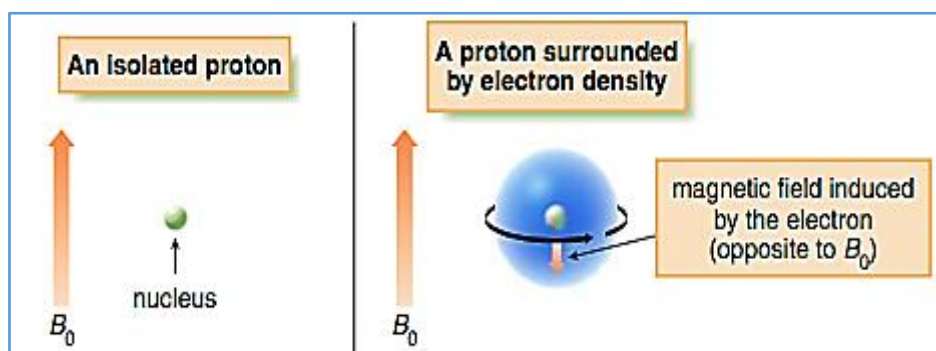
Αρχικά, ένα φάσμα NMR είναι ένα γράφημα της συχνότητας συντονισμού προς την ένταση της απορρόφησης της ακτινοβολίας από ένα δείγμα. Αν και ο οριζόντιος άξονας του φάσματος είναι μία κλίμακα συχνότητας, συνήθως βαθμονομείται με αδιάστατες μονάδες, τα ppm (parts per million), που καλούνται «μέρη στο εκατομμύριο». Οι μονάδες συχνότητας λοιπόν μετατρέπονται σε ppm με σκοπό η κλίμακα του οριζόντιου άξονα να έχει τις ίδιες τιμές ανεξάρτητα από την ισχύ του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, στο οποίο γίνεται η μέτρηση. Η κλίμακα ppm, που ορίζεται ως κλίμακα δ, βαθμονομείται συνήθως με βάση τον συντονισμό μιας πρότυπης ένωσης, η συχνότητα της οποίας επιλέγεται να είναι 0,0 ppm. Η διαφορά της συχνότητας συντονισμού ενός πυρήνα με τη συχνότητα συντονισμού της ένωσης αναφοράς, καλείται χημική μετατόπιση. Η χημική μετατόπιση μπορεί να μετρηθεί σε Hz, όμως συνήθως εκφράζεται σε ppm, με στόχο την απλούστευση των αριθμητικών τιμών. (Εξίσωση 2.18). (Klein, 2020)

$$\text{χημική μετατόπιση } \delta \text{ (ppm)} = \frac{\text{χημική μετατόπιση από TMS σε Hz}}{\text{συχνότητα φασματομέτρου σε MHz}} \quad (\text{Εξίσωση 2.18})$$

Το εύρος των χημικών μετατοπίσεων για τον πυρήνα ^1H καλύπτει κατά προσέγγιση την περιοχή 0 – 10 ppm ενώ για τον πυρήνα ^{13}C καλύπτει κατά προσέγγιση την

περιοχή 0 – 220 ppm, καθώς ο γυρομαγνητικός λόγος του ^{13}C είναι 4 φορές μικρότερος από αυτόν του ^1H . Οι τιμές στην κλίμακα δ αυξάνουν από δεξιά προς τα αριστερά.

Η διαφορά χημικής μετατόπισης μεταξύ δύο πυρήνων οφείλεται στο διαφορετικό τους χημικό περιβάλλον. Όμοιοι πυρήνες στο ίδιο μόριο, οι οποίοι βρίσκονται σε διαφορετικό χημικό περιβάλλον, παρουσιάζουν διαφορετική συχνότητα συντονισμού, δηλαδή οι αντίστοιχες κορυφές εμφανίζονται σε διαφορετικές θέσεις στο φάσμα NMR. Για να γίνει αντιληπτή η επίδραση του χημικού περιβάλλοντος μπορεί να χρησιμοποιηθεί ένα απλό ατομικό μοντέλο, το οποίο αποτελείται από έναν πυρήνα και ένα ηλεκτρόνιο. Αν λοιπόν, τοποθετηθεί ένα άτομο εντός μαγνητικού πεδίου B_0 , το πεδίο επιδρά στη στροφορμή του ηλεκτρονίου και το εξαναγκάζει να εκτελεί μεταπτωτική κίνηση γύρω από τον πυρήνα. Η κίνηση αυτή δημιουργεί ένα επαγόμενο μαγνητικό πεδίο B_i , το οποίο είναι ανάλογο προς το B_0 , αλλά αντίθετο προς αυτό. Επομένως, ο πυρήνας θα αισθάνεται ένα πραγματικό πεδίο B , το οποίο θα είναι μικρότερο από το εξωτερικό B_0 (Εξίσωση 2.19).



Εικόνα 2.13.: Ηλεκτρονική προστασία πυρήνα από το περιστρεφόμενο ηλεκτρόνιο. (Pavan M.)

$$B_{\text{πραγματικό}} = B_0 - B_i \quad (\text{Εξίσωση 2.19})$$

$$\text{όμως } B_i = \sigma B_0 \quad (\text{Εξίσωση 2.20})$$

$$B_{\text{πραγματικό}} = B_0 - \sigma B_0 = (1 - \sigma)B_0 \quad (\text{Εξίσωση 2.21})$$

Με βάση λοιπόν το παραπάνω μοντέλο είναι αντιληπτό ότι τα δεσμικά ηλεκτρόνια προστατεύουν τους πυρήνες από το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Η σταθερά αναλογίας σ στην εξίσωση 2.20 ονομάζεται σταθερά προστασίας, είναι αδιάστατο μέγεθος, αποτελεί μέτρο της προστασίας των πυρήνων από τα κινούμενα ηλεκτρόνια και εξαρτάται από το είδος των πυρήνων και την ελεύθερη κίνηση των ηλεκτρονίων.

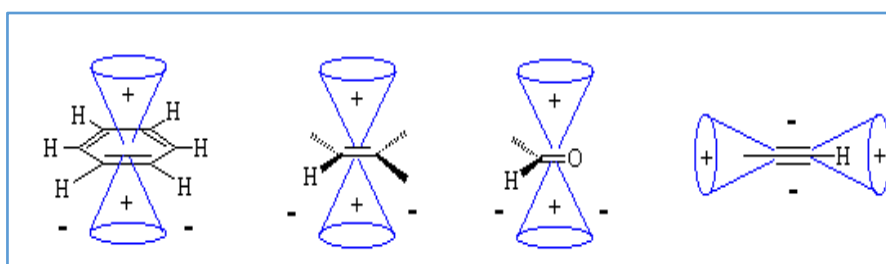
Όταν τα ηλεκτρόνια κινούνται ελεύθερα γύρω από τον πυρήνα, η προστασία ονομάζεται διαμαγνητική και η σταθερά σ_d παίρνει πολύ μικρές θετικές τιμές. Η διαμαγνητική επίδραση των ηλεκτρονίων προστατεύει τον πυρήνα. Από την άλλη, όταν η κίνηση των ηλεκτρονίων είναι περιορισμένη λόγω παρουσίας πολλαπλών δεσμών ή ηλεκτραρνητικών υποκαταστατών, η προστασία ονομάζεται

παραμαγνητική και η σταθερά σ_p παίρνει μικρές αρνητικές τιμές. Η παραμαγνητική επίδραση των ηλεκτρονίων αποπροστατεύει τον πυρήνα. Συνεπώς, η σταθερά προστασίας σ μπορεί να εκφραστεί ως το αλγεβρικό άθροισμα της διαμαγνητικής και παραμαγνητικής προστασίας ($\sigma = \sigma_d + \sigma_p$). (Günther, 2013)

Επομένως, είναι αντιληπτό ότι η χημική μετατόπιση εξαρτάται σημαντικά από την ένταση του εξωτερικού πεδίου. Όμως, η χημική μετατόπιση επηρεάζεται και από ενδομοριακούς και εξωμοριακούς παράγοντες, οι οποίοι επηρεάζουν την πυκνότητα του ηλεκτρονιακού νέφους γύρω από τον πυρήνα. Τέτοιοι παράγοντες είναι οι πολλαπλοί δεσμοί, οι ηλεκτραρνητικοί υποκαταστάτες, οι δακτύλιοι, ο σχηματισμός δεσμού υδρογόνου και ο διαλύτης.

Οι ηλεκτραρνητικοί υποκαταστάτες έλκουν προς το μέρος τους τα δεσμικά ηλεκτρόνια και ελαττώνουν έτσι την ηλεκτρονική πυκνότητα γύρω από τον πυρήνα με τον οποίο είναι συνδεδεμένοι. Έτσι, ο πυρήνας συντονίζεται σε χαμηλότερα μαγνητικά πεδία με μεγαλύτερες συχνότητες και οι αντίστοιχες κορυφές στο φάσμα εμφανίζονται με μεγαλύτερη χημική μετατόπιση. Ωστόσο, ένας ηλεκτραρνητικός υποκαταστάτης παρουσιάζει μικρή επίδραση στη χημική μετατόπιση όταν βρίσκεται σε απόσταση μεγαλύτερη από τρεις δεσμούς.

Επιπλέον, η ύπαρξη ενός πολλαπλού δεσμού ή ενός δακτυλίου στο μόριο μιας χημικής ένωσης επηρεάζει τη χημική μετατόπιση των γειτονικών πρωτονίων. Αυτό το φαινόμενο ονομάζεται μαγνητική ανισοτροπία και οφείλεται στην κίνηση των ηλεκτρονίων του πολλαπλού δεσμού, η οποία δημιουργεί ένα επαγόμενο μαγνητικό πεδίο. Η διεύθυνση του επαγόμενου μαγνητικού πεδίου ως προς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο προκαλεί άλλοτε την προστασία και άλλοτε την αποπροστασία των γειτονικών πρωτονίων (Εικόνα 2.14).



Εικόνα 2.14: Κώνοι ανισοτροπίας ενώσεων με πολλαπλούς δεσμούς. (Openchemistryhelp)

Οι κώνοι ανισοτροπίας καθορίζουν τις περιοχές προστασίας και αποπροστασίας των πρωτονίων λόγω της κοντινής απόστασης τους με πολλαπλούς δεσμούς. Όταν η θέση των πρωτονίων στο μόριο είναι εντός της περιοχής προστασίας (+), αυτά προστατεύονται από το B_0 , ενώ αποπροστατεύονται όταν βρίσκονται σε θέσεις εκτός της περιοχής προστασίας (-). Ακόμη, η αύξηση της πολλαπλότητας του δεσμού ή η αύξηση συζυγίας σε ένα μόριο προκαλεί την ελάττωση της ενεργειακής διαφοράς (ΔΕ) μεταξύ της υψηλότερης κατειλημμένης κατάστασης (HOMO) και της

χαμηλότερης διεγερμένης κατάστασης (LUMO), με συνέπεια τα δεσμικά ηλεκτρόνια να επάγουν την αποπροστασία του πυρήνα.

Από την άλλη πλευρά, η χημική μετατόπιση επηρεάζεται σημαντικά από τον διαλύτη, έναν εξωμοριακό παράγοντα. Από τη στιγμή, που όλες οι μετρήσεις των δειγμάτων γίνονται με διάλυσή τους σε κάποιον διαλύτη είναι φυσικό να αναμένεται αλληλεπίδραση του διαλύτη και της ουσίας. Υπάρχουν αρκετά είδη διαμοριακών αλληλεπιδράσεων μεταξύ διαλυτών και ουσιών, που επηρεάζουν τη χημική μετατόπιση. Τέτοια παραδείγματα παρουσιάζονται όταν ο διαλύτης ενώνεται με τη διαλυμένη ουσία με ασθενείς δυνάμεις Van der Waals, που διαστρεβλώνουν και μεταβάλλουν τη συμμετρία του ηλεκτρονικού περιβάλλοντος γύρω από τον πυρήνα (μεταβολή κατά 0,1-0,2 ppm). Ακόμη, η μαγνητική ανισοτροπία των μορίων του διαλύτη, κυρίως όταν στον διαλύτη υπάρχουν αρωματικοί δακτύλιοι, προκαλεί συνολικά θετική μεταβολή της χημικής μετατόπισης (κατά 0,5 ppm). Επιπρόσθετα, διαλύτες με πολικά μόρια ή πολικές ομάδες προκαλούν ένα ηλεκτρικό πεδίο αντίδρασης, που έχει ως αποτέλεσμα τη μείωση της θωράκισης γύρω από τα πρωτόνια της ουσίας. (Wade G., 2012)

Οι δεσμοί υδρογόνου παίζουν σημαντικό ρόλο στην αλληλεπίδραση μορίων του διαλύτη και της διαλυμένης ουσίας. Γενικά η ισχύς ενός δεσμού υδρογόνου εξαρτάται από το μήκος H --- Y, τη γεωμετρία της διέδρης γωνίας X-H --- Y-Z, τη φύση του μικροπεριβάλλοντος και τον βαθμό ομοιότητας των τιμών pK_a των ατόμων που μοιράζονται το υδρογόνο (Grabowski, 2011). Οι χημικές μετατοπίσεις, ιδιαίτερα των πρωτονίων, επηρεάζονται έντονα από τον σχηματισμό δεσμών υδρογόνου. Η αλλαγή της χημικής μετατόπισης προς υψηλές τιμές ppm λόγω σχηματισμού δεσμών υδρογόνου δεν έχει εξηγηθεί σε όλη της την έκταση, αλλά από τις ενδείξεις φαίνεται ότι δεν είναι απλά και μόνο ένα φαινόμενο μείωσης της ηλεκτρονικής πυκνότητας γύρω από το πρωτόνιο και ότι η ηλεκτρονική κατανομή στον ομοιοπολικό δεσμό είναι προφανώς διαφορετική από το ηλεκτρικό πεδίο, με τέτοιο τρόπο που να προκαλεί αποθωράκιση του πρωτονίου. Μία εξήγηση μπορεί να δοθεί χρησιμοποιώντας τη μέθοδο NBO analysis, η οποία δείχνει τον τρόπο με τον οποίο τα άτομα του δεσμού υδρογόνου αλληλεπιδρούν (Weinhold, 2012). Ο Σίσκος Μ. (2017) και η ομάδα του χρησιμοποίησαν τη μέθοδο NBO για να εξηγήσουν τη δεσμικότητα των δεσμών υδρογόνου και κατ' επέκταση πως αυτή επηρεάζει τη χημική μετατόπιση, σε πολύπλοκα βιολογικά και συνθετικά οργανικά μόρια. Στην έρευνα παρατηρήθηκε ότι όσο αυξανόταν η δεσμικότητα του δεσμού υδρογόνου, τόσο μεγαλύτερη ήταν η αποπροστασία του πρωτονίου. (Siskos, Gerothanassis, & Choudhary, 2017)

2.4.3.β. Σύζευξη spin – spin

Ένα ακόμη χαρακτηριστικό, που παρατηρείται στα φάσματα NMR, είναι η σχάση των κορυφών. Τα σήματα συντονισμού πρωτονίων στην περίπτωση της ^1H NMR, που γειτνιάζουν με άλλους μαγνητικούς πυρήνες εμφανίζονται με τη μορφή πολλαπλών κορυφών, που έχουν ορισμένη κανονικότητα και συμμετρία. Η πολλαπλότητα των σημάτων ονομάζεται σύζευξη spin – spin. Η σύζευξη μεταξύ πυρήνων πραγματοποιείται μέσω αλληλεπιδράσεων σύζευξης μεταξύ των δεσμικών ηλεκτρονίων και όχι μέσω χώρου, καθώς η ενέργεια αλληλεπίδρασης μέσω χώρου μηδενίζεται λόγω της ταχύτατης κίνησης και περιστροφής των μορίων. Υπάρχουν τρεις πιθανοί μηχανισμοί: (α) οι μαγνητικές ροπές των πυρήνων αλληλεπιδρούν με τα ηλεκτρικά ρεύματα που προκαλούνται από τα ηλεκτρονικά τροχιακά (β) υπάρχει διπολική αλληλεπίδραση μεταξύ των πυρηνικών και ηλεκτρονικών μαγνητικών ροπών και (γ) υπάρχει αλληλεπίδραση μεταξύ των μαγνητικών ροπών και των ηλεκτρονικών spin στα s-τροχιακά. Χαρακτηριστικό, ωστόσο, των πολλαπλών κορυφών είναι ότι ισαπέχουν μεταξύ τους κατά μία σταθερή απόσταση, η οποία ονομάζεται σταθερά σύζευξης. Η σταθερά σύζευξης συμβολίζεται με J και μετρείται σε Hz, καθώς είναι ανεξάρτητη από την ένταση του εφαρμοζόμενου εξωτερικού μαγνητικού πεδίου B_0 . (Μαυρομούστακος, και συν., 2018)

Έστω ένας πυρήνας A, ο οποίος γειτνιάζει με έναν πυρήνα X. Το δευτερεύων μαγνητικό πεδίο στον πυρήνα A θα έχει μία από τις δυνατές τιμές ($B_0 + \gamma$, $B_0 - \gamma$), που εξαρτώνται από το κατά πόσο ο προσανατολισμός του spin της στροφορμής του γειτονικού πυρήνα X είναι παράλληλος ή αντιπαράλληλος ως προς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο (α , $I=1/2$ ή β , $I= -1/2$). Έτσι, προκύπτουν δύο φασματικές γραμμές για τον πυρήνα A και με ανάλογο τρόπο επηρεάζεται και ο πυρήνας X.

Γενικά η σταθερά σύζευξης συμβολίζεται ως $^nJ_{AX}$, όπου n είναι ο αριθμός των δεσμών, οι οποίοι παρεμβάλλονται μεταξύ των συζευγμένων πυρήνων και A, X οι πυρήνες, που μελετώνται. Η σύζευξη spin – spin ονομάζεται ομοπυρηνική όταν η σύζευξη γίνεται μεταξύ όμοιων πυρήνων και ετεροπυρηνική, όταν η σύζευξη γίνεται μεταξύ ανόμοιων πυρήνων.

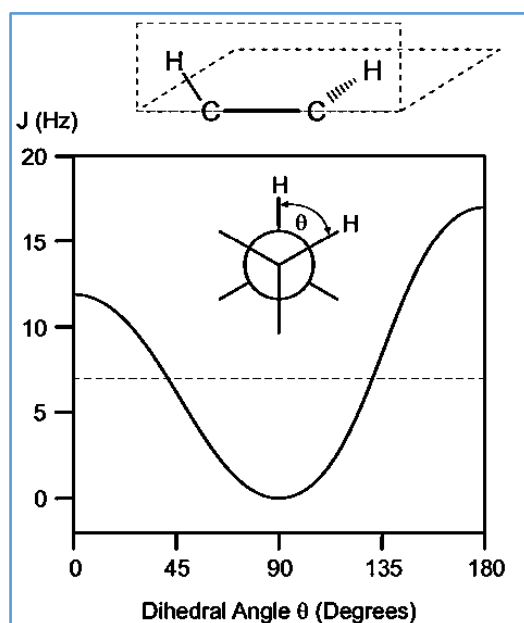
Σχάση κορυφών μπορεί να παρατηρηθεί όταν συντελείται σύζευξη πυρήνων σε απόσταση ενός χημικού δεσμού, δύο, τριών χημικών δεσμών, ακόμη και τεσσάρων ή περισσότερων δεσμών. Όσο περισσότεροι δεσμοί παρεμβάλλονται μεταξύ των δύο πυρήνων, τόσο μικραίνει η ενέργεια αλληλεπίδρασης και συνεπώς ελαττώνεται η σταθερά σύζευξης.

Η σύζευξη δύο πυρήνων, που βρίσκονται σε απόσταση δύο δεσμών ονομάζεται δίδυμη ή ζευγαρωτή σύζευξη, ενώ η σύζευξη δύο πυρήνων, που βρίσκονται σε απόσταση τριών δεσμών ονομάζεται γειτονική σύζευξη. Η αποτελεσματικότητα της γειτονικής σύζευξης και επομένως η τιμή της σταθεράς σύζευξης εξαρτάται από τη

δίδεργη γωνία, που σχηματίζουν οι τρεις δεσμοί. Η εξάρτηση αυτή περιγράφεται από τις θεωρητικές εξισώσεις Karplus (Εξισώσεις 2.22, 2.23), οι οποίες εφαρμόζονται στη διευκρίνιση της διαμόρφωσης κυκλικών συστημάτων (Εικόνα 2.15).

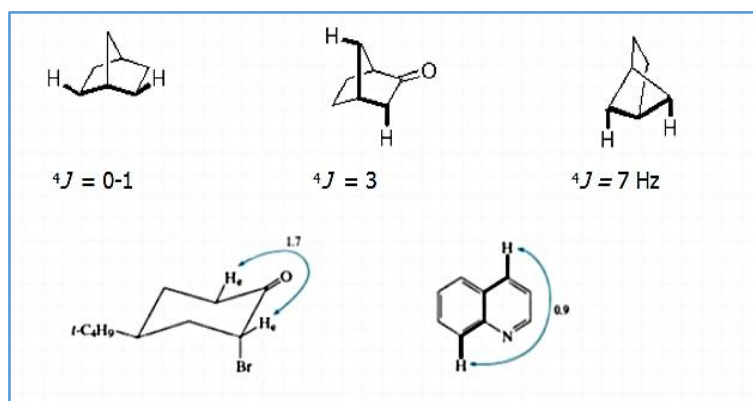
$$^3J = 8.5 \cdot \cos^2 \theta - 0.28 \text{ (Hz)} \quad 0 \leq \theta \leq 90^\circ \quad (\text{Εξίσωση 2.22})$$

$$^3J = 9.5 \cdot \cos^2 \theta - 0.28 \text{ (Hz)} \quad 90^\circ \leq \theta \leq 180^\circ \quad (\text{Εξίσωση 2.23})$$



Εικόνα 2.15: Εξάρτηση της 3J από τη δίδεργη γωνία θ (Εξίσωση Karplus) (Chemistry, n.d.)

Οποιαδήποτε άλλη σύζευξη ονομάζεται σύζευξη μακρινής εμβέλειας. Από τις συζεύξεις μακρινής εμβέλειας παρουσιάζουν ενδιαφέρον η αλλυλική και η ζιγκ – ζαγκ σύζευξη, που λαμβάνουν χώρα όταν δύο πυρήνες βρίσκονται σε απόσταση τεσσάρων δεσμών. Η ζιγκ – ζαγκ σύζευξη απαιτεί οι τέσσερις δεσμοί να βρίσκονται σε διαμόρφωση W, καθώς αυτή η διάταξη των δεσμών διευκολύνει την επικάλυψη των ατομικών τροχιακών, μέσω των οποίων διαδίδεται η πληροφορία του προσανατολισμού των μαγνητικών ροπών των πυρήνων (Εικόνα 2.16).



Εικόνα 2.16: Παραδείγματα μορίων με διαμόρφωση W. (Chemistry, n.d.)

Κεφάλαιο 3: ΜΕΘΟΔΟΣ - ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

3.1 Εισαγωγή – Στόχος Έρευνας

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται η μέθοδος διεξαγωγής της παρούσας έρευνας. Κατ' αρχήν περιγράφεται το δείγμα, το χρονοδιάγραμμα της έρευνας, τα ερευνητικά ερωτήματα που τέθηκαν, η διδακτική παρέμβαση του διδάσκοντα κ. Γεροθανάση, σε προπτυχιακούς φοιτητές. Επιπλέον, περιγράφεται η αναλογία που χρησιμοποιήθηκε ως μέσο αποδοτικότερης κατανόησης των εννοιών της φασματοσκοπίας, καθώς και τα ευρήματα της έρευνας.

Κύριος προβληματισμός για την έναρξη της έρευνας ήταν η δυσκολία των τεταρτοετών φοιτητών, στην αντιμετώπιση βασικών εννοιών φασματοσκοπίας. Έτσι, λήφθηκε η απόφαση να ερευνήσουμε σε τι ποσοστό οι τελειόφοιτοι φοιτητές του τμήματος Χημείας, ανταποκρίνονται σε ερωτήσεις που σχετίζονται με έννοιες φασματοσκοπίας και πως θα μπορούσαμε να εξελίξουμε τις γνώσεις τους χρησιμοποιώντας ως διδακτικό εργαλείο την αναλογία.

Για την επίτευξη του παραπάνω στόχου, καταρτίσαμε ένα ερωτηματολόγιο. Το ερωτηματολόγιο αυτό περιείχε, εκτός από τις ερωτήσεις που αφορούσαν αποκλειστικά τους στόχους της μελέτης και ερωτήσεις που λαμβάνουν υπόψη και πιθανούς παράγοντες σύγχυσης, με σκοπό τα αποτελέσματα να είναι αξιόπιστα και να μας βοηθήσουν να εξάγουμε συμπεράσματα, που να ανταποκρίνονται στην πραγματικότητα.

Όλα τα αποτελέσματα και η διαδικασία της διδακτικής παρέμβασης αναφέρονται αναλυτικά στο δημοσιευμένο άρθρο μας (Stambouli, Pegka, Gerothanassis, & Tsarparlis, 2023). Παρακάτω αναλύεται διεξοδικά η διαδικασία που ακολουθήσαμε και τα αποτελέσματα που προέκυψαν. Τέλος, χρησιμοποιήσαμε ως διδακτικό εργαλείο, μία αναλογία για την καλύτερη κατανόηση της αναλυτικής/ διακριτικής ικανότητας στη Φασματοσκοπία NMR.

3.2 Το δείγμα της Έρευνας

Το δείγμα για τη διαγνωστική μελέτη αποτελούνταν από 137 τεταρτοετείς, προπτυχιακούς φοιτητές χημείας, εκ των οποίων 84 ήταν γυναίκες και 53 άνδρες.

Τα ερωτηματολόγια δόθηκαν κατά τη διάρκεια της παρακολούθησης του μαθήματος «Φασματοσκοπία, Φασματομετρία και Εφαρμογές», που διδάχθηκε και από τον επιβλέπων καθηγητή αυτής της εργασίας, Ιωάννη Γεροθανάση. Και οι 137 φοιτητές είχαν παρακολουθήσει προηγουμένως το υποχρεωτικό πρακτικό

μάθημα «Εργαστήριο Οργανικής Χημείας II» του 6ου εξαμήνου, με 56 (60,2% του συνολικού δείγματος) εκ των οποίων να έχουν επιτύχει το μάθημα αυτό).

Σύμφωνα με το πρόγραμμα σπουδών του τμήματος, οι φοιτητές στους οποίους δόθηκε, το ερευνητικό ερωτηματολόγιο, είχαν παρακολουθήσει επίσης τα θεωρητικά μαθήματα: Οργανική Χημεία III, το οποίο πραγματεύεται δύο διαφορετικά αντικείμενα. Στο 1ο τμήμα του μαθήματος διδάχθηκαν οι δομές, τα χαρακτηριστικά, οι ιδιότητες και οι αντιδράσεις των βιομορίων. (υδατάνθρακες, αμινοξέα, πρωτεΐνες και νουκλεϊνικά οξέα), ενώ στο 2ο τμήμα του μαθήματος, αυτό που μας ενδιαφέρει στην παρούσα έρευνα, πραγματοποιήθηκε θεωρητική ενασχόληση με το αντικείμενο της φασματοσκοπίας. Επίσης, οι φοιτητές κατά τη διάρκεια του μαθήματος διδάχθηκαν τρόπους προσδιορισμού της δομής οργανικών μορίων με τη χρήση φασμάτων UV, IR, NMR και MS.

Οι φοιτητές στην αρχή της διαδικασίας ενημερώθηκαν ότι οι απαντήσεις του ερωτηματολογίου θα χρησιμοποιηθούν στατιστικά για τη διεξαγωγή συμπερασμάτων. Επιπλέον, τους φοιτητές έγινε γνωστό ότι τα ερωτηματολόγια συμπληρώνονται ανώνυμα και ότι δεν είναι υποχρεωτική η συμπλήρωσή τους. Για το ακαδημαϊκό έτος 2017-2018 η εισήγηση για τη συμπλήρωση των ερωτηματολογίων έγινε αρχικά από το διδάσκων και έπειτα από τη μεταπτυχιακή φοιτήτρια, ενώ για το ακαδημαϊκό έτος 2018 – 2019 η εισήγηση πραγματοποιήθηκε από τρεις διδάσκοντες, οι οποίοι προέτρεψαν τους φοιτητές να δώσουν έμφαση στο ερωτηματολόγιο.

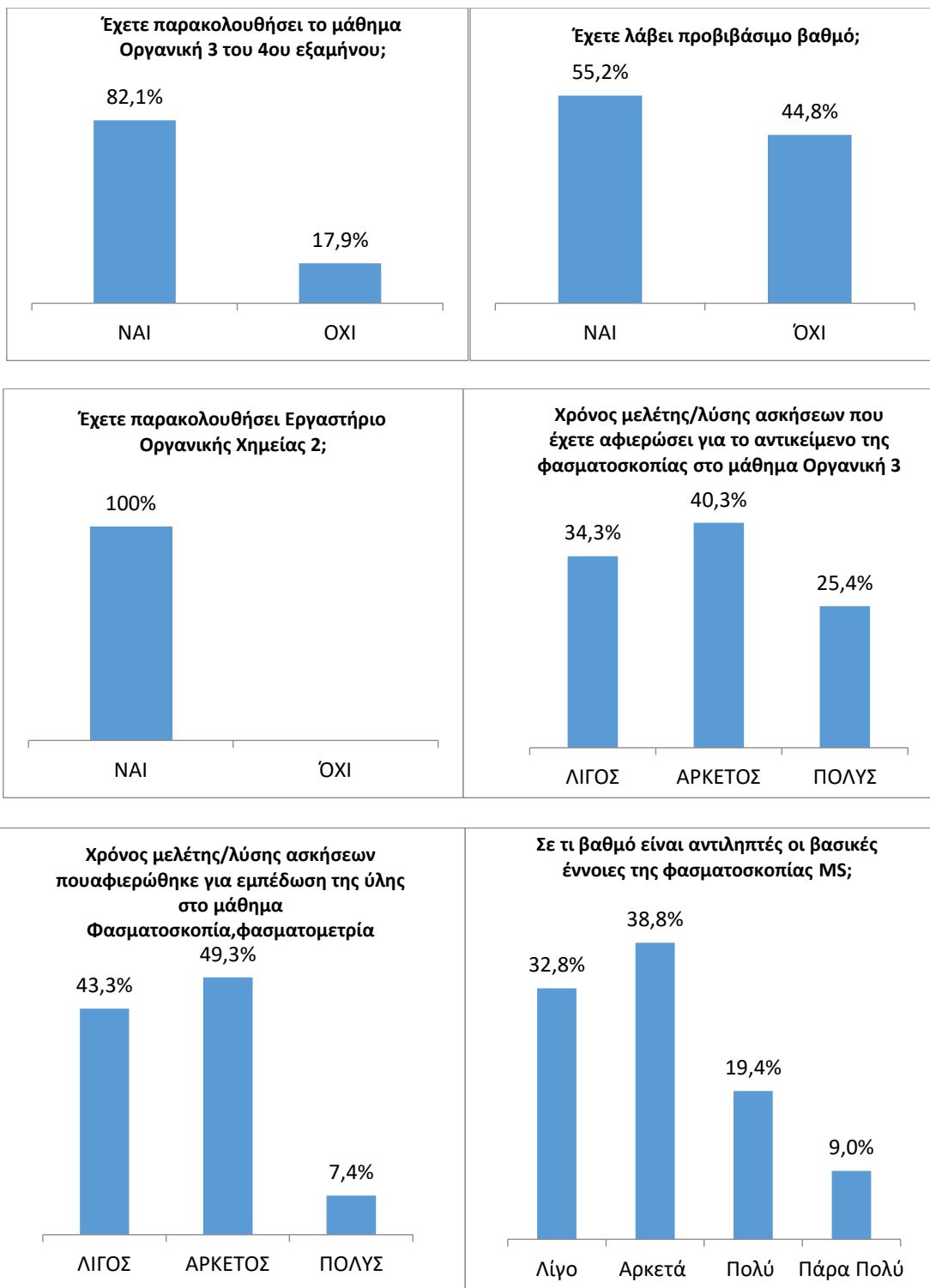
Η συμπλήρωση του ερωτηματολογίου έγινε ατομικά και η διαδικασία επαναλήφθηκε με το ίδιο ερωτηματολόγιο τόσο στον προ- όσο και στον μετα- έλεγχο. Συγκεκριμένα, η πρώτη συμπλήρωση διεξήχθη δύο εβδομάδες πριν την έναρξη της παρέμβασης και η δεύτερη μία εβδομάδα μετά την χρήση του διδακτικού εργαλείου, αναλογίας.

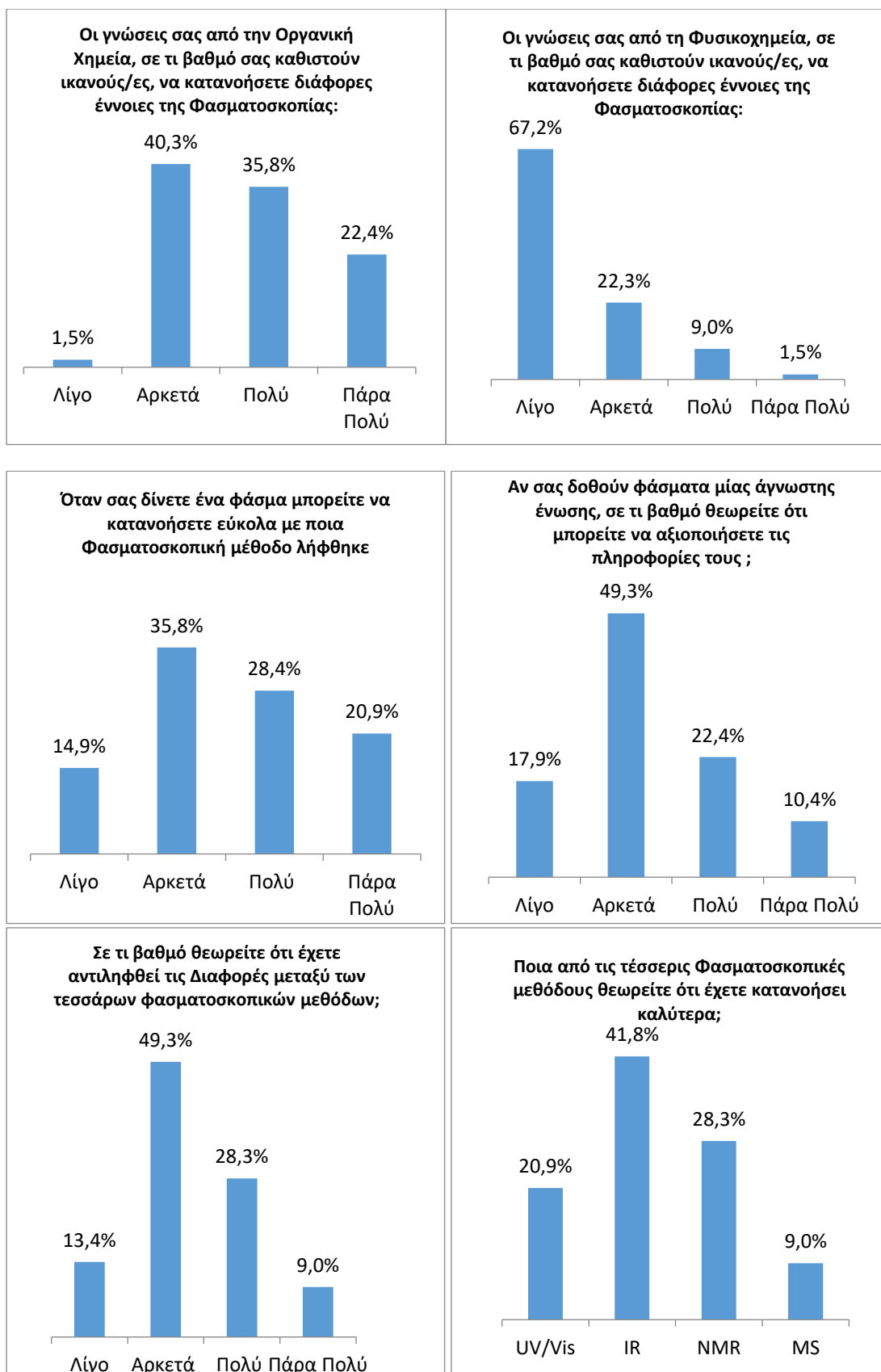
Σε επόμενο στάδιο, προτείνεται διδακτική παρέμβαση για τις βασικές έννοιες του κυματάριθμου, της ολοκλήρωσης, της μονάδας ppm και της διακριτικής ικανότητας στη φασματοσκοπία.

3.3 Κωδικοποίηση και Ανάλυση των δεδομένων

A. Πρώτο μέρος Ερωτηματολογίου

Το 1^ο μέρος του ερωτηματολογίου, περιλαμβάνει ερωτήσεις κλειστού και ανοικτού τύπου από τις οποίες θέλαμε να λάβουμε περισσότερες πληροφορίες για τους φοιτητές-δείγμα. Ορισμένες από τις ερωτήσεις και τα δεδομένα που λάβαμε και αναλύσαμε φαίνονται στα παρακάτω ραβδογράμματα.





Σύμφωνα με τις απαντήσεις που λάβαμε: στην ερώτηση που αφορούσε το βαθμό στον οποίο οι μαθητές θεώρησαν ότι τα προηγούμενα τους βασικά μαθήματα

(ανόργανη χημεία, οργανική χημεία, φυσικόχημεία και «φασματοσκοπία, φασματομετρία και εφαρμογές») τους είχε δώσει τη δυνατότητα να κατανοήσουν τις διάφορες έννοιες της φασματοσκοπίας. Η οργανική χημεία βαθμολογήθηκε ως το βοηθητικότερο με το καλύτερο ποσοστό (71,0%), ακολουθεί η φασματοσκοπία (67,5%), ενώ η ανόργανη και η φυσικοχημεία βαθμολογήθηκε πολύ χαμηλότερα (βαθμοί 40,0 και 37,0%, αντίστοιχα). Ίσως αυτό το αποτέλεσμα να προέκυψε καθώς το δείγμα των φοιτητών μας είχε εργαστεί στο εργαστήριο Οργανικής χημείας και είχε εξασκηθεί με τις περισσότερες από τις φασματοσκοπικές μεθόδους. Σε αντίθεση με τα μαθήματα της Φυσικοχημείας και της Ανόργανης, που δεν πραγματοποιήθηκαν σε βάθος τις έννοιες αυτές.

Στις παραπάνω ερωτήσεις, με τις οποίες προσπαθήσαμε να κατανοήσουμε το υπόβαθρο των φοιτητών - δείγμα της ερευνάς μας, δόθηκε η δυνατότητα αιτιολόγησης της απάντησής τους, με κείμενο (ανοικτού τύπου). Μερικά από τα σχόλια που λάβαμε από τους φοιτητές ήταν:

Σχόλιο 1: Στην οργανική ασχοληθήκαμε τόσο σε εργαστηριακό, όσο και σε θεωρητικό επίπεδο και με τις 4 φασματοσκοπίες.

Σχόλιο 2: Από την οργανική 1 και 2 έχουμε κατανοήσει τους δεσμούς που σχηματίζονται μεταξύ των ατόμων και των μορίων, οπότε μας δίνει μια βάση ώστε να μπορούμε να αντιληφθούμε τα φάσματα.

Σχόλιο 3: Σημαντικό είναι ότι είδαμε και δουλέψαμε στο εργαστήριο οργανικής πολλά IR και NMR φάσματα.

Σχόλιο 4: Δεν έχω ακούσει ότι η φυσικοχημεία συνδέεται με έννοιες της φασματοσκοπίας. Δεν έχω δει κανένα φάσμα στη φυσικοχημεία.

Σχόλιο 5: Μόνο κρυσταλλογραφία είδαμε στη φυσικοχημεία 3 αλλά και πάλι δεν είμαι σίγουρος αν τοποθετείται στις φασματοσκοπικές μεθόδους.

Σχόλιο 6: Θεωρώ πως βοηθάει όσον αφορά να αντιληφθούμε τις ενέργειες που απαιτούνται για να δημιουργηθούν και να διασπαστούν ενδομοριακές και διαμοριακές δυνάμεις.

Σχόλιο 7: Στην Φασματοσκοπία, Φασματομετρία και Εφαρμογές, θα μπορούσε να έχει γίνει καλύτερο μάθημα από τους διδάσκοντες. Σε μία ερώτηση για παράδειγμα που έκανα σε έναν από τους διδάσκοντες δεν ήξερε να μου απαντήσει.

Σχόλιο 8: Δεν έχει δοθεί μεγάλη έμφαση λόγω χρόνου σε κάθε φασματοσκοπία.

Σχόλιο 9: Αναλύθηκαν αρκετά είδη φασματοσκοπίας, όποτε μπορώ να πω ότι έχουμε μία ιδέα.

Τέλος, παρακάτω παρατίθενται, οι πίνακες στατιστικών αποτελεσμάτων που λάβαμε σύμφωνα με τις απαντήσεις των φοιτητών: Οι πίνακες συμπεριλαμβάνονται και στο δημοσιευμένο άρθρο, «Undergraduate Chemistry Students’ Perceived Abilities and Declarative Knowledge on Some Basic Aspects and Concepts of Spectroscopy» στο διεθνές περιοδικό Journal of Chemical Education.

Πίνακας 3.1: Αποτελέσματα των απαντήσεων των μαθητών σε ερωτήσεις σχετικά με το βαθμό στον οποίο οι βασικές έννοιες καθεμιάς από τις τέσσερις φασματοσκοπικές μεθόδους (UV, IR, NMR, MS) είχαν γίνει κατανοητές από αυτούς.

<i>Spectroscopic method</i>	<i>Extent of students’ understanding of basic concepts</i>				Total mark (max = 548)*	χ^2 statistic**
	<i>A little</i>	<i>Enough</i>	<i>Much</i>	<i>Very much</i>		
UV	19	60	42	16	329 (60.03%)	
			Much + Very much: 58			45.85
IR	4	36	62	35	402 (73.36%)	
			Much + Very much: 97			97.94
NMR	14	41	61	21	363 (66.20%)	
			Much + Very much: 82			51.34
MS	54	50	29	4	257 (46.90%)	
			Much + Very much: 33			5.45

* The total mark was calculated by assigning 1, 2, 3, and 4 points respectively to each of four choices (1 for “little” up to 4 for “very much”).

** The χ^2 statistic was calculated by grouping together the “much” and “very much” answers (2 degrees of freedom). (Stambouli, Pegka, Gerothanassis, & Tsapalis, 2023)

Πίνακας 3.2: Αποτελέσματα των απαντήσεων των μαθητών σε ερωτήσεις σχετικά με ορισμένες γενικές πτυχές της φασματοσκοπίας.

<i>Question</i>	<i>A little</i>	<i>Enough</i>	<i>Much</i>	<i>Very much</i>	Total mark (max = 548)*	χ^2 statistic**
You are given a spectrum. To what extent could you identify the spectroscopic method used to obtain it?	15	53	55	14	342 (62.24%)	
			Much + Very much: 69			33.69
To what extent do you assume that you have understood the differences between the four spectroscopic methods (UV, IR, NMR, MS)?	40	62	29	6	275 (50.18%)	

			Much + Very much: 35			9.04
Suppose that you were given the spectra of an unknown to you compound, to what extent do you assume that you could exploit the given information?	21	76	28	12	305 (55.66%)	
			Much + Very much: 40			34.17

* The total mark was calculated by assigning 1, 2, 3, and 4 points respectively to each of four choices (1 for “little” up to 4 for “very much”).

** The χ^2 statistic was calculated by grouping together the “much” and “very much” answers (2 degrees of freedom). (Stambouli, Pegka, Gerothanassis, & Tsaparlis, 2023)

Πίνακας 3.3: Αποτελέσματα φοιτητών, απαντώντας σε τι βαθμό θεωρούν ότι τα μαθήματα ‘Ανόργανη Χημεία, Οργανική Χημεία, Φυσικοχημεία και Φασματοσκοπία, Φασματομετρία και Εφαρμογές’ τους καθιστούν ικανούς να κατανοήσουν διάφορες έννοιες της Φασματοσκοπίας. (Stambouli, Pegka, Gerothanassis, & Tsaparlis, 2023)

<i>Courses</i>	<i>Extent of students’</i>				Total mark (max = 548)*	χ^2 statistic**
	<i>A little</i>	<i>Enough</i>	<i>Much</i>	<i>Very much</i>		
Inorganic Chemistry	79	41	12	5	217 (39.60%)	
			Much + Very much: 17			42.20
Organic Chemistry	17	25	58	37	389 (70.99%)	
			Much + Very much: 95			80.64
Physical Chemistry	83	47	4	3	201 (36.68%)	
			Much + Very much: 7			63.29
Spectroscopy, Spectrometry and Applications	22	32	48	35	370 (67.52%)	
			Much + Very much: 83			46.87

B. Δεύτερο μέρος Ερωτηματολογίου

Στο 2^ο μέρος του ερωτηματολογίου, οι ερωτήσεις επικεντρώνονταν στο να αντιληφθούμε αν οι βασικές έννοιες φασματοσκοπίας έχουν κατανοηθεί από τους φοιτητές. Συγκεκριμένα σε αυτή τη μελέτη, το ερωτηματολόγιο επικεντρώθηκε

αφενός σε γενικές πτυχές της φασματοσκοπίας και αφετέρου σε τρεις συγκεκριμένους τύπους φασματοσκοπίας, δηλαδή UV, IR και NMR.

Οι απαντήσεις στις ερωτήσεις του ερωτηματολογίου κωδικοποιήθηκαν με βάση την ορθότητα και την πληρότητά τους, καθώς και με βάση την παρουσία ή όχι εναλλακτικών αντιλήψεων σε αυτές. Στις ερωτήσεις κλειστού τύπου (Σωστού/Λάθους, ή πολλαπλής επιλογής) η επιστημονικά αποδεκτή απάντηση έπαιρνε 1 μονάδα ενώ η μη αποδεκτή 0 μονάδες. Στις ερωτήσεις ανοικτού τύπου κάθε αποδεκτή απάντηση βαθμολογούνταν με 1 μονάδα και κάθε απάντηση με απουσία νοηματοδότησης με 0 μονάδες.

Η διαγνωστική μας έρευνα έδειξε ότι οι μαθητές εμφανίζουν αρκετές δυσκολίες στην κατανόηση των βασικών εννοιών της φασματοσκοπίας. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι για τις τέσσερις φασματοσκοπίες: η φασματομετρία μάζας (MS) ήταν η μακράν λιγότερο κατανοητή, το IR ήταν αυτό που είχε κατανοηθεί περισσότερο, ενώ η UV και το NMR βρισκόταν σε μία ενδιάμεση κατάσταση. Εκθέτοντας τους μαθητές στη φασματοσκοπία τόσο σε θεωρητικό επίπεδο όσο και σε επίπεδο διαλέξεων και στο εργαστήριο (όπως συνέβη με τους μαθητές μας για την IR φασματοσκοπία) είναι πιθανό οι μαθητές να εξοικειώθηκαν περισσότερο. Στατιστική ανάλυση μέσω της στατιστικής χ^2 επιβεβαίωσε το γεγονός ότι η φασματοσκοπία IR ήταν η καλύτερα κατανοητή, ενώ η φασματομετρία MS ήταν λιγότερο κατανοητή.

Πίνακας 3.4: Αποτελέσματα απαντήσεων μαθητών ($n = 137$) σε ερωτήσεις σχετικά με τις πραγματικές γνώσεις τους σχετικά με βασικές έννοιες και χαρακτηριστικά της φασματοσκοπίας

Question	C	W	NA	χ^2 ^b
What do each of the coordinate axes represent in the four spectroscopic methods? (DK/BL: <i>Reproduction of knowledge/information</i>)	17	49	71	77.44 ($p < .0001$)
2. ^a i. In which spectroscopic methods do we observe or do we not observe broadened spectral lines (DK/BL: <i>Similarities and differences</i>)	70	50	17	0.066 ($p = .798$) (N.S.)
ii. For what reason? (DK/HL: <i>Original explanation</i>)	0	8	129	137.00 ($p < .0001$)
3. ^a i. In which spectroscopic method is wavenumber (cm^{-1}) used? (DK/BL: <i>Reproduction of knowledge/information</i>)	42	10	85	20.50 ($p < .0001$)
ii. What is the physical meaning of wavenumber? (DL/HL: <i>Drawing of conclusions</i>)	0	31	106	($p < .0001$)
iii. What is the advantage of this unit as compared with frequency? (DK/HL: <i>Original explanation</i>)	1	13	123	133.03 ($p < .0001$)
4. ^a i. In which spectroscopic method is <i>part per million</i> (ppm) used? (DK/BL: <i>Reproduction of knowledge/information</i>)	34	4	99	30.75 ($p < .0001$)
ii. What is the physical meaning of ppm? (DL/HL: <i>Drawing of conclusions</i>)	0	18	119	137.00 ($p < .0001$)
iii. What is the advantage of this unit as compared with frequency? (DK/HL: <i>Original explanation</i>)	4	1	132	121.47 ($p < .0001$)
5. ^a i. In which spectroscopic method is <i>parent ion</i> used? (DK/BL: <i>Reproduction of knowledge/information</i>)	27	9	101	50.28 ($p < .0001$)
ii. What is the physical meaning of parent ion? (DK/BL: <i>Reproduction of knowledge/information</i>)	10	7	110	99.92 ($p < .0001$)
6. ^a i. In which spectroscopic method can we perform <i>integration</i> (calculation of the area under spectral lines)? (DK/HL: <i>Drawing of conclusions</i>)	8	118	11	106.87 ($p < .0001$)
ii. Explain the answer (DK/HL: <i>Original explanation</i>)	0	0	137	137.00 ($p < .0001$)
7. ^a i. In which spectroscopic method is a broadening of spectral lines observed when a chemical equilibrium is established? (DK/HL: <i>Drawing of conclusions</i>)	5	67	65	117.73 ($p < .0001$)
ii. What happens in this case? (DK/HL: <i>Justification of opinion</i>)	0	0	137	137.00 ($p < .0001$)
8. What is the meaning of <i>resolution</i> in spectroscopy? (DK/BL: <i>Reproduction of knowledge/information</i>)	24	11	102	57.82 ($p < .0001$)
9. Which of the four spectroscopic methods (UV, IR, NMR, MS) is characterized by a resolving power (<i>high resolution</i>)? (DK/HL: <i>Drawing of conclusions</i>)	34	66	37	34.75 ($p < .0001$)

^aFor questions 2, 3, 4, 5, 6, and 7, the additional justification of opinion questions were statistically evaluated individually. ^bThe calculation of the χ^2 statistic was based on 1 degree of freedom, by summing together wrong and no answers. ^cC = Correct answers; W = Wrong answers; NA = No answer. DK/BL: Declarative Knowledge, Basic Level; DK/HL: Declarative Knowledge, Higher Level.

Οι μαθητές δήλωσαν σχετικά σε ικανοποιητικό επίπεδο (62,2%) ότι μπορούν να αντιληφθούν και να αναγνωρίζουν τη φασματοσκοπική μέθοδο που χρησιμοποιείται. Οι δηλώσεις των μαθητών μάλλον περισσότερο με αυτοπεποίθηση έγιναν, καθώς όταν κλήθηκαν να απαντήσουν σε βασικές ερωτήσεις γνώσεων για την αναγνώριση των φασματοσκοπικών μεθόδων, το ποσοστό επιτυχίας ήταν κατά πολύ μειωμένο, όπως φαίνεται στον παραπάνω πίνακα (Πίνακας 3.4).

Όλες οι απαντήσεις ελέγχθηκαν και ταξινομήθηκαν ως σωστές οι λανθασμένες από τους εκπαιδευτικούς κ. Ι. Γεροθανάση και τον κ. Γ. Τσαπαρλή, καθηγητές με τεράστια εμπειρία στο χώρο της εκπαίδευσης και του αντικειμένου της φασματοσκοπίας αντίστοιχα. Παρακάτω παρατίθενται μερικά παραδείγματα σωστών και λανθασμένων απαντήσεων που λάβαμε υπόψη, για να εξάγουμε τα στατιστικά αποτελέσματα του Πίνακα 3.4.

ΕΡΩΤΗΣΗ 1: Τι αντιπροσωπεύει ο οριζόντιος και τι ο κάθετος άξονας των φασμάτων στις τέσσερις Φασματοσκοπικές μεθόδους;

(Οι απαντήσεις των φοιτητών οι οποίες έλαβαν τη μέγιστη βαθμολογία και θεωρήθηκαν ως σωστές ήταν αυτές που είχαν σωστή απάντηση και για τις τέσσερις φασματοσκοπικές μεθόδους. Δεν λήφθηκαν ως σωστές οι απαντήσεις οι οποίες παρείχαν σωστή απάντηση μόνο για μία από τις τέσσερις φασματοσκοπικές μεθόδους.)

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΣΩΣΤΕΣ

- UV: Κάθετος Άξονας: A, Οριζόντιος Άξονας: nm ή Κάθετος Άξονας: A, Οριζόντιος Άξονας: λ ή Κάθετος Άξονας: Απορρόφηση, Οριζόντιος Άξονας: Μήκος κύματος
- IR: Κάθετος Άξονας: %T, Οριζόντιος Άξονας: cm^{-1} ή Κάθετος Άξονας: % Διαπερατότητα, Οριζόντιος Άξονας: Κυματάριθος ή Κάθετος Άξονας: A, Οριζόντιος Άξονας: Κυματάριθος.
- NMR: Κάθετος Άξονας: Ένταση, Οριζόντιος Άξονας: ppm ή Κάθετος Άξονας: Ένταση, Οριζόντιος Άξονας: χημική μετατόπιση ή Κάθετος Άξονας: Ένταση, Οριζόντιος Άξονας: δ.
- MS: Κάθετος Άξονας: Ένταση, Οριζόντιος Άξονας: m/z ή Κάθετος Άξονας: Αφθονία ιόντων, Οριζόντιος Άξονας: $\frac{\text{μάζα}}{\text{φορτίο ιόντων}}$

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΛΑΝΘΑΣΜΕΝΕΣ

- IR Κάθετος Άξονας: A, Οριζόντιος Άξονας: ppm
- MS Κάθετος Άξονας: A, Οριζόντιος Άξονας: δ

ΕΡΩΤΗΣΗ 2: Σε ποιες φασματοσκοπικές μεθόδους παρατηρούμε διευρυμένες κορυφές και σε ποιες όχι; Γιατί;

(Οι απαντήσεις των φοιτητών οι οποίες έλαβαν τη μέγιστη βαθμολογία και θεωρήθηκαν ως σωστές ήταν αυτές που είχαν σωστή απάντηση στην επιλογή των σωστών φασματοσκοπικών μεθόδων που έχουν διευρυμένες κορυφές. Ως μη σωστές απαντήσεις θεωρήθηκαν και οι απαντήσεις που παρείχαν λάθος αιτιολόγηση.)

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΣΩΣΤΕΣ

1. Διευρυμένες κορυφές παρατηρούμε στις φασματοσκοπίες UV και IR. Αν υποθέσουμε ότι σε κάθε περίπτωση το δείγμα είναι καθαρό, χωρίς προσμίξεις. Οι ηλεκτρονικές μεταβάσεις είναι ευρύτερες, καθώς όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια της ηλεκτρονικής μετάβασης τόσο πιο ευρεία θα γίνεται η κορυφή. Στο IR βλέπουμε και στενές και ευρείες κορυφές, οι ευρείες κορυφές σχετίζονται και με τις διαμοριακές δυνάμεις.
2. Όσο αυξάνεται η ενέργεια στις ηλεκτρονικές διεγέρσεις, οι κορυφές στο φάσμα διευρύνονται. Κυρίως αυτό φαίνεται στα φάσματα UV. Στη φασματοσκοπία IR οι μεταβάσεις οφείλονται σε δονήσεις ή περιστροφικές κινήσεις που εκεί οι κορυφές είναι πιο λεπτές. Τα φάσματα UV, IR, NMR έχουν διαφορετικό εύρος στον άξονα χ.

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΛΑΝΘΑΣΜΕΝΕΣ

1. Τα φασματόμετρα UV έχουν μικρότερη ευαισθησία από των IR οπότε εμφανίζουν διευρυμένες κορυφές. Τα φασματόμετρα των IR, NMR, MS είναι πιο ευαίσθητα σε θορύβους.
2. Σχετίζεται με την παλαιότητα του μηχανήματος που χρησιμοποιεί ο κάθε ερευνητής. Όλες οι φασματοσκοπίες εμφανίζουν είτε λεπτές είτε διευρυμένες κορυφές.

ΕΡΩΤΗΣΗ 3: Ποια είναι η φυσική σημασία του κυματάριθμου (cm^{-1}), τι πλεονέκτημα παρουσιάζει έναντι της συχνότητας και σε ποια φασματοσκοπική μέθοδο χρησιμοποιείται;

(Οι απαντήσεις που θεωρήθηκαν ως σωστές ήταν αυτές που απαντήθηκαν σωστά όσον αφορά τη φυσική σημασία του κυματάριθμου και υπήρξε σωστή απάντηση όσον αφορά τη φασματοσκοπική μέθοδο στην οποία χρησιμοποιείται.)

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΣΩΣΤΕΣ

1. Φασματοσκοπία IR. Φυσική σημασία: Ενεργειακό μέγεθος. Είναι η συχνότητα της ακτινοβολίας διαιρούμενη με την ταχύτητα του φωτός που μας δείχνει τον αριθμό των κυμάτων σε σχέση με την απόσταση.

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΛΑΝΘΑΣΜΕΝΕΣ

1. Φασματοσκοπία: UV. Φυσική σημασία: δείχνει την ενέργεια κίνησης των μορίων. Πλεονέκτημα: είναι κατάλληλο για τις κινήσεις των μορίων.

2. Φασματοσκοπία: IR. Φυσική σημασία: είναι το πόσο συχνά πραγματοποιεί κίνηση το μόριο. Πλεονέκτημα: χρησιμοποιείται αντί της ενέργειας.

ΕΡΩΤΗΣΗ 4: Ποια είναι η φυσική σημασία του (ppm), τι πλεονέκτημα παρουσιάζει έναντι της συχνότητας και σε ποια φασματοσκοπική μέθοδο χρησιμοποιείται;

(Οι απαντήσεις που θεωρήθηκαν ως σωστές ήταν αυτές που απαντήθηκαν σωστά όσον αφορά τη φυσική σημασία του ppm και υπήρξε σωστή απάντηση όσον αφορά τη φασματοσκοπική μέθοδο στην οποία χρησιμοποιείται.)

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΣΩΣΤΕΣ

1. Φασματοσκοπία NMR. Φυσική σημασία: Είναι καθαρός αριθμός, δίνει τη χημική μετατόπιση και σημαίνει μέρη στο εκατομμύριο. Πλεονέκτημα: μας βοηθά να εκφράζουμε τις ίδιες χημικές μετατοπίσεις ανεξάρτητα του μηχανήματος που χρησιμοποιείται.

2. Φασματοσκοπία NMR. Φυσική σημασία: Δηλώνει τη χημική μετατόπιση σε μέρη στο εκατομμύριο, δηλαδή μας δείχνει σε σχέση με το TMS (0), σε πόσο χαμηλότερο μαγνητικό πεδίο ανά εκατομμύριο απαιτούν τα άτομα υδρογόνου την παραγωγή συντονισμού. Πλεονέκτημα: δίνει τις ίδιες χημικές μετατοπίσεις ανεξάρτητα με τη συσκευή που χρησιμοποιείται.

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΛΑΝΘΑΣΜΕΝΕΣ

1. Φασματοσκοπία: IR. Φυσική σημασία: δείχνει την ενέργεια. Πλεονέκτημα: δίνει ακέραιους αριθμούς.

2. Φασματοσκοπία: NMR. Φυσική σημασία: πόση ποσότητα διαλυμένης ουσίας βρίσκεται σε ένα εκατομμύριο του διαλύματος. Πλεονέκτημα: χαμηλές τιμές.

ΕΡΩΤΗΣΗ 5: Τι αντιπροσωπεύει η έννοια του Μητρικού ιόντος και σε ποια Φασματοσκοπική μέθοδο εμφανίζεται;

(Οι απαντήσεις που θεωρήθηκαν ως σωστές ήταν αυτές που απαντήθηκαν σωστά όσον αφορά τη φυσική σημασία του $m_{\text{ρη}}$ και υπήρξε σωστή απάντηση όσον αφορά τη φασματοσκοπική μέθοδο στην οποία χρησιμοποιείται.)

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΣΩΣΤΕΣ

1. Φασματομετρία Μαζών. Δίνει τη θραυσματοποιημένη κατιοντική ρίζα ένωσης, η μάζα της οποίας εκφράζει το μοριακό βάρος της ένωσης.
2. Φασματομετρία Μαζών. Ένα μητρικό ιόν μπορεί να είναι μοριακό ιόν ή ηλεκτρικά φορτισμένο θραύσμα μοριακού ιόντος έχει την ίδια μοριακή μάζα με την αντίστοιχη χημική ένωση.

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΛΑΝΘΑΣΜΕΝΕΣ

1. Φασματοσκοπία: MS. Δείχνει την κορυφή με την μεγαλύτερη ένταση, δηλαδή με το μεγαλύτερο ύψος, όπου από εκεί βρίσκουμε τη μοριακή μάζα της ένωσης.
2. Φασματοσκοπία: NMR. (×3) Δείχνει την απορρόφηση των κινήσεων δόνησης.

Μία παρατήρηση που μπορούμε να κάνουμε σε αυτό το σημείο είναι η εξής: Παρατηρήθηκε λοιπόν πολύ μεγάλη σύγχυση στους φοιτητές οι οποίοι έδιναν λάθος απάντηση όσον αφορά τα μεγέθη/έννοιες που χρησιμοποιούνται σε κάθε φασματοσκοπική μέθοδο. Οι φοιτητές οι οποίοι έδιναν λάθος απάντηση στην ερώτηση 3 παρατηρήθηκε ότι και στις επόμενες ερωτήσεις (4,5) έδιναν λάθος απάντηση όσον αφορά τη συσχέτιση των εννοιών φασματοσκοπίας με την αντίστοιχη φασματοσκοπική μέθοδο.

ΕΡΩΤΗΣΗ 8: Τι σημαίνει ο όρος «διακριτική ικανότητα» στη Φασματοσκοπία;

(Οι απαντήσεις που θεωρήθηκαν ως σωστές ήταν αυτές που απαντήθηκαν σωστά χωρίς η απάντηση να είναι παρεμφερής με την ερώτηση. π.χ. Ερώτηση: τι είναι η διακριτική ικανότητα; Απάντηση: η ικανότητα να διακρίνει.)

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΣΩΣΤΕΣ

1. Μεταξύ δύο κορυφών λέμε ότι διακριτική ικανότητα είναι ο διαχωρισμός των δύο κορυφών χωρίς αυτές να επικαλύπτονται. (×10)

2. Η διακριτική ικανότητα στη φασματοσκοπία ορίζει τον διαχωρισμό δύο κοντινών κορυφών που απορροφούν σε κοντινά μήκη κύματος, συνήθως υπολογίζεται από τον τύπο $R = \lambda / \Delta\lambda$. (×4)

ΕΝΔΕΙΚΤΙΚΕΣ ΛΑΝΘΑΣΜΕΝΕΣ

1. Είναι η ικανότητα του οργάνου να διακρίνει πόσες κορυφές υπάρχουν στο φάσμα και να τις υπολογίζει. (×7)
2. Είναι η ικανότητα του οργάνου να διακρίνει τις καθαρές ουσίες και να δίνει φάσματα των οποίων οι κορυφές είναι καθαρές, χωρίς θορύβους.

Έπειτα από τη διεξαγωγή της διαγνωστικής διαδικασίας και την ανάλυση των απαντήσεων των προπτυχιακών φοιτητών, γεννήθηκε η ανάγκη να μελετήσουμε, σε ποιες βασικές αρχές της φασματοσκοπίας εμφανίζονταν οι περισσότερες εναλλακτικές ιδέες και να προταθεί μία διδακτική λύση.

Η ερευνητική ομάδα πρότεινε να πραγματοποιηθεί διδακτική παρέμβαση. Ωστόσο, το δείγμα φοιτητών, που είχαμε, στην πρώτη διαγνωστική έρευνα, οι οποίοι ήταν τελειόφοιτοι φοιτητές 4^{ου} έτους, ήταν πολύ δύσκολο να μπορέσει να συγκεντρωθεί συγχρόνως σε έναν χώρο, ώστε να εφαρμοστεί η διδακτική παρέμβαση και έπειτα να ελεγχθεί αν πραγματοποιήθηκε εννοιολογική αλλαγή. Επομένως, αποφασίστηκε να δοκιμαστεί η διδακτική παρέμβαση, σε μεταπτυχιακούς φοιτητές του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, οι οποίοι είχαν ενταχθεί στον Τομέα Οργανικής και Βιοχημείας. Καθώς, το αρχικό δείγμα μας ήταν διαφορετικό και ο αριθμός των μεταπτυχιακών φοιτητών ήταν πολύ μικρός σε σχέση με τον αρχικό, δεν μπορούν να προκύψουν στατιστικά αποδεκτά αποτελέσματα (δειγματολογικό σφάλμα).

3.4 Διδακτική παρέμβαση σε βασικές έννοιες Φασματοσκοπίας

3.4.1 Κυματάριθμος

Αρχικά δίνεται ο ορισμός του κυματάριθμου, όπως αναφέρεται σε πολλά εγχειρίδια οργανικής χημείας.

$$\bar{\nu} (\text{cm}^{-1}) = \frac{1}{\lambda (\text{cm})} = \frac{1}{\lambda (10,000 \mu\text{m})} \quad (\text{Εξίσωση 3.1})$$

Έπειτα, δίνεται ο τύπος της συχνότητας τάσης στο IR.

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m_r}} \quad (\text{Εξίσωση 3.2})$$

όπου k είναι η σκληρότητα του δεσμού (σταθερότητα) και m_r είναι:

$$m_r = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (\text{Εξίσωση 3.3})$$

Ακολουθεί ο υπολογισμός της m_r του δεσμού C-H, ώστε με το παράδειγμα να γίνει η πρώτη εφαρμογή της έννοιας.

$$m_{C-H} = \frac{\frac{m_C}{N} \frac{m_H}{N}}{\frac{m_C}{N} + \frac{m_H}{N}} = \frac{m_C m_H}{(m_C + m_H)N} \quad (\text{Εξίσωση 3.4})$$

όπου N ο αριθμός Avogadro ($6,02 \cdot 10^{23}$) και λαμβάνοντας υπόψη ότι για τον δεσμό C-H ισχύει: $k = 5 \cdot 10^5$ dynes/cm, συμπεραίνουμε:

$$\nu_{C-H} = 9 \times 10^{13} \text{ Hz or cycles/s} \quad (\text{Εξίσωση 3.5})$$

Για να αποφευχθούν αυτοί οι εξαιρετικά μεγάλοι απόλυτοι αριθμοί συχνότητας (Εξίσωση 3.5), εισάγεται ο όρος κυματάριθος με μονάδες μέτρησης cm^{-1} .

$$\bar{\nu} = \frac{\nu}{c} \quad (\text{Εξίσωση 3.6})$$

όπου ν = συχνότητα τάσης και c = ταχύτητα φωτός (3×10^{10} cm/s).

$$\bar{\nu}_{C-H} = \frac{9 \times 10^{13}}{3 \times 10^{10}} = 3000 \text{ cm}^{-1} \quad (\text{Εξίσωση 3.7})$$

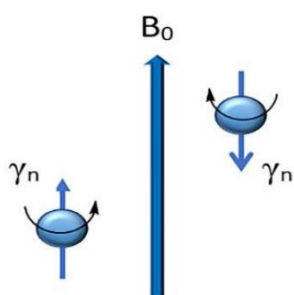
Συνεπώς προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα από την παραπάνω ανάλυση:

- Ο φοιτητής θα μπορέσει να κατανοήσει γιατί χρησιμοποιείται ο κυματάριθος (cm^{-1}) αντί της απόλυτης κλίμακας συχνότητας τάσης (Hz, κύκλοι/δευτερόλεπτο).
- Η μονάδα cm^{-1} μπορεί εύκολα να μετατραπεί σε μονάδες συχνότητας (Hz) χρησιμοποιώντας την (Εξίσωση 3.7). Αυτό θα βοηθήσει τους φοιτητές να κατανοήσουν, για παράδειγμα, γιατί η δόνηση τάσης νΟ–Η των αλκοολών σε αραιά διαλύματα εμφανίζει μια διακριτή έντονη "μονομερή" ζώνη στην περιοχή $3650\text{--}3590 \text{ cm}^{-1}$ και μια σχετικά ευρεία ζώνη λόγω των δεσμών υδρογόνου κάτω από 3500 cm^{-1} . Αυτό μπορεί να εξηγηθεί λαμβάνοντας υπόψη την εξαιρετικά σύντομη χρονική κλίμακα της ταλάντωσης ν (νΟ–Η $\approx 10\text{--}13$ s), η οποία μπορεί να διακρίνει διακριτά είδη που έχουν δεσμό με υδρογόνο. Μια τέτοια διάκριση δεν μπορεί να επιτευχθεί με τη φασματοσκοπία NMR λόγω της πολύ μεγαλύτερης χρονικής κλίμακας.
- Η κατανόηση της κλίμακας του αριθμού κύματος θα αυξήσει την ικανότητα των φοιτητών όχι μόνο να ερμηνεύουν τις IR ζώνες με βάση πίνακες από

κλασικά εγχειρίδια, αλλά και να κατανοούν τη φυσικοχημική σημασία του οριζόντιου άξονα.

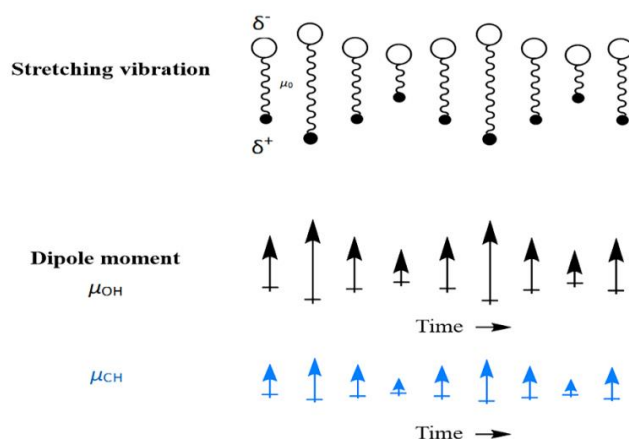
3.4.2 Ολοκλήρωση

Ένας πυρήνας που βρίσκεται εντός μαγνητικού πεδίου B_0 προσανατολίζεται κατάλληλα. Προκύπτει το σήμα NMR από την αναστροφή της πυρηνικής μαγνητικής ροπής (γ_n) όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.1. Η συνθήκη συντονισμού στην φασματοσκοπία NMR οδηγεί στην αναστροφή της πυρηνικής μαγνητικής ροπής, γ_n , η οποία είναι μια πυρηνική ιδιότητα και, επομένως, έχει μια σταθερή τιμή για έναν συγκεκριμένο πυρήνα, π.χ., ^1H . Η ένταση του σήματος, επομένως, είναι ανεξάρτητη από τις ιδιότητες των δεσμών και, κατά συνέπεια, από τις χημικές μετατοπίσεις.



Εικόνα 3.1: Προσανατολισμός πυρήνα όταν εφαρμόζεται εξωτερικό Μαγνητικό Πεδίο B . (Stambouli, Pegka, Gerothanassis, & Tsapalis, 2023)

Το μέγεθος γ_n είναι σταθερό για έναν συγκεκριμένο πυρήνα (π.χ. ^1H) οπότε δεν εξαρτάται από τη συχνότητα. Επομένως, ένα αλκυλικό πρωτόνιο C–H θα εμφανίσει την ίδια ολοκληρωμένη τιμή με αυτή της ομάδας OH. Αντίθετα, η ένταση απορρόφησης στη φασματοσκοπία IR εξαρτάται από το πόσο αποτελεσματικά μπορεί να μεταφερθεί η ενέργεια ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος συχνότητας ν στα άτομα που εμπλέκονται στη δόνηση. Όσο μεγαλύτερη είναι η αλλαγή στη διπολική ροπή κατά τη διάρκεια μιας δόνησης, τόσο υψηλότερη είναι η ένταση απορρόφησης ενός φωτονίου (Εικόνα 3.2). Η αλλαγή στη διπολική ροπή του δονητικού δεσμού OH είναι σημαντικά μεγαλύτερη από αυτήν του δεσμού CH. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα μια σημαντικά μεγαλύτερη ολοκλήρωση της ζώνης OH σε σύγκριση με αυτή της ζώνης CH.



Εικόνα 3.2: Η δόνηση τάσης στο IR έχει ως αποτέλεσμα μια αλλαγή στη διπολική ροπή, μ , της σύνδεσης, έτσι, η αλλαγή στο μ_{OH} είναι σημαντικά μεγαλύτερη από αυτή του μ_{CH} . (Stambouli, Pegka, Gerothanassis, & Tsaparlis, 2023)

3.4.3 Κλίμακα δ - Μονάδα ppm

Η κλίμακα δ , ppm, στα προπτυχιακά εγχειρίδια παρουσιάζεται ως εξής:

$$\delta_i = \frac{\nu_i - \nu_{ref}}{\nu_o} \quad (\text{Εξίσωση 3.8})$$

όπου δ_i είναι η χημική μετατόπιση της συχνότητας ανάκλασης, ν_i η συχνότητα της ένωσης που εξετάζεται, ν_{ref} είναι η ανάκλαση της ένωσης αναφοράς [τετραμεθυλοσιλάνιο, $(CH_3)_4Si$], η οποία, κατά τον ορισμό, είναι μηδέν, και ν_o είναι η συχνότητα του φασματοσκοπίου. Η εξίσωση (3.8), επομένως, απλοποιείται:

$$\delta_i = \frac{\Delta \nu_i}{\nu_o} \quad (\text{Εξίσωση 3.9})$$

Ο διδάσκων, έδωσε παράδειγμα εφαρμογής για τον υπολογισμό και την κατανόηση.

Ας υποθέσουμε ότι το φάσμα 1H NMR καταγράφεται χρησιμοποιώντας ένα όργανο 400 MHz, τότε:

$$\delta_i = \frac{\Delta \nu_i}{400 \times 10^6 \text{ Hz}} \quad (\text{Εξίσωση 3.10})$$

$\Delta \nu_i$ είναι της τάξης των Hz, είναι προφανές ότι το δ_i θα είναι ένας πολύ μικρός αριθμός. Επομένως, και τα δύο μέρη της εξίσωσης (3.10) πολλαπλασιάζονται με $\times 10^6$ ως εξής:

$$\delta_i (\text{ppm}) = \frac{\Delta \nu_i \times 10^6 \text{ Hz}}{400 \times 10^6 \text{ Hz}} = \frac{\Delta \nu_i}{400} \quad (\text{Εξίσωση 3.11})$$

Για μια χημική μετατόπιση 1 ppm, σε σχέση με την αναφορά ένωση, μπορεί να υπολογιστεί ότι $\Delta\nu = 400$ Hz. Για ένα όργανο 900 MHz, 1 ppm αντιστοιχεί σε 900 Hz. Η παραπάνω ανάλυση δεν περιορίζεται μόνο στο ^1H NMR, αλλά μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιονδήποτε πυρήνα. Για μια χημική μετατόπιση 1 ppm, σε σχέση με την αναφορά ένωση, μπορεί να υπολογιστεί ότι $\Delta\nu = 400$ Hz. Για ένα όργανο 900 MHz, 1 ppm αντιστοιχεί σε 900 Hz. Η παραπάνω ανάλυση δεν περιορίζεται μόνο στο ^1H NMR, αλλά μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιονδήποτε πυρήνα.

Επομένως, προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα:

- Η φυσική σημασία του ppm είναι η αναλογία της διαφοράς συχνότητας μιας δεδομένης γραμμής σε σχέση με την αντίστοιχη της ένωσης αναφοράς, διαιρεμένη με τη συχνότητα του φασματοσκοπίου και, επομένως, είναι ανεξάρτητη από το πεδίο. Δεδομένου ότι αυτή η τιμή είναι πολύ μικρή, πολλαπλασιάζεται με μια παράμετρο 10^6 και, έτσι, ο όρος “μέρη ανά εκατομμύριο” δικαιολογείται.
- Η κλίμακα ppm μπορεί πολύ εύκολα να μετατραπεί σε μονάδες συχνότητας (Hz), κάτι που είναι εξαιρετικά σημαντικό για την κατανόηση της φυσικής σημασίας του οριζόντιου άξονα της NMR. Αυτό είναι προαπαιτούμενο για την κατανόηση της έννοιας της κλίμακας χρόνου NMR και, επομένως, των εφαρμογών του NMR στη χημική κινητική και την αναλυτική ανάλυση των διαμορφώσεων.
- Η κατανόηση της κλίμακας ppm θα αυξήσει την ικανότητα των φοιτητών όχι μόνο να ερμηνεύουν τις θέσεις των κορυφών με βάση πίνακες από κλασικά εγχειρίδια, αλλά και να κατανοούν τη φυσική σημασία του οριζόντιου άξονα στην NMR.

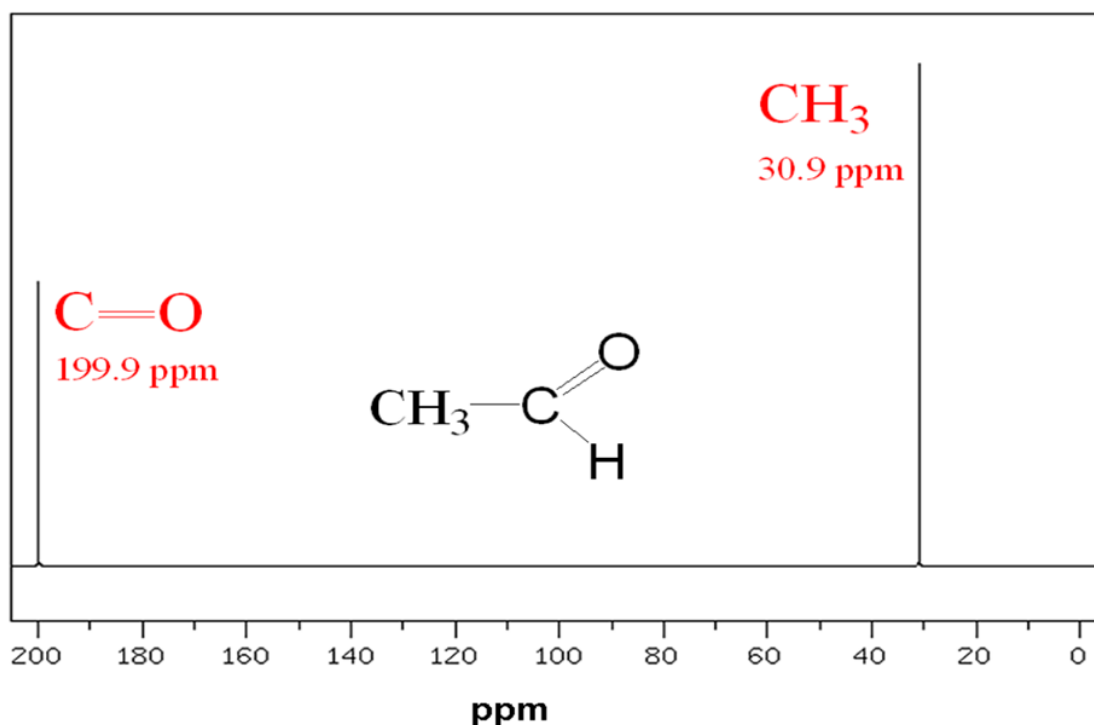
3.4.4 Διακριτική Ικανότητα

Για να υπολογίσουμε και να συγκρίνουμε τη διακριτική ικανότητα των μεθόδων NMR, IR και UV μπορούμε να σκεφτούμε την ένωση: ακεταλδεΰδη. Η ικανότητα ανάλυσης, R , είναι ένα μέτρο της ικανότητας ενός φασματομέτρου να διαχωρίζει δύο κοντινές συχνότητες και ορίζεται από τη σχέση $R = \lambda/\Delta\lambda$, όπου λ είναι ο μέσος όρος των δύο συχνοτήτων και $\Delta\lambda$ είναι η διαφορά μεταξύ των δύο συχνοτήτων. Όσο υψηλότερο το R (ένανς άνευ διάστασης αριθμός), τόσο καλύτερη είναι η ικανότητα ανάλυσης. Οι υπολογισμένες ικανότητες ανάλυσης είναι οι εξής:

- για το φάσμα ^1H NMR (300 MHz), 4560
- για το φάσμα ^{13}C NMR (50.18 MHz), 16960
- για το φάσμα IR διακριτική ικανότητα για C-H(alkyl)/C-H(aldehydes)

- για το φάσμα IR C-H(aldehydes)/C=O, (με μέσο όρο 70 cm^{-1} των πλάτους των ζωνών απορρόφησης).
- για το φάσμα IR C-H(alkyl)/C-H(aldehydes), (με μέσο όρο 70 cm^{-1} των πλάτους των ζωνών απορρόφησης).
- για το φάσμα UV (με το πλάτος της μετάβασης $n \rightarrow \pi^*$ να λαμβάνεται περίπου 40 νανόμετρα).

Φαίνεται ότι η αναλυτική ικανότητα του ^{13}C NMR είναι μεγαλύτερη από αυτή του ^1H NMR. Επιπλέον, η NMR δείχνει μεγαλύτερη διακριτική ικανότητα από ό,τι η IR ή η UV φασματοσκοπία. Ως αποτέλεσμα, με την ενσωμάτωση της φασματοσκοπίας NMR, είναι δυνατόν να διακρίνουμε κάθε άτομο άνθρακα/υδρογόνου ξεχωριστά.



Εικόνα 3.3: Το φάσμα ^{13}C NMR (50.15 MHz, υπό ευρεία αποκοπή 1H) της αιθανάλης δείχνει δύο διακριτές απορροφήσεις: ^{13}CO (199.9 ppm) και $^{13}\text{CH}_3$. (30.9 ppm). Αναδημοσιεύεται με άδεια από την αναφορά #16. Πνευματικά δικαιώματα 2022 Εθνικό Ινστιτούτο Προηγμένης Βιομηχανικής Επιστήμης και Τεχνολογίας. (Brogat.)

Η ικανότητα ανάλυσης, R , δίνεται ως εξής:

$$R = \frac{(199.9 - 30.9)50.18\text{Hz}}{0.5\text{Hz}} = \frac{8480\text{Hz}}{0.5\text{Hz}} = 16,960$$

όπου 0,5 Hz είναι το πλάτος και των δύο απορροφήσεων του ^{13}C .

Κεφάλαιο 4: ΑΝΑΛΟΓΙΑ ΚΑΙ ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ

ΠΑΡΕΜΒΑΣΗ

4.1 Τι είναι η Αναλογία

Στον προφορικό και στο γραπτό λόγο διακρίνουμε δύο κατηγορίες έκφρασης, την κυριολεξία και τους μη κυριολεκτικούς τύπους. Η αναλογία είναι ένας από τους κυρίαρχους τύπους μη κυριολεκτικής έκφρασης (άλλοι τύποι είναι η μεταφορά, η μετωνυμία, η ειρωνεία κ.λπ.) (Χρηστίδου, 2001). Οι αναλογίες αποτελούν αναπόσπαστο κομμάτι της καθημερινής επικοινωνίας και είναι μερικές φορές τόσο πολύ ενσωματωμένες στον καθημερινό μας λόγο που δεν συνειδητοποιούμε την ύπαρξή τους όταν τις χρησιμοποιούμε. Λέμε για παράδειγμα «οι αναλογίες είναι σημαντικά εργαλεία για την οικοδόμηση της γνώσης» και εννοούμε ότι όπως ένα εργαλείο συμβάλλει π.χ. στην οικοδόμηση ενός σπιτιού, έτσι και οι αναλογίες βοηθούν στην κατασκευή γνώσεων. Όμως η αναλογία δεν είναι απλώς σχήμα λόγου.

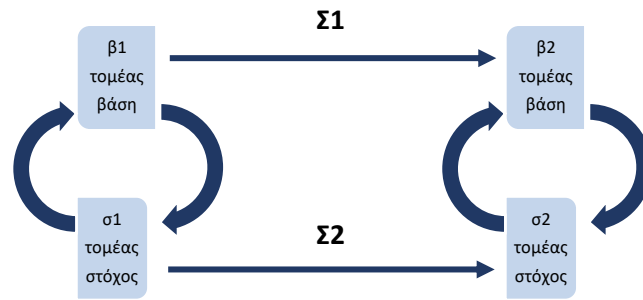
Πληθώρα ερευνών (Harrison, 2001) (Justi, 2006)(Χρηστίδου, 1997, 2001) συγκλίνουν στην άποψη ότι οι αναλογίες έχουν βαθύτερη σχέση με τον τρόπο που εκφραζόμαστε για τον κόσμο γύρω μας, επομένως συνδέονται με το μηχανισμό με τον οποίο κατανοούμε και εξηγούμε τα γεγονότα και τα φαινόμενα.. Ωστόσο, ο όρος «αναλογία» πρέπει να αντιμετωπίζεται με προσοχή κατά την επισκόπηση της βιβλιογραφίας, καθώς ο κάθε συγγραφέας δίνει διαφορετικό νόημα σε αυτή την έννοια και δεν υπάρχει ένας κοινά αποδεκτός ορισμός της. Το περιεχόμενο της έννοιας εξαρτάται επίσης από το είδος της επιστημονικής προσέγγισης, δηλαδή από ποια επιστήμη εξετάζεται η αναλογία.

Η αναλογία μελετάται από τους επιστήμονες εδώ και τριάντα χρόνια, ξεκινώντας από τη γλωσσολογία, τη γνωστική επιστήμη, την ψυχολογία, την επιστημολογία, την τεχνητή νοημοσύνη και τελευταία από τη διδακτική των φυσικών επιστημών, υποστηρίζοντας ότι έχει άμεση σχέση με τον τρόπο που ο άνθρωπος σκέφτεται, μαθαίνει και επικοινωνεί. Ως εργαλείο σκέψης η αναλογία αποτελεί όχι μόνο ένα ρητορικό σχήμα αλλά επιπλέον συμβάλλει στην κατανόηση νέων πληροφοριών,

ιδιαίτερα στην διδασκαλία των Φυσικών Επιστημών (Χρηστίδου, 2001). Η αναλογία εντοπίζει, αναδεικνύει με σαφήνεια και έπειτα επεκτείνει την ομοιότητα ανάμεσα σε ολόκληρους εννοιολογικούς τομείς βγάζοντας νέα συμπεράσματα για τον τομέα - πρόβλημα (O'Donoghue, 1997). Η (Gentner, 1983) χρησιμοποιεί τον όρο αναλογία για κάθε μη κυριολεκτική σύγκριση όμοιων οντοτήτων, η οποία περιλαμβάνει τις μεταφορές, τις παρομοιώσεις και τα μοντέλα. Ο Glynn (1991) αναφέρει ότι η αναλογία είναι η διαδικασία της εύρεσης ομοιοτήτων ανάμεσα σε διαφορετικές έννοιες ή εννοιολογικούς τομείς.

Γενικά, από πολλούς συγγραφείς (Gentner, 1983) (Glynn, Yeany, & Britton, 1991), (Harrison, 2001), (Holyoak, 2012), (Χρηστίδου, 2001), η αναλογία παρουσιάζεται ως η διαδικασία εύρεσης ομοιοτήτων μεταξύ δυο διαφορετικών εννοιολογικών εννοιών: Μιας γνωστής / οικείας έννοιας, που λέγεται βάση (base) ή ανάλογο ή πηγή ή όχημα και μιας άγνωστης / μη οικείας έννοιας, που λέγεται στόχος (target) ή θέμα. Η σύγκριση των κοινών χαρακτηριστικών μεταξύ των δυο εννοιών, η οποία μπορεί να είναι λεκτική ή οπτική, λέγεται αντιστοίχιση (mapping), ενώ καθορίζει την αναλογία που συνδέει τους δυο εννοιολογικούς τομείς, με σκοπό μέσα από τη σε βάθος κατανόηση κάθε διάστασης της βάσης, να οδηγηθούμε στην αναπεριγραφή του στόχου (Κουλαϊδής, Δημόπουλος, Σκλαβενίτη, & Χρηστίδου, 2002)

Στην πιο απλή μορφή της, μια αναλογία περιλαμβάνει τέσσερις κόμβους – έννοιες (τετράπολο) που συνδέονται ανά δύο μεταξύ τους με όμοιες σχέσεις. Οι δύο κόμβοι – έννοιες ανήκουν στον τομέα – βάση και συμβολίζονται με β_1 και β_2 και συνδέονται μεταξύ τους με τη σχέση Σ_1 . Οι άλλοι δύο κόμβοι – έννοιες ανήκουν στον τομέα – στόχο, συμβολίζονται με σ_1 και σ_2 και συνδέονται μεταξύ τους με τη σχέση Σ_2 (Εικόνα 4.1).



Εικόνα 4.1: Το βασικό τετράπολο μιας αναλογίας με σχέση ανάμεσα στις έννοιες του κάθε τομέα.
(Φλουρής, 1984)

Ο ακροατής της αναλογίας εξάγει αναλογικές συσχετίσεις εφαρμόζοντας στον τομέα - στόχο κατηγορήματα (ιδιότητες, χαρακτηριστικά, λειτουργίες) που είναι έγκυρα στον τομέα - βάση, χρησιμοποιώντας τις αντικαταστάσεις των κόμβων που υπαγορεύει η αντιστοίχιση $A: [\Sigma(\beta1, \beta2)] - [\Sigma(\sigma1, \sigma2)]$, όπου $\Sigma(\beta1, \beta2)$ είναι μια σχέση που συνδέει τις έννοιες – κόμβους $\beta1$ και $\beta2$ του τομέα – βάση (Εικόνα 4.1).

Συμπερασματικά, η αναλογική σκέψη αποτελεί έναν από τους πιο σημαντικούς μηχανισμούς κατασκευής νέας γνώσης επειδή – μεταξύ άλλων:

- Είναι γνωστικό εργαλείο της καθημερινής ζωής.
- Αποτελεί τη βάση στην οποία στηρίζεται η επίλυση των περισσότερων προβλημάτων της (Goswami, 2001). Χαρακτηριστικό παράδειγμα χρήσης της αναλογικής σκέψης για την επίλυση προβλημάτων αποτελεί η διαδικασία της μοντελοποίησης ρόλου όπου: σε γενικές γραμμές ο νεώτερος σε μια εργασία μιμείται και παραδειγματίζεται από έναν παλαιό και έμπειρο συνεργάτη (Holyoak & Thagard, 1997).
- Παίζει κεντρικό ρόλο σε πολλές διακριτές γνωστικές διαδικασίες, όπως η επαγωγή, η ανάκληση, η μεταφορική ερμηνεία, η δημιουργικότητα (O'Donogue, 1997).

4.2 Διάκριση Αναλογίας από συγγενικές έννοιες

A. Αναλογία και μεταφορά

Υπάρχει μεγάλη συζήτηση στη διεθνή βιβλιογραφία για τον τρόπο που ορίζονται οι όροι «μεταφορά» και «αναλογία». Οι Aubusson et al. (2006) υποστηρίζουν ότι στη μεταφορά λέμε ότι το A είναι B, ενώ στην αναλογία ότι το A μοιάζει με το B. Επίσης, εξηγούν ότι στην διδακτική των φυσικών επιστημών, η μεταφορά αναφέρεται στον τρόπο διδασκαλίας, ενώ, αντίθετα η αναλογία συνδέεται με την ερμηνεία της επιστημονικής γνώσης.

Παρόλο που οι όροι αναλογία και μεταφορά χρησιμοποιούνται μερικές φορές εναλλακτικά, γενικά η αναλογία εμφανίζεται συχνότερα σε επιστημονικά και τεχνολογικά κείμενα, ενώ η μεταφορά συναντάται κυρίως σε λογοτεχνικά κείμενα (Glynn & Duit, 1995). Σύμφωνα με τον (Duit, 1991), και οι δύο όροι αναφέρονται σε συγκρίσεις μεταξύ δύο πραγμάτων, με έμφαση στις ομοιότητές τους, αλλά διαφέρουν στον τρόπο που το κάνουν. Η αναλογία συγκρίνει ρητά δύο τομείς, υπογραμμίζοντας τα κοινά τους χαρακτηριστικά, ενώ η μεταφορά κάνει μια έμμεση σύγκριση, εστιάζοντας στις ιδιότητες και τις σχέσεις που δεν αντιστοιχούν απόλυτα μεταξύ των δύο τομέων. Πρέπει να είμαστε προσεκτικοί, γιατί αν μια μεταφορά ληφθεί κυριολεκτικά, μπορεί να οδηγήσει σε λανθασμένα συμπεράσματα.

B. Αναλογία και Μοντέλο

Το μοντέλο είναι μια αφηρημένη αναπαράσταση ή προσομοίωση ενός συστήματος, φαινομένου ή διαδικασίας. Τα μοντέλα χρησιμοποιούνται σε διάφορους τομείς (π.χ., φυσικές επιστήμες, κοινωνικές επιστήμες, οικονομία) για να κατανοήσουν, να αναλύσουν ή να προβλέψουν τη συμπεριφορά ενός συστήματος (Gilbert & Boulter, 2000). Το μοντέλο συνήθως αποτελεί μια απλοποίηση της πραγματικότητας αναπαριστώντας επιλεκτικά ορισμένες μόνο όψεις της και διευκολύνοντας έτσι την κατανόηση, την περιγραφή και την επεξεργασία της (Ingham & Gilbert, 1991). Επίσης το μοντέλο επιτρέπει την πρόβλεψη της εξέλιξης ενός συστήματος ή ενός φαινομένου χωρίς να χρειάζεται άμεση παρατήρηση της πραγματικότητας (Σταυρίδου, 1995).

Το μοντέλο, κατά μια άποψη, είναι μια έννοια που περικλείει την αναλογία, καθώς κατά την διαδικασία σχηματισμού ενός μοντέλου γίνεται χρήση μιας αναλογίας, δηλαδή, ένας αναλογικός συλλογισμός, μια διαδικασία σύγκρισης και συσχέτισης όμοιων χαρακτηριστικών. (Coll, France, & Taylor, 2005). Ωστόσο, δεν θα πρέπει να συγχέονται οι δύο έννοιες, καθώς η αναλογία είναι μια απλή σύγκριση που χρησιμοποιείται για να εξηγήσει ή να διευκρινίσει έννοιες μέσω ομοιοτήτων, ενώ το μοντέλο είναι μια πιο σύνθετη και συστηματική αναπαράσταση ενός πραγματικού συστήματος ή φαινομένου, χρησιμοποιούμενη για ανάλυση και πρόβλεψη.

Γ. Αναλογία και Παράδειγμα

Η αναλογία αποτελεί σύγκριση ανάμεσα σε δύο διαφορετικά πράγματα ή καταστάσεις, με σκοπό να αναδειχθούν οι ομοιότητές τους. Χρησιμοποιείται για να διευκολύνει την κατανόηση μιας έννοιας, συγκρίνοντάς την με κάτι πιο γνωστό ή απλό. Μέσω της αναλογίας, οι ιδιότητες ενός αντικειμένου μεταφέρονται σε ένα άλλο. Αντίθετα, το παράδειγμα αναφέρεται σε μια συγκεκριμένη περίπτωση ή εφαρμογή, που χρησιμοποιείται για να υποστηρίξει, να επεξηγήσει ή να διευκρινίσει μια γενική έννοια ή αρχή. Τα παραδείγματα είναι πιο συγκεκριμένα και βασίζονται σε πραγματικές ή υποθετικές καταστάσεις. Ο Glynn (1991) σημειώνει ότι το παράδειγμα είναι μια επιμέρους πτυχή μιας έννοιας και όχι σύγκριση ανάμεσα σε κοινά χαρακτηριστικά δύο διαφορετικών εννοιών. Εν κατακλείδι, η αναλογία στηρίζεται στη σύγκριση, ενώ το παράδειγμα είναι μια συγκεκριμένη απόδειξη ή εφαρμογή μιας γενικής ιδέας.

4.3 Είδη Αναλογιών

Σύμφωνα με τους: (Duit, 1991. Thiele & Treagust, 1995. Treagust, 1993) προτείνεται η ταξινόμηση των διδακτικών αναλογιών με βάση τρία κριτήρια: την έκταση της αντιστοίχισης, την ύπαρξη ή μη οπτικής αναπαράστασης και την ύπαρξη ή μη σωματικής εμπλοκής.

A: Έκταση αντιστοίχισης

A1) Στις απλές αναλογίες γίνεται παράθεση ομοιότητας χωρίς συνθήκες και όρους. Περιγράφεται μια ομοιότητα χωρίς να διευκρινίζεται πώς ή γιατί ισχύει. Οι απλές αναλογίες συχνά είναι ελλιπείς.

A2) Οι εμπλουτισμένες αναλογίες περιέχουν επιπλέον – σε σχέση με τις αναλογίες της προηγούμενης κατηγορίας - ένα είδος αιτιότητας. Αν οι αναλογίες της πρώτης κατηγορίας είναι περιγραφικές, ενώ αυτές είναι ερμηνευτικές.

A3) Πολλαπλές αναλογίες (multiple analogies) χαρακτηρίζονται εκείνες οι αναλογίες που περιλαμβάνουν περισσότερες από μία αναλογίες. Σ' αυτές τις περιπτώσεις περισσότερες από μία βάσεις αντιστοιχίζονται στον ίδιο στόχο.

B: Ύπαρξη ή μη οπτικής αναπαράστασης

B1) Οπτικές αναλογίες. Η αναλογία παρουσιάζεται ως εικόνα, φωτογραφία, διάγραμμα κ.λπ.. (κάτι που γίνεται συνήθως από το διδάσκοντα), για να γίνει εστίαση στα επιθυμητά χαρακτηριστικά της επιλεγμένης βάσης.

B2) Λεκτικές αναλογίες. Οι λεκτικές αναλογίες είναι αυτές που εκφράζονται με λέξεις. Υπάρχουν δύο κύριες μορφές: α) η γραπτή, όπου η αναλογία παρουσιάζεται στους μαθητές ως κείμενο (είτε μέσα είτε έξω από το διδακτικό εγχειρίδιο) και β) η προφορική, όταν την παρουσιάζει ο εκπαιδευτικός κατά τη διάρκεια του μαθήματος. Επίσης, μπορεί να συμβεί το αντίθετο, όταν οι μαθητές παράγουν τις δικές τους αναλογίες κατά τη διάρκεια συζητήσεων, είτε σε μικρές ομάδες είτε σε ολόκληρη την τάξη.

B3) Επεξεργασμένες (elaborate) αναλογίες Αυτές οι αναλογίες περιλαμβάνουν τόσο κείμενο όσο και γραφικά στοιχεία. Στο κείμενο εξηγούνται λεπτομερώς η βάση, ο στόχος και οι αντιστοιχίσεις, ενώ στα γραφικά παρουσιάζονται οι πληροφορίες που αναφέρονται στο κείμενο μέσω οπτικών μέσων, όπως σκίτσα, διαγράμματα, φωτογραφίες κ.ά.

Γ: Ύπαρξη ή μη σωματικής εμπλοκής

G1) Δραματοποιημένες (role – play) αναλογίες όπου οι μαθητές εμπλέκονται σωματικά στην παρουσίαση της αναλογίας.

G2) Αφηγηματικές αναλογίες Σ' αυτήν την περίπτωση δεν υφίσταται σωματική εμπλοκή αλλά οι μαθητές εμπλέκονται νοητικά στην παρουσίαση της αναλογίας εσωτερικεύοντας την αφήγηση.

Από διάφορες έρευνες διαπιστώθηκε ότι το βάθος κατανόησης των δύσκολων εννοιών και το ποσοστό επιτυχίας των μαθητών στις αξιολογήσεις διευρύνεται κατά πολύ με τη χρήση πιο σύνθετων αναλογιών όπως πολλαπλών (Chiu & Lin, 2005. Heywood & Parker, 1997. Rigas & Valanidis, 2004) ή επεξεργασμένων αναλογιών (Glynn & Takahashi, 1998). Στην δική μας, ωστόσο, μελέτη χρησιμοποιήθηκε μία επεξεργασμένη αναλογία, η οποία συνέδεε τόσο γραφική απεικόνιση όσο και πληροφορίες που δόθηκαν προφορικά και σε κείμενο.

4.4 Ο ρόλος των Αναλογιών στην εκπαίδευση

Έρευνες προτείνουν ως σημαντικό διδακτικό εργαλείο τις αναλογίες, καθώς αναδιοργανώνουν τις γνώσεις των μαθητών (Duit, 1991). Οι επιστήμονες καταφεύγουν στις αναλογίες με σκοπό την εισαγωγή νέων μοντέλων που είναι δυνατόν να συμβάλλουν στην ανακάλυψη νέων θεωριών. Οι εκπαιδευτικοί εισάγουν στην Διδακτική των Φυσικών Επιστημών αναλογίες που αναδιοργανώνουν τις γνώσεις των μαθητών και τους καθοδηγούν στην κατασκευή νοητικών μοντέλων συμβατών των επιστημονικών (Χρηστίδου, 2001).

Συχνά, οι εκπαιδευτικοί κάνουν χρήση αναλογιών προκειμένου να εξηγήσουν στους μαθητές τους ένα άγνωστο φαινόμενο ή μια νέα και αφηρημένη έννοια

(Harrison, 2001). Συγκρίνοντας ο μαθητής δύο φαινομενικά ανόμοια αντικείμενα μπορεί να κατανοήσει μια δύσκολη έννοια καταγράφοντας τις ομοιότητες με μια ήδη γνωστή έννοια ή μια έννοια που μπορεί πιο εύκολα να καταλάβει. Έτσι, η γνώση κάποιου για ένα τομέα χρησιμοποιείται για να κατανοήσει έναν άγνωστο τομέα. Όπως λέει και ο Glynn (2007) η αναλογία μπορεί να βοηθήσει τους μαθητές να δημιουργήσουν «εννοιολογικές γέφυρες» (conceptual bridges) ανάμεσα στην καινούρια γνώση και σε κάτι που τους είναι οικείο. Αποτελεί ένα τρόπο κατανόησης της επιστημονική γνώσης και κλειδί για τον μετασχηματισμό της σε σχολική γνώση (Κουλαϊδής et al., 2002).

Σημαντικός, επίσης, είναι ο ρόλος της αναλογίας και του αναλογικού συλλογισμού στην επίλυση προβλημάτων. Θεωρείται ως μια από τις βασικές στρατηγικές επίλυσης ενός προβλήματος και βοηθάει στην αναπαράσταση και τον σχεδιασμό της λύσης. Οι μαθητές, όταν καλούνται να αντιμετωπίσουν ένα άγνωστο πρόβλημα, ανακαλούν στη μνήμη τους ένα πρόβλημα του οποίου γνωρίζουν τη λύση και που το θεωρούν ανάλογο με το προς επίλυση πρόβλημα. Ο Clement (1998) σε έρευνά του διαπίστωσε ότι η αναλογία είναι ένα αυθόρμητος και φυσικός τρόπος σκέψης τόσο για έμπειρους όσο και για αρχάριους λύτες.

4.5 Η συμβολή των διδακτικών αναλογιών στην κατανόηση εννοιών των Φυσικών Επιστημών

Η χρήση αναλογιών στη διδασκαλία εννοιών των Φυσικών Επιστημών απέφερε, κατά κανόνα, θετικά αποτελέσματα στη μάθηση όπως αυτά καταγράφονται σε ποικίλες έρευνες (Bellocchi & Ritchie, 2011. Gineste & Gilbert, 1995. Glynn & Takahashi, 1998. Harrison & Treagust, 1993. Ijioma & Onwukwe, 2011. Lagoke, Jegede, & Oyebanji, 1997. Sarantopoulos & Tsaparlis, 2004. Yerrick et al., 2003).

Ιστορικά, ο Joseph Priestley (1773-1804) σκεπτόμενος αναλογικά πρότεινε ένα νόμο για την ηλεκτρική δύναμη. Γνωρίζοντας ήδη τον νόμο της παγκόσμιας έλξης του Νεύτωνα που λέει ότι η βαρυτική έλξη ανάμεσα σε δύο σώματα είναι αντιστρόφως ανάλογη του τετραγώνου της μεταξύ τους απόστασης, πρότεινε το ίδιο και για την ηλεκτρική δύναμη που ασκείτε ανάμεσα σε δύο φορτία. Ο νόμος της

ηλεκτρικής δύναμης επιβεβαιώθηκε πειραματικά αργότερα από τον Charles Coulomb και σήμερα φέρει το όνομά του (S. Glynn, 1995). Επίσης, ο αστρονόμος Κέπλερ (1571-1630) υποστήριζε πάρα πολύ τον αναλογικό συλλογισμό και στην προσπάθειά του να εξηγήσει τις κινήσεις των πλανητών, παρομοίασε την λειτουργία του πλανητικού συστήματος με τον μηχανισμό ενός ρολογιού. Επιπλέον, ο Huygens χρησιμοποίησε την κυματική θεωρία του ήχου για να διατυπώσει την κυματική θεωρία του φωτός. Ο Fourier ανέπτυξε τη θεωρία του για την αγωγή της θερμότητας βασιζόμενος στην αναλογία της ροής ενός υγρού, την οποία υιοθέτησε αργότερα ο Ohm, όταν ανέπτυξε τη θεωρία του για τον ηλεκτρισμό. Ακόμη, ο Maxwell, για να περιγράψει μαθηματικά τις ηλεκτρικές δυναμικές γραμμές, τις παρομοίασε με την πίεση του νερού σε ένα σωλήνα (Silva, 2007). Συνεχίζοντας ιστορικά, τον 17ο αιώνα στην Αγγλία, ο Νεύτωνας διερευνά τη φύση του φωτός. Η ομοιότητα στην συμπεριφορά μιας μπάλας, όταν αναπηδά σ' ένα τοίχο και στην ανάκλαση του φωτός από ένα κάτοπτρο, τον οδηγεί στο συμπέρασμα ότι το φως είναι σωματιδιακής φύσεως (Gillispie, 1986). Ο Νεύτωνας παρομοίασε το φεγγάρι με μια μπάλα, που εκτοξεύεται με τέτοια αρχική ταχύτητα, ώστε να καταφέρει να φύγει από τη Γη και να μπει σε τροχιά γύρω της. Ο Γαλιλαίος σύγκρινε την κίνηση του φεγγαριού με την κίνηση μιας πέτρας, που ρίχνεται από το κατάρτι ενός κινούμενου πλοίου. Η κίνηση της θα έχει μια κατακόρυφη συνιστώσα και μια οριζόντια ίδια με του πλοίου. Και οι δύο προηγούμενες αναλογίες για την κυκλική κίνηση του φεγγαριού δείχνουν ότι αποτελεί ένα συνδυασμό κινήσεων, μιας εφαπτόμενης στην τροχιά κίνησης και μιας κάθετης προς τη Γη (Gentner, 1982). Στην αρχή του 20ου αιώνα, οι επιστήμονες έκαναν χρήση αναλογιών ώστε να ανακαλύψουν και να κατανοήσουν τη δομή του ατόμου. Αρχικά, ο J.J. Thomson, το 1904, πρότεινε ένα ατομικό πρότυπο γνωστό και ως «σταφιδόψωμο» καθώς διατύπωνε ότι τα ηλεκτρόνια βρίσκονται διασκορπισμένα ομοιόμορφα σε μια θετικά φορτισμένη σφαίρα, όπως οι σταφίδες είναι διασκορπισμένες μέσα στο ψωμί. Αργότερα ο Ernest Rutherford το 1911 πρότεινε το πλανητικό μοντέλο του ατόμου, ενώ το 1912 ο Bohr πρότεινε ένα διαφορετικό μοντέλο, στο οποίο οι στιβάδες των ηλεκτρονίων δεν ήταν σαν τις τροχιές των πλανητών αλλά σαν σκαλοπάτια σκάλας. Τα ηλεκτρόνια μπορούν να βρίσκονται μόνο στα σκαλοπάτια και όχι στα μεταξύ τους διαστήματα.

Στο κοντινό παρελθόν, η χρήση αναλογιών διαπιστώθηκε ότι συμβάλλει επίσης και στην κατασκευή επιστημονικής γνώσης σε ομαδικές εργασίες φοιτητών σε θέματα σχετικά με το ηλεκτρικό ρεύμα (Yerrick et al., 2003). Στους φοιτητές προτάθηκε η χρήση της αναλογίας “το συνεχές ηλεκτρικό ρεύμα μοιάζει με ένα ποτάμι που κυλάει”. Η αναλογία αυτή χρησιμοποιήθηκε σαν εργαλείο, υπέστη επεξεργασία για τον εντοπισμό κοινών και μη κοινών χαρακτηριστικών ανάμεσα στη βάση και το στόχο.

Παρόμοια ευρήματα υψηλών επιδόσεων καταγράφηκαν από τους Sarantopoulos & Tsaparlis, (2004) σε μαθητές λυκείου που μελέτησαν ευρύ φάσμα χημικών εννοιών όπως σύγχρονη ατομική θεωρία, χημικοί δεσμοί, οξέα – βάσεις – άλατα, θερμοχημεία, χημική κινητική, χημική ισορροπία, οξειδοαναγωγή και στοιχεία οργανικής χημείας. Ενδεικτικά, αναλογίες που χρησιμοποιήθηκαν ήταν ο χορός για την αμφίδρομη χημική αντίδραση, ή το εισόδημα παντρεμένου ζευγαριού για τη συγκέντρωση διαλύματος.

Ακόμα, όπως αναφέρουν οι Bellocchi και Ritchie (2011), αναλογίες που χρησιμοποιήθηκαν κατά την προσέγγιση της στοιχειομετρίας χημικών αντιδράσεων συνέβαλαν στην επιτυχή σύζευξη καθημερινού και χημικού λόγου στην αντίστοιχη ομάδα μαθητών. Οι ερευνητές χρησιμοποίησαν την αναλογία του σάντουιτς με ζαμπόν για τη μελέτη της έννοιας της στοιχειομετρίας χημικής αντίδρασης (ένα σάντουιτς φτιάχνεται από δύο φέτες ψωμιού και μία φέτα ζαμπόν, όπως δύο αντιδρώντα σε συγκεκριμένες αναλογίες παράγουν ένα προϊόν σε μία χημική αντίδραση).

Ωστόσο, η χρήση αναλογιών δεν έχει πάντοτε τα θετικότερα αποτελέσματα σε σχέση με τη διδασκαλία χωρίς αναλογίες, καθώς μπορεί να καταλήξει σε ορισμένα αμφιλεγόμενα συμπεράσματα. Για τον λόγο αυτό θα πρέπει να χρησιμοποιούνται οι αναλογίες κατάλληλα από τον εκπαιδευτικό. Ο εκπαιδευτικός θα πρέπει να τονίζει τις διαφορές που υπάρχουν μεταξύ του αντικειμένου στόχου και του αναλόγου, καθώς η αντιστοίχιση μη κοινών χαρακτηριστικών και η υπεργενίκευση στη χρήση μιας αναλογίας συσκοτίζει τα όρια της ισχύος της και μπορεί να οδηγήσει σε παρανοήσεις (Yerrick et al., 2003).

4.6 Πλεονεκτήματα και περιορισμοί στη χρήση Αναλογιών στην εκπαιδευτική διαδικασία

Η χρήση των αναλογιών στην εκπαιδευτική διαδικασία πρέπει να γίνεται με ιδιαίτερη προσοχή και σωστή προετοιμασία. Δεν είναι όλες οι αναλογίες εξίσου αποδοτικές, και δεν είναι κάθε στιγμή κατάλληλη για την ενσωμάτωσή τους στη διδασκαλία. Ακόμη, έννοιες που είναι εύκολα κατανοητές από τους επιστήμονες δεν σημαίνει ότι γίνονται εξίσου κατανοητές από τους μαθητές. Συνεπώς, πριν χρησιμοποιηθεί μια αναλογία στο μάθημα, είναι σημαντικό να ληφθούν υπόψη όχι μόνο οι έννοιες που περιέχει, αλλά και οι αντιλήψεις και τα γνωστικά μοντέλα των μαθητών. (Χρηστίδου, 2001).

Οι Holyoak και Thagard (1989) αναφέρουν ότι μια σωστή αναλογία πρέπει να περιλαμβάνει τα παρακάτω στοιχεία:

1. Το περιεχόμενο της πηγής πρέπει να είναι οικείο στους μαθητές και να έχει σχέση με καθημερινές ή πρακτικές καταστάσεις (pragmatic centrality).
2. Να υπάρχει δομική συνάφεια (structural consistency) μεταξύ πηγής και στόχου.
3. Να υπάρχει σημασιολογική ομοιότητα (semantic similarity) ανάμεσα στα χαρακτηριστικά της πηγής με τα αντίστοιχα του στόχου.

Οι παραπάνω προϋποθέσεις αποτελούν κρίσιμους παράγοντες για την επιτυχία μιας αναλογίας και πρέπει να πληρούνται ταυτόχρονα κατά τον σχεδιασμό της. Σύμφωνα με τον Zeitoun (1984), οι αναλογίες έχουν ελάχιστη ή και καμία θετική επίδραση στη μαθησιακή διαδικασία, όταν οι μαθητές δεν είναι εξοικειωμένοι με την έννοια της αναλογίας ή δεν διαθέτουν επαρκές γνωστικό υπόβαθρο για το θέμα που πρόκειται να διδαχθούν.

Υπάρχουν αρκετά πλεονεκτήματα, που απορρέουν από τη χρήση των αναλογιών ως διδακτικό και γνωστικό εργαλείο (Duit, 1991) (Orgill & Bodner, 2004) (Thiele & Treagust, 1991) (Treagust, 1993). Αυτά είναι τα εξής:

- Προωθούν και ενισχύουν την εννοιολογική αλλαγή, βοηθώντας τους μαθητές να ξεπεράσουν τις εναλλακτικές τους ιδέες.

- Βοηθούν την κατανόηση και ερμηνεία αφηρημένων εννοιών και φαινομένων που συμβαίνουν στον μικρόκοσμο, τονίζοντας τις ομοιότητες με τον πραγματικό καθημερινό κόσμο.
- Παρέχουν οπτικοποίηση των αφηρημένων εννοιών, το οποίο βοηθάει στην κατανόησή τους.
- Παρέχουν ισχυρά κίνητρα στους μαθητές, αυξάνοντας τον ενδιαφέρον τους για μάθηση.
- Προτρέπουν τον εκπαιδευτικό να λάβει υπόψη του τις προϋπάρχουσες γνώσεις των μαθητών στα πλαίσια της εποικοδομητικής μάθησης.
- Βοηθούν στην καλύτερη οργάνωση της μνήμης και στην αποθήκευση περισσότερων και πιο χρήσιμων πληροφοριών, καθώς και στην ανάκλησή τους.

Όπως υποστηρίζεται, (Duit, 1991)(Orgill & Bodner, 2004) (Thagard, 1992) οι αναλογίες αποτελούν «δίκωπο μαχαίρι» για τον εκπαιδευτικό, καθώς, ενώ παρουσιάζουν αρκετά πλεονεκτήματα, μπορεί να προκαλέσουν αντίθετα αποτελέσματα από αυτά που θα περίμενε αν δεν χρησιμοποιηθούν σωστά. Μερικά τους μειονεκτήματα είναι τα εξής:

- Οδηγούν σε παρανοήσεις και σε λανθασμένες γενικεύσεις καθώς οι μαθητές εκλαμβάνουν κυριολεκτικά τις αντιστοιχίσεις μιας αναλογίας.
- Μπορεί να περιέχουν περιττές πληροφορίες για τον μαθητή, όταν ο ίδιος έχει ήδη κατανοήσει την έννοια-στόχο, που πρέπει να διδαχτεί.
- Οι μαθητές μπορεί να χρησιμοποιούν μια αναλογία μηχανικά, χωρίς να κατανοούν τις πληροφορίες που η αναλογία έχει σκοπό να μεταδώσει. Μια αιτία αυτής της μηχανιστικής χρήσης της αναλογίας αποτελεί το γεγονός ότι οι μαθητές δεν είναι πρόθυμοι να επενδύσουν χρόνο για να μάθουν μια άγνωστη έννοια, αν μπορούν να θυμηθούν απλώς μια γνωστή αναλογία για την έννοια αυτή. Εξάλλου γνωρίζοντας μόνο την αναλογία οι μαθητές μπορεί να απαντούν σωστά σε διαγωνίσματα χωρίς να έχουν κατανοήσει πλήρως την άγνωστη έννοια.
- Μια αναλογία δεν εξηγεί πλήρως την άγνωστη έννοια ή το φαινόμενο. Πάντα υπάρχουν περιορισμοί και ένα σημείο στο οποίο η αναλογία παύει να

ισχύει. Οι μαθητές συνήθως δεν έχουν επαρκή γνώση για την έννοια-στόχο και δεν μπορούν να καταλάβουν τους περιορισμούς, που εμπεριέχονται σε μια αναλογία με αποτέλεσμα να συγχέουν την αναλογία με την πραγματικότητα.

Ο μαθητής μπορεί λανθασμένα να συμπεράνει ότι η αναλογία αποτελεί το μοναδικό ή τον απαραίτητο τρόπο για να κατανοήσει ένα γνωστικό αντικείμενο.

4.7 Η Χρήση Αναλογίας για την κατανόηση της διακριτικής ικανότητας στη Φασματοσκοπία NMR.

Η Αναλογία

Το Gran Telescopio Canarias (GTC) και ένας φασματογράφος NMR AVANCE 1000 (1 GHz) επιλέχθηκαν για αυτήν την αναλογία. Το GTC είναι ένα ανακλαστικό τηλεσκόπιο 10,4 m (410 in), το οποίο χρησιμοποιεί ένα ή συνδυασμούς καμπυλωτών κατόπτρων που αντανακλούν το φως και σχηματίζουν μια εικόνα (gtc.iac). Βρίσκεται στο Παρατηρητήριο Roque de los Muchachos στο νησί Λα Πάλμα, στα Κανάρια Νησιά της Ισπανίας σε ύψος 2.267 μέτρα (7.438 πόδια). Ο φασματογράφος AVANCE 1000 NMR (1 GHz = 1.000 MHz), ενσωματώνει τον πρώτο σε διεθνές επίπεδο υπεραγωγίμο μαγνήτη 23,5 Tesla (54 mm). Τα φάσματα NMR 1 GHz καταδεικνύουν τις τεράστιες δυνατότητες αυτού του νέου οργάνου υψηλής τεχνολογίας, για την επίτευξη πειραμάτων NMR εξαιρετικής αναλυτικής/διακριτικής ικανότητας. Στον Πίνακα 4.1 παρέχονται οι αναλογίες μεταξύ του τηλεσκοπίου και του υψηλού μαγνητικού πεδίου οργάνου NMR. (Bruker)

Για το τηλεσκόπιο, θα μπορούσε να γίνει ο ακόλουθος ορισμός της αναλυτικής/διακριτικής ικανότητας: Αναλυτική ικανότητα (σε ακτίνια) = (μήκος κύματος)/(διάμετρος τηλεσκοπίου) ή $R = w/D$ (rad) (υπενθυμίζουμε ότι το rad είναι η μονάδα SI για μια γωνία) (Εικόνα 4.2A).

Γνωρίζουμε ότι η διάμετρος του τηλεσκοπίου είναι 10,4 μέτρα και ότι χρησιμοποιείται ορατό φως μήκους κύματος στην περιοχή 400-700 nm. Επιλέγοντας μια ενδιάμεση τιμή, για παράδειγμα 600 nm, το R, επομένως, υπολογίζεται ως εξής:

$$R = \frac{600 \text{ nm}}{10.4 \text{ m}} = \frac{600 \cdot 10^{-9} \text{ m}}{10.4 \text{ m}} = 0.5769 \cdot 10^{-7}$$

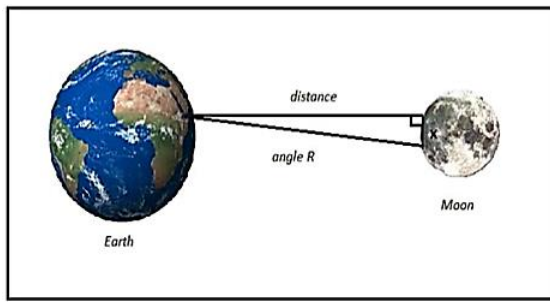
Αυτό παρέχει την ανάλυση του GTC σε ακτίνια, αλλά μπορεί να μετατραπεί σε μέτρα στην επιφάνεια του φεγγαριού. Επομένως, δημιουργείται ένα τρίγωνο μεταξύ Γης και Σελήνης όπου R είναι η γωνία σε ακτίνια που υπολογίσαμε, x είναι η πλευρά απέναντι από τη γωνία R που αντιστοιχεί στο αντικείμενο στη σελήνη και η διπλανή πλευρά είναι η απόσταση Γης-Σελήνης. Με δεδομένο ότι η απόσταση της Σελήνης από τη Γη είναι 384,400 km ή 384,400,000 m, μπορούμε να υπολογίσουμε ότι η διακριτική ικανότητα του τηλεσκοπίου GTC είναι 22,1 m. Συνεπώς, για να διακριθεί ένα αντικείμενο με το τηλεσκόπιο GTC στην επιφάνεια της Σελήνης θα πρέπει να είναι διαστάσεων τουλάχιστον 22,1 m. Είναι προφανές ότι η αναλυτική αυτή ικανότητα δεν είναι αρκετή για τη διάκριση του “Lunar Roving Vehicle” (περίπου 5 m) το οποίο προσεληνώθηκε το 1972 (Σχήμα 4.2B). Για τη φασματοσκοπία NMR, υποθέτοντας ότι η ελάχιστη συχνότητα μεταξύ των κορυφών είναι 0.5 Hz, προκύπτει ότι:

$$\text{Resolving ability} = \frac{0.5\text{Hz}}{1\text{GHz}} = \frac{0.5\text{Hz}}{1 \times 10^9\text{Hz}} = 0.5 \times 10^{-9}$$

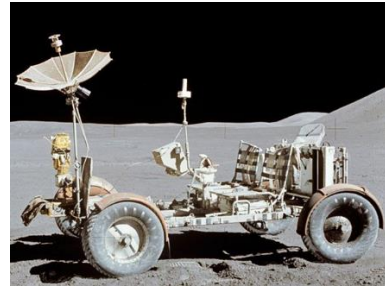
Λαμβάνοντας και πάλι υπόψη την απόσταση της Σελήνης από τη Γη, προκύπτει ότι η διακριτική ικανότητα της φασματοσκοπίας NMR είναι 19,22 cm. Τέτοιου είδους αναλυτική ικανότητα είναι αρκετή για τη διάκριση όχι μόνον του “Lunar Roving Vehicle” αλλά και τη διευκρίνιση των λεπτομερειών ακόμη και των τροχών του LRV. Το μέγεθος του αντικειμένου στο φεγγάρι που μπορεί να παρατηρηθεί πρέπει να είναι τουλάχιστον 22,1 cm. Κατά συνέπεια, μπορεί εύκολα να γίνει αντιληπτό ότι η ικανότητα ανάλυσης του φασματομέτρου AVANCE 1000 NMR είναι εκατό φορές καλύτερη από αυτή του μεγαλύτερου τηλεσκοπίου στον κόσμο.

Πίνακας 4.1. Δομικές αναλογίες μεταξύ τηλεσκοπίου και του υψηλού μαγνητικού πεδίου οργάνου NMR

Ανάλογο	Στόχος
Ανάλυση τηλεσκοπίου	Αναλυτική/διακριτική ικανότητα φασματομέτρου NMR
Μήκος κύματος ορατού φωτός	Διαχωρισμός συχνότητας φασματικών γραμμών
Διάμετρος τηλεσκοπίου	Ένταση μαγνητικού πεδίου και, κατά συνέπεια, συχνότητας του φασματομέτρου NMR



(A)



(B)

Εικόνα 4.2 (A) Σχηματική απεικόνιση του μεγέθους ενός αντικειμένου το οποίο μπορεί να διακριθεί με τη χρήση τηλεσκοπίου και NMR. (Stambouli, Pegka, Gerothanassis, & Tsaparlis, 2023) (B) Η διακριτική ικανότητα του τηλεσκοπίου GTC (22,1 m) δεν επιτρέπει τη σαφή διάκριση του Lunar Roving Vehicle σε αντίθεση με την υψηλή διακριτική ικανότητα του NMR (19,2 cm).

(https://en.wikipedia.org/wiki/Lunar_Roving_Vehicle)

Κεφάλαιο 5: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Η διαγνωστική μας έρευνα έδειξε ότι οι μαθητές εμφανίζουν πολλές δυσκολίες στην κατανόηση των εννοιών της φασματοσκοπίας. Η φασματοσκοπία MS παρατηρούμε ότι προκαλεί τη μεγαλύτερη σύγχυση στους φοιτητές. Αυτό εύρημα ίσως οφείλεται στο γεγονός ότι δεν έρχονται όλοι οι φοιτητές σε επαφή με φασματόμετρα μάζας σε εργαστηριακό επίπεδο, καθώς δεν εντάσσεται σε κάποιο υποχρεωτικό εργαστηριακό μάθημα. Σε αντίθεση έρχονται τα ευρήματα για την φασματοσκοπία IR, όπου οι φοιτητές φαίνεται να έχουν αντιληφθεί καλύτερα τις βασικές έννοιες και την αρχή λειτουργίας της συγκεκριμένης μεθόδου, αφού το ποσοστό των σωστών απαντήσεων αυξάνεται ραγδαία. Επιπλέον, μία μέτρια αλλά όχι καλή κατανόηση των βασικών εννοιών φασματοσκοπίας παρατηρείται στις μεθόδους NMR και UV.

Μεγάλο μέρος των φοιτητών, στην ερώτηση: σε τι επίπεδο μπορεί να ξεχωρίσει τις φασματοσκοπικές μεθόδους μεταξύ τους, ήταν σίγουροι για τον εαυτό τους και με αυτοπεποίθηση απάντησαν ότι θα τα κατάφερναν. Στην συνέχεια ωστόσο του ερωτηματολογίου, διαπιστώθηκε από τις απαντήσεις τους, ότι εμφανίζουν μεγάλη σύγχυση. Αυτό μας δίνει την εντύπωση ότι πιθανώς οι ίδιοι οι φοιτητές δεν είχαν αντιληφθεί ότι είχαν δυσκολευτεί σε βασικές έννοιες, που ίσως είχαν αποστηθίσει χωρίς να τις κατανοήσουν σε βάθος.

Μία επιπρόσθετη παρατήρηση που θα μπορούσαμε να κάνουμε μετά την μελέτη και επεξεργασία των απαντήσεων των φοιτητών είναι η εξής. Ορισμένοι από τους φοιτητές απαντούσαν σωστά στις ερωτήσεις κλειστού τύπου, ωστόσο όταν απαιτούνταν η επεξήγηση των εννοιών, ελάχιστοι ήταν αυτοί που κατάφερναν να δώσουν μία σωστή απάντηση (0-19,7%).

Όλες αυτές οι δυσκολίες που παρατηρούνται να εμφανίζουν οι φοιτητές στη μελέτη των φασματοσκοπικών εννοιών, ίσως πηγάζουν από το γεγονός ότι ασχολούνται και εκπαιδεύονται σε κάθε μέθοδο ξεχωριστά. Συγκεκριμένα κάθε φασματοσκοπική μέθοδος διδάσκεται από διαφορετικό διδάσκοντα, παράγοντας που μπορεί να δημιουργεί ασυνέχειες και σύγχυση στους φοιτητές. Το πρόγραμμα σπουδών αλλά και η εκτεταμένη διδαχθείσα ύλη φαίνεται πως δυσκολεύει τους φοιτητές να οργανώσουν τις γνώσεις που έχουν λάβει και με κριτική σκέψη να ξεχωρίσουν τις βασικές έννοιες της φασματοσκοπίας. Ακόμη, παρατηρούμε ότι δεν έχουν γίνει «κτήμα» τους πληροφορίες που έχουν λάβει μέσω της διάλεξης (δασκαλοκεντρικής μεθόδου) σε αντίθεση με την εργαστηριακή ενασχόληση, η οποία προκαλεί το ενδιαφέρον των φοιτητών καθώς έχουν ενεργό ρόλο στη απόκτηση της γνώσης.

Τέλος, η αναλογία που προτείναμε ίσως προσελκύσει το ενδιαφέρον των σπουδαστών με συνέπεια την καλύτερη κατανόηση της διακριτικής ικανότητας στη Φασματοσκοπία.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Αναφορές

- Aguirre, J. M. (1990). Student-teachers' conceptions of science, teaching and learning: a case study in preservice science education. *International Journal of Science Education*, 12(4), σσ. 381-390.
- Atkins, P. J. (2018). *Φυσικοχημεία* (9η εκδ.). (Γ. Π. Αναστασιάδης Σπύρος Χ. Παπαθεοδώρου Γιώργος Ν. Φαράντος Σταύρος Φυτάς Γιώργος Δεληγιάννης Κωνσταντίνος Κοπιδάκης Νίκος Κωτσόπουλος, Μεταφρ.) Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Ausubel, D. P. (2000). *The acquisition and retention of knowledge: A cognitive*. The Netherlands: Εκδόσεις Kluwer Academic Publishers.
- Baddeley, A. (2009). Short-term memory. Στο A. Baddeley, M. W. Eysenck, & M. C. Anderson, *Memory* (σσ. 19-40). New York: Εκδόσεις Psychology Press.
- Baxter, J. (1991). A constructivist approach to astronomy in the National Curriculum. *Phys. Educ.*, 26, σσ. 38-45.
- Bigge, M. L. (1990). *Θεωρίες μάθησης για εκπαιδευτικούς*. (Α. Κάντας, & Α. Χατζή, Μεταφρ.) Αθήνα: Εκδόσεις Πατάκης.
- Bliss, J. (2001). Από την πρακτικοβιωματική γνώση στη σχολική εκδοχή της επιστημονικής γνώσης: το «παράδειγμα» του Piaget. Στο J. Bliss, K. Δημόπουλος, & Β. Χατζηνικήτας (Επιμ.), *Διδακτική των Φυσικών Επιστημών* (Κ. Δημόπουλος, Μεταφρ., Τόμ. Ι, σσ. 189-216). Πάτρα: Εκδόσεις Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο.
- Brogat, I. s. (χ.χ.). Sources of spectra for ethanal (accessed 08-10-2023): ¹H NMR spectrum (at 300 MHz):. Ανάκτηση από https://www.chemicalbook.com/SpectrumEN_75-07-0_1HNMR.htm using a medium strength
- Bruker, A. (χ.χ.). Ανάκτηση από <https://ir.bruker.com/press-releases/press-release-details/2009/Bruker-Announces-Avance-1000-the-Worlds-First-1-Gigahertz-NMR-Spectrometer/default.aspx>
- Chemistry, L. (χ.χ.). *Instrumentation*. Ανάκτηση από chem.libretexts.org
- Chiu, M.-H. (2007). A national survey of students' conceptions in chemistry in Taiwan. *International Journal of Science Education*, 29(4), σσ. 421-452.
- Coll, R., & Taylor, I. (2005). The role of models and analogies in science education: implications from research. *International Journal of Science Education*, 27(2), σσ. 183-198.
- Derrick, R., Stalk, D., & Landry, J. (1999). *Infrared Spectroscopy in Conservation Science*. Getty Conservation Institute.

- Douglas, B., & Hollingsworth, C. (1985). *Symmetry in Bonding and Spectra: An Introduction*. New York: Academic Press.
- Driver, R. (1994). "Planning and Teaching a Chemistry Topic from Constructivist Perspective", *Proceedings of "The Content of Science: A Constructivist Approach to its Teaching and Learning*. Fensham: Εκδόσεις Gunstone and White.
- Driver, R., Guesne, E., & Tiberghien, A. (1985). *Οι ιδέες των παιδιών στις φυσικές επιστήμες*. Αθήνα: Εκδόσεις Ένωση Ελλήνων Φυσικών - Τροχαλία.
- Duit, R. (1991). On the role of analogies and metaphors in learning science. *Science Education*, 6, σσ. 649-672.
- Duit, R., & Treagust, D. (2003). Conceptual change: A powerful framework for improving science teaching and learning. *International Journal of Science Education*(25), σσ. 671-688.
- Ebrahim, A. (2012). The effect of cooperative learning strategies on elementary students' science achievement and social skills in Kuwait. *International Journal of Science and Mathematics Education*, 10, σσ. 293-314.
- Eilam, B. (2004). Drops of water and of soap solution: Students' constraining mental models of the nature of matter. *Journal of Research in Science Teaching*, 41(10), σσ. 970-993.
- Eryilmaz, A. (2002). Effects of conceptual assignments and conceptual change discussions on students' misconceptions and achievement regarding force and motion. *Journal of Research in Science Teaching*(39), σσ. 1001-1015.
- Ferraro, J. R., & Nakamoto, K. (1994). *Introductory Raman Spectroscopy*. Academic Press CA.
- Flynn, A. B. (2015). Structure and Evaluation of Flipped Chemistry Courses: Organic and Spectroscopy, Large and Small, First to Third Year, English and French. *Chem. Educ. Res. Pract* 16 (2), σσ. 198-211.
- Gammon, E. (2023). *Σύγχρονη Γενική και Ανόργανη Χημεία* (11η εκδ.). (Ν. Κλούρας, Μεταφρ.) Τραύλος Π.
- Gentner, D. (1983). Structure-Mapping: A theoretical framework for analogy. *Cognitive Science*, 2.
- Gericke, N., & Hagberg, M. (2007). Definition of historical models of gene function and their relation to students' understanding of genetics. *International Journal of Science Education*(16), σσ. 849-881.
- Gilbert, J. (1982). *Children's science and its consequences for teaching*. University of Surrey, United Kingdom.
- Gillan, A., & Stern, E. (1958). *Introduction to Electronic Absorption Spectroscopy in Organic Chemistry*. London: E Arnold.

- Glynn. (1994). *Teaching science with analogies: A strategy for teachers and textbook authors*. National Reading Research Center: University of Georgia.
- Glynn, S. M., Yeany, R. H., & Britton, B. K. (1991). *The Psychology of learning science*. Hillsdale, N. J.: Erlbaum.
- Grabowski, S. J. (2011). *What Is the Covalency of Hydrogen Bonding?* American Chemical Society.
- gtc.iac. (χ.χ.). Ανάκτηση από <https://www.gtc.iac.es/>
- Günther, H. (2013). *NMR Spectroscopy: Basic Principles, Concepts and Applications in Chemistry*. Wiley-VCH.
- Harrison, A. (2001). How do teachers and textbook writers model scientific ideas for students? *Research in Science Education*, 3, σσ. 401-435.
- Harrison, A. (2001). How do teachers and textbook writers model scientific ideas for students? *Research in Science Education*, 3, σσ. 401-435.
- Harrison, A., & Treagust, D. F. (2001). Conceptual change using multiple interpretive perspectives: Two case studies in secondary school chemistry. *Instructional Science*, 29(1), σσ. 45-85.
- Hollas, J. (2004). *Modern Spectroscopy* (4th Ed. εκδ.). John Wiley & Sons.
- Holyoak, K. J. (2012). Analogy and relational reasoning. . *The Oxford handbook of thinking and reasoning* , σσ. 234-259.
- Howe, A. C. (1996). Development of science concepts within a Vygotskian framework. *Science Education*, 1(80), σσ. 35-51.
- Ioannides, C., & Vosniadou, S. (2002). The changing meanings of force. *Cognitive Science Quarterly*(2), σσ. 5-62.
- Jaffe, H., & Orchin, M. (1962). *Theory and Applications of UV Spectroscopy*. New York: John Wiley and Sons.
- Johnstone, A. H. (1984). "New stars for the teacher to steer by?", *Journal of Chemical Education*, 61(10), σσ. 847-849.
- Jurišević, M., Vrtačnik, M., Kwiatkowski, M., & Gros, N. (2012). *The Interplay of Students' Motivational Orientations, their Chemistry Achievements and their Perception of Learning within the Hands-On Approach to Visible Spectrometry*. (Τόμ. 13 (3)). Chem. Educ. Res. Pract.
- Justi, R. &. (2006). The role of analog models in the understanding of the nature of models in chemistry. . *Heidelberg, Germany*, σσ. 119-130.
- Klein, D. R. (2020). *Organic Chemistry, 4th Edition*. Wiley.

- Knight, R. (2006). *Πέντε Εύκολα Μαθήματα. Στρατηγικές για την επιτυχία*. (Π. Τζαμαλής, Μεταφρ.) Αθήνα: Εκδόσεις Δίαυλος.
- Komorek, M., & Kattmann, U. (2008). The Model of Educational Reconstruction. Στο S. Mikelskis-Seifert, *Four Decades of Research in Science Education: From Curriculum Development to Quality Improvement* (σσ. 171-180). Germany: Εκδόσεις Waxmann Verlag GmbH.
- Kuhn, H., Forsterling, H.-D., & Waldeck, D. (2000). *Principles of Physical Chemistry* (2nd Edition εκδ.). John Wiley & Sons, Inc.
- Lang, L. (1971-1976). *Absorption Spectra in UV and VIS Regions*. New York: Academic Press.
- Leicester, H. M. (1993). *The Historical Background of Chemistry*. (Θ. Ηλιάδης, Π. Μπουκάλας, Γ. Τρουφάκος, Επιμ., & Γ. Γεωργακόπουλος, Μεταφρ.) Αθήνα: Εκδόσεις Τροχαλία.
- level, Z. e. (χ.χ.). Ανάκτηση από https://www.pngitem.com/middle/hhiihwo_zeeman-energy-level-hd-png-download/
- Liang, L. L. (2005). Effectiveness of a constructivist approach to science instruction for. *International Journal of Science Education*, 27(10), σσ. 1143-1167.
- Limniou, M., Papadopoulos, N., Gavril, D., Touni, A., & Chatziapostolidou, M. (2021). An Educational Software for Supporting Students' Learning of IR Spectral Interpretation. Problems and Problem Solving in Chemistry Education; *Tsaparlis, G. Ed.; Royal Society of Chemistry: London, UK*, σσ. 340-360.
- Linn, M. C. (1986). *Journal of research and science teaching*, 5.
- March, J. (1992). *Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure*. New York: Wiley, ISBN 0-471-60180-2.
- McMurry, J. (2017). *Οργανική Χημεία*. (Μ. Σ. Ιουλία Σμόνου, Επιμ., & Α. Β. Γεώργιος Βαρβούνης, Μεταφρ.) Κρήτη: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Moon, A., Zotos, E., Finkenstaedt-Quinn, S., Gere, A. R., & Shultz, G. (2018). Investigation of the Role of Writing-To-Learn in Promoting Student Understanding of Light–Matter Interactions. *Chem. Educ. Res. Pract*, 19 (3), σσ. 807-818.
- Nilsson, P. (2009). From lesson plan to new comprehension: Exploring student teachers' pedagogical reasoning in learning about teaching. *European Journal of Teacher Education*, 32, σσ. 239-258.
- Novak, J. D. (2002). Meaningful learning: The essential factor for conceptual change in limited or inappropriate propositional hierarchies leading to empowerment of learners. *Science Education*(86), σσ. 548-571.
- Ogborn, I., & Martins, I. (1996). Metaphorical understandings and scientific ideas. *International Journal of Science Education*, 18(6), σσ. 631-652.

- Openchemistryhelp. (χ.χ.). *NMR chemistry items*. Ανάκτηση από <https://openchemistryhelp.blogspot.com/2012/12/?m=1>
- Partanen, L. (2018). Student-Centred Active Learning Approaches to Teaching Quantum Chemistry and Spectroscopy: Quantitative Results from a Two-Year Action Research Study. *Chem. Educ. Res. Pract.* 19(3), σσ. 885-904.
- Pavan M., V. R. (χ.χ.). *NMR Spectroscopy*. Ανάκτηση από chem.libretexts.org
- Penkampus, H. (1992). *UV-VIS Atlas of Organic Compounds*. Weinheim: Wiley-VCH.
- Piaget, J. (1999). *Η ψυχολογία της νοημοσύνης*. (Ε. Βέλτσου, Μεταφρ.) Αθήνα: Εκδόσεις Καστανιώτη.
- Posner, G. S. (1982). Accommodation of a scientific conception: Toward a theory of conceptual change. *Science Education*, 66, σσ. 211-227.
- Rapp, D. (2005). Mental Models: Theoretical issues for visualizations in science education. *Visualization in Science Education*, σσ. 43-60.
- Scott, P. (1998). Teacher talk and meaning making in science classrooms: a Vygotskian analysis and review. *Studies in Science Education*, 1(32), σσ. 45-80.
- Seamount, C. (χ.χ.). *Applications of Electromagnetic Waves*. Ανάκτηση από https://ffden-2.phys.uaf.edu/webproj/213_fall_2017/Christopher_Seamount/page1.html
- Serway, R., Moses, C., & Moyer, C. (2002). *Σύγχρονη Φυσική*. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Shepardson, D. P. (1999). Learning science in a first grade science activity: a Vygotskian perspective. *Science Education*, 5(83), σσ. 621-638.
- Shipstone, D. (1984). A study of children's understanding of electricity in simple D.C. circuits. *European Journal of Science Education*(6), σσ. 185-196.
- Siskos, M., Gerothanassis, I., & Choudhary, M. (2017). *Hydrogen Atomic Positions of O–H...O Hydrogen Bonds in Solution and in the Solid State: The Synergy of Quantum Chemical Calculations with 1H-NMR Chemical Shifts and X-ray Diffraction Methods*. *Molecules* 2017,22, 415.
- Skoog, C. (2021). *Αρχές Ενόργανης Ανάλυσης*. Σπυρίδων Κωσταράκης.
- Solomon, J. (1994). The rise and fall of constructivism. *Studies in Science*(23), σσ. 1-19.
- Stambouli, O., Pegka, S., Gerothanassis, I., & Tsaparlis, G. (2023, October 17). Undergraduate Chemistry Students' Perceived Abilities and Declarative Knowledge on Some Basic Aspects and Concepts of Spectroscopy. *Journal of Chemical Education*, 11, σσ. 4181–4189.
- Stone, J. V. (2021). *The Fourier Transform: A Tutorial Introduction*. Sebtel press.

- Stowe, R. L., & Cooper, M. (2019). Arguing from Spectroscopic Evidence. *J. Chem. Educ.*, 96 (10), σσ. 2072-2085.
- Stuart, B. H. (2004). *Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications*. John Wiley & Sons, Ltd.
- Taber, S. K. (2000). Chemistry lessons for universities? A review of constructivist ideas. *University Chemistry Education*, 4(2), σσ. 26-35.
- Venkatesh. (χ.χ.). *slideshare.net*. Ανάκτηση από Fourier Transform nuclear magnetic Resonance Instrumentation.
- Vygotsky, L. S. (1987). *Σκέψη και γλώσσα*. (Α. Ροδή, Μεταφρ.) Αθήνα: Εκδόσεις Γνώση.
- Wade G., L. (2012). *Organic Chemistry*. (Μ. Σ. ΒΡΟΝΤΕΛΗ ΑΝΑΣΤΑΣΙΑ, Μεταφρ.) Tziolas.
- Weinhold, F. (2012). *Discovering Chemistry With Natural Bond Orbitals*. Canada: John Wiley & Sons.
- Wright, L. C., & Oliver-Hoyo, M. T. (2020). Student Assumptions and Mental Models Encountered in IR Spectroscopy Instruction. *Chem. Educ. Res. Pract.*, 21 (1), σσ. 421-437.
- Βαλαβανίδης. (2008). *Βασικές Αρχές Μοριακής Φασματοσκοπίας και Εφαρμογές στην Οργανική Χημεία*. Αθήνα: Σύγχρονα Θέματα.
- Βαλαβανίδης, Α. (2006). *Φασματοσκοπία Οργανικών Ενώσεων*. Αθήνα: Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Αθηνών.
- Βλάχος, Φ. (2018). *Εγκέφαλος, Μάθηση και Ειδική Αγωγή*. Αθήνα: Εκδόσεις Gutenberg.
- Βοσνιάδου, Σ. (1992α). *Κείμενα Εξελικτικής Ψυχολογίας: Σκέψη*. Αθήνα: Εκδόσεις Gutenberg.
- Γαγάτσης, Α. (1991). *Θέματα διδακτικής των μαθηματικών*. Αθήνα: Εκδόσεις Αφοί Κυριακίδη.
- Γεροθανάσης, Ι. (2000). *Φασματοσκοπία οργανικών ενώσεων*. Αθήνα: ΦΥΕ30 Εκδόσεις ΕΑΠ.
- Γεωργιάδου, Α., & Τσαπαρλής, Γ. (1999). Διδασκαλία γυμνασιακής χημείας με μεθόδους που βασίζονται α) σε ψυχολογικές και β) στο μακροσκοπικό, το συμβολικό και το μικροσκοπικό επίπεδο της χημείας. *1ο Πανελλήνιο Συνέδριο Διδακτικής Φυσικών Επιστημών και Εφαρμογής Νέων Τεχνολογιών στην Εκπαίδευση, Βιβλίο Πρακτικών* (σσ. 65-70). Θεσσαλονίκη: Αφοί Κυριακίδη.
- Γιαννακάκη, Π. (2000). *Σχολείο για όλους και για τον καθένα*. Αθήνα: Εκδόσεις Σύγχρονη Εκπαίδευση.

- Γιαννούλης, Ν. (1993). *Διδακτική μεθοδολογία: Ψυχολογική θεμελίωση της διδασκαλίας και διαμόρφωση της διδακτικής θεωρίας στο πλαίσιο της σχολικής πράξης*. Αθήνα: Εκδόσεις Ιδιωτική.
- Δημητρόπουλος, Ε. Γ., & Καλούρη - Αντωνοπούλου, Ο. Χ. (2003). *Παιδαγωγική Ψυχολογία: Από τη θεωρία της μάθησης στην εκπαίδευση νέων και ενηλίκων*. Αθήνα: Εκδόσεις Έλλην.
- Θωμαΐδης, Ν. Ε. (2015). «Ενόργανη Ανάλυση II». (1.0). Αθήνα. Ανάκτηση από <http://opencourses.uoa.gr/courses/CHEM104>.
- Καλδούδη, Ε., & Ελευθεριάδης, Χ. (2015). *Η φυσική της Ζωής*. Αθήνα: Σ'υνδεσμος Ελληνικών Ακαδημαϊκών Βιβλιοθηκών.
- Καραγιαννοπούλου, Ε. (2007). *Για τη Μάθηση*. Αθήνα: Εκδόσεις Gutenberg.
- Καφετζόπουλος, Ε. (1995). *Εγκέφαλος, συνείδηση και συμπεριφορά*. Αθήνα: Εκδόσεις Εξάντας.
- Κόκκινος, Χ. (2001). Χημικό Εργαστήριο, Φασματοφωτομετρία UV-VIS. Ανάκτηση από <https://chimikoergastirio.blogspot.com/2008/09/uv-vis.html>
- Κόκκοτας, Π. (1989). *Διδακτική των Φυσικών Επιστημών*. Αθήνα: Εκδόσεις Γρηγόρη.
- Κόκκοτας, Π. (2008). *Διδακτική των Φυσικών Επιστημών*. Αθήνα: Εκδόσεις Γρηγόρη.
- Κολλιάδης, Ε. Α. (1997). *Θεωρίες μάθησης και εκπαιδευτική πράξη* (Τόμ. ΙΙΙ). Αθήνα: Αυτοέκδοση.
- Κονταρίδης, Δ. (2015). *Μοριακή Φασματοσκοπία*. Πάτρα: Πανεπιστήμιο Πατρών. Ανάκτηση από <https://eclass.upatras.gr/courses/CMNG2173/>
- Κουλαϊδής, Β. (2001). *Διδακτική των Φυσικών Επιστημών: αντικείμενο και αναγκαιότητα* (Τόμ. Α). Πάτρα: Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο.
- Κουλαϊδής, Β. (2007). *Σύγχρονες Διδακτικές Προσεγγίσεις για την Ανάπτυξη κριτικής - δημιουργικής σκέψης για την πρωτοβάθμια εκπαίδευση*. Αθήνα: Εκδόσεις Ο.Ε.Π.ΕΚ.
- Κουλαϊδής, Β., Δημόπουλος, Κ., Σκλαβενίτη, Σ., & Χρηστίδου, Β. (2002). *Τα κείμενα της τεχνοεπιστήμης στο δημόσιο χώρο*. Αθήνα: Μεταίχμιο.
- Κουτσουβανού, Ε. (2012). *Η Θεωρία του Piaget και παιδαγωγικές εφαρμογές στην προσχολική εκπαίδευση*. Αθήνα: Εκδόσεις Παπαζήσης.
- Κρήτης, Α. Σ. (2007). *Φασματοσκοπία IR*. Ανάκτηση από https://www.chemistry.uoc.gr/aspyros/AnalChem2/AC2_pres6.pdf
- Κρίβας, Σ. (2005). *Παιδαγωγική Επιστήμη: Βασική Θεματική*. Αθήνα: Εκδόσεις Gutenberg.
- Κώτσης, Θ. Κ. (2005). *Διδασκαλία της Φυσικής και Πείραμα*. Ιωάννινα: Εκδόσεις Πανεπιστημίου Ιωαννίνων.

- Μάνιου - Βάκαλη, Μ. (1995). *Μάθηση, Μνήμη, Λήθη*. Θεσσαλονίκη: Εκδόσεις Art of Text.
- Ματσαγγούρας, Η. (2006). *Η Εξέλιξη της Διδακτικής: Επιστημολογική θεώρηση* (4η Έκδοση εκδ.). Αθήνα: Εκδόσεις Gutenberg.
- Μαυρομούστακος, Θ., Τζάκος, Α., Γεροθανάσης, Ι., Σπυρούλιας, Γ., Μικρός, Ε., Κολοκούρης, Α., . . . Ματσούκας, Ι. (2018). *Πυρηνικός Μαγνητικός Συντονισμός*. Αθήνα, Ζωγράφου: Συμμετρία.
- Μαυρόπουλος, Α. (2004). *Στοιχεία Διδακτικής Μεθοδολογίας*. Αθήνα: Εκδόσεις Σαββάλας.
- Μπαμπλέκου, Ζ. (2007). *Η ανάπτυξη της μνήμης: Γνωστική διαδρομή στην παιδική ηλικία*. Αθήνα: Εκδόσεις Τυπωθήτω.
- Νταής, Φ. (2001). *Φασματοσκοπία*. Πάτρα: Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο.
- Παπαδογιάννης, Ι., & Σαμανίδου, Β. (2001). *Ενόργανη Χημική Ανάλυση*. Πήγασος.
- Παπανικολάου, Α. (2007). Φαινόμενα και εννοιολογικές κατασκευές. Στο Α. Παπανικολάου, *Οι Αμνησίες* (σσ. 1-35). Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
- Ραβανής, Κ. (2001). Η γνωστική σύγκρουση ως διδακτικό εργαλείο. (G. Δ. J. Bliss, Επιμ.) *Διδακτική των φυσικών επιστημών, Α*, σσ. 253-270.
- Ράπτης, Α., & Ράπτη, Α. (2003). *Μάθηση και Διδασκαλία στην Εποχή της Πληροφορίας* (Τόμ. ΙΙ). Αθήνα: Έκδοση των συγγραφέων.
- Ρέππα, Α. Α., & Ιωάννου, Ν. (2015, Σεπτέμβριος 24). *Οι ενεργητικές εκπαιδευτικές τεχνικές στη διδακτική πράξη*. Ανάκτηση από 10ο Συνέδριο Παιδαγωγικής Εταιρείας Κύπρου: http://www.pek.org.cy/Proceedings_2008/pdf/o2.pdf
- Σκουμιός, Μ. (2005). Διδακτική επεξεργασία εμποδίων για την εννοιολογική περιοχή της θερμότητας,. *Διδακτορική Διατριβή*, 941.
- Σμυρναίου, Ζ. Γ. (2010). *Εισαγωγή στη διδακτική θετικών επιστημών*. Αθήνα: Εκδόσεις Ηρόδοτος.
- Σμυρναίου, Ζ. Γ. (2010). *Εισαγωγή στη διδακτική θετικών επιστημών*. Αθήνα: Ηρόδοτος.
- Σολομωνίδου, Χ. (2012). *Νέες τάσεις στην εκπαιδευτική τεχνολογία*. Αθήνα: Εκδόσεις Μεταίχμιο.
- Σπυροπούλου-Κατσάνη, Δ. (2005). *Διδακτικές και Παιδαγωγικές Προσεγγίσεις*. Αθήνα: Τυπωθήτω.
- Τριλιανός, Θ. (2003). *Μεθοδολογία της σύγχρονης διδασκαλίας: Καινοτόμες επιστημονικές προσεγγίσεις στη διδακτική πράξη* (Τόμ. Ι). Αθήνα: Εκδόσεις Ατραπός - Περιβολάκι.
- Τσαπαρλής, Γ. (1991). *Θέματα Διδακτικής Φυσικής και Χημείας στη μέση εκπαίδευση*. Αθήνα: Εκδόσεις Γρηγόρης.

- Τσαπαρλής, Γ. (2002). *Ο Εποικοδομητισμός στη Διδασκαλία της Χημείας. Διδασκαλία των Φυσικών επιστημών* (Τόμ. III). Αθήνα: Εκδόσεις Έρευνα και Πράξη.
- Τσεκουράς, Α. (2023). *Αρχές Σύγχρονης Φυσικοχημείας*. Παπαζήση.
- Φαραντός, Κ. Σ. (1999). *Στοιχεία Φασματοσκοπίας Υπερύθρου*. Κρήτη: Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής.
- Φλουρής, Γ. (1984). *Η αρχιτεκτονική της διδασκαλίας και η διαδικασία της μάθησης*. Αθήνα: Εκδόσεις Γρηγόρης.
- Φλουρής, Γ. (2003). *Σκέψεις για την αναζήτηση ενός πλαισίου επιμόρφωσης και δια βίου μάθησης των εκπαιδευτικών στην κοινωνία της γνώσης, στο Χουρδάκης, Α., κ.α. (επιμ), 100 χρόνια από την ίδρυση του Διδασκαλείου στην Κρήτη*. Αθήνα: Εκδόσεις Ατραπός.
- Φράγκος, Χ. (1983). *Βασικές παιδαγωγικές θέσεις*. Αθήνα: Εκδόσεις Gutenberg.
- Χαραλαμπίδης, Β. (2001). *Οργάνωση της διδασκαλίας και της μάθησης Γενικά*. Αθήνα: Εκδόσεις Gutenberg.
- Χατζηγιάννου, Θ. κ. (1990). *Ενόργανη Ανάλυση*. Αθήνα.
- Χατζηνικήτα, Β., & Χρηστίδου, Β. (2001). *Πρακτικο-βιωματική γνώση μαθητών: γενικά* (Τόμ. Α). (Β. Κουλαϊδής, Επιμ.) Πάτρα: Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο.
- Χρηστίδου, Β. (2001). *Διδακτική των Φυσικών Επιστημών, Ο ρόλος των ρητορικών σχημάτων: Η μεταφορά και η αναλογία ως μηχανισμοί σκέψης και κατανόησης στις Φυσικές Επιστήμες*. (Τόμ. Β). (Β. Χατζηνικήτα, & Κ. Δημόπουλος, Επιμ.) Πάτρα: Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο.
- Χριστιάς, Ι. (2001). *Θεωρία και μεθοδολογία της διδασκαλίας*. Αθήνα: Εκδόσεις Γρηγόρης.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ



ΕΡΩΤΗΜΑΤΟΛΟΓΙΟ

«Το παρόν ερωτηματολόγιο χορηγείται στους φοιτητές του τμήματος Χημείας στα πλαίσια διεξαγωγής Μεταπτυχιακής έρευνας, η οποία σχετίζεται με τη Διδακτική και κατανόηση θεμελιωδών εννοιών Φασματοσκοπίας. Οι απαντήσεις του ερωτηματολογίου είναι ανώνυμες και θα χρησιμοποιηθούν στατιστικά για την διεξαγωγή συμπερασμάτων.»

* Οι απαντήσεις στο ερωτηματολόγιο σημειώνονται με ένα ✖ σε αυτό, που σας εκφράζει.

A. ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΦΟΙΤΗΤΗ

Φύλο: Άνδρας ☐ Γυναίκα ☐ Έτος Σπουδών:
Εργάζεστε κατά τις σπουδές: Ναι ☐ Όχι ☐ Περιστασιακά ☐

	ΟΧΙ	ΝΑΙ
Έχετε παρακολουθήσει το Μάθημα 4 ^{ου} Εξαμήνου: Οργανική III	☐	☐
Έχετε λάβει προβλεπόμενο βαθμό στο Μάθημα 4ου Εξαμήνου: Οργανική III	☐	☐
Έχετε παρακολουθήσει το Μάθημα 7 ^{ου} Εξαμήνου: Φασματοσκοπία, Φασματομετρία και Εφαρμογές	☐	☐
Έχετε λάβει προβλεπόμενο βαθμό στο Μάθημα 7ου Εξαμήνου: Φασματοσκοπία, Φασματομετρία και Εφαρμογές	☐	☐
Έχετε παρακολουθήσει το Εργαστήριο 6 ^{ου} Εξαμήνου: Οργανικής II	☐	☐

B. ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ ΓΕΝΙΚΟΥ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟΥ

- ❖ Χρόνος για κατ' οίκον μελέτη/λύση ασκήσεων, που έχετε αφιερώσει για το αντικείμενο της Φασματοσκοπίας στο μάθημα Οργανική III (4^{ου} Εξαμήνου) σε σύγκριση με τα υπόλοιπα αντικείμενα του μαθήματος:
Λίγος ☐ Αρκετός ☐ Πολύς ☐
Για ποιον λόγο;
- ❖ Αν έχετε παρακολουθήσει το μάθημα Φασματοσκοπία, Φασματομετρία και Εφαρμογές (7^{ου} Εξαμήνου): Χρόνος κατ' οίκον μελέτης / λύση ασκήσεων για εμπέδωση της ύλης: Λίγος ☐ Αρκετός ☐ Πολύς ☐
Για ποιον λόγο;
- ❖ Όταν σας δίνετε ένα φάσμα μπορείτε να κατανοήσετε εύκολα με ποια Φασματοσκοπική μέθοδο λήφθηκε:
Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐

- ❖ Σε τι βαθμό σας είναι αντιληπτές οι βασικές Έννοιες, εφαρμογές της Φασματοσκοπίας:

UV: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐
 IR: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐
 NMR: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐
 MS: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐

- ❖ Οι γνώσεις σας από τα παρακάτω μαθήματα, σε τι βαθμό θεωρείτε ότι σας καθιστούν ικανούς/ες, να κατανοήσετε διάφορες έννοιες της Φασματοσκοπίας:

Μαθήματα Οργανικής Χημείας: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐
 Αιτιολόγηση:
 Μαθήματα Ανόργανης Χημείας: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐
 Αιτιολόγηση:
 Μαθήματα Φυσικοχημείας: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐
 Αιτιολόγηση:

- ❖ Σε τι βαθμό θεωρείτε ότι έχετε αντιληφθεί τις Διαφορές μεταξύ των τεσσάρων φασματοσκοπικών μεθόδων: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐

- ❖ Ποια από τις τέσσερις Φασματοσκοπικές μεθόδους θεωρείτε ότι έχετε κατανοήσει καλύτερα: Ορατού/Υπεριώδους ☐ Υπέρυθρου ☐
 Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού ☐ ~~Φασματομετρία Μάζας~~ ☐

- ❖ Αν σας δοθούν φάσματα μίας άγνωστης ένωσης, των τεσσάρων παραπάνω Φασματοσκοπικών μεθόδων, σε τι βαθμό θεωρείτε ότι μπορείτε να αξιοποιήσετε τις πληροφορίες τους: Λίγο ☐ Αρκετά ☐ Πολύ ☐ Πάρα Πολύ ☐

Γ. ΕΡΩΤΗΣΕΙΣ ΕΙΔΙΚΟΥ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟΥ

- ❖ Τι αντιπροσωπεύει ο οριζόντιος και τι ο κάθετος άξονας των φασμάτων στις τέσσερις Φασματοσκοπικές μεθόδους;

	Οριζόντιος Άξονας	Κάθετος Άξονας
UV		
IR		
NMR		
MS		

- ❖ Σε ποιες φασματοσκοπικές μεθόδους παρατηρούμε διευρυμένες κορυφές και σε ποιες όχι; Γιατί;

UV: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 IR: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 NMR: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 MS: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐

- ❖ Ποια είναι η φυσική σημασία του κυματάρθρου (cm^{-1}), τι πλεονέκτημα παρουσιάζει έναντι της συχνότητας και σε ποια φασματοσκοπική μέθοδο χρησιμοποιείται;

	Κυματάρθρος (cm^{-1})
Φυσική Σημασία	
Πλεονέκτημα	
Μέθοδος	

- ❖ Ποια είναι η φυσική σημασία του (ppm) , τι πλεονέκτημα παρουσιάζει έναντι της συχνότητας και σε ποια φασματοσκοπική μέθοδο χρησιμοποιείται;

	(ppm)
Φυσική Σημασία	
Πλεονέκτημα	
Μέθοδος	

- ❖ Τι αντιπροσωπεύει η έννοια του Μητρικού ιόντος και σε ποια Φασματοσκοπική μέθοδο εμφανίζεται;

	Μητρικό ιόν
Έννοια	
Μέθοδος	

- ❖ Σε ποια φάσματα μπορούμε να κάνουμε ολοκλήρωση (υπολογισμό εμβαδού κορυφών);

UV: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 IR: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 NMR: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 MS: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐

- ❖ Σε ποια Φασματοσκοπική μέθοδο οι κορυφές στο φάσμα διευρύνονται, όταν συντελείται χημική ισορροπία;

UV: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐ Τι ακριβώς συμβαίνει:
 IR: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 NMR: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 MS: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐

- ❖ Τι είναι η διακριτική ικανότητα στην Φασματοσκοπία;

.....

- ❖ Ποια ή ποιες από τις παρακάτω φασματοσκοπικές μεθόδους, χαρακτηρίζονται ως υψηλής διακριτικής ικανότητας;

UV: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 IR: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 NMR: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐
 MS: ΝΑΙ ☐ ΟΧΙ ☐

THANK
YOU
😊