

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ

А.Т.Каипбергенов

д.т.н., профессор.

М.А.Нургалиева

ассистент–преподаватель

Нукусский государственный технический университет.

<https://doi.org/10.5281/zenodo.15734486>

Аннотация. В статье рассмотрены компьютерные технологии и программы, которые могут использоваться на уроках химии при решении задач. Наиболее популярными программы являются ChemDraw, ChemSketch, Marvin, Jmol, Avogadro.

Внедрение компьютерных технологий позволяет существенно повысить качество образования.

Ключевые слова: информационные-коммуникационные технологии, химическая задача, ChemDraw, ChemSketch, Marvin, Jmol, Avogadro.

XXI век - век высоких компьютерных технологий. Выпускники которого будут жить и трудиться в грядущем тысячелетии в постиндустриальном обществе, должны уметь самостоятельно, активно действовать, принимать решения, гибко адаптироваться к изменяющимся условиям жизни, обладать высоким уровнем толерантности. Одной из важнейших задач, стоящих перед образованием, является овладение информационными и телекоммуникационными технологиями для формирования обще учебных и общекультурных навыков работы с информацией.

Информационные технологии также играют все более заметную роль в организации обучения химии. Применение информационных технологий для обучения решению химических задач представляет собой один из возможных вариантов выхода из сложившейся ситуации, позволяет расширить кругозор учащихся, предоставляет новые возможности передачи информации, более широкого применения средств наглядности, диалогового режима обучения в сочетании с индивидуализацией обучения и активностью учащихся [1].

Химическая задача - это учебная задача, требующая от учащегося умений выявлять сущность химических процессов и выражать ее в виде уравнений реакций или формул, одновременно учитывать происходящие физические процессы и описывать количественную часть задачи в виде математических действий.

В настоящее время химические задачи из метода отработки умений и навыков превращаются в ведущий метод обучения. Учащийся, решающий задачу, относительно свободен в выборе способа решения, что позволяет говорить о творчестве и развитии.

Одновременно в процессе решения он усваивает новые знания, способы действий, овладевает приемами мышления [2].

Для лучшего понимания химии большое значение имеют даже простейшие вычисления, выполняемые учащимися при усвоении понятия об относительной молекулярной массе, а также расчеты, связанные с определением молекулярных масс различных веществ по химическим

формулам. Они позволяют перейти от качественных представлений о химических формулах к количественным.

Традиционные подходы в обучении решению задач на уроке предусматривают сходную последовательность действий: подготовка к усвоению нового материала, знакомство со способом решения, закрепление через упражнения, промежуточная проверка качества усвоения, решение содержательных задач на применение новых знаний и итоговая проверка с оцениванием. Такая стратегия обучения нацелена на усвоение учащимися знаний и требует большого напряжения памяти [3].

В настоящее время для решения задач по химии с использованием ИКТ существует множество программ и приложений. Они варьируются от простых инструментов для рисования химических формул до сложных симуляторов химических реакций и баз данных. Основные категории программ включают в себя инструменты для:

Моделирование молекул и химических реакций:

ChemDraw: это программный инструмент, используемый для создания, редактирования и визуализации химических структур, реакций и связанного с ними контента. ChemDraw, широко используемый химиками, исследователями и студентами, предлагает удобный интерфейс и ряд функций для рисования молекулярных структур и управления ими. Это программное обеспечение имеет решающее значение в области химии для решения таких задач, как проектирование химических соединений, иллюстрация реакций и создание химических диаграмм. Он поддерживает различные форматы файлов, включая собственный формат ChemDraw Exchange (CDX), что повышает совместимость и упрощает обмен информацией в научном сообществе [4].

ChemSketch: это многофункциональное программное обеспечение для рисования и визуализации химических структур. Программа поддерживает двух- и трехмерное моделирование молекул, автоматическую нумерацию атомов, расчет физических свойств и генерацию ИУПАК-наименований.

ChemSketch часто используется в учебных заведениях для обучения химии, так как позволяет студентам визуализировать молекулярные структуры и химические реакции, что значительно облегчает понимание материала [5].

Marvin: это комплексный набор инструментов, который широко применяется для построения, отображения и анализа молекул, химических реакций и связанных данных. Благодаря своей гибкости и мощному функционалу Marvin используется как в научных лабораториях, так и в образовательных учреждениях.

Marvin представляет собой семейство приложений и библиотек, включающих такие компоненты, как MarvinSketch (редактор химических структур), MarvinView (просмотрщик молекул) и MarvinJS (веб-версия редактора). Эти инструменты поддерживают двух- и трёхмерное моделирование, расчет физических свойств и проведение сложных химических анализов [6].

Jmol: это бесплатная, открытая программа, которая позволяет пользователям изучать трехмерные структуры химических соединений. Программа используется как в образовательных, так и в научных целях, предоставляя удобные средства для анализа и демонстрации молекулярной геометрии, связей и взаимодействий [7].

Благодаря интуитивному интерфейсу и широким возможностям визуализации, он помогает учащимся понять пространственную структуру молекул, гибкость молекулярных связей и особенности реакционных механизмов.

Avogadro: это свободное и открытое программное обеспечение, предназначенное для построения, визуализации и анализа молекулярных структур. Благодаря удобному интерфейсу и поддержке множества форматов Avogadro стал одним из наиболее популярных инструментов для студентов, исследователей и преподавателей [8].

Подводя итог, можно сказать, что молодой ученый получает в свое распоряжение мощный и универсальный инструментарий, способствующий эффективному решению широкого круга задач в области химического моделирования, не ограничиваясь при этом рамками конкретной программной платформы или формата данных. Это особенно ценно на начальных этапах научной карьеры, когда важна возможность экспериментировать с различными подходами и инструментами, не обременяя себя значительными финансовыми затратами. Более того, владение навыками работы с представленными программами станет отличным фундаментом для освоения более сложных и специализированных программных комплексов в будущем.

Литература

1. Kaipberganov A. T., Nurgaliyeva M. A. //The use of modern information technologies in teaching chemistry and chemical technology //Modern Science and Research. – 2023. – Т. 2. – №. 7. – С. 145-148.
2. А.Т.Каипбергенов., М.А.Нургалиева., “Использование информационных технологий при обучении решения задач по химии”. II Международная научная конференция «Инновационные решения актуальных проблем химической и горнодобывающей промышленности» / 2024. № 2. С 390-392.
3. Архангельская О. В. Использование универсальной газовой постоянной при решении задач // Химия в школе. 1994. - № 2. - С. 51 - 53.
4. Литвак М.М. Использование программного пакета Chem office в преподавании биоорганической химии // Фундаментальные исследования. -2008. № 4. С. 34-38
5. Ганиев Б.Ш., Холикова Г.К., Садуллаева Г.Г., Салимов Ф.Г., Аслонова Ф.С., Использование программы chemsketch в процессе изучения органической химии для повышения успеваемости учащихся // UNIVERSUM 2021№ 12 (90). С 14-17.
6. <https://chemaxon.com/products/marvin>
7. Hanson, R. M. Jmol — A Java viewer for chemical structures in 3D. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 2008, 29(1), 45–52.
8. Hanwell M.D. Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform / M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G.R. Hutchison // J. Cheminform.– 2012. – Vol. 4 (1). –P. 17.