

Елементи комп'ютерного моделювання в підготовці вчителів хімії та інформатики

Михайло Вікторович Моїсеєнко^{*}, Світлана Вікторівна Шокалюк[‡],
Наталія Володимирівна Моїсеєнко[#]

Кафедра інформатики та прикладної математики, Криворізький
державний педагогічний університет, пр. Гагаріна, 54, м. Кривий Ріг,
50086, Україна
shokalyuk15@gmail.com[‡], n_v_moiseenko@mail.ru^{*#}

Анотація. *Метою дослідження є проектування та реалізація комп'ютерно-орієнтованого навчання майбутніх учителів хімії та інформатики моделюванню об'єктів (процесів, явищ та систем) квантової механіки на другому рівні вищої освіти. Задачами дослідження є обґрунтування необхідності навчання магістрів хімії – майбутніх учителів хімії та інформатики – комп'ютерного моделювання об'єктів квантової механіки за підтримки спеціалізованого програмного засобу «Активний конструктор ієрархічних систем»; визначення змісту лабораторного практикуму з дисципліни (факультативного курсу) «Новітні інформаційні технології в наукових дослідженнях та освіті» та особливостей методики його навчання. Об'єктом дослідження є процес навчання бакалаврів та магістрів хімії – майбутніх учителів хімії та інформатики. Предметом дослідження є зміст та програмні засоби навчання комп'ютерного моделювання об'єктів квантової механіки. У роботі засвідчено необхідність навчання майбутніх учителів хімії та інформатики теорії та практики комп'ютерного моделювання об'єктів квантової механіки, подано розгорнутий зміст комп'ютерно-орієнтованого лабораторного практикуму вибіркової дисципліни (факультативного курсу) «Новітні інформаційні технології в наукових дослідженнях та освіті» для магістрів спеціальності 014 Середня освіта (Хімія), зазначено особливості методики його упровадження. Результати дослідження: узагальнення рекомендацій щодо проектування освітніх стандартів та навчальних планів підготовки магістрів за спеціальністю 014 Середня освіта (Хімія) та спеціалізацією 014 Середня освіта (Інформатика).*

Ключові слова: квантова механіка; комп'ютерне моделювання хімічних об'єктів; активний конструктор ієрархічних структур; нанотехнології.

M. V. Moiseienko^{*}, S. V. Shokaliuk[‡], N. V. Moiseienko[#]. Elements of computer modeling in training of teachers in chemistry and informatics

Abstract. The *aim* of this study is projecting and realization of computer-oriented learning of future teachers in chemistry and informatics to modeling of objects (processes, phenomena and systems) of quantum mechanics at master's degree level of higher education. *Objectives of the study* is ground of necessity of studies of master's degrees of chemistry – future teachers in chemistry and informatics – computer modeling of quantum mechanics objects supported by the specialized software tool “Active constructor of the hierarchical systems”; content determination of laboratory laboratory workshop in elective course “New information technologies in scientific researches and education” and features of methodology of its learning. The *object of research* is the learning of bachelors and master in chemistry – future teachers in chemistry and informatics. The *subject of research* is content and software learning tools of computer modeling of quantum mechanics objects. In the article is shown a necessity the detailed study future teachers in chemistry and informatics to theories and practices of computer modeling of quantum mechanics objects, the unfolded content of the computer-oriented laboratory workshop of elective course “New information technologies in scientific researches and education” for the masters in 014 Secondary education (Chemistry), the features of methodology of his realization are marked. *Results of the study* is planned to summarize for development of recommendations to planning of educational standards and curricula design for masters in 014 Secondary education (Chemistry) with specialization 014 Secondary education (Informatics).

Keywords: quantum mechanics; computer modeling of chemical objects; active constructor of hierarchical structures; nanotechnologies.

Affiliation: Department of Computer Science and Applied Mathematics, Kryvyi Rih State Pedagogical University, 54, Gagarin avenue, Kryvyi Rih, 50086, Ukraine.

E-mail: shokalyuk15@gmail.com[‡], n.v.moiseenko@gmail.com^{*#}.

Сучасна освіта вимагає використання інформаційних технологій практично на кожному занятті. Одним з напрямків такого використання є комп'ютерне моделювання різноманітних процесів у математиці, фізиці, хімії, біології, економіці, історії тощо. Упровадження елементів комп'ютерного моделювання в навчальний процес дозволяє поглибити знання учнів, навчити їх самостійному пошуку, проведенню наукових досліджень та залученню до програм МАН. Використання комп'ютерного моделювання на уроках підвищує інтерес учнів не лише до вивчення конкретних тем та розділів з даного предмету, а й до

вивчення інформатики. Учень починає бачити в комп'ютері не тільки іграшку, засіб комунікації з однолітками чи фото- та відеоальбом великого обсягу, а починає розуміти можливості цього потужного інструменту для проведення досліджень. Комп'ютерне моделювання дозволяє вивчати такі системи, які неможливо розглянути наживо чи, навіть, у мікроскоп (наприклад: атомний остов – електрон, атом, вільна молекула, молекула адсорбована на металевих електродах). Остання система є важливим елементом сучасної наноелектроніки, тому сучасний вчитель повинен володіти методами комп'ютерного моделювання і активно використовувати їх у своїй роботі. Акцентуючи увагу на вище зазначеному, слід, у процесі підготовки вчителя хімії та інформатики додати до навчального плану магістрів дисципліну або факультативний курс «Новітні інформаційні технології в наукових дослідженнях та освіті». У контенті цієї дисципліни передбачено виконання лабораторного практикуму, в основу якого покладено авторський курс, упроваджений Є. Я. Глушко та В. М. Євтеєвим [1]. Комп'ютерна підтримка курсу здійснюється програмним пакетом «Активний конструктор ієрархічних систем» (АКІС). Внесок авторів полягає у вдосконаленні елементів пакету АКІС, переробленні та доповненні змісту практикуму.

Комп'ютерний практикум має сприяти більш глибокому засвоєнню фундаментальних понять квантової теорії та набуттю навичок створення моделей атомів та одновимірних кристалів у потенціальному підході. Курс розраховано на 20 годин лабораторних занять, у кожній роботі за допомогою АКІС передбачається створення комп'ютерної моделі квантовомеханічної системи, спочатку моделі окремих атомів різної конфігурації, а далі моделі одновимірних періодичних структур. Передбачається дослідження впливу зовнішнього однорідного поля та порівняння різних моделей однакових структур. За допомогою АКІС чисельно розв'язується рівняння Шредінгера, розраховуються основні характеристики електронної структури: набір хвильових функцій, енергетичних рівнів, дисперсія енергії, щільність станів, ефективна маса.

Курс розрахований на десять лабораторних робіт, методичні вказівки до виконання яких викладено в посібнику [2]. Початкові параметри кожної моделі залежать від номеру варіанту кожного студента для забезпечення самостійного виконання робіт та запобігання плагіату. Перелік тем лабораторних робіт, що подані у курсі:

1. Дослідження умов виникнення збудженого стану в симетричній потенціальній ямі.
2. Якісне дослідження хвильових функцій станів частинки у симетричній потенціальній ямі.

3. Дослідження енергетичного спектру в симетричній потенціальній ямі при змінній висоті бар'єру.
4. Дослідження енергетичного спектру глибокої потенціальної ями.
5. Дослідження енергетичного спектру несиметричної потенціальної ями.
6. Дослідження станів у обмеженій параболічній ямі.
7. Дослідження станів частинки у зовнішньому однорідному полі.
8. Дослідження станів у обмеженому потенціалі Кроніга-Пенні.
9. Дослідження станів у одновимірному кристалі параболічних потенціальних ям.
10. Потенціал Кроніга-Пенні у зовнішньому однорідному полі.

Важливим є інтерпретація побудованих моделей, їх фізичний та хімічний зміст. Студенти переконуються, що досліджуючи одновимірні моделі, досить прості з точки зору геометрії потенціалу, можна переконатися в правильності відкритих фундаментальних закономірностей, яким підпорядковуються хімічні структури. Так, зазначений практикум й АКІС, майбутній вчитель зможе використовувати у школі для вивчення учнями відповідних тем на уроках хімії та фізики.

Список використаних джерел

1. Глушко Е. Я. Компьютерный лабораторный практикум «Основы квантовой механики твердого тела» / Е. Я. Глушко, В. Н. Евтеев. – Кривой Рог : КГПУ, 1999. – 25 с.
2. Комп'ютерний лабораторний практикум з основ квантової теорії : методичний посібник / Укл. М. В. Моїсеєнко. – Кривий Ріг : КДПУ, 2005. – 30 с.

References (translated and transliterated)

1. Glushko E. Ya. Kompyuterniy laboratorniy praktikum «Osnovy kvantovoy mehaniki tverdogo tela» [Computer laboratory workshop «Fundamentals of Quantum Mechanics of Solid State»] / E. Ya. Glushko, V. N. Evteev. – Krivoy Rog : KGPU, 1999. – 25 s. (In Russian)
2. Komp'yuterniy laboratorniy praktikum z osnov kvantovoi teorii [Computer laboratory workshop on fundamentals of quantum theory] : metodychny posibnyk / Ukl. M. V. Moiseienko. – Kryvyi Rih : KDPU, 2005. – 30 s. (In Ukrainian)