

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КРИВОРІЗЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ ПЕДАГОГІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Кафедра хімії та методики її навчання

Реєстраційний № _____

«___» _____ 20__ р.

ДИПЛОМНА РОБОТА

З ХІМІЇ

на тему: «Формування вмінь редагування хімічних формул з використанням хімічного редактора ACD/Chem Sketch при вивченні курсу ВНЗ «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів»»

студентки II курсу групи XI-м-13

факультету природознавства

напряму підготовки 6.040101 ХІМІЯ*

Сердюк Наталії Яківни

керівник: к.х.н., Селіванова Т.В.

Оцінки:

Національна шкала _____

Шкала ECTS ___ Кількість балів _____

Члени комісії:

(підпис)

(прізвище та ініціали)

(підпис)

(прізвище та ініціали)

(підпис)

(прізвище та ініціали)

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

ВНЗ – вищий навчальний заклад

КМХП – комп'ютерне моделювання хімічних процесів

КТН – комп'ютерні технології навчання

КЗН – комп'ютерні засоби навчання

ІТ – інформаційні технології

ПЗ – програмне забезпечення

ППЗ – педагогічні програмні засоби

АНС – автоматизовані навчальні системи

ІТ – інформаційні технології

БД – бази даних

ПК – персональний комп'ютер

ТЗН – технічні засоби навчання

ЕНМ – електронні навчальні матеріали

НІТ – наукові інформаційні технології

ЗМІСТ

ВСТУП.....	4
РОЗДІЛ 1. ХІМІЧНІ РЕДАКТОРИ ЯК ЗАСІБ КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ НАВЧАННЯ.....	7
1.1. Комп'ютерні технології навчання.....	8
1.2. Програмні хімічні редактори.....	19
1.3. Програма ChemSketch як сучасний комп'ютерний засіб навчання.....	28
1.3.1. Загальна характеристика програмного додатку ChemSketch.....	29
1.3.2. Особливості програми хімічного редактора ChemSketch.....	30
1.3.3. Режими роботи в хімічному редакторі ChemSketch.....	34
Висновки до розділу 1.....	44
РОЗДІЛ 2. РОЗРОБКА МЕТОДИЧНОГО КОМПЛЕКТУ ДЛЯ ВИКОНАННЯ ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ ПРИ ВИВЧЕННІ КУРСУ ВНЗ «КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ».....	47
2.1. Вивчення науково-методичних наробок з використання програми ChemSketch.....	47
2.2. Розробка методичного комплекту для лабораторних робіт при вивченні курсу ВНЗ «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів».....	49
2.3. Методика перевірки ефективності поданого методичного комплекту.....	52
Висновки до розділу 2.....	58
ВИСНОВКИ.....	60
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	63
ДОДАТОК А.....	67

ВСТУП

Створення та розвиток комп'ютерних програм дозволяють швидко та більш точно отримати певні дані та інші характеристики певних об'єктів. А якщо говорити про програмні хімічні редактори, то це не тільки економить час, а ще й дозволяє представити хімічні сполуки у різних формах та зрозуміти іноді те, що важко пояснити в звичайних лабораторних умовах. Таких програм на сьогоднішній день достатня кількість і всі вони мають певні переваги одна перед одною, але слід зауважити, що вміння користуватися ними відкриває нове бачення на хімічні сполуки.

Хімія як наука володіє досить багатю палітрою назв хімічних елементів чи сполук з префіксами, суфіксами та закінченнями, але можна ці назви представити у вигляді якоїсь структурної формули чи об'ємної моделі і зазвичай текстові процесори не можуть якісно відобразити та передати правильно суть формули. Більшість відомих хімічних редакторів дозволяють сьогодні не тільки правильно створювати формули, але й зберігати їх в різних форматах чи переносити у інші документи, що набагато спрощує роботу з ними.

При навчанні хімії, найбільш звичайним є використання комп'ютера, підкреслюючи особливості хімії як науки. Наприклад, для лабораторного використання комп'ютера в режимі інтерфейсу, моделювання хімічних процесів і явищ, комп'ютерної підтримки процесу викладу навчального матеріалу і контролю його засвоєння. Моделювання хімічних явищ і процесів на комп'ютері – необхідно, насамперед, для вивчення явищ і експериментів, що іноді неможливо показати в шкільній лабораторії, але вони можуть бути показані за допомогою комп'ютера [6].

Використання комп'ютерних моделей дозволяє більш краще дослідити істотні зв'язки досліджуваного об'єкта, глибше виявити його закономірності, що, у кінцевому рахунку, веде до кращого засвоєння матеріалу. Учень може досліджувати явище, порівнювати отримані результати, аналізувати їх,

робити висновки, змінюючи параметри. Наприклад, задаючи різні значення концентрації реагуючих речовин (у програмі, що моделює залежність швидкості хімічної реакції від різних факторів), учень може простежити за зміною обсягу газу, що виділяється, і т.д. [6].

Другий напрямок використання комп'ютера в навчанні хімії – контроль і обробка даних хімічного експерименту. Компанія IBM розробила «Персональну наукову лабораторію» (ПНЛ) – комплект комп'ютерів і програм для них, різних датчиків і лабораторного устаткування, що дозволяє проводити різні експерименти хімічного, хіміко-фізичного і хіміко-біологічного напрямку. Таке використання комп'ютера корисно тим, що прищеплює учням навички дослідницької діяльності, формує пізнавальний інтерес, підвищує мотивацію, розвиває наукове мислення [6].

Більшість хімічних редакторів, як показує аналіз вивчення таких програм, містять таблиці та інші короткі відомості щодо загальних характеристик або інших важливих аспектів при вивченні того чи іншого курсу.

Актуальність моєї теми дослідження полягає в розкритті можливостей програми хімічного редактора, розробці та представленні завдань для виконання на лабораторних заняттях з курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів».

Завдяки вільному поширенню програми для широкого кола користувачів такі редактори стали звичайними в більшості хімічних лабораторій та навчальних закладах світу.

Метою мого дослідження є виявлення можливостей програмного комплексу ACD/ChemSketch, створення та коригування формул, а також представлення завдань для самостійного виконання студентами на лабораторних заняттях.

Для досягнення мети потрібно вирішити такі **завдання**:

- провести аналіз наукової літератури з теми дослідження;
- описати програмний додаток та виявити його можливості;

- вивчити науково-методичні нароби з використання програми;
- виявити переваги та недоліки при створенні та редагуванні хімічних формул у хімічному редакторі;
- розробити методичний комплект до лабораторних робіт з курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів» для ознайомлення студентів з можливостями програмного комплексу ACD/ChemSketch;
- зробити висновки з отриманих результатів дослідження.

Об'єкт дослідження: є процес створення, побудови, моделювання молекулярних структур.

Предмет дослідження: алгоритм створення, побудови, моделювання та візуалізації молекулярних структур з використанням програми ChemSketch.

При проведенні даного дослідження були використані наступні методи:

- а) теоретичні: синтез, систематизація, узагальнення, порівняння;
- б) діагностичні: аналіз літературних джерел та науково-методичних нарбок з використанням програми (програмного пакету) ChemSketch.

Практичне значення отриманих результатів – це можливість використання методичного комплексу у педагогічній практиці ВНЗ у межах курсу «КМХП», а також при вивченні певних тем у межах курсів «органічної», «неорганічної», «фізичної» та «аналітичної» хімії.

Структура роботи: робота складається із вступу, 2-х розділів, висновків, списку використаної літератури (40), 1-го додатку.

РОЗДІЛ 1.

ХІМІЧНІ РЕДАКТОРИ ЯК ЗАСІБ КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ НАВЧАННЯ

Інформаційно-комунікаційні технології – це особлива форма набуття знань, адже, вони багатофункціональні та оперативні, доступні та продуктивні. З розвитком мультимедійних технологій з'явилась можливість супроводу процесу навчання наочними матеріалами, що в свою чергу, дозволяє подавати інформацію в лаконічній та доступній формі [1]. Наявність комп'ютерних класів, інтерактивних дощок, велика різноманітність мультимедійних посібників та сучасні методики викладання [4] дозволяють відкривати нові шляхи в розвитку мислення, надаючи нові можливості для активного й індивідуального навчання, а головне – творчої самореалізації молоді. А залучення до навчального процесу сучасних гаджетів та новітніх досягнень комунікативних технологій (інтернету, телефонії, бездротового зв'язку) занурює студентів в атмосферу, звичну для відпочинку і розваг, що підвищує емоційний фон, впевненість у своїх силах і, загалом, покращує засвоєння матеріалу.

Студентам-хімікам неодноразово доводиться у своїй діяльності використовувати певні редактори для написання формул хімічних речовин. Але, коли мова йде про велику кількість відображень формул, виникають труднощі, оскільки не всі редактори можуть правильно відобразити структуру. Таким чином, використання саме хімічних редакторів дозволяє не лише правильно зобразити структури речовин, а й скопіювати та вставити в інший хімічний чи навіть текстовий редактор. Окрім зручності, варто сказати, що моделювання чи зображення структурних формул дозволяє краще зрозуміти чи пояснити певні зв'язки та будову речовини.

На сьогоднішній день хімічних редакторів достатня кількість з різним набором інструментів та різним спектром можливостей, що дозволяє нам

обрати той, який краще підходить для виконання різних типів завдань чи навіть для конкретної галузі хімії.

1.1. Комп'ютерні технології навчання

В практиці інформаційними технологіями навчання називають всі технології, що використовують спеціальні технічні інформаційні засоби [8].

Застосування інформаційно-комунікаційних технологій в галузі освіти і безпосередньо в діяльності майбутнього викладача стає загальною необхідністю. Впровадження інформаційно-комунікаційних технологій у навчально-виховний процес забезпечить поступовий перехід освіти на новий, якісний рівень. Інформаційно-комунікаційні технології позитивно впливають на всі компоненти системи навчання: мету, зміст, методи та організаційні форми навчання, засоби навчання, що дозволяє вирішувати складні і актуальні завдання педагогіки для забезпечення розвитку інтелектуального, творчого потенціалу, аналітичного мислення та самостійності педагогічних працівників. Для ефективної модернізації освіти та оновлення технічного арсеналу засобів навчання необхідно оптимізувати реалізацію державних програм, спрямованих на інформатизацію, комп'ютеризацію та оновлення матеріально-технічної бази шкіл, надання всім вільного доступу до мережі Інтернет [22].

При використанні комп'ютерних технологій є можливість у навчальному процесі організувати безперервне і ґрунтовне засвоєння навчального матеріалу. Таким чином, за деякими даними, у навчальній практиці більше застосовують комп'ютерні технології як допоміжний засіб навчання в комплексі з іншими засобами, що значно інтенсифікує процес навчання. Але, слід пам'ятати, що для підвищення ефективності навчального процесу сучасні технічні засоби необхідно використовувати як цілісний самостійний продукт, лише в такому випадку будемо мати гарний результат.

Якщо говорити в цілому про використання комп'ютерних технологій, то слід виділити переваги і недоліки.

Серед переваг виділимо основні:

1. Можливість звернення користувача до великих обсягів інформації, розваг, ніж при використанні традиційних технологій.

2. Економія часу.

3. Більш повна реалізація творчого потенціалу користувача завдяки використанню засобів комп'ютерного зв'язку;

4. Легкий спосіб покупок (інтернет магазини).

5. За допомогою нових технологій очищується навколишнє середовище. Йде перехід від техніцизму (природа як майстерня) до екологізму (природа як храм).

6. Інтернет і соціальні мережі допомагають в спілкуванні з носіями мови.

7. Дистанційне навчання (одна з форм позакласної діяльності, що має свої переваги перед традиційним навчанням і без комп'ютерних технологій тут ніяк не обійтись, оскільки дистанційне навчання передбачає навчання на відстані саме за допомогою ІТ, при цьому його результативність може іноді перевищувати очне навчання).

Це загальні пункти, які підкреслюють важливість, зручність у використанні інформаційно-комунікативних технологій.

До мінусів відносять:

1. Вихід з ладу комп'ютерних пристроїв, зберігання інформації і інших механізмів.

2. Зараз сучасне суспільство набуває фактично повної залежності від інформаційної інфраструктури.

3. Негативний вплив на здатності граматично і синтаксично правильно висловлювати свою думку.

4. Негативний вплив на здоров'я.

Використовуючи інформаційно-комунікативні технології, треба не тільки розуміти, що вони є корисними, але й можуть привести до проблем [32].

Основним недоліком використання комп'ютерних технологій є зменшення безпосереднього спілкування учня з вчителем та з колективом, значні матеріальні затрати на комп'ютеризацію навчальних закладів. У таких навчальних закладах комп'ютери не завжди відповідають сучасним вимогам, а подекуди зовсім відсутні. Але згідно з Концепцією програми інформатизації загальноосвітніх закладів, комп'ютеризації сільських шкіл комп'ютерні технології навчання є одним із пріоритетних напрямів та головною метою Концепції, що значно покращить підготовку підростаючого покоління до повноцінної плідної життєдіяльності в інформаційному суспільстві, підвищить якість, доступність та ефективність освіти [23].

Особливості організації та методики заняття з використанням сучасних комп'ютерних технологій залежить від:

- загальної дидактичної структури заняття;
- варіанта використання ІКТ;
- обсягу делегованих комп'ютеру функцій учителя;
- виду використовуваних комп'ютерних засобів.

Реалізуючи основні принципи дидактики, комп'ютерні технології привносять в навчання і деякі нові закономірності [24].

На сучасному етапі в багатьох навчальних закладах розробляються і використовуються як окремі програмні продукти навчального призначення, так і АНС з різних навчальних дисциплін. АНС включають в себе комплекс навчально-методичних матеріалів, комп'ютерні програми, які керують процесом навчання [25].

Комп'ютерне моделювання структури хімічних речовин допомагало краще засвоїти просторову будову речовин. Так, студентам під час вивчення органічної хімії пропонувалось за допомогою програм ChemOffice зробити моделі означених речовин у 3D-форматі різними шляхами [11].

Інформаційно-комунікаційні технології навчання дозволяють інтенсифікувати навчальний процес, активізувати пізнавальний інтерес, поєднати колективні форми роботи з індивідуальним підходом, формувати

інформаційну культуру, розвивати індивідуальні здібності студентів-хіміків. Та якою не була б мета використання комп'ютерних технологій, реалізувати її можливо тільки на основі системного підходу. Систематичний підхід є методологічним принципом і на його основі ґрунтується розробка та використання комп'ютерних технологій. Наприклад, під час вивчення курсу комп'ютерної хімії нами використовувались різні засоби комп'ютерних технологій (навчальні комп'ютерні програми, мультимедійні підручники, комп'ютерні моделі хімічних речовин та динамічні комп'ютерні моделі хімічних процесів, комп'ютерні хімічні тренажери, електронні підручники, інформаційні ресурси Інтернету). Разом вони забезпечують цілісне, різнобічне засвоєння нового матеріалу [11].

Для самостійної підготовки до лабораторно-практичних занять студенти використовують інформаційні можливості наведених вище комп'ютерних засобів, мережу Інтернет та електронні підручники. Практичну підготовку забезпечують хімічні тренажери та віртуальні хімічні лабораторії. Це створило умови для реалізації індивідуального підходу, адже вдома, працюючи з комп'ютерною програмою, студент має можливість багаторазового повтору, закріплення матеріалу з послідуочим самоаналізом ефективності навчальних дій, можливість розвитку самоорганізаційних умінь. Лабораторно-практичні заняття займають вагому частину професійної підготовки майбутніх учителів хімії. І від їх якості залежить повноцінність сформованості професійної компетентності випускника. Тому, відповідно до мети окремого лабораторного заняття, необхідно застосовувати різні засоби інформаційно-комп'ютерних технологій: відеозаписи шкідливих або вибухонебезпечних хімічних реакцій, фотографії, структурні моделі будови рідкісних речовин, динамічні комп'ютерні моделі хімічних процесів, комп'ютерні тренажери, віртуальні лабораторії. Ці засоби комп'ютерних технологій забезпечили вивчення явищ і процесів у макро і мікросвіті, у складних технічних і біологічних системах. Дали змогу представляти у

зручному для вивчення масштабі часу різні фізико-хімічні процеси, які реально відбуваються з дуже великою або малою швидкістю [11].

Тому впровадження комп'ютерних технологій в навчальний процес вищої школи є необхідним і доцільним. Бо може водночас вирішувати багато проблем, які постають перед викладачем та студентом в процесі навчання.

По-перше, навчальний процес у ВНЗ побудований таким чином, що за малу кількість часу викладач повинен донести до слухачів велику кількість нової інформації, яка була б не тільки теоретичного але і фактичного плану. Використати максимум наочних посібників [12], для того щоб кожен зрозумів наданий матеріал. Ці питання вирішує використання комп'ютера в навчальному процесі. Викладач має можливість за короткий час надати великий об'єм інформації, розбитої на систематичні блоки та диференційованої за ступенями складності. Маючи мультимедійні пристрої, з'єднані з комп'ютером, лектор може відразу підтверджувати факти наочними ілюстраціями, відео фрагментами відповідних хімічних явищ чи експериментів, відтворити їх тонкі деталі. Мультимедійні підручники з комп'ютерною графікою та анімацією дають змогу поглиблено зрозуміти навчальний матеріал та розвивають у студентів образне мислення, що є однією складовою успішного засвоєння хімічних дисциплін [13].

По-друге, завжди актуальна проблема активізації пізнавального інтересу студентів до хімії. І деяким чином, це питання можна вирішити, впроваджуючи комп'ютерні технології на заняттях хімії. Використовуючи протягом лекції комп'ютерні моделі хімічних речовин, чи явищ викладач досягає ефекту присутності, що підвищує пізнавальну активність та інтерес до «хімічного світу» [14]. На думку Бородіної О.Є., комп'ютерні навчальні програми дозволяють більш раціонально поєднувати колективні форми роботи з індивідуальним підходом у навчанні. У процесі роботи активізується діяльність кожного учня, створюються передумови переходу від пасивного сприйняття до активного мислення [15]. Застосовуючи інтернет-ресурси можна задовольнити інформаційні потреби студентів.

Найсучаснішу інформацію про події на ниві хімічної науки у світі можна отримати за допомогою міжнародних пошукових систем. Також Інтернет може бути одним з засобів обміну інформації між студентами. Закордонними викладачами опробуванні методи залучення студентів до створення хімічних сайтів, це допомагає формувати інформаційну культуру, розвиває творчі здібності, активізує пізнавальний інтерес та є одним з засобів самоорганізації студентів. Але ефективність використання студентами Інтернету залежить від того, як методично забезпечений й організований навчальний процес, від майстерності педагогів [16-19].

По-третє, лабораторні заняття займають вагому частину при вивченні будь-якої хімічної дисципліни. Оснащення хімічних аудиторій не завжди дозволяє провести бажані лабораторні роботи, що вимагають більш складного устаткування. На допомогу може прийти комп'ютер, що дозволяє проводити досить складні чи нереальні в стандартних умовах досліди (досліди з вибухонебезпечними та дорогими речовинами), або надає можливість студенту самому змінювати умови експерименту та його перебіг. Комп'ютер дає змогу відразу закріпити з'ясований на лабораторному занятті матеріал на прикладі комп'ютерних експериментальних задач. Це не забирає багато часу і стає зрозумілим, як студенти засвоїли матеріал [11].

Вчетверте, у ВНЗ більшість тем курсу хімії винесено на самостійне вивчення. Найчастіше, студентам важко організувати самостійну роботу, знайти потрібний матеріал, з'ясувати головне та відокремити другорядне, зробити висновки. Завдяки комп'ютерним хімічним програмам та можливостей Інтернету ця задача спрощується. Комп'ютерні програми побудовані таким чином, що студент будь-якого рівня знань зможе розібратися з наданим матеріалом. Наявність в програмах елементів керування дозволяють переходити від одного розділу до другого, повертатися до попереднього, призупиняти динамічні моделі, в т.ч. студент має змогу вивчати тему в індивідуальному порядку [13]. Потрібно лише поставити чіткі проблемні питання і повідомити інформаційні джерела, які

суттєво допомогли б у вивченні нового матеріалу та вимоги до захисту самостійної роботи. По-п'яте, одним з головних питань в учбовому процесі є перевірка знань - екзамен чи залік. Для того щоб цей стоговий етап був менш психологічно навантаженим як для студентів так і для викладача, можна використовувати різнорівневе комп'ютерне тестування. Задана комп'ютерна програма швидко перевіряє відповіді та відразу надає інформацію про рівень знань. В контролюючих тестах необхідно передбачати неможливість переходу до іншого питання без відповіді на попереднє, а також повернення до попередніх. Це дозволить отримувати об'єктивні результати навчальних досягнень студентів, на які не впливатиме не списування, ні підказування. А також зовсім виключає таке явище, як передвзяте ставлення викладача до студентів [20].

Останнім часом в університетах широко впроваджується дистанційне навчання. І зрозуміло, що воно неможливе без використання новітніх інформаційних технологій. Дистанційне навчання – це електронний варіант очного або заочного навчання, що адаптує традиційні форми занять та паперові засоби навчання в телекомунікативні. Воно надає унікальну доступність освіти без відриву від основної роботи [21]. Одне з найактуальніших питань сьогодення, оскільки має ряд переваг і все більше впроваджується в навчальну діяльність.

Основні переваги дистанційного навчання є такі:

- гнучкість – можливість викладення матеріалу певної дисципліни з урахуванням підготовки та здібностей студентів, а це досягається створенням різних сайтів для одержання більш детальної або додаткової інформації з незрозумілих тем, а також низки питань – підказок;
- зручність – можливість навчання у зручний час, у певному місці, здобуття освіти без відриву від основної роботи, відсутність обмежень у часі для засвоєння матеріалу;

- актуальність – можливість упровадження новітніх педагогічних, психологічних, методичних розробок;
- економічна ефективність – метод навчання дешевший, ніж традиційні, завдяки ефективному використанню навчальних приміщень, полегшеному коригуванню електронних навчальних матеріалів та мультидоступу до них;
- модульність – розбиття матеріалу на окремі функціонально завершені теми, які вивчаються у міру засвоєння і відповідають здібностям окремого студента або групи загалом;
- інтерактивність – активне спілкування між студентами групи і викладачем, що значно посилює мотивацію до навчання, поліпшує засвоєння матеріалу;
- можливість одночасного використання великого обсягу навчальної інформації будь-якою кількістю студентів;
- більші можливості контролю якості навчання, які передбачають проведення дискусій, чатів, використання самоконтролю, відсутність психологічних бар'єрів;
- відсутність географічних кордонів. Різні курси можна вивчати в різних навчальних закладах світу, не перетинаючи кордони своєї країни.

Використання комп'ютерних технологій в учбовому процесі дозволяють підвищити рівень індивідуалізації навчання і як наслідок – глибину засвоєння матеріалу. Кожен студент має змогу засвоювати матеріал відповідно до своїх індивідуальних можливостей сприйняття. Але тут можуть виникнути проблеми щодо гармонійного поєднання комп'ютерного навчання з традиційним. В цьому разі педагогічні комп'ютерні засоби повинні мати кілька рівнів складності, або відрізнитися манерою надання матеріалу. При такому підході викладач може реалізувати диференційоване, різнорівневе навчання. Для того щоб вдало впроваджувати комп'ютерні технології при вивченні хімічних дисциплін, треба вирішити деякі проблеми. Аналіз існуючих моделюючих програм з хімії та інформаційних джерел

свідчать, що більша частина навчальних комп'ютерних моделей мають демонстративний характер і не інтерактивні. Відсутність інтерактивності робить неможливим реалізацію дослідницького підходу до навчання. Створені комп'ютерні моделі з хімії різнотипів та фрагментарні, що створює труднощі у використанні їх в процесі навчання [8].

Під час впровадження комп'ютерних технологій у навчальний процес враховувались такі положення:

- для формування професійних компетентностей майбутнього спеціаліста фундаментальними (базовими) є хімічні знання;
- успішне засвоєння одержаної інформації забезпечується шляхом підвищення наочності навчального матеріалу, організації самостійної роботи студентів і виконання хімічних завдань різних типів;
- ефективність застосування комп'ютерних технологій потребує системного підходу;
- в умовах кредитно-трансферної системи навчання кожна форма засвоєння знань, умінь та навичок повинна контролюватись [10].

Одним з основних напрямків роботи сучасної освіти є використання інформаційних технологій в процесі навчання [9].

Важливу роль відіграє НІТ у фундаменталізації знань, різносторонньому і ґрунтовному вивченні предметної галузі, формуванні знань, необхідних для обґрунтованого пояснення причинно-наслідкових зв'язків досліджуваних процесів і явищ, пізнанні законів реальної дійсності. Фундаментальні знання необхідні для прикладних досліджень, а потреби повсякденної виробничої практики викликають і стимулюють відповідну пізнавальну діяльність, спрямовану на розкриття законів фундаментального характеру, що є одним із аспектів гуманітаризації освіти [26].

Серед важливих компонентів комп'ютеризації навчання є розроблення програмного забезпечення. Програми, які використовують у вищих навчальних закладах, поділяють на:

- ✓ навчальні (скеровують навчання з огляду на наявні знання та індивідуальні здібності студентів, а також сприяють засвоєнню нової інформації);
- ✓ діагностичні (тестові) (призначені для діагностування, перевірки, оцінювання знань, умінь, здібностей);
- ✓ тренувальні (розраховані на повторення закріплення пройденого навчального матеріалу);
- ✓ бази даних (сховища інформації з різних галузей знань, у яких за допомогою запитів на пошук по різних об-ластях знань знаходять необхідні відомості);
- ✓ імітаційні (представляють певний аспект реальності за допомогою параметрів для вивчення його основних структурних чи функціональних характеристик);
- ✓ моделюючі (відображають основні елементи і типи функцій, моделюють певну реальність);
- ✓ програми типу «мікросвіт» (подібні до імітаційно-моделюючих, однак не відображають реальності, а створюють віртуальне навчальне середовище);
- ✓ інструментальні програмні засоби (забезпечують виконання конкретних операцій, тобто оброблення тексту, складання таблиць, редагування графічної інформації) [26].

Електронні навчальні матеріали формують інформаційне наповнення навчального предмета. До цих матеріалів належать:

- електронні підручники та матеріали лекцій;
- електронні методичні розробки до семінарів, практичних і лабораторних занять;
- бази даних і знань (закони, картографічні дані, міжнародні стандарти та системи тощо);
- засоби для набуття практичних навичок (віртуальні та дистанційні лабораторії, практикуми, комп'ютерні тренажери).

Комп'ютерні тестові системи надають інструментарій для:

- потокового та рубіжного контролю результатів засвоєння матеріалу (атестації, колоквиуми, заліки, іспити);
- проведення контрольних робіт за матеріалами лекцій і семінарів;
- контролю підготовки до лабораторних і практичних занять;
- самоконтролю знань в інтерактивному режимі;
- визначення рейтингу студентів.

Системи управління навчанням призначені для організації навчального процесу, а саме:

- проведення навчально-адміністративної роботи (створення навчальних груп, організація розкладу занять і навчальних планів);
- надання контрольованого доступу до навчальних матеріалів;
- організації колективної й індивідуальної роботи студентів і викладача.

Кожна з цих категорій засобів може застосовуватися окремо. Наприклад, маючи CD-копію електронного підручника, студент користується нею без застосування комп'ютерної тестової системи й системи управління навчанням [29].

Комп'ютерні технології навчання є інструментом, який дає змогу викладачу якісно змінити методи, а також організаційні форми своєї роботи і на цій основі розвивати індивідуальні здібності студентів, спонукати кожного гармонізувати притаманні йому особистісні якості; концентрувати основну увагу на формуванні пізнавальних здібностей, на ефективній навчальній діяльності; підтримувати і розвивати прагнення до самовдосконалення; посилювати міждисциплінарні зв'язки у навчанні, комплексність вивчення явищ дійсності, забезпечувати нерозривні взаємозв'язки між природознавством і технікою, гуманітарними науками і мистецтвом; здійснювати постійне динамічне оновлення навчального процесу, його форм і методів, забезпечувати дебюрократизацію навчальних закладів, їх постійну адаптацію до змінних зовнішніх умов і контингенту студентів тощо [26].

Впровадження в навчальний процес інформаційних технологій супроводжується збільшенням обсягів самостійної роботи студентів, що потребує постійної підтримки навчального процесу з боку викладачів. Важлива роль належить консультаціям, які ускладнюються з погляду дидактичних цілей: вони зберігаються як самостійні форми організації навчального процесу і водночас є елементами інших форм навчальної діяльності (лекції, практики, семінари, лабораторні практикуми) [26].

Таким чином, викладач, який знаходиться в постійному творчому пошуку, випробовує сучасні технології навчання, тримає студентів у постійному інформаційному потоці, створює умови для усвідомленого прагнення в майбутній професійній діяльності застосовувати комп'ютерну техніку, заохочує їх до дослідницької роботи, самозростання, вдосконалення професійних здібностей та вмінь, розвитку ефективної стратегії мислення [26].

Психологи та методисти, які проводять дослідження процесів комп'ютеризації освіти, констатують, що в процесі спілкування учня (або студента) із засобами нових інформаційних технологій і, зокрема, при роботі з комп'ютерною програмою, а також у процесі так званої «екранної творчості» слухач часто підміняє об'єкти реального світу або моделями, зображеннями цих об'єктів, або символами, які позначають об'єкти або відношення між ними, при цьому сприйняття слухачем реального світу підміняється опосередкованим сприйняттям останнього, що часто призводить до втрати предметності діяльності, до відірваності від дійсності. Крім того, робота за комп'ютером пов'язана з високим емоційним напруженням, яке не завжди і не кожному може бути корисним [27].

Досвід використання інформаційних технологій в процесі викладання хімічних дисциплін свідчить про появу нових можливостей, які не досягаються іншими традиційними засобами. Проте, комп'ютер є і залишиться лише базою даних і не може замінити собою викладача [10].

1.2. Програмні хімічні редактори

Як зазначає доктор технічних наук, професор, академік НАПНУ В.Ю. Биков, на основі поєднання традиційних педагогічних та інформаційно-комунікаційних технологій навчання вдається значно ефективніше розвинути і примножити природні задатки і здібності людини. Використання цих технологій у процесі навчання, на його думку, створює додаткові умови і спричинює появу нових цілей та оновлення змісту освіти, а також дає змогу досягнути значно більших результатів навчальної діяльності, забезпечити для кожного учня формування і розвиток їхньої власної освітньої траєкторії [33].

І продовжуючи говорити про розвиток ІКТ та запровадження і використання, треба сказати, що на сьогоднішній день є достатня кількість програм для створення та редагування хімічних формул або взагалі для хімії.

Прийнято вважати, що хімічні редактори - це програми для опису і редагування хімічних формул та візуалізації тривимірних моделей молекул.

Основні функції хімічних редакторів:

- Опис та редагування структурних формул речовин;
- Генерування систематичних назв речовин;
- Генерування структурної формули за кодами SMILES, InChiKey і навпаки;
- Обчислення деяких властивостей структури;
- Перегляд тривимірної моделі структури;
- Визначення за тривимірною моделлю структури деяких геометричних параметрів молекули, наприклад, довжини зв'язку, кута між зв'язками тощо;
- Створення і редагування векторних графічних зображень.

Як і будь-яке інше програмне забезпечення, хімічні редактори розповсюджуються як на платній основі (комерційні), так і безкоштовно.

До комерційних хімічних редакторів відносять: ChemOffice Ultra, ChemWindow, ChemDraw Pro, ChemPen, а до вільно поширюваних – ISIS Draw, MarvinBeans, пакет ACD/Labs.

Ознайомившись з різними хімічними програмами та їх можливостями, фактично можна поділити на дві великі групи:

- I. хімічні програми для школи (прості у використанні та призначенні для виконання простих розрахунків);
- II. хімічні програми для ВНЗ (мають більш широкі можливості, ніж хімічні програми для школи та дозволяють окрім розрахунку різних констант, кутів та інших характеристик, зображати та представляти у 2Д та 3Д моделях структури хімічних речовини.

До першої групи слід віднести найпоширеніші такі хімічні програми:

Table – програма, яка вміє розраховувати ступінь окислення елемента в з'єднанні, кількість речовини, вирішувати шкільні завдання, зрівнювати хімічні реакції і т.д. Інформація про кожен елемент, також показує ряд активності металів, краща з кращих, на мій погляд, для школярів. Утиліта також має в собі цілий список допоміжних функцій, в цьому числі будова графіків за властивостями хімічних елементів, вміння відображати ряд хімічної активності металів, опис періодичної системи в більше 20 різних видах, засіб для перекладу температур з однієї шкали в інші і багато іншого і корисного.

Електронна Таблиця Менделєєва - програма, яка дає вичерпну інформацію про кожен елемент (в тому числі про лантаноїди і актиноїди). Зручно організований пошук елементів. Також є зручний список елементів з можливістю сортування.

Тут все дуже зрозуміло і доступно. У Вашому розпорядженні будуть підручник, довідник і різноманітні відеоматеріали. Крім самої періодичної таблиці і назв елементів, тут наводиться більше 30 цікавих фактів про походження певного джерела що звичайно ж дозволяє краще пізнати їх, провести деякі асоціації і звичайно ж запам'ятати.

Щоб перевірити, як Ви засвоїли матеріал, скористайтеся розділом тестів: визначте назву елемента по символу і навпаки, а також вкажіть номер

елемента, знаючи його назву і символ. Повірте, якщо у Вас були проблеми з хімією і періодичної таблиці Менделєєва, то тепер Ви про них забудете.

Хімік – урівнювач реакцій. Легко зрівнює хімічні реакції будь-якої складності.

Молекулярна маса – обчислення молекулярної маси речовини за його структурної формулою.

Period3D – програма з хімії, що має вигляд таблиці Менделєєва. Інформація за основними елементами. Обчислення різних параметрів (маса речовини і т.д.).

Для школярів такі програми можна використовувати як для зацікавлення так і для кращого розуміння та запам'ятовування. Вичерпна інформація про кожен елемент (крім лантаноїдів і актиноїдів), а також різні хімічні обчислення, такі як обчислення маси і об'єму речовин. Плюс до всього програму має зручний інтерфейс і можливість міняти скіни, які можна зробити самим.

Для інших людей, хто працює в області хімії є ряд зручних і гарних програм, з них слід виділити:

Accelrys Software – компанія-розробник різноманітного програмного забезпечення для хіміків (Accord Cheminformatics, Materials Studio, Discovery Studio, QUANTA, CNX і ін.). розробка комерційних програмних продуктів для інтеграції, досліджень, аналізу та моделювання, управління та звернення до баз даних. Програма візуалізації Discovery Studio має академічну безкоштовну версію.

ACD Labs – велика кількість простих і складних програм, що використовуються в різноманітних областях хімії, спектроскопії. Сюди ж входить і хімічний редактор ChemSketch, який доволі розповсюджений та використовується і в шому ВНЗ у курсі «КМХП». ACD/Labs пропонує оптимізаційні інструменти для синтетичної хімії, агрохімії і хімії ліків, фокусуються на досягненні бажаних молекулярних властивостей, відштовхуючись від неоптимізованих молекул.

AIM2000 – програма для візуалізації атомів в молекулах. Програма розроблена Фрідріхом Біглером-Кенігом та Йенсом Шенбомом.

Asad – програмний пакет для створення просторових хімічних моделей. Рішення рівнянь реакцій [28].

Atoms, Symbols and Equations – інтерактивне мультимедійне посібник з хімії, спеціально розроблене для використання в класі, але також відповідне і для самостійного вивчення. Дозволяє засвоїти базові знання з хімії: поняття атома, елемента, хімічного зв'язку, рівняння та ін.

Cambridge Soft – світовий лідер в розробці програм для хімічного моделювання та аналізу. ChemOffice, ChemDraw - відомі продукти компанії - для вчених, що використовують хімічні дані в своїй роботі. CambridgeSoft ChemOffice Ultra 2008 v11.0 пакет хімічних додатків, для проектування і роботи з базами даних і хімічної документацією.

CaRIne Crystallography – програма CaRIne Crystallography призначена для візуалізації та аналізу кристалічних структур. Кристалографічне програмне забезпечення, яке було розроблено з 1989 року і яке використовується тисячами людей у всьому світі для викладання, дослідження та видання, тепер доступний у повністю переосмисленій версії.

Перша частина цієї нової версії 4.0 зосереджена на 3D моделюванні елементарних комірок, кристалів, поверхонь, меж зерен та інтерфейсів [28].

ChemBioDraw Ultra – одна з популярних програм, що створена спеціально для побудови структурних формул органічних і неорганічних речовин, окрім цього, містить побудовану таблицю Менделєєва. Саме ця програма дозволяє створювати розраховані спектри ядерного магнітного резонансу і протонного магнітного резонансу для різних речовин, а також генерувати назви речовин за їх структурними формулами. Містить велику базу шаблонів хімічних структур.

Chem-It – у програмі Chem-It зібраний ряд утиліт, які будуть корисні студентам, що вивчають хімію. Тут ви знайдете: найбільш часто використовувані константи, конвертер величин, інтерактивну таблицю

елементів з докладною інформацією для кожного елемента, а також калькулятор мас і багато іншого.

Chemcaster – веб-додаток Chemcaster призначене для зберігання даних про хімічні речовини, їх структури [28].

ChemCraft – графічна програма для конструювання молекул і візуалізації квантовохімічних розрахунків (GAMESS, Gaussian). В основному програма розроблена як засіб візуалізації вихідних файлів GAMESS. Програма написана в середовищі розробки Delphi. Chemcraft є лише сервісною програмою, яка не виконує власні розрахунки, але здатна значно полегшити використання стандартних квантовохімічних пакетів.

ChemPen – програма для створення структурних формул речовин. Формули можна копіювати в буфер обміну, а потім вставляти до документів Microsoft Word або PowerPoint.

ChemFinderUltra – програма, що призначена для перегляду і створення бази даних хімічних властивостей речовин.

Основні можливості програми:

-відображення 3-вимірних зображень молекул по декартовим координатам атомів, з можливістю перегляду або модифікації будь-якого геометричного параметра в молекулі (відстані, кут);

-візуалізація розрахункових файлів GAMESS і гаусів, включаючи просмотр окремих геометрій з файлу (оптимізована структура, геометрія окремих кроків оптимізації та ін.),

-анімація мода ваг, графічне подання градієнта енергії, візуалізація молекулярних орбіт в вигляді ізоферментів, відображення графіки конверсії ССП та ін. ;

-різні засоби для конструювання молекул і модифікацій молекулярної геометрії: використання стандартного набору молекулярних фрагментів, "перетасування" атомів або фрагментів за допомогою миші, надавання молекулі необхідної симетрії та інші можливості;

-отримання якісних 32-бітних зображень молекул у різних графічних стилях.

Chemical Reagent Calculator – програма Chemical Reagent Calculator від австралійської компанії 3Z Software призначена для виконання розрахунків для приготування розчинів речовин певної концентрації.

ChemInform Saint-Petersburg (CISP) Ltd – компанія CISP з Санкт-Петербурга займається розробкою програмного забезпечення для хімічної інженерії та оцінки небезпеки реакцій.

Chemistry-baikal – все що Ви хотіли б знати про енергію хімічного зв'язку. На сайті розміщений хімічний онлайн калькулятор, що зв'язує частоти валентних коливань ковалентних зв'язків з їх енергією і меж'ядерних відстанню. Простота і точність розрахунків знаходиться в недосяжному як для будь-якої іншої квантово-хімічної програми.

CHEMIX School – навчальний посібник з хімії. В пакет також входять кілька розрахункових модулів, словник і інтерактивна таблиця Менделєєва. Включені деякі розділи з програми по хімії ВНЗ, зокрема термохімія, електрохімія, спектроскопія та ін. [28].

ChemOffice Ultra 2005 - пакет програм для малювання, моделювання, створення та керування базами даних хімічної і біологічної інформації.

До складу пакету входять наступні модулі:

- ChemDraw Ultra 9.0 - малювання хімічних формул;
- Chem3D Ultra 9.0 - моделювання молекул;
- BioAssay Ultra 9.0 - менеджер даних біологічних експериментів;
- ChemFinder Ultra 9.0 - менеджер баз даних хімічної інформації;
- E-Notebook Ultra 9.0 - ведення електронного лабораторного журналу;
- Inventory 9.0 - інструмент керування даними за допомогою MSDE.

XDrawChem - це безкоштовна програма для складання хімічних структурних формул, доступних для Windows, Unix та Mac OS.

Основні характеристики:

- Фіксована довжина і фіксований кут малюнка

- Виявлення структур, тексту та стріл і їх автоматичне розміщення
- Можна автоматично намалювати кільця та інші структури - має всі стандартні амінокислоти та нуклеїнові кислоти у вбудованій бібліотеці.
- Завантаження структур з мережевої бази даних на основі CAS-номера, формули або назви
- Витяг інформації на молекулу на основі креслення
- Символи, такі як частковий заряд і радикали
- Читання MDL Molfiles, CML (хімічна мова розмітки), бінарний формат ChemDraw, текстовий формат ChemDraw
- Інтеграція з OpenBabel, що дозволяє XDrawChem читати та записувати більше 20 різних форматів хімічних файлів.
- Експорт зображень у портативну мережеву графіку (PNG), растровий файл Windows, інкапсульований PostScript (EPS) та масштабовану векторну графіку (SVG).
- Створення 3D-структури за допомогою зовнішньої програми BUILD3D
- Прості спектральні прогнози, в тому числі ^{13}C -ЯМР, ^1H -ЯМР (на основі аддитивних правил та методів пошуку функціональних груп).

AutoNom – хімічний редактор, що використовується для знаходження назв різних хімічних сполук, а також ISIS Draw 2.5-графічний редактор, чудовий і абсолютно вільний для приватного користування. Вимагає реєстрацію.

HyperChem - комплексний програмний продукт, призначений для завдань квантово-механічного моделювання атомних структур. Він включає в себе програми, що реалізують методи молекулярної механіки, квантової хімії та молекулярної динаміки. Силкові поля, які можуть використовуватися в HyperChem - це MM + (на базі MM2), Amber, OPLS і BIO + (на базі CHARMM). Дозволяє проводити напівемпіричні розрахунки: розширений метод Хюккеля, CNDO, INDO, MINDO / 3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO / 1, ZINDO/S. Представлені неемпіричні методи розрахунку і методи функціонала щільності.

Sparky – для аналізу спектрів ДНК і протеїнів, з вільною реєстрацією, мультиплатформенний та багато інших різних хімічних програм, які надають різні можливості.

Програма ChemWindow (версія 6.0) створена для відтворення хімічних структур. Власником прав на цю програму є відома фірма Bio-Rad Laboratories, яка придбала їх свого часу у фірми SoftShell, що була розробником перших версій програми. Незважаючи на те, що 6 версія програми ChemWindow, не остання випущена версія, проте, саме ця версія є найпопулярнішою і поширеною серед користувачів-хіміків. І дійсно, низькі вимоги до системних параметрам комп'ютера, стійка робота під усіма версіями операційної системи Windows, і, найголовніше, - необхідний і достатній набір інструментів і функцій, який влаштовує більшість хіміків [31].

Avogadro - вільний просунутий молекулярний редактор, розроблений для використання поперечної платформи з обчислювальної хімії, молекулярного моделювання, біоінформатики, науки матеріалів, і пов'язаних областей, має ручний інтерфейс, простий у вивченні.

Окрім перелічених вище, є ряд онлайн хімічних редакторів, які дозволяють користуватися різними функціями з метою написання, редагування та завантаження вже готових чи написаних хімічних структур.

Проаналізувавши наявну інформацію про хімічні редактори, можна розподілити їх [7] на три напрями:

- 1) комп'ютерне моделювання хімічних процесів і явищ, які майже неможливо провести в реальній лабораторії;
- 2) для обробки результатів аналізу, а також їх контролю;
- 3) програмна підтримка певної дисципліни. Оскільки, як вже було оголошено, більшість хімічних редакторів містять також таблиці чи інші допоміжні матеріали з хімії.

Окрім відомих хімічних програм, деякі ВНЗ впроваджують хімічні програми власної розробки, які можна поділити за призначенням на такі:

- навчально-контролюючі та тестові (60%);
- для підготування та проведення лабораторних робіт (28%);
- навчальні для самостійної роботи студентів (6%);
- ігрові (6%) [7].

Програма має також онлайн версію та дозволяє всім учням і професорам отримати легкий та швидкий доступ до наших хімічних баз даних та прогнозних програм.

Онлайн-доступ до: ЯМР прогнозування та БД; фізико-хімічні прогнози та БД рка, LogP, LogD, водна розчинність, температура кипіння і тиску пари, коефіцієнт адсорбції та біоконцентраційний фактор та ін.

На сьогоднішній день область науки, що носить назву «комп'ютерна хімія», не обмежується тільки квантово-хімічними розрахунками і включає широкий спектр теоретичних методів, в тому числі різні емпіричні та напівемпіричні методи розрахунку фізико-хімічних властивостей речовини, а також моделювання статистичних характеристик і динаміки хімічних процесів.

1.3. Програма ChemSketch як сучасний комп'ютерний засіб навчання

Advanced ChemSketch Development Inc. - це канадська компанія, що розробила програмне забезпечення ACD/Labs для вчених і фахівців в області хімічних, біохімічних і фармацевтичних досліджень заснована випускниками Московського державного університету. Область діяльності компанії лежить у створенні програм для рутинної роботи. Основна розробка здійснюється в Москві, Вільнюсі та Мінську. Глибоке розуміння хімії та програмного забезпечення було використано для створення більш ніж 100 комерційних комп'ютерних програм, багато з яких були нагороджені престижними нагородами та визнаними галузевими стандартами. Аналіз передбачення властивостей і управління вже отриманими результатами спектроскопічних, хроматографічних і інших методів інструментального аналізу хімічних речовин. Ці програми успішно використовуються у проведенні передових

хімічних досліджень у більш ніж 600 хімічних, фармацевтичних та біотехнологічних компаніях, а також у більш ніж 650 академічних інститутах та університетах по всьому світі. Також програмний комплекс ACD/Labs відомий завдяки можливості передбачати такі фізико-хімічні властивості, як рKa і LogD і вмінню генерувати назви речовини в різних видах номенклатур.

Пакет ACD/Labs складається з двох автономних, але взаємопов'язаних програм:

- ❖ ACD/ChemSketch - молекулярний редактор двовимірних хімічних структур і графічний редактор,
- ❖ ACD/3D Viewer - програма моделювання і візуалізації тривимірних структур.
- ❖ додаткові модулі— модулі для розширення можливостей використання ACD/Chem Sketch (деякі з них потрібно купити окремо).

1.3.1. Загальна характеристика програмного додатку ChemSketch

Крім створення структур "з нуля", в ньому є можливість використання досить об'ємною бібліотеки готових формул. Надає редактор і деякі можливості отримання інформації про речовини. Оформлення документів ChemSketch можна істотно доповнити графічними об'єктами, написами. За допомогою спеціальної програми створені в ChemSketch структури можна представити у вигляді наочних моделей.

ACD / ChemSketch це пакет для зображення:

- ✓ Хімічних структур
- ✓ Хімічних реакцій
- ✓ Схематичних діаграм
- ✓ Створення звітів і презентацій пов'язаних з хімією

ACD / ChemSketch Chemsketch працює з векторною графікою, також тут підтримуються вимоги основних наукових журналів. В програмне забезпечення для ведення бази даних інтегровані всі аспекти хімії, що дозволяє організувати організоване в електронному вигляді і управляти сотнями і тисячами структур і реакцій, створювати 2D баркоди структур,

групувати і аналізувати найрізноманітніші хімічні дані. Хімічний редактор включає можливості генерації хімічних імен відповідно до номенклатури IUPAC та InChI кодів для комерційного використання. Містить ACD/Dictionary - унікальну бібліотеку 29 000 часто вживаних хімічних і біологічних молекул з більш ніж 158 000 тривіальних, торгових та систематичних назв.

Програма має свої можливості, що робить її унікальною:

- Швидке створення нескладних структурних формул органічних речовин;
- Створення хімічних формул речовин на основі лінійних кодів InChI SMILES;
- Створення схем реакцій;
- Проведення пошуку хімічних структур в файлах різного формату через комп'ютерну файлову систему;
- Швидке перетворення 2D-структурного ескізу в 3D-модель з оптимізацією геометрії методом MM;
- Вільне обертання в площині і 3D-обертання моделей;
- Швидкий розрахунок молекулярної маси і елементного складу структури або структурного фрагмента;
- Швидка оцінка макроскопічних властивостей - молекулярної рефракції, молярного об'єму, щільності і т.д. ;
- Проведення повного або часткового структурного пошуку;
- Експорт створених файлів в PDF-формат, HTML-формат.

1.3.2. Особливості програми хімічного редактора ChemSketch

Хімічний редактор ChemSketch з пакету програм ACD/Labs за функціональними можливостями не поступається редактору ChemDraw і навіть де в чому його перевершує. Важливо й те, що документи, створені за допомогою ChemSketch, займають невеликий обсяг - всього кілька кілобайт. Цей хімічний редактор більш орієнтований на роботу з органічними формулами середнього рівня складності (є велика бібліотека готових

формул), але в ньому зручно складати також хімічні формули неорганічних речовин. З його допомогою можна оптимізувати молекули в тривимірному просторі, обчислювати відстані та валентні кути між атомами в молекулярній структурі і багато іншого [30].

Створення складних формул і малюнків полегшується наявністю альбому шаблонів формул і малюнків, який може поповнюватися користувачем. Створені за допомогою редактора об'єкти можуть бути збережені, роздруковані, а також скопійовані в WORD і інші додатки, що значно полегшує роботу із структурними формулами хімічних речовин [30].

Робоче вікно програми містить рядок Меню і дві панелі інструментів (частина команд і кнопок будуть доступні, тільки коли ви почнете створювати формулу):

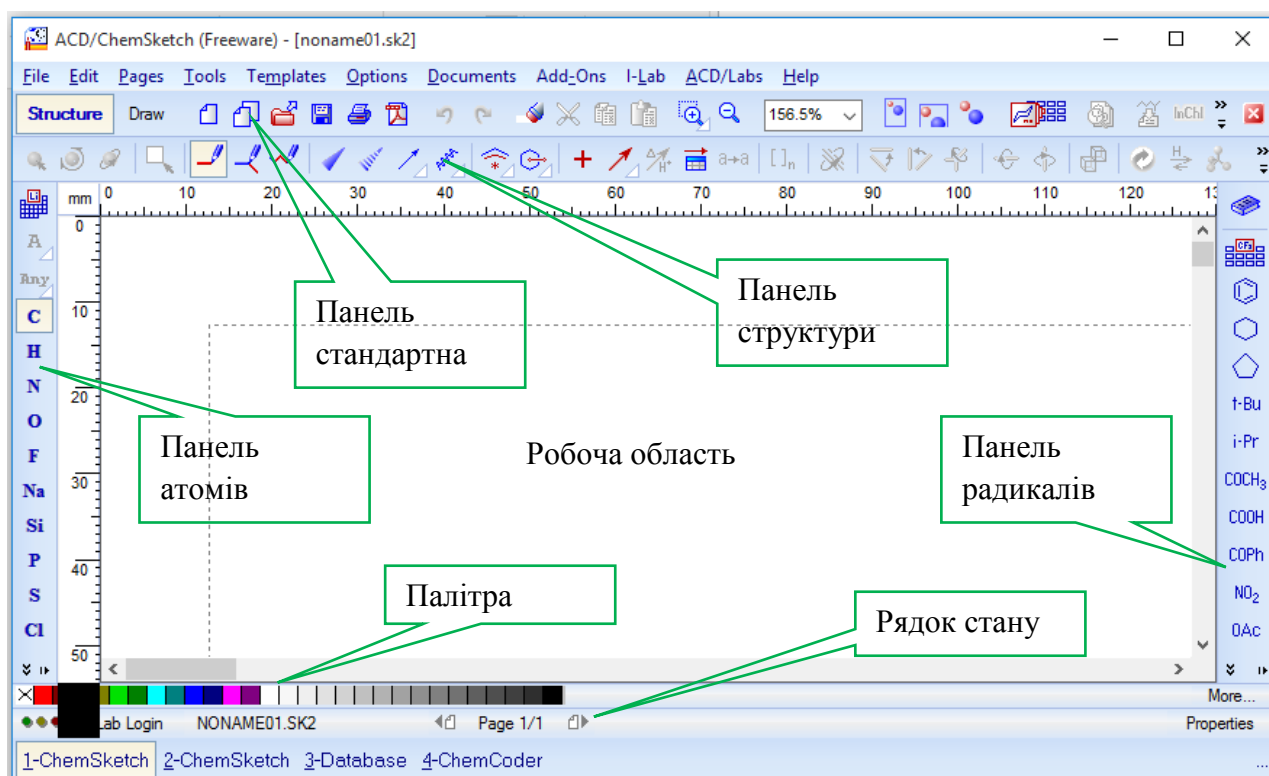


Рис.1.1. Вікно програми ChemSketch

Панель інструментів Стандартна, розташована нижче панелі Меню, містить кнопки, які допоможуть вам швидко виконати такі звичні команди, як збереження і відкриття файлів, скасування і повтор дії, видалення, вирізання і копіювання фрагмента, масштабування, а також ряд специфічних

команд. На цій панелі знаходяться також кнопки Structure-Draw для перемикання режиму роботи редактора.

Робоча область є заготовкою сторінки. Документ ChemSketch складається з однієї або декількох сторінок, які можна створювати, копіювати, видаляти, використовуючи команди меню Pages. Так, команда меню Pages-New додає нову сторінку в документ. У рядку стану вказується загальна кількість сторінок, номер робочої сторінки, і є кнопки для переходу зі сторінки на сторінку.

Під робочою областю розташована Палітра кольорів, і рядок стану, що містить довідкову інформацію: назва створеного (редагованого) файлу, номер сторінки в файлі, число хімічних структур в робочій області, молекулярну формулу і масу виділеного фрагмента структури [30].

Декілька вчителів, які працювали з програмою ChemSketch, запропонували підказки, які стануть у нагоді тим, хто бажає розібратись в її можливостях:

- Для того, щоб створити нову сторінку потрібно обрати пункт меню Pages → New.
- Створення структури проводиться в режимі Structure (а не Draw) - див. У другій сходинці верхнього меню, зліва. Режим Draw призначений для роботи з зображенням як з малюнком, а не як зі структурною схемою сполук.
- Щоб перетворити одинарну зв'язок в подвійну, клацніть по цій зв'язку; такі клацання повернуть її в одинарну. Для зміни типу атома (наприклад С на N) досить просто вибрати новий тип з панелі зліва і клацнути по об'єкту зміни. Уважно вивчивши панель, подібним же чином можна змінити заряд і інші властивості атома.
- Для малювання структурної формули обирають інструмент Draw normal (5а зліва кнопка в третьому рядку верхнього меню).
- Атоми вибираються з лівого меню (і вставляються клацанням миші), зв'язку простягаються при утриманні лівої кнопки миші.

- Для встановлення заряду служить інструмент Increment Charge - передостання кнопка знизу в лівому меню. Перемикання "+" на "-" і навпаки виконується в підміню, що викликається клацанням по білому куточка.
- Активно користуйтеся заготовками, список заготовок можна викликати, натиснувши клавішу F5.
- Для копіювання малюнка виберіть інструмент Select / Move (крайня ліва кнопка в третьому рядку верхнього меню), обведіть малюнок прямокутником, далі - звичайні <Ctrl + C>, <Ctrl + V>.
- Виділені частини малюнка, наприклад, атоми, можна пересувати. При цьому будуть також пересуватися асоційовані з цим атомом хімічні зв'язки. Відповідно, при видаленні атома зникають всі асоційовані з ним зв'язку.
- Заміна зв'язку на символи "зв'язок виходить над площиною малюнка" і "зв'язок йде під площину малюнка" - за допомогою відповідних інструментів з верхнього меню, третій рядок.
- Для внесення підписів виберіть режим Draw (а не Structure). У лівому меню, третя кнопка знизу, знайдете інструмент, що дозволяє створити вікно для тексту.
- Для внесення самого тексту виберіть інструмент Edit text - 4-а кнопка зліва в третьому рядку верхнього меню.
- Зображення копіюється в інші програми Windows звичайним способом (виділення → <Ctrl + C> → <Ctrl + V>). Не забувайте писати заголовки документа і підписувати картинку.
- Для зображення реакції використовуються знаки "+" і "=>" (знайдіть відповідні інструменти в меню і поставте потрібні знаки в робоче поле).
- Для об'єднання двох амінокислот в дипептид досить перетягнути мишкою атом азоту однієї на атом кисню інший.

- Якщо опція Clean Structure погано працює (або не працює) на трипептиди, можна спробувати спочатку привести структуру дипептида до традиційного виду - атоми N-C_α-C-N-C_α-C-N-C_α-C йдуть зигзагом (після цього, можливо, і Clean Structure спрацює).
- Для фарбування об'єкта (атома або зв'язку) належить спочатку виділити їх (інструмент Select / Move) в остові пептиду. Виділяти об'єкти можна як одночасно групою (оточуючи їх прямокутником або ласо), так і по одному (утримуючи Shift, виділяти їх все по одному). Нові версії програми дозволяють задавати різні властивості для об'єктів виділеного діапазону, розділяючи їх за типами (наприклад, для атомів і зв'язків або ж по-різному налаштовувати уявлення одинарних / подвійних зв'язків або атомів різного типу). Подвійне клацання по виділеному об'єкту призводить до появи вікна «Properties» в якому можна задати необхідні властивості.

1.3.3. Режими роботи в хімічному редакторі ChemSketch

ChemSketch працює в двох режимах:

- Structure (Структура) - молекулярний редактор; зображувані атоми і хімічні зв'язки є елементами хімічної структури і мають відповідні властивості;
- Draw (Малювати) - графічний редактор; всі зображувані елементи є частинами звичайного малюнка.

Для перемикання між режимами служать кнопки Structure і Draw:

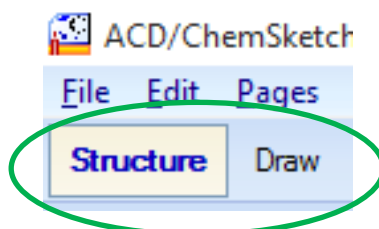


Рис.1.2. Режими роботи в хімічному редакторі ChemSketch

Перемикання також відбувається при натисканні клавіші "пробіл".

Програма за замовчуванням завантажується в режимі Structure.

Робота в режимі Structure

В основній своїй частині інтерфейс ChemSketch стандартний для такого роду програм.

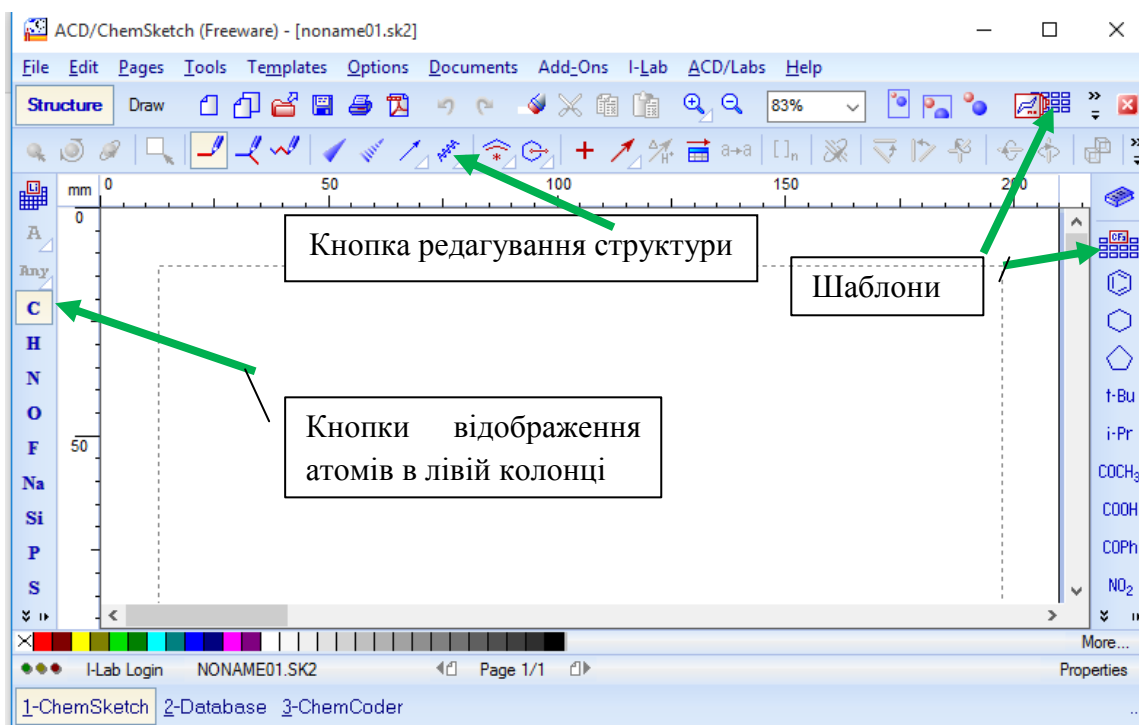


Рис.1.3. Вікно програми ChemSketch в режимі Structure

При завантаженні ChemSketch за замовчуванням включаються кнопки:

- C "атом вуглецю"
- "Звичайне малювання" (Draw Normal).

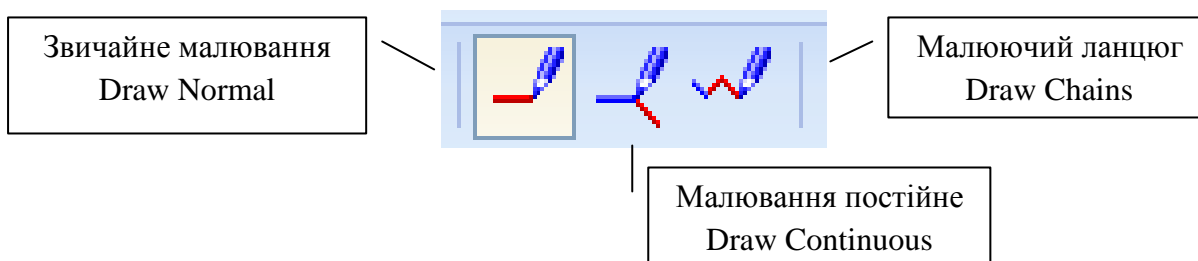


Рис.1.4. Інструменти малювання

Виконання основних операцій при кнопці Draw Normal:

- Додати зв'язок в стандартному напрямку - клацнути по атому.
- Додати зв'язок в заданому напрямку – клацнути по атому і, не відпускаючи клавішу мишки, пересунути курсор в потрібному напрямку.
- Намалювати зв'язок між наявними атомами - клацнути по першому атому і, не відпускаючи клавішу мишки, тягнути зв'язок до другого атому.

- Змінити порядок зв'язку - клацнути по зв'язку.

Дія кнопки Draw Continuous аналогічне крім того, що:

- при першому натисканні на атом, він виділяється, а додавання зв'язку відбувається при другому натисканні.

Draw Chains = "Малювати ланцюг":

- клацнути по атому і тягнути ланцюг в потрібному напрямку на потрібну довжину.



- кнопка "Періодична таблиця":

- Якщо в колонці відсутня кнопка будь-якої хімічного елемента, її додають з Періодичної системи.
- Кнопка залишається на панелі протягом роботи в хімічному редакторі.
- Щоб під час роботи видалити таку кнопку, слід двічі клацнути на панелі і потім в вікні, що з'явилося, підтвердити видалення.

Кнопки виділення.

Програма містить 4 кнопки для виділення структури або її частини і подальшої маніпуляції з виділеним об'єктом.

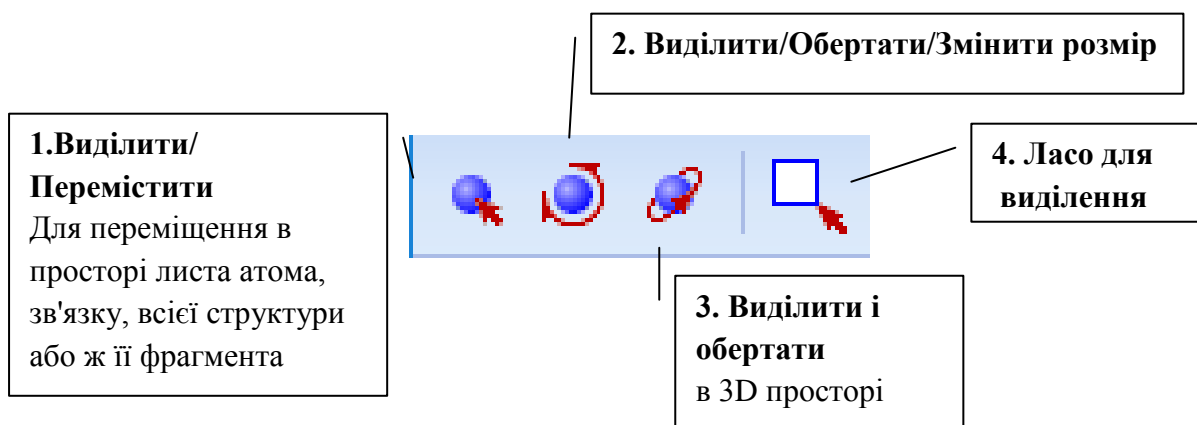
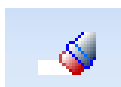


Рис.1.5. Кнопки виділення в хімічному редакторі ChemSketch

Особливістю кнопок 2, 3, 4 є те, що процес проводиться в дві стадії:

- при виділенні об'єкта в вузлах (на атомах, в центрах зв'язків) з'являються маленькі білі квадратики,

- для маніпуляції з виділеним об'єктом необхідно встановити курсор на будь-який з цих квадратиків, і якщо вони зафарбовуються в чорний колір, можна виконувати відповідну дію.



- Стерти – Delete (видалення атома або зв'язку):

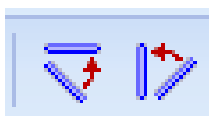
- Натиснути кнопку "Видалити" (зверніть увагу, що змінюється форма курсора), потім клацнути по атому або зв'язку. Атом видаляється з усіма його зв'язками.



Рис. 1.6. Кнопки для зміни зовнішнього вигляду структури



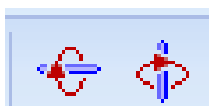
- для зміни положення атомів Гідрогену, для зміни виду подвійного зв'язку потрібно при натиснутій кнопці натискати на зв'язок або на групу CH_n .



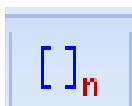
- для розгортання структур у площині листа так, щоб зазначений зв'язок виявився горизонтально або вертикально, при натисканні відповідної кнопки слід натиснути на цей зв'язок.



- обертання на 180° навколо зв'язку - при натисненні кнопки слід натиснути відповідний зв'язок.



- обертання на 180° по осі x і y – натиснути на одну з цих кнопок.



"Полімер" - для укладання в дужки ланки полімеру. При натисканні на кнопку "Полімер" з'являється віконце, в якому слід вибрати параметри:

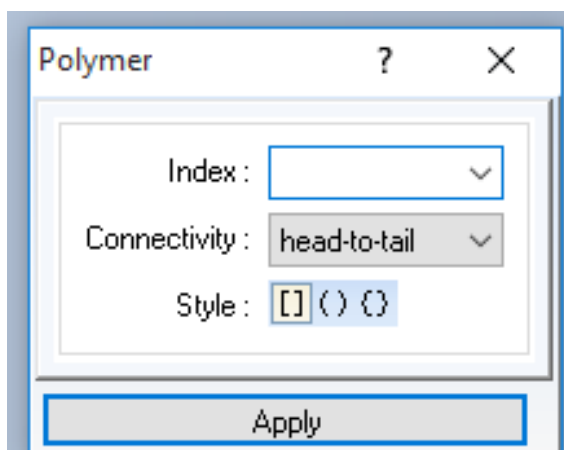


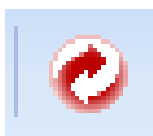
Рис.1.7. Вікно кнопки «Полімер»

Index - число полімеризації,
Connectivity - порядок з'єднання
мономерних ланок:

- "Голова до хвоста" (head-to-tail),
- "Голова до голови" (head-to-head),
- "Будь-яке" (either / unknown).

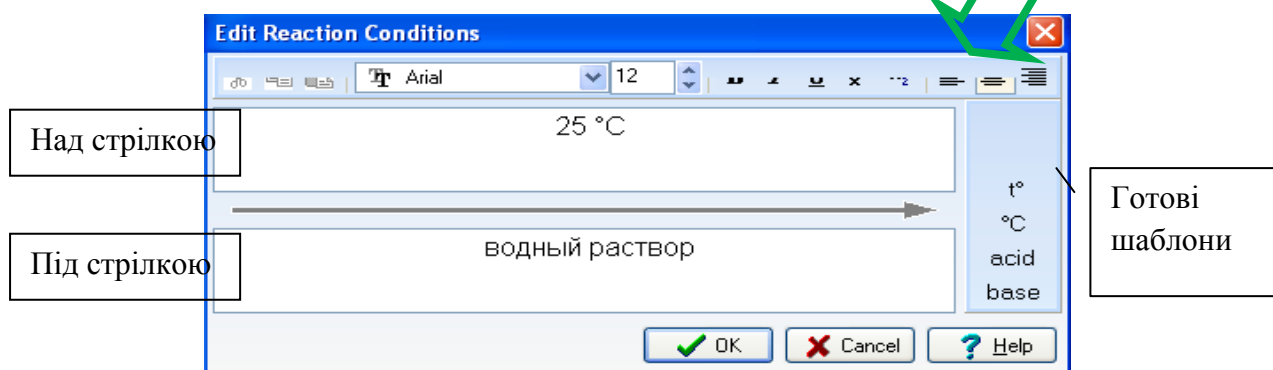
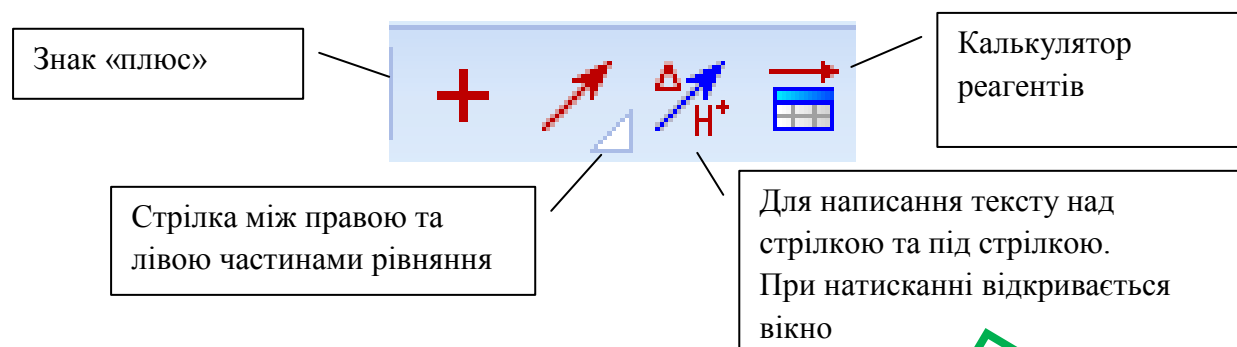
Style - вид дужок.

Після натискання кнопки «Apply» слід клацнути по лівій межі ланки ланцюга і, не відпускаючи клавіші мишки, пересунути курсор на праву межу ланки.



- підчистка структури - Clean Structure: кнопка дозволяє "підчистити структуру" - стандартизувати довжини зв'язків і кути між зв'язками і зробити її зовні акуратною.

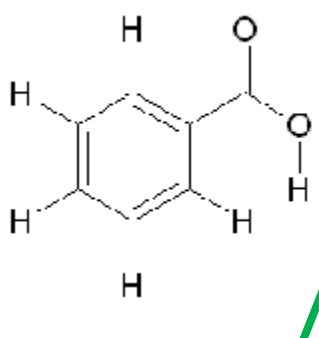
Блок кнопок для написання рівнянь хімічних реакцій



Корисні команди в меню. Розділ Tools.

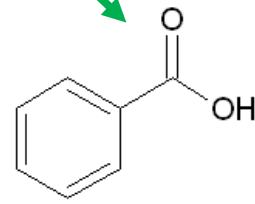
На екрані можна показувати або приховувати ті атоми водню, які насичують вільні валентності (Explicit Hydrogens).

Показувати атоми
водню



Tools	Templates	Options	Documents	Add-Or
Structure Properties				Alt+Shift+S
Clean Structure				F9
Check Automeric Forms				Ctrl+Shift+T
3D Structure Optimization				Ctrl+Shift+3
MassSpec Scissors				
Show Aromaticity				Ctrl+Shift+A
Hide Aromaticity				Ctrl+Shift+H
Expand Shorthand Formulae				Ctrl+Shift+F
Add Explicit Hydrogens				Ctrl+Shift+Y
Remove Explicit Hydrogens				Ctrl+Shift+R
Bring Bond(s) to Front				Ctrl+F
Send Bond(s) to Back				Ctrl+K
Auto Renumbering				Ctrl+Shift+N
Clear Numbering				Ctrl+Shift+L
Generate				▶
Search for Structure...				Ctrl+Shift+C
Calculate				▶

Не показувати
атомів водню



Name for Structure Ctrl+Shift+I

Stereo Descriptors

Stereo Descriptors Options...

SMILES Notation

Structure from SMILES

InChI for Structure

InChI Options...

Structure from InChI

програма вміє
розраховувати
фізико-хімічні
параметри
речовини.

Molecular Formula

Formula Weight

Composition

Molar Refractivity

Molar Volume

Parachor

Index of Refraction

Surface Tension

Density

Dielectric Constant

Polarizability

Monoisotopic Mass

Nominal Mass

Average Mass

M+

M-

[M+H]+

[M+H]-

[M-H]+

[M-H]-

All Properties

Select Properties to Calculate...

Selected Properties

програма вміє генерувати систематичну назву, R/S-стереодискриптори, коди SMILES і InChI, а також генерувати структурні формули за відомими кодами SMILES і InChI.

Ще декілька корисних кнопок:



- кнопка, що дублює команду Name for Structure



- Check for Tautomeric Forms - генерування стійких таутомерних форм.



- 3D Optimization - Генерування тривимірної структури. Перед початком процесу генерування програма може запитати, чи слід прибрати атоми водню (тимчасово). Слід погоджуватися - це помітно прискорює процес.



- MassSpec Scissors – розрахунок молекулярної маси осколків, які можуть утворитися в маспектрометричному експерименті.

Якщо виділити фрагмент молекули і натиснути цю кнопку, програма підрахує молекулярні маси можливих осколків. Ця операція корисна при інтерпретації маспектра.



- Calculate LogP - Розрахунок теоретичного значення LogP.



- Кнопки для переходу в БД PubChem, eMolecules, ChemSpider. Зображена структура використовується як запит в тих БД.



- кнопка завантажує ACD/3D Viewer - програму роботи з тривимірними структурами.

Робота в режимі Draw

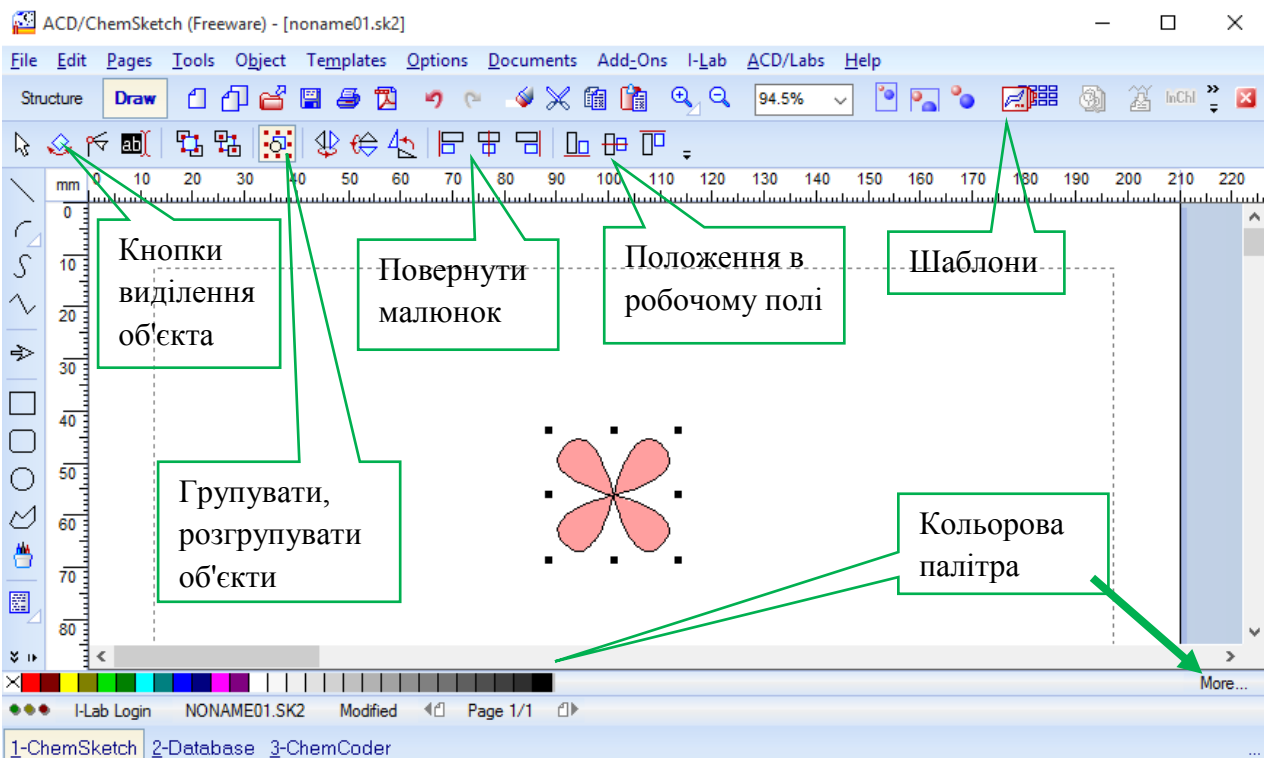


Рис.1.8. Вікно програми ChemSketch в режимі Draw

У лівій колонці розміщені кнопки з функціями, звичайними для графічних редакторів.



- кнопка для малювання ламаних кривих.

Клацнути на початку лінії, перенести курсор і далі в точках перелому слід зробити клацання лівою кlawішею мишки, в кінцевій точці - клацання правою кlawішею.

У горизонтальному ряду зверху знаходяться кнопки управління, в тому числі:



- виділити, перемістити, змінити розмір.



- Виділити, обертати на площині листа.

Виділення декількох об'єктів - утримуючи кlawішу Shift.

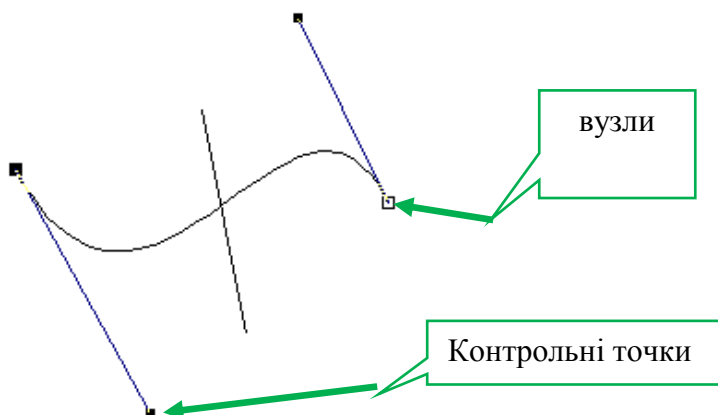
Виділення всіх об'єктів - Ctrl + A.




- кнопка для переміщення вузлів і контрольних точок кривих і ламаних ліній.

Вузли - кінці сегментів кривих або відрізків прямих. При натисканні на вузол з'являється відрізок дотичної з розташованими на ньому контрольними точками.

Переміщаючи контрольну точку, змінюють кут нахилу кривої.



При активації кнопки  на панелі з'являються додаткові кнопки, призначені для редагування ліній, що мають вузли:



- з'єднати прямою лінією кінцеві вузли виділеної кривої,



- видалити сегмент між виділеними вузлами,



- додати сегмент між виділеними вузлами,



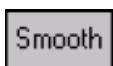
- видалити виділені вузли,



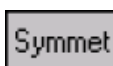
- перетворити виділену криву або сегмент в пряму,



- перетворити виділену пряму в криву,



- згладити лінію в точці перелому,



- зробити два сегмента симетричними щодо вузла.



- друкувати і редагувати текст.

Отже, розглянувши можливості хімічного редактора ChemSketch, можна сміливо сказати, що вміння користуватися нею відкриє можливості

для побудови, редагування та копіювання громістких структурних формул, а також дозволить швидше виконати певні розрахунки, більш краще зрозуміти певні характеристики або будову хімічної сполуки. Програма працює в двох режимах, що з одного боку є досить зручним. Впровадження для виконання завдань з тої чи іншої хімічної дисципліни дає очікувані результати та виправдовує свою характеристику.

Висновок до розділу 1

"Технології - це всього лише інструмент" – так говорив Білл Гейтс, засновник корпорації Microsoft. Але всі ми точно знаємо, що саме за допомогою цих технологій ми маємо змогу краще, глибше, ширше та швидше вивчити даний процес чи речовину. І ці ж технології ми активно використовуємо як на уроках так і на парах зі студентами. Чому? Тому, що технології дають можливість користуватися різними зручними програмами. Особливо в наш час, стрімкого розвитку ІТ-технологій можна знайти достатню кількість тих програм, які можуть слугувати зручним інструментом у нашій діяльності, а також економією часу і т.д.

Популярність використання і запровадження комп'ютерної техніки, а точніше програм, зростає з кожним роком і якщо взяти ще й розвиток науки, то це не тільки зручність та економія часу, але й більш глибоке розуміння деяких характеристик певної речовини, наприклад. Окрім цього, слід зауважити, що молоде покоління краще засвоює матеріал з використанням ІТ, що дає гарний результат у подальшому навчанні.

Хімія не є виключенням з правила, коли мова йде про застосування інформаційні технології, тому, маючи велику кількість хімічних програм, їх активно використовують у діяльності. Одні хімічні програми є більш відомими, інші мають певні переваги над іншими, але для певної області хімії та для певної роботи є свої програми. Таким чином, ми маємо декілька класифікацій хімічних програм, одна з яких поділ за призначенням та складністю:

- ✓ хімічні програми для вивчення основ хімії
- ✓ хімічні програми для дослідження певних характеристик та властивостей різних хімічних речовин.

Тому, слід не тільки про них знати, але й вміти користуватися, тим паче, тим людям, які працюють з молодим поколінням або ж зі складними дослідженнями в цій галузі.

ChemSketch – один з розповсюджених хімічних редакторів, який відомий як в вітчизняних так і зарубіжних університетах та який надає багато можливостей при вивченні різних тем з хімії. Має певні переваги перед іншими хімічними редакторами, оскільки окрім різних характеристик є можливість копіювати структурні формули хімічних речовин в іншому форматі, наприклад, текстовому, що є важливим в деяких випадках. Також потрібно звернути увагу на додаткові модулі, які можна придбати і окремо, вони слугують для розширення можливостей програми і можуть використовуватись як при створенні структурних формул хімічної речовини так і для розрахунку певної характеристики. Програма з іноземним інтерфейсом, але на сьогоднішній день є в наявності навіть русифікатор для програми, що значно полегшує роботу деяким людям, хто погано розуміє англійську мову. Вивчаючи різні теми з окремих галузей хімії треба зазначити, що цей редактор може використовуватись і при вивченні тем з органічної хімії, аналітичної, фізичної тощо.

Ознайомившись з хімічним редактором ChemSketch ближче треба сказати, що окрім перелічених переваг є можливість працювати в двох режимах, що значно спрощує роботу при виконанні різних завдань. Саме такі програми слід використовувати активніше при вивченні хімії. Оскільки, на мою думку, це не лише дає змогу зображувати структурні формули речовин, але й розуміти як і чому можуть відбуватися певні процеси або ж пояснювати властивості хімічних речовини, що є важливим для хіміка. Складні органічні формули досить трудомісткі в малюванні їх звичайними методами WORD, хоча й такі текстові редактори мають широкі можливості і можуть використовуватись при написанні формул, але не структурних.

Для вирішення цього завдання створено спеціальні хімічні редактори. Вони розрізняються по спеціалізації і своїми можливостями, за ступенем складності інтерфейсу і роботи в них і т.д.

Отже, якщо поєднати вміння користуватися певною хімічною програмою та самою програмою, то в результаті окрім низки наведених вище

переваг, отримаємо гарний результат нашої діяльності, а в цьому зацікавлені як студенти, учні так і вчителі, викладачі та батьки.

РОЗДІЛ 2.

РОЗРОБКА МЕТОДИЧНОГО КОМПЛЕКТУ ДЛЯ ЛАБОРАТОРНИХ РОБІТ ПРИ ВИВЧЕННІ КУРСУ ВНЗ «КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ»

На лабораторних заняттях з курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів» студентам пропонується як ознайомлення з програмою так і виконання простих і складних завдань. Це означає, що при розв'язку тої чи іншої задачі або завдання можна дізнатися декілька характеристик структури деякої хімічної речовини. Тому, ознайомившись із хімічним редактором та його властивостями, можна запропонувати для виконання різні типи завдань з певних тем.

2.1. Вивчення науково-методичних наробок з використання програми ChemSketch

Проаналізувавши науково-методичні та періодичні джерела, які присвячені даній темі, можна зробити висновки, що програма ChemSketch широко розповсюджена.

Було проаналізовано:

1) Методичні джерела, присвячені ознайомленню з програмою та як інструкція до програми ChemSketch (наприклад, Шабаршин В.М., Мазур В. А. Интерфейс и функции специализированного химического редактора ACD/CHEMSKETCH та інші). Такі інструкції містять детальну інформацію, приклади як виконати стандартні завдання, скріншоти самої програми та її можливостей тощо. Представлений матеріал можна проаналізувати та структурувати для ознайомлення при використанні програми або ж для лекційного матеріалу, а також наголошення на основних моментах для студентів або для тих, хто буде використовувати програму у своїх цілях.

2) Розробки уроків з періодичного джерела «Хімія в школі» деяких авторів з різним тем (наприклад, Малеева З.Ф. Обобщающий урок по теме «Азотсодержащие органические соединения»). Цю програму багато

вчителів пропонують використовувати у школі і самі активно запроваджують знайомство та використання на уроках, особливо з органічної хімії при вивченні класів органічних сполук з громісткими структурними формулами. Наведені розробки уроків містять також завдання для виконання у хімічному редакторі ChemSketch, таким чином, учні ознайомлені з програмою та її можливостями вже у школі. Деякі вчителі пропонують як факультативне заняття ознайомлення з хімічними редакторами.

3) Розробки доступних лекцій в мережі Інтернет з різних тем з хімії. Різні викладачі багатьох університетів, включаючи як вітчизняних так і зарубіжних країн, активно пропонують ознайомлення та використання хімічного редактора при вивченні деяких галузей хімії в різних цілях. Особливою популярністю користується серед викладачів і студентів у Росії та Америці.

Бажано б звернути увагу, на такі лекції, які містять приклади моделювання хімічних структур та опис панелі меню, інструментів та принципи роботи в хімічних редакторах. Зазвичай, окрім огляду програми, розглядають і загальні питання щодо функцій хімічних редакторів, таких понять як «плагін», «авторське право» тощо.

4) Приклади різних завдань вітчизняних університетів для виконання в хімічному редакторі ChemSketch. Розробки уроків різних рівнів з деяких тем в області хімії представлені Московським університетом, Петербурзьким університетом, а також Харківським інститутом.

5) Книга «Комп'ютерна хімія» авторів М.Е. Соловйова та М.М. Соловйова, яка досить детально ознайомлює з хімічними редакторами, в тому числі і з хімічним редактором ChemSketch. Рекомендована студентам викладачам і містить теоретичну і практичну частину, візуалізацію моделей, розрахунок залежності хімічних сполук, квантово-хімічні розрахунки, набір прикладів за розрахунковими методами. Користується популярністю серед студентів-хіміків та викладачів, оскільки поданий

матеріал є доступним та містить опис з прикладами, що значно полегшує розуміння важливих аспектів.

Проаналізовані матеріали дають право впевнено стверджувати, що даний хімічний редактор користується популярністю і для роботи в ньому слід розробити завдання до лабораторних робіт у ВНЗ з курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів», але можна і не тільки для цього курсу, але й при вивченні різних тем з таких областей хімії як органічна, фізична хімія, біологічна, аналітична тощо.

Завдання в переважній кількості носять навчальний характер, що свідчить про застосування вмінь на практиці.

2.2. Розробка методичного комплекту для лабораторних робіт при вивченні курсу ВНЗ «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів»

За результатами дослідження нами було розроблено методичний комплект (Див. Додаток-вкладка) для виконання лабораторних робіт в курсі ВНЗ «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів» з використанням програми ChemSketch.

Методичний комплект було складено на основі тематичного планування курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів» (таб. 2.1) та рекомендовано для студентів, що навчаються за освітньо кваліфікаційним рівнем "бакалавр", природничого напрямку освіти у педагогічних вузах.

Розробка представляє собою опис лабораторних робіт з використанням програми ChemSketch, яка є хімічним редактором для створення, редагування, копіювання та зберігання в різних форматах структурних формул хімічних сполук, а також дає можливість розраховувати фізико-хімічні параметри речовини та містить контрольні запитання для перевірки знань та виявлення незрозумілих аспектів.

У таблиці 2.1. наведено фрагмент тематичного плану з темами лабораторних робіт.

Фрагмент тематичного плану

Змістовний модуль			
№	Теми	Кількість годин лабораторних робіт	Кількість годин лекцій
1.	Знайомство з програмою	1	2
2.	Знайомство з інтерфейсом програми	1	-
3.	Робота в режимі Structure	1	--
4.	Робота в режимі Draw	1	-
Всього		4	2

Даний методичний комплект спрямований на вироблення у студентів навичок володіння спеціалізованим хімічним програмним забезпеченням, на прикладі програми ChemSketch, і застосування його в навчальній практиці та самостійній роботі.

В результаті освоєння змістовного модуля «Створення та редагування структурних хімічних формул з використанням програми ChemSketch» дисципліни «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів» студенти повинні володіти професійними компетенціями:

1. Вміти логічно, вірно, аргументовано і зрозуміло будувати усну і письмову мову.

2. Використовувати основні закони природничих дисциплін у професійній діяльності, застосовувати методи математичного аналізу та моделювання, теоретичного і експериментального дослідження.

3. Вміти працювати з комп'ютером на рівні користувача та застосовувати навички роботи з комп'ютерами як у соціальній сфері, так і в області пізнавальної і професійної діяльності.

4. Володіти основними методами, способами і засобами отримання, зберігання, обробки інформації, мати навички роботи з комп'ютером як засобом управління інформацією.

5. Розуміти сутність і соціальну значущість професії, основних перспектив і проблем, що визначають конкретну галузь діяльності.

6. Володіти основами теорії фундаментальних розділів хімії (насамперед неорганічної, аналітичної, органічної, фізичної, хімії високомолекулярних сполук, хімії біологічних об'єктів, хімічної технології)

7. Здатність застосовувати основні закони хімії при обговоренні отриманих результатів, в тому числі із залученням інформаційних баз даних.

8. Володіти методами відбору матеріалу для теоретичних занять і лабораторних робіт.

9. Здатність підбору інструментальної бази для вирішення поставлених прикладних завдань.

В результаті освоєння дисципліни студенти повинні:

Знати: основи створення і редагування структурних формул хімічних сполук за допомогою програми ChemSketch.

Вміти: використовувати персональний комп'ютер для виконання поставлених завдань, моделювати структури молекул, обирати потрібну інформацію та аналізувати її.

Володіти: програмним забезпеченням для створення і редагування структурних формул хімічних сполук.

Контроль засвоєння змістовного модулю «Створення та редагування структурних хімічних формул з використанням програми ChemSketch» студентами здійснюється на основі рейтингової системи оцінки якості навчальної діяльності студентів і включає: контроль поточної успішності (відвідування занять і виконання лабораторних робіт) і заключний контроль у вигляді письмової роботи (самостійної або контрольної).

У розробленому методичному комплекті представлено 4 лабораторних роботи з наступних тем:

1. Знайомство з програмою ChemSketch.
2. Знайомство з інтерфейсом програми ChemSketch.
3. Робота в режимі Structure
4. Робота в режимі Draw

Перші дві лабораторні роботи розраховані на детальне ознайомлення з програмою ChemSketch та її інтерфейсом і можливостями. У комплекті представлено детальний опис програми і переклад всього меню з англійської мови на українську для полегшення користування даною програмою і виконання поставлених задач. Також, тут представлені найкоротші альтернативні шляхи користування функціями програми.

Третя лабораторна робота ознайомлює користувачів з режимом роботи Structure, в якій будуються структурні формули хімічних речовин. Тут представлений алгоритм створення структурної формули хімічної речовини за детально описаним алгоритмом, а також дає можливість формувати навички роботи у хімічному редакторі.

Четверта лабораторна робота дозволяє відкрити можливості режиму роботи Draw – графічного редактора з інструментами для роботи з векторними зображеннями, які розглядаються як сукупність кривих.

Після кожної лабораторної роботи подані контрольні запитання, що дозволить студентам перевірити себе.

Отже, представлений комплект стане у нагоді для викладачів і студентів для лабораторних робіт при вивченні тем з хімічної дисципліни «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів», а також інших дисциплін.

2.3. Методика перевірки ефективності поданого методичного комплексу

Для того, щоб переконатися у ефективності та доступності подання матеріалу проводять певні дослідження і роблять висновки. Для мене важливо, щоб розроблений методичний комплект не тільки існував, а ще активно використовувався студентами, адже, при вивченні деяких хімічних дисциплін використовується лише доступні для розуміння посібники.

Метод анкетування було запропоновано для перевірки ефективності розробленого методичного комплексу.

Анкетне опитування – це метод педагогічного дослідження при використанні анкет [34].

Анкета – представляє собою набір завдань, впорядкованих за змістом та формою і поданих у вигляді опитувального листа.

Анкетування застосовується для збирання первинних даних. Зміст запитань і спосіб відповідей на них заздалегідь плануються.

Надійність даних анкетного опитування залежить від таких умов:

- ◆ відповідності запитань програмі дослідження, його завданням;
- ◆ вилучення «зайвих» та відбору необхідних запитань;
- ◆ дотримання правил розвитку теми: на початку – прості запитання, що стосуються подій і фактів; далі – складніші запитання (думки, оцінки); ще далі – найбільш складні (вибір рішень, відповіді у вільній формі); під кінець – знову прості запитання про демографічні дані;
- ◆ ясності формулювання запитань, їх однозначності;
- ◆ чіткості варіантів відповідей (у закритих запитаннях);
- ◆ достатнього простору для відповідей на відкриті запитання;
- ◆ однозначності всіх елементів вибору в часі, частоті подій, згоди чи незгоди («так» чи «ні») із запропонованими варіантами відповідей;
- ◆ відсутності будь-яких натяків на бажану відповідь;
- ◆ наявності контрольних запитань;
- ◆ наявності комбінацій прямих та опосередкованих, особистих і неособистих запитань [34].

Запропоновані запитання анкети містили відкриту та закриту форму опитування за своєю структурою. Закриті запитання анкети містили набір можливих варіантів відповідей, відкриті – це питання, на які опитуваному пропонується дати самостійну відповідь (респондент висловлює власну думку).

Анкетування проводилось після вивчення модуля «Створення та редагування структурних хімічних формул з використанням програми ChemSketch».

Використавши даний метод, ми ставили за мету проаналізувати, наскільки студентам було складно освоїти хімічний редактор та використовуючи комп'ютерну програму, виконувати запропоновані завдання в ній.

Анкета містить наступні запитання:

1. Наскільки логічно і послідовно було викладено матеріал вивченої теми?

Відзначте на шкалі від 1 до 10.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
---	---	---	---	---	---	---	---	---	----

2. Оцініть насиченість лабораторного заняття новою інформацією:

- а) Висока;
- б) Середня;
- в) Низька.

3. Наскільки складно Вам було сприймати матеріал?

- а) Легко, але виникали певні труднощі;
- б) Зрозуміло на достатньому рівні;
- в) Важко.

4. Чи вважаєте Ви, що застосування комп'ютерних програм при вивченні хімії дає можливість поглибити знання?

- а) Так;
- б) Ні;
- в) Інколи.

Власна відповідь: _____.

5. Чи зрозуміла Вам програма ChemSketch?

- а) Так;
- б) Ні;
- в) Виникають труднощі у її користуванні.

Власна відповідь: _____.

6. Чи зможете Ви застосувати отримані знання у своїй професії?

- а) Так;
- б) Ні;
- в) Можливо.

Опитуваних було 12 студентів природничого факультету III курсу групи XI-16.

Проаналізувавши отримані відповіді на питання анкети після вивчення модуля «Створення та редагування структурних хімічних формул з використанням програми ChemSketch», було отримано наступні результати:

- ✓ матеріал теми було викладено логічно і послідовно – 87% на 10 по шкалі і 13% на оцінку 9;
- ✓ лабораторне заняття було насичене новою інформацією – на 75%
- ✓ на питання: наскільки складно було сприймати матеріал, 72% студентів вибрали варіант відповіді: легко, але виникали певні труднощі
- ✓ 75% студентів відповіли, що застосування комп'ютерних програм при вивченні хімії дає можливість поглибити знання;
- ✓ 11 студентів зауважили, що їм зрозуміла програма ChemSketch і лише в 1-го студента виникали труднощі при її використанні;
- ✓ застосувати отримані знання у своїй професії зможуть 11 студентів з 12 опитуваних.

В анкеті студенти зазначили, що їм сподобалася програма ChemSketch, у викладанні змістовного матеріалу все зрозуміло і цікаво, зауважили, що

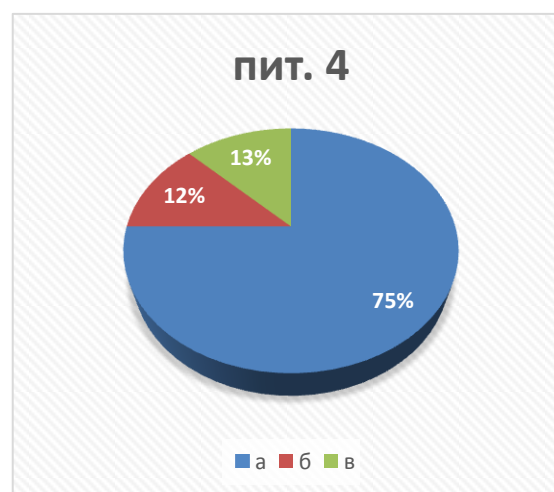
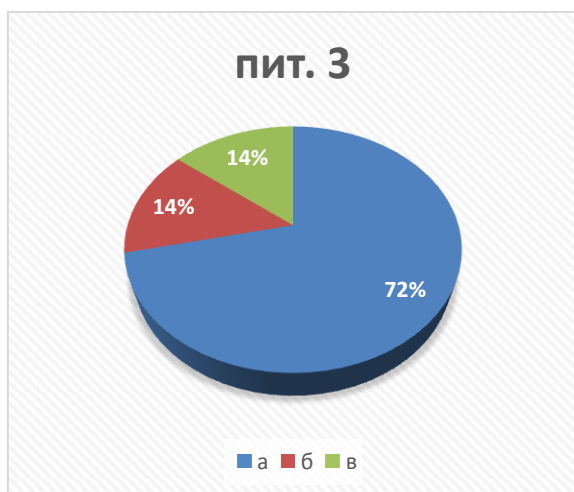
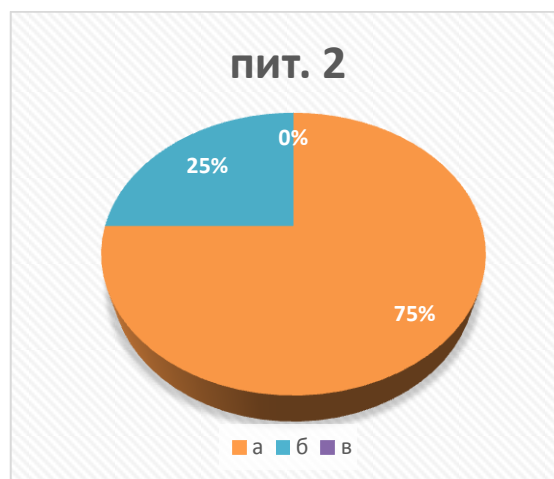
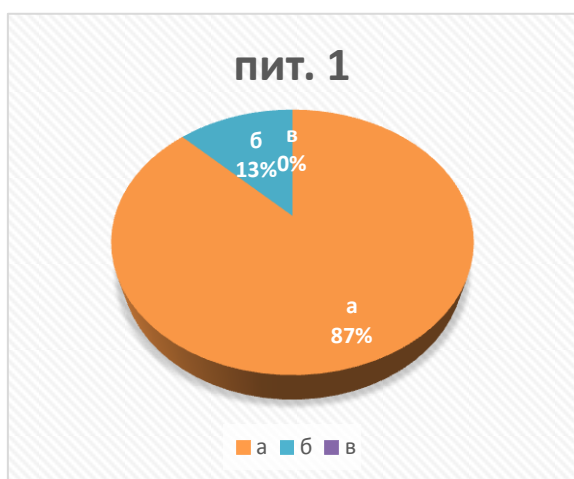
вміння малювати структурні формули хімічних сполук дійсно сприяє кращому розумінню теми.

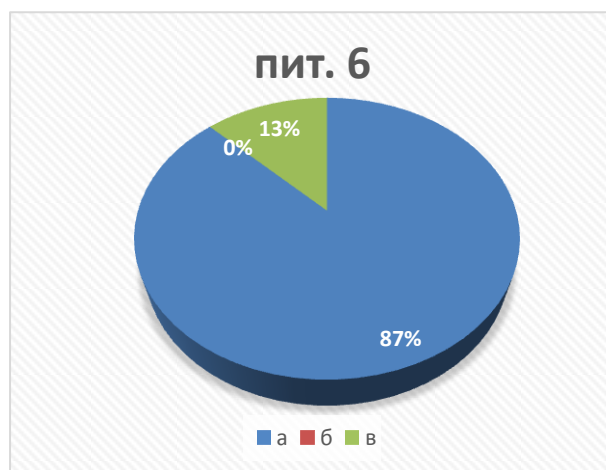
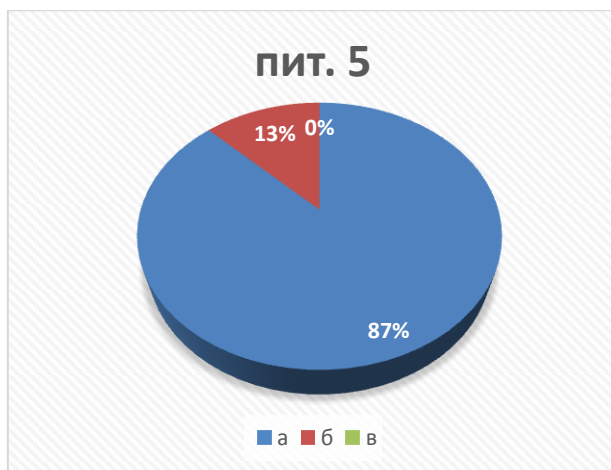
Результати анкетування оцінки ефективності представлені на діаграмі нижче, що дозволяє зробити висновок про ефективне впровадження методичного комплексу у навчальну діяльність.

Таблиця 2.2

Результат анкетування

варіант відповіді	пит. 1	пит. 2	пит. 3	пит. 4	пит. 5	пит. 6
а	11	10	10	10	11	11
б	1	2	1	1	1	0
в	0	0	1	1	0	1





Отже, проведені дослідження показали, що методичний комплект для лабораторних робіт з використанням програми ChemSketch з курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів» може бути використаний у педагогічній практиці хімічних дисциплін, оскільки він є ефективним при вивченні теми «Створення та редагування структурних хімічних формул з використанням програми ChemSketch».

Висновок до розділу 2

Для студентів, що вивчають хімію є обов'язковим вміння користуватися хімічними редакторами та володіти навичками редагування, копіювання, збереження та відтворення структурних хімічних формул.

Нами було проаналізовано набірки та літературу, які містять опис програм хімічних редакторів, завдання з прикладами, розробки уроків, лекцій, а саме: Шабаршин В.М., Мазур В.А. Інтерфейс и функции специализированного химического редактора ACD/ChemSketch; розробки уроків з періодичного джерела «Хімія в школі» деяких авторів з різним тем - Малеева З.Ф. Обобщающий урок по теме «Азотсодержащие органические соединения»; книга «Комп'ютерна хімія» авторів М.Е. Соловйова та М.М. Соловйова та інші.

Також було запропоновано методичний комплект з теми «Створення та редагування структурних хімічних формул з використанням програми ChemSketch» дисципліни «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів», що складається зі вступу та чотирьох лабораторних робіт і контрольних питань для самоперевірки студентів

Ознайомлення з програмою ChemSketch буде відбуватись на лекційному занятті, а також на лабораторних заняттях, таким чином студенти оволодіють можливостями програми ChemSketch та самостійно навчаться редагувати, копіювати, зберігати структурні формули хімічних речовин.

Для перевірки ефективності поданого методичного комплекту використано метод анкетування, який проводився після вивчення зазначеної вище теми з курсу КМХП.

Аналіз отриманих результатів підводить до таких висновків: для багатьох (а точніше – 11 студентів з 12 опитуваних) ця тема була цікавою та доступною для розуміння. Вагома половина студентів стверджує, що труднощів особливих не виникало і що застосування комп'ютерних програм при вивченні хімії дає можливість поглибити знання.

А значить, методичний поданий комплект до лабораторних робіт може бути використаний у навчальній діяльності для студентів при вивченні курсу «Комп'ютерне моделювання хімічних процесів».

ВИСНОВКИ

В наш час роль інформаційних технологій значно збільшилася. Процеси, що відбуваються з інформатизацією суспільства не тільки укорінили науково-технічний прогрес, інтелектуалізацію всіх видів людської діяльності, але і створення якісно нового інформаційного середовища суспільства.

Одним з пріоритетних напрямлень процесу інформатизації сучасного суспільства є інформатизація навчання.

Аналізуючу питання щодо використання інформаційних технологій при вивченні певних дисциплін, можна виділити як переваги, так і недоліки. Тим не менш, їх впровадження зазвичай залежить від:

- загальної дидактичної структури заняття;
- варіанта використання ІКТ;
- обсягу делегованих комп'ютеру функцій викладача;
- виду використовуваних комп'ютерних засобів.

Також, прогнозуючи результати вивченої теми можна використовувати інформаційно-комунікаційні технології з різною метою.

Як говорив А.С.Макаренко, ми не можемо говорити про ефективність застосування будь-якого, найбільш науково обгрунтованого методу навчання або виховання без врахування тих умов, у яких він застосовується.

Із стрімким розвитком ІКТ, розробляються і комп'ютерні програми, набираючи популярності.

Хімія як експериментальна наука, теж потребує використання спеціальних хімічних програм для вирішення певних завдань. Програми широкого профілю не можуть задовольнити всі потреби користувача для відображення чи розрахунку характеристики хімічної сполуки. Тому, дослідивши це питання, можна знайти саме той хімічний редактор, який має достатній перелік можливостей.

Серед широко розповсюджених хімічних програм із забезпеченням потреб користувача відомі такі: HyperChem, ChemSketch, Avogadro, ChemBioDraw Ultra і т.д.

Хімічний редактор ChemSketch з пакету програм ACD/Labs за функціональними можливостями не поступається редактору ChemDraw і навіть де в чому його перевершує. Не менш важливим є те, що документи, створені за допомогою ChemSketch, займають невеликий обсяг - всього кілька кілобайт. Цей хімічний редактор більш орієнтований на роботу з органічними формулами середнього рівня складності з великою бібліотекою готових формул, але в ньому зручно складати також хімічні формули неорганічних речовин. З його допомогою можна оптимізувати молекули в тривимірному просторі, обчислювати відстані та валентні кути між атомами в молекулярній структурі і багато іншого.

Програма працює в двох режимах: Structure і Draw і відрізняються вони можливостями та функціями.

Розроблений методичний комплект для виконання лабораторних робіт рекомендовано використовувати при вивченні курсу «КМХП», містить в собі не тільки опис програми, а й контрольні питання для перевірки знань.

Методика перевірки ефективності поданого комплексу говорить про логічне і послідовне викладення матеріалу, про його ефективність та доступність.

Використання студентами на лабораторних заняттях дозволить ознайомитися з інтерфейсом програми, її можливостями, функціями, режимами роботи, а також спробувати виконати подані завдання та перевірити засвоєння вивченого матеріалу.

Такий підхід до вивчення теми та ознайомлення з хімічними редакторами, на мою думку, є досить результативним. Адже, в діяльності хіміка зі спеціалізацією «Інформатика» це не тільки корисно, але й необхідно, щоб стати професіоналом своєї справи. В хімічній галузі, не зважаючи на місце роботи, важливо навчитися творчо підходити до

вирішення різних завдань, при цьому, навчитися їх якісно та цікаво подати з використанням додаткових засобів. А в цьому нам допоможуть знання та вміння про спеціальні програми.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. «Використання інформаційних технологій при підготовці майбутнього вчителя технології» [Електронний ресурс] // Режим доступу: https://ru.osvita.ua/school/lessons_summary/education/45678/
2. ACD/ChemSketch [електронний ресурс] // Режим доступу: https://eduinf.waw.pl/che/inne/prgchem/pages/chsk_eng.pdf
3. ACD/Labs Freeware [електронний ресурс] // Режим доступу: <http://www.abc.chemistry.bsu.by/structure/8-acdlabs-1.pdf>
4. Банк інноваційних педагогічних технологій / Автор-упорядник : Л.В. Галіцина. - К. : Шк. Світ, 2012. - 104 с.
5. Биков В.Ю. Моделі організаційних систем відкритої освіти: монографія / В.Ю. Биков. – К.: Атака, 2008. – 684 с.
6. Бондар Д.А., Гариев И.А. Химия и виртуальный мир // Химия в шк. – 1999. – №5. – С. 47–52.
7. Бондаренко В.В. Современные педагогические технологи как объективная потребность [Текст] / В.В. Бондаренко, М.В. Ланских. – Харьков: ХНАДУ, 2011. – 146 с.
8. Бородина О.Є. Комп'ютер на уроках хімії // Комп'ютер у школі та сім'ї. – 1999. – №2. – С.42–43.
9. Валюк В. Особливості використання комп'ютерних технологій при вивченні хімічних дисциплін // Збірник наукових праць. – 2011. – Ч.3. – С. 24-29.
- 10.Добротин Д.Ю., Журин А.А. Интернет в обучении химии // Химия в шк. – 2001. – №7. – С.52–55.
- 11.Довгопола О.В. Підготовка майбутнього вчителя до впровадження комп'ютерних технологій / О.В. Довгопола // Освіта Донбасу. – 2006. – №3–4. – С. 116–117.
- 12.Загорський В.В. Интернет-ресурсы для учителя // Химия в шк.. – 2003. – №9. – С. 82–85. 10.

13. Застосування інноваційних технологій як запорука підвищення ефективності та якості навчання у вищій школі / С. І. Дубінін, А. В. Ваценко, В. О. Пілюгін [та ін.] // Медична освіта. – 2016. – № 4. – С. 12–14.
14. Затворний О., Затворна І. Використання комп'ютерних моделей на уроках хімії // Біологія та хімія в школі. – 2004. – №4. – С. 33–37.
15. Інтерактивні технології навчання у початкових класах / Авт.-упор. І.І. Дівакова. - Тернопіль: Мандрівець, 2009. - 180 с.
16. Каталог химических ресурсов [электронный ресурс] // Режим доступа: <http://www.chemport.ru/?cid=22>
17. Киричок В. А. Можливості застосування інтерактивних методів навчання у системі післядипломної медичної освіти / В. А. Киричок // Медична освіта. – 2016. – № 1. – С. 25–28.
18. Комп'ютерні технології в освіті : навч. посібн. / Ю. С. Жарких, С. В. Лисоченко, Б. Б. Сусь, О. В. Третяк. – К.: Видавничо-поліграфічний центр "Київський університет", 2012. – 239 с. © Жарких Ю. С., Лисоченко С. В., Сусь Б. Б., Третяк О.В., 2012 © Київський національний університет імені Тараса Шевченка, ВПЦ "Київський університет", 2012.
19. Кузнєцова Н.Є. Методика викладання хімії: Учеб. посібник для студентів пед. ін-тов за хім. і біол. спец. - М.: Просвещение, 1984. - 415 С., Іл.
20. Манойлова С. Використання комп'ютера на уроках хімії // Біологія та хімія в школі. – 2001. – №5. – С.22–25.
21. Маркин В.И. Практическое руководство по использованию ChemWindow (версия 6.0): Учебное пособие. – Барнаул: Изд-во Алт. ун-та, 2005. – 170 с.
навчальний процес / С. Пустовіт // Біологія та хімія в школі. – 2002. – №3. – С. 11–12.

22. Нифантьев Э.Е., Ахлебин А.К., Лихачев В.Н. Компьютерные модели в обучении химии // Информатика и образование. – 2002. – №7. – С. 77–85.
23. Опанасюк Ю. Використання комп'ютерних технологій у навчальному процесі [Електронний ресурс] / Ю. Опанасюк // Вісник Інституту розвитку дитини. Серія : Філософія, педагогіка, психологія. – 2015. – Вип. 38. – С. 43-48. Режим доступу: http://nbuv.gov.ua/UJRN/Vird_2015_38_8
24. Основні напрямки використання інформаційних технологій [електронний ресурс] // Режим доступу: <https://works.doklad.ru/view/9-2cLOre7uE.html>
25. ПЕРСПЕКТИВНІ НАПРЯМИ ІНФОРМАТИЗАЦІЇ ХІМІЧНОЇ ОСВІТИ Варгалюк В.Ф. [електронний ресурс] // Режим доступу: <http://distance.dnu.edu.ua/ukr/publikazii/VargalukDercach.pdf>
26. Підгорна Т.В. Інформаційно#комунікаційні технології в хімічних дослідженнях: Посібник для вчителів — К.: Видавництво НПУ імені М.П. Драгоманова, 2013. — 233 с.
27. Проекти в початковій школі / Упоряд. О.М. Кондратюк. - К. : Редакції газет з дошкільної та початкової освіти, 2012. - 128 с.
28. Пустовіт С. Деякі проблеми впровадження комп'ютерних технологій у
29. Ребенок В.М. ВИКОРИСТАННЯ СУЧАСНИХ КОМП'ЮТЕРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ В ПРОЦЕСІ ПРОФЕСІЙНОГО НАВЧАННЯ [електронний ресурс] // Режим доступу: http://visnyk.chnpu.edu.ua/?wpfb_dl=736
30. Редактор ChemSketch, дополнительные возможности [електронний ресурс] // Режим доступу: http://kontren.narod.ru/ikt/ikt_10-2.html
31. Редактор химических формул ChemSketch [електронний ресурс] // Режим доступу: http://kontren.narod.ru/ikt/ikt_10.html
32. Сахно Т., Джурка Г., Пустовіт С. Internet-джерело хімічної інформації // Біологія та хімія в школі. – 2002. – №3. – С. 19.

33. Стрілецька Н.М. Методика навчання інформатики (у початковій школі)
/ Н.М. Стрілецька. - Чернігів : ЧНПУ імені Т.Г. Шевченка, 2014.
34. Титаренко Н. Використання комп'ютерних навчальних програм з хімії
// Біологія та хімія в школі. – 2004. – №1. – С. 9–12.
35. Торба Ю.І. Використання дистанційного навчання для підвищення
кваліфікації педагогічних працівників // Освіта Донбаса. – 2007. – №4
(123).
36. Ягупов В.В. Педагогіка: Навч. посібник. – К.: Либідь, 2002. – 560 с.
37. Ядов Г.Б. Информация и общество // Вокруг света. – 2004. - № 2.

ДОДАТКИ

Додаток-вкладка