

ТЕХНОЛОГИИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ОБЛАСТИ ХИМИИ И ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИХ НА УРОКАХ

Введение. Инновационные технологии приобретают все большее значение в современном образовательном процессе. И особое место при этом занимают методы компьютерного моделирования. Эти методы дают уникальную возможность визуализировать и проиллюстрировать сложные химические процессы, реакции, построение молекулярных формул и расчеты, значительно облегчая процесс обучения и делая его более наглядным и понятным для студентов и школьников. Использование компьютерного моделирования в том числе подходит для курсов химии, где необходимо объяснить множество сложных понятий. С помощью компьютерного моделирования студенты и школьники могут наблюдать как происходят химические реакции на молекулярном уровне, как выглядят структурные формулы некоторых веществ и производить сложные расчёты, что позволяет им лучше разобраться в новой теме, понять и запомнить материал. **Цель** нашей работы – выполнить обзор компьютерных программ, пригодных для использования в процессе обучения химии, и изучить возможности применения их в образовательном процессе.

Основная часть. В современном мире технологии компьютерного моделирования играют важную роль в различных областях науки и практики, в том числе в химии. Компьютерное моделирование позволяет изучать свойства и реакции химических веществ, предсказывать их поведение в разных условиях, а также визуализировать и демонстрировать химические процессы. Однако, несмотря на значительные преимущества компьютерного моделирования, его использование в школьных и университетских курсах химии пока не является повсеместным и эффективным. Существуют различные проблемы и трудности, связанные с доступностью, качеством, адаптацией и введением компьютерных программ в учебный процесс. Поэтому актуальной является задача исследования возможностей и условий использования технологий компьютерного моделирования на уроках химии, а также разработки методических рекомендаций и практических заданий для учителей и учеников. Такие исследования позволят повысить качество и эффективность преподавания химии, интерес и мотивацию к ее изучению, а также будут способствовать формированию у учащихся современных навыков в области компьютерного моделирования.

Рассмотрим некоторые программы, которые позволяют достичь поставленные нами цели.

Avogadro – это программа для создания, редактирования и визуализации молекул [1]. Это яркий пример программы молекулярного моделирования. Имеющийся функционал позволяет легко создавать или изменять молекулярные структуры, а программа отображает получившиеся молекулярные структуры в отличном качестве. Avogadro позволяет визуализировать молекулы в трёхмерном пространстве. Это полезно для изучения и анализа химических соединений. Программа очень проста в использовании. Интерфейс программы выглядит следующим образом (рис. 1).

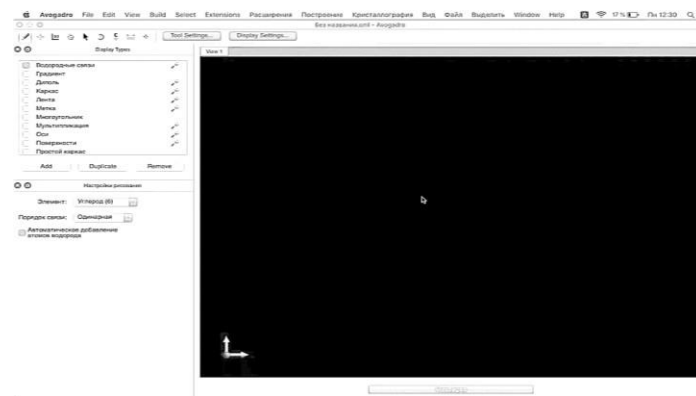


Рисунок 1. Интерфейс программы Avogadro

Он состоит из нескольких важнейших частей, таких как основное рабочее поле, где происходит основной процесс рисования и редактирования молекулы; меню стилия отображения молекулы, позволяющая изменить способ отображения молекулы; меню рисования, где мы можем выбрать элемент, который нужно добавить в молекулу, и порядок связи.

Например, так выглядит молекула фенолфталеина в структурном виде и в приложении Avogadro (рис. 2).

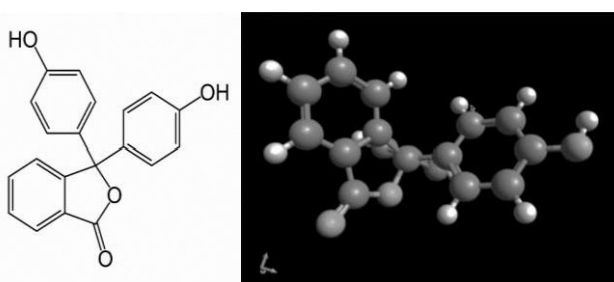


Рисунок 2. Молекула фенолфталеина

Стоит также отметить, что с помощью Avogadro мы можем получить информацию о свойствах молекул, таких как длины связей, углы и дипольные моменты.

Таким образом, Avogadro – это отличный инструмент для школьников, студентов и всех, кто интересуется молекулярной химией и структурой веществ.

Программа BestChem предназначена для решения разного рода задач по химии [2]. Сюда входят:

- задачи на расчёт массы, объёма или химического количества по уравнению химической реакции;

- задачи на «избыток-недостаток»;

- задачи на выход продукта реакции.

Программа тоже очень проста в использовании и имеет следующий интерфейс (рис. 3).

Всё, что требуется от пользователя для решения задачи, это ввести исходные данные, ввести выход продукта (если он дан по условию задачи) и нажать “Далее”. Программа посчитает и выведет ответы на экран. Программа BestChem может быть полезна для изучения базового курса химии.

Yenka Chemistry – это полноценная виртуальная лаборатория, которая позволяет безопасно и легко моделировать химические эксперименты [3]. В программе доступно более 100 химических веществ, и вы можете контролировать их количество и концентрацию. Программа предоставляет готовые уроки и активности, а также обучающие видеоролики, чтобы помочь начать работу.

Вот ключевые функции Yenka Chemistry:

Моделирование экспериментов: перетаскивайте химические вещества, оборудование и инструменты на экран и комбинируйте их по своему усмотрению. Как только вы смешиваете химические компоненты, программа точно моделирует реакцию. Мощные инструменты построения графиков позволяют вам отображать данные из ваших реакций, например, pH от объема. Вы также можете просматривать механизмы реакций с помощью 3D-анимаций.

Электрохимическое моделирование: Выбирайте металлические или углеродные электроды и сочетайте их с одним из 28 различных электролитов. Для каждого электролита вы можете точно установить концентрацию и объем. Добавьте батарею, подключите провода к электродам и наблюдайте за ходом симуляции. Информация о реакциях отображается в окне деталей реакции. Вы можете изучать реакции и свойства на каждом электроде, а также общее уравнение для всей ячейки. С помощью инструментов графиков можно строить графики симулированных экспериментальных данных.

Yenka Chemistry – это не просто ограниченный набор анимаций. Это полноценная, гибкая виртуальная лаборатория, которую можно использовать как для демонстрации на доске, так и для самостоятельных экспериментов студентов. Она позволяет безопасно и легко проводить эксперименты, стимулируя научное исследование и позволяя видеть реакции, которые не всегда возможно или практично провести в реальной жизни.

ChemOffice – это программный комплекс, который позволяет собирать, хранить, извлекать и обмениваться данными и информацией о соединениях, реакциях, материалах и их свойствах [4]. Он включает в себя 4 приложения:

ChemDraw используется для быстрого рисования молекул, химических реакций и биологических объектов;

Chem3D способен генерировать 3D-модели с последующей возможностью просмотра для установления свойств. Программа также включает в себя интерфейсы с вычислительными инструментами;

ChemFinder является редактором баз данных, который используется для создания и редактирования баз данных химических соединений;

Редактор таблиц CS Table Editor, предназначенный для просмотра и редактирования табличных данных.

Yenka Chemistry – это виртуальная лаборатория, которая позволяет моделировать и анимировать химические процессы.

Вышеперечисленные программы будут полезны для учащихся как школ, так и университетов.

Crocodile Chemistry – это комплексная программа, которая симулирует химическую лабораторию, позволяя легко моделировать эксперименты и реакции [2].

Основные возможности программы включают:

Проведение химических испытаний и запуск обучающих сценариев.

Воссоздание аутентичного набора инструментов химической лаборатории.

Предоставление опций для тестирования веществ, их создания, смешивания и анализа.

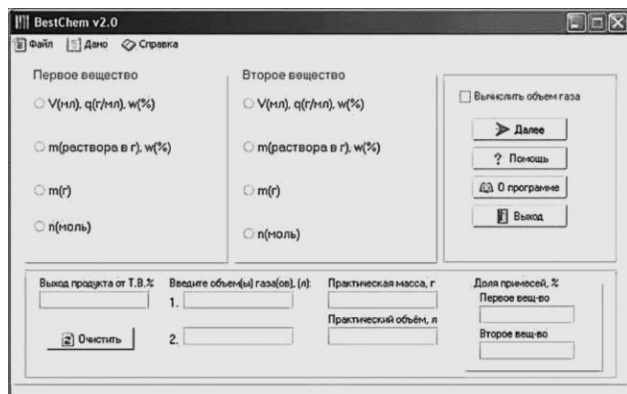


Рисунок 3. Интерфейс программы BestChem

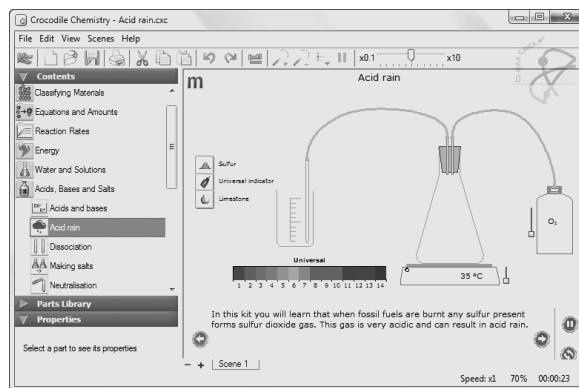


Рисунок 4. Интерфейс программы Crocodile Chemistry

Вышеперечисленные программы будут полезны для учащихся как школ, так и университетов.

Заключение. Проведение исследования позволило сделать следующие выводы. Компьютерное моделирование стало мощным инструментом в области химии. Оно позволяет ученым и исследователям предсказывать результаты экспериментов, экономя время и ресурсы. Оно также открывает новые возможности для обучения химии, делая сложные концепции более доступными для учащихся. Использование методов компьютерного моделирования в курсах химии может значительно улучшить процесс обучения. Оно позволяет студентам визуализировать абстрактные химические процессы и явления, углубляя их понимание материала. Кроме того, это может повысить интерес к науке и мотивировать к дальнейшему изучению химии. Однако, несмотря на все эти преимущества, существуют некоторые трудности и ограничения в использовании технологии компьютерного моделирования в образовательном процессе. К ним относятся необходимость использования специального оборудования и программного обеспечения, а также необходимость обучения преподавателей и студентов эффективному использованию этих технологий. Таким образом, методы компьютерного моделирования являются важным инструментом в химии и образовании. Дальнейшие исследования и разработки в этой области могут привести к значительным улучшениям в преподавании химии и ее применении.

Список цитированных источников:

1. Avogadro – программа просмотра и редактирования молекул – База знаний РЕД ОС [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://redos.red-soft.ru/base/arm/software-for-education/avogadro/>. – Дата доступа: 09.02.2024.

2. Белохвостов, А.А. Методические особенности использования электронных средств обучения химии на этапе довузовской подготовки / А.А. Белохвостов // Инновационные обучающие технологии в медицине : сб. материалов Междунар. Респ. науч.-практ. конф. с междунар. участием. – Витебск : Витебский государственный ордена Дружбы народов медицинский университет, 2017. – С. 562-566. – Режим доступа: <https://rep.vsu.by/handle/123456789/34814>. – Дата доступа: 10.02.2024.

3. Chemistry – Yenka [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://yenka.com/chemistry/>. – Дата доступа: 11.02.2024.

4. ChemOffice | PerkinElmer [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.perkinelmer.com/product/chemoffice-chemoffice>. – Дата доступа: 11.02.2024.