

УДК 621.762.4

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ CHEMSKETCH ПРИ УГЛУБЛЕННОМ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ

Соколовская О. Н.

*Научный руководитель: д. т. н., доцент Азаров С. М.
Белорусский национальный технический университет,
г. Минск, Республика Беларусь*

Химия является одной из наук, в которой предметом изучения является невидимым. Объектом изучения химии становятся атомы, молекулы и их превращения. Эти частицы настолько малы, что увидеть их невозможно даже в самый сильный микроскоп.

Актуальность данной работы заключается в том, что при изучении общеобразовательных и профессиональных, а также инженерных дисциплин для выполнения заданий необходимо иметь развитое пространственное мышление. Если данная компетенция отсутствует или имеет низкий уровень, обучающийся не может освоить и применять на практике знания по ряду тем, например: химическое строение веществ. Как следствие, возникают затруднения при изучении классов веществ неорганической и органической химии.

Программа химического офиса ChemsSketch позволяет решить эту проблему – помогает развивать у учащихся познавательную деятельность, облегчить восприятие и усвоение материала, что обеспечивает более эффективное обучение. Также это программа позволяет организовать научно-исследовательскую работу учащихся, реализовать деятельностный подход в обучении, активизировать учебный процесс и создать предпосылки для активного личного вмешательства в познавательную деятельность. Это инструмент, который помогает визуально изучить геометрическое строение молекул (валентный угол, длины связей).

Для построения и визуализации структурных формул предназначены компоненты пакета:

ChemSketch – это графический редактор, предназначенный для создания двумерных химических структур.

3D Viewer – программа, позволяющая моделировать трехмерные структуры.

Химический редактор ChemSketch предназначен для работы с органическими формулами среднего уровня сложности (также имеется большая библиотека с готовыми более сложными формулами), но в нем удобно составлять также химические формулы неорганических веществ. С его помощью можно оптимизировать молекулы в трехмерном пространстве, изменять длины и углы химических связей.

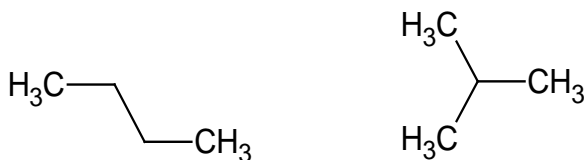


Рисунок 1 – Структурные формулы бутана и изобутана

Chem Basic имеет два режима: Structure и Draw. Chem Basic Structure позволяет конструировать структурные формулы, механизмы химических реакций. Данное приложение можно использовать при проведении вводных уроков по органической химии, изучении теории химического строения органических веществ, для демонстрации валентных возможностей атомов в органических соединениях. Так как программа автоматически учитывает валентные возможности атомов, выделяет красной рамкой все несоответствия валентностям элементов и другие ошибки, то такого типа задания (построить структурную формулу соединения по молекулярной формуле) можно использовать как тренажер. Кроме того, можно давать ученикам задания на построение изомеров по молекулярной

формуле. У многих такие задания сначала вызывают затруднения, а программа помогает дописывать атомы водорода и не дает присоединить «лишних» атомов.

Учитывая, что химические и физические свойства органических веществ в большой степени зависят от пространственного строения молекул, очень важной задачей на уроках химии, является формирование понятия о стереохимическом представлении молекул.

При изучении органической химии очень важно показать учащимся, каким образом геометрическая структура молекул зависит от гибридизации атомов углерода. В объяснении теории гибридных орбиталей поможет функция Chem Basic-Templates (шаблоны). Данная функция позволяет изобразить образование π - и σ -связей.

После изучения видов гибридизации необходимо показать зависимость геометрического строения молекул от вида гибридизации атомных орбиталей. Для решения этой задачи можно использовать приложение 3D Viewer.

3D Viewer позволяет создать 3D-модели органических соединений в скелетной, шаростержневой и сферической формах.

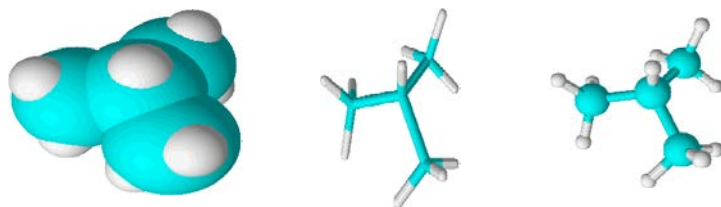


Рисунок 2 – Скелетная, шаростержневая и сферическая формулы изобутана

В созданной модели молекулы могут быть изучены, а при необходимости изменены, геометрические параметры – длины связей и валентные углы. Для этого структурную формулу изобутана копируем из приложения ChemBasic в 3D Viewer.

При использовании функции Angle программа позволяет рассчитать валентный угол молекулы. Для этого необходимо выбрать функцию Angle и нажать курсором мыши на три атома между которыми необходимо посчитать угол. Данная функция позволяет показать учащимся, что молекулы веществ не плоские, а имеют определенную геометрическую форму.

Использование химического редактора ChemSketch позволяет решить ряд педагогических задач: обеспечение активизации учебной и познавательной деятельности, формирование и развитие пространственного мышления, зрительного восприятия, повышения визуальной грамотности и визуальной культуры. Следовательно, химический редактор ChemSketch создает условия для технологической подготовки и эффективного использования в обучении информационных образовательных продуктов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Литвак, М. М. Компьютерное моделирование органических реакций / М. М. Литвак, Н. В. Литвак // Химия: методика преподавания. – 2005. – № 4. – С. 47–57.
2. Литвак, М. М. Использование программного пакета ChemOffice в преподавании биоорганической химии / М. М. Литвак // Фундаментальные исследования. – 2008. – № 4. – С. 34–38.
3. Соловьев, М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. – М: СОЛОН-Пресс, 2005. – 536 с.
4. Протопопов А. В., Коньшин В. В. Визуализация химических структур и молекулярное моделирование: методическое пособие по работе в химических редакторах / А. В. Протопопов, В. В. Коньшин. – Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2011. – 44 с.