

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНІКА»
ФАКУЛЬТЕТ ПРИРОДНИЧИХ НАУК**

Л.Я. Мідак, О.В. Кузишин, Л.В. Базюк

**Методичні вказівки до самостійної роботи з курсу
«СУЧАСНІ ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ (ЗА
ПРОФЕСІЙНИМ СПРЯМУВАННЯМ)»**

Навчально-методичний посібник

**Калуш
Видавець Петраш К.Т.
2018**

УДК 54:37:004

ББК 24я73

М 87

Рекомендовано до друку ухвалою Вченої ради Факультету природничих наук ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника», протокол № 3 від 15 листопада 2018 року

Автори:

Л.Я. МІДАК, доцент, кандидат хімічних наук

О.В. КУЗИШИН, кандидат фізико-математичних наук

Л.В. БАЗЮК, кандидат фізико-математичних наук

РЕЦЕНЗЕНТИ:

М.П. МАТКІВСЬКИЙ, кандидат технічних наук, доцент кафедри хімії середовища та хімічної освіти ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»;

Д.О. ЗОРІН, кандидат геологічних наук, доцент кафедри екології Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу.

Мідак Л.Я., Кузишин О.В., Базюк Л.В.

М 87 Методичні вказівки до самостійної роботи з курсу «Сучасні інформаційні технології (за професійним спрямуванням)». – Калуш: ФО-П Петраш К.Т., 2018. – 92 с. – 100 пр.

ISBN 978-617-7362-29-5

Навчально-методичний посібник містить матеріал для самостійного вивчення курсу «Сучасні інформаційні технології (за професійним спрямуванням)» студентами спеціальностей «Середня освіта (хімія)», «Хімія» та «Середня освіта (Природничі науки)»: приведено характеристику спеціального програмного забезпечення професійної діяльності хіміка та вчителя хімії (інструменти та основні прийоми роботи), а також тестові завдання для самостійного і дистанційного контролю знань.

ISBN 978-617-7362-29-5

УДК 54:37:004

ББК 24я73

© Мідак Л.Я., Кузишин О. В., Базюк Л.В., 2018

© ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника», 2018

ЗМІСТ

ВСТУП.....	4
ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА.....	11
Лекція 1. Комп'ютерні технології у викладанні хімії в школі.....	11
Лекція 2. Спеціальне програмне забезпечення Model ChemLab професійної діяльності хіміка, викладача хімії.....	21
Лекція 3. Спеціальний редактор хімічних формул ChemDrawPro.....	41
Лекція 4. Пакет програмного забезпечення ACD/Labs. Робота в режимі Structure.....	51
Лекція 5. Пакет програмного забезпечення ACD/Labs. ACD/3D Viewer.....	62
ТЕСТОВІ ЗАПИТАННЯ ДЛЯ САМОКОНТРОЛЮ.....	81

ВСТУП

На сучасну пору освітній процес знаходиться на стадії активної інформатизації. Рівень розвитку комп'ютерних технологій у наш час вимагає використання нових підходів до навчального процесу у закладах вищої освіти, нових методів, форм подання навчальної інформації для активізації пізнавальної діяльності студентів. Комп'ютеризовані системи є потужними інтеграторами інформації в усіх галузях знань, у т.ч. в навчальних процесах. Використання інформаційно-комунікативних технологій (ІКТ) у викладанні хімії дозволяє інтенсифікувати освітній процес, прискорити передачу знань і досвіду, а також підвищити якість навчання й освіти.

Відомо, що хімія – наука, що потребує ілюстрації теоретичного матеріалу. Правильно підібраний демонстраційний матеріал допомагає краще зрозуміти різноманітні процеси та явища, будову хімічних сполук та механізми їх взаємодій. Таким чином, візуалізація навчального матеріалу полегшує його сприйняття та засвоєння. На жаль, звичні 2D-зображення класичних підручників, посібників та монографій не дають можливості у повній мірі зрозуміти механізми перебігу хімічних реакцій, просторову будову молекул, суть фізичних та хімічних явищ тощо. Тому для ефективного вивчення хімічних дисциплін та підготовки майбутніх вчителів хімії, на сучасну пору актуальним завданням є використання численних демонстрацій в навчальному процесі, які є неможливими без використання мультимедійних презентацій, Інтернет-ресурсів, спеціальних хімічних програм, програм-симуляторів та програм-реалізаторів доповненої реальності.

Мета вивчення дисципліни полягає у поглибленому освоєнні системного та типового програмного забезпечення персональних комп'ютерів і вдосконаленню навиків роботи з оригінальними програмами, що використовуються в різних розділах хімії, а також із компонентами операційної системи для програмування.

Завдання:

- закріпити та поглибити знання по практичному використанню можливостей операційної системи Windows;
- вдосконалити навички роботи з редактором Word при набиранні тексту, таблиць та формул, редактором електронних таблиць Excel, графічними редакторами Corel Draw та Origin і редактором хімічних формул ISIS Draw;
- освоїти можливості програм для математичної обробки результатів хімічних експериментів;
- освоїти можливості графічних редакторів Corel Draw та Origin, редакторів хімічних формул ChemDraw, ISIS Draw, електронного хімічного словника ACDLabs та спеціальних хімічних програм;
- ознайомитися з роботою електронних словників і перекладачів;
- отримати навички роботи з фаховою інформацією в мережі Internet;
- ознайомитися з використанням персональних комп'ютерів в різних видах фахової діяльності: науковій, видавничій, учбовій, пізнавальній.

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен

знати:

- основні методи обробки даних;
- методи планування експериментів;
- засади статистичної обробки експериментальних даних;
- можливості програм для математичної обробки експериментальних даних;
- можливості спеціальних хімічних програм та їх застосування;
- правила техніки безпеки та охорони праці при роботі на персональних комп'ютерах.

вміти:

- аналізувати структуру експериментальних даних.
- застосовувати теоретичні знання, отримані на заняттях, для розв'язання конкретних технічних задач.
- підібрати конкретний метод обробки даних залежно від ситуації.

- використовувати комп'ютерні засоби обробки даних хімічного експерименту.
- практично використовувати можливості операційної системи Windows;
- користуватись графічними редакторами Corel Draw та Origin, редакторами хімічних формул ChemDraw, ISIS Draw та електронним хімічним словником ACDLabs;
- працювати з хімічними електронними словниками і перекладачами;
- користуватись фаховою інформацією в мережі Internet;
- створювати елементарні сайти за допомогою мови програмування HTML.

Компетентності, якими повинен оволодіти здобувач:

- Здатність аналізувати, синтезувати, оцінювати, щоб виявляти педагогічні проблеми і виробляти рішення щодо їх усунення; здатність вчитися; автономія;

- Здатність вдосконалювати власне навчання і виконання, включно з розробленням навчальних і дослідницьких навичок.

- Набуття гнучкого мислення, відкритість до застосування знань з природничих дисциплін та компетентностей в широкому діапазоні можливих місць роботи та повсякденному житті.

- Дотримання етичних принципів як з погляду професійної чесності, так і з погляду розуміння можливого впливу досягнень з природничих наук на соціальну сферу.

- Готовність використовувати сучасні методи і технології наукової комунікації українською та іноземними мовами у педагогічній діяльності.

- Здатність планувати і розв'язувати задачі власного професійного і особистого зростання.

- Здатність до реалізації інноваційних технологій у навчанні.

- Здатність до організації пошуку способів виконання педагогічних дій за зразком або алгоритмом.

- Здатність оцінювати порядок величини і знаходити відповідні рішення із чітким визначенням припущень та використанням спеціальних та граничних випадків.

- Здатність розуміти та уміло використовувати математичні та числові методи, які часто використовуються у хімії, фізиці, та екології.

- Здатність використовувати відповідне програмне забезпечення (мови програмування, пакети) для проведення хімічних та екологічних досліджень.

- Здатність шляхом самостійного навчання освоїти нові області, використовуючи здобуті знання з природничих дисциплін.

Програма дисципліни

Змістовий модуль 1. Спеціальні хімічні програми для хімічних розрахунків.

Тема 1. Комп'ютерні технології у викладанні хімії в школі.

Впровадження інформаційно-комунікативних технологій у навчальний процес. Можливості використання ІКТ під час викладання хімії. Умови активного впровадження ІКТ в освітній процес. Основні напрямки використання інформаційних технологій у процесі навчання хімії. Використання педагогічних програмних засобів з хімії. Застосування комп'ютерних моделей у навчанні хімії. Технологія роботи з ресурсами Інтернет на уроках хімії.

Програми EQTabla5, Period3D та Mendeleev 2.2. Інтерфейс програм (головне меню, панелі інструментів) та принципи роботи. Вивчення структури вбудованої бази даних та прийомів її редагування. Отримання додаткової текстової інформації по елементу (у вигляді статті). «Довідка по елементу».

Тема 2. Запис хімічних рівнянь у Chemical Equation Expert 2.0, ChemBalance Wizard 1.0 та Chemical 1.0.

Тема 3. Хімічні розрахунки у Molecular Weight Calculator 6.49, BestChem v.2.0, Химия 4.2, Chemical Formula Tutor 1.3.

Тема 4. Спеціальні хімічні програми: chemcalc, PrepSol 2.1 , AutoNom.

Використання електронної лабораторії. Використання електронної Періодичної таблиці елементів. Використання хімічного калькулятора для розрахунку молекулярної маси речовини. Використання хімічних програм для розрахунку продуктів реакції.

Змістовий модуль 2. Демонстраційні та енциклопедичні хімічні програми.

Тема 5. Хімічна лабораторія Model ChemLab.

Віртуальні хімічні та фізичні лабораторії та стимулятори. ChemLab: інтерфейс та можливості використання.

Використання технологій мобільного навчання та доповненої реальності на уроках хімії, фізики, біології та природознавства.

Тема 6. Термодинаміка 2.3 – довідник термодинамічних та термохімічних властивостей індивідуальних речовин. Інтерфейс та можливості. Робота з базами даних. Використання інформації.

Тема 7. Chemister CDB 1.1.0 – бази даних фізико-хімічних та токсикологічних властивостей речовин. Інтерфейс та можливості. Робота з базами даних. Використання інформації.

Тема 8. kvazar-micro – інтерактивний посібник з хімії для практичної підготовки та контролю знань.

Можливості використання. Набуття практичних навичок роботи. Створення власних віртуальних експериментальних розробок. Використання технологій мобільного навчання та доповненої реальності на уроках хімії, фізики, біології та природознавства.

Тема 9. Навчальні сайти з хімічних дисциплін. Бібліотеки фахових книг, програмного забезпечення, хімічні енциклопедії.

Основні принципи роботи з системами. Параметри та можливості пошуку.

Тема 10. Основи роботи з пакетом ChemOffice.

Можливості пакету *ChemOffice Pro 2000*. Інтерфейс пакету (головне меню, панелі інструментів) та принципи роботи з ним. Вивчення структури

вбудованої бази даних та прийомів її редагування. Робота з графічними об'єктами та текстовими блоками за допомогою вбудованого редактора бази даних, робота з вбудованою таблицею Менделєєва. Робота з 2D та 3D об'єктами. Налаштування пакету.

CS ChemDraw - засіб складання і редагування структурних формул; CS Chem3D – програма для візуалізації просторової будови сполук, моделювання реакцій і фізико-хімічних розрахунків; CS ChemFinder, CS Table Editor - редактори баз даних.

Створення прогнозованих ЯМР і ПМР спектрів для різних речовин. Обробка та аналіз спектрів. Визначення будови органічних сполук за ІЧ-спектрами, спектрами комбінаційного розсіювання, ядерного-магнітного резонансу та електронного парамагнітного резонансу.

Генерування назв речовин за їх структурними формулами та побудова структурних формул за назвами речовин (по міжнародній системі IUPAC). Просторова будова та ізомерія органічних сполук: зображення структурних ізомерів, енантіомерів, стереоізомерів з хіральними атомами карбону, конформаційних ізомерів.

Основні правила запису схем хімічних реакцій. Імпорт та експорт даних. Рисування складних реакцій: заміщення та приєднання за нуклеофільним, електрофільним та радикальним механізмом, відщеплення, ізомеризації та перегрупування.

Створення і перегляд тривимірних хімічних структур. Побудова об'ємної (тривимірної) хімічної структури за написаною структурною формулою і навпаки. Розрахунок фізичних властивостей хімічних структур різними квантово-хімічними методами (ММЗ, МОРАС, метод Хюккеля та інші).

Перегляд та створення бази даних хімічних структур. Пошук хімічних структур у документах Microsoft Office (*.rtf, *.doc, *.xls та інших.), файлах хімічних структур.

Тема 11. Пакет ACD/Labs Freeware. Основи роботи та можливості.

Можливості пакету ACD/Labs Freeware . Інтерфейс пакету (головне меню, панелі інструментів) та принципи роботи з ним. Вивчення структури вбудованої бази даних та прийомів її редагування. Робота з графічними об'єктами та текстовими блоками за допомогою вбудованого редактора бази даних.

ACD/ChemSketch — молекулярний редактор двовимірних хімічних структур і графічний редактор: **Structure** (*Структура*) — молекулярний редактор; **Draw** (*Малювати*) — графічний редактор.

ACD/3D Viewer — програма моделювання і візуалізації тривимірних структур.

Створення назви сполуки за правилами IUPAC. Симуляція спектрів ЯМР. Обчислення показника ліпофільності сполуки. Ведення записів в середовищі “ACD Lab”. Пряме введення, імпорт та експорт даних.

ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА

Лекція 1

Тема. Комп'ютерні технології у викладанні хімії в школі.

Мета. Ознайомити студентів з основами, перевагами та недоліками застосування ІКТ під час викладання хімічних дисциплін та хімії в загальноосвітній школі зокрема.

Вступ. Наразі освітній процес знаходиться у стані інформатизації. Сучасні інформаційно-комунікативні технології входять в усі сфери життєдіяльності людини, і в освіту зокрема. Сучасність вимагає нових підходів до навчального процесу, нових методів, форм подання навчальної інформації. Зокрема, нові підходи потрібні і у викладанні хімії та природничих дисциплін в цілому. Одним із таких підходів є використання інформаційно-комунікативних технологій (ІКТ) під час навчального процесу. Використання ІКТ у викладанні хімії дозволяє інтенсифікувати освітній процес, прискорити передачу знань і досвіду, а також підвищити якість навчання й освіти.

План

- 1. Впровадження інформаційно-комунікативних технологій у навчальний процес.**
- 2. Можливості використання ІКТ під час викладання хімії.**
- 3. Умови активного впровадження ІКТ в освітній процес.**
- 4. Основні напрямки використання інформаційних технологій у процесі навчання хімії.**
- 5. Використання педагогічних програмних засобів з хімії.**
- 6. Застосування комп'ютерних моделей у навчанні хімії.**
- 7. Технологія роботи з ресурсами Інтернет на уроках хімії.**

Зміст лекції

1. Впровадження інформаційно-комунікативних технологій у навчальний процес.

Наразі освітній процес знаходиться у стані інформатизації. Сучасні інформаційно-комунікативні технології входять в усі сфери життєдіяльності людини, і в освіту зокрема. Сучасність вимагає нових підходів до навчального процесу, нових методів, форм подання навчальної інформації. Зокрема, нові підходи потрібні і у викладанні хімії та природничих дисциплін в цілому. Одним із таких підходів є використання інформаційно-комунікативних технологій (ІКТ) під час навчального процесу. Використання ІКТ у викладанні хімії дозволяє інтенсифікувати освітній процес, прискорити передачу знань і досвіду, а також підвищити якість навчання й освіти.

Останнім часом помітно зросла кількість досліджень, предметом яких стало використання ІКТ у навчальному процесі. Цій темі в Україні присвячені дослідження таких науковців, як: О.М. Бондаренко, В.Ф. Заболотний, Г.О. Козлакова, О.А. Міщенко та інші. Розробкою і впровадженням у навчальний процес нових інформаційних технологій активно займаються такі дослідники як: Дмитреєва Е.И., Новиков С.У., Полілов Т.А. та багато інших.

Питання використання ІКТ для навчання хімії вже розглядалося різними вченими. Так, В.Ф. Заболотний, обґрунтовуючи необхідність використання ІКТ в освітньому процесі, зазначив, що дидактичні можливості певних технічних засобів співвідносні з певними бажаними характеристиками [1]. І.А. Смольяннікова зазначає, що «сучасний фахівець в будь-якій галузі повинен володіти навичками використання інформаційних та комунікаційних технологій у професійному контексті» [15]. Сучасний рівень розвитку суспільства вимагає від тих, хто навчається досвіду існування в інформаційному просторі. В контексті шкільної освіти це веде до розгляду можливостей ІКТ стосовно створення технологічного навчального середовища (тобто навчального середовища, в якому поряд із традиційними матеріалами та

видами роботи використовуються можливості ресурсів ІКТ та навчальні матеріали нового покоління).

Впровадження інформаційно-комунікативних технологій у навчальний процес характеризується:

- поступовим нарощуванням темпу;
- зміною кількісних та якісних характеристик засобів;
- збільшенням обсягу інформаційних потоків, зміною технологій викладання;
- трансформацією систем взаємостосунків у системах «учитель – учень», «учитель – група учнів», «учень – група учнів» [19].

Окрім того, впровадження ІКТ у навчальний процес вимагає розробки та практичного використання науково-методичного забезпечення, створення й ефективного застосування інструментальних засобів і систем комп'ютерного навчання й контролю знань, системної інтеграції цих технологій в існуючі навчальні процеси та організаційні структури.

Таким чином, сучасність вимагає введення ІКТ в освітній процес, але методика впровадження ІКТ в процес навчання ще не достатньо розроблена.

Комп'ютер сприяє розвитку самостійності і творчих здібностей учнів, спеціальної або загальної обдарованості, формуванню політехнічних знань, забезпечує інтенсифікацію діяльності вчителя та учнів на уроці і в процесі підготовки до нього, здійснення диференціації й індивідуалізації навчання, посилює міжпредметні зв'язки, дозволяє змінити саму технологію надання освітніх послуг, зробити урок більш наочним і цікавим. А все це разом дає змогу покращити якість навчання у школі.

Практика показує, що проблеми нинішньої шкільної освіти можуть бути вирішені на якісно іншому рівні завдяки застосуванню комп'ютерною техніки і новітніх КТ. Так, використання телекомунікаційних та інформаційних ресурсів Інтернету дозволяє не тільки доповнити інформаційне наповнення навчальних дисциплін у загальноосвітній школі, а й суттєво змінити методики їх викладання, оновити зміст навчання, якісно вдосконалювати фаховість

педагога. Сучасні ІКТ докорінно змінили наше уявлення про традиційні форми навчання [10]. Оскільки найбільш доступним середовищем для реалізації освітянських програм нині є Інтернет, то закономірним постає поєднання і створення освітянського простору, що надасть величезних можливостей для освітніх установ різного рівня в реалізації свого освітнього потенціалу на більш досконалому та якісному рівні.

На уроках з природничо-математичних дисциплін комп'ютер використовується як засіб навчання і як інструмент автоматизації навчальної діяльності. Його можна застосовувати впродовж усього уроку при вивченні нового матеріалу, його повторенні і закріпленні, контролі знань, а також при підготовці до занять на уроці. Однак необхідно використовувати різні способи застосування ІКТ на уроках, оскільки монотонне їх застосування стримує цілісне і творче сприйняття навчального матеріалу. Впровадження інформаційно-комунікаційних технологій – це освітня стратегія викладання і навчання. Особливість технології в тому, що її не обов'язково використовувати на всіх етапах уроку, бо вона потребує певного підґрунтя, додаткових зусиль, часу і є доречною при розв'язанні низки проблемних задач сучасної методики викладання уроку хімії.

2. Можливості використання ІКТ під час викладання хімії.

Визначення сучасного етапу розвитку суспільства, інтенсивний розвиток сучасних інформаційно-комунікативних технологій, визнання необхідності освіти протягом всього життя людини – все це визначає необхідність широкого використання інформаційних технологій в системі освіти в цілому та при викладанні природничих дисциплін зокрема.

Сучасні інформаційні технології – це форми і методи передачі інформації за допомогою новітніх засобів та пристроїв зв'язку (телебачення, комп'ютеризація, Інтернет та мобільна мережа зв'язку).

Інформаційно-комунікаційні технології – це сукупність методів, засобів і прийомів, що використовуються для добору, опрацювання, зберігання, подання,

передавання різноманітних даних і матеріалів, необхідних для підвищення ефективності різних видів діяльності [12].

На думку доктора технічних наук, професора, академіка НАПНУ В.Ю.Бикова «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 створює додаткові умови і спричинює появу нових цілей та оновлення змісту освіти, дає змогу досягти значно більших результатів навчальної діяльності, забезпечити для кожного учня формування і розвиток їхньої власної освітньої траєкторії» [4].

Розглядаючи проблему інтеграції ІКТ у освітньому процесі, варто зазначити, що на сучасному етапі значна увага приділяється матеріально-технічному, програмному, методичному забезпеченню щодо використання ІКТ у навчально-виховному процесі. Проведення моніторингових, аналітичних та інших досліджень на рівні держави, участь у міжнародних проектах, сприяє виробленню стратегічних підходів до впровадження ІКТ у навчальний процес, що значною мірою сприяє виявленню тенденцій та аналізу проблем і просуває їх розв'язання. Сьогодні в Україні на державному рівні робляться певні кроки для впровадження ІКТ у освітній процес.

Інформатизація суспільства пов'язана, насамперед, з розвитком комп'ютерної техніки, різноманітного програмного забезпечення, глобальних мереж (Інтернет) та мультимедійних технологій.

Мультимедійні засоби навчання займають важливе місце у розвитку інформаційного суспільства. Мультимедійні засоби навчання за С.У. Гончаренко – це комплекс апаратних і програмних засобів, що дозволяють користувачеві спілкуватися з комп'ютером, використовуючи різноманітні, природні для себе середовища: графіку, гіпертексти, звук, анімацію, відео. Мультимедійні системи надають користувачеві персонального комп'ютера такі види інформації: текст; зображення; анімаційні картинки; аудіокоментарі; цифрове відео. Технології, які дозволяють з допомогою комп'ютера

інтегрувати, обробляти і водночас відтворювати різноманітні типи сигналів, різні середовища, засоби і способи обміну інформацією, називаються мультимедійними [7].

Нові мультимедійні засоби, в яких використовується аудіо-візуальний формат, надають такі можливості, які традиційні підручники надати не можуть.

І.В. Ставицька пропонує [17] різні способи застосування засобів мультимедіа в навчальному процесі, серед яких:

- використання електронних лекторів, тренажерів, підручників, енциклопедій;
- розробка ситуаційно-рольових та інтелектуальних ігор з використанням штучного інтелекту;
- моделювання процесів і явищ;
- забезпечення дистанційної форми навчання;
- проведення інтерактивних освітніх телеконференцій;
- побудова систем контролю й перевірки знань і умінь студентів (використання контролюючих програм-тестів);
- створення і підтримка сайтів навчальних закладів;
- створення презентацій навчального матеріалу;
- здійснення проєктивної і дослідницької діяльності студентів тощо [1].

Мультимедійні засоби дозволяють задіяти майже всі органи чуття студентів, поєднуючи друкований текст, графічне зображення, рухоме відео, статичні фотографії та аудіозапис, створюючи «віртуальну реальність» справжнього спілкування. Доведено, що застосування мультимедійних матеріалів та комп'ютерних мереж скорочує час навчання майже втричі, а рівень запам'ятовування через одночасне використання зображень, звуку, тексту зростає на 30-40 відсотків [17].

Інтенсивність комп'ютеризації уроків хімії визначається їх спрямованістю: ті, що проводяться з елементами мультимедіа та цілком комп'ютеризовані. Для перших характерним є епізодичне звертання до комп'ютерних засобів для розв'язання окремих завдань уроку: перевірка знань

з попередньої теми, демонстрація експериментів, набуття нових умінь та знань, виконання тренувальних вправ, контролю. Повністю комп'ютеризований урок (мультимедійний урок-лекція) – для досягнення навчальних цілей під час вивчення нового матеріалу. На семінарських заняттях доцільно застосовувати мультимедійні презентації, що характеризує значний ступінь самостійності учнів у набутті і застосуванні знань.

Великі можливості у підвищенні ефективності процесу викладання хімії є використання *мережі Інтернет*. Зазвичай, найпростіше застосування Інтернету у навчанні хімії – це використання його як джерела додаткових матеріалів.

Інтернет на сучасному етапі є найпотужнішим джерелом інформації у науковій та освітянсько-навчальній сферах. У глобальній мережі є електронні версії наукових і науково-популярних видань, розміщуються матеріали наукових конференцій, статті дискусійного характеру тощо, найшвидше повідомляються наукові новини, надаються коментарі науковців, оприлюднюються аудіо – та відеоматеріали. Ознайомлення з такими джерелами дає змогу вчителю з'ясувати сутність і достовірність інформації; зробити висновок про доцільність введення відповідного додаткового матеріалу у зміст загальної предметної освіти з метою його оновлення; набути знань з наукової проблеми, достатніх для грамотного адекватного викладу матеріалу на рівні, адаптованому до навчальних можливостей учнів, а також для надання компетентних відповідей на запитання учнів [2].

Інтернет - технології займають все більшу вагу в реалізації практичних завдань в освіті. Кількість освітянських Інтернет-ресурсів постійно зростає. Це вимагає поєднання зусиль щодо створення відповідного освітянського середовища, у вигляді інформаційного ресурсу, здатного забезпечувати інформаційну, комунікативну та дослідницьку складові [5].

Однак, найповніше можливості Інтернету розкриваються при використанні його у навчальній аудиторії: це можуть бути спеціальні тренувальні вправи для дистанційного навчання, творча діяльність цілих колективів [13].

3. Умови активного впровадження ІКТ в освітній процес.

Для впровадження ІКТ та використання Інтернет-ресурсів з метою підвищення якості сучасної природничо-математичної освіти необхідні наступні умови [22]:

- відповідна матеріальна база, тобто наявність комп'ютерів, обладнання, програм;
- інформаційна культура вчителя, відповідна підготовка викладача до використання ІКТ, яка передбачає оволодіння вчителем певними вміннями та навичками, які свідчать про його досконале володіння комп'ютером на рівні середньо досвідченого користувача;
- інформаційна культура учня: від того, наскільки досконало учень володіє комп'ютером на рівні користувача залежить, чи досягне праця вчителя природничих дисциплін успіху;
- наявність значного педагогічного досвіду: з ІКТ може працювати лише той вчитель, який користується всім арсеналом традиційних методик, урок у комп'ютерному класі вимагає від викладача додаткових психологічних та методичних зусиль, знання методик ефективного застосування комп'ютерних програм, наявність відповідного педагогічного програмного забезпечення, що відповідало б навчальним програмам викладання хімії.

Існують певні проблеми щодо застосування ІКТ, які є загальними для багатьох освітніх закладів України. Це, насамперед, недостатня матеріально-технічна база, яка не дозволяє широко використовувати ПК для вивчення хімії, недостатнє програмне забезпечення, відсутність відповідних науково-методичних засобів, необхідних для організації самостійної роботи учнів [7], обмеженість доступу до Інтернету. Однак комп'ютеризація навчання почалася і успішно розвивається.

Надзвичайно важливою у використанні ІКТ на заняттях та поза ними є роль учителя. Необхідно, щоб кожен учитель зрозумів: комп'ютер у навчальному процесі – не механічний педагог, чи заступник/аналог учителя, а

засіб навчання, що підсилює і розширює можливості його навчальної діяльності. Те, що учитель бажає одержати в результаті використання машини, у неї необхідно запрограмувати. Тому учитель має бути інформаційно та інформативно компетентним [22].

4. Основні напрямки використання інформаційних технологій у процесі навчання хімії.

При навчанні хімії, найбільш природним є використання комп'ютера, виходячи з особливостей хімії як науки. Наприклад, для моделювання хімічних процесів і явищ, лабораторного використання комп'ютера в режимі інтерфейсу, 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 практично неможливо показати в шкільній лабораторії, але вони можуть бути показані за допомогою комп'ютера [21].

Використання комп'ютерних моделей дозволяє розкрити істотні зв'язки досліджуваного об'єкта, глибше виявити його закономірності, що, у кінцевому рахунку, веде до кращого засвоєння матеріалу. Учень може досліджувати явище, змінюючи параметри, порівнювати отримані результати, аналізувати їх, робити висновки. Наприклад, задаючи різні значення концентрації реагуючих речовин (у програмі, що моделює залежність швидкості хімічної реакції від різних факторів), учень може простежити за зміною об'єму газу, що виділяється, і т.д.

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 учнем навички дослідницької діяльності, формує пізнавальний інтерес, підвищує мотивацію, розвиває наукове мислення [21].

Третій напрямок використання ІКТ у процесі навчання хімії – програмна підтримка курсу. Зміст програмних засобів навчального призначення, застосовуваних при навчанні хімії, визначається цілями уроку, змістом і послідовністю подачі навчального матеріалу. У зв'язку з цим, усі програмні засоби використовувані для комп'ютерної підтримки процесу вивчення хімії, можна розділити на програми [21]:

- довідкові посібники по конкретних темах;
- рішення розрахункових і експериментальних задач;
- організація і проведення лабораторних робіт;
- контроль і оцінка знань.

На кожному конкретному уроці можуть бути використані визначені програми, виходячи з цілей уроку, при цьому функції вчителя і комп'ютера різні. Програмні засоби для ефективного застосування в навчальному процесі повинні відповідати курсу хімії профільного навчання, мати високий ступінь наочності, простоту використання, сприяти формуванню загальних навчальних і експериментальних умінь, узагальненню і поглибленню знань і т.д.

З підвищенням мотивації навчання за рахунок використання комп'ютера на уроці, підвищення рівня індивідуалізації навчання і можливості організації оперативного контролю за засвоєнням знань комп'ютерні технології можуть бути ефективно використані для формування основних понять, необхідних для розуміння мікросвіту (будова атома, молекул), таких найважливіших хімічних понять як "хімічний зв'язок", при вивченні високотемпературних процесів (кольорова і чорна металургія), реакцій з отруйними речовинами (галогени), тривалих за часом хімічних дослідів (гідроліз нуклеїнових кислот) і т.д. Відомо, однак, що, на даному етапі комп'ютерні технології у викладанні хімії в школі використовуються дуже рідко. Цьому є причини як об'єктивного, так і суб'єктивного характеру. Серед першого типу причин, безумовно, головними є недостатня забезпеченість загальноосвітніх шкіл сучасними комп'ютерами і явно недостатня кількість відповідних комп'ютерних програм. Проте, процес комп'ютеризації шкіл хоча і повільно, але йде. Як причину суб'єктивного

характеру модно згадувати так називану "комп'ютерофобію", що приписують вчителям-предметникам. Цей фактор є надуманим.

У учителів-предметників є значний інтерес до використання комп'ютерних технологій, причому незалежно від віку і стажу роботи. Більш важливим є те, що сучасні освітні стандарти дають учителю визначену волю у виборі тем і розміщенні акцентів при викладанні дисципліни. Досвід застосування комп'ютерних технологій [20] у навчанні хімії в школі дозволяє стверджувати, що для одержання високого навчального ефекту важливим є їхнє систематичне використання, як на стадії вивчення матеріалу, так і на стадії оперативного контролю за засвоєнням знань, а для цього також необхідний різноманітний асортимент педагогічних програмних засобів (ППЗ). Нові можливості, виявлені в результаті аналізу педагогічної практики використання ППЗ, дозволяють значно поліпшити навчально-виховний процес. Особливо це стосується предметів природно-наукового циклу, у тому числі хімії, вивчення якої зв'язане з процесами, схованими від безпосереднього спостереження, і тому важко сприймається дітьми. ППЗ дозволяють візуалізувати такі процеси, надаючи одночасно з цим можливість багаторазового повторення і просування в навчанні зі швидкістю, сприятливою для кожної дитини в досягненні розуміння того чи іншого навчального матеріалу [20]. Педагогічні програмні засоби, будучи частиною програмних засобів навчального призначення, забезпечують також можливість прилучення до сучасних методів роботи з інформацією, інтелектуалізацію навчальної діяльності.

Таким чином, використання даних педагогічних програмних засобів у навчанні хімії дає можливість [20]:

- 1) індивідуалізувати і диференціювати процес навчання за рахунок можливості вивчення з індивідуальною швидкістю засвоєння матеріалу;
- 2) здійснювати контроль зі зворотним зв'язком, з діагностикою помилок і оцінкою результатів навчальної діяльності;
- 3) здійснювати самоконтроль і самокорекцію;

4) здійснювати тренування в процесі засвоєння навчального матеріалу і самопідготовку учнів;

5) візуалізувати навчальну інформацію за допомогою наочного представлення на екрані ЕОМ даного процесу, у тому числі схованого в реальному світі;

6) проводити лабораторні роботи в умовах імітації в комп'ютерній програмі реального чи досвіду експерименту;

7) формувати культуру навчальної діяльності того, якого навчають, і навчального [20].

Перераховані вище можливості змінюють структуру традиційної суб'єкт-об'єктної педагогіки [20], а віртуалізація деяких процесів з використанням анімації служить формуванню в учня наочно-образного мислення і більш ефективному засвоєнню навчального матеріалу.

Ще один важливий висновок – важливими є не тільки ППЗ, але і методики їхнього використання, тобто рекомендації з організації уроків. Як правило, для досвідченого вчителя не важко на основі комп'ютерної програми розробити відповідний урок. Молодим же вчителям для цього необхідна допомога у виді планів-конспектів, методичних рекомендацій з використання ППЗ на різних етапах уроку й у класах з різним рівнем підготовки учнів. Таким чином, найбільш насущним завданням, ви рішення якого дозволить зрушити з "мертвої точки" упровадження комп'ютерних технологій у навчанні предметів природничо-наукового циклу, є розробка ППЗ і методик їхнього використання. Було б дуже корисно об'єднати зусилля зацікавлених учителів хімії з різних регіонів країни. Обмін досвідом, безумовно, прискорить комп'ютеризацію шкільного освітнього процесу [20].

5. Використання педагогічних програмних засобів з хімії.

Уроку з комп'ютерною підтримкою властиво [23]:

- принцип адаптивності: пристосування комп'ютера до індивідуальних особливостей дитини;

- керованість: у будь-який момент можлива корекція вчителем процесу навчання;
- інтерактивність і діалоговий характер навчання;
- оптимальне поєднання індивідуальної та групової роботи;
- підтримання в учня стану психологічного комфорту при спілкуванні з комп'ютером;
- необмежене навчання.

Широкі можливості технологія має в позакласній роботі з предмету, при написанні науково-дослідницьких робіт, оскільки тут немає обмежень часу. При цьому комп'ютер виконує важливі дві функції [23]:

1. Як джерело навчальної інформації; наочний посібник; тренажер; засіб діагностики і контролю.
2. Як робочий інструмент: засіб підготовки текстів, їх зберігання; графічний редактор; засіб підготовки виступів; обчислювальна машина великих можливостей.

На сучасну пору у своїй роботі вчителі використовують вітчизняні навчальні комп'ютерні програми, які є демонстраційно-навчальними з елементами моделювання, містять тестові блоки, ілюстративні й відеоблоки, звуковий супровід. Прикладами сучасних ППЗ з хімії є: «Таблиця Д.І.Менделєєва», «Бібліотека електронних наочностей. 8-9 класи», «Бібліотека електронних наочностей. 10-11 класи», «Уроки хімії.8 клас», «Уроки хімії. 9 клас», «Органічна хімія. 10-11 класи», «Віртуальна хімічна лабораторія. 8-11 класи», електронний підручник «Хімія. 7 клас».

Відповідно до змісту навчального матеріалу дані ППЗ містять тексти стандартного підручника, біографічний матеріал та портрети видатних хіміків, досліди, словник термінів, відеофрагменти, інтерактивне тематичне тестування. На уроках хімії використовується мультимедійний проектор, з допомогою якого реалізуються різні види освітньої діяльності. Допомагає в роботі вчителя оснащеність кабінету хімії комп'ютером, підключеним до мережі Інтернет.

Використання ІКТ надає широкі можливості для суттєвого підвищення якості навчального процесу, підвищує як рівень засвоєння знань, так і інтерес до навчання в цілому. Уроки із застосуванням ІКТ набувають іншого характеру та стилю, потребують нових методичних підходів. Значною перевагою ПК у порівнянні з іншими технічними засобами навчання є можливість індивідуального навчання.

Бази даних, електронні схеми й таблиці, мережі, експертні системи, засоби мультимедія, електронні посібники, задачники, тести, віртуальні лабораторії – це інструменти, які дозволяють вчителю хімії підвищувати якість навчання хімії, стимулюють й організують мисленнєву діяльність учнів, розвивають критичне, емпіричне й евристичне мислення, збільшують загальнокультурний, інтелектуальний і творчий потенціал школярів.

В якості очікуваних результатів впровадження ІКТ виділяють [23]:

- формування ключових компетенцій учнів у процесі навчання та у позаурочній діяльності;
- підвищення мотивації до навчання учнів;
- оволодіння комп'ютерною грамотністю учнями, підвищення рівня комп'ютерної грамотності у вчителя;
- організацію самостійної та дослідницької діяльності учнів; створення власного банку навчальних і методичних матеріалів, готових до використання у навчально-виховному процесі;
- розвиток просторового мислення, пізнавальних здібностей учнів;
- естетичну привабливість уроків.

Впровадження інформаційно-комунікаційних технологій дозволяє вчителю урізноманітнити навчальний процес, стимулює навчальну діяльність учнів, робить уроки хімії незабутніми, наочними, барвистими, інформативними, інтерактивними, заощаджує час учителя та учня, дозволяє працювати учневі у своєму темпі, дозволяє вчителю працювати з учнем диференційовано і індивідуально, дає можливість оперативно проконтролювати та оцінити результати навчання. Постійно зростає інтерес учнів до предмету,

підвищується результативність роботи вчителя, збільшується відсоток учнів, які навчаються на високому і достатньому рівні, обирають хімію як предмет для ЗНО та вступають до ВНЗ, де хімія є профільним предметом [23].

Загалом використання комп'ютера на уроці забезпечує: зростання якісного рівня використання наочності та ілюстративності на уроці; дотримання логіки у поданні навчального матеріалу, що позитивно впливає на збагачення знань учнів; підвищення загальної результативності уроку; встановлення і розширення міжпредметних зв'язків; можливість організації проектної діяльності учнів під керівництвом вчителя; встановлення більш тісних і довірливих взаємин вчителя і учнів; краще оволодіння учнями комп'ютерною технікою та сучасними ІКТ, що стане їм необхідним у різних сферах діяльності [23].

6. Застосування комп'ютерних моделей у навчанні хімії.

Серед різних типів педагогічних програмних засобів особливо виділяються ті, у яких використовуються комп'ютерні моделі. Застосування комп'ютерних моделей дозволяє не тільки підвищити наочність процесу навчання й інтенсифікувати його, але і кардинально змінити цей процес [20].

Моделі можуть використовувати для розв'язання різних задач. Р.Ю. Шенон виділяє п'ять типів моделей за функціональним призначенням [20]:

- засоби осмислення дійсності,
- засоби спілкування,
- інструменти прогнозування,
- засоби постановки експериментів,
- засоби навчання і тренажу.

Останній тип моделей також називають навчальними комп'ютерними моделями (НКМ).

У вивченні шкільного курсу хімії виділяють кілька основних напрямків, де виправдане використання НКМ [20]:

- наочне представлення об'єктів і явищ мікросвіту;
- вивчення виробництв хімічних продуктів;

- моделювання хімічного експерименту і хімічних реакцій.

Усі моделі, використовувані у викладанні хімії, можна розділити за рівнем об'єктів, що представляються, на дві групи: моделі мікросвіту і моделі макросвіту. *Моделі мікросвіту* відображають будову об'єктів і зміни, що відбуваються в них, на рівні їхнього атомно-молекулярного представлення. *Моделі макросвіту* відображають зовнішні властивості модельованих об'єктів і їхні зміни. Моделі таких об'єктів, як хімічні речовини, хімічні реакції і фізико-хімічні процеси, можуть бути створені як на рівні мікросвіту, так і на рівні макросвіту.

При вивченні хімії учні стикаються з об'єктами мікросвіту буквально з перших уроків, і звичайно ж НКМ, що моделюють такі об'єкти, можуть стати неоціненними помічниками, наприклад, при вивченні будови атомів, типів хімічного зв'язку, будови речовини, теорії електролітичної дисоціації, механізмів хімічної реакції, стереохімічних уявлень і т.д. Усі ці перераховані моделі реалізовані в програмах "1С: Репетитор. Хімія", ChemLand, "Хімія для всіх", CS Chem3D Pro, Crystal Designer, "Збери молекулу", "Organic Reaction Animations" і ін.

Моделі хімічних реакцій, лабораторних робіт, хімічних виробництв, хімічних приладів (комп'ютерні моделі макросвіту) реалізовані в наступних програмах:

- "Хімія для усіх - 2000";
- "Хімклас";
- ChemLab;
- IR and NMR Simulator і ін.

Подібні моделі використовуються в тих випадках, коли немає можливості за якимись причинами здійснити лабораторні роботи в реальних умовах і немає можливості в реальності познайомитися з досліджуваними технологічними процесами.

Використання перерахованих вище програмних засобів на уроках хімії мають наступні переваги [20]:

- •значний обсяг матеріалу, що охоплює різні розділи курсу шкільної хімії;
- •поліпшується наочність подачі матеріалу за рахунок кольору, звуку і руху;
- •наявність демонстрацій тих хімічних досвідів, що небезпечні для здоров'я дітей (наприклад, досвіди з отруйними речовинами);
- •прискорення на 10-15% темпу уроку за рахунок посилення емоційної складової;
- •учнями виявляють цікавість до предмета і легко засвоюють матеріал (підвищується якість знань учнів).

Однак деякі програмні продукти мають недоліки. Наприклад, одним з головних недоліків програми "1С: Репетитор. Хімія" є відсутність діалогу учня з комп'ютером при засвоєнні ним навчального матеріалу і виконанні розрахункових задач. Це утрудняє й обмежує використання вчителем даного комп'ютерного продукту в навчальному процесі в школі.

Тільки органічна співпраця вчителя інформатики і вчителя хімії буде сприяти поліпшенню процесу навчання хімії. На уроках інформатики учні вивчають різні інформаційні технології, представлені в пакеті Microsoft Office. Наприклад, учні, вивчаючи програму PowerPoint, можуть уже самі створити презентацію (міні-підручник у вигляді слайдів) за окремим матеріалом підручника хімії. А для реалізації можливості навчання, тестування і контролю знань учнів використовується убудована у Microsoft Office мова програмування Visual Basic for Applications (VBA), що дозволяє розміщувати на слайдах форми й елементи керування для ведення діалогу (інтерактивні майстри-шаблони) [20].

7. Технологія роботи з ресурсами Інтернет на уроках хімії.

Учитель хімії може використовувати інформаційні ресурси Інтернет за наступними напрямками [20]:

1. Самоосвіта, тобто вивчення досвіду колег в інших містах України й інших країнах. Підготовка до тематичних семінарів шкільних і муніципальних

методичних об'єднань. (Побічно це підвищує загальний рівень підготовки вчителя і рівень викладання.)

2. Підготовка конспектів і дидактичних матеріалів з нових курсів і поглиблення змісту традиційних курсів. Підготовка атестаційних матеріалів.

3. Позакласна робота учнів при підготовці рефератів, доповідей, повідомлень за індивідуальними творчими завданнями, під час роботи з тематики шкільних проектів.

4. Використання безпосередньо на уроках під час самостійної роботи учнів довідкових матеріалів, довідкових баз даних, що є в мережі, методичних матеріалів, схем, таблиць, малюнків.

5. Тестування знань учнів за окремими предметами або розділами курсів. (Для цього на деяких серверах чи сайтах є програми тестування з вільним доступом. У США й у ряді інших країн можна дистанційно у формі тестування здавати іспити в багато університетів.)

6. Демонстрація безпосередньо на уроках за допомогою телевізора або проектора, документів, графічних матеріалів, таблиць, діаграм з баз даних мережі.

7. Робота безпосередньо на уроках з навчальними інтерактивними моделями з Мережі, наприклад робота з інтерактивною таблицею елементів.

Висновки.

Інформатизація істотно вплинула на процес здобуття знань. Нові технології навчання на основі інформаційно-комунікативних дозволяють збільшити швидкість сприймання, розуміння та глибину засвоєння величезних масивів знань.

Актуальність використання інформаційних технологій у вивченні хімії обумовлено тим, що в комп'ютерних технологіях закладені невичерпні можливості для навчання учнів на якісно новому рівні. Вони надають широкі можливості для розвитку особистості учнів і реалізації їх здібностей. Комп'ютерні технології істотно підсилюють мотивацію вивчення хімії,

підвищують рівень індивідуалізації навчання, інтенсифікують процес навчання і т.д.

Нові засоби навчання і нові інформаційні технології вимагають високого ступеня підготовленості, навченості і готовності учителів застосовувати різні досягнення інформаційних технологій у процесі навчання. Вчителям слід усвідомити, що без удосконалення і розширення своїх знань і навичок у сфері використання інформаційних технологій вони можуть відстати від своїх учнів і тим самим втратити авторитет вчителя.

Сучасний учитель – це генератор ідей, організатор, режисер, який визначає ролі і процес навчання, поєднуючи традиційні і новітні методики, прийоми і засоби. Він повинен знайти мотивацію для учня і побудувати його діяльність так, щоб в останнього виникло бажання пізнавати і відкривати нове.

Моделі хімічних реакцій, лабораторних робіт, хімічних виробництв, хімічних приладів (комп'ютерні моделі макросвіту) реалізовані в наступних програмах: «Хімія для усіх – 2000»; «Химкласс»; ChemLab; IR and NMR Simulator і ін. Подібні моделі використовуються в тих випадках, коли немає можливості за якимись причинами здійснити лабораторні роботи в реальних умовах і немає можливості в реальності познайомитися з досліджуваними технологічними процесами.

Література

1. Алборова С.З. Телекоммуникации как средство развития познавательного интереса учащихся: Автореф...дис. канд. пед. наук: 13.00.01 / Северо-Осетинский гос. ун-т им. К. Л. Хетагурова. – Владикавказ, 1999. – 14 с.
2. Андреев А. А. Комп'ютерні та телекомунікаційні технології в сфері освіти / А. А. Андреев / Шкільні технології. – 2007. – № 3. – С. 151–170.
3. Ахметов М.А., Денисова О.Ф. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. -С. 35.
4. Биков В.Ю. Моделі організаційних систем відкритої освіти: монографія / В.Ю. Биков. - К.: Атака, 2008. - 684 с.

5. Бужиков Р. П. Дидактичний потенціал Інтернет-технологій в сучасній системі освіти / Р. П. Бужиков // Проблеми освіти: наук. збірник Ін-ту інновац. технологій і змісту освіти МОНМС України. – К., 2011. – Вип. 66. – Ч. II. – С. 40–45.
6. Глізбург В. І. Інформаційні технології при освоєнні топологічних і диференційовано геометричних знань в умовах безперервної математичної освіти / В. І. Глізбург // Інформатика та освіта. – 2009. – № 2. – С. 122–124.
7. Гончаренко С.У. Український педагогічний енциклопедичний словник. Видання друге, доповнене і виправлене – Рівне: Волинські обереги, 2011. - 522 с.
8. Дорошенко Ю. О. Біологія та екологія з комп'ютером / Ю. Дорошенко, Н. Семенюк, Л. Семко. – К.: Шкільний світ; Вид-во Л. Галіцина, 2005. – 128 с.
9. Жабєєв Г. В. Методика використання Інтернет-ресурсів у процесі профільного навчання фізики: дис. ... канд. пед. наук: 13.00.02 / Г. В. Жабєєв. – К., 2009. – 198 с.
10. Жалдак М. І. Комп'ютерно-орієнтовані засоби навчання математики, фізики, інформатики: посібник для вчителів / М. І. Жалдак, В. В. Лапінський, М. І. Шут. – К.: НПУ ім. М. П. Драгоманова, 2004. – 182 с.
11. Литвак М.М., Литвак Н.В. //Химия: методика преподавания. - 2005. - №4. - С. 47.
12. Носенко Е.Л. Методичні прийоми забезпечення ефективності запам'ятовування інформації у дистанційному навчальному курсі / Е.Л. Носенко, С.В. Чернишенко. – Дніпропетровськ: Вид-во ДНУ, 2003. – 127 с.
13. Основні положення доповіді Міністра освіти і науки України Василя Кременя // Освіта. – 3–4 березня 2004. – №11. – С. 2.
14. Рошупкин С.И. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. - С. 46.
15. Смольяникова И.А. Конгресс конференций «Информационные технологии в образовании» [Электронный ресурс] / И. А. Смольяникова, Ресурсы ИКТ как технологическая составляющая учебной среды для

формирования иноязычной компетенции. - Режим доступа:
<http://ito.edu.ru/2003/II/2/II-2-2196.html> .

16. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. // Компьютерная химия. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.
17. Ставицька І.В. Інформаційно-комунікаційні технології в освіті [Електронний ресурс]. – Режим доступу до статті:
<http://confesp.fl.kpi.ua/node/1103>.
18. Шабаршин В.М. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №2. - С. 33.
19. <http://iktsumskij.blogspot.com/>
20. <http://iv-frschool1.at.ua>
21. <http://school5.krimeu.com/uk/article/vikoristannya-informatsiinih-tekhnologii-na-uroka-3.html>
22. <http://teacher.ed-sp.net/index.php>
23. <http://virtkafedra.ucoz.ua>

Запитання для самоперевірки

1. Розшифруйте та дайте визначення поняттям ІКТ та ППЗ.
2. Обґрунтуйте доцільність впровадження інформаційно-комунікативних технологій у навчальний процес.
3. Вкажіть умови активного впровадження ІКТ в освітній процес.
4. Перерахуйте ППЗ та комп'ютерні моделі, які, на Вашу думку, доцільно використовувати під час вивчення хімії. Відповідь обґрунтуйте.
5. Вкажіть напрямки роботи з ресурсами Інтернет на уроках хімії.

Лекція 2

Тема. Спеціальне програмне забезпечення model ChemLab професійної діяльності хіміка, викладача хімії.

Мета. Оволодіти навичками проведення хімічного аналізу у віртуальній хімічній лабораторії. Навчити студентів використовувати сучасні інформаційні системи.

Вступ. Будь-яка педагогічна технологія є інформаційною, оскільки пов'язана із передачею та переробкою інформації учню чи студенту. Запровадження комп'ютерів як допоміжних засобів навчального процесу, внесло свої корективи у дефініцію поняття «інформаційна технологія навчання» - сукупність методів і технічних засобів збирання, організації, збереження, опрацювання, передачі й подання інформації за допомогою комп'ютерів і комп'ютерних комунікацій.

Інформаційні технології в навчанні представляють собою свого роду відгук на зміни в системі вищої професійної освіти, що стосуються оптимізації управління пізнавальною діяльністю студентів. Темпи ускладнення процесів, що протікають в сучасному суспільстві, необхідність обробки значних обсягів інформації для прийняття рішень у всіх сферах діяльності позначили проблему швидкого «старіння» знань у суспільстві з високою технологічною та інформаційною культурою. Тому проблема вдосконалення методичного підходу до викладання дисциплін на основі концепції інформаційно-модульної побудови освітнього процесу з використанням сучасних інформаційних технологій навчання, орієнтованих на підготовку фахівця високого рівня, затребуваного на сучасному ринку праці, є досить актуальною.

План

- 1. Загальна характеристика програми.**
- 2. Запуск програми та її налаштування.**
- 3. Меню програми.**
- 4. Вивчення інструментів (Оборудование, Tools).**
- 5. Основні команди та прийоми роботи у ChemLab.**

2. Запуск програми та її налаштування.

Запустити програму Model ChemLab можна командою головного меню: "ПУСК – Программы – ChemLab Eval – ChemLab". Натиснути кнопку "I agree" для підтвердження.

У модулі моделювання ChemLab потрібно вибрати алгоритм Acid-Base Titration або інший тип лабораторної роботи (рис. 2.2). Натиснути кнопку "OK" для підтвердження.

Крім вказаного алгоритму модуль моделювання ChemLab включає такі алгоритми лабораторних робіт:

- кристалізація та розділення сумішей;
- вимірювання тиску газових сумішей;
- гравіметричний аналіз;
- дослідження кінетики окисно-відновних реакцій;
- вимірювання питомого тепла реакції.

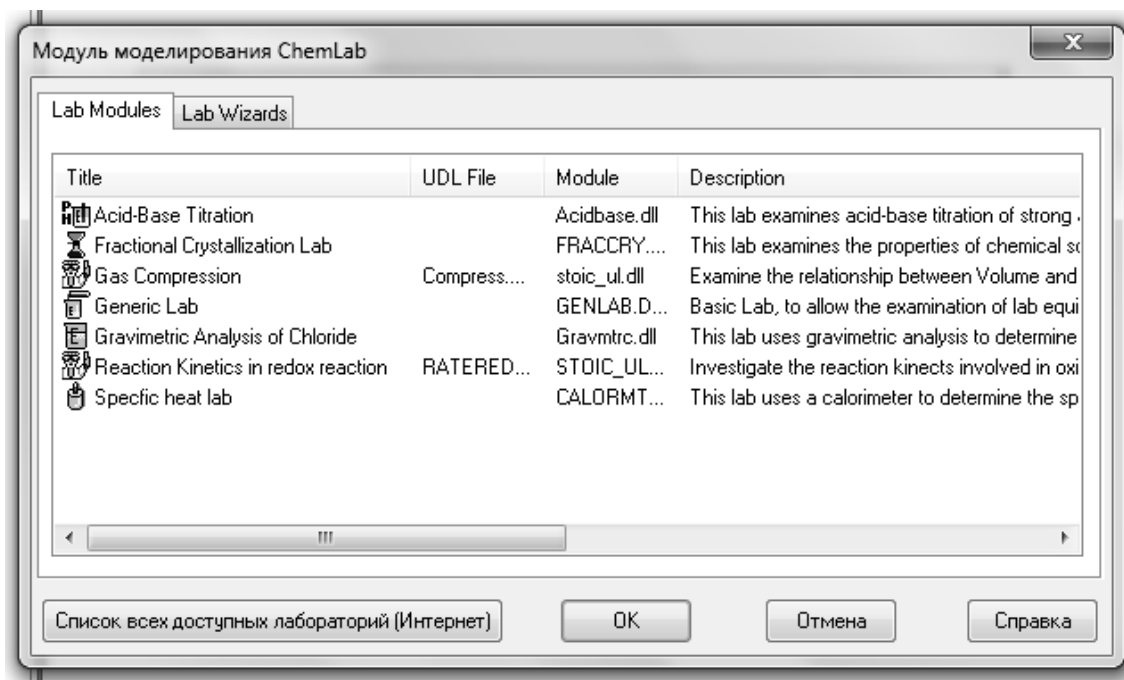


Рис. 2.2. Вибір типу лабораторної роботи у модулі моделювання ChemLab.

3. Меню програми.

Вигляд головного меню програми показаний на рис. 2.3.

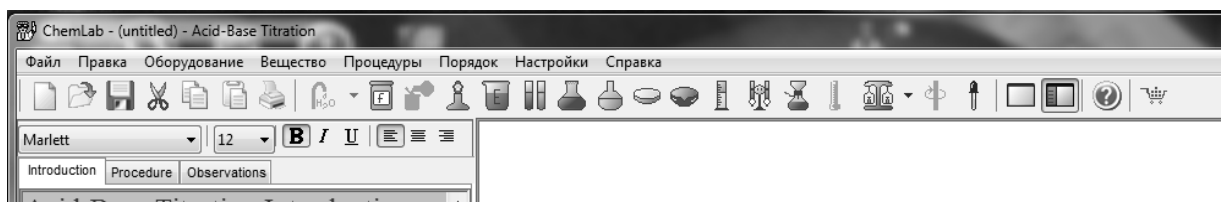


Рис. 2.3. Головне меню програми ChemLab.

Головне меню програми ChemLab включає такі пункти:

- **Файл** дає можливість створювати документи ChemLab, налаштовувати їх та зберігати.
- **Правка** дає можливість працювати з фрагментами та структурами в цілому (вирізати, копіювати, вставляти, виділяти тощо).
- **Обладнання** містить базу даних з лабораторним посудом (табл. 2.1) та обладнанням для створення установок та проведення віртуальних лабораторних робіт.
- **Речовина** містить базу даних з реактивами, потрібними для вибраного алгоритму лабораторної роботи.
- **Процедури** містить опції, потрібні для виконання роботи та обробки результатів хімічного експерименту.
- **Порядок** дає можливість об'єднувати об'єкти, комбінувати їх тощо.
- **Налаштування** містить параметри налаштування роботи режимів віртуальної лабораторії.
- **Довідка** містить відомості про окремі функції та режими роботи та про програму в цілому.

4. Вивчення інструментів (Оборудование, Tools).

Вибравши почергово кожен інструмент, можна зобразити відповідний елемент на сторінці (табл. 2.1).

5. Основні команди та прийоми роботи у ChemLab.

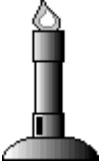
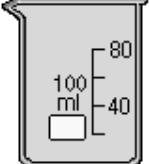
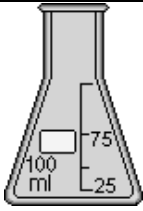
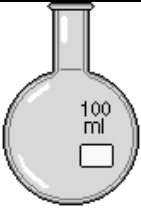
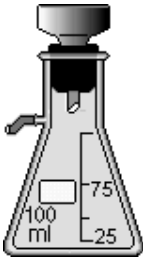
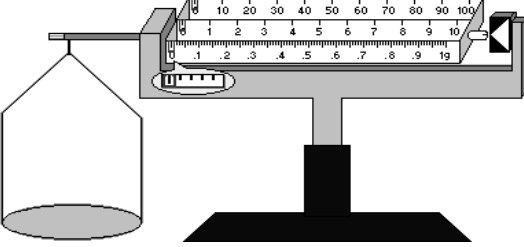
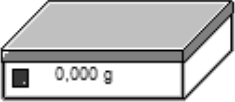
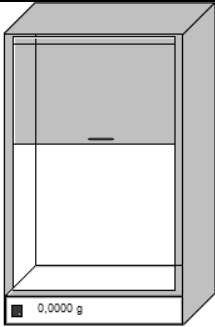
Заповнення хімічного стакана певним об'ємом реактиву. Для цього потрібно виділити стакан правою кнопкою миші і в контекстному меню виберіть опцію Chemicals. Після цього з'явиться діалогове вікно, в якому потрібно

вибрати реактив, вказати його об'єм, тип та розмір посудини, в яку його налити (рис. 2.4).

Копіювання об'єкта. Скопіювати вибраний об'єкт можна командами Правка → Копіювати та Правка → Вставити або комбінацією «гарячих клавіш» Ctrl+c (копіювати), Ctrl+v (вставити). Після цього потрібно перемістити курсором миші скопійований об'єкт на вільне місце на робочому столі.

Таблиця 2.1

Обладнання ChemLab

				
Пальник	Хімічний стакан	Пробірка	Конічна колба (Ерленмейєра)	Круглодон- на колба
				
Годинникове скло	Фарфорова чашка	Мірний циліндр	Колба Бунзена і лійка Бюхнера	
				
Технічні ваги		Електронні ваги	Аналітичні ваги	Бюретка

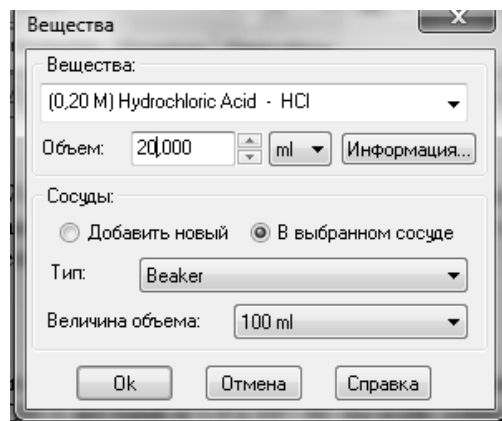


Рис. 2.4. Заповнення хімічного стакану на 100 мл 20 мл розчину хлоридної кислоти.

Додавання різних індикаторів в розчини. Для виконання цієї операції потрібно виділити об'єкт (посудину з реактивом) правою кнопкою миші і в контекстному меню виберіть опцію Indicators. Після цього в діалоговому вікні слід вказати індикатор та його об'єм (кількість крапель). Після цього потрібно проконтролювати зміну забарвлення індикаторів в даному середовищі.

Команди для заповнення посуду розчинами.

Для заповнення посудини розчином потрібно її вибрати лівою кнопкою миші і натиснути у меню команду Chemicals . Далі з'явиться діалогове вікно (рис. 6.4), в якому потрібно вказати усі параметри.

Для переливання розчинів з посудини в посудину (наприклад з колби у хімічний стакан) потрібно розчин у колбі розмістити над стаканом, вибрати його лівою кнопкою миші та натисніть команду .

Дистильованою водою посудину можна заповнити, використовуючи команду .

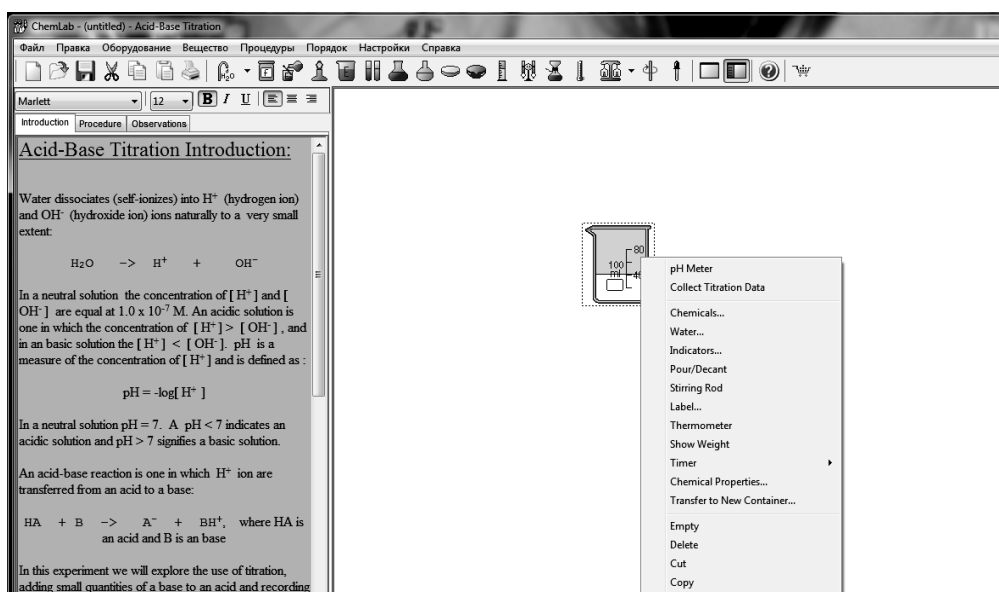
Визначення температури та pH розчину. Виділити потрібний об'єкт (заповнену реактивом посудину) правою кнопкою миші і в контекстному меню вибрати опції pH Meter та Thermometer (рис. 2.5).



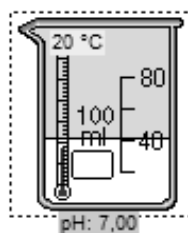
Нагрівання. Нагріти розчин можна за допомогою пальника. При активованому термометрі слід відмітити зміну температури. При доведенні розчину до кипіння, починається випаровування.

Зважування. У даному програмному продукті використовуються ваги: технічні, електронні та аналітичні. Для виконання цієї операції потрібно об'єкт для зважування перемістити на ваги і зафіксувати його масу (рис. 2.6).

Перегонка. Скласти уставку для перегонки можна, використовуючи пункт меню: «Оборудование → Оборудование для перегонки». Далі слід по черзі з контекстного меню вибрати круглodonну колбу, насадку Вюрца з термометром, холодильник, алонж, електроплитку та колбу-приймач. Після цього потрібно заповнити круглodonну колбу розчином і ввімкнути нагрів: Heating Mental Settings → Increase Heat (рис. 2.7) (припинити нагрів – Decrease Heat).

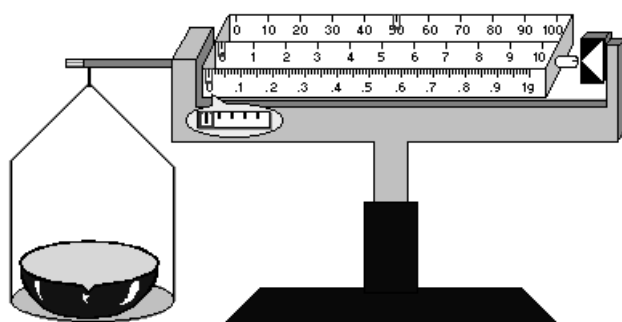


а)

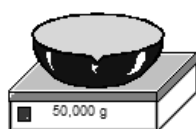


б)

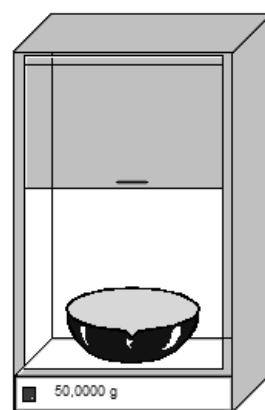
Рис 2.5. Визначення температури та рН розчину: а – вибір функцій; б – вимірювання температури і рН у розчині.



а)



б)



в)

Рис. 2.6. Зважування фарфорової чашки на технічних (а), електронних (б) та аналітичних (в) вагах.

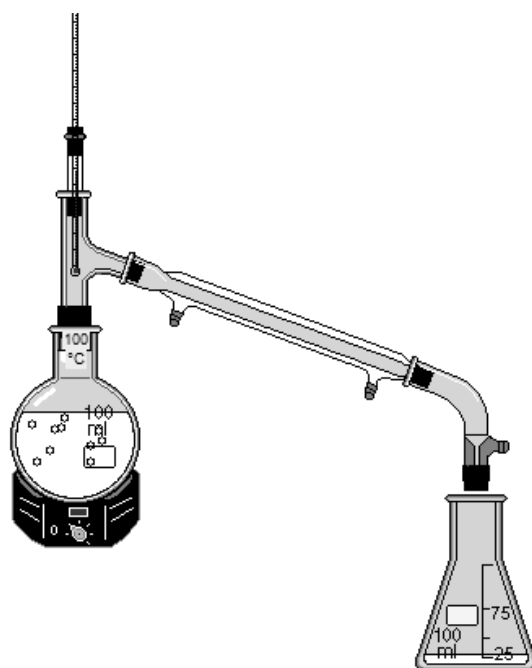


Рис. 2.7. Установка для перегонки у ChemLab.

Висновки.

Інформатизація істотно вплинула на процес здобуття знань. Нові технології навчання на основі інформаційно-комунікативних дозволяють збільшити швидкість сприймання, розуміння та глибину засвоєння величезних масивів знань.

Актуальність використання інформаційних технологій у вивченні хімії обумовлено тим, що в комп'ютерних технологіях закладені невичерпні можливості для навчання учнів на якісно новому рівні. Вони надають широкі можливості для розвитку особистості учнів і реалізації їх здібностей. Комп'ютерні технології істотно підсилюють мотивацію вивчення хімії, підвищують рівень індивідуалізації навчання, інтенсифікують процес навчання і т.д.

Model ChemLab – програма для симулювання різних хімічних реакцій. Крім самої програми в пакет установки входить: RasWin - мобільна програма для перегляду 3D-структур молекул (підтримує формати PDB, MDL і XYZ, молекулу можна обертати, переглядати за різних кутів, скопіювати в буфер обміну або зберегти в декількох графічних форматах); Періодична Таблиця – періодична система хімічних елементів.

Література

1. Ахметов М.А., Денисова О.Ф. //Химия: методика преподавания. - 2004. -№1. -С. 35.
2. Литвак М.М., Литвак Н.В. //Химия: методика преподавания. - 2005. - №4. - С. 47.
3. Рощупкин С.И. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. - С. 46.
4. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. // Компьютерная химия. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.
5. Шабаршин В.М. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №2. - С. 33.
6. Model ChemLab 2.5 (ShareWare) – програмне забезпечення фірми Model Science Software Inc.

Запитання для самоперевірки

1. Дайте загальну характеристику програми Model ChemLab.
2. Як можна запустити програму Model ChemLab?
3. Які алгоритми лабораторних робіт включає модуль моделювання ChemLab?
4. Як здійснити вибір типу лабораторної роботи у модулі моделювання ChemLab?
5. Які пункти включає головне меню програми ChemLab?
6. Вкажіть основні команди та прийоми роботи у ChemLab.

Лекція 3

Тема. Спеціальний редактор хімічних формул ChemDrawPro.

Мета. Оволодіти навичками набору і редагування хімічних формул в редакторі ChemDrawPro. Навчити студентів використовувати сучасні інформаційні системи.

Вступ. Редактор Word вважається одним із основних інструментів для ведення текстової документації. Він має широкі можливості з використання різних шрифтів, символів, внесення в документ графічних об'єктів, таблиць, баз даних тощо. Однак серйозні труднощі можуть виникнути при необхідності включити в документ велике число формул хімічних сполук чи рівнянь реакцій. І тут на допомогу приходять спеціальні редактори хімічних формул.

Розвиток сучасної комп'ютерної техніки дав можливість створення електронних мультимедійних підручників, енциклопедій та інших спеціалізованих програмних продуктів. В програмному забезпеченні такого типу поєднуються звичні текстові документи, фотографії, звуко- та відеозаписи реального часу, різноманітні інтерактивні пошукові та експертні системи. Електронні мультимедійні підручники, енциклопедії – принципово новий крок в розвитку як хімічної освіти, так і практичних аспектів.

План

1. Загальна характеристика програми.
2. Запуск програми та її налаштування.
3. Вивчення меню програми.
4. Вивчення інструментів (Tools).
5. Вправи для оволодіння основними навичками роботи.

Зміст лекції

1. Загальна характеристика програми.

ChemDrawPro від фірми Cembrige soft є одним з найбільш зручних та ефективних редакторів хімічних структур. Програма має розвинуті можливості для створення, редагування та оформлення хімічних формул, схем, рівнянь реакцій практично будь-якої складності. Зокрема, є можливість малювати проекції Фішера та Ньюмана, а також проводити аналіз зображених формул з метою виявлення помилок.

Призначений для користувача інтерфейс ChemDraw представляє три основні прийоми створення структурних формул:

а) безпосереднє зображення при активуванні кнопки "Bond" для зображення хімічного зв'язку. Для вписування знаку хімічного елементу кінець зв'язку виділяють подвійним клацанням лівої кнопки мишки;

б) генерація за назвою ІЮПАК. Активують функцію "Convert Name to Struktore";

в) використання формул заготовок (кнопки "Templates", "Acyclic Chain", "Rings").

При активній кнопці "Check Structure" програма перевіряє виділену молекулярну структуру на наявність помилок, а при активній кнопці "Clean Structure" – на відповідність параметрів молекули звичайним довжинам зв'язків і валентних кутів з автоматичним їх виправленням.

ChemOffice містить велику базу даних за номенклатурою органічних сполук, що дозволяє легко вирішувати як прямі завдання: «назвати сполуку» (кнопка "Convert Struktore to Name"), так і зворотні: «написати структурну

формулу за назвою» "Convert Name to Structure". Тут важливо знайти розумний компроміс у використанні традиційних і нових форм навчання.

2. Запуск програми та її налаштування.

Запустити програму ChemDrawPro можна командою головного меню: "ПУСК – Программы – CS Chem Office – CS ChemDraw Pro".

Далі потрібно відкрити вікно налаштувань програми командою меню "File-Preferences"; для пункту "Units" встановити значення "cm", а для "Tolerance" – "5 pixels". Після цього слід натиснути кнопку "OK" для підтвердження.

Для візуальної зручності можна включити відображення лінійок в документі та координатної сітки. Для цього в меню "Tools" потрібно поставити відмітку навпроти пункту "Show Rulers". Для відображення координатної сітки можна поставити відмітку навпроти пункту "Show Crosshair" меню "Tools".

3. Вивчення меню програми.

Головне меню програми включає такі пункти: File, Edit, Tools, Object, Structure, Text, Curves, Color, CLogP, Online, Estimate, Window, Help (рис. 31).

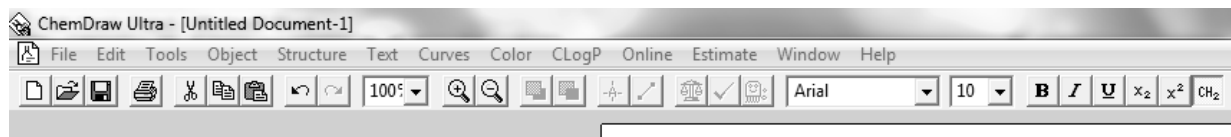


Рис. 3.1. Вигляд головного меню редактора ChemDraw.

File (Файл) дає можливість створювати документи ChemDraw, налаштовувати їх та зберігати (рис. 3.2).

Edit (Правка) дає можливість працювати з фрагментами та структурами в цілому (вирізати, копіювати, вставляти, виділяти тощо) (рис. 3.3).

Tools (Інструменти) – цей пункт меню допомагає налаштувати робочий стил для роботи в ChemDraw відповідними інструментами та встановити деякі параметри зображення формул (фіксовані довжини зв'язків, фіксовані кути тощо) (рис. 3.4).

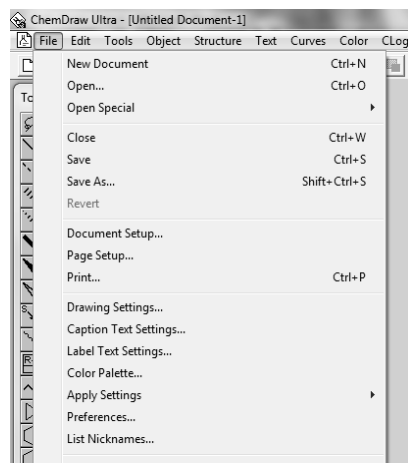


Рис. 3.2. Підпункт меню Файл редактора ChemDraw.

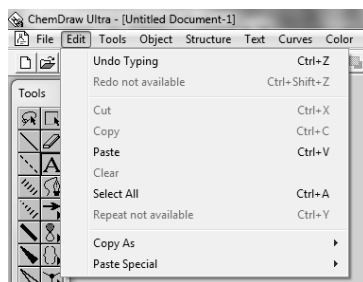


Рис. 3.3. Підпункт меню Правка редактора ChemDraw.

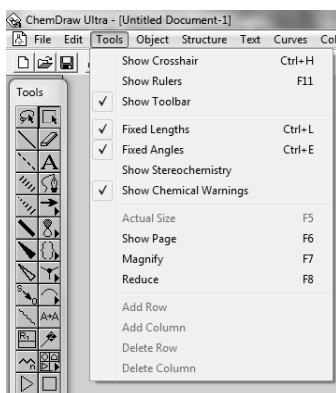


Рис. 3.4. Підпункт меню Інструменти редактора ChemDraw.

Object (Об'єкт). За допомогою цього пункту меню користувач має можливість зручно для себе розмістити об'єкти на сторінці, повернути їх, відобразити тощо (рис. 3.5).

Structure (Структура). Цей пункт меню дає можливість користувачу працювати зі структурою сполуки, варіювати її вигляд, аналізувати її, показувати властивості, виправляти помилки, а також за назвою сполуки

генерувати її структуру "Convert Name to Structure" та навпаки "Convert Structure to Name" (назви потрібно вказувати англійською мовою) (рис. 3.6).

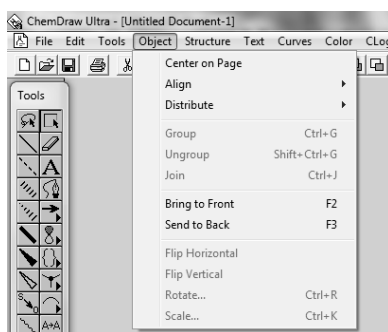


Рис. 3.5. Підпункт меню Об'єкт редактора ChemDraw.

Text (Текст). Цей пункт меню дає можливість формувати текстові фрагменти (змінювати вигляд та тип шрифту, вирівнювати текст тощо) (рис. 3.7).

Curves (Криві). Опції цього пункту активуються після зображення кривих у документі. Користувач може змінювати їх вигляд та форму (рис. 3.8).

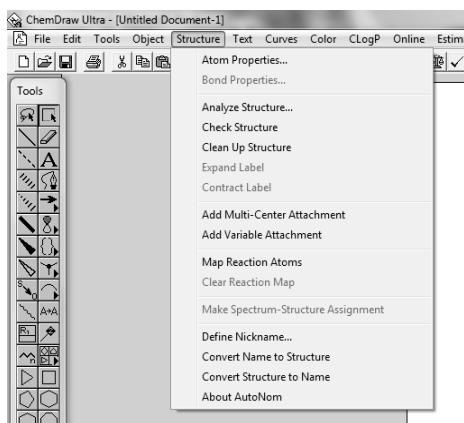


Рис. 3.6. Підпункт меню Структура редактора ChemDraw.

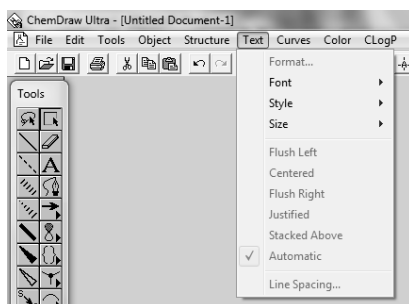


Рис. 3.7. Підпункт меню Текст редактора ChemDraw.

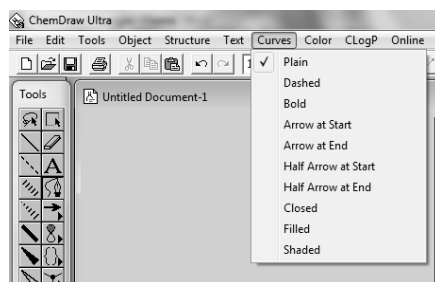


Рис. 3.8. Підпункт меню Криві редактора ChemDraw.

Color (Колір) – цей пункт меню дає можливість змінювати колір фону та шрифту.

CLogP – дає можливість розрахувати параметри CLogP (Фактор ліофільності) та CMR (Ефект колосального магнітоопору (КМО) (CMR в англійському варіанті).

Online – дає можливість знайти інформацію на відповідних сайтах в Інтернеті.

Window (Вікно) – дає можливість працювати з декількома вікнами одночасно, зручно розміщувати їх на робочому столі.

Help (Допомога) – містить загальні відомості та пояснення різних прийомів роботи з редактором.

4. Вивчення інструментів (Tools).

Розширене меню **Tools** із зображенням кожного інструмента міститься в лівій частині робочого стола у вигляді двох стовпців. У разі вибору по чергово кожного інструмента можна зобразити відповідний елемент на сторінці (рис. 3.9).

5. Вправи для оволодіння основними навичками роботи.

1. Зображення схеми реакції.

1. Намалюйте схему реакції хлорування метану (загальну та окремими стадіями).

2. Створіть новий документ. Намалюйте схему реакції нітрування пропану. Отриманий документ збережіть, вказавши в назві файлу власне прізвище з поміткою 1.

2. Зображення формул циклічних хімічних сполук.

1. Намалюйте хімічну формулу бензену; трансформуйте її в толуен→п-крезол.

2. Намалюйте хімічну формулу бензену; трансформуйте її в анілін→п-фенілендіамін.

3. Створіть новий документ. Намалюйте хімічну формулу нафталену, трансформуйте його в β -нафтол. Отриманий документ збережіть, вказавши в назві файлу власне прізвище з поміткою 2.

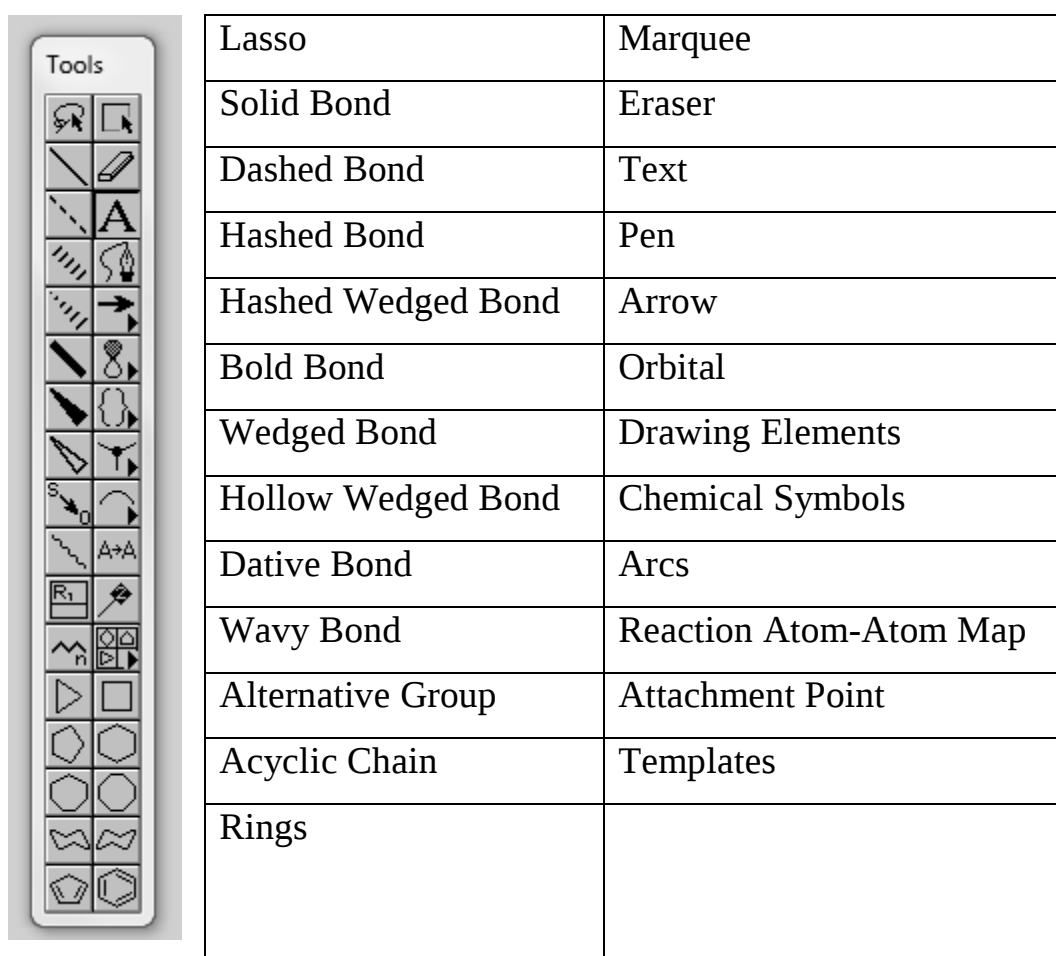


Рис. 3.9. Інструменти (Tools) редактора ChemDraw та їх назви.

3. Створення структурних формул за назвою.

1. Генерація за назвою ІЮПАК. Наберіть текст **propane (пропан)**, виділіть його та згенеруйте структуру цієї сполуки, активуючи функцію "Convert Name to Structure".

2. При активній кнопці "Check Structure" перевірте виділену молекулярну структуру на наявність помилок.

3. Зробіть зміни у довжинах зв'язків у структурі пропану. Виділіть сполуку. Кнопкою "Clean Structure" перевірте структуру на відповідність параметрів молекули звичайним довжинам зв'язків і валентних кутів з автоматичним їх виправленням.

4. За допомогою активування кнопки "Bond" для зображення хімічного зв'язку зобразіть структуру етану. Назвіть сполуку за допомогою кнопка "Convert Structure to Name" у меню Structure.

4. Вивчення властивостей сполук.

1. Зобразіть за допомогою шаблонів (Templates) амінокислоту α -аланін.

2. Проаналізуйте її будову (Structure $\rightarrow$ Analyze Structure $\rightarrow$ Analysis)

(рис. 3.10).

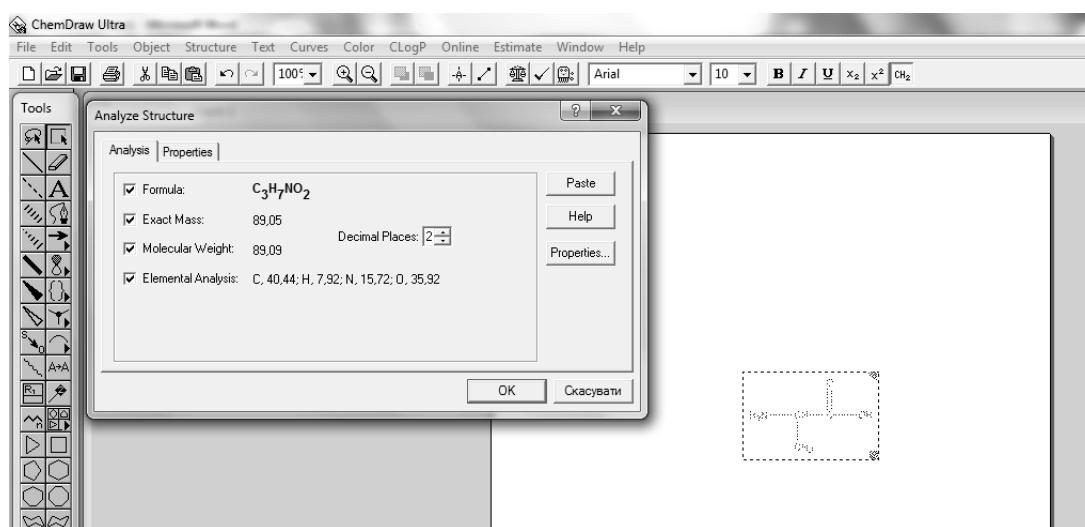


Рис. 3.10. Аналіз будови α -аланіну.

3. Розгляньте властивості цієї речовини (Structure $\rightarrow$ Analyze Structure $\rightarrow$ Properties) (рис. 3.11).

4. Натисніть кнопку Report та збережіть інформацію про цю речовину у тестовому редакторі «Блокнот» (в деяких версіях ОС AkelPad) (рис. 3.12).

5. Збережіть документ. Зробіть висновки.

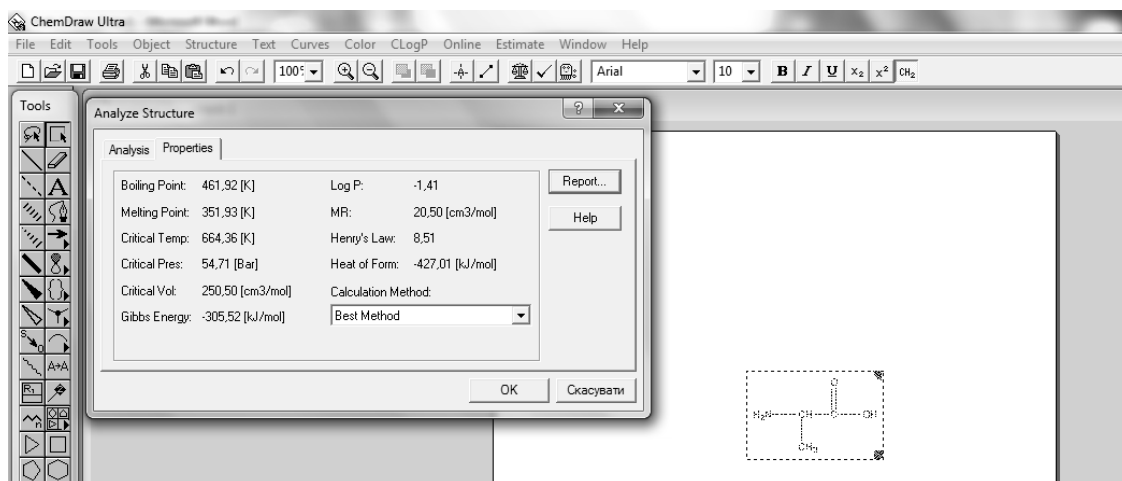


Рис. 3.11. Аналіз властивостей α-аланіну.

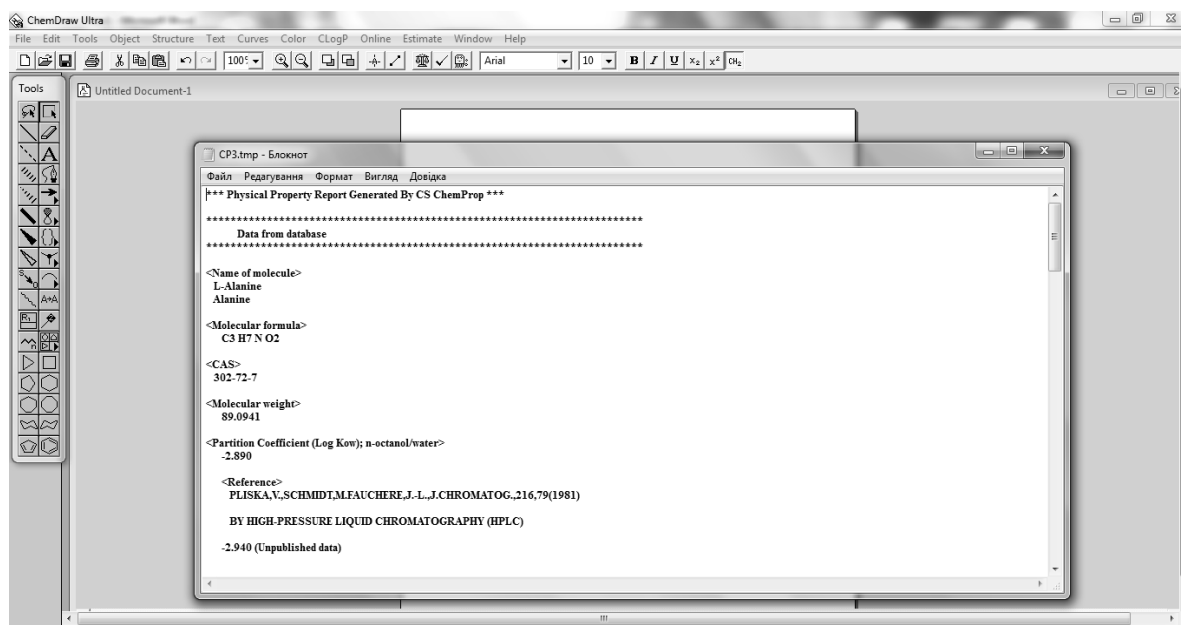


Рис. 3.12. Збереження інформації у тестовому редакторі «Блокнот».

Висновки.

Досвід використання інформаційних технологій в процесі викладання хімічних дисциплін студентам природничих спеціальностей свідчить про появу нових можливостей, які не досягаються іншими традиційними засобами.

При вивченні хімії комп'ютер слід використовувати, враховуючи особливості цієї науки. Виділяють три основні напрями його застосування: моделювання хімічних процесів і явищ; контроль і обробка даних хімічного експерименту; програмна підтримка курсу хімічних дисциплін.

ChemDrawPro від фірми Cembrige soft є одним з найбільш зручних та ефективних редакторів хімічних структур. Програма має розвинуті можливості для створення, редагування та оформлення хімічних формул, схем, рівнянь реакцій практично будь-якої складності. Зокрема, є можливість малювати проекції Фішера та Ньюмана, а також проводити аналіз зображених формул з метою виявлення помилок.

Література

1. Ахметов М.А., Денисова О.Ф. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. -С. 35.
2. Литвак М.М., Литвак Н.В. //Химия: методика преподавания. - 2005. - №4. - С. 47.
3. Программа по биоорганической химии. - М.: ГОУ ВУНМЦ МЗ РФ, 2000, - 18 с.; МО РФ, 2004.
4. Рошупкин С.И. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. - С. 46.
5. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. // Компьютерная химия. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.
6. Тюкавкина Н.А., Бауков Ю.И. //Биоорганическая химия: Учебник для вузов. - М.: Дрофа, 2004. - 544 с.: ил.
7. Шабаршин В.М. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №2. - С. 33.
8. ChemOffice (Ultra Version 9.0) - пакет программных средств фирмы CabridgeSoft Corporation, 2005.

Запитання для самоперевірки.

1. Охарактеризуйте можливості програми ChemDrawPro.
2. Вкажіть три основні прийоми створення структурних формул.
3. Як запустити програму ChemDrawPro?
4. Як включити відображення лінійок та координатної сітки в документі?
5. Які пункти включає головне меню програми? Дайте їм коротку характеристику.

Лекція 4

Тема. Пакет програмного забезпечення ACD/Labs. Робота в режимі Structure.

Мета. Оволодіти навичками набору і редагування хімічних формул в редакторі ACD/Labs. Навчити студентів використовувати бази даних ППЗ.

Вступ. Пакет **ACD/Labs Freeware** складається з двох автономних, але взаємозв'язаних програм [11]:

- **ACD/ChemSketch** – молекулярний редактор двовимірних хімічних структур і графічний редактор;
- **ACD/3D Viewer** – програма моделювання і візуалізації тривимірних структур.

План

1. Редактор ACD/ChemSketch. Загальна характеристика.
2. Робота в режимі Structure.
3. Зміна зовнішнього вигляду структури.
4. Блок кнопок для запису рівнянь хімічних реакцій.
5. Корисні команди в меню. Розділ Tools.

Зміст лекції

1. Редактор ACD/ChemSketch. Загальна характеристика.

Запуск редактора: Програми → ACDLABS 12.0 → ChemSketch

ChemSketch працює в двох режимах [11]:

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

Для перемикання між режимами служать кнопки Structure і Draw (рис. 4.1).

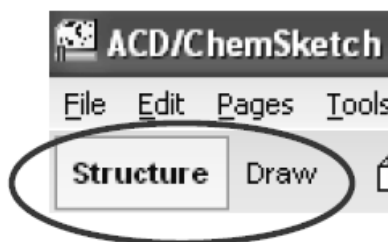


Рис. 4.1. Режими редактора ACD/ChemSketch.

Перемикання також відбувається при натисненні клавіші "пропуск". Програма за замовчуванням завантажується в режимі Structure.

2. Робота в режимі Structure.

У основній своїй частині інтерфейс ChemSketch стандартний для такого роду програм (рис. 4.2).

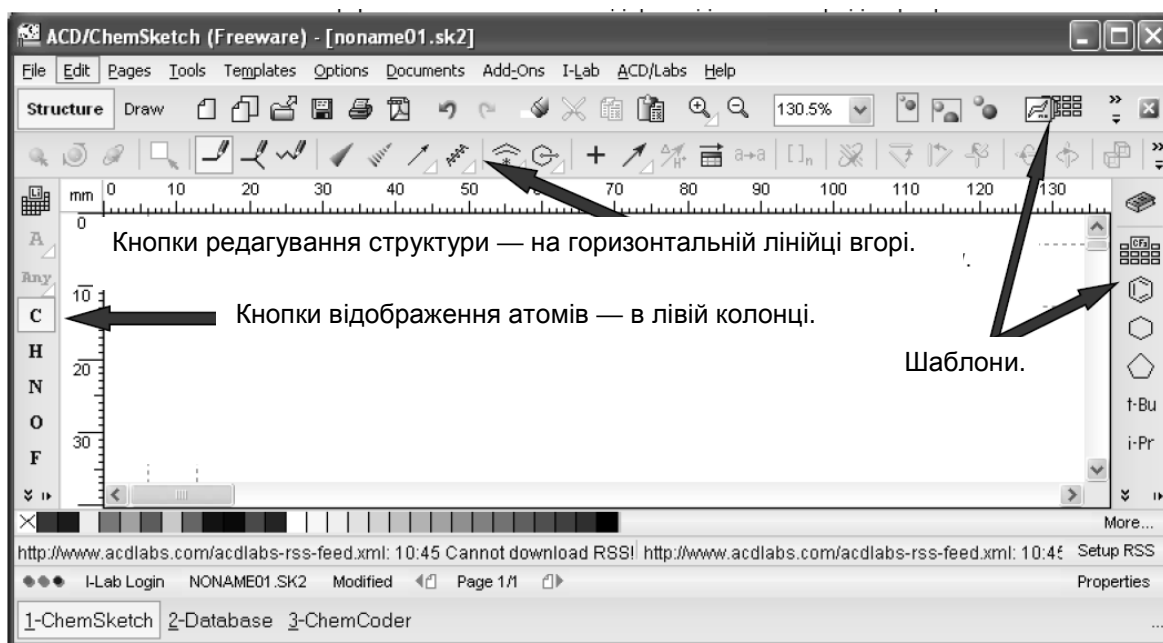


Рис. 4.2. Інтерфейс режиму Structure.

При завантаженні ChemSketch за замовчуванням включаються кнопки: С «атом карбону» і «Звичайне малювання» (Draw Normal) (рис.4.3).

Малювання звичайне
Draw Normal



Малювання постійне
Draw Continuous

Малювати ланцюг
Draw Chains

Рис. 4.3. Функція «Малювання».

Виконання основних операцій при натиснутій кнопці **Draw Normal**:

- додати зв'язок в стандартному напрямі – клацнути на атомі;
- додати зв'язок в заданому напрямі – клацнути на атомі і, не відпускаючи клавішу мишки пересунути курсор в потрібному напрямі.;
- намалювати зв'язок між наявними атомами – клацнути на першому атомі і, не відпускаючи клавішу мишки, тягнути зв'язок до другого атома;
- змінити порядок зв'язку – клацнути на зв'язку.

Дія кнопки **Draw Continuous** є аналогічною крім того, що при першому клацанні на атомі він виділяється, а додавання зв'язку відбувається при другому клацанні.

Draw Chains «Малювати ланцюг»: клацнути на атомі і тягнути ланцюг в потрібному напрямі на потрібну довжину.



– кнопка «**Періодична таблиця**». Якщо в лівій колонці відсутня кнопка якого-небудь хімічного елементу, її додають з Періодичної системи.

- Кнопка залишається на панелі на весь сеанс.
- Щоб під час сеансу видалити таку кнопку, слід двічі клацнути по панелі і потім в віконці, 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. 4.4).



Рис. 4.4. Призначення кнопок виділення.

При відтисненій кнопці «Ласо» виділяється прямокутник, при натиснутій – площа будь-якої конфігурації.

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

- при виділенні об'єкту у вузлах (на атомах, в центрах зв'язків) з'являються маленькі білі квадратики;
- для маніпуляції з виділеним об'єктом необхідно встановити курсор на будь-якому з цих квадратиків, і якщо вони зафарбовуються в чорний колір, можна виконувати відповідну дію.



Delete (Стерти/ видалити). Видалення атома або зв'язку:

- натиснути кнопку «Видалити» (при цьому змінюється форма курсору), потім клацнути на атомі або зв'язку. Атом видаляється зі всіма його зв'язками, причому, якщо в результаті цієї операції утворилися б одиночні незв'язані атоми, то вони зникають теж.

Якщо необхідно видалити тільки центральний атом, але зберегти периферійні, то видалення проводять при натиснутій кнопці Ctrl.

Видалення фрагмента або всієї структури:

- натиснути кнопку «Видалити», обвести курсором структуру, що видаляється, або її частину. Обведена курсором структура виділяється – на атомах і зв'язках з'являються маленькі квадрати. При наведенні курсору на квадрат, він стає активним – зафарбовується чорним кольором.

Якщо клацнути на будь-якому чорному квадраті, виділена структура видаляється.

3. Зміна зовнішнього вигляду структури.

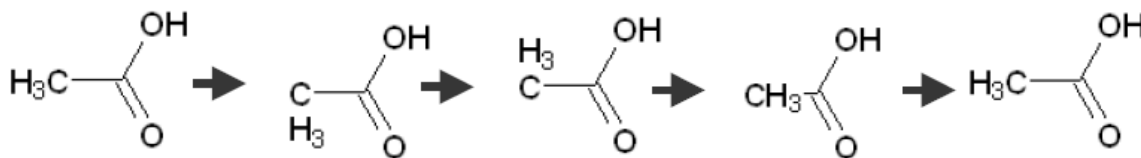
Інструменти для зміни зовнішнього виду структури приведені на рис. 4.5.



Рис. 4.5. Інструменти для зміни зовнішнього виду структури.

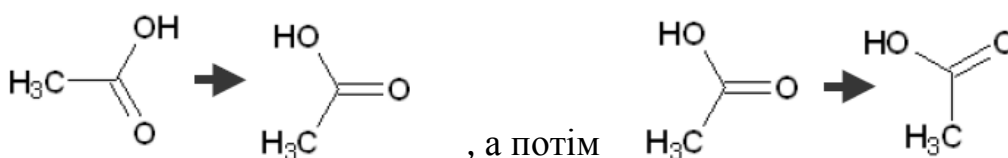
Кнопка  призначена для зміни положення атомів гідрогену, для зміни вигляду подвійного зв'язку (слід при натиснутій кнопці клацати на групі CH_n або на зв'язку).

Вправа. Здійснити наступні перетворення:



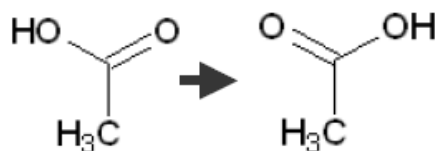
Інструменти  призначені для розвороту структури в площині листа так, щоб вказаний зв'язок виявився горизонтально або вертикально (при натиснутій відповідній кнопці слід клацнути на цьому зв'язку).

Вправа. Здійснити наступні перетворення:



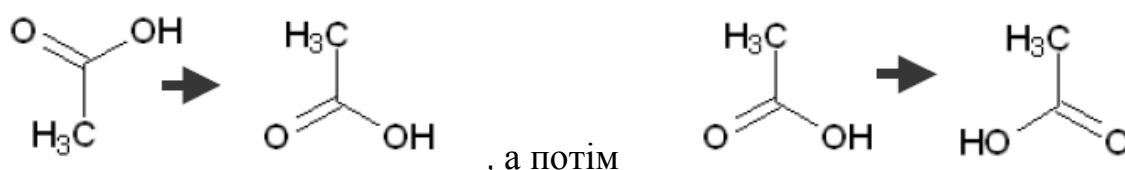
 - поворот на 180° навколо зв'язку – при натиснутій кнопці слід клацнути на відповідних зв'язках.

Вправа. Здійснити наступне перетворення:



 - обертання на 180° по осях x і y – клацнути по одній з цих кнопок.

Вправа. Здійснити наступні перетворення:



 «Полімер» – для взяття в дужок ланки полімеру.

При клацанні по кнопці «Полімер» з'являється віконце, в якому слід вибрати параметри (рис. 4.6):

Index – ступінь 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.

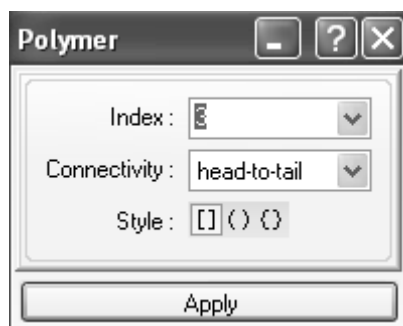


Рис. 4.6. Інструмент «Полімер».

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

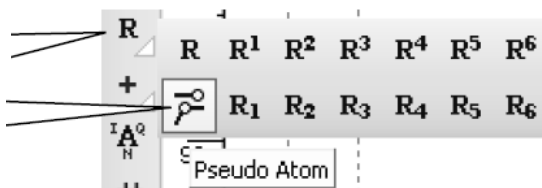
Вправа. Здійснити наступне перетворення:



Якщо при відображенні полімеру необхідно вказати кінцевий зв'язок без атома, кінцевий атом замінюють «псевдо-атомом» (рис. 4.7):

1. У лівій колонці клацнути по трикутнику кнопки R – відкривається список

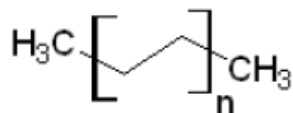
2. Клацнути по кнопці «псевдо-атом»



3. Клацнути в структурі по кінцевих атомах карбону.

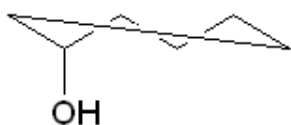
Рис. 4.7. Використання «псевдо-атомів».

Вправа: Замінити кінці полімерного ланцюга «псевдо-атомами»:

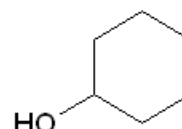


Clean Structure (Стирання структури). Кнопка дозволяє «підчистити структуру» – стандартизувати довжини зв'язків і кути між зв'язками і зробити їх зовні акуратними.

Вправа:



перетворити на структуру



4. Блок кнопок для запису рівнянь хімічних реакцій.

Інструменти, що використовуються для запису хімічних рівнянь представлені на рис. 4.8.

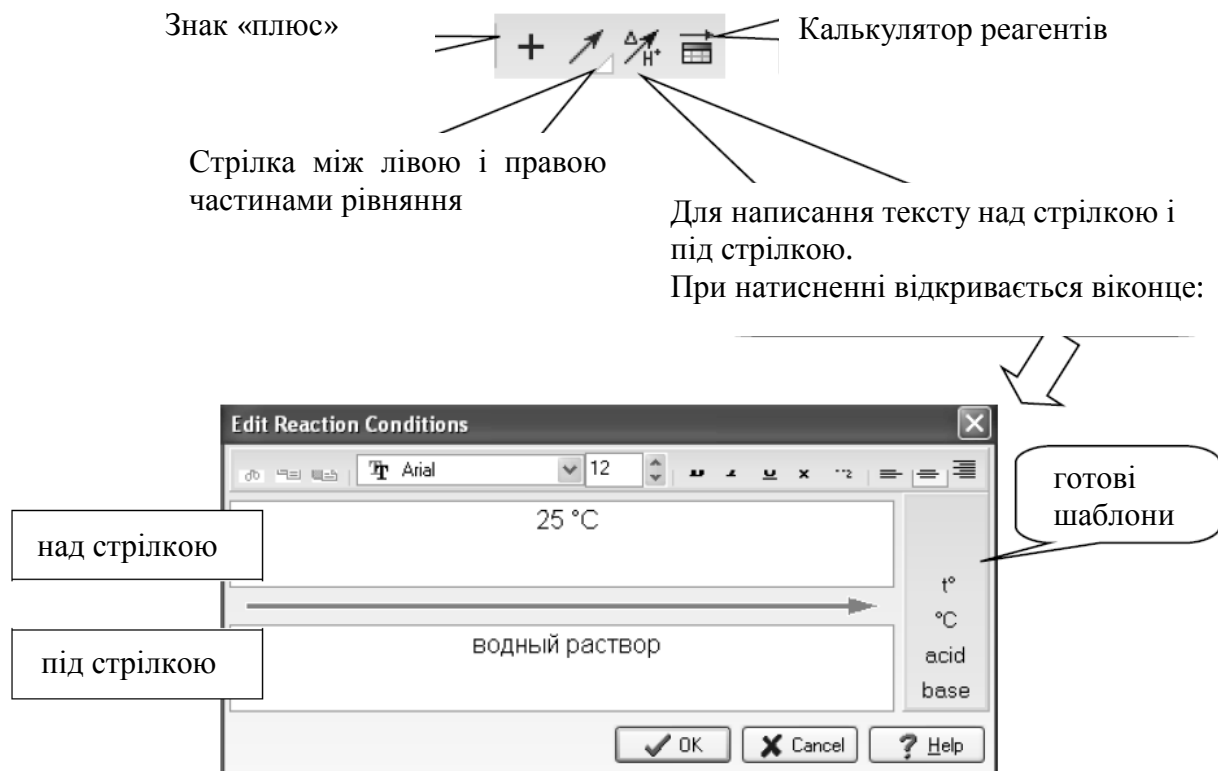


Рис. 4.8. Функції інструментів, що використовуються для запису хімічних рівнянь.

5. Корисні команди в меню. Розділ Tools.

Спеціальні можливості редактора ChemSketch показано на рис. 4.9.

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

Показати атоми Н

Заховати атоми Н

Програма уміє генерувати систематичні назви R/S-стереодескриптори, коди SMILES і InChI, а також генерувати структурні формули за відомими кодами SMILES і InChI.

Програма уміє розраховувати фізико-хімічні параметри речовини.

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				

Calculate submenu:

- 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

Рис. 4.9. Спеціальні можливості редактора ChemSketch.



- кнопка, дублююча команду Name for Structure.

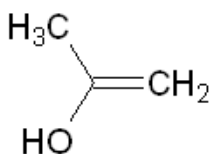


- кнопка, дублююча команду InChI for Structure.



Check for Tautomeric Forms – генерування стійких таутомерних форм.

Вправа. Визначити, які таутомерні форми є у даної структури і яка з форм стійкіша:



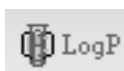
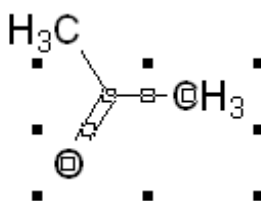
3D Optimization – генерування тривимірної структури. Перед початком процесу генерування програма може запитати, чи прибрати атоми водню (тимчасово). Слід погоджуватися – це помітно прискорює процес.

Вправа. Зобразити двовимірну структуру циклогексану і потім згенерувати тривимірну його структуру. Обертаючи структуру в тривимірному просторі, визначити її конфігурацію: «ванна» або «крісло».



MassSpec Scissors – розрахунок молекулярної маси уламків, які можуть утворитися в мас-спектрометричному експерименті. Якщо виділити фрагмент молекули і натиснути цю кнопку, програма підрахує молекулярні маси можливих уламків. Ця операція корисна при інтерпретації мас-спектрів.

Вправа. Виділити фрагмент молекули ацетону і проаналізувати, як програма прогнозує поява можливих уламків при мас-спектрометрії.



Calculate LOGP – розрахунок теоретичного значення LOGP.

Вправа. Визначите LOGP пропанону.

PubChem, eMolecules, ChemSpider. Зображена структура використовується як запит в цих базах даних.

Вправа. Провести з ChemSketch пошук в базах даних PubChem, eMolecules, ChemSpider – знайти інформацію про ацетон.



Кнопка завантажує ACD/3D Viewer – програму роботи з тривимірними структурами.

Висновки.

Досвід використання інформаційних технологій в процесі викладання хімічних дисциплін студентам природничих спеціальностей свідчить про появу нових можливостей, які не досягаються іншими традиційними засобами.

При вивченні хімії комп'ютер слід використовувати, враховуючи особливості цієї науки. Виділяють три основні напрями його застосування: моделювання хімічних процесів і явищ; контроль і обробка даних хімічного експерименту; програмна підтримка курсу хімічних дисциплін.

ACD/3D Viewer – програма швидкого і точного моделювання і візуалізації структур. Вона повністю пов'язана з програмою ACD/ChemSketch, що дозволяє малювати структури 2D і швидко отримувати з них прекрасні кольорові 3D зображення.

Література

1. Аспицкая А.Ф. Использование информационно-коммуникационных технологий при обучении химии: метод. пособие/ А.Ф. Аспицкая, Л.В. Кирсберг. - М.: Бином; Лаборатория Знаний, 2009. -356 с.
2. Ахметов М.А., Денисова О.Ф. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. -С. 35.
3. Добротин Д. Ю. Интернет в обучении химии / Д. Ю. Добротин, А. А. Журин // Химия в школе. – 2001. – № 7. – С. 52–55.

4. Довгопола О. В. Підготовка майбутнього вчителя до впровадження комп'ютерних технологій / О. В. Довгопола // Освіта Донбасу. – 2006. – № 3. – С. 116–117.
5. Литвак М.М., Литвак Н.В. //Химия: методика преподавания. - 2005. - №4. - С. 47.
6. Марченко І., Посторонко А. Особистісно-орієнтований підхід при організації навчання з фахових хімічних дисциплін/ Marchenko_Postoronko_article_31.
7. Мультимедиа в образовании : специализированный учебный курс / Бент Б. Андерсен, Катя ванн ден Бринк; авторизованный пер. с англ. – М.: Дрофа, 2007. – 224 с. – (Информационные технологии в образовании).
8. Пакет програмного забезпечення ACD/Labs
9. Программа по биоорганической химии. - М.: ГОУ ВУНМЦ МЗ РФ, 2000, - 18 с.; МО РФ, 2004.
10. Рошупкин С.И. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. - С. 46.
11. Современные технологии в процессе преподавания химии: Развивающее обучение, проблемное обучение, проектное обучение, кооперация в обучении, компьютерные технологии / Авт.-сост. С. В. Дендебер, О. В. Ключникова. – 2-е изд. – М.: 5 за знания, 2008. – 112 с. – (Методическая библиотека).
12. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. //Компьютерная химия. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.
13. Титаренко Н. В. Використання комп'ютерних навчальних програм з хімії / Н. В. Титаренко // Біологія та хімія в школі. – 2004. – № 1. – С. 9–12.
14. Тюкавкина Н.А., Бауков Ю.И. //Биоорганическая химия: Учебник для вузов. - М.: Дрофа, 2004. - 544 с.: ил.
15. Шабаршин В.М. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №2. - С. 33.

Запитання для самоперевірки

1. Дайте загальну характеристику редактора ACD/ChemSketch.

2. Як запустити редактор ACD/ChemSketch?
3. Вкажіть режими роботи ChemSketch. Як переключити режими роботи?
4. Дайте коротку характеристику інтерфейсу режиму Structure.
5. Виконання основних операцій при натиснутій кнопці Draw Normal.
6. Які кнопки виділення містить програма ChemSketch?

Лекція 5

Тема. Пакет програмного забезпечення ACD/Labs. ACD/3D Viewer.

Мета. Оволодіти навичками швидкого і точного моделювання і візуалізації структур в програмі ACD/3D Viewer пакету ACD/Labs. Навчити студентів використовувати бази даних ППЗ.

Вступ. Пакет **ACD/Labs Freeware** складається з двох автономних, але взаємозв'язаних програм [11]:

- **ACD/ChemSketch** – молекулярний редактор двовимірних хімічних структур і графічний редактор;
- **ACD/3D Viewer** – програма моделювання і візуалізації тривимірних структур.

План

1. ACD/3D Viewer. Загальна характеристика.
2. Алгоритм 3D – оптимізації.
3. Основи ACD/3D Viewer.
4. Управління зображенням молекул.
5. Налаштування зображення молекули.
6. Збереження і завантаження параметрів налаштування зображення.
7. Обчислення і зміна структурних параметрів.

Зміст лекції.

1. ACD/3D Viewer. Загальна характеристика.

ACD/3D Viewer – програма швидкого і точного моделювання і візуалізації структур [11]. Вона повністю пов'язана з програмою

ACD/ChemSketch, що дозволяє малювати структури 2D і швидко отримувати з них прекрасні кольорові 3D зображення. З програмою ACD/3D Viewer можна:

- керувати 3D моделями: переміщати, обертати 2D і 3D зображення, змінювати розмір, стилі і кольори;
- відображати 3D структуру у вигляді стержнів, стержнів і куль, сфер або дисків;
- у 3D структурах твердих речовин додавати зображення границь дії сил Ван-дер-Ваальса у вигляді дрібних крапочок;
- вимірювати і змінювати довжину зв'язків, кути між площинами зв'язків і торсійних кутів;
- оптимізувати структури, використовуючи силові поля 3-D CHARMM-типу;
- клацанням кнопки у вікні програми ACD/ChemSketch перемикатися від 3D дисплею до 2D;
- користуватися конфігурацією автономного обертання 3D молекул, з/або без зміни стилю показу структури;
- розглядати 3D структуру в перспективі;
- відображати багатократні зв'язки в режимі показу обертання дротяних структур(Wireframe);
- експортувати 3D моделі в інші програми геометричних оптимізацій і використовувати їх як хороші стартові конфігурації.

2. Алгоритм 3D – оптимізації.

Алгоритм 3D оптимізації швидко перетворює плоску (2D) структуру створену в програмі ACD/3D Viewer в реалістичну 3D структуру. Це засновано на уявленнях молекулярної механіки, яка бере до уваги довжину зв'язків, величину кута, внутрішнє обертання і неутворені зв'язки Ван-дер-Ваальсових взаємодій. Модифікації включають незначні спрощення потенційних функцій і реалізацію схеми мінімізації додатковими евристичними алгоритмами для тих стартових конфігурацій, що «погано поведуться».

Алгоритм 3D оптимізації – патентна версія молекулярного механізму з силовими полями, що ґрунтуються на CHARMM параметрах. Модифікації включають деякі спрощення і були призначені для збільшення стабільності і швидкості обчислення. 3D оптимізація не є повномасштабним молекулярним двигуном. Вона швидше прагне відтворити ті 2D конфігурації, що найбільше відповідають дійсності, і точно оптимізувати 3D структури.

Іноді 3D оптимізація відображає молекулярну конфігурацію, відмінну від очікуваної. Це відбиває саму суть структурного аналізу – молекули зазвичай мають декілька можливих конфігурацій. Оптимізатор знаходить тільки одну конфігурацію, і вона не обов'язково та, на яку сподіваєшся. Наприклад, ймовірно, що фрагмент циклогексану матиме форму крісла, але оптимізатор може привести викривлену форму – човна, який так само є однією з можливих конфігурацій (насправді цей фрагмент існує у викривленій формі у багатьох структурах). Щоб отримати іншу конфігурацію в отриманій 3D структурі, потрібно перемістити деякі її атоми, щоб зробити початкову структуру ближчою до кінцевої конфігурації, і потім оптимізувати структуру ще раз.

Якщо спробувати отримати в процесі оптимізації певний енантіомер для структур з хіральними центрами, конфігурація, що вводиться, може змінитися до однієї з протилежних форм. Щоб розв'язати цю проблему, зазвичай досить, «малюючи», поміняти місцями всі чотири хіральні карбонові атоми і показати потрібний напрям зв'язків в початковій 2D структурі, для цього слід використати обидва інструменти Up (Вгору) і Down Stereo Bond (Вниз Стереозв'язки). Якщо це не допоможе, можна перемістити атоми в кінцевій 3D формулі і оптимізувати структуру ще раз. У будь-якому випадку рекомендовано відповісти «Ні», коли в діалоговому вікні, що відкривається, запитують про те, чи хочете Ви видалити атоми гідрогену перед початковою оптимізацією.

Обмеження оптимізації ACD/3D. ACD/3D Viewer програма може оптимізувати тільки ті структури, що містять атоми від гідрогену до ксенону із стандартною валентністю і в зв'язаних станах. Також вона не бере до уваги

водневі зв'язки. У структурі молекули, що піддається оптимізації не може бути більше 250 атомів, включаючи і число невидимих атомів гідрогену.

3. Основи ACD/3D Viewer.

1. Запуск ACD/3D Viewer.

Для запуску програми ACD/3D Viewer на комп'ютері потрібно:

- запустити Microsoft Windows;
- двічі клацнути на значку 3D Viewer;
- або меню Start/Run (Запуск/Виконати) у Windows 98/2000, NT або XP на панелі завдань відмітити ACD/Labs і потім вибрати значок ACD/3D Viewer;
- або двічі клацнути на теці програмних файлів SHOW3D.EXE де встановлене усе програмне забезпечення ACD/Labs. За замовчуванням це ACD8;
- або у запущеній програмі ACD/Labs в меню ACD/Labs вибрати 3D Viewer;

2. Установка файлових асоціацій.

У випадку першого запуску програми, з'являється діалогове вікно File Associations (Файлові асоціації). У ньому міститься список розширень файлу і типи файлів, які можна відкрити автоматично з програмним забезпеченням ACD/Labs. Для підтвердження потрібно встановити прапорці тих файлових форматів, які слід додати і потім клацнути Yes. У іншому випадку (якщо не потрібно працювати зі ChemSketch файлами, що автоматично відкриваються, з перерахованими розширеннями), слід залишити прапорці невстановленими і клацнути No.

3. Зміна файлових асоціацій.

Якщо вибрані не усі формати файлових асоціацій, заданих за замовчуванням, їх можна у будь-який час переглянути і змінити; у меню File (Файл), вибрати File Associations (Файлові асоціації).

Примітка: якщо користувач вибрав File Associations відповідні Windows NT, але не має права на зміни в системі файлових асоціацій, з'явиться

застереження. Для вирішення цього питання, потрібно зв'язатися з системним адміністратором. Якщо вибрано усі формати, то з'явиться повідомлення, «all supported file types are already associated with the current application» (усі підтримані типи файлів вже пов'язані з поточним додатком). У цьому випадку, можна змінювати файлові асоціації через Windows Explorer.

1) Для цього слід відкрити Windows Explorer і вибрати файл з розширенням, для якого потрібно створити асоціацію; утримуючи клавішу SHIFT, клацнути правою клавішею миші на файлі. У меню, що відкрилося, вибрати Open With (Відкрити з). Слід звернути увагу, що в деяких операційних системах Windows (наприклад, Windows XP) користувач не повинен натискати клавішу SHIFT, щоб отримати команду Open With в підручному меню.

2) Встановити додаток, який повинен використовуватися, для відкриття файлу і вибрати Always use this program (завжди використовувати цей перемикач програми).

3) Клацнути OK і закрити Windows Explorer.

4. Зміна каталогу значень за замовчуванням.

У односторонній (автономній) копії ChemSketch параметри налаштування основного каталогу, ймовірно, є задовільними. У мережевій копії, бажано змінити параметри налаштування основного каталогу в ACD/Labs програмному забезпеченні так, щоб заданий за замовчуванням диск для збереження роботи в прогресі був місцевим жорстким диском користувача, а не віддаленим сервером. Після створення місцевого доступу для обмеженої і необмеженої кількості місць, для кожної подальшої місцевої інсталяції:

1. У ChemSketch вікні, в меню Options(Опції) потрібно вибрати Preferences(Установки).

2. Натиснути на таблиці General (Загальні). У віконці Default (Передбачений) визначити каталог, який буде відкриватися кожного разу, як тільки відкриваються діалогові вікна Import (Імпорт), Open (Відкрити), Save (Зберегти), або діалогове вікно Export (Експорт) в ChemSketch вікні (рис. 5.1):

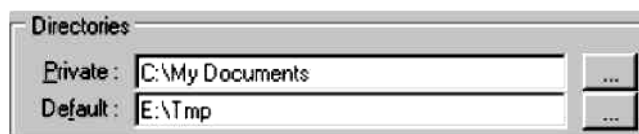


Рис. 5.1. Вікно вибору каталогу.

Примітка: у вікні Private (Особистий) можна встановити каталог для реєстрації конфігурації програми ChemSketch (наприклад, файли TEMPLATE.CFG і GrStYLES.STL).

3. Клацнути OK.

4. Перейти до 3D – з меню Options (Опції) вибати Set Default Folder (Набір можливих тек) і визначити теку необхідну для відкриття і збереження файлів. Клацніть OK.

5. Вихід з ACD/3D Viewer.

З програми можна вийти одним з наступних способів:

- клацнути X у верхньому правому кутку області заголовка будь-якого вікна;
- або з меню ACD/Labs, вибрати Close All (Закрити все). Так закриються усі відкриті програми ACD/Labs одна за одною;
- або з меню File (Файл) вибрати Exit (Вихід) (так закриється тільки відкрита програма ACD/Labs).

При появі запиту про збереження виконаної роботи у форматах файлу, що відповідають вікну з якого виходить користувач, слід його підтвердити.

4. Управління зображенням молекул.

Вставка молекули і її 3D оптимізація.

1. Запустити ACD/3D Viewer.

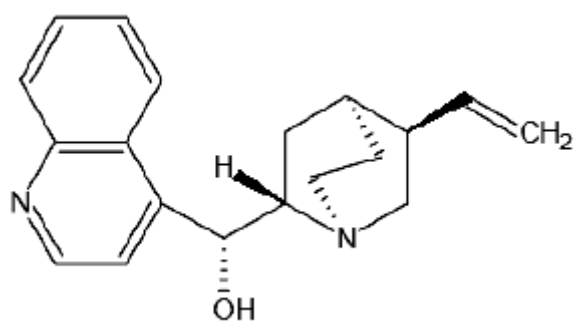
2. Клацнути ChemSketch у смузі перемикавання вікон. Ця дія приведе до відкриття ChemSketch вікна.

3. Клацнути Словник  у верхній правій частині вікна.

Примітка: у вільну ChemSketch версію модуль словника не включений. Цей модуль доступний тільки для комерційної версії, тому користувачам

вільної версії ChemSketch, під час зображення будь-якої структури, потрібно користуватися інструментальними засобами інтерфейсу ChemSketch.

Приклад. У блоці Quick Search (Швидкий пошук) в діалоговому вікні ACD/Dictionary, що з'являється, надрукувати декількома натисненнями клавіш «cinchonidine» (цинхонідин). (Цинхонідин – анти-молярний агент, який витягається з кори різних різновидів цинхони). Після вибору в списку необхідної назви і відображення відповідної структури, клацнути ОК. Слід відмітити, що тінь вибраної структури висить поряд з курсором. Клацнути на робочому просторі, щоб помістити структуру в ChemSketch вікні (5.1):



(5.1)

4. Клацнути Cory to 3D у смузі перемикання вікон, щоб перемістити молекулу у інтерфейс ACD/3D Viewer. У 3D вікні з'явиться простий, стержневий малюнок (рис. 5.2).

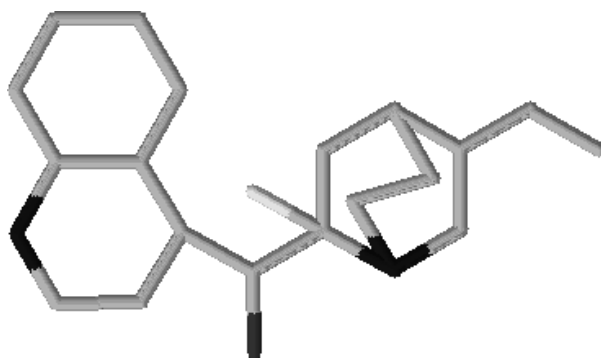


Рис. 5.2. Стержнева структура цинхонідину.

5. Щоб створити 3D модель з 2D хімічної структури, потрібно клацнути 3D Optimization (3D Оптимізація) . При цьому додаються атоми гідрогену (рис.5.3.):

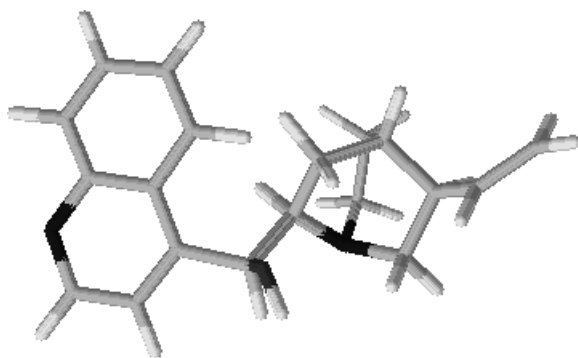


Рис. 5.3. 3D Оптимізація цинхонідину.

5. Налаштування зображення молекули.

1. Обертання, переміщення і зміна масштабу зображення.

1. Клацнути 3D Rotate (3D обертання)  і переміститися у робочому просторі, для того щоб обертати структуру в тривимірному просторі.

2. Після цього перемкнутися на режим Z- обертання, клацаючи Rotate (Обертання)  переміститися по робочому просторі, структура буде обертатися тільки в двовимірному просторі.

3. Клацнути Move (Переміщення) , щоб включити режим Drag (Перетягування), де можна переміщати структуру в просторі вниз, вліво або вправо.

4. Для того, щоб змінювати розмір структури, потрібно клацнути Resize (Зміна розміру) . Переміщення від центру структури до меж екрану – збільшує розмір структури, переміщення до центру структури робить її меншою.

5. Клацнути 3D Rotate , щоб включити режим 3D обертань.

2. Зміна зображення структури.

1. Для того щоб представити наявну структуру у вигляді кулестержневої, потрібно клацнути Balls and Sticks (Кулі і Стержні) .

2. Щоб додати ореол точок до робочого представлення молекули, потрібно клацнути With Dots (З точками) .

Приблизний вигляд структури показано на рис. 5.4.

3. Для того щоб зобразити багатократні зв'язки, слід включити режим Wireframe (Дротяний), натискаючи на інструментальній панелі Top (Топ) і потім з меню View (Вид) вибрати Show Multiple Bonds (Зображення багатократних зв'язків) (рис. 4.5).

Для того щоб молекула подібної структури оберталася автоматично без зміни її стилю, потрібно натиснути Auto Rotate (Автоматичне обертання) . (Щоб обертати молекулу автоматично, змінюючи її стиль, слід натиснути Auto Rotate and Change Style ).

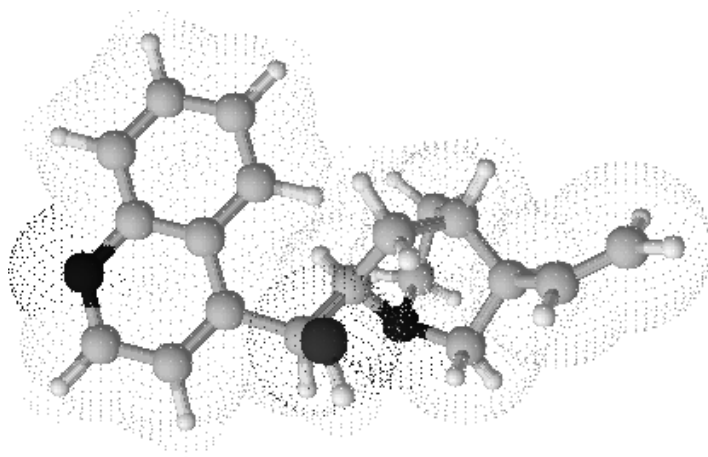


Рис. 5.4. Кулестержнева структура.

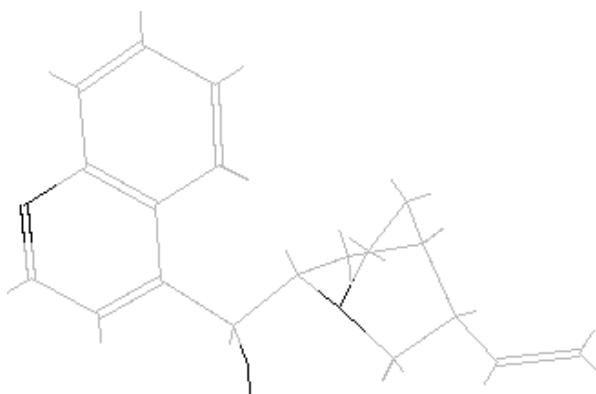


Рис. 5.5. Зображення багатократних зв'язків.

Примітка: щоб представити структуру у вигляді дисків, дротів, точок, сфер: натискають відповідні кнопки на інструментальній панелі (   або ). Також можна натиснути правою кнопкою миші в робочому просторі вікна, щоб перемкнути тип кнопки режиму представлення. (Якщо активований будь-який інструментальний засіб (  або ), клацання правою кнопкою миші перемикає тільки ці зображені кнопки.

3. Зміна кольору

У меню Options (Опції) потрібно вибрати Colors (Кольори) або натиснути Set Colors (Набір кольорів) , для того щоб відобразити діалогове вікно Colors (рис. 5.6).

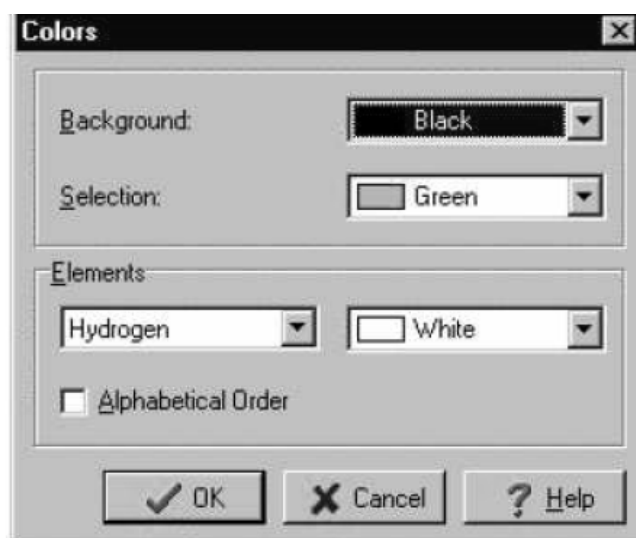


Рис. 5.6. Діалогове вікно Colors.

2. Для того щоб змінити колір фону дисплея, потрібно вибрати бажаний колір у вікні Background (Фон). Якщо друкувати часто і багато, то найкращим буде встановлення білого кольору фону, щоб заощадити чорнило.

3. Після встановлення розмірів, наборів атомів, відстані і кути між якими мають певні значення, встановлюється спеціальний колір підсвічування. Цей колір за замовчуванням є яскраво зеленим. Щоб змінювати колір вибраних атомів, в списку Selection (Вибір) потрібно вибрати бажаний колір і клацнути ОК.

Примітка: вибір працює окремо з інструментальними засобами Distance

(Відстань) , Angle(Кут)  і Torsion Angle (Торсійний кут).

4. Щоб змінити колір хімічного елементу, слід натиснути на назві елементу в списку і потім вибрати бажаний колір у вікні справа. Встановивши прапорець Alphabetical Order (Алфавітний порядок), назви елементів в списку встановлюються в алфавітному порядку. У іншому випадку вони розташовуються відповідно до свого місця в Періодичній таблиці елементів.

4. Отримання дзеркального зображення.

1. Для одержання дзеркального зображення відтвореної структури потрібно натиснути Mirror (Дзеркало) . У цьому випадку увесь порядок стереоцентрів в початковій структурі буде інвертований.

2. Щоб повернутися назад до початкового виду, потрібно натиснути цю кнопку знову.

5. Інверсія центру структури.

1. Invert Center (Інверсія центру) – цей інструмент інвертує конфігурацію хірального центру, змінюючи просторову позицію одного або декількох заміщених вибраних атомів. (Натиснути Invert Center (Інверсія центру) , і потім натиснути на атомі, щоб інвертувати його.

Після цієї операції може виникнути потреба оптимізувати хімічну структуру ще раз. Щоб це здійснити, потрібно клацнути 3D Optimization (3D оптимізація)  на інструментальній панелі Top.

2. Щоб повернутися назад до початкового виду, слід натиснути знову Invert Center.

6. Зміна радіусу атома.

У меню Options (Опції) потрібно вибрати Radii (Радіус), щоб відкрити діалогове вікно Atomic Radii (Радіус атома), що містить параметри за замовчуванням радіусів атомів різних елементів (рис. 5.7).

2. Щоб побачити радіус будь-якого елементу, потрібно натиснути на ньому в списку. У правому стовпці висвічується відповідне значення.

3. Щоб змінити радіус атома елементу, слід двічі натиснути на ньому в списку і надрукувати нове значення, наприклад, 0.5 у блоці Change Radius (Зміна радіусу), що з'являється (рис. 5.8).

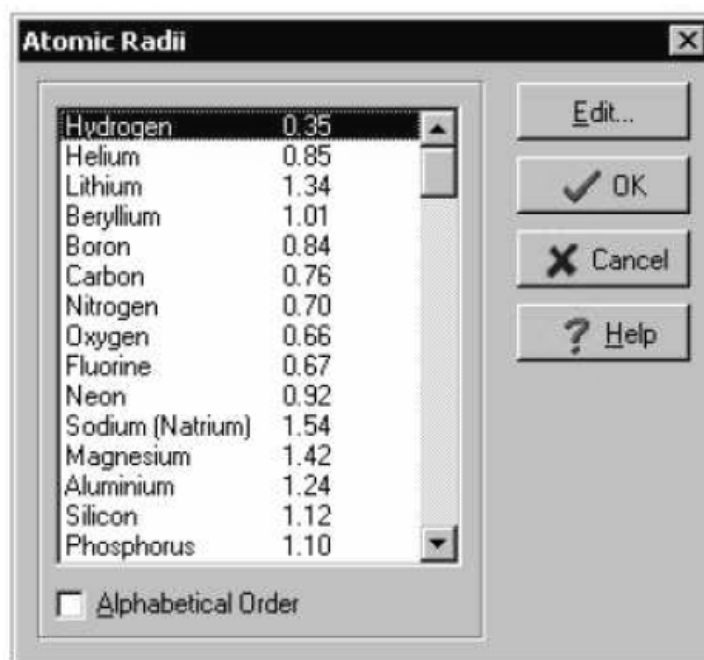


Рис. 5.7. Діалогове вікно Atomic Radii (Радіус атома).

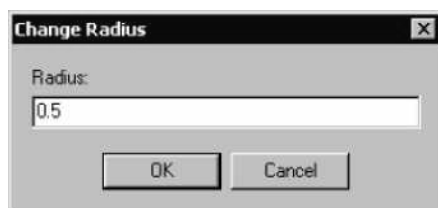


Рис. 5.8. Блок Change Radius (Зміна радіусу).

4. Натиснути OK щоб підтвердити зміни. Атомний радіус буде виражений у відносних одиницях.

5. Виконавши зміни в діалоговому вікні Atomic Radii (Атомний радіус), натиснути OK. Наступного разу, запускаючи програму ACD/3D Viewer задані за замовчуванням значення, будуть скинуті до їх попередніх значень.

7. Зміна зображення радіусу атома.

1. Натиснути Increase Atoms' Radii by 5% (Збільшення радіусу на 5%) . Кожне додаткове натискання цієї кнопки збільшує розмір радіусу зображених атомів на 5%.

2. Натиснути Decrease Atoms' Radii by 5% (Зменшення радіусу на 5%)



, щоб зменшити розмір усіх зображених атомів на 5%.

Вказані інструментальні засоби не зачіпають фактичних розмірів радіусів атомів (визначених в діалоговому вікні Atomic Radii), а тільки змінюють зображення.

6. Збереження і завантаження параметрів налаштування зображення.

1. Збереження параметрів налаштування зображення.

1. З меню Options (Опції), вибрати Save Settings (Збереження змін), щоб відобразити діалогове вікно, зображене на рис. 5.9.

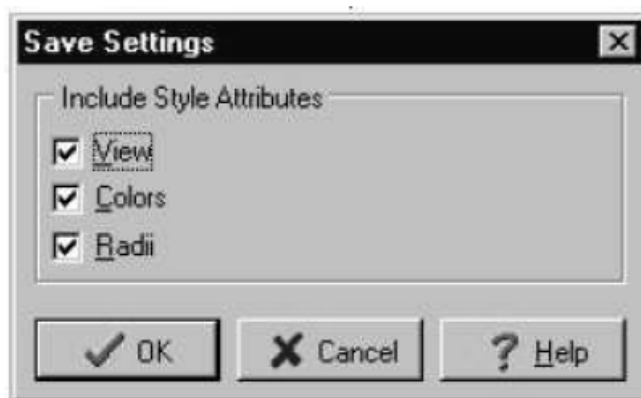


Рис. 5.9. Діалогове вікно Save Settings (Збереження змін).

2. Встановити помітки тих ознак, які потрібно зберегти. Встановлення прапорця Radii (Радіус) дозволить зберегти параметри налаштування, вказані в діалоговому вікні Atomic Radii (Радіус атома), але не поточні опції зображення радіусу.

3. У діалоговому вікні, що з'являється, потрібно вказати назву файлу і місце (диск і каталог) розташування і клацнути ОК. Файл має бути збережений з розширенням .3DS.

4. Клацнути Save (Зберегти) для збереження файлу.

2. Завантаження параметрів налаштування зображення.

Якщо користувачем заздалегідь збережено параметри налаштування, то їх можна завантажити і для поточного сеансу.

1. У меню Options (Опції) виберіть Load Settings (Завантаження параметрів), щоб відкрити діалогове вікно Load Settings.

2. Знайти .3DS файл, який потрібно завантажити.

3. Клацнути Open (Відкрити). Параметри налаштування, які містяться в цьому файлі, будуть завантажені під час поточного робочого сеансу.

3. Установка параметрів налаштування зображення за замовчуванням. Якщо користувач використовує певні параметри налаштування, кожного разу під час роботи з програмою ACD/3D Viewer, їх потрібно встановити як задані за замовчуванням.

1. Визначити необхідні параметри налаштувань представлення.

2. Зберегти їх у файлі, для цього в меню Options (Опції) вибрати Save Settings (Зберегти зміни).

3. У меню Options вибрати Set Default Settings (Набір передбачуваних змін). Знайти файл з налаштуванням, яке потрібно встановити як значення за замовчуванням.

4. Клацнути Open (Відкрити). Після цього кожного разу при відкритті ACD/3D Viewer, вказані параметри налаштування завантажуватимуться, поки не будуть встановлені інші.

Щоб повернутися до системних параметрів за замовчуванням, в меню Options слід вибрати Restore Default Settings (Відновлення передбачуваних змін).

7. Обчислення і зміна структурних параметрів.

1. Обчислення і зміна відстані між двома атомами.

1. Перемикач Balls and Sticks (Кулі і стержні)  атомів пропонує режим кращого представлення.

2. Клацнути Distance (Відстань) .

3. Клацнути на будь-якому атомі, щоб вибрати його, потім перемістити вказівник на інший атом, і клацнути і на ньому, щоб засвітити ці два атоми

вибраним кольором. З'являється діалогове вікно Internuclear Distance (Міжядерна відстань) (рис. 5.10).

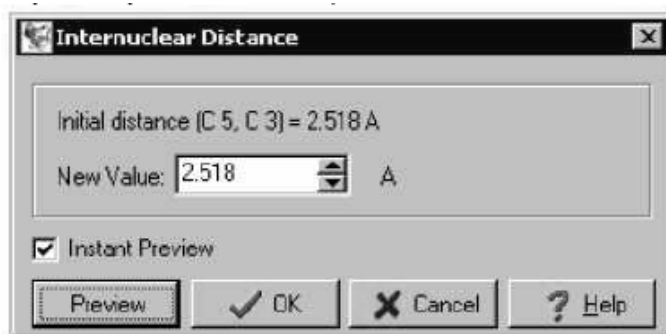


Рис. 5.10. Діалогове вікно Internuclear Distance (Міжядерна відстань).

З рис. 5.10 видно, що відстань між вибраними атомами:

Distance (C 5, C 3) = 2.5180 Å
(0,2518 нм)

4. Бажаючи змінити відстань між атомами, в діалоговому вікні Internuclear Distance, друкують бажане значення у блоці New Value (Нове значення). Якщо прапорець встановлений у Instant Preview (Негайне застосування), зміни негайно застосовуються. Якщо прапорець не встановлений, після кожної зміни потрібно клацнути Preview (Застосувати). Початкова відстань завжди представлена в діалоговому вікні, при потребі можна легко повернутися до початкових параметрів налаштування.

5. Клацнути OK, щоб застосувати зміну (будь-яку) і закрити діалогове вікно.

6. Щоб відмінити вибір і запустити нову зміну, натиснути будь-де на порожньому місці робочого простору.

2. Обчислення і зміна кута між двома зв'язками.

1. Клацнути Angle(Кут)

2. Клацнути на двох сусідніх атомах, що створюють між собою зв'язок. Перемістити вказівник на третій атом, який утворює зв'язок з останнім вибраним атомом. Відкриється діалогове вікно Bond Angle (Кут зв'язку) (рис. 5.11).

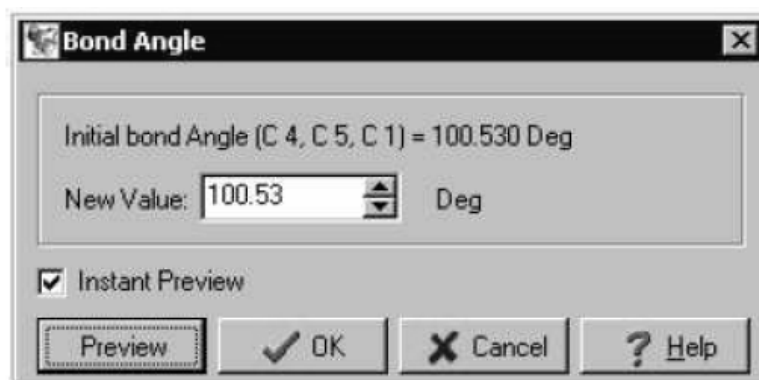


Рис. 5.11. Діалогове вікно Bond Angle (Кут зв'язку).

Також, в рядку стану з'являється розраховане кутове значення, наприклад:

Bond Angle (C 4, C 5, C 1) = 100.530 Deg

4. Щоб змінити значення кута, в діалоговому вікні Bond Angle (Кут зв'язку), друкують бажане значення у блоці New Value (Нове значення). Якщо прапорець Instant Preview (Негайне застосування) встановлений, зміни негайно застосовуються. Початковий кут завжди представлений в діалоговому вікні, якщо виникла потреба не змінювати кут, можна легко повернутися до початкових параметрів налаштування.

5. Клацнути ОК, щоб застосувати зміну (будь-яку) і закрити діалогове вікно. Щоб відмінити вибір і запустити нову зміну, натиснути де-небудь на порожньому місці робочого простору. Щоб припинити використання цього інструменту, потрібно натиснути на його кнопці, щоб зняти виділення.

3. Обчислення і зміна торсійного кута.

1. Клацнути Torsion Angle (Торсіонний кут) .

2. Клацнути на двох атомах, що утворюють спільний зв'язок. Вказаний зв'язок стає вибраним.

Таким самим чином потрібно клацнути ще на двох атомах, суміжних з раніше вибраним зв'язком. У результаті будуть вибрані три суміжні зв'язки, що створюють торсійний кут. З'являється діалогове вікно Torsion Angle (рис. 5.12).

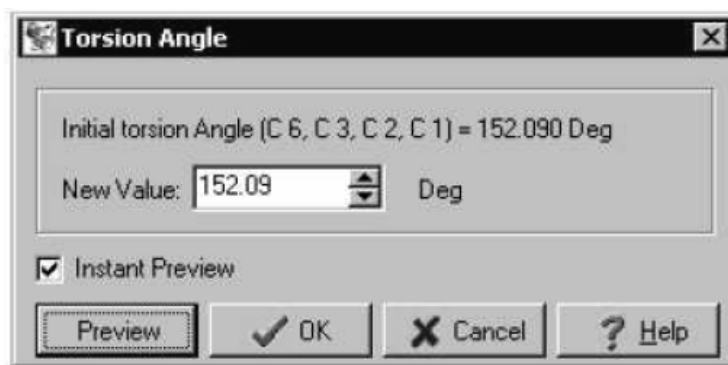


Рис. 5.12. діалогове вікно Torsion Angle (Торсійний кут).

3. Не вибравши третій зв'язок, можна проглянути значення усіх можливих кутів повороту, що межують з останнім вибраним атомом, переміщаючи вказівник між суміжними атомами.

4. Якщо прапорець Instant Preview (Негайне застосування) встановлений, зміни негайно застосовуються. Початковий торсійний кут завжди представлений в діалоговому вікні. Якщо користувач не змінює кут, можна легко повернутися до початкових параметрів налаштування.

5. Клацнути ОК, щоб застосувати зміну (будь-яку) і закрити діалогове вікно. Щоб відмінити вибір і запустити нову зміну, потрібно натиснути де-небудь на порожньому місці робочого простору. Для припинення використання цього інструменту, слід натиснути на його кнопці, щоб зняти виділення.

Висновки.

Досвід використання інформаційних технологій в процесі викладання хімічних дисциплін студентам природничих спеціальностей свідчить про появу нових можливостей, які не досягаються іншими традиційними засобами.

При вивченні хімії комп'ютер слід використовувати, враховуючи особливості цієї науки. Виділяють три основні напрями його застосування: моделювання хімічних процесів і явищ; контроль і обробка даних хімічного експерименту; програмна підтримка курсу хімічних дисциплін.

ACD/3D Viewer – програма швидкого і точного моделювання і візуалізації структур. Вона повністю пов'язана з програмою ACD/ChemSketch,

що дозволяє малювати структури 2D і швидко отримувати з них прекрасні кольорові 3D зображення.

Література

1. Аспицкая А.Ф. Использование информационно-коммуникационных технологий при обучении химии: метод. пособие/ А.Ф. Аспицкая, Л.В. Кирсберг. - М.: Бином; Лаборатория Знаний, 2009. -356 с.
2. Ахметов М.А., Денисова О.Ф. //Химия: методика преподавания. - 2004. -№1. -С. 35.
3. Добротин Д. Ю. Интернет в обучении химии / Д. Ю. Добротин, А. А. Журин // Химия в школе. – 2001. – № 7. – С. 52–55.
4. Довгопола О. В. Підготовка майбутнього вчителя до впровадження комп'ютерних технологій / О. В. Довгопола // Освіта Донбасу. – 2006. – № 3. – С. 116–117.
5. Литвак М.М., Литвак Н.В. //Химия: методика преподавания. - 2005. - №4. - С. 47.
6. Марченко І., Посторонко А. Особистісно-орієнтований підхід при організації навчання з фахових хімічних дисциплін/ Marchenko_Postoronko_article_31.
7. Мультимедиа в образовании : специализированный учебный курс / Бент Б. Андерсен, Катя ванн ден Бринк; авторизованный пер. с англ. – М.: Дрофа, 2007. – 224 с. – (Информационные технологии в образовании).
8. Пакет програмного забезпечення ACD/Labs
9. Программа по биоорганической химии. - М.: ГОУ ВУНМЦ МЗ РФ, 2000, -18 с.; МО РФ, 2004.
- 10.Рощупкин С.И. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №1. - С. 46.
- 11.Современные технологии в процессе преподавания химии: Развивающее обучение, проблемное обучение, проектное обучение, кооперация в обучении, компьютерные технологии / Авт.-сост. С. В. Дендебер, О. В. Ключникова. – 2-е изд. – М.: 5 за знания, 2008. – 112 с. – (Методическая

бібліотека).

12. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. //Компьютерная химия. - М.: СОЛОН-Пресс, 2005. - 536 с.
13. Титаренко Н. В. Використання комп'ютерних навчальних програм з хімії / Н. В. Титаренко // Біологія та хімія в школі. – 2004. – № 1. – С. 9–12.
14. Тюкавкина Н.А., Бауков Ю.И. //Биоорганическая химия: Учебник для вузов. - М.: Дрофа, 2004. - 544 с.: ил.
15. Шабаршин В.М. //Химия: методика преподавания. - 2004. - №2. - С. 33.

Запитання для самоперевірки

1. З яких програм складається пакет ACD/Labs?
2. Дайте загальну характеристику програмі ACD/3D Viewer.
3. Які операції можна здійснювати, використовуючи програму ACD/3D Viewer?
4. Що таке алгоритм 3D оптимізації?
5. Вкажіть обмеження оптимізації ACD/3D.

ТЕСТОВІ ЗАПИТАННЯ ДЛЯ САМОКОНТРОЛЮ

1. Вкажіть особливості уроку з комп'ютерною підтримкою:

- а) інтерактивність і діалоговий характер навчання;
- б) оптимальне поєднання індивідуальної та групової роботи;
- в) підтримання в учня стану психологічного комфорту при спілкуванні з комп'ютером;
- г) всі відповіді вірні.

2. Дайте пояснення принципу адаптивності для уроку з комп'ютерною підтримкою:

- а) пристосування комп'ютера до індивідуальних особливостей дитини;
- б) у будь-який момент можлива корекція вчителем процесу навчання;
- в) оптимальне поєднання індивідуальної та групової роботи;
- г) жодної правильної відповіді.

3. Дайте пояснення принципу керованості для уроку з комп'ютерною підтримкою:

- а) пристосування комп'ютера до індивідуальних особливостей дитини;
- б) у будь-який момент можлива корекція вчителем процесу навчання;
- в) оптимальне поєднання індивідуальної та групової роботи;
- г) жодної правильної відповіді.

4. Прикладами сучасних ППЗ з хімії є:

- а) «Періодична система хімічних елементів»; б) підручник «Хімія. 7 клас»;
- в) підручник «Хімія. 8 клас»; г) жодної правильної відповіді.

5. Прикладами сучасних ППЗ з хімії є:

- а) «Віртуальна хімічна лабораторія. 11 клас»; б) підручник «Хімія. 7 клас»;
- в) підручник «Хімія. 11 клас»; г) жодної правильної відповіді.

6. Прикладами сучасних ППЗ з хімії є:

- а) «Таблиця Д.І.Менделєєва»;
- б) «Віртуальна хімічна лабораторія. 8-11 класи»;
- в) «Бібліотека електронних наочностей. 8-9 класи»;
- г) всі відповіді вірні.

7. У вивченні шкільного курсу хімії виділяють кілька основних напрямків, де виправдане використання НКМ:

- а) наочне представлення об'єктів і явищ мікросвіту;
- б) вивчення виробництв хімічних продуктів;
- в) моделювання хімічного експерименту і хімічних реакцій;
- г) всі відповіді вірні.

8. Усі моделі, використовувані у викладанні хімії, можна розділити за рівнем об'єктів, що представляються, на групи:

- а) моделі мікросвіту і моделі макросвіту;
- б) моделі мікросвіту і моделі реакцій;
- в) моделі мікросвіту, моделі макросвіту, моделі хімічного експерименту;
- г) жодної правильної відповіді.

9. Моделі хімічних реакцій, лабораторних робіт, хімічних виробництв, хімічних приладів реалізовані в наступних програмах:

- а) «Хімія для усіх – 2000»;
- б) ChemLab;
- в) IR and NMR Simulator;
- г) всі відповіді вірні.

10. Використання перерахованих вище програмних засобів на уроках хімії мають наступні переваги:

- а) значний обсяг матеріалу, що охоплює різні розділи курсу шкільної хімії;
- б) поліпшується наочність подачі матеріалу за рахунок кольору, звуку і руху;
- в) наявність демонстрацій тих хімічних досвідів, що небезпечні для здоров'я дітей;
- г) всі відповіді вірні.

11. Вкажіть програму для симулювання різних хімічних реакцій.

- а) ACD/ChemSketch;
- б) ACD/3D Viewer;
- в) Model ChemLab;
- г) жодної правильної відповіді.

12. Що входить до пакету установки Model ChemLab?

- а) програма ChemLab;
- б) програма RasWin;
- в) Періодична система елементів;
- г) всі відповіді вірні.

13. Вкажіть мобільну програму для перегляду 3D-структур молекул у пакеті Model ChemLab.

а) 3D Viewer; б) RasWin; в) 3D Optimization; г) всі відповіді вірні.

14. Які формати підтримує програма RasWin?

а) PDB; б) MDL; в) XYZ; г) всі відповіді вірні.

15. Які формати підтримує програма RasWin?

а) PDB; б) BMP; в) JPEG; г) всі відповіді вірні.

16. Які формати підтримує програма RasWin?

а) GIF; б) MDL; в) TIF; г) всі відповіді вірні.

17. Запустити програму Model ChemLab можна командою головного меню:

- а) ПУСК – Програми – ChemLab Eval – ChemLab;
- б) ПУСК – Програми – Стандартні – ChemLab Eval – ChemLab;
- в) ПУСК – Програми – Стандартні – ChemLab;
- г) жодної правильної відповіді.

18. Яке діалогове вікно з'являється після запуску ChemLab?

- а) «Модуль моделювання»;
- б) «Хімічна лабораторія»;
- в) «Установки»;
- г) жодної правильної відповіді.

19. Які алгоритми лабораторних робіт є стандартними у модулі моделювання ChemLab?

- а) кислотно-основне титрування;
- б) окисно-відновне титрування;
- в) властивості металів;
- г) жодної правильної відповіді.

20. Які алгоритми лабораторних робіт є стандартними у модулі моделювання ChemLab?

- а) вимірювання тиску газових сумішей;
- б) окисно-відновне титрування;
- в) властивості металів;
- г) жодної правильної відповіді.

21. Які алгоритми лабораторних робіт є стандартними у модулі моделювання ChemLab?

- а) дослідження кінетики окисно-відновних реакцій;
- б) визначення фізико-хімічних констант;
- б) властивості металів;
- г) жодної правильної відповіді.

22. Які алгоритми лабораторних робіт є стандартними у модулі моделювання ChemLab?

- а) визначення фізико-хімічних констант; б) гравіметричний аналіз;
- в) комплексонометрія; г) жодної правильної відповіді.

23. Які алгоритми лабораторних робіт є стандартними у модулі моделювання ChemLab?

- а) гравіметричний аналіз; в) кислотно-основне титрування;
- б) кристалізація та розділення сумішей; г) всі відповіді вірні.

24. Вкажіть пункт, який відсутній у меню ChemLab.

- а) Файл; б) Правка; в) Формат; г) жодної правильної відповіді.

25. Вкажіть пункт, який відсутній у меню ChemLab.

- а) Речовина; б) Обладнання; в) Об'єкт; г) жодної правильної відповіді.

26. Який пункт входить до меню ChemLab?

- а) Файл; б) Речовина; в) Налаштування; г) всі відповіді вірні.

27. Який пункт входить до меню ChemLab?

- а) Обладнання; б) Речовина; в) Налаштування; г) всі відповіді вірні.

28. Вкажіть програму, що містить базу даних з лабораторним посудом та обладнанням для створення установок та проведення віртуальних лабораторних робіт.

- а) ACD/ChemSketch; б) ACD/3D Viewer;
- в) Model ChemLab; г) жодної правильної відповіді.

29. Опції, необхідні для виконання роботи та обробки результатів хімічного експерименту у ChemLab містяться у меню ...

- а) Обладнання; б) Процедури; в) Налаштування; г) всі відповіді вірні.

30. Які ваги містяться у лабораторному обладнанні віртуальної хімічної лабораторії?

- а) технічні; б) електронні; в) аналітичні; г) всі відповіді вірні.

31. ChemDrawPro є одним з найбільш зручних та ефективних ...

- а) текстових редакторів; б) редакторів хімічних структур;
- в) системних програм; г) жодної правильної відповіді.

32. Програма ChemDrawPro має розвинуті можливості для ...

- а) створення та редагування хімічних формул, схем, рівнянь реакцій;
- б) побудови графіків;
- в) створення та редагування математичних формул;
- г) жодної правильної відповіді.

33. Основним прийомом створення структурних формул у ChemDraw є:

- а) безпосереднє зображення при активуванні кнопки "Bond" для зображення хімічного зв'язку;
- б) генерація за назвою ІЮПАК. Активують функцію "Convert Name to Struktur";
- в) використання формул заготовок;
- г) всі відповіді вірні.

34. На яку кнопку з перерахованих (див. рис. 1) потрібно натиснути, щоб створити зв'язок ?

- а) 19; б) 2; в) 18; г) 3; г) 1,5.

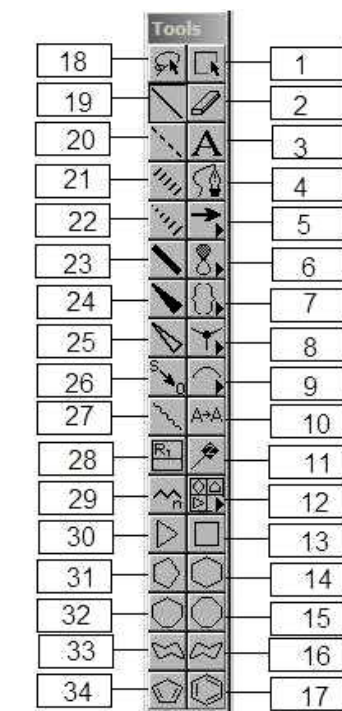


Рис 1. Панель інструментів редактора ChemDrawPro.

35. Як називається функція, що викликається кнопкою під номером 18 (див. рис. 1)?

в) "Convert Name to Struktüre"; г) жодної правильної відповіді.

45. Якою номенклатурою слід користуватися при активації кнопок "Convert Struktüre to Name" та "Convert Name to Struktüre"

- а) міжнародною ІЮПАК; б) тривіальною;
в) раціональною; г) жодної правильної відповіді.

46. Запустити програму ChemDrawPro можна командою головного меню:

- а) ПУСК – Програми – CS ChemOffice – CS ChemDraw Pro;
б) ПУСК – Програми – Стандартні – CS ChemOffice – CS ChemDraw Pro;
в) ПУСК – Програми – Обслуговування;
г) жодної правильної відповіді.

47. Для відображення лінійок в документі потрібно поставити відмітку у меню

- а) "Tools" – "Show Rulers"; б) "Tools" – "Show Crosshair";
в) "Structure" – "Show Crosshair"; г) жодної правильної відповіді.

48. Для відображення координатної сітки в документі потрібно поставити відмітку у меню

- а) "Tools" – "Show Rulers"; б) "Tools" – "Show Crosshair";
в) "Structure" – "Show Crosshair"; г) жодної правильної відповіді.

49. Пункт меню ... дає можливість створювати документи ChemDraw, налаштовувати їх та зберігати

- а) File (Файл); б) Edit (Правка);
в) Tools (Інструменти); г) жодної правильної відповіді.

50. Пункт меню ... дає можливість працювати з фрагментами та структурами в цілому (вирізати, копіювати, вставляти, виділяти тощо)

- а) File (Файл); б) Edit (Правка);
в) Tools (Інструменти); г) жодної правильної відповіді.

51. Зі скількох батьківських програм складається пакет програмного забезпечення ACD/Labs?

- а) одної; б) двох; в) трьох; г) жодної правильної відповіді.

52. Вкажіть молекулярний редактор двовимірних хімічних структур і графічний редактор.

- г) жодної правильної відповіді.

53. Вкажіть програму моделювання і візуалізації тривимірних структур

- г) жодної правильної відповіді.

54. У яких режимах працює редактор ChemSketch?

- г) жодної правильної відповіді.

55. Запустити молекулярний редактор двовимірних хімічних структур можна командою ГОЛОВНОГО МЕНЮ:

- г) жодної правильної відповіді.

56. Перемикання між режимами редактора ChemSketch відбувається при натисненні клавіші ...

- г) жодної правильної відповіді.

57. Які основні операції можна виконати при натиснутій кнопці Draw Normal у редакторі ChemSketch?

- Г) всі відповіді вірні.

58. Які основні операції можна виконати при натиснутій кнопці Draw Normal у редакторі ChemSketch?

- Г) всі відповіді вірні.

59. Яку клавішу потрібно використати для зображення ланцюга атомів карбону у редакторі ChemSketch?

- г) всі відповіді вірні.

60. Кнопка «Ласо» використовується для

- а) виділення структури;
- б) повороту структури;
- в) текстового надпису;
- г) всі відповіді вірні.

61. Для видалення атома або зв'язку використовують клавішу

- а) Delete;
- б) Insert;
- в) Enter;
- г) жодної правильної відповіді.

62. Якщо всі зображені елементи є елементами хімічної структури і мають відповідні властивості, то ChemSketch працює у режимі ...

- а) Structure;
- б) Draw;
- в) Object;
- г) жодної правильної відповіді.

63. Якщо всі елементи, що зображуються, є частинами звичайного малюнка, то ChemSketch працює у режимі ...

- а) Structure;
- б) Draw;
- в) Object;
- г) жодної правильної відповіді.

64. У ChemSketch намалювати зв'язок між наявними атомами можна ...

- а) клацнувши на першому атомі;
- б) клацнувши на обох атомах;
- в) клацнувши на першому атомі і, не відпускаючи клавішу мишки, тягнути зв'язок до другого атома;
- г) жодної правильної відповіді.

65. Скільки кнопок містить редактор ChemSketch для виділення структури або її частини і подальшої маніпуляції з виділеним об'єктом?

- а) 2;
- б) 3;
- в) 4;
- г) таких операцій у даному редакторі здійснити неможливо.

66. Якщо у ChemSketch необхідно видалити тільки центральний атом, але зберегти периферійні, то видалення проводять клавішою Delete при натиснутій клавіші

- а) Ctrl;
- б) Shift;
- в) Alt;
- г) жодної правильної відповіді.

67. Функція 3D Optimization у ChemSketch дає можливість

- а) генерувати тривимірну структуру;
- б) генерувати формулу за назвою;
- в) повернути сполуку;
- г) жодної правильної відповіді.

68. Кнопка Clean Structure дозволяє ...

- а) витерти структуру;
- б) виділити структуру;
- в) стандартизувати довжини зв'язків і кути між зв'язками і зробити їх зовні акуратними;
- г) жодної правильної відповіді.

69. Інструменти для зміни зовнішнього виду структури призначені

- а) для зміни положення атомів гідрогену та зміни вигляду подвійного зв'язку;
- б) для розвороту структури в площині листа;
- в) для повороту на 180^0 навколо зв'язку;
- г) всі відповіді вірні.

70. Інструменти для зміни зовнішнього виду структури призначені

- а) для генерування тривимірної структури;
- б) для зміни положення атомів гідрогену та зміни вигляду подвійного зв'язку;
- в) для стандартизації довжин зв'язків і кутів між ними;
- г) всі відповіді вірні.

71. Вкажіть програму швидкого і точного моделювання і візуалізації структур.

- а) ACD/ChemSketch;
- б) ACD/3D Viewer;
- в) ACD/Labs;
- г) жодної правильної відповіді.

72. Вкажіть програму за допомогою якої можна керувати 3D моделями: переміщати, обертати 2D і 3D зображення, змінювати розмір, стилі і кольори.

- а) ACD/ChemSketch;
- б) ACD/3D Viewer;
- в) ACD/Labs Draw;
- г) жодної правильної відповіді.

73. За допомогою ACD/3D Viewer можна:

- а) вимірювати і змінювати довжину зв'язків, кути між площинами зв'язків і торсійних кутів;
- б) керувати 3D моделями;
- в) експортувати 3D моделі в інші програми геометричних оптимізацій;
- г) всі відповіді вірні.

74. ACD/3D Viewer не можна використовувати

- а) для управління 3D моделями;
- б) в якості графічного редактора;
- в) для експорту 3D моделей в інші програми геометричних оптимізацій;
- г) жодної правильної відповіді.

75. Які структури може оптимізувати програма ACD/3D Viewer?

- а) усі;
- б) структури, що містять атоми від гідрогену до ксенону;
- в) структури, що містять атоми від гідрогену до ксенону із стандартною валентністю і в зв'язаних станах;
- г) жодної правильної відповіді.

76. Який зв'язок не бере до уваги програма ACD/3D Viewer?

- а) ковалентний; б) йонний; в) водневий; г) металічний.

77. Вкажіть максимальну кількість атомів у структурі молекули, що піддається оптимізації.

- а) 100; б) 200; в) 250; г) такого обмеження не існує.

78. Для запуску програми ACD/3D Viewer на комп'ютері потрібно:

- а) запустити Microsoft Windows та двічі клацнути на значку 3D Viewer;
- б) в меню Start/Run (Запуск/Виконати) у Windows 98/2000, NT або XP на панелі завдань відмітити ACD/Labs і потім вибрати значок ACD/3D Viewer;
- в) у запусненій програмі ACD/Labs в меню ACD/Labs вибрати 3D Viewer;
- г) всі відповіді вірні.

79. У випадку першого запуску програми ACD/3D Viewer, з'являється діалогове вікно ...

- а) File Associations (Файлові асоціації); б) ChemSketch;
- в) File (Файл); г) жодної правильної відповіді.

80. З програми ACD/3D Viewer можна вийти одним з наступних способів:

- а) клацнути X у верхньому правому кутку області заголовка будь-якого вікна;
- б) з меню ACD/Labs вибрати Close All (Закрити все);
- в) з меню File (Файл) вибрати Exit (Вихід);
- г) всі відповіді вірні;

Навчальне видання

**Мідак Лілія Ярославівна
Кузишин Ольга Василівна
Базюк Лілія Володимирівна**

**Методичні вказівки до самостійної роботи з курсу
«Сучасні інформаційні технології
(за професійним спрямуванням)»**

Літературний редактор і коректура – Лілія Мідак, Ольга Кузишин
Комп'ютерна верстка – Іван Кравець
Дизайн обкладинки – Іван Кравець

Підписано до друку 20.11.2018.
Формат 60х84/16. Папір офсетний. Друк цифровий.
Гарнітура "Times New Roman". Ум. друк арк. 5,35
Наклад 100 пр. Зам. № 12 від 22.11.2018.

Видавець: ФО-П Петраш Ксенія Тарасівна
77300 Україна, Івано-Франківська обл., м. Калуш,
вул. Дзвонарська, 4, тел. (066) 656-62-63
Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру видавців, виготовлювачів
і розповсюджувачів видавничої продукції
Серія ДК № 4928 від 02.07.2015 р.

Виготовлювач: підприємець Голіней О. М.
76000, Україна, м. Івано-Франківськ, вул. Галицька, 128,
тел.: (0342) 580 432, +38 066 481 66 01,
+38 050 540 30 64
e-mail: gsm1502@ukr.net