

ни выполнение лабораторной работы всеми тремя категориями действующих лиц, главной из которых является, естественно, категория обучаемых.

Изучение химии не должно быть ограничено узкоспециальными целями. Это только один из этапов подклубления к накопленным человечеством научным и культурным ценностям. Только в совокупности с другими науками и искусством она может полноценно существовать, давать требуемые результаты. Химия – это шаг от изучения неживой природы физикой и еще целым спектром наук к предметам и явлениям живой природы – органической химии, биологии, физиологии, психологии... В этом ряду проблемы, решаемые органической химией, начинают приобретать значение общечеловеческих позиций, придавая молодому человеку, осваивающему мир, силы и уверенность в правильности выбора своего пути.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Зайцев, О.С. Методика обучения химии. / О.С. Зайцев. – М.: Владос, 1999. – 384с.
2. Чернобельская, Г.М. Методика обучения химии в средней школе. / Г.М. Чернобельская. – М.: Владос, 2000. – 336с.
3. Голуб, Н.М. Основы химического синтеза: методические указания. / Н.М. Голуб, В.Г. Салищев, А.И. Боричевский ; БрГУ им. А.С. Пушкина, каф. химии. – Брест: изд-во БрГУ 2008. – 62 с.
4. Гранберг, И.И. Практические и семинарские работы по органической химии. / И.И. Грандберг – М.:Высшая школа, 1987. – 272 с.
5. Гиттис, С.С. Практикум по органической химии. Органический синтез. / С.С. Гиттис, А.И. Глаз, А.В. Иванов – М.:Высшая школа, 1991. – 301 с.

УДК 372.016:54

### **МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИ ИЗУЧЕНИИ МЕХАНИЗМОВ ПРОТЕКАНИЯ РЕАКЦИЙ**

*Голуб Н.М., Боричевский А.И.*

*УО «Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина», г.Брест*

Образовательные системы практически во всех развитых странах мира предполагают создание условий для непрерывного образования, внедрение новых технологий, направленных на творческое развитие личности. Разработка, внедрение и использование компьютерных технологий обучения является одним из приоритетных направлений развития высшей школы. Компьютерные разработки могут рассматриваться при этом как обязательная часть высшего образования независимо от профиля подготовки будущего специалиста.

Одной из целей обучения в вузе является формирование профессионального мышления будущего специалиста. Он должен не только усвоить определенную систему знаний, но и научиться системно видеть и решать проблему, выделять фундаментальные связи внутри теорий, а также применять теоретические знания к решению практических задач. Каждый студент должен приобрести знания и навыки работы в области информационных технологий, овладеть определенным типом мышления. [1]. Компьютер, являясь универ-

сальным средством обучения, позволяет не только формировать знания, умения и навыки, но и решать гораздо более важную задачу, стоящую перед обучением, – развивать личность и удовлетворять ее познавательные интересы. Внедрение электронных систем в высшее образование позволяет принципиально изменить методы передачи учебного материала от преподавателя к студенту. Использование компьютерных технологий в учебном процессе в существенной степени зависит от характера, уровня и качества материала, который заложен в соответствующей программе, а также от умения сформулировать учебную задачу таким образом, чтобы заинтересовать учащегося, побудить его к поиску правильного решения.

Одной из интересных и во многом парадоксальных особенностей современных естественнонаучных знаний является значительная и все возрастающая роль теоретических методов трактовки результатов исследования. Теоретическое мышление, сопутствующее развитию квантовой химии, все сильнее расширяет континуум, лежащий между экспериментом и теорией. Вместе с этим все более размывается граница между теоретическими понятиями и теоретическими интерпретациями.

В настоящий момент функционирует достаточно много современных вычислительных комплексов, реализующих методы квантовой химии и молекулярной динамики. Молекулярное моделирование становится все более распространенным инструментом для изучения химических и биологических процессов. Применение компьютерных технологий может оказать заметную поддержку экспериментальным работам, позволяя существенно снизить временные и материальные затраты.

В области квантовой химии полностью теоретическим можно считать расчет «*ab initio*» свойств какой-либо молекулярной системы с помощью методов квантовой механики. Введение в расчет каких-либо величин, кроме универсальных мировых постоянных, представляет собой уже уступку эксперименту. Наряду с этим, подбор уравнения, описывающего какой-либо процесс с включением в это уравнение некоторых характеристик молекул или атомов, вполне может быть назван, теоретической обработкой наблюдений. Четкой границы между наблюдаемыми зависимостями и первичным теоретическим их осмыслением практически не существует. В повседневной практике мы все же довольно уверенно проводим различие между этими двумя категориями зависимостей. Думается, что это повседневное интуитивное разграничение экспериментального и теоретического подсознательно основывается на степени связи осмысливаемой закономерности с общими принципами науки, лежащими в основе изучаемых явлений.

В силу некоторых причин исследование экспериментальными методами особенностей структуры, электронного строения и свойств интермедиатов и переходных состояний затруднено или невозможно. Квантовохимические расчеты в сочетании с данными, полученными физико-химическими методами и синтетическим путем позволяют наиболее близко подойти к глубокому пониманию явления и установить последовательность событий, происходящих в ходе химического взаимодействия.

Поэтому представляется важным решение вопроса о возможности применения расчетных методов квантовой химии для корректного объяснения физико-химических свойств и реакционной способности химических соединений, ко-

торые базируются на понятии поверхности потенциальной энергии (ППЭ), являющемся центральным в спектроскопии, кинетике, структурной теории.

В практическом курсе «Квантовая механика и квантовая химия» для студентов биологического факультета специальности «Биология. Химия» и «Химия. Биология» БрГУ имени А.С. Пушкина выполняется лабораторная работа по сравнительному анализу реакционной способности ряда соединений и инверсионному анализу молекулярных структур. Введение компьютерной компоненты увеличивает восприимчивость сложного квантово-химического материала, а исследовательский подход при анализе полученных результатов позволяет студентам интерпретировать сложный теоретический аппарат данного курса наглядным изображением химических структур, с учетом всех особенностей пространственного и электронного строения.

Суть метода внутренней координаты для изучения реакционной способности и инверсионного анализа изложена в лабораторном практикуме [2]. Для визуализации строения многомерной ППЭ используют анализ ее сечений по независимым внутренним координатам. Выполнение расчета ППЭ для многоатомных молекул в полном объеме не представляется возможным. Это можно проиллюстрировать рассмотрением конформационного расчета для молекулы этана. Молекулярная формула –  $C_2H_6$ .

Число независимых ядерных координат, определяемых по формуле  $3N - 6$ , равно  $3 \cdot 8 - 6 = 18$ . ППЭ в данном случае невозможно наглядно представить в графическом виде. Если даже ограничить варьирование каждой внутренней координаты всего 360 точками, то для того чтобы построить ППЭ для молекулы этана, потребуется произвести расчеты  $360^{18}$  различных структур (точек на ППЭ). Для решения большинства задач не требуется рассчитывать ППЭ в полном объеме. На практике обычно можно использовать сведения лишь об определенных участках ППЭ. Это, прежде всего, точки минимумов и седловые точки, которые являются моделями переходных состояний в химических реакциях, а также пути минимальной энергии перехода от одного минимума к другому (рис. 1). В некоторых случаях можно выделить один или два параметра (внутренние координаты) из числа внутренних координат, монотонное изменение которых может описать путь химической реакции или конформационный переход [3].

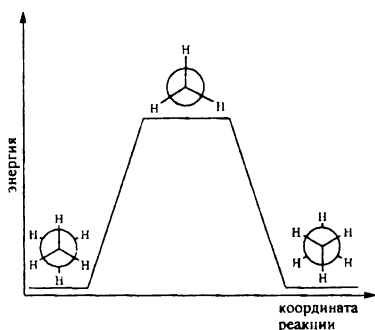


Рисунок 1. Сечение ППЭ вдоль координаты реакции превращения скошенной в заслоненную конформации молекулы этана

Моделирование механизмов химических реакций или инверсионных переходов при выполнении практических занятий по квантовой химии позволяет обучающимся обосновать возможности осуществления процесса. Рассмотрение эмпирических и модельных соотношений позволяет избежать недоразумений и двусмысленностей при изучении теоретической химии.

Использование данного методического подхода в преподавании курса «Квантовая механика и квантовая химия» помогает студентам реально понимать процессы, происходящие в теоретической химии, что в свою очередь повышает их научный потенциал как педагогов-исследователей.

Применение информационных технологий в обучении позволяет реализовать такой важный принцип обучения, как индивидуализация. Компьютерное обучение, являясь по форме самостоятельным, индивидуальным, осуществляется по общей методике, которая реализуется в компьютерной программе. Тем не менее, нельзя считать, что компьютерное моделирование может полностью заменить химический опыт либо экспериментальные методы исследования. Наиболее продуктивным является совместное решение поставленных задач экспериментальными и расчетными методами.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Зинович З., Василевская Е., Халецкий В. Дидактическое программное обеспечение учебного процесса по фундаментальным дисциплинам в системе высшего образования // *Technologiczne systemy informacyjne w inzynierii, produkcji i kształceniu technicznym*, Lublin, Lubelskie Towarzystwo Naukowe, 2001 P. 121-127

2. Голуб Н.М., Боричевский А.И. Квантовая механика и квантовая химия // БрГУ им. А.С. Пушкина. Брест 2006. – С. 51

3. Минкин, В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – Ростов на Дону: Феникс, 1997. – 560 с.

УДК 378.147.88

### **РОЛЬ ПЕДАГОГИЧЕСКОЙ ПРАКТИКИ В ФОРМИРОВАНИИ ПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ КОМПЕТЕНЦИЙ БУДУЩЕГО УЧИТЕЛЯ ХИМИИ-БИОЛОГИИ**

*Голуб Н.М.<sup>1</sup>, Подоляк О.С.<sup>1</sup>, Василевская Е.И.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>УО «Брестский государственный университет имени А.С. Пушкина», г.Брест

<sup>2</sup>Белорусский государственный университет, г.Минск

Процесс подготовки учителей традиционно базируется на сложившихся, апробированных длительным опытом содержании образования, методах и формах обучения (аудиторная и самостоятельная подготовка, лекции, практические и лабораторные занятия, семинары, практикумы, спецкурсы и др.). Соотношение форм и методов обучения определяются образовательными стандартами, квалификационными характеристиками, учебными планами и программами, решениями Советов вузов, факультетами и кафедрами.

Потребность современного общества в инициативных, обладающих творческой активностью специалистах обуславливает открытие новых на-