

УДК 544.7; 004.9

DOI 10.18372/2786-5487.1.17735

**Пилипчук Людмила** 

кандидат біологічних наук, доцент,  
Херсонський державний університет,  
м. Херсон, Україна

[lpylpchuk@ksu.ks.ua](mailto:lpylpchuk@ksu.ks.ua)

**Волкова Світлана,**

кандидат хімічних наук, доцент,  
Херсонський державний університет,  
м. Херсон, Україна

[lpylpchuk@ksu.ks.ua](mailto:lpylpchuk@ksu.ks.ua)

**Попович Тетяна** 

кандидат технічних наук, доцент,  
Херсонський державний університет,  
м. Херсон, Україна

[chemisthdu@gmail.com](mailto:chemisthdu@gmail.com)

## **ВИКОРИСТАННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ПРИ ВИСВІТЛЕННІ ПИТАНЬ КОЛОЇДНОЇ ХІМІЇ**

***Анотація.** У статті розглядаються шляхи використання новітніх інформаційних технологій при вивченні колоїдної хімії.*

***Ключові слова:** колоїдна хімія, інформаційні технології, хімічна інформатика.*

***Annotation.** The article deals with the different ways of using new information technologies in the study of colloid chemistry.*

***Key words:** colloid chemistry, information technology, chemoinformatics.*

**Актуальність теми.** Колоїдна хімія одна із найбільш необхідних дисциплін при вивченні живих організмів, так як вони всі складаються з колоїдних систем. Тому ця освітня компонента вивчається на спеціальностях хімія, фармація, біологія, медицина. Для кращого розуміння здобувачами вищої освіти цієї дисципліни, в сучасному світі, бажано використовувати сучасні інформаційні технології. Їх можна застосовувати як при викладенні нового матеріалу, так і для закріплення та контролю.

Саме тому, хімічна інформатика активно допомагає вивченню як колоїдної хімії, так і інших галузей хімії та фармакології.

**Мета статті** – розкрити шляхи використання новітніх інформаційних технологій при вивченні колоїдної хімії.

**Результати дослідження.** Інформатизація сучасного світу суттєво впливає на процес отримання знань та формування вмінь. Нові інформаційно-комунікативні технології в процесі навчання дозволяють збільшити швидкість, глибину, розуміння та сприйняття нових знань [1]. Це сприяє підвищенню творчої активності як студентів, так і викладачів, так як збільшує можливості викладати новий матеріал та закріплювати його в більш доступній формі.

Інформаційне суспільство – це комплексне поняття, яке складається з багатьох різноманітних аспектів політичної, економічної, соціальної природи, яке має високу динаміку розвитку. Ознакою інформаційної культури сучасного фахівця повинне стати розуміння сутності інформаційних процесів, а також важливості ролі інформаційних ресурсів [2]. Розвиток концепції інформаційного суспільства вимагає від особистості знань, інформації та збільшення інтелектуального потенціалу.

В світлі процесу інформатизації, який почали проваджувати в усьому світі, на основі хімічних наук та фармації, з'явилась нова галузь «хімічна інформатика». Вона виникла в останні десятиліття і почала швидко поширюватись. Використання інформаційних технологій та управління синтезом фармацевтичних препаратів стало важливою частиною процесу

відкриття ліків. Спочатку хімічна інформатика об'єднувала інформаційні ресурси для перетворення даних в знання, а потім передбачення, з метою приймати кращі рішення в області ідентифікації сполук-лідерів та організації процесу синтезу.

У нас час хімічна інформатика отримала нове визначення, яке засноване на нових можливостях цієї науки.

Хімічна інформатика – це загальний термін, який охоплює проектування, створення, організацію, управління, пошук, аналіз, розповсюдження, візуалізацію та використання хімічної інформації.

Методи хімічної інформатики необхідні в усіх областях хімії та мають ширше значення, ніж лише синтез лікарських препаратів [3].

Хімія та фармація мають величезний об'єм даних, відомо більше 45 мільйонів хімічних сполук, і ця кількість збільшується. Нові техніки: комбінаторний синтез та високопродуктивний скринінг генерують величезні обсяги даних. Усі ці дані та інформація можуть працювати лише тоді, коли вони зберігаються в базах даних. Сучасна наука має данні про 3-D структуру, яку визначено методом рентгенівської кристалографії, близько 300 тис. органічних сполук. А база даних інфрачервоних спектрів містить близько 200 000 спектрів. Тобто, ми знаємо менш ніж 1% 3-D структури усіх сполук.

З часом з'явилося багато інформаційних методів вивчення та різних способів представлення хімічних сполук і структур. Було створено цілий ряд програм для зображення хімічної будови в 2-D та 3-D структурах, щоб сприймати стехіометричні формули чи молекулярні поверхні [4].

Хімія оперує широким спектром даних про фізичні, хімічні та біологічні властивості. Тому з'являються, в першу чергу, бази даних для зберігання та поширення їх. Бази даних були розроблені для хімічної літератури, для хімічних сполук, для 3-D-структур, для реакцій, для спектрів, тощо.

Чи зможе сучасна наука отримати достатньо інформації про маловивчені сполуки з уже відомих даних? Для вирішення цієї проблеми і потрібна сумісна робота хімії, фармації та інформатики.

Існує думка, що хімічну інформатику потрібно викладати для підготовки майбутніх спеціалістів. Основні теми хімічної інформатики мають бути інтегровані в хімічну та фармацевтичну галузі.

Саме тому ми вважаємо, що використання сучасних інформаційних технологій при вивченні колоїдної хімії суттєво спростить процес навчання, зробить його більш доступним та наглядним.

Зараз наявні пакети програм, які дозволяють будувати структурні формули хімічних сполук. Використання цих програм дозволяє викладачам показати при викладенні хімічних дисциплін різні структурні та просторові зображення сполук, що суттєво полегшує сприйняття нових тем студентами. Також, здобувачі вищої освіти за допомогою програмного забезпечення можуть самі створювати різні формули, що сприяє процесу навчання.

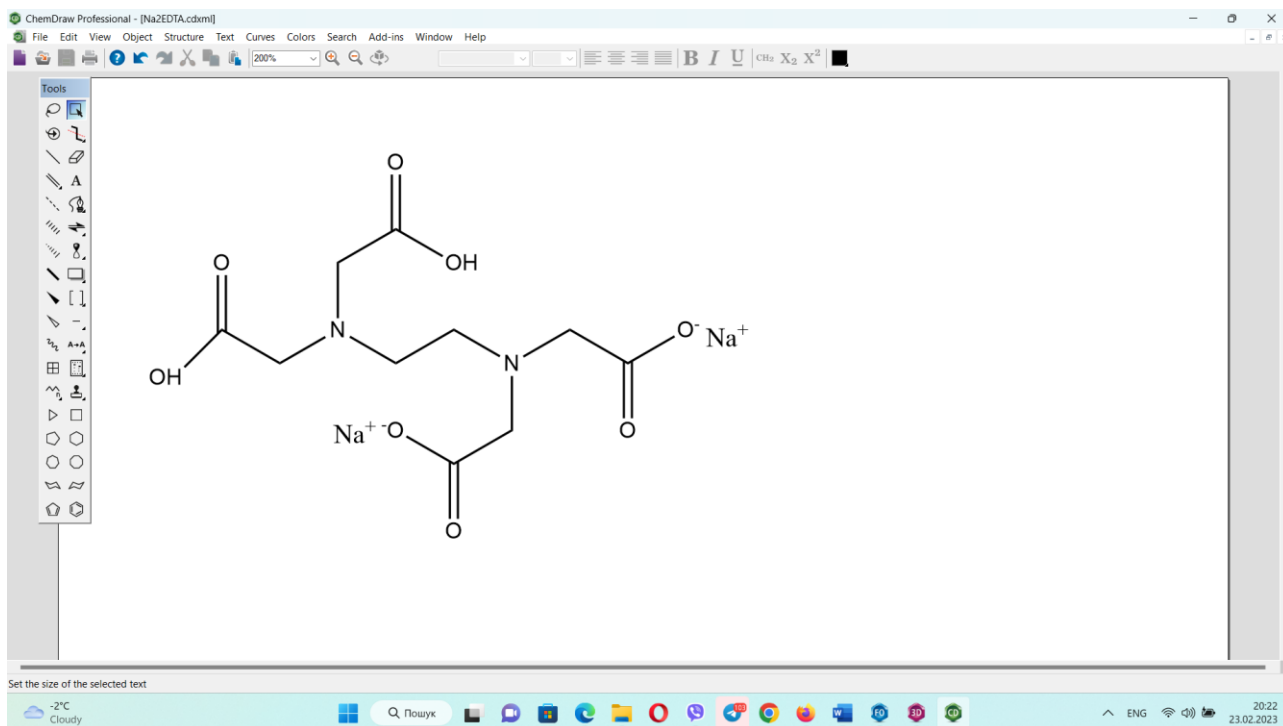
Наприклад, трилон Б (комплексон III,  $\text{Na}_2\text{-ЕДТА}$ ) застосовують в колоїдній хімії для отримання деяких золів, а також в інших галузях хімії, фармації та промисловості. Студенти можуть побачити і написати формулу, що сприяє засвоєнню нових знань.

Одна із програм, яка дозволяє записати як 2-D, так і 3-D структурні формули – це ChemOffice. Це програмне забезпечення дуже допомагає в записі різноманітних хімічних формул (рис. 1).

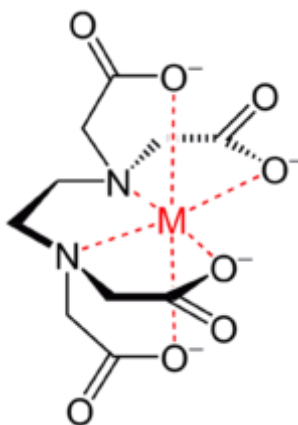
Також можна записати просторову 2-D формулу в цьому редакторі, чи в аналогічних, що забезпечує сприйняття різних хімічних та біологічних властивостей сполуки, які залежать саме від просторової будови (рис. 2).

Також сучасні програмні продукти дозволяють створювати 3-D зображення. Вони показують, як атоми в сполуці та в якому порядку, поєднані між собою (рис. 3). 3-D структури в сучасних програмах можна не тільки записувати, а повертати під різними кутами, тобто структуру можна вивчати з усіх боків.

Окрім ординарних, подвійних та потрійних зв'язків у хімічних формулах можна використовувати інші типи – координаційні, водневі та ін.

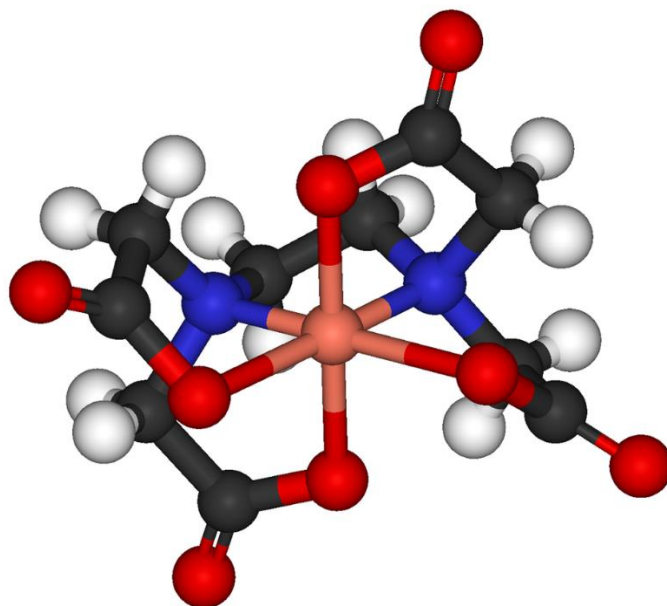


**Рис. 1. 2-D Формула  $\text{Na}_2$ -ЕДТА** виповнена в редакторі ChemOffice



**Рис. 2. 2-D Формула хелату метал-ЕДТА**

Ще один програмний продукт, який дозволяє створювати просторові моделі полімерів – це PyMol (<http://www.pymol.org/>).



**Рис. 3. Модель комплексу, утвореного ЕДТА з йоном  $\text{Cu}^{2+}$**

Цей продукт використовується для побудови і візуалізації 3-D моделей хімічних сполук. Розповсюджується безкоштовно.

Ще одна серія програмних продуктів, які полегшують вивчення будь-яких наук, в том числі і хімію, це XMind та її аналоги. Ці програми допомагають створювати інтелект-карти та діаграми, провидити «мозкові штурми» на заняттях (рис. 4). Більшість з них сумісна з пакетом програм Microsoft Office. Такі програми дозволяють створювати схеми класифікацій, особливо в випадках коли є види, підвиди тощо.

Одним із найбільш розповсюджених програмних продуктів в усьому світі є пакет програм Microsoft Office. Ці програми дозволяють набирати тексти, створювати таблиці, графіки, діаграми, бази даних та презентації. Презентації – це набір слайдів, де є текст, графічні об'єкти, рисунки. Служать для зацікавлення слухачів ілюстраціями й ефектами під час доповіді, для рекламування послуг, продукції. Для створення і демонстрації презентацій призначена програма MS Power Point, яка є складовою частиною пакету MS Office.

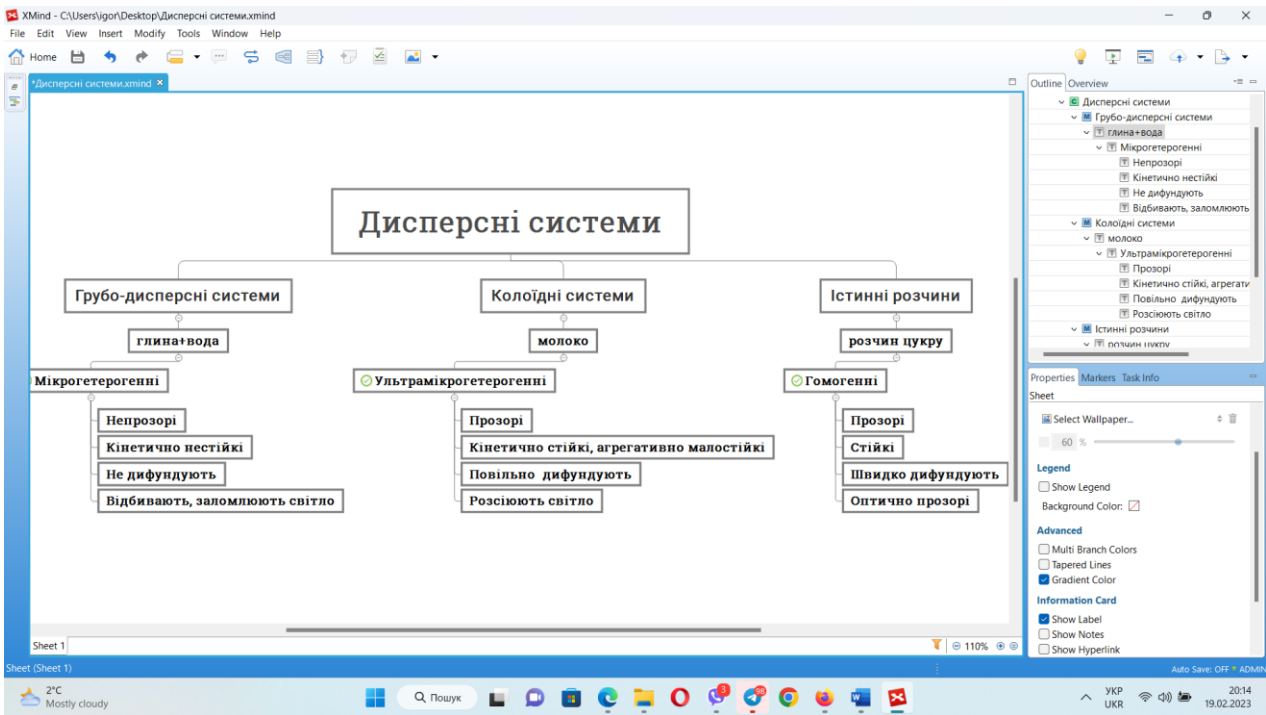


Рис. 4. Класифікація дисперсних систем, виконана в програмі XMind

Презентації роблять лекції та доповіді більш доступними, що особливо важливо при дистанційному навчанні (рис. 5) [5].

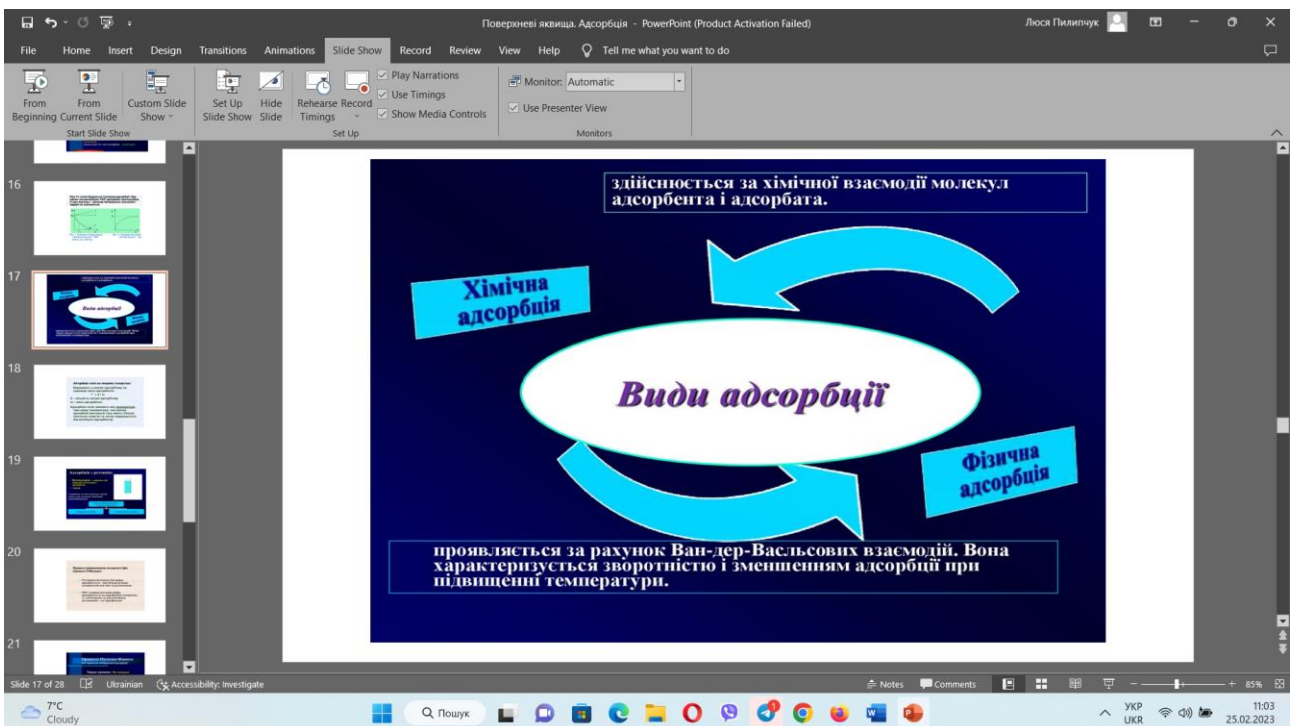


Рис. 5. Презентація в програмі MS Power Point

Зараз навчання, як в Україні, так і у всьому світі, часто відбувається в дистанційному режимі. Тому програми, які дозволяють проводити контроль результатів дуже важливі. Таких програм багато, одними з тих, найчастіше використовують є Google Classroom та Moodle. У наш час ці програми офіційно використовують багато університетів та шкіл. Ці програми дозволяють проводити опитування, як в тестовій, так і в вигляді відкритих питань, коли потрібно студенту написати, що він знає по цьому питанню.

В Херсонському державному університеті давно використовують систему Moodle. На основі створена система KSU online. Викладачі та студенти можуть використовувати цю систему як для обміну навчальними матеріалами, так і для контролю якості навчання (рис. 6).

**Рис. 6. Фрагмент тесту для контролю знань в системі KSU online (Moodle)**

Використання інформаційних технологій при вивченні колоїдної хімії дозволяє вирішувати ряд дидактичних завдань:



1. Вивчення явищ та процесів у мікро- та макросвіті з використанням засобів 2D- та 3D-графіки та комп'ютерного моделювання різних хімічних та фізико-хімічних процесів;

2. Вивчення у зручному вигляді перебігу різних хімічних та фізичних процесів [6].

**Висновки.** Використання інформаційних комп'ютерних технологій в колоїдній хімії тісно пов'язано з розвитком такої міждисциплінарної області, як хімічна інформатика. Розвиток хімічної інформатики розширює способи використання комп'ютерних технологій, методів статистики, методів візуалізації для вирішення навчальних та хімічних задач.

### Список використаних джерел

1. Швачич Г.Г., Толстой В.В., Петречук Л.М., Іващенко Ю.С., Гуляєва О.А., Соболенко О.В. Сучасні інформаційно-комунікаційні технології: Навчальний посібник. Дніпро: НМетАУ, 2017. 230 с.

2. Ничкало Н.Г. Інформаційна культура фахівців в інтердисциплінарних дослідженнях. *Сучасні інформаційні технології та інноваційні методики навчання в підготовці фахівців: методологія, теорія, досвід, проблеми.* 2014.

№ 37.

3. Johann Gasteiger, Kimito Funatsu. Chemoinformatics. An Important Scientific Discipline. *Journal of Computer Chemistry Japan*, July 2006. 5(2): 53-58: DOI:[10.2477/jccj.5.53](https://doi.org/10.2477/jccj.5.53)

4. Chemoinformatics A Textbook, J. Gasteiger, T.Engel, Editors, Wiley-VCH, Weinheim, 2003

5. Пилипчук Л.Л., Волкова С.А., Магдич В.В. Особливості дистанційного вивчення колоїдної хімії. *Сучасний рух науки: тези XI міжнародної науково-практичної інтернет-конференції*, Дніпро, 2020, С.155

[https://scholar.google.com/citations?view\\_op=view\\_citation&hl=en&user=ZwZ8-nwAAAAJ&citation\\_for\\_view=ZwZ8-nwAAAAJ:L8Ckcad2t8MC](https://scholar.google.com/citations?view_op=view_citation&hl=en&user=ZwZ8-nwAAAAJ&citation_for_view=ZwZ8-nwAAAAJ:L8Ckcad2t8MC) (дата звернення: 10.02.2023).

6. Ракша О. В. Інформаційні технології у фізичній хімії: навчально-методичний посібник. О. В. Ракша. Донецьк: ДонНУ, 2013. 98 с.