

ОПЫТ ПРЕПОДАВАНИЯ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ СТУДЕНТОВ ХИМИЧЕСКОГО НАПРАВЛЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

Научная статья

Газетдинов Р.Р.^{1,*}, Абдулгафарова Г.Х.²¹ORCID : 0000-0002-8731-7363;^{1,2} Башкирский государственный университет, Бирский филиал, Бирск, Российская Федерация

* Корреспондирующий автор (aldrich[at]mail.ru)

Аннотация

Современный подход к высшему образованию, изложенный в федеральных государственных стандартах, требует формирования информационной компетентности. В частности, для уровней бакалавриата и магистратуры по химии – это компетенции, направленные на использование компьютерных технологий при решении профессиональных задач в области химии. В данной статье изложен опыт преподавания специализированного компьютерного программного обеспечения прикладного характера студентам естественнонаучного направления химических профилей высшего образования в Бирском филиале Башкирского государственного университета. Рассматриваются подходы к обучению в программных пакетах, используемых для 2D и 3D визуализации химических структур и их графической обработки; расчетов различных параметров и характеристик атомов, молекул и более крупных агрегаций; квантовохимических расчетов и обработки спектральных данных (ИК, УФ, ЯМР, хроматомасс); изучения свойств веществ и химических процессов; оценки биологической активности веществ; поиска химической информации в базах данных и в Интернете. Рассмотрены проблемы и затруднения, возникающие у студентов и преподавателей с учетом современных социально-экономических условий и геополитической ситуации. Предложены пути их решения, апробированные на кафедре биологии, экологии и химии Бирского филиала БашГУ.

Ключевые слова: компьютерные технологии, прикладное программное обеспечение, высшее образование, химия, ACDLabs, HyperChem, ChemWindow.

EXPERIENCE IN TEACHING SPECIALIZED COMPUTER TECHNOLOGY TO STUDENTS OF HIGHER EDUCATION IN THE FIELD OF CHEMISTRY

Research article

Gazetdinov R.R.^{1,*}, Abdulgafarova G.K.²¹ORCID : 0000-0002-8731-7363;^{1,2} Bashkir State University, Birk Branch, Birk, Russian Federation

* Corresponding author (aldrich[at]mail.ru)

Abstract

The modern approach to higher education, as stated in the federal state standards, requires the formation of informational competence. In particular, for Bachelor's and Master's degree levels in chemistry, these are the competences aimed at using computer technologies for solving professional tasks in the field of chemistry. This article describes the experience of teaching specialized computer software of applied nature to students of natural sciences in chemical majors of higher education at Birk branch of Bashkir State University. The approaches to teaching in software packages used for 2D and 3D visualization of chemical structures and their graphic processing; calculations of various parameters and characteristics of atoms, molecules and larger aggregations; quantum-chemical calculations and processing of spectral data (IR, UV, NMR, chromatomass); studying properties of substances and chemical processes; evaluation of biological activity of substances; searching of chemical information in databases and on the Internet are examined. The problems and difficulties encountered by students and teachers in accordance with modern socio-economic conditions and geopolitical situation are considered. Ways of solving them, tested at the Department of Biology, Ecology and Chemistry of Birk branch of Bashkir State University, are proposed.

Keywords: computer technologies, application software, higher education, chemistry, ACDLabs, HyperChem, ChemWindow.

Введение

Реализация современного высшего образования в России осуществляется согласно федеральным государственным образовательным стандартам (далее ФГОС), в которых утверждены «совокупность обязательных требований при реализации основных профессиональных образовательных программ высшего образования - программ бакалавриата по соответствующим направлениям подготовки». Согласно уровневой подготовки кадров с высшим образованием, аналогичные требования предъявляются и при реализации программ магистратуры.

Реализация программ бакалавриата по направлению подготовки 04.03.01 Химия, а также программ магистратуры по направлению подготовки 04.04.01 Химия, предполагает формирование определенного набора компетенций выпускника для выполнения профессиональной деятельности в установленных ФГОС областях и сферах. И следует отметить, что как универсальные, так и общепрофессиональные компетенции (а также и профессиональные компетенции, определяемые вузами самостоятельно) требуют формирования компетенций, использующих в

дальнейшем компьютерные технологии в соответствующих областях и сферах профессиональной деятельности (химии). В частности, к таковым относятся требования к сформированности следующих компетенций:

УК-1. Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.

ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.

ОПК-4. Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач.

ОПК-5. Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности [1], [2].

Для успешного освоения программы обучения и формирования компетенций, связанных с компьютерной грамотностью при решении задач профессиональной деятельности, обучающемуся необходимо успешно освоить такие дисциплины учебного плана, как «Информатика», «Современные информационно-коммуникационные технологии», «Компьютерные технологии в химии», «Квантовая химия». В зависимости от выбранного профиля учебного плана, составленного в отдельно взятом учебном заведении, реализующем программы бакалавриата и магистратуры, набор дисциплин может быть достаточно широкий.

Основные результаты

В Бирском филиале Башкирского государственного университета согласно утвержденным учебным планам направления 04.03.01 Химия, профили: Органическая и биоорганическая химия, Нефтехимия и химическая технология, формирование компетенций по компьютерной грамотности и использованию вычислительной техники в химии происходит в рамках освоения дисциплины «Компьютерные технологии в химии». Здесь подразумевается именно «химическая» направленность использования компьютерных технологий. Учебно-методическое сопровождение данной дисциплины разработано по модульно-блочной технологии и предполагает изучение двух модулей:

Модуль 1. Изучение дисциплины необходимо начать с повторения и закрепления общих вопросов состояния развития современной компьютерной техники и телекоммуникаций; архитектуры современного компьютера, его устройство и основные компоненты; информационные технологии, их структуру и классификацию; сети и сетевые информационные технологии; Интернет; программное обеспечение компьютерных технологий и т.д.

Модуль 2. После освоения первого модуля происходит изучение специализированного материала дисциплины, куда относятся: использование компьютера в современной химической лаборатории; создание и представление химических формул в 2D и 3D; компьютерное моделирование в химии; методы и средства обработки экспериментальных данных в химии; программные средства для квантово-химических расчетов; компьютерные технологии изучения свойств веществ и химических процессов; программные продукты и базы данных по химии; поиск химической информации в Интернете и т.д.

В преподавании дисциплины, также, как и при освоении её студентами, наибольшие затруднения возникают именно со вторым модулем. Проблемы и затруднения условно можно разделить на две основные составляющие:

1. Доступность программного обеспечения, используемого в химии и в химических лабораториях. Большая часть такого программного обеспечения является коммерчески распространяемым и достаточно дорогостоящим, что накладывает серьезные ограничения при приобретении как для персонального пользования, так и для учебных целей. Во многих вузах отмечается недостаточное финансирование для разового и ежегодного приобретения лицензий на программные пакеты специализированного направления.

Данная проблема частично решается приобретением для учебного использования демонстрационных версий программ, а также ряд разработчиков предоставляют учебные версии программного обеспечения для образовательных учреждений. Также не исключается возможность использования бесплатно и условно-бесплатно распространяемых программ. Естественно перечисленные варианты программ имеют ряд ограничений по функционалу, области применений и иные недостатки. Однако, при условии ознакомления обучающихся с перечисленными нюансами, такие версии программ допустимы для использования в учебных целях.

2. Методические затруднения в преподавании дисциплины со стороны преподавателя и сложности в усвоении материала дисциплины студентами. Программное обеспечение компьютерных технологий в химии является весьма узкоспециализированным, часть программ имеют специфический интерфейс и особенности использования, требуют достаточно глубоких знаний, как в химии, так и в информатике и математике. Ряд программ не имеют локализации на другие языки.

При изучении специализированных «химических» программ мы используем ряд методических приемов, позволяющих, на наш взгляд, улучшить усвоение студентами материала и облегчить труд преподавателя без потери качества.

Например, при изучении программных пакетов BioRadLabs (программы ChemWindow, SymApps), ACDLabs (программы ChemSketch, ChemBasic, ChemFolder и другие) для освоения навыков рисования химических структур и написания уравнений реакций используются опубликованные труды наших коллег, в частности, обзорные монографии по органической химии. Такой подход позволяет экономить время и ресурсы при подготовке заданий для группового и индивидуального выполнения, также расширяет знания студентов в специфических областях химии, реализует межпредметные связи химии с биологией, физикой и другими науками. Основной набор заданий для выполнения студентами при изучении программ включает в себя: освоение основных интерфейсных элементов; изучение функциональных возможностей и особенностей; настройку панелей и контрольных элементов; визуализацию химических структур в 2D и 3D; написание уравнений химических реакций; освоение особенностей отображения и

представления химической информации. Углубленное изучение или дополнительный набор заданий может включать в себя изучение подпрограмм SymApps пакета BioRadLabs, предназначенную для 3D визуализации молекул; подпрограмм Name, 3D Viewer, ChemFolder, CNMR, HNMR и т.д. В любом случае необходимо включать в задания упражнения по отработке навыков наименований молекул по IUPAC, по структурной визуализации молекул, обработке спектров ЯМР ^{13}C и ^1H .

Пакет BioRadLabs (программа ChemWindow) используется свободно распространяемой версии, а пакет ACDLabs (программа ChemCketch) – обучающая демоверсия с ограниченными возможностями. Оба программных пакета доступны для скачивания с официальных сайтов разработчиков [3], [4], [5].

Для обучения квантовохимическим расчетам используются программы GAMESS и HyperChem, которые обладают мощным набором инструментов для теоретических исследований в химии и сопоставления данных с экспериментом. [6], [7]

Программа GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System), предназначенная для расчетов атомных и молекулярных структур, приобретена с бесплатной лицензией для академических пользователей через официальных разработчиков. Для обучающих целей используются неплохой набор учебных и демонстрационных материалов доступных на сайте разработчика. Примеры заданий, представленные в виде файлов PDF, позволяют произвести расчеты для молекул аммиака и глицина, что достаточно для ознакомления с программой.

Практические задания, разработанные нами, позволяют изучать следующие возможности программы GAMESS: возможность расчета молекулярных волновых функций методом самосогласованного поля в различных приближениях; учет энергии электронной корреляции на основе теории возмущений, конфигурационного взаимодействия, связанных кластеров и функционала плотности; возможность выполнения полуэмпирических расчетов методами MNDO, AM1 и PM3; автоматическая оптимизация геометрии, поиск переходных состояний с использованием аналитических градиентов; решение колебательной задачи – расчет частот валентных колебаний ИК- и спектров комбинационного рассеяния; вычисление молекулярных свойств, таких как дипольный момент, электростатический потенциал, электронная и спиновая плотность, анализ заселенностей по Малликену и Лёвдину; возможность моделирования влияния растворителя.

Программный комплекс HyperChem приобретен с коммерческой лицензией, обладает мощными вычислительными возможностями, дружелюбным графическим интерфейсом и содержит каталог молекулярных фрагментов (что существенно облегчает задание исходной геометрии). Справочные материалы, представленные с самой программой, содержат неплохой набор обучающих примеров и позволяют студенту самостоятельно освоить интерфейс программы и некоторые особенности работы с ней. Программа HyperChem может выполнять расчеты энергии систем и их равновесной геометрии методом молекулярной механики с использованием четырех модельных потенциалов (MM+, AMBER, BIO+ и OPLS), девятью полуэмпирическими квантово-химическими методами (расширенный метод Хюккеля, CNDO, INDO, MINDO3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO/1 и ZINDO/S), или неэмпирическим (*ab initio*) методом квантовой химии в различных базисах. Однако следует отметить, что непосредственные квантовохимические и иные расчеты в программе изучать и проводить не имеет смысла, пока не будет пройдена дисциплина «Квантовая механика и квантовая теория», где рассматриваются теоретические особенности расчетных методов. Для простого пользователя и студента без знаний квантовой теории, такие термины и сокращения как HF/STO-3G, MP4, AM1 и другие, будут бессмысленным набором символов. Также нами используются ряд авторских разработок заданий по квантовохимическому расчету различных свойств органических молекул. Например, задание по теме «Полуэмпирические методы квантовой химии» предполагает следующий порядок работы: построение заданной структуры молекулы; оптимизацию геометрии молекулы методом молекулярной механики; выполнение расчета молекулы полуэмпирическим квантовым методом; интерпретацию результатов расчета. Последний пункт работы включает в себя оформленный студентом отчет в виде файла (pdf или doc), в котором должны содержаться: строение молекулы (общий вид молекулы с нумерацией атомов, длины связей и валентные углы); построение диаграмм энергетических уровней с графическим изображением высших занятых и низших свободных молекулярных орбиталей и указанием вкладов атомных орбиталей в них; определение нуклеофильных и электрофильных свойств; построение распределения электростатического потенциала и визуализацию неподеленных электронных пар; квантово-химическое обоснование моделей резонансных структур.

Одной из современных и востребованных областей использования компьютерных технологий в химии также является расчет и предсказание биологической активности различных химических соединений. Компьютерный скрининг фармакологической и иной активности веществ позволяет экономить огромные временные и финансовые ресурсы при разработке лекарств, пестицидов, биодобавок и т.д. В учебных целях, на наш взгляд, наиболее удобным и перспективным является программный пакет PASS, доступный как в офлайн, так и онлайн режимах. Программа PASSOnline доступна в свободном режиме, обладает дружелюбным интерфейсом и позволяет достаточно быстро провести дескрипторный анализ биологической активности. Содержит встроенный редактор Marvin, позволяющий быстро и качественно вводить необходимые структуры для скрининга [8].

В рамках исследований совместной лаборатории с Уфимским институтом химии РАН студентами Бирского филиала БашГУ были проведены расчеты биологической активности ряда потенциально ценных макрогетероциклов, что также подчеркивает возможности как обучающей, так и научной ценности данного программного ресурса [9], [10].

В преподавании дисциплин, изучающих компьютерные технологии в химии, следует также обратить внимание на возможности программы Excel, входящей в пакет MSOffice. Excel обладает серьезными встроенными функциями для математической и статистической обработки данных, например, результатов измерений в химическом анализе – вычисление погрешностей, отклонений, доверительного интервала и т.д. [11].

Заключение

Таким образом, преподавание дисциплин, содержащих использование компьютерных технологий в химии, позволяет реализовать компетентностный подход при обучении по естественнонаучным направлениям высшего образования, в частности по направлению 04.03.01 Химия.

Конфликт интересов

Не указан.

Рецензия

Все статьи проходят рецензирование. Но рецензент или автор статьи предпочли не публиковать рецензию к этой статье в открытом доступе. Рецензия может быть предоставлена компетентным органам по запросу.

Conflict of Interest

None declared.

Review

All articles are peer-reviewed. But the reviewer or the author of the article chose not to publish a review of this article in the public domain. The review can be provided to the competent authorities upon request.

Список литературы / References

- Ишмуратов Г.Ю. Монотерпеноиды в химии оптически активных феромонов насекомых / Г.Ю. Ишмуратов, М.П. Яковлева, Н.М. Ишмуратова и др. – СПб: Наука, 2012. – 171 с.
- Газетдинов Р.Р. Использование программы MS Excel для статистической обработки данных в преподавании аналитической химии. / Р.Р. Газетдинов, О.В. Газетдинова, И.М. Бляхина // Педагогическая информатика. – 2019. – 3. – с. 31-39.
- Денежкина А.А. Компьютерный прогноз биологической активности производных бетулина в программе Pass. / А.А. Денежкина, Р.Р. Газетдинов // Академическая публицистика. – 2020. – № 5. – с. 35-38.
- Газетдинов Р.Р. Расчет биологической активности азотсодержащих органических соединений в программе PASS. / Р.Р. Газетдинов, Т.В. Семенова // Доклады Башкирского университета. – 2019. – № 4-1. – с. 32-34.
- Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия (с изменениями и дополнениями от: 26 ноября 2020 г., 8 февраля 2021 г.): Приказ Министерства образования и науки РФ от 17 июля 2017 г. N 671. – URL: <https://fgosvo.ru/fgosvo/index/24/4> (дата обращения: 18.08.2022).
- Об утверждении федерального государственного образовательного стандарта высшего образования - магистратура по направлению подготовки 04.04.01 Химия (с изменениями и дополнениями от: 26 ноября 2020 г., 8 февраля 2021 г.): Приказ Министерства образования и науки РФ от 13 июля 2017 г. N 655. – URL: <https://fgosvo.ru/fgosvo/index/25/33> (дата обращения: 18.08.2022).
- ChemWindow Chemical Structure Drawing Software. – URL: <https://sciencesolutions.wiley.com/chemwindow-chemical-structure-drawing-software/> (accessed 08.18.2022).
- ChemSketch Freeware. – URL: <https://www.acdlabs.com/resources/free-chemistry-software-apps/chemsketch-freeware/> (accessed 08.18.2022).
- The General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) is a general ab initio quantum chemistry package. – URL: <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/download.html> (accessed 08.18.2022).
- Hypercube Products. – URL: <http://www.hypercubeusa.com/Products/tabid/354/Default.aspx> (accessed 08.18.2022).
- Predictive services PASS online. – URL: <http://www.pharmaexpert.ru/PASSOnline/index.php> (accessed 18.08.2022).

Список литературы на английском языке / References in English

- Ishmuratov G.Yu. Monoterpenoidy' v khimii opticheski aktivny'x feromonov nasekomy'x [Monoterpenoids in the chemistry of optically active insect pheromones] / G.Yu. Ishmuratov, M.P. Yakovleva, N.M. Ishmuratova et al. – SPb: Nauka, 2012. – 171 p. [in Russian]
- Gazetdinov R.R. Ispol'zovanie programmy' MS Excel dlya statisticheskoy obrabotki danny'x v prepodavanii analiticheskoy khimii [Using MS Excel for Statistical Data Processing in Teaching Analytical Chemistry]. / R.R. Gazetdinov, O.V. Gazetdinova, I.M. Blyaxina // Pedagogicheskaya informatika [Pedagogical informatics]. – 2019. – 3. – p. 31-39. [in Russian]
- Denezhkina A.A. Komp'yuterny'j prognoz biologicheskoy aktivnosti proizvodny'x betulina v programme Pass [Computer prediction of the biological activity of betulin derivatives in the Pass program]. / A.A. Denezhkina, R.R. Gazetdinov // Akademicheskaya publicistika [Academic journalism]. – 2020. – № 5. – p. 35-38. [in Russian]
- Gazetdinov R.R. Raschet biologicheskoy aktivnosti azotsoderzhashhix organicheskix soedinenij v programme PASS [Calculation of the biological activity of nitrogen-containing organic compounds in the PASS program]. / R.R. Gazetdinov, T.V. Semenova // Doklady' Bashkirskogo universiteta [Reports of the Bashkir University]. – 2019. – № 4-1. – p. 32-34. [in Russian]
- Ob utverzhdenii federal'nogo gosudarstvennogo obrazovatel'nogo standarta vysshego obrazovaniya - bakalavriat po napravleniju podgotovki 04.03.01 Himiya (s izmeneniyami i dopolneniyami ot: 26 nojabrja 2020 g., 8 fevralja 2021 g.) [On approval of the federal state educational standard of higher education - bachelor's degree in the field of study 04.03.01 Chemistry" (as amended and supplemented by: November 26, 2020, February 8, 2021)] : Order of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation of July 17, 2017 N 671. – URL: <https://fgosvo.ru/fgosvo/index/24/4> (accessed: 08.18.2022).
- Ob utverzhdenii federal'nogo gosudarstvennogo obrazovatel'nogo standarta vysshego obrazovaniya - magistratura po napravleniju podgotovki 04.04.01 Himiya (s izmeneniyami i dopolneniyami ot: 26 nojabrja 2020 g., 8 fevralja 2021 g.) [On approval of the federal state educational standard of higher education - master's degree in the direction of preparation 04.04.01

Chemistry" (as amended and supplemented by: November 26, 2020, February 8, 2021)] : Order of the Ministry of Education and Science of the Russian Federation of July 13, 2017 N 655. – URL: <https://fgosvo.ru/fgosvo/index/25/33> (accessed: 18.08.2022).

7. ChemWindow Chemical Structure Drawing Software. – URL: <https://sciencesolutions.wiley.com/chemwindow-chemical-structure-drawing-software/> (accessed 08.18.2022).

8. ChemSketch Freeware. – URL: <https://www.acdlabs.com/resources/free-chemistry-software-apps/chemsketch-freeware/> (accessed 08.18.2022).

9. The General Atomic and Molecular Electronic Structure System (GAMESS) is a general ab initio quantum chemistry package. – URL: <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/download.html> (accessed 08.18.2022).

10. Hypercube Products. – URL: <http://www.hypercubeusa.com/Products/tabid/354/Default.aspx> (accessed 08.18.2022).

11. Predictive services PASS online. – URL: <http://www.pharmaexpert.ru/PASSOnline/index.php> (accessed 18.08.2022).