

індивідуальних завдань та дотримання термінів виконання роботи, оперативно реагувати на коментарі, пропозиції, зауваження та приймати самостійні рішення, розв'язувати поточні проблеми.

Метод канбан крім навичок ефективної взаємодії сприяє формуванню навичок тайм-менеджменту, самодисципліни та самоконтролю, уміння вчитися та здобувати знання.

Організовувати проєктну діяльність з хімії за технологію канбан можна з використанням цифрових інструментів: Trello, Asana, Basecamp. Головна перевага застосування цифрових інструментів полягає в можливості працювати виконавцям проєкту над продуктом онлайн в будь-який момент часу з будь-якого місця.

Таким чином, ключовими особливостями організації гнучкої системи взаємодії виконавців проєкту під час змішаного та дистанційного навчання за технологію канбан є: командна робота дистанційно в режимі реального часу, рівномірний розподіл обов'язків, візуалізація роботи, відстеження прогресу, систематичний зворотній зв'язок, дотримання термінів виконання завдань, вчасне реагування на пропозиції та зміни в роботі, документообіг, зберігання даних, об'єктивність оцінювання індивідуальної роботи кожного учасника та ін. Виконання проєктів з хімії за методологією канбан сприяє системності, візуалізації, регламентованості організації проєктної діяльності здобувачів освіти.

Список використаної літератури

1. Вороненко, Т. Використання міні-проєктів на уроках хімії [Текст] / Т. Вороненко // Біологія і хімія в рідній школі. – 2018. – № 4, 5. – С. 12-19.
2. Загнибіда Н. М. Метод проєктів на уроках хімії [Текст] / Наталія Михайлівна Загнибіда. – Тернопіль; Х. : Ранок, 2011. – 128 с.
3. Криворучко А. В., Шиян Н. І Хмарні сервіси в проєктній діяльності з хімії здобувачів освіти // Міжнародна науково-практична конференція «Методика навчання природничих дисциплін у середній та вищій школі : XXX Каришинські читання», 26–27 травня 2023 р., м. Полтава, 2023. – С. 12-14.
4. Криворучко А.В., Крайко О.О. Інструменти едьютейнменту в хімічній освіті / А.В. Криворучко, О.О Крайко // III Міжнародна науково-практична конференція «Природнича наука й освіта: сучасний стан і перспективи розвитку», (22-23 вересня 2022 р.), збірник тез. – Х. : ХНПУ імені Г. С. Сковороди, 2022. – С. 156 – 159.
5. Момот Ю.В. Проєктна технологія організації навчання хімії: методичний посібник /
6. Шиян Н. І., Криворучко А.В. Зміст і структура учнівського портфолію з хімії / Н. І. Шиян, А. В. Криворучко / Методика навчання природничих дисциплін у середній та вищій школі : XXVII Каришинські читання : міжнар. наук.-практ. конф., м. Полтава 28–29 травня 2020 р. : зб. наук. праць – Полтава : Астрія, 2020. С. 105–109.

ВИКОРИСТАННЯ МЕТОДУ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА КВАНТОВО-ХІМІЧНИХ РОЗРАХУНКІВ ПІД ЧАС ВИВЧЕННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ У ХІМІЇ

Куленко О. А.

Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

Структурний (з лат. structura – пристрій, будова) підхід заснований на розгляді речовин як системи частинок – елементів системи – та її опис через встановлення структури

системи, тобто мережі зв'язків чи взаємозв'язків між її елементами. Згідно цього підходу передбачається, що властивості об'єкта-системи обумовлені як складовими її елементами, так і взаємодіями цих елементів між собою. За допомогою структурного підходу розкриваються причини властивостей об'єктів та їх зміни. Його суттєвою рисою є використання моделей. До прикладу, при структурному підході кристали характеризуються тривимірним симетричним періодичним розміщенням у просторі складових їх атомних частинок або атомних угруповань. Для зображення цієї особливості внутрішнього простору кристалів використовуються різні моделі: хімічні формули, кристалічні ґрати, щільні упаковки та інші структурні одиниці.

Під комп'ютерним моделюванням розуміють побудову та вивчення штучно створеного об'єкта (матеріально реалізованого або подумки представленого), який називають моделлю і який деяким способом відображає або відтворює реальний об'єкт (оригінал), але у спрощеній та зручній для дослідника формі шляхом абстрагування від приватних, несуттєвих в аспекті дослідження сторін об'єкта, що проводиться.

Моделювання як пізнавальний процес здійснюється з метою розширення знань про оригінальний об'єкт, конструювання оригіналу, перетворення або управління ним. Моделювання – це опосередкований шлях вивчення об'єкта, до якого вдаються тоді, коли предмет дослідження недоступний безпосередньому вивченню або з якихось причин таке вивчення є незручним для дослідника. Моделювання при вивченні структури хімічних речовин здійснюється через нескінченну складність і невичерпність всього різноманіття елементів структури та їх взаємодій між собою.

Модель не є і не має бути буквальним описом дійсності. У ній з'єднується абстрактне, як результат ідеалізації, спрощення та відволікання від несуттєвих сторін об'єкта, що моделюється, і конкретне, як збережені залишки чуттєвого конкретного образу об'єкта. Завдяки тому, що модель відмінна від оригіналу, і створюється можливість виділяти певні суттєві зв'язки та взаємодії, відволікаючись від другорядних, більш легко та доступно видозмінювати умови, тобто вчиняти з моделлю так, як не можна було діяти з оригіналом. При цьому численні властивості, зв'язки та взаємодії об'єкта зводяться до обмеженого числа найважливіших для вирішення певного завдання. Модель, що отримується у результаті такої ідеалізації, відображає реальний об'єкт лише в межах тих абстракцій, понять, які використовуються для її побудови. Для вивчення інших особливостей, властивостей та взаємодій необхідні інші моделі. Лише система взаємодоповнюючих одна одну моделей може дати відносно повне знання про складний об'єкт моделювання. Це своєрідний вияв принципу додатковості, коли кожна наступна модель є доповненням до попередньої, розширюючи аспекти опису реального об'єкта.

Наприклад, записуючи молекулярну хімічну формулу молочної кислоти, ми моделюємо її якісний та кількісний склад: $C_3H_6O_3$. Представляючи її хімічну будову у вигляді структурної формули, ми моделюємо вже не лише склад речовини, а й порядок розташування атомів у молекулі $CH_3CH(OH)COOH$. Моделюючи розташування атомів у просторі відносно один одного, ми отримуємо стехіометричну формулу. А представляючи проекцію атомів та зв'язків між ними на площині ми отримаємо дисплейну формулу.

Для інтерпретації характеру хімічного зв'язку між атомами у зазначеній молекулі ми використовуємо модель ковалентного хімічного зв'язку, а для пояснення просторового розташування атомів – модель, засновану або на концепції гібридизації атомних орбіталей, або на теорії Галлеспі (модель відштовхування електронних пар валентної оболонки атомів).

Як бачимо, кожна з цих моделей відображає лише один або обмежену кількість фрагментів реальної структури речовини. Тільки їхня нескінченна сукупність зможе претендувати на повноту опису об'єкта. Комп'ютерне моделювання – один із ефективних способів подолання протиріччя між нескінченною складністю реального світу та обмеженими наразі можливостями його пізнання.

За способом репрезентації (відтворення) реального об'єкта моделі можна класифікувати на матеріальні та уявні. Матеріальні моделі постійно створюються у хімічних дослідженнях, де вивчаються процеси вирощування кристалів, синтезу речовин, подібно до процесів, що протікають у природі. У будь-якому науковому дослідженні властивостей речовини речовина «виринається» зі своїх природних зв'язків і поміщається в штучно створені умови, в яких суворо фіксується вплив температури, тиску, складу та інших параметрів середовища. До матеріальних моделей у хімії можна віднести лабораторні способи одержання речовин, які є першими моделями промислових технологій.

Уявні моделі конструюються в ідеальній формі, зафіксованій за допомогою мови, знакових засобів, креслень, формул, малюнків тощо. До них відносять образні (або іконічні) та знакові (або символічні) моделі. Прикладами образних моделей є планетарна модель атома, модель електронної хмари, шарострижні моделі молекул, модель ідеального газу, модель електролітичної дисоціації, кристалічні ґратки тощо. До знакових моделей належать символи хімічних елементів, хімічні формули речовин, рівняння хімічних реакцій.

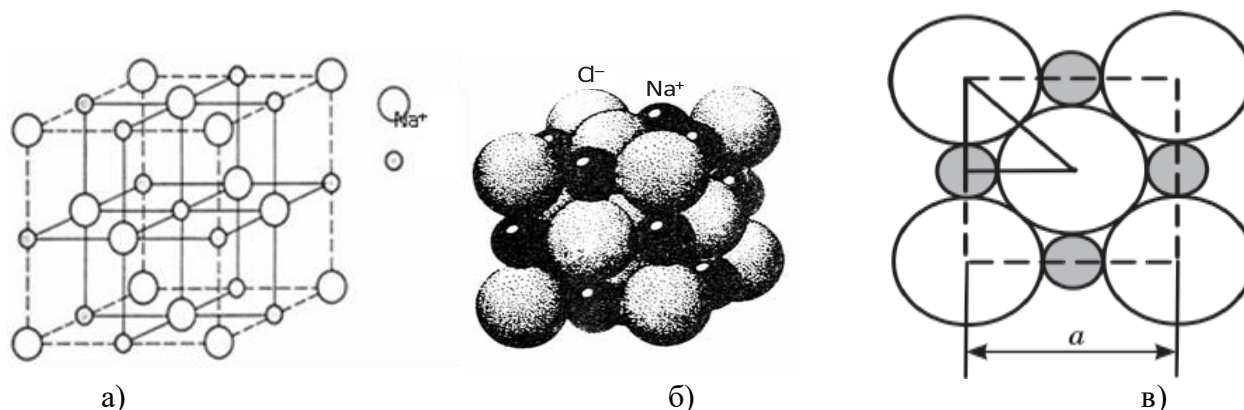
Розглянемо особливості опису кристалічного стану речовини. Однорідність кристала – особливість кристалічного тіла бути однаковим у всьому обсязі. Абсолютної однорідності у реальних кристалах не буває через дефектність їхньої структури. Здатність самообмежуватися – одна із властивостей кристалів набувати багатогранної форми за певних умов їх зростання. Усі зазначені властивості кристалів у межах структурного підходу пояснюються їхньою внутрішньою будовою: тривимірним упорядкованим, періодичним і симетричним розміщенням у просторі складових речовин атомних частинок або атомних угруповань. Таке розташування реальних частинок утворює кристалічну структуру речовини. Для опису цієї структури використовують різні комп'ютерні моделі.

Перша відома як геометрична модель – кристалічна або просторова решітка. Ґрати зображують у вигляді системи ідентичних точок – вузлів решітки, – кожен з яких можна отримати з одного якогось вузла шляхом певних геометричних перетворень. Найменший поліедр кристалічної решітки, що повторюється, називають елементарним осередком. Існує загалом 14 типів елементарних осередків, що мають якісний та кількісний вираз, кристалічні речовини характеризуються природною формою багатогранників, анізотропією, однорідністю, здатністю самообмежуватися.

Кожній кристалічній речовині властива своя кристалічна структура. Вона вивчається за допомогою дифракційних методів та спектроскопії (обчислення міжатомних відстаней та валентних кутів у реальній кристалічній структурі, визначення типу симетрії розміщення у просторі її структурних елементів). На основі цих даних можна моделювати у вигляді кристалічних ґрат структуру кристала. Тому, зображуючи ґрати кристала, створюють не структуру кристала, а модель структури. Розглянемо конкретний приклад розв'язання задачі щодо визначення формули мінералів [3].

Завдання 1. Визначити стехіометричну формулу галіту (хлориду натрію) з розгляду структури його елементарного складу.

Рішення. Елементарний осередок галіту є кубічним гранецентрованим, який можна описати термінами щільної упаковки. У ній йони хлору (радіус 0,181 нм) займають положення куль кубічної щільної упаковки, а йони натрію (радіус 0,102 нм) –октаедричних порожнин цієї упаковки.



Мал. 3. Моделі кристалічної структури NaCl у вигляді елементарного складу (а), кубічної щільної упаковки (б) та проекція її граней (в).

Результати обчислень числа йонів, що припадають на один елементарний осередок галіту представлені в таблиці 1. При цьому звернемо увагу, що елементарний осередок – це лише мінімальний об'єм кристалічної решітки, яка виходить нескінченним повторенням у трьох вимірах елементарного осередку. Тому кожен елементарний осередок решітки є початком і продовженням інших сусідніх осередків. Таким чином, в одному елементарному осередку галіту 4 позиції зайнято йонами натрію і 4 позиції – йонами хлору. Тому можна записати стехіометричну формулу галіту як Na_4Cl_4 або в скороченому вигляді NaCl. Зауважимо, що остання формула передає лише стехіометричне співвідношення між числом йонів натрію та числом йонів хлору у кристалічній структурі галіту.

Таблиця 1.

Положення позицій числа йонів галіту.

Положення позиції	Число позицій для Na^+	Число позицій для Cl^-
Центр комірки (належить 1 комірці).	1	0
Центр грані (належить 2 коміркам), число граней – 6.	0	$(6 \cdot 1/2) = 3$
Ребро (належить 4 коміркам), число ребер – 12.	$(12 \cdot 1/4) = 3$	0
Вершина (належить 8 коміркам), число вершин – 8.	0	$(8 \cdot 1/8) = 1$
	4	4

Всього зайнято позицій в комірці.		
--------------------------------------	--	--

Таким чином, ми бачимо, що для повного отримання конкретних знань про об'єкт, потрібна побудова деякої системи описів об'єкта через різні моделі, кожна з яких охоплює лише певні аспекти досліджуваних властивостей кристалічної структури та доповнює інші. Ступінь відповідності моделі оригіналу може бути різною. Так, модель «кристалічні ґратки» передає лише закономірне тривимірне розташування структурних елементів кристала у вигляді системи точок. Модель «найбільша упаковка» додатково враховує розміри структурних елементів, їх контакти один з одним, наявність та розміри пустот у структурі кристалів. Модель «тепловий еліпсоїд» відображає середньоквадратичні зміщення атомів у кристалічній структурі в результаті коливань. Модель «карта електронної густини» демонструє розподіл електронної густини у кристалічному просторі. Знакова (або символічна) модель мінералу галіту, записана у вигляді NaCl, відображає лише той факт, що в кристалічній структурі цього мінералу на один атом натрію припадає один атом хлору.

У квантовій механіці говорять про відсутність чітких меж між атомами, але в кристалохімічних розрахунках ефективно використовують уявлення про атомні радіуси. Існування протилежних моделей пояснюється тим, що кожна з них добре працює у певній галузі і немає підстав поширювати її на інші області, де потрібні зовсім інші моделі. Вибір комп'ютерної моделі для конкретного випадку обумовлений розв'язуваними завданнями, вибором дослідника та перевагами моделі. У сучасній квантовій хімії існують різні моделі, що іноді слабо узгоджуються, а іноді й суперечать одна одній. Структурні моделі, за звичай, створюються на основі різноманітних аналогій та експериментальних даних.

Список використаної літератури

1. Винник О.Ф. Застосування програмного засобу ACD/ChemSketch (Freeware) 12.0 для написання хімічних формул та моделювання хімічних процесів. Навчальний посібник. / О.Ф. Винник, О.М. Свєчнікова, Т.Я. Грановська. – Харків, 2018. – 92с.
2. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: стислий конспект лекцій для студентів спеціальності 102 «Хімія» денної форми навчання / уклад. С. О. Коновалова. – Краматорськ : ДДМА, 2020. – 80 с.
3. Комп'ютерні та інформаційні технології в хімії: методичні вказівки до лабораторних робіт та самостійної роботи для студентів спеціальності 102 «Хімія» денної форми навчання / уклад. С. О. Коновалова. – Краматорськ : ДДМА, 2020. – 80 с.

ФОРМУВАННЯ ЕКОЛОГІЧНОЇ КОМПЕТЕНТНОСТІ СТАРШОКЛАСНИКІВ У ПРОЦЕСІ ВИВЧЕННЯ ХІМІЇ

Лещенко Л. В.

Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

З кожним роком все гострішим стає питання глобальної екологічної кризи. Екологічні проблеми, такі як стан навколишнього середовища, скорочення біорозмаїття видів рослинного та тваринного світу займають основне місце серед глобальних проблем, що стоять перед сучасним людством. Проте на фоні потрясінь останніх років, що охопили