

МОЛЕКУЛЯРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА СИМУЛЯЦІЇ ПІД ЧАС ВИВЧЕННЯ ХІМІЇ
У ЗАКЛАДАХ ЗАГАЛЬНОЇ СЕРЕДНЬОЇ ОСВІТИ*Яцько А. О.¹, Шпирка З. М.²*¹Середня загальноосвітня школа № 97, Львів, Україна²Львівський національний університет імені Івана Франка, Львів, Україна
alinalinonka@gmail.com

“Справжнє знання приходить через розуміння сутності речей, а не лише через їх спостереження. Лише занурюючись у глибину явищ, моделюючи та відтворюючи їх у думках, ми можемо досягнути істинну природу світу.”

Галілео Галілей

Сучасні тенденції в освіті спрямовані на інтеграцію інноваційних технологій у навчальний процес. Використання молекулярного моделювання та симуляцій відкриває нові можливості для формування у здобувачів середньої освіти базових знань, розвитку критичного та аналітичного мислення та підвищення інтересу до предмета.

Молекулярне моделювання (від англ. *molecular modelling*) – сукупність методів комп’ютерної графічної візуалізації наукової інформації та представлення геометрії молекул у тривимірному чи двовимірному просторі. Симуляція – математична модель, яка відтворює фізико-хімічні процеси у реальному часі, дозволяючи прогнозувати результати експерименту. Використання цих технологій дозволяє учням/ученицям краще розуміти структуру речовин, суть хімічного зв’язку та механізми хімічних реакцій, що є важливими аспектами під час вивчення хімії. Основні напрямки молекулярного моделювання: *структурне моделювання, динамічні симуляції, квантово-хімічні розрахунки*. На сьогодні існує багато програмних засобів, які дозволяють використовувати молекулярне моделювання та симуляції в освітніх цілях. PhET Interactive Simulations (<https://phet.colorado.edu/>) – безкоштовні онлайн-симуляції для моделювання молекул та хімічних реакцій. Avogadro (<https://avogadro.cc>) – інструмент для 3D-візуалізації молекул. ChemSketch (<https://www.acdlabs.com/products/chemsketch/>) – програма для побудови 2D- та 3D-моделей хімічних сполук та аналізу їхньої структури. Molecular Workbench (<https://mw.concord.org/modeler/>) – інтерактивне середовище для симуляцій молекулярних процесів.

Коли учні самостійно працюють з програмним забезпеченням вони можуть досліджувати внутрішню будову речовин, вивчати типи хімічного зв’язку, типи хімічних реакцій та механізми їх перебігу. Завдяки цьому у них формується аналітичне мислення, навички самостійного дослідження та розвивається інтерес до хімії. Інтеграція молекулярного моделювання у навчальний процес відбувається, наприклад, під час проєктної діяльності. Учні можуть моделювати структуру білків, досліджувати механізми реакцій або навіть відтворювати поведінку біомолекул у водному середовищі. Такі завдання сприяють глибшому розумінню предмета та наближають навчальний процес до рівня сучасних наукових досліджень. Молекулярне моделювання та симуляції роблять навчання цікавим, захопливим, доступним і динамічним, залучаючи учнів/учениць до активного пізнання. Завдяки можливості безпечного проведення віртуальних експериментів, можна досліджувати реакції, які складно або небезпечно виконувати у шкільній лабораторії. Крім того, цей метод готує учнів до майбутніх наукових досліджень, знайомлячи їх із сучасними методами аналізу та моделювання, що використовуються у хімічній науці.

Молекулярне моделювання та комп’ютерні симуляції – це інноваційний підхід до хімічної освіти. Вони сприяють розвитку наукового мислення, дозволяють учням краще розуміти складні хімічні процеси та застосовувати отримані знання на практиці.