

## Література

1. Бублик Б.Н., Кириченко Н.Ф. Основы теории управления. Изд.об. «Вища школа», 1975. – 328с.
2. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. – М.: Наука Главная редакция физико-математической литературы, 1980. – 518 с.
3. Галеев Э.М., Тихомиров В.М. Краткий курс теории экстремальных задач. М.: Изд-во Моск. Ун-та, 1989. – 204 с.
4. Жалдак М.І., Триус Ю.В. Основи теорії і методів оптимізації: Навчальний посібник. – Черкаси: Брама-Україна, 2005. – 608 с.
5. Крак Ю.В., Лешош О.Л. Оптимальне керування: Навч.-метод. посібник для студентів фак.-ту кібернетики спеціальності «Інформатика». – К.: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2003. – 106 с.
6. Курицкий Б.Я. Поиск оптимальных решений средствами Excel 7.0 – Спб.: ВHV – Санкт-Петербург, 1997. – 384 с.

**Підгорна Т.В.**

Кандидат педагогічних наук, доцент  
НПУ імені М.П.Драгоманова

### Методика вивчення інформаційних ресурсів Інтернету майбутніми вчителями хімії

Інформаційні ресурси Інтернету – величезне джерело практично будь-яких відомостей. Індексованих веб-сторінок Інтернету існує як мінімум 8.42 мільярда за даними [1] на жовтень 2012 року. Частина цих ресурсів корисна для вчителів хімії. Важко здійснити ефективний пошук потрібних відомостей серед такої великої кількості веб-сторінок.

При ознайомленні майбутніх вчителів хімії з інформаційними ресурсами Інтернету, що стосуються питань з хімії, доцільно розподілити розглядувані ресурси на види за змістом та принципами організації доступу до відомостей. В [3] виділено такі види інформаційних ресурсів для хіміків: універсальні пошукові системи, наукові журнали, електронні публікації, патентні бази даних, довідкові бази даних; в [4] - веб-каталоги, пошукові системи, література з хімії, патенти з хімії, бази даних хімічних сполук, виробники реагентів. Проаналізувавши запропоновані види інформаційних ресурсів Інтернету для хіміків і врахувавши власний практичний досвід, було виокремлено такі види інформаційних ресурсів:

1. Пошукові системи та каталоги загального спрямування (всесвітні ресурси: [www.google.com.ua](http://www.google.com.ua); [www.altavista.com](http://www.altavista.com); [www.excite.com](http://www.excite.com); [www.lycos.com](http://www.lycos.com); [www.yahoo.com](http://www.yahoo.com); [www.hotbot.com](http://www.hotbot.com); [go.com](http://go.com); [www.scopus.com](http://www.scopus.com); російські ресурси: [www.rambler.ru](http://www.rambler.ru); [www.yandex.ua](http://www.yandex.ua); [www.aport.ru](http://www.aport.ru); [www.au.ru](http://www.au.ru); [www.ulitka.ru](http://www.ulitka.ru); українські ресурси: [www.a-counter.com](http://www.a-counter.com); [www.sova.com.ua](http://www.sova.com.ua); [meta.ua](http://meta.ua); [www.uaportal.com](http://www.uaportal.com); [www.ukr.net](http://www.ukr.net)).
2. Пошукові системи і каталоги хімічного спрямування ([www.chemie.de](http://www.chemie.de); [chemdex.org](http://chemdex.org); [www.organicworldwide.net](http://www.organicworldwide.net); [www.netsci.org](http://www.netsci.org); [www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html](http://www.liv.ac.uk/Chemistry/Links/links.html); [www.ch.cam.ac.uk/c2k](http://www.ch.cam.ac.uk/c2k); [www.boc.uu.se/boc14www/www\\_links/Links\\_general.html](http://www.boc.uu.se/boc14www/www_links/Links_general.html); [nmr.ioc.ac.ru/flinks.htm](http://nmr.ioc.ac.ru/flinks.htm); [www.chemweb.com](http://www.chemweb.com); [organicchemistry.org](http://organicchemistry.org); [www.bioua.org.ua/index.php](http://www.bioua.org.ua/index.php); <http://chemexpress.fatal.ru>).
3. Література з хімії ([www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com); [www.pubs.acs.org](http://www.pubs.acs.org); [www.springer.com](http://www.springer.com); [onlinelibrary.wiley.com](http://onlinelibrary.wiley.com); [ukcatalogue.oup.com](http://ukcatalogue.oup.com); [www.mai.rssi.ru](http://www.mai.rssi.ru); [www.bioorganica.org.ua](http://www.bioorganica.org.ua); [www.biopolymers.org.ua](http://www.biopolymers.org.ua); [nbuv.gov.ua/Portal/Chem-Bio/Ukhj/index.html](http://nbuv.gov.ua/Portal/Chem-Bio/Ukhj/index.html); [ubj.biochemistry.org.ua](http://ubj.biochemistry.org.ua); [www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez](http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/entrez); [www.chemrefer.com](http://www.chemrefer.com); [www.fizchemie.de](http://www.fizchemie.de); [www.biomedcentral.com](http://www.biomedcentral.com); [www.chemistrycentral.com](http://www.chemistrycentral.com); [chemexpress.fatal.ru/Novigator/ejournals.htm](http://chemexpress.fatal.ru/Novigator/ejournals.htm)).
4. Патенти синтезованих речовин ([www.uspto.gov/patft/index.html](http://www.uspto.gov/patft/index.html); [wordwide.espacenet.com](http://wordwide.espacenet.com); [www.wipo.int/pctdb/en](http://www.wipo.int/pctdb/en); [www.ipo.gov.uk/patent.htm](http://www.ipo.gov.uk/patent.htm); [depatisnet.dpma.de](http://depatisnet.dpma.de); [www.delphion.com](http://www.delphion.com); [thomsonreuters.com/training/derwent](http://thomsonreuters.com/training/derwent); [www.micropat.com](http://www.micropat.com); [www.solip.gov.ua/ua/nagorWIPO.html](http://www.solip.gov.ua/ua/nagorWIPO.html)).
5. Бази даних відомостей про речовини ([www.chemfinder.camsoft.com](http://www.chemfinder.camsoft.com); [webbook.nist.gov/chemistry](http://webbook.nist.gov/chemistry); [chembank.broad.harvard.edu](http://chembank.broad.harvard.edu); [www.ebi.ac.uk/chebi](http://www.ebi.ac.uk/chebi); [pubchem.ncbi.nlm.nih.gov](http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov); [www.chemspider.com](http://www.chemspider.com); [www.emolecules.com](http://www.emolecules.com); [www.chemspy.com/index.html](http://www.chemspy.com/index.html); [www.chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus](http://www.chem.sis.nlm.nih.gov/chemidplus); [www.orgsyn.org](http://www.orgsyn.org); [www.aist.go.jp/riohomee.html](http://www.aist.go.jp/riohomee.html); [www.chembiogrid.org/related/resources/databases.html](http://www.chembiogrid.org/related/resources/databases.html)).
6. Бази даних спектрів речовин ([www.aist.go.jp](http://www.aist.go.jp); [www.nist.gov](http://www.nist.gov); <http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/>).
7. Сайти фірм виробників реагентів ([www.chemexper.com](http://www.chemexper.com); [www.chemsources.com](http://www.chemsources.com); [www.chem.com](http://www.chem.com); [www.chemnavigator.com](http://www.chemnavigator.com); [www.chemolink.com](http://www.chemolink.com); [www.chemindustry.com](http://www.chemindustry.com); <http://www.labprice.ua/>).

8. Сайти, що присвячені хімії (www.organic-chemistry.org; chemistry.merlot.org; www.indianchemicalportal.com; www.nist.gov/chemistry-portal.cfm; chemistry.com.ua; www.ioch.kiev.ua/ukr/index.htm; chemunion.org.ua; www.chemport.ru; www.xumuk.ru; www.anchem.ru; www.chemweek; chemportal.org.ua).

Для ознайомлення студентів із запропонованими ресурсами і формування навичок ефективного пошуку потрібних відомостей їм пропонуються такі практичні завдання дослідницького характеру:

1. Пошукові системи та каталоги загального та хімічного спрямування:

1. Знайти відповіді на запропоновані питання за допомогою різних пошукових систем загального та хімічного спрямування та за отриманими результатами заповнити таблицю 1.

Таблиця 1

Номер питання	Формулювання запиту	Пошукова система	URL-адреса сайта, на якому знайдено відповідь	Відповідь на питання
---------------	---------------------	------------------	---	----------------------

Запити українською мовою.

1. Що таке сірчана кислота?
2. Як виробляють сірчану кислоту?
3. Які хімічні властивості сірчаної кислоти?
4. Де можна придбати сірчану кислоту для промислового використання?
5. Чи можна використовувати сірчану кислоту в навчальних закладах?
6. Для чого використовується сірчана кислота в промисловості та в господарстві?
7. Що таке сульфати?
8. Як різні сульфати використовують в господарстві?

2. Ввести запропоновані запити в різних пошукових системах загального та хімічного спрямування. Результати пошуку занести до таблиці 2. Проаналізувати отриману таблицю. Зробити висновки.

Таблиця 2

Номер запиту	Пошукова система	Формулювання запиту	Кількість знайдених документів
--------------	------------------	---------------------	--------------------------------

1. Знайти документи, які містять слова *сірчана кислота*.
2. Знайти документи, які містять слова *сірчана кислота*. Текстовий фрагмент, у якому зустрічаються ключові слова, не повинен перевищувати 10 слів.
3. Знайти документи, які містять слова *сірчана кислота*. Текстовий фрагмент, у якому зустрічаються ключові слова, не повинен перевищувати 5 слів.
4. Знайти документи, які містять слова *серная кислота*.
5. Знайти документи, які містять слова *sulfuric acid*.
6. Визначити кількість документів, які буде знайдено за запитом  $H_2SO_4$ .
7. Визначити кількість документів, які буде знайдено за запитом  $h_2so_4$ .
8. Визначити кількість документів, які буде знайдено за запитом " $H_2SO_4$ ".
9. Визначити кількість документів, які буде знайдено за запитом " $h_2so_4$ ".
10. Визначити кількість документів, які буде знайдено за запитом  $O=S(=O)O$ .
11. Визначити кількість документів, які буде знайдено за запитом " $O=S(=O)O$ ".
12. Визначити кількість документів, які буде знайдено за запитом  $1/H_2O_4S/c1-5(2,3)4/h(H_2,1,2,3,4)$ .
13. Визначити кількість документів, які буде знайдено за запитом " $1/H_2O_4S/c1-5(2,3)4/h(H_2,1,2,3,4)$ ".
14. Знайти документи, які містять слова *сірчана кислота* та *сірчана мазь*.
15. Знайти документи, які містять слова *сірчана кислота* або *сірчана мазь*.
16. Знайти документи, які містять слова *сірчана кислота*, але не містять слова *сірчана мазь*.
17. Проаналізувати отримані результати і зробити висновки щодо формування запиту і вибору пошукової системи в залежності від потрібних результатів.

Завдання для самостійного виконання:

1. Знайти документи українською мовою, в яких подано методику вивчення хімічних властивостей речовини, назва якої вказана в індивідуальному варіанті. Зберегти ці документи в текстовому форматі та форматі веб-сторінки на локальному комп'ютері.
2. Для речовини, назва якої вказана в індивідуальному варіанті (таблиця 3), виконати завдання, аналогічні до загального завдання 2, враховуючи висновки, зроблені в пункті 17 завдання 2.

3. Виконати попереднє завдання, використовуючи системи або програми для одночасного пошуку через кілька пошукових систем. Порівняти отримані результати з результатами виконання попереднього завдання.

Таблиця 3

Номер варіанта	Назва речовини
1	Метан
2	Циклогексан
3	Пінопласт
4	Антрацен
5	Бром бензол
6	Толуол
7	Етилен
8	Нітробензол
9	Анілін
10	Лейцин

## 2. Література з хімії:

Використовуючи доступ через Інтернет до наукових журналів, підготувати доповідь та презентацію до неї про комп'ютерне моделювання в сучасних хімічних дослідженнях (використати не менше 5 джерел різними мовами).

План доповіді:

Вступ.

1. Поняття комп'ютерної моделі.
2. Класифікація комп'ютерних хімічних моделей (довідковий матеріал Додаток А).
3. Програмне забезпечення реалізації аналізу комп'ютерних хімічних моделей.

Висновки.

Список використаних джерел.

При складанні тексту доповіді дотримуватись вимог оформлення бібліографічного опису та посилань.

## 3. Патенти синтезованих речовин:

Використовуючи патентні бази даних, визначити хімічні властивості речовин, що були синтезовані за останні п'ять років (не менше 5 речовин). Звіт про виконання завдання підготувати у вигляді текстового файлу.

## 4. Бази даних відомостей про речовини:

### 1. Робота з базою даних *Inorganic Crystal Structure Database*

#### 1.1. Знайти відомості про гіпс (запит потрібно вводити англійською мовою).

##### 1.1.1. Визначити джерело відомостей і рік публікації.

##### 1.1.2. Визначити довжини зв'язків, величини кутів між ними, двогранні кути між площинами, що утворені атомами.

#### 1.2. Знайти відомості про гідроксиди, задаючи такі запити, і заповнити таблицю 4:

Таблиця 4

Запит	Отримані результати (кількість знайдених документів, навести приклади формул речовин)
<i>Elements O H</i>	
<i>Elements H O</i>	
<i>Elements H O, Element count 3</i>	
<i>Elements H2 O2, Element count 3</i>	
<i>Elements H2 O2 Ca, Element count 3</i>	

#### 1.3. Знайти відомості про сірчану кислоту.

##### 1.3.1. Зберегти всі знайдені cif-файли.

##### 1.3.2. Переглянути їх і порівняти структуру молекули. Пояснити отримані результати.

### 2. Робота з базою *Crystallography Open Database*:

#### 2.1. Знайти відомості про речовини, що містять гуанін, задаючи наступні запити, і заповнити таблицю 5:

Таблиця 5

<i>Занум</i>	<i>Отримані результати</i> (кількість знайдених документів, навести приклади формул речовин)
<i>text (1 or 2 words) guanine</i>	
<i>text (1 or 2 words) guanine</i> <i>1 to 8 elements N</i>	
<i>text (1 or 2 words) guanine</i> <i>1 to 8 elements N H</i>	
<i>text (1 or 2 words) guanine</i> <i>1 to 8 elements N H O</i>	
<i>text (1 or 2 words) guanine</i> <i>1 to 8 elements N H O C</i>	
<i>text (1 or 2 words) guanine</i> <i>1 to 8 elements N H O C</i> <i>strict number of elements 4</i>	
<i>text (1 or 2 words) guanine</i> <i>1 to 8 elements N5 H O C</i> <i>strict number of elements 4</i>	

2.2. Зберегти всі файли, знайдені за останнім запитом.

2.2.1. Порівняти отримані структури і зробити висновки.

*Завдання для самостійного виконання:*

- Використовуючи бази даних *ICSD* (Inorganic Crystal Structure Database) і *COD* (Crystallography Open Database), знайти не менше ніж три речовини, що містять групу атомів відповідно до варіанта завдання (варіант залежить від номера прізвища в журналі викладача). Якщо кількість отриманих результатів про речовини, що містять відповідні групи атомів, велика, то відбирати речовини для аналізу потрібно за зростанням кількості атомів в сполучі. Якщо не знайдено жодного результату, то дати відповідні пояснення

1.1. Зберегти CIF файли цих речовин в створеній папці.

1.2. Завантажити програму Mercury 2.3.

1.3. `Dbrijhbcnjde.xb rjvfyle Display [More Information|Structure Information? dbpyfxbnb ajhveke i ufpde htxjdbyb/`

1.4. Визначити геометричні параметри цих речовин: відповідні довжини зв'язків, кути між зв'язками і двогранні кути.

1.5. Порівняти отримані результати для однієї і тієї самої речовини, відомості про яку знайдено в різних базах даних.

1.6. Зробити відповідні висновки.

1.7. Отримані результати занести до текстового файлу.

*Структура текстового файлу:*

Прізвище ім'я, номер варіанту:

Група атомів в речовині:

Отримані результати:

<i>Група атомів</i>	<i>ICSD (Inorganic Crystal Structure Database)</i>	<i>COD (Crystallography Open Database)</i>
Речовина 1		
Речовина 2		
Речовина 3		

Висновки:

Варіант завдань для самостійного виконання подано в таблиці 6.

Таблиця 6

<i>Варіант</i>	<i>Група</i>	<i>Варіант</i>	<i>Група</i>
1	PO <sub>4</sub>	7	FeCl <sub>3</sub>
2	Na <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8	NH <sub>3</sub>
3	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	9	KOH
4	AlF <sub>3</sub>	10	NO <sub>2</sub>
5	HBr	11	NaOH
6	NaO		

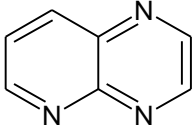
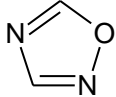
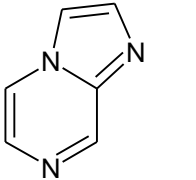
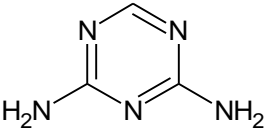
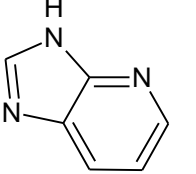
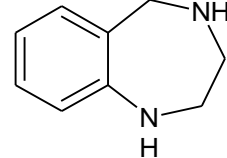
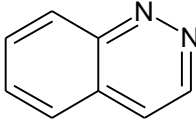
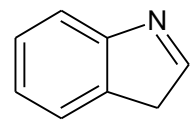
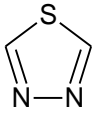
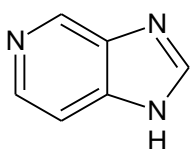
2. За результатами структурного пошуку заповнити таблицю 7 і зробити висновки, в яких випадках доцільно використовувати який вид пошуку:

Таблиця 7

Структура	Кількість речовин, що знайдено за структурою (Structure (Exact) Search)	Кількість речовин, що знайдено за підструктурою (субструктурою) (Substructure Search)	Кількість речовин, що знайдено за подібністю (Similarity Search)
-----------	---	---	--

Варіанти завдань подано в таблиці 8.

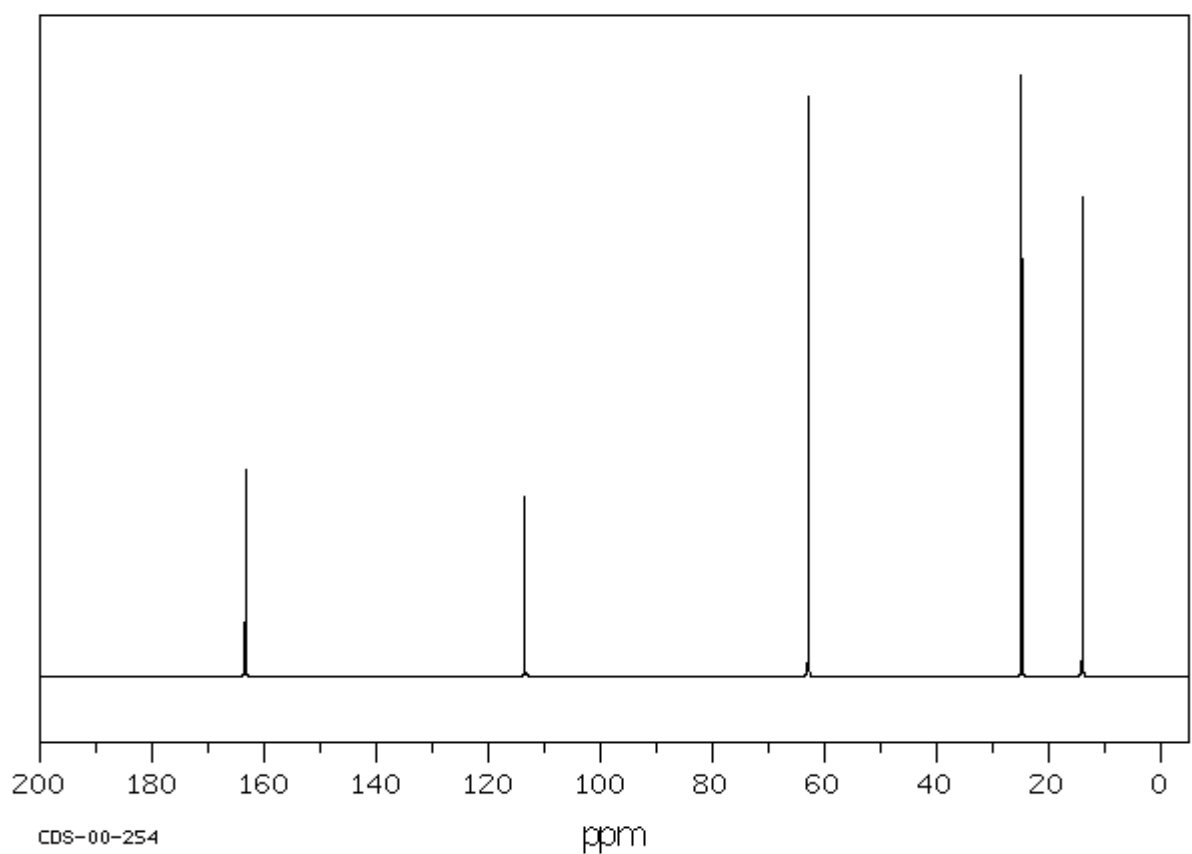
Таблиця 8

Номер варіанта	Структура	Номер варіанта	Структура
1		6	
2		7	
3		8	
4		9	
5		10	

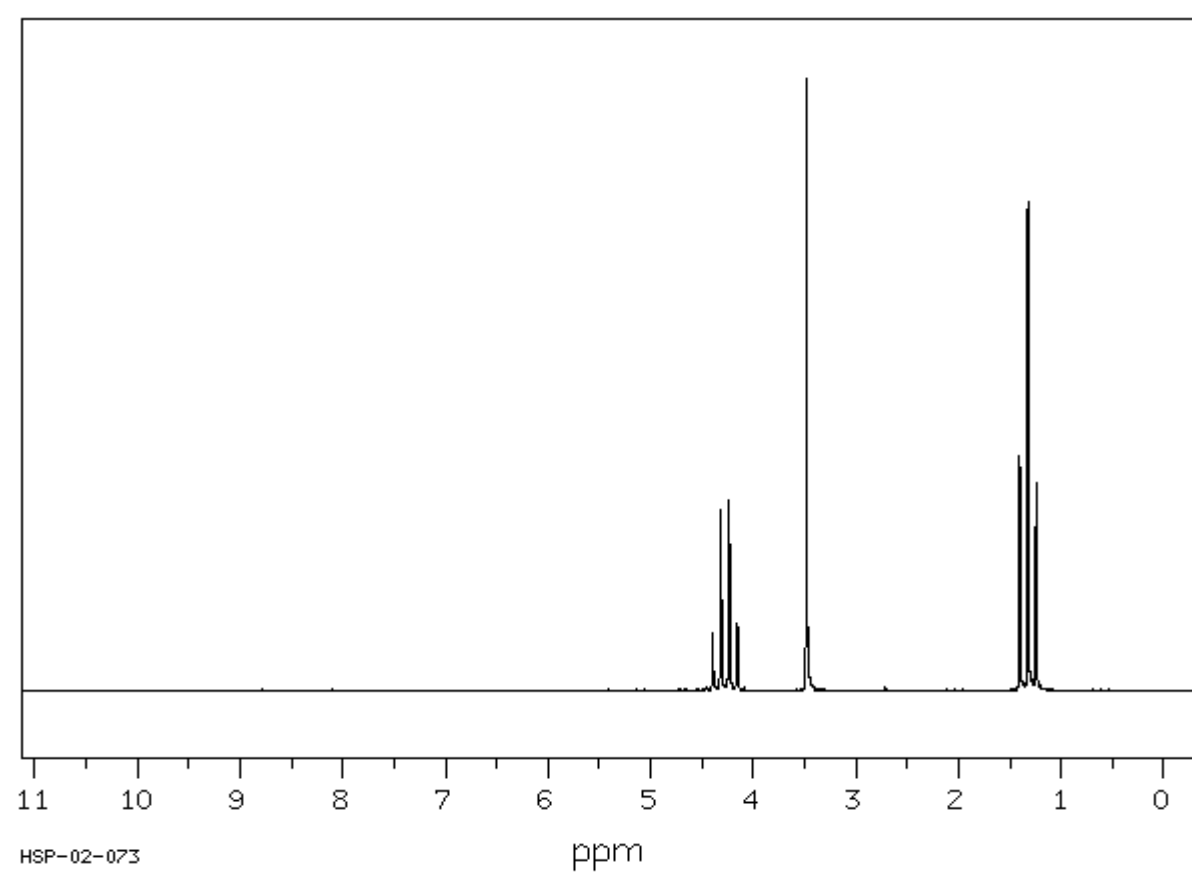
5. Бази даних спектрів речовин:

- Знайти в базі даних SDBS речовини за структурною формулою  $C_5H_7NO_2$ . Визначити кількість отриманих результатів.
- Уточнити запит, встановивши значення молекулярної маси в межах 113 – 114. Визначити кількість отриманих результатів.
- Зробити порівняльний аналіз  $^1H$  NMR,  $^{13}C$  NMR, MS спектрів за кількістю і значенням піків.
- При дослідженні речовини було отримано такі спектри:  $^1H$  NMR (рис. 1),  $^{13}C$  NMR (рис. 2), MS (рис. 3). Визначити склад цих речовин.
  - Скласти таблиці значень зсувів. Для  $^1H$  NMR отримаємо такі значення: 163; 113; 62; 25; 13. Для  $^{13}C$  NMR отримаємо такі значення: 4,3; 3,4; 1,3. Для MS спектру отримаємо такі пари окремих значень піків та їх інтенсивність: 29 (100), 68 (70), 27 (23), 40 (18), 41 (13).
  - Ввести спочатку значення для  $^1H$  NMR спектру і визначити кількість отриманих результатів.
  - Додати значення для  $^{13}C$  NMR спектру і визначити кількість отриманих результатів.
  - Додати перші 3 значення для MS спектру і визначити кількість отриманих результатів.
  - Додати останні 2 значення для MS спектру і визначити кількість отриманих результатів.
- Сайти фірм виробників реагентів:
 

Використовуючи ресурси Інтернету визначити вартість реагентів, які потрібні для організації навчання хімії в школі.



*Puc. 1*



*Puc. 2*

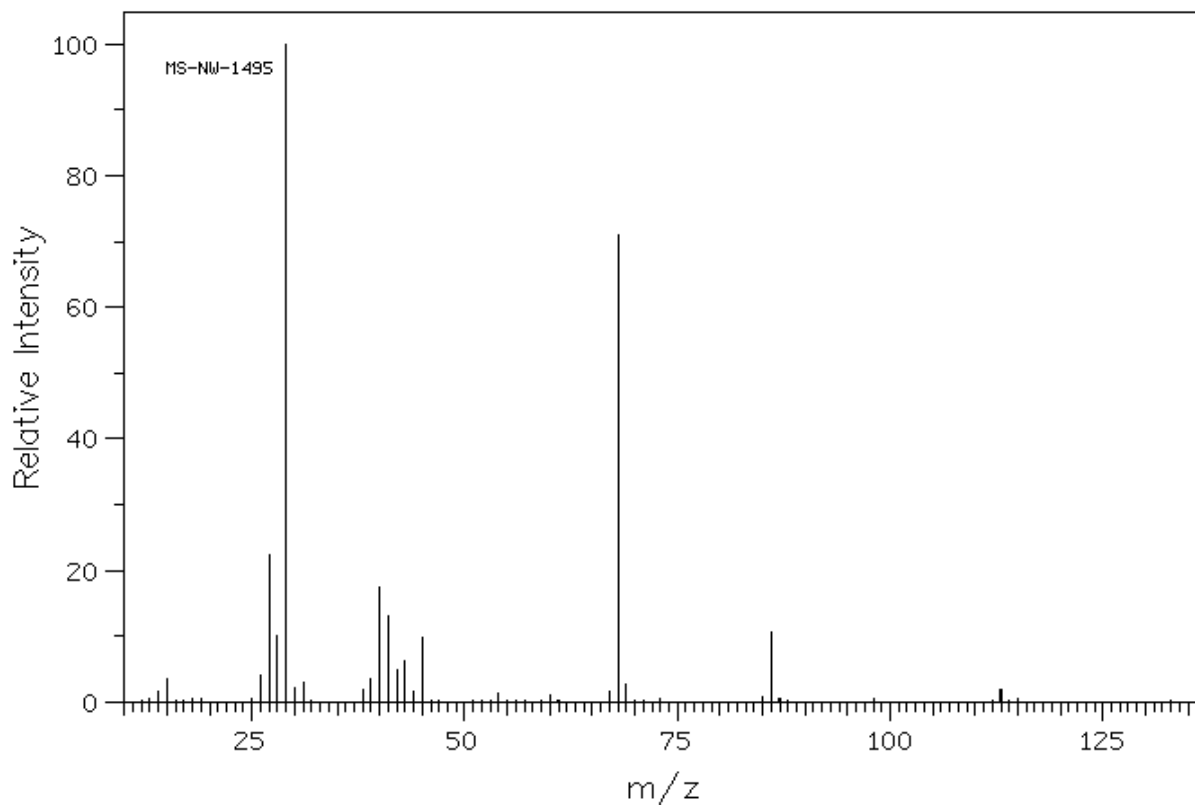


Рис. 3

#### 6. Сайти, що присвячено хімії:

Підготувати доповідь про три сайти (один україномовний, один російськомовний, один англomовний (або іншою іноземною мовою)) присвячені хімії. Доповідь подати у вигляді текстового файлу, для ілюстрації матеріалу доповіді підготувати презентацію.

Використання запропонованих завдань дозволяє сформувати у студентів навички ефективного пошуку потрібних відомостей в інформаційних ресурсах Інтернету та ознайомити майбутніх вчителів хімії з різними виданими таких ресурсів.

#### Література

1. WorldWideWebSize.com [Електронний ресурс]. – Режим доступу URL: <http://www.worldwidewebsize.com/> – 1.10.2012.
2. Рамський Ю.С., Резіна О.В. Вивчення інформаційно-пошукових систем мережі Інтернет: Навч. посіб. – К.: НПУ імені М.П.Драгоманова, 2004. – 60 с.
3. Рагойша А. А. Текстовый поиск научной химической информации в Интернете: руководство к практикуму: учеб. пособие по курсу "Информационные технологии в химии" для студентов хим. фак. спец. 1-31 05 01 [Электронный ресурс] – Минск: БГУ, 2011. – 64 с. – Режим доступа: [http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha\\_2011.pdf](http://www.abc.chemistry.bsu.by/lit/Rahoisha_2011.pdf)
4. Дубей І.Я. Веб-ресурси вільного доступу для хіміків-біоорганіків. // Журнал біоорганічної хімії. – 2007. – Т. 5. – № 1. [Електронний ресурс]. – Режим доступу URL: [http://www.bioorganica.org.ua/UBAdenovo/pubs\\_5\\_1\\_07/Nauk\\_proces/Nauk\\_proces\\_Dubey.pdf](http://www.bioorganica.org.ua/UBAdenovo/pubs_5_1_07/Nauk_proces/Nauk_proces_Dubey.pdf). – 1.10.2012.