

4. Uspanova K. Zh. *Ideas of people's pedagogy in the development of education and the creation of Kazakh researchers in the period of study of Kazakhstan to Russia (first half of the XVIII - XIX century): Dis. Kand. PED. Nauk: 13.00. 01: Tyumen. -2002. - 171 c "Bulletin of SKSPU-Vestnik YUKGPU", No. 3 (33), 2022.*

5. Medvedev D. A. *Methodology of formation of modern ethnopedagogics // Ethnopedagogic traditions of formation of culture of international relations. Mater. VII international scientific practice. conf. - Kazan: KGPU. -2000. – 216 P.*

6. Pak M. S. *Didactics of chemistry. - SPB.: ООО "TRIO". -2012. - pp. 67-85.*

7. Beisekova A., Utemissova A. *The role of modern educational technologies in humanizing chemistry education of future teachers based on national traditions //AD alta-journal of interdisciplinary research. – 2018. – Vol.8. – Issue 2. DOI: <http://www.magnanimitas.cz/ADALTA/0802/PDF/0802.pdf>*

8. Mirenkova E. V. *The concept of methodological provision for the formation of favorable conditions for studying chemistry in the modern school: dis. ð dock. PED. Nauk: 13.00.02 / Mirenkova Elena Vasilievna. - SPB. - 2018. - 430 P.*

FTAMP 31.01.45

<https://doi.org/10.51889/3005-6217.2024.81.3.003>

Ж.Б. Борисова*, Н.Н. Қожабекова, Н.Т. Мананов, А.Ж.Өтемісова
Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті, Алматы қ., Қазақстан
e-mail: borisova.22@internet.ru

ОРГАНИКАЛЫҚ ХИМИЯНЫ ОҚЫТУДА HYPERCHEM БАҒДАРЛАМАСЫН ҚОЛДАНУ ЕРЕКШЕЛІКТЕРІ

Аңдатпа

Бұл мақалада органикалық химияны оқытуда қолданылатын негізгі компьютерлік бағдарламалар, олардың функциялары, артықшылықтары мен кемшіліктері қарастырылады.

Көміртекті қосылыстарының құрылысы мен қасиеттерін зерттейтін органикалық химия химияның негізгі пәндерінің бірі болып табылады. Органикалық молекулалардың күрделілігі мен жан-жақтылығы оларды талдау және түсіну үшін тиімді құралдарды қажет етеді. Соңғы онжылдықтарда компьютерлік бағдарламалар органикалық қосылыстарды визуализациялау, модельдеу және талдау үшін қуатты құралдарды ұсына отырып, осы салада оқыту мүмкіндіктерін едәуір кеңейтті. Компьютерлік бағдарламалар арқылы оқыту оларға күрделі тапсырмаларды орындауға мүмкіндік береді, химиялық құрылымдарды нақты тәсілдермен суреттейді және химиялық принциптер туралы түсініктерін арттырады.

Мақалада толығырақ тоқталатын HyperChem бағдарламасы студенттерге есептеу нәтижелерін түсіндіруге және реакция механизмдері туралы қорытынды жасауға мүмкіндік беретін аналитикалық дағдыларды дамытады. Спектроскопиялық деректерді біріктіру қабілеті бұл құралды тек теорияның негізінде ғана емес, сонымен қатар органикалық химия тәжірибесін түсіну үшін де қажет.

Осылайша, HyperChem-ді органикалық химияны оқытуда қолдану нағыз өнерге айналады, мұнда әрбір өзара әрекеттесу, әрбір молекула және әрбір реакция мағынаға толы. Бұл бағдарлама ғылымды түсініп қана қоймай, оны ғылыми-зерттеу және тәжірибелік-конструкторлық жұмыстарда жаңа көзқарастар ашатын химиктердің жаңа буынын қалыптастырады. Мақалада HyperChem бағдарламасын қолданудың негізгі аспектілері, оның ішінде оның функционалдығы, оқытуда қолданылуы және болашақ зерттеулердің негізгі бағыттарын анықтауды қарастырады.

Түйін сөздер: органикалық химия, компьютерлік бағдарлама, HyperChem, молекулалық динамика, спектроскопиялық модельдеу, молекулалық визуализация.

Ж.Б. Борисова *, Н.Н. Қожабекова, Н.Т. Манатов, А.Ж. Утемисова
Казахский национальный педагогический университет имени Абая, г. Алматы, Казахстан
e-mail: borisova.22@internet.ru

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ПРОГРАММЫ HYPERCHEM В ОБУЧЕНИИ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Аннотация

В данной статье рассмотрены основные компьютерные программы, используемые при преподавании органической химии, их функции, преимущества и недостатки.

Органическая химия, изучающая строение и свойства соединений углерода, является одним из основных предметов химии. Сложность и универсальность органических молекул требуют эффективных инструментов для их анализа и понимания. В последние десятилетия компьютерные программы значительно расширили возможности обучения в этой области, предлагая мощные инструменты для визуализации, моделирования и анализа органических соединений. Обучение с помощью компьютерных программ позволяет им выполнять сложные задачи, реалистично иллюстрировать химические структуры и улучшать понимание химических принципов.

HyperChem, о котором подробнее будет сказано в статье, развивает аналитические навыки, позволяющие учащимся интерпретировать результаты расчетов и делать выводы о механизмах реакций. Способность интегрировать спектроскопические данные делает этот инструмент не только теоретической основой, но и необходимым для понимания практики органической химии.

Таким образом, использование HyperChem в преподавании органической химии становится настоящим искусством, где каждое взаимодействие, каждая молекула и каждая реакция полны смысла. Эта программа создаст новое поколение химиков, которые не только будут разбираться в науке, но и откроют новые горизонты в исследованиях и разработках. В статье рассматриваются ключевые аспекты использования HyperChem, включая его функциональность, использование в образовательных целях и определение ключевых областей для будущих исследований.

Ключевые слова: органическая химия, компьютерная программа, HyperChem, молекулярная динамика, спектроскопическое моделирование, молекулярная визуализация.

Zh.B. Borisova *, N.N. Kozhabekova, N.T. Manapov, A.Zh. Utemissova
Abai Kazakh National Pedagogical University, Almaty, Kazakhstan
e-mail: borisova.22@internet.ru

FEATURES OF THE APPLICATION OF THE HYPERCHEM PROGRAM IN TEACHING ORGANIC CHEMISTRY

Abstract

This article examines the main computer programs used in the teaching of organic chemistry, their functions, advantages and disadvantages.

Organic chemistry, which studies the structure and properties of carbon compounds, is one of the main subjects of chemistry. The complexity and versatility of organic molecules require efficient tools to analyze and understand them. In recent decades, computer programs have greatly expanded learning opportunities in this field, offering powerful tools for visualizing, modeling, and analyzing organic compounds. Learning through computer programs enables them to complete complex tasks, illustrate chemical structures in realistic ways, and increase their understanding of chemical principles.

HyperChem, which will be discussed in more detail in the article, develops analytical skills that allow students to interpret calculation results and draw conclusions about reaction mechanisms. The ability to integrate spectroscopic data makes this tool not only a theoretical basis, but also essential for understanding the practice of organic chemistry.

In this way, using HyperChem in teaching organic chemistry becomes a true art, where every interaction, every molecule and every reaction is full of meaning. This program will create a new generation of chemists who will not only understand science, but will open new horizons in research and development. The article examines key aspects of using HyperChem, including its functionality, educational use, and identifying key areas for future research.

Keywords: *organic chemistry, computer program, HyperChem, molecular dynamics, spectroscopic modeling, molecular visualization.*

Негізгі ережелер. Органикалық химияны оқытуда HyperChem бағдарламасының маңызы – бұл студенттердің химиялық процестерді визуализациялау, модельдеу және талдау жасауға мүмкіндік беруі. HyperChem бағдарламасы студенттердің сыни ойлауына, логикалық және аналитикалық қабілеттерін жетілдіруіне ықпал етеді. Ол молекулалардың құрылымын және реакция механизмдерін тереңірек түсінуге мүмкіндік беріп, ғылыми зерттеулерге дайындығын арттырады. Зерттеу мақсатында бағдарламаның функционалдылығы, педагогикалық аспектілері мен студенттердің білім алу нәтижелері қарастырылды.

Кіріспе. Қоғам дамуының қазіргі кезеңі адам қызметінің барлық салаларында ғылыми-техникалық прогрестің кеңінен қолданылуына негізделген терең экономикалық және әлеуметтік ұғымдармен сипатталады. Ғылыми-техникалық прогресті жеделдетудің, өндірісті автоматтандырудың, тиімді технологияларды құрудың, жоспарлау мен басқаруды жетілдірудің маңызды факторларының бірі компьютерлік ақпараттық технологиялар мен бағдарламаларды кеңінен қолдану болып табылады. Ал білім беру саласында қолдану, бір жағынан, білім алушының шығармашылығына кең өріс ашса, екінші жағынан, кәсіби және ғылыми-зерттеу міндеттерін шешу мүмкіндіктерін кеңейтеді.

Жаратылыстану ғылымдары саласындағы жаңалықтардың көпшілігі бізді қоршаған әлемнің құрылымы мен динамикасы туралы идеялардың дамуымен байланысты. Бұл процесте материяның кванттық теориясы маңызды орын алады. Компьютерлік химия кванттық химияның бір саласы ретінде осы теорияның ерекше аспектілерінің бірі болып табылады. Бұл пән химиялық құбылыстар мен процестерді атом-молекулалық деңгейде есептеу техникасын қолдана отырып зерттеуге кванттық механикалық заңдардың қолданылуын қарастырады.

Компьютерлік химия – қазіргі ғылымның маңызды және дамушы бағыты, ол органикалық химияны оқытуда жаңа мүмкіндіктер ашады. Оқытушылардың басты мақсаты – студенттерді компьютерлік химияның әдістерімен таныстыра отырып, олардың пәнге деген қызығушылығын арттыру. Бұл бағытта халықтық педагогиканың үлгі-өнегелерін сабақта тиімді пайдалану да маңызды.

Компьютерлік химияның негізі – молекулаларды моделдеу, визуализациялау және химиялық реакцияларды есептеу. Студенттерге HyperChem, ChemDraw сияқты бағдарламаларды қолдану арқылы молекулалардың құрылымын, реакция механизмдерін және физико-химиялық қасиеттерін зерттеуді үйрету – оқыту процесін интерактивті және қызықты етеді. Оқушыларға компьютерлік химия арқылы молекулаларды зерттеу, нәтижелерді визуализациялау, эксперименттерді модельдеу – ғылымның негіздерін практикалық түрде меңгеруге мүмкіндік береді. Сонымен қатар, компьютерлік химияның әдістері білім алушыларға логикалық ойлау қабілеттерін дамытуға, эксперименттер жүргізу дағдыларын қалыптастыруға және ғылыми зерттеу дағдыларын жетілдіруге көмектеседі. Білім алушылардың химия пәніндегі тәжірибесі олардың ғылыми ойлауын, креативтілігін және жауапкершілігін арттырады [2].

Осылайша, компьютерлік химияның тиімді әдістерін сабақта қолдану – оқытушылардың жастарды тәрбиелеудегі басты бағыты. Бұл білім беру процесінің сапасын арттырып, студенттердің химияға деген ынтасын, білімін және дағдыларын дамытуға мүмкіндік береді.

Компьютерлерді күрделі химиялық теңдеулерді шешу үшін ғана емес, сонымен қатар модельденген операциялар мен олардың нәтижелерін визуализациялау үшін қолайлы пайдалануға болады. Осылайша, компьютерлік бағдарламалар молекулалық модельдеу операцияларын орындаудың таптырмас құралы болып табылады [1].

Органикалық химия мен компьютерлік химияның ұштасуы білім беру мен ғылыми зерттеулердің жаңа стандарттарын белгілейді. Компьютерлік әдістерді пайдалану арқылы органикалық молекулаларды тереңірек түсініп, олардың реакцияларын болжап, жаңа қосылыстарды жобалай алады. Бұл интеграция оқу процесін байытады, студенттердің ғылыми зерттеу дағдыларын дамытуға ықпал етеді және химияның шекараларын кеңейтеді.

Қазіргі химия молекулалардың қасиеттерін түсіну және болжау үшін озық есептеу әдістерін қолдануды талап етеді. Осындай құралдардың бірі - HyperChem, ол молекулалық модельдеу және есептеу химиясы үшін қуатты бағдарламала болып табылады. 1980 жылдардың соңында негізі қаланған бұл бағдарлама алғашында ғылыми зерттеулер мен оқу мақсатында қолданылған. HyperChem бағдарламасын құрудың негізін қалаушы – Д.Винсент, ол бағдарламаны ғылыми зерттеулер мен химиялық білім беру саласында қолдануға бағыттаған. Бағдарламаның дамуы барысында органикалық химияның күрделі мәселелерін шешуге арналған бірқатар жаңа құралдар енгізілген болатын. Алғашқыда молекулалық моделдеу мен кванттық химияны біріктіре отырып, химиктерге молекулалардың құрылымын зерттеуге мүмкіндік берді. Кейін 1990 жылдары бағдарламаға жаңа функционалдық мүмкіндіктер қосылып, соның ішінде молекулалық динамика, термодинамикалық есептеулер және реакция механизмдерін модельдеу құралдары енгізілді. Бұл жаңалықтар HyperChem-ді ғылыми-зерттеу институттарында және университеттерде кеңінен қолдануға мүмкіндік берді [3].

Қазіргі таңда HyperChem-нің интерактивті интерфейсі мен қолжетімді құралдары оқытушылар мен студенттерге оқу материалдарын меңгеруді жеңілдетеді. Бұл бағдарламаның білім беру процесіне қосқан үлесі студенттердің ғылыми зерттеу дағдыларын дамытуға ықпал етеді. HyperChem-ді қолдану арқылы білім алушылар молекулалық деңгейде терең түсінік алады, органикалық химияның күрделі тұжырымдамаларын меңгеруге мүмкіндік алады.

HyperChem – органикалық молекулалар мен олардың қасиеттерін зерттеуге арналған құралдардың кең ауқымын ұсынатын интеграцияланған молекулалық модельдеу және есептеу химиясы бағдарламалық құралы. Оның қолдану аясы ғылыми және білім беру мақсаттарын қамтиды, бұл оны органикалық химияны зерттеу үшін өзекті етеді [4].

Материалдар мен әдістер. HyperChem бағдарламалық пакеті компьютерлік химияның барлық қазіргі заманғы әдістерін, соның ішінде эмпирикалық емес және жартылай эмпирикалық кванттық-химиялық әдістерін қамтиды. Оның үстіне, әрбір әдіс үшін зерттеудің мақсаты мен компьютерлік техниканың мүмкіндіктеріне байланысты проблемалық есептердің нұсқасын таңдауға әртүрлі мүмкіндік беретін әртүрлі параметрлену жиынтығы бар [11].

Ресейлік ғалымдар HyperChem бағдарламасын химия саласында ғылыми зерттеулер жүргізу үшін белсенді қолданады. Мысал ретінде бағдарлама көмегімен катализатор ретінде әрекет ете алатын жаңа органикалық қосылыстардың құрылымы мен қасиеттерін зерттеген Мәскеу мемлекеттік университетінде жүргізілген жұмыстарды келтіруге болады.

Санкт-Петербург мемлекеттік университетінде хош иісті қосылыстардың металлорганикалық кешендермен өзара әрекеттесуін модельдеу бойынша зерттеулер жүргізілді. Бұл зерттеулер катализ механизмдерін тереңірек түсінуге және органикалық заттарды синтездеудің жаңа тәсілдерін ұсынуға мүмкіндік берді.

Бағдарлама сонымен қатар Новосибирск мемлекеттік университетінде молекулалардың термодинамикалық қасиеттерін және олардың әртүрлі жағдайларда тұрақтылығын зерттеу үшін қолданылады. Бұл деректер берілген қасиеттері бар жаңа материалдарды әзірлеу үшін өте маңызды.

Қазіргі таңда, бағдарламаның қолдану кеңістігі едеуір кеңейді. Химияның көптеген салаларында, білім беру орындарында айрықша қолданылып келеді. «Компьютерлік химия» пәнімен ұғымдас жүретін бұл бағдарлама органикалық заттар құрылысы мен қасиеттерін зерттеу барысында елеулі ерекшеліктерге ие болып табылады. Мысал ретінде:

1. Білім берудегі мүмкіндіктері

HyperChem бағдарламасы белгілі және белгісіз молекулалардың геометриялық құрылымы мен параметрлерін, энергиясын және басқа қасиеттерін болжауға мүмкіндік береді. Кванттық-химиялық есептеулер химиялық зерттеулердің маңызды әдісі болып табылады және оның маңыздылығы ЯМР әдісінің маңыздылығымен салыстырылады. Есептеулердің көпшілігі белгілі тұрақты молекулалар туралы қосымша ақпарат алуға бағытталған. Тәжірибелік әдістер молекуланың геометриясы, диполь моменті, түзілу жылуы, иондану потенциалы, зарядтың таралуы, байланыс реті, спин тығыздығы және т. б. туралы мәліметтер алуға мүмкіндік береді. Кейбір жағдайларда есептеу нәтижелері эксперименттік деректерге қарағанда сенімдірек болады. Бағдарлама арқылы жасалатын кванттық-химиялық есептеулер зерттелетін химиялық қосылыстардың ауқымын кеңейтуге мүмкіндік береді, бұл зерттелетін қосылыстардың ауқымын тек синтезделген қосылыстарға ғана арналған деген практикалық кедергіні жояды. Есептеудің әр түрінің өзіндік артықшылықтары мен қолдану аясы бар [10].

2. Молекулаларды визуализациялау және модельдеу

Оқытуда HyperChem қолдану студенттерге үш өлшемді кеңістіктегі молекулаларды елестетуге және олардың құрылымы мен қасиеттерін зерттеуге мүмкіндік береді. Бұл молекулалық өзара әрекеттесу мен конформациялық өзгерістерді жақсырақ түсінуге ықпал етеді. HyperChem бағдарламалық пакеті молекулалардың екі өлшемді және үшөлшемді үлгілерін жасау және өңдеуге арналған барлық құралдармен жұмыс істейді. Бағдарлама студенттерге атомдар мен молекулалық орбитальдардың кеңістікте таралуына қатысты ұғымдарды меңгеруге көмектеседі. Генерацияланған молекулалардың геометриялық оптимизациясы маңызды кезең болып табылады [9]. HyperChem кванттық химия әдістерін (мысалы, молекулалық механика және DFT) пайдаланып, молекуланың ең төменгі энергиялы конфигурациясын табуға мүмкіндік береді. Бұл кезең молекулалардың тұрақтылығын және реакцияға қабілеттілігін бағалауда критикалық рөл атқарады.

3. Спектроскопиялық мәліметтерді талдау.

Бағдарлама спектрлерді есептеу және эксперименттік мәліметтерді интерпретациялау үшін қолданылады, студенттерге спектроскопиялық талдау әдістерін меңгеруге және теориялық болжамдарды практикалық нәтижелермен байланыстыруға мүмкіндік береді. Бұл деректерді талдау дағдыларын және молекулалардың химиялық қасиеттерін түсінуді жақсартады [5].

Зерттеу барысында HyperChem бағдарламасының функционалдық мүмкіндіктері жан-жақты талданды. HyperChem бағдарламасының қолданбалы интерфейсін жалпы химияны оқытуда қолданылатын негізгі компьютерлік бағдарламаларымен салыстыру жүргізіп көрдік:

1. Avogadro

Avogadro – 3D визуализациясы мен молекулалық динамикаға қолдау көрсететін тегін бағдарламалық құралы. Avogadro білім беру мекемелерінде студенттерге молекулалық модельдеу және бейнелеу негіздерін үйрету үшін қолданылады. Бағдарлама сонымен қатар молекулалық құрылымдар мен олардың қасиеттерін талдауды қажет ететін ғылыми зерттеуге негізделген таптырмас көмекші. Ол әртүрлі кванттық химиялық әдістерді қолдана отырып, молекулалардың геометриясын, энергиясын және басқа қасиеттерін анықтау үшін есептеулер жүргізуге мүмкіндік береді. HyperChem-нен айырмашылығы, кванттық химиялық есептеулер

мен спектрлік талдаулар үшін шектеулі мүмкіндіктері бар. Дегенмен, студенттер мен зерттеушілерге молекулалардың 3D моделін құруға және редактрлеуге мүмкіндік береді [8].

2. Gaussian

Gaussian – молекулалық құрылымдарды зерттеу және кванттық химиялық есептеулер жүргізу үшін кеңінен қолданылатын бағдарламалық құрал. Ол химиялық жүйелердің қасиеттерін, реакция механизмдерін және молекулалардың электрондық құрылымдарын модельдеуге мүмкіндік береді. HyperChem-мен салыстырғанда, есептеуді қарқынды пайдалану қиын болуы мүмкін [7]. HyperChem модельдеу және визуализация мүмкіндіктері бар интеграцияланған тәсілді ұсынады. Соған қарамастан Gaussian-ды қолдану органикалық химияның күрделі тұжырымдамаларын түсінуге және ғылыми зерттеулерді тереңдетуге ықпал етеді.

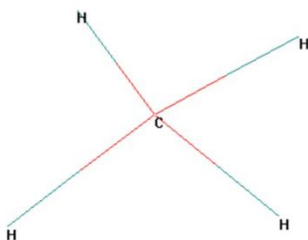
3. ChemDraw

ChemDraw химиялық құрылымдар мен реакция механизмдерін сызуға арналған және визуализациялауға бағытталғанданымал құрал. Сонымен қатар, органикалық химия бойынша ғылыми жұмыстар мен презентациялар үшін қажетті графикалық материалдарды дайындауға көмектеседі. ChemDraw бағдарламасы химиялық білім беру процесін байытады, студенттердің теориялық білімдерін практикалық түрде қолдануға мүмкіндік береді. ChemOffice, ChemDraw бағдарламаларынан HyperChem бағдарламасының айырмашылығы, атауы немесе брутто-формулардың молекулалық құрылымдық формулаларын құрастыра алмауында [2]. Сол себепті басқа химиялық бағдарламалар болмаған жағдайда, молекулалық құрылымды түзуде HyperChem бағдарламасы олардан қарапайым элементтердің суретін салу немесе визуализация терезесіндегі үздіксіз мәліметтердің дайындамаларын редакциялау үшін таптырмас құрал болып табылады.

Gaussian, Avogadro және ChemDraw – органикалық химияда қолданылатын үш негізгі бағдарламалық құрал. Әрқайсысының өз ерекшеліктері мен артықшылықтары бар, оларды интеграциялау студенттердің пәнге деген қызығушылығын арттыруға, химиялық білімдерін тереңдетуге және ғылыми зерттеу дағдыларын дамытуға ықпал етеді. Олардың көмегімен студенттер молекулалардың құрылымын, реакцияларын және қасиеттерін тереңірек түсініп, тәжірибелік дағдыларын жетілдіреді.

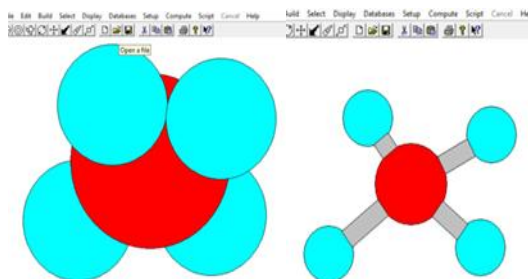
Нәтижелер. Студенттерге жүргізілген зертханалық жұмыстардың үлгісі ретінде, «Молекулалық құрылымдарды бейнелеу әдістері» тәжірибесінің қысқаша бөлігі ұсынылып отыр.

Қарапайым және күрделі заттардың молекулаларының құрылымын көрсету үшін химиялық формулалар қолдану жеткілікті. Алайда, органикалық химиядағы молекулаларды бейнелеудің әдеттегі әдісі ол – құрылымдық формулалар. Олар молекуладағы атомдардың қосылу реті ацетилен мысалында көрсетеді (сурет 1).



Сурет 1. Метанның құрылымдық формуласы

Алайда, құрылымдық формулалар атомдардың нақты кеңістіктікте қалай орналасқанын көрсетпейді. Әсіресе, егер молекулада тетраэдрлік ортасы sp^3 гибридтенген көміртек атомдары болса. Стюарт-Бриглебтің жарты шар тәрізді модельдері сияқты, кеңістіктіктегі модельдердің көмегімен атомдар арасындағы байланыстарды және олардың өзара орналасуын, яғни молекулалардың нақты геометриясын көрнекі түрде шар тәрізді көрсетуге болады (сурет 2).



Сурет 2. Метанның шар-сфера және шар-стержн модельдері

HyperChem-де ацетилен моделін құру молекулалық модельдеу бағдарламалық жасақтамасының ыңғайлылығын көрсетеді. Геометрияны визуализациялау және оңтайландыру мүмкіндіктерімен HyperChem молекулалар мен олардың қасиеттерін зерттеудің маңызды құралына айналуға мүмкіндік береді. Атомдардың сфералық көрінісі молекулалардың кеңістіктік құрылымын жақсы түсінуге көмектеседі, бұл химия мен материалтану саласындағы қосымша зерттеулер үшін маңызды. Ацетилен моделі теориялық химиядағы бағдарламалық жасақтаманың маңыздылығын көрсететін күрделі молекулалар мен реакцияларды зерттеуге негіз бола алады.

Осындай зертханалық тапсырмалардың нәтижесі бойынша HyperChem-нің негізгі артықшылықтары мен кемшіліктері айқындалды.

Артықшылықтары:

- Көп функционалдылық. HyperChem бір құралында геометриялық оңтайландыру, молекулалық динамика, энергия есептеулері және спектроскопиялық модельдеу функцияларын біріктіреді.

- Интуитивті интерфейс. Бағдарлама молекулалық модельдермен және есептеулермен жұмыс істеуді жеңілдететін ыңғайлы интерфейссті қамтамасыз етеді.

- Көрнекілік. Молекулярлық визуализация мүмкіндіктері күрделі химиялық ұғымдарды үйренуге және түсінуге көмектеседі.

Кемшіліктері:

- Құны. HyperChem коммерциялық өнім болып табылады, ол кейбір оқу орындарында қолжетімсіз болуы мүмкін.

- Ресурстардың қарқындылығы. Күрделі есептеулерді жүргізу айтарлықтай есептеу ресурстарын талап етеді.

- Оқыту. Бағдарламаны пайдалану оның функционалдығын үйренуге және меңгеруге уақытты қажет етеді.

Бағдарламаның артықшылықтары мен кемшіліктерін ескере отырып, зерттеу барысында студенттерге дайындалған жоспар бойынша дәрістер мен семинарлар және зертханалық жұмыстар жүргізілді. HyperChem бағдарламасын қолдану нәтижесінде студенттердің алған әсерлері мен пікірлері жинақталды. Студенттердің пікірлері әр түрлі аспектілерге бағытталған. Көптеген студенттер бағдарламаның көмегімен органикалық химия пәніне деген қызығушылықтарының артқанын атап өтті. Молекулалардың 3D моделдерін көріп, химиялық реакцияларды визуализациялау процесі олардың білім алу мотивациясын күшейткен. Талдау нәтижелері төмендегі 1 кестеде көрсетілген.

Кесте 1 – Студенттердің HyperChem-ді қолдану нәтижелері

Негізгі параметр	Нәтиже (%)	Пікірлер
3D модельдер	80	- молекулалардың құрылымын визуализациялау арқылы стереохимиялық концепцияларды жеңіл түсіндік.
Реакция механизмі	75	- реакцияларды модельдеу барысында механизмдерді түсіну қабілетіміз артты.

Практикалық дағдылар	85	- зертханалық сабақтар тәжірибелік дағдыларымызды дамытуға ықпал етті.
Студенттердің қызығушылығы	90	- HyperChem бағдарламасын қолдану сабақтарды интерактивті етіп, пәнге деген қызуғышылық айтарлықтай арттырды.

Студенттердің HyperChem бағдарламасын қолдану туралы пікірлері мен нәтижелері бағдарламаның органикалық химияны оқытуда тиімді құрал екенін растайды. Пәнге қызығушылықтың артуы, теория мен практиканың байланысы, зерттеу дағдыларының дамуы және интерактивтілік – бұл бағдарламаның артықшылықтары. Дегенмен, интерфейсті түсіну бойынша қиындықтарды жою үшін қосымша оқыту мен қолдау көрсету қажеттілігі туындайды.

Талқылау. HyperChem бағдарламасын қолдана отырып, сабақтың нәтижелері оқу процесіне және студенттердің материалды қабылдауына айтарлықтай әсер етті. Төменде талқылаудың негізгі тармақтары берілген:

1. Материалды түсіну деңгейі:

- Зат құрылысы мен қасиеттерін бейнелеу органикалық химияны тереңірек түсінуге ықпал ететінін көрсетеді. Студенттер күрделі ұғымдарды оңай қабылдайды, бұл олардың материалды түсіндіру қабілетімен расталады. Геометриялық оптимизация, реакция механизмдері мен физико-химиялық қасиеттерді есептеу әдістері теориялық білімнің практикалық қолданылуын қамтамасыз етеді. Студенттер химиялық формулаларды және концепцияларды визуалды түрде меңгеру арқылы, органикалық химияның күрделі тұжырымдамаларын оңай түсінеді. Бұл оқыту әдісі білім алушылардың логикалық ойлау қабілеттерін дамытуға ықпал етеді.

2. Студенттердің қызығушылығы:

- Басқа да компьютерлік бағдарламалармен салыстыра отырып, HyperChem бағдарламасын қолдану оқу процесін оперативті және қызықты ететінін көрсетеді. Бұл студенттердің пәнді оқуға деген ынтасын арттыруға ықпал етеді. Молекулалардың 3D моделін көру және химиялық реакцияларды визуализациялау мүмкіндігі білім алушылардың теориялық білімдерін практикалық тәжірибемен байланыстыруға мүмкіндік береді. Бұл тәсіл студенттердің пәнді тереңірек түсінуіне және «Компьютерлік химия» пәніне деген ынтасын арттырады.

3. Уақыт тиімділігі:

- Тақырыптарды зерттеуге уақытты 30% қысқарту бағдарламаның интерактивті элементтері материалды тезірек игеруге мүмкіндік беретіндігін көрсетеді. Бұл әсіресе шектеулі уақыт жағдайында пайдалы болып табылады.

4. Зертханалық тапсырмалар:

- Зертханалық тапсырмаларды сәтті орындаған студенттердің жоғары пайызы (85%) алған білімдерін іс жүзінде қолдана алатынын көрсетеді. Бұл оқытудың маңызды аспектісі. Сонымен қатар, HyperChem бағдарламасын қолдану студенттерге ғылыми зерттеулер жүргізу, нәтижелерді талдау және деректерді интерпретациялау дағдыларын дамытуға көмектеседі. Студенттер зерттеу жұмыстарында практикалық тәжірибеге ие болып, ғылыми жобаларға қатысуға дайындықтарын арттырады. Бұл дағдылар олардың болашақтағы ғылыми қызметтеріне әсер етеді.

5. Кері байланыс:

- Бағдарламаның визуализациясы мен интерактивтілігі туралы студенттердің оң пікірлері оның білім беру үдерісіндегі құндылығын растайды. Зерттеу нәтижелері компьютерлік химияның мүмкіндіктерін одан әрі кеңейту арқылы білім беру жүйесін жетілдіру үшін түрлі жолдар бар екендігін көрсетеді. Оқытушыларға арналған тренингтер, әдістемелік құралдар және заманауи технологияларды енгізу студенттердің ғылымға деген қызығушылығын арттыруда маңызды рөл атқарады.

Қорытынды. Органикалық химия курсында компьютерлік бағдарламаларды қолдану білім алушылардың пәндік мазмұнды тереңірек және саналы түрде түсінуіне, сондай-ақ

өзіндік және стандартты емес мәселелерді шешудің көптеген идеялары мен тәсілдерін игеруге ықпал ететіндігін көрсетеді. HyperChem бағдарламасын органикалық химияны оқытуда пайдалану білім алушылардың ғылыми көзғарасын кеңейтеді және кәсіби дағдыларын қалыптастыруға ықпал етеді. Бұл бағдарламаны оқу процесінде қолдану химиялық ұғымдар мен талдау әдістерін түсінуді айтарлықтай жақсартады. Сонымен қатар, бағдарламаның интерактивтілігі мен қолданудың интуитивтілігі студенттерді шығармашылық ойлауға және проблемаларды шешуге ынталандырады, бұл олардың кәсіби болашағына оң әсер етеді, әрі болашақта химия саласындағы ғылыми зерттеулерге дайындықты арттырады. Шығындар мен ресурстардың қарқындылығына байланысты кейбір шектеулерге қарамастан, HyperChem органикалық химия студенттері мен оқытушылары үшін құнды құрал болып қала береді.

Пайдаланылған әдебиеттер тізімі:

1. С.Е.Алдешов. Колледжде компьютерлік оқыту бағдарламасын қолдану жағдайында ақпараттық-логикалық модельдеудің әдістемесі, Алматы 2010 – 4 б.
2. Базлов Д.А., Орлов В.Ю., Котов А.Д., Цивов А.В. Ярослав. гос. ун-т им. П. Г. Демидова / Компьютерная химия: методические указания – Ярославль: ЯрГУ, 2013.– 74 с.
3. Пешкова Т.В., Сальникова Е.В., Пешков С.А. Основы компьютерной химии: методические указания Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ООО ИПК «Университет», 2018. – 36 с.
4. Соловьев М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. – Москва : СЛОН-Пресс, 2005.
5. Baker C., Peters R. Virtual Laboratory Simulations in Chemical Education. *Journal of Chemical Education*, 2020. – 123-130 p.
6. Glusker J. P., Lewis M. *The Molecular Structure of Organic Compounds*. Oxford University Press, 2015.
7. Frisch M. J., et al. *Gaussian 16, Revision C.01*. Gaussian, Inc. 2016.
8. Hanwell M. D., et al. Avogadro: An Advanced Semantic Chemical Editor and Visualization System. *Journal of Cheminformatics*, 2012. – 17p.
9. Zhijiang Y., Youjun X., Li Pan. Conf-GEM: A geometric information-assisted direct conformation generation model, 2024. <https://www.journals.elsevier.com/artificial-intelligence-chemistry>
10. Manapov N.T. *Computer chemistry: Texbook*. – Almany: Association of higher educational Institutions of Kazakhstan, 2016. -312 p.
11. Кларк Т. Компьютерная химия, Москва: Мир, 1990.

References

1. Aldeshov S.E. *Methodology of information and logical modeling in the context of using a computer training program in college*, Almaty 2010 – 4 p.
2. *Computer chemistry: methodological guidelines / comp.* D. A. Bazlov, V. Yu. Orlov, A.D. Kotov, A.V. Tsivov; Yaroslav. State University named after P. G. Demidov. Yaroslavl : YarGU, 2013. – 74 p.
3. Peshkova T.V. *P31 Fundamentals of computer chemistry: methodological guidelines / T.V. Peshkova, E.V. Salnikova, S.A. Peshkov, Orenburg State University*. – Orenburg: ИПК Университет LLC, 2018. – 36 p.
4. Solovyov M. E. *Computer chemistry /M. E. Solovyov, M. M. Solovyov*. – Moscow : SLON-Press, 2005
5. Baker C., Peters R. Virtual Laboratory Simulations in Chemical Education. *Journal of Chemical Education*, 2020. – 123-130 p.
6. Glusker J. P., Lewis, M. *The Molecular Structure of Organic Compounds*. Oxford University Press, 2015.
7. Frisch M. J., et al. *Gaussian 16, Revision C.01*. Gaussian, Inc. 2016.

8. Hanwell M. D., et al. Avogadro: An Advanced Semantic Chemical Editor and Visualization System. *Journal of Cheminformatics*, 2012. – 17p.
9. Zhijiang Y., Youjun X., Li Pan. Conf-GEM: A geometric information-assisted direct conformation generation model, 2024. <https://www.journals.elsevier.com/artificial-intelligence-chemistry>
10. Manapov N.T. *Computer chemistry: Texbook*. – Almany: Association of higher educational Institutions of Kazakhstan, 2016. -312 p.
11. Clark T. *Computer Chemistry*, Moscow: Mir, 1990.

FTAMP 39.01.45

<https://doi.org/10.51889/3005-6217.2024.81.3.004>

Лайсханов Ш.Ұ., Данияр Ж.А. *

Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университеті Алматы қ., Қазақстан
e-mail: ahmetzankyzyzhanyl@gmail.com

МЕКТЕП ГЕОГРАФИЯСЫНДА ТУРИСТІК-ӨЛКЕТАНУ ЖҰМЫСТАРЫН ҰЙЫМДАСТЫРУ

Аңдатпа

Бұл мақалада мектеп географиясы пәнінде туризм мен өлкетануды ұйымдастырудың заманауи тәсілдері қарастырылады. Туризм мен өлкетану оқушылардың географиялық білімі мен мәдени және табиғи мұраларды түсіну қабілеттерін дамытуға бағытталған маңызды құрал болып табылады. Авторлар гиподинамияның алдын алу, оқушыларды белсенді зерттеу қызметтеріне тарту және олардың танымдық қызығушылықтарын арттыру үшін туризм мен өлкетанудың рөлін атап көрсетеді. Мақалада экскурсиялар, далалық зерттеулер мен жобалық қызметтерді қолдану арқылы оқушылардың географиялық білімі мен практикалық дағдыларын жетілдіру мәселелері талданады. Өлкетану мен балалар туризмі оқушылардың туған өлке туралы білімдерін арттырумен қатар, олардың физикалық, зияткерлік және рухани дамуына маңызды ықпал етеді. Мақалада Қазақстандағы мектептерде өлкетану мен балалар туризмінің рөлі мен маңыздылығы айқындалған. Балалар табиғат пен мәдениетке жақындау арқылы патриоттық сезімдерін нығайтып, өмір бойы қажетті дағдыларды игереді. Бұл қызметтер оқушылардың шығармашылық қабілеттерін дамытып, олардың табиғатқа және қоғамға деген көзқарастарын қалыптастырады. Мектептегі өлкетану жұмыстары оқушыларды зерттеушілік дағдыларға, ұжымдық жұмысқа және экологиялық мәдениетке тәрбиелейді.

Түйін сөздер: мектеп географиясы, туризм, өлкетану, экскурсиялар, далалық зерттеулер, оқыту әдістемесі, белсенділік.

Лайсханов Ш.У., Данияр Ж.А. *

Казахский национальный педагогический университет имени Абая, г. Алматы, Казахстан
e-mail: ahmetzankyzyzhanyl@gmail.com

ОРГАНИЗАЦИЯ ТУРИЗМО-ГЕОГРАФИЧЕСКОЙ РАБОТЫ В ШКОЛЬНОЙ ГЕОГРАФИИ

Аннотация

В статье рассматриваются современные подходы к организации туризма и краеведения в школьной географии. Туризм и краеведение являются важным инструментом для развития у учащихся географических знаний и понимания культурного и природного наследия. Авторы подчёркивают роль туризма и краеведения в предотвращении гиподинамии, вовлечении учащихся в активные исследовательские мероприятия и повышении их познавательного интереса. Рассматриваются вопросы углубления географических знаний и формирования