

ОСНОВЫ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ СТУДЕНТОВ СПЕЦИАЛЬНОСТИ «ХИМИЯ. ФАРМАЦЕВТИЧЕСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ»

Севрук А.Б., Глузд Г.А.

Белорусский государственный университет, г. Минск

Студенты химического факультета – будущие фармацевты знакомятся с основами информационных технологий на первом году обучения. В дальнейшем им предстоит прослушать и другие курсы, связанные с применением баз данных и экспертных систем в химии – «Информационные технологии в химии» и с получением специализированной информации с помощью разнообразных поисковых систем – «Основы информационного поиска». К сожалению, программами подготовки будущих фармацевтов, в отличие от студентов других специальностей химического факультета, не предусмотрено изучение курса математического моделирования химических процессов. Между тем математические модели в изобилии встречаются в курсах аналитической, физической и радиационной химии. Многие выдающиеся достижения современной фармацевтической химии, сделанные, в том числе и белорусскими учеными [1], стали возможны лишь благодаря математическому моделированию и привели к созданию лекарственных средств и препаратов, спасших многие человеческие жизни. Указанные достоинства и недостатки подготовки студентов предопределили состав и содержание курса, читаемого авторами. Одним из главных недостатков в подготовке вчерашнего школьника является недостаточный уровень развития алгоритмического мышления, столь необходимого будущему специалисту уже на этапе обучения. Также студентов необходимо обучить методам грамотной работы с современным прикладным программным обеспечением, позволяющим форматировать тексты учебного и научного химико-фармацевтического содержания, внедрять в них с помощью OLE технологии химические и математические формулы, строить графики, анализировать их и проводить автоматизированные расчеты на основе экспериментальных данных. Поясним сказанное на конкретных примерах задач, которые предлагаются студентам:

Задача № 1. В файле Задание_№_ВашаФамилия.doc с помощью меню *Найти и заменить* исправить ошибки верстки в тексте и таблице с данными, относящимися к титрованию 50.0 см^3 сильной кислоты (HCl) концентрации 0.10 моль/дм^3 сильным основанием (NaOH).

Работа с меню *Найти и заменить* для автоматизированного исправления ошибок верстки является первым шагом в обучении студентов составлению и применению алгоритмов [2]. Отметим важность навыка автоматизированного исправления ошибок набора, копирования и верстки, поскольку наличие переходных и специальных символов в таблицах не позволяет корректно

проводить расчеты с помощью вычисляемых полей и построить средствами модуля Microsoft Graph диаграмму или график на основе табличных данных.

Задача № 2. На основе табличных данных, например, приведенных в «Таблица 1. Титрование 50.0 см^3 сильной кислоты HCl концентрации 0.10 моль/дм^3 сильным основанием NaOH», с помощью модуля Microsoft Graph, внедрить объект точечная диаграмма – график в координатах V-pH, относящийся к титрованию 50.0 см^3 сильной кислоты (HCl) концентрации 0.10 моль/дм^3 сильным основанием (NaOH). Объект отформатировать строго по правилам указанным в лекции, под объектом добавить название «Рисунок 1. График титрования 50.0 см^3 сильной кислоты HCl концентрации 0.10 моль/дм^3 сильным основанием NaOH», оформленное специальным стилем *название*.

В данной задаче студент должен научиться, не только строить таблицы, графики и диаграммы, но и правильно их оформлять с помощью специального стиля *Название* в соответствии с принятыми стандартами [3].

Задача № 3. Средствами редактора химических формул Symyx Draw, внедрить в документ, после графика, формулу – уравнение химической реакции сильной кислоты (HCl) и сильного основания (NaOH). Формулу выровнять по центру горизонтальной разметки документа. Под формулой добавить название Формула 1, оформленное специальным стилем *название*.

Умение работать с редакторами химических формул необходимо любому специалисту-химику. Для будущего фармацевта это особо актуально, ведь ему придется иметь дело с органическими веществами, химические обозначения которых чрезвычайно сложны могут занимать половину листа А4. Среди прочих заданий студентам предлагаются более сложные формулы реакций, используемых при фармацевтическом анализе лекарственных средств. Ключевую роль в методике преподавания данной темы играет, на наш взгляд, наглядность и последовательность изложения основных этапов и приемов работы в редакторе химических формул Symyx Draw. Студентам демонстрируется на лекции десятиминутный видеофильм, который размещен на сервере УЦИТ химического факультета и доступен для скачивания, как и все остальные учебно-методические и справочные материалы, – лекции-презентации, сборники задач, комплекты лабораторных работ, справочники физико-химических величин, врачебной рецептуры, лекарственных препаратов.

Задача № 4. Средствами редактора математических формул Microsoft Equation 3.0 внедрить в документ, после формулы – уравнения химической реакции сильной кислоты (HCl) и сильного основания (NaOH), формулу для вычисления величины значения концентрации (в моль/дм^3) основания (NaOH) в точке конца титрования. Формулу выровнять по центру горизонтальной разметки документа. Добавить порядковый номер справа от формулы в круглых скобках.

Студента надо познакомить со спецификой текстов химико-фармацевтического содержания, например, касающихся потенциометрического анализа лекарственных средств, где химические формулы необходимо

встречаются вместе с математическими. Задачи № 3 и № 4 представляют собой простейшие примеры, требующие от студента знания уравнения реакции сильной кислоты (HCl) и сильного основания (NaOH), формул для вычисления значения величины концентрации (в моль/дм³) основания (NaOH) в точке конца титрования, умения правильно задавать стиль используемых буквенных и числовых обозначений скалярных величин и функций, химических констант и соединений.

Задача № 5. По графику определить значение pH в точке конца титрования. Построить таблицу, содержащую все необходимые исходные данные, и с помощью вычисляемых полей в таблице (формул в таблице) вычислить значения величины концентрации (в моль/дм³) основания (NaOH).

При решении данной задачи студенту предстоит научиться анализировать уже корректно обработанные в предыдущих задачах графические данные. Сделать вывод о том, что точка конца титрования будет находиться там, где резко изменяется значение pH и по графику определить его. Подобный метод определения уровня pH раствора в точке конца титрования применим в случаях титрования сильных кислот сильным основанием, слабой кислоты сильным основанием, слабого основания сильной кислотой. При этом следует учитывать, что в других случаях реакция будет обратимой и уровень pH окажется больше или меньше 7. Здесь следует подчеркнуть важный методический аспект преподавания дисциплины, которого, к сожалению, лишены многие другие учебные курсы, – это наличие вариантов лабораторных и контрольных заданий, индивидуальных и творческих заданий. Даже в приведенных выше пяти задачах всегда можно изменить условия, предложив, к примеру, определить pH раствора слабого основания и сильной кислоты в точке конца титрования, которые, как и исходные данные в Таблице 1, студент может подобрать самостоятельно с использованием справочной и методической литературы. Расчет значения величины концентрации с помощью вычисляемых полей в таблице позволяет полностью автоматизировать вычисления и обеспечивает возможность проверки результатов на всех основных этапах.

Успешно решив задачи № 1 – № 5, студенты впервые средствами прикладного программного обеспечения создают свой первый интуитивно понятный графический интерфейс пользователя, предназначенный для решения конкретной химической задачи. После изменения исходных данных, этот интерфейс может быть использован для решения целого класса химических задач и представляет собой простейшую информационно-математическую модель химического процесса.

В заключение отметим, что применение компьютерных математических моделей позволяет значительно повысить производительность работы химика, фармацевта и эколога, выводит на новый уровень организацию и проведение научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ, стимулирует развитие инновационной и производственной деятельности по наиболее актуальным проблемам химических и смежных наук.

Литература

1. Севрук, Б.Б. Математическая модель радиационной деструкции декстрана. / П.Т. Петров, Б.Б. Севрук, С.В. Маркевич // Доклады АН БССР. – 1982. – Т. 26, № 7. – С. 632–634.
2. Барвенов, С.А. Методические рекомендации по лабораторному практикуму MicrosoftWord. Пособие для студентов-правоведов / С.А. Барвенов. – Минск: БГУ, 2010. – 50 с.
3. Савицкая, Т.А. Коллоидная химия: Методическое пособие для студентов химического факультета / Т.А. Савицкая. – Минск: БГУ, 2008.