

Г.О.Лезенко,  
канд. хім. наук, доцент  
[lezenko@ukr.net](mailto:lezenko@ukr.net)  
О.М.Міронников,  
канд. хім. наук, доцент,  
[masajist@ukr.net](mailto:masajist@ukr.net)  
Л.С.Воловик,  
канд. хім. наук, доцент  
[mekomkiev@rambler.ru](mailto:mekomkiev@rambler.ru)

Національний університет харчової промисловості, м.Київ

## **ВИКОРИСТАННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО ТРЕНАЖЕРА В КУРСІ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ МЕТОДІВ АНАЛІЗУ ДЛЯ СТУДЕНТІВ-ТЕХНОЛОГІВ ХАРЧОВОЇ ПРОМИСЛОВОСТІ**

Вимоги до підвищення якості інженерної освіти передбачають фундаменталізацію та використання сучасних прогресивних методів досліджень при підготовці фахівців інженерного профілю. Для майбутніх інженерів харчових виробництв виключно важливе значення має засвоєння хімічних дисциплін, зокрема органічної хімії та методів якісного і кількісного аналізу складу і будови органічних сполук

Сучасна органічна хімія широко використовує фізичні та фізико-хімічні методи досліджень для вивчення будови молекул органічних сполук. Ці методи досить чисельні й різноманітні, але найбільш ефективними і найчастіше використовуваними серед них слід вважати спектроскопічні методи, зокрема оптичну спектроскопію (електронні та коливальні спектри), спектроскопію ЯМР, мас-спектрометрію тощо.

Науковцям-дослідникам добре відомі ті можливості, що відкриваються при застосуванні цих методів, особливо для вивчення будови складних органічних сполук, де в цілому ряді випадків важливі успіхи були досягнуті виключно завдяки

застосуванню спектроскопії. Удосконалення автоматичних спектрометрів здійснило переворот у методах визначення структури органічних сполук.

У наш час у програми майже всіх вищих навчальних закладів введено розгляд спектроскопічних методів. Оскільки прикладна спектроскопія є наукою, в основному, емпіричною, то після засвоєння студентами теоретичних основ різних видів спектроскопії, зокрема фізичних принципів, що забезпечують базу для подальшого вдосконалення в цій галузі знань, необхідно закріпити одержані знання практичними навичками. Процес навчання здійснюється найбільш успішно, якщо він супроводжується застосуванням набутих знань до розгляду конкретних задач.

З іншого боку, придбання відповідної апаратури обмежується фінансовими можливостями вищих навчальних закладів, особливо тоді, коли мова йде про сучасні ЯМР-спектрометри та мас-спектрометри, які коштують сотні тисяч доларів.

Тому виникає потреба у створенні тренажерів, що моделюють функції зазначених приладів, а методи і прийоми роботи з ними максимально наближені до операцій, що виконуються при використанні відповідних спектрометрів.

Нами запропоновано на практичних заняттях з фізико-хімічних методів аналізу при засвоєнні теоретичних основ методу ЯМР і застосування ЯМР (ПМР) - спектроскопії для встановлення структури органічних сполук використовувати комп'ютерний тренажер на основі програми FELIX.

Програма надає можливість off-line – оперування як з реальними, так і з уявними спектрами, як побудови ЯМР-спектрів відповідно даним про структуру молекул сполуки, так і встановлення структури за даними про ЯМР (ПМР) – спектри, одержані при різних сполученнях параметрів їх зйомки.

На перших етапах роботи студенту пропонуються ЯМР

(ПМР) - спектри відомих речовин і необхідні довідкові дані (зокрема константи спин-спінової взаємодії).

Змінюючи умови зйомки спектру (напруженість зовнішнього магнітного поля, частоту, швидкість розгортки спектру, тип розчинника, концентрацію досліджуваної речовини) введенням з клавіатури або з допомогою „мишки“, студент має можливість наочно спостерігати залежність спектрів ЯМР (які з'являються при цьому на дисплеї) від умов зйомки, тобто вплив зазначених чинників на такі спектральні характеристики, як інтегральна інтенсивність, форма (структура) сигналів, мультиплетність тощо.

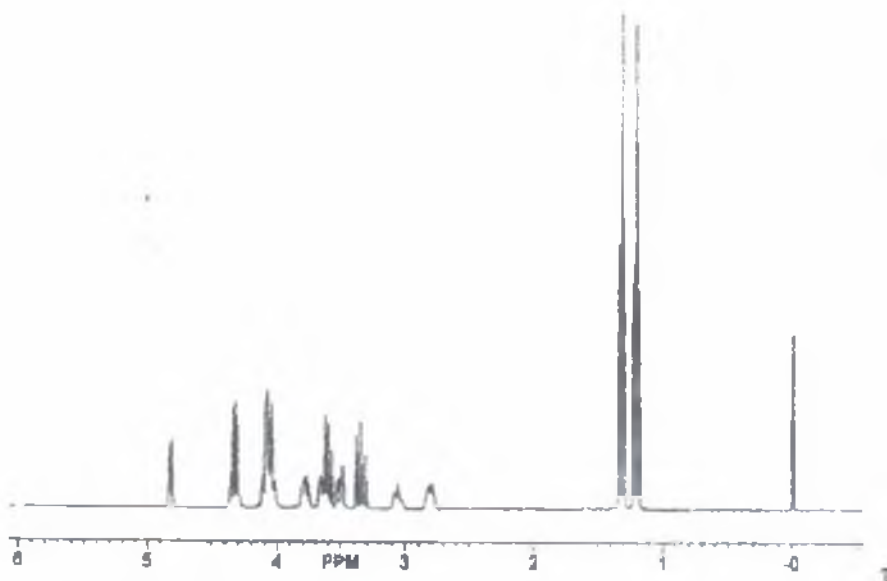


Рис.1. Спектр ПМР невідомої речовини;  
стандартна сполука – ТМС (тетраметилсилан); шкала  $\tau$  – у м.ч.

Подальша робота полягає у розгляді найтипівіпших випадків застосування ЯМР для структурного аналізу, а саме: для остаточного підтвердження вже відомої гаданої формули

речовини; для доведення чистоти препарату; для встановлення структури, якщо є додаткові відомості про речовину – її якісний склад, брутто-формулу, дані про природу, походження та деякі хімічні властивості; для одержання часткових даних про структуру, якщо ЯМР-спектр є первинним джерелом інформації про невідому речовину.

На останньому – контрольному – етапі роботи студент має розшифрувати ЯМР-спектри невідомих речовин і встановити будову їх молекул.

На рис. 1 наведено приклад спектру ЯМР довільно обраної речовини, для якої студент, користуючись довідковими даними і константами (які передбачаються програмою), може за положенням окремих сигналів у запропонованому спектрі та за їх формою, а також інтенсивністю в зазначених умовах зробити висновки про наявність у сполучі певних атомних угруповань і про їх взаємне розташування – тобто про структуру молекули цієї сполуки.

Запропонований комп'ютерний тренажер може бути використаний як для самостійної роботи студентів, так і для контролю їх знань.

Поширення дистанційної форми навчання відкриває нові можливості використання цієї розробки: як тренувальний блок, так і контрольні завдання та відповіді студентів на ці завдання нескладно передавати з допомогою мережі Internet.

Якщо виникає необхідність подання письмового звіту, то в цьому разі програмою передбачене роздрукування поетапно одержаних спектральних даних (відповідно заданим параметрам), а також коментарів та висновків до них.

У перспективі можливе створення подібних програм для засвоєння інших, зокрема спектральних, методів фізичних досліджень у курсі фізико-хімічних методів аналізу.