

УДК 373.5.016:004

ВИВЧЕННЯ ХІМІЧНИХ РЕДАКТОРІВ У ШКОЛІ

Підгорна Тетяна Володимирівна,

доцент кафедри інформаційних технологій і програмування Національного педагогічного університету імені М. П. Драгоманова, кандидат педагогічних наук, доцент, dtv@ukr.net.

Анотація. У статті наведено призначення й основні функції хімічних редакторів. Пропонується вивчення окремих функцій хімічних редакторів на уроках інформатики в класах з поглибленим вивченням хімії.

Ключові слова: хімічний редактор, функції хімічних редакторів, практичні справи для опанування хімічних редакторів.



Наприкінці ХХ, початку ХХІ століття сформовані нові вимоги до змісту і якості освіти, зумовлені передусім феноменом інформаційного суспільства, інтенсивним розвитком його технологій.

Концепція модернізації української освіти передбачає запровадження профільного навчання в старшій школі. Метою здійснення профільного навчання є створення умов для освіти старшокласників з урахуванням їхніх нахилів і здібностей, для навчання у відповідно до профільних інтересів і намірів щодо продовження освіти. Інформатика перебуває зараз у першому ряду шкільних навчальних предметів, зміст яких уже досить широко диференційовано залежно від профілю навчання.

Велика кількість науковців, серед яких Жалдак М.І., Морзе Н.В., Рамський Ю.С., Лапінський В.В., Гуржій А.М. та інші, у своїх дослідженнях приділяють увагу змісту навчання інформатики в старшій профільній школі з урахуванням особливостей профілю навчання. Однак, особливостям навчання інформатики в класах з поглибленим вивченням хімії приділено не достатньо уваги.

Враховуючи сучасний рівень розвитку і використання інформаційно-комунікаційних технологій, майбутні фахівці з хімії повинні володіти сучасною термінологією, що пов'язана з використанням ІКТ в хімічних дослідженнях, мати уявлення про подання хімічних даних за допомогою комп'ютерної техніки, уміти використовувати комп'ютерні моделі в дослідженнях, здійснювати ефективний пошук потрібних відомостей в інформаційних ресурсах мережі Інтернет.

На початковому етапі формування в учнів інформаційних компетентностей у галузі хімічних досліджень доцільно ознайомити їх із створенням структурних формул за допомогою хімічних редакторів. Розглянемо методику вивчення функцій хімічних редакторів.

Тексти, що містять хімічні формули, неможливо створити, використовуючи текстові редактори і процесори загального призначення. У цьому випадку можна використовувати спеціальні програми — хімічні редактори.

Хімічний редактор — програма для опису і редагування хімічних формул, візуалізації тривимірних моделей молекул.

Основні функції хімічних редакторів:

- опис і редагування структурних формул речовин;
- генерування систематичних назв речовин;

- генерування структурної формули за кодами SMILES, InChI, InChIKey і навпаки;
- обчислення деяких властивостей структури;
- перегляд тривимірної моделі структури;
- визначення за тривимірною моделлю структури деяких геометричних параметрів молекули, наприклад, довжини зв'язку, кута між зв'язками тощо;
- створення і редагування векторних графічних зображень [1].

Як і будь-яке інше програмне забезпечення, хімічні редактори розповсюджуються як на платній основі (комерційні), так і безкоштовно.

До комерційних хімічних редакторів відносять: Chem Office Ultra, Chem Window, Chem DrawPro, ChemPen, а до вільно поширюваних — ISIS Draw, Marvin Beans, пакет ACD/Labs.

ПАКЕТ ACD/LABS

Одним з найпоширеніших хімічних редакторів є пакет програм ACD/Labs.

ACD/Labs — пакет (вільнопоширюваний), розроблений Advanced Chemistry Development, для опису структурних формул речовин, схематичних діаграм, здійснення обчислень хімічних властивостей речовин, створення тривимірних моделей молекул.

Пакет ACD/Labs складається з автономних, але взаємопов'язаних програм:

- **ACD/Chem Sketch** — редактор структурних формул речовин і графічний редактор;
- **ACD/3D Viewer** — програма моделювання і візуалізації тривимірних моделей молекул;
- **додаткові модулі** — модулі для розширення можливостей використання ACD/Chem Sketch (деякі з них потрібно купити окремо).

Для встановлення пакета на локальному комп'ютері потрібно завантажити дистрибутив програми із сайту компанії Advanced Chemistry Development (ACD) за веб-адресою www.acdlabs.com.

1. ACD/Chem Sketch

Завантажити програму можна за допомогою головного меню операційної системи, наприклад, Пуск/ACDLABS12.0/ChemSketch.

Вигляд головного вікна програми і призначення елементів вікна подано на рис. 1.

Заголовок вікна містить ім'я програми, ім'я відкритого файлу (ім'я файлу за замовчуванням NONAME.XX.SK2, де 'XX' — порядковий номер файлу, що почи-

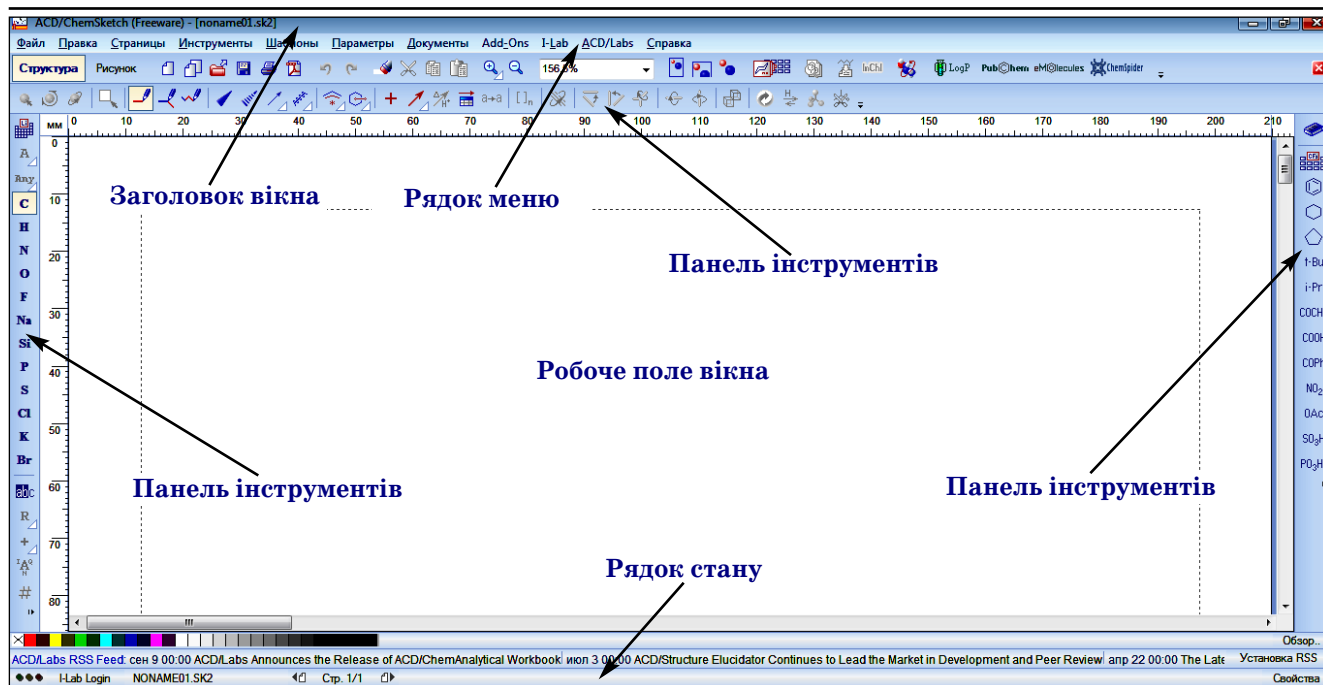


Рис. 1

нається від 00), і трьох маленьких кнопок, за допомогою яких змінюється розмір і розташування вікна. За допомогою системної кнопки викликаються команди для зміни розмірів вікна. Деякі з них викликаються за допомогою кнопок, розташованих на заголовку вікна. Програму Chem Sketch можна використовувати у двох режимах: **Структура** і **Рисунок**.

Структура — редактор формул молекул (атоми, що зображуються, і хімічні зв'язки є елементами хімічних структур і мають відповідні властивості);

Рисунок — графічний редактор (всі елементи, що зображені, є частинами графічного зображення).

Для перемикавання між режимами використовують кнопки **Структура** та **Рисунок** або клавішу **Пропуск** (рис. 2).

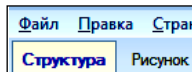


Рис. 2

Робота в режимі Структура

Після завантаження програми автоматично встановлюється режим **Структура** (рис 3).

Розглянемо приклади вправ, що можна використовувати для формування практичних умінь щодо використання хімічних редакторів.

Вправи

1. Визначити, які відомості про хімічні елементи можна дізнатися, використовуючи інструмент **Периодическая система элементов им. Д. И. Менделеева**.

Виконання. Відкрити вікно **Периодическая система химических элементов им. Д. И. Менделеева** за допомогою команди **Шаблоны/Периодическая система им. Д. И. Менделеева** (рис. 4). Використовуючи кнопку **Показать фотографии элементов** та вкладки

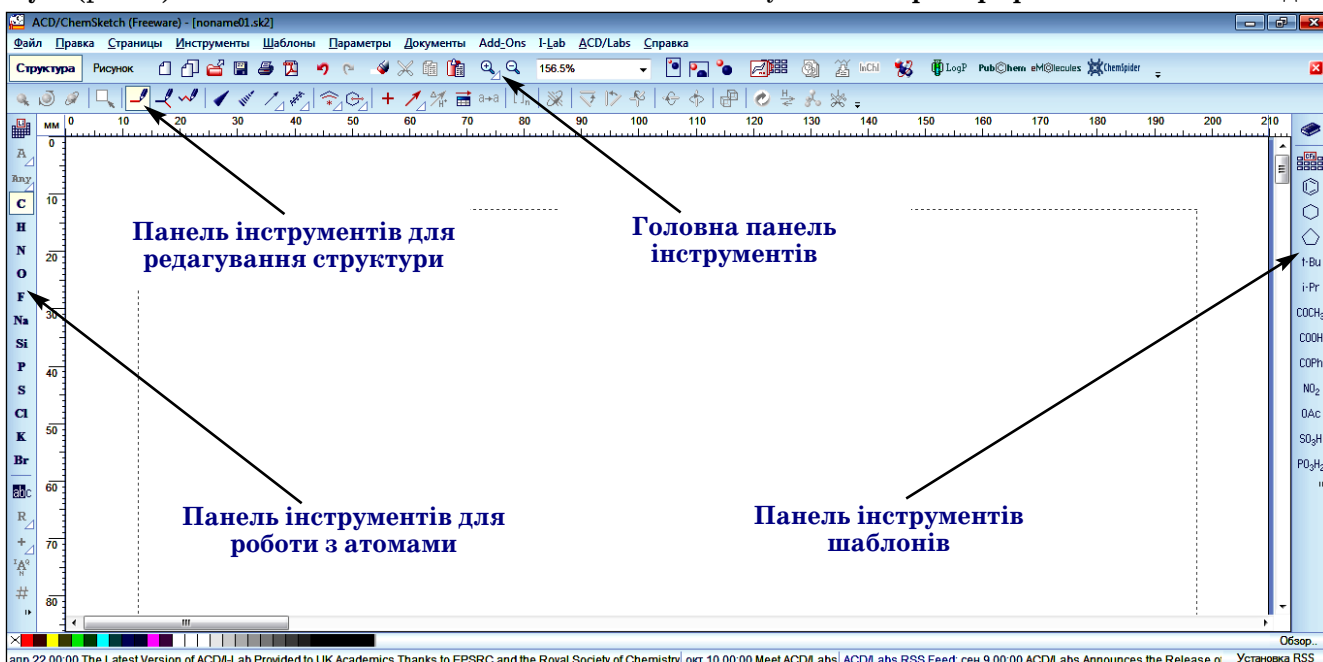


Рис. 3

Общие, ЯМР (рис. 5), Масса (рис. 6), Окраска (рис. 7) визначити, які відомості можна отримати за допомогою даного інструмента.

Периодическая система химических элементов им. Д.И. Менделеева

Фтор

Масса: 18.9984032
Валентность: 1
Электронная конфигурация: 2-7

Общие ЯМР Масса Окраска

Описание: green-yellow gas, poisonous
Открытие: 1886, H. Moissan, France
Название: from 'fluere' (Latin) - to flow
Атомный радиус, Å: 0.67 Температура плавления, К: 54 Плотность, г/л: 1.7
Электроотрицательность: 3.98 Температура кипения, К: 85

Рис. 4

Изотоп	Спин	%	Магн. момент	Магн. отнош.	Q	Частота	Восприимчив.
19	1/2	100	4.553333000	25.18148	0	94.094011	0.834

Рис. 5

Изотоп	%	Масса	Изотоп	%	Масса	Изотоп	%	Масса
[18]	0	18.000937						
19	100	18.9984032						
[20]	0	19.999981						

Рис. 6

Общие ЯМР Масса Окраска

Схема окраски

☒ Классический ☐ Радиоактивность

☐ Агрегатное состояние ☐ Нет

☐ Металлы/Неметаллы

1s Блок d Блок

s Блок f Блок

p Блок

Рис. 7

2. Записати структурну формулу молекули бутанолу та її систематичну назву:

2.1. Записати структурну формулу молекули бутанолу.

Виконання. На рис. 8 показано покрокове виконання вправи (інструмент і результат його використання):

а) вибрати інструмент **Рисовать нормально** і створити один вуглецевий ланцюг з групи атомів H_3C : вибрати місце розташування групи атомів H_3C і натиснути ліву клавішу мишки;

б) вибрати інструмент **Рисовать нормально** і створити чотири вуглецевих ланцюги з групами атомів H_3C : від попередньої групи атомів H_3C «протягнути» зв'язок до місця розташування наступної групи, тримаючи натиснутою ліву клавішу мишки, остання група з'являється автоматично;

в) вибрати інструмент **Упорядочить структуру** для стандартизації форми запису структурної формули: після вибору інструмента **Упорядочить структуру** записи всіх структур, що є на робочому полі, буде стандартизовано;

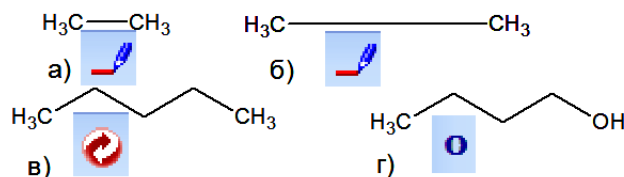


Рис. 8

г) вибрати інструмент **Кислород** і замінити праву групу H_3C на функціональну групу OH : підвести курсор мишки до групи H_3C і натиснути ліву клавішу мишки.

2.2. Згенерувати назву за номенклатурою **ИЮПАК** структури (рис. 9).

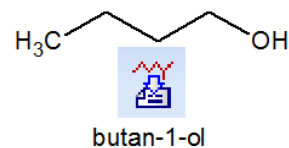


Рис. 9

Виконання. Досить вибрати інструмент **Генерировать название для структуры**.

2.3. Використовуючи відповідні команди з меню **Инструменты** згенерувати коди **SMILES** і **InChI**, відомості про структуру, структури з кодів **SMILES** і **InChI** та порівняти отримані результати з початковими структурами.

Виконання. Спочатку потрібно відмітити структурну формулу бутанолу за допомогою інструмента **Лассо ВКЛ/ВЫКЛ**, а потім, поступово вибираючи команди **Инструменты/Генерировать/Строку СМАЙЛОВ**, **Инструменты/Генерировать/InChI** для структури, **Инструменты/Рассчитать/Все свойства**, згенерувати відповідні відомості про бутанол (рис. 10).

butan-1-ol

CCCCO

InChI=1/C4H10O/c1-2-3-4-5/h5H,2-4H2,1H3

Результаты вычисления

Молекулярная формула = C4H10O
Молекулярная масса = 74.1216
Состав = C(64.82%) H(13.60%) O(21.59%)
Molar Refractivity = 22.11 ± 0.3 cm³
Molar Volume = 52.0 ± 3.0 cm³
Parachor = 208.0 ± 4.0 cm³
Index of Refraction = 1.395 ± 0.02
Surface Tension = 26.0 ± 3.0 dyne/cm
Density = 0.805 ± 0.06 g/cm³
Dielectric Constant = Не доступно
Polarizability = 8.76 ± 0.510-24 cm³
Monoisotopic Mass = 74.073165 Da
Nominal Mass = 74 Da

Рис. 10

3. Створити структурну формулу бензойної кислоти та її систематичну назву:

3.1. Створити структурну формулу бензойної кислоти.

Виконання. На рис. 11 показано покрокове виконання вправи (інструмент і результат використання інструменту):

а) вибрати інструмент **Benzene** і створити бензольне кільце: вибрати місце розташування і натиснути ліву клавішу мишки;

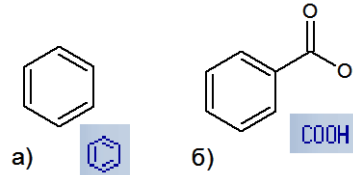


Рис. 11

б) вибрати інструмент **Carboxyl** і додати групу $COOH$ до бензольного кільця: вибрати місце розташування і натиснути ліву клавішу мишки;

3.2. Згенерувати систематичну назву (рис. 12).

Виконання. Досить вибрати інструмент **Генерировать название для структуры**.

3.3. Використовуючи відповідні команди з меню **Инструменты** згенерувати коди **SMILES** (simplified molecular input line entry system) — спосіб відображен-

ня молекулярного графа у лінійній формі (у вигляді рядка буквенно-цифрових символів), і InChi (IUPAC International Chemical Identifier) — міжнародний текстовий ідентифікатор хімічних об'єктів, комп'ютеризований варіант систематичного каталогу, відомості про структуру, структури з кодів SMILES і InChi та порівняти отримані результати з початковими структурами.

Виконання. Спочатку потрібно відмітити структурну формулу за допомогою інструмента **Лассо ВКЛ/ВЫКЛ**, а потім, поступово вибираючи команди **Інструменти/Генерировать/Строку СМАЙЛОВ**, **Інструменти/Генерировать/InChi** для структури, **Інструменти/Рассчитать/Все свойства**, згенерувати відповідні відомості (рис. 13).

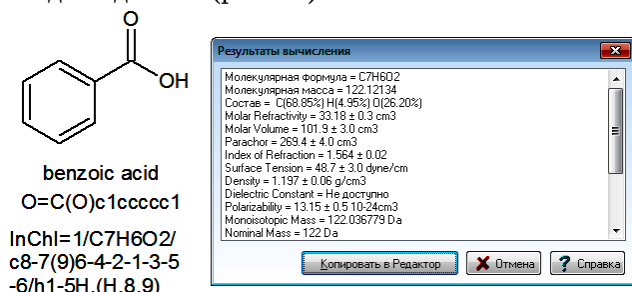


Рис. 13

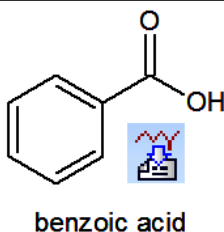


Рис. 12

4. Створити ланцюг полімерів.

Виконання:

а) створити ланцюг CH3(CH2)5CH3, вибрати інструмент **Рисовать цепи** і за натисненої лівої клавіші мишки створити зображення шести ланцюгів структури;

б) вибрати інструмент **Полимери**;

в) встановити такі значення параметрів вікна: **Указатель** — n, **Соединение** — head-to-tail, **Стиль** — [];

г) вибрати за допомогою мишки початковий і кінцевий зв'язок ланцюга полімера (рис. 14).

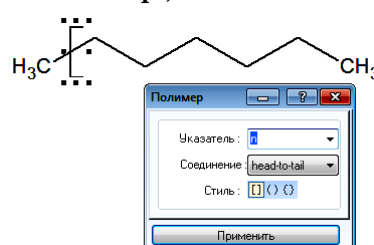


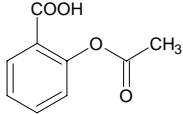
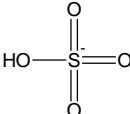
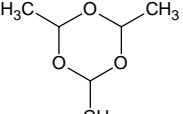
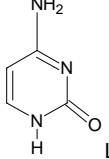
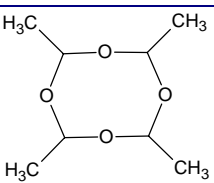
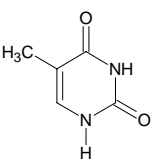
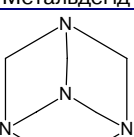
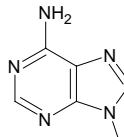
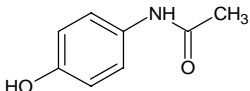
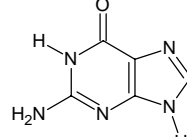
Рис. 14

Завдання для самостійного виконання

Створити структурні формули за їх назвами і виконати з ними такі дії:

- оптимізувати їх запис за допомогою відповідного інструменту;
- згенерувати їх систематичну назву. Чи співпадає отримана назва із заданою?
- згенерувати код InChi;
- згенерувати код SMILES;
- розрахувати хімічні властивості для даної речовини. Варіанти завдань подано в таблиці 1.

Таблиця 1

Варіант	Назва структури та її формула	Варіант	Назва структури та її формула
1	 <p>Аспірин</p>	6	 <p>Сірчана кислота</p>
2	 <p>Паральдегід</p>	7	 <p>Цитозин</p>
3	 <p>Метальдегід</p>	8	 <p>Тимін</p>
4	 <p>Уротропін</p>	9	 <p>Аденін</p>
5	 <p>Парацетамол</p>	10	 <p>Гуанін</p>

Робота в режимі Рисунок

У режимі **Рисунок** (рис. 15) користувач працює з інструментами для роботи з векторними зображеннями, які розглядаються як сукупність кривих.

Розглянемо приклади вправ, що виконуються в режимі **Рисунок**.

Вправи

1. Схематично зобразити графік залежності параметрів проходження реакції: на рис.16 показано покрокове виконання завдання, відповідні інструменти і результати їх застосування.

Виконання:

а) вибрати інструмент **Полилиния** і створити криву: натиснути ліву клавішу мишки і встановити перший вузол кривої, не відпускаючи ліву клавішу мишки, створити форму сегмента кривої і відпустити ліву клавішу мишки; вибрати положення наступного вузла і натиснути ліву клавішу мишки і не відпускаючи її, створити форму наступного сегмента; аналогічно створюються всі сегменти кривої; для завершення створення кривої потрібно здійснити подвійне натиснення лівої клавіші мишки;

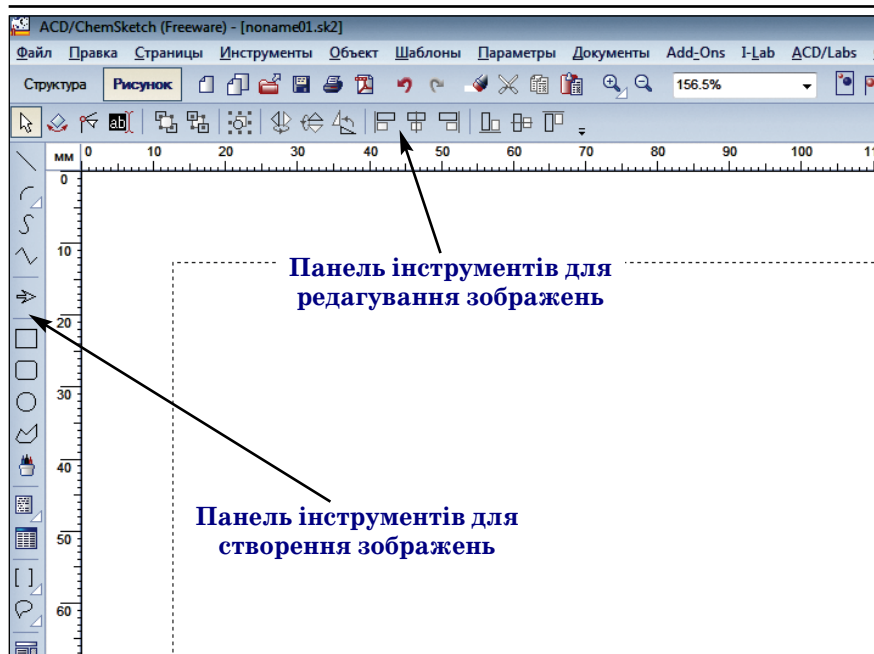


Рис. 15

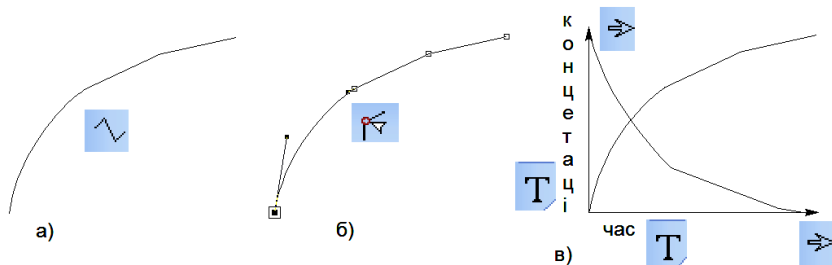


Рис. 16

б) вибрати інструмент **Изменить узлы** і по черзі вибрати вузли кривої, і за допомогою ручок управління скоригувати форму кривої: потрібно вибрати вузол і, змінюючи положення ручки управління за натисненої лівої клавіші мишки, скорегувати форму відповідного сегмента;

в) вибрати інструмент **Стрелка** і створити зображення осей координат: вибрати положення початку прямої і натиснути ліву клавішу мишки, не відпускаючи клавішу мишки, вибрати положення кінця прямої і відпустити клавішу мишки; вибрати інструмент **Артистический текст** і створити підписи

осей координат: вибрати інструмент і місцеположення тексту, натиснувши ліву клавішу мишки; у створеному полі набрати текст за допомогою клавіатури.

2. Створити зображення орбіталей молекули: на рис. 17 показано покрокове виконання завдання, відповідні інструменти і результати їх застосування.

Виконання:

а) вибрати бібліотеку шаблонів, що викликається за допомогою команди **Шаблоны/Окно шаблонов.../Orbitals** вставити 4 зображення орбіталей у вигляді несиметричних восьмирок;

б) вибрати інструмент **Выделить/Переместить/Повернуть** і повернути вставлені зображення орбіталей на потрібний кут: відмітити потрібне зображення і підвести курсор мишки до точки зміни кута положення зображення. Курсор змінить свій вигляд на дугу з двосторонньою стрілкою. Натиснути ліву клавішу мишки і змінити положення зображення. Далі потрібно «перемістити» зображення-орбіталей атомів карбону, встановивши точку їх перетину в ядрі карбону;

в) розташувати зображення орбіталей електронів атому карбону на другому плані: відмітити створені зображення орбіталей за допомогою інструменту **Выделить/Переместить/Изменить размер** і вибрати інструмент **На задний план**;

г) вибрати бібліотеку шаблонів, що викликається за допомогою команди **Шаблоны/Окно шаблонов.../Orbitals**, вставити 4 зображення атомів гідрогену у вигляді куль;

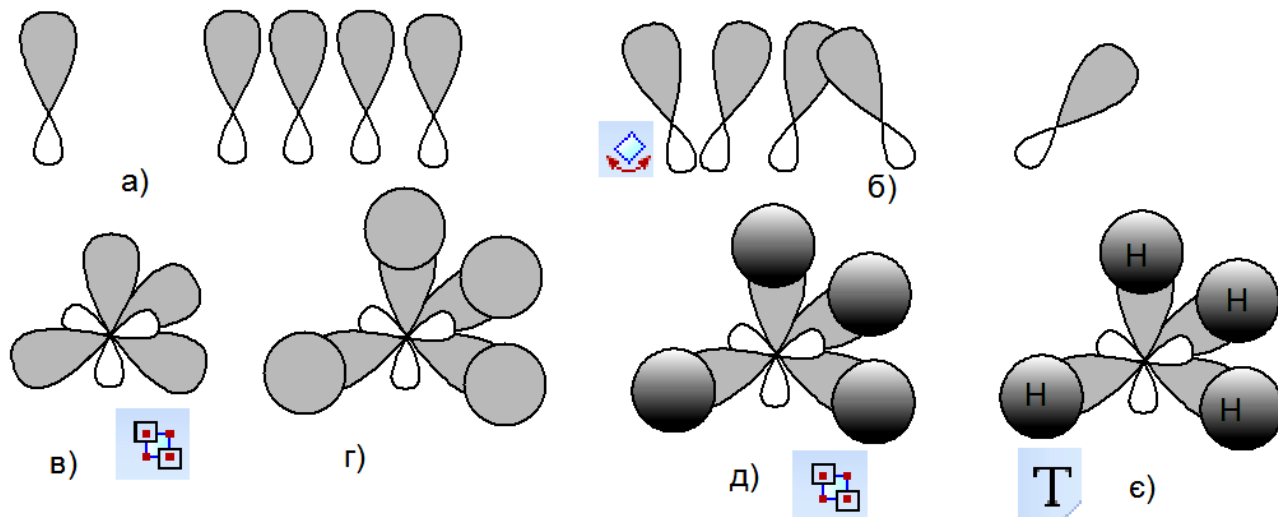


Рис. 17

д) за допомогою інструментів **На передній план** і **На задній план** визначити порядок розташування зображень орбіталей у молекулі метану аналогічно до пункту в) даної вправи; за допомогою інструменту **Інструменти/Стиль заливки** визначити стиль заливання **Тень** для зображень атомів гідрогену в молекулі метану;

е) вибрати інструмент **Артистический текст** і вставити підписи для зображень атомів гідрогену.

Завдання для самостійного виконання

1. Створити схематичне зображення графіка залежності від температури розчинності речовин у воді. Варіанти завдань подано в таблиці 2.

Таблиця 2

Варіант	Назва речовини
1	NH_4NO_3
2	NaNO_3
3	KNO_3
4	KBr
5	NH_4Cl
6	NaCl
7	KClO_3
8	Сульфур(VI) оксид
9	Хлороводень
10	Аміак

2. Створити ілюстрацію орбіталей атомів речовин:

- σ -зв'язок та π -зв'язок в молекулі азоту;
- sp^3 -гібридизацію атома карбону;
- sp^2 -гібридизацію атома карбону;
- sp -гібридизацію атома карбону;
- p - π спряження;
- π - π спряження;
- σ - π спряження;
- циклічне π - π спряження;
- електронну будову молекули фенолу;
- електронну будову молекули формальдегіду.

2. Програма 3D Viewer

До складу пакету ACD/Labs входить програма 3D Viewer, за допомогою якої можна здійснювати:

- обертання 3D-моделей молекул у різних площинах, зміну розміру атомів, зміну стилів відображення молекули;
 - відображення 3D-моделі молекули у вигляді дротів, стержнів, стержнів і куль, куль;
 - додавати відображення в 3D-моделі молекули меж дії сил Ван-дер-Ваальса у вигляді малих точок;
 - вимірювання і зміну довжин зв'язків, кутів між площинами зв'язків і торсіонних кутів;
 - оптимізацію подання 3D-моделі молекули з використанням силового поля типу 3-D CHARMM;
 - перемикавання між 2D-і 3D поданням моделей молекул;
 - перегляд 3D-моделі молекули в перспективі;
 - створення анімованих файлів із зображенням 3D-моделі молекули у форматі GIF (формат для зберігання графічних та анімованих зображень; анімовані зображення зберігаються у вигляді кількох статичних графічних зображень і відомостей про час, протягом якого кожний кадр повинен бути відображений на екрані);
 - експорт 3D-моделі молекули в інші програми.
- На рис. 18 подано вікно програми 3D Viewer.

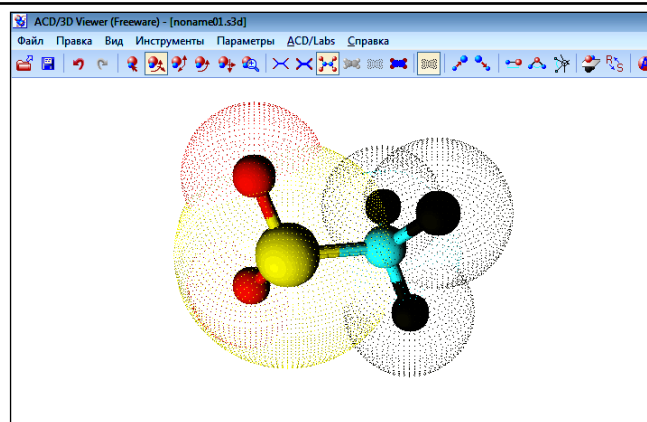


Рис. 18

Для створення тривимірної моделі молекули потрібно в ACD/ChemSketch в режимі **Структура** записати структурну формулу речовини і перейти до 3D Viewer для перегляду моделі молекули.

Завдання для самостійного виконання

Створити тривимірні моделі молекул.

Варіанти завдань:

- Етилен, цис-Бут-2-ен, транс-Бут-2-ен.
- Пропін, бут-2-ин2, вінілхлорид.
- Пропан-1,2-дієн, дивініл, ізопрен.
- Натуральний каучук, штучний каучук, гума.
- Бензол, нітробензол, бром бензол.
- Стирол, нафталін, антрацен.
- Фторетан, хлоретил, йодпропан.
- Фенол, ацетон, кумол.
- Метаналь, етаналь, пентаналь.
- Кислоти мурашина, оцтова, масляна.

Після ознайомлення з функціями хімічних редакторів учні будуть вміти не тільки створювати структурні формули та тривимірні моделі молекул, а також генерувати коди SMILES, InChI, InChIKey (короткий варіант коду InChI), що можна використовувати як запити в пошукових системах для знаходження відомостей про речовини за **структурними формулами**.

* * *

Подгорная Т. В. Изучение химических редакторов в школе

Аннотация. В статье рассматривается назначение и основные функции химических редакторов. Предлагается изучение отдельных функций химических редакторов на уроках информатики в классах с углубленным изучением химии.

Ключевые слова: химический редактор, функции химических редакторов, практические упражнения для изучения химических редакторов.

* * *

Pidhorna Tetiana V. Study of the chemical editors at school

Abstract. The article provides an overview of basic functions and purpose of chemical editors. It offers to study particular chemical features editors for science lessons in classes with intensive study of chemistry.

Keywords: chemical editor, features editor of chemical, practical exercises for mastering chemical editors.

Література

1. Підгорна Т.В. Інформаційно-комунікаційні технології в хімічних дослідженнях: Посібник для вчителів — К.: Видавництво НПУ імені М.П. Драгоманова, 2013. — 233 с.
2. ACD/Labs [Електронний ресурс]. — Режим доступу: <http://www.acdlabs.com>.