

Прохорова Светлана Викторовна

учитель

МБОУ «Центр образования №14»

г. Тула, Тульская область

DOI 10.31483/r-156427

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ СРЕДСТВАМИ ИНТЕРАКТИВНЫХ ПЛАТФОРМ

Аннотация: в статье рассматриваются современные методы визуализации и компьютерного моделирования химических связей с применением интерактивных цифровых платформ. Автором приводятся примеры популярных программных решений, описываются их ключевые функции и сценарии применения в учебном процессе.

Ключевые слова: химия, визуализация, моделирование, интерактивная платформа.

Современные интерактивные платформы – это цифровые ресурсы, которые используют технологии для организации обучения с активным вовлечением учащихся. Интерактивные образовательные платформы знаменуют собой переход от традиционной модели «учитель – ученик» к динамичной цифровой среде, где учащийся становится активным участником процесса. Используя мультимедийные технологии, адаптивные алгоритмы и инструменты совместной работы, эти платформы разрушают барьеры времени и пространства. Учащиеся получают возможность осваивать материал в индивидуальном темпе, получать персонализированную поддержку и мгновенно проверять свои знания. Аналитика прогресса помогает как самим учащимся, так и педагогам вовремя корректировать стратегию обучения. В итоге образовательный процесс становится не только более гибким и персонализированным, но и существенно более эффективным – знания усваиваются глубже, а навыки закрепляются прочнее.

Визуализация химических связей – это способ наглядно представить тип, структуру и основные характеристики взаимодействий между атомами внутри

молекул. Помимо отображения самой структуры (например, линейной, треугольной или тетраэдрической), визуализация передаёт важные параметры: длину связи (расстояние между атомами), энергию связи (прочность соединения), полярность (неравномерность распределения электронов) и кратность (одинарную, двойную или тройную связь).

Моделирование химических связей представляет собой комплексный вычислительный процесс, включающий расчёт и компьютерную имитацию механизмов образования, трансформации и разрыва химических связей между атомами и молекулами при варьируемых внешних условиях. К таким условиям относятся: температура, давление, наличие катализаторов или ингибиторов, интенсивность излучения и другие физико-химические параметры. Для реализации моделирования применяются как классические физические модели (например, методы молекулярной механики и динамики), так и квантово-химические подходы (включая теорию функционала плотности, методы Хартри-Фока и *ab initio* расчёты), что позволяет воспроизводить поведение электронных оболочек и ядер на атомно-молекулярном уровне.

Интерактивные платформы – программные среды, которые позволяют пользователю решать следующие задачи:

- вращать и масштабировать 3D-модели;
- изменять параметры среды (температура, pH, давление);
- запускать симуляции реакций в реальном времени;
- получать количественные данные (длины связей, углы, энергии);
- создавать собственные молекулярные структуры.

Платформы предоставляют интерактивную трёхмерную визуализацию молекулярных структур, позволяя отображать различные типы химических связей, наглядно показывать их длины и валентные углы с возможностью их измерения в реальном времени. Одно из преимуществ подобной визуализации – возможность настраивать стиль отображения: шаростержневые модели, пространственно-заполняющие модели (модели Ван-дер-Ваальса), скелетные формулы. В процессе работы можно выделять отдельные фрагменты молекулы, окрашивать

атомы по элементам или зарядам, вращать, масштабировать и перемещать модель для детального изучения пространственной конфигурации. Интерактивные платформы позволяют создавать динамические модели, позволяющие исследовать механизмы химических реакций: пошаговое образование и разрыв связей, конформационные переходы (вращение вокруг одинарных связей, инверсия циклов), молекулярные колебания и вибрации.

Современные платформы для моделирования химических процессов позволяют проводить симуляцию реакций в различных условиях, детально анализируя влияние внешних факторов на протекание химических процессов. С их помощью можно варьировать температуру и давление – это даёт возможность изучать кинетику реакций и положение химического равновесия в разных режимах. Платформы также учитывают воздействие катализаторов различного типа (гетерогенных, гомогенных и ферментативных), позволяя оценить их влияние на скорость и механизм реакций – например, снизить энергию активации или направить процесс по альтернативному пути. Кроме того, инструменты моделирования воспроизводят эффекты растворителей (полярных, неполярных, протонных), используя континуальные модели вроде PCM (Polarizable Continuum Model) и COSMO (Conductor-like Screening Model), – это помогает учесть сольватационные эффекты без чрезмерного усложнения расчётов. Наконец, платформы поддерживают многостадийное моделирование сложных химических превращений: можно последовательно воспроизводить цепочки реакций или детально анализировать каталитические циклы, отслеживая промежуточные продукты и переходные состояния на каждом этапе. Такой подход существенно расширяет возможности прогнозирования поведения химических систем в реальных условиях.

Среди популярных интерактивных платформ выделяют:

- MolView – веб-приложение для 3D-визуализации молекул и кристаллов, интеграции с базами данных (PubChem, RCSB PDB);
- Avogadro – открытый инструмент для молекулярного моделирования и визуализации;

– Jmol/JSmol – Java- и JavaScript-библиотеки для встраивания 3D-моделей в веб-страницы;

– ChemDraw 3D – профессиональное ПО для рисования структур и их 3D-преобразования;

– HyperChem – пакет для квантово-химических расчётов и молекулярной механики;

– VirtuLab – виртуальные лаборатории с симуляциями химических реакций;

– Mercury (CCDC) – визуализация кристаллических структур и межмолекулярных взаимодействий.

Образовательные платформы с возможностями химического моделирования обладают рядом существенных преимуществ, которые трансформируют процесс изучения химии. Прежде всего, они обеспечивают наглядность: абстрактные понятия, такие как молекулярные орбитали или распределение электронной плотности, визуализируются и становятся визуально воспринимаемыми для учащихся. Интерактивность дополняет этот эффект – ученик не просто наблюдает, а активно взаимодействует с моделью: меняет параметры (температуру, давление, тип реагентов) и сразу видит результат своих действий. Важным преимуществом является безопасность: с помощью симуляций можно детально изучать высокотемпературные, взрывоопасные или токсичные реакции, полностью исключая риски для здоровья. Кроме того, такие платформы повышают доступность образования – виртуальные эксперименты заменяют дорогостоящее лабораторное оборудование и реактивы, делая качественное обучение возможным даже при ограниченных ресурсах. Глубина анализа также выходит на новый уровень: учащиеся получают доступ к количественным данным (энергии связей, зарядам на атомах, энергиям активации), которые невозможно измерить в условиях стандартной школьной лаборатории. Наконец, повышается мотивация к изучению предмета за счёт внедрения игровых элементов и динамичной анимации – это делает сложные химические процессы увлекательными и помогает поддерживать устойчивый интерес учащихся к науке.

Интерактивные платформы превращают пассивное восприятие информации в активное взаимодействие: вместо скучных лекций – интерактивные задания и симуляции, вместо типовых тестов – адаптивные упражнения, которые «подстраиваются» под ваш уровень. Мультимедийные материалы делают сложные темы наглядными, инструменты совместной работы позволяют учиться в команде, а встроенная аналитика показывает ваш прогресс в реальном времени. Результат – обучение становится гибким, персонализированным и по-настоящему эффективным.

Список литературы

1. Вильданов А.Н. Трехмерная браузерная визуализация молекул с помощью технологии WebGL / А.Н. Вильданов, Е.П. Шафеева // Научное обозрение. Технические науки. – 2015. – №1. – С. 108–109.
2. Горобец С.Н. Использование виртуальных лабораторий при изучении химических дисциплин / С.Н. Горобец // Достижения вузовской науки. – 2014. – №13. – С. 41–45. EDN TDOORN
3. Никулина Т.В. Виртуальные образовательные лаборатории: принципы и возможности / Т.В. Никулина, Е.Б. Стариченко // Педагогическое образование в России. – 2016. – №7. – С. 62–66. DOI 10.26170/ro16-07-09. EDN UEQOXE
4. Протопопов А.В. Визуализация химических структур и молекулярное моделирование / А.В. Протопопов, В.В. Коньшин. – Барнаул: Типография АлтГТУ, 2011. – 44 с.
5. Раковская О.Л. Инновационные стратегии развития образовательного процесса / О.Л. Раковская // Альма матер. – 2012. – №10. – С. 61–64. EDN PDLCSF
6. Савкина А.В. Виртуальные лаборатории в дистанционном обучении / А.В. Савкина, А.В. Савкина, С.А. Федосин // Образовательные технологии и общество. – 2014. – Т. 17. №4. – С. 507–517. EDN TCEMHP