Автор: Новикова В.А., Зенцова И.М.
14.11.2026 13:12 -

РОЛЬ ВИРТУАЛЬНЫХ КОНСТРУКТОРОВ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В ВЫСШЕМ УЧЕБНОМ ЗАВЕДЕНИИ

Новикова В.А., студентка

Зенцова И.М.,к.пед.н., доцент,

Березниковский филиал ПНИПУ, г. Березники, Россия

Аннотация. В статье рассматривается применение виртуальных конструкторов и программного обеспечения для моделирования химических реакций в образовательном процессе и научных исследованиях. Описаны достоинства и недостатки использования виртуальных конструкторов в высшем учебном заведении.На основе анализа научно-методической литературы показано, что внедрение компьютерного моделирования позволяет повысить безопасность при изучении сложных химических процессов.

Современное развитие химической науки и высшего образования невозможно представить без внедрения информационных технологий. Особое место здесь занимают программные продукты, позволяющие создавать виртуальные конструкторы

химических реакций и молекулярных структур. В отличие от традиционных методов, виртуальные конструкторы обеспечивают не только визуализацию атомно-молекулярного уровня, но и позволяют прогнозировать результаты реакций, рассчитывать энергетические параметры и моделировать кинетику процессов.

Под виртуальным конструктором химических реакций можно пониматьприложение или программу, позволяющую пользователю в интерактивном режиме создавать молекулы, изменять их пространственную конфигурацию и наблюдать за ходом реакции. Анализ научной литературы показал, что наиболее востребованными платформами являются ChemOffice, Avogadro, MolView, а также специализированные VR-среды.

ChemOffice представляет собой универсальное решение, включающее редактор ChemDraw для двумерных структур и модуль Chem3D для построения объемных моделей. С его помощью можно не только изображать формулы, но и рассчитывать длины связей, валентные углы и углы вращения[1].

Е.В. Осипенко, О.В. Муфтахетдинова, А.Р. Ахмадиева, Е.Д. Жирнова разработали программу Avogadro[3]. Она отличается гибкостью и открытой архитектурой. К достоинствам данной программы следует отнести операции рисования молекул и интерактивную оптимизацию геометрии. Также важно отметить, что Avogadro интегрируется с внешними базами данных.

Моделирование химических реакций в виртуальном конструкторе подразумевает несколько этапов:

1) построение реагентов;

2) задание условий реакции;

3)визуализация химических реакций;

4)анализ продуктов.

В статье П.А. Шерстнева, Д.С. Сергеева, Р.Р. Каримоваописан пример использования таких моделей для реакции нейтрализации. В VR-среде этот процесс сопровождается визуальными эффектами, имитируя реальные признаки химических реакций [4].

Как указывается в статье М.А. Зарудских иС.А. Безносюк, особый интерес вызывают приложения с элементами искусственного интеллекта. Например, методы машинного обучения могут предсказывать тип реакции или подбирать катализаторы[2].

А.К. Апендина, Б.С. Альжанов, М.Ж. Сабетбек считают, что, виртуальные лаборатории

и внедрение VR-технологий позволяют:

· безопасно проводить сложные химические эксперименты;

· уменьшить время на проведение лабораторных работ по химии;

· при отсутствии или недостаточном количестве оборудования обеспечить обучающимся возможность изучения условий протекания химических реакций;

· стимулировать интерес и мотивацию обучающихся[1].

Как отмечают М.А. Зарудских, С.А. Безносюк, несмотря на явные достоинства, у виртуальных лабораторий есть ограничения. По сравнению с реальным экспериментом опыты, проводимые на основе виртуальных конструкторов, не дают возможность в полной мере оценить все факторы, влияющие на его проведение. Также возникает проблема безосновательного доверия к использованию виртуальных конструкторов. Студент может принять результат, полученный при моделировании химических реакций, за реальный факт [2].

Современные виртуальные конструкторы не ограничиваются визуализацией. Например, программа Molview, описанная Е.В. Осипенко, О.В. Муфтахетдиновой, А.Р. Ахмадиевой, Е.Д. Жирновой,позволяет определить получить результаты инфракрасной и масс-спектроскопии изображенной молекулы, а также рассчитать молекулярный электростатический потенциал [3].

Итак, моделирование химических реакций с использованием виртуальных конструкторов является эффективным инструментом как для научных исследований, так и для образовательной практики в высшей школе. Программные комплексы ChemOffice, Avogadro, Molview и VR-системы позволяют наглядно изучать кинетику и термодинамику реакций, а также проводить предварительную оценку свойств веществ без физического синтеза. Интеграция таких средств в учебный процесс способствует повышению уровня знаний учащихся, развитию пространственного мышления и безопасности. Для дальнейшего прогресса в этой области необходимо создание открытых баз данных и разработка более совершенных алгоритмов машинного обучения.

Литература

1. Апендина А. К., Альжанов Б. С., Сабетбек М. Ж. Повышение уровня знаний учащихся с помощью программы Chemoffice на уроках химии // Современное образование: проблемы, решения, тенденции развития: сборник статей X Международной научно-практической конференции, Петрозаводск, 25 марта 2024 года. Петрозаводск: Международный центр научного партнерства «Новая Наука», 2024. С. 96-101.

2. Зарудских М.А., Безносюк С.А. Развитие компьютерного моделирования в области химии // Приоритетные направления развития науки и технологий: Сборник XXXIV Международной научно-практической конференции, Тула, 30 мая 2024 года. Тула, 2024. С. 95-98.

3. ОсипенкоЕ. В., Муфтахетдинова О. В., Ахмадиева А. Р., Жирнова Е. Д. Моделирование химических процессов как неотъемлемая часть развития химии // Вестник молодого ученого УГНТУ. 2023. № 2(22). С. 212-218.

4. Шерстнев П.А., Сергеев Д.С., Каримов Р.Р. Использование VR-технологий в обучении химии как способ повышения эффективности образовательного процесса //

Информационные технологии. Проблемы и решения. 2024. № 2(27). С. 22-30.