

# ХИМИК СТУДЕНТТЕРДІ ОҚЫТУДА КОМПЬЮТЕРЛІК БАҒДАРЛАМАЛАРДЫ ПАЙДАЛАНУ

Ш.Ж. БАЛҚАШБАЙ\*  
С.Н. АЙТҚҰЛ\*\*

**Аңдатпа:** Компьютерлік химия-бұл химия мен компьютерлік технологиялардың түйіскен жерінде пайда болған, графиктер теориясын іргелі және қолданбалы сипаттағы химиялық мәселелерге қолдануға негізделген химияның салыстырмалы түрде жас саласы. Химияның заттар туралы ғылым және олардың бір — біріне айналуы туралы жалпы анықтамасына сүйене отырып, заттар (молекулалар) компьютерлік химияда молекулалық графиктермен, ал заттардың түрленуі (химиялық реакциялар) графиктермен формальды операциялармен модельденеді деп айтуға болады. Мұндай формальды-логикалық тәсіл кейбір жағдайларда химиялық есептерді алгоритмдеуді едәуір жеңілдетеді, оларды комбинаторика мен дискретті математиканың типтік есептеріне дейін азайтады және компьютерлік бағдарламалардың көмегімен шешімдер іздеуге мүмкіндік береді. Сол себепті, қазіргі таңда химик студенттерді химиялық қосылыстардың формулаларын жазу, оларды редакциялау, негізгі физика-химиялық қасиеттерін компьютерлік модельдеу үшін бағдарламаларды қолдану негіздерімен таныстыру арқылы студенттер затты модельдеу процесінде қоршаған әлем белгілі бір құрылымға ие және өзара түрлендіруге қабілетті заттардан тұрады деген идеяны дамыта отырып, пәндік химиялық сауаттылықты қалыптастырады. Химиялық ойлау, қоршаған әлем құбылыстарын химиялық тұрғыдан талдай білу, химиялық тілде сөйлеу және ойлау қабілеті де қалыптасады. Бұл мақала зат құрамын зерттеуде жалпыға қолжетімді Avogadro, ArgusLab бағдарламалары бойынша білім алушыларды таныстыруға бағытталған.

**Кілт сөздер:** Avogadro, ArgusLab, IQmol, модель, алгоритм.

## THE USE OF COMPUTER PROGRAMS IN TEACHING CHEMIST STUDENTS

**Abstract:** Computational chemistry is a relatively young field of chemistry that arose at the junction of chemistry and computer technology, based on the application of graph theory to chemical problems of a fundamental and applied nature. Based on the general definition of chemistry, the science of substances and their transformation into each other, it can be said that substances (molecules) are modeled in computer chemistry using molecular graphs, and transformations of substances (chemical reactions) are modeled using formal graph operations. In some cases, this formal logical approach greatly simplifies the algorithmization of chemical problems, reduces them to typical problems of combinatorics and discrete mathematics, and allows you to search for solutions using computer programs. Therefore, at present, by introducing chemistry students to the basics of writing formulas for chemical compounds, editing them, and using programs for computer modeling of basic physico-chemical properties, students form subject chemical literacy, developing the idea that in the process of modeling matter, the surrounding world consists of substances with a certain structure and capable of mutual transformation.. Chemical thinking is also being formed, the ability to chemically analyze the phenomena of the surrounding world, the ability to speak and think in a chemical language. This article aims to familiarize students with the publicly available Avogadro, ArgusLab programs when studying the composition of a substance.

**Keywords:** Avogadro, ArgusLab, IQmol, model, algorithm.

### Кіріспе

Химиялық зерттеудің маңызды элементтерінің бірі қосылыстардың геометриялық құрылымын талдау болып табылады. Ғылымның бұл саласы құрылымдық химия деп аталды. Молекулалардың геометриялық құрылымын зерттеуге мүмкіндік беретін маңызды эксперименттік әдістер адсорбциялық және эмиссиялық спектроскопия, сондай-ақ дифракциялық әдістер болып табылады. Құрылымдық

\* П.Ф.М, Kazakh women's teacher training university, synarbalkasbaj@gmail.com.

\*\* Магистрант, Kazakh women's teacher training university, aitkul.s@qyzpu.edu.kz.

формулар молекуладағы әртүрлі атомдардың бір-бірімен байланысын көрсетеді. Екі өлшемді құрылымдық модельдің классикалық мысалы-бензолдың құрылымдық формуласы:  $C_6H_6$  жалпы формуласы сақинаның көміртегі атомдары арасындағы байланысты беруге мүмкіндік бермейді, осыған байланысты құрылымды геометриялық кескін ретінде көрсету қажеттілігі туындайды, ол— құрылымды визуализациялау міндеті. Бұл міндет стереоизомерлерді зерттеу кезінде одан да өзекті болады. Қосылыстардың конформациялық талдауы молекулалардың үш өлшемді модельдерін қолдануды талап етеді. Компьютерлер пайда болғанға дейін молекулалардың механикалық модельдері (Стюарт-Бриглеб модельдері) осындай модельдер ретінде кеңінен қолданылды. Соңғы онжылдықта молекулалардың жазық, мак және кеңістіктік модельдері ретінде визуализация мәселелерін шешуге мүмкіндік беретін әр түрлі бағдарламалық жасақтама пакеттері жасалды. Бағдарламалардың алғашқы нұсқалары негізінен құрылымдық формулаларды редакциялау және кеңістіктік құрылымдарды визуализациялау мәселелерін шешуге мүмкіндік берді. Болашақта мамандандырылған «химиялық» бағдарламалық пакеттерді қолдана отырып шешілетін бірқатар міндеттер кеңейтілді және қазіргі уақытта олардың ішіндегі ең күштілері компьютерлік химияның барлық негізгі міндеттерін, соның ішінде химиялық қосылыстардың мәліметтер базасын басқаруды, кванттық химия әдістерін және сандық модельдеуді жүзеге асырады.

Модельдеу процесінде студент қоршаған әлем белгілі бір құрылымға ие және өзара түрлендіруге қабілетті заттардан тұрады деген идеяны дамыта отырып, пәндік химиялық сауаттылықты қалыптастырады. Химиялық ойлау, қоршаған әлем құбылыстарын химиялық тұрғыдан талдай білу, химиялық тілде сөйлеу және ойлау қабілеті де қалыптасады [1].

### **1. Avogadro Бағдарламасымен Танысу және Жұмыс Жасау**

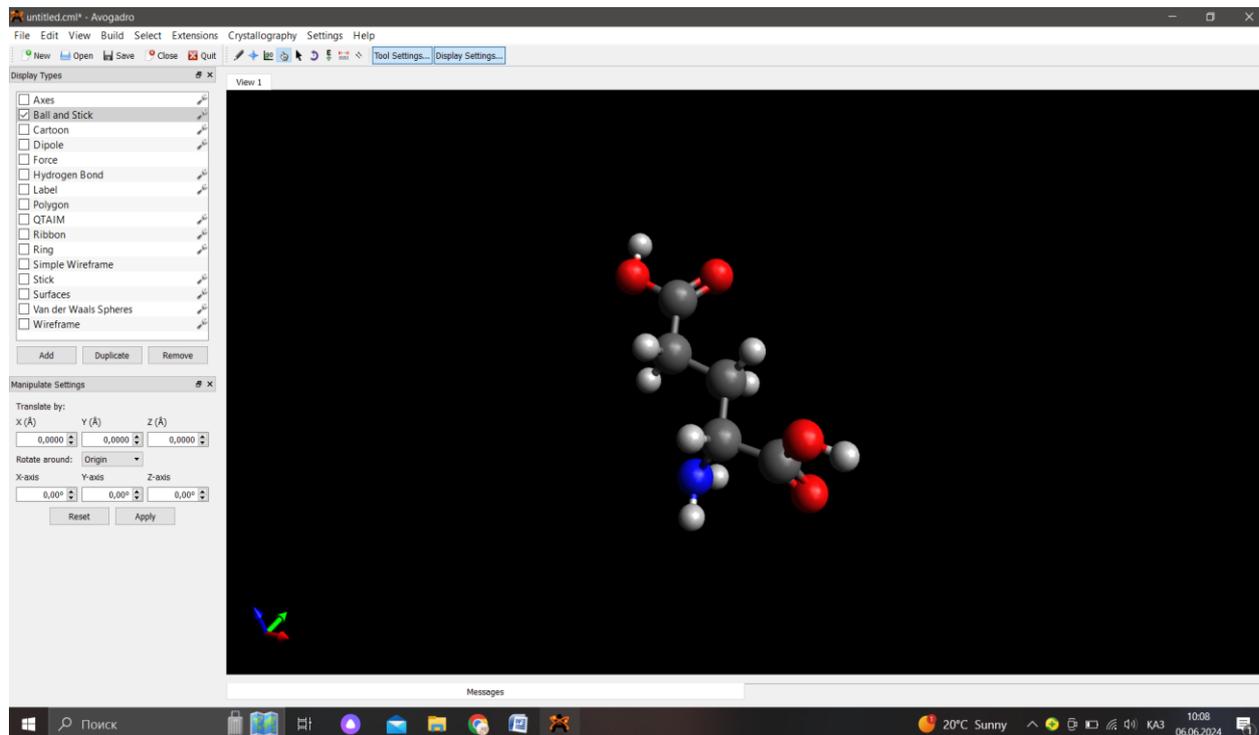
Avogadro-есептеу химиясында, молекулалық модельдеуде, биоинформатикада, материалтануда және онымен байланысты салаларда кросс-платформада қолдануға арналған молекулалық редактор және визуализатор. Бағдарламаның функционалдығын плагиндер арқылы кеңейтуге болады.

Avogadro көмегімен молекуланың құрылымын оңай құруға немесе өзгертуге болады, бағдарлама молекулалар мен ақуыз құрылымдарының тамаша дисплей сапасын қамтамасыз етеді. Қолданба есептеу химиясында ең танымал форматтардың көпшілігінің үш өлшемді құрылымдарын көруге және өңдеуге қолдау көрсетеді (мысалы cml, cif, mol, sd, sdf, pdb, ent, vis, xyz және т.б.) [2].

Бағдарламаның интерфейсі стандартты және бірнеше типтік бөліктерден тұрады.

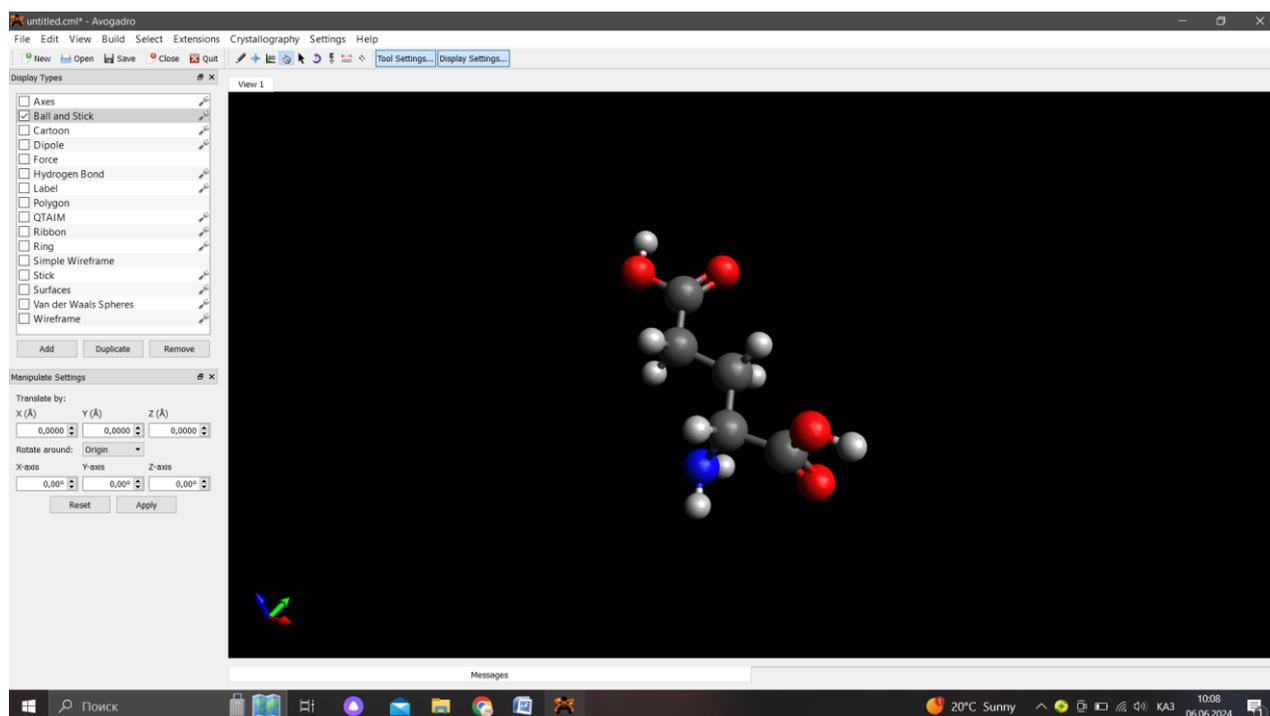
## А. Басты мәзір

Жасалған құжатпен әртүрлі әрекеттерді орындауға, сондай-ақ бағдарламаның өзін де, құралдар тақтасын да конфигурациялауға мүмкіндік береді.



## Б. Құралдар тақтасы

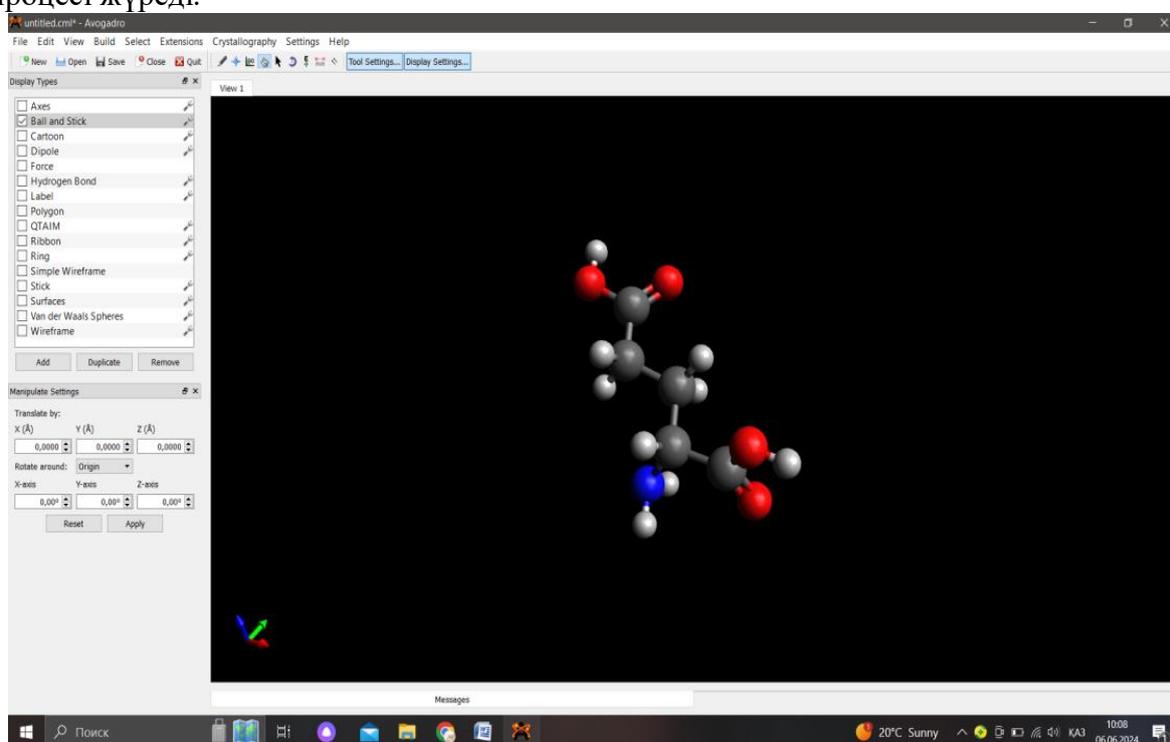
Бұл бағдарламаның негізгі функцияларына жылдам қол жеткізу түймелері бар стандартты құралдар тақтасы. Бұл панельдерді негізгі мәзір арқылы жасыруға және көрсетуге болады. Әдепкі бойынша, негізгі панель мен құралдар көрсетіледі.



Орнату мәзірінде көптеген панельдер бар, бірақ олар қолданбаны тереңірек зерттегенде қажет.

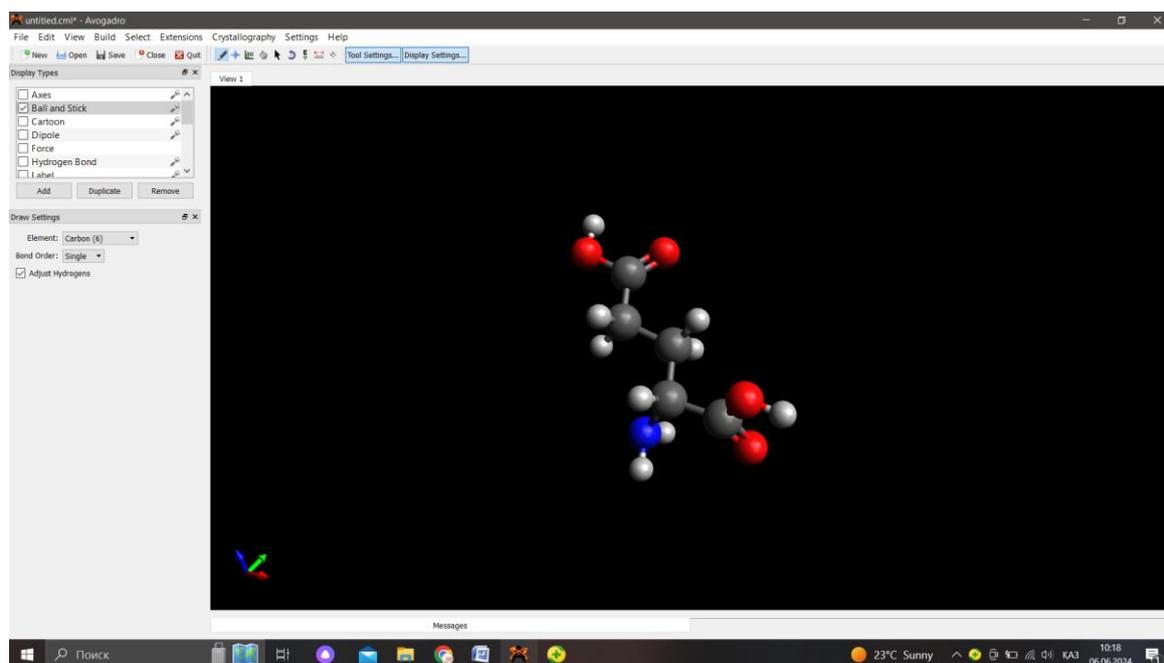
### В. Негізгі жұмыс өрісі

Бұл өрісте молекулалардың модельдерін салу және анимациялаудың барлық процесі жүреді.



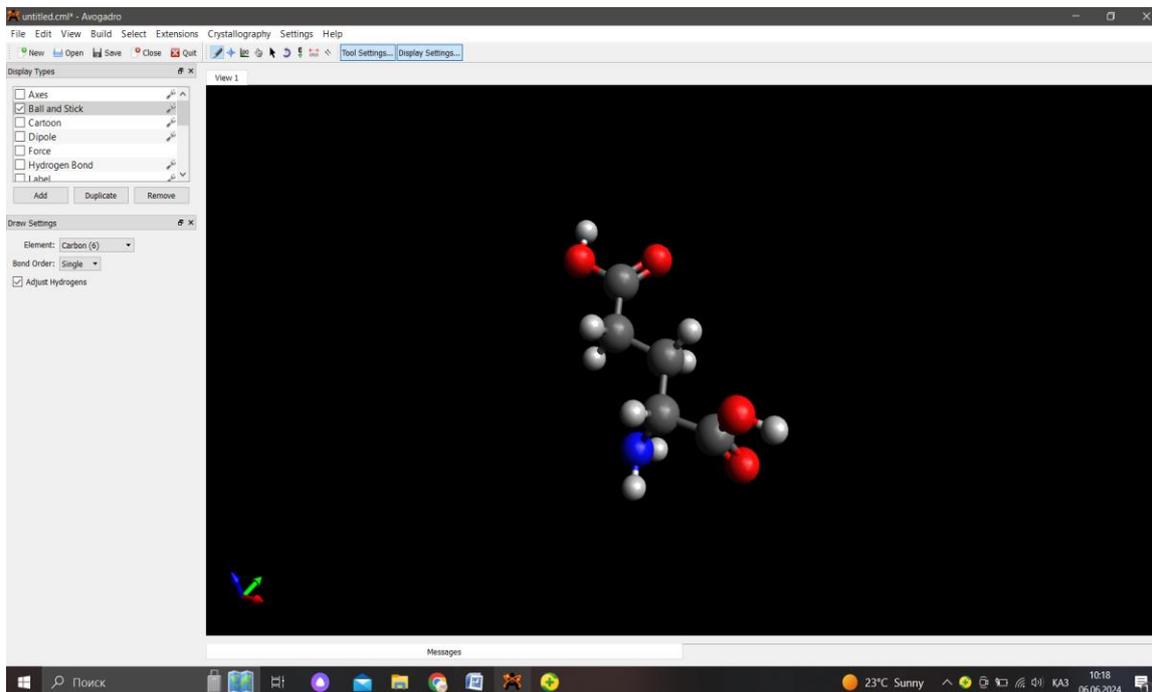
### С. Модельді көрсету стилінің мәзірі

Бұл құралдар тақтасы молекуланың қалай көрінетінін өзгертуге мүмкіндік береді.



### Д. Сурет мәзірі

Мұнда қазіргі уақытта таңдалған құралға қатысты опциялар мен әрекеттер көрсетіледі. Құралдарды құралдар тақтасы арқылы таңдауға болады[3].



## 2. Arguslab Бағдарламасымен Танысу және Жұмыс Жасау

ArgusLab – зертханада жұмыс істейтін, фармацевтика саласында оқитын немесе жұмыс істейтін кез келген адам үшін өте пайдалы құрал.

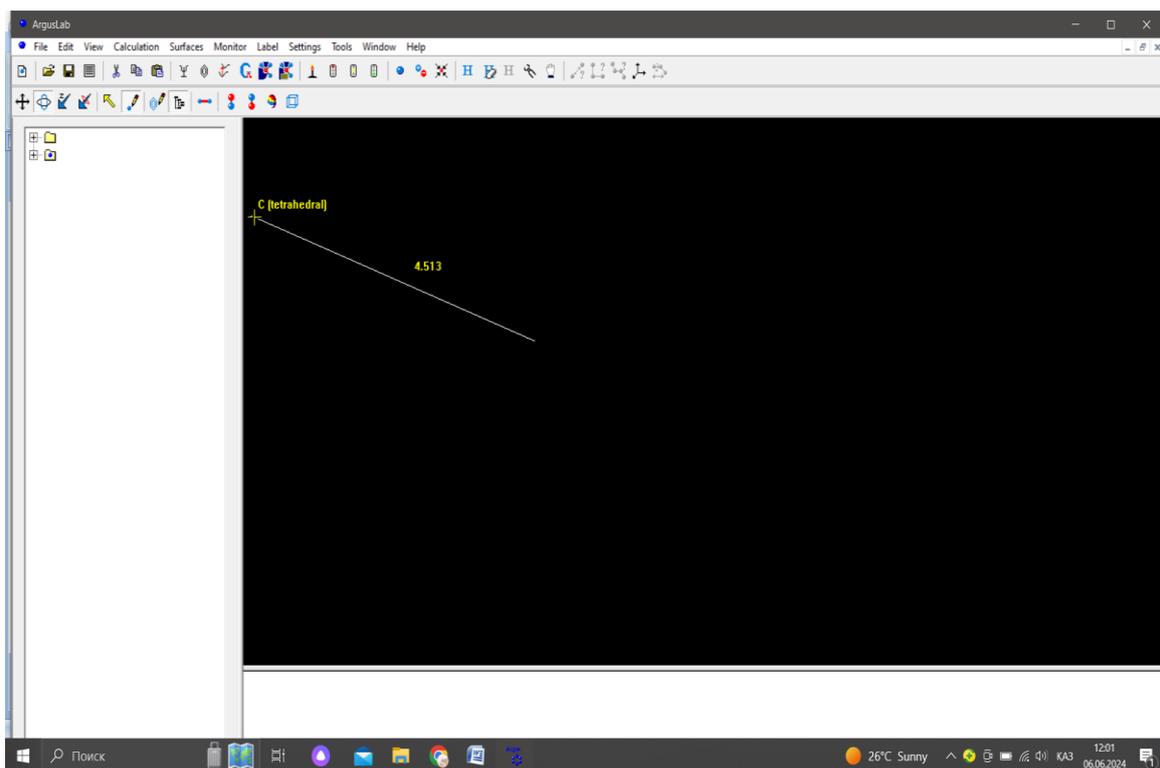
Бұл бағдарлама молекулалардың кез-келген түрін құрастыруға және белгілі бір дәрі-дәрмектерді, аминқышқылдары мен химиялық қосылыстарды әзірлеуді және зерттеуді жеңілдетуге арналған 3D кескін редакторы болып табылады.

Бағдарламада пайдаланушы құрылымын талдау және өзгерту үшін пайдалана алатын ең танымал химиялық және фармацевтикалық заттардың үлкен кітапханасы бар. Интерфейс басқа 3D модельдеу бағдарламаларымен жұмыс істеуге ұқсайды, бірақ химиялық молекулаларды енгізудің қосымша функциялары бар.

Бірақ, бұл бағдарлама «Авогадро» бағдарламасы секілді ағылшын тілінде және ағылшын тілін білудің орташа деңгейін талап етеді (B1 деңгейі – «шекті» немесе ағылшын тілінің орташа деңгейі). Сонымен қатар, байланыс ұзындығын масштабтаудағы қиындықтармен жолығады.

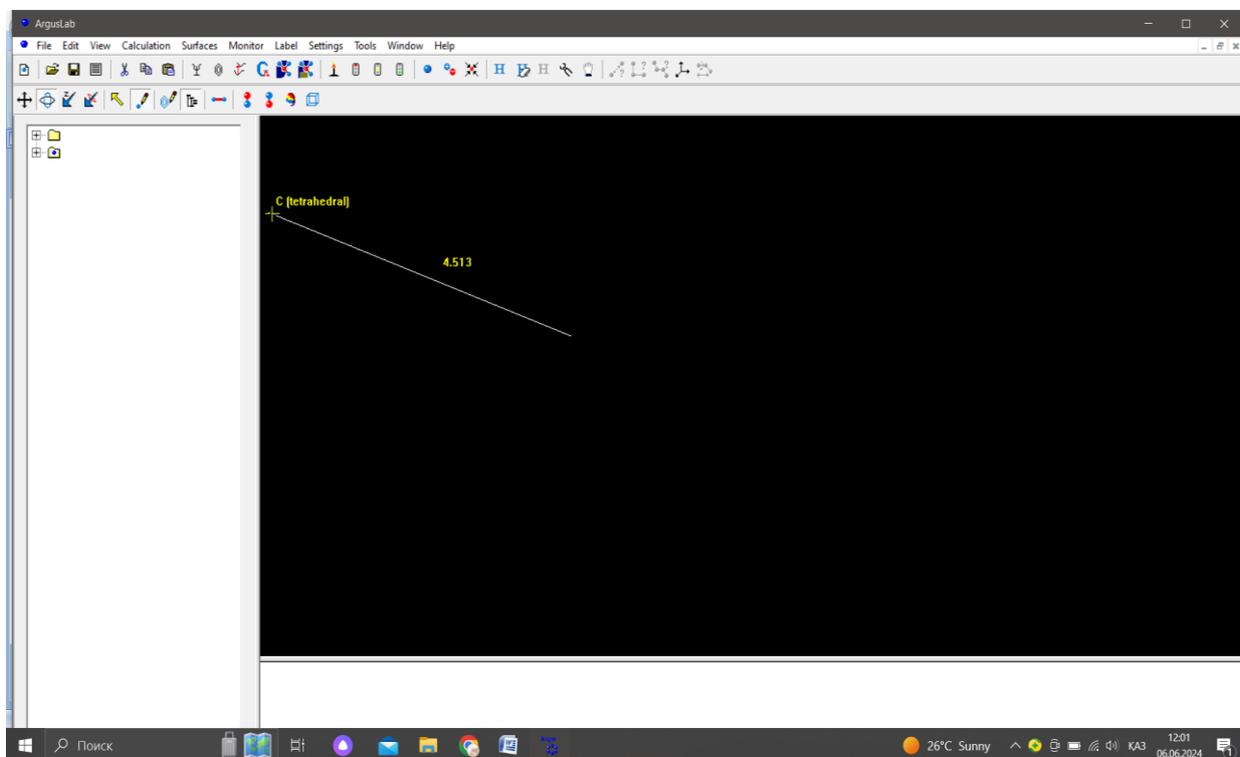
### А. Басты мәзір

Дәл «Авогадро» бағдарламасы сияқты жасалған құжатпен әртүрлі әрекеттерді орындауға, сондай-ақ бағдарламаның өзін де, құралдар тақтасын да конфигурациялауға мүмкіндік береді.

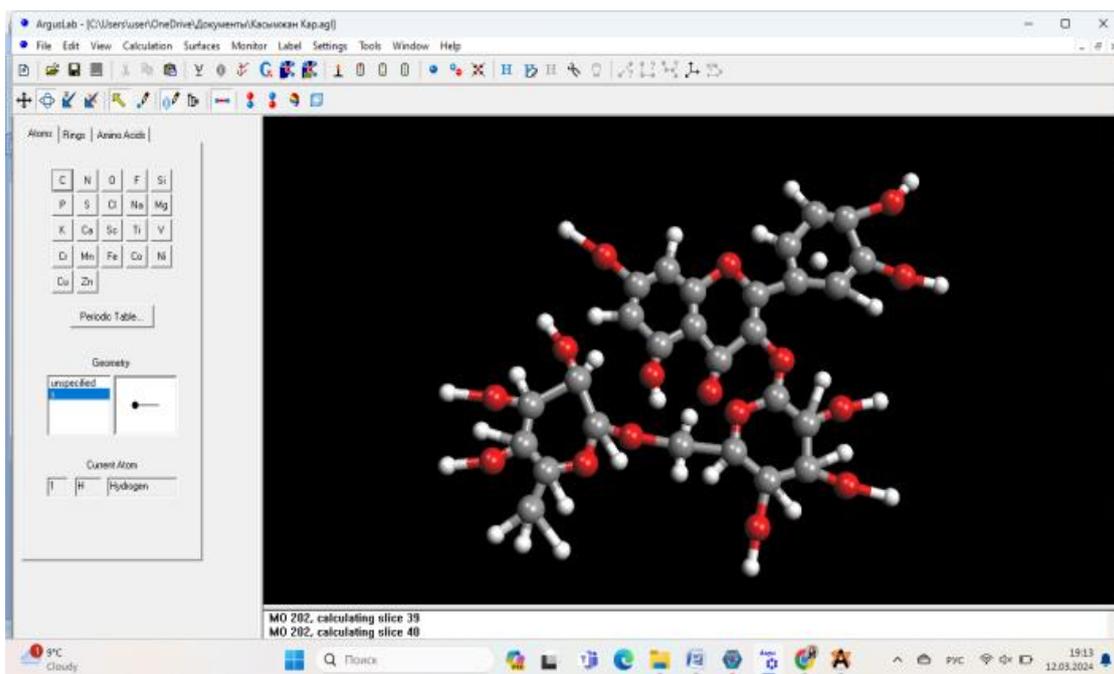


### Б. Құралдар тақтасы

Бұл бағдарламаның негізгі функцияларына жылдам қол жеткізу түймелері бар стандартты құралдар тақтасы. Авогадроғадай негізгі панель мен құралдар көрсетіледі.

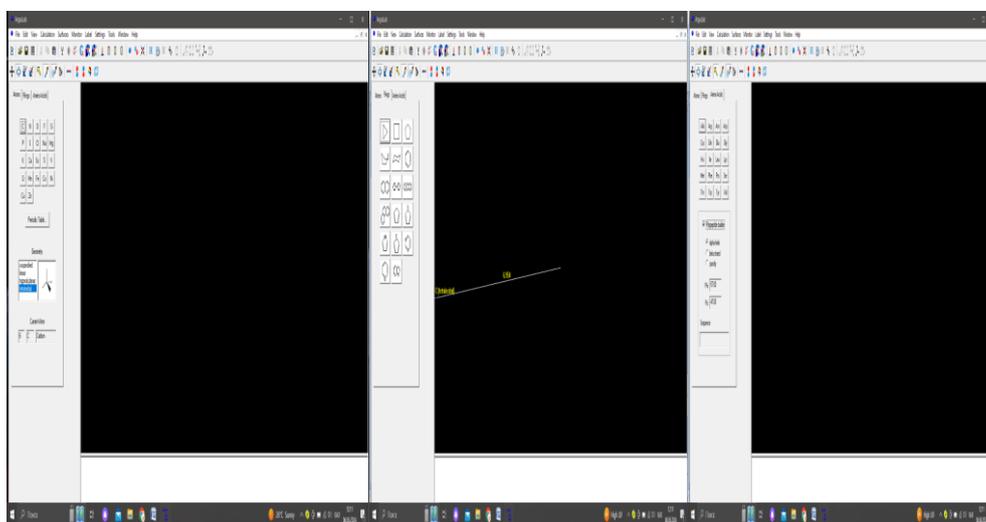


## В. Негізгі жұмыс өрісі



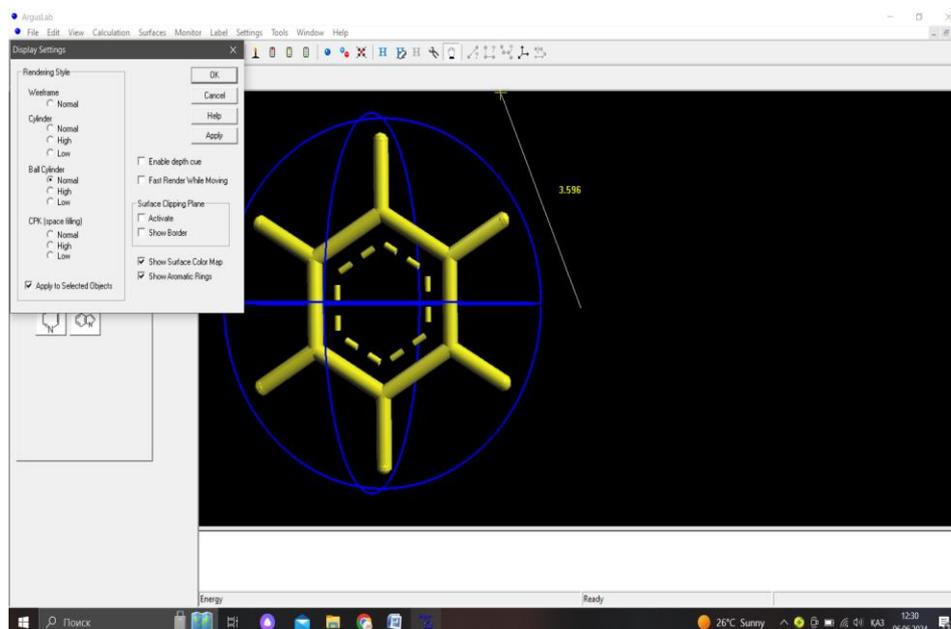
## С. Сурет мәзірі

Avogadro бағдарламасымен салыстырғанда, ArgusLab бағдарламасында атомдармен қатар, ароматты қосылыстардың сақина түрлері және аминқышқылдарының дайын түрлері бар. Avogadro-да «қосу» түймесін басу арқылы жасайтын болсақ, ArgusLab-та басты бетте дайыны тұрады.



ArgusLab бағдарламасының Avogadro бағдарламасынан анықталған ерекшелігі молекулалық орбитальдар теориясы (МО), яғни, электрон тығыздығының таралуы мен молекулалардың қасиеттері анықталады.

Түзетін заттың пішінін «Settings» батырмасын басу арқылы өзгерте аламыз[4].



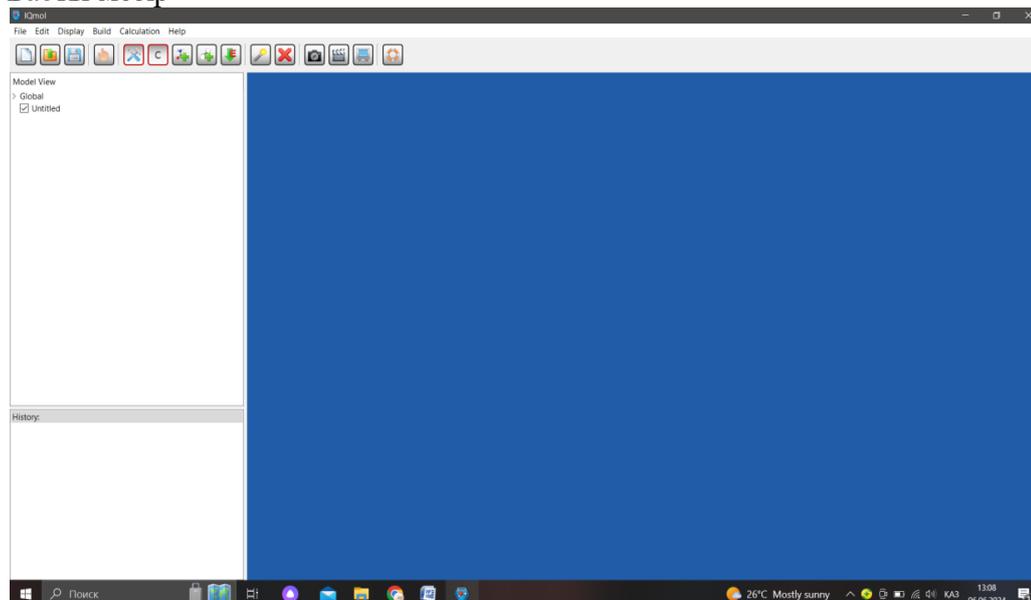
### 3. IQmol Бағдарламасымен Танысу және Жұмыс Жасау

IQmol-бұл тегін молекулалық редактор және ашық бастапқы визуализация пакеті. Ол бірқатар функцияларды ұсынады, соның ішінде молекулалық редактор, беттік генерация (орбитальдар мен тығыздықтар) және анимация (діріл режимдері және реакция жолдары).

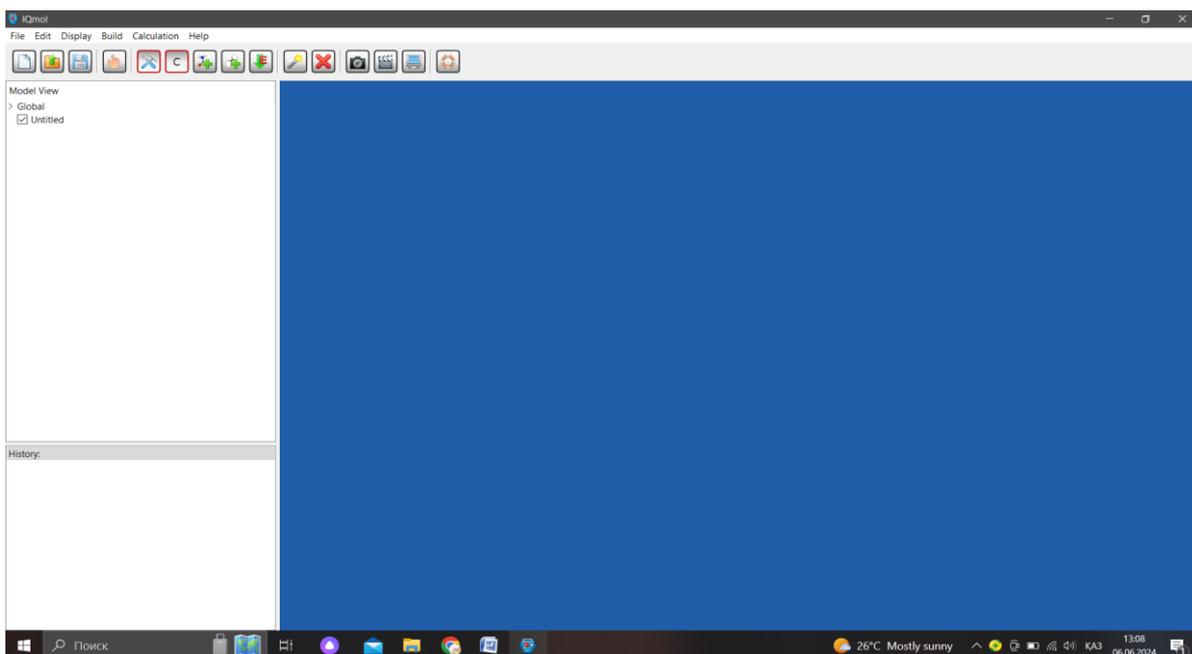
IQmol qt кітапханаларын қолдана отырып жазылған , бұл оған OS X, Windows және Linux сияқты әртүрлі платформаларда жұмыс істеуге мүмкіндік береді.

Ол Chem кванттық химия пакетімен біріктірілген және Q-Chem есептеулерін теңшеу, іске қосу және талдау үшін интуитивті ортаны ұсынады. Сонымен қатар, ол әртүрлі форматтағы файлдарды, соның ішінде кеңінен қол жетімді форматталған бақылау нүктесі файлын оқи және көрсете алады[5].

#### A. Басты мәзір

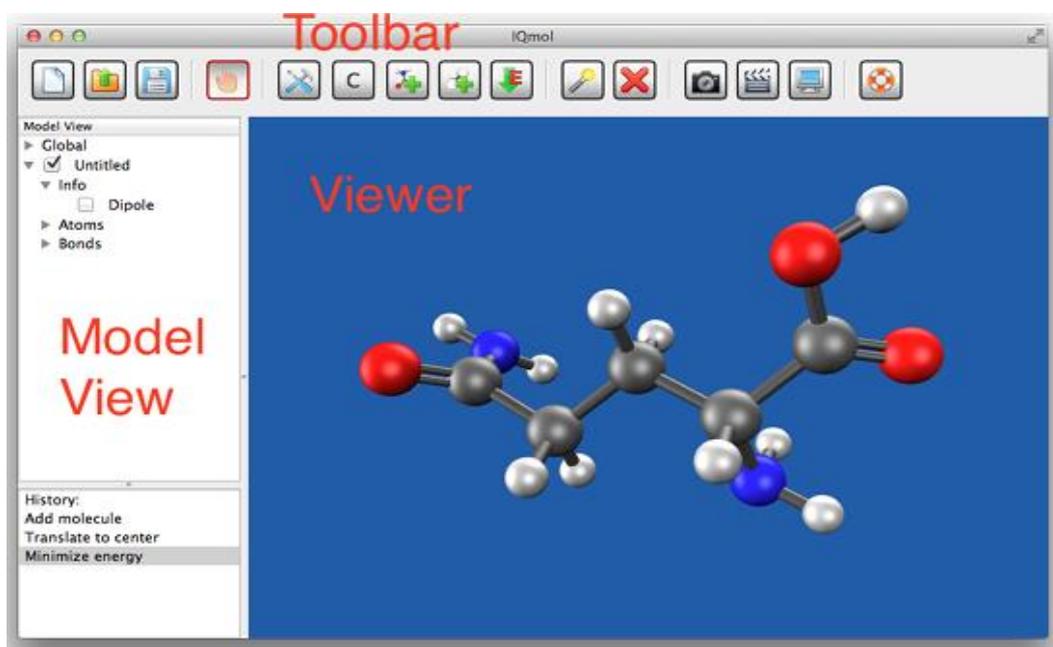


## Б. Құралдар тақтасы



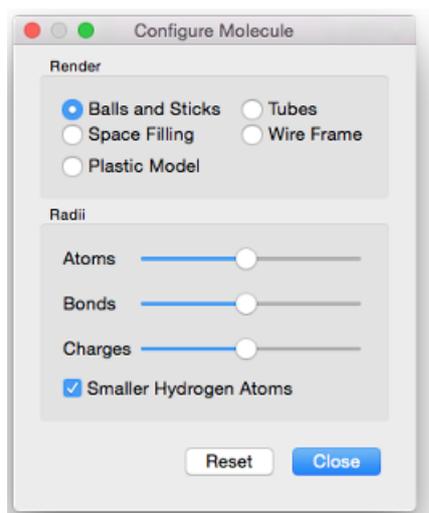
## В. Негізгі жұмыс өрісі

Бұл өрісте молекулалардың модельдерін салу және анимациялаудың барлық процесі жүреді.

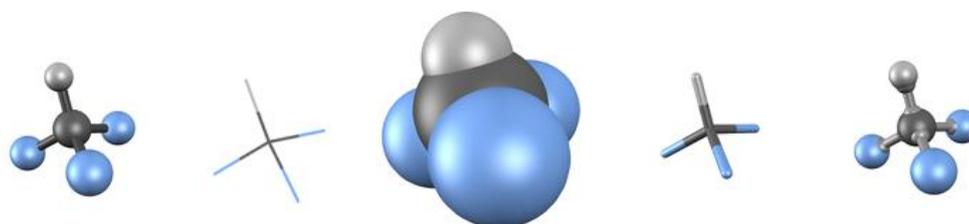


## С. Модельді көрсету стилінің мәзірі

Бұл құралдар тақтасы молекуланың қалай көрінетінін өзгертуге мүмкіндік береді[6].



Пішін түрлері мынадай болады:



### Қорытынды

Біздің мақаламызда студенттер IQmol, Avogadro, ArgusLab бағдарламаларын қолдану арқылы химиялық қосылыстардың формулаларын жазу, оларды редакциялау, негізгі физика-химиялық қасиеттерін компьютерлік модельдеу жұмыстарымен танысады. Және де, осы жұмыс барысында ҚазҰлтҚызПУ «6B05301-Химия» БББ-ның 2-курс студенттері химиялық қосылыстарды компьютерлік бағдарламалар арқылы моделін, құрылысын, құрамын, байланыс бұрыштары мен ұзындықтарын, зарядтарын, энергиясын, сутектік көрсеткіш пен валенттілігін, Гиббс энергиясын, термодинамикалық мәндерін анықтай алды.

Қорытындылай келсек, химия - эксперименттік ғылым. Заттардың құрылымы мен реакциясын зерттеудің барлық нәтижелері тәжірибеде тексерілуі керек, содан кейін ғана практикалық қолдануға арналған ұсыныстар ретінде қарастырылады. Мысалы, кванттық химияда молекуланың моделі кванттық механика заңдарына бағынатын ядролар мен электрондардың жиынтығы болып табылады. Молекулалық механикада сол молекула атомдардың жиынтығы ретінде қарастырылады, олардың өзара әрекеттесуі, әдетте, эмпирикалық потенциалдар арқылы беріледі және т.б. компьютерлік эксперименттің сәттілігі немесе сәтсіздігі компьютердің техникалық мүмкіндіктерімен және алгоритмнің тиімділігімен ғана емес, есептеу схемасының негізінде жатқан модельдің ақылға қонымдылығымен де анықталады.

### ӘДЕБИЕТТЕР

1. Базлов, Д. А., Орлов, В. Ю., Котов, А. Д., Цивов, А. В. (2013). *Компьютерная химия: методические указания, сост.;* Ярослав. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. Ярославль : ЯрГУ. <https://redos.red-soft.ru/base/arm/arm-other/avogadro/>
2. Taylor Cornell and Geoffrey Hutchison (2015). Avogadro: Molecular Editor and

Visualization. *Pittsburgh, Pennsylvania. Summer 2015.*  
<https://www.solvusoft.com/ru/file-extensions/software/planaria-software-llc/arguslab/>

3. Thomas James Smith (1995). MOLView: A program for analyzing and displaying atomic structures on the Macintosh personal computer. *Journal of Molecular Graphics, Volume 13*, Issue 2, April 1995, P 122-125. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(94\)00019-0](https://doi.org/10.1016/0263-7855(94)00019-0)
4. Herman Bergwerf (2015). MolView: an attempt to get the cloud into chemistry classrooms. *Fall 2015 ACS CHED CCCE Newsletter*, p 1-3.

