

高中有机化学分子结构可视化程序编制

◆马 斌 王星齐 梁之琛 刘洪君 王悦晴

(陕西师范大学化学化工学院 陕西省西安市 710062)

摘要: 随着科技与教育的发展,知识可视化这个新兴领域正蓬勃发展,可视化教学也日益火热。高中化学教学中教师对于有机物分子的空间构型较难清晰阐述,学生理解困难,基于此问题,本项目通过建立高中有机化学分子结构模型库,使用 Python 编程语言编制高中化学有机分子结构可视化程序,并与模型库建立连接,达到了输入有机物名称,即可呈现其静态与动态的立体构型的一体化效果。

关键词: 高中化学;有机分子结构;可视化程序

引言

在高中有机化学教学中,利用可视化教学,可以将抽象的分子结构形象生动地呈现给学生^[1-2],启发学生过渡到抽象思维,降低学生的学习难度,提高学习兴趣,从而掌握知识的规律性,形成科学的理论。当前,国内与国外对可视化的研究多为知识可视化系统或可视化技术的应用,将可视化教学运用于建立数学及物理模型,以及对聋哑人的可视化教学研究,但至今很少有将化学知识可视化的研究。

可视化程序的编制使有机分子结构实现可视化,由抽象变具体,减轻了高中教师的教学负担,极大的降低了学生对空间想象能力的要求,减缓了学生的学习困难。同时,利用可视化教学所提供的具体化空间构型有效的利用学习资源,在一定程度上实现了教学资源的共享和传递,对传统授课进行变革,有效提高教学质量和效率,将教学与网络信息化结合^[3-4],为教师提供简单易用的教学平台,最终实现教师方便授课,学生轻松理解的师生共赢。

一、程序界面设计

建立完善的分子结构模型库,使用 python 语言^[5],利用 while 循环块和图片 show()方法和视频 play()方法实现对存储有大量化学分子结构图片、视频动态文件的文件夹进行可重复的快速查找调用并展示。

```
class Video(object):
    def __init__(self,path):
        self.path = path

    def play(self):
        from os import startfile
        startfile(self.path)

class Movie_MP4(Video):
    type = 'MP4'

from PIL import Image
while 1:
    x = input('请选择图片(1),视频(2):')
    while x=='1':
        name = input('请输入物质名称:')
        if name == 'exit':break
        inpath = 'H:/国创项目程序/高中有机化合物3D分子结构模型库/静态有机分子3D模型库/' + name
        savepath = inpath + '.png'
        img=Image.open(savepath)
        img.show()
    while x=='2':
        name = input('请输入视频名称:')
        if name == 'exit':break
        inpath = 'H:/国创项目程序/高中有机化合物3D分子结构模型库/动态有机分子3D模型库/' + name
        savepath = inpath + '.mp4'
        movie = Movie_MP4(savepath)
        movie.play()
    if x=='exit':break
```

图 1 可视化程序编制界面

二、生成实例

举例: 调用葡萄糖分子 3D 静态与动态结构模型

首次运行此程序时,需要先将程序用“记事本”的方式打开,修改代码中的数据库路径,操作如下:

打开数据库,调出任意一张图片的“属性”,复制其“位置”到上述“记事本”中的“inpath”行的单引号中,把“\”修改为“/”,保存修改,关闭界面;再将程序用“python”的方式打开。

如需生成图片,则在此界面键入“1”,回车,输入“葡萄糖”,回车,即可,界面如下图 2 所示。生成图片如下图 3:

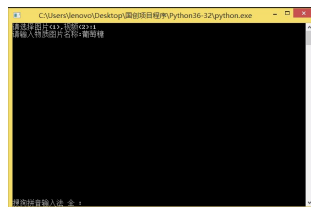


图 2 图片程序运行界面

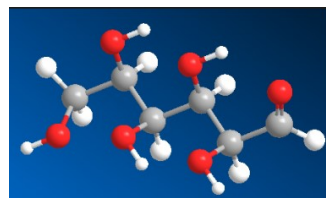


图 3 葡萄糖分子 3D 静态棍模型
如需生成视频,则在此界面键入“2”,回车,输入“葡萄糖”,回车,界面如下图 4 所示。生成视频界面如下图 5:

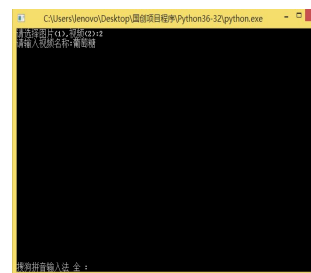


图 4 视频程序运行界面

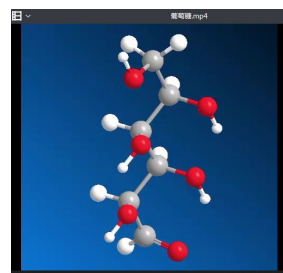


图 5 视频播放界面

结语

本项目成功建立了高中有机化学分子结构的 3D 静态与动态模型库,编制了高中有机化学分子结构可视化程序,实现了分子结构的可视化。未来可以进一步探索其在课堂教学中的应用效果,并结合大学有机化学,进一步扩大分子结构模型库,实现有机化学分子结构的可视化。

参考文献:

- [1]盛永娟,沈理明,杨艳娟,等.高中生化学学习中“映象表征”、“符号表征”及其转换能力的调查分析[J].化学教育,2013,34(1):58-61.
- [2]整体论视域下高中化学多媒体动画模型分析[D].李敏.东北师范大学 2013
- [3]宁清茹,陈亚芳.信息技术支持下的思维可视化教学——以人教版《化学 2》第三章为例[J].化学教与学,2017(09):2-6+23.
- [4]陈维,张红俊.高中化学可视化教学例谈[J].化学教与学,2017(09):28-29
- [5]佚名.基于可视化软件 eChem 的分子立体构型学习[J].化学教与学,2019(2):7-8.

项目: 陕西师范大学校级大学生创新创业训练计划项目“高中有机化学分子结构可视化程序编制”,编号: Cx2018117.

