

**Филиппов Михаил Константинович,**  
студент ГБПОУ ЯНАО  
«Ноябрьский колледж профессиональных  
и информационных технологий»,  
г. Ноябрьск

**Дьяконова Мария Сергеевна,**  
преподаватель ГБПОУ ЯНАО  
«Ноябрьский колледж профессиональных  
и информационных технологий»,  
г. Ноябрьск

# СОЗДАНИЕ 3D–МОЛЕКУЛ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

УДК 66.011

В статье рассмотрена возможность создания трехмерных моделей с помощью программы КОМПАС–3D. Программа предназначена для визуализации соединений атомов и молекул и является актуальным инструментом для современного учебного процесса, в который последнее время активно внедряются информационные технологии. Приложение обладает функциями создания моделей химических соединений, просмотра существующих соединений из базы, просмотра моделей атомов и кристаллических решеток, сохранения и загрузки моделей в mol–формате и экспорта в формат для 3D–печати.

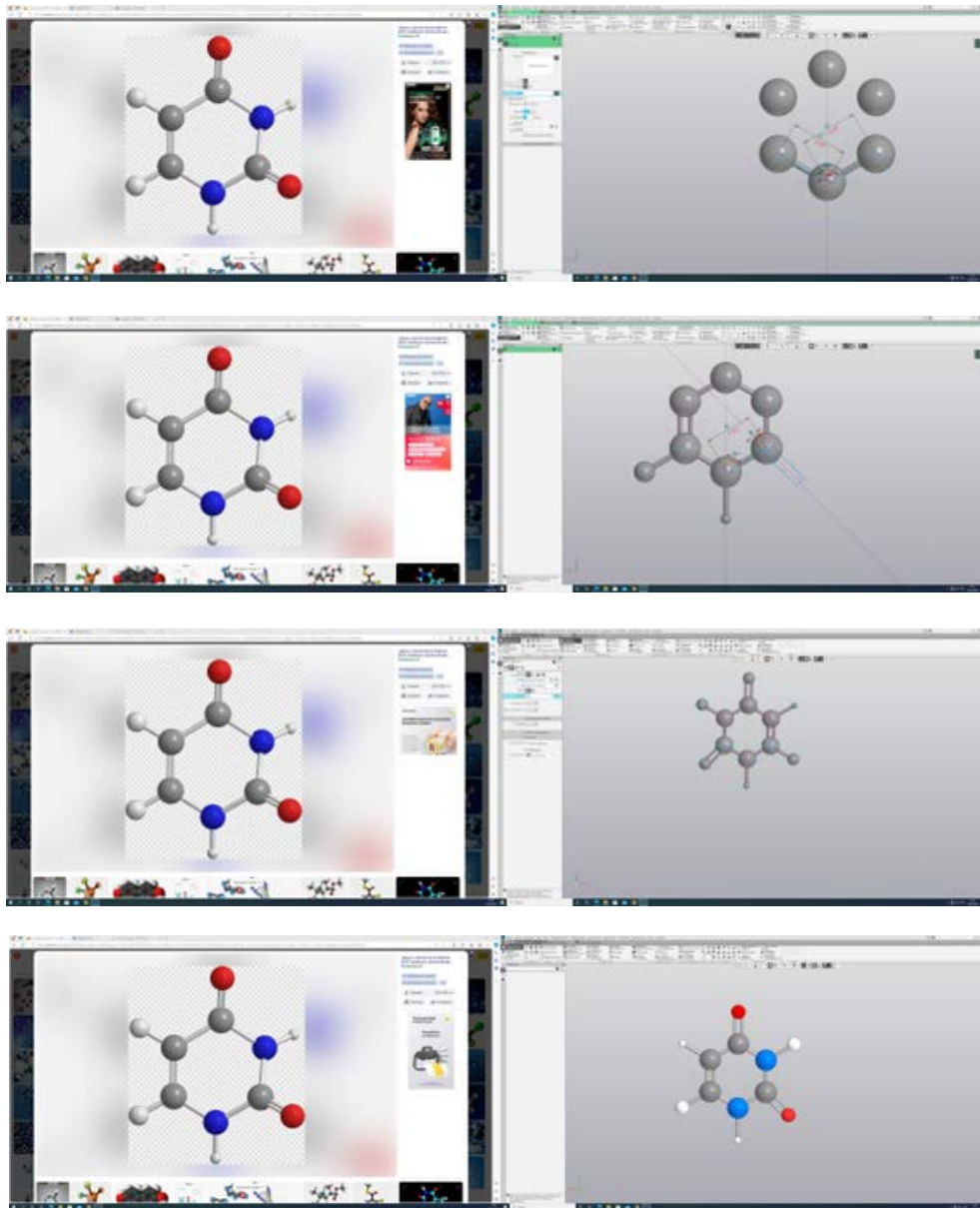
The article discusses the possibility of creating three–dimensional models using the «Compass 3D» program. The program is designed to visualize compounds, atoms and molecules and is a relevant tool for the modern educational process, in which information technology has recently been actively introduced. The application has the functions of creating models of chemical compounds, viewing existing compounds from the database, viewing models of atoms and crystal lattices, saving and loading models in to1 format and exporting to a format for 3D printing.

**Ключевые слова:** 3D–молекулы химических веществ, органическая химия, визуализация.

**Keywords:** 3D–molecules of chemical substances, organic chemistry, visualization.

В органической химии важно иметь четкое представление о химическом строении вещества, знать, как расположены связи. Химические, физические свойства

любого органического вещества зависят от его строения. Студенты и школьники часто испытывают трудности при изучении органической химии лишь потому, что не могут визуализировать связи, как они расположены в веществе. Проект по созданию молекул химии в программе КОМПАС–3D предполагает использование инструментов трехмерного моделирования для создания точных моделей молекулярных структур. В процессе рабо-



ты над проектом необходимо изучить основные принципы химии, атомной структуры и связей между атомами.

**Цель проекта** – создание учебного материала для изучения химии с использованием современных методов визуализации и моделирования. Такой подход позволит студентам лучше понять атомную структуру веществ и химические реакции. Результаты проекта также могут быть использованы преподавателями для обучения школьников и студентов.

Система КОМПАС-3D позволяет реализовать классический процесс трехмерного параметрического проектирования – от идеи к ассоциативной объемной модели, от модели к конструкторской документации. Основные компоненты КОМПАС-3D – система трехмерного твердотельного моделирования, универсальная система автоматизированного проектирования КОМПАС-График и модуль проектирования спецификаций. Все они легки в освоении, имеют русскоязычные интерфейс и справочную систему.

**Плюсы:**

1. Широкий функционал.

2. Удобный интерфейс.

3. Простая и быстрая работа.

4. Красивые и реалистичные эскизы на выходе.

**Минусы:**

1. Высокая цена как коммерческой, так и некоммерческой версии.

2. Высокие требования к аппаратным и системным ресурсам.

Но на базе нашего колледжа эти проблемы решаются.

Создание трехмерных (3D) молекул по органической химии в программе КОМПАС-3D – это процесс, требующий определенных ресурсов и выполнения нескольких этапов исследования. В данном тексте будут рассмотрены основные этапы такой работы и необходимые для их реализации ресурсы.

Первым этапом работы над проектом является изучение теоретических основ органической химии. Мы провели анализ литературы (КОМПАС-3D V17. Основы 3D-проектирования). Следующий этап – использование программы КОМПАС-3D для создания трехмерных моделей молекул. Программа предоставляет инструмен-

ты для создания детальных и реалистичных моделей молекул, учитывая их конкретные химические свойства.

Важным ресурсом при работе над проектом является также доступ к современным и высококачественным компьютерам и программному обеспечению. Значительные вычислительные мощности позволяют обрабатывать сложные молекулярные структуры и создавать реалистичные модели с высокой степенью детализации.

В нашем колледже очень развиты мастерские информационного программирования, это поможет мне качественно провести исследование и достичь поставленной цели.

В процессе исследования я активно использовал онлайн-справочники и базы данных, специализированные в области органической химии. Это позволило получить актуальную информацию о структуре, свойствах и реакционной способности различных органических соединений. Также для подтверждения результатов исследования проводились расчеты на специализированных компьютерных программах (КОМПАС-3D), которые позволяют предсказывать свойства и поведение органических молекул.



Созданные 3D-молекулы некоторых органических веществ были продемонстрированы на занятиях химии для студентов групп 2324, 2325, 2326 (специальность «информационные системы и программирование»), а также я показал, как эти знания применить на практике при составлении изомеров, гомологов органических веществ и при решении уравнений.

Работа над проектом по созданию 3D-молекул по органической химии в программе КОМПАС-3D включала в себя ряд этапов, начиная от теоретического изучения основной информации, заключающегося в анализе литературы и научных статей, до создания трехмерных моделей.

Представление о пространственном расположении молекул в органической химии играет важную роль в учебном процессе студентов. Это знание имеет большое значение при изучении реакций, свойств и поведения органических соединений.

Пространственное расположение молекул влияет на их физические и химические свойства. Например, изомерия – это явление, при котором у двух различных соединений одинаковая химическая формула, но отличаются они только своим пространственным расположением атомов. Изомеры могут иметь разные физические

и химические свойства, поскольку их структуры различны. Понимание этого явления поможет студентам более глубоко изучить их свойства и взаимодействие с другими веществами.

Кроме того, представление о пространственном расположении молекул поможет студентам понять одну из важнейших особенностей органической химии – хиральность. Это свойство молекулы быть неравнозначной копией своего изомера, несмотря на одинаковый состав атомов. Данное свойство связано с наличием хирального центра в структуре молекулы. При этом хиральные молекулы могут проявлять различную активность и взаимодействовать по-разному с другими соединениями. Понимание пространственной конфигурации молекул важно для определения ее хиральности и понимания ее свойств.

Также знание о пространственном расположении молекул поможет студентам лучше понять трехмерную структуру сложных органических молекул, которые могут иметь множество функциональных групп и заместителей. Это позволит им находить логические связи между структурой и свойствами молекулы, а также анализировать ее реакционные механизмы и предсказывать возможные проявления.

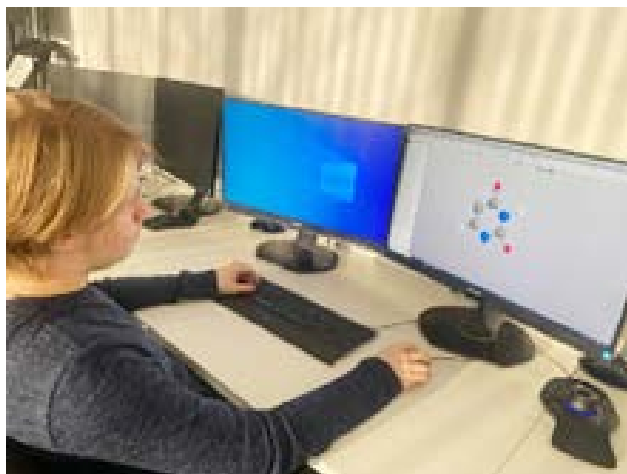
Важно отметить, что представление о пространственном расположении молекул поможет студентам более глубоко понять основы органической химии и применить полученные знания на практике, будь то синтез новых соединений или изучение их биологической активности.

3D-модели молекул, созданные с помощью программы КОМПАС-3D, являются удивительным инструментом при изучении химии. Они открывают новые возможности для студентов и исследователей, помогая им визуализировать сложные структуры и взаимодействия молекул.

3D-модели молекул значительно облегчают понимание геометрии и структуры молекул. Традиционные плоские модели могут быть ограничены и недостаточно наглядными для изучения трехмерных связей и атомных аранжировок. Подобно тому, как 2D-изображение может не передавать всю информацию о физической структуре, 2D-модели молекул ограничивают нашу способность понять, как именно молекулы взаимодействуют друг с другом. 3D-модели молекул, созданные в программе КОМПАС-3D, могут быть вращаемыми и масштабируемыми, позволяя исследователям изучать молекулярные структуры под разными углами и масштабами.

3D-модели молекул, созданные с использованием программы КОМПАС-3D, играют важную роль в изучении химии. Они предоставляют наглядные и интерактивные инструменты для исследования молекулярных структур, взаимодействий и реакций. Эти модели способствуют углубленному пониманию химических концепций и стимулируют интерес студентов к изучению химии. В результате использование 3D-моделей молекул является важным шагом в образовании и научных исследованиях, обогащая нашу способность понимать и манипулировать частицами, из которых состоит наш мир.

Проект по созданию молекул химии в программе КОМПАС-3D актуален, поскольку современные технологии трехмерного моделирования открывают новые



возможности для изучения химии и биологии. Этот проект может быть полезен для различных областей, таких как фармацевтика, медицина, материаловедение, катализ и т. д., где важно понимание молекулярных структур и их воздействие.

#### Результаты проекта:

Создание трехмерных моделей молекул поможет студентам и специалистам лучше понять структуру и функции химических соединений, а также предсказывать их свойства и взаимодействия с другими веществами. Такой подход может стать мощным инструментом для разработки новых лекарств, материалов и технологий.

Ссылка на программу: <https://kompas.ru/>

Более того, проект по созданию молекул химии в программе КОМПАС-3D может стимулировать интерес обучающихся к науке, технологии, инженерии и математике (STEM), поскольку он предоставляет возможность применить знания химии в современной компьютерной среде и визуализировать абстрактные концепции. В целом такой проект позволяет объединить теоретические знания в области химии с практическими навыками трехмерного моделирования, что делает его актуаль-

ным и важным для образования и научных исследований.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. КОМПАС-3D V17. Основы 3D-проектирования. Часть 1. [Электронный ресурс]. Режим доступа <https://3dtoday.ru/blogs/kompas-3d/kompas3d-v17-the-basics-of-3d-design-part-1/> (дата обращения 22.02.2024).
2. Сиддикви, Д. 20 бесплатных программ для 3D-моделирования. [Электронный ресурс]. Режим доступа <https://freelance.today/poleznoe/20-besplatnyh-programm-dlya-3d-modelirovaniya.html> (дата обращения 22.02.2024).
3. Самоучитель (учебник) КОМПАС-3D v16 [электронный ресурс]. Режим доступа <https://autocad-lessons.ru/samouchitel-kompas-3d-v16/> (дата обращения 22.02.2024).
4. Интерактивный самоучитель КОМПАС-3D [электронный ресурс]. Режим доступа <https://archicad-autocad.com/samouchitel-kompas-3d/interaktivniy-samouchitel-kompas-3d.html> (дата обращения 22.02.2024).
5. <https://dmkpress.com/catalog/computer/3d/> (дата обращения 22.02.2024).