

Využití nástrojů společnosti Wolfram Research, Inc. ve výuce chemie

PhDr. Martin Adamec, RNDr. Antonín Jančařík, Ph.D.

Univerzita Karlova v Praze, Pedagogická fakulta

Úvod

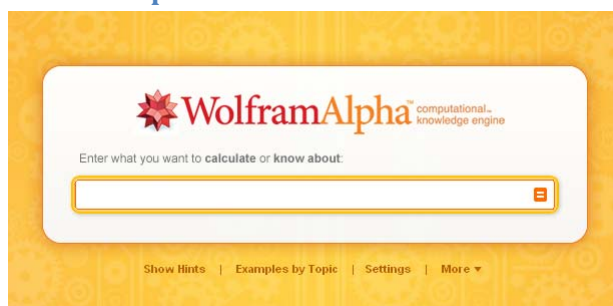
Společnost Wolfram Research, Inc., je po mnoho let spojena s programem Mathematica, který patří mezi špičkové produkty na poli programů pro symbolické výpočty, takzvané computer algebra systémy (CAS). Svým pojetím je tento produkt předurčen pro využití ve vědě, výzkumu a vývoji jako velice silný výpočetní nástroj. V posledních letech lze však pozorovat výraznou snahu firmy Wolfram Research, Inc., oslovit širší skupinu uživatelů a nabídnou své produkty i středním a základním školám. V rámci této nabídky se objevují jak specifické produkty určené pro tuto cílovou skupinu (např. Mathematica Explorer), tak se rozšiřují možnosti produktů stávajících. Z pohledu učitele chemie je jistě zajímavé, že firma Wolfram Research, Inc., používá ve svých produktech přístup do význačných chemických databází, z nichž dokáže data nejen čerpat, ale i dále zpracovávat a vyhodnocovat. Cílem tohoto příspěvku je představit možnosti, jak lze tyto produkty, z nichž některé jsou dostupné i zdarma, využívat ve výuce chemie na středních a základních školách.

Učitelé a nástroje ICT

Učitele, lze podle vztahu k informačním technologiím rozdělit do 4 skupin. První skupinu tvoří učitelé, kteří informační technologie nepoužívají. Druhou učitelé, kteří přejímají kompletní nástroje a používají je přesně tak, jak byly vytvořeny. Třetí skupinu tvoří učitelé, kteří nástroje pro výuku v některých případech modifikují. Do čtvrté řadíme učitele, kteří jsou schopni sami nástroje pro výuku vytvářet. Učitelé samozřejmě mohou procházet vývojem a jejich vztah k ICT se může v průběhu času měnit.

V rámci našeho příspěvku budou představeny nástroje, které mohou učitelé ve své výuce používat přímo a zdarma, bez toho, aby je musely nějakým způsobem upravovat. Zároveň představíme i způsoby, jak lze, s využitím plné verze programu Mathematica upravovat, případně i vytvářet nástroje vlastní.

WolframAlpha



WolframAlpha je on-line nástroj dostupný na stránkách (<http://www.wolframalpha.com>). Na první pohled se jedná o vyhledávač, autoři však volí označení *computational knowledge engine*. Tímto názvem chtějí autoři produktu vyjádřit, že se nejedná o pouhý nástroj, který informace vyhledává, ale že systém zároveň informace zpracovává, vyhodnocuje a provádí požadované výpočty. V nabídce

Examples by Topic lze nalézt konkrétní ukázky toho, jak lze zadávat otázky z oblasti chemie a ukázku okruhů, na něž je možné se ptát.

Jaké informace WolframAlpha tedy WolframAlpha nabízí.

Input interpretation: **iron** (chemical element)

Periodic table location:


symbol	Fe
atomic number	26
atomic weight	55.845

Thermodynamic properties:

phase at STP	solid
melting point	1538 °C (rank: 26 th)
boiling point	2861 °C (rank: 40 th)

(properties at standard conditions)

Při dotazu na železo (iron, Fe), dostáváme informaci o umístění prvku v periodické tabulce prvků a základní informace o prvku (viz obrázek), informace však pokračují. Systém poskytuje informace o vlastnostech materiálových, elektromagnetických či o možných izotopech prvku. Důležitou informací je i zpráva o tom, za jakých zdrojů byly informace pro odpověď čerpány. Stejným způsobem jako na jednotlivé prvky, je možné se ptát i na sloučeniny:

 **WolframAlpha**™ computational...
knowledge engine

H2SO4

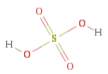
Assuming sulfuric acid | Use [aqueous sulfuric acid](#) instead

Input interpretation: Mathematica form
sulfuric acid

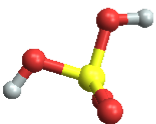
Chemical names and formulas: More

formula	H ₂ SO ₄
compound formula	H ₂ O ₄ S
name	sulfuric acid

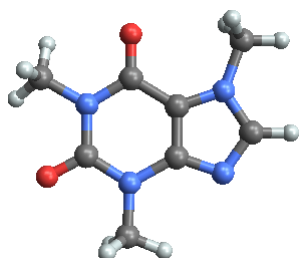
Structure diagram: Show bond information



3D structure: Show space filling



Z pohledu výuky je velice dobré, že kromě základních údajů z ověřených zdrojů učitel získává i strukturní vzorec a 3D model molekuly nalezené sloučeniny, a to i u těch složitějších (na následujícím obrázku je model molekuly kofeinu).



Výhodou vyhledávače WolframAlpha je, že poskytuje obrovské množství informací. Nevýhodou, alespoň v nižších ročnících, je fakt, že tento nástroj je dostupný pouze v anglickém jazyce a česká a anglická terminologie není vždy zcela kompatibilní. Na druhou stranu využívání tohoto nástroje může přispět k rozvoji jazykových dovedností žáků, kteří si rozšíří svoji slovní zásobu.

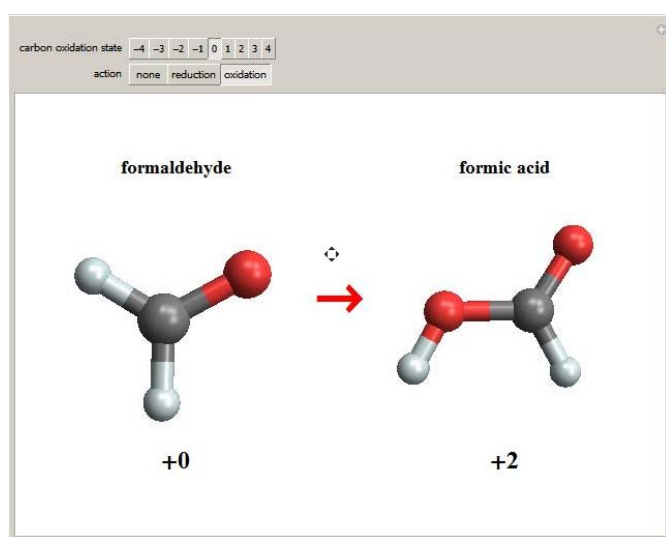
Wolfram Demonstrations Project

The screenshot shows the Wolfram Demonstrations Project website interface. At the top, there is a navigation bar with links for 'HOME', 'TOPICS', 'LATEST', 'ABOUT', 'FAQS', 'PARTICIPATE', and 'AUTHORING AREA'. Below this is a search bar. The main content area is titled 'High School Chemistry' and 'EDUCATIONAL DEMONSTRATIONS'. It features a grid of 12 demonstration thumbnails, each with a title and a small image representing the content. The titles include: 'Oxidation States of Carbon', 'Boiling Point of Water as a Function of Altitude', 'Element Density Comparisons', 'Regulation', 'Build the Periodic Table', 'Latent Heats of Fusion and Vaporization', 'Ideal Gas Law Solver', 'Lemon Batteries', 'An Experiment with Boyle's Law', 'Half-Life of a Radioactive Element', 'Isotope Browser', and 'n-l Rule for Atomic Electron Configurations'.

Na portále Wolfram Demonstrations Project jsou umístěny aplikace vytvořené v programu Mathematica, které mají nekomerční charakter a jsou bezplatně nabízeny dalším uživatelům. Pro spuštění aplikace z tohoto portálu musím mít uživatel nainstalovanou plnou verzi programu Mathematica, nebo program Mathematica Player, který lze přímo ze stránek projektu stáhnout a nainstalovat. Každá z ukázek je na stránkách projektu stručně představena a ke každé ukázce je vystaven i zdrojový kód, který uživatel může, pokud vlastní verzi programu Mathematica, dále upravovat. V rámci tohoto příspěvku představíme tři demonstrace z tohoto portálu.

Oxidační stavy uhlíku (v organických sloučeninách)

("Oxidation States of Carbon" from The Wolfram Demonstrations Project, On-line:
<http://demonstrations.wolfram.com/OxidationStatesOfCarbon/>, Contributed by: S. M. Blinder)



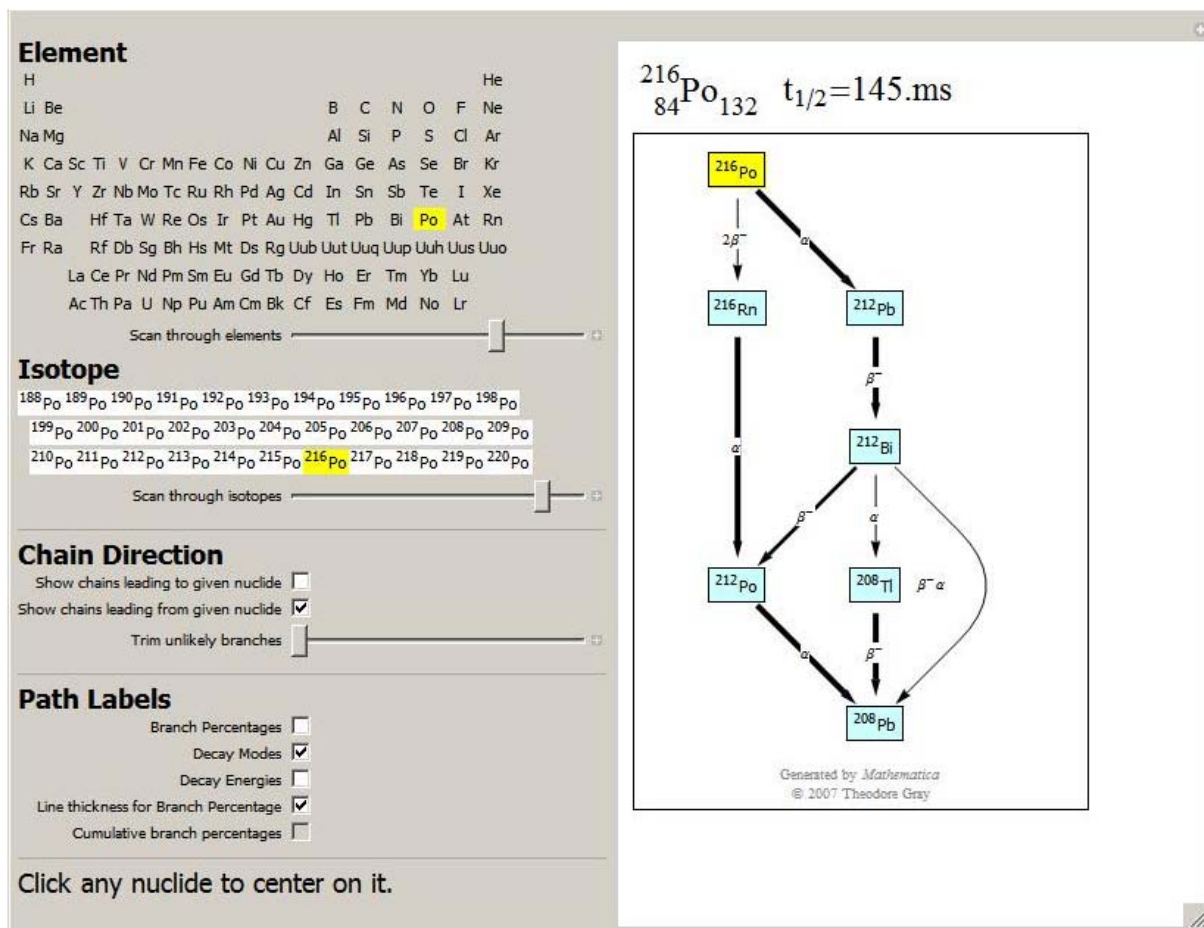
V této ukázce jsou demonstrovány všechny možné oxidační stavy uhlíku na jednoduchých, většinou organických, sloučeninách. Uživatel může zvolit jedno z možných oxidačních čísel (od -4 do +4). Ke každému z nich se zobrazí vybraná sloučenina s atomem uhlíku ve zvoleném oxidačním stavu,

případně jednoduchá reakce oxidace či redukce. Molekuly jsou znázorněny atraktivními 3D modely, se kterými je možné otáčet.

Prohlížeč izotopů

("Isotope Browser" from The Wolfram Demonstrations Project, On line:

<http://demonstrations.wolfram.com/IsotopeBrowser/>, Contributed by: Theodore Gray and Yifan Hu)

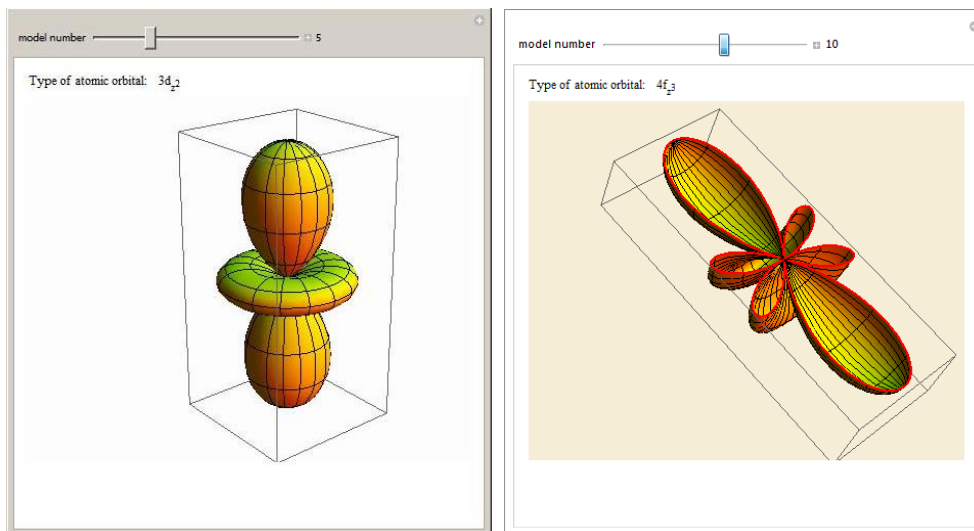


Tato demonstrace umožňuje prohlížet všechny známé nuklidy prvků a sledovat jejich případné rozpadové řady. Uživatel může zvolit prvek, pak se objeví jeho izotopy, nebo v již zobrazeném diagramu kliknout na konkrétní nuklid. U zvoleného nuklidu je zobrazen poločas rozpadu a rozpadová řada, která jím začíná. Dále je možné zapnout zobrazení procentického podílu jednotlivých větví rozpadu, typu záření a jejich energie.

Vizualizace atomových orbitalů

("Visualizing Atomic Orbitals" from The Wolfram Demonstrations Project, On line:

<http://demonstrations.wolfram.com/VisualizingAtomicOrbitals/>, Contributed by: Guenther Gsaller)



Poslední demonstrace umožňuje zobrazit 3D vizualizace 16 základních atomových orbitalů (1s, 2p, 3d a 4f). Modely orbitalů je možné otáčet v prostoru, případně zvětšovat a zmenšovat. S malou změnou ve zdrojovém kódu by také bylo možné zobrazit 3D řez orbitalem (obrázek vpravo).

Mathematica

V programu Mathematica jsou k dispozici čtyři základní příkazy pro přístup k chemickým informacím. Data získaná pomocí těchto příkazů lze dále zpracovávat.

ChemicalData – Poskytuje informace o chemických sloučeninách (resp. skupinách sloučenin a prvcích).

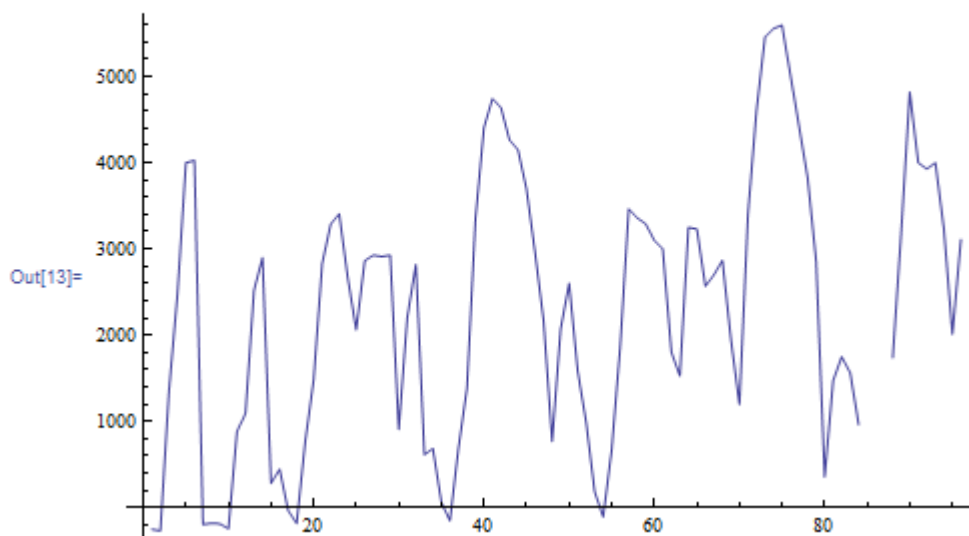
ElementData – Poskytuje základní informace o chemických prvcích a jejich skupinách.

IsotopeData – Poskytuje informace o izotopech jednotlivých prvků.

ParticleData – Poskytuje informace o částicích na subatomární úrovni.

In[13]:=

```
ListLinePlot[Table[ElementData[z, "BoilingPoint"], {z, 105}]]
```



Na ukázce je demonstrováno použití příkazu ElementData pro sestrojení grafu závislosti teploty varu prvků na protonovém čísle. Tento graf je možné využít například při výkladu periodického zákona. Nejprve je sestrojena tabulka s teplotami varu prvků: Table[ElementData[z, "BoilingPoint"], {z, 105}] a v druhém kroku je z těchto dat sestrojen spojnicový graf pomocí příkazu ListLinePlot.

Závěr

Rozvoj ICT technologií má vliv na výuku všech předmětů, chemii nevyjímaje. Nástroje prezentované v tomto článku umožňují obohatit výuku pomocí díky snadného a rychlého přístupu k informacím a jejich následnému zpracování v grafické podobě či statistickému vyhodnocení a přispět tak k jejímu zkvalitnění díky prezentaci dat v širších souvislostech a konotacích.

Informační zdroje

The Wolfram Demonstration Project, On-line: <http://demonstrations.wolfram.com/>

WolframAlpha, On-line: <http://www.wolframalpha.com/index.html>

Informace o využití systému Mathematica na středních školách, On-line: <http://www.mathematica.cz/skoly.php>