STŘEDOŠKOLSKÁ ODBORNÁ ČINNOST



Středoškolská technika 2019

Setkání a prezentace prací středoškolských studentů na ČVUT

VIRTUÁLNÍ CHEMICKÁ LABORATOŘ A SIMULACE CHEMICKÝCH REAKCÍ

Monika Meierová

Gymnázium Nad Štolou

Nad Štolou 1, Praha 7

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem svou práci SOČ vypracovala samostatně a použila jsem pouze prameny a literaturu uvedené v seznamu bibliografických záznamů.

Prohlašuji, že tištěná verze a elektronická verze soutěžní práce SOČ jsou shodné.

Nemám závažný důvod proti zpřístupňování této práce v souladu se zákonem č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších předpisů.

V Praha dne 26.3.2019 Monika Meierová

Poděkování

Chtěla bych poděkovat své konzultantce Mgr. Tereze Bokové za ochotnou pomoc s informatickou částí práce a celkovou podporu. Dále bych chtěla poděkovat své konzultantce RNDr. Štěpánce Selingerové za cenné rady s chemickou částí práce a možnost otestování programu v pátém ročníku osmiletého gymnázia. Za možnost otestování programu ve třetím ročníku šestiletého gymnázia děkuji Ing. Haně Kačerové. Za pomoc s chemickou částí práce děkuji také RNDr. Anně Ježkové a Mgr. Josefu Markovi za užitečné informace z chemického semináře, ze kterého jsem velmi čerpala.

Anotace

Tato práce se zabývá tvorbou programu na výuku chemie rozděleného na části Laboratoř a Reakce. Inspirací pro tvorbu byla aplikace ChemLab a další podobné programy, které uvádím v úvodu práce. Dále popisuji vzhled programu a jeho zdrojový kód, který ho činí lehce upravitelný. Vyzkoušela jsem použití části programu ve dvou třídách víceletého gymnázia a výsledky v práci také uvádím. Na závěr popisuji jeho možná budoucí vylepšení.

Klíčová slova

Virtuální chemická laboratoř; chemické reakce; výuka chemie

Annotation

This paper deals with the creation of a software program for teaching chemistry. The program is divided into the parts Laboratory and Reactions. The inspiration for my work was an application called Chem-Lab and other similar programs, which I am mentioning in the beginning of my paper. I describe, how the program looks like, and it's source code, which makes it easily modifiable. I have tested the use of the program in two high-school classes, and I talk about the results as well. In the end, I describe some possible future improvements of the application.

Keywords

Virtual chemistry laboratory; chemical reactions; teaching chemistry

Obsah

1	Ú	vod		6
2	С	íl prác	e a motivace	7
	2.1	Cíl.		7
	2.2 Mo		tivace	7
3	E	xistují	cí virtuální chemické laboratoře	8
4	V	zhled	programu	9
	4.1 Oki		no Práce v laboratoři	9
	4.2 Ok		no Reakce	.11
	4.	2.1	Anorganické reakce	.11
	4.	2.2	Důkazy kationtů	.12
	4.	2.3	Neznámý vzorek	.13
5	T	vorba	programu	.14
	5.1	Lab	oratoř	.14
	5.1.1		Uchopování a pohybování s pomůckami	.14
	5.1.2		Tlačítka	.14
	5.1.3		Potřebné excelové listy	.14
	5.1.4		Tvorba správných obrázků	.15
	5.1.5		Animace a názvy obrázků	.15
	5.1.6		Výběr správných obrázků při pohybování pomůckou	.15
	5.1.7		Proměnné každého druhu pomůcky	.16
	5.1.8		Důležitost excelu	.16
	5.2	Rea	kce	.16
	5.	2.1	Chemické reakce	.16
	5.2.2		Menu s chemikáliemi	.16
	5.2.3		Excelový list a proměnná "vybrane_polozky"	.17
	5.	2.4	Důkazy kationtů	.17
6	Využití		programu při výuce a testování	.18
	6.1	Info	ormace o testu	.18
	6.2 Sez		nam rovnic v testu	.18
	6.3	Úsp	věšnost rovnic s jednotlivými kovy	.19
	6.3.1		Zinek	.19
	6.3.2		Měď	.20

6.3.4 Železo	21
6.4 Celková úspěšnost	21
6.5 Hodnocení programu studenty	22
7 Možná vylepšení programu	23
8 Závěr	24
9 Použitá literatura	25
10 Seznam obrázků	27

1 Úvod

Když jsem se poprvé setkala s nápadem virtuální chemické laboratoře, velmi mě nadchnul. Jako začátečník v programování jsem pro školní ročníkovou práci vytvořila jednoduché simulace několika anorganických reakcí, které jsem do programu pro soutěž SOČ také přidala.

První část vytvořeného programu je chemická laboratoř, ve které je prostředí pro neutralizační reakce a reakce vytěsňování kovů. Tyto reakce jsem zvolila proto, že vzhled jejich průběhu obsahuje barevné změny, pomocí kterých se učivo dá lépe vysvětlit. U vytěsňovacích reakcí program počítá chemické veličiny, jako je látkové množství, koncentrace a další. U neutralizačních reakcí počítá pH. To umožňuje využít program i při procvičování chemických výpočtů. Druhá část jsou již zmiňované anorganické reakce vždy dvou anorganických chemikálií a animace důkazů několika kationtů rozdělených do tříd podle sulfanového systému. K programu jsem také napsala návod na používání.

Při programování jsem se snažila použít co nejuniverzálnější postup, aby pak bylo snadné program upravovat a vylepšovat. Propojením programovacího jazyka Python s excelovým souborem jsem došla k závěrečnému řešení.

2 CÍL PRÁCE A MOTIVACE

2.1 Cíl

Cílem práce bylo vytvořit virtuální chemickou laboratoř, kterou by učitelé chemie používali jako názornou ukázku při výkladu učiva, případně výpočtech pH nebo výpočtech z chemických rovnic. Dále by s programem mohli studenti pracovat sami, například během laboratorních prací na školách, které si laboratoř nemohou dovolit. Další část programu jsou chemické reakce vždy dvou různých anorganických sloučenin.

Chtěla jsem, aby vytvořený program studentům přiblížil a zpříjemnil učivo chemie a upoutal jejich pozornost. Myslím si, že práce v laboratoři, nebo alespoň její ukázka, tyto cíle splňuje. Virtuální chemická laboratoř sice nemůže nahradit opravdovou, ale pokud si ji škola nemůže dovolit, je dobré ji mít alespoň na počítači. A i když ji škola má, není vždy časově možné názorně ukázat probírané reakce a tím usnadnit jejich pochopení. S reakcemi na počítači ušetří učitelé čas, který by strávili přípravou pomůcek a chemikálií a jejich uklízením. Je s ní také možné ukázat i pokusy, které z bezpečnostních důvodů nelze ve škole provádět. Virtuální laboratoř se tak může stát pravidelnou pomůckou při výuce.

2.2 Motivace

K vytvoření virtuální chemické laboratoře mě vedla ročníková práce, kterou jsem psala minulý školní rok. Jako téma práce jsem se rozhodla spojit téma z chemie "ChemLab", což je chemický program s nasimulovanými laboratorními pokusy [1], kterým jsem se při vlastní tvorbě inspirovala, a téma z informatiky "Naprogramování jednoduché hry". Výsledný program z ročníkové práce vypadal stejně, jako druhá část programu pro soutěž SOČ. Postupem času a získávání větších znalostí z programování jsem přišla na to, jak vytvořit laboratoř, ve které by se dalo pohybovat pomůckami a přelévat chemikálie v nich z jedné do druhé. Nakonec jsem předělala zdrojový kód části s reakcemi, přičemž jsem využila stejné metody jako v části s laboratoří, aby byl zdrojový kód jednotný.

Velmi mě motivovalo to, aby vytvořená laboratoř měla univerzální zdrojový kód. Daly by se tak snadno přidávat chemikálie a pomůcky, ale také vytvářet laboratorní prostředí pro další oblasti chemie.

3 EXISTUJÍCÍ VIRTUÁLNÍ CHEMICKÉ LABORATOŘE

První virtuální chemická laboratoř, se kterou jsem se seznámila, byla aplikace ChemLab [1], kterou máme ve škole dostupnou na počítačích v knihovně. Jak jsem již zmínila, tato aplikace mě inspirovala pro vytvoření programu. Obsahuje několik nasimulovaných úloh z chemické laboratoře spolu s vysvětlením teorie. Pro každou úlohu jsou dostupné pouze potřebné chemikálie, ale uživatel může používat širokou škálu chemických pomůcek. ChemLab jsem krátce vyzkoušela před vytvořením svého programu a tento rok jsem v něm pracovala ve škole v rámci semináře z chemie.

Další příklad virtuální laboratoře jsem našla na webové stránce Virtual Labs [2], na které jsou chemické, biologické i fyzikální laboratoře. Webové stránky jsou ale z Indie, takže jsem laboratoře viděla pouze na videu. Na stránkách ChemCollective [3] jsem našla virtuální chemickou laboratoř, ve které měl uživatel k dispozici spoustu chemikálií, pomůcek, kahan a laboratorní váhy. Simulace chemických, biologických, fyzikálních, matematických a dalších úloh jsem našla i na webových stránkách ASC Chemistry for life [4].

Dále jsem na internetu našla webovou stránku s virtuální chemickou laboratoří [5], ale byla placená, takže jsem ji nevyzkoušela. Další taková stránka s laboratoří vyžadovala registraci, ale na této stránce jsem našla video s pokusy z laboratoře [6]. Tento průzkum jsem však udělala až po vytvoření svého programu.

4 VZHLED PROGRAMU

Program je rozdělen na dvě hlavní části – Práce v laboratoři a Reakce. Práce v laboratoři obsahuje okna Neutralizace a Vytěsňování kovů. V okně Neutralizace probíhají neutralizační reakce, přidáním indikátorů je možné pozorovat barevné změny. V okně Vytěsňování kovů probíhají vytěsňovací reakce mezi kovy a roztoky jejich solí. Reakce jsou dále rozdělené na okna Anorganické reakce a Důkazy kationtů. V okně Anorganické reakce probíhají reakce některých anorganických chemikálií a v okně Důkazy kationtů důkazové reakce některých kationtů s příslušnými činidly.

4.1 Okno Práce v laboratoři

Vzhled obou oken Práce v laboratoři je velmi podobný. Na "regálu" jsou připravené pomůcky skleněná tyčinka v kelímku na zamíchání pevných látek, kádinka o objemu 200 ml a odměrná baňka o objemu 250 ml. V okně Neutralizace je navíc odměrná baňka o objemu 1000 ml (Obr. 1). Do kádinek se dávají chemikálie a probíhají v nich reakce. Odměrné baňky slouží na úpravu koncentrace roztoků. Dále jsou v obou oknech tlačítka s potřebnými chemikáliemi, jejichž chemické vzorce jsou uvedeny na tlačítkách. V okně Neutralizace jsou na výběr kyseliny HCl a HNO₃, zásady NaOH a KOH, voda a indikátory fenolftalein a methylčerveň. V okně Vytěsňování kovů jsou na výběr kovy zinek, měď, stříbro a železo, soli CuSO₄.5H₂O, ZnSO₄ a AgNO₃ a voda.



Obr. 1: Okno Neutralizace

Stisknutím tlačítka vybrané chemikálie se podle jejího skupenství zobrazí okno s výběrem hmotnosti nebo objemu. U hmotností je na výběr 5, 10 a 25 g, u objemů 50, 100, 150 a 200 ml. Potvrzením vybrané hmotnosti nebo objemu se naposledy vybraná kádinka naplní vybranou chemikálií o příslušném objemu nebo





hmotnosti. Pokud je naposledy vybrána odměrná baňka, zobrazí se upozornění, aby uživatel vybral kádinku. Rozmícháním pevných látek ve vodě se vytváří vodné



Obr. 3: Rozmíchaný roztok NaOH

roztoky. Koncentrace roztoků solí a hydroxidů se dá upravit přelitím obsahu kádinky do odměrných baněk, které je možné doplnit vodou na svůj maximální objem. Stisknutím tlačítka s indikátorem se do kádinek kapátkem "kápne" vybraný indikátor, u odměrných baněk to není povoleno.



Obr. 5: Slévání obsahu dvou kádinek

Když si uživatel připraví potřebné chemikálie, přelití obsahu jedné kádinky do druhé se provádí dvojitým kliknutím na jednu z kádinek s vybranými chemikáliemi nad druhou. Tím se přelije obsah té, na kterou uživatel dvakrát kliknul a může tak proběhnout chemická reakce nebo, v případě indikátorů, barevná změna.

Kliknutím pravým tlačítkem myši na jakoukoli pomůcku se objeví menu s položkami "Smazat" a "Obsah pomůcky". Vybráním položky "Smazat" se pomůcka smaže a vybráním položky "Obsah pomůcky" se otevře malé okno, ve kterém je napsaný vzorec chemikálie v pomůcce, pokud není prázdná, nebo v ní není nerozmíchaná pevná látka. V okně Neutralizace se dále zobrazí pH, které je v pomůcce, a pokud je přidán indi-

kátor, je uvedeno který. V okně Vytěsňování kovů jsou pod vzorcem chemikálie napsané chemické veličiny jako je koncentrace, látkové množství a další. Pokud je pomůcka prázdná, ale byla v ní předtím jiná chemikálie než voda nebo kov, je daná pomůcka "špinavá". Takové pomůcky nelze z bezpečnostních důvodů použít, dokud je uživatel nevyčistí. Zobrazí se tedy položka "Vyčistit pomůcku", jejímž vybráním se pomůcka vyčistí. Odměrné baňky mají navíc položku "Doplnit vodu", jejímž vybráním se odměrná baňka doplní vodou na svůj maximální objem. U odměrných baněk naplněných na maximální objem se objeví i položka "Odebrat část", která otevře okno s výběrem

objemů, které lze odebrat do kádinky pro reakci. Na výběr je 50, 100 a 150 ml.



Obr. 4: Okno obsahem pomůcky, ve které proběhla reakce HCl a NaOH

4.2 Okno Reakce

4.2.1 Anorganické reakce

Okno Reakce je určeno pro zobrazování reakcí dvou různých anorganických sloučenin. V horní liště okna je menu s kyselinami HCl, HNO₃ a H₂SO₄, kovy Zn, Cu, Al a Fe, hydroxidem NaOH, halogenidy CuCl₂, KCl a NaCl a solemi NaHCO₃, AgNO₃, CuSO₄ a KMnO₄. Po vybrání první chemikálie není možné vybrat takové chemikálie, které s první vybranou nereagují, nebo bylo složité jejich reakci dohledat. Tyto položky v menu "zašednou", takže se kliknutím na ně nic nestane. Vybráním druhé chemikálie se zobrazí animace a chemická rovnice jejich reakce. Pokud je potřeba reakci zahřívat, zobrazí se kahan a reakce začne probíhat až tehdy, když ho uživatel zapne (Obr. 6).



Obr. 6: Vypínání kahanu během reakce mědi s H₂SO₄

4.2.2 Důkazy kationtů

V okně Důkazy kationtů se zobrazují důkazové reakce některých kationtů rozdělených do tříd sulfanovým systémem. Vlevo jsou tlačítka s názvy chemikálií, které jsou pod sebou uspořádané podle jejich třídy. Uprostřed jsou dvě zkumavky připravené na reakce s činidly.

Vybráním některé z chemikálií se obě zkumavky naplní jejím vzorkem. Vpravo vedle zkumavek se objeví tlačítko s názvem HCl, což je první činidlo, které se používá při dokazování kationtů ze tříd sulfanového systému. Kliknutím na toto tlačítko se do levé zkumavky přidá HCl. Pokud vybraná chemikálie patří do první třídy sulfanového systému, vznikne ve zkumavce sraženina. Vpravo od tlačítka s HCl se v takovém případě objeví tlačítka s chemikáliemi, které mohou vzniklou sraženinu rozpustit. Pod tím se objeví tlačítka s dalšími činidly, kterými lze dokázat kation vybrané chemikálie. Dále se ukáže iontová rovnice dané reakce. U některých chemikálií se žádné rozpouštědlo nezobrazí. Pokud je však kation vybrané chemikálie z vyšší třídy, objeví se pod tlačítkem HCl tlačítko s dalším činidlem. Činidla se objevují v pořadí HCl, H₂S, (NH₄)₂S a (NH₄)₂CO₃. Jejich tlačítka se zobrazují dokud se neobjeví sraženina nebo dokud už není žádné další v pořadí. Aby nebylo možné znovu kliknout na tlačítka s předešlými činidly, tak tato tlačítka "zašednou" a nereagují na stisknutí.

Kliknutím na tlačítko s rozpouštědly se sraženina může rozpustit. Když uživatel klikne na tlačítko s dalším činidlem, přidá se toto činidlo do zkumavky vpravo, ve které je pouze vzorek původní vybrané chemikálie. Následně se ukáže animace jejich reakce a chemická rovnice (Obr. 7).



Obr. 7: Reakce AgNO3 s HCl (levá zkumavka) a K2CrO4 (pravá zkumavka)

4.2.3 Neznámý vzorek

Součástí okna Důkazy kationtů je tlačítko Neznámý vzorek, kterým se otevřené okno Důkazy kationtů nahradí oknem Určování neznámého vzorku. V tomto okně jsou také uprostřed připravené dvě zkumavky, ale jsou již naplněné vzorkem některé z chemikálií v předešlém okně. Tlačítko s prvním činidlem (HCl) je připravené vpravo vedle zkumavek a místo tlačítek s chemikáliemi v levé části okna je výběrové menu s nimi. Pod výběrem je tlačítko Zkontrolovat.

Kliknutím na tlačítko s HCl proběhne stejný proces, jako v okně Důkazy kationtů, ale u žádných reakcí se nezobrazuje rovnice. Cílem je, aby uživatel na základě poznatků z předešlého okna zjistil, o kterou chemikálii se jedná. Rovnici naposledy proběhlé reakce lze zobrazit pomocí tlačítka Ukázat rovnici. Vybráním chemikálie z menu a kliknutím na tlačítko Zkontrolovat se zkontroluje správnost výběru (Obr. 8).



Obr. 8: Správné určení vzorku Pb(NO₃)₂ na základě reakcí s HCl a KI

5 TVORBA PROGRAMU

Program jsem vytvořila v programovacím jazyce Python [7] a grafické rozhraní jsem vytvořila pomocí knihovny Pythonu Tkinter [8]. Na animace bylo potřeba mnoho obrázků, které jsem vytvořila ve vektorovém grafickém editoru Inkscape [9] a následně jsem je vyexportovala do formátu png. Podstatnou část tvoří excelové soubory, ve kterých se ukládají data na zobrazování všech obrázků a výpočty chemických vlastností látek v laboratoři. Na čtení excelových souborů v Pythonu jsem použila knihovnu Openpyxl [10]. Při řešení jednotlivých kroků programování jsem používala internetové zdroje [11], [12], [13], [14].

Obě části programu (laboratoř i Reakce) jsou postavené na stejném principu – propojení Pythonu s MS Excelem.

5.1 Laboratoř

V oknech Práce v laboratoři jsou pomůcky a tlačítka s chemikáliemi umístěné na plátno o stejné velikosti jako okno, do kterého je vložené.

5.1.1 Uchopování a pohybování s pomůckami

Každá pomůcka má svůj "tag", pomocí kterého je rozpoznána při stisknutí myši nad ní a dokud je myš stisknutá a pohybuje se, tvoří se na pozici myši obrázky se stejnou pomůckou a tagem a mažou se ty staré, takže to vypadá, jako že se pomůcka pohybuje.

5.1.2 Tlačítka

Tlačítka jsou na plátno umístěná v cyklu, ve kterém se každému tlačítku přidělí název ze seznamu s chemikáliemi. Funkce, která se vykoná jejich stisknutím, je pro všechna tlačítka stejná – tato funkce vždy rozpozná, která chemikálie byla vybrána, pomocí pořadí z cyklu, ve kterém byla tlačítka umístěna na plátno, a pomocí seznamu chemikálií, ze kterých byla pojmenována.

5.1.3 Potřebné excelové listy

Jak již bylo zmíněno, důležitou součástí je excelový soubor, který obsahuje několik listů. V obou oknech Laboratoře je potřeba excelový list s vlastnostmi pomůcek a jejich reakcemi. V listu s vlastnostmi je připravená tabulka s daty o vlastnostech pomůcek, které se během používání programu upravují. List s reakcemi obsahuje tabulku s daty pro ukazování správných obrázků. Dále je v souboru list s molárními hmotnostmi jednotlivých chemikálií uvedených na tlačítkách, list s vyčíslenými rovnicemi reakcí z obou oken, které mohou proběhnout, a list pro zapsání chemických veličin jako je látkové množství, koncentrace, hustota, pH a další.

V listu s vlastnostmi je připravena tabulka, ve které třetí sloupec obsahuje názvy tagů všech pomůcek. V programu je vždy dvacet kusů od každého druhu pomůcky a tagy jednotlivých druhů se liší pouze o poslední jeden nebo dva znaky textového řetězce, což je číslo od 1 do 20. Další sloupce jsou připravené pro zapsání chemikálie v pomůcce, jejího objemu a hmotnosti, údaje o zamíchání tyčinkou, přidané vodě a potřebné údaje pro zobrazení správného obrázku včetně názvu souboru, ve kterém je umístěn obrázek pomůcky naplněné chemikáliemi.

5.1.4 Tvorba správných obrázků

V listu s reakcemi jsou ve druhém sloupci zapsané reaktanty reakcí – všechny chemikálie, které je možné do pomůcek přidat a také všechny možné kombinace dvou chemikálií, které je v programu povoleno smíchat. Není možné dát do jedné pomůcky dva kovy, dvě kyseliny, dvě zásady nebo dvakrát stejnou chemikálii. Ve třetím sloupci jsou produkty, které vznikají reakcí chemikálií z druhého sloupce. Přidáváním a, v případě odměrných baněk, ubíráním chemikálií nebo po zamíchání pevných látek ve vodě tyčinkou, čímž vznikne roztok, program projde druhý nebo třetí sloupec, podle toho, jestli je potřeba hledat pomocí produktů nebo reaktantů. Když dojde k hledané chemikálii, zapíše hodnoty buněk na stejném řádku a určených sloupcích do předem určených sloupců stejného řádku jako tag vybrané pomůcky z listu s vlastnostmi. Tyto hodnoty slouží ke zobrazování správných obrázků. Sloupec s produkty je důležitý zejména pro pevné látky, ze kterých se má vytvořit vodný roztok. Pokud totiž nejsou zamíchané, jsou považované za reaktanty, po zamíchání však jako produkty. Informace o tom, jestli se má hledat v prvním nebo ve druhém sloupci, je zapsána v tabulce s vlastnostmi pomůcek.

5.1.5 Animace a názvy obrázků

V předem určeném sloupci v listu s reakcemi je zapsaný počet obrázků, který se má zobrazit změnou obsahu pomůcky, a pokud je víc než jeden, ukáže se animace dané reakce. Název všech obrázků je sestaven na základě údajů v tabulce s vlastnostmi z hmotnosti, objemu a čísla počtu obrázků chemikálie v pomůcce. Hmotnost je však větší než nula, pouze pokud se jedná o nezamíchanou pevnou látku ve vodě. Název pro takovou látku o 5 g v 50ml vodě je před zamícháním "5g_50ml_0" a po zamíchání "0g_50ml_0". Soubor s obrázky pro takové chemikálie je také jiný. Opravdová hmotnost pevné látky v roztoku je zapsaná v listu s chemickými veličinami.

5.1.6 Výběr správných obrázků při pohybování pomůckou

Rozpoznávání pomůcek při uchopení spočívá v tom, že se prochází sloupec s tagy, dokud se nenajde tag hledané pomůcky. Na základě údajů zapsaných na stejném řádku v určených sloupcích se vybere správný obrázek, který se bude během pohybování s pomůckou zobrazovat.

5.1.7 Proměnné každého druhu pomůcky

Každý druh pomůcky potřebuje několik globálních proměnných přímo v programu. Pomocí jedné z nich se kontroluje, kolik pomůcek již bylo vytvořeno, a díky tomu se jich nevytvoří víc než dvacet. Další mění svou hodnotu z "False" na "True", pokud je pomůcka stisknuta. Když je hodnota této proměnné jakéhokoli druhu pomůcek "True" a je stisknuté levé tlačítko myši, program začne procházet výše zmíněný sloupec s tagy pomůcek. Když najde tag naposledy vybrané pomůcky, začne se pohybovat s touto pomůckou. Další proměnné jsou důležité pro zobrazení základních obrázků pomůcek. Dále každá pomůcka potřebuje seznam se slovníky, ze kterých se vybírají správné obrázky. Slovníky mají v těchto seznamech předem dané pořadí a v listu s reakcemi je vždy uvedeno i číslo příslušného slovníku, ve kterém se vytváří správné obrázky.

5.1.8 Důležitost excelu

Hodnoty z excelových listů jsou tedy klíčové pro zobrazování obrázků i počítání chemických veličin. Díky tomu je také snadné do programu přidávat další pomůcky a chemikálie. Nové pomůcky vyžadují pouze své globální proměnné, přidání tabulky s jejich tagy, předem danými vlastnostmi a prostorem pro další vlastnosti do excelového listu a vytvořené obrázky se všemi možnými kombinacemi chemikálií, které v dané pomůcce mohou být. U nových chemikálií zase stačí přidat je do seznamu s chemikáliemi, v excelových listech doplnit jejich reakce a molární hmotnosti a vytvořit obrázky jejich reakcí. Také by nebylo problematické vytvořit okno s novou tématikou jako například srážecí reakce a další.

5.2 Reakce

Tuto část jsem vytvořila jako první bez pomoci Excelu, ale po naprogramování laboratoře jsem její zdrojový kód upravila tak, aby byl postavený na stejném principu. Tato úprava byla výhodná z hlediska délky i čitelnosti kódu. Také je nyní snadnější kód upravovat a přidávat chemikálie.

5.2.1 Chemické reakce

Předtím, něž jsem vytvořila animace reakcí, jsem hledala jejich rovnice. Při hledání jsem používala internetové a knižní zdroje [15], [16], [17], [18], [19], [20], [21]. U méně běžných reakcí jsem se na jejich správnost ptala učitelů chemie.

5.2.2 Menu s chemikáliemi

V horní liště okna Reakce je menu s chemikáliemi, které je vytvořeno na stejném principu jako tlačítka v okně Laboratoř. Každé položce s chemikálií je přiřazena stejná funkce a v této funkci se získá vzorec vybrané chemikálie ze seznamu, ze kterého byly pojmenovány položky s nimi. Vzorec chemikálií je dále použit při zobrazování reakcí, což je také kontrolováno z této funkce.

5.2.3 Excelový list a proměnná "vybrane_polozky"

Tato část programu potřebuje pro zobrazení animací proměnnou "vybrane_polozky", do které se zapisují vybrané položky z menu, a excelový soubor se dvěma listy.

V prvním listu jsou v prvním sloupci vzorce všech chemikálií z menu a ve druhém položky, které nemá být možné po vybrání chemikálie v prvním sloupci na stejném řádku vybrat. Vybráním první položky program projde první sloupec a když najde vzorec vybrané chemikálie, neumožní vybrání položek s chemikáliemi zapsanými ve druhém sloupci na stejném řádku. Tyto položky "zašednou" a nereagují tak na stisknutí.

Ve druhém listu jsou v prvním sloupci všechny možné kombinace reaktantů, které lze v programu zvolit. Ve třetím sloupci je zapsaná chemická rovnice dané reakce a v dalších sloupcích jsou údaje potřebné ke zobrazení animace, například název souboru s obrázky a jejich počet v animaci, jestli je potřeba chemikálie zahřívat kahanem nebo jestli se uvolňují bublinky. Vybráním druhé chemikálie program projde sloupec s reaktanty ve druhém listu a když najde ty vybrané, použije hodnoty v předem určených sloupcích na stejném řádku, aby se zobrazila chemická rovnice a příslušná animace.

5.2.4 Důkazy kationtů

Okno Důkazy kationtů jsem do programu přidala jako poslední. Ve škole jsme na semináři z chemie šli do laboratoře, abychom viděli, jak vypadají srážecí reakce kationtů podle jejich tříd. Rozhodla jsem se tedy, že vytvořím také okno s animacemi těchto reakcí. Při tvorbě jsem použila knižní zdroje [22], abych zjistila potřebné chemické reakce.

Excelový list tohoto okna je ve stejném excelovém souboru, jako list okna Reakce, protože zobrazování jejich obrázků vykonává stejná funkce. Stačilo pouze upravit kód tak, aby se zobrazovala všechna tlačítka s chemikáliemi a činidly, která jsou pro důkazy kationtů potřeba. Pro okno Určování neznámého vzorku jsem přidala funkci, která zkontrolovala volbu položky z menu. Stále však hrálo důležitou roli pořadí názvů chemikálií v seznamu a data pro zobrazovaní obrázků v excelovém listu.

6 VYUŽITÍ PROGRAMU PŘI VÝUCE A TESTOVÁNÍ

Animace neutralizačních a vytěsňovacích reakcí by měly sloužit jako pomůcka při výuce chemie těchto témat na druhém stupni základní školy. Na střední škole by se pak animace mohly využít v rámci výpočtů z chemických rovnic a počítání pH. Důkazy kationtů lze použít pro ukázku postupu při určování kationtů a v okně Určování neznámého vzorku by si studenti následně mohli procvičit jejich zařazování do tříd. Okno s reakcemi sice neobsahuje animace uceleného tematického okruhu, ale daly by se využít jako zpestření výuky při výkladu o jaké-koliv chemikálii z menu v okně Reakce.

Reálné použití programu jsem otestovala na jedné třídě pátého ročníku osmiletého gymnázia a jedné třídě třetího ročníku šestiletého gymnázia, obě třídy z gymnázia Nad Štolou. Otestovala jsem okno Vytěsňování kovů formou testu s chemickými rovnicemi a dotazníkem, kterým jsem zjišťovala názor studentů na užitečnost programu. Toto učivo studenti probírali před dvěma roky. Cílem bylo zjistit, jestli učivu studenti lépe rozumí po shlédnutí animací z programu. Na obou stranách testu bylo stejných dvanáct rovnic chemických reakcí kovů a jejich solí, které jsou na výběr v programu. První stranu měli za úkol vyplnit bez pomoci programu a k dispozici měli pouze zjednodušenou Beketovovu řadu napětí kovů vytištěnou na první straně testu. Před doplněním každé rovnice na druhé straně jsem studentů ukázala příslušnou animaci, ve které mohli pozorovat, kdy se který kov vytěsňuje. Výsledky jsem následně zpracovala a vytvořila grafy s procenty úspěšnosti.

6.1 Informace o testu

Test s dotazníkem vyplnilo celkem 51 studentů, ale výsledky pěti z nich jsem nezahrnula do celkové statistiky. Dva z nich nevyplnili druhou stranu testu a další dva vyplnili pouze velmi málo rovnic. Jeden student napsal, že animace nepochopil, a proto nevyplnil druhou stranu, i když měl celou první stranu vyplněnou správně. Procenta úspěšnosti jsou tedy sestavena z odpovědí 46 studentů.

Studenti většinou nevyčíslovali chemické vzorce vzniklých sloučenin, nebo je vyčíslovali špatně. Hodnotila jsem tedy pouze to, jestli správně určili, který kov se vytěsňuje, a jaká sůl kterého kovu vzniká. Nehodnotila jsem však jejich vyčíslení. Účelem nebylo zjistit, jestli studenti umí sestavit vzorce vzniklých sloučenin, protože to z animací patrné nebylo.

6.2 Seznam rovnic v testu

- $1. \quad Zn + CuSO_4 \rightarrow ZnSO_4 + Cu$
- 2. $Zn + ZnSO_4 \rightarrow nereaguje$
- 3. $Zn + 2AgNO_3 \rightarrow Zn(NO_3)_2 + 2Ag$

- 4. $Cu + CuSO_4 \rightarrow nereaguje$
- 5. $Cu + ZnSO_4 \rightarrow nereaguje$
- 6. $Cu + 2AgNO_3 \rightarrow Cu(NO_3)_2 + 2Ag$
- 7. $Ag + CuSO_4 \rightarrow nereaguje$
- 8. $Ag + ZnSO_4 \rightarrow nereaguje$
- 9. $Ag + AgNO_3 \rightarrow nereaguje$
- 10. Fe + CuSO₄ \rightarrow FeSO₄ + Cu
- 11. Fe + ZnSO₄ \rightarrow nereaguje
- 12. Fe + $3AgNO_3 \rightarrow Fe(NO_3)_3 + 3Ag$

6.3 Úspěšnost rovnic s jednotlivými kovy

6.3.1 Zinek

Reakce se zinkem měly bez programu úspěšnost vyřešení 59 % a s programem 70 % (Obr. 9). Nárůst úspěšnosti, který byl 11 %, byl nejmenší v porovnání s ostatními kovy. U prvních dvou rovnic, ve kterých reagoval zinek se síranem měďnatým a pak se síranem zinečnatým (rovnice č. 1 a 2), úspěšnost vzrostla. U třetí rovnice, která popisovala reakci zinku a dusičnanu stříbrného (rovnice č. 3), úspěšnost klesla. V animaci vytěsňoval zinek stříbro z bezbarvého roztoku dusičnanu stříbrného. Je možné, že nebylo dostatečně vidět vytěsňované stříbro a to studenty mohlo zmást. Bylo by tedy třeba vylepšit obrázky pro animace reakcí šedých kovů s bezbarvými roztoky, u kterých se vytěsňuje jiný šedý kov.



Obr. 9: Úspěšnost rovnic se zinkem

6.3.2 Měď

Reakce s mědí měly celkový nárůst úspěšnosti 27 %, což byl druhý největší nárůst ze všech kovů. Úspěšnost bez programu byla 45 % a s programem 72 % (Obr. 10). Úspěšnost prvních dvou rovnic mědi, ve kterých reagovala měď nejdříve se síranem měď natým a pak se síranem zinečnatým (rovnice č. 4 a 5), úspěšnost vzrostla. U třetí rovnice reakce mědi s dusičnanem stříbrným (rovnice č. 6) úspěšnost opět klesla. V této animaci se hnědočervená měď pokryla šedivým stříbrem a bezbarvý roztok dusičnanu stříbrného se změnil na modrý roztok síranu měď natého. Barevné změny byly tedy jasně vidět, a proto mě výsledek překvapil.





6.3.3 Stříbro

Úspěšnost reakcí se stříbrem bez programu byla 23 % a s programem 60 % (Obr. 11). Tyto reakce měly ze všech kovů největší nárůst úspěšnosti, který byl 37 %, ale jejich úspěšnosti byly nejmenší ze všech reakcí bez programu i s programem v porovnání s ostatními kovy. Stříbro bylo jediným kovem, který nereagoval se žádným roztokem, a nejspíš proto byla úspěšnost tak nízká.



Obr. 11: Úspěšnost rovnic se stříbrem

6.3.4 Železo

Úspěšnost reakcí železa bez programu byla 61 % a s programem 78 % (Obr. 12). Reakce se železem měly nejvyšší úspěšnost s programem v porovnání s ostatními kovy. Celkový nárůst úspěšnosti reakcí se železem byl však pouze 17 %, což byl druhý nejmenší nárůst ze všech kovů, přestože animace reakcí se železem měly nejvíc barevných změn. Reakcí železa se síranem měďnatým se vytěsnila hnědočervená měď a modrý síran měďnatý zreagoval na zelený roztok síranu železnatého. Reakcí železa a dusičnanu stříbrného se vytěsnilo stříbro a bezbarvý roztok dusičnanu stříbrného se změnil na oranžovohnědý roztok dusičnanu železitého.



Obr. 12: Úspěšnost rovnic se železem

6.4 Celková úspěšnost

Celková úspěšnost bez programu byla 47 % a s programem 70 % (Obr. 13). Celkový nárůst úspěšnosti byl tedy 23 %.



Obr. 13: Celková úspěšnost rovnic všech rovnic

Studenti nejvíce chybovali u reakcí, ve kterých reagoval kov s jeho vlastní solí (rovnice č. 2, 4 a 9). Spouta studentů se snažila zapsat jejich slučování. Nejúspěšnější pak byly reakce zinku a síranu měďnatého (rovnice č. 1), železa a síranu zinečnatého (rovnice č. 10) a železa s dusičnanem stříbrným (rovnice č. 12). Vysoké úspěšnosti měla také reakce mědi a dusičnanu stříbrného (rovnice č. 6), i když u této reakce byla úspěšnost bez programu horší, než s programem.

6.5 Hodnocení programu studenty

Na otázku, zda studenti vidí práci s programem jako užitečnou 73 % studentů vybralo možnost ano a 5 % možnost ne. Dalších 5 % studentů vybralo, že je jim to jedno a dva studenti připsali možnost, že neví. Jeden respondent k odpovědi nevím připsal, že to každý může pochopit jinak. Několik studentů do části se zhodnocením napsalo, že tomu nerozumí nebo že si to nepamatují. Z toho, co studenti napsali, jsem usoudila, že by princip vytěsňovacích reakcí potřebovali připomenout také ústně, aby lépe pochopili animace. Pokud by učitel tuto část programu využil během výkladu vytěsňovacích reakcí, na základě hodnocení studentů se dá předpokládat, že by jim animace mohly pomoct. Studenti, kteří učivu již rozumí, by však mohli být touto částí programu i testováni.

7 MOŽNÁ VYLEPŠENÍ PROGRAMU

Program by se dal vylepšit zvýšením počtu chemikálií a pomůcek v oknech Laboratoře. Pokud by se přidalo větší množství chemikálií, bylo by dobré vytvořit menu, ze kterého by je uživatel vybíral. Toto menu by nahradilo tlačítka, aby byl na ploše dostatek místa. Pro větší počet pomůcek by bylo třeba vytvořit větší "regál", ve kterém by byly naskládané základní pomůcky, jako jsou kádinky a baňky, ve zmenšené velikosti. Vytažením z "regálu" by se zvětšili na použitelnou velikost. Další pomůcky by mohly být umístěny v menu. Dále by bylo užitečné přidat do oken Laboratoře kahan pro reakce, které je potřeba zahřívat. Možnost vytváření chemických aparatur by z programu udělalo lepší laboratoř.

V okně Reakce by také bylo dobré přidat další chemikálie. V okně Důkazy kationtů by při zvýšení počtu chemikálií bylo potřeba, stejně jako v oknech Laboratoře, vyměnit tlačítka s chemikáliemi a dalšími činidly kromě těch základních, za menu, aby nezabírala příliš mnoho místa. Také by se mohlo vytvořit okno i s jiným systémem rozdělení než sulfanovým.

Princip celého programu by však zůstal stejný – stále by se používala data z excelového souboru. Například pro vytvoření reakcí, které je třeba zahřívat, by stačilo do listu s vlastnostmi i reakcemi přidat potřebné sloupce a zdrojový kód upravit tak, aby je využil.

8 ZÁVĚR

Cíl vytvořit virtuální chemickou laboratoř byl splněn vytvořením oken Laboratoře. V těchto oknech jsou základní pomůckou kádinky, do kterých se přidávají chemikálie a probíhají v nich chemické reakce. Odměrné baňky jsou připravené na úpravu koncentrací chemikálií. Skleněná tyčinka slouží na zamíchání pevných látek ve vodě, čímž se vytvoří vodný roztok. V každém okně je několik nejběžnějších chemikálií, které se používají v oblastech chemie probíraných v oknech laboratoře.

Do programu jsou přidaná varovná upozornění, která se objeví, pokud uživatel špatně zachází s chemikáliemi nebo pomůckami. V opravdové laboratoři by se z bezpečnostních důvodů neměla lít voda na kyseliny a hydroxidy. Proto se v okně Neutralizace objeví varovné upozornění, pokud se uživatel snaží přidávat vodu na kyselinu nebo na pevný hydroxid. V obou oknech laboratoře také není možné použít špinavou pomůcku, dokud ji uživatel nevyčistí. Jedná se o pomůcku, ve které byla před vyprázdněním jiná chemikálie než kov nebo voda. Tato varovná upozornění by měla pomoct studentům naučit se dodržovat zásady bezpečnosti v laboratoři. Některá upozornění jsem však přidala pouze pro to, aby byl program jednodušší.

V části Práce v laboratoři jsem jako první vytvořila okno Neutralizace se všemi potřebnými funkcemi pro pohybování pomůckami a přidávání a přelévání chemikálií. Následně jsem vytvořila okno Vytěsňování kovů. Stačilo však pouze přidat tlačítko a funkci pro vytvoření tohoto okna a omezit některé případy smíchání nově přidaných chemikálií v již vytvořených funkcích. Také bylo potřeba přidat excelové listy s reakcemi a vlastnostmi Zdrojový kód části Laboratoře jinak zůstal stejný, čímž jsem ověřila, že je snadné přidávat okna s novými tématy.

Jak jsem již zmínila, zdrojový kód okna Anorganické reakce z minulého roku jsem upravila tak, aby také využíval excelový soubor. Také jsem vytvořila okno Důkazy kationtů, což původně nebylo v plánu. Do zdrojového kódu pro část Reakce jsem přidala funkce pro vytvoření oken Důkazy kationtů a Určování neznámého vzorku. Do hlavní funkce pro zobrazování obrázků reakcí jsem přidala příkazy specifické pro Důkazy. Potom ale stačilo vytvořit excelový list, který měl stejnou strukturu jako list okna Anorganické reakce a program využil jeho data pro tvorbu správných obrázků a zobrazení chemických rovnic se správnými indexy. Ověřila jsem tak, že i do části Reakce lze přidávat animace dalších reakcí.

Při zkoušení programu na studentech jsem zjistila, že je potřeba, aby student věděl, co se v programu ukazuje. Učitel chemie tak může používat program při výkladu, aby si studenti učivo lépe představili. Pokud však má být program použit při samostatné práci nebo při testování, je potřeba, aby student měl základní chemické znalosti, které se od něj na jeho úrovni požadují.

9 POUŽITÁ LITERATURA

- [1] ChemLab A Virtual Chemistry Lab: model science software [online]. Waterloo (Ontario): Model Science Software, ©2019 [cit. 2019-3-10].
 Dostupné z: https://www.modelscience.com/index.html
- [2] *Virtual Labs: An MHRD Govt of India Initiative* [online]. Delhi (India): Wireless Research Lab, 2019 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: http://www.vlab.co.in/
- [3] ChemCollective: Online Resources for Teaching and Learning Chemistry [online]. National Science Foundation [cit. 2019-03-11].
 Dostupné z: http://chemcollective.org/home
- [4] ASC Chemistry for life: Virtual Chemistry and Simulations [online]. Washington DC (USA): American Chemical Society, ©2019 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: https://www.acs.org/content/acs/en/education/students/highschool/chemistryclubs/acti activi/simulations.html
- [5] Virtual Chemistry Lab: ...Integrating Computer into Chemistry Practical [online]. Owerri (Nigeria): Virtual Chemistry Lab, ©2019 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: https://www.vclokoreweb.com/index
- [6] *Realism: Virtual science labs anytime, anywhere* [online]. Boston (Massachusetts): Realism, ©2018 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: https://realism.io/simulations
- [7] Anaconda cloud [online]. Anaconda, ©2019 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: https://anaconda.org/
- [8] 24.1. Tkinter Python interface to Tcl/Tk [online]. Python Software Foundation, ©1990-2019 [cit. 2019-03-11].
 Dostupné z: https://docs.python.org/2/library/tkinter.html
- [9] *Inkscape: Draw Freely* [online]. Boston (Massachusetts): Free Software Foundation, 1989 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: https://inkscape.org/en/
- [10] OpenPyXI: A Python library to read/write Excel 2010 xlsx/xlsm files [online]. Sphinx,
 ©2010-2019 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: https://openpyxl.readthedocs.io/en/stable/
- [11] An Introduction to Tkinter (Work in Progress) [online]. django, 2005 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: https://effbot.org/tkinterbook/
- [12] Stack overflow [online]. Stack Exchange, ©2019 [cit. 2019-03-11].
 Dostupné z: https://stackoverflow.com/

- [13] *Openpyxl tutorial* [online]. Jan Bodnar, ©2007-2019 [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: http://zetcode.com/articles/openpyxl/
- [14] Python 3.7.2 documentation [online]. Python Software Foundation, ©2001-2019
 [cit. 2019-03-12]. Dostupné z: https://docs.python.org/3/index.html
- [15] Chemiday [online]. ChemiDay.com, ©2019 [cit. 2019-3-11]. Dostupné z: https://chemiday.com/en/reaction/
- [16] *Chemické rovnice online!* [online]. Michal Punčochář [cit. 2019-03-11]. Dostupné z: http://chemequations.com/cs/
- [17] Gymnázium a SOŠPg Jeronýmova [online]. Liberec: Gymnázium a SOŠPg Jeronýmova, 2007 [cit. 2018-03-18]. Dostupné z: http://canov.jergym.cz/index.htm
- [18] MAREČEK, Aleš a Jaroslav HONZA. Chemie pro čtyřletá gymnázia: 1. díl. 3. přeprac. vyd. Olomouc: Nakladatelství Olomouc, 2013. ISBN 80-7182-055-5.
- [19] MAREČEK, Aleš a Jaroslav HONZA. *Chemie pro čtyřletá gymnázia: 2.díl.* 3. přeprac. vyd. Olomouc: Nakladatelství Olomouc, 2014. ISBN 80-7182-141-1.
- [20] GREENWOOD, N. N., A. EARNSHAW a František JURSÍK. *Chemie prvků [Orig.: Chemistry of the elements]*. Sv. I. Praha: Informatorium, 1993. ISBN 80-85427-38-9.
- [21] GREENWOOD, N. N., A. EARNSHAW a František JURSÍK. *Chemie prvků [Orig.: Chemistry of the elements]*. Sv. II. Praha: Informatorium, 1993. ISBN 80-85427-38-9.
- [22] Chemie analytická. Olomouc: Nakladatelství FIN, 1996. ISBN 80-7182-005-9

10 SEZNAM OBRÁZKŮ

Obr. 1: Okno Neutralizace	9
Obr. 2: Kádinka naplněná 10 g NaOH a 50 ml vody	10
Obr. 3: Rozmíchaný roztok NaOH	10
Obr. 5: Okno obsahem pomůcky, ve které proběhla reakce HCl a NaOH	10
Obr. 4: Slévání obsahu dvou kádinek	10
Obr. 6: Vypínání kahanu během reakce mědi s H ₂ SO ₄	11
Obr. 7: Reakce AgNO3 s HCl (levá zkumavka) a K2CrO4 (pravá zkumavka)	12
Obr. 8: Správné určení vzorku Pb(NO ₃) ₂ na základě reakcí s HCl a KI	13
Obr. 9: Úspěšnost rovnic se zinkem	19
Obr. 10: Úspěšnost rovnic s mědí	20
Obr. 11: Úspěšnost rovnic se stříbrem	20
Obr. 12: Úspěšnost rovnic se železem	21
Obr. 13: Celková úspěšnost rovnic všech rovnic	21
1	