

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ІНСТИТУТ ВИСОКИХ ТЕХНОЛОГІЙ

Завідувач кафедри супрамолекулярної хімії

проф. Сергій Вікторович Рябухін

Протокол №_____ засідання кафедри

від “_____” _____ 2023 р.

**СТВОРЕННЯ МОДУЛЯ “ВІРТУАЛЬНА ЛАБОРАТОРІЯ
ФІЗИЧНИХ МЕТОДІВ ДОСЛІДЖЕННЯ” НА ПЛАТФОРМІ MOODLE**

Випускна кваліфікаційна робота бакалавра

студента спеціальності 102 «Хімія»

ОП «Хімія (високі технології)»

Косарєва Юрія Ігоровича

Науковий керівник

директор Навчально-наукового

інституту високих технологій

д. х. н. проф. **Комаров Ігор Володимирович**

Оцінка захисту роботи

Київ – 2023 р.

АНОТАЦІЯ

Косарєв Ю.І. Створення модуля “Віртуальна лабораторія фізичних методів дослідження” на платформі Moodle. – Випускна кваліфікаційна робота бакалавра за спеціальністю 102 Хімія ОП «Хімія (високі технології)».

Задачі, які студенти розв’язують під час вивчення фізичних методів досліджень зазвичай дозволяють навчитися аналізувати їх результати, проте, є далекими від реальних задач, які виникають під час роботи в лабораторії, де важливим є також правильний вибір потрібних методів. При цьому важливим при виборі є і ціна різних методів. В даній роботі було створено і описано новий навчальний модуль на онлайн платформі Moodle та платформі H5P з подальшим інтегруванням в Moodle, який дозволяє ознайомити студентів з реальними завданнями, а також перевірити вміння студентів розв’язувати такі завдання, вибрати потрібні для конкретних задач види аналізів та інтерпретувати їх результати.

Ключові слова: Moodle, H5P, тестування, інтерактивна освіта, вирішення задач

ANNOTATION

Problems that students solve during the study of physical research methods usually allow learning to analyze their results, however, they are far from the real problems that arise during work in the laboratory, where the correct choice of the necessary methods is also important. At the same time, the price of various methods is also important when choosing. In this work, a new educational module was created and described on the Moodle online platform and the H5P platform with further integration into Moodle, which allows students to be introduced to real tasks, as well as to test students' ability to solve such tasks, to choose the types of analyzes required for specific tasks and interpret their results.

Keywords: Moodle, H5P, quiz, interactive education, problem solving

Перелік умовних скорочень

ЯМР	Ядерний Магнітний Резонанс
PHP	PHP: Hypertext Preprocessor; PHP: Препроцесор гіпертексту
LTI	Learning Tools Interoperability; Взаємодія засобів навчання
HRMS	High-Resolution Mass Spectrometry; Мас-Спектрометрія Високої Роздільної Здатності
ppm	parts per milion; мільйонних часток
HSQC	Heteronuclear Single Quantum Coherence; Гетероядерна Одноквантова Когерентність
COSY	Correlation Spectroscopy; Кореляційна Спектроскопія
HMBC	Heteronuclear Multiple Bond Correlation; Гетероядерна Кореляція Множинних Зв'язків
NOESY	Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy; Спектроскопія Ядерного Ефекту Оверхаузера
nD	n-Dimensional, n-Вимірний
APT	Attached Proton Test; Тест Приєднаних Протонів
SMILES	Simplified Molecular-Input Line-Entry System; Система Спрощеного Представлення Молекул в Рядку Введення

Зміст

Перелік умовних скорочень	3
Вступ	5
Розділ 1. Огляд літератури	6
1.1. Огляд існуючих завдань з фізичних методів дослідження.....	6
1.2. Огляд можливостей реалізації модуля.....	7
1.3. Огляд можливостей реалізації системи оцінювання.....	13
Розділ 2. Процедури створення завдань	15
2.1 Постановка задачі	15
2.2 Процедура створення завдання з використанням платформи H5P	28
2.2 Процедура створення завдання з використанням активності Lesson...	32
2.3 Процедура додавання активності Quiz з молекулярним редактором...	36
Висновки	38
Подяки	39
Список використаних джерел	40

Вступ

Головною метою будь якого навчального курсу є підготовка студентів для подальшого працевлаштування, а також поточний контроль знань та навичок отриманих під час його вивчення. Протягом останніх трьох років велика частина навчальних закладів частково або повністю перейшли на дистанційну форму навчання, спочатку в зв'язку з пандемією коронавірусної хвороби COVID-19 і карантинном, що почався навесні 2020 року, а потім через повномасштабне вторгнення російської федерації в Україну 24 лютого 2022 року.

В зв'язку з цим виникла потреба в інтерактивних завданнях, що дозволяють студентам закріпити здобуті знання, а також викладачам оцінити їх. Таким чином, за останні кілька років студентами разом з викладачами нашого інституту була створене онлайн середовище з фізичних методів аналізу, яке дозволило перевіряти певні знання, зокрема вміння зіставляти фрагмент молекули і сигнали на спектрі, зумовлені цим фрагментом. Також у вільному доступі є достатня кількість завдань з фізичних методів, наприклад, з встановлення структури з наданого набору спектрів, що також і було реалізовано в нашому навчальному середовищі на платформі Moodle. Проте, хоч ці види завдань дозволяють студентам отримати навички інтерпретації спектрів та закріпити знання з фізичних методів аналізу, вони залишають прогалину. Раніше була описана ігрова частина та варіант реалізації такого модуля. Враховуючи це, а також коштовність та часозатратність деяких методів аналізу та обмежений доступу до деяких з них для спеціаліста в області фізичних методів аналізу є важливим також і правильна побудова стратегії підбору методів, що і було вирішено реалізувати в цій роботі.

Метою роботи є створення модулю з задачами, які виникають в лабораторії фізичних методів аналізу, а саме — розв'язання завдань з

самостійним вибором експериментів, а також розробка системи, яка могла б автоматично оцінити правильність розв'язку студента, враховуючи ціну кожного експерименту.

Завданням роботи є створення вищезазначеного модуля на платформі Moodle та H5P з подальшим інтегруванням в Moodle.

Об'єкт дослідження Moodle, пов'язані платформи, та інтернет ресурси з задачами з фізичних методів аналізу.

Предмет дослідження можливості платформи Moodle та пов'язаних платформ для створення інтерактивних завдань.

Розділ 1. Огляд літератури

1.1. Огляд існуючих завдань з фізичних методів дослідження

Оскільки в цій роботі описано інтерактивний онлайн модуль з завданнями з фізичних методів дослідження, була досліджена і проаналізована частина подібних завдань, які є у відкритому доступі. Існуючі завдання можна поділити на види, з урахуванням того, на перевірку яких знань спрямований конкретний тест:

1. Теоретичні знання про принцип та особливості роботи методу дослідження;
2. Вміння інтерпретації результатів методів дослідження.

Задачі, які підпадають під різні категорії мають різні варіанти реалізації і доречним є навести певні приклади. Більшість завдань в вільному доступі реалізовані як прості тестові завдання з можливістю вибору правильної відповіді і подальшої можливості перевірки правильності вибраної відповіді чи відповідей, якщо є можливість вибору кількох правильних відповідей.

Якщо говорити про типи запитань, що можна віднести до першої групи, то це можуть бути як загальні питання про те, для чого застосовується певний вид аналізу[1], так і більш специфічні питання - такі, як встановлення причин виникнення певних недосконалостей сигналів у ЯМР спектрах[2], тому потенційно цю групу можна розділити ще на підгрупи.

Щодо другого типу завдань, то тут можна відзначити такі варіанти завдань. Першим варіантом можна вважати завдання, відповіддю на які є просто інформація отримана з окремого спектра, наприклад маса молекулярного йона отримана з мас спектра[3]. Другим доречно виділити завдання з встановлення структури речовини з заданого набору спектрів[4,5]. Варто відзначити також, що другий вид завдань був добре реалізований на платформі Moodle студентами нашого інституту.

1.2. Огляд можливостей реалізації модуля

В зв'язку з тим, що наш інститут має онлайн ресурс із задачами з фізичних методів аналізу на платформі Moodle, нові завдання є сенс створювати саме там. Під час аналізу можливостей платформи було виділено три можливих варіанти реалізації мети роботи.

1. Створення власного плагіну

Цей варіант є найбільш трудомістким і потребує навичок з програмування, зокрема з використанням РНР: Hypertext Preprocessor (РНР). Раніше ігрова частина і теоретичні засади для створення такого модуля були описані Шамраєм Денисом в його магістерській роботі[6]. Проте описаний ним варіант має ряд недоліків.

Недоліком є те, що такий варіант не є зручним для користувача. Пропонується спочатку обмежувати доступ до файлів зі спектрами, а потім надавати доступ до спектрів на основі відповіді на питання тесту. Якщо проходити тест ітераціями, то в разі створення такого тесту студент

муситиме після кожної ітерації виходити з тесту і переглядати файл, до якого йому відкрився доступ. Таким чином, найзручнішим варіантом для студента буде відразу вказати всі методи, які він бажає використати для розв'язання поставленої перед ним задачі, але це не відображає реальний хід розв'язання таких задач в лабораторії, оскільки зазвичай рішення про те, який метод використати наступним приймається на основі наявної інформації в тому числі і вже знятих спектрів.

Відповідно розв'язувати так поставлене завдання правильним чином є неможливим, оскільки тоді не виконується сама мета, з якою завдання цього типу створені. Якщо вбудувати зображення спектрів в завдання, ця проблема вирішується, але виникає нова. Так як проходження тесту відбувається ітераціями, то кількість ітерацій не можна обмежувати, оскільки студент може захотіти повторно переглянути певний спектр. Але виникає питання про те, як тепер оцінювати студента. Якщо оцінювати результат кожної ітерації, то це генеруватиме велику кількість хибних відповідей та дозволить студенту перебирати варіанти відповідей і підганяти свою відповідь під правильну. Якщо не оцінювати кожну ітерацію проходження тесту, а тільки останню, то тоді виникає проблема в тому, щоб визначити яка ітерація є остаточною.

Ці недоліки зникають, якщо створювати плагін не на основі існуючого Flex Quiz, а з нуля, проте це сприяє значному посиленню внеску основного недоліку, а саме такий варіант потребує багато часу і вміння програмувати за допомогою PHP. Забігаючи наперед, слід сказати, що якщо вдасться реалізувати такий варіант, то він буде найкращим з можливих, оскільки таким чином можна запрограмувати ідеальний для такого виду завдань алгоритм, що зображений на рис. 1.2.1.

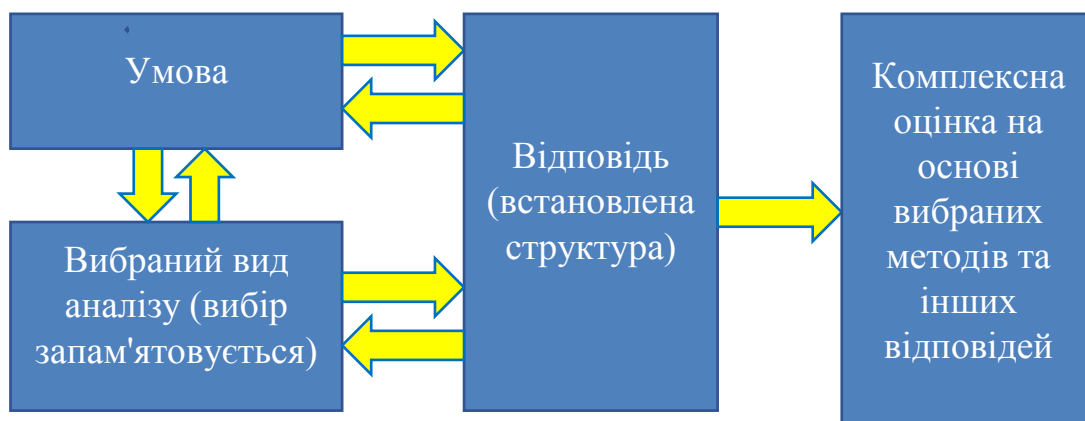


Рис. 1.2.1. Логічна схема тесту при створенні плагіну

Реалізувати саме такий варіант, навіть володіючи достатніми навичками в програмуванні досить складно, тому більш реалістичним та простішим варіантом буде створити окреме завдання, в якому студент зможе дати відповідь на запитання про структуру, а сам плагін застосувати для реалізації простішої схеми, зображеної на рис. 1.2.2

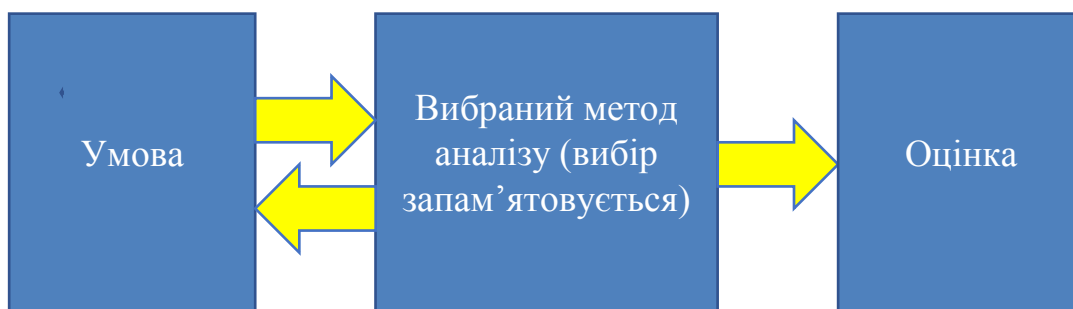


Рис. 1.2.2. Логічна схема тесту при створенні простішого плагіну

Недоліком простішого варіанту є те, що студент повинен проходити додаткове завдання, та отримуватиме окремі оцінки за ці завдання замість комплексного звіту по кожній частині тесту.

2. Створення завдання з використанням активності Lesson

Lesson [7] є вбудованою активністю на платформі Moodle, що вже є перевагою з точки зору розробника, вона дозволяє поєднувати сторінки та тести між собою та переміщатися між ними за допомогою спеціальних

кнопок. Таким чином можна пов'язати кнопку з назвою певного виду аналізу і сторінкою, на якій зображений вибраний спектр. Таким чином можна реалізувати логічну схему, зображену на рис 1.2.3.



Рис. 1.2.3. Логічна схема тесту на основі активності Lesson

Переміщення між блоками відбувається за допомогою відповідних кнопок, а оцінювання автоматичне, оскільки в тестах активності Lesson можна встановити різну кількість балів для різних відповідей.

На перший погляд, схема не сильно відрізняється від ідеальної, проте насправді це не так. Недоліками такого способу реалізації є те, що активність Lesson не запам'ятовує, на які кнопки натискав студент під час проходження завдання, тобто для того, щоб дізнатися якими методами скористався студент, створюється кінцеве питання в якому він і повинен вказати обраними методами. Відповідно, в кінцевому питанні про те, якими методами скористався при виконанні завдання студент, з'являється можливість для обману, оскільки доступ до сторінок зі спектрами ніяким чином неможливо обмежити, як і неможливо відстежити на сторінки, з якими спектрами він заходив. Тому, при виконанні завдання можливе недотримання студентом засад академічної доброчесності. Проте, об'єктивно кажучи, не так багато завдань можуть стовідсотково гарантувати, що під час їх розв'язання студент не має можливості схитрувати. З іншого боку через те, що студент може вільно рухатися вперед і назад між обраними видами аналізів і умовою є

дуже зручним, оскільки так він може повертатися до сторінок і повторно їх аналізувати та нагадувати собі таким чином про вже зроблені, але призабуті висновки, відмовлятися від хибних припущень, робити нові припущення на основі кількох методів аналізу, тощо.

Також існує ще один недолік і полягає він в тому, що на один тест, вбудований в активність Lesson можна задати максимум чотири відповіді, а на сторінку не можна додати більше чотирьох кнопок, що при більшій кількості методів змушує створювати кілька тестів, на які студент повинен відповісти послідовно, а також додавати кнопки, які направлятимуть на сторінку з вибором меншої кількості методів, що не є дуже зручним.

3. Створення завдання з використанням платформи H5P та активності H5P, або активності (LTI (Learning Tools Interoperability)) External Tool.

H5P [8] є платформою яка дозволяє створювати завдання різних типів і як користуватися ними на самій платформі так і вбудовувати їх в інші, такі як Moodle. З великого діапазону типів завдань, які є доступними на цій платформі, нас цікавить саме тип Branching Scenario. Цей тип завдань дозволяє створювати розгалужені дерева з різного змісту наповненням. В контексті цієї роботи даний тип завдань дозволяє реалізувати ту саму схему, що і простіший варіант плагіну рис.1.2.2.

Перевагами цього методу є те, що він дозволяє запам'ятовувати, який вид аналізу обрав студент, присвоїти кожній відповіді різну ціну в балах і потім відобразити загальну акумульовану кількість набраних таким чином балів. Також на мою думку завдання, створені на H5P мають набагато привабливіший інтерфейс ніж ті, що створені на Moodle.

Проте є також і недоліки. Першим і основним недоліком є те, що для вбудовування завдань створених на h5p.com з використанням LTI необхідна платна підписка, вона недешева і на даний момент коштує 570.4

американських долари на рік. Є пробний період, в який можна безкоштовно вбудувати завдання з цієї платформи. Проте, насправді для того, щоб створювати завдання такого типу, достатньо і безкоштовної версії з сайту h5p.org, бо вона дозволяє завантажувати створені завдання, які потім можна використовувати в Moodle. Другий недолік захований в самому принципі роботи виду завдань Branching Scenario. Оскільки такий тип завдань дозволяє створювати саме дерева, в кінцевому варіанті такі дерева повинні містити всі можливі варіанти і тому вони є дуже масивними. Хоч на перший погляд може здаватися, що це сильно ускладнює створення таких завдань, насправді це не так, оскільки питання можна копіювати і вставляти в конструкторі, а не створювати заново кожне питання для кожного розгалуження, але навіть так для створення такого завдання потрібно досить багато часу.

Оскільки завдання полягає саме в створенні модуля на платформі Moodle, створені на H5P завдання потрібно якось вбудувати в Moodle. Це легко зробити, оскільки це передбачено можливостями обох середовищ, а зокрема в Moodle було знайдено дві активності, що дозволяють це зробити, а саме однойменна з платформою активність H5P та активність (LTI) External Tool.

Активність H5P Дозволяє легко додавати вміст H5P, створений у банку вмісту (content bank), на h5p.com до курсу як заняття. Тобто цей інструмент був створений для того, щоб завантажені з H5P завдання можна було використовувати в Moodle.

Активність (LTI) External Tool дозволяє взаємодіяти з LTI-сумісними навчальними ресурсами та активностями на інших веб-сайтах таких як H5P. Проте ця активність потребує більше зусиль, оскільки перш ніж вони будуть доступні в окремих курсах, їх потрібно налаштувати, пов'язавши сайти між собою в налаштуваннях активності; зробити це може тільки адміністратор. А

також ця функція доступна тільки при оформленні платної підписки на H5P, як було згадано вище.

1.3. Огляд можливостей реалізації системи оцінювання

Оскільки оцінка в балах за проходження завдання генерується автоматично, що спрощує роботу викладача, бо не потрібно кожне завдання перевіряти вручну, важливим елементом при створенні завдань такого типу є також правильний дизайн системи оцінювання. Оскільки в реальності завдання подібного типу можуть мати кілька альтернативних шляхів розв'язання, система оцінювання повинна враховувати такі параметри:

1. Відносна ринкова ціна методу аналізу
2. Інформативність виду аналізу в межах поставленого завдання

При дизайні розробленого алгоритму оцінювання було розглянуто два варіанти реалізації в межах можливостей платформи Moodle та H5P.

Активність Lesson дозволяє створювати тест з можливістю вибору кількох правильних відповідей (Multichoice) та присвоєння різної кількості балів за кожен варіант відповіді. Також є можливість додати запитання, відповіддю на яке може бути число в заданому числовому діапазоні (Numerical). Таким чином, можна або запитувати студента про ті методи, які він використав, розв'язуючи завдання, або про кількість коштів, які він витратив у підсумку, попередньо надавши інформацію про відносну ціну проведення кожного аналізу. Щодо останнього варіанту, то він хоч і є досить реалістичним, він не виконує вимоги щодо другого параметра, тому його варто або використовувати в комбінації з тестом Multichoice, яке і виконуватиме цю функцію, або - як було зроблено - просто відмовитися від цього підходу, реалізувавши це дещо інакшим чином.

Зокрема, ціну за метод можна враховувати і при встановленні вартості конкретної відповіді в балах, при цьому винагороджуючи більшою кількістю

балів за більш дешеві методи. Більше того, оцінювання відбувається у відсотках від кількості балів, які максимально можна набрати, а використовуючи можливість присвоювати від'ємні бали за певну відповідь, дозволяє якраз таки знижувати бал у разі вибору дорогих і не дуже інформативних в контексті поставленого завдання спектрів.

Щодо реалізації цього в H5P то, як було згадано раніше, ця платформа теж дозволяє призначати певну кількість балів при виборі конкретної відповіді. Тому реалізація самої системи оцінювання може бути однаковою, що однозначно є позитивною рисою, оскільки той, хто складає завдання може обрати платформу, яка йому є зручнішою чи привабливішою.

Розділ 2. Процедури створення завдань

Загальний модуль складається з кількох завдань, які дозволяють автоматично перевірити правильність розв'язку задачі.

1. Активність Lesson або H5P. Дозволяє перевірити правильність вибору конкретних видів фізичних методів аналізу;
2. Активність Quiz з молекулярним редактором. Для перевірки правильності визначення структури:
3. Активність Quiz з віднесенням сигналів. Щоб перевірити вміння інтерпретувати конкретні спектри.

Як було зазначено раніше, в цій роботі описується саме перший пункт. Для створення такого типу завдань, для початку потрібно мати розв'язану задачу та зробити зображення всіх спектрів в будь-якому з найпоширеніших форматів JPEG, PNG, тощо.

2.1 Постановка задачі

Спочатку потрібно мати готову задачу, яка повинна бути розв'язаною до того, як створити сам модуль. Для наочності було обрано реальну задачу, що виникла у хіміків-синтетиків. Задача формулюється наступним чином. В результаті основного гідролізу (1R, 2S, 3S) 9-бromo диметил камфорату в розчині метанол/вода як побічний продукт утворюється карбонова кислота з молекулярним складом $C_{11}H_{16}O_4$, який було встановлено за допомогою мас-спектрометрії високої роздільності (HRMS — High-Resolution Mass Spectrometry). Встановіть структуру та відносну конфігурацію продукту.

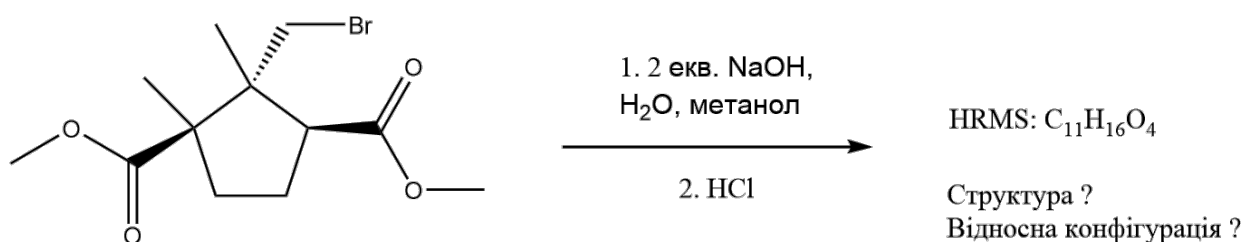


Рисунок 2.1.1. Умова задачі

Почнемо з опрацювання вже наявної інформації молекулярний склад вихідної речовини $C_{12}H_{19}O_4Br$. Еквівалент подвійних зв'язків цієї сполуки дорівнює $3 \left(12 - \frac{20}{2} + 1\right)$ тоді як у продукту він становить $4 \left(11 - \frac{16}{2} + 1\right)$, що свідчить або про утворення подвійного зв'язку, або про утворення нового циклу. Також кінцева сполука не містить атом бром та має тільки на один атом карбону менше, що може свідчити про те, що з двох естерних груп гідролізувала лише одна, а другий еквівалент основи був витрачений на формування еквівалента подвійного зв'язку, ймовірніше за все цей еквівалент подвійного зв'язку є саме циклом, оскільки атом в другому положенні атом карбону є четвертинним і там утворення подвійного зв'язку є неможливим.

Для подальшого розв'язання і підтвердження сформульованих здогадок потрібно звертатися до фізичних методів аналізу. Перший спектр, на який варто поглянути це одновимірний 1H ЯМР, його ми надаватимемо безкоштовно при розв'язку завдання, оскільки він є найдешевшим з усіх як з фінансової так і часової точки зору [9], а також є спектром, який знімається практично завжди першим в реальній практиці хіміка.

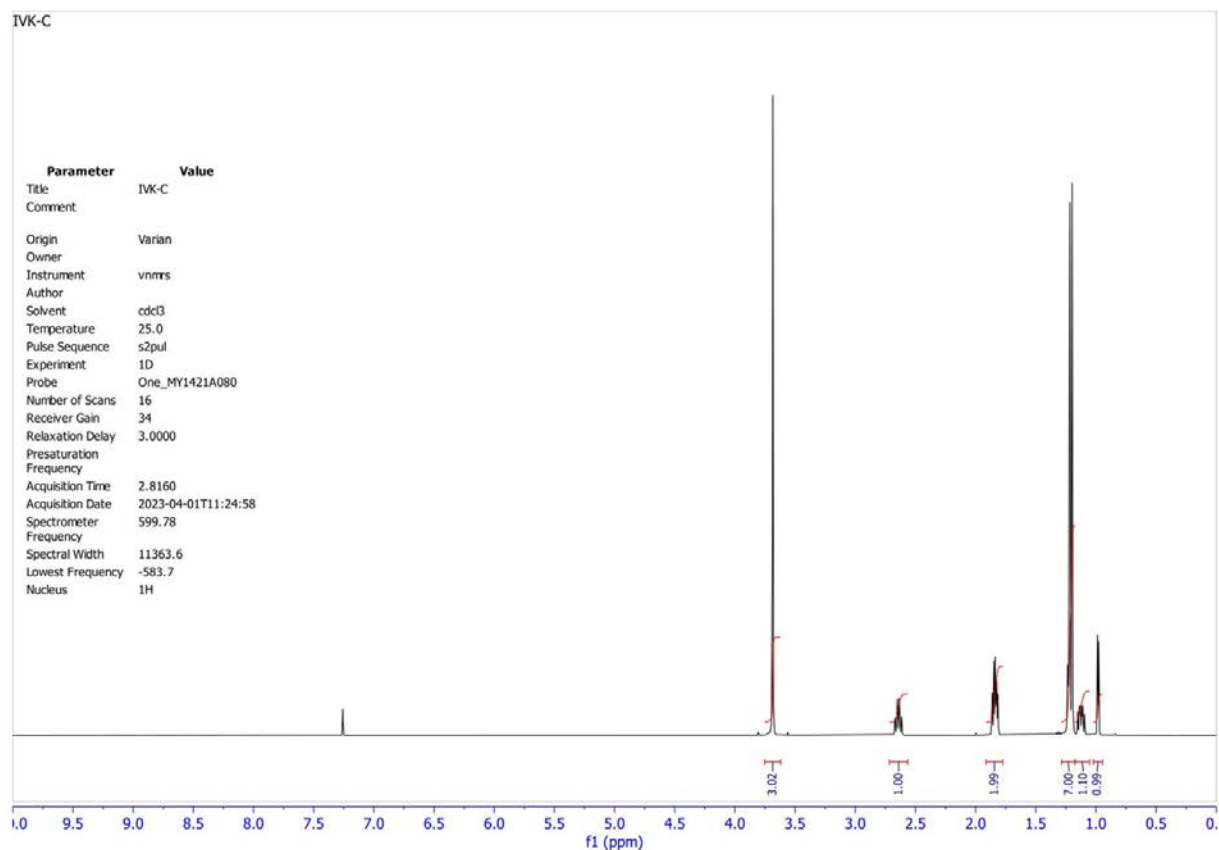


Рисунок 2.1.2. Одновимірний ^1H ЯМР спектр досліджуваної речовини

Бачимо, що кількість гідрогенів в кінцевій молекулі збігається з виставленою інтегральною інтенсивністю, це свідчить, що вона була обрана правильно (один атом якого не вистачає це протон карбоксильної кислоти, його часто не видно на спектрах, а регіон в якому такі сигнали зустрічаються не потрапив на картинку). Для зручності варто розглянути приближену версію цього спектра.

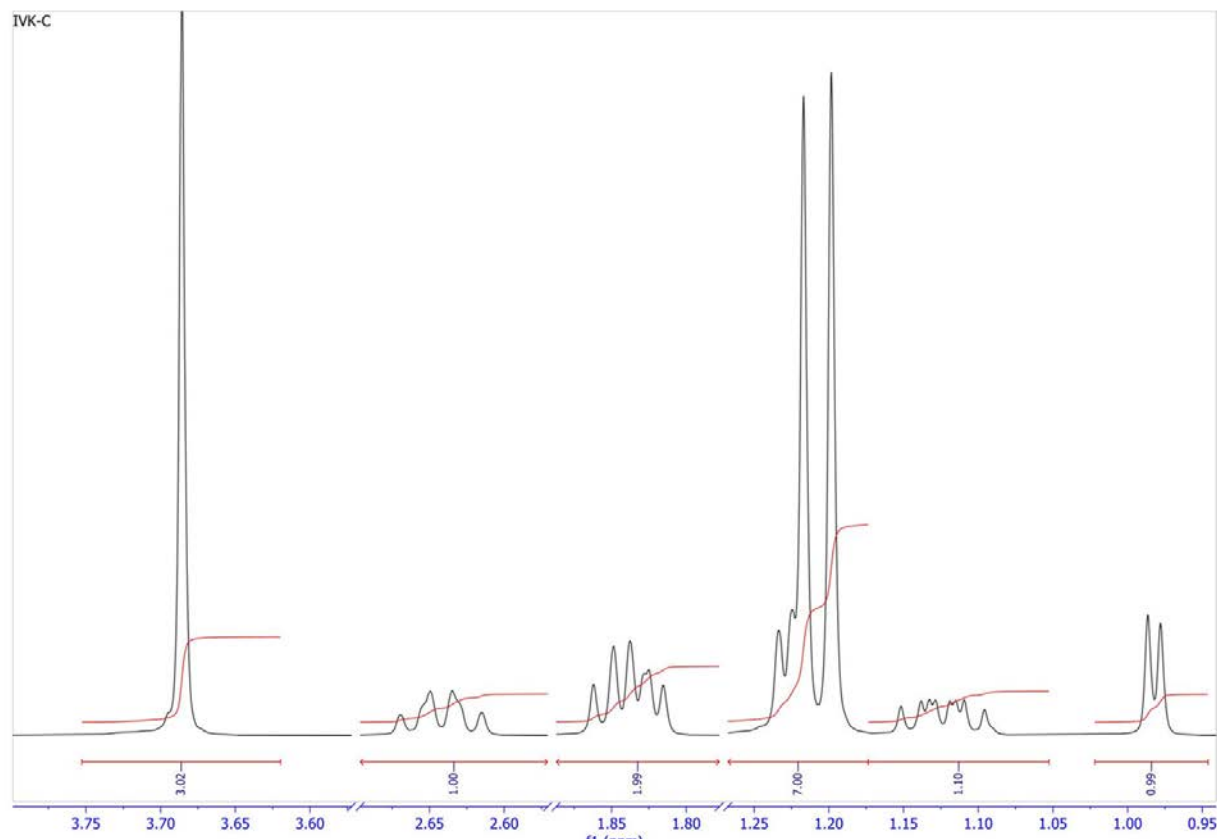


Рисунок 2.1.3. Наближений одновимірний ^1H ЯМР спектр досліджуваної

Сигнал близько 3,68 ppm (parts per milion, мільйонних часток) є синглетом з відносною інтегральною інтенсивністю 3, що є характерним для метилового естеру кислоти, більше того в цьому регіоні тільки один такий сигнал, що підтверджує гідроліз лише однієї з двох естерних груп. Також, порівнявши з цим піком інші на цьому спектрі, видно, що сигнал з інтегральною інтенсивністю 7 складається з трьох різних сигналів, а саме з двох синглетів з інтенсивністю 3 (метильні групи) та одного сигналу з невідомою мультиплетністю та інтенсивністю 1. Звісно ще можна робити припущення про природу інших сигналів, виходячи з міркувань про можливий перебіг реакції, проте такі припущення будуть ненадійними. Для встановлення цих даних потрібно подивитися на редагований ^1H — ^{13}C HSQC (Heteronuclear Single Quantum Coherence) спектр, цей вид аналізу дозволить дати відповідь на питання про те до яких саме груп належать атоми гідрогену в регіоні 0,95-2,7 ppm.

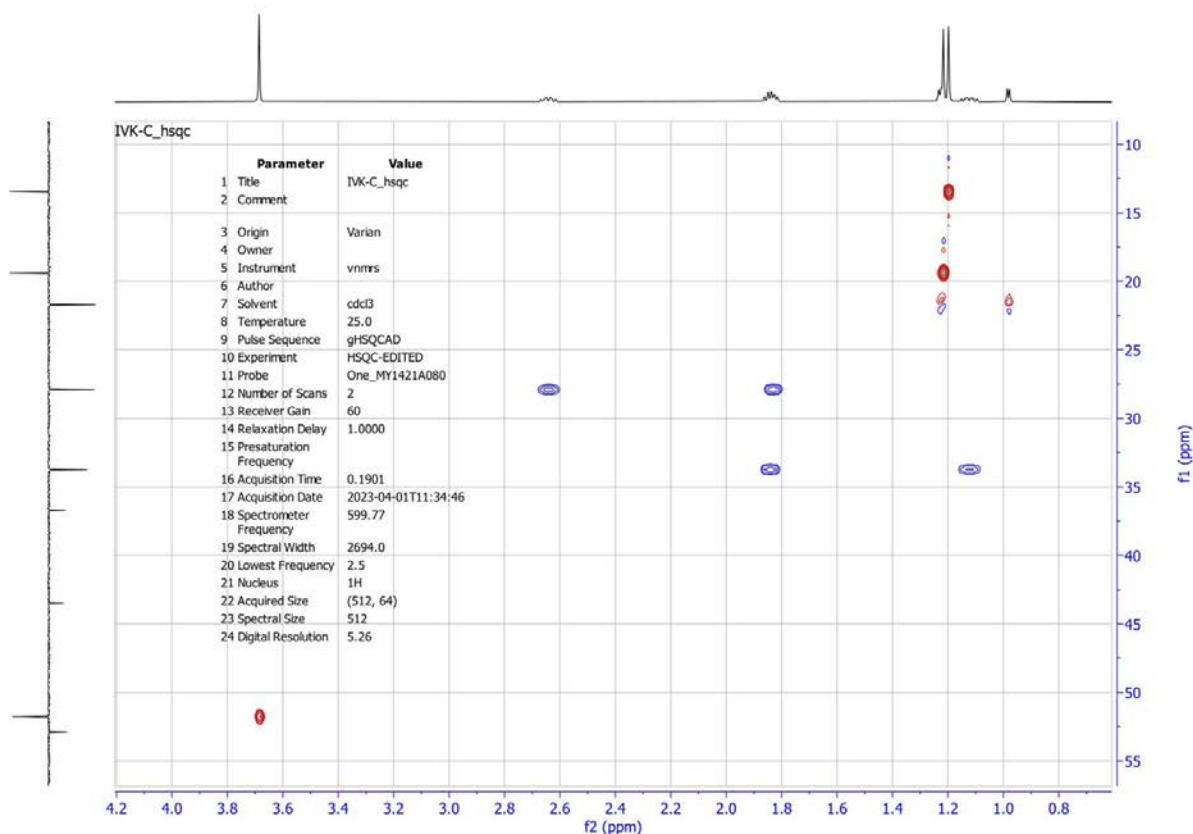


Рисунок 2.1.4. Редагований ^1H — ^{13}C HSQC спектр досліджуваної речовини

Бачимо що продукт, окрім вищезгаданих метильних груп має також три метиленових. Більше того, кожен гідроген в усіх метиленових групах дає окремий сигнал на одновимірному протонному спектрі. Таке явище характерне для циклічних структур, жоден з цих сигналів не знаходиться в типовому регіоні для термінальних алкільних груп, тому з впевненістю можемо сказати, що новоутворений еквівалент подвійного зв'язку є циклом. Також важливо помітити, що дублет близько 0,98 ppm та сигнал на 1,23 ppm, належать до одного атома карбону, більше того, якщо повернутися до протонного спектру, то видно, що обидва ці сигнали мають ефект даху, що свідчить про спін-спінову взаємодію, а характерні хімічні зсуви вглиб сильного поля спектру свідчить про те, що вони входять до циклопропільного фрагменту, тобто спираючись на ці дані можна

стверджувати про утворення циклопропану з двома четвертинними карбонами і однією метиленою групою.

Якщо глянути на одновимірну частину HSQC де знаходиться карбоновий спектр, то бачимо що, маємо лише шість атомів карбону що мають біля себе гідроген, решта є четвертинними в тому числі і два карбонільних атоми карбону, що не помістилися на спектр, один від кислоти про яку говориться в умові, та один від метилового естеру наявність якого була встановлена раніше. Для зручності зобразимо всю отриману інформацію з вже переглянутих спектрів у вигляді таблиці, значення хімічних зсувів атомів карбону візьмемо приблизні, оскільки з такого спектру точні значення отримати важко.

H(ppm)	CH_n	C(ppm)
1,2	CH ₃	13
1,21	CH ₃	19
1,23;0,98	(циклопропіл)CH ₂	22
2,64;1,85	CH ₂	28
2,64;1,85	CH ₂	34
-	C	37
-	C	43
3,68	(естер)CH ₃	52
-	C	53
-	COO	?

-	<i>COO</i> ⁻	?
---	-------------------------	---

Таблиця 2.1.1. Інформація про досліджувану сполуку та віднесення сигналів встановлена на основі редагованого ^1H — ^{13}C HSQC спектра

Для подальшого з'єднання фрагментів молекули потрібно звернутися до кореляційного спектру COSY (correlation spectroscopy)

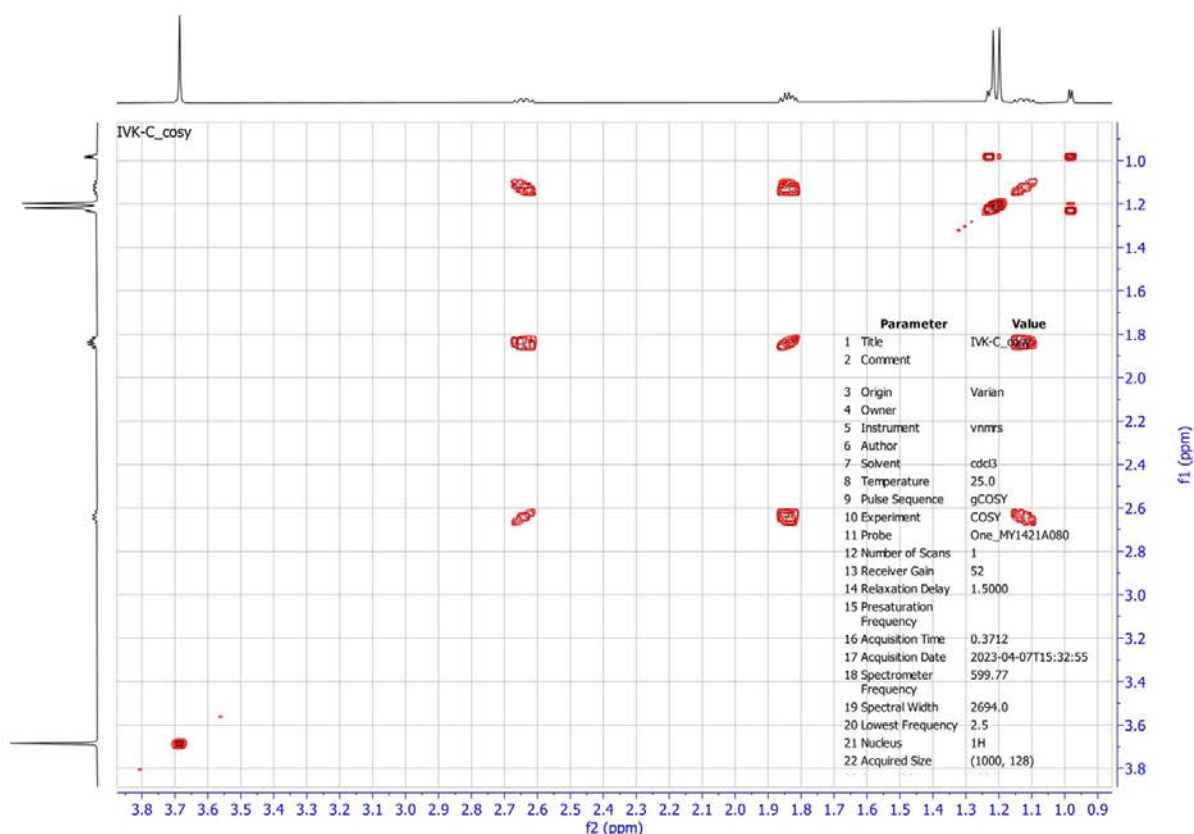


Рисунок 2.1.5. COSY спектр досліджуваної речовини

Бачимо, що всі метильні групи не мають кореляцій, окрім однієї, та спостерігаємо дві спінові системи, одна з яких це циклопропільний протон, який якраз має слабку кореляцію з однією метильною групою, а решта атомів гідрогену всі взаємодіють один з одним. Підсумовуючи намалюємо всі

фрагменти молекули, які нам вдалося встановити з їх хімічними зсувами:

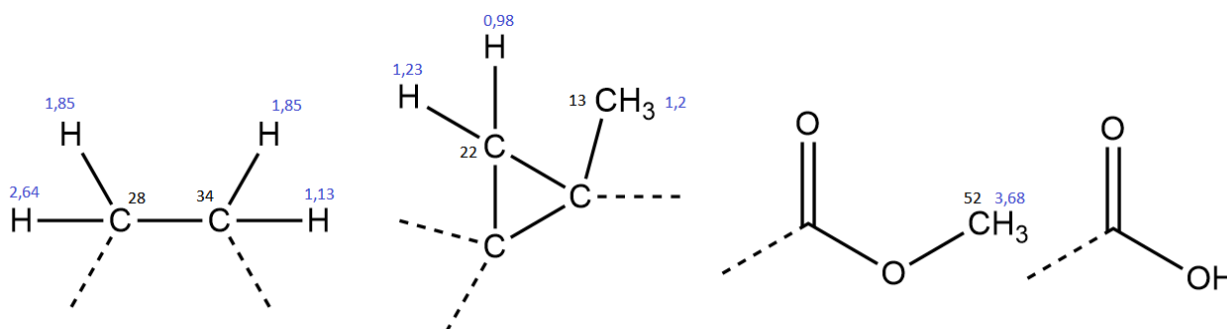


Рисунок 2.1.6. Фрагменти досліджуваної речовини встановлені на основі одновимірних ^1H , HSQC та COSY спектрів

Окрім вище наведених структур, продукт ще має одну метильну групу та четвертинний атом карбону.

Для того, щоб поєднати ці фрагменти разом, потрібно поглянути на ^1H — ^{13}C HMBC (Heteronuclear Multiple Bond Correlation) спектр.

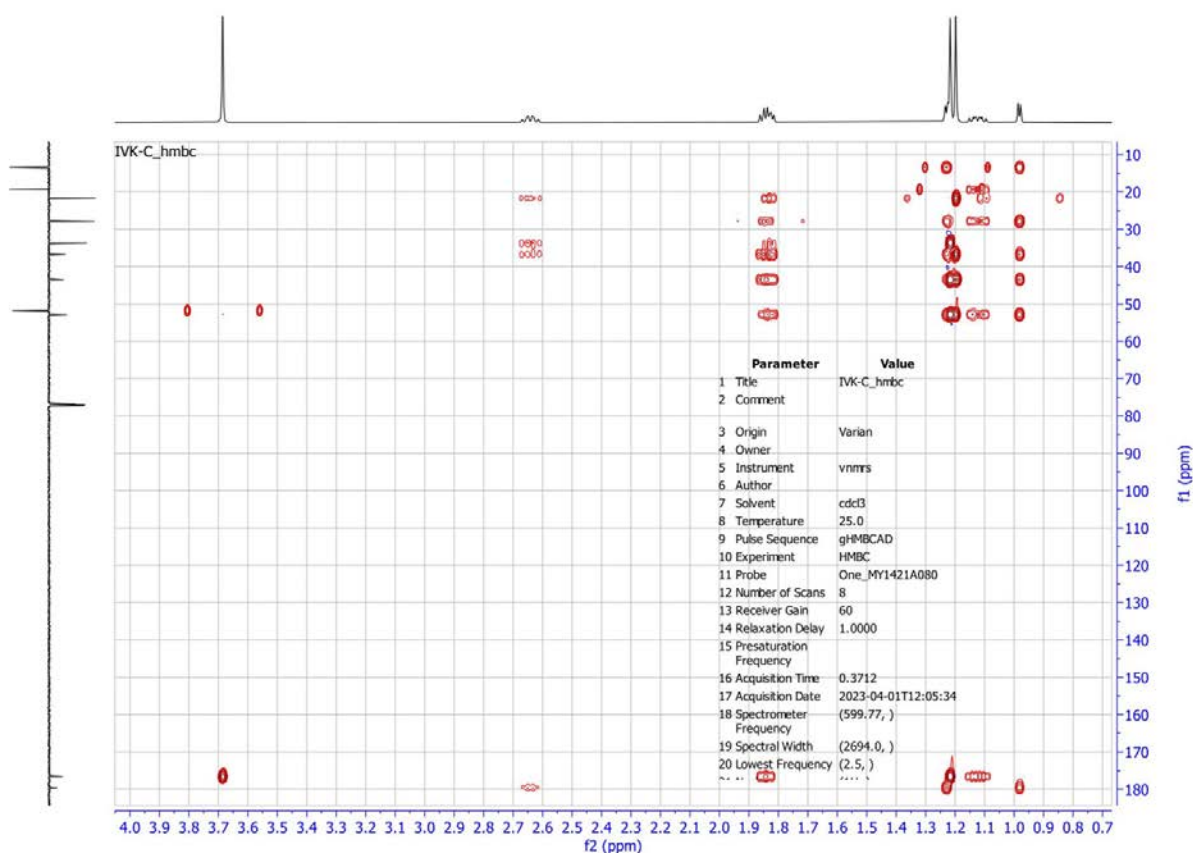


Рисунок 2.1.7. ^1H — ^{13}C HMBC спектр досліджуваної речовини

На цьому спектрі вже видно карбонільні групи, відповідно можемо зробити деякі висновки про подальшу організацію структурних елементів молекули. Бачимо кореляцію метильної групи на 3,68 з карбонілом на приблизно 176 ppm, що остаточно підтверджує наявність метилового естеру. Також цей самий карбон має кореляції з трьома сигналами на 1,85; 1,13 та метильною групою на 1,21 ppm. Кореляція ядер на 19 та 1,13 ppm дозволяє з'єднати ці фрагменти наступним чином:

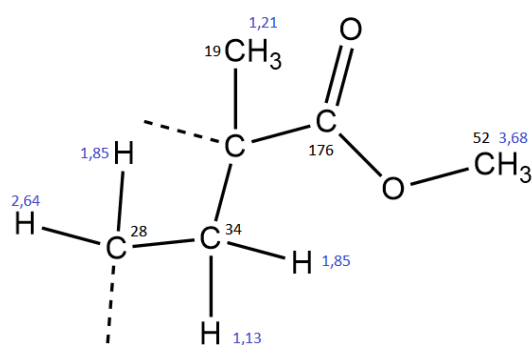


Рисунок 2.1.8. З'єднання частини встановлених фрагментів на основі кореляцій сигналів спектру НМВС

Інший карбоніл має кореляцію з протоном на 2,64, та кореляції з циклопропільними протонами на 1,23 та 0,98 ppm. Також пік на 2,64 має кореляцію з карбоном на 22 та не має кореляції з карбоном на 13. Ця інформація дозволяє нам намалювати наступну проміжну структуру:

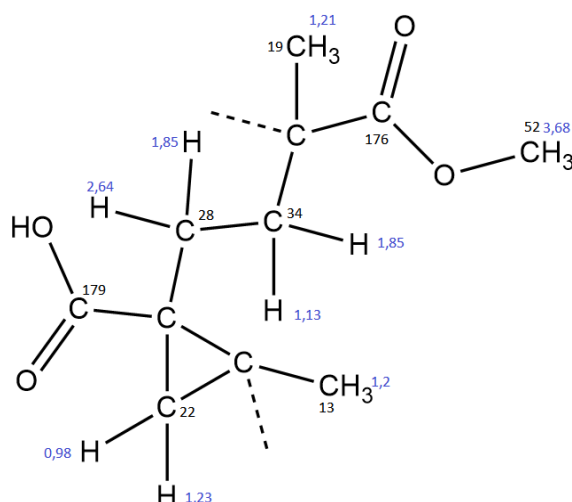


Рисунок 2.1.9. З'єднання решти встановлених фрагментів на основі кореляцій сигналів спектру НМВС

В цій структурі рівно така ж кількість атомів як і в установленій з HRMS тому залишається закрити вільні зв'язки в цикл і співвіднести решту атомів до їх сигналів на спектрах, оскільки таке завдання теж студент отримує. Залишилося співвіднести три карбони та їх сигнали на 37; 43 та 53 ppm. Ці три сигнали мають майже однакові кореляції, проте сигнал на 53 одиниць з них має кореляцію з сигналом на 1,13, а сигнал на 37 одиниць з них має кореляцію з сигналом на 2,64, врахувавши це намалюємо структуру продукту з повним віднесенням (структура орієнтована таким самим чином як і вихідна в умові для наочності).

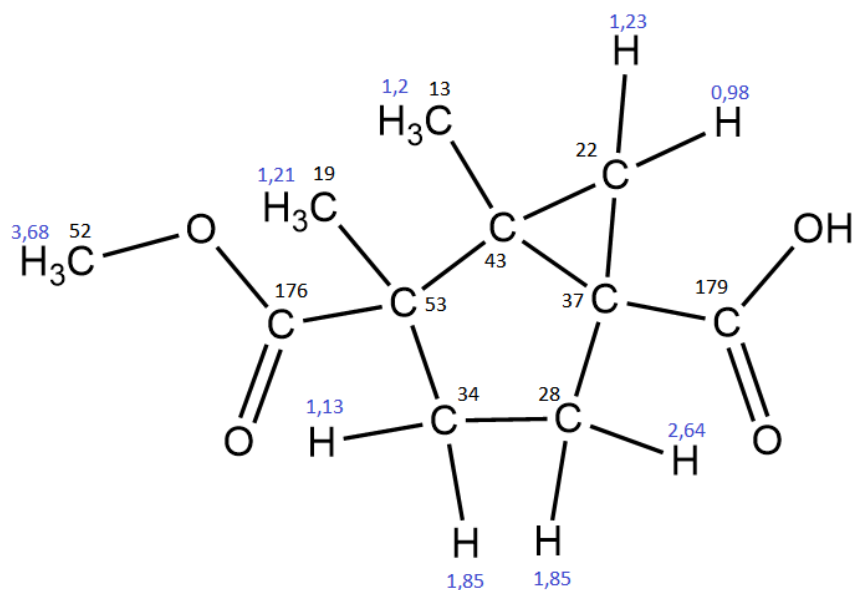


Рисунок 2.1.10 Встановлена 2D структура продукту з віднесенням сигналів

Оскільки досі віднесення сигналів метиленових груп циклопропану було не точним та робилося лише для зручності, для того щоб визначити які саме атоми гідрогену дають піки на 1,85; 2,64 та 1,13 ppm, нам потрібен спектр NOESY (Nuclear Overhauser Effect Spectroscopy), також він дозволить встановити відносну конфігурацію продукту.

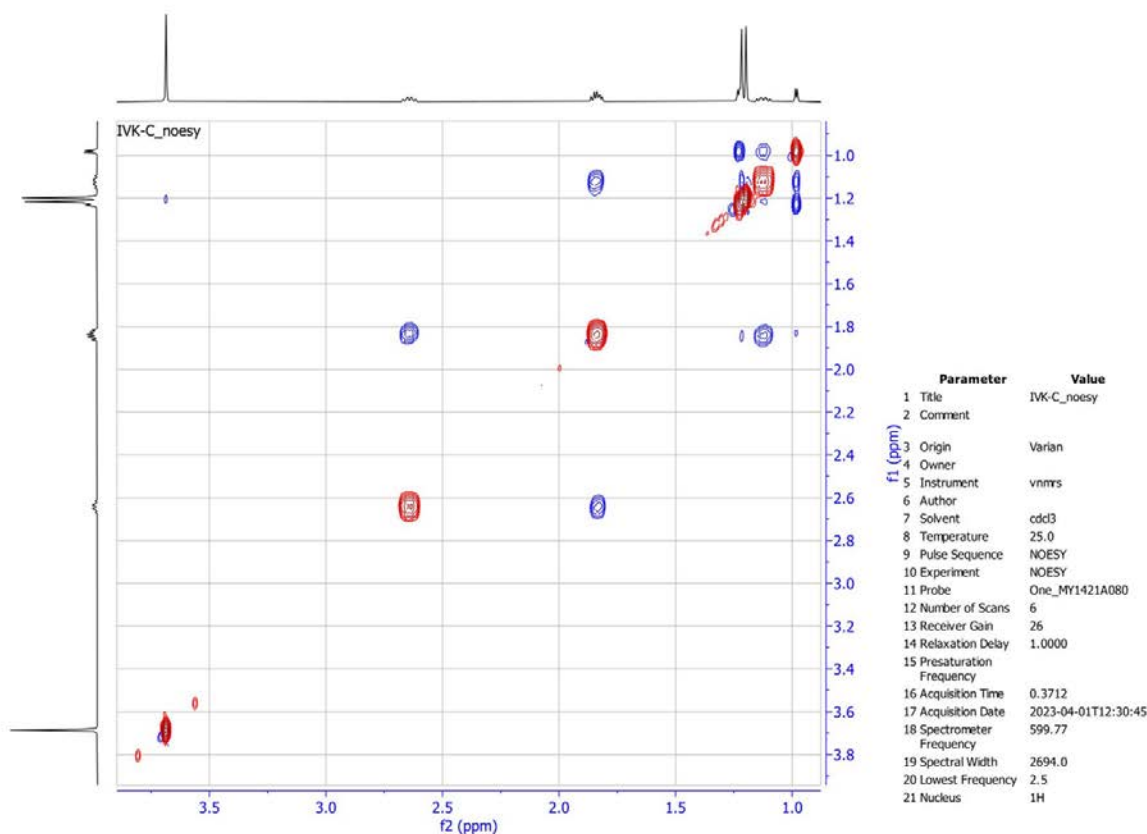


Рисунок 2.1.11. NOESY спектр досліджуваної речовини

Відсутність кореляції між сигналами на 1,13 та 2,64 ppm свідчить про те, що вони знаходяться з різних боків циклу, а кореляція піку від циклопропільного протона та сигналу на 1,13 свідчить про те, що циклопропан з одного і того ж боку кільця з цим протоном циклопропільного фрагмента. Щодо естеру, то бачимо лише одну слабку кореляцію з метильною групою протони якої дають сигнал на 1,2 ppm, в той же час обидві метильні групи мають цілком різні кореляції, що свідчить про те, що вони знаходяться з різних боків кільця. Враховуючи ці дані, намалюємо формулу та тривимірну структуру для наочності.

2D HSQC	450	30
2D COSY	250	20
2D HMBC	800	20
2D NOESY	350	30

Таблиця 2.1.2. Розподіл балів між видами аналізу та їх ринкова ціна

Розв'язавши задачу, зробивши зображення спектрів та присвоївши кожному виду аналізу свою оцінку, підготовку до створення завдань можна вважати завершеною.

2.2 Процедура створення завдання з використанням платформи H5P

Для створення завдання на сайті h5p.org після реєстрації в розділі My account обираємо розділ Contents, далі вибираємо кнопку Create New Content, після чого в списку типів завдань обираємо Branching Scenario.

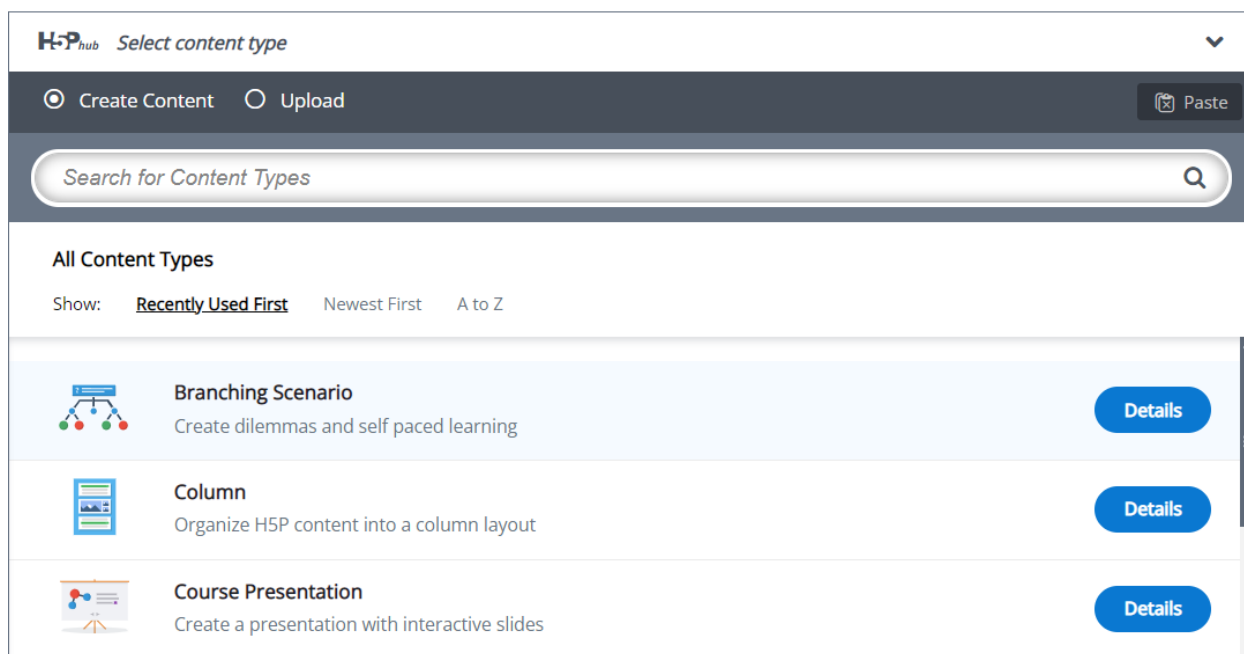


Рисунок 2.2.1. Меню вибору типу вмісту сайту H5P

Далі вибираємо на панелі зліва тип наповнення який нам потрібен для умови, це або зображення (Image) або текст (Text) в залежності від того як сформульована умова.

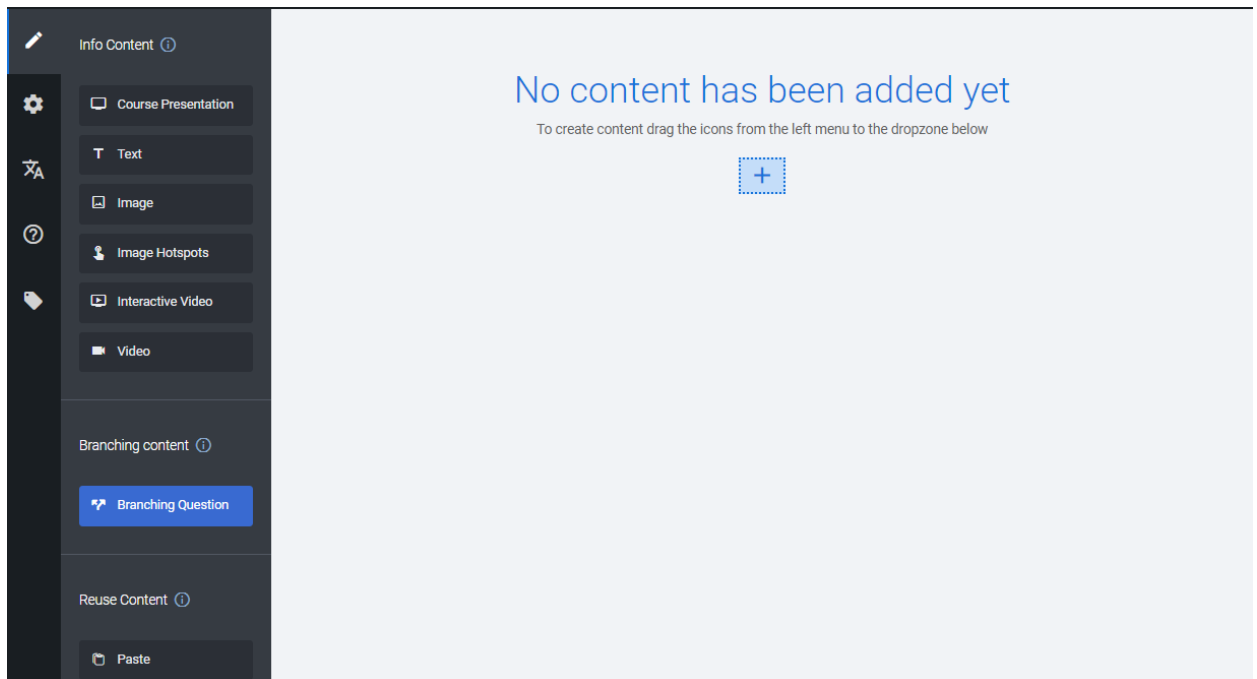


Рисунок 2.2.2. Меню редагування вмісту Branching Scenario

В вікні що відкрилося при перетягуванні відповідного вмісту на поле в розділі Title вводимо Умова задачі та додаємо саму умову в текстовому вигляді, або завантажуюємо як зображення в залежності від вибраного типу вмісту, для комбінованого введення умови (зображення+текст) обираємо Image, а текст додаємо на зображення в редакторі зображень Paint, Adobe Photoshop, тощо. Також за бажанням можна встановити текст, що відобразиться на кнопці переходу до наступного вмісту, за замовчуванням відобразиться текст “Proceed”, таке налаштування знаходиться внизу кожного меню редагування вмісту, та повинне встановлюватися окремо для кожного вмісту. Також це можливо зробити для інших кнопок і функцій, що встановлені за замовчуванням в розділі Translations (Додаток 1, піктограма 1), що знаходиться на лівій панелі.

Після додавання умови потрібно зайти в налаштування (Додаток 1, піктограма 2) та в розділі Scoring options обрати “Dynamically calculate score from user answers”. Це налаштування дозволяє встановлювати певну кількість балів за конкретно обрану гілку, та підраховує набрані бали в кінці завдання. Іноді це налаштування не працює коректно, в такому випадку обираємо “Statistically set score for each end scenario” та самостійно вводимо бали які студент отримає дійшовши до обраного кінцевого сценарію (що і було зроблено в цій роботі).

Далі додаємо тип вмісту Branching Question в ньому в розділі Question пишемо питання яке бачитиме студент наприклад: “Оберіть бажаний метод аналізу”, а також додаємо варіанти відповідей в розділі Available alternatives. Тоді кожен альтернативний варіант називаємо відповідно до методу аналізу на який він переспрямовуватиме, та в списку Advanced branching options у розділі Feedback в полі Score for this scenario вводимо кількість балів, яку студент отримає вибравши цю відповідь. Після цього зберігаємо натиснувши кнопку Done. Після чого під відповідною гілкою додаємо сам спектр, через тип вмісту Image, називаємо вміст відповідно до виду аналізу який ми додаємо, завантажуюємо зображення спектра у відповідне поле, за бажанням змінюємо назву кнопки, що переносить до наступного вмісту, та зберігаємо. Якщо є кілька версій одного виду аналізу, наприклад повний 1D протонний ЯМР і його наближена версія, то потрібно вставляти їх один під одним і в полі Text for the proceed button зображення, що знаходиться вище вказуємо яку версію ми вставили в зображення нижче.

Після чого копіюємо перший вміст типу Branching Question який ми додали на попередньому кроці та через кнопку на лівій боковій панелі Paste (Додаток 1, піктограма 3) вставляємо його під кожним доданим видом аналізу. Далі заходимо в налаштування кожного нововставленого запитання-розгалуження та серед альтернативних варіантів вибору видаляємо вид

спектра під яким це запитання вставлене, а натомість додаємо альтернативу “Завершити тест” та в налаштуваннях альтернативи встановлюємо “-” в розділі *Special action if selected*.

Це потрібно для того, щоб не з’являлися вже обрані методи аналізу та, щоб студент міг завершити тест в той момент коли він вважатиме що обраних методів достатньо для розв’язання задачі. Після чого копіюємо вже додані спектри і вставляємо через кнопку *Paste* під кожним відповідним альтернативним варіантом відповіді. Далі продовжуємо вставляти питання-розгалуження та спектри під ними видаляючи з альтернативних варіантів ті, що вже були обрані, доки не закінчатся всі додані види аналізу, для гілок, що мають однакове розгалуження з уже створеними, процедуру можна дещо скоротити, для цього обираємо в *Advanced branching options* “*Jump to another branch*” та зі списку обираємо те місце де розгалуження однакове. З цих міркувань дерево потрібно будувати не поступово, а починати кожне нове розгалуження, дійшовши до кінця в попередньому, для того щоб простіше було відрізнити всі розгалуження в списку, можна нумерувати кожне розгалуження (або використовувати інші мітки) окрім останнього та першого (оскільки на них перенаправляти потреби немає), вказуючи номер в полі *Question* вмісту *Branching Question*, а після того, як дерево закінчене цю нумерацію можна видалити.

Також потрібно щоб в кінці відображалася правильна відповідь, для цього заходимо в налаштування та в розділі *Configure the default end scenario screen* натискаємо на *End screen* та у випадяючому списку в полі *Text* вводимо правильну відповідь. Також її можна завантажити, як зображення, за бажання можна також якось назвати цей кінцевий сценарій.

І останнім пунктом який варто змінити в налаштуваннях це надання студентам можливості повертатися до попередньої сторінки, для цього в розділі *Behavioural settings* обираємо *Navigate back*.

Після того як всі потрібні зміни було внесено, в лівму нижньому кутку під полем редагування нажимаємо рожеву кнопку Save, зберігши користувача переправить на сторінку My account і в розділі View, Recent content з'явиться створене завдання, його також можна переглянути в розділі Contents. Це завдання потрібно відкрити та завантажити, натиснувши кнопку Reuse в лівому нижньому кутку під самим завданням, далі натискаємо кнопку Download as an .h5p file таким чином завантаживши створене завдання.

Залишається лише додати його в Moodle. Для цього адміністратор сайту на Moodle повинен додати тип активності H5P в обраний курс, через режим редагування, дати йому назву та вивантажити попередньо завантажене завдання з H5P в полі Package file, після чого потрібно зберегти це завдання і воно буде готовим до проходження.

2.3 Процедура створення завдання з використанням активності Lesson

Спочатку обираємо курс в який ми хочемо додати завдання, вмикаємо режим редагування та обираємо додати активність, після чого в списку вибираємо тип активності Lesson. Даємо назву цьому тесту, а решту налаштувань не змінюємо і зберігаємо через кнопку Save and display, після чого відкривається вікно Edit в якому ми обираємо додати сторінку вмісту натиснувши на Add a content page. Таке завдання зручніше за все створювати з кінця. В вікні редагування сторінки називаємо сторінку “Правильна відповідь”, а в поле Page contents вводимо правильну відповідь на завдання. В полі Description вмісту 1 (Content 1), пишемо: “Завершити тест”, а в полі Jump в випадяючому списку обираємо End of lesson та зберігаємо цю сторінку натиснувши на кнопку Save page внизу. Відкриється сторінка Edit з двома розділами Collapsed та Expanded, тепер потрібно додати тест в якому студент вибиратиме методи, які він використав.

Додати нову сторінку можна двома способами, або з розділу Collapsed натиснувши з правого боку від створеної сторінки на Add a new page і у випадаючому списку обрати потрібний тип сторінки, або в розділі Expanded вгорі чи знизу біля створеної сторінки натиснути на відповідний текст.

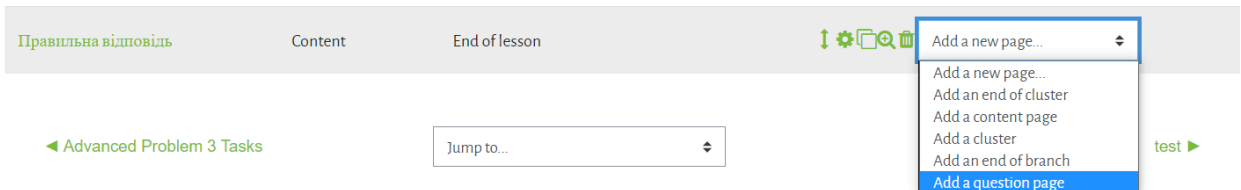


Рисунок 2.3.1. Додавання нової сторінки в розділі Collapsed

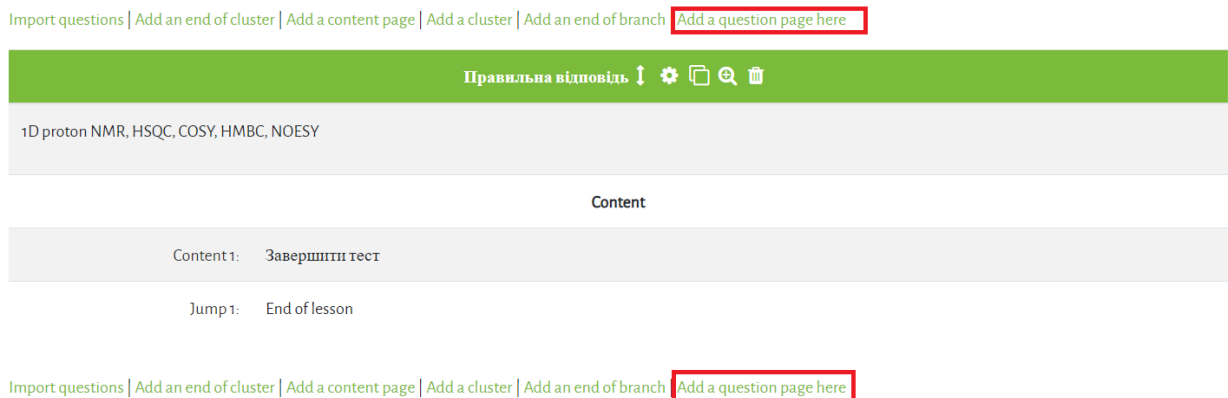


Рисунок 2.3.2. Додавання нової сторінки в розділі Expanded

Найкраще для цих завдань робити це через розділ Expanded, натискаючи вгорі, таким чином нова сторінка буде додаватися зверху і буде наочно видно ієрархію сторінок, та зберігатиметься послідовність сторінок від умови до відповіді.

Обираємо створити сторінку з питанням (question page). Вибираємо тип питання Multichoice та натискаємо Add a question page. Називаємо сторінку “Обрані методи”, в полі Page contents пишемо запитання: ”Які методи було обрано при розв’язуванні”, а в полі для відповідей Answer вказуємо три методи, які доступні для вибору студентом, важливо в останньому полі додати варіант відповіді “Жоден з перелічених” (за умови, що методів для

вибору більше чотирьох), оскільки можливо наведені варіанти не потрібні для розв'язання, а також в полі Jump під кожним варіантом відповіді обрати: "Правильна відповідь" це переспрямує студента на останню сторінку, яку було створено на попередньому кроці. Також потрібно вказати в полі Score скільки балів студент отримає за вибір цього варіанту відповіді (варіант відповіді "Жоден з перелічених" коштує 0 балів). Зберігаємо цю сторінку, після чого знову опиняємося в меню Edit, Collapsed. Якщо, ще залишилися методи, які не введені як варіанти відповіді, то в меню Collapsed дуплікуємо створений тест натиснувши на символ Duplicate page (Додаток 1, піктограма 4) та редагуємо той що вище в списку натиснувши на Update page (Додаток 1, піктограма 5), змінюємо методи, що вже були введені, на ті що ще не використані, та вводимо відповідну кількість балів під кожним методом, а також в полі Jump змінюємо введений параметр на "Обрані методи" який нижче в списку (порядок сторінок у випадяючому списку, такий же як і в меню Edit). Повторюємо дуплікацію і редагування сторінок доки методи не вичерпаються (для того щоб не заплутатися сторінкам "Обрані методи" можна присвоювати номери.

Наступним кроком є додавання методів аналізу, так як на одну сторінку можна додати лише чотири кнопки, потрібно всі наявні спектри поділити на групи (максимум чотири групи). Для прикладу в проілюстрованій задачі є шість спектрів, що дозволяє поділити їх на три групи, по 2 спектри в кожній.

Додавання групи починаємо з додавання самих спектрів, таким же чином як додавали сторінку з питаннями, тільки цього разу обираємо Add a content page. Завантажуємо зображення спектру натиснувши на Insert or edit image (Додаток 1, піктограма 6) в полі Page contents, та називаємо сторінку однойменно з видом аналізу який було додано. Також в полі Content 1, Description пишемо: "Умова задачі та вибір методів", в полі Jump поки залишаємо все як є. В розділі Content 2 у поле Description вводимо: "Задача

розв'язана”, в полі Jump виставляємо: “Обрані методи”, саме ті, які знаходяться найвище в випадяючому списку. Таким чином додаємо всі спектри з однієї групи, також після створення першої сторінки спектрів інші можна додавати дуплікуючи і редагуючи вже додану сторінку просто замінюючи зображення та назву сторінки.

Тепер створюємо сторінку яка пов'язуватиме спектри в групу. Створюємо її натиснувши Add a content page згори над останнім доданим спектром, називаємо її однойменно зі спектрами які вона пов'язує, а в кожен з розділів Content, Description пишемо назву кожного метода окремо та в полі Jump вказуємо сторінку зі спектром назву якого вказали в описі та зберігаємо сторінку. Проводимо кроки додавання спектрів та групуючих сторінок, доки не буде створено сторінку для кожної групи, а разом з ними і для кожного спектра. Якщо спектрів більше ніж 16, то виникатиме потреба в створенні групуючих сторінок другого порядку, тобто групи (максимум по чотири спектри в кожній), також треба буде поєднувати в групи, проте досі такої потреби не виникало.

Умову додаємо так само як і групуючі сторінки, тобто над останньою створеною сторінкою натискаємо Add a content page. Називаємо сторінку “Умова задачі та вибір методів” оскільки на цій сторінці будуть розміщені кнопки вибору груп спектрів. Умову задаємо в текстовому вигляді та/або як зображення в полі Page contents, обов'язково вказуючи в умові вартість кожного методу аналізу. В розділах Content 1-4, в текстове поле вводимо назву групуючої сторінки, та в полі Jump зі списку обираємо ту сторінку назву якої було введено після того як всі сторінки було пов'язано зберігаємо.

Наостанок потрібно пов'язати сторінки на яких розміщені спектри зі сторінкою умови та вибору методів, для цього на сторінці спектра натискаємо Update page (Додаток 1, піктограма 5), та в розділі Content в полі

Jump обираємо сторінку “Умова задачі та вибір методів”. Після чого зберігаємо внесені зміни і завдання готове.

2.4 Процедура додавання активності Quiz з молекулярним редактором

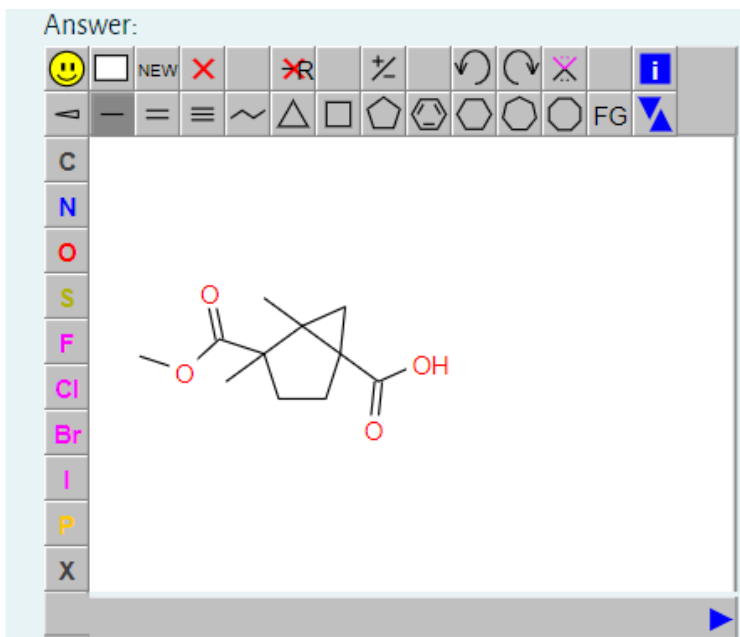


Рисунок 2.4.1. Молекулярний редактор плагіну pattern match with molecular editor

Для того, щоб перевірити чи правильно студент встановив структуру, використовуємо плагін “Pattern match with molecular editor”[10]. Щоб встановити його на Moodle, на сайті відкриваємо вікно Site administration та переходимо в розділ Plugins, де в списку натискаємо на текст “Install plugins”. У вікні що відкрилося натискаємо Install plugins for moodle directory, після чого потрібно повторно авторизуватися в новому вікні, знайти потрібний плагін та встановити його на сайт.

Альтернативно, можна спершу зайти в директорію плагінів, знайти потрібний та завантажити його як архів, після чого його можна завантажити на сайт натиснувши на той же текст “Install plugins”, але тепер вже завантажуюємо архів в полі Install plugin from ZIP file.

Тепер створюємо завдання, переходимо у вікно курсу в який потрібно його додати, вмикаємо режим редагування, та додаємо активність типу Quiz. Зберігаємо всі налаштування після того як дали назву завданню. Далі в вікні, що відкрилося натискаємо кнопку Edit quiz, потім на текст “Add” і з випадаючого списку обираємо “a new question”. У вікні, що з’явилося потрібно в списку знайти плагін, який було додано тобто “Pattern match with molecular editor” обрати його після чого натиснути кнопку Add. В меню редагування питання вводимо текст умови, даємо назву питанню, також обираємо інші потрібні налаштування, наприклад можливість повторної відповіді зі штрафом. Та вводимо правильну відповідь у вигляді: “match (SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) молекули)”, тобто потрібно використовувати синтаксис завдань типу Pattern match. Досі є проблема зі зчитуванням та введенням стереохімії, на даний момент проводиться робота над вирішенням цієї проблеми.

Тимчасовим рішенням було використання активності Quiz для вибору стереохімії. Надавши до цього завдання доступ лише в разі правильної відповіді на запитання про структуру, а як варіанти відповіді тесту вставивши зображення всіх можливих відносних конфігурацій.

Також можна дати студенту лише частину максимальних балів при введенні частково хибних структур, для цього потрібно SMILES таких молекул ввести в поля Answer, та в полі Grade вказати оцінку відмінну від 100%. Після того як всі відповіді було внесено, та потрібні налаштування встановлено зберігаємо їх, на цьому моменті завдання є завершеним.

Висновки

В цій роботі було описано та створено навчальний модуль “Віртуальна лабораторія фізичних методів дослідження” на платформі Moodle, що дозволить перевірити повноту засвоєння інформації студентами інформації викладеної в рамках курсу з фізичних методів дослідження. Також дозволить їм отримати досвід та навички розв’язування реальних складніших задач з підбором конкретних методів аналізу з врахуванням їх інформативності та ціни в рамках поставленого завдання, оскільки такі задачі виникають під час роботи хіміків різної спеціалізації від аналітиків до органіків. Було детально розписано саму процедуру створення такого модуля і розв’язання задачі такого формату, щоб навіть не дуже досвідчені користувачі, або користувачі, що не знайомі з платформами Moodle та H5P могли легко створювати нові завдання, беручи описану задачу за зразок.

Що стосується шляхів розвитку тематики, висвітленої в роботі, то можливо створити окремий плагін для такого типу завдань, який спростить процедуру створення завдань, усуне недоліки використаних способів та дозволить поєднати всі завдання, з яких складається модуль, в одне. Також для того щоб модуль перетворився в повноцінний курс потрібно створити більше завдань такого типу, що вимагає великої кількості реальних задач та знятих спектрів. Також однією з ідей, що виникли під час виконання роботи, але не були реалізованими, є додавання можливості вибору розчинника при пробопідготовці та робочої частоти спектрометра за допомогою якого було отримано спектр.

Подяки

Хотілось би подякувати професору Комарову Ігорю Володимировичу за пропозицію втілити ідею цієї роботи в життя і допомогу в її реалізації, та Шамраю Денису за допомогу в освоєнні платформи Moodle, створення навчального середовища, та велику кількість корисних порад і дискусій.

Також висловлюю свою вдячність працівникам ЯМР лабораторії та зокрема Половинко Віталію, за допомогу в отриманні спектрів задачі, і доценту хімічного факультету КНУ Горічко Мар'яну Віталійовичу за саму задачу.



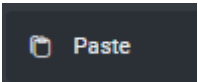


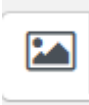
І ще безмежна вдячність всім і кожному хто боронив і продовжує боронити життя громадян України у складі Збройних Сил України, Державної прикордонної служби України, Державної служби України з надзвичайних ситуацій, та інших, без кого ніщо не було б можливим.

Список використаних джерел

1. Загальні питання про застосування та особливості різних методів аналізу. Stanfoundry. *Analytical Instrumentation MCQ (Multiple Choice Questions)*. www.stanfoundry.com/1000-analytical-instrumentation-questions-answers.
2. Інтерпретація спектрів та питання щодо отримання та обробки даних. NMR-Collaborative Training Project (NMR-CTP): http://www-usr.rider.edu/~grushow/nmr/NMR_tutor/selftests/problems_fs_start.html
3. Інтерпретація спектрів та віднесення сигналів. Identifying Organic Molecules Using Spectroscopy: Practice Problems - Quiz & Worksheet: <https://study.com/academy/practice/quiz-worksheet-organic-compounds-spectroscopy-practice-problems.html>
4. Встановлення структури за наданими спектрами. CU Boulder Spectroscopy Problems: <https://www.orgchemboulder.com/Spectroscopy/Problems/index.shtml>
5. Встановлення структури за наданими спектрами. University of Calgary Spectra Problems: <https://www.chem.ucalgary.ca/courses/351/Carey5th/Ch13/isp/index.html>
6. Шамрай Денис Ігорович. “Розробка Електронного Посібника З ЯМР: Ігрова Частина.” 2022, ir.library.knu.ua/knurepo/handle/123456789/1302
7. Активність Lesson: https://docs.moodle.org/39/en/Lesson_activity
8. Посібник автора вмісту на H5P: <https://h5p.org/documentation/for-authors>
9. Ціни експериментів: <https://www.enovatia.com/nmr-services/nmr-general-pricing/>
10. Плагін Pattern match with molecular editor: https://moodle.org/plugins/qtype_pmatchjme

Додаток 1

Піктограми:

1.  — розділ Translations (Переклади) в Branching Scenario на H5P;
2.  — розділ Settings (Налаштування) в Branching Scenario на H5P;
3.  — кнопка Paste (Вставити) в Branching Scenario на H5P;
4.  — Duplicate page (Продублювати сторінку) в активності Lesson;
5.  — Update page (Оновити сторінку) в активності Lesson;
6.  — Insert or edit image (Вставити або редагувати зображення) в розділі Page contents на Moodle;