



# شیمی در فضای

وحید نوروزی چرندابی

## مجازی

بخش دوم

### اشاره

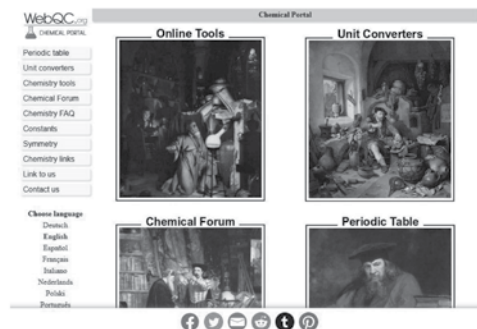
در این مقاله نگاهی می‌اندازیم به دو وبگاه اینترنتی که در تبیین و تصویرسازی مفاهیم علمی پایه در حوزه شیمی می‌توانند کمک‌کننده باشند. یکی از این دو، وبگاهی با نشانی [webqc.org](http://webqc.org) است که در پایگاه اطلاعاتی Similarweb - که به رتبه‌بندی وبگاه‌های اینترنتی پر بازدید جهان در حوزه‌های علمی و فنی و موضوع‌های مختلف دیگر می‌پردازد - معرفی شده است. در این پایگاه، [webqc.org](http://webqc.org) در رتبه نوزدهم جهان در بین وبگاه‌های مرتبط با علم شیمی از نظر تعداد بازدید قرار گرفته است. این وبگاه در پایان سال خورشیدی گذشته، در یک ماه نزدیک به دو میلیون و در پایان بهار امسال، در یک ماه اندکی کمتر از یک میلیون بازدیدکننده داشته است. بیشترین بازدیدکننده‌های این وبگاه از قاره آمریکا (شمالی، مرکزی و جنوبی) بوده‌اند. وبگاه اینترنتی دیگر، [molview.org](http://molview.org) است که با تصویرسازی مناسب و سه‌بعدی از مولکول‌های شیمیایی می‌تواند در درک مخاطب از شیمی فضایی و ساختار ترکیب‌های شیمیایی مؤثر واقع شود.

### Online Tools



برخط است، انجام بسیاری از کارهای مهم و ضروری را برای کاربر امکان‌پذیر می‌سازد. با کلیک روی آن مشاهده می‌کنیم که کاربر می‌تواند در سه زمینه شیمی عمومی، شیمی محاسبه‌ای و ریاضیات از آن بهره‌گیرد. در زمینه شیمی عمومی می‌توان به موازنه واکنش‌های شیمیایی، محاسبه جرم مولی، محاسبه pH و محاسبه خواص گازهای مختلف به کمک معادله‌های گاز ایده‌آل، وان در والس و هنری اشاره کرد. در زمینه شیمی محاسبه‌ای نیز تبدیل قالب و ویرایش مولکول و ذخیره‌سازی تصویر آن در وبگاه امکان‌پذیر است. در بخش ریاضیات امکان بهره‌بردن از حسابگر حد، مشتق و انتگرال وجود دارد. کاربر همچنین می‌تواند با آن به حل معادله‌های خطی و غیرخطی بپردازد. محاسبه ویژگی‌های ماتریسی و عملیات بین آن‌ها مانند ضرب و جمع از دیگر توانایی‌های آن است.

## molview.org

\* سامانه اینترنتی [webqc.org](http://webqc.org)

این وبگاه دارای چهار زیردسته است که در صفحه نخست وبگاه به چشم می‌آید. نخستین عنوان که [Online Tools](http://webqc.org) یا ابزار

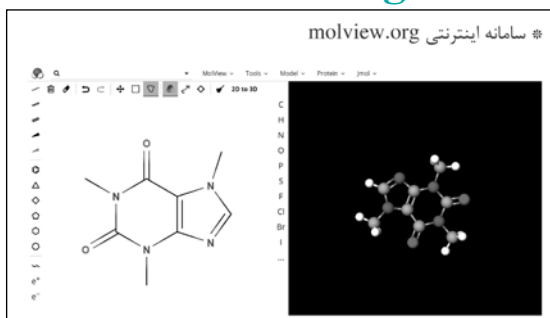
## Chemical Forum



عنوان چهارم Chemical Forum است که بازارچه یا پاتوقی برای به اشتراک گذاشتن مطلب‌ها، نظرها، سؤال‌ها و پاسخ‌های کاربران به یکدیگر است. این بخش برای کاربران فعال وبگاه که همیشه سؤالی در ذهن دارند می‌تواند فضایی جالب برای تبادل نظر باشد.

وبگاه [webqc.org](http://webqc.org) در ستون کناری خود، همچنین اطلاعات بسیار کاملی از مقدار ثابت‌های فیزیکی ارائه می‌کند (Constants) که می‌تواند در حل مسأله‌های شیمی و فیزیک به کاربر کمک کند. نکته قابل توجه دیگر، گزینه Symmetry است که برای کاربران علاقه‌مند به آشنایی با تقارن در مولکول‌ها مناسب است. با کلیک روی هر کدام از گروه‌های نقطه‌ای ارائه شده، جدول کاراکتر و جدول ضرب آن گروه نقطه‌ای ارائه می‌شود. نکته آخر این است که وبگاه [webqc.org](http://webqc.org) به ۱۲ زبان زنده دنیا در دسترس کاربران در سراسر جهان است اما شوربختانه زبان فارسی در میان آن‌ها نیست.

## [molview.org](http://molview.org)



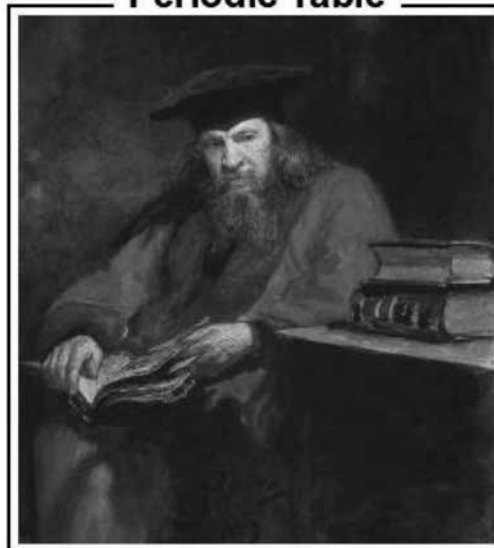
وقتی وارد وبگاه [molview.org](http://molview.org) می‌شوید اولین چیزی که توجه کاربر را به خود جلب می‌کند ساختاری خطی و مسطح

## Unit Converters



عنوان دوم Unit Converters یا تبدیل‌کننده یکا است، این امکان را فراهم می‌کند تا کاربر به راحتی به تبدیل همه واحدهای اندازه‌گیری بپردازد. چنان که طول، سطح، حجم، جرم، چگالی، گرانشی، بار الکتریکی، جریان الکتریکی، ولتاژ، انرژی، نیرو، فرکانس، آنتروپی، روشنایی و شدت آن، شار مغناطیسی، فشار، تنش، سرعت و تندی، دما و بسیاری دیگر از کمیت‌های قابل اندازه‌گیری را در دستگاه‌های مختلف تغییر یکا می‌دهد.

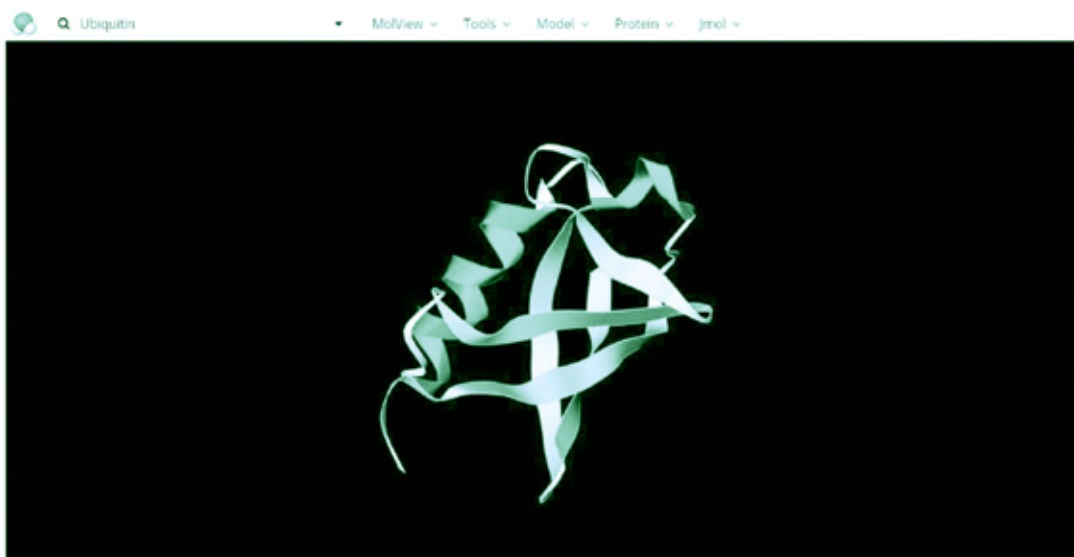
## Periodic Table



عنوان سوم Periodic Table یا جدول دوره‌ای عناصر است که جدول جمع و جوری برای کاربر فراهم کرده است. با نوشتن نماد، نام یا عدد اتمی عنصر مورد نظر در محل مشخص شده، اطلاعات مختصری در مورد آن عنصر ارائه می‌دهد.

ما را در نیمه سمت راست صفحه نمایش دهد. برای مشاهده مولکول‌ها (رسم شده یا جست‌وجو شده)، ابزاری نیز در وبگاه وجود دارد. در کادر بالایی صفحه می‌توان از MolView شیوه نمایش مولکول را در صفحه مشخص کرد؛ نمایش سه‌بعدی به‌تنهایی، دوبعدی به‌تنهایی، یا هر دو نمایش دو و سه‌بعدی در کنار یا بالا و پایین هم. با گزینه Tools هم می‌توان از مولکول مورد نظر فایل خروجی تصویر یا نمایش ساختار گرفت. همچنین اطلاعات مختصری از نام، فرمول بسته، درصد اتم‌های کربن، نیتروژن و هیدروژن، و برای برخی ترکیب‌ها اطلاعات محدود طیف‌سنجی از آن قابل دریافت است. در گزینه Model نیز امکان تغییر شکل نمایش مولکول و تغییر رنگ زمینه فراهم است. چنانچه مولکول مورد نظر ما یک پروتئین باشد، امکان تغییر شیوه نمایش و رنگ مارپیچ‌ها و صفحه‌های تاخورد در آن با گزینه‌های موجود در Protein وجود دارد. در گزینه Jmol که گزینه آخر است امکان انجام محاسبه‌های مختصر روی ساختار رسم شده وجود دارد که برای نمونه می‌توان به محاسبه طول و زاویه پیوندها اشاره کرد. البته خود وبگاه هنگام انجام محاسبه تأکید می‌کند که نتیجه محاسبه دارای دقت و صحت کافی نیست. از این امکان وبگاه زمانی می‌توان استفاده کرد که می‌خواهیم به شکلی سرانگشتی یا تقریبی فاصله اتم‌ها یا زاویه بین آن‌ها را بدانیم. در شکل زیر ساختار پروتئین Ubiquitin نشان داده شده است. گفتنی است که مولکول‌های پیچیده مانند پروتئین‌ها امکان نمایش ساختار به شکل دوبعدی را ندارند.

در چپ و ساختار فضایی با نمایش گلوله و میله مربوط به ترکیب آشنای کافی است. ترکیبی که ممکن است ساختار آن در نگاه نخست برای برخی قابل تشخیص نباشد. چنانچه روی قسمت سمت راست کلیک چپ را نگه دارید و ماوس را حرکت دهید، می‌توانید ساختار سه‌بعدی ترکیب را به‌خوبی مشاهده کنید. در قسمت بالا، سمت چپ صفحه یک نشانه جست‌وجو وجود دارد که امکان جست‌وجوی ترکیب را برای کاربر فراهم می‌کند. این جست‌وجو می‌تواند ترکیب‌های آلی، معدنی و مولکول‌های زیستی مانند پروتئین‌ها، آنزیم‌ها، پپتیدها، آمینواسیدها و نوکلئیک‌اسیدها را در بر گیرد. امکان مهم دیگر در این وبگاه، همان‌گونه که در نیمه سمت چپ آن مشاهده می‌شود، امکان ترسیم ترکیب مورد نظر کاربر در آن است. جعبه‌های ابزار مربوط به ترسیم مولکول، در سه طرف نیمه سمت چپ مشاهده می‌شود که برحسب نیاز می‌توان از آن‌ها استفاده کرد. در جعبه ابزار سمت راست می‌توان اتم مورد نظر را انتخاب کرد و از جعبه ابزار سمت چپ نیز امکان انتخاب پیوند، برخی ترکیب‌های حلقه‌ای و نیز بار مربوط به اتم وجود دارد. در جعبه ابزار بالایی نیز به ترتیب از چپ به راست امکان حذف مولکول، پاک کردن قسمتی از آن، برگشت به عقب یا جلو رفتن، جابه‌جایی مولکول، انتخاب کل یا قسمتی از آن، هم‌رنگ کردن اتم‌ها با کربن، نشان دادن همه اتم‌ها با نماد شیمیایی آن‌ها و به مرکز آوردن مولکول رسم شده در تصویر وجود دارد. حال پس از اینکه مولکول دلخواه مان را رسم کردیم، ابزار 2D to 3D می‌تواند شکل سه‌بعدی ترکیب



▲ ساختار پروتئین یوبی کیتین [webqc.org](http://webqc.org) [molview.org](http://molview.org)