

КОМПЬЮТЕРНАЯ ПОДДЕРЖКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ ЧАСТИ ХИМИИ

К числу инновационных технологий обучения можно отнести компьютерные и телекоммуникационные технологии. Они способствуют рациональному проектированию учебного процесса и эффективной реализации намеченных целей и задач обучения [1]. Эксперимент требует от преподавателя много времени для подготовки и проведения, наличия целого набора реактивов и оборудования. Опыт должен быть наглядным и убедительным, и если он не создает должного впечатления, недостаточно эффективен или неудачен, то теряется интерес учащихся к познанию наблюдаемого явления. Поэтому, использование мультимедийных компьютерных учебников, виртуальных лабораторий имеет ряд ценных преимуществ, особенно в условиях недостатка обеспеченности химических лабораторий необходимым оборудованием. Мультимедийные средства позволяют наглядно изображать химические процессы и объекты, показывают динамику механизмов химических реакций и технологические процессы химических производств [1]. Учебная информация в компьютерных средствах обучения может использоваться на всех этапах обучения: на этапе введения нового материала, на этапе закрепления, повторения и контроля знаний, умений и навыков обучаемых [1].

В настоящей статье рассмотрим некоторые возможности применения программы HyperChem в ВУЗах, где преподаются химические дисциплины, что позволяет студентам более глубоко усвоить основные понятия структурной химии, поскольку, одним из важнейших элементов химического исследования является анализ геометрической структуры соединений. Структурные формулы отражают связанность различных атомов в молекуле друг с другом. Классическим примером двухмерной структурной модели является структурная формула бензола: брутто-формула C_6H_6 не позволяет передать взаимосвязи между атомами углерода кольца, в связи с чем возникает необходимость отображения структуры в виде геометрического образа - задача визуализации структуры. Еще более актуальной эта задача становится при изучении стереоизомеров. Конформационный анализ соединений требует использования трехмерных моделей молекул. До появления компьютеров в качестве таких моделей широко применялись механические модели молекул (модели Стьюарта-Бриглеба) [2]. Возможность изображения трехмерных моделей молекул при использовании программы HyperChem позволяет студентам углубить знания, полученные в процессе изучения темы «Основные положения теории химического строения Бутлерова. Строение органических веществ. Виды изомерии», поскольку студенты должны закрепить навыки написания структурных формул органических веществ, уметь определять изомеры [3]. В связи с этим, целесообразно выполнить следующую лабораторную работу, которая позволит научиться рисовать структурные формулы при использовании графической оболочки программы HyperChem.

Создание молекулы средствами графической оболочки HyperChem • Мышь устанавливают на пункт меню "Build", щелчком по левой кнопке разворачивают меню и выбирают "Default atoms" (в раскрывшемся окошке появится список атомов в виде периодической системы). При помощи кнопки Properties (свойства) для выбранного

атома можно открыть справочное окно, в котором собрана полезная информация о соответствующем элементе.

Select: Display ; Databases Setup ; Explicit Hydrogens
Add Hydrogens Model Build
HyperChem - (untitled) length and ii Angles All Atoms Valency Valence
Build: large... United Atoms All Atoms
Edit Build Calculate Types Compile Type Rules
Comm Set Atom Type... Set Mass... Set Charge... Set Custom Labo... Constrain Geometry...
Constrain Bond Length.. Constrain Bond Angle.. Constrain Torsion..



• Устанавливают указатель курсора в режим построения молекулярных моделей (кружок с перекрестием); для этого в верхней строчке выбирают необходимый вид курсора и щелкают левой кнопкой мыши

Propert
r^ Allow Ions j^ Explicit

Change; the default element for drawing atoms

- В развернутой на экран периодической таблице выбирают интересующий атом (щелчком левой кнопкой мыши по атомному символу); щелчок левой кнопкой мыши в точку на экране генерирует выбранный атом в этой точке. Если возникли нежелательные варианты, которые следовало бы удалить, то щелкните правой кнопкой мыши на атом, который хотите удалить.

- Аналогично в таблице выбирают следующий атом (если он отличается от предыдущего) и помещают его рядом с предыдущим.

Связь между атомами обозначают, нажимая левую кнопку мыши в положении одного из атомов, и удерживая ее, передвигают курсор к другому; затем кнопку отпускают

- Типы связей (ординарные, двойные, тройные, делокализованные) задают, щелкая левой кнопкой мыши по связи до тех пор, пока в нижней строке окна не появится соответствующая надпись (single, double, triple, aromatic)

- Построенную модель автоматически достраивают добавлением водородов; для этого мышь устанавливают на пункт меню "Build", щелчком по левой кнопке разворачивают меню и выбирают "Add Hydrogens"

HyperChem - Select Display Databases Setup Compute Annotations Script
 (untitled) €Э1(£p1^c{ } *Exp^{licit} Hydrogens

Default Element ■ ■

A
d
d

H
y
d
r
o
g
e
n
s

M
o
d
e
l

B
u
i
l
d

Constrain Length and Angles Allow Arbitrary Valence
 Set Pormol Charge...
 United Atoms " All Atoms

Calculate Types Compile Type Rules

Set Atom Type... Set Mass... Set Charge... ; Set Custom Label... Constrain geometry... Constrain Bond Length... Constrain Bond Angle... Constrain Bond Torsion...
 Change theaenrainwernenr

- Для устранения неточностей выполненного рисунка мышь устанавливают на пункт меню "Build", щелчком по левой кнопке разворачивают меню и выбирают "Model build"; данная команда корректирует межатомные расстояния и углы:

HyperChem

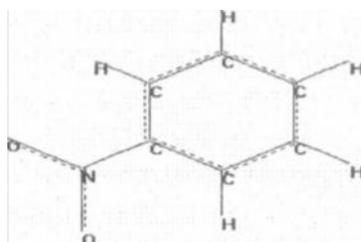
Select Display Databases Setup Compute Annotation^ Script \ Help

>y
E
x
p
l
i

C
i
t
H
y
d
r
o
g
e
n
s

D
e
f
a
u
l
t
E
l
e
m
e
n
t
.
.
.
A
d
d

H
y
d
r
o
g
e
n
s



Constrain Length and Angles Allow Arbitrary Valence
Se: Formal Charge... UrUsed Atom* Alt Atoms

Calculate Types Compile Type Rules

**Sat Atom Type... Sc* Mam... Set Charge... Set Custom Label... Constrain Geometry... Constrain Bond Length... Constrain Bond Angle.. -OIm.strain Bond
ToiSJon..**

Transform a ^1?члоессп*пягв"»^

Сохраним рисунок для дальнейшего его использования. Для этого в меню File выбираем Save as. Даем имя нитробензол.Бп и сохраняем.

HyperChem и ChemDraw поддерживают интерфейс через буфер обмена Windows, поэтому, если необходимо создать сложную структуру, можно использовать ChemDraw, а затем простым копированием перенести структуру в HyperChem. Она автоматически преобразуется в трехмерный вид.

Некоторые заготовки молекул (например, аминокислоты, кристаллы, полимеры) можно добавлять из главного меню Databases (База данных). Кроме того, каталог

Samples (Примеры) содержит массу уже готовых органических и неорганических соединений.

Вид представления молекулы на экране можно изменить путем установки нужной опции в пункте меню Display\Rendering (Отображение\Визуализация).

Здесь существует богатый выбор настроек, **Rendering Options** позволяющий подобрать форму представления модели, в наибольшей мере отвечающую задачам анализа. По качеству трехмерные модели молекулярных структур HyperChem ни в чем не уступают Chem3D.

Среди возможных методов отображения молекул: Sticks (Стержни), Balls (Шары), Balls&Cylinders (Шары и цилиндры), Overlapping Spheres (Перекрывающиеся сферы), Dots (Точки) и Sticks&Dots (Стержни и точки). Каждый из этих методов отображения по-своему хорош и имеет также ряд дополнительных настроек во вкладках.

Для подробного изучения трехмерной модели используются кнопки вращения и перемещения:

Rotate out-of-plane (Внеплоскостное вращение). Вращать можно как всю молекулу, так и ее отдельные элементы относительно выделенных.

• **Jsi** Rotate in-plane (Вращение в одной плоскости). Если предварительно выделить определенный атом или связь, то вращение будет осуществляться относительно их.

Translate (Перемещать). Позволяет перемещать молекулу по плоскости экрана.

Z-Translate. Позволяет перемещать молекулу по оси Z, которая располагается перпендикулярно плоскости экрана.

• **Oj** Zoom. С помощью этой кнопки можно изменить масштаб изображения. Более точно масштаб изображения можно задать в пункте главного меню Edit\Zoom.

• **Ml** Z-clipping planes. Эта кнопка позволяет создать сечение молекулы двумя секущими плоскостями, перпендикулярными оси Z.

При изучении курса «Строение вещества» целесообразно выполнить следующие лабораторные работы, которые предлагаются на химическом факультете МГУ им. М.В. Ломоносова и широко обсуждаются в учебно-методической литературе, в том числе и на соответствующих сайтах в Интернете.

Определение геометрических параметров молекулярной модели, Измерение физических характеристик молекулярных структур осуществляется с использованием различных техник выделения. Путем выделения различных частей молекулы мы можем измерять длины связей и углы, а также отображать характеристики атома, так же как заряды и X,Y,Z координаты. Нарисуйте молекулярную структуру нитробензола:

Чтобы получить информацию по характеристикам атомов, в меню Select должен быть выбран пункт Atoms, а Multiple Selections - нет. Нажмите кнопку Selection tool (инструмент выделения). Выберите атом кислорода. Выбранный атом подсвечивается и характеристики атома появляются в строке состояния.

Чтобы измерить длину, щелкните по углерод-кислородной связи. Связь будет подсвечиваться, а ее длина будет отображена в строке состояния.

Чтобы измерить валентный угол между двумя смежными атомами, удерживая левую кнопку мыши, проведите указатель мыши между двумя атомами, которые соединены с общим третьим атомом. Выделенный угол будет подсвечен и его

величина появится в строке состояния. Для выделения двугранного угла надо провести указатель мыши с нажатой левой кнопкой между ближайшими четырьмя атомами. В статусной строке будет отражено его текущее значение.

Для измерения расстояний и углов между валентно несвязанными атомами нужно включить пункт Multiple Selection в пункте меню Select.

Расчет длин связи и валентных углов методами ММ и MNDO

В начале откроем файл нитробензол.Бп. В пункте Molecular Mechanics пункта меню Setup выберем ММ+. Проведем оптимизацию геометрии молекулы. Сделаем расчет всех длин связей и валентных углов.

Далее проводим расчет с помощью метода MNDO. Для этого выбираем пункт Semi-empirical в пункте меню Setup, в раскрывшемся окошечке устанавливаем MNDO. Запускаем процесс оптимизации и также делаем расчет, как и при расчете методом ММ.

Все полученные данные вводим в таблицу 1.

Таблица 1

Длина связи и валентные углы	Данные ММ расчета	Данные MNDO расчета
08 - N7	1,22136	1,21221
09 - N7	1,22136	1,21219
N7 - C6	1,41615	1,49908
C6 - C5	1,39832	1,41564
C5 - C4	1,39687	1,40643
C4 - C3	1,39625	1,40607
C3 - C2	1,39625	1,40609
C2 - C1	1,39687	1,40641
C1 - C6	1,39832	1,41565

Продолжение таблицы 1

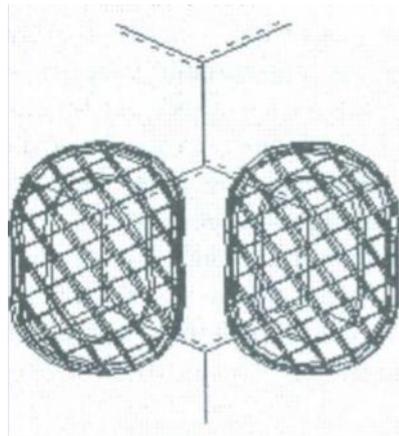
Длина связи и валентные углы	Данные ММ расчета	Данные MNDO расчета
09 - N7 - C6	116,897	119,963
08 - N7 - 09	126,207	120,076
08 - N7 - C6	116,897	119,961
C6 - C5 - C4	119,449	119,276
C5 - C4 - C3	120,19	120,573
C4 - C3 - C2	120,064	120,841
C3 - C2 - C1	120,19	120,572
C2 - C1 - C6	119,449	119,276
C1 - C6 - C5	120,659	120,461
C1 - C6 - N7	119,67	119,768

Построение диаграммы энергетических уровней. Графическое изображение ВЗМО и НВМО.

Для начала работы откроем файл нитробензол.Бп. Устанавливаем полуэмпирический метод MNDO. Далее производим оптимизацию геометрии и после этого в меню Compute пункты Orbitals и Plot Molecular Graphs становятся доступными. Если нажать пункт Orbitals, то появится окошечко, где можно увидеть энергетическую диаграмму, значения энергий высшей занятой МО (ВЗМО) и нижней вакантной МО (НВМО) и другие параметры.

Энергия ВЗМО -10,312 эВ; Энергия НВМО -1,221 эВ.
Вид ВЗМО

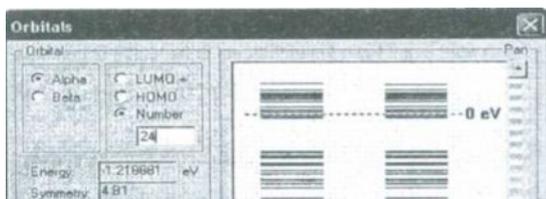
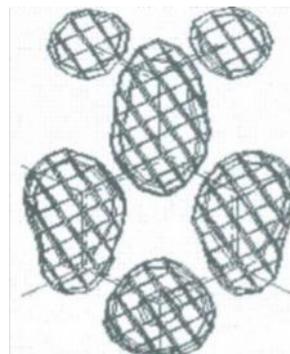
-
-Pan-
(7) Afch ШМО ♦ 45 78
a f Γ -0eV
HOMO-C
Number
[23~"



E. C 2D
Contours
P Orbital
squated ::
Flo: !:
Option: I :

Energy. I lu
31245 eV
Symmetry:
|2A2

Вид НВМО



Orbital Plotting
j c 2D
Coriouri: \
i 3D .J
IsOSurfaceHv 1
P Orbital
squated;
; Plot: j
; Option.
'■ Сад .j;

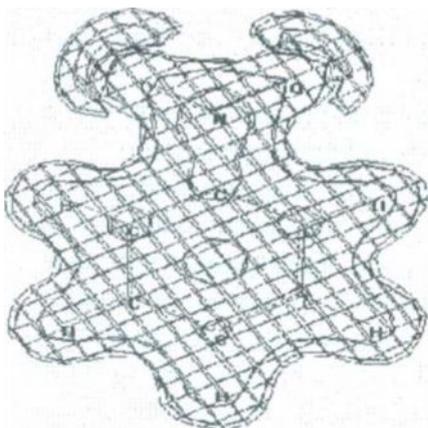
оложи
тельн
ые
значен
ия
коэфф
ициент
ов при
атомн
ых
орбита
лях

Атомы	Орбитали	ВЗМО	НВМО
N7	Pz	0,00000	0,31496
С1	Pz	-0,00001	0,44102
С2	Pz	0,49946	-,035691
С3	Pz	0,50052	-0,16993
С4	Pz	0,00001	0,48335
С5	Pz	-0,50052	-0,16993
С6	Pz	-0,49946	-0,35691
08	Pz	-0,00408	-0,28297
09	Pz	0,00409	-0,28297

дают связывающие вклады в МО, отрицательные значения - разрыхляющие вклады.

Также по значениям ВЗМО и НВМО мы можем определить нуклеофильные и электрофильные свойства вещества. В данной работе нитробензол является электрофилом, так как значение НВМО отрицательно.

Для построения распределения электростатического потенциала выбираем пункт меню "Compute", которое разворачивают щелчком по левой кнопке мыши и далее выбираем "Plot molecular properties". В раскрывшемся окошке выбираем "electrostatic potential" и устанавливаем "3D", и нажимаем "ОК". Результат проделанной работы выглядит следующим образом:



Данный рисунок показывает области положительного и отрицательного распределения электростатического потенциала и визуализирует неподеленные электронные пары на атомах кислорода. Положительный знак электростатического потенциала отображается зеленым цветом. В области неподеленных пар на атомах азота, кислорода и других электростатический потенциал отрицательный, отображается красным цветом.

Это позволяет, например, сделать предположение о взаимодействии молекулы с растворителем. Очевидно, что катионы стремятся подойти к области отрицательного потенциала, анионы к положительной области.

Литература

1. Алексеева Н. П. Компьютерная поддержка экспериментальной части химии, в условиях профильного обучения в сельской школе //Материалы Интернета [http://festival. 1 september.ru/2005_2006/index.phpnumb_artic-314133](http://festival.1september.ru/2005_2006/index.phpnumb_artic-314133)
2. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия.-М: Солон - Пресс, 2005.-С.7
3. Нейланд О.Я. Органическая химия. -М.: ВШ, 1990.-751с