
МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И РЕАКЦИЙ ПРИ ИЗУЧЕНИИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Н.М. Голуб

Брест, Брестский государственный технический университет

Образовательные системы во всех развитых странах мира предполагают создание условий для непрерывного образования, внедрение новых технологий, направленных на творческое развитие личности. Разработка, внедрение и использование компьютерных технологий в процессе обучения является одним из приоритетных направлений развития высшей школы. Компьютерные разработки могут рассматриваться при этом как обязательная часть высшего образования независимо от профиля подготовки будущего специалиста.

Одной из целей обучения в вузе является формирование профессионального мышления будущего специалиста, который должен не только усвоить определенную систему знаний, но и научиться системно видеть и решать проблему, выделять фундаментальные связи внутри теории, а также применять теоретические знания к решению практических задач. Каждый студент должен, приобрести знания и навыки работы в области информационных технологий, овладеть определенным типом мышления. [2]. Внедрение электронных систем в высшее образование позволяет принципиально изменить методы передачи учебного ма-

териала от преподавателя к студенту. Использование компьютерных технологий в учебном процессе в существенной степени зависит от характера, уровня и качества материала, который заложен в соответствующей программе, а также от умения сформулировать учебную задачу таким образом, чтобы заинтересовать учащегося, побудить его к поиску правильного решения.

Одной из интересных и во многом парадоксальных особенностей современных естественнонаучных знаний является значительная и все возрастающая роль теоретических методов трактовки результатов исследования. Теоретическое мышление, сопутствующее развитию квантовой химии, все сильнее расширяет континуум, лежащий между экспериментом и теорией. Вместе с этим все более размывается граница между теоретическими понятиями и теоретическими интерпретациями.

Сегодня функционирует достаточно много современных вычислительных комплексов, реализующих методы квантовой химии и молекулярной динамики. Молекулярное моделирование становится все более распространенным инструментом для изучения химических и биологических процессов. Применение компьютерных технологий может оказать заметную поддержку экспериментальным работам, позволяя существенно снизить временные и материальные затраты.

В области квантовой химии полностью теоретическим можно считать расчет «*ab initio*» свойств какой-либо молекулярной системы с помощью методов квантовой механики. Введение в расчет каких-либо величин, кроме универсальных мировых постоянных, представляет собой уже уступку эксперименту. Наряду с этим, подбор уравнения, описывающего какой-либо процесс с учетом некоторых характеристик молекул или атомов, вполне может быть назван, теоретической обработкой наблюдений. Четкой границы между наблюдаемыми зависимостями и первичным теоретическим их осмыслением практически не существует. В повседневной практике мы все же довольно уверенно проводим различие между этими двумя категориями зависимостей. Думается, что это повседневное интуитивное разграничение экспериментального и теоретического подсознательно основывается на степени связи осмысляемой закономерности с общими принципами науки, лежащими в основе изучаемых явлений.

В силу некоторых причин исследование экспериментальными методами особенностей структуры, электронного строения и свойств интермедиатов и переходных состояний затруднено или невозможно. Квантово-химические расчеты в сочетании с данными, полученными физико-химическими методами и синтетическим путем, позволяют наиболее близко подойти к глубокому пониманию явления и установить последовательность событий, происходящих в ходе химического взаимодействия.

Поэтому, представляется важным решение вопроса о возможности применения расчетных методов квантовой химии для корректного объяснения физико-химических свойств и реакционной способности химических соединений, которые базируются на понятии поверхности потенциальной энергии (ППЭ), являющимся центральным в спектроскопии, кинетике, структурной теории.

В практическом курсе «Квантовая механика и квантовая химия» для студентов биологического факультета специальности «Биология. Химия» и «Химия. Биология» БрГУ имени А.С. Пушкина выполняется комплекс лабораторных работ по сравнительному анализу реакционной способности ряда соединений и инверсионному анализу молекулярных структур. Введение компьютерной ком-

пONENTЫ увеличивает восприимчивость сложного квантово-химического материала, а исследовательский подход при анализе полученных результатов позволяет студентам интерпретировать теоретический аппарат данного курса наглядным изображением химических структур, с учетом всех особенностей пространственного и электронного строения.

Суть метода внутренней координаты для изучения реакционной способности и инверсионного анализа изложена в лабораторном практикуме [1]. Для визуализации строения многомерной ППЭ используют анализ ее сечений по независимым внутренним координатам. В качестве иллюстрации можно рассмотреть конформационный расчет молекулы этана. Молекулярная формула – C_2H_6 .

Число независимых ядерных координат, определяемых по формуле $3N - 6$ равно $3 \cdot 8 - 6 = 18$. ППЭ в данном случае невозможно наглядно представить в графическом виде. Если даже ограничить варьирование каждой внутренней координаты всего 360 точками, то для того чтобы построить ППЭ для молекулы этана, потребуется произвести расчеты 360^{18} различных структур (точек на ППЭ). На практике обычно можно использовать сведения лишь об определенных участках ППЭ. Это, прежде всего, точки минимумов и седловые точки, которые являются моделями переходных состояний в химических реакциях, а также пути минимальной энергии перехода от одного минимума к другому (Рис. 1).

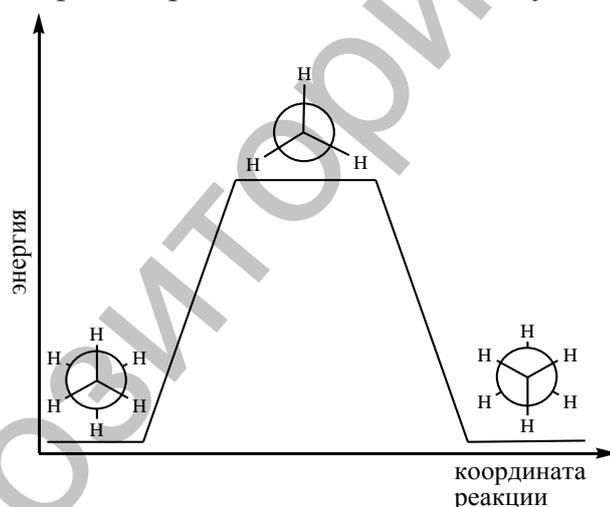


Рисунок 1 – Сечение ППЭ вдоль координаты реакции перехода конформации скошенной в заслоненную молекулы этана

В некоторых случаях можно выделить один или два параметра (внутренние координаты) из числа внутренних координат, монотонное изменение которых может описать путь химической реакции или конформационный переход [3].

Математический расчет, в этом случае, выглядит наглядно и позволяет, минуя стадию сложных вычислений, делать заключения о реакционной способности структуры, а при наличии изменяющегося ряда соединений о влиянии на реакционную способность функциональных групп. Расширенный анализ результатов не только обобщает теоретические навыки, полученные на лекционном курсе по данному предмету, но и по большому спектру смежных дисциплин, что позволяет ввести в процесс обучения научно-исследовательский аспект при изучении программного материала. Восприятие материала в этом случае получается не одно-

сторонним и охватывает различные стороны подготовки преподавателя химии.

Моделирование механизмов химических реакций или инверсионных переходов при выполнении практических занятий по квантовой химии позволяет обучающимся обосновать возможности осуществления процесса. Рассмотрение эмпирических и модельных соотношений позволяет избежать недоразумений и двусмысленностей при изучении теоретической химии.

Использование данного методического подхода к преподаванию курса «Квантовая механика и квантовая химия» помогает студентам реально понимать процессы, происходящие в теоретической химии, что в свою очередь повышает их научный потенциал как педагогов-исследователей.

Применение информационных технологий в обучении позволяет реализовать такой важный принцип обучения, как индивидуализация. Компьютерное обучение, являясь по форме самостоятельным, индивидуальным, осуществляется по общей методике, которая реализуется в компьютерной программе. Тем не менее, нельзя считать, что компьютерное моделирование может полностью заменить химический опыт либо экспериментальные методы исследования. Наиболее продуктивным является совместное решение поставленных задач экспериментальными и расчетными методами.

Список литературы

1. Голуб, Н.М. Квантовая механика и квантовая химия // Н.М. Голуб, А.И. Боричевский – БрГУ им. А.С. Пушкина. Брест 2006.– С. 51
2. Зинович, З. Дидактическое программное обеспечение учебного процесса по фундаментальным дисциплинам в системе высшего образования // З. Зинович, Е. Василевская, В. Халецкий. – Technologiczne systemy informacyjne w inzynierii, produkcji i kształceniu technicznym, Lublin, Lubelskie Towarzystwo Naukowe, 2001 P.121-127
3. Минкин, В.И. Теория строения молекул / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997. – 560 с.