

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Кузбасский государственный технический университет
имени Т. Ф. Горбачева»

Институт химических и нефтегазовых технологий
Кафедра технологии пластмасс, органических веществ и нефтехимии

Татьяна Сергеевна Котельникова

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ПРОФЕССИОНАЛЬНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

Методические материалы к практическим занятиям и
лабораторным работам

Рекомендовано учебно-методической комиссией направления
подготовки 18.03.01 «Химическая технология» в качестве
электронного издания для использования в учебном процессе

Кемерово 2024

Рецензенты: Боркина Г. Г. – кандидат химических наук, доцент кафедры технологии пластмасс, органических веществ и нефтехимии ФГБОУ ВО «Кузбасский государственный технический университет имени Т. Ф. Горбачева»

Котельникова, Т.С. Информационные технологии в профессиональной деятельности: методические материалы к практическим занятиям и лабораторным работам для обучающихся направления подготовки 18.03.01 «Химическая технология» профиля «Химическая технология органических веществ» всех форм обучения / сост. Т.С. Котельникова,; Кузбасский государственный технический университет имени Т. Ф. Горбачева. – Кемерово, 2024. – Текст: электронный.

Методические материалы предназначены для работы обучающихся на практических и лабораторных занятиях при изучении дисциплины «Информационные технологии в профессиональной деятельности». Содержат теоретические сведения, необходимые для усвоения курса, задания для выполнения лабораторных работ, вопросы для текущего контроля знаний.

© Кузбасский государственный
технический университет
имени Т. Ф. Горбачева,

© Котельникова Т.С.,
составление, 2024

ОГЛАВЛЕНИЕ

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ	4
Практическое занятие № 1, 2 Способы изображения молекулярных структур органических соединений	5
Практическое занятие № 3 Применение программы ChemOffice в учебном процессе. Интерфейс программы ChemDraw	13
Лабораторная работа № 1 Редактирование структурных химических формул органических соединений с помощью программы ChemDraw	17
Лабораторная работа № 2 Написание схем химических реакций и их механизмов с помощью программы ChemDraw ..	18
Лабораторная работа № 3 Создание карты химических реакций с указанием реакционных центров в программе ChemDraw	18
Лабораторная работа № 4 Редактирование проекционных формул органических соединений в программе ChemDraw	21
Практическое занятие № 4 Применение программы Chem3D пакета ChemOffice в учебном процессе. Интерфейс программы Chem3D.....	21
Лабораторная работа № 5 Визуализация пространственных молекулярных структур с использованием программы Chem3D	25
Практическое занятие № 5 Анализ геометрии трехмерных моделей молекул органических соединений в среде Chem3D ..	28
Лабораторная работа № 6 Изучение пространственного строения молекул органических соединений с открытой цепью в среде Chem3D.....	29
Лабораторная работа № 7 Анализ геометрии трехмерных моделей молекул циклического строения в среде Chem3D	31
Практическое занятие № 6 Прогнозирование физико-химических свойств органических соединений на основе их химического строения.....	31

Лабораторная работа № 8 Определение физических и термодинамических свойств соединений эмпирическим методом в программе Chem3D.....	37
Практическое занятие № 7 Расчет термодинамических свойств соединений квантово-химическими методами в программе Chem3D	37
Лабораторная работа № 9 Оптимизация геометрии и минимизация энергии молекулярной структуры. Расчет термодинамических свойств соединения полуэмпирическим методом.....	41
Практическое занятие № 8 Расчет и построение молекулярных орбиталей и частичных зарядов на атомах в программе Chem3D	43
Лабораторная работа № 10 Расчет и построение распределения частичных зарядов на атомах в молекулах органических соединений в программе Chem3D.....	45
КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ	47
ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА ПО ЛАБОРАТОРНЫМ РАБОТАМ	48
СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	49
Приложение	51

ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Целью изучения дисциплины «Информационные технологии в профессиональной деятельности» является приобретение студентами знаний, умений и навыков в области применения компьютерных технологий в моделировании сложных молекулярных структур и определения их основных геометрических и энергетических характеристик.

В настоящее время создано большое количество различных программных пакетов, позволяющих решать задачи визуализации как плоских, так и пространственных моделей молекул. В данном курсе предлагается изучить основы одной из наиболее популярных компьютерных программ – ChemOffice, с помощью которой можно визуализировать, редактировать структурные формулы химических соединений, прогнозировать их химические свойства и реакционную способность.

В методических указаниях приведены материалы практических и лабораторных занятий с поясняющими примерами, заданиями, контрольными вопросами, ответами на которые студенты должны проверить свои знания.

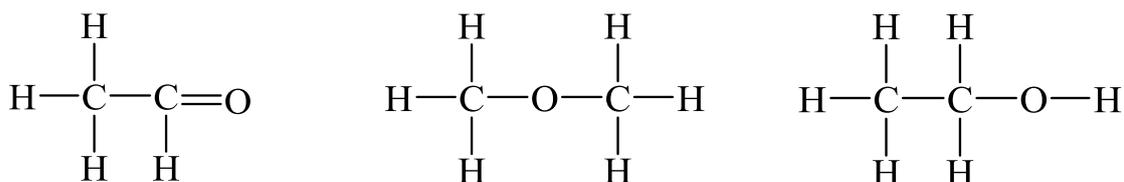
На практических занятиях в виде дискуссии изучаются теоретические положения по конкретной теме, разбираются примеры выполнения заданий. На лабораторных занятиях студенты самостоятельно выполняют задания в соответствии с выданным преподавателем вариантом. Варианты к заданиям приведены в приложении. Задание выполняется каждым обучающимся индивидуально.

Знания, умения и навыки, полученные при выполнении лабораторных работ, контролируются защитой отчета. Для защиты студенту необходимо устно ответить на вопросы, которые приведены в методических указаниях. После успешной защиты отчета студент допускается к промежуточной аттестации в виде зачета.

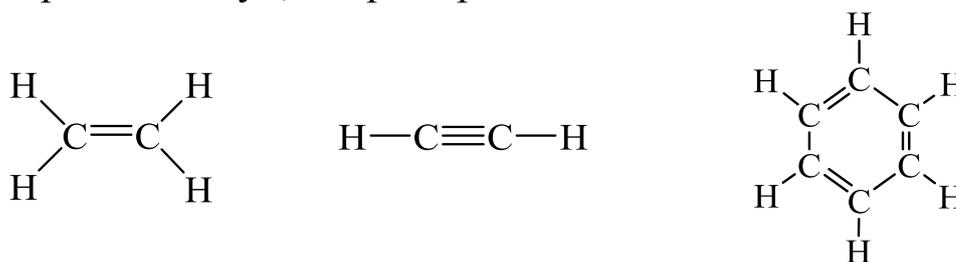
Практическое занятие № 1, 2

Способы изображения молекулярных структур органических соединений

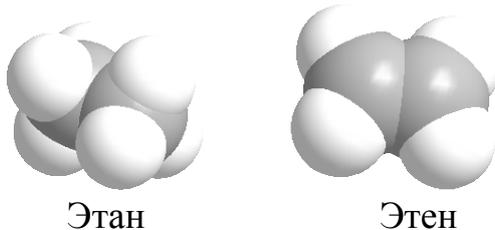
Для обозначения состава молекул простых и сложных веществ пользуются химическими формулами. Обычный способ изображения молекул в органической химии – это структурные формулы, которые передают порядок соединения атомов в молекуле.



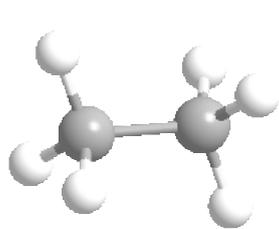
В случае молекул, имеющих плоское или линейное строение, с помощью таких формул можно адекватно описать также геометрию молекул, например:



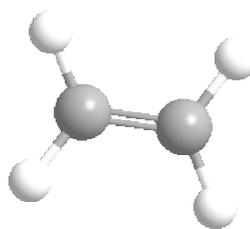
Однако структурные формулы не отражают действительного пространственного расположения атомов. Особенно если в состав молекулы входят sp^3 -гибридизованные атомы углерода, имеющие тетраэдрическое окружение. Наглядно представить связи между атомами и их взаимное расположение, т. е. передать реальную геометрию молекул, можно с помощью пространственных моделей, таких как полусферические модели Стюарта – Бриглеба



или шаро-стержневые модели



Этан

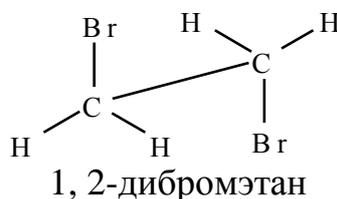


Этен

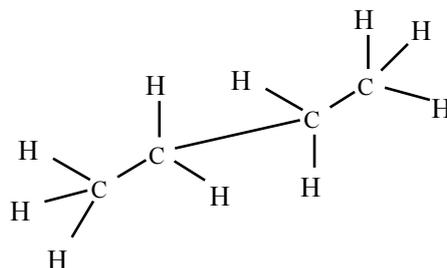
Шаро-стержневые модели молекул делают наглядным относительное положение атомов в пространстве, но не соответствуют действительному соотношению атомных радиусов и длине химических связей.

Изображение пространственного строения молекулы на плоскости осуществляют при помощи различных проекционных формул, которые представляют собой проекции шаро-стержневых моделей в определенном ракурсе.

Для этана и его производных можно использовать **перспективные формулы**. Это рисунки шаростержневых моделей, в которых шары, символизирующие атомы, заменены на символы химических элементов. В перспективных формулах связь С–С как бы удаляется от наблюдателя.



Однако этот способ не подходит для более сложных молекул, например, бутана. В таких случаях наглядность теряется.



Перспективные формулы используют чаще всего для изображения циклических молекул.

Для изображения пространственного строения молекул на плоскости используют клиновидную проекцию, проекционные формулы Ньюмена и Фишера.

Наиболее наглядной является **клиновидная проекция**. Например, клиновидная проекция молекулы метана, имеющей форму тетраэдра, выглядит следующим образом:



Связи C-H^1 и C-H^2 лежат в плоскости чертежа. Атом H^3 возвышается над плоскостью чертежа, что изображается связью C-H^3 в виде клина, широким концом направленного в сторону атома H^3 . Атом H^4 , расположен за плоскостью чертежа, поэтому связь C-H^4 изображается пунктиром или штриховым клином.

Клиновидную проекцию метана можно использовать для построения проекций других углеводородов, например:

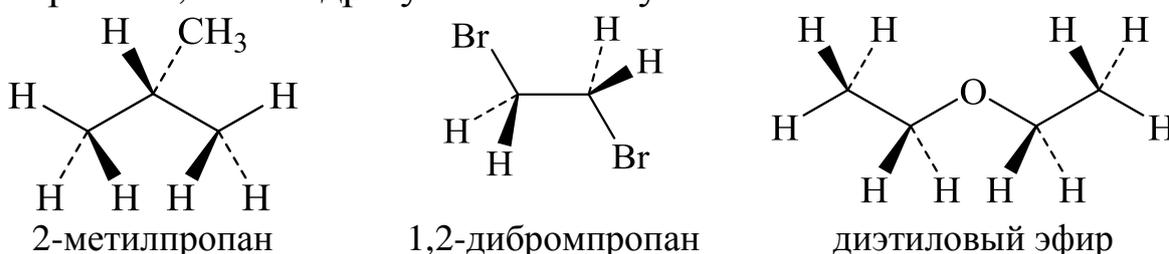


этан

пропан

В проекциях этана и пропана в плоскости чертежа находятся связи C-C и две связи C-H .

Клиновидные проекции обычно изображают в виде зигзагообразной цепи, все связи C-C и две концевые связи C-H которой расположены в плоскости чертежа. Атомы углерода можно не изображать; они подразумеваются в углах зигзага.

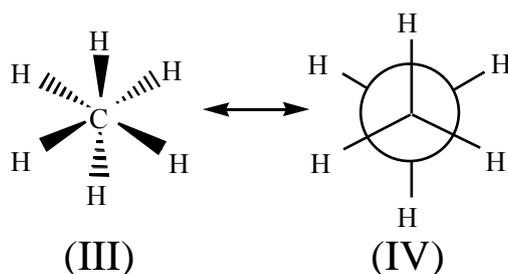


2-метилпропан

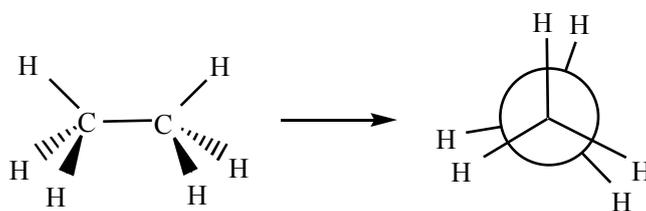
1,2-дибромпропан

диэтиловый эфир

В настоящее время широкое распространение получил сокращенный вариант проекций молекул в виде зигзагов, в углах и на концах которых подразумеваются атомы углерода. Связи C-H при этом не изображают. Связи заместителей с атомами углерода

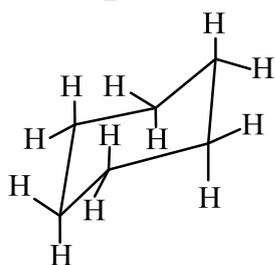


При изображении формулы Ньюмена, соответствующей конформации (II), «передние» атомы водорода заслоняют «задние». Чтобы в формуле Ньюмена были видны все атомы водорода, необходимо слегка повернуть «задний» атом углерода относительно «переднего».

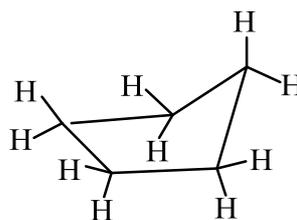


В рассмотренном примере конформация (I) молекулы этана называется заторможенной, а конформация (II) – заслоненной.

Молекулы алициклических соединений неплоские (за исключением трехчленных циклов) и могут существовать в различных конформациях. Поэтому, если важна реальная геометрия цикла, его изображают с помощью перспективной формулы. Атомы углерода при этом не указывают. Например:

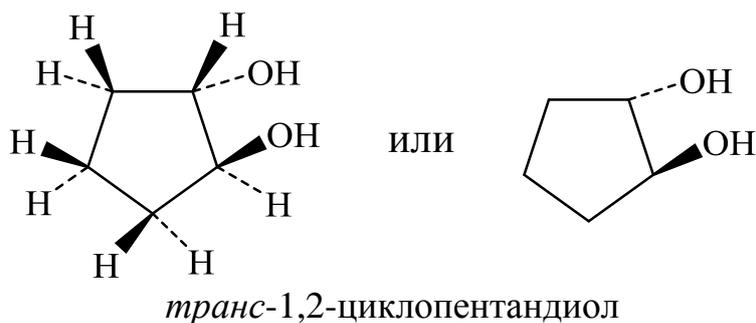


циклогексан



циклопентан

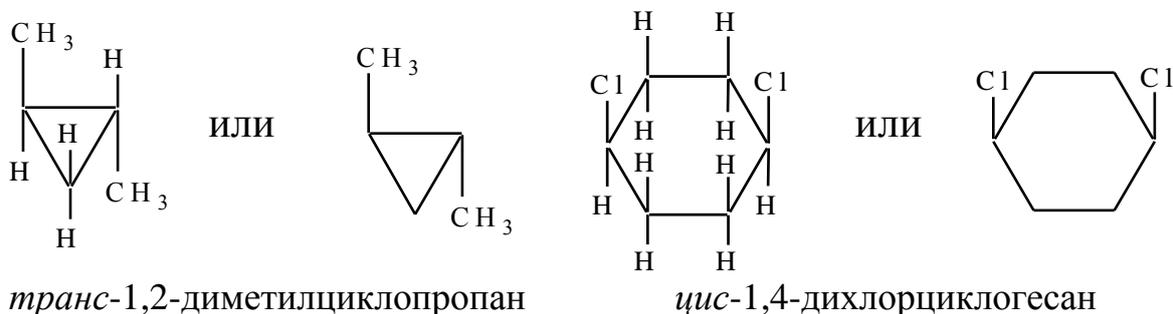
Если важно передать только взаимное расположение заместителей в цикле, можно воспользоваться клиновидной проекцией. При этом цикл искусственно уплощают и рассматривают его «сверху», т. е. в направлении, перпендикулярном плоскости цикла. Относительную конфигурацию изомеров обозначают приставками *цис*- или *транс*- в зависимости от того, находятся заместители по одну или по разные стороны цикла, например:



В другом варианте цикл тоже считают плоским и располагают почти перпендикулярно плоскости чертежа. Ближние к наблюдателю стороны цикла изображают утолщенными линиями.



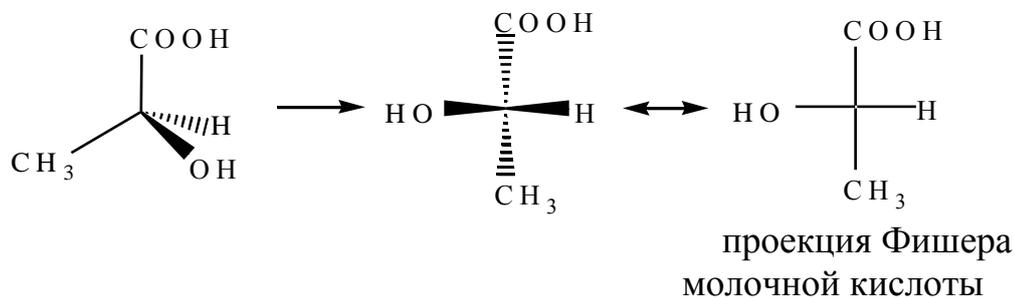
Однако чаще молекулы алициклов рисуют в виде правильных многоугольников, подразумевая при этом, что цикл расположен перпендикулярно плоскости чертежа. Связи заместителей с атомами углерода цикла изображают вертикальными линиями, искажая реальную геометрию молекулы.



Эти формулы удобны тем, что они подчеркивают взаимное расположение заместителей в цикле.

Для изображения на плоскости молекул с асимметрическими атомами углерода, т. е. атомами, связанными с четырьмя различными заместителями, часто используют проекции, предложенные в 1831 г. Э. Фишером. При построении **проекций Фишера** пространственную модель молекулы располагают таким образом, чтобы плоскость, в которой находится углеводородная цепь, оказалась перпендикулярной плоскости бумаги и угол, образованный С–С-связями был обращен вершиной к наблюдателю; сверху должна находиться высшая по степени окисления функциональная группа (старший заместитель). Рассматриваемая

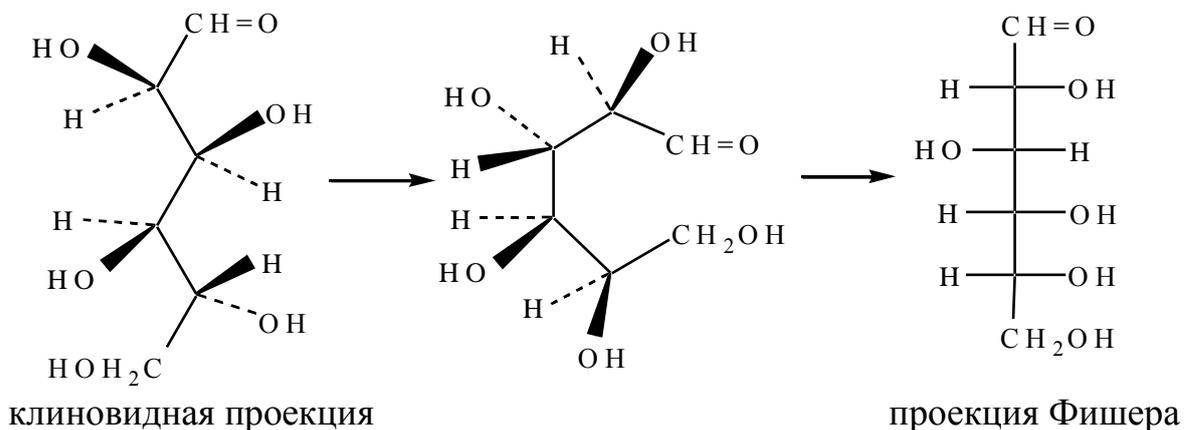
формула может быть представлена в виде двух взаимно перпендикулярных линий, пересекающихся в точке, где находится асимметрический атом углерода.



При пользовании проекциями Фишера важно помнить, что вертикальная линия в них изображает связи, удаляющиеся от наблюдателя, а горизонтальная – связи, направленные к нему.

При построении проекций Фишера для молекул с несколькими асимметрическими атомами производят аналогичные операции. Сначала вращением вокруг одинарных С–С-связей добиваются того, чтобы эти связи составили как бы незамкнутый многоугольник и располагались в одной плоскости. При этом необходимо, чтобы каждый этановый фрагмент молекулы находился в заслоненной конформации. Затем располагают этот многоугольник в плоскости, перпендикулярной плоскости бумаги, разомкнутой частью от наблюдателя и, взяв за крайние атомы углеродной цепи, вытягивают. При этом атом углерода с большей степенью окисления должен быть помещен сверху. В результате наблюдатель, смотрящий перпендикулярно плоскости бумаги, будет видеть связи как взаимно перпендикулярные линии, пересекающиеся в точках, где расположены асимметрические атомы углерода.

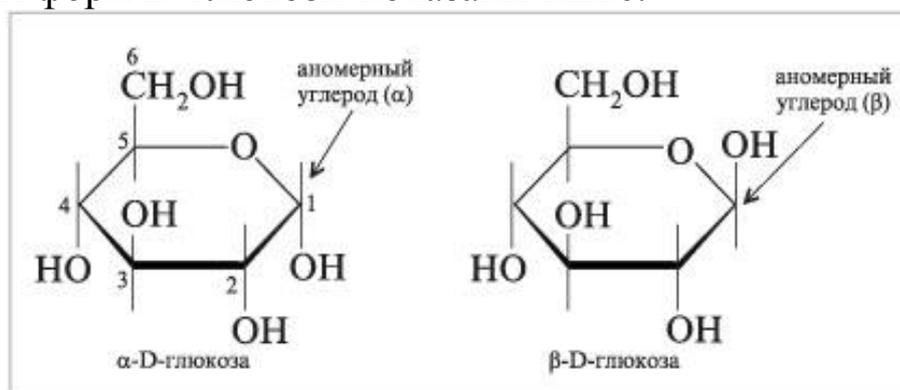
Пример построения проекции Фишера молекулы D-глюкозы:



Проекция Фишера точно отражает относительную конфигурацию асимметрических центров, но ничего не говорит об истинном расположении атомов в пространстве. И становится совсем неудобной при изображении циклических структур.

В молекулах моносахаридов содержатся гидроксильная и карбонильная группы, поэтому они легко образуют циклические полуацетали и существуют почти исключительно в этой форме. Циклические структуры моносахаридов изображают на плоскости в виде **проекций Хеуорса**.

При построении формул Хеуорса пяти- или шестичленный цикл условно считается плоским (на самом деле молекула может находиться в конформации кресла или ванны) и располагается как бы перпендикулярно плоскости листа бумаги; при этом ближняя к наблюдателю часть кольца на чертеже располагается снизу и обычно выделяется более жирной линией. Группы, присоединенные к углеродам кольца, располагают над или под плоскостью кольца параллельно плоскости листа бумаги. В формулах Хеуорса аномерный углерод обычно записывают справа, а полуацетальный кислород – позади него. Проекция Хеуорса α - и β -пиранозных форм D-глюкозы показаны ниже.



Вопросы для самоконтроля:

1. В чем отличие структурной и брутто-формулы соединения?
2. Назовите виды пространственных моделей молекул.
3. Перечислите способы изображения пространственного строения молекул на плоскости.
4. Что собой представляет клиновидная проекция молекулы на плоскости? Привести пример.

5. Что собой представляют проекционные формулы Ньюмена?
6. Что такое конформация молекулы?
7. Каковы особенности изображения циклических молекул?
8. Правила построения проекций Фишера.
9. Что представляют собой формулы Хеорса?

Практическое занятие № 3

Применение программы ChemOffice в учебном процессе.

Интерфейс программы ChemDraw

С развитием атомно-молекулярных представлений в химии возник интерес к использованию математических методов для вычисления параметров молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности химических соединений. Однако возможность прогнозирования геометрического строения молекул и свойств веществ получила научную основу лишь с развитием квантовой химии. Квантовая химия – это область науки, которая возникла на стыке теоретической физики, прикладной вычислительной математики и химии. Одним из ее создателей является Р. Малликен, разработавший основы теории молекулярных орбиталей, за что был удостоен Нобелевской премии в 1966 г.

В настоящее время компьютер стал таким же инструментом исследования, как обычный физический или химический эксперимент, сформировалась область науки, называемая компьютерной химией.

Одним из наиболее популярных в химических лабораториях и универсальным программным средством является комплекс ChemOffice, который включает в себя четыре специализированных приложения:

- «химический редактор» ChemDraw, являющийся традиционным средством редактирования химических формул;
- специализированный редактор баз данных ChemFinder, предназначенный для создания, редактирования и управления базами данных химических соединений;

– программа Chem3D, предназначенная для визуализации химических соединений, компьютерного моделирования и расчетов;

– редактор таблиц TableEditor, предназначенный для просмотра и редактирования табличных данных, используемых в пакете Chem3D.

Одним из важнейших элементов химического исследования является анализ геометрической структуры химического соединения. Решать задачи редактирования структурных формул химических соединений позволяет программа ChemDraw (так называемый химический редактор). Программа ChemDraw предназначена для двухмерного изображения на плоскости молекулярных структур любой сложности. Она позволяет также именовать молекулы, записывать уравнения и механизмы реакций.

На рис. 1 представлено рабочее окно программы ChemDraw.

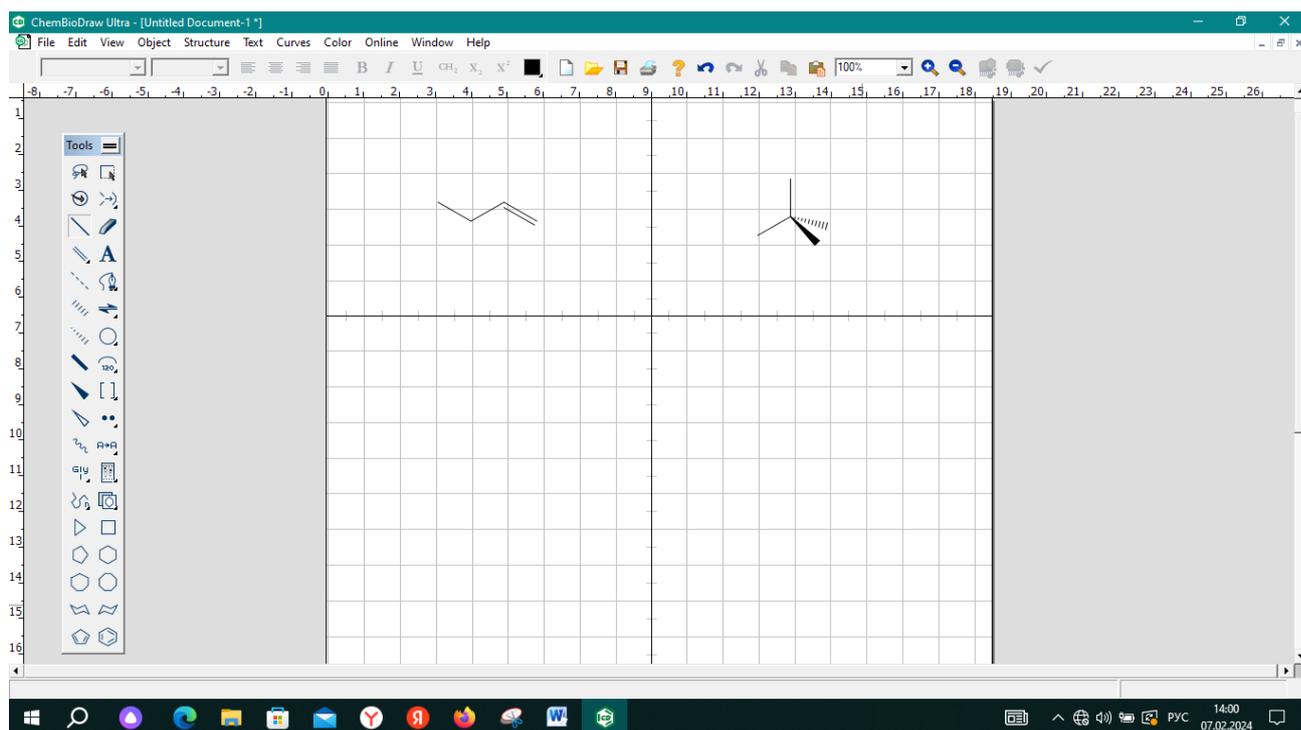


Рис. 1. Рабочее окно программы ChemDraw

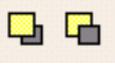
Элементы пользовательского интерфейса включают:

- главное меню
- главную панель
- контрольную панель

Обзор важнейших элементов главной панели приведен в табл. 1.

Таблица 1

Обзор важнейших элементов главной панели

Отображение кнопок на панели	Действие
 Zoom	Изменение масштаба окна отображения молекулярных структур
 Bring to front / Send to back	Перемещение выделенных объектов на передний/задний план
 Atom properties	Вызывает окно со свойствами атомов
 Bond properties	Вызывает окно со свойствами связей
 Check structure	Проверяет выделенную молекулярную структуру на наличие ошибок
 Clean structure	Проверяет соответствие молекулы обычным длинам связей и углам (если соответствие отсутствует, то делаются необходимые исправления в ее структуре)
	Настройка шрифта, размера шрифта, стиля букв и нижней и верхней индексации

Процесс рисования молекулярных структур осуществляется с помощью контрольной панели. Контрольную панель можно перетащить мышкой в любую часть окна. Обзор важнейших элементов этой панели приведен в табл. 2.

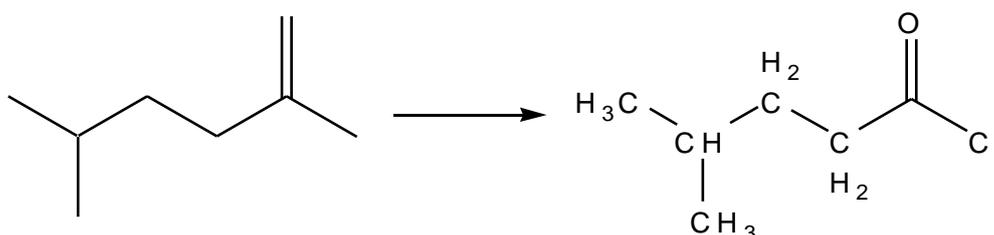
Обзор важнейших элементов контрольной панели

Отображение кнопок на панели	Действие
 Selection	Выделение нарисованных молекул или их фрагментов с помощью лассо или прямоугольника
 Eraser	Удаление атомов/связей
 Bonds 	Добавление связей: одинарной /пунктирной/ пунктирной широкой/пунктирной широкой суженной /толстой /толстой суженной /пустой суженной /направленной /волнистой
 Text	Ввода текста с клавиатуры
 Pen	Рисование векторной графики: сглаженной ломаной линии
 Arrow	Добавление всевозможных стрелок
 Orbital	Рисование электронных орбиталей
 Drawing Elements	Добавление различных элементов рисования: скобки, плоские фигуры, линии и др.
 Chemical Symbols	Позволяет нарисовать особые химические символы (заряды ионов, значки радикалов и прочие)
 Atom-to-Atom mapping	Отображает соответствие реакционных центров молекул
 Templates	Вызывает контекстное меню заготовок: аминокислот, ароматических циклов, бициклов, конформеров и т. д.
 Acyclic Chain	Создает цепь с указанным числом звеньев
 Rings	Заготовки различных колец циклоалканов и ароматических колец

Лабораторная работа № 1

Редактирование структурных химических формул органических соединений с помощью программы ChemDraw

Для составления уравнения реакции нужно изобразить молекулы исходных веществ и продуктов реакции. Чтобы нарисовать молекулу органического соединения, сначала необходимо с помощью кнопки **Bonds** нарисовать все связи, а затем обозначить атомы с помощью кнопки **Text**.



При добавлении каждой следующей связи курсор наводить на конец предыдущей так, чтобы он выделялся черным квадратиком. Двойным щелчком мыши на каждом атоме можно задать его тип. При правильном составлении структурной формулы на ней не должны отображаться красные прямоугольники.

Созданную молекулярную структуру необходимо выделить кнопкой **Selection**, проверить на наличие ошибок командой **Check Structure** и нажать кнопку **Clean** для нормализации углов и связей.

Чтобы с помощью программы назвать химическое соединение, нужно выделить молекулу и выбрать пункт главного меню **Structure** (Структура)/**Convert Structure to Name** (Преобразовать структуру в название). Программа выдаст систематическое название молекулы на английском языке. Из того же пункта главного меню **Structure** можно вызвать обратную функцию – преобразование названия в структуру (**Convert Name to Structure**).

Задание 1. Изобразить структурную формулу вещества в соответствии с заданным вариантом (см. приложение, табл. П.1), назвать его с помощью программы.

Лабораторная работа № 2

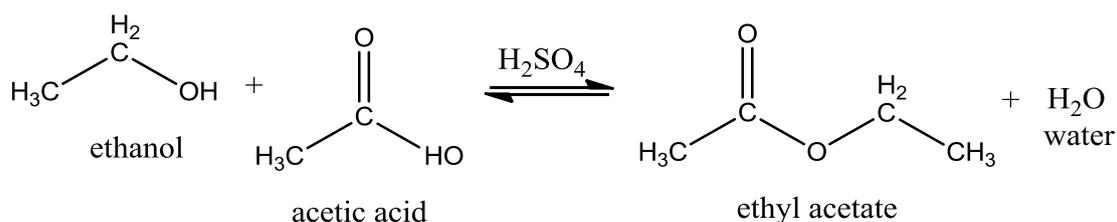
Написание схем химических реакций и их механизмов с помощью программы ChemDraw

Для создания схемы химической реакции необходимо изобразить молекулы исходных веществ и продуктов реакции, добавить стрелку с помощью кнопки **Arrow** и знаки «+» кнопкой **Text**. Также можно подписать названия веществ и условия реакции, добавляя текстовые поля кнопкой **Text**.

Чтобы все элементы располагались на строке равно, удобно использовать сетку на рабочем поле. Для ее отображения в пункте меню **Tools** нужно выбрать **ShowCrosshair**.

Для удобства работы можно увеличить масштаб листа кнопкой **Zoom**.

Пример записи реакции:



Задание 2. Записать уравнение химической реакции в соответствии с заданным вариантом (см. приложение, табл. П.1), над стрелкой указать условия протекания реакции, составить механизм этой реакции.

При выполнении задания рекомендуется сначала записать механизм на бумаге, используя материал лекций или учебник по органической химии [1–4], убедиться в правильности его написания.

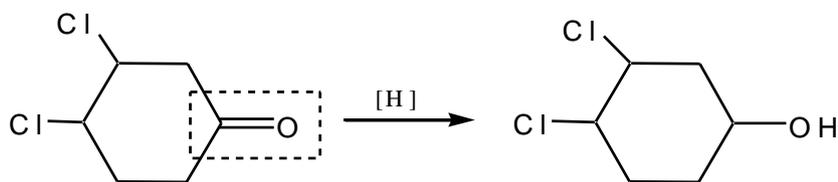
Лабораторная работа № 3

Создание карты химических реакций с указанием реакционных центров в программе ChemDraw

Редактор ChemDraw дает возможность устанавливать реакционные центры в молекулах исходных соединений, что

позволяет прояснить в необходимых случаях механизм химической реакции. Кроме того, при хранении схем химических реакций в базе данных с использованием программы ChemFinder в ней может быть произведен поиск реакции по типу реакционного центра.

Наиболее важная часть реакции – та часть, в которой происходят изменения от реагентов к продуктам реакции. Эта часть включает в себя ряд атомов и связей и называется *реакционным центром*. Например, в молекуле 3,4-дихлорциклогексанола при восстановлении карбонильной группы только двойная связь и два образующие ее атома являются частью реакционного центра. Остальная часть при переходе к продукту 3,4-дихлорциклогексанолу остается без изменений



В программе ChemDraw существуют специальные средства для указания реакционных центров в структурной формуле молекулы.

Пример. Рассмотрим реакцию гидробромирования изопрена, которая может протекать по типу 1,2- и 1,4-присоединения.

Для того чтобы указать на каждой из схем атомы углерода, по которым идет реакция, удобно создать карту реакции. В карте реакции укажем реакционные центры: номера атомов, которые принимают участие в химическом превращении.

Чтобы указать реакционные центры в первой реакции (1,2-присоединение), нажав на кнопку **Atom-to-Atom-mapping**, проведем стрелку от атома брома ко второму атому углерода. При этом автоматически около атомов и связей будут созданы символы реакционных центров **Rxn**. Затем проведем стрелку от атома водорода к первому атому углерода (рис. 2).

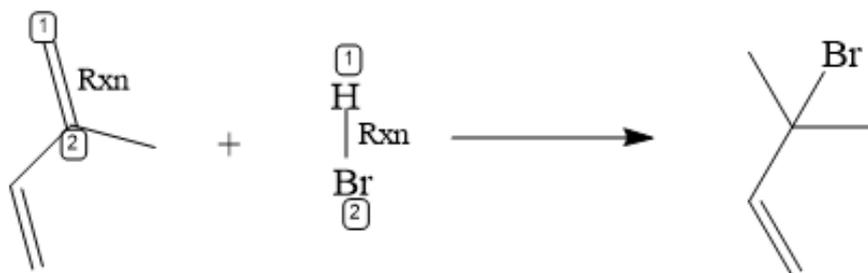


Рис. 2. Карта реакции 1,2-гидробромирования изопрена

Во второй реакции стрелку проведем от брома к четвертому атому углерода и от атома водорода – к третьему атому углерода (рис. 3).

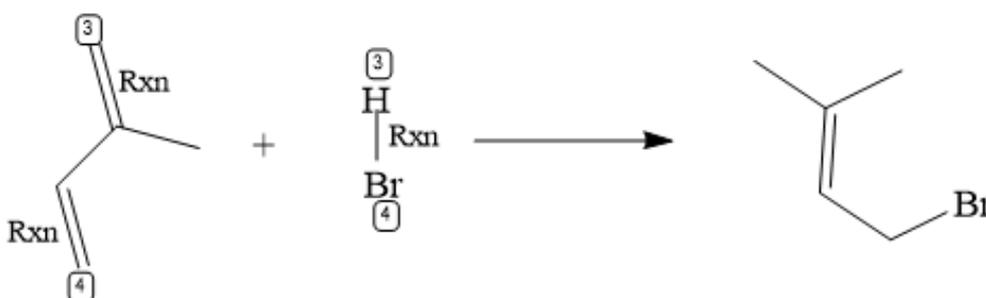


Рис. 3. Карта реакции 1,4-гидробромирования изопрена

Символы **Rxn** оставляем только у двойной связи и у связи H–Br. Остальные реакционные центры, не участвующие в превращении, удаляем. Для этого выбираем соответствующую связь, правой кнопкой мыши вызываем ее контекстное меню и в пункте **Reaction Center** выбираем пункт **Unspecified**.

Таким образом создана карта реакции. Если при включенной кнопке указать мышью на один из атомов реакционного центра первой молекулы, на второй молекуле автоматически выделится другой атом, участвующий в реакции.

В дальнейшем помеченная таким образом реакция может быть сохранена в базе данных программы ChemFinder, и по ней может быть осуществлен поиск по типу реакционного центра.

Задание 3. Создать карту химической реакции из задания 2 с указанием реакционных центров.

Лабораторная работа № 4

Редактирование проекционных формул органических соединений в программе ChemDraw

Для создания проекционных формул используем соответствующие заготовки **Templates**.

Задание 4. Изобразить молекулярную структуру моносахарида (см. приложение, табл. П.1) проекциями Фишера в открытой и циклической форме.

Для циклической формы записать перспективную формулу Хеуорса. Указать название моносахарида.

Для выполнения задания рекомендуется использовать учебник по органической химии [4].

Практическое занятие № 4

Применение программы Chem3D пакета ChemOffice в учебном процессе. Интерфейс программы Chem3D

В отличие от двумерных редакторов химических формул программа Chem3D позволяет осуществлять полное трехмерное моделирование и визуализацию химических соединений и является основным приложением пакета ChemOffice.

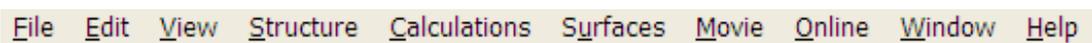
Программа Chem3D предоставляет возможность проводить квантово-механические расчеты (оптимизация структуры, расчет и прогнозирование физико-химических свойств и т.д.) молекул различными способами: эмпирическими (MM1, Gamess, Gaussian), полуэмпирическими (MOPAC), а также методом молекулярной механики.

Интерфейс программы состоит из окна для изображения модели, строки меню и команд, набора рабочих инструментов.

Окно модели – это рабочее пространство, где выводится изображение модели, осуществляется процесс ее построения и преобразования.

Основные элементы пользовательского интерфейса можно разделить следующим образом:

– главное меню



– главная панель инструментов



– контрольная панель



Рассмотрим некоторые функции главного меню и главной панели.

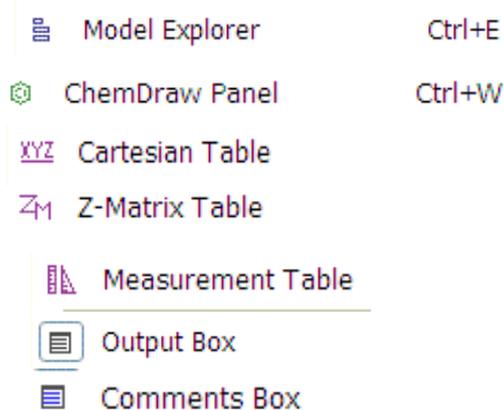
Пункт меню **File (Файл)** содержит стандартный набор возможностей для открытия, сохранения и печати файлов.

Пункт меню **Edit (Правка)** предоставляет обычный набор функций копирования, вставки, отмены последнего действия и выбора.

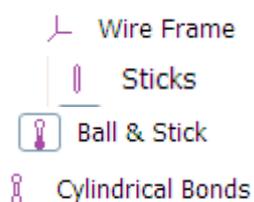
Пункт меню **View (Вид)** предоставляет широкий ассортимент настроек вида молекул/связей/панелей и т.д. Практически в этом пункте полностью присутствуют все функции главной панели:

Toolbars

(Главная панель)



Model Display Mode



– отображает панели: стандартную, построения, модели, поверхности, вычисления;

– обзор панели инструментов;

– показать панель ChemDraw

– декартова таблица координат модели;

– таблица Z- матрицы;

– таблица измерений;

– результаты расчетов;

– блок комментариев;

– способы изображения модели:

структура в пространстве

стержневая модель

шаростержневая модель

цилиндрические связи

	Space Filling		объемная модель
	Show Atom Labels	Ctrl+L	– отображает символы атомов;
	Show Serial Numbers	Ctrl+0	– отображает номера атомов;
	Red & Blue		– красный и синий цвета атомов;
	Chromatek Glasses		– различные оттенки;
	Stereo Pairs		– стереопары;
	Perspective		– перспектива;
	Выбор цвета фона ...		
	На весь экран	F11	

Контекстное меню в любой точке панелей окна открывает выкидное меню с основными пунктами меню/Вид и пунктом Настройка... , при выборе которого открывается окно Настройка, позволяющее настроить панели инструментов и вывести на панели необходимые команды.

Пункт меню **Structure (Структура)** предлагает инструменты настройки отображения различных параметров молекулы, а также измерения длин связей, межатомных расстояний и углов.

Пункт **Measurement (Измерения)** содержит выкидное подменю с пунктами:

Bond Lengths – определить длины связей,

Bond Angles – определить углы между связями,

Dihedral Angles – определить двугранные углы,

Close Contacts – определить ближайшие связи,

Clear – очистить весь список.

Функции определения длины связей, углов между связями и двугранных углов позволяют измерить и при необходимости изменить соответствующие расстояния и углы в модели молекулы. Для того чтобы воспользоваться ими, необходимо выделить с помощью мыши атомы, образующие нужную связь или формирующие нужный угол, и выбрать соответствующую функцию. Результат измерения будет отображен в открывшемся окне *Измерения* в поле *Текущий*. Кроме того, в поле *Оптимальный* будет отображено значение данной величины, принятое в качестве стандартного для выбранной связи или угла. Если выбрать по

очереди все функции для определения связей и углов, то все результаты измерений отобразятся в одном окне *Измерения*.

При необходимости изменить выделенное расстояние между атомами или угол, следует набрать требуемое значение в поле *Текущий* и нажать клавишу ввода или щелкнуть мышкой в окне редактора. При нажатии клавишей мыши в какой-либо строке поля *Оптимальный* или поля *Текущий* на фигуре цветом выделится та часть модели, к которой относится данное измерение (длины связи, углы и т. д.). Если изменить, например, значение длины связи в поле *Текущий*, Enter, то можно увидеть, как отразится на модели внесенное изменение длины связи. Окно *Измерения* можно очистить, изменить его размеры, закрыть.

Контрольная панель имеет небольшой набор необходимых средств (табл. 3). При желании ее можно перетащить в любую часть окна.

Таблица 3

Обзор элементов контрольной панели программы Chem3D

Отображение кнопок на панели	Действие
 Select Tool	Позволяет выбрать индивидуальные атомы или связи. С помощью нажатой кнопки Shift можно выбрать группы атомов или связей
 Trackball Tool	Вращает модель молекулы вокруг осей X или Y
 Zoom	Изменяет масштаб изображения молекулы. Нажмите кнопку, в рабочем окне нажатой левой клавишей мыши перемещайте значок вверх (увеличение) – вниз (уменьшение)
 Translate	Перемещает изображение в рабочем поле
 Bonds	Инструмент создания химических связей
 Eraser	Ластик, позволяющий удалить лишние атомы и связи
 Text	Используется для создания типа атомов и записи брутто-формул.

Лабораторная работа № 5

Визуализация пространственных молекулярных структур с использованием программы Chem3D

В программе Chem3D существует несколько способов создания трехмерной модели химического соединения.

Использование двухмерной модели, созданной в химическом редакторе ChemDraw. Двумерная модель соответствующего соединения, созданная в химическом редакторе, переносится в окно Chem3D через буфер обмена Windows при помощи операций «копировать» и «вставить». При вставке в окно Chem3D структурная формула автоматически преобразуется в трехмерную модель, при этом соответствующим длинам валентных связей и углов между атомами присваиваются стандартные для данных элементов значения.

Написание брутто-формулы соединения в рабочем поле окна. После нажатия кнопки **Text** на панели инструментов, курсор приобретает вид перекрестья с буквой «А» в центре. Если щелкнуть мышью в любом месте рабочего окна, появляется поле ввода текста, в котором заглавными латинскими буквами нужно набрать брутто-формулу соединения, например $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{C}_6\text{H}_5$. После нажатия клавиши ввода в рабочем окне будет создана трехмерная модель соответствующего соединения. Следует иметь в виду, что одной и той же брутто-формуле могут отвечать различные структурные изомеры, поэтому возможно, что созданная модель потребует дальнейшего редактирования.

Непосредственное редактирование с использованием кнопок на панели инструментов. Этот способ является основным, поскольку позволяет создать трехмерную модель любой сложной конфигурации. При нажатии одной из кнопок на панели инструментов, соответствующей одинарной (/), двойной (//) или тройной (///) связи, курсор в рабочем поле окна принимает вид перекрестья. Для того чтобы получить трехмерную модель молекулы из двух углеродных атомов, достаточно провести черту при помощи левой клавиши мыши в рабочем поле окна. Нужное количество атомов водорода, соответствующее выбранному типу связи, будет добавлено автоматически. Дальнейшее редактирование может проводиться добавлением новых связей взамен вы-

бранных атомов водорода, изменением геометрии модели, путем перетаскивания мышью выбранных атомов, созданием циклов, путем переноса и последующего наложения нужных атомов углерода, образующих цикл, изменением типа связи.

Для того чтобы изменить тип связи, нужно щелкнуть по кнопке, соответствующей нужному типу связи, на панели инструментов и с нажатой клавишей мыши соединить два выбранных атома углерода. Для создания модели с гетероатомами, например кислорода и азота, нужно выбрать на панели инструментов кнопку **Text**, выделить щелчком мыши нужный атом (водорода или углерода) и набрать в текстовом поле символ необходимого атома или брутто-формулу заместителя (ОН, NH₂ и т. д.).

В процессе редактирования возможно вращение созданной модели или отдельных ее частей в пространстве, изменение размеров отображаемой области, отражение и перемещение. Вращение модели в двух перпендикулярных плоскостях производится при помощи полос прокрутки в нижней и правой частях рабочей области окна. При помещении курсора в область полос прокрутки он приобретает вид ладони. Перемещая в таком состоянии курсор с нажатой левой клавишей мыши вдоль полосы прокрутки, можно вращать модель вокруг горизонтальной и вертикальной оси (правая вертикальная и нижняя полосы прокрутки соответственно). Если необходимо вращать отдельные элементы модели вокруг выбранной связи, нужно выделить нужную связь, выбрав щелчком мыши один или более нужных атомов. При необходимости выделить несколько атомов нужно щелкать на них, удерживая нажатой клавишу Shift, или обвести атомы рамкой с нажатой клавишей мыши. Вращение группы атомов вокруг выделенной связи производится перемещением левой вертикальной полосы прокрутки.

Изменение размеров отображаемой области может осуществляться нажатием кнопок в нижней части рабочего окна (левая кнопка соответствует уменьшению размеров модели, правая – увеличению) или выбором пунктов меню Tools/Reduce (уменьшить, функциональная клавиша F8) и Tools/Magnify (увеличить, функциональная клавиша F7). Чтобы переместить в плоскости экрана группу атомов, нужно выделить их и, устано-

вив указатель курсора на один из выделенных атомов, перемещать по экрану с нажатой левой клавишей мыши.

Программа допускает различные типы визуализации трехмерной модели: **Wire Frame** (Стержневой каркас), **Ball & Stick**, **Sticks** (Палочки), **Space Filling** (Пространственное заполнение). По умолчанию используется тип **Cylindrical Bonds**.

Для визуализации трехмерной модели молекулы различными способами в пункте меню вид **View** открываем вкладку **ModelDisplay** и выбираем способ представления модели (рис. 4).

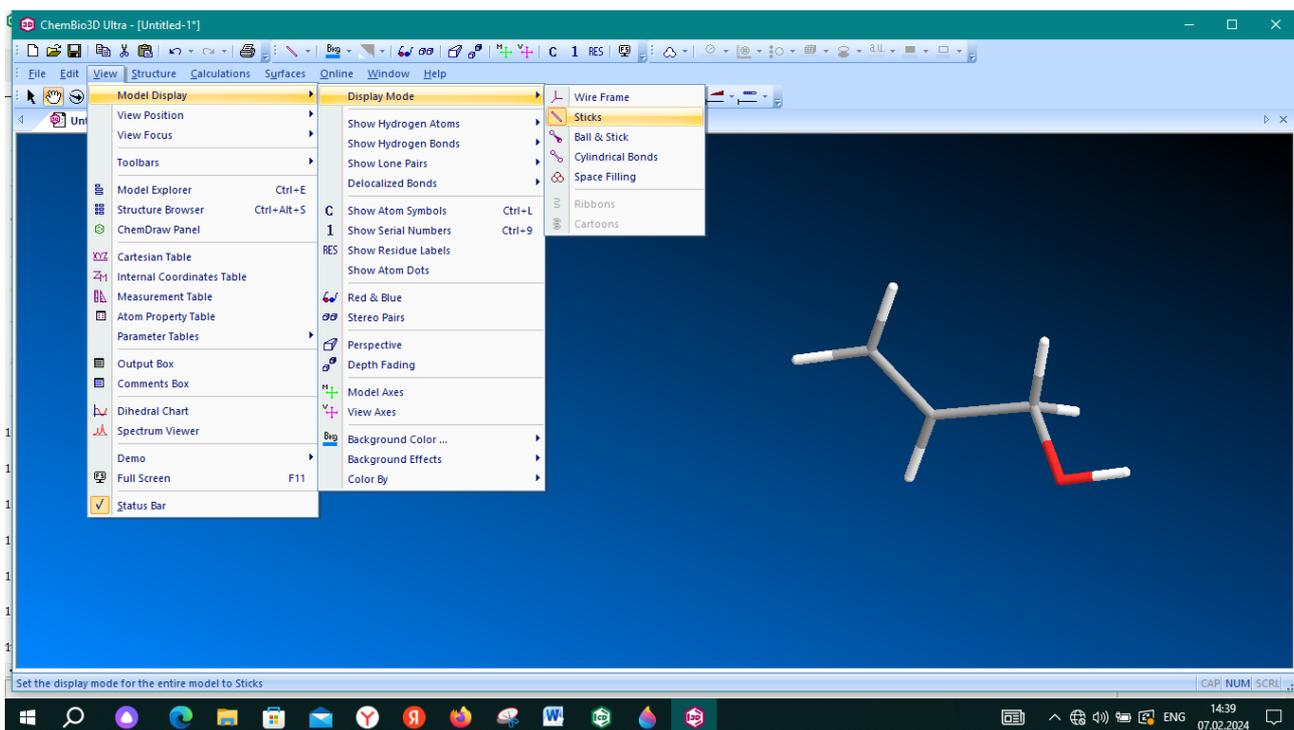


Рис. 4. Визуализация молекулярной структуры соединения в Chem3D

Используя пункт меню **Surface** можно отобразить поверхность молекулы, различными способами, выбрав соответствующий тип **SurfaceType**.

Созданную трехмерную модель необходимо скопировать с экрана через буфер обмена или вырезать с помощью элемента ножницы  и вставить в отчет.

Задание. Изобразить всеми возможными способами пространственную модель молекулы соединения из работы 1. Указать тип визуализации модели.

Практическое занятие № 5

Анализ геометрии трехмерных моделей молекул органических соединений в среде Chem3D

Для созданной пространственной модели исследуемого соединения можно установить ее геометрические параметры – длины связей и валентные углы между атомами.

Сначала в молекуле нужно указать порядковые номера атомов (в пункте меню **View** открыть вкладку **Model Display**, включить галочку **Show Serial Numbers** – Показать порядковые номера) и отобразить сами атомы (в этой же вкладке выбрать пункт **Show Atom Symbols**).

Если необходимо отключить отображение порядковых номеров для каких-либо атомов модели, следует выделить их при помощи мыши и на вкладке **Show Serial Numbers** пункта меню **View** установить значение **Hide** (Спрятать).

Анализ геометрии модели производится выбором вкладки меню **Structure/Measurements**, где можно выбрать соответственно пункты

- Display Distance Measurement** – показать длины связей,
- Generate All Bond Angles** – показать все валентные углы,
- Display Dihedral Angles** – показать двугранные углы,
- Show Close Contacts** – показать ближайшие контакты.

Результаты определения появляются в рабочем окне в виде таблицы. При отображении геометрических параметров модели в окне **Measurements** справа от поля с обозначением атомов, к которым относится соответствующий параметр (например, длина связи), выводятся два числовых поля: **Actual** и **Optimal**. В поле **Actual** содержатся действительные значения параметра модели (например, длина соответствующей связи в ангстремах), в поле **Optimal** выводятся значения данного и параметра, устанавливаемые для данной группы атомов по умолчанию в базе данных Chem3D. Если в таблице поставить галочку в пустом квадрате напротив какого-либо параметра, то значение, соответствующее этому параметру, отобразится на модели молекулы.

Лабораторная работа № 6

Изучение пространственного строения молекул органических соединений с открытой цепью в среде Chem3D

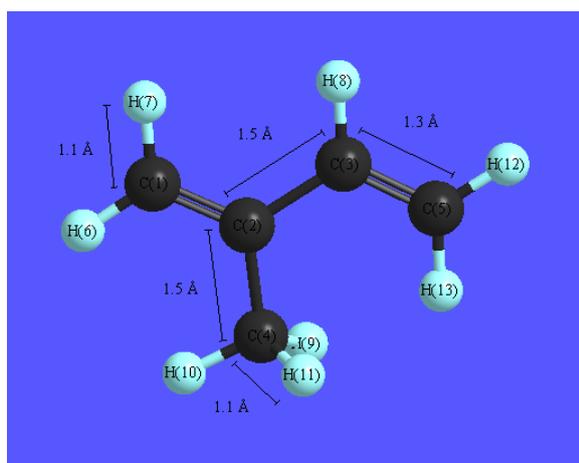
При выполнении работы придерживаемся определенной последовательности действий.

Шаг 1. Загрузка программы **ChemDraw** и создание молекулы соединения. Выполнить операцию **Clean** для того, чтобы программа автоматически установила стандартные значения длин связей и валентных углов, предлагаемые по умолчанию.

Шаг 2. С помощью буфера обмена (Copy) вставить молекулу в окно визуализации программы **Chem3D** (Paste). Молекула автоматически преобразуется в трехмерный вид.

Шаг 3. Включить отображение атомов и их номеров, т. е. выбрать пункты **Show Serial Numbers/Show Atom Symbols** в пункте главного меню **View**.

Шаг 4. Измерить длины связей между атомами молекулы. В главном меню **Structure** выбрать **Measurements/Display Distance Measurement**. В окне Measurements справа отобразятся значения. Результаты измерений скопировать с экрана через буфер обмена  или вырезать с экрана помощью элемента ножницы  и вставить в отчет. Пример представления результатов показан на рис. 5.



	Display	Atoms	Actual (° / Å)	Optimal (° / Å)
1	<input type="checkbox"/>	C(5)-H(12)	1.1000	1.1000
2	<input checked="" type="checkbox"/>	C(4)-H(11)	1.1130	1.1130
3	<input type="checkbox"/>	C(4)-H(10)	1.1130	1.1130
4	<input type="checkbox"/>	C(4)-H(9)	1.1130	1.1130
5	<input type="checkbox"/>	C(3)-H(8)	1.1130	1.1000
6	<input type="checkbox"/>	C(5)-H(13)	1.1000	1.1000
7	<input checked="" type="checkbox"/>	C(3)-C(5)	1.3370	1.3370
8	<input checked="" type="checkbox"/>	C(2)-C(4)	1.4970	1.4970
9	<input checked="" type="checkbox"/>	C(2)-C(3)	1.4970	1.5030
10	<input checked="" type="checkbox"/>	C(1)-H(7)	1.1000	1.1000
11	<input type="checkbox"/>	C(1)-H(6)	1.1000	1.1000
12	<input type="checkbox"/>	C(1)-C(2)	1.3370	1.3370

Рис. 5. Результаты измерения длин связей в молекуле

Шаг 5. Измерить валентные углы между атомами. В главном меню **Structure** выбрать **Measurements/Generate All Bond Angles**. Результаты измерений перенести в отчет.

Пример представления результатов показан на рис. 6.

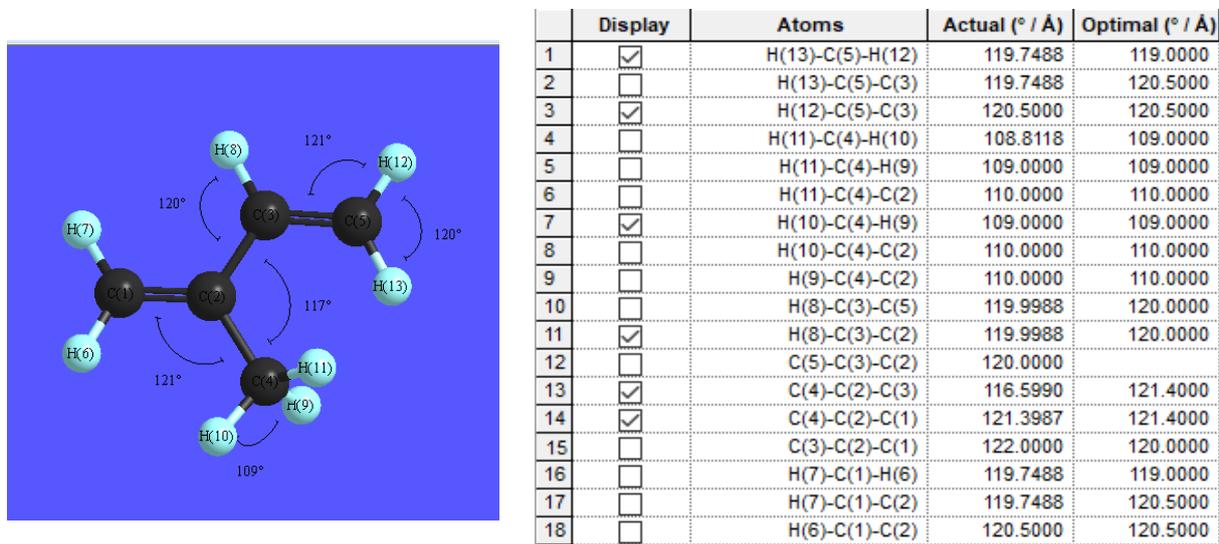


Рис. 6. Результаты измерения валентных углов между атомами в молекуле

Шаг 6. Анализируем полученные результаты и делаем вывод о геометрическом строении молекул органических соединений. Необходимо сравнить длины одинарных С–С связей с длинами двойных и тройных связей между атомами углерода, а также длины связей между атомами водорода и углерода, которые находятся в sp^2 - и sp^3 -гибридном состоянии. Указать, какие группы атомов имеют тетраэдрическое строение, а какие лежат в одной плоскости или имеют линейное расположение. Сравнить величину валентных углов между атомами С, находящихся в различных гибридных состояниях.

Задание 6. С помощью программы Chem3D провести анализ геометрии пространственных моделей молекул трех соединений: одно из работы 5, два других указаны в табл. П. 2 приложения.

Лабораторная работа № 7
Анализ геометрии трехмерных моделей
молекул циклического строения в среде Chem3D

При выполнении работы придерживаться последовательности действий, приведенной в работе 6.

Задание 7. С помощью программы Chem3D визуализировать пространственные модели молекул соединений циклического строения, указанных согласно вашему варианту в табл. П.2 приложения. Провести измерение валентных углов и длин связей между атомами в их молекулярных структурах. Путем сравнения полученных данных сделать вывод об их строении.

Практическое занятие № 6
Прогнозирование физико-химических свойств
органических соединений на основе их химического строения

К настоящему времени синтезированы десятки миллионов органических соединений различной химической структуры. Практическое применение из них находят десятки тысяч веществ. Каждое соединение имеет свои характерные физико-химические свойства. Однако не для всех из даже практически применяющихся соединений имеются надежно определенные экспериментальные значения различных свойств. Многие экспериментальные данные разбросаны по трудно доступной литературе. Поэтому чрезвычайно важной является задача нахождения количественных зависимостей между структурой и свойствами химических соединений. Такие зависимости позволят не только быстро выбрать из имеющихся соединений наиболее желательное для обеспечения какого-либо свойства, но и определить направления синтеза новых соединений.

Для вычисления физических и термодинамических свойств химических соединений можно использовать эмпирические или квантово-химические методы, имеющие строгое физическое обоснование. Использование различных методов обусловлено различием в целях. Так, если эмпирические методы используются

в первую очередь в практических целях – для технических и технологических расчетов, то квантово-химические методы применяются главным образом в исследовательских целях. В рамках квантовой химии выбор между неэмпирическими и полуэмпирическими методами также определяется целями исследования. Часто первые применяются для проверки и обоснования вторых, тогда как вторые во многих случаях пригодны для решения практических задач. Эмпирические и полуэмпирические методы могут давать хорошую точность для соединений, принадлежащих классу веществ, на которых проводилась параметризация методов. Для соединений новых классов они могут давать результаты даже качественно не соответствующие реальности.

В основе эмпирических методов расчета физико-химических характеристик органических соединений лежит принцип аддитивности. Согласно этому принципу соответствующая характеристика (свойство), рассчитанная на моль вещества, может быть вычислена путем суммирования отдельных вкладов атомов, групп атомов или связей.

Для того чтобы рассчитать вклады отдельных компонентов (инкременты), необходимо иметь набор данных исследуемого свойства для различных химических соединений, каждое из которых содержит хотя бы один из структурных элементов, входящих в состав анализируемого соединения. Чем больше этот набор, тем с большей надежностью будут вычислены вклады отдельных элементов. Хорошие результаты получаются при обработке данных по физико-химическим свойствам гомологических рядов. Поскольку в настоящее время в различной справочной литературе опубликовано большое количество экспериментальных данных по свойствам тысяч органических соединений и промышленно выпускаемых полимеров, то вычисление инкрементов не вызывает затруднений.

В зависимости от природы структурных элементов, на которые разбивается молекула, в практике метода инкрементов получили распространение два подхода: применение атомных вкладов и применение групповых вкладов. Большинство физико-химических свойств плохо описываются инкрементами атомных вкладов. Путем комбинирования атомов в наиболее часто встречающиеся атомные группы, например $-\text{CH}_3$, $-\text{OH}$ или $-\text{NH}_2$, воз-

возможности описания свойств соединений по аддитивной схеме существенно расширяются. При увеличении числа классов соединений, используемых для вычисления инкрементов, точность предсказания уменьшается. Это связано с взаимным влиянием разных групп атомов в молекуле, что при расчете должно учитываться.

Несмотря на то, что метод инкрементов дает достаточную во многих практических случаях точность, в целом его возможности ограничены. Например, при сравнении физических характеристик веществ – изомеров. Имея одну и ту же бруттоформулу, они обладают различной структурой, и свойства их часто сильно различаются. В этой связи возникают альтернативные способы построения эмпирических зависимостей между структурой и физическими свойствами химических соединений. Одним из таких способов является метод структурных дескрипторов.

Дескриптор химической структуры – это число или набор чисел, которые характеризуют структуру органического соединения. В качестве дескриптора выступают формальные величины – топологические индексы. Топологический индекс – это число, которым можно закодировать определенную молекулярную структуру. Способы построения топологических индексов можно рассмотреть в литературе [5].

Кроме топологических индексов, существует целый ряд других структурных дескрипторов: центрические топологические индексы, теоретико-информационные индексы, составные индексы и др. Многообразие существующих структурных дескрипторов указывает на то, что все они обладают определенными недостатками. Наблюдаемая хорошая корреляция между некоторым топологическим индексом и физическим свойством может оказаться неудовлетворительной при переходе к другому свойству. Поэтому многие современные программы, основанные на методе структурных дескрипторов, перебирают для каждого конкретного свойства несколько различных индексов с тем, чтобы найти тот, который наилучшим образом описывает исследуемую характеристику соединения.

Рассмотренные эмпирические методы расчета физико-химических свойств органических соединений на основании их молекулярной структуры нашли применение во многих совре-

менных пакетах программных средств, применяемых для решения задач компьютерной химии.

В программе **Chem3D** для вычисления физико-химических свойств соединений методами структурных дескрипторов используется модуль **CS ChemPropPro**. С его использованием могут быть рассчитаны следующие физические и термодинамические свойства соединения, модель которого загружена в окно трехмерного редактора:

Boiling Point – температура кипения при атмосферном давлении, K ;

Critical Temperature – критическая температура кипения (температура, выше которой газ не переходит в жидкое состояние независимо от давления), K ;

Critical Pressure – критическое давление (давление, соответствующее критической температуре), бар;

Critical Volume – критический объем (объем соединения при критической температуре и давлении), $см^3/моль$;

Heat of Formation – теплота образования при температуре $298,15 K$ и давлении $1 атм$, $ккал/моль$;

Ideal Gas Thermal Capacity – теплоемкость соединения в состоянии идеального газа при давлении $1 атм$ и температуре $298,15 K$, $Дж/(моль \cdot K)$;

Melting Point – температура плавления соединения при давлении $1 атм$, K ;

Molar Refractivity – индекс молекулярной рефракции, $см^3/моль$;

Standard Gibbs Free Energy – свободная энергия Гиббса при давлении $1 атм$ и температуре $298,15 K$, $Дж/моль$;

Vapor Pressure – давление пара соединения при температуре $25 °C$, $Па$;

Water Solubility – растворимость в воде при температуре $25 °C$, $мг/л$.

Расчет свойств соединения осуществляется с помощью вкладки меню **Calculations**, пункта **ComputeProperties** (рис. 7).

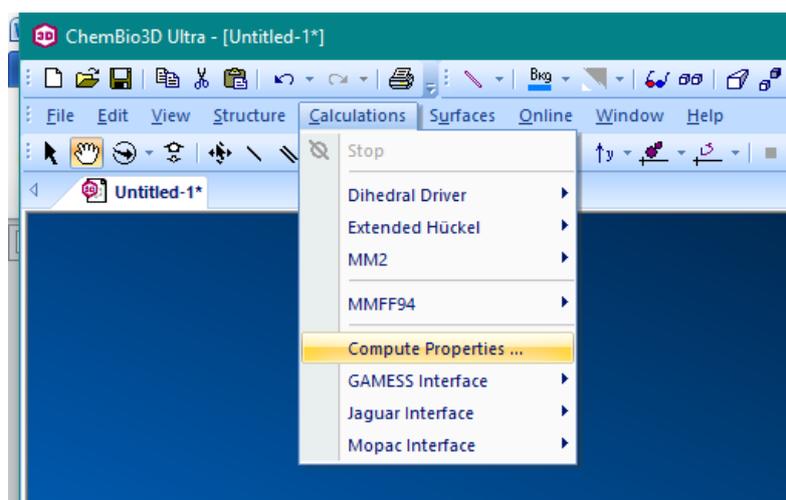


Рис. 7. Пункт Calculations главного меню программы Chem3D

В появившемся окне нужно выбрать пункт **ChemPropPro** и сформировать список свойств, которые необходимо рассчитать для исследуемого соединения (рис. 8).

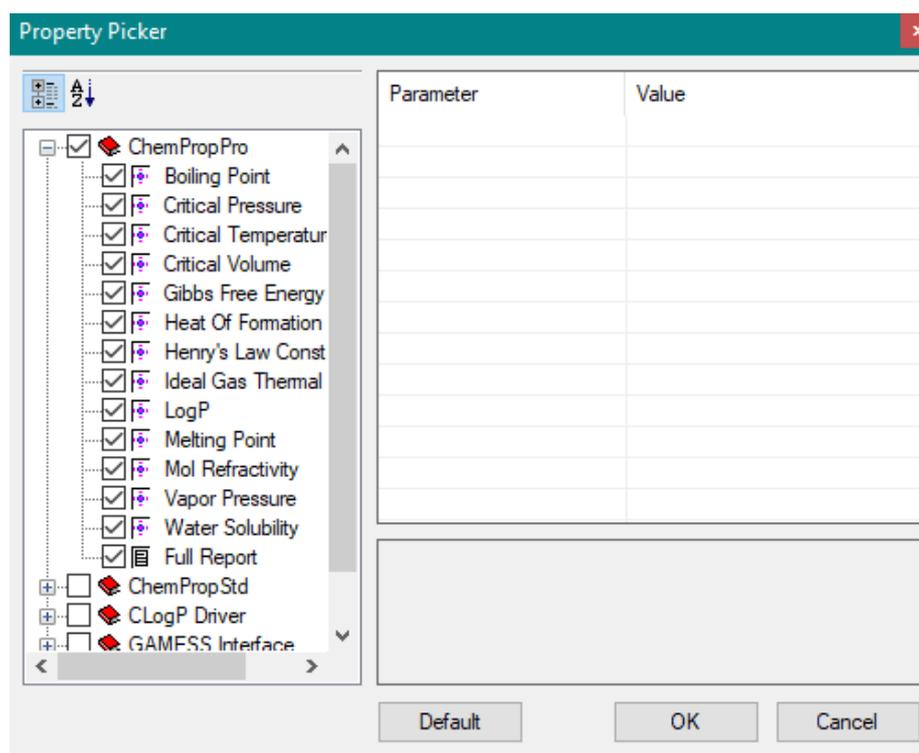


Рис. 8. Вид вкладки Property Picker в программе Chem3D

Для каждого свойства с помощью кнопки Parameters можно выбрать метод: Best Estimate (наилучшая оценка) или Literature Values (литературные данные). В последнем случае свойства не

рассчитываются, а выбираются из базы данных, полученных из литературных источников.

Информация о методах вычисления выводится при выборе значения Full Report (полный отчет) в поле **Property**. При этом будут выведены все рассчитанные значения и все доступные литературные данные для рассматриваемого соединения. В случае отсутствия надежных экспериментальных данных для вычисления инкрементов некоторых соединений расчет соответствующего свойства будет недоступен. Для некоторых свойств, наоборот, имеется несколько наборов инкрементов, предложенных разными авторами.

В первом разделе «Data from Database» приведены экспериментальные данные рассматриваемого соединения, полученные из базы данных ChemPropPro, собранной из разных литературных источников. Первые два пункта отчета: Name of molecule (название молекулы) и Molecular formula (молекулярная брутто-формула). Далее пункт GAS, представляющий собой индекс данного соединения в базе данных GAS, пункт Molecular weight (молекулярный вес), Molar Refraction (показатель молекулярной рефракции). В следующем пункте Reference (ссылка) приводится литературный источник, откуда взято значение молекулярной рефракции, и формула, по которой рассчитан этот показатель. В пунктах Entropy (энтропия) и Heat of Formation (теплота образования) приведены соответствующие экспериментальные данные со ссылками на литературные источники.

В следующем разделе «Estimation of logarithm of Partition Coefficient (n-Octanol/Water) Log(p)» приводятся три оценки логарифма коэффициента разделения данного вещества в смеси *n*-октанол-вода и значения стандартной ошибки St..deviation. Этот показатель широко используется в химии растворов.

Далее следует раздел «Estimation of Molar Refractivity», в котором приведены две оценки показателя молярной рефракции, полученные расчетными методами. Аналогично в разделе Estimation of Henrys Constant (H) приведены расчетные значения оценок константы Генри двумя методами и средние ошибки их вычисления (Estimation of mean error).

В разделе «Estimation of the Boiling and Freezing points» приведены вычисленные значения температур кипения и замер-

зания.

В разделе «Estimation of the Critical properties» приводятся оценки критической температуры, давления и объема и оценки погрешности вычисленных значений (Error was not estimated).

Последний раздел «Estimation of the Thermodynamics properties» содержит оценки термодинамических свойств: теплоты образования, энергии Гиббса и теплоемкости вещества в состоянии идеального газа.

Общим ограничением эмпирического метода расчета в программе Chem3D является количество атомов в молекуле анализируемого вещества, которое не должно превышать 100.

Лабораторная работа № 8

Определение физических и термодинамических свойств соединений эмпирическим методом в программе Chem3D

Задание 8. Провести поиск физико-химических свойств исследуемого соединения (лабораторная работа №1) в программе Chem3D с использованием модуля CS ChemPropPro. Результаты определения представить в виде таблицы.

Практическое занятие № 7

Расчет термодинамических свойств соединений квантово-химическими методами в программе Chem3D

Квантово-химические методы расчета разделяют на полуэмпирические и неэмпирические. Полуэмпирические методы позволяют изучать системы, включающие до нескольких сотен атомов первых периодов и до сотни тяжелых атомов. Они применяются для анализа молекулярных орбиталей, вычисления теплоты образования соединений, анализа распределения частичных зарядов на атомах и электростатического потенциала, оценки дипольных моментов молекул, оптимизации геометрии устойчивых молекулярных систем и переходных комплексов, расчета инфракрасных и УФ-спектров химических соединений. Эти же задачи решаются и с использованием неэмпирических квантово-

химических методов. Однако максимальный размер молекулярной системы, доступный изучению неэмпирическими методами, не превышает нескольких десятков атомов. Они применяются в тех случаях, когда точность полуэмпирических методов оказывается недостаточной, а также для изучения химических объектов, недоступных исследованию с помощью прямых экспериментальных методов. Существует много различных квантово-химических программ. К наиболее популярным можно отнести программные комплексы Gamess и Gaussian, в которых реализованы неэмпирические методы, и программный комплекс МОРАС, основанный на полуэмпирических квантово-химических методах.

Все современные представления о свойствах молекулярных систем, зависящих от их структуры, базируются на понятии **поверхности потенциальной энергии (ППЭ)**. ППЭ определяется как непрерывная функция потенциальной энергии молекулярной системы от всех ее независимых геометрических координат (расстояний между атомами, валентными или двугранными углами и т. д.). Минимум на потенциальной поверхности означает устойчивое состояние молекулярной системы. Седловая точка соответствует неустойчивому состоянию; она разделяет два устойчивых состояния системы, переход между которыми происходит путем преодоления потенциального барьера, называемого **переходным состоянием**.

Построение потенциальных поверхностей – трудоемкая задача. На практике часто нет необходимости строить всю потенциальную поверхность. Обычно исследователя интересуют значения энергии молекулярной системы при определенных значениях ее координат, а также положение критических точек, в которых система принимает минимальное значение, и переходных комплексов. В программе Chem3D имеются три варианта вычисления потенциальной энергии молекулярной системы: вычисление энергии в заданной точке, оптимизация геометрии и поиск переходных состояний. Рассмотрим лишь средства, применяемые для решения задач оптимизации геометрии молекулярной системы.

Под оптимизацией геометрии понимается поиск молекулярной структуры – координат атомов, при которых система имеет наименьшее значение энергии. Цель оптимизации геометрии –

отыскание наиболее устойчивого состояния молекулярной структуры (глобального минимума). Точность отыскания экстремума зависит от используемого алгоритма оптимизации и принятого критерия окончания поиска. Алгоритмы оптимизации, используемые в программе Chem3D, относятся к градиентным методам оптимизации. По умолчанию установлен метод следования собственному вектору, про котором в качестве опции у пользователя имеется возможность выбора значения нормы вектора градиента функции, являющейся критерием окончания поиска. Подробную информацию о методах решения задачи оптимизации можно получить в литературе [5].

Для оптимизации геометрии в Chem3D в пункте **Calculations** главного меню имеется пункт **Minimize Energy** (Минимизировать энергию), присутствующий в методах компьютерной химии MM2, Gamess, Gaussian, МОРАС (рис. 9). Эти методы отличаются точностью и скоростью расчетов. Так как процедура оптимизации может занимать значительное время, то целесообразно сначала проводить поиск минимума энергии, применяя менее надежные, но более быстрые методы MM2 (метод молекулярной механики). Затем если требуется более высокая точность вычислений, применять методы МОРАС.

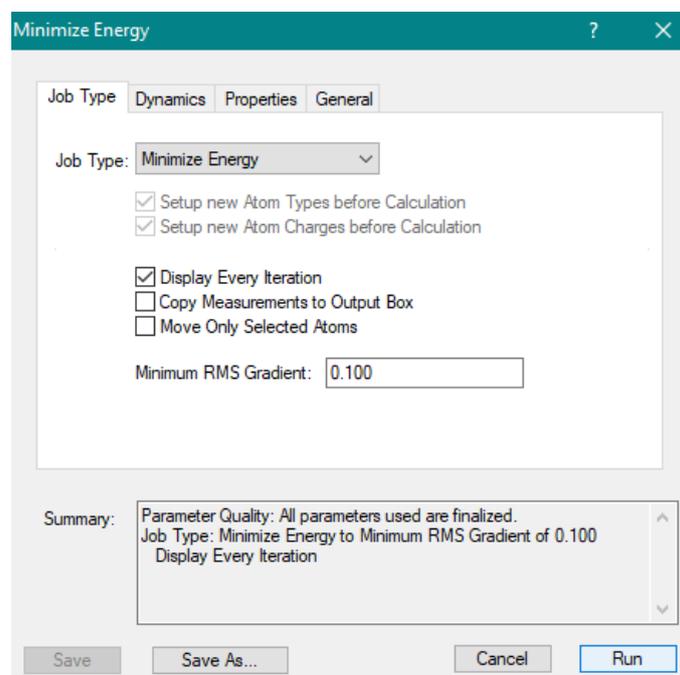


Рис. 9. Вид вкладки Minimize Energy в программе Chem3D

Вкладка **Minimize Energy** содержит следующие опции:

Display Every Iteration – отображать в рабочем окне изменение геометрии модели после каждого шага итерации;

Record Every Iteration – записывать результат каждой итерации;

Copy Measurement to Messages – копировать результаты измерений выбранных параметров (расстояний между атомами, валентных или двугранных углов) в окно **Messages**;

Move Only Selected Atoms – изменять в процессе оптимизации координаты только выделенных атомов.

Далее расположено окно для задания значения нормы вектора градиента функции энергии (**Minimum RMS Gradient**), при достижении которого поиск экстремума прекращается. Необходимым условием экстремума является равенство нулю градиента функции в критической точке. По умолчанию значение критерия окончания поиска установлено равным 0,1 ккал/моль/ангстрем. Это значение обеспечивает удовлетворительную точность определения экстремума для многих молекулярных структур. При меньшем значении координаты экстремума будут определены с большей точностью, однако время поиска при этом возрастает.

В окне **Summary** отображаются значения всех выбранных опций.

Скорость сходимости процесса оптимизации зависит от свойств модели и от выбранного алгоритма. При неудачных обстоятельствах итерационный процесс движения к оптимуму может затянуться или вообще зациклиться. Прервать процесс оптимизации можно, нажав кнопку **Cancel**. Выбор другого алгоритма оптимизации может исправить ситуацию и ускорить достижение экстремума.

В программе Chem3D расчет свойств химических соединений полуэмпирическими квантово-химическими методами осуществляется с помощью программного модуля MOPAC. Расчет можно проводить такими методами, как **MINDO/3**, **MNDO**, **AM1**, **PM3**. Из них наиболее современными являются методы **AM1** и **PM3**, являющийся новой параметризацией **AM1**. В настоящее время именно эти два метода считаются наиболее надежными из всех полуэмпирических методов. Метод **AM1** является наиболее

проверенным и в среднем обеспечивает большую точность по сравнению с MINDO/3 и MNDO. Однако использование более современного метода не означает, что для конкретного свойства анализируемого соединения результат расчета будет заведомо более точным, чем при использовании более старого метода. Расчет целесообразно проводить несколькими методами, сравнивая затем полученные результаты.

Алгоритм расчета стандартных термодинамических характеристик соединения в программе Chem3D состоит из следующих этапов:

- визуализация пространственной структуры молекулы: создание плоской структурной формулы в программе ChemDraw и ее перенос в окно визуализации Chem3D;
- оптимизация геометрии пространственной модели молекулы методом MM2;
- расчет стандартных термодинамических функций соединения.

Лабораторная работа № 9

Оптимизация геометрии и минимизация энергии молекулярной структуры. Расчет термодинамических свойств соединения полуэмпирическим методом

Для оптимизации геометрии пространственной модели молекулы методом MM2 в пункте **Calculations** главного меню выбираем метод **MM2**, в котором выбираем пункт **Minimize Energy** (рис. 10).

В появившемся окне минимизации нажимаем кнопку **Run** для запуска оптимизации. При достижении значения нормы градиента меньше заданного (0,1 по умолчанию), поиск прекращается и в окне **Output** выводятся результаты вычисления: энергия и нормы градиента.

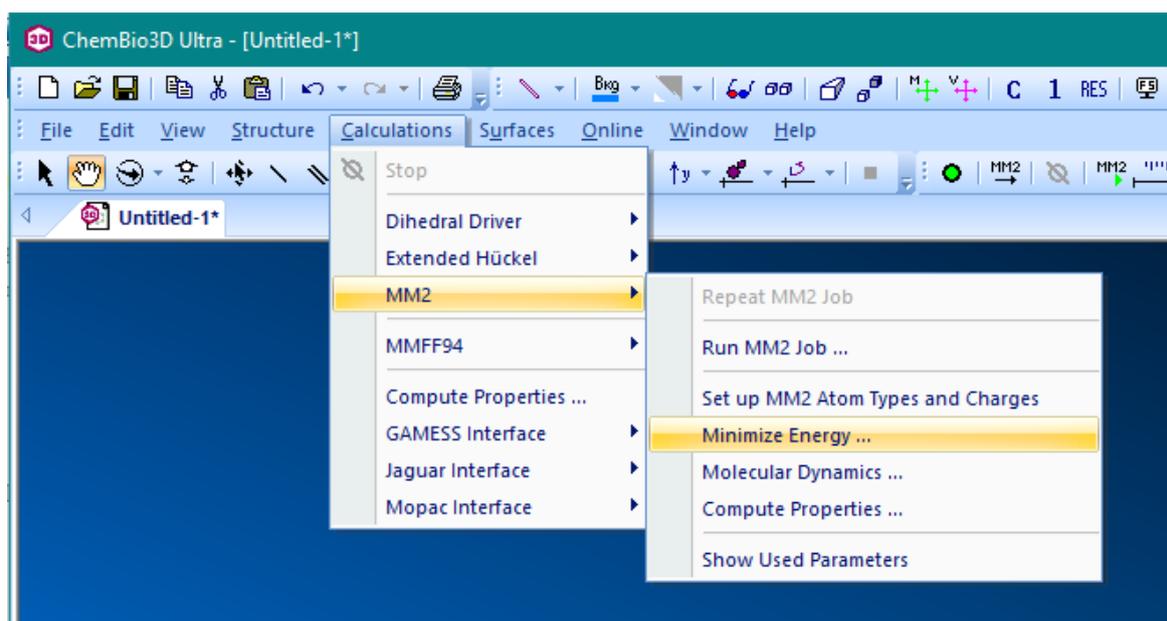


Рис. 10. Оптимизация геометрии трехмерной модели молекулы методом MM2

Для расчета стандартных термодинамических свойств (теплоты образования, теплоемкости, энергии Гиббса) выберем процедуру **Computer Properties** в пункте главного меню **Calculations**. В появившемся окне вкладки в списке **Available Properties** выбираем искомые свойства и заносим их в список **Selected Properties**, нажатием кнопки **Add**. Расчет начинается после нажатия кнопки **OK**.

По окончании расчета в окно **Output** выводятся результаты определения величин, находящихся в списке **Selected Properties**.

Для вывода полного отчета по всем свойствам, присутствующим в списке **Available Properties**, необходимо выбрать пункт **Full Report** этого списка.

Задание 9. Провести оптимизацию геометрии молекулярной структуры органического соединения из работы 1 и рассчитать его термодинамические свойства полуэмпирическим методом в программе Chem3D. Сравнить полученные значения с аналогичными значениями термодинамических характеристик, рассчитанными эмпирическим методом, и справочными данными [6, 7].

Практическое занятие № 8

Расчет и построение молекулярных орбиталей и частичных зарядов на атомах в программе Chem3D

Расчет распределения частичных зарядов на атомах позволяет делать выводы о наличии реакционных центров в молекуле и проводить сравнительную оценку реакционной способности различных реакционных центров. В программе **Chem3D** построение молекулярных орбиталей и распределения зарядов в молекуле проводится по расширенному методу Хюккеля (**Extended Huckel**), который является простейшим, наиболее быстрым полуэмпирическим квантово-химическим методом. Для этого в пункте главного меню **Calculations** имеется вкладка **Extended Huckel**, позволяющая провести расчет молекулярных орбиталей/**Calculate Surfaces** и частичных зарядов на атомах/**Calculate Charges** (рис. 11).

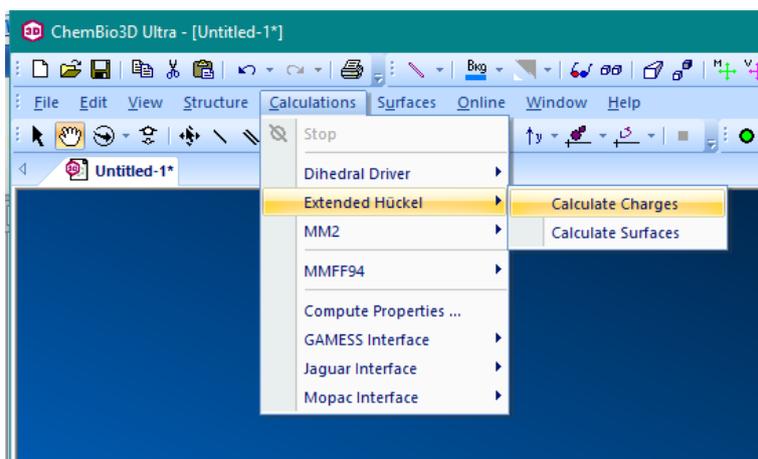


Рис. 11. Расчет частичных зарядов на атомах по методу Хюккеля в программе Chem3D

Для построения молекулярных орбиталей какого-либо соединения сначала необходимо в программе Chem3D создать его трехмерную молекулярную модель, отобразить и пронумеровать атомы. Затем в пункте меню **Surfaces** нужно выбрать пункты **Choose Surface** и **Molecular Orbitals**. При этом открывается форма, с помощью которой можно выбрать интересующую молекулярную орбиталь в списке **Orbital** и с помощью списка **Surface Type** и кнопок **Set Isocontour** и **Set Grid** настроить вид изобра-

жения. Можно просмотреть верхнюю заполненную (HOMO) и нижнюю свободную (LUMO) молекулярные орбитали.

В поле **Energy** выводятся значения энергий данных орбиталей, рассчитанные по расширенному методу Хюккеля.

При расчете частичных зарядов на атомах молекулы значения выводятся в виде таблицы в окне **Atom Property** (рис. 12).

Atom Property				
	Atom	Atom Type (MM2)	Charge (MM2)	Charge (Huckel)
1	C(1)	C Alkene	0	0.133054
2	C(2)	C Alkene	0	0.133054
3	Cl(3)	Cl	0	-0.0665233
4	Cl(4)	Cl	0	-0.0665289
5	Cl(5)	Cl	0	-0.0665178
6	Cl(6)	Cl	0	-0.0665379

Рис. 12. Результаты расчета частичных зарядов на атомах в молекуле тетрахлорэтилена по методу Хюккеля

Визуализацию распределения зарядов в молекуле можно осуществить одним из следующих способов: распределением цвета на трехмерной модели молекулы, распределением размеров моделей атомов в молекуле и распределением размеров точечных поверхностей для моделей атомов.

Откройте форму **Settings** в пункте меню **View** и установите вид контрольной панели **Model Display**. Установите тип отображения атомов модели с использованием списка **Model Type**. Например, для пространственно заполненной модели в этом списке необходимо выбрать пункт **Space Filling** и в списке **Atom Fill** – пункт **Shadowed Colors** (Затененные цвета). Убедившись, что функция **Color By Depth** отключена, в списке **Color** выберете пункт **by Partial Charge** (По частичным зарядам). Окраска атомов модели молекулы изменится в соответствии со значениями их частичных зарядов. Градация цветов будет соответствовать абсолютной величине заряда.

Для визуализации распределения зарядов по размерам атомов или по размерам точечных поверхностей установите в списке **Model Type** формы **Settings** в контрольной панели **Model Display** тип отображения **Cylindrical Bonds** (Цилиндрические связи). Откройте контрольную панель **Atom Display** этой же формы (Set-

tings) и в группах **Solid Spheres** и **Dot Surfaces** в списках **Size by** (Размер по) выберите пункт **Partial Charge**. Изображения атомов изменятся пропорционально абсолютным величинам частичных зарядов. Если в группе **Dot Surfaces** включить галочку **Show by Default**, то к изображениям атомов добавятся точечные поверхности с радиусами, пропорциональными абсолютным величинам атомных зарядов.

Визуализации подобного типа полезны при анализе механизмов реакций, протекающих с участием полярных функциональных групп, а также при изучении влияния растворителя.

Лабораторная работа № 10

Расчет и построение распределения частичных зарядов на атомах в молекулах органических соединений в программе Chem3D

Визуализация распределения зарядов в молекуле представляет собой один из способов качественной оценки ее реакционной способности. Для расчета частичных зарядов в молекуле сначала в программе Chem3D необходимо создать молекулярную модель, отобразить и пронумеровать атомы

View → Model Display → Show Serial Numbers → Show Atom Symbols.

Затем в пункте меню **Calculations** выбрать пункт **Extended Huckel/Calculate Charges**.

Визуализацию распределения зарядов в молекуле выполнить распределением цвета на трехмерной модели молекулы

(View → Settings → Model Display → Model Type → Space Filling → Atom Fill → Shadowed Colors (Затенённые цвета) → Color By Depth → Color → by Partial Charge)

и распределением размеров точечных поверхностей для моделей атомов

(View → Settings → Model Display → Model Type → Cylindrical Bonds (Цилиндрические связи) → Atom Display (Settings) → Solid Spheres → Dot Surfaces → Size by → Partial Charge → Dot Surfaces → Show by Default).

Примеры оформления результатов работы приведены на рис. 13 и 14.

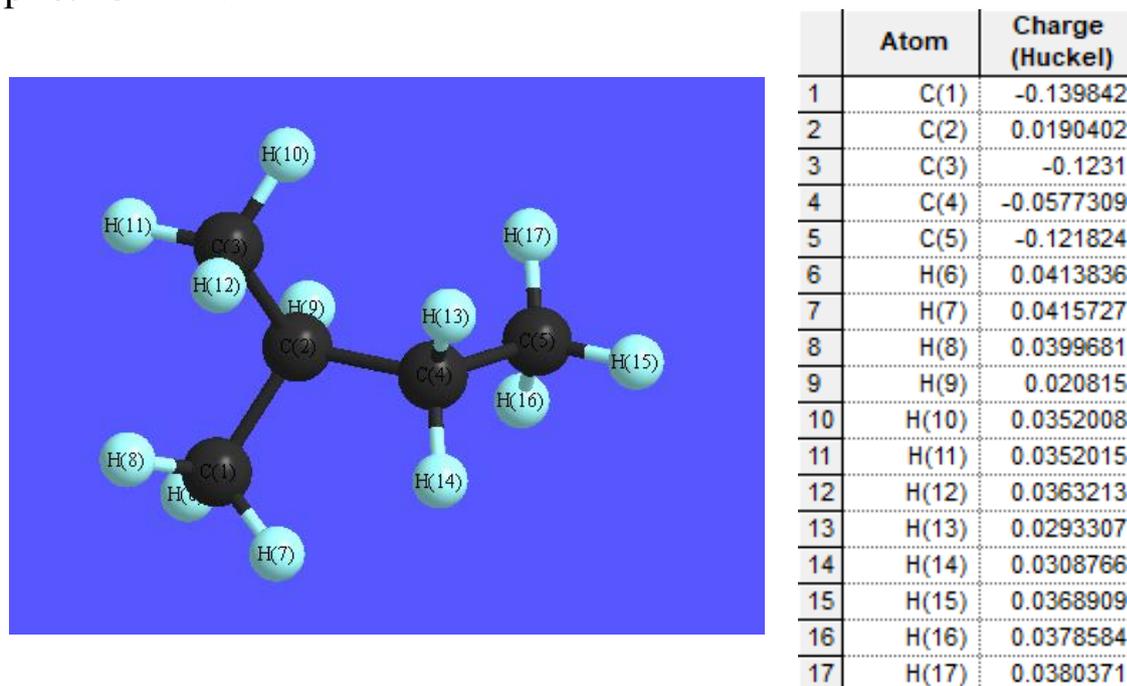


Рис. 13. Результаты расчета частичных зарядов на атомах в молекуле изопентана по методу Хюккеля в программе Chem3D

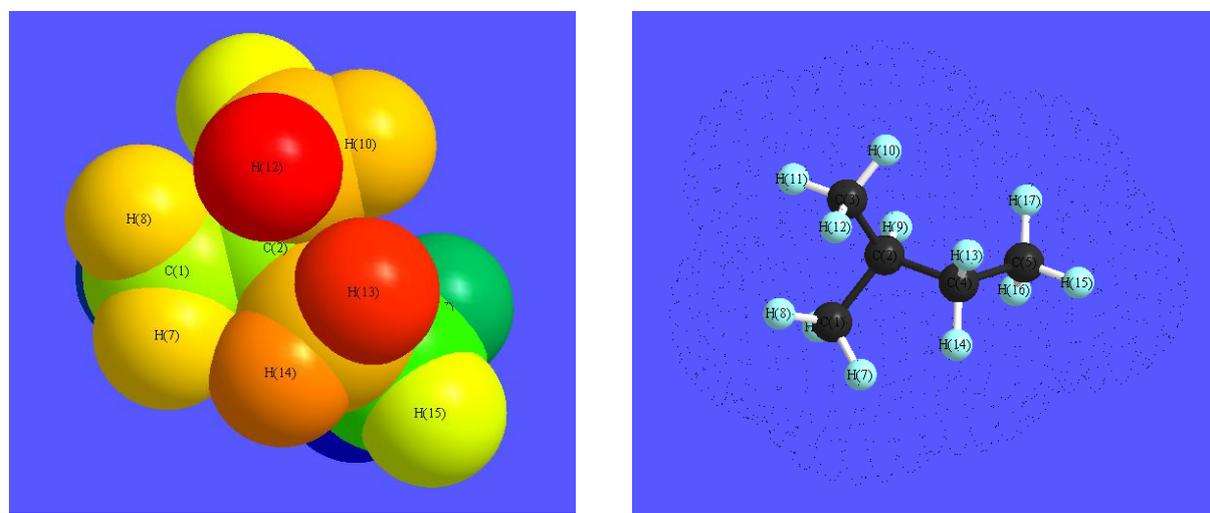


Рис. 14. Визуализация распределения частичных зарядов на атомах в молекуле изопентана в программе Chem3D

Задание 10. С помощью программы Chem3D провести расчет частичных зарядов на атомах и визуализацию их распределения в молекуле для трех соединений, анализ геометрии которых проводился в работе 6. На основании полученных данных, сделать вывод об их реакционной способности.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие приложения включает в себя программное средство ChemOffice?
2. Каковы возможности программы ChemDraw?
3. Назовите последовательность действий при создании молекулярной структуры вещества в ChemDraw.
4. Каким образом программа ChemDraw позволяет приводить названия молекулярных структур?
5. Каковы возможности программы Chem3D?
6. Перечислите способы создания трехмерной модели химического соединения в Chem3D.
7. Последовательность действий при создании пространственной молекулярной структуры в Chem3D.
8. Назовите типы визуализации трехмерной модели в Chem3D.
9. Что включает в себя анализ геометрии трехмерных моделей молекул в среде Chem3D?
10. Какие физические и термодинамические характеристики молекулы можно рассчитать с помощью программы Chem3D?
11. Какие существуют эмпирические методы расчета физико-химических свойств органических соединений? На чем основаны данные методы?
12. Какой эмпирический метод лежит в основе расчета свойств соединений с помощью модуля ChemPropPro? В чем его ограничение?
13. Какие физико-химические свойства можно рассчитать в программе Chem3D с помощью модуля ChemPropPro?
14. Алгоритм расчета физико-химических свойств в программе Chem3D с помощью модуля ChemPropPro.
15. В чем отличие эмпирических методов расчета свойств соединений от квантово-химических?
16. В чем отличие полуэмпирических методов расчета свойств соединений от неэмпирических?
17. Назовите задачи, которые можно решить с применением полуэмпирических методов.
18. В каких случаях применяются неэмпирические методы расчета? С чем связано их ограничение?

19. Какие полуэмпирические методы используются для расчета свойств химических соединений в программе Chem3D?
20. Что такое поверхность потенциальной энергии молекулы?
21. Что означает минимум на потенциальной поверхности? Понятие глобального минимума.
22. Что такое оптимизация геометрии молекулярной системы?
23. Как осуществляют оптимизацию геометрии молекулы в программах Chem3D?
24. Алгоритм расчета термодинамических свойств органических соединений в программе Chem3D полуэмпирическими методами.
25. Для чего необходим расчет частичных зарядов на атомах?
26. Какой метод лежит в основе расчета частичных зарядов на атомах?
27. Алгоритм расчета частичных зарядов на атомах в программе Chem3D.
28. Назовите способы визуализации распределения зарядов на атомах в молекуле соединения в Chem3D.

ТРЕБОВАНИЯ К ОФОРМЛЕНИЮ ОТЧЕТА ПО ЛАБОРАТОРНЫМ РАБОТАМ

Отчеты по лабораторным работам оформляются в печатном виде на листах формата А4 в виде единого документа, на титульном листе которого указывается название дисциплины, группа и ФИО студента (см. образец в приложении).

Отчет по каждой работе должен содержать:

- название и номер лабораторной работы;
- дату начала выполнения задания;
- формулировку задания с указанием соответствующих варианту веществ;
- поэтапное описание хода выполнения задания;
- результаты со всеми необходимыми рисунками и таблицами. Изображения из ChemOffice переносятся в Word с помощью буфера обмена (операции копировать/вставить), допускается вырезание и перенос фрагмента экрана.

Текст отчета печатается с соблюдением следующих требований: шрифт - TimesNewRoman размер (кегель) 14, выравнивание по ширине страницы, автоматическая расстановка переносов и нумерация страниц; абзацный отступ одинаковый по всему тексту 1,25 см; межстрочный интервал – полуторный; поля страницы: верхнее и нижнее – 15 мм, левое не меньше 20 мм, правое – 10 мм. Заголовки печатаются кеглем 14, строчным, полужирным; заголовки от текста отделять сверху и снизу одним интервалом; точку в конце заголовка не ставить. Рисунки должны быть пронумерованы и иметь название, которое помещают под рисунком.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Органическая химия: в 2 т : учебник для вузов по направлению «Хим. технология и биотехнология» и хим.-технол. направлениям / В. Ф. Травень. – Т. 1. – Москва : Академкнига, 2004. – 727 с. – ISBN 5946280686 : 268.00. ISBN 5946281712. – Текст: непосредственный.

2. Органическая химия: в 2 т : учебник для вузов по направлению «Хим. технология и биотехнология» и хим.-технолог. направлениям / В. Ф. Травень. – Т. 2. – Москва : Академкнига, 2004. – 582 с. – ISBN 5946280686 : 205.00. ISBN 5946281720. – Текст: непосредственный.

3. Сайкс, П. Механизмы реакций в органической химии : вводный курс: пер. с англ. / П. Сайкс. – Москва : Химия, 2000. – 176 с. – ISBN 5724510944 : 35.00; 86.00. – Текст: непосредственный.

4. Петров, А. А. Органическая химия : учебник для студентов химико-технологических вузов и факультетов / А. А. Петров, Х. В. Бальян, А. Т. Трощенко ; под ред. М. Д. Стадничука. – 5-е изд., перераб. и доп. / Репринт. изд. Москва : Альянс, 2012. – 624 с. – ISBN 9785903034994 : 985.00. – Текст: непосредственный.

5. Соловьев, М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. – Москва : Солон-Пресс, 2005. – 536 с. – ISBN 598003188X : 256.20. – Текст: непосредственный.

6. Краткий справочник физико-химических величин / сост.: Н. М. Барон [и др.] ; под ред. А. А. Равделя , А. М. Пономаревой. – 11-е изд., испр. и доп. – Москва : Аз-book, 2009. – 240 с. – ISBN 5905034030 : 370.00. – Текст: непосредственный.

7. Справочник химика / Н. А. Абрамова [и др.] ; редкол.: Б. П. Никольский (гл. ред.) [и др.]. Т. 2: Основные свойства неорганических и органических соединений. – 3-е изд., испр. – Ленинград : Химия, 1971. – 1167 с. : 5.03, 50.00; 81.23. – Текст: непосредственный.

Приложение

Таблица П.1

Варианты к заданиям лабораторных работ №1–5

№	Вещество	Органическая реакция	Углевод
1	2,3-Ди-метилбутан	Хлорирование 2,3-диметилбутана	D-манноза
2	Изопентан	Нитрование изопентана по Коновалову	D-ксилоза
3	Изогексан	Термический крекинг изогексана	L-рибоза
4	2-Хлорбутан	Дегидрохлорирование 2-хлорбутана	D-фруктоза
5	1,2-Дихлор-пропан	Дегидрогалогенирование 1,2-дихлор-пропана	L-фруктоза
6	Бромистый изобутил	Гидролиз бромистого изобутила	D-галактоза
7	2-Метил-2-бутен	Хлорирование 2-метил-2-бутена	D-рибоза
8	Изобутилен	Гидрохлорирование изобутилена	L-альтроза
9	Изопрен	Гидробромирование изопрена по типу 1,4	D-арабиноза
10	Дивинил	Бромирование дивинила по типу 1,2	D-альтроза
11	2-Метил-2-пентен	Гидратация 2-метил-2-пентена	L-манноза
12	3-Метил-1-бутен	Бромирование 3-метил-1-бутена в присутствии перекисей	D-глюкоза
13	2-Бутин	Гидробромирование 2-бутина	D-галактоза
14	2-Пентин	Гидратация 2-пентина	L-фруктоза
15	3-Метил-2-бутанол	Дегидратация 3-метил-2-бутанола (внутримолекулярная)	D-ликсоза
16	1-Бутен	Димеризация 1-бутена	D-гулоза
17	Метилацетилен	Присоединение синильной кислоты к метилацетилену	L-глюкоза
18	1-Бутин	Присоединение этанола к 1-бутину	D-манноза
19	Изопентиловый спирт	Дегидратация изопентанола (межмолекулярная)	L-арабиноза
20	Бромистый изопропил	Взаимодействие бромистого изопропила с этилатом натрия	L-ксилоза
21	Пропаналь	Взаимодействие пропанала с HCN	D-рибоза
22	Бромистый трет-пентил	Гидролиз бромистого трет-пентила	L-альтроза
23	2-Бутанон	α -Хлорирование 2-бутанона	D-альтроза
24	Бутаннитрил	Гидролиз бутаннитрила	D-фруктоза
25	Пропановая кислота	Этерификация пропановой кислоты метанолом	L-галактоза

Варианты к заданиям лабораторных работ № 6, 7

№	Названия веществ с открытой цепью	Названия веществ циклического строения
1	2,3-Диметил-2-бутен; 2-бутин	циклогексан, метилбензол
2	2-Метил-2-бутен; 3-метил-1-бутин	циклопентан, этилбензол
3	2-Метил-1-пентен; 4-метил-2-бутин	этилциклопентан, п-ксилол
4	3-Хлор-1-бутен; 3-хлор-1-бутин	хлорциклопентан, аминобензол
5	1,2-Дихлор-1-пропен; 3-хлор-1-пропин	1,3-диметилциклогексан, 1,3,5-триметилбензол
6	1-Бром-2-метилпропен; 3-бром-1-пропин	1-метил-2-этилциклогексан, хлористый бензил
7	2-Метилбутан; 3-метил-1-бутин	1,4-диэтилциклогексан, кумол
8	2-Метилпропан; пропин	циклогексен, винилбензол
9	2-Метилбутан; 2-метил-1-бутен-3-ин	изопропилциклогексан, фенилуксусная кислота
10	Бутан; 1-бутен-3-ин	циклопентен, п-диэтилбензол
11	2-Метилпентан; 4-метил-2-пентин	циклогексанол, фенол
12	2-Метилбутан; 3-метил-1-бутин	циклогексанон, о-метилфенол
13	2-Бромбутан; 2-бром-2-бутен	циклопентадиен, бензойная кислота
14	Пентан; 2-пентен	3-этилциклопентен, нитробензол
15	3-Метил-3-бутен-2-ол; 3-пентин-2-ол	3-метилциклогексен, 1-бром-2-метил-4-пропилбензол
16	5-Метил-3-гептен; 5-метил-3-гептин	циклогексеноксид, п-этилтолуол
17	2-Цианопропан; пропен	дициклогексил, о-дихлорбензол
18	Бутан; 1-бутен	циклогексиламин, 4-нитрофенол
19	3-Метил-3-бутен-1-ол; 3-метил-3-бутин-1-ол	1,4-циклогександиол, метилфенилкетон
20	2-Бромпропен; 1-бромпропин	1,2-дибромциклобутан, дифениламин
21	Пропеналь; пропиаль	1,2-диметилциклопентан, бензальдегид
22	3-Бром-3-метил-1-бутен; 3-бром-3-метил-1-бутин	4-метил-1-циклогексен, бензиловый спирт
23	3-Бутен-2-он; 3-бутин-2-он	циклопентанон, этилфениловый эфир
24	2-Бутеннитрил; 2-бутиннитрил	метилциклогексильный эфир, метилбензоат
25	Пропеновая кислота; пропионовая кислота	циклопентанкарбоновая кислота, терефталевая кислота

Образец титульного листа

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Кузбасский государственный технический университет
имени Т.Ф. Горбачева»

Кафедра технологии пластмасс, органических веществ и нефтехимии

ОТЧЕТ

по лабораторным работам

по дисциплине «Информационные технологии в профессиональной
деятельности»

Выполнил: студент гр. ХОб-221

ФИО

Проверил:

доцент Котельникова Т.С.