

7. Учебная программа для общеобразовательных учреждений с русским языком обучения. География XI класс. Минск : Нац. ин-т образования, 2007. 71 с.
8. Программы для общеобразовательных учреждений с русским языком обучения с 12-летним и 11-летним сроком обучения. География V—X класс. Минск : Нац. ин-т образования, 2003. 55 с.
9. Программы для общеобразовательных учреждений с 12-летним сроком обучения. Биология XI класс. Минск : Нац. ин-т образования, 2007. 59 с.
10. *Колевич Т. А., Матулис Вад. Э., Матулис Вит. Э.* Химия: пособие по общей и неорганической химии для учащихся лицея БГУ. Минск, 2007. 230 с.
11. Экспериментальные программы по химии для учащихся УОУ «Лицей БГУ» с 11-летним сроком обучения. Химия X—XI классы. 2003.
12. *Городишенина Е. Б.* // Natural Science Education. 2005. № 2. P. 62—65.
13. *Городишенина Е. Б.* // Методы совершенствования фундаментального образования в школах и вузах: Материалы 9 междунар. науч.-метод. конф. Севастополь, 2006. С. 62—67.
14. *Городишенина Е. Б., Сычевская Н. А.* // Методы совершенствования фундаментального образования в школах и вузах: Материалы 12 междунар. науч.-метод. конф. Севастополь, 2007. С. 24—26.
15. *Городишенина Е. Б.* // Народная асвета. 2005. Вып. 1. С. 65—66.

УДК 372.016:54

Н. М. ГОЛУБ, А. И. БОРИЧЕВСКИЙ

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРОГРАММ В ПРЕПОДАВАНИИ КВАНТОВОЙ ХИМИИ

Значимое место в подготовке квалифицированных педагогических кадров и обеспечение нового качества знаний принадлежит инновационным технологиям. Сложно представить сегодня учебный процесс без применения интегральных, компьютерных, саморазвивающих технологий. Информационные технологии рассматриваются при этом как неотъемлемая часть современного образования независимо от профиля подготовки будущего специалиста. Не вызывает сомнения тот факт, что каждый студент должен приобрести знания и навыки работы в области информационных технологий и овладеть определенным типом мышления [1].

В своей работе В. В. Пасечник [2] отмечает, что при проведении учебного процесса необходимо учитывать особенности восприятия информации разными категориями студентов. Условно всех студентов можно разделить на три группы:

- визуалов, которые лучше всего усваивают информацию зрительно (натуральные объекты, изобразительная наглядность, письменный текст);
- аудиалов, которые лучше всего воспринимают информацию, передающуюся с помощью слова;
- кинестетов, усваивающих лучше всего вербальную информацию и наиболее эффективно обучающихся при двигательной и тактильной активности.

Собственно визуалы, аудиалы и кинестеты встречаются редко. Как правило, у студента доминирует определенный вид восприятия учебной инфор-

мации, но при этом нередки случаи, когда такого предпочтения не наблюдается. Таким образом, при отборе средств наглядности важно обеспечить различные виды восприятия учебного материала.

Эти аспекты необходимо учитывать и при разработке различных средств обучения. Особенно большие возможности открываются при создании электронных практикумов. Это связано с тем, что компьютер, в отличие от других средств обучения, может сочетать разнообразные функции: аудиовизуальную, манипулятивную, динамическую, аналитическую, моделирующую, оперативную, хранения информации, калькулятивную и другие.

Началом применения персональных компьютеров в области химии был 1953 г., когда с их помощью были расшифрованы данные рентгенографического исследования кристаллов (Великобритания) [3]. В настоящее время уже не вызывает сомнений необходимость использования вычислительной техники при обработке результатов эксперимента. При изучении специальных курсов, например «Химические процессы и аппараты», достаточно широко используется компьютерное моделирование, позволяющее изучать многие процессы в динамике, что в конечном счете способствует более глубокому усвоению курса. В последние годы среди задач и методов математического моделирования и планирования эксперимента стали выделять новое направление, называемое «Машинный дизайн в химии». Задачи этого направления имеют очень высокий уровень сложности и могут рассматриваться при организации занятий с магистрантами и аспирантами.

Проблема замены в базовом химическом образовании традиционного эксперимента компьютерными имитациями достаточно широко обсуждается в специальной литературе. Одним из дискутируемых предложений является отказ от проведения лабораторных занятий для студентов, не специализирующихся в области химии, и замена их компьютерным моделированием или просмотром учебных телевизионных фильмов по соответствующей тематике с последующим обсуждением [3]. В качестве преимущества данного метода называют значительное удешевление учебного процесса. Вместе с тем при таком подходе активная деятельность студентов заменяется пассивной, что ведет к значительному снижению их интереса к курсу химии [1]. В последние годы также достаточно много внимания уделяется проблеме разработки учебников и учебных пособий для дистанционного обучения [4-6].

С нашей точки зрения, использование компьютерных технологий эффективно при изучении студентами курса «Квантовая механика и квантовая химия». На сегодняшний день методы квантовой химии и молекулярной динамики получили широкое распространение в численном моделировании электронной и атомной структур молекулярных, кристаллических и наноразмерных сложных систем. Это связано с технологическим развитием соответствующего математического обеспечения. В настоящее время функционирует достаточно много современных вычислительных комплексов, реализующих методы квантовой химии и молекулярной динамики.

Нами предложен электронный практикум по предмету «Квантовая механика и квантовая химия» для студентов второго и третьего курса специальности «Химия. Дополнительная специальность: Химия. Биология» и пятого курса специальности «Биология. Дополнительная специальность: Биология. Химия». Лабораторный практикум представляет собой руководство для сту-

дентов при выполнении заданий по курсу «Квантовая механика и квантовая химия». В нем изложены принципы квантово-химических расчетов геометрических и энергетических параметров молекул, межмолекулярного взаимодействия, поверхностей потенциальной энергии и т. д. Основное внимание уделено правилам пользования программой «Nurper. chem.», реализующей методы квантовой химии и молекулярной динамики.

Студенты биологического профиля имеют относительно слабую математическую подготовку. Поэтому введение компьютерной компоненты усиливает восприятие сложного квантово-химического материала. Лабораторные задания дополняются исследовательской компонентой, анализом результатов, полученных при расчетах. Такой подход позволяет усваивать сложный математический аппарат данного курса за счет введения наглядного изображения химических структур с учетом всех особенностей пространственного и электронного строения. Использование компьютерного моделирования и методов квантовой химии позволяет студентам анализировать расчетные результаты, предоставляемые компьютерной программой на более высоком уровне.

Например, задача расчета МО, зарядов, электронной плотности и дипольного момента для молекулы формальдегида расширенным методом Хюккеля выглядит следующим образом.

В молекуле формальдегида атом кислорода поставляет в  $\pi$ -систему один электрон (гетероатом 1-го рода, связь C=O — двойная). Параметры Стрейтвицера равны:  $h(\delta) = 1$ ,  $\alpha_2 = \alpha_0 + 1\beta$ ,  $k_{C-\dot{O}} = 1,41$ ,  $\beta_{12} = \sqrt{2}\beta$ .

Секулярные уравнения в приближении Хюккеля запишутся следующим образом:

$$C_1x + C_2\sqrt{2} = 0; \quad C_1\sqrt{2} + C_2(x + 1) = 1; \quad X^2 + X - 2 = 0.$$

Расставляя в порядке возрастания все  $X$ , получим:

$$X_1 = -2; \quad X_2 = 1.$$

Подставляя полученные значения в секулярные уравнения, определяем набор коэффициентов для каждого  $X$ . Структура двух найденных МО будет выглядеть следующим образом:

$$\Psi_1 = 0,46\chi_1 + 0,885\chi_2; \quad \Psi_2 = 0,885\chi_1 - 0,46\chi_2;$$

$$\epsilon_1 = \alpha + 2\beta; \quad \epsilon_2 = \alpha - \beta.$$

Электронные плотности на атомах и заряды на каждом атоме равны:

$$P_{11} = 2(0,46)^2 = 0,42, \quad q_1 = +0,58; \quad P_{22} = 2(0,885)^2 = 1,58, \quad q_2 = -0,58;$$

$$P_{21}^{\pi} = 2(0,46)(0,885) = 0,814.$$

Согласно этому расчету свободная валентность для любого атома может быть определена:

$$F_{\mu} = \sqrt{3} - n_{\mu},$$

где  $n_{\mu}$  — сумма порядков связей окружающих атом  $\mu$ .

$$E^{\text{полн}} = \sum_i n_i \cdot \varepsilon_i = 2(\alpha + 2\beta) = 2\alpha + 4\beta.$$

Индекс свободной валентности  $F_\mu$  на каждом атоме составляет

$$F_1 = F_2 = \sqrt{3} - 0,814 = 0,916.$$

Расчет дипольного момента формальдегида

$$\mu_X = \sum_v q_v X_v, \mu_Y = \sum_v q_v Y_v, \mu_Z = \sum_v q_v Z_v; \mu^2 = \mu_X^2 + \mu_Y^2 + \mu_Z^2,$$

$$Z_C = 0, R_{CO} = 1,26 \text{ \AA}; \mu_Z = \mu = -0,58e \cdot 0,16 = -0,67e\text{ \AA} \cdot 4,8 = -3,12D.$$

Аналогичный расчет может быть представлен в пакете программ «Nupreg. Chem».

1. Выполнение в формате программы изображения молекулы формальдегида (рис. 1).

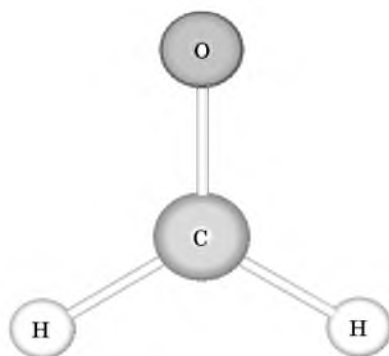


Рис. 1. Изображение молекулы формальдегида

2. Оптимизация структуры квантово-химическим методом (AM1) (рис. 2).

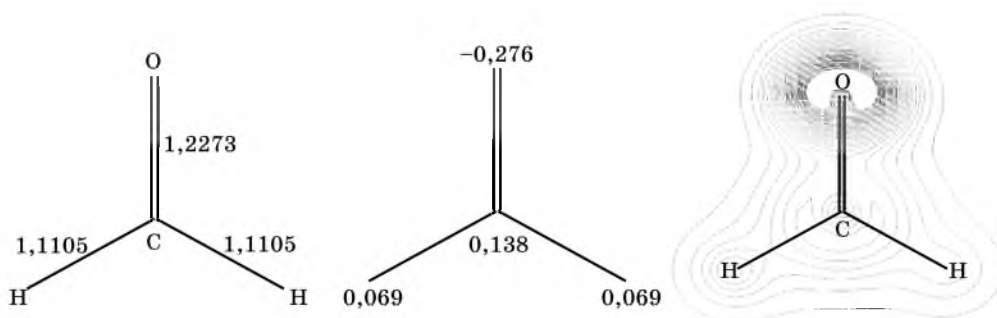


Рис. 2. Оптимизированные структуры формальдегида

### 3. Полученные результаты:

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule = (untitled) AM1

PolakRibiere optimizer

Accelerate convergence = YES

Criterion of RMS gradient = 0,0010 kcal/(A mol) Maximum cycles = 60

UHF Calculation:

Singlet state calculation

Number of electrons = 12

Number of Alpha Electrons = 6

Number of Beta Electrons = 6

Charge on the System = 0

#### ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy -10967,5088380 (kcal/mol)

Total Energy -17,477488888 (a. u.)

Binding Energy -366,1826500 (kcal/mol)

Isolated Atomic Energy -10601,3261880 (kcal/mol)

Electronic Energy -19930,9351400 (kcal/mol)

Core-Core Interaction 8963,4263019 (kcal/mol)

Heat of Formation -31,5296500 (kcal/mol)

Gradient 0,0004012 (kcal/mol/Ang)

#### MOLECULAR POINT GROUP C2V EIGENVALUES (eV)

Alpha Orbitals:

Symmetry:	1 A1	2 A1	1 B2	3 A1	1 B1	2 B2	2 B1	4 A1	3 B2	5 A1
Eigenvalue:	-39,06	-25,06	-17,14	-16,26	-14,54	-10,78	0,79	3,16	3,99	6,06

Beta Orbitals:

Symmetry:	1 A1	2 A1	1 B2	3 A1	1 B1	2 B2	2 B1	4 A1	3 B2	5 A1
Eigenvalue:	-39,06	-25,06	-17,13	-16,25	-14,54	-10,78	0,79	3,16	3,99	6,06

#### ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

Alpha Orbitals:

AO	1 s C	1 P <sub>x</sub> C	1 P <sub>y</sub> C	1 P <sub>z</sub> C	2 s O	2 P <sub>x</sub> O	2 P <sub>y</sub> O	2 P <sub>z</sub> O	3 s H	4 s H
	0,64	0,48	0,45	0,35	0,95	0,95	0,57	0,64	0,46	0,46

Beta Orbitals:

AO	1 s C	1 P <sub>x</sub> C	1 P <sub>y</sub> C	1 P <sub>z</sub> C	2 s O	2 P <sub>x</sub> O	2 P <sub>y</sub> O	2 P <sub>z</sub> O	3 s H	4 s H
	0,64	0,48	0,45	0,35	0,95	0,95	0,57	0,64	0,46	0,46

#### NET CHARGES AND DIPOLE (DEBYES)

Atom	Z	Charge	Dipole	X	Y	Z	Total
1	6	0,138	Point-Chg,	0,000	-3,117	-0,000	3,017
2	8	-0,276	sp Hybrid	0,000	-0,100	-0,000	0,100
3	1	0,069	pd Hybrid	0,000	0,000	0,000	0,000
4	1	0,069	Sum	0,000	-3,117	-0,000	3,317

Математический расчет 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 смежным дисциплинам, что позволяет ввести в процесс обучения научно-исследовательский аспект. Восприятие материала в этом случае получается не односторонним, а охватывает различные стороны подготовки преподавателя химии.

В качестве примера можно проанализировать успеваемость студентов за 4 года (таблица).

Успеваемость студентов по курсу «Квантовая механика и квантовая химия»

Год		Количество студентов		Изучаемый предмет					
		БХ, 5к.	ХБ, 3 к.	Квантовая химия		Органическая химия		Основы информатики и ВТ	
				БХ	ХБ	БХ	ХБ	БХ	ХБ
Без использования компьютерных технологий	2003/2004	26	17	3,1*	3,3*	4,2*	4,3*	3,8*	3,8*
	2004/2005	17	20	3,0*	3,3*	4,1*	4,2*	3,9*	3,7*
С использованием компьютерных технологий	2005/2006	16	17	6,1	3,4*	7,3	4,3*	7,6	4,1*
	2006/2007	21	18	7,2	4,1*	7,8	4,7*	7,7	4,6*

\* Оценки по 5-балльной системе.

Анализ успеваемости слушателей курса «Квантовая механика и квантовая химия» привел к выводу, что использование электронных учебных материалов (ЭУМ) помогает студентам воспринимать изучаемое как симбиоз теоретических и практических знаний. Результаты исследования показывают, что разработка современных ЭУМ является важной составляющей в методической организации преподавания дисциплин, содержащих сложный расчетный аппарат. ЭУМ позволяют интенсифицировать восприятие, усвоение знаний и их применение будущими специалистами в профессиональной деятельности.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Зинович З., Василевская Е., Халецкий В. // Technologiczne systemy informacyjne w inzynierii, produkcji i ksztalceniu technicznym. Lublin, Lubelskie Towarzystwo Naukowe, 2001. P. 121—127.
2. Пасечник В. В. Современные требования к разработке и отбору средств наглядности // Сб. материалов междунар. науч.-практ. конф. Брест, 2002. С. 116.
3. Shitogawa J. J. // Kagaku tokyoiku. Chem. Educ. M., 1993. Vol. 41, № 1. P. 6—8.
4. Афанасьев В. Н., Агдалов Р. И., Дмитриев С. В. и др. // Совр. высш. школа. 1991. № 4. С. 44—47.
5. Калашников П. // Высш. образование в России. 1999. № 1. С. 117—120.
6. Шабанова В. И., Гурин Н. И. // Педагогическое образование в классическом университете: проблемы и перспективы. Материалы междунар. науч.-практ. конф. Минск, 2000. Ч. 2. С. 220.