Моделирование строения химических соединений с использованием программного комплекса HyperChem 8.0

Учитель химии: Пономаренко О.А.

г. Егорьевск, МОУ СОШ №13, 2018 г.

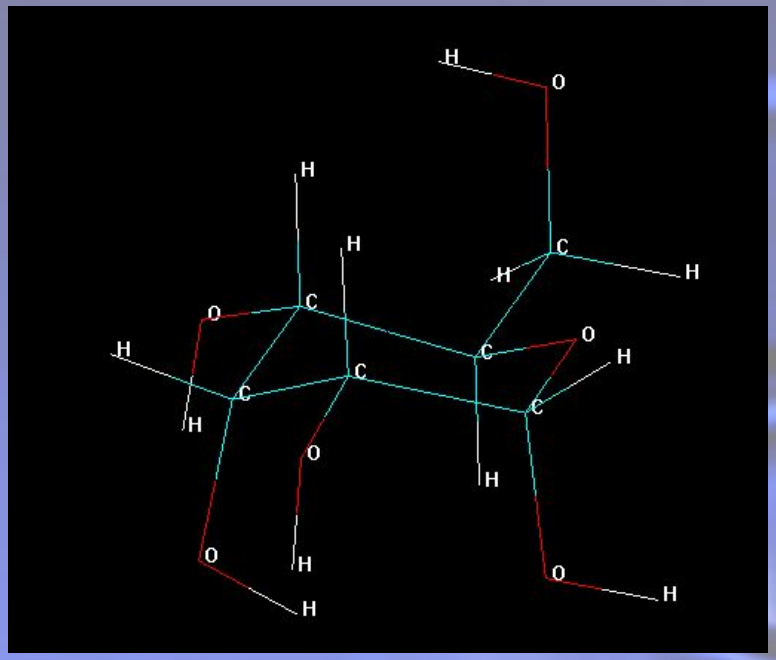
Цель работы:

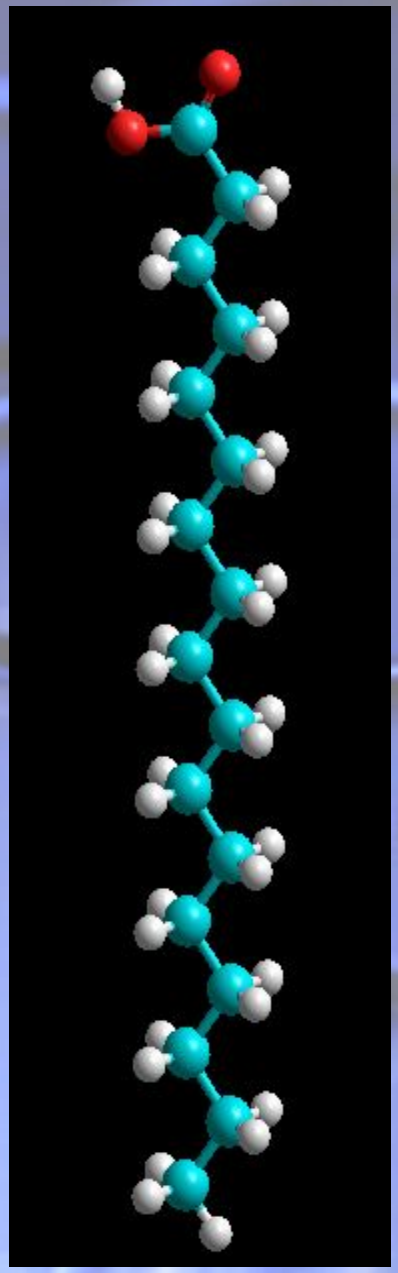
Внедрение программного комплекса HyperChem 8.0 для выполнения задач, стоящих при изучении химии в средней школе, проведение молекулярного моделирования, а также квантово-химический расчёт некоторых параметров отдельных химических соединений.

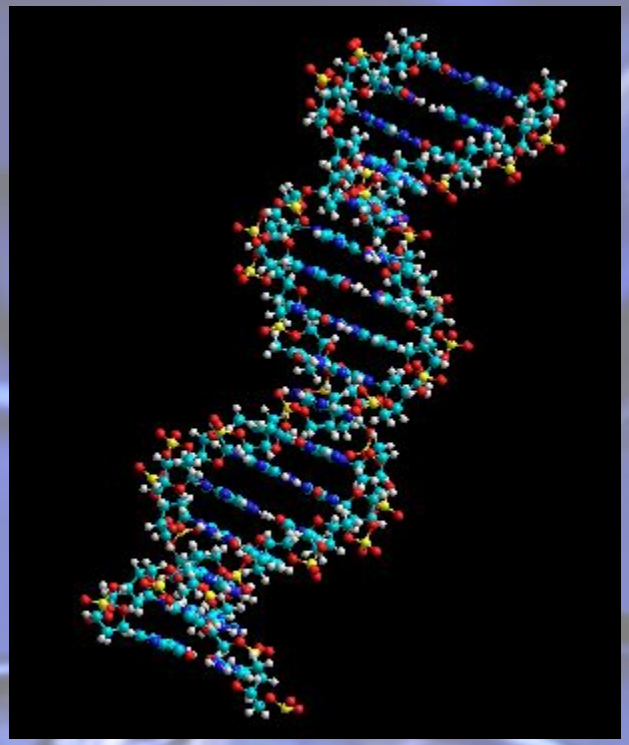
Задачи:

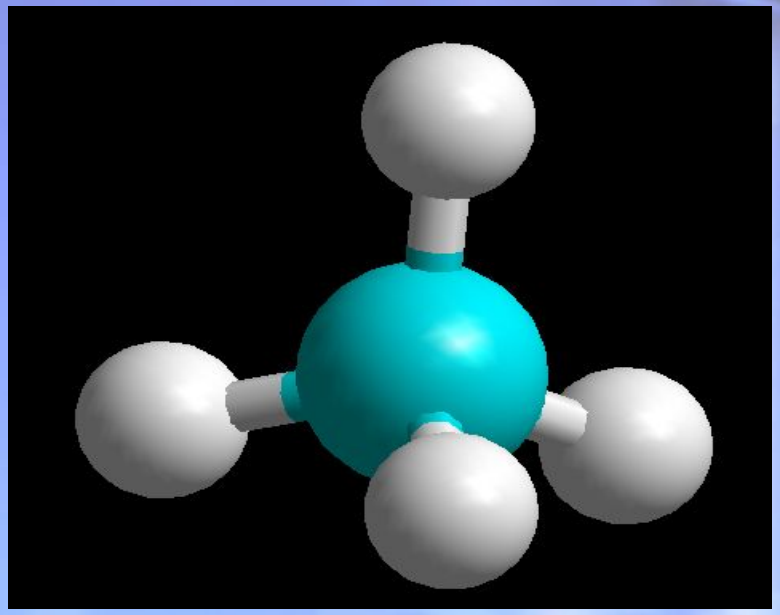
- Анализ литературных данных;
- Освоение алгоритма работы в HyperChem 8.0;
- Построение моделей химических соединений и определение их основных молекулярных параметров;
- Проведение квантово-химического расчёта выбранных химических соединений

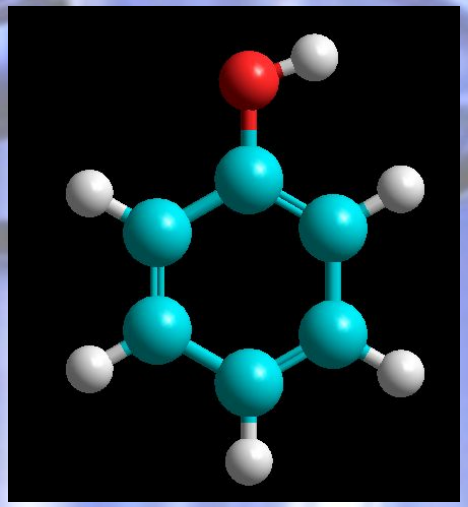
От чего зависят свойства веществ?









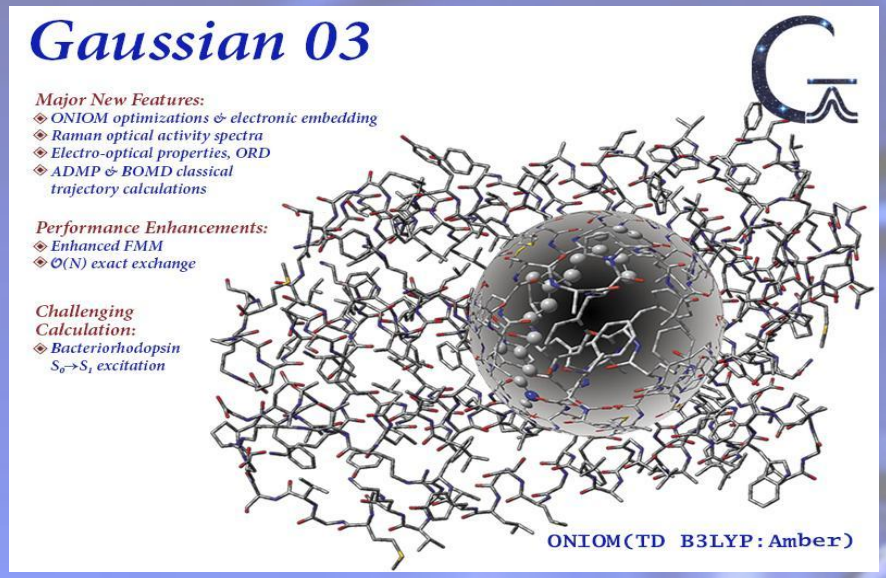


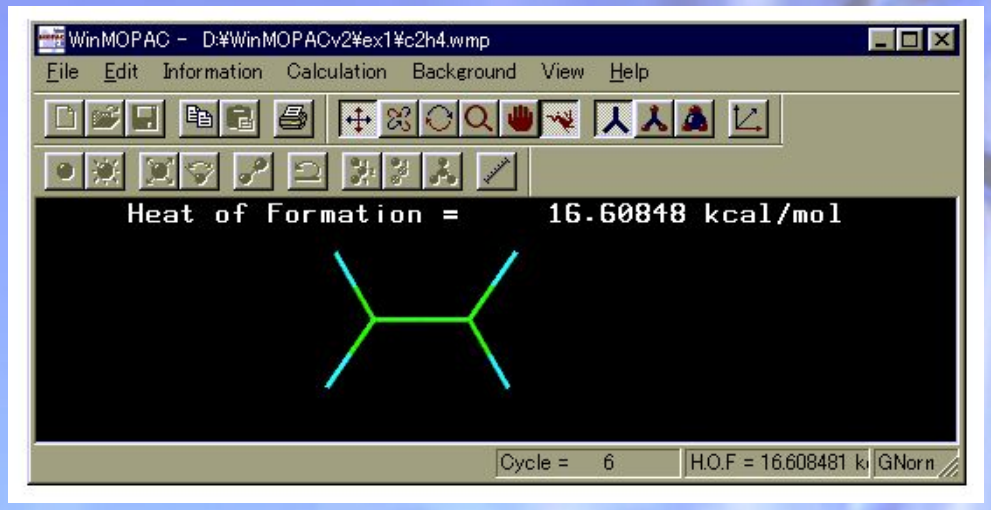
Основные разделы современной химии

Химия

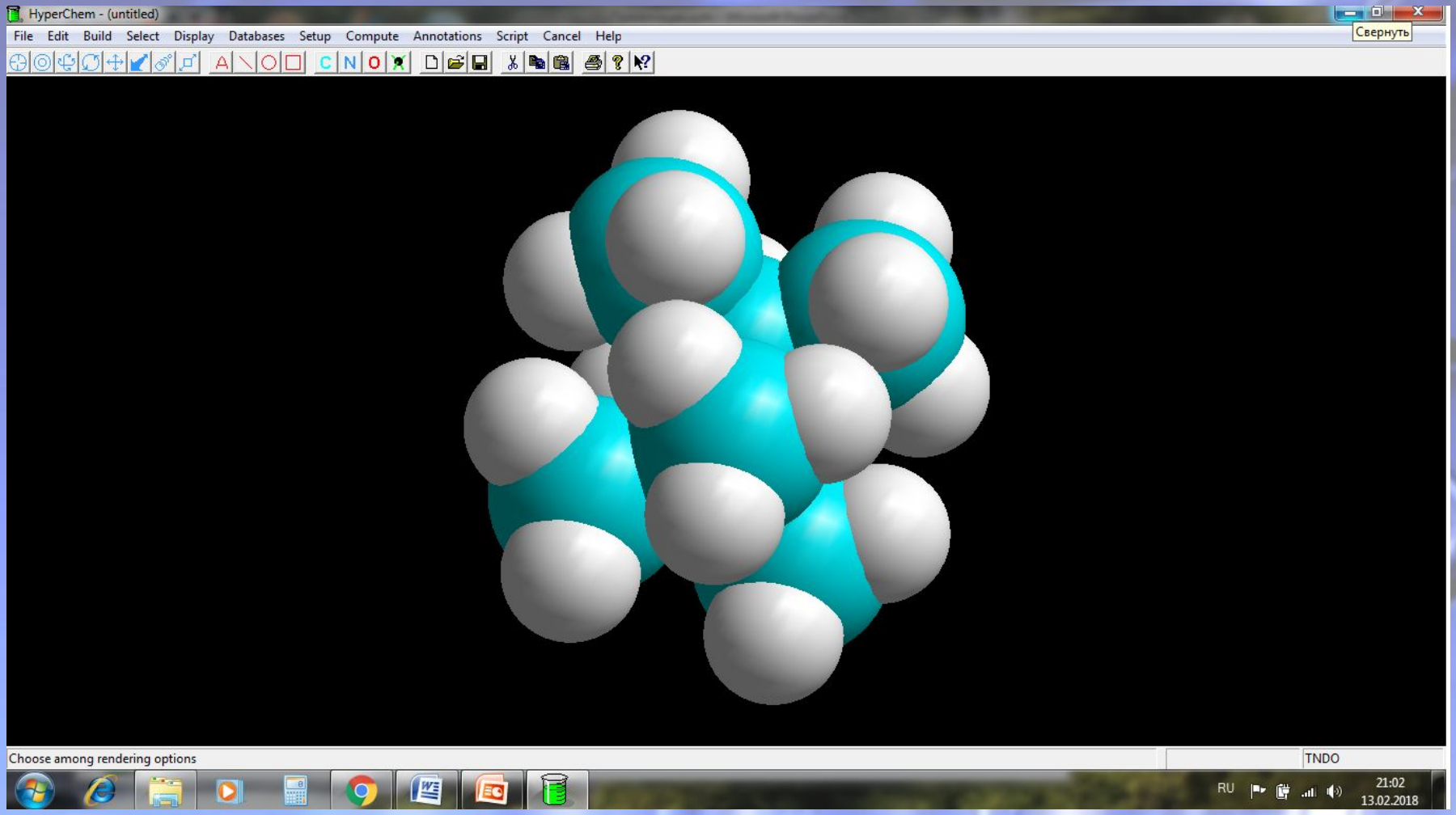
- Неорганическая
- Органическая
- Аналитическая
- Биологическая
- Физическая
- Квантовая химия
- Химическая кинетика
- Химическая термодинамика

Программы, используемые для проведения квантово-химических расчётов





Программный комплекс HyperChem 8.0



Возможности HyperChem 8.0, необходимые для реализации поставленной цели

1. Совместимость с 64-х битной операционной системой Windows;

2. Построение 3-D моделей молекул веществ, наглядно демонстрирующих качественный и количественный состав молекул, их пространственное строение, а также распределение электронной плотности между атомами в молекуле.

3. Позволяет проводить квантово-химические расчёты, результатами которых являются значения геометрических параметров молекул, дипольные моменты, энергии химических связей между атомами в молекулах, что позволяет судить о реакционной способности веществ и их устойчивости.

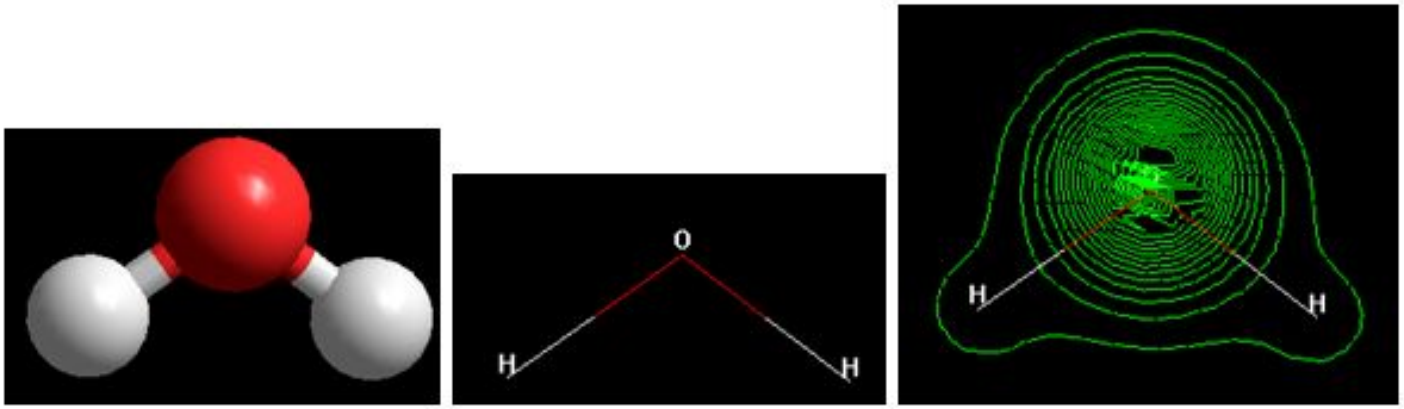
4. Имеет встроенную базу данных со значениями основных параметров химических элементов и некоторых молекул, и позволяет сохранить полученные результаты с возможность их дальнейшей обработки, а также имеет интуитивно простой интерфейс.

Объекты исследования

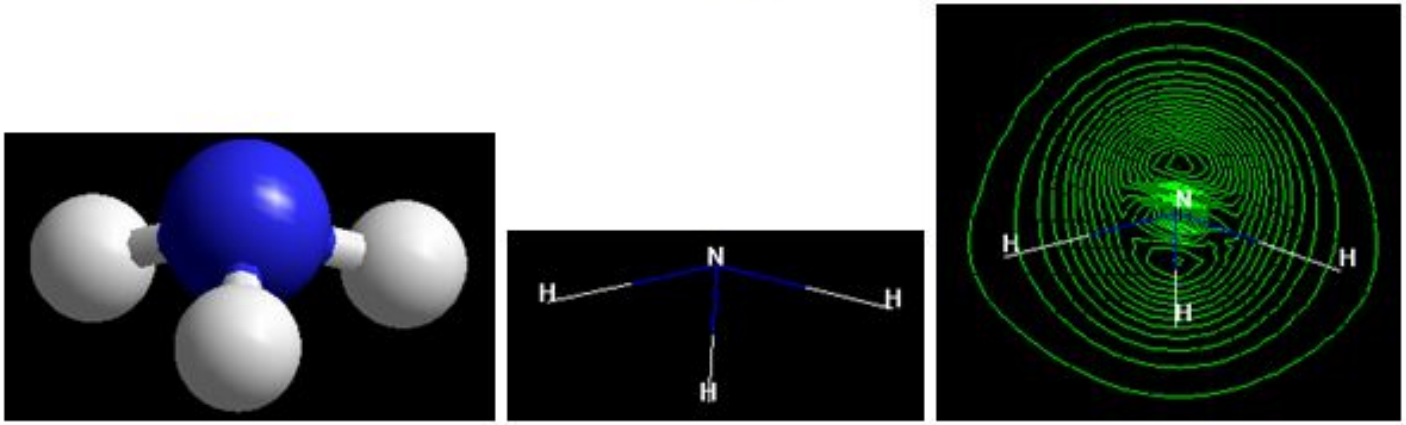
- Представители летучих водородных соединений некоторых неметаллов, в том числе галогеноводороды
- Кислородсодержащие кислоты галогенов, в том числе несуществующие кислоты фтора
- Отдельные органические соединения: глицин, молочная и уксусная кислоты

Визуализация строения объектов с помощью HyperChem 8.0

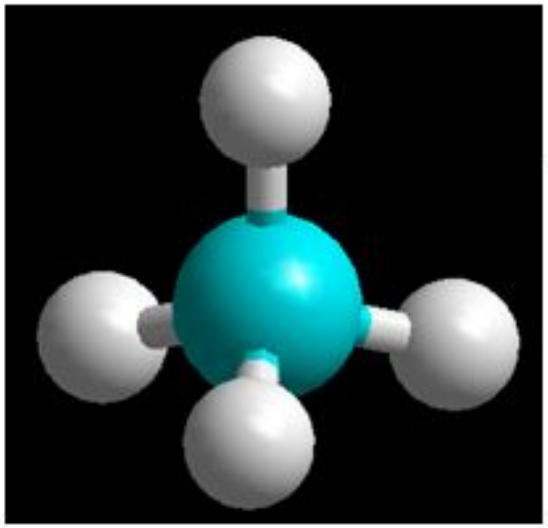
Вода (H_2O)

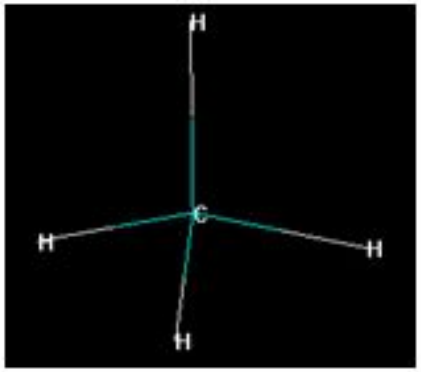


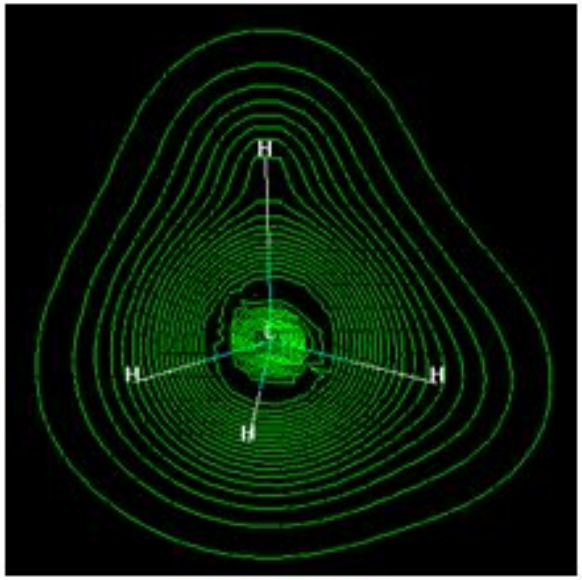
Аммиак (NH_3)



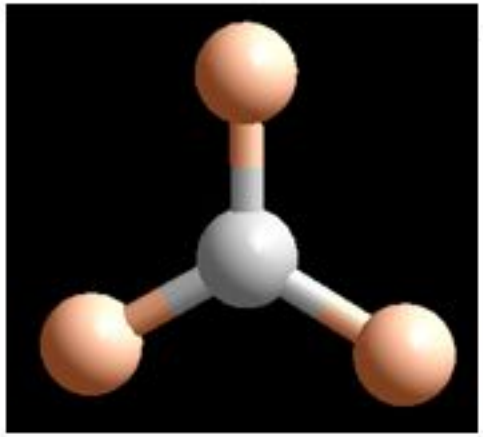
Метан (CH_4)

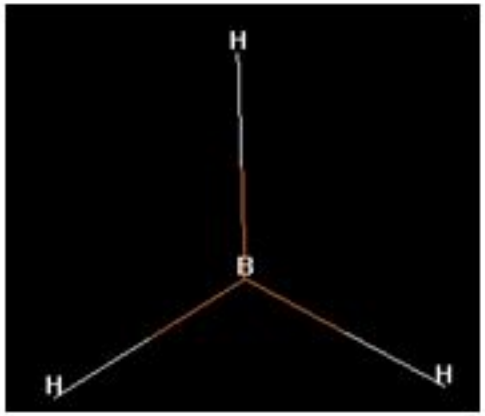


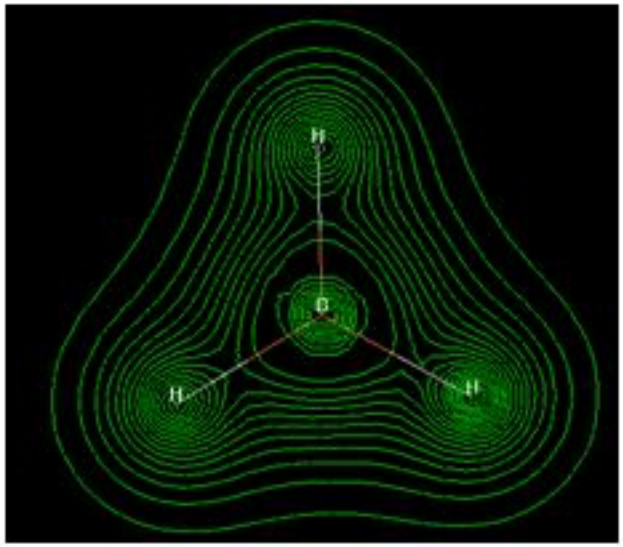




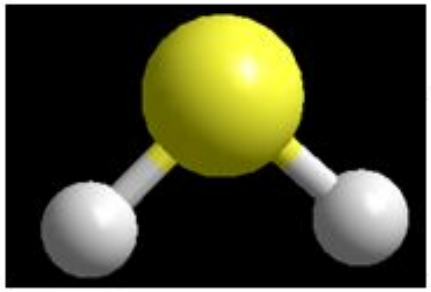
Боран (BH_3)

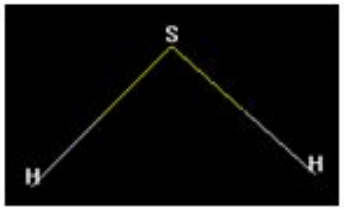


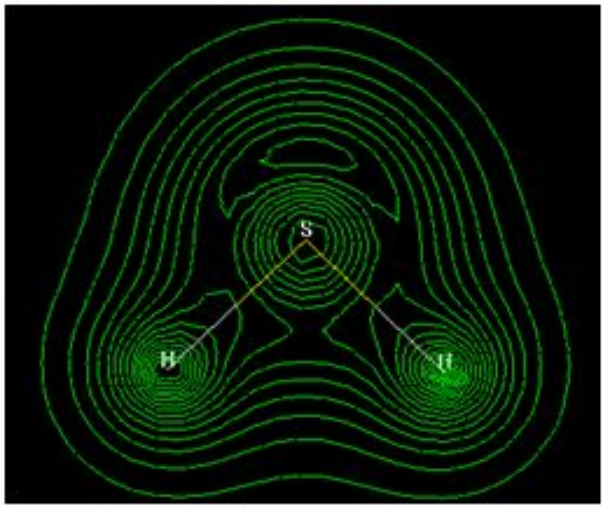




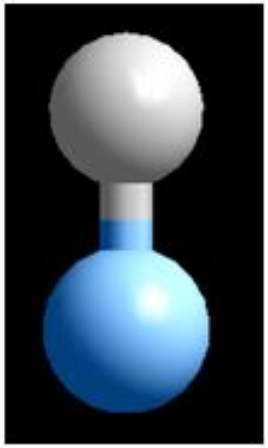
Сероводород (H_2S)

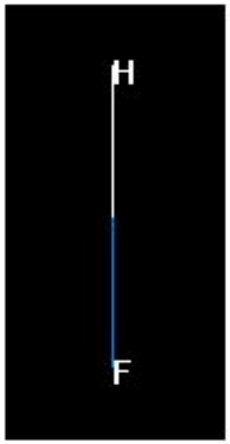


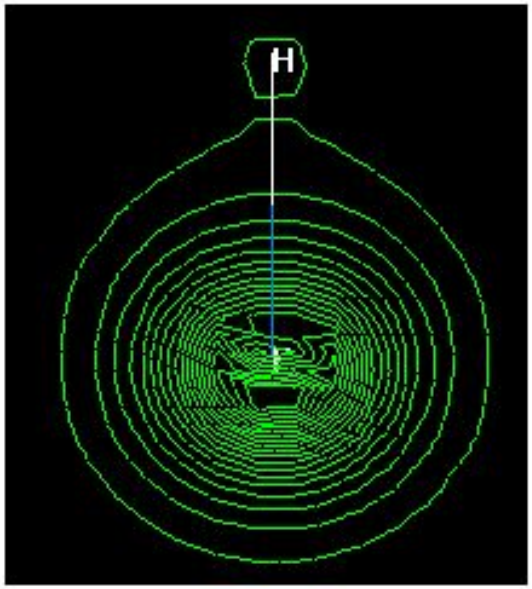




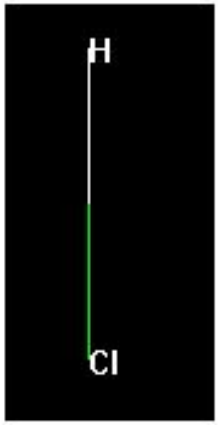
Фтороводород (HF)



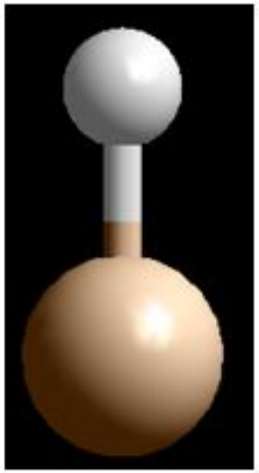


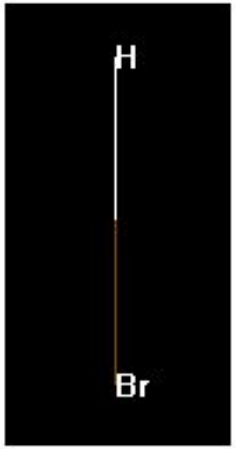


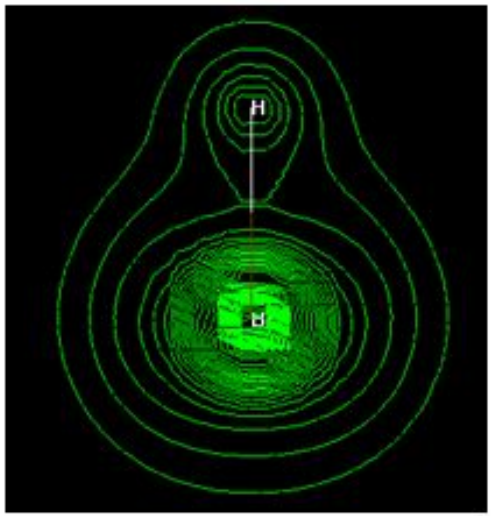
Хлороводород (HCl)



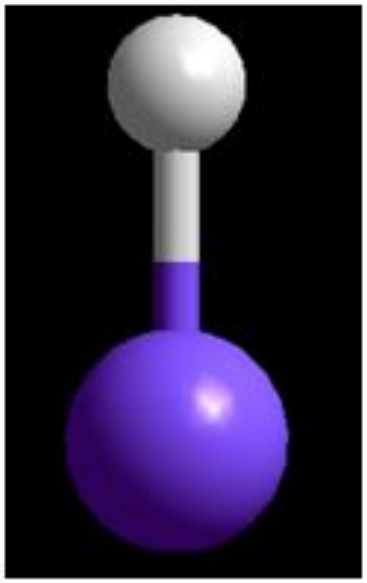
Бромоводород (HBr)

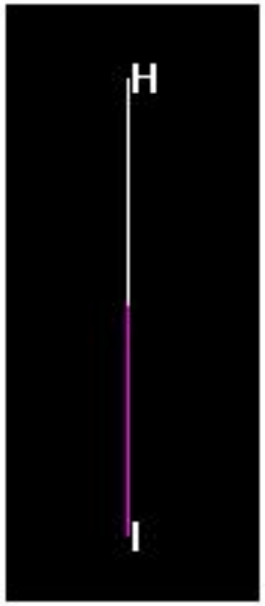


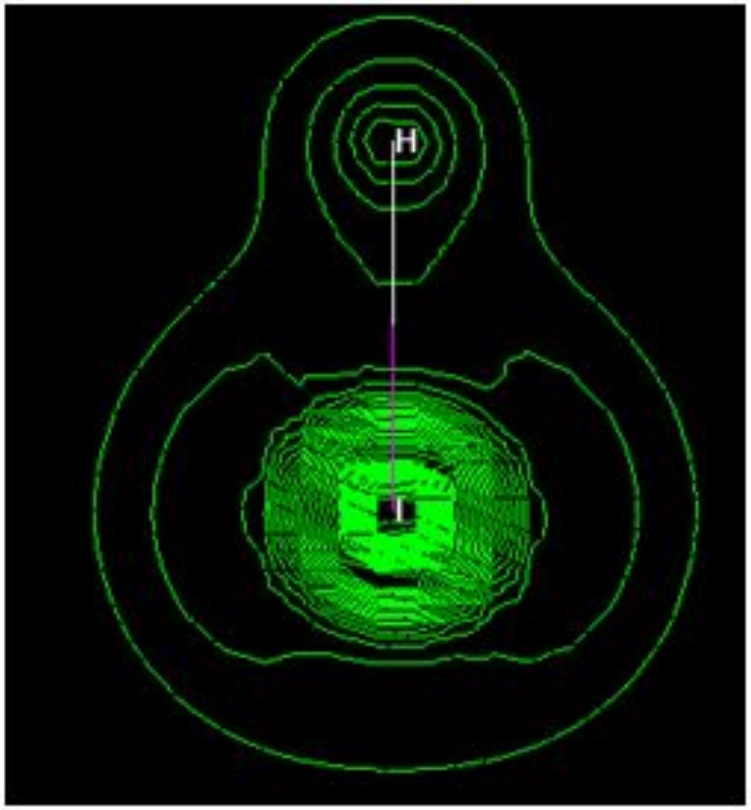




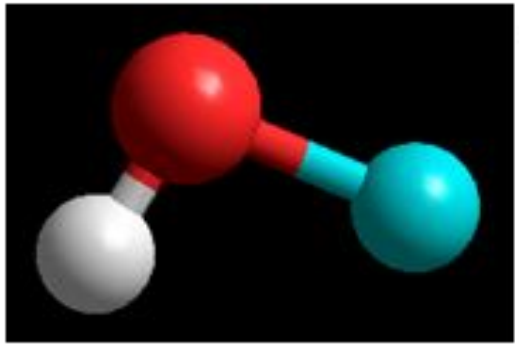
Иодоводород (HI)

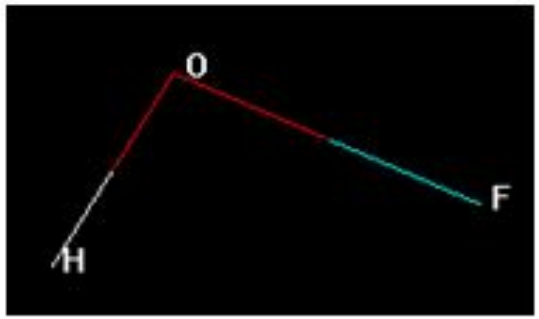


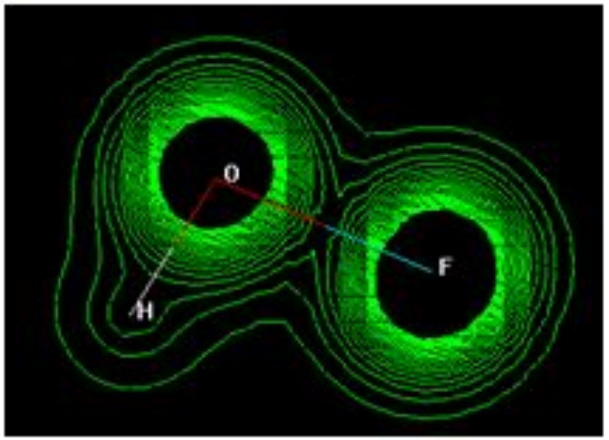




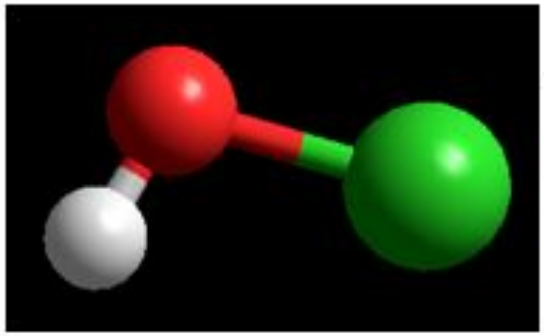
Фторноватистая кислота (HFO)

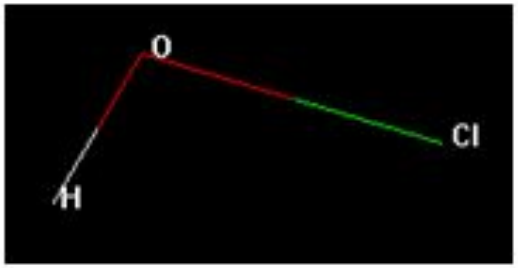


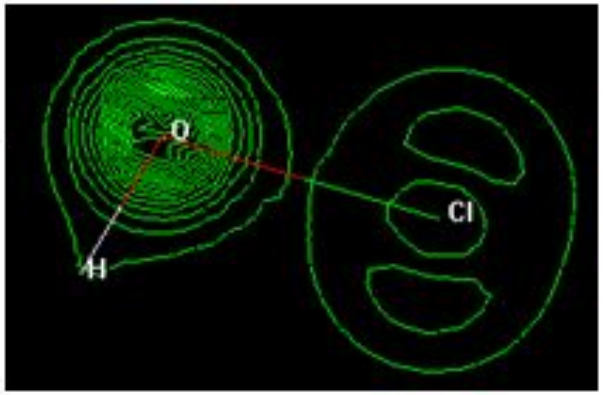




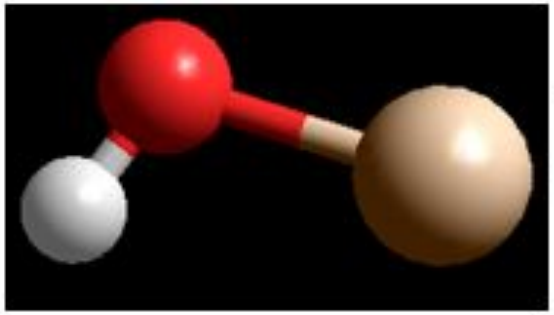
Хлорноватистая кислота (HClO)

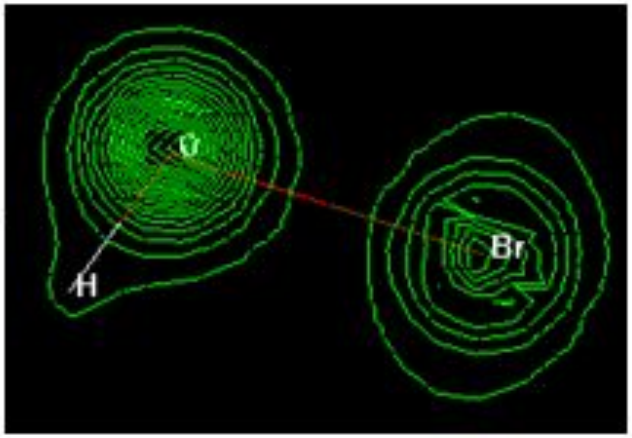




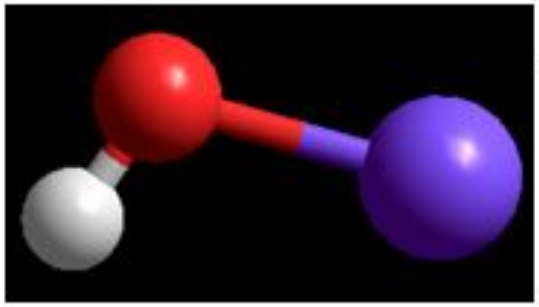


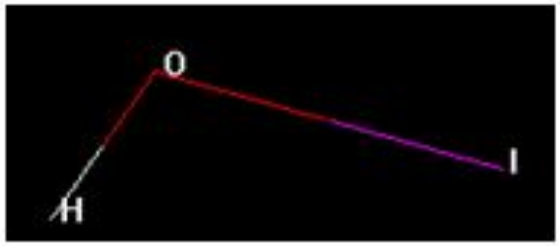
Бромноватистая кислота (HBrO)

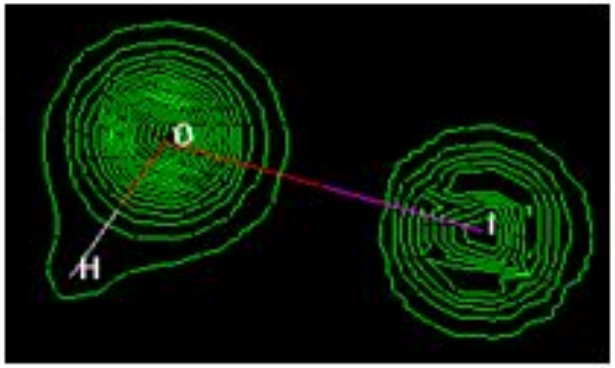




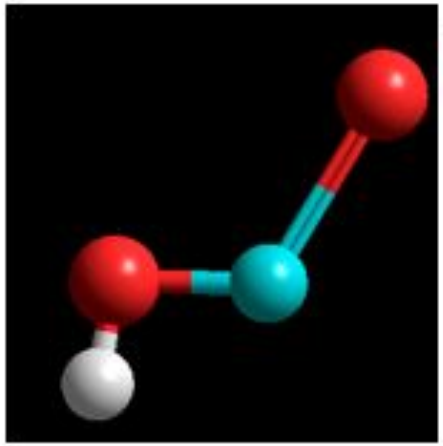
Иодноватистая кислота (HIO)

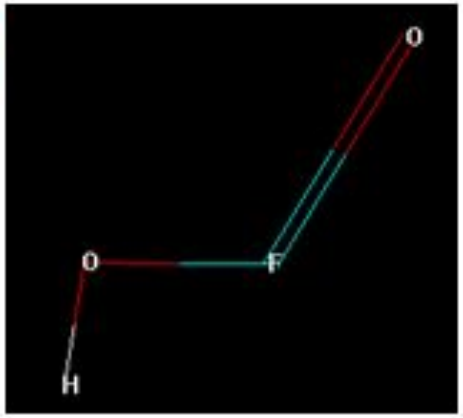


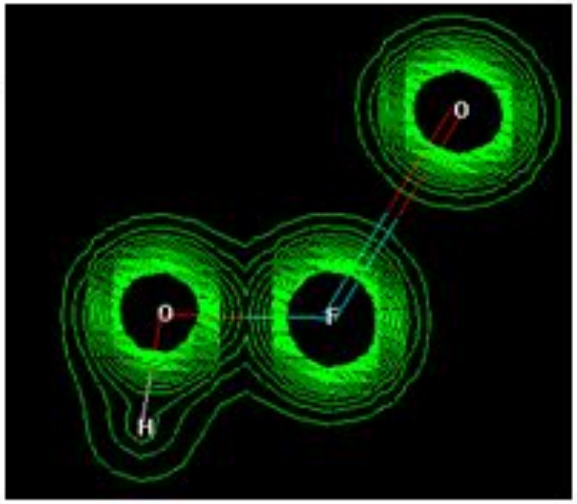




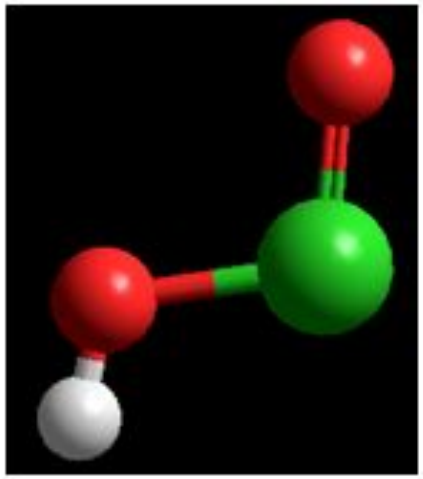
Фтористая кислота (HFO_2)

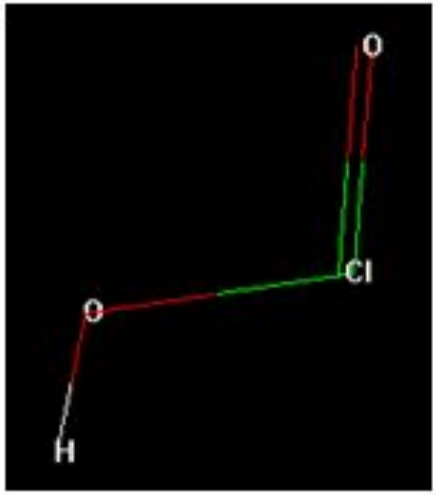


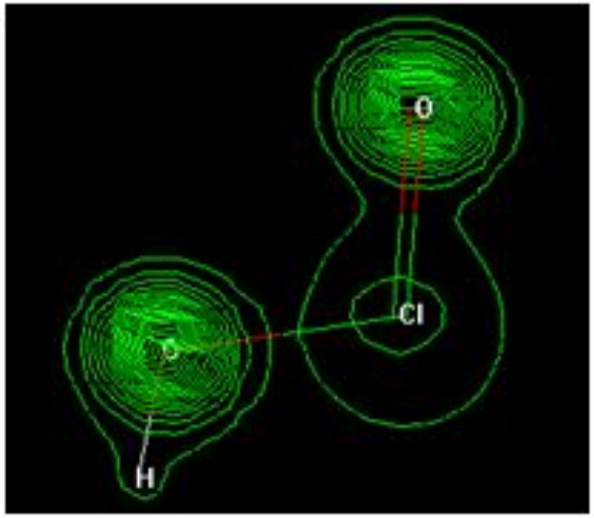




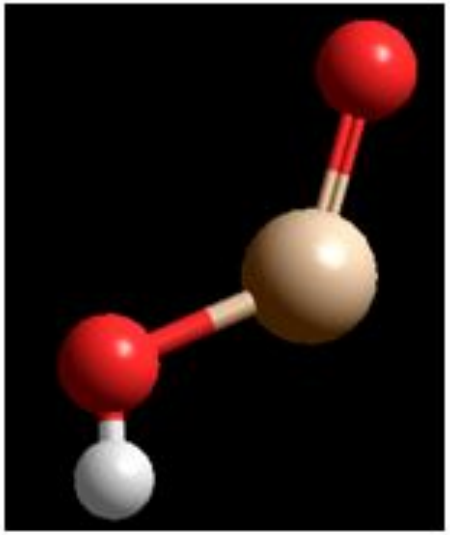
Хлористая кислота ($HClO_2$)

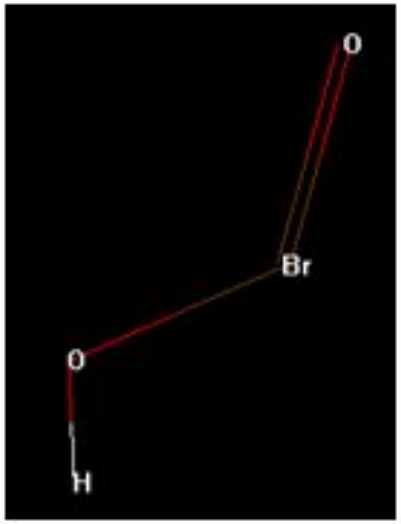


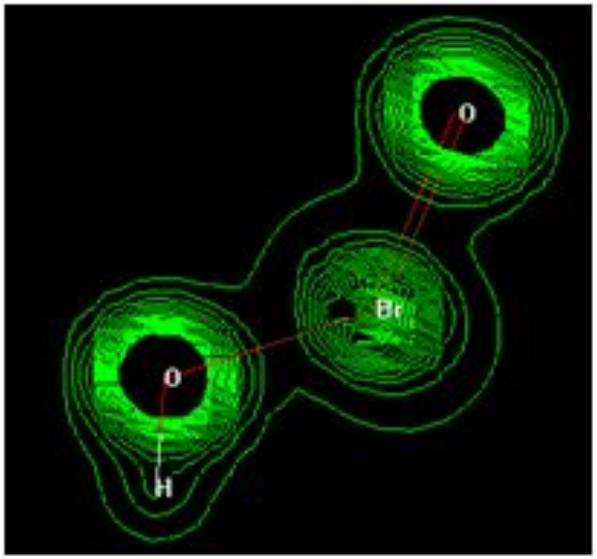




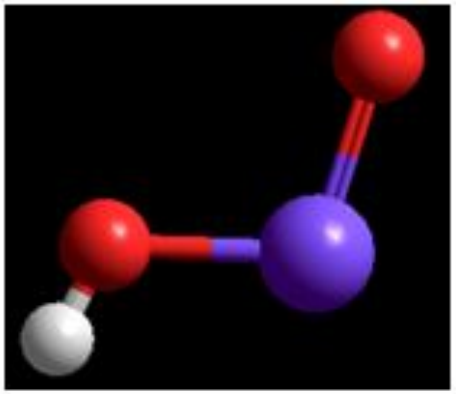
Бромистая кислота ($HBrO_2$)

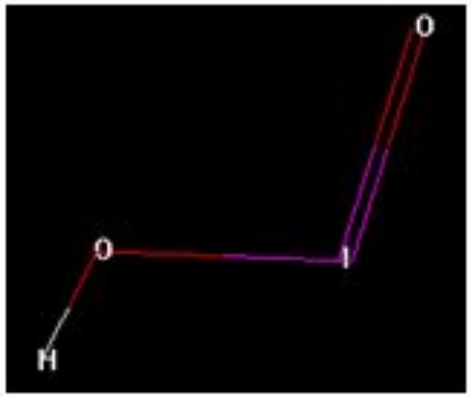


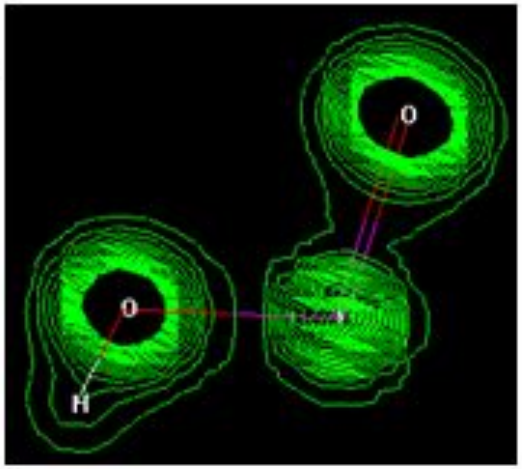




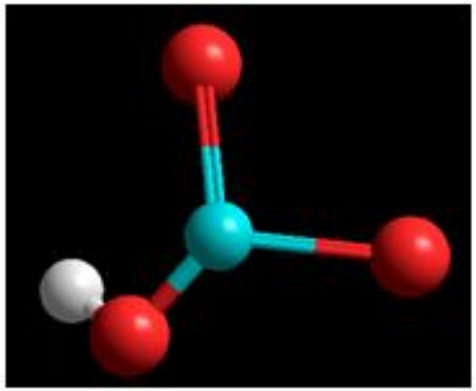
Иодистая кислота (HIO_2)

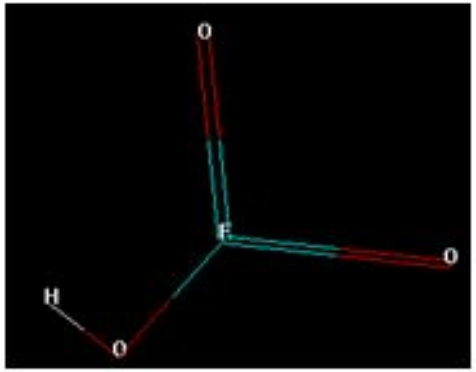


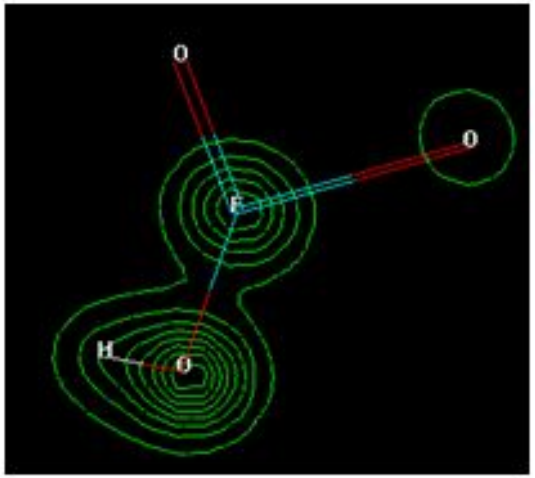




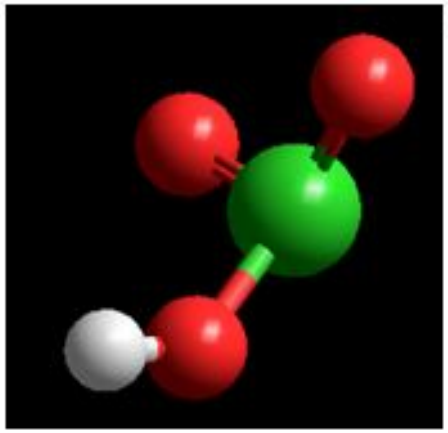
Фторноватая кислота (HFO_3)

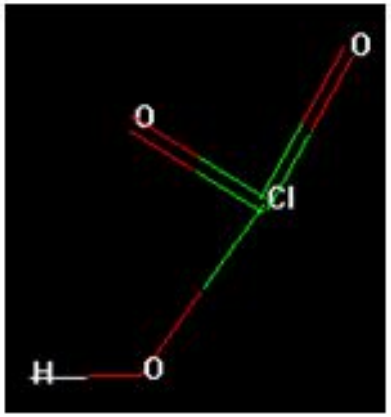




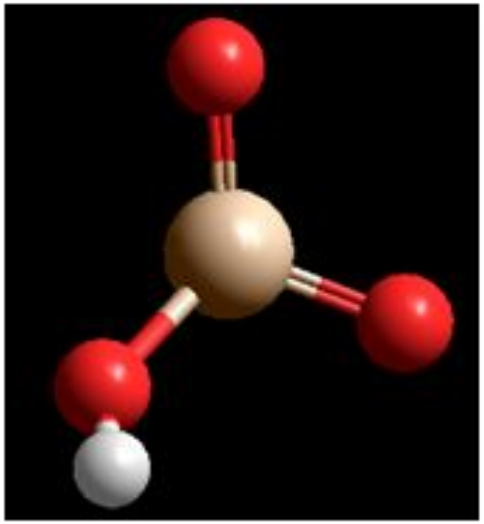


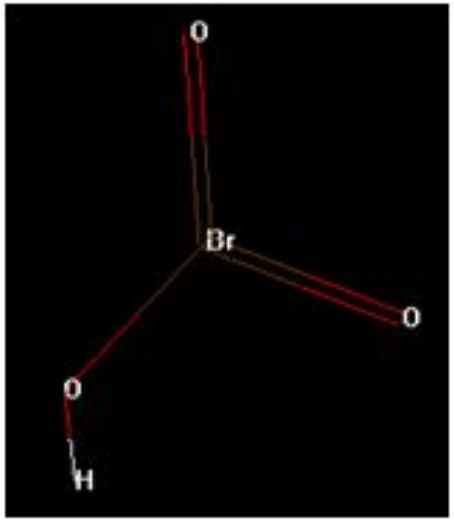
Хлорноватая кислота ($HClO_3$)

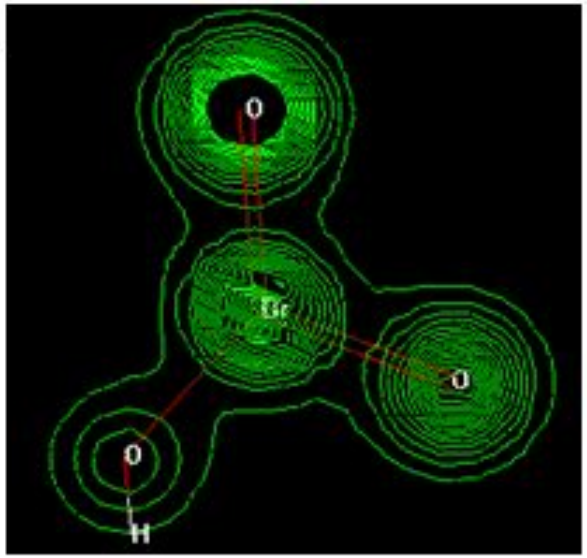




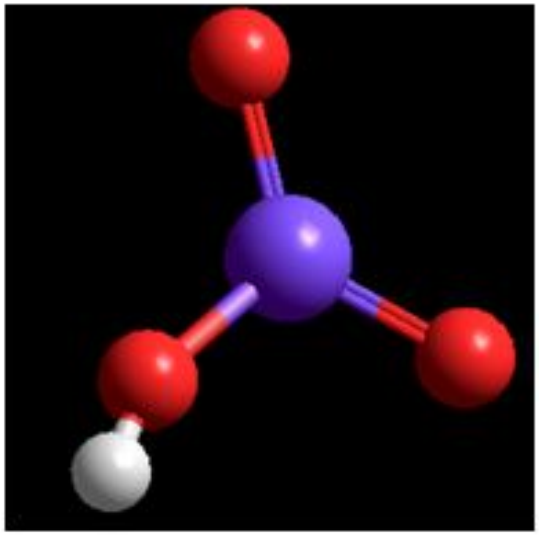
Бромноватая кислота ($HBrO_3$)

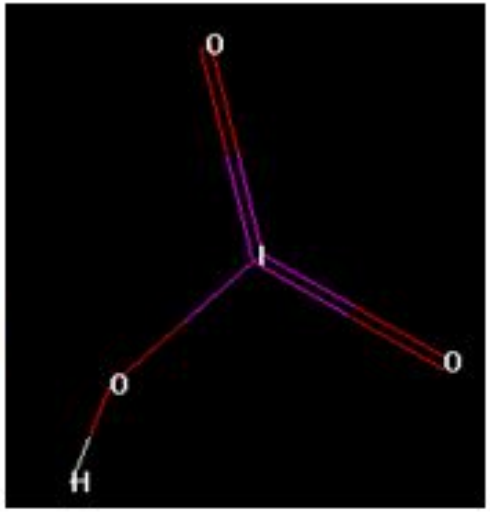


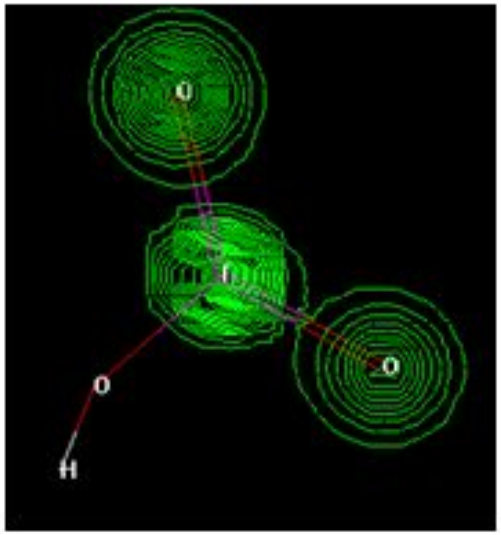




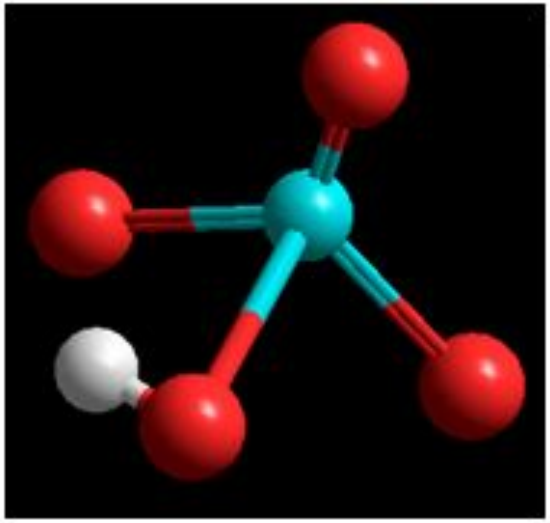
Иодноватая кислота (HIO_3)

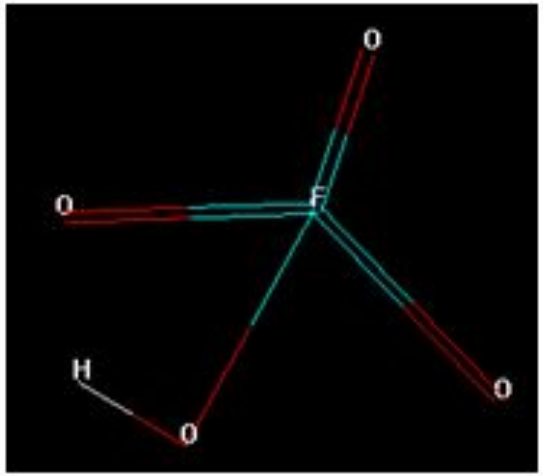


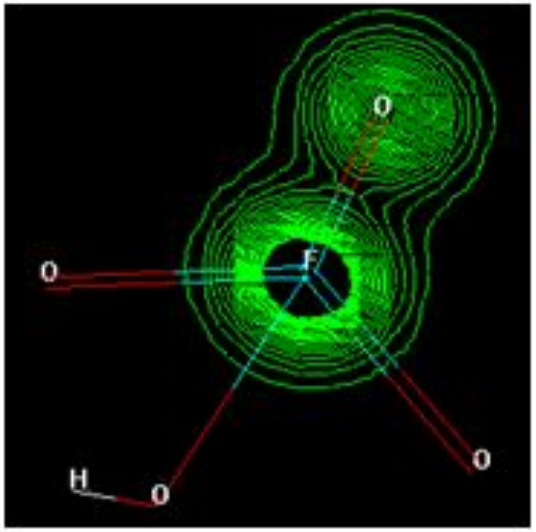




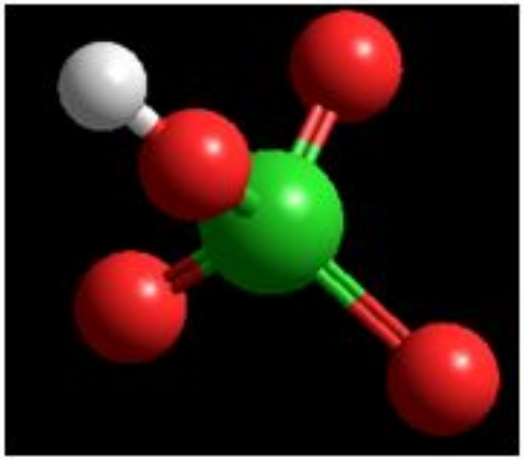
Фторная кислота (HFO_4)

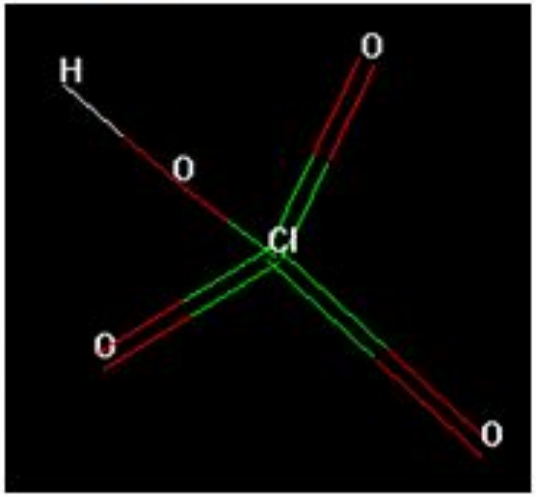


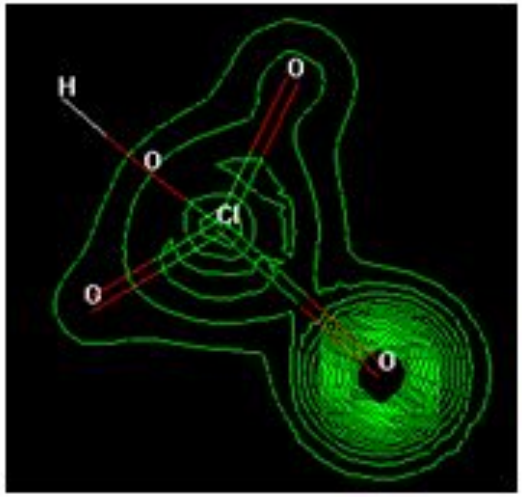




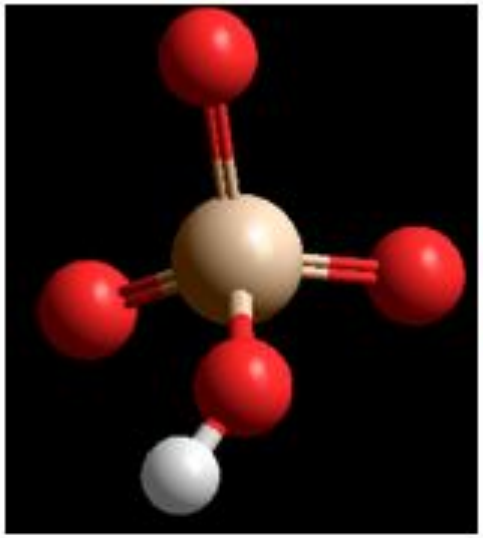
Хлорная кислота ($HClO_4$)

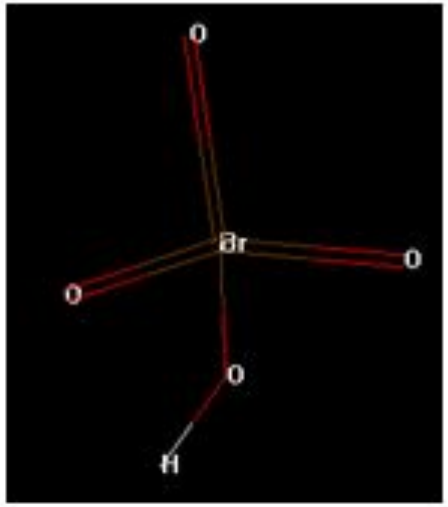


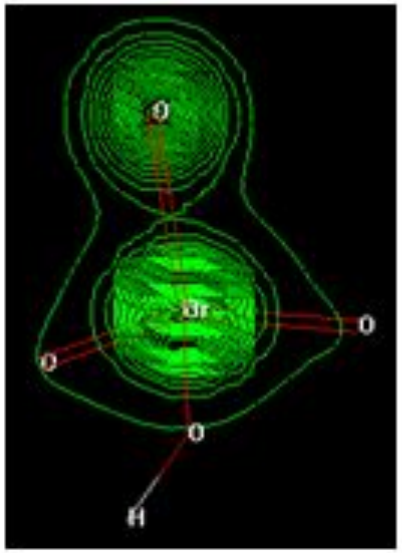




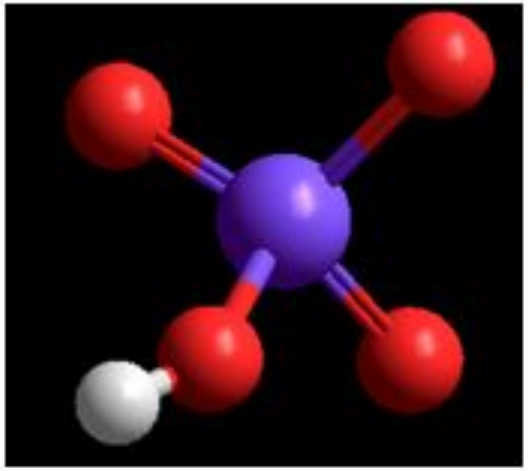
Бромная кислота ($HBrO_4$)

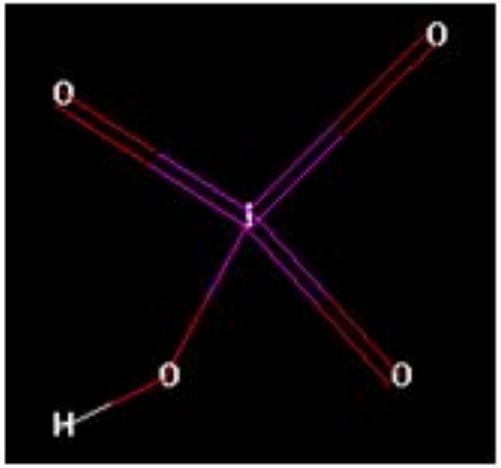


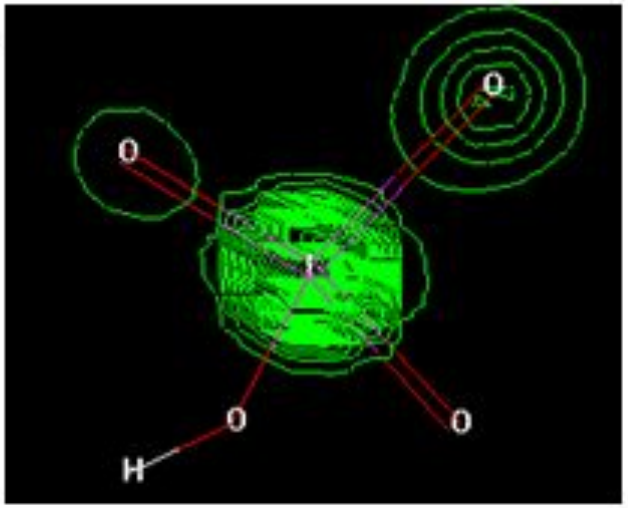




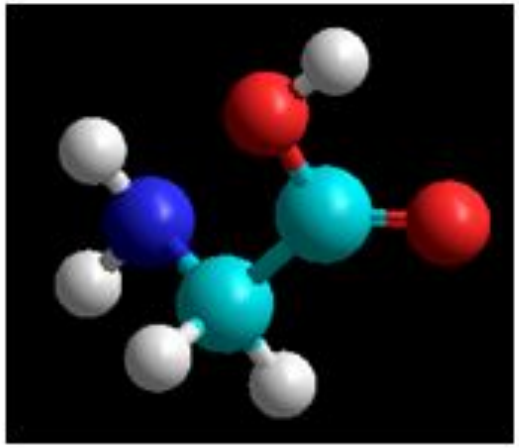
Иодная кислота (HIO_4)

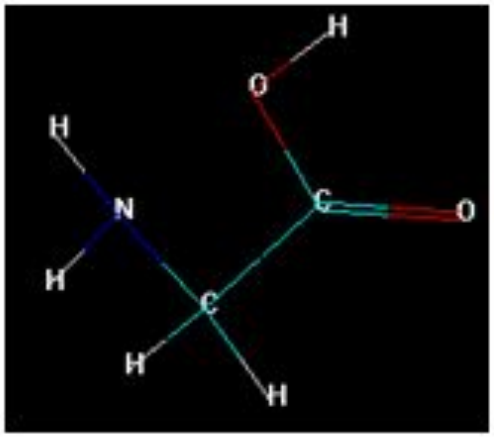


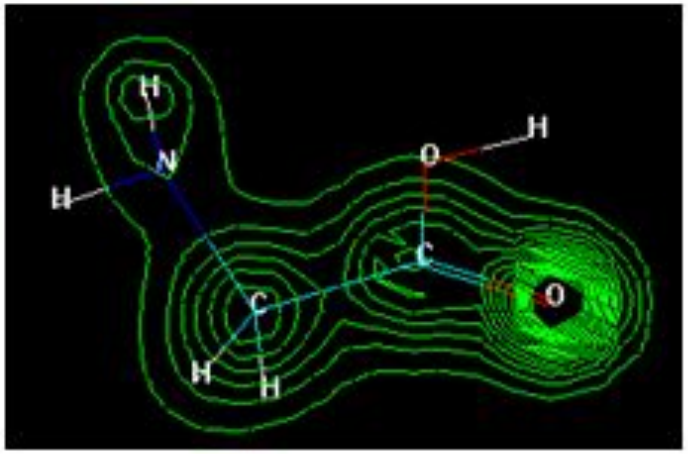




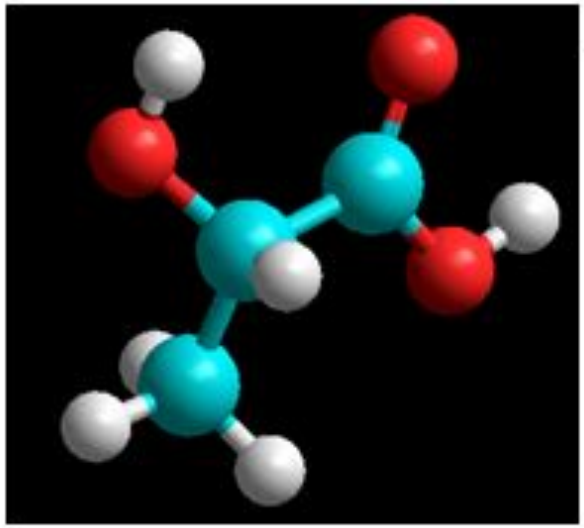
Аминоуксусная кислота (глицин, NH_2CH_2COOH)

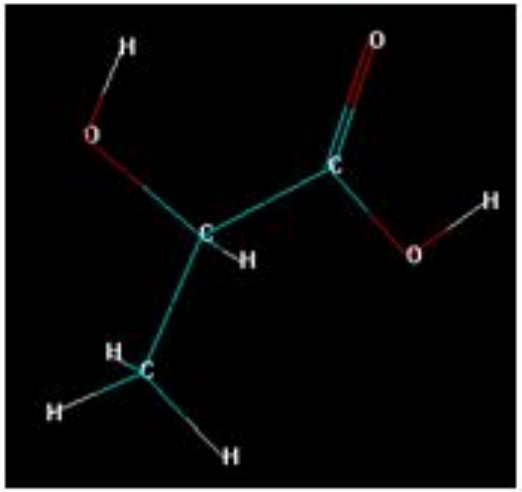


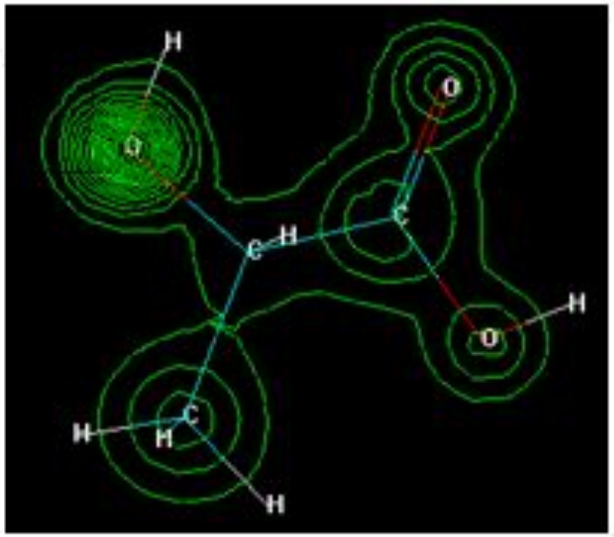




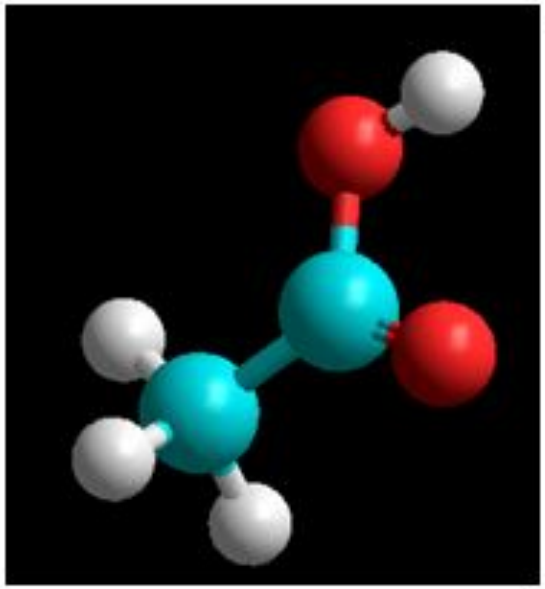
2-Оксипропановая кислота (молочная кислота, $CH_3CH(OH)COOH$)

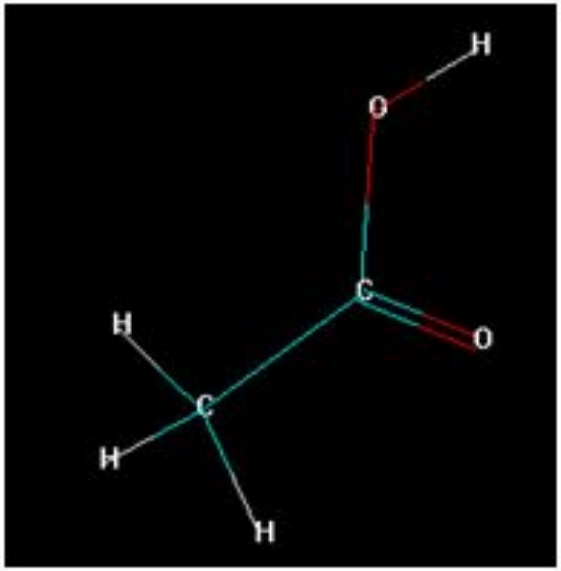






Уксусная кислота (CH_3COOH)





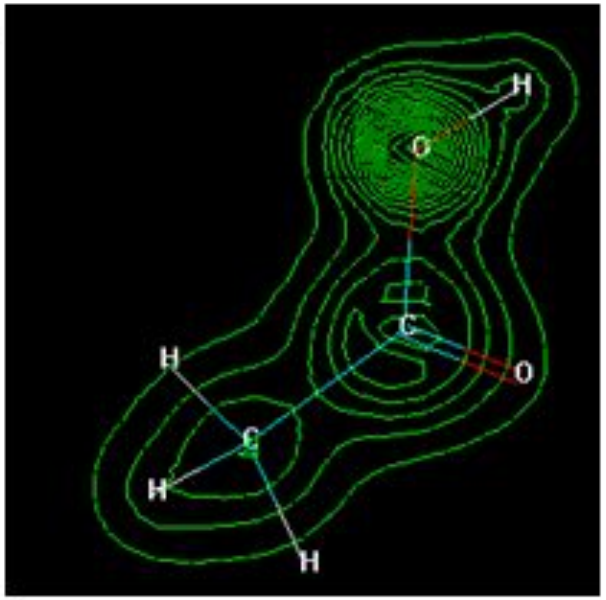


Таблица 1. Летучие водородные соединения отдельных неметаллов

№ п/п	Объект исследования (название, формула)	Длины химических связей (Å)	Валентный угол, ^{0}	Дипольный момент (дебай)	Энтальпия образования (ΔH^0), ккал/моль	Полная энергия молекулы, ккал/моль
1	Вода H_2O	H-O: 0,951	107,74	1,739	-53,46	-7493
2	Аммиак NH_3	N-H: 1,000	108,08	1,549	-3,10	-4812
3	Метан CH_4	C-H: 1,087	109,47	0	-13,07	-4163
4	Боран BH_3	B-H: 1,198	120	0	34,40	-2610
5	Сероводород H_2S	H-S: 1,291	93,53	1,777	-0,93	-5005

Таблица 2. Галогеноводороды

Параметр	HF	HCl	HBr	HI
Длины химических связей, Å	0,938	1,268	1,471	1,677
Дипольный момент, дебай	1,404	1,379	1,270	0,949
Энтальпия образования (ΔH), ккал/моль	-62,764	-20,477	5,304	28,793
Полная энергия молекулы, ккал/моль	-10525	-7672	-8505	-6999

Выводы:

1. Критически проанализированы литературные источники по молекулярному компьютерному моделированию, а также основам неорганической и квантовой химии.
2. Освоен алгоритм работы в программном комплексе HyperChem 8.0.
3. Выбраны соответствующие объекты для моделирования.
4. Построены 3-D модели химических соединений.
5. Произведен квантово-химический расчёт перечисленных выше химических соединений и определены валентные углы, длины химических связей, дипольные моменты, а также значения энтальпий образования этих соединений и их полная энергия.

Спасибо за внимание!