

Моделирование строения химических соединений с использованием программного комплекса HyperChem 8.0

Учитель химии: Пономаренко О.А.

г. Егорьевск, МОУ СОШ №13, 2018

г.

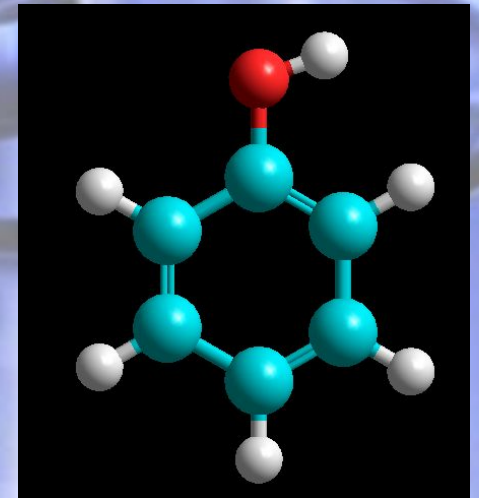
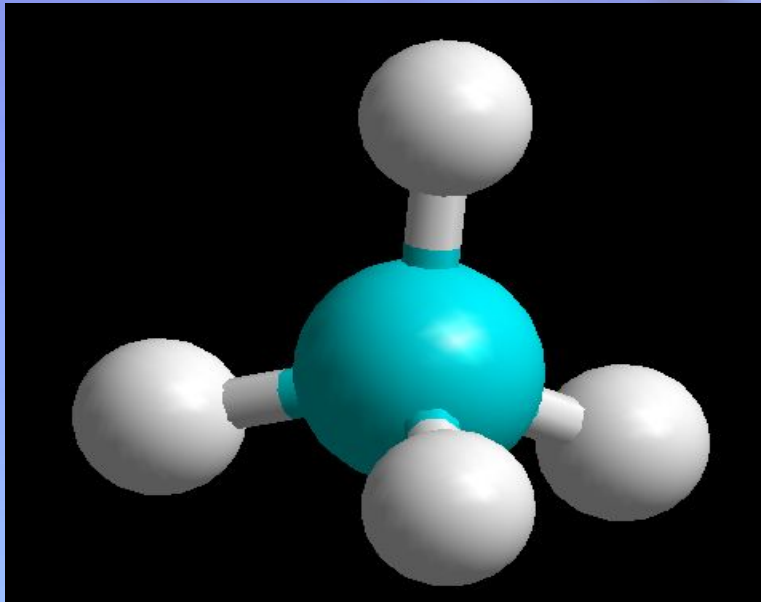
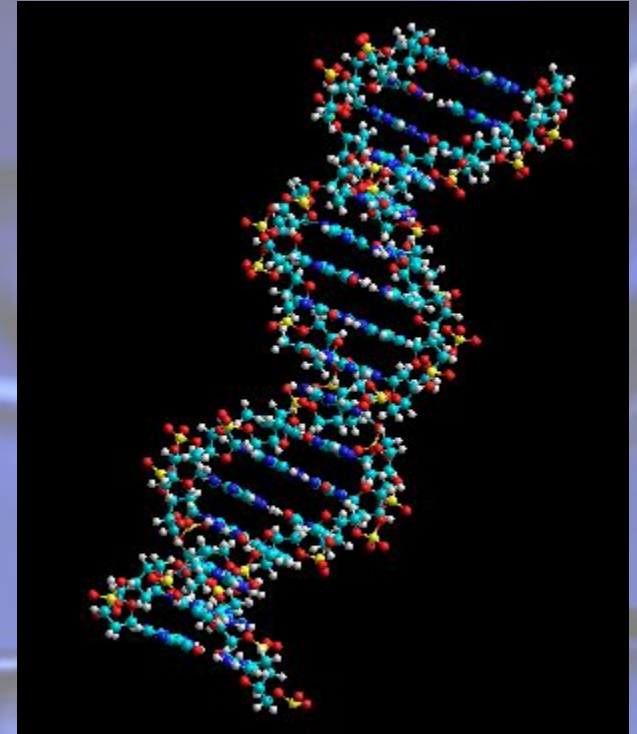
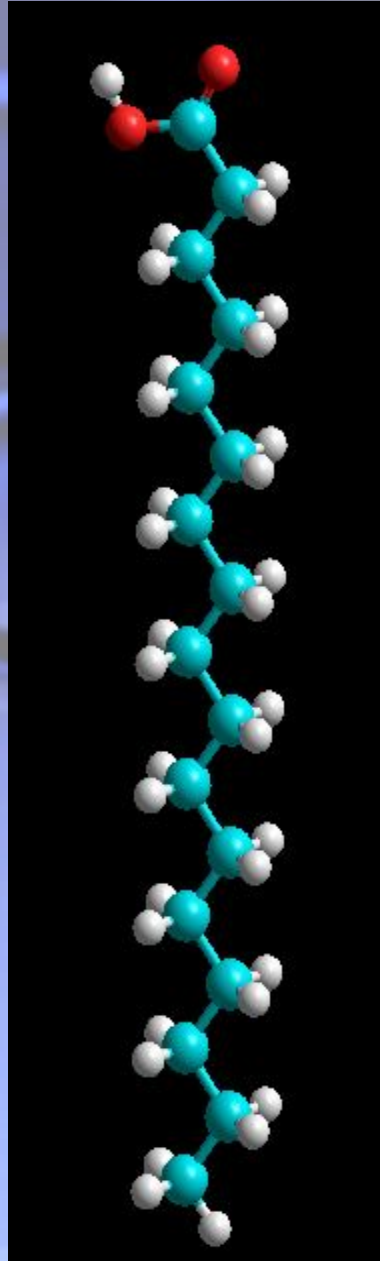
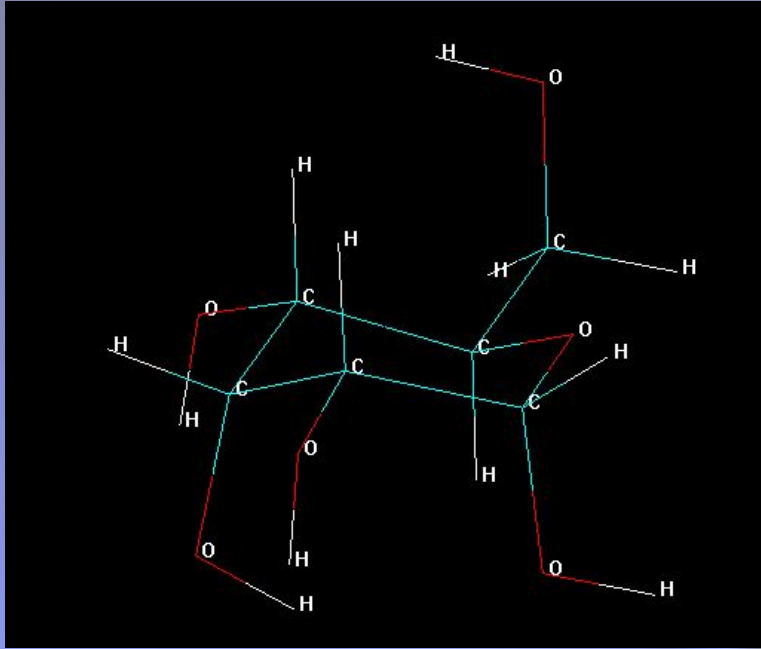
Цель работы:

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

Неорганическая

Органическая

Аналитическая

Биологическая

ХИМИЯ

Физическая

Квантовая химия

Химическая
кинетика

Химическая
термодинамика

Программы, используемые для проведения квантово-химических расчётов

Gaussian 03

Major New Features:

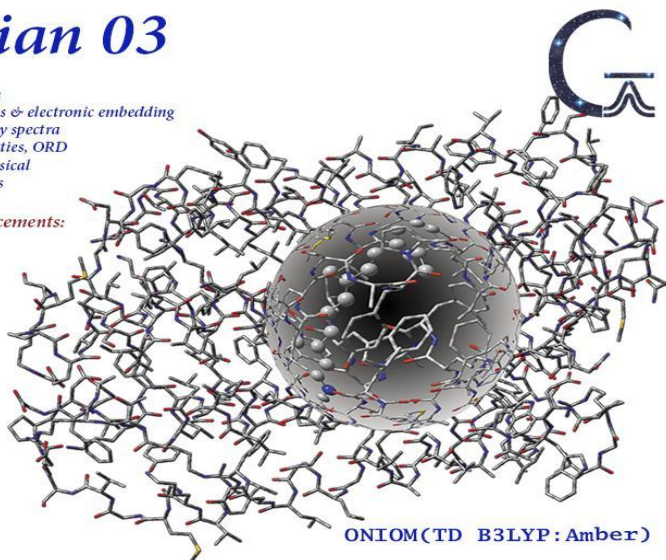
- ◆ ONIOM optimizations & electronic embedding
- ◆ Raman optical activity spectra
- ◆ Electro-optical properties, ORD
- ◆ ADMP & BOMD classical trajectory calculations

Performance Enhancements:

- ◆ Enhanced FMM
- ◆ $\mathcal{O}(N)$ exact exchange

Challenging Calculation:

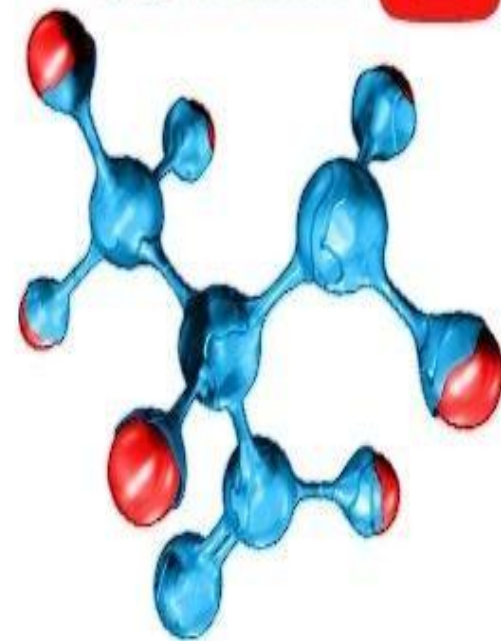
- ◆ Bacteriorhodopsin $S_0 \rightarrow S_1$ excitation



New Release of HyperChem 8 now available

What's new

- Third-Party Interfaces
- Batch Capabilities
- Double Precision
- Undo and Redo
- Recent Files List
- Geometric Measurements
- Chemical Substituents
- Entropy and Free Energy
- Heat Capacities
- Zero-point Energies
- Rate Constants
- Equilibrium Constants
- MP2 additions
- Configuration Interaction
- Temperature
- LineWidths
- MM-QM
- Fixed Atoms
- Electric Fields
- New Visualization
- Vibrational Analysis
- Particle in a Box
- Multiple Unit Systems
- RM1 Semi-empirical Method



$$\sum_{\text{dihedrals}} \frac{V_1}{2}(1 + \cos\phi) + \frac{V_2}{2}(1 - \cos 2\phi) + \frac{V_3}{2}(1 + \cos 3\phi)$$

Kopona.NET

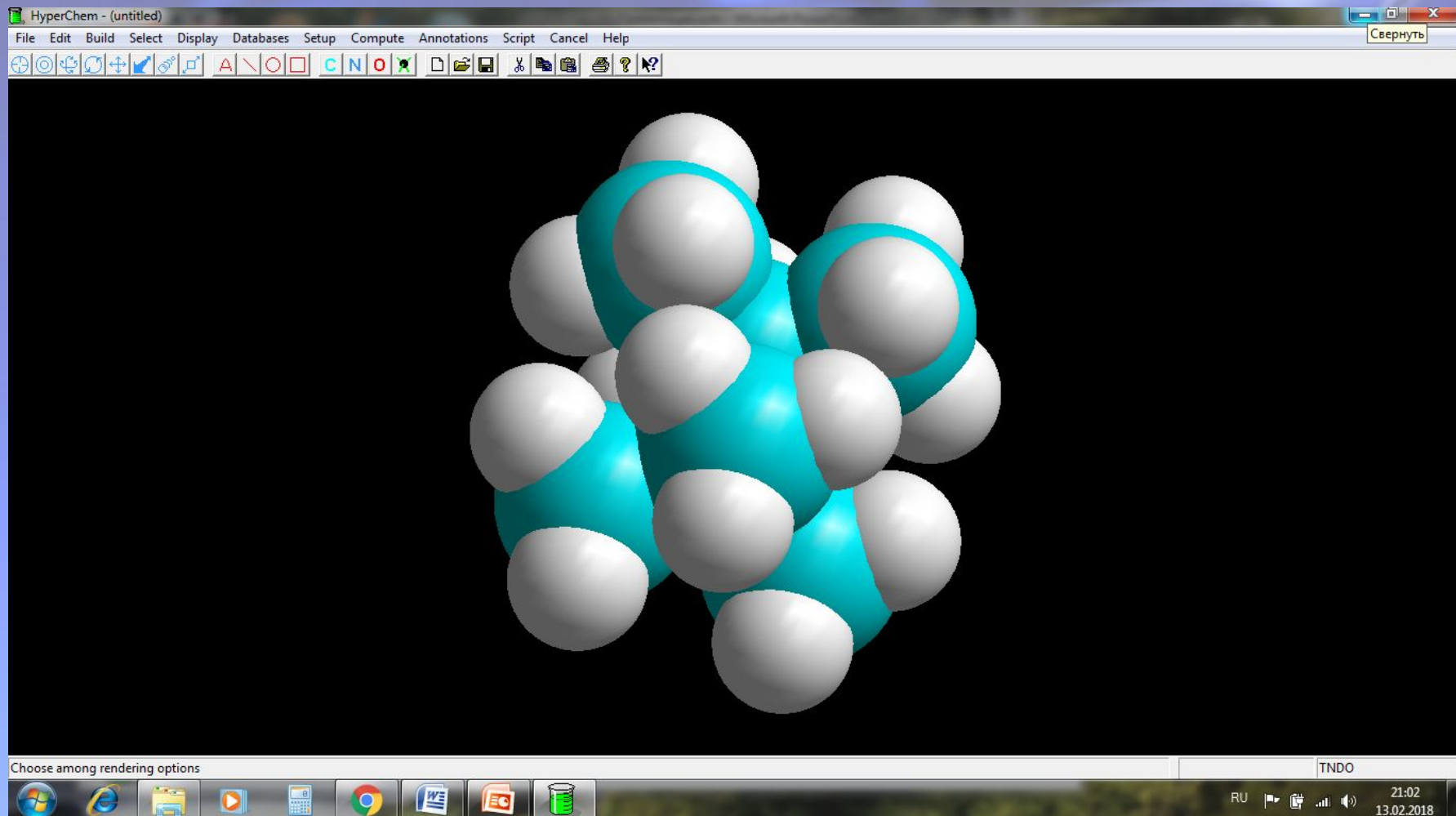
WinMOPAC - D:\WinMOPACv2\ex1#c2h4.wmp

File Edit Information Calculation Background View Help

Heat of Formation = 16.60848 kcal/mol

Cycle = 6 H.O.F = 16.608481 k GNorn

Программный комплекс HyperChem 8.0



Возможности HyperChem 8.0, необходимые для реализации поставленной цели

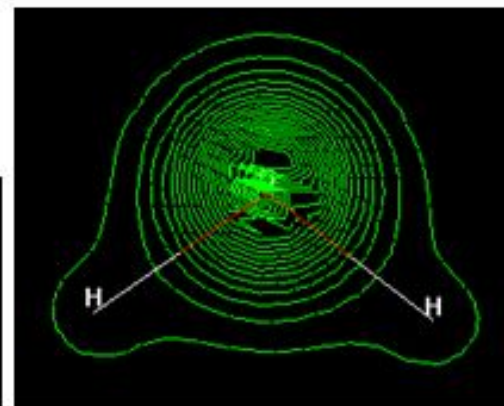
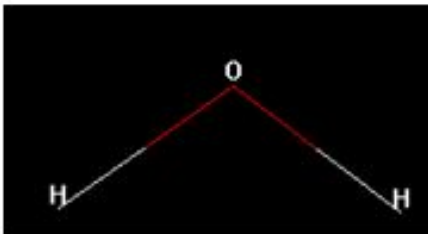
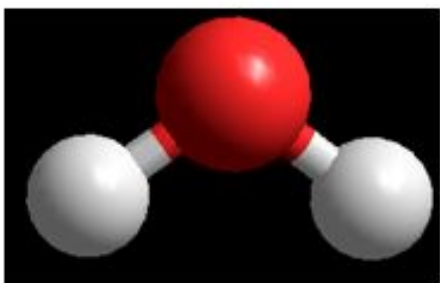
- 1. Совместимость с 64-х битной операционной системой Windows;**
- 2. Построение 3-D моделей молекул веществ, наглядно демонстрирующих качественный и количественный состав молекул, их пространственное строение, а также распределение электронной плотности между атомами в молекуле.**
- 3. Позволяет проводить 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 возможностью их дальнейшей обработки, а также имеет интуитивно простой интерфейс.**

Объекты исследования

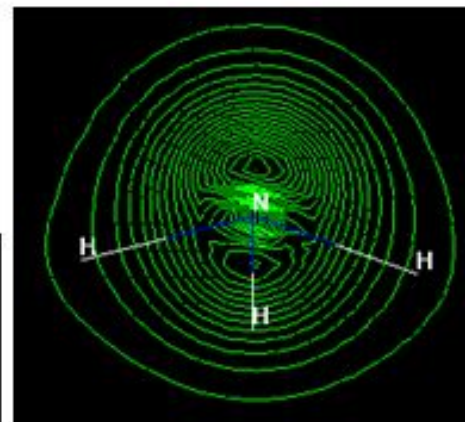
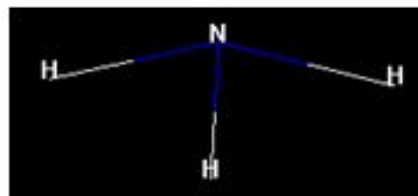
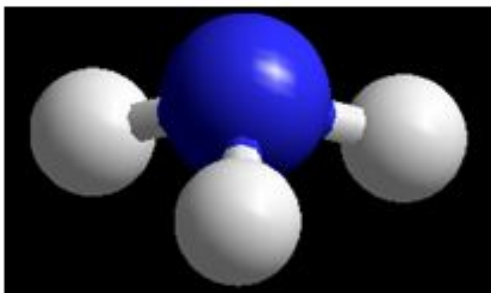
- Представители летучих водородных соединений некоторых неметаллов, в том числе галогеноводороды**
- Кислородсодержащие кислоты галогенов, в том числе несуществующие кислоты фтора**
- Отдельные органические соединения: глицин, молочная и уксусная кислоты**

Визуализация строения объектов с помощью HyperChem 8.0

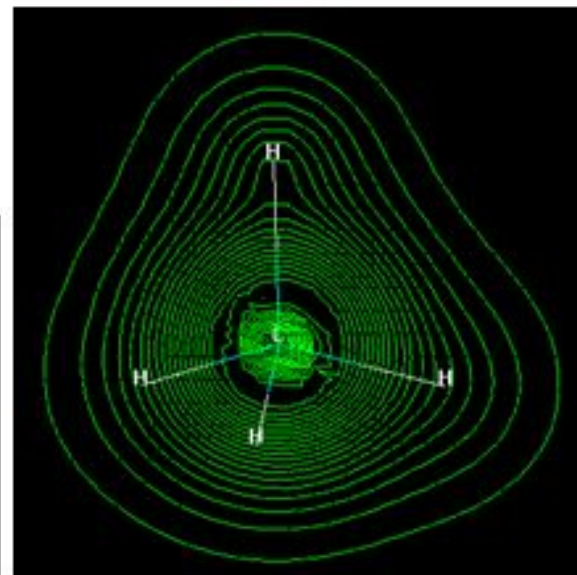
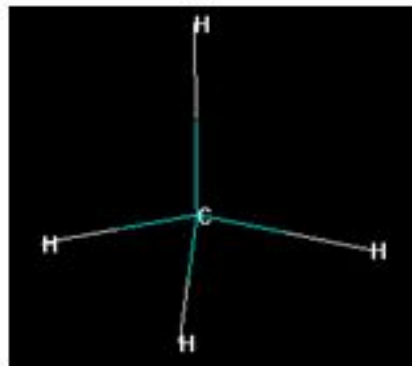
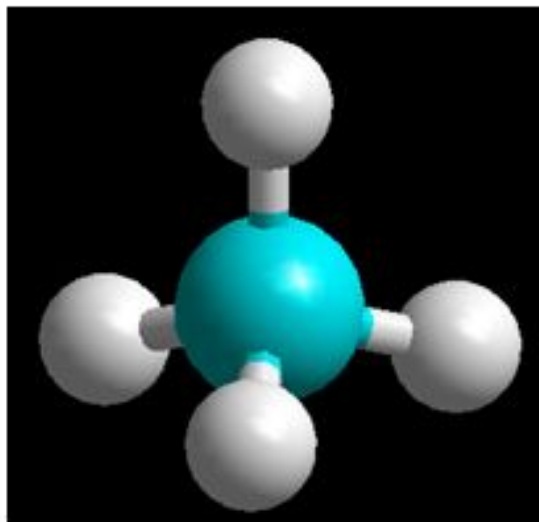
Вода (H_2O)



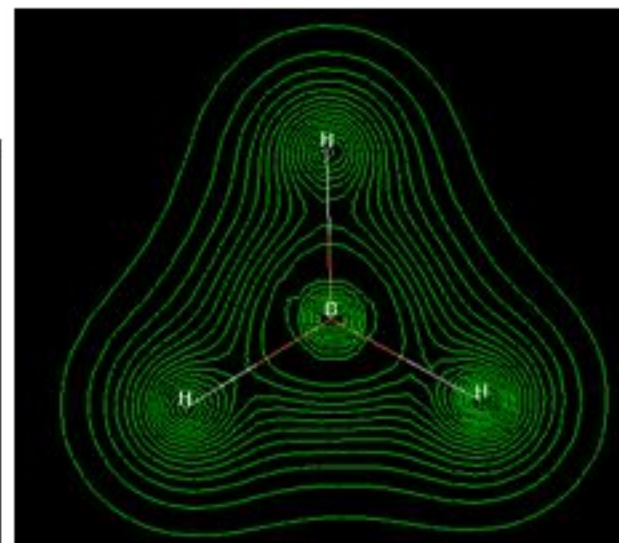
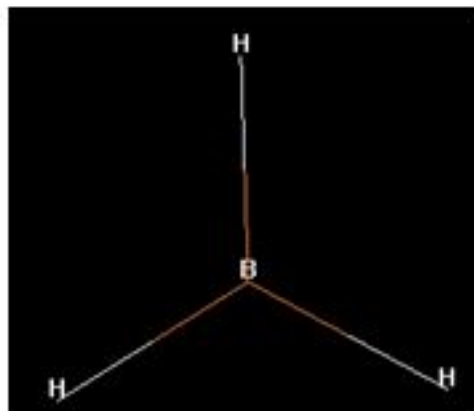
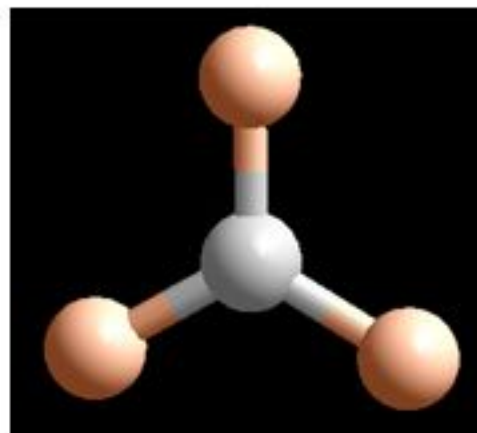
Аммиак (NH_3)



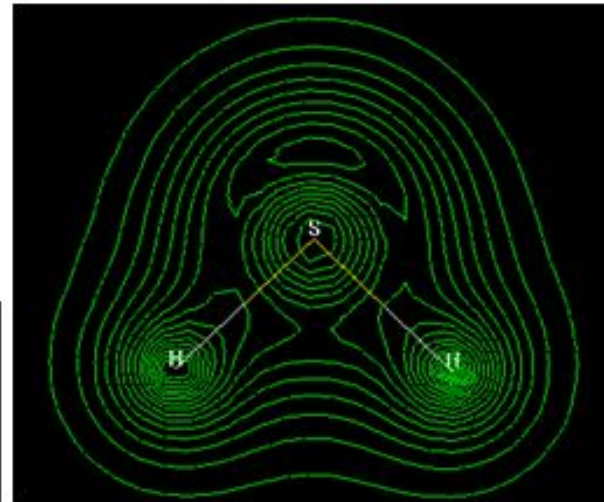
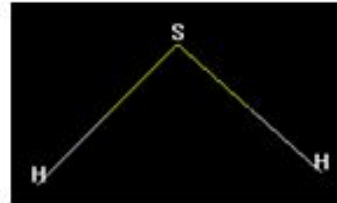
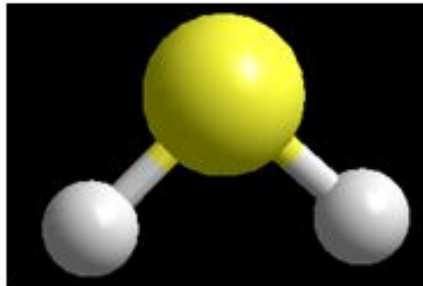
Метан (CH_4)



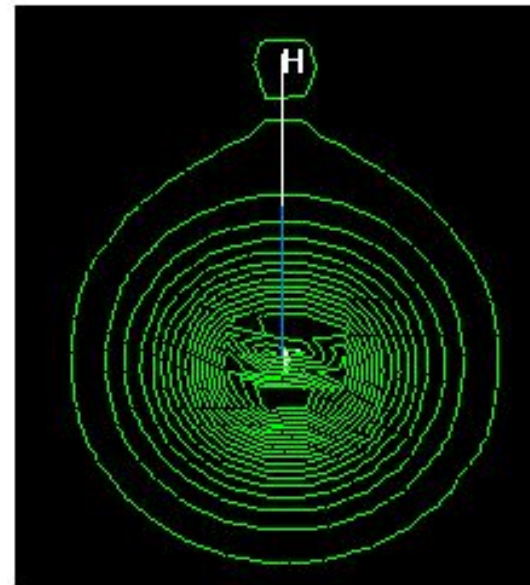
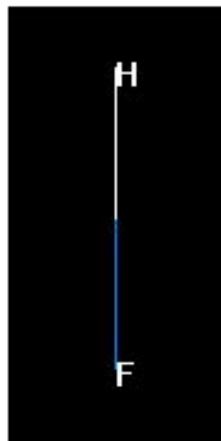
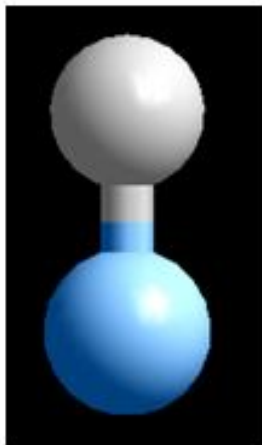
Боран (BH_3)



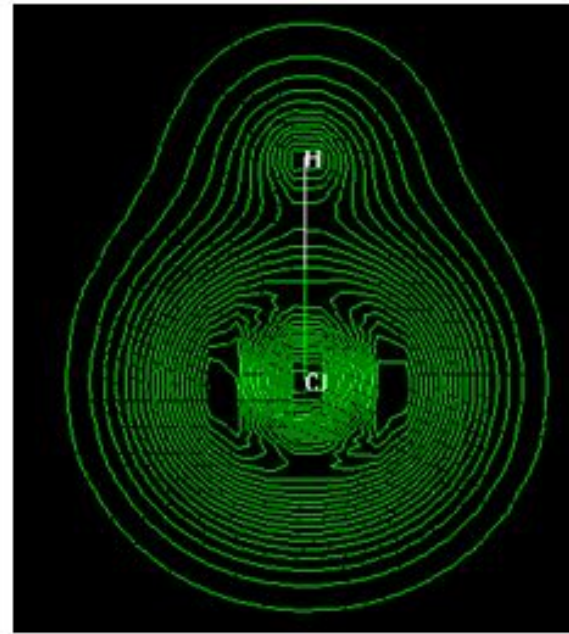
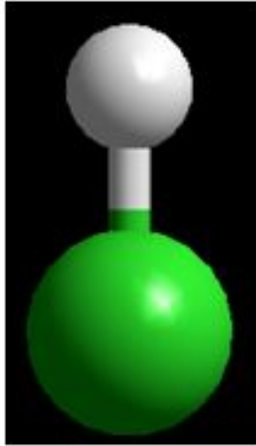
Сероводород (H_2S)



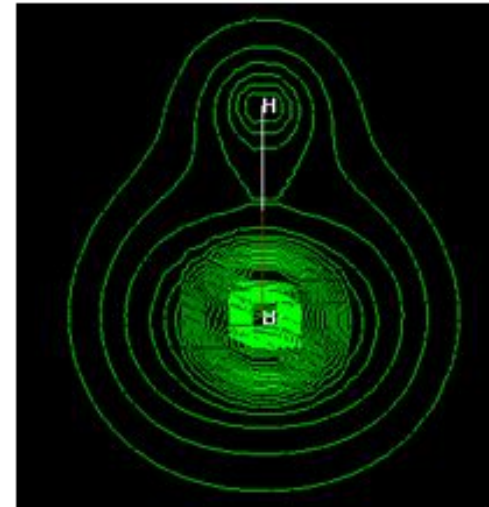
Фтороводород (HF)



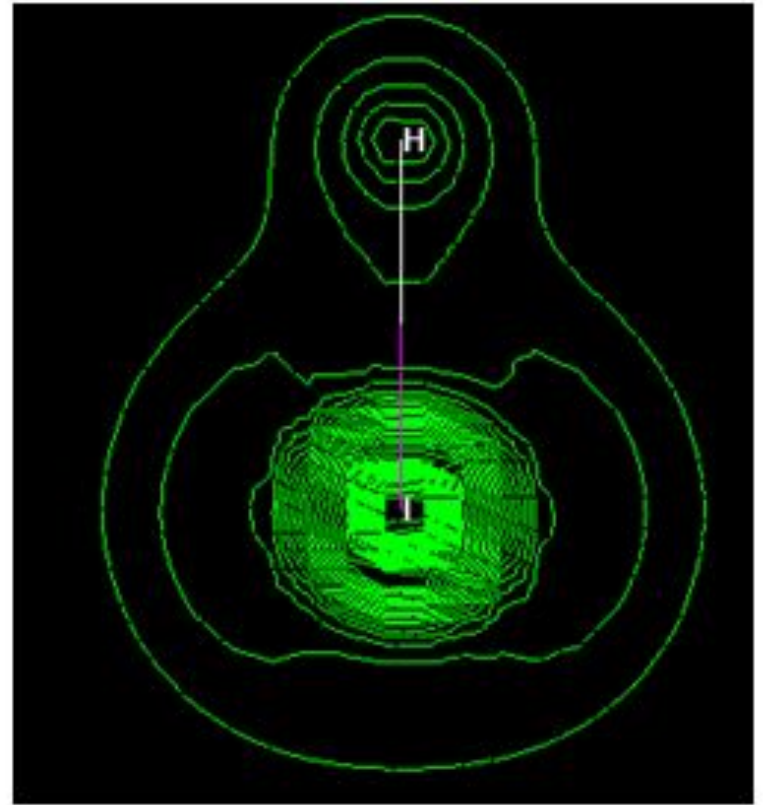
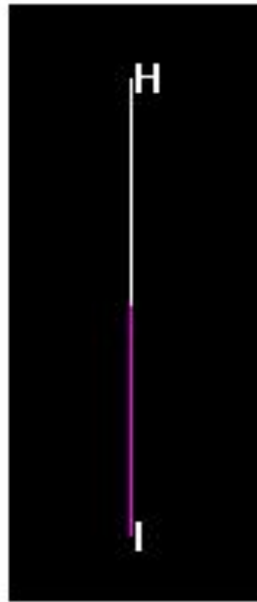
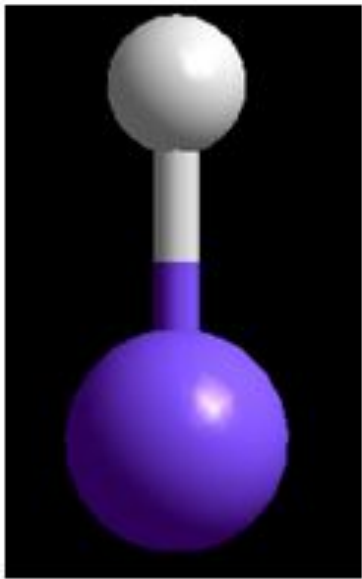
Хлороводород (HCl)



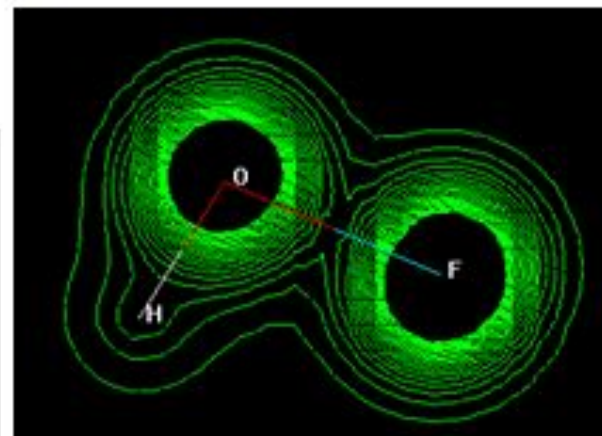
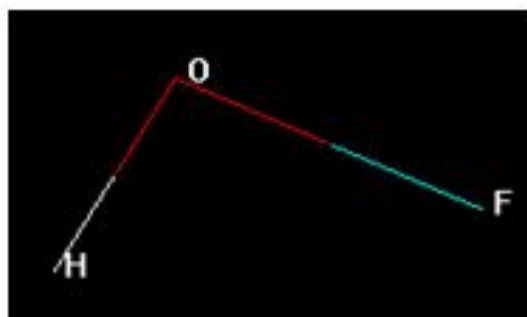
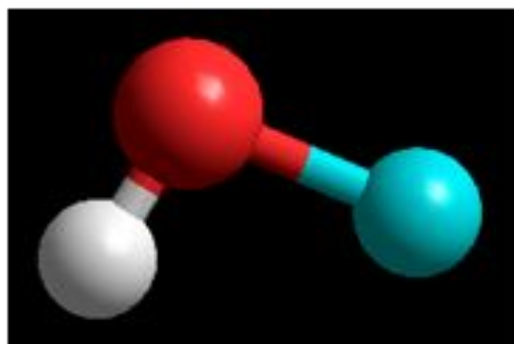
Бромоводород (HBr)



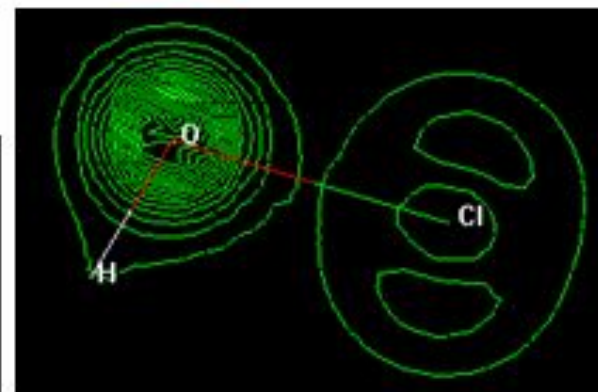
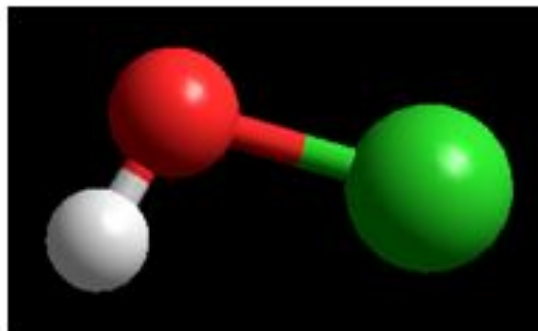
Иодоводород (HI)



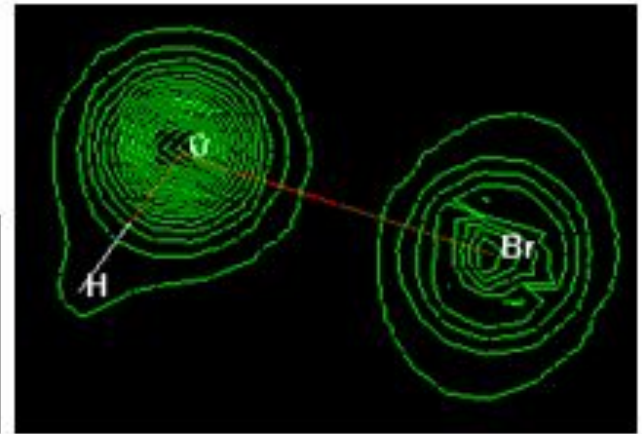
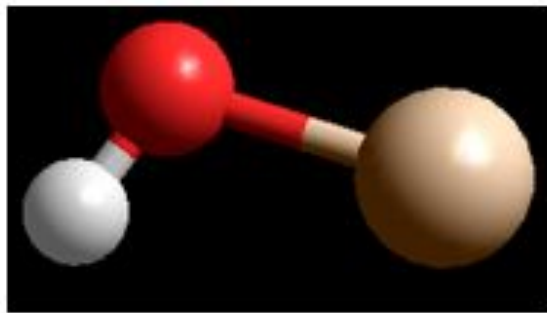
Фторноватистая кислота (HFO)



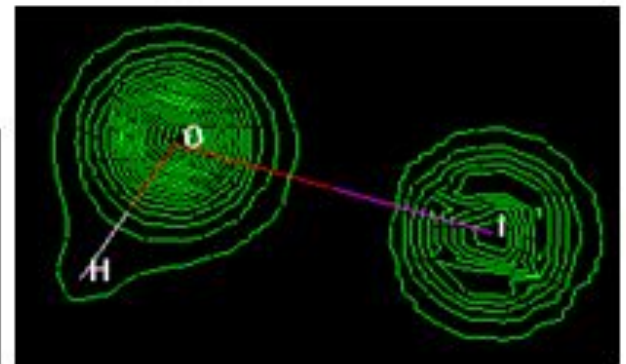
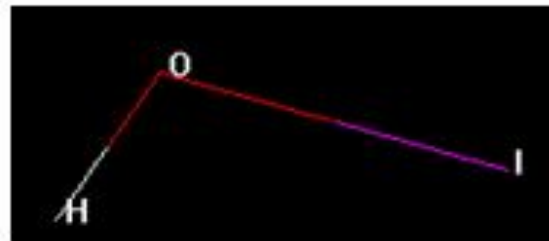
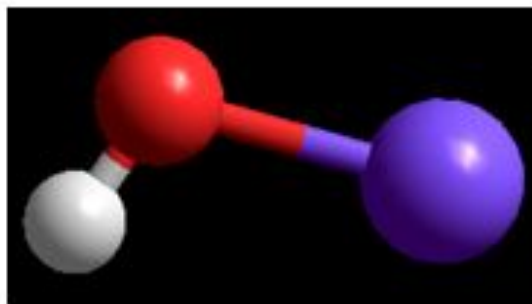
Хлорноватистая кислота (HClO)



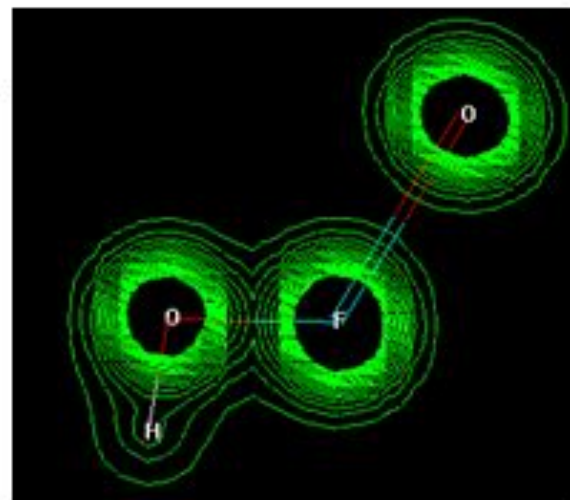
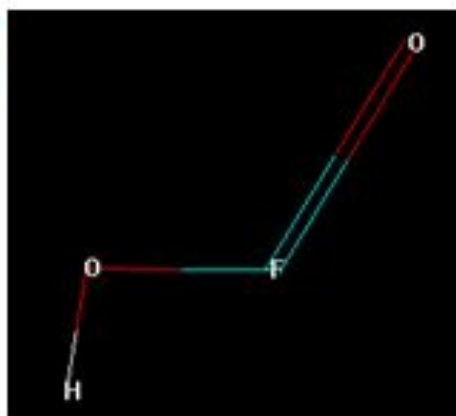
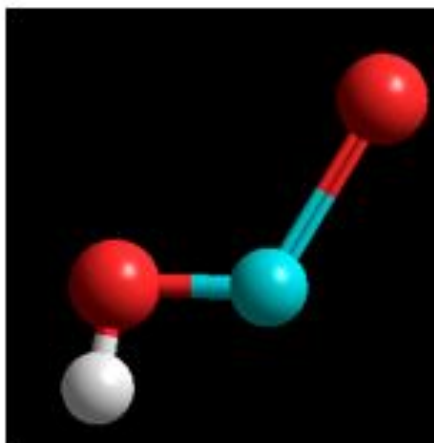
Бромноватистая кислота (HBrO)



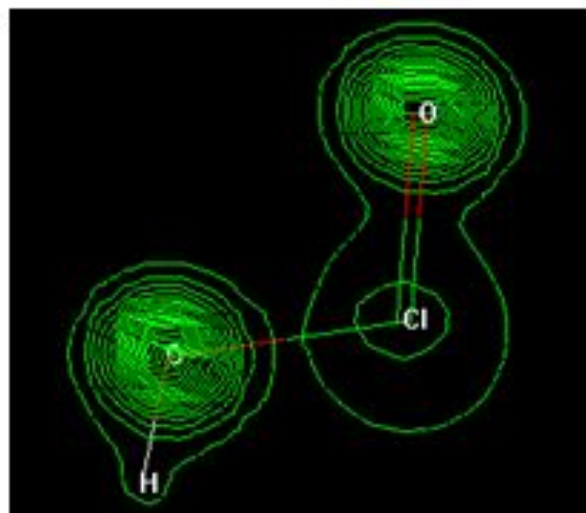
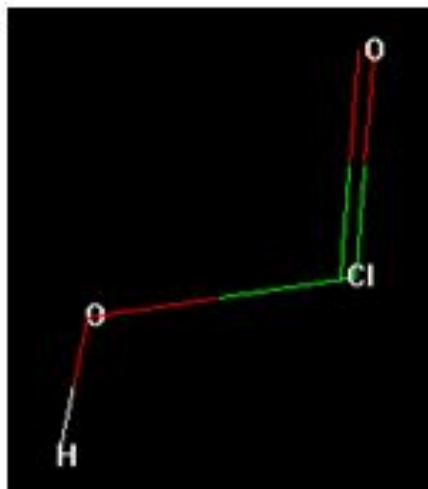
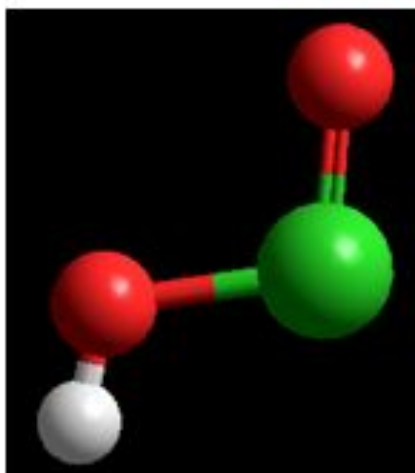
Иодноватистая кислота (HIO)



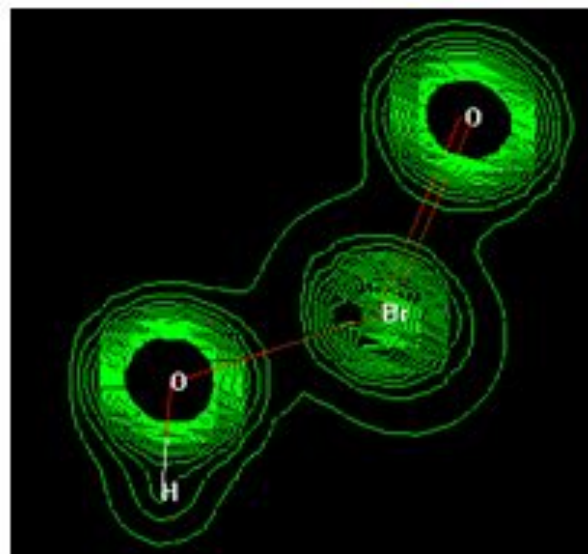
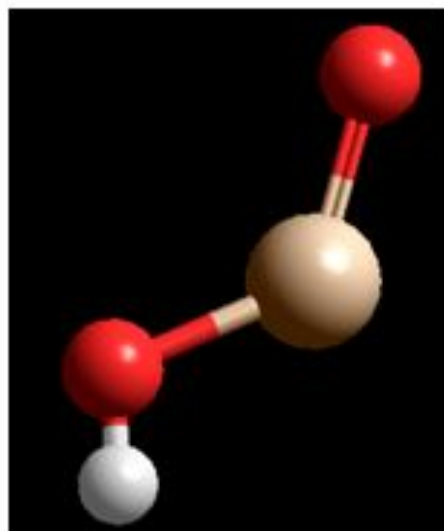
Фтористая кислота (HFO_2)



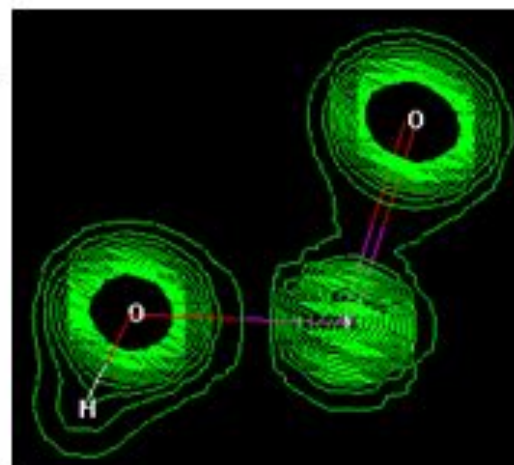
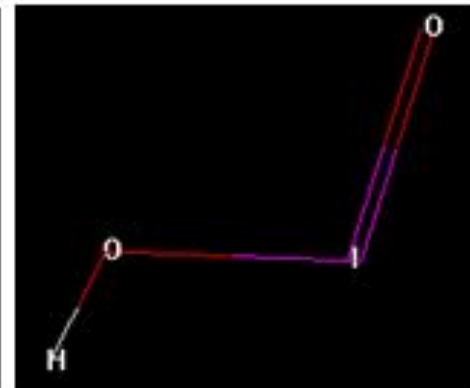
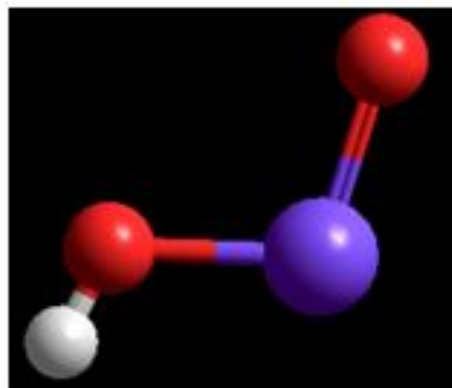
Хлористая кислота (HClO_2)



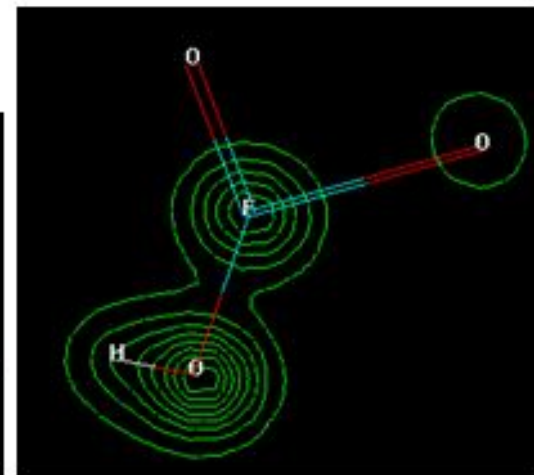
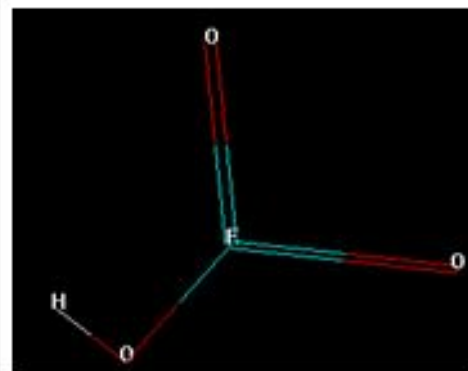
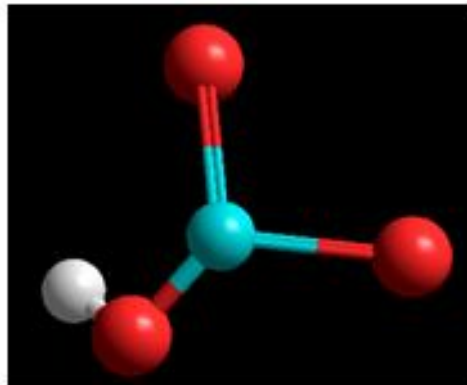
Бромистая кислота (HBrO_2)



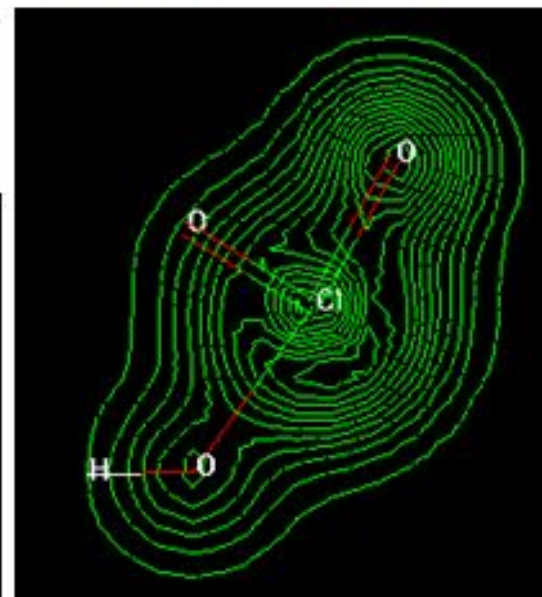
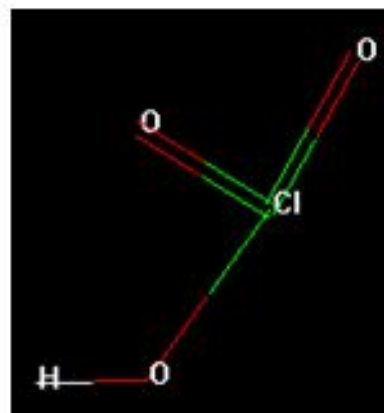
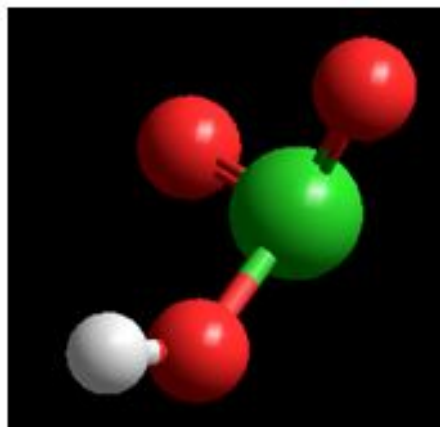
Иодистая кислота (HIO_2)



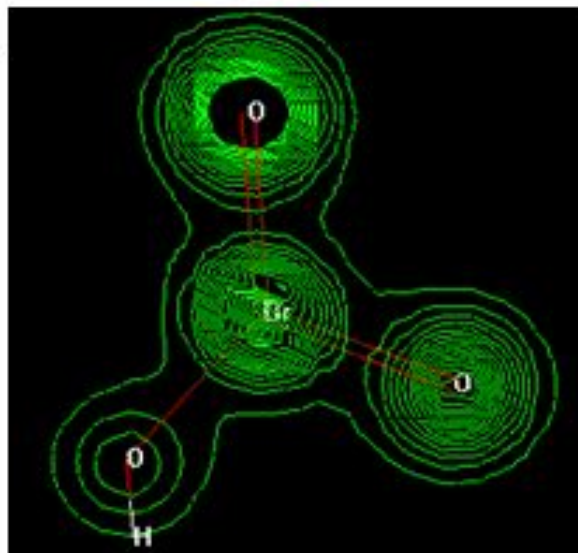
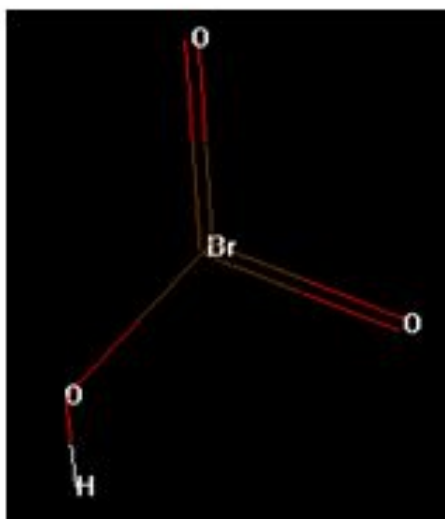
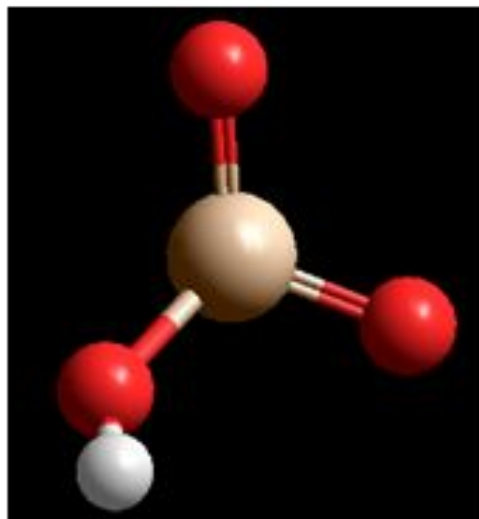
Фторноватая кислота (HFO_3)



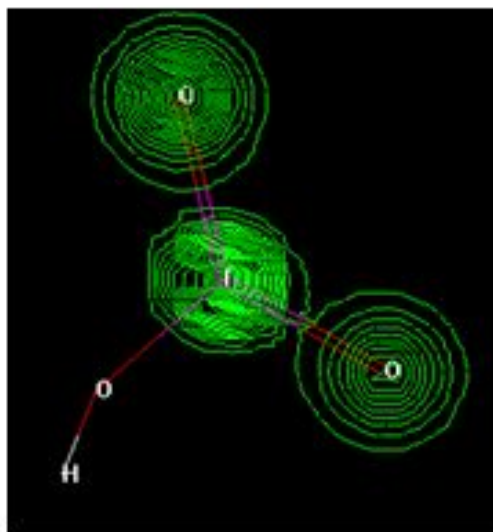
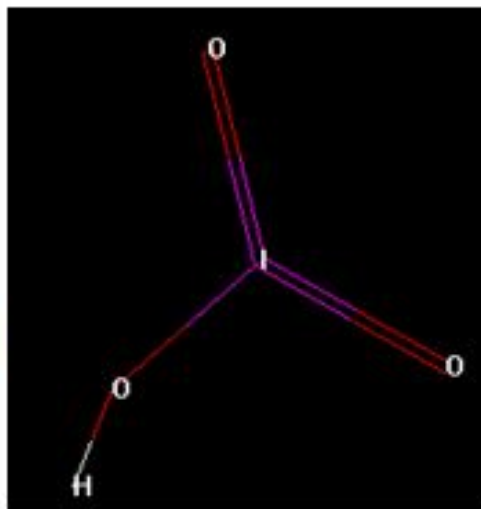
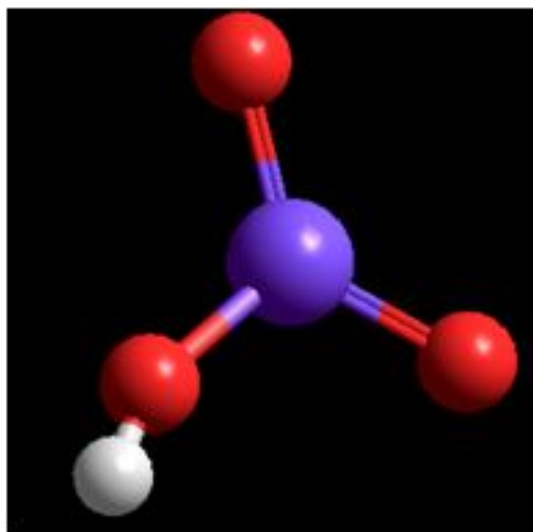
Хлорноватая кислота (HClO_3)



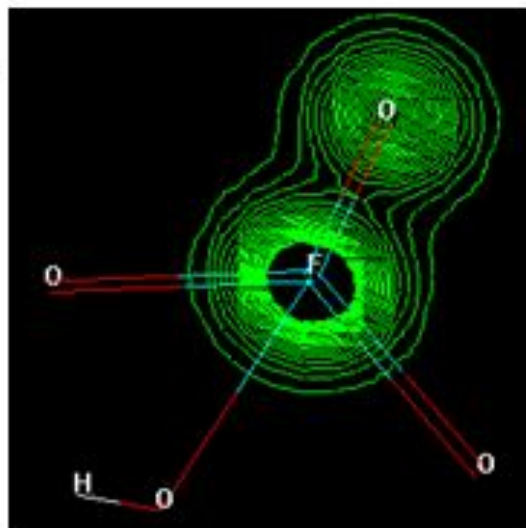
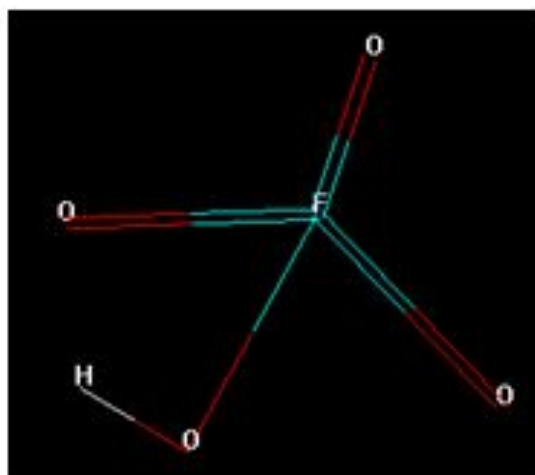
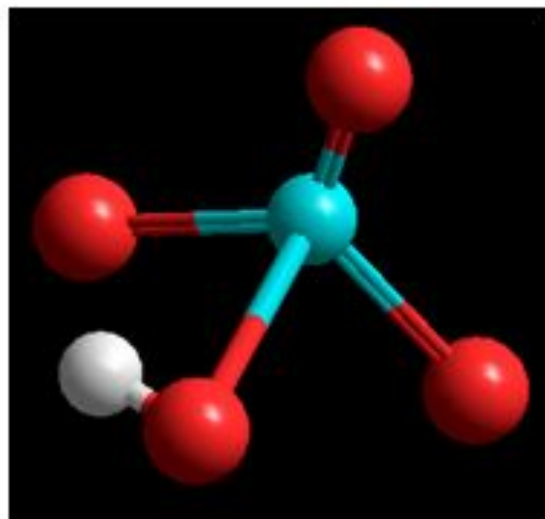
Бромноватая кислота (HBrO_3)



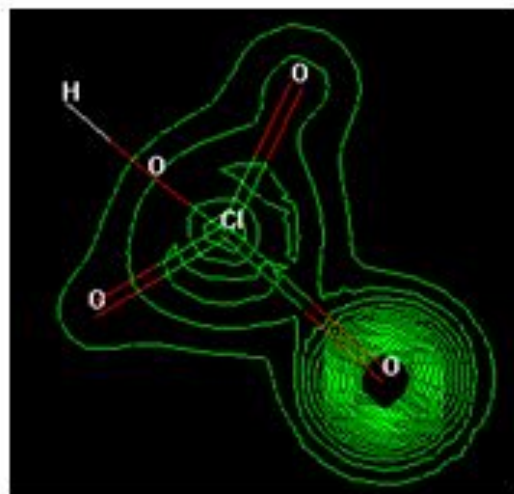
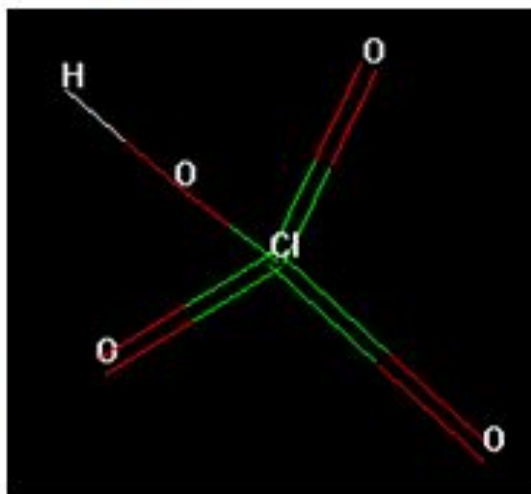
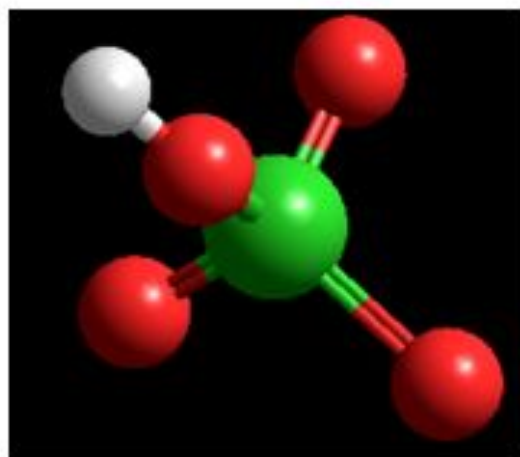
Иодноватая кислота (HIO_3)



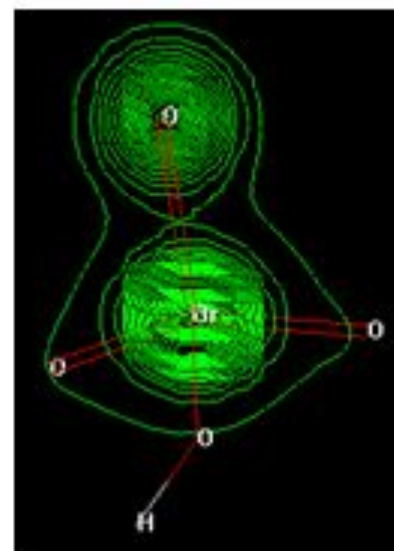
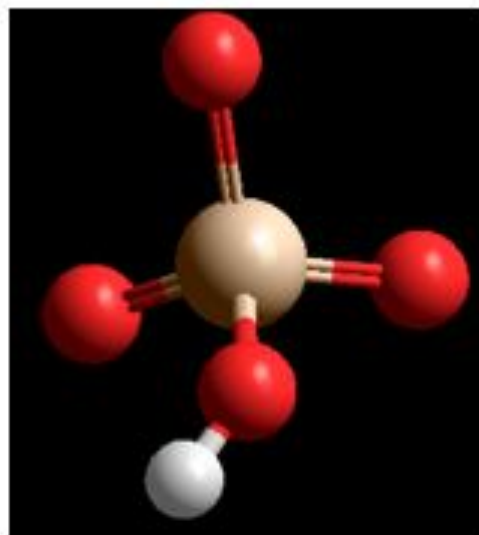
Фторная кислота (HFO_4)



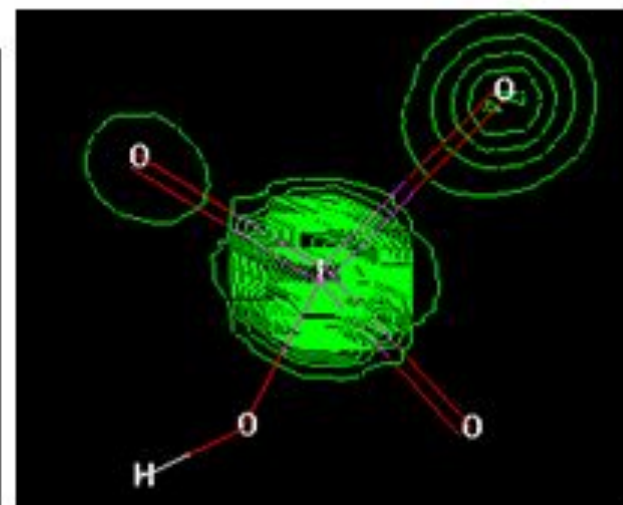
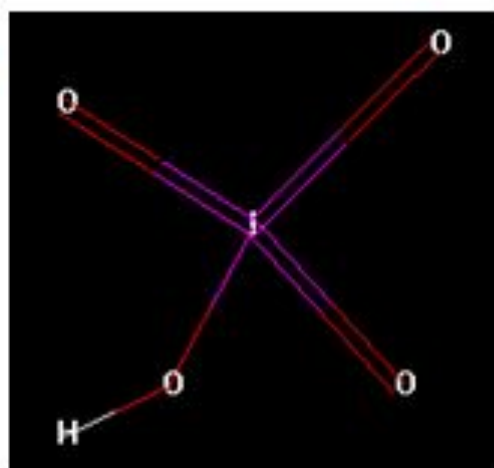
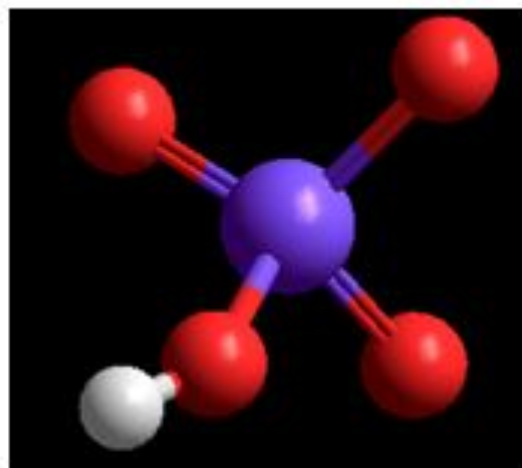
Хлорная кислота (HClO_4)



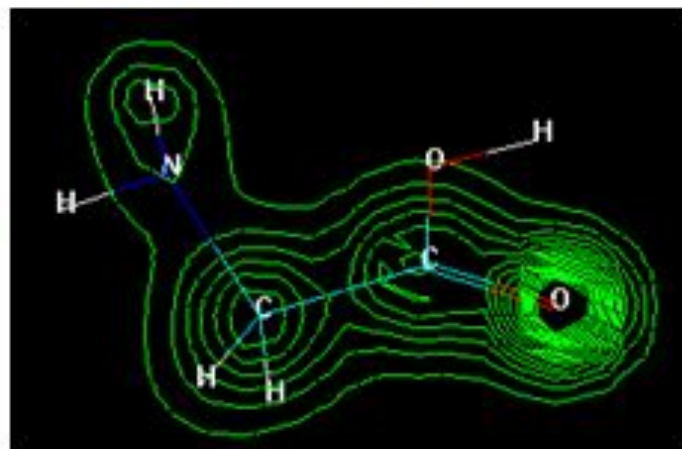
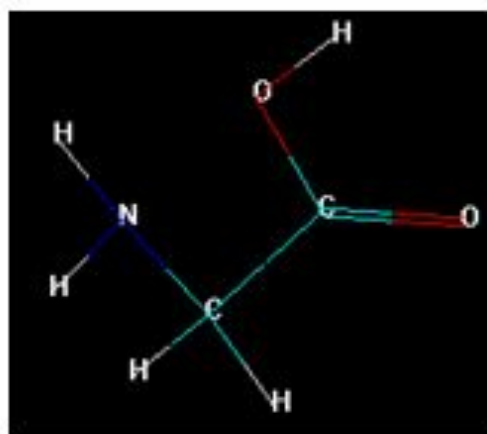
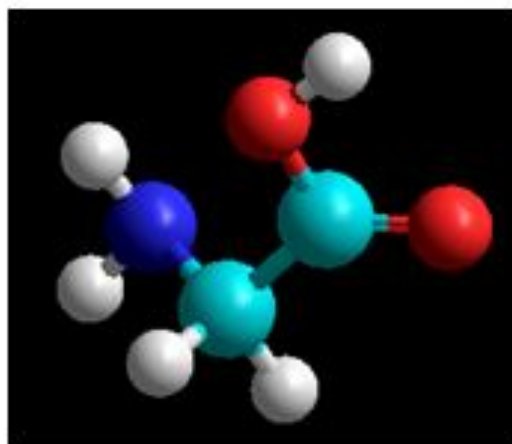
Бромная кислота (HBrO_4)



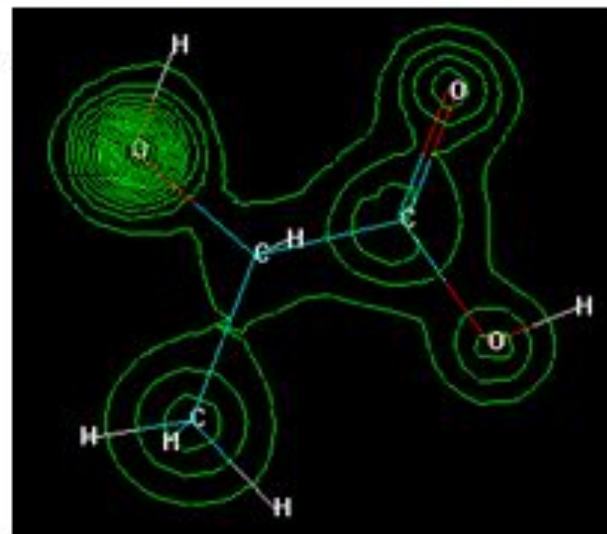
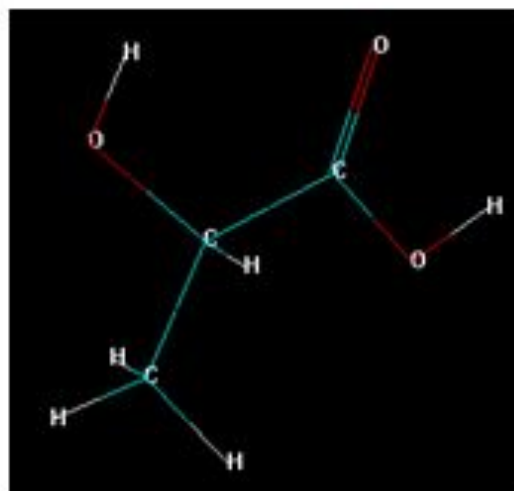
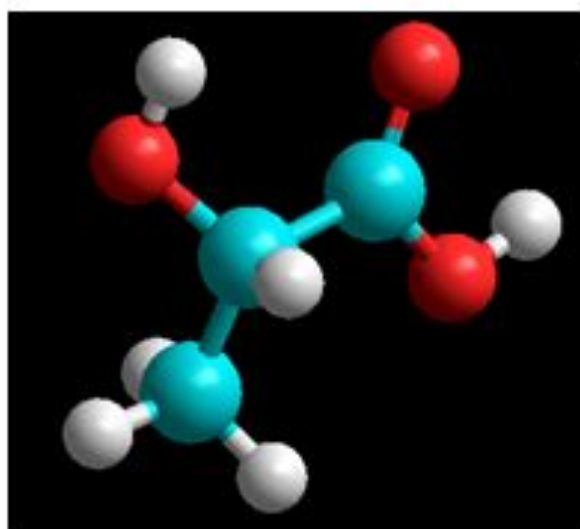
Иодная кислота (HIO_4)



Аминоуксусная кислота (глицин, $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$)



2-Оксипропановая кислота (молочная кислота, $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{COOH}$)



Уксусная кислота (CH_3COOH)

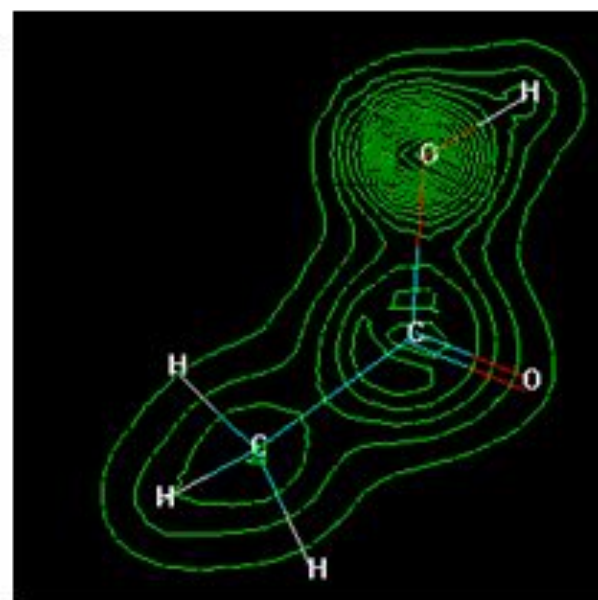
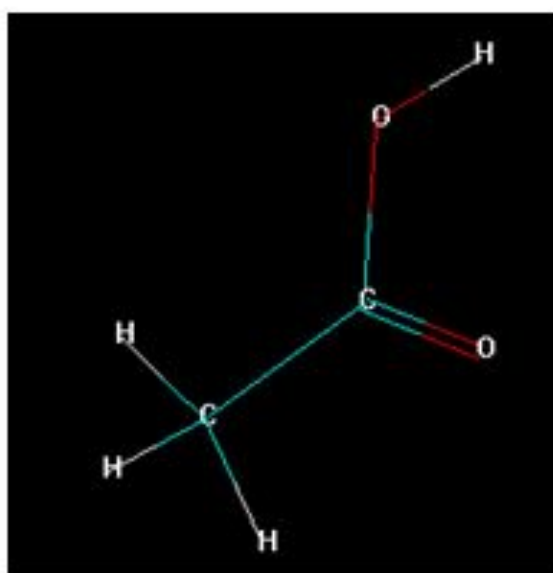
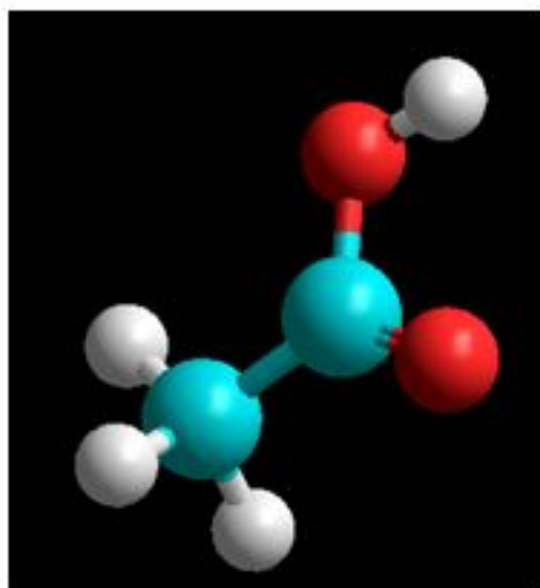


Таблица 1. Летучие водородные соединения отдельных неметаллов

№ п/п	Объект исследования (название, формула)	Длины химических связей (Å)	Валентный угол, °	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!