

СЕКЦИЯ № 2. ХИМИЯ

Нурушева А.Б.¹, Ергалиева Э.М.², Арыкпанова С.Б.³

1. Ғылыми жетекшісі, химия магистрі, аға оқытушы

2. Ғылыми жетекшісі, химия магистрі, оқытушы

3. «Химия» мамандығының 4 курс студенті, жаратылыстану ғылымдар кафедрасы

«ЗАТ ҚҰРЫЛЫСЫ» КУРСЫ ПРАКТИКУМЫНДА КВАНТТЫ-ХИМИЯЛЫҚ ЕСЕПТЕУЛЕРДІҢ ПАЙДАЛАНЫЛУЫ

Заттарды құрастыру курсына «Молекулалар симметриясы» тақырыбы зерделенді, осы тақырып бойынша практикалық сабақтар жүргізіледі: «Молекулалар симметриясы теориясының элементтері», «Симметрияның нүктелі топтары», «Олардың симметриясы бойынша полярлық және аполярлық емес молекулаларды және изометрлерді анықтау», «Молекуланың электрлік дипольдік моменті» (практикалық сабақтар), «Классикалық теория және кванттық механикадағы электрлік дипольдік момент», «Поляризациялау эллипсоиды және молекула симметриясы» (ОЖСӨЖ).

«Молекулалар симметриясы» тақырыбы молекулалар құрылысын математикалық әдістермен зерделеуді қарастырады және барлық курстың теориялық іргетасы болып келеді.

Теориялық кіріспе

Молекуланың кеңістікті құрылысын қарастыру молекуланы үш өлшемді кеңістіктегі геометриялық дене ретінде қабылдау туралы стереохимиялық түсініктермен негізделді. Бұл стереохимияға кейбір геометриялық түсініктерді, негізінен дене симметриясының элементтері мен операцияларын енгізуді талап етеді.

Симметрия элементтері [1] – бұл геометриялық орындар, оларға қатысты симметрия операциялары жүзеге асырылады. Симметрия операциялары – бұл геометриялық операциялар, олар симметрия элементтерінде жүзеге асырылады және нысанды (молекуланы) айырықсыз, баламалы немесе ұқсас бағытқа ауыстырады.

Дипольдік момент [2] – молекуланың электрлік симметриясын сипаттайтын маңызды молекулярлық тұрақты шама.

Дипольдік моменттің пайда болу себебі бірнеше фактор болып келеді. Бірінші кезекте – табиғаттағы атом молекулаларын құраушы айырмашылықтар. Екі атомды молекула үшін $\mu = 0$, егер ол екі бірдей атомнан тұрса. Екі атомды молекулада әртүрлі табиғатты атомдармен тұрақты дипольдік момент пайда болады, өйткені атомның электронды тығыздықты итеруші қабілетін көрсететін әртүрлі электрлік қайшылықтар салдарынан электронды тығыздықтың

асимметриясы пайда болады. Басқа себептер – атом орбитальдерінің әртүрлі гибридтік күйлері.

Дипольдік моментті анықтау моменттері қосымшаланған электрлік өрістің бейімделу әсерін табуға негізделген.

Тапсырма

1. Синиль қышқыл симметриясының нүктелі тобын анықтаңыз және практикалық жұмыс үшін дәптерде оның дипольдік моментін санаңыз.
2. Кванттық-химиялық бағдарламаларда Синиль қышқыл молекуласының симметриясын және дипольдік моментін анықтаңыз:
 - a. Синиль қышқыл молекуласын құрастырыңыз.
 - b. Молекулаға оңтайландыру жүргізіңіз.
 - c. Дипольдік момент векторының бейнесін ретке келтіріңіз.
 - d. log-файлды ашыңыз, ондағы дипольдік момент белгісін және симметрияның нүктелі тобын табыңыз.
3. Көрсетілген алгоритм бойынша молекулаларға арналған есептеулерді орындаңыз: SO_2 , SO_3 , SF_6 , $\text{CH}_3\text{-CHFCI}$

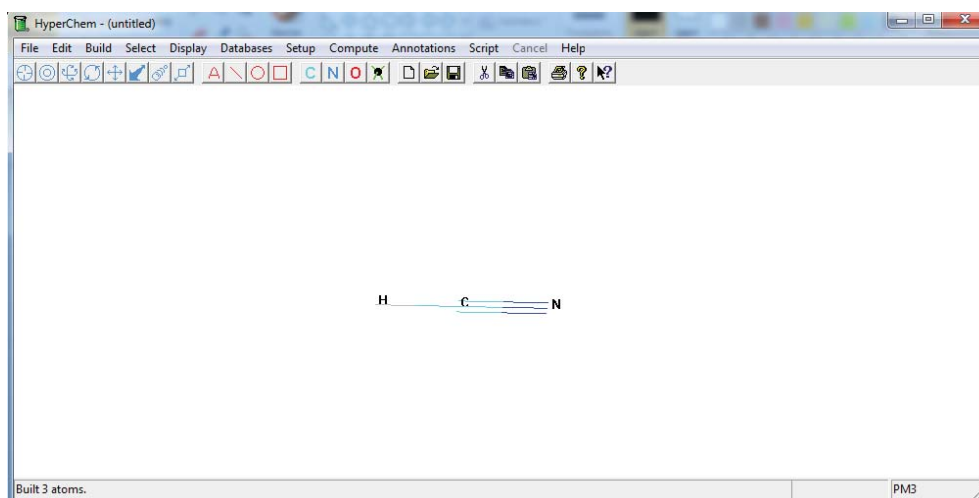
Өзідігінен, сонымен қатар анықтамалық деректермен орындалған есептермен HyperChem саналған мәндерін салыстырыңыз. Сараптамалық деректер сәйкестігі негізінде есептерге арналған нақты әдісті және бағдарламаны табыңыз.

Жұмыстың барысы

1. HyperChem бағдарламасын іске қосыңыз [3, 4]. Синильқышқылының молекуласын салындар.

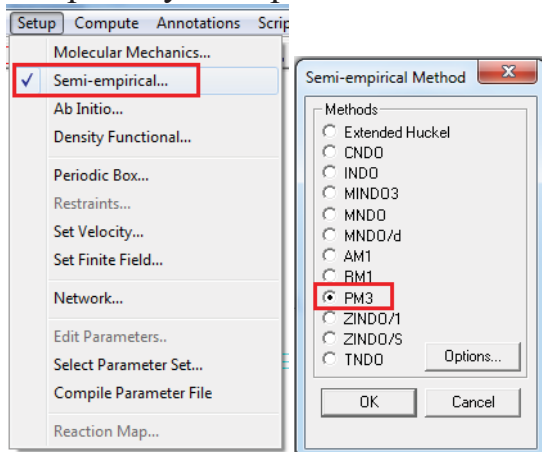
Ол үшін көміртек атомын таңдаңыз, жұмыс орынында этан молекуласын салып, содан кейін азот атомын көміртек атомына ауыстырыңыз, Draw with Nitrogen таңдап, атомдардың валенттілігін ескере отырып, кратную байланысын орнатыңыз. Су тектің атомын қосып және

AddN&ModelBuild меню пункті Build көмегімен Синиль қышқылының стандартты мәндерімен бірге байланыстардың ұзындығын алып моделін жасау.



1-сурет. Синильқышқылының стандартты мәндерінің моделі

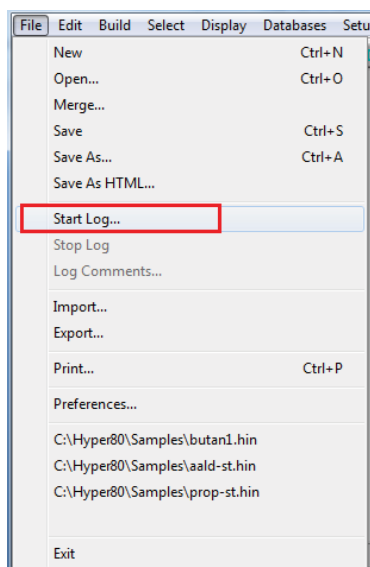
3. Setup менюінде жартылай эмпирикалық әдістің PM3 есебін таңдау



2-сурет. Жартылай эмпирикалық әдістің PM3 орнату. PM3 әдісін таңдау

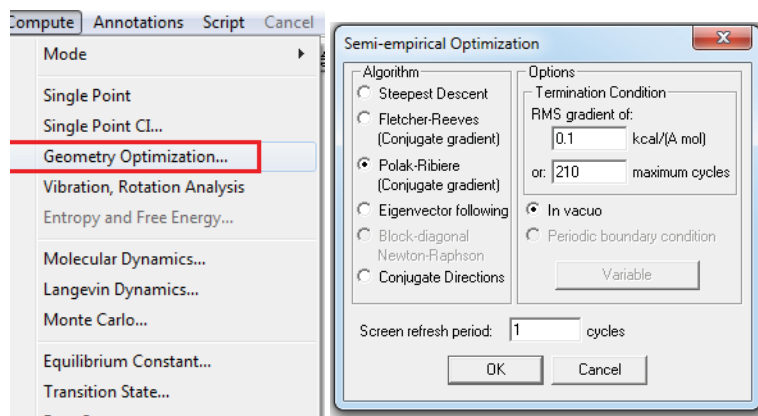
4. log-файлын протокол есебін іске қосу

File менюінде StartLog таңдау. Файлға атын беру және протокол есебінің толық жазылу дәрежесін молекулярлық-механикалық есептеу Mechanics print level = 9 орнату.

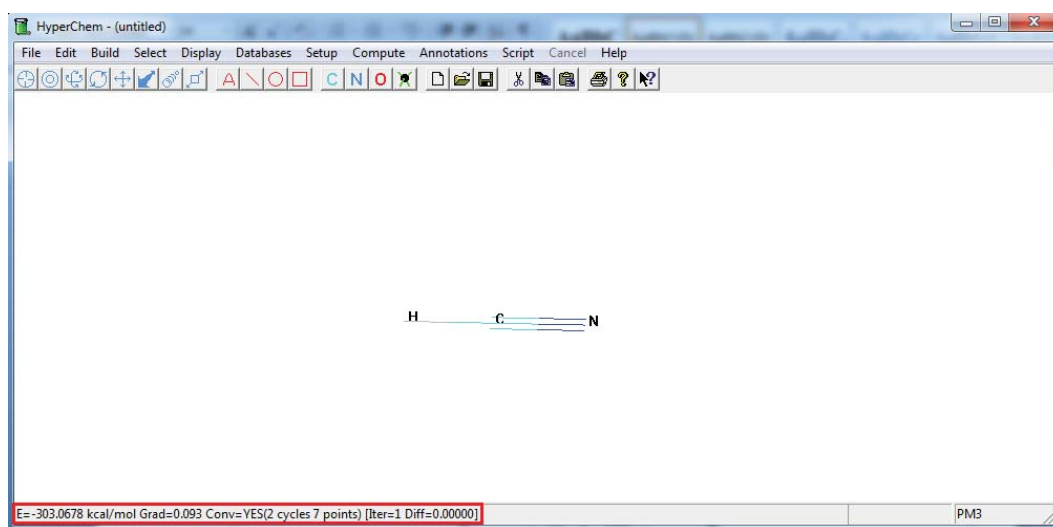


3-сурет. log-файлды іске қосу

5. Геометриялық молекуланың оптимизациясын есептеп шығару Compute > Geometry Optimization менюінде Геометрияның оптимизация процесін бастау. Оптимизация процесс аяқталғаннан кейін терезенің төменгі жағында Converged=YES пайда болып және менюдің блогы жоғалып кетеді

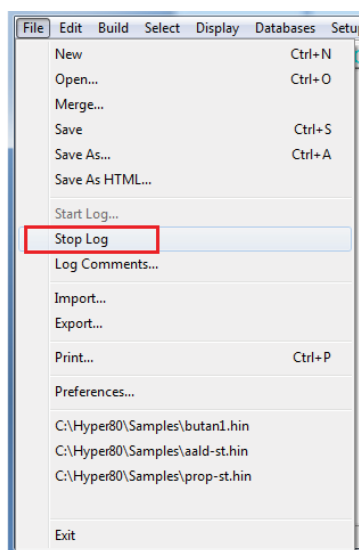


4-сурет. Молекуланың оптимизациясы. Молекуланың оптимизациясының параметрлер терезесі



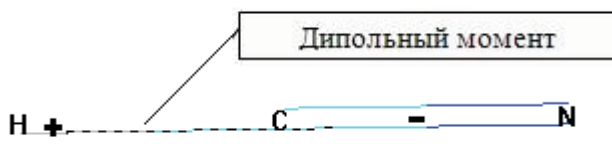
5-сурет. Молекуланың оптимизацияланған энергиясы

6. log-файлды жабу
File>StopLog таңдау.



6-сурет. log-файл жазбасын тоқтату

7. Жартылай эмпирикалық әдістің нәтижелерін интерпретациялау
 Дипольдік моменті есептеу және векторлардың бағыттарын көрсету
 Вектордың дипольдік моментін көрсету, Display>Show dipole moment таңдау. Берілген команда қол жетімді болмаса (сұр түс), онда молекуланың есептеуін қайта іске қосу қажет (меню Compute>Single Point). модульдің диполь моментінің мәндері log-файлға келтіріледі.



7-сурет. Синильқышқылының молекуласының вектордың дипольдік моменті

Дипольдік моменттің мәні log-файлде молекуланың оптимизация үшін файлдың соңында орналасқан. Барлық мәндер Дебай(D) бірлігінде.

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-0.000	-1.538	-0.000	1.538
sp Hybrid	0.000	-1.158	-0.000	1.158
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	0.000	-2.696	-0.000	2.696

8-сурет. log-файлынан фрагмент

Симметрияның нүктелі тобы Molecular Point Group тармағында молекуланың энергетикалық сипаттамаларынан кейін log-файлда орналасқан

MOLECULAR POINT GROUP
 C*v

9-сурет. Синильқышқылының симметрияның нүктелі тобы

Пайдаланған әдебиеттер тізімі

1. Кобзев Г.И. Применение неэмпирических и полуэмпирических методов в квантово-химических расчетах. – Оренбург: ГОУ ОГУ, 2004. – 543 с.
2. Young D.C. Computational Chemistry. - New York: Wiley&Sons, - 2001. – P. 398..
3. Hypercube, INC // режим доступа: <http://www.hyper.com/>
4. HyperChem® Computational Chemistry. Canada: Hypercube, inc. 1996. – 350 p.

Жұмағалиева Б. М.¹, Әскербек З.Ж.²

1. Ғылыми жетекшісі, химия ғылымдарының кандидаты, доцент
2. «Химия» мамандығының 4 курс студенті, жаратылыстану ғылымдар кафедрасы

ҚОРШАҒАН ОРТА СУЛАРЫНЫҢ ҚЫШҚЫЛДЫҒЫН ЗЕРТТЕУ