

Использование программного обеспечения на занятиях по квантовой химии: практика внедрения на радиофизическом факультете ХНУ имени В. Н. Каразина

В статье обсуждается практика внедрения пакетов квантовохимических программ на занятиях по квантовой химии на радиофизическом факультете ХНУ имени В. Н. Каразина с целью обучения студентов современным теоретическим методам исследования и интерпретации с их помощью практических результатов.

Ключевые слова: пакет программ, полуэмпирические методы квантовой химии, предсказательная способность метода.

Интенсивное развитие современного общества приводит к тому, что различные отрасли производства становятся все более технологичными, наука сталкивается с новыми сложными задачами, решение которых требует использование усовершенствованных методов не только для получения экспериментальных данных, но и для их обработки. Информационные технологии играют важную роль в этих процессах. Их использование позволяет не только ускорить получение конечных результатов эксперимента, но и открывает новые горизонты для решения теоретических и прикладных задач.

Химическая наука не является исключением и также широко использует достижения информационных технологий. Особенно это имеет место в теоретической химии, которая, с одной стороны, выполняет предсказательную, с другой, – объяснительную функции относительно практического эксперимента. В курсе квантовой химии, который читается в большинстве политехнических вузов мира, в основном, используются специализированные программы, предназначенные для проведения сложных расчетов, облегчения визуализации объектов, программы, содержащие обширные базы данных различных параметров соединений и использующиеся для их идентификации: Nuser Chem 6, GAUSSIAN и др. Также специализированным является программное обеспечение, предназначенное для работы исследовательского оборудования: ЯМР-, ИК-спектрометров, просвечивающие и сканирующие электронные микроскопы и другие приборы.

В данной работе будут рассмотрены возможности использования компьютерной программы Nuser Chem – в целях обучения студентов грамотно интерпретировать полученные экспериментальные результаты и предсказывать пути синтеза новых химических объектов.

Программа Nuser Chem совмещает в себе как функции визуализатора 3 D- структуры соединений, так и возможности выполнения квантовохимических расчетов.

Наряду с молекулярной динамикой и полуэмпирическими методами, реализован учет электронной корреляции методами теории возмущений второго порядка и функционала плотности.

К достоинствам данной программы можно отнести обширный каталог молекулярных фрагментов, облегчающих задание исходной геометрии, а также возможность ее контроля по мере выполнения расчета (все изменения в ходе оптимизации незамедлительно отражаются на экране).

Однако ряд недостатков не позволяет рекомендовать данную программу в качестве основного инструмента исследователя. А именно:

- неэффективное использование ресурсов компьютера, в том числе – организация процедуры оптимизации геометрии, приводящая к значительным временным потерям;

- ограниченный выбор базисных наборов и методов учета электронной корреляции;

- учет симметрии возможен только при задании исходной геометрии в виде Z - матрицы, что значительно снижает ценность интерактивного построения молекулярной структуры.

Все достоинства и недостатки данной программы были обсуждены со студентами 4 курса радиофизического факультета ХНУ имени В. Н. Каразина (специальность – биофизика) для последующих расчетов и интерпретации результатов применительно к биологически активным молекулам.

Один из наиболее простых и старых расчетных методов квантовой химии – метод Хюккеля, входящий как наиболее примитивный в рамки программы Nuser Chem, пренебрегающий электрон-электронным взаимодействием и дающий хорошо коррелируемые с экспериментом теоретические результаты только для ароматических углеводородов, уже в некоей мере предсказывает химическую активность полиядерных аренов (например, нафталина или антрацена), которые являются сильнейшими канцерогенами и вызывают онкологические заболевания. Естественно, что изучение физико-химических и биологических свойств подобных соединений вызывает интерес не только у химиков, но также у медиков, биологов и экологов. В рамках предложенных практических заданий студенты группы РБ-41 (специальность – биофизика) выполнили расчет электронных плотностей на атомах углерода и индексов свободных валентностей ароматических углеводородов, наиболее часто встречаемых в выбросах крупных промышленных предприятий. Это позволило обсудить потенциальную возможность реакционной способности подобных соединений и, как следствие, – их тлетворного влияния на организм человека. Подобные расчеты, естественно, всё более часто подтверждаются экспериментальными фактами. В рамках расчетных методов AM1 и PM3, также включенных в пакет Nuser Chem, были исследованы свойства жизненно важных

азотсодержащих органических соединений-аминокислот и простейших пептидов. Естественно, что существование всевозможных пептидных изомеров и конфигураций обуславливает столь многогранное многообразие форм живых организмов.

Подобный способ работы на занятиях по квантовой химии ярко демонстрирует студентам пользу теоретической науки, подчеркивая переход от набора скучных формул и сухого формализма умозрительного подхода к проблеме – к реальным расчетным результатам, что позволяют грамотно интерпретировать уже проделанный эксперимент и предсказывать во многих случаях пути проведения нового эксперимента.

Литература

1. Матулис В. Э. Прикладная квантовая химия / В. Э. Матулис, В. Э. Матулия, О. А. Ивашкевич. – Минск : БГУ, 2007. – 143 с.