

Российская Федерация
Министерство образования Иркутской области
ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ПРОФЕССИОНАЛЬНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ИРКУТСКОЙ ОБЛАСТИ
«АНГАРСКИЙ ТЕХНИКУМ СТРОИТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ»

Исследовательская работа химии и информатике
«Виртуальное моделирование молекул и атомов»

Работу выполнили:

Новацкий Дмитрий, обучающаяся I курса

Группа ИС - 41521,

Каплан Владислав, обучающаяся I курса

Группа ИС - 41521,

Руководители:

Вахитова Евгения Владимировна,

Преподаватель химии

2016 г.

Содержание

1. Введение.

2. Основная часть.

- Теоретическое обоснование, анализ литературы.
 - Моделирование. Историческая справка о моделировании.
 - Сущность процесса моделирования. Этапы моделирования.
 - Моделирование в химии.

- Практические этапы работы.
 - Изучение и построение моделей молекул химических веществ используя программу ArgusLab 4.0.1.
 - Изучение и построение моделей атомов в программе Microsoft Office Power Point 2010.

3. Заключение.

4. Библиографический список.

Введение

В современном мире происходит интенсивное изменение окружающей жизни, активное проникновение научно-технического прогресса во все сферы жизнедеятельности. Одним из наиболее перспективных методов обучения является моделирование, поскольку мышление человека отличается предметной образностью и наглядной конкретностью метод моделирования открывает ряд дополнительных возможностей в ознакомлении с окружающим миром.

Моделирование на современном этапе приобрело значение общенаучного метода. Его особенностью является то, что для изучения объекта используется опосредующее звено – объект-заместитель. Исходный объект исследования при моделировании называется оригиналом, объект-заместитель – моделью.

По мнению большинства выдающихся химиков, в том числе лауреата нобелевской премии Г. Сиборга, теоретическое моделирование является основным методом познания в химии. Сущность химических явлений скрыта от непосредственного наблюдения исследователя, поэтому познание осуществляют путем построения модели невидимого объекта по косвенным данным.

В данной работе мы изучим и апробируем компьютерные программы для построения виртуальных моделей молекул и атомов, которые позволят понять строение химических веществ.

Актуальность данной работы заключается в том, что при изучении химии пространственное воображение играет большую роль. Из-за неразвитости этого компонента темы как химическое строение веществ воспринимается достаточно тяжело, как следствие этого возникают затруднения при изучении классов веществ неорганической и органической химии. Построение и исследование моделей – это один из важнейших методов познания, умение использовать компьютер для построения моделей – одно из требований сегодняшнего дня, поэтому мы считаем данную работу актуальной.

Цель работы: Изучить компьютерные программы Microsoft Office Power Point 2010 и ArgusLab 4.0.1. и их возможности в построении виртуальных моделей химических молекул и атомов.

Для реализации данной цели, мы поставили такие **задачи:**

1. Дать теоретические сведения о моделировании.

2. Описать этапы моделирования.
3. Изучить конструкторы химических молекул и атомов.
4. Апробировать компьютерные программы Microsoft Office Power Point 2010, ArgusLab 4.0.1 в построении химических молекул и атомов.
5. Произвести эстетическое оформление проекта.

Гипотеза: Молекулы и атомы химических элементов можно смоделировать, используя компьютерные программы Microsoft Office Power Point 2010, ArgusLab 4.0.1.

Предмет исследования: компьютерные программы Microsoft Office Power Point 2010, ArgusLab 4.0.1.

Этапы исследования:

- 1) Изучение литературных источников по данной теме;
- 2) Апробация компьютерных программ Microsoft Office Power Point 2010, ArgusLab 4.0.1.

Методика исследования

1. Для сбора информации применялся поисково-аналитический метод, информация бралась из современного источника - интернета (Yandex, Google).

2. Для составления слайдов презентации использовались следующие программы:

1. для написания текста – Microsoft Office Word 2010;
2. для демонстрации слайдов— Microsoft Office PowerPoint 2010;
3. для эстетического восприятия— Microsoft Office PowerPoint 2010.
4. для построения моделей - ArgusLab 4.0.1 и Microsoft Office Power Point 2010.

2. Основная часть.

Что такое моделирование?

Моделирование (лат. *modus* – мера, образ, способ).

Моделирование — исследование объектов познания на их моделях; построение и изучение моделей реально существующих объектов, процессов или явлений с целью получения объяснений этих явлений, а также для предсказания явлений, интересующих исследователя.

Моделирование издавна применялось в научном познании. Например, возникновение представлений Демокрита и Эпикура об атомах, их форме, и способах соединения, об атомных вихрях и ливнях, объяснения физических свойств различных веществ с помощью представления о круглых и гладких или крючковатых частицах, сцепленных между собой. Эти представления являются прообразами современных моделей, отражающих ядерно-электронное строение атома.

Моделирование как метод познания применялось человечеством - осознанно или интуитивно - всегда. На стенах древних храмов предков южно-американских индейцев обнаружены графические модели мироздания. Учение о моделировании возникло в средние века. Выдающаяся роль в этом принадлежит Леонардо да Винчи (1452-1519).

Гениальный полководец А. В. Суворов перед атакой крепости Измаил тренировал солдат на модели измаильской крепостной стены, построенной специально в тылу.

Огромный вклад в укрепление обороноспособности нашей страны внесли работы по моделированию взрыва - генерал-инженер Н.Л. Кирпичев, моделированию в авиастроении - М.В. Келдыш, С.В. Ильюшин, А.Н. Туполев и др., моделированию ядерного взрыва - И.В. Курчатов, А.Д. Сахаров.

В науке Нового времени первоначально применялись различные механические модели. Постепенно метод моделирования стал приобретать все большее распространение, проникая во все отрасли научного знания. XX век принес методу моделирования новые успехи, связанные с расцветом кибернетики.

Сущность процесса моделирования. Этапы моделирования

Процесс как теоретического, так и экспериментального моделирования состоит из следующих шагов:

1. Построение модели.
2. Изучение модели.
3. Экстраполяция – перенос полученных данных на область знаний об исходном объекте.

На первом этапе, при осознании невозможности или нецелесообразности прямого изучения объекта, создается его модель. Целью этого этапа является создание условий для полноценного замещения оригинала объектом-посредником, воспроизводящим его необходимые параметры.

На втором этапе производится изучение самой модели – настолько детальное, насколько это требуется для решения конкретной познавательной задачи. Здесь исследователь может вести наблюдения за поведением модели, проводить над ней эксперименты, измерять или описывать ее характеристики – в зависимости от специфики самой модели и от исходной познавательной задачи. Цель второго этапа – получение требуемой информации о модели.

Третий этап представляет собой «возвращение» к исходному объекту, т.е. интерпретацию полученных знаний о модели, оценку их приемлемости и, соответственно, приложение их к оригиналу, позволяющее в случае успеха решить исходную познавательную задачу.

Человечество в своей деятельности (научной, образовательной, технологической, художественной) постоянно создает и использует модели окружающего мира. Строгие правила построения моделей сформулировать невозможно, однако человечество накопило богатый опыт моделирования различных объектов и процессов.

Модели позволяют представить в наглядной форме объекты и процессы, недоступные для непосредственного восприятия (очень большие или очень маленькие объекты, очень быстрые или очень медленные процессы и др.). Наглядные модели часто используются в процессе обучения.

Моделирование в химии

Молекулярное моделирование — собирательное название методов исследования структуры и свойств молекул вычислительными методами с последующей визуализацией результатов, обеспечивающие их трехмерное представление при заданных в расчете условиях.

Методы молекулярного моделирования используются для изучения, как индивидуальных молекул, так и взаимодействия в молекулярных системах. Материальное (экспериментальное) моделирование широко используется в химии для познания и изучения строения веществ и особенностей протекания химических реакций, для выявления оптимальных условий химико-технологических процессов и др.

Общей чертой методов молекулярного моделирования является атомистический уровень описания молекулярных систем — наименьшими частицами являются атомы или небольшие группы атомов. В этом состоит отличие молекулярного моделирования от квантовой химии, где в явном виде учитываются и электроны. Таким образом, преимуществом молекулярного моделирования является меньшая сложность в описании систем, позволяющая рассмотрение большего числа частиц при расчётах.

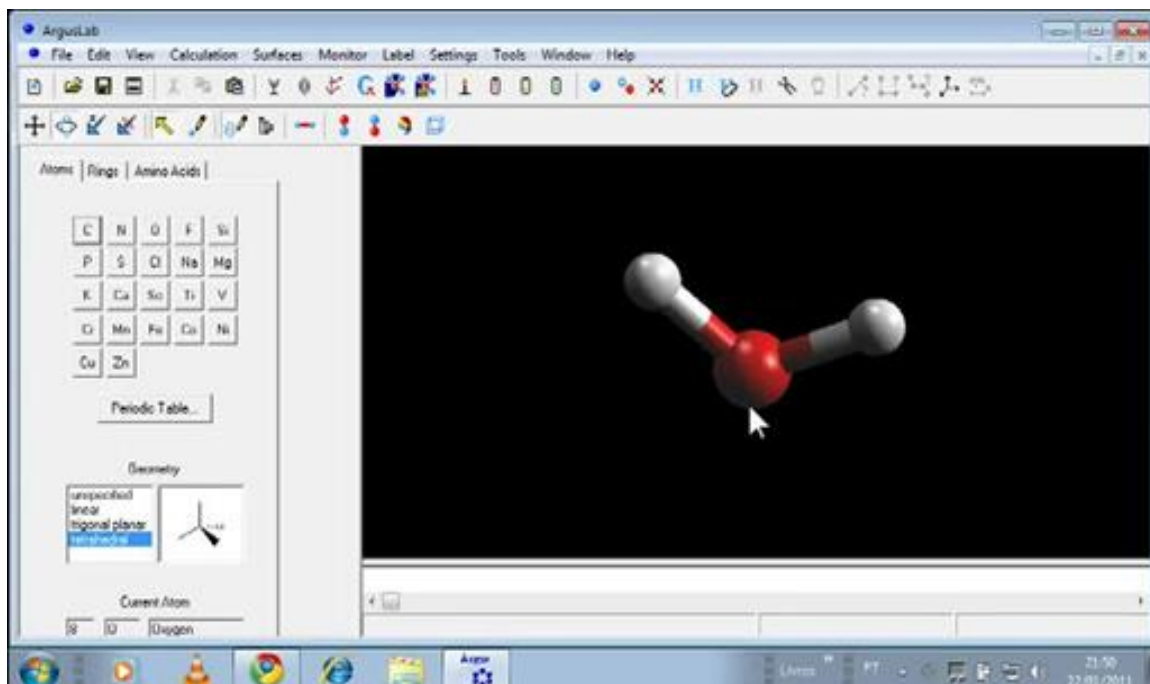
Используя имеющиеся данные о свойствах многих макромолекул, удается с помощью компьютеров моделировать их структуру. Это дает четкое представление о геометрии всей молекулы.

Практическая часть

Моделирование молекул химических веществ и атомов.

Для изучения виртуального моделирования молекул и атомов мы использовали две компьютерные программы **ArgusLab4.0.1** и **Microsoft Office Power Point 2010**

Конструктор молекул ArgusLab 4.0.1



Основные возможности программы ArgusLab 4.0.1

- Трёхмерный интерактивный конструктор молекул.
- Автоматическое добавление, удаление атомов водорода.
- Новые атомы можно выбирать из периодической таблицы.
- Автоматическое или ручное задание атомной гибридизации и порядка хим. Связей.
- Автоматический поиск кольцевых структур, включая ароматические кольца.
- Визуализация стержневой, шаростержневой, масштабной моделей.
- Поддержка одинарных, двойных и тройных связей.
- Построение моделей молекул циклических соединений.

- Визуализация атомных орбиталей и электронных эффектов.
- Получение информации о длине связей и символах химических элементов в молекуле.

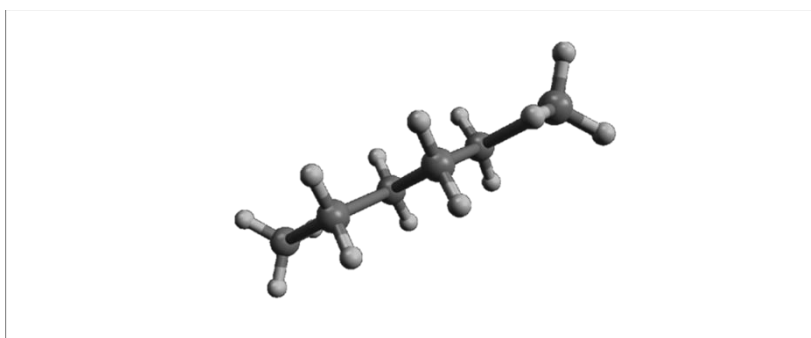
ArgusLab является программой для создания графических представлений молекулярных моделей. Используя эту программу, можно собрать и показать молекулярные модели. Вы будете в состоянии включать в Вашу модель несколько атомов, остатков, групп и вычислений.

Каждый компонент может быть отредактирован для удовлетворения потребностей. Можно использовать водород, углерод, азот, кислород, хлор и атомы фтора. Программа даёт возможность присоединиться к атомам с помощью любого вида возможной связи. Таким образом, создаются простые или сложные молекулы. При необходимости ArgusLab позволяет проверить встроенную периодическую таблицу. Можно увеличить масштаб для создания модели больше, или уменьшение для наблюдения меньшего количества деталей. При конструировании соблюдаются правила валентностей и углов между связями в молекуле, что гарантирует достоверность получаемых моделей химических соединений.

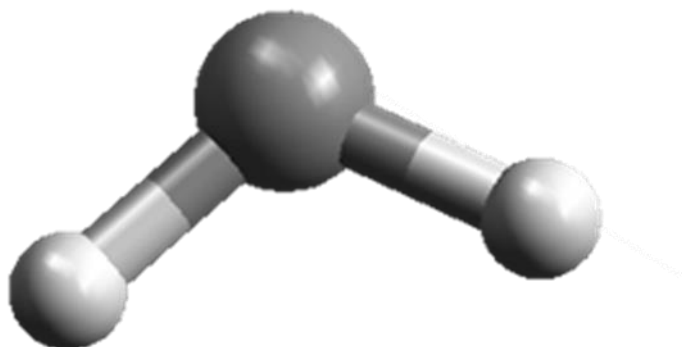
Результаты могут быть распечатаны или графически изображены. В них можно сохранить собственный формат ArgusLab. Они могут также быть экспортированы в BMP, JPG, TIFF.

При использовании конструктора молекул ArgusLab 4.0.1 нами были построены следующие шаростержневые молекулы.

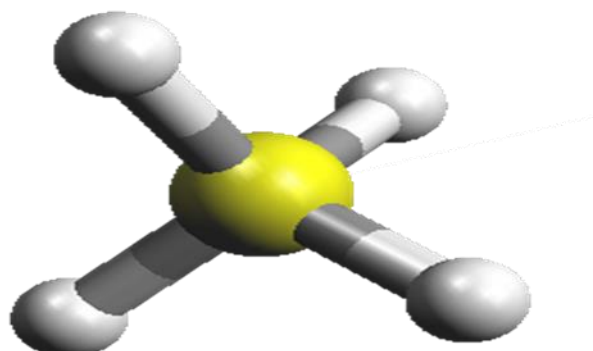
Молекула гексена (ArgusLab)



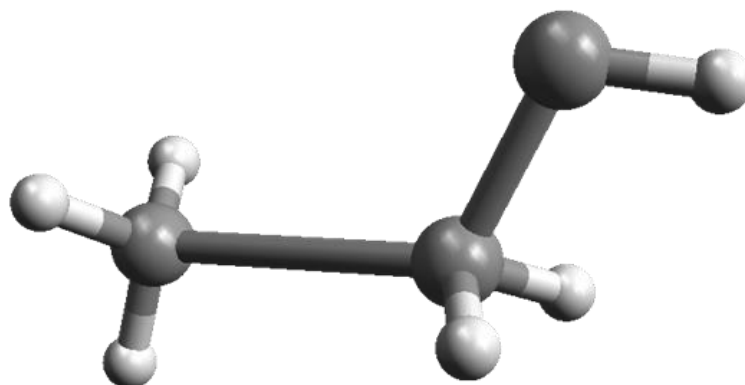
Молекула воды(ArgusLab)



Молекула метана (ArgusLab)

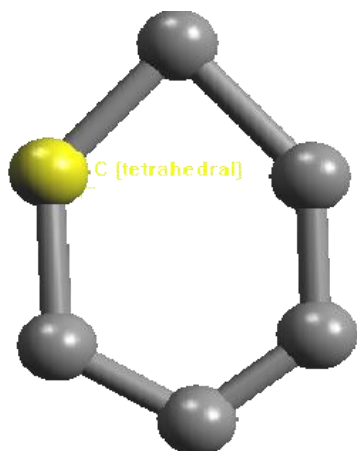


Молекула этилового спирта (ArgusLab)

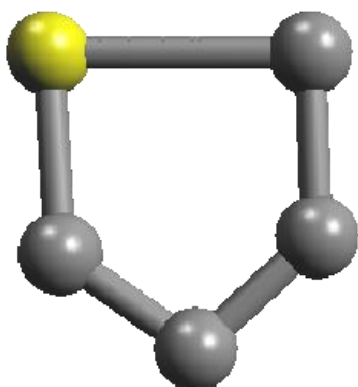


Созданы модели циклических молекул.

Молекула циклогексана(ArgusLab)

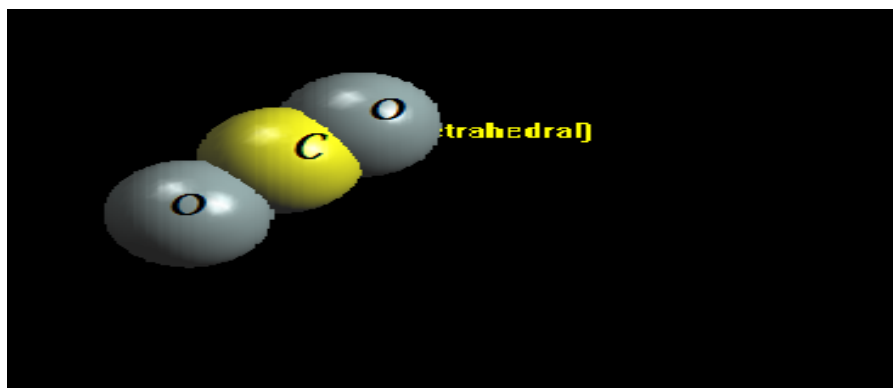


Молекула циклопентана(ArgusLab)



В программе ArgusLab 4.0.1 можно создавать объёмные модели молекул.

Молекула Углекислого газа (ArgusLab)



Программа Microsoft Office PowerPoint 2010

Программа Microsoft Office PowerPoint 2010 обладает большими возможностями при построении молекул и атомов химических веществ. Зная теоретическое строение атомов (количество электронов, протонов, количество орбиталей) можно построить модели атомов используя области задач «Анимация». В Microsoft PowerPoint в области задач «Анимации», для построения моделей атомов используются эффекты входа и выхода, дополнительные возможности управления временными параметрами и новые пути перемещения (заранее заданные пути, по которым перемещаются элементы, перечисленные в списке порядка выполнения эффектов анимации).

В редакторе Microsoft Office PowerPoint 2010 были смоделированы:

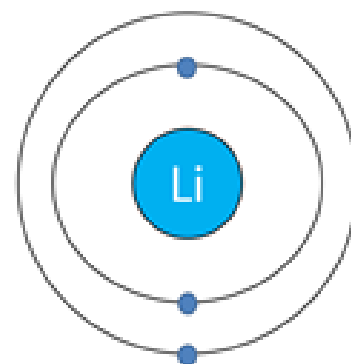
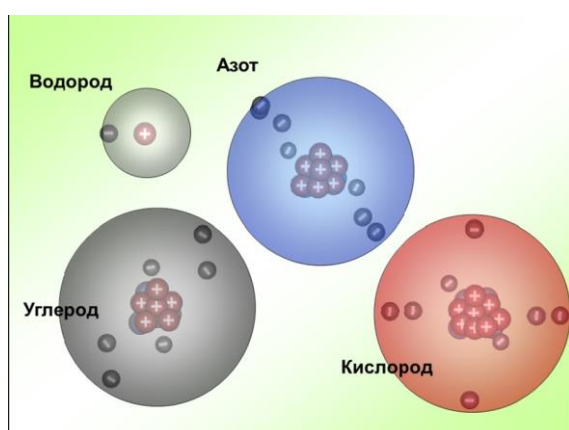
Атом водорода

Атом азота

Атом углерода

Атом кислорода

Атом лития



Заключение

Для развития химической науки важную роль играет не только теоретическое, но и экспериментальное моделирование химических процессов. Моделирование глубоко проникает в теоретическое мышление. Важная познавательная функция моделирования состоит в том, чтобы служить импульсом, источником новых познаний.

После построения моделей, можно сделать вывод: чтобы правильно построить модель, необходимо поставить цель, придерживаться схемы, представленной в теоретической части.

В исследовательской работе были выявлены преимущества использования программ **ArgusLab 4.0.1** и **Microsoft Office Power Point 2010**:

а) Программы обладают понятным интерфейсом; б) Отличаются доступностью в изучении и простотой в управлении, что принципиально важно; в) Программы обладают богатым инструментарием; г) Конструктор молекул ArgusLab 4.0.1 позволит сделать уроки химии интересными и разнообразными.

Подводя итог работы, хотелось бы сделать вывод: цель, поставленная в начале этого исследования, была достигнута. Исследования показали, что действительно можно смоделировать любую молекулу и атом. Выдвинутая гипотеза, верна.

Библиографический список

1. Х.Д.Хельте, В. Зиппль, Д. Роньян, Г. Фолькерс
«Молекулярное моделирование.» - М.: Бином, 2010.
2. О. С. Габриелян, И.Г. Остроумов «Химия: 9-е издание.
Учебник для студентов учреждений среднего
профессионального образования .» - М.: «Академия», 2011.

3. Интернет-ресурсы

<http://ek-ek.jimdo.com/петухин/моделирование2/1-понятие-моделирования-история-развития-математического-моделирования-особенности-компьютерного-моделирования/>

<http://www.gff-lgi.spb.ru/bibl-begin.htm>

<http://www.kinetics.nsc.ru/chichinin/rprogramms.htm>

