

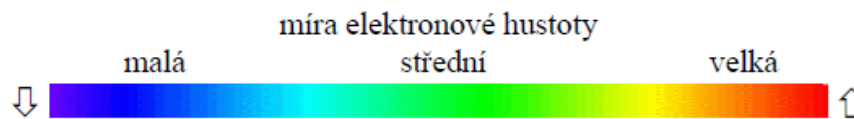
Компьютерные модели как визуальная интерпретация молекул

Mgr. Natálie Karásková, prof. Ing. Karel Kolář,
CSc.

natalie.karaskova@uhk.cz

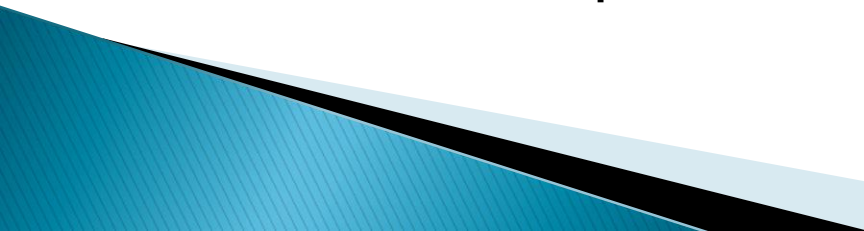
Определение понятие компьютерная модель

- ▶ Результат квантово–химических вычислений
- ▶ Представляет четыре параметра
 - Три параметра представляют упорядочение молекул в пространстве
 - Под четвертым параметром имеется ввиду свойство (напр. электронная плотность), которое выражается цветом
 - Синий цвет – небольшая электронная плотность
 - Красный цвет – большая электронная плотность

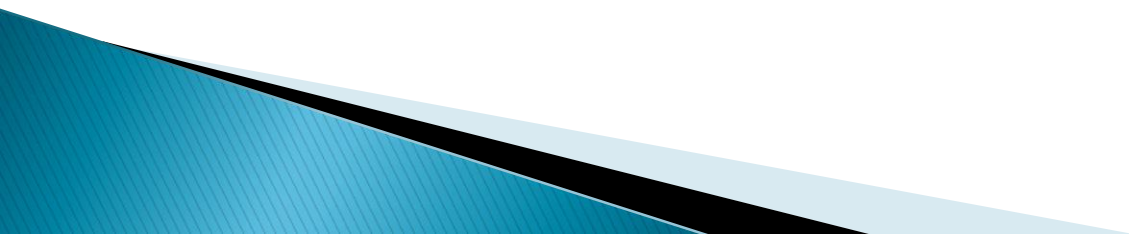


Какие вопросы можно с помощью моделей объяснить?



- ▶ Структуру соединений
 - Взаимные связи между атомами
 - Организацию атомов в пространстве
 - Распределение электронной плотности
 - ▶ Дедукция физических и химических свойств, как например:
 - Реакционный центр молекул
 - Физические свойства соединений (напр. растворимость)
 - Механизм реакций соединений
- 

Цель использования компьютерных моделей на уроках химии

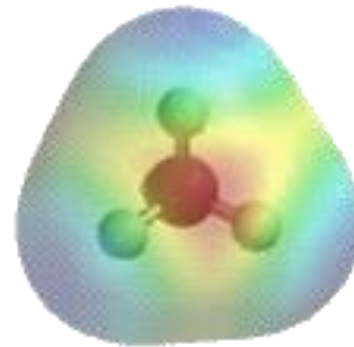
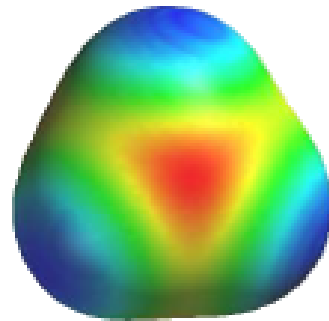




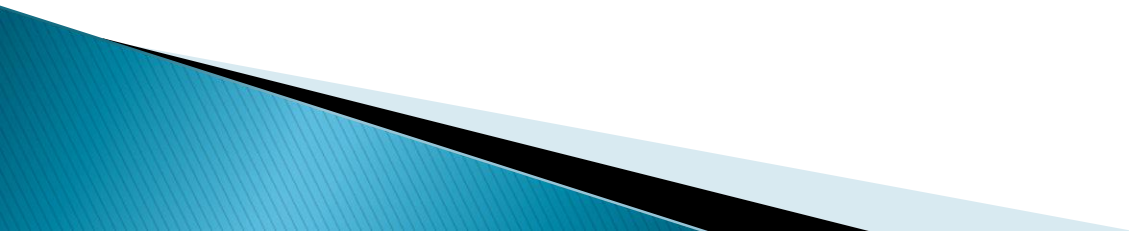
Целью является **наглядность** урока
Модели – **мотивация** для учащихся
и способствуют представлению о
структуре и реактивности веществ

Виды компьютерных моделей

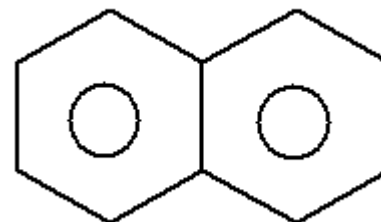
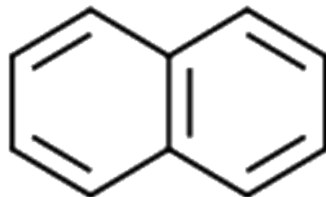
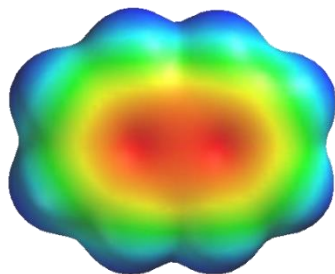
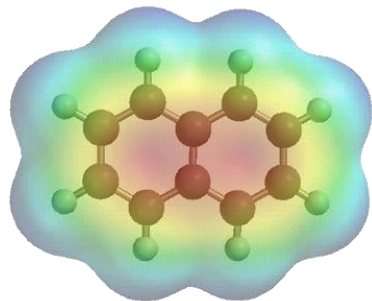
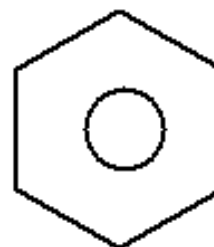
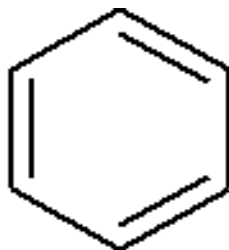
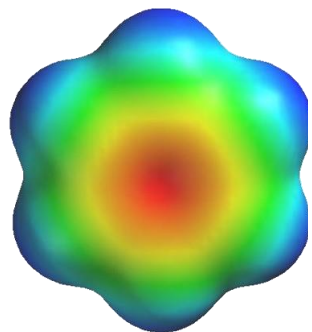
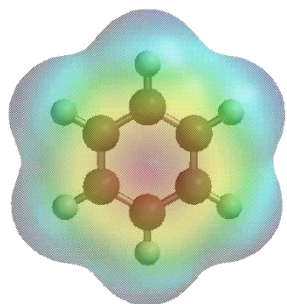
- ▶ Компьютерная модель – простой тип
- ▶ Компьютерная модель – комбинированный тип



Примеры определенных компьютерных моделей молекул

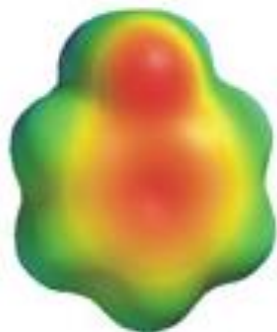


Бензол, нафталин

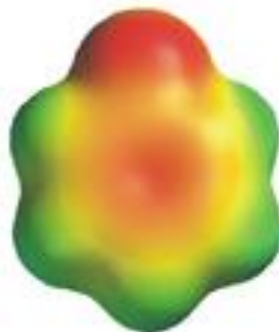


Анилин, фенол, нитробензол, бензонитрил

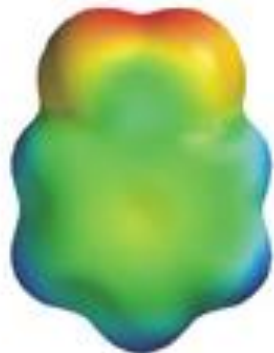
Anilin



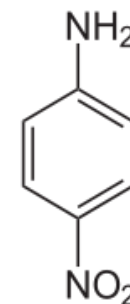
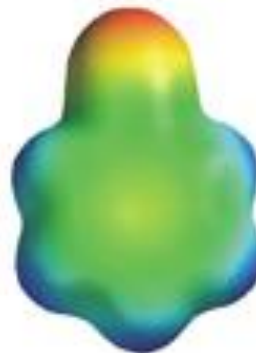
Fenol



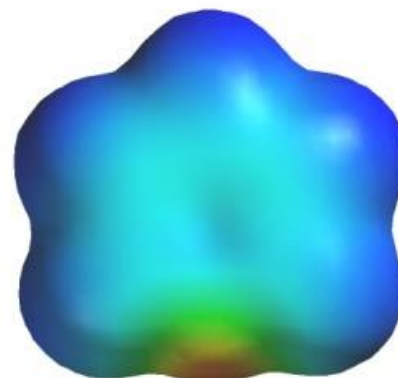
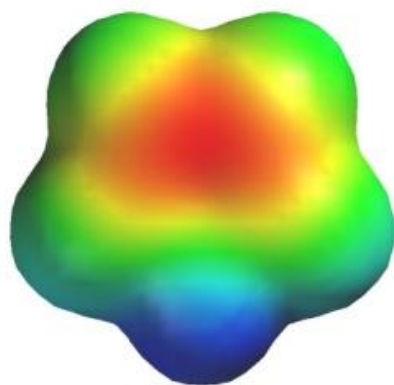
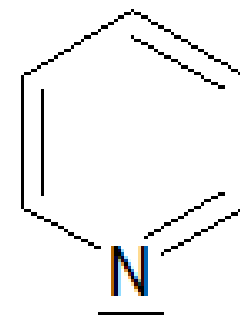
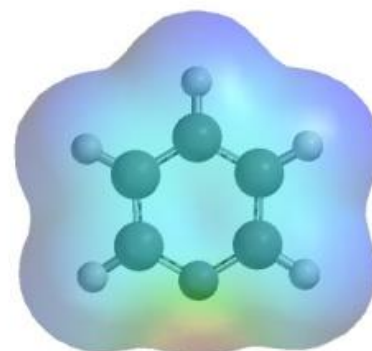
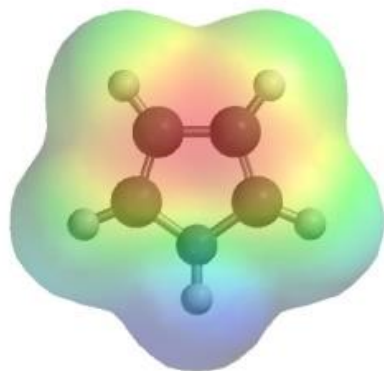
Nitrobenzen



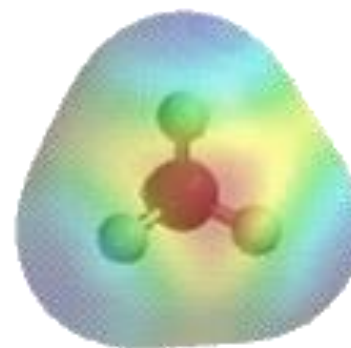
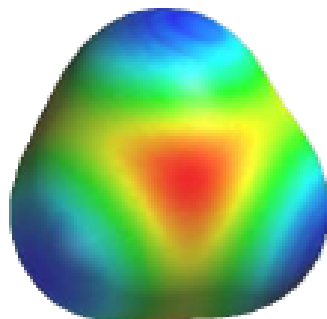
Benzonitril



Пиррол, пиридин



Выводы и результаты



Помогают решать химические свойства
веществ

Благодарю за внимание!
Děkuji Vám za pozornost!



ИСТОЧНИКИ

- ▶ Kolář, K., Myška K., Doležal R., a Marek M. *Počítačové modely ve výuce chemie*. Vyd. 1. Hradec Králové: Gaudeamus, 2006 – 74 c
- ▶ McMurry, J.. *Organická chemie*, Brno–Praha, VUTIM–VŠCHT, 2007 – 1176 c
- ▶ Myška, K., Kolář, K., a Marek M. *Vzorce, modely a počítačová grafika ve výuce chemie*. Hradec Králové: Gaudeamus, 2006 – 76 c.
- ▶ Marek, M. Myška, K. Kolář, K.: Využití molekulárních modelů v úlohách z organické chemie na gymnáziu, *Media4uMagazine*, 7, X3/2010, s. 21–24
- ▶ *PC Spartan Pro User´s Guide*, Irvine : CA Wavefunction. 1999 – 108 c.