مدل‌سازی مولکول‌ها
با استفاده از نرم‌افزار هایپرکم

ژیلا حسن‌زاده مقیمی
دانشجوی کارشناسی ارشد آموزش شیمی دانشگاه شهید رجایی
آزیتا سیدفدایی
دکترای آموزش فیزیک

چکیده

استفادهٔ اثربخش از ظرفیت‌های تازه‌ای که در حوزهٔ علم و فناوری ایجاد شده است از شاخص‌های بارز نظام‌های پیشرو در آموزش‌وپرورش به‌شمار می‌رود. یادگیری و درک ساختار مواد در نتیجهٔ غیرقابل لمس بودن و پیچیدگی آن‌ها اغلب دشوار است. درحالی‌که استفاده از مدل‌سازها برای درک بیشتر این مفاهیم راه‌گشا خواهد بود. استفاده از نرم‌افزار هایپرکم در آموزش چگونگی نمایش مولکول‌ها و پاسخگویی به سؤالات کتاب درسی و کنکور سراسری سودمند است. این شیوه آموزش با سرعت بخشیدن به یادگیری، شرایط یادگیری را نیز برای افراد با استعداد و سلیقه‌های مختلف فراهم می‌کند.

کلیدواژه‌ها: تفکر مولکولی، ساختار لوییس، شکل هندسی، نظریهٔ VSEPR، نرم‌افزار هایپرکم

مقدمه

ضرورت آموزش شیمی و یادگیری آن در سه سطح تفکر مولکولی، نمادی و ماکروسکوپی و توجه زیاد به سطح تفکر مولکولی سبب شده تا ضرورت به‌کارگیری فناوری در برنامهٔ درسی شیمی احساس شود. جهت بررسی ویژگی‌ها و رفتار مواد شیمیایی، در اندازه‌های اتمی و مولکولی، استفاده از نرم‌افزارها برای تسهیل یادگیری سطح تفکر مولکولی سودمند است.

همچنین استفاده از تصاویر شبیه‌سازی شده توسط نرم‌افزار، برای نمایش رفتار اتم‌ها و مولکول‌ها می‌تواند در این زمینه راه‌گشا باشد. [۱]

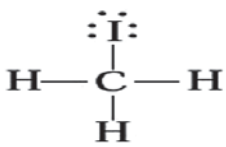
در ادامه با بیان مفاهیم مرتبط با نمایش مولکول‌ها، به کاربرد نرم‌افزار هایپرکم در آموزش این مبحث می‌پردازیم.

انواع نمایش مولکول‌ها

آ. مدل الکترون ـ نقطه برای نشان دادن چگونگی اتصال اتم‌ها به یکدیگر و نمایش مولکول حاصل، می‌توان الکترون‌های ظرفیتی شرکت‌کننده در تشکیل پیوند را با استفاده از نقطه نشان داد. به این شیوهٔ نمایش مدل الکترون ـ نقطه می‌گویند.

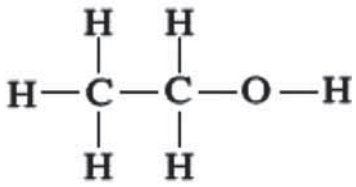
شکل ۱ مدل الکترون نقطه

ب. ساختار لوییس اگر در مدل الکترون ـ نقطه به جای هر جفت الکترون پیوندی، یک خط قرار دهیم ساختار لوییس به‌دست می‌آید.



شکل ۲ ساختار لوییس

پ. مدل ساختاری در این مدل الکترون‌های ناپیوندی نمایش داده نمی‌شوند.



شکل ۳ مدل ساختاری

ت. شکل هندسی براساس نظریهٔ نیروی دافعهٔ جفت الکترون‌های لایهٔ ظرفیت[1]، نیروهای دافعهٔ الکترواستاتیک موجود بین قلمروهای الکترونی موجب می‌شود که این قلمروها تا آنجا که امکان داشته باشد، از یکدیگر فاصله بگیرند. این جهت‌گیری به‌گونه‌ای است که پایدارترین آرایش هندسی را برای مولکول فراهم می‌کند. در این تعریف پیوندهای یگانه، دوگانه یا سه‌گانه، یک قلمرو به‌شمار می‌آید.

برای نشان دادن شکل هندسی مولکول‌ها می‌توان از بادکنک‌های باد شده استفاده کرد. دو بادکنک کوچک را به یک اندازه باد کنید. سپس با استفاده از نخ، سر بادکنک‌ها را به یکدیگر ببندید به طوری که تا حد امکان آزاد اما به هم نزدیک باشند. بادکنک‌ها را روی پارچهٔ پشمی بکشید تا بار الکتریکی پیدا کنند. سپس آن‌ها را روی میز رها کنید تا آرایش ثابتی به خود بگیرند. بادکنک‌ها کدام‌یک از این دو آرایش را به خود خواهند گرفت؟

شکل ٤ آرایش بادکنک‌ها برای نشان دادن دو قلمرو

اگر در آزمایش بالا از سه بادکنک استفاده کنید، کدام آرایش هندسی زیر برای آن‌ها مناسب‌تر است؟

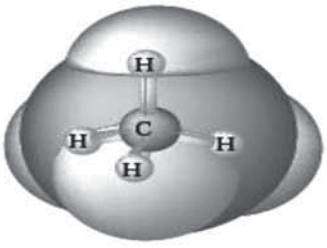
شکل ٥ آرایش بادکنک‌ها برای نشان دادن سه قلمرو

اگر چهار بادکنک را به یکدیگر گره بزنید، بادکنک‌ها کدام‌یک از آرایش‌های زیر را اختیار می‌کنند؟

شکل ٦ آرایش بادکنک‌ها برای نشان دادن چهار قلمرو

شکل هندسی مولکول‌ها را می‌توان براساس این مدل‌ها نشان داد:

- مدل گلوله (نمادی برای نمایش اتم) و میله (نمادی برای نمایش پیوند کووالانسی)
- مدل فضا پرکن
- مدل خط‌چین (نمادی برای نمایش جهت‌گیری اتم دور از بیننده) و گوه (نمادی برای نمایش جهت‌گیری اتم نزدیک به بیننده) [۲]



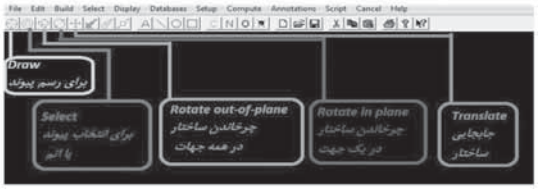
شکل ۷ شکل هندسی مولکول متان (ادغام هر سه مدل)

معرفی نرم‌افزار

نرم‌افزار هایپرکم[۲]، یک برنامه گرافیکی و محاسباتی است که برای رسم ساختار مولکول‌ها، بهینه‌سازی اولیه و انجام محاسبات می‌توان از آن استفاده کرد. البته سطح محاسبات آن خیلی بالا نیست [۳]. این نرم‌افزار قدرتمند از قابلیت‌هایی همچون توانایی نمایش ساختارهای مولکولی به‌صورت سه‌بعدی با قابلیت چرخش، انتخاب، تغییر اندازه و کنترل به‌وسیله موس و... برخوردار است. این نرم‌افزار محصولی از شرکت ماکو لب[۳] است.

معرفی کلیدهای کاربردی

در تصویر زیر پنج کلید کاربردی مهم که در رسم ساختارها بیشتر به‌کار می‌آیند معرفی شده‌اند.

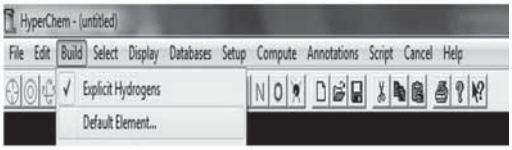


شکل ۸ کلیدهای کاربردی در نرم‌افزار هایپرکم

کار با نرم‌افزار

به دو روش زیر می‌توان جدول تناوبی را باز، و یک عنصر را انتخاب کرد:

آ. Build → Default Element



(آ)

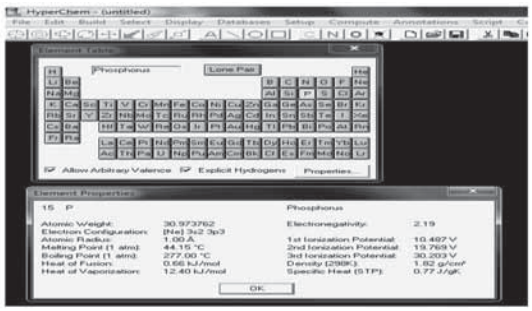
ب. Drawing → Dabel Click

(ب)

شکل ۹ روش‌های باز کردن جدول تناوبی عنصرها

با باز شدن جدول و مشخص کردن نوع عنصر، با استفاده از گزینه Properties می‌توان مشخصات کامل عنصر مورد نظر را به‌دست آورد.

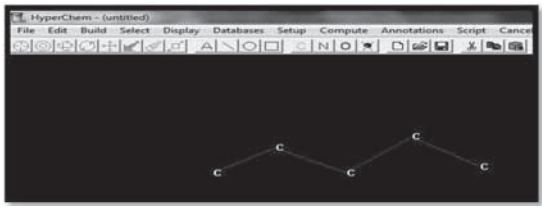
برای نمونه، با انتخاب عنصر فسفر می‌توان به مشخصات آن شامل عدد اتمی، جرم اتمی، آرایش الکترونی، شعاع اتمی، نقطهٔ ذوب و جوش، گرمای ذوب و تبخیر، الکترونگاتیوی، انرژی اولین، دومین و سومین یونش، چگالی و ظرفیت گرمایی ویژه آن دسترسی یافت.



شکل ۱۰ انتخاب عنصر و آوردن مشخصات آن

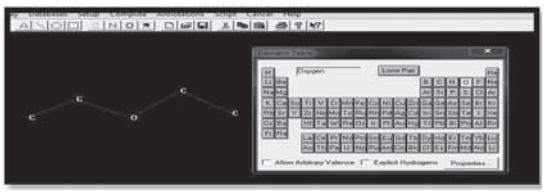
گزینهٔ Allow Arbitrary Valence و Explicit Hydrogen's به ما اجازه می‌دهند ظرفیت‌های بالاتر از ظرفیت H را اضافه کنیم. البته ضرورتی ندارد این گزینه فعال باشد.

پس از اینکه جدول تناوبی باز شد و نوار ابزار Draw را انتخاب کردیم، روی عنصر مورد نظر click می‌کنیم. سپس روی صفحه چپ‌click کرده، Drag and Draw را گرفته، می‌کشیم. برای پاک کردن هم روی موردی که می‌خواهیم پاک کنیم راست click می‌کنیم.



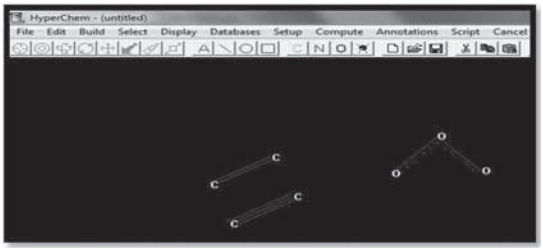
شکل ۱۱ رسم ساختار پنتان با استفاده از نوار ابزار Draw

اگر خواستیم یکی از عنصرها را عوض کنیم روی عنصر مورد نظر click کرده، عنصری را که می‌خواهیم، جایگزین می‌کنیم.



شکل ۱۲ جایگزین کردن اکسیژن به‌جای کربن وسط و ایجاد ساختار دی‌اتیل اتر

برای ایجاد پیوند دوگانه، روی هر پیوند قبلی یک‌بار click می‌کنیم. اگر دوبار click کنیم، پیوند سه‌گانه می‌شود. برای نمایش رزونانس کافی است که روی یکی از پیوندها دوبار click کنیم.



شـــکل ۱۳ پیوند دوگانه در اتیلن، پیوند ســه‌گانه در استیلن و ساختار رزونانسی در مولکول اوزون

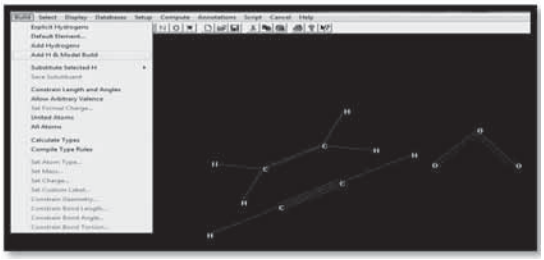
پس از رســـم شکل برای مرتب کردن آن و اضافه کردن H در موقعیت‌های قبلی، می‌توان Hها را یا به‌صورت دستی اضافه کرد، یا به‌صورت زیر عمل کرد:

1. Build: Add Hydrogen's

پر کردن ظرفیت‌های باقی‌مانده

2. Add H and Model Build

افزودن هیدروژن و بهینه‌سازی ساختار

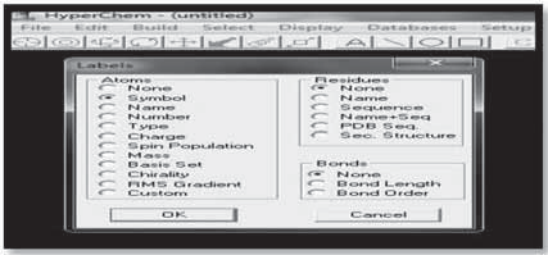


شکل ۱۴ افزودن هیدروژن و بهینه‌سازی ساختار

عملکردهای دیگر

برای نشان‌دار کردن اتم‌ها:

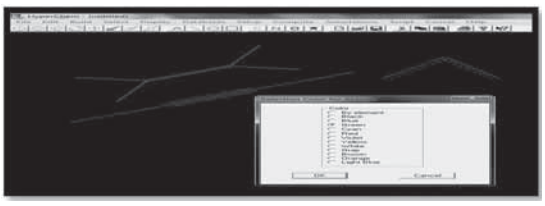
Display → Labels →



شکل ۱۵ نشان‌دار کردن اتم‌ها

برای تغییر رنگ ساختار:

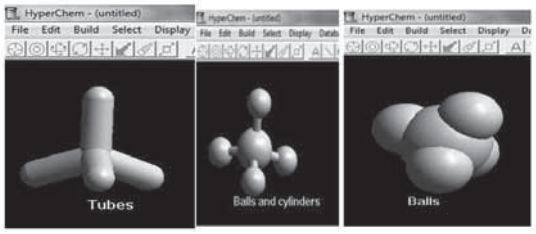
Display → Color atoms... → Color



شکل ۱۶ تغییر رنگ ساختار

نمایش‌های مختلف رسم شده:

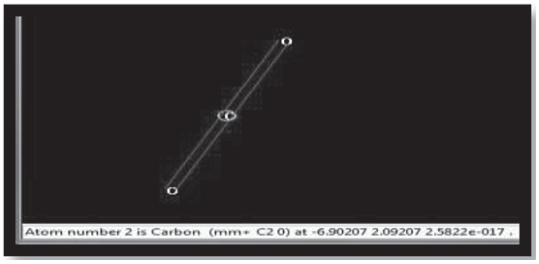
Display → Rendering → select



(پ) (ب) (آ)

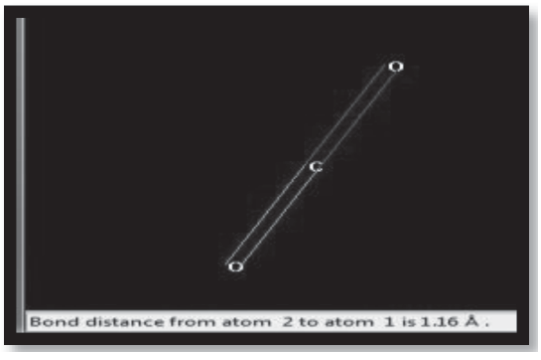
شـــکل ۱۷ نمایش‌های مختلف شکل هندسی (آ) مدل فضا پرکن، (ب) مدل گلوله و میله، (پ) مدل لوله

گزینهٔ select با انتخاب یک عنصر، مشخصات آن عنصر را ارائه می‌دهد.



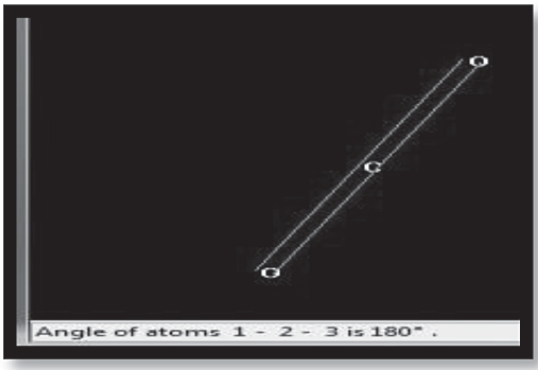
شکل ۱۸ نمایش مشخصات عنصر

با انتخاب دو عنصر مشترک در یک پیوند یا انتخاب پیوند میان آن‌ها، طول پیوند مشخص می‌شود.



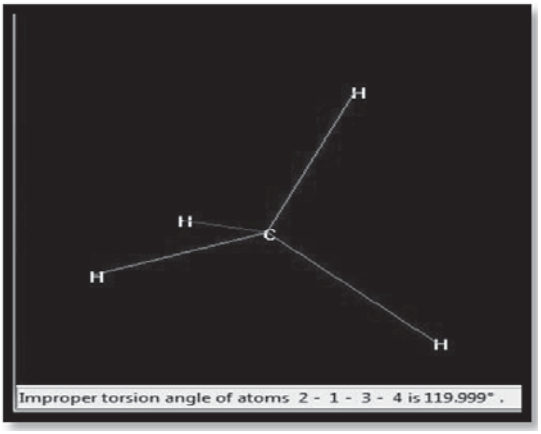
شکل ۱۹ نمایش طول پیوند

بـــا انتخـــاب دو پیوند یا ســـه اتم مشـــترک در دو پیوند، زاویهٔ پیوندی مشخص می‌شود.



شکل ۲۰ نمایش زاویه پیوندی

با انتخاب چهار اتم یا سه پیوند متصل به هم، زاویهٔ دووجهی داده می‌شود.



شکل ۲۱ نمایش زاویهٔ دووجهی

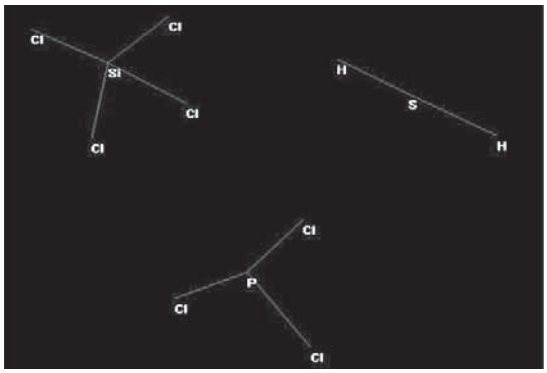
طرح درس

با توجه به توضیحاتی که برای رسم انواع ساختار مولکول‌ها آورده شد، به‌وسیله این نرم‌افزار به پرسش‌هایی از کتاب درسی شیمی (۲) پاسخ می‌دهیم.

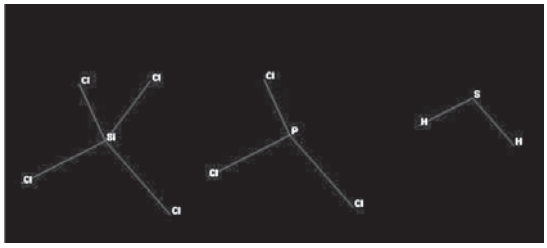
خود را بیازمایید صفحه ۸۹، بخش ۴، کتاب شیمی (۲)

شکل هندسی مولکول‌های زیر را پیش‌بینی کنید.

H_2S و PCl_3 و $SiCl_4$



شکل ۲۲

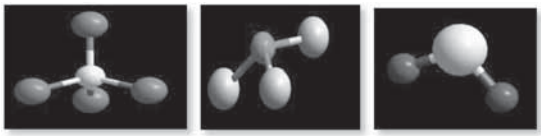


شکل ۲۳

نخست با استفاده از Drawing و انتخاب عنصرها از جدول، ساختار اولیهٔ مولکول‌ها را رسم می‌کنیم (بدون رعایت زاویه‌ها)، شکل ۲۲.

سپس با استفاده از Model Build شکل هندسی مولکول‌ها به‌دست می‌آید، شکل ۲۳.

همچنین می‌توان این شکل‌های هندسی را با استفاده از مدل‌های موجود در Display → Rendering → select نشان داد:



شکل ۲۴ شکل هندسی مولکول‌ها براساس مدل گلوله و میله

فکر کنید ـ صفحه ۱۰۰، بخش ۵، کتاب شیمی (۲)

۳. در یکی از روش‌های نمایش فرمول ساختاری آلکان‌ها (نقطه ـ خط)، پیوند بین اتم‌های کربن با یک خط تیره و اتم‌های کربن با نقطه نشان داده می‌شوند. در این روش اتم‌های هیدورژن را نشان نمی‌دهند. به کمک نمونهٔ رسم شده، فرمول نقطه ـ خط آلکان‌های خواسته شده را رسم کنید.

آ) ۳ـ متیل پنتان

ب) ۳ـ متیل هگزان

پ) هپتان

ت) $CH_3\text{-}CH(CH_3)\text{-}CH_2\text{-}CH(CH_3)\text{-}CH_3$

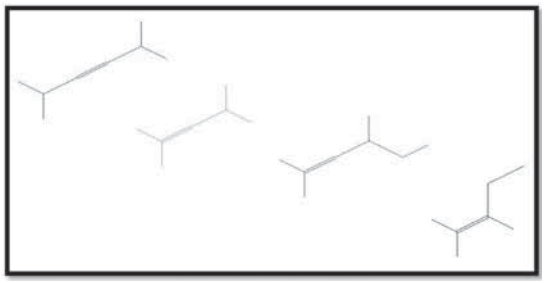
برای رسم مدل نقطه ـ خط آلکان‌های موردنظر کافی است به این ترتیب عمل کنید: (در حالت Display → Labels atoms → none) با انتخاب کربن از جدول، تعداد کربن موجود در زنجیر اصلی را مشخص کرده، شاخه‌ها را در مکان‌های موردنظر روی زنجیر اصلی اضافه می‌کنیم. در پایان، با استفاده از Model Build، ساختار بهینه می‌شود.

در پایان، دو نمونه از پرسش‌های آزمون سراسری ـ که به کمک این نرم‌افزار به‌راحتی می‌توان به پاسخ آن دست یافت ـ آورده می‌شود.

آزمون سراسری ورودی دانشگاه‌های کشور ــ سال ۱۳۹۳
آزمون اختصاصی گروه آزمایشی علوم ریاضی

۲۱۰ در نام‌گذاری کدام آلکــن، اتم‌های کربن زنجیر اصلی را می‌توان از هر دو سوی مولکول شماره‌گذاری کرد؟
۱) ۲، ۳ـ دی‌متیل ـ ۲ـ پنتن
۲) ۲، ٤ ـ دی‌متیل ـ ۲ـ هگزن
۳) ۲، ٤ـ دی‌متیل ـ ۲ـ پنتن
٤) ۲، ٥ ـ دی‌متیل ـ ۳ ـ هگزن

برای پاسخ به این پرسش کافی است با رسم مدل نقطه ـ خط، ساختار متقارن را انتخاب کنیم.
برای گزینه‌های ۱ و ۳ پنج کربن و گزینه‌های ۲ و ٤ شش کربن رسم می‌کنیم.
لفظ «ــِن» در انتهای نام ترکیب‌ها، به‌معنای آلکن بودن آن‌ها و وجود پیوندهای دوگانه روی شــماره کربن ذکر شــده اســت. بنابرایــن در گزینه‌های ۱ و ۲ و ۳ روی کربن دوم، و در گزینه ٤ روی کربن ســوم پیوند دوگانه قرار می‌دهیم و شاخه‌های متیل (یک‌کربنی) را روی کربن‌های مورد نظر می‌گذاریم.



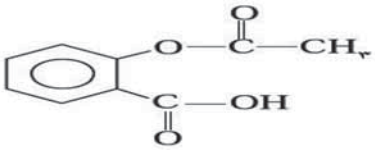
شکل ۲۵ پاسخ سؤال کنکور با نرم‌افزار هایپرکم

با توجه به مدل رسم شده با نرم‌افزار، گزینهٔ ٤ درست است.

آزمون سراسری ورودی دانشگاه‌های کشور ــ سال ۱۳۹۳ آزمون اختصاصی گروه آزمایشی علوم تجربی

۲٤٤. در مولکــول آســپیرین ..... اتم دارای ســه قلمرو الکترونی‌اند، ..... پیوند دوگانه در ساختار آن وجود دارد و امکان تشکیل پیوند هیدروژنی بین مولکول‌های آن وجود .....
۱) ۸، ٥، ندارد.
۲) ۸، ٥، دارد.
۳) ٦، ۳، ندارد.
٤) ٦، ۳، دارد.

برای پاسخ به این پرسش با توجه به ساختار آسپرین ـ که در آن یک حلقه بنزنی، یک عامل کربوکسیل و یک عامل استر روی دو کربن مجاور حلقه قرار می‌گیرند ـ اتم‌های کربن دارای پیوند دوگانه، ســه قلمرویی هستند. (شش کربن در حلقه و دو کربن در بیرون حلقه)
درون حلقه ســه پیوند دوگانه به‌صورت یک‌درمیان وجود دارد که رزونانــس دارند. بنابراین ٥ پیوند دوگانه در ســاختار وجود دارد و به‌دلیل داشــتن عامل OH، دارای پیوند هیدروژنی است. بنابراین گزینهٔ ۲ درست است.



شکل ۲٦ ساختار آسپرین

نتیجه‌گیری

در آمــوزش و تدریــس مفاهیم شــیمی اســتفاده از ابزار و روش‌های مناســب، ضمن افزودن به سرعت یادگیری، شرایط یادگیــری را نیز برای اســتعداد و ســلیقه‌های مختلف فراهم می‌آورد.
بــه کمــک هایپرکــم کــه یــک نرم‌افــزار حرفــه‌ای بــرای شیمی‌دان‌هاســت، می‌توان بسیاری کارها را که قبلاً روی کاغذ و تخته‌سیاه به‌صورت دستی انجام می‌شد به‌صورت نرم‌افزاری و سه‌بعدی به انجام رساند.
اســتفادهٔ به‌جا و به‌موقــع از این نرم‌افزار، به‌عنوان یک رســانهٔ آموزشی در تکمیل فرایند یاددهی ـ یادگیری و تلفیق شیوه‌های مختلــف آموزش در این فراینــد، معلمان حرفــه‌ای را در ادامهٔ آموزش معنادار یاری می‌رساند.

*** پی‌نوشت‌ها**

1. VSEPR
2. hyper chem http://hyperchem.software.informer.com/download/
3. Mako Lab

*** منابع**

۱. بدریان، عابد، «آموزش شــیمی راهبردها و شــیوه‌های آموزش شــیمی در مدارس»، مبنای خرد، ۱۳۸۸.
۲. شــورای تألیف گروه شــیمی دفتر برنامه‌ریزی و تألیف کتب درســی «شــیمی(۲) و آزمایشگاه سال دوم دبیرستان»، شرکت چاپ و نشر کتاب‌های درسی ایران، ۱۳۹۳.
۳. باوفا، صادقعلی و فهمیه، «آموزش کاربردی نرم‌افزارهای Gaussian, GaussView, ChemOffice, HyperChem&AIM»، اندیشه‌سرا، ۱۳۹۳.