

Karel Kolář\*  
Karel Myška  
Ivan Holý

*Uniwersytet Hradec Králové, Katedra Chemii, Czechy*  
*e-mail: karel.kolar@uhk.cz*

## ZASTOSOWANIE MODELI CZĄSTECZEK W KSZTAŁCENIU NAUCZYCIELI CHEMII

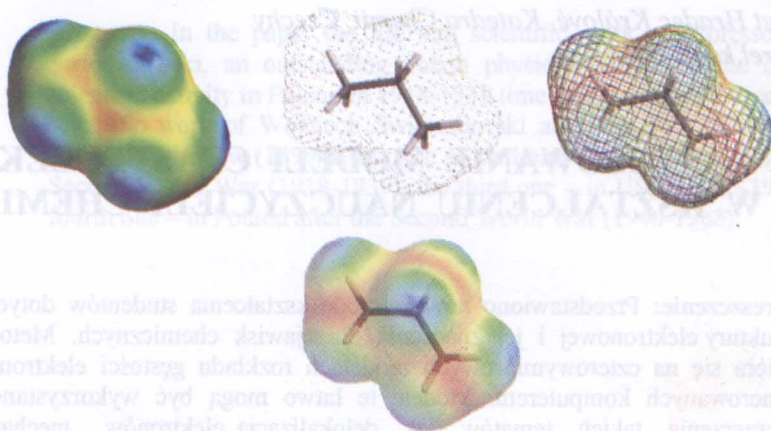
**Streszczenie:** Przedstawiono nową metodę kształcenia studentów dotyczącą struktury elektronowej i jej znaczenia dla zjawisk chemicznych. Metoda ta opiera się na czterowymiarowych modelach rozkładu gęstości elektronowej generowanych komputerem. Modele te łatwo mogą być wykorzystane do rozszerzenia takich tematów jak delokalizacja elektronów, mechanizm reakcji, konformacja.

Podnoszenie jakości kształcenia nauczycieli chemii wymaga zastosowania nowoczesnych środków dydaktycznych, które umożliwiają wizualną prezentację materiału dydaktycznego. W kształceniu chemicznym istnieje duża możliwość zastosowania technologii informacyjnych do prezentacji struktury i reaktywności związków organicznych.

Przykładem tych aplikacji są modele cząsteczek stanowiące poglądowy środek prezentacji struktury materii. W kształceniu chemicznym istnieje możliwość prezentacji rozkładu gęstości elektronowej lub potencjału elektrostatycznego w molekuale. Modele przedstawiające rozkład gęstości elektronowej pozwalają wnioskować o właściwościach fizycznych, chemicznych i biologicznych danego związku.

Modele te uwzględniające rozkład gęstości elektronowej w stosunku do wielkości i kształtu cząsteczek stanowią mapę właściwości (property map), która jest czterowymiarowa. Trzy wymiary dotyczą rozmieszczenia cząsteczki w przestrzeni, a wymiar czwarty prezentuje odpowiednią właściwość cząsteczki. Do wyrażenia jej stosuje się odpowiednio dobraną skalę barw, w której kolor niebieski obrazuje małą gęstość elektronową, natomiast kolor czerwony dużą gęstość elektronową.

Rozkład gęstości elektronowej cząsteczki można zaprezentować kilkoma sposobami (rys.1,2), przedstawiając ją w całej cząsteczce lub w wiązaniu (model of the bond).

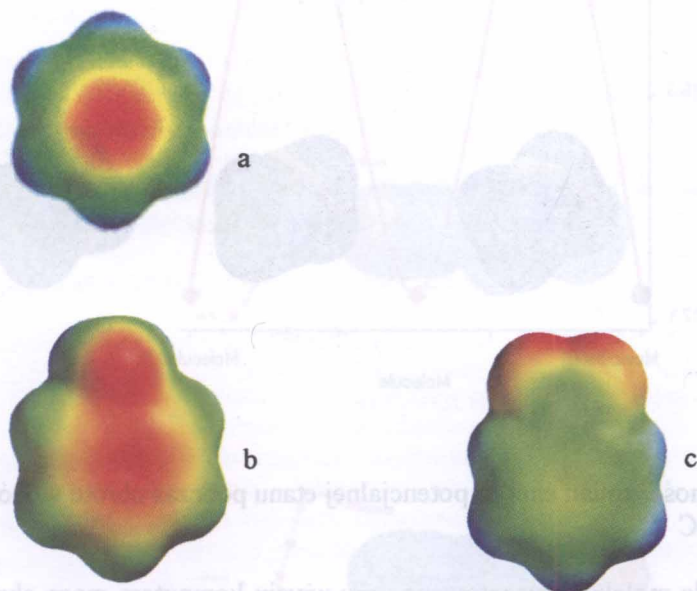


Rys. 1. Różne modele cząsteczki propanu



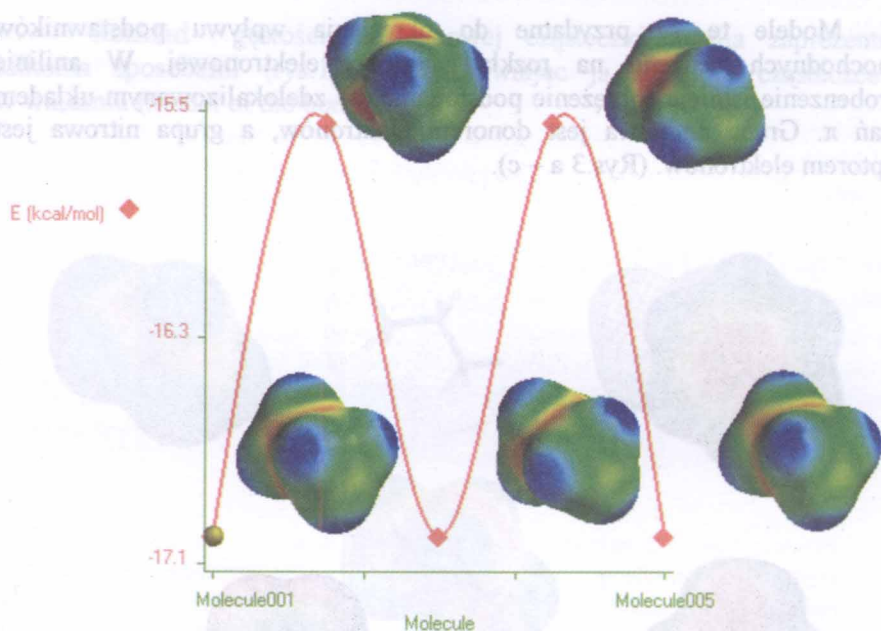
Rys. 2. Rozkład gęstości elektronowej w cząsteczce propanu

Modele te są przydatne do określenia wpływu podstawników w pochodnych benzenu na rozkład gęstości elektronowej. W anilinie i nitrobenzenie istnieje sprzężenie podstawnika ze zdelokalizowanym układem wiązań  $\pi$ . Grupa aminowa jest donorem elektronów, a grupa nitrowa jest akceptorem elektronów. (Rys.3 a – c).



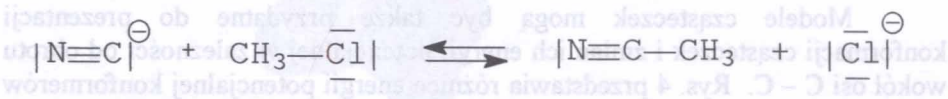
Rys. 3. Rozkład gęstości elektronowej w molekułach: a) benzenu, b) aniliny, c) nitrobenzeniu

Modele cząsteczek mogą być także przydatne do prezentacji konformacji cząsteczek i zmian ich energii potencjalnej w zależności od obrotu wokół osi C – C. Rys. 4 przedstawia różnice energii potencjalnej konformerów (izomerów rotacyjnych) etanu.



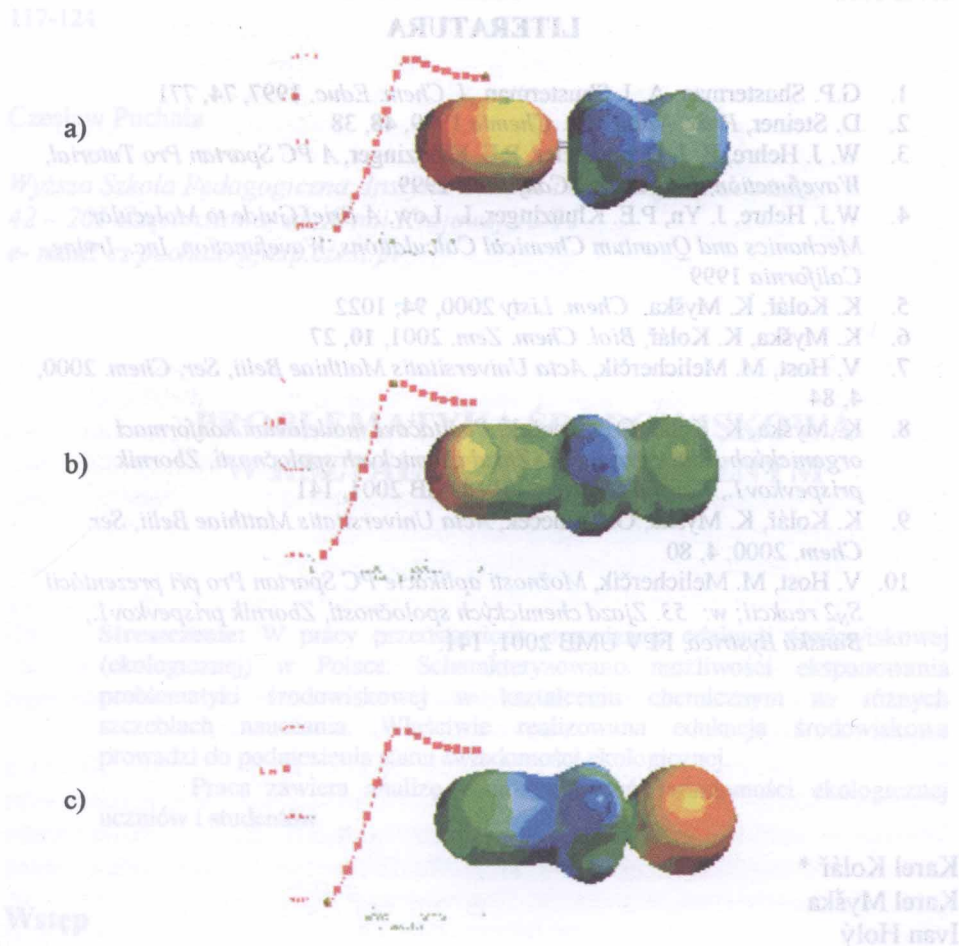
Rys. 4. Zależność zmian energii potencjalnej etanu podczas obrotu wokół osi C-C

Modele molekuł prezentowane przy użyciu komputera mogą służyć do symulacji przebiegu reakcji związków organicznych, np. reakcji podstawienia nukleofilowego  $S_N2$  przebiegającej między chlorkiem metylu i anionem cyjankowym, zgodnie z następującym równaniem :



Symulacja przebiegu reakcji chemicznej przy zastosowaniu modeli komputerowych przedstawia zmiany gęstości elektronowej zachodzące w trakcie jej przebiegu. Na rys. 5 przedstawiono za pomocą modeli trzy graniczne stany reakcji chemicznej: a) początkowy, b) przejściowy i c) końcowy.





Rys. 5. Symulacja reakcji chemicznej zachodzącej między cząsteczką chlorku metylu i anionem cyjankowym

Modele graficzne związków chemicznych w sposób poglądowy ukazują strukturę i reaktywność związków. Jest to jeden z wariantów innowacji procesu kształcenia chemicznego w szkołach wyższych i średnich.

Polscy nauczyciele chemii uczestniczyli w konferencjach organizowanych przez Agencję 21. Polscy aktywnie uczestniczyli w tych konferencjach, a jej wytyczne i zalecenia znalazły swoje odbicie w aktach prawnych i dokumentach wydanych w naszym kraju. Jednym z nich jest Narodowa Strategia Edukacji Ekologicznej, której przygotowanie zleciła Agencja 21.

## LITERATURA

1. G.P. Shusterman, A. J. Shusterman, *J. Chem. Educ.* 1997, 74, 771
2. D. Steiner, *Prax. Naturwiss. Chemie* 1999, 48, 38
3. W. J. Hehre, B. J. Deppemeier, P.E. Klunzinger, *A PC Spartan Pro Tutorial, Wavefunction, Inc., Irvine, California* 1999
4. W.J. Hehre, J. Yn, P.E. Klunzinger, L. Low, *A Brief Guide to Molecular Mechanics and Quantum Chemical Calculations, Wavefunction, Inc., Irvine, California* 1999
5. K. Kolář, K. Myška, *Chem. Listy* 2000, 94, 1022
6. K. Myška, K. Kolář, *Biol. Chem. Zem.* 2001, 10, 27
7. V. Host, M. Melicherčík, *Acta Universitatis Matthiae Belii, Ser. Chem.* 2000, 4, 84
8. K. Myška, K. Kolář, O. Tomeček, *Počítačové modelování konformací organických sloučenin; w: 53. Zjazd chemických společností, Zborník príspevkov I., Banská Bystrica, FPV UMB* 2001, 141
9. K. Kolář, K. Myška, O. Tomeček, *Acta Universitatis Matthiae Belii, Ser. Chem.* 2000, 4, 80
10. V. Host, M. Melicherčík, *Možnosti aplikácie PC Spartan Pro při prezentácii S<sub>N</sub>2 reakcií; w: 53. Zjazd chemických spoločností, Zborník príspevkov I., Banská Bystrica, FPV UMB* 2001, 141.

Karel Kolář \*  
Karel Myška  
Ivan Holý

**Application of molecular models  
in the education of chemistry teachers**

**Abstract:** A new method for education of chemistry teachers, concerning electronic structure and its importance for chemical phenomena is presented. The method relies on computer generated four dimensional models of electron density distributions. These models are easily applied to a broad range of topics such as delocalisation of electrons, reaction mechanisms and conformation.