

Жаркова Оксана Михайловна

канд. физ.-мат. наук, доцент

Губина Лина Владиславовна

студентка

Научный руководитель

Исаев Владислав Андреевич

д-р физ.-мат. наук, профессор

ФГБОУ ВО «Кубанский государственный университет»

г. Краснодар, Краснодарский край

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ИНСТРУМЕНТ ЦИФРОВОГО ОБУЧЕНИЯ: ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ

***Аннотация:** в статье показаны возможности молекулярного моделирования как инструмента цифрового обучения на примере конформационного анализа ароматических углеводородов. Описана методическая схема, объединяющая молекулярную механику, молекулярную динамику для визуализации конформаций и TDDFT-расчёты в Python для интерпретации электронных спектров. Представленные результаты могут быть использованы в лабораторном практикуме и курсовом проектировании по молекулярному моделированию.*

***Ключевые слова:** молекулярное моделирование, цифровое обучение, конформационная нежесткость.*

Введение.

Молекулярное моделирование (молекулярная механика ММ, молекулярная динамика МД, квантово-химические расчёты) – ключевой цифровой инструмент в химическом образовании, позволяющий визуализировать вращение фрагментов молекул и связь конформаций с их свойствами.

Ароматические углеводороды с несколькими кольцами – наглядный объект для цифрового обучения: их конформационная подвижность определяет оптиче-

ские свойства (OLED, сцинтилляторы). Изучение таких соединений в виртуальной среде позволяет сформировать у обучающихся системное представление о взаимосвязи «структура – конформация – свойство».

В работе показано применение компьютерного моделирования в учебном процессе для анализа вращения, расчёта спектров и интерпретации данных.

Цифровые инструменты молекулярного моделирования в образовании.

Молекулярное моделирование связывает абстрактную теорию с виртуальным экспериментом, что особенно важно для изучения конформационно нежестких систем. В данной работе компьютерная химия выступает не только как исследовательский, но и как дидактический инструмент.

Методы молекулярной механики и динамики полезны для оптимизации геометрии, визуализации вращения колец и поиска устойчивых конформаций [1]. Благодаря высокой скорости и наглядности они востребованы в учебных работах, а удобной платформой для их реализации служит ChemOffice. Метод TDDFT (теория функционала плотности в временном приближении) [2] занимает оптимальную нишу для образовательных задач: он точнее полуэмпирических методов, требует меньше ресурсов, чем неэмпирические подходы, а его реализация в среде Python делает его доступным для студентов.

Предложенная методическая схема включает два уровня: пакет ChemOffice (для визуализации и молекулярной динамики) и среду Python (для TDDFT-расчётов и обработки данных). Python-скрипты позволяют студентам автоматизировать расчёт спектральных характеристик для различных конформаций. Такой подход формирует понимание компромисса между точностью модели и вычислительными затратами, а сравнение с литературными данными учит критически оценивать методы. Набор инструментов от молекулярной механики до TDDFT в Python покрывает полный цикл обучения: от визуализации геометрии до интерпретации спектров.

Объекты исследования как учебные модели.

Учебные объекты должны быть концептуально ясными, вычислительно доступными и практически значимыми. Авторы статьи выбрали молекулы дифенила, паратерфенила и дифенилметана (рис. 1). Они обладают наглядной системой сопряжённых или разделённых метановым мостиком ароматических колец, вращение которых легко визуализировать и количественно охарактеризовать. Несмотря на малый размер, молекулы демонстрируют сложное конформационное поведение [3].

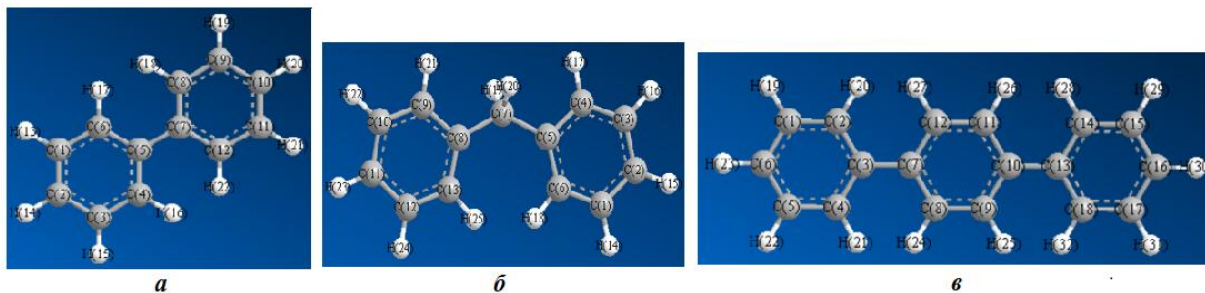


Рис. 1. Структурные формулы молекул дифенила (а), дифенилметана (б), паратерфенила (в) после оптимизации геометрии методом ММ в ChemOffice

Целенаправленный выбор объектов позволяет последовательно оценить влияние двух ключевых структурных факторов: увеличение числа ароматических колец, замена прямой связи между кольцами в дифениле на метановый мостик в дифенилметане. Такая двухфакторная схема особенно ценна в обучении: студенты могут изолированно анализировать каждый параметр.

Результаты моделирования и их интерпретация в учебном процессе

Расчёты выполнены в газовой фазе (упрощение для начального этапа обучения). Методом МД выявлены устойчивые внеплоскостные конформации дифенила, соответствующие с углам поворота колец 40° , 60° и 90° (рис. 2).

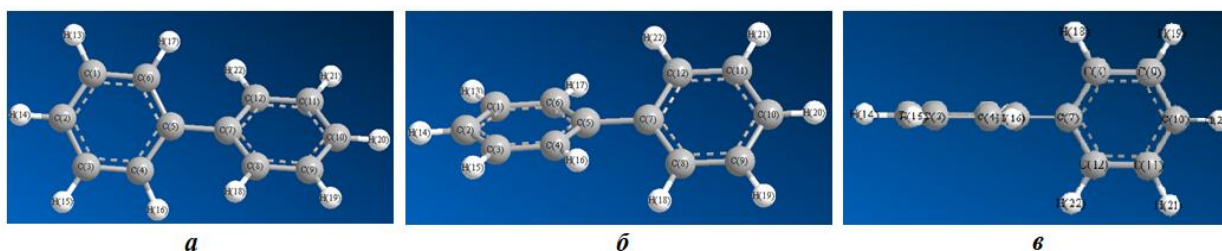


Рис. 2. Конформации дифенила с поворотом на углы 40° (а) 60° (б), 90° (в), полученные методом МД в ChemOffice

Для молекулы дифенилметана метод МД также показал наличие нежестких конформаций с устойчивыми поворотами ароматических колец относительно метильного мостика на углы $\pm 55\text{--}58^\circ$ и 90° (рис. 3). Согласно [3], конформация с поворотом на углы $\pm 55\text{--}58^\circ$ соответствует винтовой конформации.

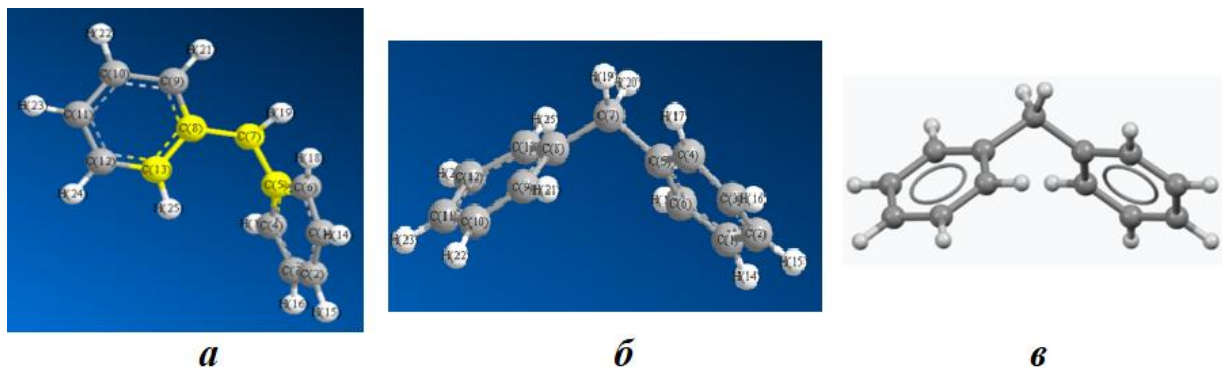


Рис. 3. Конформации дифенилметана с поворотом на углы 90° (а), $\pm 57^\circ$ (б), винтовая из [3] (в), полученные методом МД в ChemOffice

Оценка структурной нежесткости молекулы паратерфенила показала наличие трех неплоских структур: структура с поворотом крайних колец на углы 90° , структуры с поворотом двух бензольных колец на 40° в одну и в разные стороны относительно среднего кольца (рис. 4).

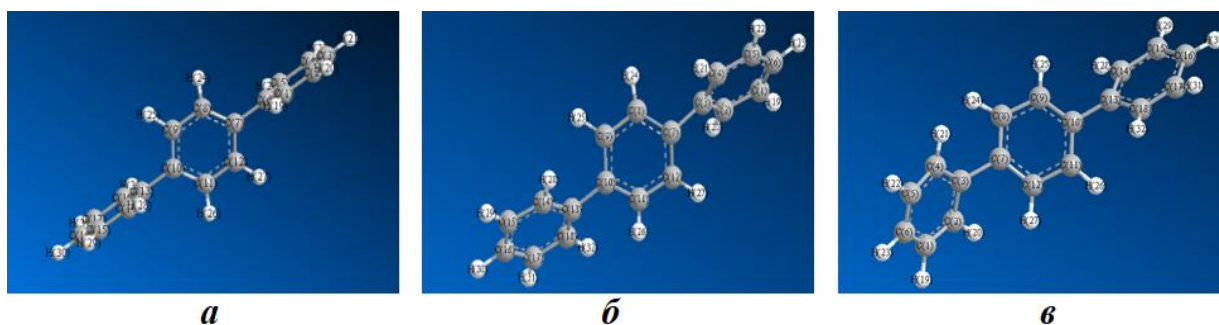


Рис. 4. Конформации паратерфенила с поворотом на углы 90° (а), 40° (в одну сторону) (б), 40° (в разные стороны) (в), полученные методом МД в ChemOffice

Для демонстрации практического применения метода TDDFT в рамках цифрового обучения, в таблице 1 приведены результаты расчёта электронного спектра только для молекулы паратерфенила. Из этих данных видно, что плоская конформация имеет наиболее интенсивный переход S_1 и полосу при 213 нм. Поворот

колец на 90° сдвигает эти полосы в коротковолновую область и снижает интенсивность, а повороты на 40° дают промежуточную картину, причём поворот в разные стороны ослабляет S_1 сильнее, чем в одну.

Таблица 1

Результаты расчета энергетических уровней и сил осциллятора исследуемых конформаций паратерфенила методом TDDFT (Python)

S	Плоская		Поворот 90°		Поворот 40° в одну сторону		Поворот 40° в разные стороны	
	λ (нм)	f	λ (нм)	f	λ (нм)	f	λ (нм)	f
S_1	311,6	1,000	276,7	0,887	281,1	0,709	280,9	0,533
S_2	284,5	0,000	260,0	0,000	265,9	0,001	274,5	0,139
S_3	265,8	0,000	251,6	0,000	257,9	0,030	256,3	0,011
S_4	259,3	0,014	251,5	0,000	252,8	0,012	255,3	0,043
S_5	251,1	0,000	236,2	0,000	247,4	0,000	242,3	0,016
S_6	247,5	0,002	228,7	0,001	240,2	0,027	236,4	0,007
S_7	237,0	0,000	228,1	0,026	232,2	0,015	232,4	0,007
S_8	232,8	0,000	224,8	0,000	230,1	0,015	230,8	0,041
S_9	219,4	0,095	221,5	0,081	223,0	0,033	229,6	0,009
S_{10}	214,7	0,000	210,1	0,000	222,1	0,045	225,7	0,006
S_{11}	213,3	0,415	207,7	0,002	217,1	0,007	223,9	0,031
S_{12}	208,9	0,000	207,5	0,000	214,6	0,005	218,3	0,011
S_{13}	208,7	0,009	207,3	0,001	214,1	0,101	214,6	0,022
S_{14}	205,7	0,001	207,0	0,002	213,0	0,107	212,7	0,009

Заключение.

Представленная методическая схема, объединяющая молекулярную механику, динамику и TDDFT-расчёты в Python, доказала свою эффективность как инструмент цифрового обучения конформационному анализу. Последовательное применение этих методов позволяет визуализировать конформационную нежесткость ароматических углеводородов, выявлять устойчивые внеплоскостные структуры и связывать их с электронными спектрами. Предложенный подход рекомендован для лабораторного практикума и курсового проектирования при изучении взаимосвязи «строение – свойства».

Список литературы

1. Галимзянов Б.Н. Основы моделирования молекулярной динамики / Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин. – Казань: Казанский федеральный университет, 2016. – 107 с. – EDN WIGRLF.

2. Гараев В.М. Теория функционала плотности (DFT) / В.М. Гараев // Актуальные вопросы современной науки и образования: сборник статей XLVII Международной научно-практической конференции. – Пенза: Наука и просвещение – 2025. – С. 9–12. – EDN JNSYGE.

3. Wang Y. Push-pull biphenyl-based iodonium salts: Highly sensitive one-component photoinitiators for photopolymerization under UV-visible LEDs / Y. Wang, G. Sheng, J. Xie, D. Wan, M. Jin // Progress in Organic Coatings. 2024. Vol. 188. P. 108209. EDN HMEWAA. DOI 10.1016/j.porgcoat.2024.108209