

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

Факультет комп'ютерних наук та кібернетики
Кафедра теоретичної кібернетики

**Кваліфікаційна робота
На здобуття ступеня бакалавра**
за спеціальністю 122 Комп'ютерні науки

на тему:

**ВІДОБРАЖЕННЯ СТРУКТУРИ МОЛЕКУЛ ХІМІЧНИХ СПОЛУК
(DISPLAY THE STRUCTURE OF CHEMICAL COMPOUND
MOLECULES)**

Виконав студент 4-го курсу групи ТК-41
Дамір КАРІЄВ




(підпис)

Науковий керівник:
Доцент, кандидат фіз.-мат. наук
Андрій СТАВРОВСЬКИЙ



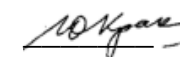
(підпис)

Засвідчую, що в цій роботі
немає запозичень з праць інших авторів
без відповідних посилань.
Студент



(підпис)

Роботу розглянуто й допущено до захисту
на засіданні кафедри теоретичної кібернетики
«01» червня 2022 р., протокол № 11
Завідувач кафедри
доктор фіз.-мат. наук, професор
Юрій КРАК



(підпис)

РЕФЕРАТ

Обсяг роботи 44 сторінки, 9 ілюстрацій, 26 джерел посилань.

ХІМІЯ, МОЛЕКУЛА, СТРУКТУРА, ХІМІЧНА СПОЛУКА, ФОРМА
МОЛЕКУЛИ, ВІЗУАЛІЗАЦІЯ ХІМІЧНИХ СПОЛУК, КОМП'ЮТЕРНА
МОДЕЛЬ

Об'єктом роботи є процес розробки способу відображення структури молекул хімічних сполук за поданою інформацією на вході.

Метою роботи є розробка та створення додатку, який буде виконувати зазначену задачу, та робитиме це у раціональний спосіб, та зможе бути використаний у майбутньому практично.

Методи розробки: огляд важливих аспектів хімії, аналіз необхідної теорії та молекулярних структур. Огляд способів комп'ютерного моделювання. Створення додатку завдяки отриманим знанням та засобів, які були обрані заздалегідь.

Інструменти розробки: рушій та інструмент розробки ігор та додатків Unity, середовище для розробки (IDE) Microsoft Visual Studio.

Результати розробки: створений додаток, який виконує зазначені задачі, а саме – відображає тривимірну модель хімічної сполуки, що була введена у вхідних даних, що може бути використаний з освітньою метою, та для пришвидшення роботи у різних галузях, пов'язаних з хімією.

ЗМІСТ

| | |
|---|----|
| РЕФЕРАТ | 2 |
| ЗМІСТ | 3 |
| ВСТУП | 5 |
| РОЗДІЛ 1 РОЗБІР СТРУКТУРИ ХІМІЧНИХ СПОЛУК | 7 |
| 1.1 Основна теорія | 7 |
| 1.1.1. Атом | 7 |
| 1.1.2 Молекула | 8 |
| 1.1.3 Хімічні сполуки | 10 |
| 1.2 Структура та детальний огляд | 13 |
| 1.3 Хімічна формула | 18 |
| 1.3.1. Емпірична формула | 21 |
| 1.3.2. Молекулярна формула | 22 |
| 1.3.3. Структурна формула | 22 |
| 1.3.4. Закон композиції | 24 |
| 1.3.5. Ізотопи | 25 |
| 1.4. Моделі | 26 |
| 1.4.1. Моделі на основі сфер | 27 |
| 1.4.2. Моделі на основі кульки і палиці | 27 |
| 1.4.3. Скелетні моделі | 28 |
| 1.4.4. Багатогранні моделі | 29 |
| 1.4.5. Композитні моделі | 29 |
| 1.4.6. Комп'ютерні моделі | 30 |
| 1.4.7. Обчислювальні моделі | 30 |
| 1.5. Молекулярне моделювання | 31 |
| РОЗДІЛ 2. РОЗРОБКА ОБ'ЄКТУ ДОСЛІДЖЕНЬ | 33 |
| 2.1. Вибір технології та мови програмування | 33 |
| 2.2. Засоби для розробки | 33 |
| 2.3. Опис додатку | 34 |

| | |
|---------------------------------|----|
| | 4 |
| 2.4. Огляд окремих частин коду | 34 |
| 2.5. Процес та результат роботи | 39 |
| ВИСНОВКИ | 42 |
| ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ | 43 |

ВСТУП

Однією з найважливіших наук, що створило людство є наука про природу під назвою хімія. Вона вивчає, перш за все, перетворення речовин на молекулярному та атомному рівнях.

Якщо казати іншими словами, то хімія – це наука про речовини, а також їхні властивості. Речовини, насамперед – це те, з чого складаються всі фізичні тіла.

Як наука, хімія почала з'являтися ще з дуже давніх часів, десь біля 4000 років до н. е. Далі, усі знання з перетворення речовин почали пов'язуватися давньогрецькими філософами з міфологією, що призводило до спроб пояснити різні явища природи.

Після античних часів, хімію почали розвивати араби. Але за їх часів, ця наука називалася алхімією. Її тоді описували як спосіб перетворення різних металів на золото. Із золотом було пов'язане багатство, тож спроби отримати його стало значним рушієм на шляху вдосконалення перетворення речовин на інші. Завдяки цьому алхімія дуже сильно розвинулась, та її стали багато використовувати у медицині.

Багато часу минуло відтоді, алхімія поступово перетворилася на справжню хімію, люди краще навчилися перетворювати речовини. Окремим важливим етапом було те, що вчені змогли проаналізувати склад речовин та класифікувати кожну з них. А якщо точніше – винахід та опис атому та молекул.

Атом – це найменша хімічно неподільна частинка речовини. Насамперед, молекули, що складаються з атомів – це найменша частинка речовини або хімічної сполуки, яка при цьому зберігає властивості простої речовини. Усі молекули можуть складатись як з однакових атомів, так і з різних.

Дуже важливо звернути увагу на молекули, що складаються з атомів різних хімічних елементів. Такі молекули утворюють речовини, які називають хімічними сполуками.

А це вже пов'язує нас з інформаційними технологіями. Завдяки ним, можна встановити справжні моделі хімічних сполук речовин, щоб мати їх представлення у цифровому вигляді.

РОЗДІЛ 1 РОЗБІР СТРУКТУРИ ХІМІЧНИХ СПОЛУК

1.1 Основна теорія

1.1.1. Атом

Для розуміння того, як працювати з хімічними сполуками, треба детальніше дізнатися про те, з чого вони утворюються та складаються.

Атом — це найменша одиниця звичайної речовини, яка утворює хімічний елемент. Кожне тверде тіло, рідина, газ і плазма складається з нейтральних або іонізованих атомів. Атоми надзвичайно малі, зазвичай близько 100 пікометрів у поперечнику. Вони настільки малі, що точно передбачити їхню поведінку за допомогою класичної фізики — наприклад, як у м'ячів — неможливо через квантові ефекти.

Кожен атом складається з ядра та одного або кількох електронів, зв'язаних з ядром. Ядро складається з одного або кількох протонів і ряду нейтронів. Лише найпоширеніший різновид водню не має нейтронів. Більше 99,94% маси атома знаходиться в ядрі. Протони мають позитивний електричний заряд, тоді як електрони мають негативний електричний заряд, а нейтрони взагалі не мають електричного заряду. Якщо кількість електронів і протонів є рівною, то атом електрично нейтральний. Якщо в атомі менше або більше електронів, ніж протонів, то цей атом має загальний позитивний або негативний заряд відповідно – їх називають іонами.

Електрони атома притягуються до протонів в ядрі атома електромагнітною силою. Протони і нейтрони в ядрі притягуються один до одного ядерною силою. Ця сила зазвичай сильніша за електромагнітну силу, яка відштовхує позитивно заряджені протони один від одного. За певних

обставин електромагнітна сила відштовхування стає сильнішою за ядерну. У цьому випадку ядро розщеплюється і залишає за собою різні елементи. Це форма ядерного розпаду. [1]

1.1.2 Молекула

Молекула — це група з двох або більше атомів, скріплених силами притягання, відомими як хімічні зв'язки; залежно від контексту термін може включати або не включати іони, які задовольняють цьому критерію. У квантовій фізиці, органічній хімії та біохімії відмінність від іонів відкидається, і молекула часто використовується, коли йдеться про багатоатомні іони. [2]

У кінетичній теорії газів термін молекула часто використовується для позначення будь-якої газоподібної частинки незалежно від її складу. Це послаблює вимогу, щоб молекула містила два або більше атомів, оскільки благородні гази є окремими атомами. [3]

Молекула може бути гомоядерною, тобто складатися з атомів одного хімічного елемента, напр. два атоми в молекулі кисню (O_2); або вона може бути гетероядерним, хімічною сполукою, що складається з більш ніж одного елемента, напр. вода (два атоми водню і один атом кисню, H_2O).

Атоми та комплекси, пов'язані нековалентними взаємодіями, такими як водневі або іонні зв'язки, зазвичай не вважаються поодинокими молекулами. [4]

Молекули як компоненти речовини поширені. Вони також складають більшу частину океанів і атмосфери. Більшість органічних речовин є молекулами. Поживні речовини — це молекули, напр. білки, амінокислоти, з яких вони складаються, нуклеїнові кислоти (ДНК і РНК), цукру, вуглеводи,

жири, вітаміни. Поживні мінерали, як правило, є іонними сполуками, тому вони не є молекулами, напр. сульфат заліза.

Однак більшість знайомих на Землі твердих речовин частково або повністю складаються з кристалів або іонних сполук, які не складаються з молекул. Сюди входять усі мінерали, які складають речовину Землі, пісок, глина, галька, скелі, валуни, корінні породи, розплавлені надра та ядро Землі. Усі вони містять багато хімічних зв'язків, але не складаються з ідентифікованих молекул.

Не можна визначити типову молекулу для солей або ковалентних кристалів, хоча вони часто складаються з повторюваних одиничних клітин, які простягаються або в площині, напр. графен; або тривимірно, напр. алмаз, кварц, хлорид натрію. Тема повторюваної одиничної клітинної структури також стосується більшості металів, які є конденсованими фазами з металевим зв'язком. Таким чином, тверді метали не складаються з молекул.

У склянках, які є твердими тілами, які існують у склоподібному неупорядкованому стані, атоми будуть утримуватися разом за допомогою хімічних зв'язків та без фактичної присутності будь-якої визначеної молекули, або будь-якої закономірності повторюваної одиничної клітинної структури, яка характеризує солі, ковалентні кристали та метали.

Молекули зазвичай утримуються разом за допомогою ковалентного зв'язку. Деякі неметалічні елементи існують лише як молекули в навколишньому середовищі або в сполуках, або як гомоядерні молекули, а не як вільні атоми: наприклад, водень.

У той час як деякі люди кажуть, що кристал металу можна вважати єдиною гігантською молекулою, яка скріплюється металевим зв'язком, інші зазначають, що метали поведуться зовсім інакше, ніж молекули. [5][6]

Ковалентний зв'язок - це хімічний зв'язок, який передбачає спільне використання електронних пар між атомами. Ці електронні пари називаються спільними парами або зв'язуючими парами, а ковалентним зв'язком називають стабільний баланс сил притягання та відштовхування між атомами, коли вони спільні електрони. [7]

Іонний зв'язок – це тип хімічного зв'язку, який включає електростатичне притягнення між протилежно зарядженими іонами та є основною взаємодією, що відбувається в іонних сполуках. Іони - це атоми, які втратили один або більше електронів (так називають катіони), і атоми, які отримали один або більше електронів (так називають аніонами). Таке перенесення електронів називається електровалентністю [8]

У найпростішому випадку катіон - це атом металу, а аніон - атом неметалу, але при цьому ці іони можуть мати складнішу природу. Гарним прикладом будуть іони NH_4^+ або SO_4^{2-} . При нормальних температурах і тиску іонний зв'язок здебільшого створює тверді речовини (або іноді рідини) без окремих молекул, які можна ідентифікувати, але випаровування/сублімація таких матеріалів дійсно створює окремі молекули, де електрони все ще передаються достатньо повністю, щоб зв'язки розглядалися як іонні, а не ковалентні.

1.1.3 Хімічні сполуки

Хімічна сполука — це хімічна речовина, що складається з багатьох ідентичних молекул (або молекулярних об'єктів), що складаються з атомів більш ніж одного елемента, скріпленого хімічними зв'язками. Отже, молекула, що складається з атомів лише одного елемента, не є сполукою.

Усього є чотири різних типи сполук. Вони відрізняються між собою тим, як саме складові атоми будуть утримуватися разом:

- молекули, скріплені ковалентними зв'язками
- іонні сполуки, скріплені іонними зв'язками
- інтерметалеві сполуки, скріплені між собою металевими зв'язками
- певні комплекси, скріплені координованими ковалентними зв'язками.

Кількість атомів кожного елемента в молекулі хімічної сполуки визначає хімічна формула. Вона задається з використанням скорочення назв усіх хімічних елементів і індекси. Наприклад, молекула води має формулу H_2O , яка вказує на два атоми водню, пов'язані з одним атомом кисню. Усього вчені зареєстрували понад 350 000 унікальних сполук для використання з різною метою та виробництва безлічі матеріалів. [9]

Завдяки хімічним реакціям можна перетворити одну сполуку в іншу хімічну речовину. Це відбувається через взаємодію з другою речовиною за допомогою хімічної реакції. У цьому процесі зв'язки між атомами можуть бути розірвані в одній або обох взаємодіючих речовинах, і утворюються нові зв'язки.

Молекулою називають електрично нейтральну групу атомів у кількості двох, або більше, скріплених хімічними зв'язками. Молекула може бути гомоядерною, тобто складатися з атомів одного хімічного елемента, як з двох атомів у молекулі кисню (O_2); або він може бути гетероядерним, хімічною сполукою, яка складається з двох або більше елементів, як вода (два атоми водню і один атом кисню, H_2O).

Іонна сполука — це хімічна сполука, що складається з іонів, утримуваних разом електростатичними силами, які називаються іонним

зв'язком. Сполука в цілому нейтральна, але складається з позитивно заряджених іонів, які називаються катіонами, і негативно заряджених іонів, які називаються аніонами. Це можуть бути прості іони, такі як натрій (Na^+) і хлорид (Cl^-) у хлориді натрію, або багатоатомні іони, такі як амоній (NH_4^+) і карбонат (CO_3^{2-}) іони в карбонаті амонію. Окремі йони всередині іонної сполуки зазвичай мають декілька найближчих сусідів, тому не вважаються частиною молекул, а натомість частиною безперервної тривимірної мережі, як правило, у кристалічній структурі.

Іонні сполуки, що містять основні іони гідроксид (OH^-) або оксид (O^{2-}), класифікуються як основи. Ті іонні сполуки, в яких немає цих іонів можуть утворюватися в результаті кислотно-основних реакцій (вони також відомі як солі). Іонні сполуки також можуть бути отримані з іонів, що входять до їх складу, шляхом випаровування їх розчинника, осадження, заморожування, реакції в твердому стані або реакції перенесення електрона реакційноздатних металів з реакційноздатними неметалами, такими як гази галогену.

Іонні сполуки зазвичай мають високі температури плавлення і кипіння, тверді та крихкі. Будучи твердими речовинами, вони майже завжди є електроізоляційними, але при розплавленні або розчиненні стають високопровідними, оскільки іони мобілізуються.

Інтерметал (також званий інтерметалевим з'єднанням, інтерметалевим сплавом, упорядкованим інтерметалевим сплавом і сплавом дальнього порядку) — це тип металевого сплаву, що утворює впорядковану твердотільну сполуку між більше ніж одним металевим елементом. Інтерметалеві речовини, як правило, тверді та крихкі, з хорошими високотемпературними механічними властивостями. Їх можна класифікувати як стехіометричні або нестехіометричні інтерметалеві сполуки. [10]

Інтерметалеві сполуки у більшості випадків набувають крихкого стану за кімнатною температурою, а їх температури плавлення є доволі високими. Через обмежені незалежні системи ковзання, необхідні для пластичної деформації, режими спайності або міжкристалічного руйнування є типовими для інтерметалідів.

Координаційні (або комплексні) сполуки складаються з центрального атома або іона, який зазвичай є металевим і називається координаційним центром, і оточуючого масиву зв'язаних молекул або іонів, які, у свою чергу, відомі як ліганди або комплексоутворювачі. [11]

Багато металовмісних сполук, особливо перехідні метали, є координаційними сполуками. Координаційна сполука, центром якої є атом металу, називається металевим комплексом d-блокового елемента. [12]

Координація береться від "координатних ковалентних зв'язків" (дипольних зв'язків) між лігандами і центральним атомом. Спочатку комплекс означав оборотне об'єднання молекул, атомів або іонів через такі слабкі хімічні зв'язки. У застосуванні до координаційної хімії це значення змінилося. Деякі комплекси металів утворюються практично необоротно, а багато з них пов'язані між собою досить міцними зв'язками. [13]

1.2 Структура та детальний огляд

Молекулярна геометрія — це тривимірне розташування атомів, які утворюють молекулу. Вона включає загальну форму молекули, а також довжину зв'язку, кути зв'язку, торсіонні кути та будь-які інші геометричні параметри, які визначають положення кожного атома.

Молекулярна геометрія впливає на кілька властивостей речовини, включаючи її реакційну здатність, полярність, фазу речовини, колір, магнетизм і біологічну активність. Кути між зв'язками, які утворює атом, є слабо залежними від частин молекули, що складають решту. Це означає, що їх можна розуміти як приблизно локальні. [14]

Геометрію молекули можна визначити різними спектроскопічними та дифракційними методами. інфрачервона, мікрохвильова та комбінаційна спектроскопія може дати інформацію про геометрію молекули на основі деталей коливального та обертового поглинання, виявлених за допомогою цих методів. Рентгенівська кристалографія, дифракція нейтронів та дифракція електронів можуть дати молекулярну структуру кристалічних твердих тіл на основі відстані між ядрами та концентрації електронної густини. Дифракція газових електронів може бути використана для малих молекул у газовій фазі. Ядерний магнітний резонанс і ферстерівський перенос енергії можна використовувати для визначення додаткової інформації, включаючи відносні відстані, двогранні кути, кути та зв'язність. Молекулярну геометрію найкраще визначити при низькій температурі, оскільки при вищих температурах молекулярна структура усереднена для більш доступних геометрій (див. наступний розділ). Більші молекули часто існують у кількох стабільних геометріях (конформаційна ізомерія), які близькі за енергією на поверхні потенційної енергії. Геометрії також можуть бути обчислені методами квантової хімії *ab initio* з високою точністю. Геометрія молекули може бути різною як у твердому тілі, у розчині та у вигляді газу. [15]

Положення кожного атома визначається природою хімічних зв'язків, за допомогою яких він з'єднаний із сусідніми атомами. Молекулярну геометрію можна описати положеннями цих атомів у просторі, викликаючи довжини зв'язку двох з'єднаних атомів, кути зв'язку трьох з'єднаних атомів і торсіонні кути (двогранні кути) трьох послідовних зв'язків.

Молекули, за визначенням, найчастіше утримуються разом за допомогою ковалентних зв'язків, що включають одинарні, подвійні та/або потрійні зв'язки, де «зв'язок» — це спільна пара електронів (інший метод зв'язку між атомами називається іонним зв'язком і включає в себе позитивний катіон і негативний аніон).

Молекулярні геометрії можуть бути визначені в термінах довжини зв'язку, кутів зв'язку та торсіонних кутів. Довжина зв'язку визначається як середня відстань між ядрами двох атомів, з'єднаних разом у будь-якій даній молекулі. Сполучний кут – це кут, що утворюється між трьома атомами через принаймні два зв'язки. Для чотирьох атомів, з'єднаних разом у ланцюжок, торсіонний кут — це кут між площиною, яка утворена трьома першими атомами, а також площиною, що утворена останніми трьома атомами.

Геометрія молекули визначається квантовомеханічною поведінкою електронів. Використовуючи наближення валентного зв'язку, це можна зрозуміти за типом зв'язків між тими атомами, що створюють молекулу. Тоді, коли ці атоми взаємодіють між собою та утворюють хімічний зв'язок, кажуть, що для кожного з атомів, їх атомні орбіталі об'єднуються в процесі, який називається орбітальною гібридизацією. Двома найпоширенішими типами зв'язків є сигма-зв'язки (зазвичай утворені гібридними орбіталями) і пі-зв'язки (утворені негібридизованими р-орбіталями для атомів елементів основної групи). Геометрію також можна зрозуміти за допомогою теорії молекулярних орбіт, де електрони делокалізовані.

Розуміння хвилеподібної поведінки електронів в атомах і молекулах є предметом квантової хімії.

Сполучний кут – це геометричний кут між двома сусідніми зв'язками. Деякі поширені форми простих молекул включають:

- Лінійна: у лінійній моделі атоми з'єднані прямою лінією. Кути зв'язку встановлені на 180° . Наприклад, вуглекислий газ і оксид азоту мають лінійну форму молекули.
- Тригональна площина: Молекули з тригонально-плоскою формою є дещо трикутними і знаходяться в одній площині (плоскі). Отже, кути зв'язку встановлюються на 120° . Наприклад, трифторид бору.
- Кутова: Кутові молекули (також звані зігнутими або V-подібними) набувають нелінійної форми. Як приклад - вода (H_2O). Вона має кут, значення якого дорівнює майже 105° . Ця молекула містить в собі дві пари зв'язаних електронів, а також дві неподілені пари.
- Тетрагедральна: Tetra- означає чотири, а -hedral відноситься до грані твердого тіла, тому «тетраedr» буквально означає «має чотири грані». Ця форма зустрічається, коли є чотири зв'язки на одному центральному атомі, без додаткових нерозділених електронних пар. Відповідно до теорії відштовхування електронної пари валентної оболонки (ВЕПВО) валентні кути між електронними зв'язками мають значення близько $109,47^\circ$. Одним з прикладів є метан (CH_4) є тетраедричною молекулою.
- Октагедральна: Octa- означає вісім, а -hedral відноситься до грані твердого тіла, тому «октаedr» означає «має вісім граней». Кут зв'язку становить 90 градусів. Наприклад, гексафторид сірки (SF_6) є октаедричною молекулою.
- Тригональна пірамідальна: Тригональна пірамідальна молекула має форму піраміди з трикутною основою. На відміну від лінійних і тригональних плоских форм, але схожих на тетраедричну орієнтацію, пірамідальним формам потрібно три виміри, для того щоб була можливість розділити електрони повністю. В цій формі є три пари зв'язаних електронів, і так залишається одна нерозділена неподілена пара. Неповна пара – відштовхування пар зв'язків

змінюють кут зв'язку з тетраедричного кута на трохи нижче значення.

Наприклад, аміак (NH_3).

У хімії та молекулярній фізиці кут зв'язку — це кут між ковалентними зв'язками атома з двома сусідніми атомами. Це, по суті, залежить від атомних орбіталей, залучених до зв'язків, але може певною мірою вплинути на стеричні взаємодії. Кути зв'язку і, отже, геометричні структури молекули можна пояснити за допомогою моделі ВЕПВО. Однак модель ВЕПВО зазвичай не працює для сполук, що містять елементи з підгруп. [16]

Конкретні теоретичні кути (псевдоструктура) є результатом кутів зв'язку між атомами в молекулах, орбіталі яких гібридизовані:

- sp^3 гібридні орбіталі в молекулах розташовані під тетраедричним кутом $109,5^\circ$ одна до одної.
- sp^2 гібридні орбіталі площинно-тригональні одна до одної і утворюють кут 120° .
- sp гібридні орбіталі вирівнюються лінійно, в результаті чого кут зв'язку становить 180° .

Фактичні кути зв'язку (реальна структура) у багатьох молекулах, які мають тетраедричну, тригональну або лінійну структуру, різною мірою відхиляються від кутів, згаданих вище (псевдоструктура). Фактичний кут зв'язку в молекулі води становить не $109,5^\circ$, а $104,45^\circ$, оскільки несполучні електронні пари трохи відштовхують сполучні. У молекулі аміаку також є інший кут 107° . Відхилення менше, ніж у молекулі води, оскільки аміак має лише одну вільну пару електронів. [17]

У багатоатомної молекули є своя конфігурація в просторі. Це означає, що вона має свою геометрію того, як розташовані зв'язки. Без розриву цих

зв'язків, геометрія не може бути суттєво зміненою. Проте молекули, що містять одиничні зв'язки або, так звані, сигма-зв'язки, можуть існувати в різних конформаціях, які виникають тоді, коли навколо цих зв'язків відбуваються повороти атомних груп. Завдяки конформаційним властивостям можуть бути визначені всі важливі особливості макромолекул біологічних та синтетичних полімерів.

Одним із методів вимірювання кутів зв'язку є Ядерна магнітно-резонансна спектроскопія (ЯМР). Залежність константи зчеплення та кута зв'язку між двома С-Н зв'язками, яка виникає в ЯМР, називається відношенням Карплюса на честь його першовідкривача Мартіна Карплюса. Молекулярні коливання здебільшого включають періодичну деформацію валкових кутів. [18]

1.3 Хімічна формула

Хімічна формула — це спосіб подання інформації про хімічні пропорції атомів, які утворюють певну хімічну сполуку або молекулу, за допомогою символів хімічних елементів, чисел, а іноді й інших символів, таких як дужки, тире, дужки, коми та плюс (+) і мінус (-). Вони обмежуються одним типографічним рядком символів, який може включати нижні та верхні індекси. Хімічна формула не є хімічною назвою, і вона не містить слів. Хоча хімічна формула може означати певні прості хімічні структури, це не те саме, що повна хімічна структурна формула. Хімічні формули можуть повністю визначити структуру лише найпростіших молекул і хімічних речовин, і, як правило, вони, на відміну від структурних формул та хімічних назв, є більш обмеженими за своєю потужністю.

Найпростіші типи хімічних формул називаються емпіричними формулами, в яких використовуються літери і цифри, що вказують пропорції атомів кожного типу у числовому значенні. Молекулярні формули вказують прості номери кожного типу атома в молекулі, але не надають інформацію про структуру молекули. Яскравим прикладом є глюкоза. Її емпірична формула — CH_2O (вдвічі більше атомів водню, ніж вуглецю та кисню), тоді як її молекулярна формула — $C_6H_{12}O_6$ (Вона містить в собі дванадцять атомів водню, а також шість атомів кисню та вуглецю).

Хімічна формула може бути ускладнена записом у вигляді конденсованої формули, або конденсованої молекулярної формули. Її також називають «напівструктурною формулою». Вона може передавати додаткову інформацію про способи хімічного зв'язку атомів, або ковалентно. Це можливо у тих випадках, коли відповідне з'єднання легко показати в одному вимірі.

Прикладом є конденсована молекулярна/хімічна формула етанолу, яка є CH_3-CH_2-OH або CH_3CH_2OH . Однак навіть сконденсована хімічна формула обов'язково обмежена у своїй здатності показувати складні зв'язки між атомами, особливо атомами, які мають зв'язки з чотирма або більше різними замісниками.

Оскільки хімічна формула має бути виражена як один рядок з символів різних елементів, її у багатьох випадках не можна вважати настільки інформативною, як справжню структурну формулу. Така формула являє собою графічне зображення просторового співвідношення між різними атомами в сполуках. З причин структурної складності одна згущена хімічна формула, або напівструктурна формула, може відповідати різним молекулам, відомим як ізомери. Добрим прикладом є глюкоза, яка має свою молекулярну формулу $C_6H_{12}O_6$ з низкою інших цукрів, включаючи фруктозу, галактозу та манозу. Існують лінійні еквівалентні хімічні назви, які можуть вказувати будь-яку

складну структурну формулу, але в таких іменах має використовуватися багато різних слів замість символів простих елементів, а також цифри та типографічні символи, які визначають хімічну формулу.

Хімічні формули можна використовувати в хімічних рівняннях для опису хімічних реакцій та інших хімічних перетворень. Наприклад, це може бути розчинення іонних сполук у деякому розчині. Проте, хімічні формули при цьому не мають повної потужності структурних формул, щоб показати хімічні зв'язки між атомами, їх достатньо, щоб відстежувати кількість атомів і кількість електричних зарядів у хімічних реакціях, таким чином урівноважуючи хімічні рівняння, щоб ці рівняння може використовуватися в хімічних задачах, пов'язаних зі збереженням атомів і збереженням електричного заряду.

Хімічна формула визначає кожен складовий елемент за його хімічним символом, а також вказує для кожного елемента пропорційну кількість його атомів. Емпіричні формули створені так, що в них такі пропорції мають починатися з ключового елемента. Вже потім приписують номери атомів інших елементів у з'єднанні за співвідношенням до ключового елемента. Для молекулярних сполук усі ці відношення можна виразити цілими числами. Наприклад, емпіричну формулу етанолу можна записати C_2H_6O . Це виходить таким чином, бо кожна з молекул етанолу містить два атоми вуглецю, шість атомів водню та один атом кисню. Проте, деякі з типів іонних сполук не можуть бути записані за допомогою емпіричних формул цілком цілого числа. Прикладом є карбід бору, формула якого CB_n є змінним співвідношенням неповних чисел з n від 4 до 6,5.

Коли хімічна сполука складається з простих молекул, у формулах доволі часто використовують різні способи для того, щоб припустити структуру молекули. Такі типи формул відомі по-різному як конденсовані формули та

молекулярні формули. Молекулярна формула перераховує кількість атомів, які відображають атоми в молекулі, так що молекулярна формула глюкози є $C_6H_{12}O_6$, при тому, що емпіричною формулою є CH_2O . Однак, за винятком дуже простих речовин, молекулярні хімічні формули не мають необхідної структурної інформації і є неоднозначними.

Для простих молекул згущена (або напівструктурна) формула — це тип хімічної формули, яка може повністю означати правильну структурну формулу. Наприклад, етанол може бути представлений конденсованою хімічною формулою CH_3CH_2OH , а диметилловий ефір - конденсованою формулою CH_3OSCH_3 . Дві представлені молекули мають однакові формули в обох випадках їх представлення (C_2H_6O), але їх можна відрізнити за наведеними узагальненими формулами, яких достатньо для представлення повної структури цих простих органічних сполук.

Конденсовані хімічні формули також можуть використовуватися для представлення іонних сполук, які не існують у вигляді дискретних молекул, але, тим не менш, містять у собі ковалентно зв'язані кластери. Ці багатоатомні іони являють собою групи атомів, які ковалентно зв'язані разом і мають загальний іонний заряд. Кожен багатоатомний іон у з'єднанні записується окремо, щоб проілюструвати окремі групи

Серед тих хімічних формул, що описані тут, можна знайти те, що вони відрізняються від набагато складніших систематичних назв хімічних речовин, які використовуються в різних системах хімічної номенклатури. Наприклад, одна систематична назва глюкози — (2R,3S,4R,5R)-2,3,4,5,6-пентагідроксигексанал. Ця назва, інтерпретована за правилами, що за нею, визначає структурну формулу глюкози повністю, але при цьому її назва не являє собою хімічну формулу, як зазвичай вважають, та використовує слова та терміни, що взагалі не використовуються в хімічних

формулах. Ці імена, на відміну від базових формул, можуть представляти повні структурні формули без графіків.

1.3.1. Емпірична формула

У хімії емпірична формула хімічної речовини — це простий вираз відносної кількості атомів кожного типу або співвідношення елементів у з'єднанні. Емпіричні формули є стандартом для іонних сполук, таких як CaCl_2 , і для макромолекул, таких як SiO_2 . Емпірична формула не посилається на ізомерію, структуру чи абсолютну кількість атомів. Термін емпіричний відноситься до процесу елементного аналізу, методики аналітичної хімії, що зазвичай використовується у визначенні відносного відсоткового складу чистої речовини для елемента.

Одним з прикладів є гексан. Він має молекулярну формулу C_6H_{14} або, якщо записати структурно, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$, що означає, що ця сполука має структуру ланцюга з шести атомів вуглецю та чотирнадцяти атомів водню. Однак емпірична формула гексану — C_3H_7 . Так само емпірична формула для перекису водню, H_2O_2 , є просто HO , що виражає співвідношення компонентів 1:1. Формальдегід і оцтова кислота мають однакову емпіричну формулу CH_2O . Це справжня хімічна формула формальдегіду, але в оцтовій кислоті вдвічі більше атомів.

1.3.2. Молекулярна формула

Молекулярні формули вказують на прості номери кожного з типів атома в молекулі речовини. Як і емпіричні формули для молекул, вони мають лише один атом якогось певного типу. Проте, в деякому іншому випадку вони можуть мати більші номери. Прикладом відмінності є емпірична формула глюкози, яка становить CH_2O (співвідношення 1:2:1), а її молекулярна формула $C_6H_{12}O_6$ (співвідношення кількості атомів - 6:12:6). Для молекули води обидві з формул будуть записуватися як H_2O . Завдяки молекулярній формулі надається більше інформації про молекулу, ніж через її емпірична формула. Та не дивлячись на це, є недолік – таку формулу складніше встановити.

Таким чином, молекулярна формула може показувати кількість елементів у молекулі, а також визначати, її бінарність, потрійність, четвортинність, те, чи є вона сполукою чи має ще більше елементів.

1.3.3. Структурна формула

Зв'язність молекули часто має сильний вплив на її хімічні та фізичні властивості, а також поведінку. Якщо взяти дві різні молекули, які складаються з однакової кількості атомів однакового типу (тобто пара ізомерів), то можна зрозуміти що вони можуть мати абсолютно різні фізичні, та навіть хімічні властивості, у разі коли атоми є по-різному з'єднаними або знаходяться в різних положеннях. Тоді у таких випадках є корисною структурна формула, оскільки вона ілюструє, з якими атомами зв'язані атоми. Зі зв'язності часто можна зробити висновок про приблизну форму молекули.

Конденсована хімічна формула може являти собою просторове розташування та типи зв'язків у простій хімічній речовині, хоча вона не обов'язково визначає ізомери чи складні структури. Наприклад, етан

складається з двох атомів вуглецю, які пов'язані між собою. Кожен з цих атомів вуглецю має три атоми водню. Його хімічну формулу можна передати як CH_3C
 H_3 . В етилені існує подвійний зв'язок між атомами вуглецю (і, отже, кожен вуглець має лише два атоми водню), тому хімічну формулу можна записати: C
 H_2CH_2 , а той факт, що між вуглецю існує подвійний зв'язок, є неявним, оскільки вуглець має валентність чотирьох. Однак більш явним методом є запис $H_2C=CH_2$ або рідше $H_2C::CH_2$. Дві лінії (або дві пари точок) вказують на те, що атоми з'єднані по обидві боки від них подвійним зв'язком .

Потрійний зв'язок може бути виражений трьома лініями ($HC\equiv CH$) або трьома парами точок ($HC:::CH$), і якщо може бути неоднозначність, для позначення єдиного зв'язку можна використовувати одну лінію або пару точок.

Молекули з кількома однаковими функціональними групами можуть бути виражені при укладанні повторюваної групи в круглі дужки. Як приклад – ізобутан, що може бути записаний $(CH_3)_3CH$. Ця згущена структурна формула передбачає іншу зв'язність, ніж інші молекули, які можуть бути утворені з використанням тих самих атомів у тих самих пропорціях (ізомерів). Формула $(CH_3)_3CH$ подає центральний атом вуглецю, який є з'єднаним з трьома групами CH_3 та одним атомом водню. Таку саму кількість атомів кожного елемента (10 атомів водню і 4 атоми вуглецю, або C_4H_{10}) можна використати для створення молекули з прямим ланцюгом n-бутану: $CH_3CH_2CH_2CH_3$.

1.3.4. Закон композиції

У будь-якій даній хімічній сполуці елементи завжди поєднуються один з одним в однаковій пропорції. Це називається законом постійного складу.

Цей закон говорить про те, що в будь-якій конкретній хімічній сполуці всі зразки цієї сполуки будуть складатися з однакових елементів, які мають однакову пропорцію. Як приклад можна навести те, що молекула води завжди буде складатися з двох атомів водню і одного атома кисню, співвідношення яких дорівнює 2:1. Можна поглянути на відносні маси кисню і водню в одній молекулі води, і побачити, що 94% маси однієї молекули води припадає на кисень, а вся решта — на масу водню. Ця масова пропорція буде однаковою для будь-якої молекули води. [19]

Алкен, який називається бут-2-ен, має два ізомери, які хімічна формула C_4H_8 не ідентифікує. Відносно положення двох метильних груп має бути вказано окремим позначенням, що показує, чи знаходяться метильні групи на одній й тій самій стороні подвійного зв'язку чи на протилежних сторонах одна від одної. [20]

Для представлення повних структурних формул багатьох складних органічних і неорганічних сполук може знадобитися хімічна номенклатура, яка виходить далеко за межі наявних ресурсів, використаних вище в простих сконденсованих формулах. Крім того, лінійні системи імен, такі як Міжнародний хімічний ідентифікатор, дозволяють комп'ютеру побудувати структурну формулу, а спрощена система введення рядка на молекулярному рівні дозволяє вводити ASCII більш зрозумілим для людини.

Для полімерів у конденсованих хімічних формулах круглі дужки розміщуються навколо повторюваної одиниці. Наприклад, молекула вуглеводню, яка описується як $CH_3 (CH_2)_{50} CH_3$, є молекулою з п'ятдесятьма повторюваними одиницями. Якщо кількість повторюваних одиниць є невідомою або змінною, буква n латинського алфавіту може використовуватися в формулі: $CH_3 (CH_2)_n CH_3$,

Для іонів заряд на конкретному атомі можна позначити правим верхнім індексом. Наприклад, Na^+ або Cu^{2+} . Загальний заряд зарядженої молекули або багатоатомного іона також можна показати таким чином. Наприклад: H_3O^+ або SO_4^{2-} . Зверніть увагу, що + і - використовуються замість +1 і -1 відповідно.

Для більш складних іонів дужки [] часто використовуються для закріплення іонної формули, як у $[B_{12}H_{12}]^{2-}$, яка міститься в таких сполуках, як $Cs_2[B_{12}H_{12}]$. Дужки () можуть бути вкладені в дужки для позначення повторюваної одиниці, як у $[Co(NH_3)_6]^{3+}Cl_3^-$. Тут $(NH_3)_6$ вказує, що іон містить шість груп NH_3 , зв'язаних з кобальтом, а квадратні дужки охоплюють усю формулу іона із позитивним зарядом +3.

Це не є обов'язковим; хімічна формула дійсна як з інформацією про іонізацію, так і без неї, а хлорид гексамінкобальту(III) можна записати як $[Co(NH_3)_6]^{3+}Cl_3^-$ або $[Co(NH_3)_6]Cl_3$. Справжні дужки та квадратні дужки, використовуються в хімії так само, як і інших дисциплінах, наприклад в математиці. Вони групують необхідні терміни разом та спеціально не використовуються лише для станів іонізації. В останньому випадку тут у дужках вказано 6 груп однакової форми, пов'язаних з іншою групою розміром 1 (атом кобальту), а потім весь пучок, як група, пов'язаний з 3 атомами хлору. У першому випадку зрозуміліше, що зв'язок, що з'єднує хлори, є іонною, а не ковалентною.

1.3.5. Ізотопи

Хоча ізотопи є більш релевантними для ядерної хімії або хімії стабільних ізотопів, ніж для звичайної хімії, різні ізотопи можуть бути вказані з префіксом

над індексом у хімічній формулі. Наприклад, фосфат-іоном, що містить радіоактивний фосфор-32, є $[^{32}\text{PO}_4]^{3-}$. Також дослідження, що включає стабільні ізотопні співвідношення, може включати молекулу $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$.

Інколи лівий індекс використовується надмірно для позначення атомного номера. Наприклад, $^{8}\text{O}^2$ для діоксигену і $^{816}\text{O}^2$ для найбільш поширених ізотопних видів діоксигену. Це зручно при написанні рівнянь для ядерних реакцій, щоб більш чітко показати баланс заряду.

1.4. Моделі

Молекулярна модель — це фізична модель, яка представляє молекули та їхні процеси. Створення математичних моделей властивостей і поведінки молекул називається молекулярним моделюванням. Графічне представлення цього — це молекулярна графіка. Теми мають тісний зв'язок, і кожна використовує методи інших.

Фізичні моделі атомістичних систем відіграли важливу роль у розумінні хімії, а також у створенні та перевірці гіпотез. Найчастіше є явне представлення атомів, але крім того інші підходи, наприклад мильні плівки та інші безперервні середовища, є корисними. Існує кілька мотивів створення фізичних моделей:

- як педагогічні засоби для учнів або тих, хто не ознайомлений зі структурою атомів та молекул;
- як окремі об'єкти, які існують для створення та перевірки деяких теорій (Як приклад, структури ДНК);

- як аналогові комп'ютери (Може використовуватися у вимірюванні відстаней і кутів у гнучких системах);
- як естетично привабливі об'єкти на межі мистецтва і науки.

Є дуже багато різних підходів до моделювання молекул та атомів. Завдяки молекулярній графіці, були замінені окремі функції фізичних молекулярних моделей, та не зважаючи на це, фізичні моделі досі є дуже популярними і продаються у великій кількості. Їх унікальні сильні сторони включають:

- дешевизна і транспортабельність;
- негайні тактильні та візуальні відчуття;
- дуже легка інтерактивність для різних процесів (Одні з прикладів - псевдообертання і конформаційний аналіз).

1.4.1. Моделі на основі сфер

Повторювані одиниці допомагають показати, як легко і зрозуміло представляти молекули через кульки, які представляють атоми.

Бінарні сполуки хлорид натрію і хлорид цезію мають кубічну структуру, та при цьому в них різні просторові групи. Це можна раціоналізувати з точки зору щільного пакування куль різного розміру. Наприклад, NaCl можна описати як щільно упаковані іони хлориду (у гранецентрованій кубічній решітці) з іонами натрію в октаедричних отворах. З розробкою пластикових або пінополістиролових куль тепер створювати такі моделі легко.

1.4.2. Моделі на основі кульки і палиці

Щоб змоделювати поняття хімічного зв'язку, треба з'єднати кульки (атоми) паличками/стержнями (зв'язками). Це було надзвичайно популярним і широко використовується сьогодні. Наприклад, вуглець можна представити у вигляді кулі з чотирма отворами під тетраедричними кутами, значення яких дорівнює $109,47^\circ$.

У жорстких зв'язків і отворів є проблема, яка полягає в тому, що системи з довільними кутами неможливо побудувати. Ця проблема вирішується з використанням гнучких зв'язків. На початку це були гвинтові пружини, але тепер вони пластикові. Завдяки цьому можна апроксимувати подвійні та потрійні зв'язки кількома одинарними зв'язками.

1.4.3. Скелетні моделі

Модель ДНК Крика і Уотсона і набори для створення білка Кендрю були одними з перших моделей скелета. Вони були засновані на атомних компонентах, в яких валентності були представлені деякими паличками. Тоді, коли атоми були представлені як точки на перетинах. З'єднання створювали шляхом з'єднання компонентів трубчастими з'єднувачами за допомогою стопорних гвинтів.

Наприкінці 1950-х Андре Дрейдінг представив набір для молекулярного моделювання, у якому не було роз'ємів. В такому атомі були б тверді та порожнисті валентні спайки. Тверді стрижні клацали в трубках, утворюючи зв'язок, зазвичай при вільному обертанні. Вони були і дуже широко використовуються на в органічній хімії, а також були розроблені дуже точно,

щоб навіть міжатомні вимірювання можна було робити просто звичайною лінійкою.

1.4.4. Багатогранні моделі

Багато неорганічних твердих тіл складаються з атомів, оточених координаційною сферою електронегативних атомів (наприклад, тетраедри PO_4 , октаедри TiO_6). Конструкції можна моделювати, склеюючи багатогранники з паперу або пластику.

1.4.5. Композитні моделі

Гарним прикладом композитних моделей є підхід Ніколсона, який широко використовувався з кінця 1970-х років для побудови моделей біологічних макромолекул. Компонентами є переважно амінокислоти та нуклеїнові кислоти з попередньо сформованими залишками, що представляють групи атомів. Багато з цих атомів безпосередньо формуються в шаблон і з'єднуються, просовуючи пластикові заглушки в маленькі отвори. Пластик добре зчеплюється і ускладнює обертання зв'язків, тому можна встановлювати довільні кути кручення і зберігати своє значення. Конформації хребта та бічних ланцюгів визначають шляхом попереднього обчислення кутів кручення, а потім роблять коригування моделі за допомогою звичайного транспортира.

Пластик білий і може бути пофарбований, щоб розрізнити атоми O та N. Атоми водню зазвичай є неявними і моделюються шляхом відрізання спиць. На створення моделі типового білка з приблизно 300 залишками може

знадобитися місяць. Для лабораторій було звично створювати модель для кожного вирішеного білка.

1.4.6. Комп'ютерні моделі

З розвитком комп'ютерного фізичного моделювання тепер стало можливим створювати цілісні моделі, подаючи в комп'ютер координати поверхні.

Крім того, деякий час тому з'явилася можливість створювати дуже точні моделі молекул всередині скляних блоків. Це робиться за допомогою підземного лазерного гравірування.

1.4.7. Обчислювальні моделі

Комп'ютери також можуть моделювати молекули математично. Такі програми, як Avogadro, можуть працювати на типових настільних комп'ютерах і можуть передбачати довжину зв'язків і кути, полярність молекул і розподіл заряду і навіть квантово-механічні властивості, такі як спектри поглинання та випромінювання. Однак такі програми не можуть моделювати молекули, оскільки додається більше атомів, оскільки кількість обчислень квадратична від кількості залучених атомів; якщо в молекулі використано в чотири рази більше атомів, обчислення з триватимуть у 16 разів більше часу. Для більшості практичних цілей, таких як розробка ліків або згортання білка, обчислення моделі вимагають суперкомп'ютерів або взагалі не можуть бути виконані на класичних комп'ютерах за розумний проміжок часу. Квантові комп'ютери можуть моделювати молекули з меншою кількістю обчислень, оскільки тип

обчислень, які виконує квантовий комп'ютер у кожному циклі, добре підходить для молекулярного моделювання.

1.5. Молекулярне моделювання

Молекулярне моделювання охоплює всі методи, теоретичні та обчислювальні, що використовуються для моделювання або імітації поведінки молекул. Методи використовуються в області обчислювальної хімії, дизайну ліків, обчислювальної біології та матеріалознавства для вивчення молекулярних систем, починаючи від малих хімічних систем і закінчуючи великими біологічними молекулами та матеріалами. Найпростіші розрахунки можна виконати вручну, але неминуче потрібні комп'ютери для виконання молекулярного моделювання будь-якої системи розумного розміру. Загальною рисою методів молекулярного моделювання є опис атомістичного рівня молекулярних систем. Такий опис може включати в себе розгляд атомів як найменшої окремої одиниці (підхід молекулярної механіки) або явне моделювання протонів і нейтронів за допомогою кварків, антикварків і глюонів і електронів за допомогою фотонів (підхід квантової хімії). [21]

Механіка молекул - це один з найважливіших аспектів молекулярного моделювання, оскільки вона передбачає використання класичної механіки (механіки Ньютона) для опису фізичної основи моделей. Такі моделі найчастіше існують для опису атомів як точкових зарядів з відповідною масою. Взаємодія між сусідніми атомами описується пружинними взаємодіями (які представляють хімічні зв'язки) і силами Ван-дер-Ваальса. Для опису останнього зазвичай використовується потенціал Леннарда-Джонса. Електростатичні взаємодії при цьому обчислюються, використовуючи закон Кулона. Для кожного атома призначаються координати в декартовому просторі

або у внутрішніх координатах, а також можуть бути призначені швидкості атомів в динамічному моделюванні, які пов'язані з температурою системи, макроскопічною величиною. Збірний математичний вираз називається потенціальною функцією і пов'язаний з окремою термодинамічною величиною, яка називається внутрішньою енергією системи та дорівнює сумі потенціальної та кінетичної енергій. Методи, які займаються мінімізацією потенційної енергії, зазвичай називають методами мінімізації енергії. А вже методи, які використовуються для моделювання поведінки системи з поширенням часу, називаються молекулярною динамікою.

$$E = E_{\text{bonds}} + E_{\text{angle}} + E_{\text{dihedral}} + E_{\text{non-bonded}}$$

$$E_{\text{non-bonded}} = E_{\text{electrostatic}} + E_{\text{van der Waals}}$$

Ця функція, яку називають потенціальною функцією, обчислює молекулярну потенціальну енергію як суму енергетичних доданків, які описують відхилення довжин зв'язку, кутів зв'язку та кутів торсіона від рівноважних значень, а також доданків для пар атомів, що не зв'язуються, що описують параметри Ван-дер-ваальса та електростатичні взаємодії. Набір параметрів, що складається з рівноважних довжин зв'язку, кутів зв'язку, значень часткового заряду, силових констант і параметрів Ван-дер-Ваальса, спільно називають силовим полем. Різні реалізації можливої механіки молекул можуть використовувати зовсім різні вирази та різні параметри для функції потенціалу. Загальні силові поля, які використовуються сьогодні, були розроблені з використанням хімічної теорії, експериментальних довідкових даних і високорівневих квантових розрахунків. [22]

Молекули можна моделювати або у вакуумі, або в присутності розчинника, такого як вода. Моделювання систем у вакуумі називають газофазним моделюванням, тоді як ті, що включають присутність молекул розчинника, називаються явними моделюваннями розчинника. В іншому типі

моделювання дія розчинника оцінюється за допомогою емпіричного математичного виразу; це називається моделюванням неявної сольватації.

РОЗДІЛ 2. РОЗРОБКА ОБ'ЄКТУ ДОСЛІДЖЕНЬ

2.1. Вибір технології та мови програмування

Розмірковуючи про вибір технологій, одразу виникає важливе питання, який з усіх варіантів буде найдоцільнішим та найраціональнішим. Обирати треба враховуючи різні аспекти, які потім проявлятимуть себе в ході роботи.

Обрана тема зазначає саме те, що треба створити такий застосунок, який може бути інтуїтивно зрозумілим будь-якому звичайному користувачу, але при цьому розкривати тему та бути корисним.

2.2. Засоби для розробки

Застосунок працює на Unity та створений з використанням мови C#.

Unity – це кросплатформовий рушій та інструмент, який використовується для створення ігор та різних застосунків.

C# — це універсальна мова програмування, яка охоплює різні дисципліни програмування: лексичну, імперативну, декларативну, функціональну, загальну, об'єктно-орієнтовну (на основі класів), компонентно-орієнтовану та дисципліни зі статичною та жорсткою типізацією

Використане середовище для розробки - Microsoft Visual Studio. Це інтегроване середовище розробки від компанії Microsoft, яке використовується для розробки комп'ютерних програм, а також веб-сайтів, веб-додатків, веб-сервісів та мобільних додатків. Воно може створювати як рідний код, так і керований код. В даному випадку використовується як середовище для розробки на мові C#.

2.3. Опис додатку

Принцип роботи застосунку наступний:

- Вводиться формула
- Починається розбір кожного окремого символу з форми для перевірки, починаючи з того, чи є літера маленькою або великою
- Якщо літера велика, то ми маємо новий атом в формулі, а всі символи записуються до нової змінної типу string
- Якщо літера мала, то вона стосується того ж елемента
- Кожному зі значень, які ми маємо присвоюється своя електронегативність
- Усі отримані значення електронегативності сортуються від найменшого до найбільшого
- Найменше число відокремлюється, бо воно належить центральному атому
- Кількість неподілених пар електронів порівнюється з іншими елементами

2.4. Огляд окремих частин коду

Робота з додатком починається з введення формули хімічної сполуки. Обробка вхідних даних проводиться далі наступним чином:

Спочатку ми перевіряємо, чи є літера, яку ми на даний момент обробляємо великою. Якщо ні, то переходимо до наступного символу нашого рядку.

```

if (first_letter >= 65 && first_letter < 90)
{
    if (cap_or_not >= 65 && cap_or_not <= 90 || isdigit(valueNext))
    {
        element = value;
        if(isdigit(valueNext))
        {
            num_of_atoms = valueNext - '0';
            for (int j = 1; j <= num_of_atoms; j++)
            {
                Elements.push_back(element);
            }
        }
        else
        {
            Elements.push_back(element);
        }
    }
    else if (cap_or_not >= 97 && cap_or_not <= 122)
    {

        element = value;
        element += valueNext;

        if(isdigit(formula[i + 2]))
        {
            num_of_atoms = (formula[i + 2]) - '0';
            for (int j = 1; j <= num_of_atoms; j++)
            {
                elemnt2 = element;
                Elements.push_back(elemnt2);
            }
        }
        else
        {
            Elements.push_back(element);
        }
    }
}
}

```

Рисунок 2.4.1 – Робота з вхідними даними

Якщо наступна літера є великою, то поточний набір символів ми записуємо як елемент. У разі, коли ми маємо якесь число після елемента, то ми зберігаємо елемент саме таку кількість разів.

Якщо наступна літера не є великою, то перевіряємо чи це є маленька літера. У випадку коли це так, ми зберігаємо перший та другий символ як елемент. Так само, як і при попередній умові, ми зберігаємо зазначений елемент необхідну кількість разів, якщо після нього є якесь число.

```

int valence_shell_elctrons (auto atomic_element)
{
    int valence_electrons = 0;

    if (atomic_element == "F" || atomic_element == "Cl" || atomic_element == "Br" || atomic_element == "I" || atomic_element == "At" || atomic_element == "Ts")
    {
        return valence_electrons = 1;
    }
    else if (atomic_element == "O" || atomic_element == "S" || atomic_element == "Se" || atomic_element == "Te" || atomic_element == "Po")
    {
        return valence_electrons = 2;
    }
    else if (atomic_element == "N" || atomic_element == "P" || atomic_element == "As" || atomic_element == "Sb" || atomic_element == "Bi")
    {
        return valence_electrons = 3;
    }
    else if (atomic_element == "C" || atomic_element == "Si" || atomic_element == "Ge" || atomic_element == "Sn" || atomic_element == "Pb")
    {
        return valence_electrons = 4;
    }
    else if (atomic_element == "B" || atomic_element == "Al")
    {
        return valence_electrons = 5;
    }
    else if (atomic_element == "H")
    {
        return valence_electrons = 1;
    }
    else
    {
        return valence_electrons = 0;
    }
    return valence_electrons;
}

```

Рисунок 2.4.2 – Перевірка отриманих елементів

Після отримання списку з елементами, які були визначені з формули на вхідних даних, ми створюємо функцію `valence_shell_elctrons`, в якій зазначаємо для кожного з них кількість валентних електронів

```

float electroNegativity (auto atomic_element)
{
    float num = 0;

    switch (hashit(atomic_element))
    {
        case F:
            num = 3.98;
            break;
        case Cl:
            num = 3.16;
            break;
        case Br:
            num = 2.96;
            break;
        case I:
            num = 2.66;
            break;
        case At:
            num = 2.20;
            break;
        case O:
            num = 3.44;
            break;
        case S:
            num = 2.58;
            break;
    }
}

```

Рисунок 2.4.3 – функція `electroNegativity`

Також ми створюємо функцію `electroNegativity`, яка необхідна для того, щоб зазначити для кожного з атомів його електронегативність.

```
string molecular_shape (int counter, int sum)
{
    string shape;
    if (counter == 2)
    {
        return shape = "Linear (2 Atoms)";
    }
    else if (counter == 3)
    {
        if (sum == 8)
        {
            return shape = "Linear";
        }
        else if (sum == 6 || sum == 7)
        {
            return shape = "Bent (Trigonal)";
        }
        else if (sum == 4)
        {
            return shape = "Bent (Tetrahydral)";
        }
    }
    else if (counter == 4)
    {
        if (sum == 8)
        {
            return shape = "Trigonal Planar";
        }
        else if (sum == 6)
        {
            return shape = "Trigonal Pyramidal";
        }
        else if (sum == 4)
        {
            return shape = "T-Shaped";
        }
    }
}
```

Рисунок 2.4.4 – фрагмент функції `molecular_shape`

Маючи необхідну інформацію з нашої хімічної формули, ми отримуємо важливі дані – визначаємо молекулярну форму в функції `molecular_shape`

Після визначення формули молекули залишається останній крок відобразити молекулу обраної форми на екрані.

```
void Update () {  
  
    the_shape = Shape (Main(formula));  
    text.text = the_shape;  
  
    if (the_shape== "Linear (2 atoms)") {  
        Select (0);  
    } else if (the_shape == "Linear") {  
        Select (0);  
    } else if (the_shape == "Bent (Trigonal)") {  
        Select (1);  
    }  
    else if (the_shape == "Bent (Tetrahydral)") {  
        Select (1);  
    }  
    else if (the_shape == "Trigonal Planar") {  
        Select (2);  
    }  
    else if (the_shape == "Trigonal Pyramidal"){  
        Select (6);  
    }  
    else if (the_shape == "T-Shaped") {  
        Select (5);  
    }  
    else if (the_shape == "Tetrahydral") {  
        Select (3);  
    }  
    else if (the_shape == "Seesaw") {  
        Select (4);  
    }  
}
```

Рисунок 2.4.5 – запуск функції Select за обраною формою

На наведеному фрагменті коду, ми запускаємо функцію, що дивиться яку форму молекули ми обрали, на звертається до функції Select.

```
public void Select (int index) {  
    if (index == selectedIndex)  
        return;  
    if (index < 0 || index >= models.Count)  
        return;  
  
    models [selectedIndex].SetActive (false);  
    selectedIndex = index;  
    models [selectedIndex].SetActive (true);  
}
```

Рисунок 2.4.6 – функція Select

Насамперед, функція Select необхідна для того, щоб серед списку обраних заздалегідь тривимірних моделей молекул різних форм обрати саме ту, що потрібна нам в цій ситуації та відобразити її на екрані.

2.5. Процес та результат роботи

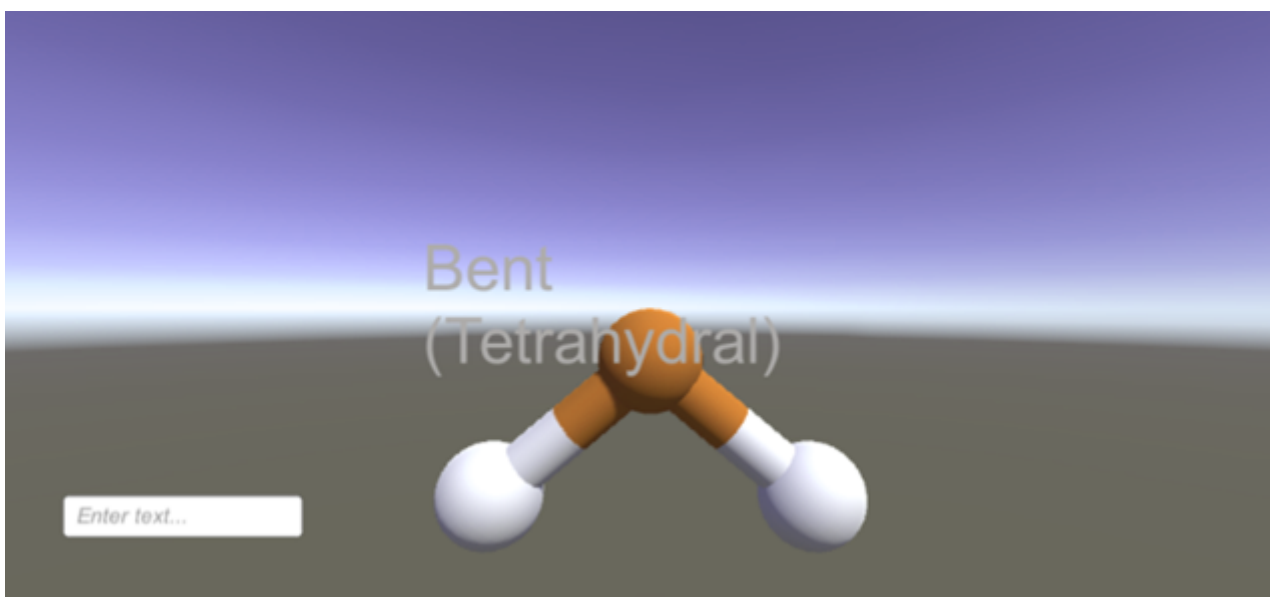


Рисунок 2.5.1 – результат у вигляді зігнутої (кутової) форми молекули

Приклад перший – на вхід подано хімічну сполуку H_2O (молекулу води) у вигляді «H2O».

Результат – маємо молекулу у «кутовій» формі.

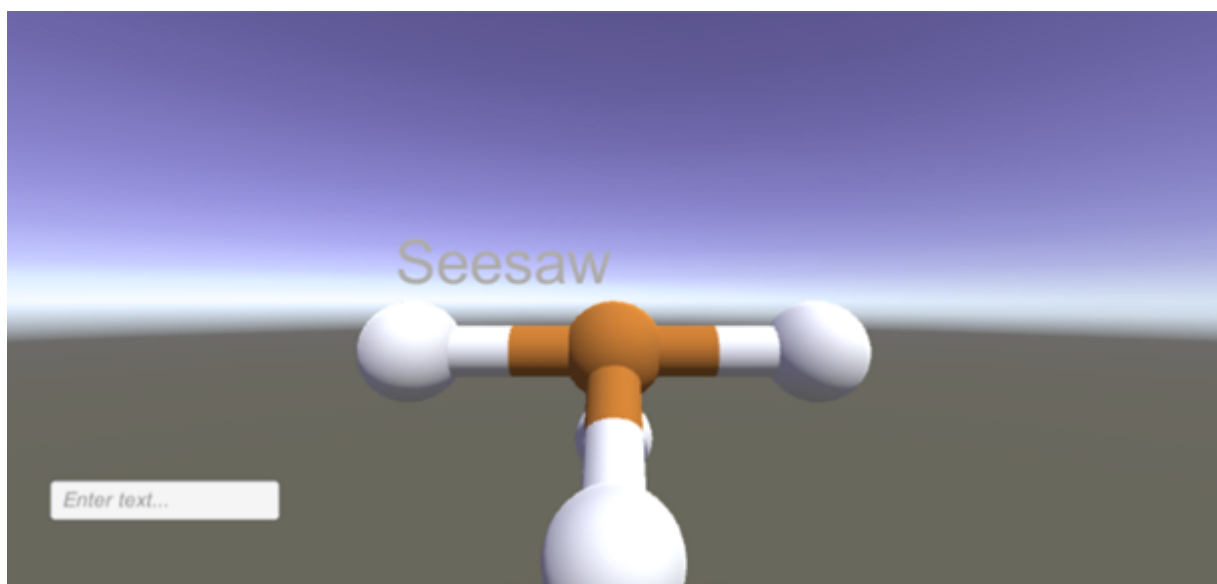


Рисунок 2.5.2 – результат у вигляді дисфеноїдальної форми молекули

Приклад другий – на вхід подано хімічну сполуку SF_4 (молекулу сульфур тетрафторид) у вигляді «SF4»

Результат – маємо молекулу у дисфеноїдальній формі, або ж у формі «гойдалки», як її ще називають.

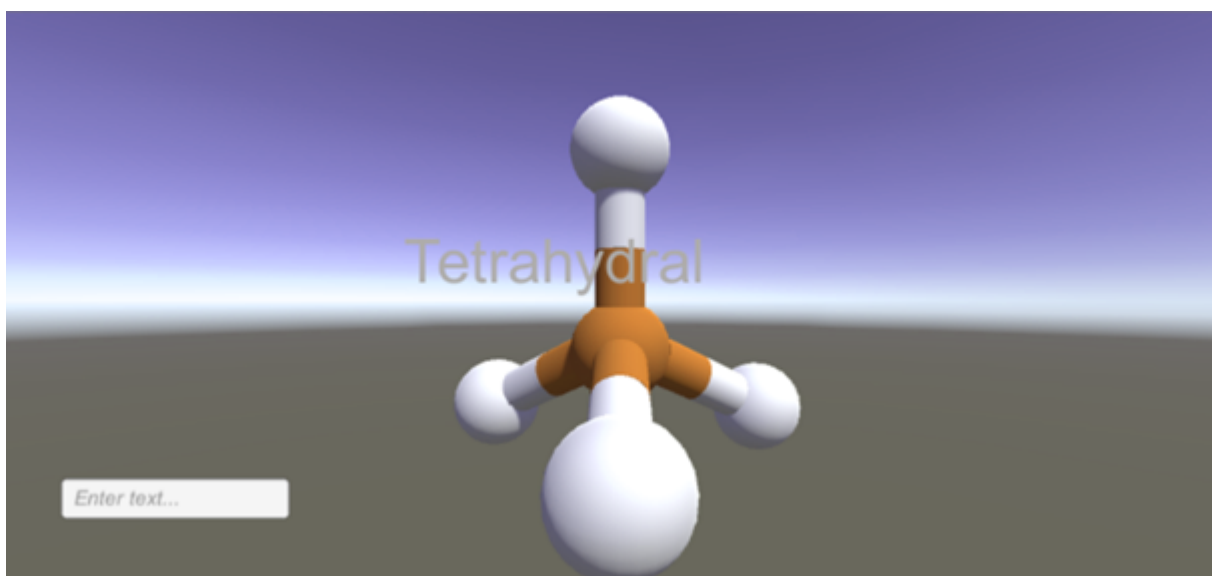


Рисунок 2.5.3 – результат у вигляді тетрагедральної форми молекули

Приклад третій – на вхід подано хімічну сполуку CH_4 (молекулу метану) у вигляді «CH4».

Результат – маємо молекулу у тетрагедральній формі.

ВИСНОВКИ

Процес роботи над кваліфікаційною роботою був розподілений так, що під час її виконання були розібрані усі важливі аспекти хімії, завдяки яким був розроблений застосунок, принцип якого полягає у відображенні структури молекул хімічних сполук у зрозумілому вигляді.

Як вже було зазначено, застосунок працює на рушії Unity та зроблений у його редакторі з використанням мови програмування C#, середовищем розробки для якої було обране IDE Microsoft Visual Studio 2019, бо воно вважалося найбільш доцільним.

Опис коду та принцип роботи застосунку був продемонстрований на декількох прикладах. Окремі фрагменти були розібрані та пояснені для кращого розуміння того, як працює застосунок.

Отриманий результат може бути корисним для більш легкого вивчення окремих аспектів хімії та як зручна заміна бази даних хімічних сполук у випадках коли потрібен швидкий доступ до необхідної інформації. Має великий потенціал для збільшення функціоналу.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. McSween Jr, Harry, and Gary Huss. Cosmochemistry. Cambridge University Press, 2021. p. 419
2. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the "Gold Book") (1997)
3. Chandra, Sulekh (2005). Comprehensive Inorganic Chemistry
4. "Molecule". Encyclopædia Britannica
5. Harry, B. Gray. Chemical Bonds: An Introduction to Atomic and Molecular Structure
6. "How many gold atoms make gold metal?". phys.org.
7. Campbell, Neil A.; Brad Williamson; Robin J. Heyden (2006). Biology: Exploring Life
8. "Ionic bond". IUPAC Compendium of Chemical Terminology
9. Wang, Zhanyun; Walker, Glen W.; Muir, Derek C. G.; Nagatani-Yoshida, Kakuko (2020-01-22). "Toward a Global Understanding of Chemical Pollution: A First Comprehensive Analysis of National and Regional Chemical Inventories"
10. Askeland, Donald R.; Wright, Wendelin J. (January 2015). "11-2 Intermetallic Compounds". The science and engineering of materials
11. Lawrance, Geoffrey A. (2010). Introduction to Coordination Chemistry.
12. Greenwood, Norman N.; Earnshaw, Alan (1997). Chemistry of the Elements
13. Cotton, Frank Albert; Geoffrey Wilkinson; Carlos A. Murillo (1999). Advanced Inorganic Chemistry
14. McMurry, John E. (1992), Organic Chemistry
15. Hillisch, A; Lorenz, M; Diekmann, S (2001). "Recent advances in FRET: distance determination in protein–DNA complexes". Current Opinion in Structural Biology.
16. Richard E. Dickerson: Prinzipien der Chemie. Walter de Gruyter, 1988
17. Thomas Hill: Prüfungswissen Physikum. Georg Thieme Verlag, 2009

18. Paula Yurkanis Bruice: Organische Chemie Studieren kompakt. Pearson Deutschland GmbH, 2011
19. "Law of Constant Composition". Everything Math and Science. SIYAVULA
20. Burrows, Andrew. (2013-03-21). Chemistry³ : introducing inorganic, organic and physical chemistry
21. Leach AR (2009). Molecular modelling : principles and applications.
22. Heinz H, Ramezani-Dakhel H (January 2016). "Simulations of inorganic-bioorganic interfaces to discover new materials: insights, comparisons to experiment, challenges, and opportunities"
23. Parsons J, Holmes JB, Rojas JM, Tsai J, Strauss CE (July 2005). "Practical conversion from torsion space to Cartesian space for in silico protein synthesis". Journal of Computational Chemistry.
24. Lee J, Cheng X, Swails JM, Yeom MS, Eastman PK, Lemkul JA, et al. (January 2016). "CHARMM-GUI Input Generator for NAMD, GROMACS, AMBER, OpenMM, and CHARMM/OpenMM Simulations Using the CHARMM36 Additive Force Field". Journal of Chemical Theory and Computation.
25. Dealessandri, Marie (January 16, 2020). "What is the best game engine: is Unity right for you?". GamesIndustry.biz. Gamer Network.
26. C# Language Specification (4th ed.). Ecma International.