Research in Chemistry Education, Vol 6, No 1, 69-90

Research in Chemistry Education

https://chemedu.cfu.ac.ir

ORIGINAL RESEARCH PAPER

Using Gaussian and GaussView software for effective teaching of chemistry by drawing molecules

Alireza Yaghoubi [1,*], ***Ali Ramazani*** [2]

[1] *Chemistry teacher in education department of Qazvin region 2, Qazvin, Iran*
[2] *Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Zanjan, 45371-38791 Zanjan, Iran*
* Corresponding author: (alirezayaghoubi62@yahoo.com)

ABSTRACT

The use of visual effects and visual media in chemistry education is very effective and can make the classroom attractive and impress the audience in addition to facilitating the learning of the chemistry concepts and rules. Therefore, this type of learning can be considered a type of visual learning style. In this article, first, a number of the polar and non-polar molecules in high school chemistry books were drawn using GaussView software. Then, in order to achieve the optimized structure of the molecules and their various characteristics, Gaussian software was used. These calculations include optimizing the energy level of the molecule, determining the electric charge of the atoms that make up the molecule, determining the dipole moment of the molecule, displaying the contours around the molecule, displaying electrostatic potential maps, and obtaining the HOMO and LUMO molecular orbitals. From among the different molecules, the structure of water molecule was discussed in more detail. In addition, Gaussian's calculations were performed on some other molecules such as ammonia, methanol, formaldehyde, methane, carbon dioxide, and oxygen. Various molecules were used for drawing to cover many concepts of chemistry. Moreover, the steps of drawing molecules and displaying their properties has also been described.

Keywords: Effective teaching of chemistry, Visual learning, Drawing molecules, Gaussian software, GaussView software

Received: 23 January 2024
Revised: 30 March 2024
Accepted: 08 April 2024
Published online: 08 April 2024
PP: 69-90
ISSN (Online): 2717-2279

Citation: Yaghoubi, A, Ramazani, A. (2024) Using Gaussian and GaussView software for effective teaching of chemistry by drawing molecules. *Research in Chemistry Education*, *6*(1), 69-90.
https://doi.org/ 10.48310/CHEMEDU.2024.16029.1230

پژوهش در آموزش شیمی، سال ششم، شماره اول، صفحات ۹۰-۶۹

پژوهش در آموزش شیمی
https://chemedu.cfu.ac.ir

مقاله پژوهشی

استفاده از نرم افزار گوسین و گوس ویو برای آموزش موثر شیمی بوسیله ترسیم مولکول‌ها

علیرضا یعقوبی [۱،*]، علی رمضانی [۲]

۱. دبیر شیمی آموزش و پرورش استان قزوین، ناحیه دو، قزوین، ایران

۲. استاد شیمی دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، صندوق پستی۴۵۳۳۳۴۵ زنجان، زنجان، ایران

* نویسنده مسئول: (alirezayaghoubi62@cfu.ac.ir)

چکیده

استفاده از جلوه های بصری و رسانه های تصویری در آموزش شیمی بسیار تاثیر گذار است و می تواند علاوه بر تسهیل در یادگیری مفاهیم و قواعد شیمی، کلاس درس را جذاب و مخاطبان را تحت تاثیر قرار دهد. بنابراین این نوع از یادگیری را می توان از نوع سبک یادگیری بصری به حساب آورد. در این مقاله، ابتدا تعدادی از مولکول های قطبی و غیر قطبی موجود در کتاب های درسی شیمی دوره دوم متوسطه با استفاده از نرم افزار گوس ویو ترسیم شدند. سپس به منظور دستیابی به ساختار بهینه شده مولکول ها و ویژگی های مختلف آن ها، از نرم افزار گوسین استفاده شد. این محاسبات شامل بهینه کردن سطح انرژی مولکول، تعیین مقدار بار الکتریکی اتم های تشکیل دهنده مولکول، تعیین ممان دو قطبی مولکول، نمایش کانتورهای اطراف مولکول، نمایش نقشه های پتانسیل الکتروستاتیکی و به‌دست آوردن اوربیتال مولکولی هومو و لومو می‌شود. از بین مولکول های مختلف، ساختار مولکول آب با جزئیات بیشتری بررسی شد. به علاوه، محاسبات گوسین بر روی برخی مولکول های دیگر مانند آمونیاک، متانول، فرمالدهید، متان، کربن دی اکسید و اکسیژن نیز انجام شد. برای ترسیم از مولکول های متنوعی استفاده شد تا بسیاری از مفاهیم شیمی را تحت پوشش قرار دهد. علاوه بر این، مراحل ترسیم مولکول ها و نمایش خواص آن ها نیز شرح داده شده‌است.

واژه‌های کلیدی:
آموزش موثر شیمی ،
یادگیری بصری،
ترسیم مولکول‌ها،
نرم افزار گوسین،
نرم افزار گوس ویو

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۱۱/۰۳
تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۰۱/۱۱
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۰۱/۲۰
تاریخ انتشار آنلاین: ۱۴۰۳/۰۱/۲۰
شماره صفحات: ۹۰-۶۹
شاپا الکترونیکی: ۲۷۱۷-۲۲۷۹

ارجاع: یعقوبی، علیرضا؛ رمضانی، علی (۱۴۰۳). استفاده از نرم افزار گوسین و گوس ویو برای آموزش موثر شیمی بوسیله ترسیم مولکول‌ها. پژوهش در آموزش شیمی، ۶(۱) ، ۹۰-۶۹.

https://doi.org/ 10.48310/CHEMEDU.2024.16029.1230

مقدمه

با توجه به پیشرفت سریع علم و فناوری و افزایش سطح دانش و اطلاعات دانش آموزان، آموزش در نظام آموزش و پرورش به شیوه سنتی دیگر پاسخگوی نیاز دانش‌آموزان نیست. بنابراین به‌کار بردن روش‌های نوین و موثر با تکیه بر ابزارها و فناوری‌های مدرن در آموزش می‌تواند مسیر یادگیری و یاددهی را آسان‌تر و راحت‌تر کند. استفاده از رایانه در آموزش، انقلاب بزرگی در تدریس و یادگیری ایجاد کرده‌است به طوری که به این نوع آموزش، آموزش رایانه محور گفته می‌شود (احدیان، ۱۳۸۲). معلم برای آموزش به دانش آموزان با کمک رایانه می‌تواند مطالب خود را در قالب نرم افزارهای چند رسانه‌ای به نمایش بگذارد. با کمک رایانه و نرم افزارهای چندرسانه‌ای حس بینایی و شنوایی دانش آموزان در یادگیری درگیر می‌شود.

استفاده از نرم افزارهای چند رسانه‌ای و رایانه در آموزش را می‌توان یکی از بهترین روش‌های تدریس و یادگیری دانش‌آموزان دانست. این روش می‌تواند چندین مزیت داشته باشد: باز خورد زود و فوری، یادگیری گام به گام دانش آموزان، افزایش بهره‌وری در یادگیری دانش آموزان، افزایش شوق یادگیری و اشتیاق به مدرسه، بهبود عملکرد تحصیلی و افزایش سرعت یادگیری دانش آموزان (Lewis, 1994) .

یکی دیگر از مزایای مهم نرم افزارهای چند رسانه‌ای، افزایش تعامل بین دانش آموزان و همچنین بین معلم و دانش آموزان است. این هدف به عنوان یک روش فعال یادگیری همواره مورد توجه مسئولین آموزش و پرورش بوده‌است (خزاعی، ۱۳۸۰). به علاوه، چند رسانه‌ای‌ها به معلمان فرصتی می‌دهند تا در کلاس سبک‌های متفاوت یادگیری و هوش را بشناسند (Cherry, 2002).

پژوهشگران بر این باورند که قبل از ارائه مطالب به صورت کلامی و نوشتاری، ارائه به صورت تصویری باشد که در این صورت یادگیری سریع‌تر و مفهومی‌تر خواهدبود. این یافته‌ها تاثیر بسیار زیاد رسانه‌های تصویری در روند یادگیری و همچنین مزیت این نوع رسانه‌ها نسبت به کلمه در یادگیری مفاهیم را نشان می‌دهد. استفاده از نرم افزارهای رایانه‌ای نوین در آموزش شیمی، زمینه را برای افزایش علاقه دانش‌آموزان به شیمی، انتقال دانش و همچنین تثبیت دانش ایجاد می‌کند. نرم افزار رایانه‌ای شیمی برنامه‌ای است که برای انجام محاسبات معادلات و عملیات شیمیایی پیچیده، ساختار مواد شیمیایی، شناسایی آن‌ها و نمایش مؤلفه‌های مواد مختلف استفاده می‌شود (Julboev, 2021).

نرم‌افزارهای کاربردی مختلفی در شیمی وجود دارند که یکی از مهمترین آن‌ها نرم‌افزار گوسین۱ است (فریده حقیقی - آموزش شیمی - دانلود ها). نرم افزار گوسین یکی از قوی‌ترین نرم‌افزارهای محاسباتی است که قابلیت انجام محاسبات ساده تا پیچیده را دارا می باشد و به محققان امکان بررسی مؤلفه‌های ساختاری، شیمیایی، خواص سیستم‌ها و همچنین پیش بینی مسیرهای واکنش را می‌دهد (Frisch, M. J., 2009). با استفاده از این نرم افزار می‌توان خواص و نتایج مولکول‌ها و ساختارهای ترسیم شده با نرم‌افزار گوس ویو۲ را محاسبه کرد (Deringer et al., 2021). به عبارت دیگر ساختارهای خام ترسیم شده با استفاده از نرم افزار گوس ویو با محاسبات بعدی با گوسین شکل کامل و واقعی‌تری به خود می‌گیرند.

در این تحقیق، ابتدا برخی از مولکول‌های موجود در کتاب‌های درسی شیمی دبیرستان با استفاده از نرم‌افزار گوس ویو ترسیم شد. در مرحله بعد ساختارهای ترسیم شده، با استفاده از نرم‌افزار گوسین محاسبه شد تا مولکول شکل بهینه شده و واقعی‌تری به خود بگیرد. در نهایت، ویژگی ها و خواص مولکول مورد نظر به دست آمد. با استفاده از

[1] Gaussian
[2] GaussView

نمایش تصویری از مولکول‌ها و ویژگی‌هایشان، یادگیری بسیاری از مفاهیم شیمی موجود در کتاب‌های درسی شیمی آسان و جذاب خواهدبود.

پیشینه پژوهش

آموزش و یاددهی بسیاری از مفاهیم شیمی به شیوه سنتی و روش سخنرانی یک روش آموزشی غیرموثر برای یادگیری دانش آموزان و همچنین این روش‌ها برای معلمان بسیار زمان بر هستند. بنابراین، ارائه یک روش یاددهی و یادگیری موثر یک امر ضروری و همچنین بسیار کمک کننده خواهدبود. در یک پژوهش، میزان یادگیری درس شیمی با استفاده از نرم افزارهای آموزشی و یادگیری به شیوه سنتی با یکدیگر مقایسه شدند. نتایج نشان داد که یادگیری و یادسپاری با استفاده از نرم افزارهای آموزشی تاثیر قابل توجهی بر یادگیری درس شیمی داشته‌است (مهدی نیا، ۱۳۹۵).

گزارش‌ها حاکی از آن است که استفاده از نرم افزارهای گوسین و گوس ویو تاثیر قابل توجهی در تسهیل آموزش دانش آموزان و بهبود فرایند یادگیری نشان داده‌است (LI et al., 2016). با استفاده از نرم‌افزار گوسین می‌توان اطلاعات کاملی از خواص و ویژگی‌های ساختاری مولکول‌ها به‌دست آورد (Podolyan, 2009). این نتایج در کنار مطالب مربوط به ساختار لوییس مولکول‌های موجود در کتاب شیمی پایه دهم (حذرخانی و همکاران، ۱۴۰۱) و نقشه پتانسیل الکترواستاتیکی مولکول‌ها در کتاب شیمی پایه دوازدهم (حذرخانی و همکاران، ۱۴۰۱) می‌تواند جامع‌ترین اطلاعات را در اختیار دانش آموزان قرار دهد.

هدف پژوهش

این تحقیق چندین هدف را طبق موارد ذیل در بر می‌گیرد:

۱- ترسیم و محاسبه برخی ترکیبات و مولکول‌های موجود در کتاب درسی شیمی پایه دهم تا دوازدهم با استفاده از نرم افزارهای ترسیم گوس ویو و محاسباتی گوسین.

۲- نمایش خصوصیات و ویژگی‌های مولکول‌ها پس از محاسبات با نرم افزار گوسین جهت یادگیری آسان و سریع برخی از مفاهیم پایه در درس شیمی.

۳- آشنایی با ترسیم ساختار مولکول‌ها با استفاده از نرم افزار گوس ویو و دستیابی به خصوصیات و ویژگی‌های مولکول‌ها با استفاده از نرم‌افزار گوسین.

۴- شناسایی ساختار واقعی و ویژگی‌های متنوع برخی از مولکول‌های گنجانیده شده در کتاب‌های درسی شیمی دبیرستان با استفاده از نتایج به‌دست آمده از محاسبات نرم‌افزار گوسین.

۵- پتانسیل بالای نرم‌افزارهای گوس ویو و گوسین برای آموزش موثر درس شیمی با نمایش ساختارهای متنوع مولکول‌ها به عنوان رسانه‌های تصویری جذاب.

روش

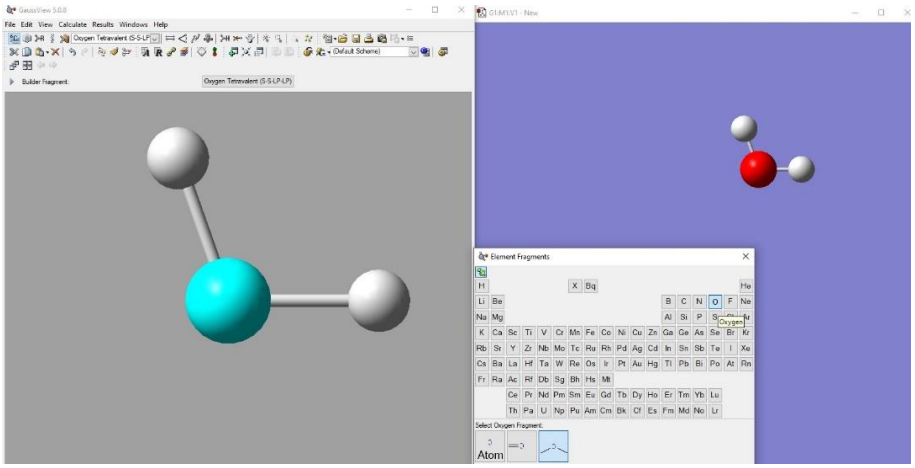
بسیاری از مولکول‌های قطبی و غیرقطبی در محتوای کتاب‌های درسی شیمی پایه دهم تا دوازدهم گنجانیده شده‌است. برخی از این مولکول‌های قطبی عبارت است از آب، آمونیاک، متانول و فرمالدهید و همچنین برخی مولکول‌های غیر قطبی شامل متان، کربن دی اکسید و اکسیژن می‌شوند. از آنجایی که بسیاری از خواص مولکول‌ها تنها پس از نمایش درست ساختار واقعی مولکول‌ها قابل درک است، بنابراین استفاده از یک روش که بتواند هم ساختار

درست مولکول‌ها را نشان دهد و هم خصوصیات مولکول‌ها را تخمین بزند بسیار موثر خواهد بود. در این مقاله، ابتدا برخی از مولکول‌ها مانند مولکول آب (که به طور ویژه‌ای به آن پرداخته شده‌است)، آمونیاک، متانول، فرمالدهید، کربن دی اکسید، متان و مولکول اکسیژن با استفاده از نرم‌افزار گوس ویو ترسیم شدند. سپس برای محاسبه و بدست آوردن ساختار واقعی مولکول‌ها و رسیدن به برخی خصوصیات مربوط به این ساختارها از نرم افزار گوسین استفاده شد. در نهایت نتایج محاسبه شده بوسیله نرم‌افزار گوسین به صورت داده‌های تصویری و اطلاعات ساختاری مولکول‌ها حاصل شد. این اطلاعات می‌تواند به عنوان یکی از رسانه‌های تصویری قوی برای آموزش موثر شیمی در کلاس درس بکار رود.

یافته‌ها

۱- ترسیم مولکول آب با نرم افزار گوس ویو۵

در ابتدا مولکول آب که به عنوان یکی از معروف‌ترین و شناخته‌ترین مولکول در شیمی است، انتخاب شد. سپس ساختار این مولکول با استفاده از نرم افزار گوس ویو ترسیم شد (شکل۱). همانطور که شکل ۱ نشان می‌دهد، با اجرای نرم افزار گوس ویو، پنجره مربوط به آن همراه با پنجره ترسیم (پس زمینه آبی رنگ) و جدول تناوبی عنصرها بر روی صفحه رایانه ظاهر می شود. پنجره گوس ویو به صورت پیش فرض بر روی مولکول متان فعال است. با کلیک بر روی عنصر اکسیژن در جدول تناوبی و در ادامه کلیک بر روی پنجره ترسیم، ساختار مولکول آب ترسیم می‌شود (شکل۱).

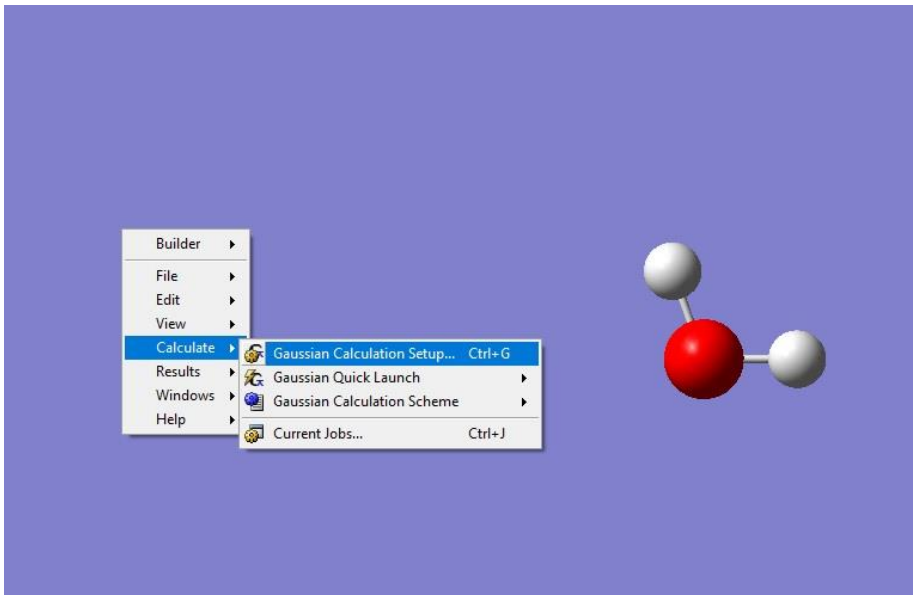


شکل۱- ترسیم مولکول آب با نرم افزار گوس ویو ۵

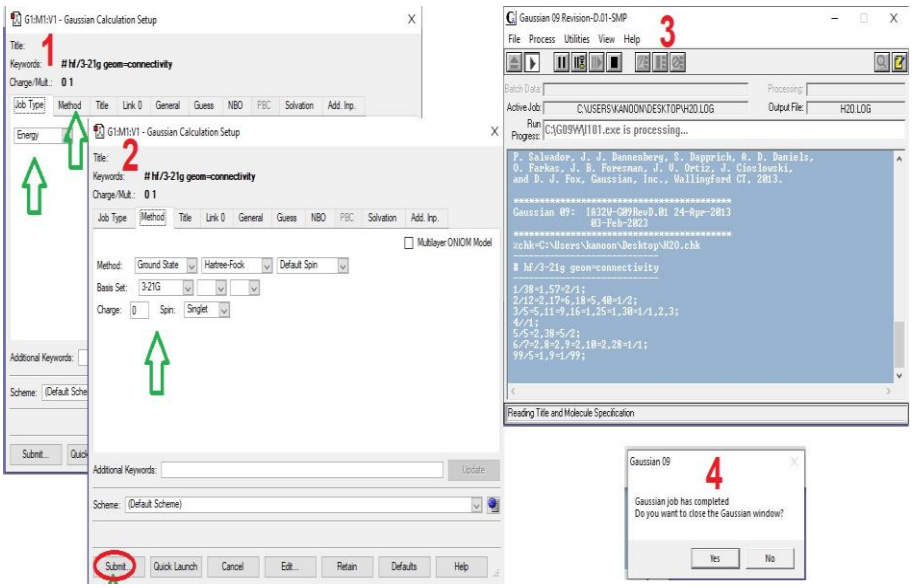
۲- بهینه سازی ساختار مولکول آب با نرم افزار گوسین۹

از آنجایی که مولکول آب پس از ترسیم اولیه، از لحاظ ساختاری و سطح انرژی بهینه نیست، از این رو لازم است که محاسباتی بر روی این مولکول به منظور رسیدن به حالت پایدار انجام شود. بنابراین از نرم افزار محاسباتی گوسین جهت بهینه کردن سطح انرژی این مولکول استفاده شد (شکل ۲). به این صورت که پس از راست کلیک کردن و انتخاب گزینه "Calculate" و در ادامه انتخاب گزینه "Gaussian Calculation Setup" یک پنجره باز می شود (شکل۳). در این پنجره، گزینه "Job Type" به صورت پیش فرض بر روی انرژی تنظیم شده‌است. به علاوه گزینه "Method" بکار رفته نیز به صورت پیش فرض به صورت "Ground State" با مشخصات نشان داده‌شده در شکل ۳ تنظیم شده‌است. بنابراین پس از کلیک بر روی گزینه "Submit" نرم افزار گوسین شروع به محاسبه بر روی مولکول آب می‌کند (مراحل انجام کار به ترتیب اعداد در شکل ۳ نشان داده شده‌است). در نهایت، ساختار بهینه شده به صورت

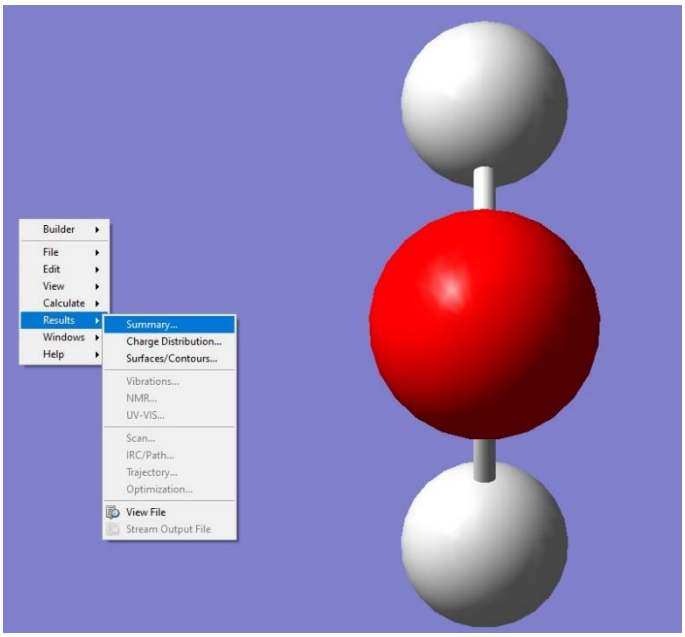
شکل ۴ بدست می‌آید. همچنین خصوصیات و ویژگی‌های ساختار بهینه شده مولکول آب در ادامه بحث و بررسی می‌شوند.



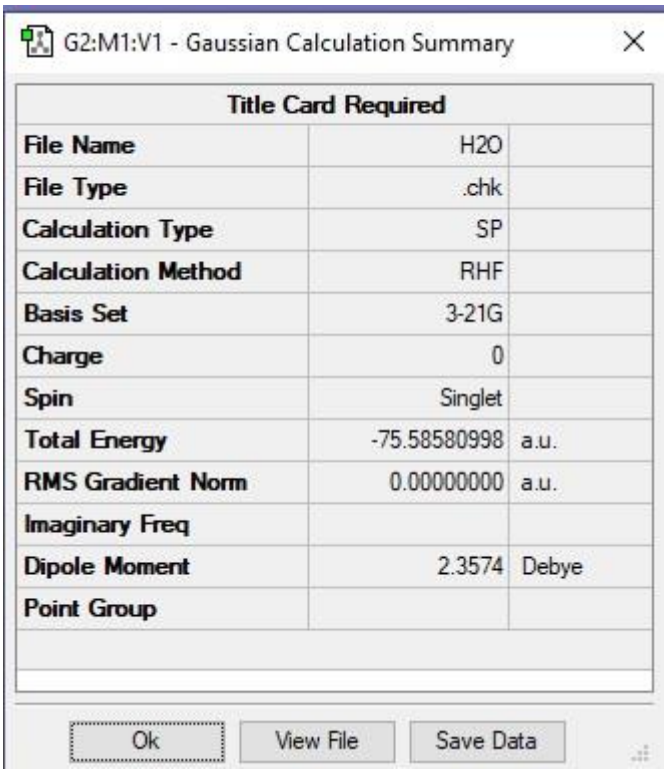
شکل۲- محاسبه بر روی مولکول آب با استفاده از نرم‌افزار گوسین ۹



شکل۳- مراحل بهینه سازی مولکول آب و محاسبات بر روی آن توسط نرم‌افزار گوسین ۹



شکل۴- ساختار بهینه شده مولکول آب پس از محاسبات گوسین

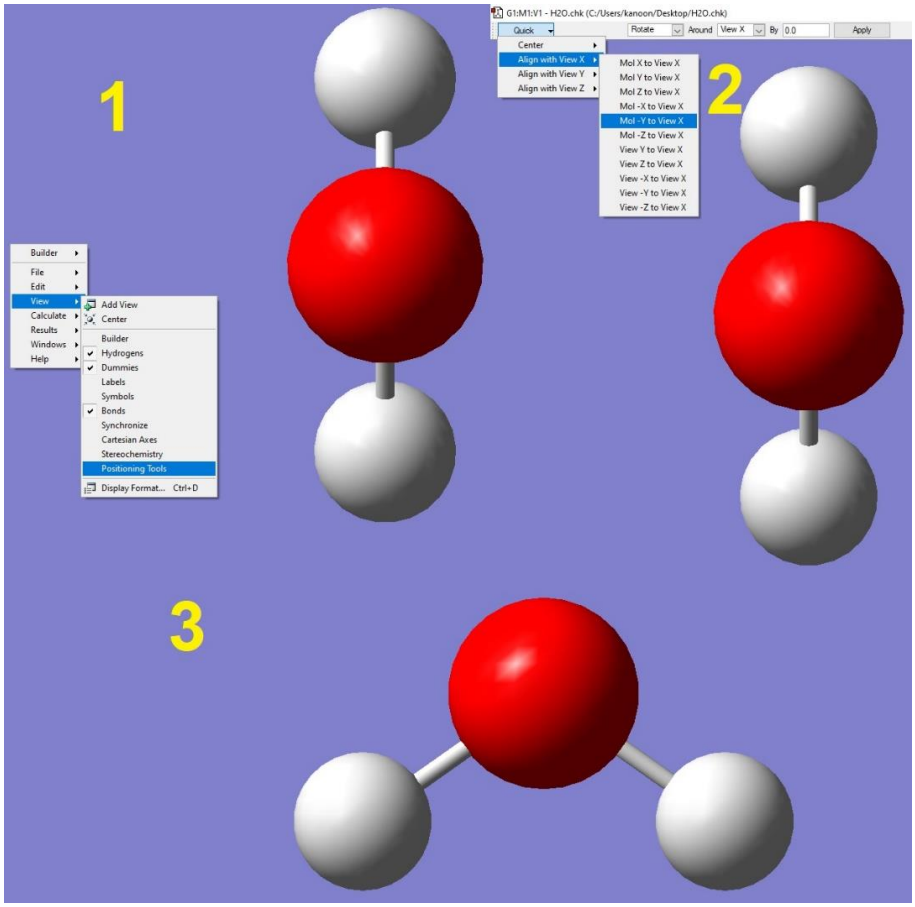


شکل۵- خلاصه بعضی خواص ساختاری مربوط به مولکول آب پس از محاسبات گوسین بر روی مولکول آب

نتایج حاصل از محاسبه گوسین بر روی مولکول آب، شامل بسیاری از خصوصیات مربوط به ساختار مولکول آب می‌شود. خلاصه محاسبات گوسین برای مولکول آب که مربوط به نوع و روش محاسبه، انرژی، بارالکتریکی و... است در شکل ۵ نمایش داده شده‌است.

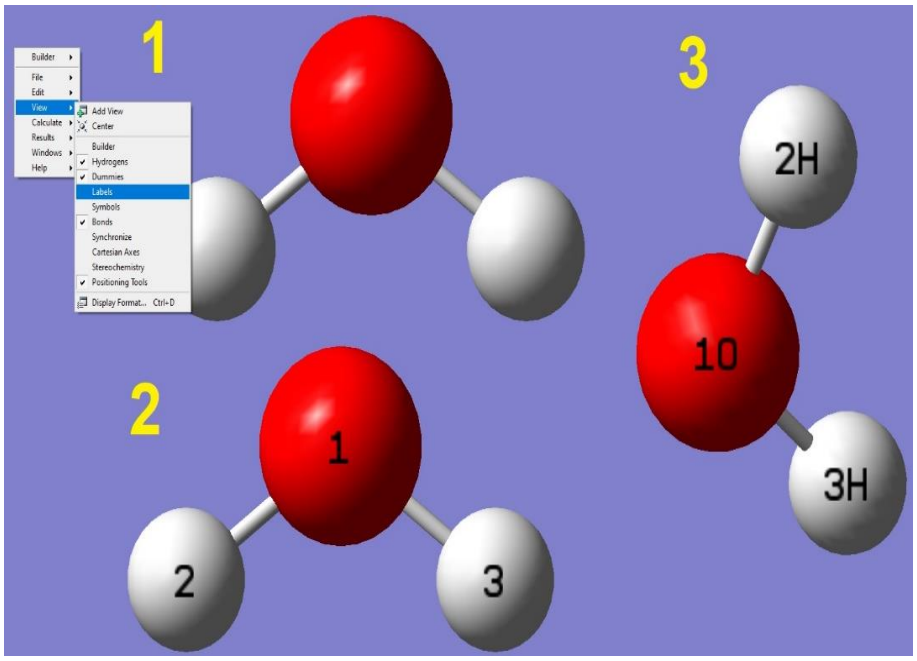
۳- تغییر موقعیت مولکول آب، شماره گذاری اتم‌ها و برچسب زدن بر روی اتم‌ها.

موقعیت مولکول آب را می توان براساس محورهای X, Y و Z تغییر داد و ساختار مولکول آب را از نماهای مختلف مشاهده کرد. شکل ۶ مراحل تغییر موقعیت مولکول آب را نشان می‌دهد. بر طبق این شکل، پس از کلیک بر روی ابزار موقعیت، گزینه مربوط به تغییر موقعیت مولکول آب در جهت محورهای مختلف فعال می‌شود و می‌توان مولکول آب را از زوایای مختلف مشاهده کرد.



شکل۶- مراحل مربوط به تغییر موقعیت مولکول آب

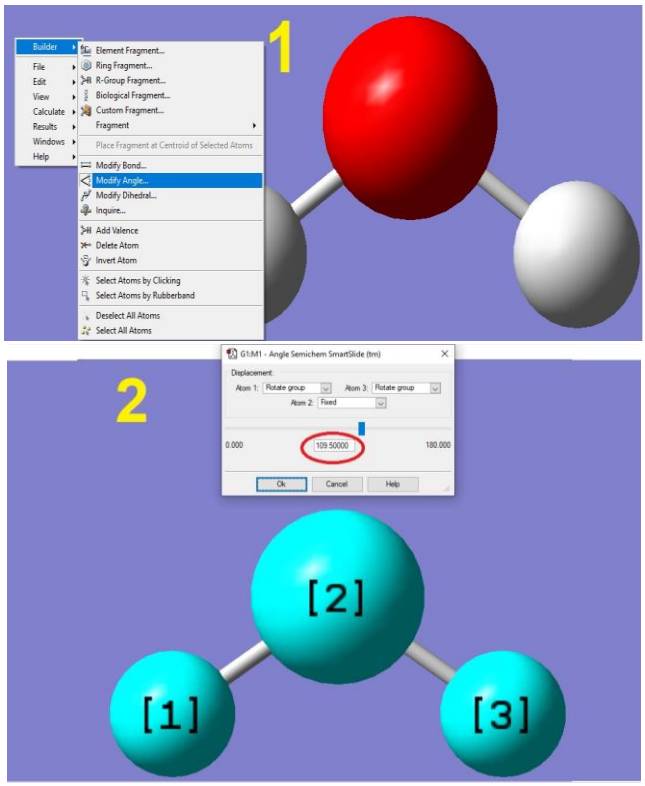
شناسایی اتم‌های مختلف مولکول‌آب و شماره‌گذاری آن‌ها برای نمایش ویژگی‌های مختلف مولکول از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است. بنابراین می توان گزینه‌های برچسب، نمادها و... را از منوی "View" فعال کرد (شکل۷).



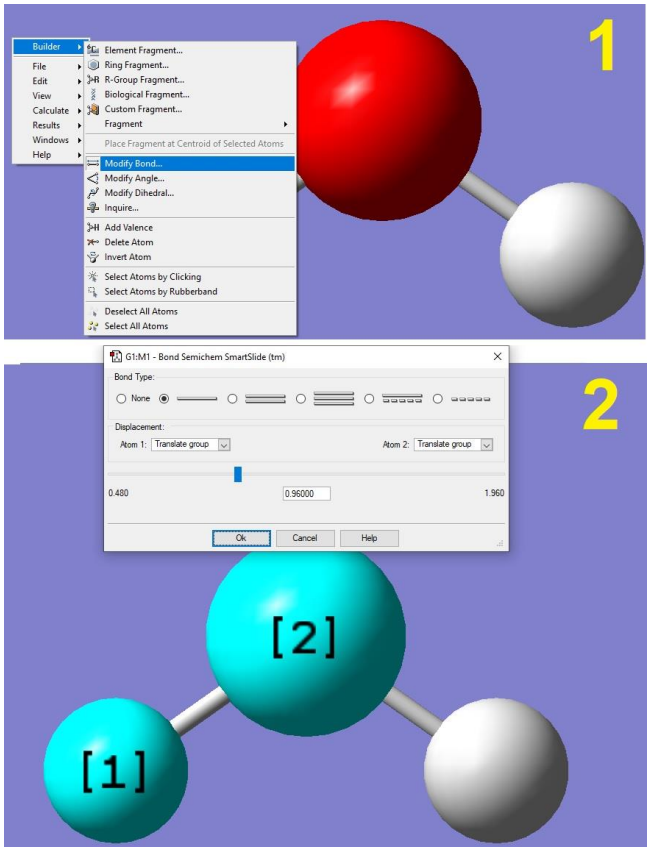
شکل۷- شماره‌گذاری و برچسب زدن اتم‌های مولکول آب

۴- زاویه پیوند و درجه پیوند

تعیین زاویه پیوند و درجه پیوند مولکول آب برای نمایش ساختار حقیقی مولکول آب از اهمیت زیادی برخوردار است. به عنوان مثال در شیمی پایه اول دبیرستان ساختار خمیده و قطبیت مولکول آب جهت گیری در میدان الکتریکی را سبب می‌شود. برای پیدا کردن زاویه پیوند بین دو اتم هیدروژن و یک اتم اکسیژن در مولکول آب، یکی از ساده‌ترین روش‌ها استفاده از گزینه "Modify Angle" از زیر مجموعه‌های گزینه "Builder" می‌باشد (شکل۸). بر طبق شکل ۸ زاویه پیوندی در مولکول آب حدود ۱۰۹/۵ درجه است. به علاوه، برای به‌دست آوردن درجه پیوند در مولکول آب لازم است که گزینه "Modify Bond" فعال شود. سپس، با کلیک بر روی اتم اکسیژن و هیدروژن پنجره‌ای نمایش داده می‌شود که در آن اطلاعاتی کامل در مورد درجه پیوند مولکول مورد نظر آمده‌است. بنابراین بین اتم اکسیژن و هیدروژن، پیوندی با درجه پیوند نزدیک به عدد ۱ که نشان دهنده پیوند یگانه است حاصل می‌شود.



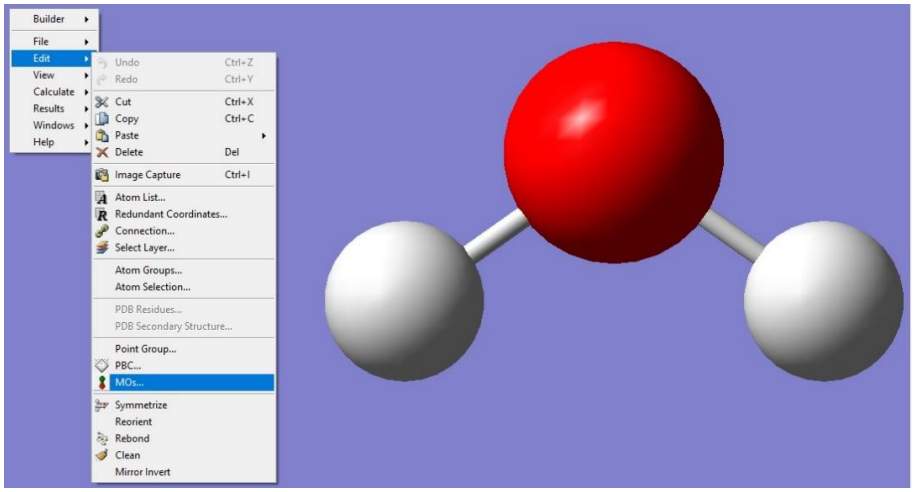
شکل۸- تعیین زاویه پیوندی در مولکول آب



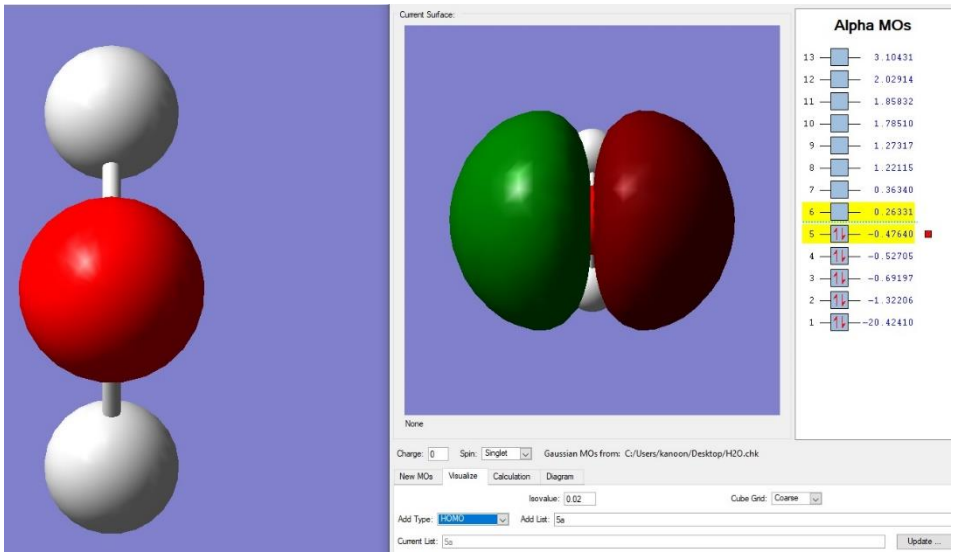
شکل۹- تعیین درجه پیوندی در مولکول آب

۵- نمایش اوربیتال‌های هومو (HOMO[1]) و لومو (LUMO[2]) در مولکول آب

برای نشان دادن بالاترین اوربیتال مولکولی پر شده و پایین ترین اوربیتال مولکولی پر نشده باید ابتدا گزینه "MOs" از زیر مجموعه "Edit" را فعال کرد. شکل ۱۰ نحوه ورود به بخش مربوط به اوربیتال مولکولی مولکول آب را نشان می‌دهد. درادامه، گزینه "Visualize" بر روی اوربیتال "HOMO" تنظیم می‌شود. در حالی‌که بقیه بخش‌ها به صورت پیش فرض باقی می‌مانند. پس از کلیک بر روی گزینه بروزرسانی یک پنجره باز می‌شود که هم به صورت تصویری اوربیتال هومو مولکول آب را نشان می‌دهد و هم نمایشی از نحوه پر شدن اوربیتال‌های مولکولی آب و به ویژه اوربیتال هومو را نشان می‌دهد (شکل ۱۱). به علاوه با تنظیم اوربیتال مولکولی بر روی "LUMO" پنجره‌ای مانند شکل ۱۲ باز می‌شود که در آن اوربیتال مولکولی لومو به صورت تصویری و هم به صورت پر شدن اوربیتال‌های مولکولی از الکترون‌ها را نشان می‌دهد (شکل۱۲).

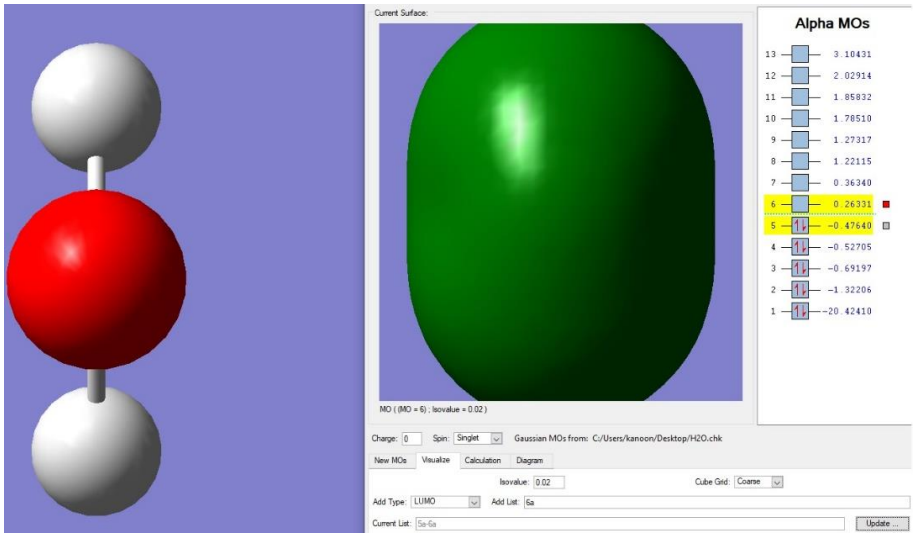


شکل۱۰- ترسیم اوربیتال‌های مولکولی(هومو و لومو) در مولکول آب



شکل۱۱- نمایش اوربیتال‌های مولکولی هومو در مولکول آب

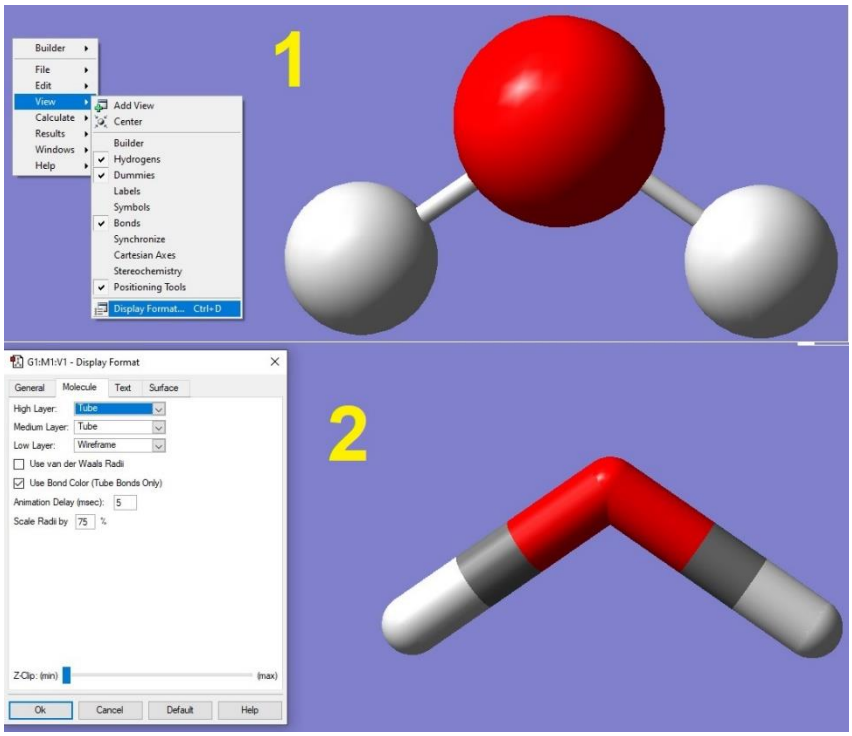
[1] Highest occupied molecular orbital (HOMO)
[2] Lowest occupied molecular orbital (LUMO)

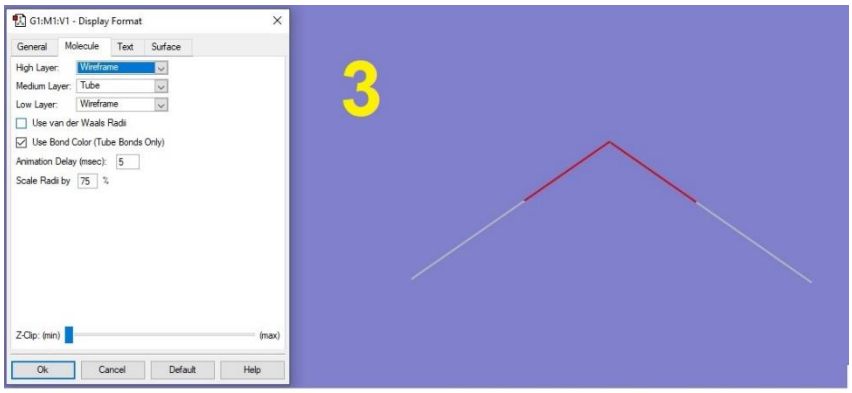


شکل۱۲- نمایش اوربیتال‌های مولکولی لومو در مولکول آب

۶- نمایش مدل‌های مولکولی مختلف مولکول آب

ساختار مولکول آب را می‌توان به صورت انواع مدل نمایشی مانند مدل گوی و میله، لوله‌ای، سیمی و... نشان داد. در کتاب‌های درسی شیمی دبیرستان مدل فضا پرکن برای مولکول‌ها به وفور مشاهده می‌شود. برای این منظور، گزینه "Disply format" باید به صورت شکل ۱۳ (شماره ۱) فعال کرد. به عنوان مثال ساختار مولکولی آب را می‌توان به صورت مدل لوله‌ای شکل ۱۳ شماره ۲ و مدل سیمی شکل ۱۳ شماره ۳ نشان داد.

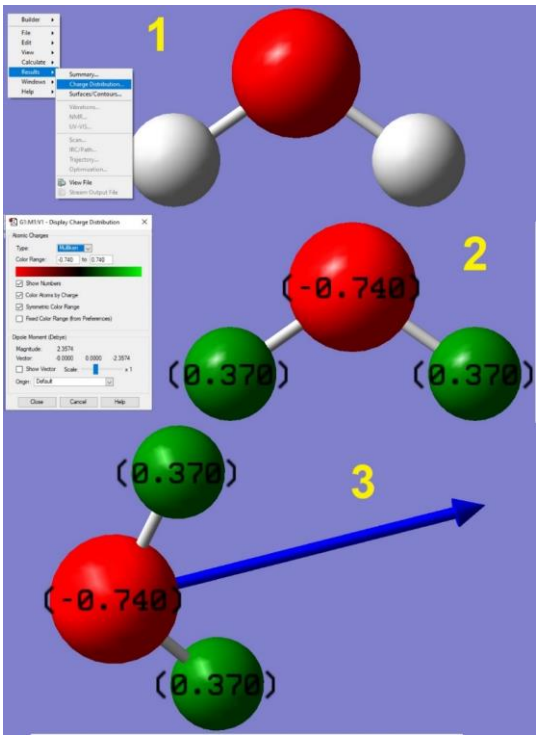




شکل۱۳- مدل‌های مولکولی مختلف مولکول آب

۷- توزیع بار الکتریکی بر روی سطح اتم‌های مولکول آب

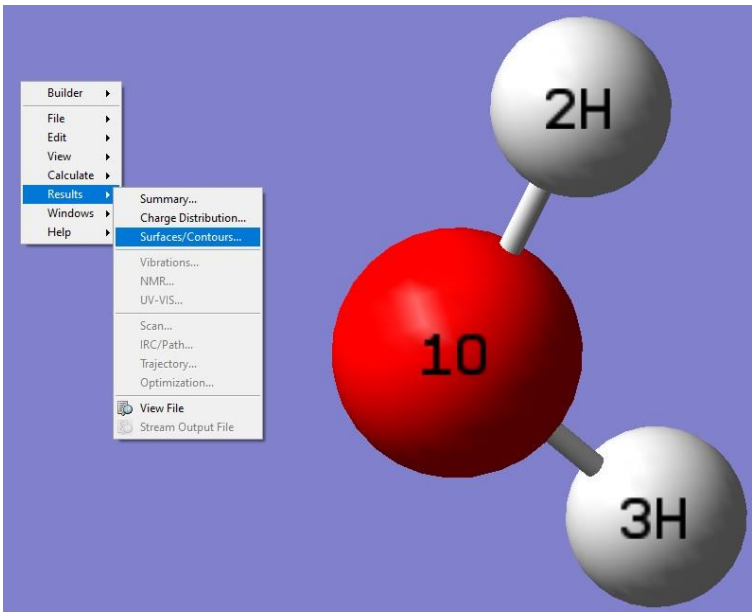
همانند نقشه‌های پتانسیل الکتروستاتیکی مولکول‌ها در شیمی پایه دوازدهم دبیرستان که تراکم بارالکتریکی را روی اتم‌های یک مولکول نشان می‌دهد، یکی دیگر از نتایج مهم محاسبه گوسین بر روی مولکول آب تعیین بار الکتریکی آن می‌باشد. بر این اساس پس از فعال شدن گزینه "Charge Distribution" (شکل۱۴ شماره ۱)، پنجره‌ای باز می‌شود که در این پنجره بار الکتریکی باید بر روی گزینه "Mulliken " تنظیم شود (شکل۱۴ شماره ۲). به‌علاوه گزینه‌های مربوط به نمایش اعداد، رنگ اتم‌ها، نمایش محور ممان دو قطبی و... نیز باید فعال شود (شکل۱۴ شماره ۳). شکل ۱۴ نمایش تصویری از مولکول آب که بر روی اتم‌هایش بار الکتریکی توزیع شده‌است را نشان می‌دهد. به علاوه محور ممان دو قطبی کل مولکول که نمایشی از قطبی بودن مولکول آب است نیز در شکل ۱۴ شماره ۳ قابل مشاهده است.



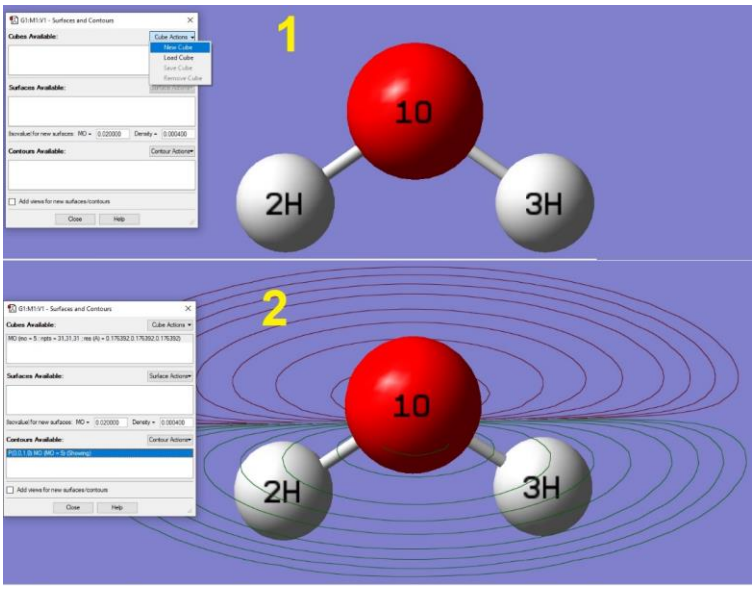
شکل ۱۴- نحوه نمایش توزیع بار بر روی مولکول آب (تصویر شماره۱)، نمایش بار الکتریکی بر روی اتم‌های مولکول آب (تصویر شماره ۲) و نمایش محور ممان دوقطبی مولکول آب (تصویر شماره۳)

۸- به‌دست آوردن نتایج مربوط به سطح مولکول و ایجاد کانتورها[1]

یکی دیگر از نتایج محاسباتی گوسین بر روی مولکول آب به‌دست آوردن اطلاعات مربوط به سطوح مولکول و همچنین تولید کانتورها (خطوط تشکیل شده از نقاط هم ارزش برای دانسیته الکترونی در صفحه) اطراف مولکول است. در واقع کانتورهای اطراف مولکول مقدار بار الکترونی در هر نقطه در فضا را تعیین می‌کنند. شکل ۱۵ تا ۱۷ مراحل ایجاد کانتورها اطراف مولکول آب و همچنین نمایش آن را نشان می‌دهند. به علاوه شکل های ۱۸ و ۱۹ تصاویری از کانتورهای اطراف مولکول آب همراه با نمایشی از اوربیتال مولکولی هومو را از نماهای مختلف نشان می‌دهند.

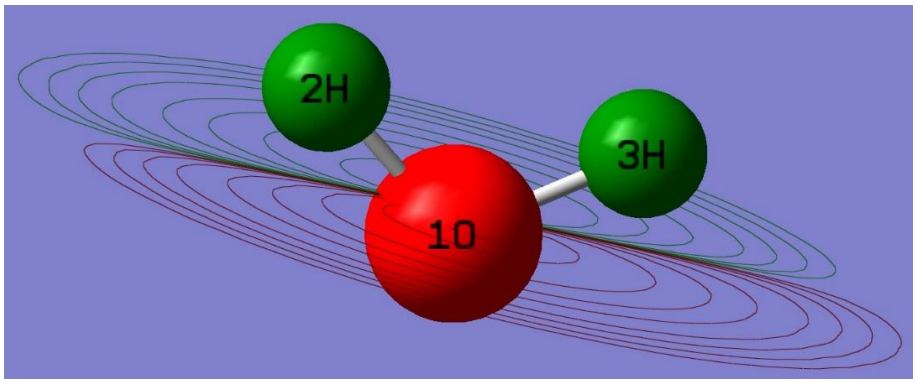


شکل ۱۵- مراحل نمایش ایجاد کانتورها اطراف مولکول آب

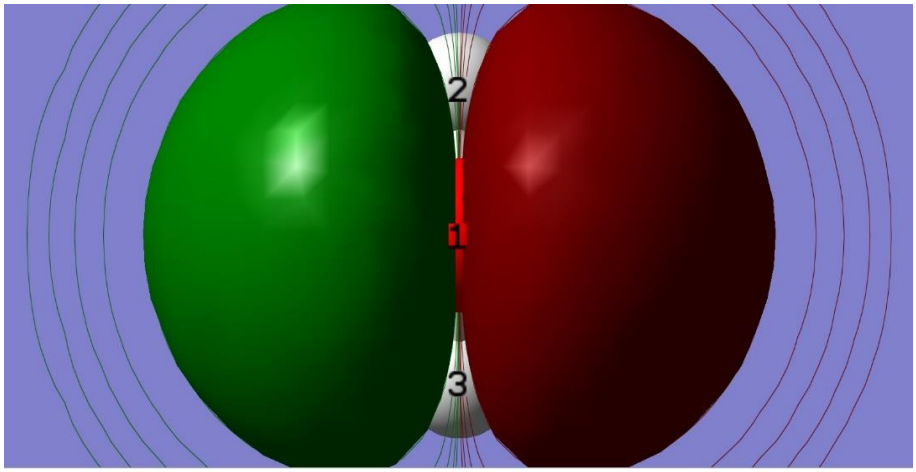


شکل ۱۶- نمایش تولید کانتور اطراف مولکول آب از طریق پنجره سطح و کانتور

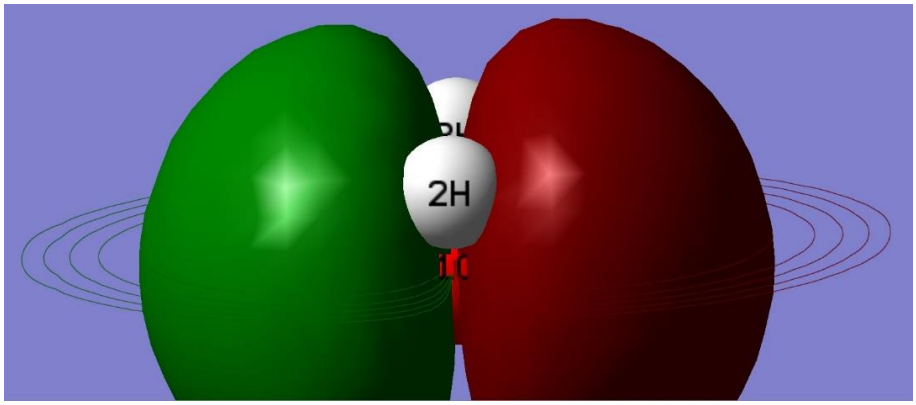
[1] Contours



شکل ۱۷- نمایش کانتور اطراف مولکول آب از یک زاویه متفاوت



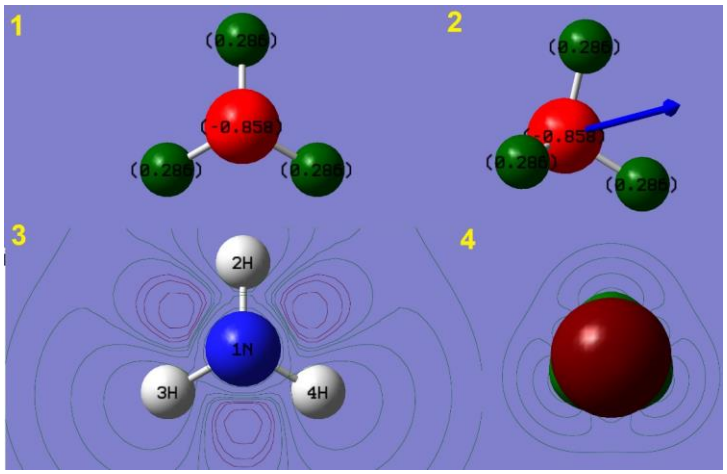
شکل ۱۸- تصویری از کانتورهای اطراف مولکول آب همراه با نمایشی از اوربیتال مولکولی هومو



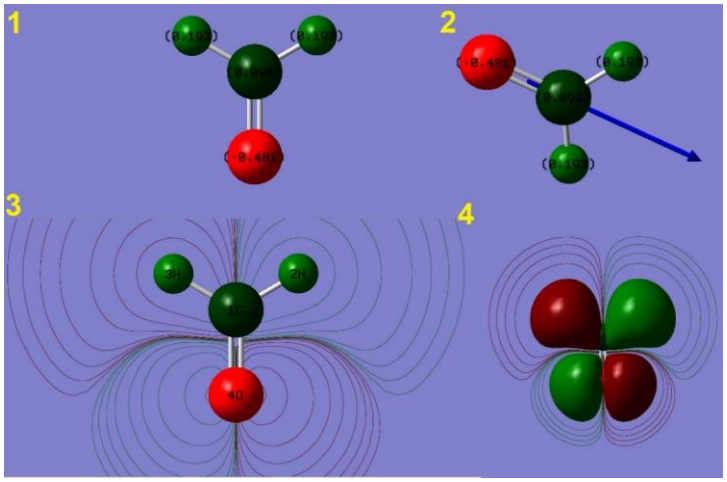
شکل ۱۹- نمایش کانتورهای اطراف مولکول آب همراه با اوربیتال مولکولی هومو از نمای جانبی

۹- ترسیم و محاسبه بعضی مولکول‌های قطبی مانند آمونیاک، متانول و فرمالدهید

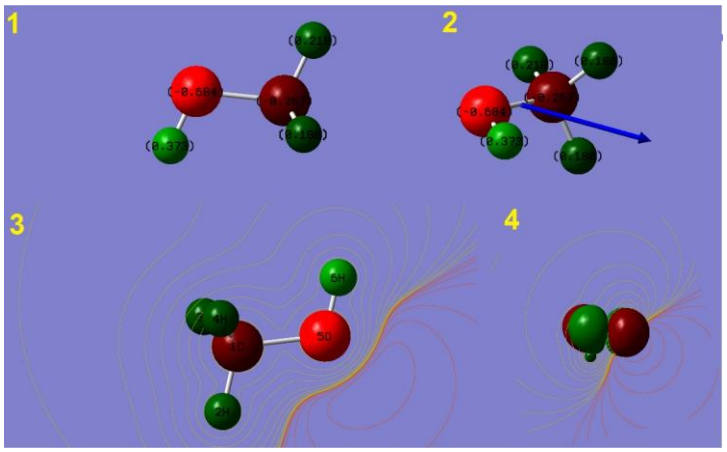
تفاوت مولکول‌های قطبی با مولکول‌های غیر قطبی وجود قطبیت در مولکول‌های قطبی است که این خصوصیت به صورت بردار ممان دو قطبی مشخص می‌شود. پس از ترسیم اولیه مولکول‌های قطبی آمونیاک، متانول و فرمالدهید محاسبات گوسین بر روی آن‌ها اجرا شد. شکل‌های ۲۰ تا ۲۲ نمایشی از ساختار محاسباتی گوسین بر روی مولکول‌های قطبی ذکر شده را نشان می‌دهد.



شکل۲۰- ساختار مولکول آمونیاک: ۱) توزیع بار الکتریکی بر روی مولکول، ۲) ممان دوقطبی، ۳) نمایش کانتورهای اطراف مولکول، ۴) نمایش اوربیتال مولکولی همو همراه با کانتورها



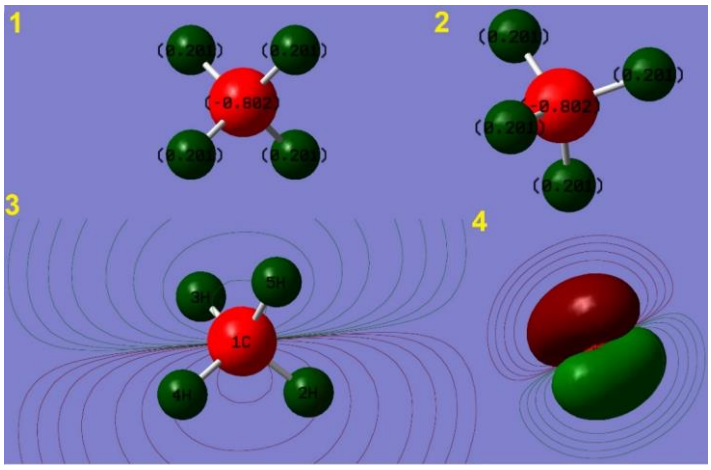
شکل ۲۱- ساختار مولکول فرمالدهید: ۱) توزیع بار الکتریکی بر روی مولکول، ۲) ممان دوقطبی، ۳) نمایش کانتورهای اطراف مولکول، ۴) نمایش اوربیتال مولکولی همو همراه با کانتورها



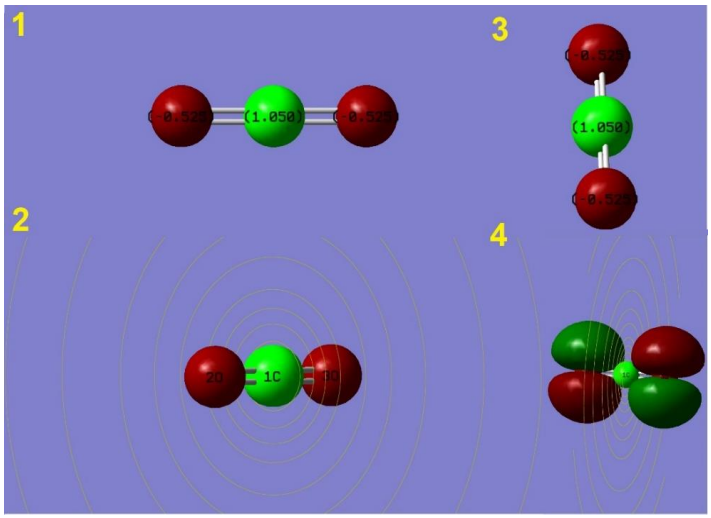
شکل۲۲- ساختار مولکول متانول: ۱) توزیع بار الکتریکی بر روی مولکول، ۲) ممان دوقطبی، ۳) نمایش کانتورهای اطراف مولکول، ۴) نمایش اوربیتال مولکولی همو همراه با کانتورها

۱۰- ترسیم و محاسبه بعضی مولکول‌های غیر قطبی مانند متان، کربن دی اکسید و اکسیژن

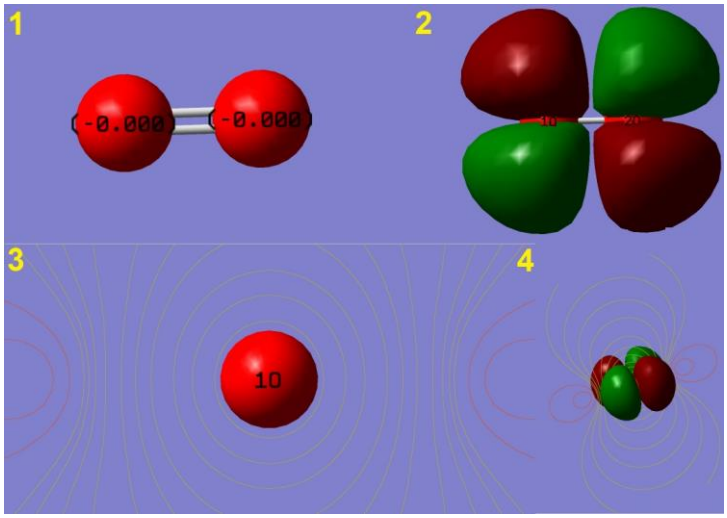
مولکول متان و مولکول اکسیژن به دلیل تقارن کلی مولکول هیچگونه قطبیتی ندارند. مولکول کربن دی اکسید هر چند که دارای پیوندهای قطبی است به دلیل جهت گیری ناهمسو پیوندهای قطبی که سبب می‌شود برآیند کلی قطبیت مولکول صفر شود و در نتیجه به یک مولکول غیر قطبی تبدیل شود. این مولکول‌ها بر خلاف مولکول‌های قطبی، محور ممان دو قطبی ندارند که این خصوصیت مهم‌ترین تفاوت آن‌ها با مولکول‌های قطبی است. پس از ترسیم اولیه مولکول‌های غیر قطبی متان، کربن دی اکسید و اکسیژن با استفاده از نرم افزار گوس ویو محاسبات گوسین بر روی آن‌ها اجرا شد. نتایج محاسبات گوسین سبب شد تا برخی خصوصیات مولکول‌های غیر قطبی ذکر شده به نمایش گذاشته شوند. برخی از این خواص شامل توزیع بار الکتریکی بر روی اتم‌های مولکول، ساختار مولکولی بدون ممان قطبی، ایجاد کانتورهای مختلف اطراف مولکول‌ها و نمایش اوربیتال مولکولی هومو می‌شود. شکل‌های ۲۳ تا ۲۵ نمایشی از ساختار محاسباتی گوسین بر روی مولکول‌های غیر قطبی نام برده شده را نشان می‌دهد.



شکل۲۳- ساختار مولکول متان: ۱) توزیع بار الکتریکی بر روی مولکول، ۲) عدم وجود ممان دوقطبی در مولکول،۳) نمایش کانتورهای اطراف مولکول، ۴) نمایش اوربیتال مولکولی هومو همراه با کانتورها



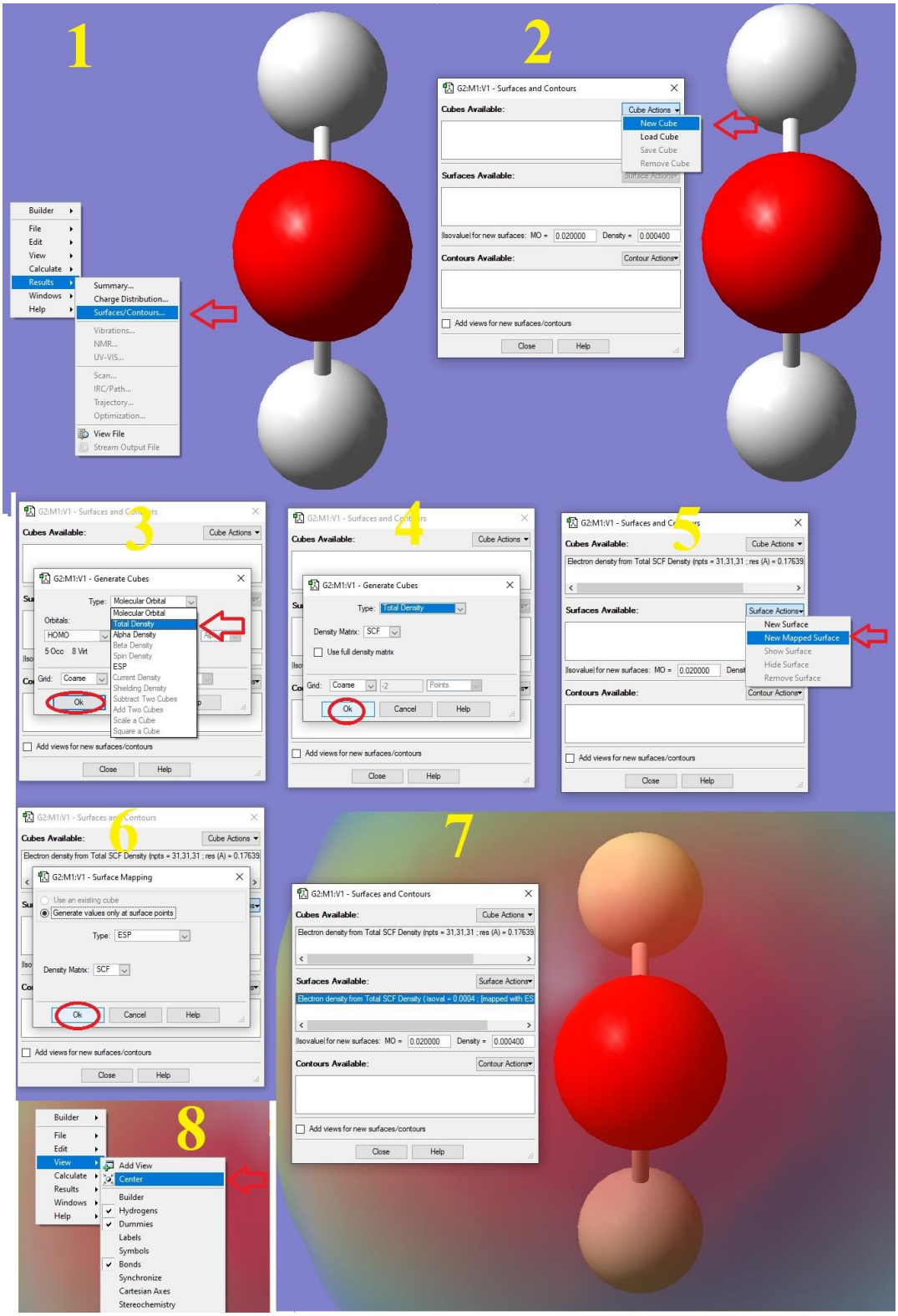
شکل۲۴- ساختار مولکول کربن دی اکسید: ۱) توزیع بار الکتریکی بر روی مولکول، ۲) عدم وجود ممان دوقطبی،۳) نمایش کانتورها، ۴) نمایش اوربیتال مولکولی هومو همراه با کانتورها



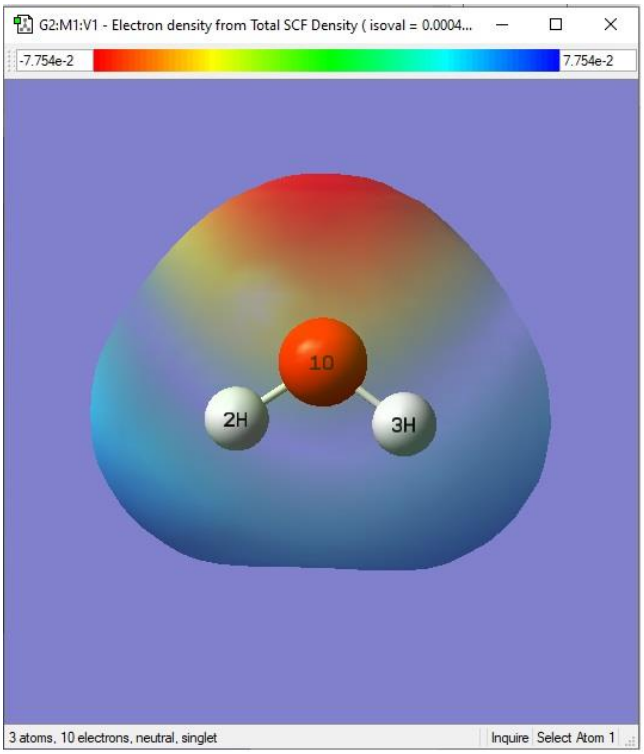
شکل۲۵- ساختار مولکول اکسیژن: ۱) توزیع بار الکتریکی بر روی مولکول، ۲) عدم وجود ممان دوقطبی، ۳) نمایش کانتورهای اطراف مولکول، ۴) نمایش اوربیتال مولکولی همو همراه با کانتورها

۱۱- ترسیم نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی مولکول آب و برخی دیگر از مولکول‌های قطبی و غیرقطبی

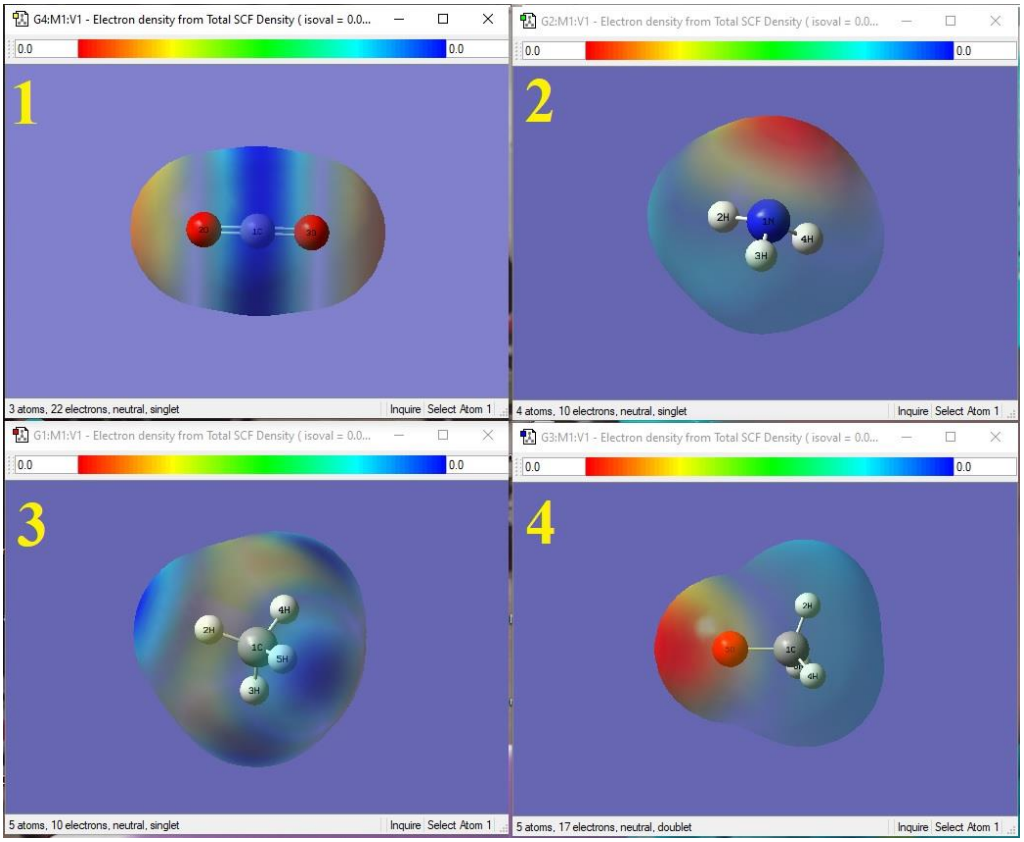
برای بررسی تراکم بارالکتریکی بر روی اتم‌های سازنده مولکول از نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی استفاده می‌شود. این نقشه نحوه توزیع الکترون‌ها در مولکول را به صورت رنگ‌های قرمز و آبی نشان می‌دهد. به طوری که اتم یا اتم‌های که تراکم بار الکتریکی بر روی آن‌ها بیشتر است به رنگ قرمز و اتم یا اتم‌های که تراکم بار الکتریکی بر روی آن‌ها کمتر است آبی رنگ هستند. به علاوه، به بخش‌های قرمز بار جزئی منفی و به بخش آبی بار جزئی مثبت نسبت می‌دهند. این نقشه در کتاب درسی شیمی پایه دوازدهم نشان داده شده‌است و برای تعیین قطبی یا ناقطبی بودن مولکول به کار می‌رود. شکل ۲۶ مراحل ترسیم نقشه پتانسیل الکترواستاتیکی مولکول آب را با اعداد و فلش‌ها نشان می‌دهد. با راست کلیک کردن بر روی پنجره مربوط به مولکول بهینه شده آب و کلیک بر روی گزینه "Surfaces and Contours" از بخش "Results" پنجره کوچک مربوط به آن باز می‌شود (شماره ۱). در این پنجره باید گزینه "New Cube" از بخش "Cube Actions" فعال شود (شماره ۲). در ادامه با کلیک بر روی آن، گزینه "Total Density" از بخش"Type" انتخاب می‌شود (شماره ۳). در پایان بر روی گزینه "Ok" کلیک می‌شود (شماره ۴). در قسمت بعدی، گزینه " New Mapped Surface" از بخش "Surface Actions" کلیک می‌شود (شماره ۵) تا پنجره مربوط به آن باز شود که در آن نوع نقشه به صورت پیش فرض بر روی "ESP (پتانسیل الکتروستاتیکی)" تنظیم شده‌است (شماره ۶). سپس با کلیک بر روی گزینه "Ok" نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی به نمایش در می‌آید (شماره ۷). از آنجایی که این نقشه با اندازه بزرگ در صفحه به نمایش در می‌آید، باید آن را در مرکز صفحه قرار داد. بنابراین در صفحه راست کلیک کرده و گزینه "Center" را از بخش "View" کلیک می‌کنیم (شماره ۸). در نهایت نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی مولکول آب به صورت شکل ۲۷ ظاهر می‌شود. برای ترسیم نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی دیگر مولکول‌های قطبی و مولکول‌های غیرقطبی نیز مشابه مولکول آب عمل می‌کنیم. به عبارت دیگر ابتدا ساختار مولکول را ترسیم می‌کنیم سپس آن‌را بهینه می‌کنیم در ادامه مراحل ذکر شده بالا را به ترتیب انجام می‌دهیم. شکل ۲۸ نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی برخی مولکول‌های قطبی مانند آمونیاک و متانول و مولکول‌های غیر قطبی مانند کربن دی اکسید و متان را نشان می‌دهد.



شکل ۲۶- مراحل ترسیم نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی مولکول آب



شکل ۲۷- نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی مولکول آب



شکل ۲۸- نقشه پتانسیل الکتروستاتیکی مولکول‌های قطبی آمونیاک و متانول (شماره ۲ و۴) و مولکول‌های غیر قطبی متان و کربن دی اکسید (شماره ۱ و۳)

بحث و نتیجه‌گیری

با توجه به اهمیت بسیار زیاد رسانه‌های تصویری در امر آموزش و گسترش روز افزون روش‌های نوین آموزشی در نظام آموزش و پرورش، در این مقاله روش ترسیمی مولکول‌ها جهت آموزش موثر درس شیمی پیشنهاد شده‌است. برای این منظور ابتدا برخی از مولکول‌های قطبی و غیر قطبی گنجانیده شده در کتاب‌های درسی شیمی دبیرستان انتخاب شدند. در مرحله بعد با استفاده از نرم‌افزار ترسیم گوس ویو ساختار اولیه آن‌ها ترسیم شد. در نهایت این ساختارهای اولیه تحت محاسبات نرم‌افزار گوسین۹، به عنوان یک نرم‌افزار محاسباتی پیشرفته در علوم مهندسی شیمی و شیمی درآمد. محاسبات به طور ویژه و با جزئیات کامل بر روی مولکول آب اجرا شد. به علاوه این محاسبات بر روی بعضی مولکول‌های قطبی شامل آمونیاک، متانول و آلدهید و همچنین بر روی برخی مولکول‌های غیرقطبی مانند متان، کربن دی اکسید و اکسیژن نیز اجرا شد. نتایج محاسبات گوسین بر روی مولکول‌های ذکر شده سبب نمایان شدن بسیاری از خصوصیات در مولکول‌ها شد. برخی از ویژگی‌ها شامل بهینه شدن سطح انرژی مولکول‌ها، تعیین بار الکتریکی اتم‌ها در سطح مولکول، تعیین ممان دو قطبی در مولکول‌های قطبی، نمایش کانتورهای اطراف مولکول‌ها، نمایش نقشه‌های پتانسیل الکتروستاتیکی و بدست آورن اوربیتال مولکولی هومو و لومو در مولکول می‌شود. همه نتایج مربوط به ترسیم و محاسبات به صورت تصویری نمایش داده شده‌است. از مولکول‌های متنوع و گوناگون در ترسیم استفاده شده‌است تا بخش مهمی از مفاهیم شیمی را تحت پوشش قرار دهد. به علاوه در این مقاله از تکنیک رسانه تصویری به صورت ترسیم مولکول‌ها و محاسبات آن‌ها توسط دو نرم افزار قدرتمند و قوی گوس ویو و گوسین استفاده شده‌است. پیش‌بینی می‌شود که تدریس شیمی به شیوه ترسیم و نمایش مولکول‌ها و خواص آن‌ها نقش موثری در یادگیری بسیاری از مفاهیم شیمی دارد و می‌تواند کلاس را برای دانش آموران جذاب‌تر کند.

مشارکت نویسندگان

هر یک از نویسندگان به میزان ۵۰ ٪ در نگارش مقاله سهم داشته اند. علیرضا یعقوبی و علی رمضانی محاسبات مربوط به مولکول ها، نوشتن مقاله و ویرایش مقاله را انجام داده‌اند.

تعارض منافع

«هیچ‌گونه تعارض منافع توسط نویسندگان بیان نشده است».

COPYRIGHTS
©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.

منابع

احدیان، محمد (۱۳۸۲). مقدمات تکنولوژی آموزشی. تهران: نشر و تبلیغ بشری.

حذرخانی، حسن (۱۴۰۱). شیمی(۳) پایه دوازدهم- دوره دوم متوسطه-۱۱۲۲۱۰، چاپ پنجم، شرکت چاپ و نشر کتاب‌های درسی ایران.

حذرخانی، حسن (۱۴۰۲). شیمی(۱) پایه دهم دوره دوم متوسطه-۱۱۰۲۱۰، چاپ هشتم، شرکت چاپ و نشر کتاب‌های درسی ایران.

خزاعی، امیرمسعود (۱۳۸۰). دیدگاهی در نرم افزارهای آموزشی. نشریه وب، ۲(۱۵).

مهدی نیا، نازیلا (۱۳۹۵). تاثیر کاربرد نرم افزارهای آموزشی بر یادگیری و یادسپاری شیمی دوره دوم دبیرستان. نهمین کنفرانس آموزش شیمی ایران، زنجان، دانشگاه زنجان.

Cherry, S. (2002). Twelve reasons to use multimedia projects in the classroom. Retrieved from http://www.ezedia.com/education/ classroom/ library/ Twelve_ Reasons.html

Deringer, V. L., Bartók, A. P., Bernstein, N., Wilkins, D. M. (2021). Gaussian process regression for materials and molecules. *Chemical reviews*, 121(16), 10073-10141 .

Frisch, M. J. (2009). Expanding the limits of computational chemistry. Wallingford CT. Retrieved from https://gaussian.com/glossary/g09/.

Julboev, T. A., Sultonov, M. M. (2021). Teaching Chemistry computer software to students of chemistry in pedagogical higher education institutions. *European Journal of Research and Reflection in Educational Sciences*, 9 (3) 33-45.

Lewis, R. B. (1994). Applications of technology in special education: A statewide study. *Learning Disabilities: A Multidisciplinary Journal*, 5(2), 69-79 .

LI, W., Xie, H., Huang, Y. (2016). Application of Gaussian 09/GaussView 5.0 in analytical chemistry teaching. *Journal of Kunming Medical University*, 134-136 .

Podolyan, Y., Leszczynski, J. (2009). MaSK: A visualization tool for teaching and research in computational chemistry. *International Journal of Quantum Chemistry*, 109(1), 8-16 .