

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ И РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ МОЛЕКУЛ

Современная химия переживает этап стремительного технологического развития, в котором методы компьютерного моделирования и инструменты искусственного интеллекта становятся неотъемлемой частью научной практики. Прогнозирование свойств молекул, оценка их реакционной способности, моделирование энергетических профилей и поиск оптимальных структур – это задачи, которые ещё несколько десятилетий назад требовали дорогостоящего оборудования и значительных вычислительных ресурсов. Сегодня же они доступны студентам и молодым исследователям благодаря развитию квантово-химических методов, открытых программных пакетов [1–3].

Актуальность применения компьютерного моделирования в химическом образовании обусловлена несколькими факторами. Во-первых, моделирование позволяет визуализировать молекулярные процессы, которые невозможно наблюдать напрямую. Во-вторых, цифровые методы дают возможность проводить виртуальные эксперименты, экономя время и ресурсы, а также обеспечивая безопасность [2].

Несмотря на очевидные преимущества, использование компьютерного моделирования в обучении студентов сопровождается рядом проблем. Недостаток методических материалов, практико-ориентированных заданий приводит к тому, что цифровые инструменты используются фрагментарно, без глубокого осмысления.

**Цель работы** – проанализировать фундаментальные принципы и технические аспекты программных средств, используемых для квантово-химических расчётов, и показать возможности применения методов компьютерного моделирования в учебном процессе для прогнозирования свойств и реакционной способности молекул.

В образовательной практике важно, чтобы студенты понимали не только технические аспекты программ, но и фундаментальные принципы, лежащие в основе расчётов.

**1. Квантово-химические методы.** Квантовая химия основана на решении уравнения Шрёдингера для многоэлектронных систем. Поскольку точное решение возможно только для самых простых молекул, используются приближённые методы – методы *ab initio* – методы этого класса не используют эмпирических параметров и основаны исключительно на фундаментальных физических принципах.

К наиболее распространённым относятся: Hartree–Fock (HF) – базовый метод, учитывающий электронную корреляцию лишь частично; MP2, MP3, MP4 – методы возмущений Мёллера–Плессета, улучшающие точность HF; CCSD, CCSD(T) – методы связанных кластеров, обеспечивающие высокую точность, но требующие значительных вычислительных ресурсов. Метод функционала плотности (DFT) является наиболее популярным подходом благодаря оптимальному соотношению точности и вычислительной эффективности. Он основан на описании системы через электронную плотность, а не волновую функцию. Наиболее распространённые функционалы: B3LYP, PBE, M06-2X. DFT позволяет моделировать реакционные пути; переходные состояния; энергетические профили; влияние заместителей на реакционную способность. Для студентов DFT является оптимальным инструментом, т.к. он достаточно точен и доступен в бесплатных пакетах (ORCA, NWChem).

**2. Молекулярная механика и динамика.** В отличие от квантовых методов, молекулярная механика описывает молекулы как набор атомов, связанных «пружинами». Она не учитывает электронную структуру, но позволяет моделировать крупные системы, применяется для оптимизации геометрии больших молекул; моделирования биомолекул;

оценки конформационной подвижности. Молекулярная динамика моделирует движение атомов во времени, позволяя изучать динамику реакций; влияние температуры; взаимодействие молекул в растворе; стабильность комплексов.

**3. Полуэмпирические методы** (PM3, AM1, RM1, PM6) используют упрощённые квантовые уравнения и эмпирические параметры. Они позволяют быстро оценивать геометрию; зарядовое распределение; реакционную способность, но имеют ограниченную точность. Для студентов полуэмпирические методы удобны как первый шаг перед более точными расчётами.

**4. Молекулярные дескрипторы и базы данных.** Для применения в химии цифровых технологий, в том числе и ИИ, необходимы числовые характеристики молекул – дескрипторы. К ним относятся топологические индексы; квантово-химические параметры (НОМО, LUMO, дипольный момент); геометрические параметры; физико-химические свойства (рKa, logP, растворимость). Работа с дескрипторами формирует у студентов навыки анализа данных и подготовки выборок для машинного обучения.

Современная химическая информатика опирается на широкий спектр программных средств, которые позволяют проводить квантово-химические расчёты, визуализировать структуры, анализировать данные и применять методы машинного обучения. Ниже представлены наиболее востребованные инструменты, которые могут быть эффективно интегрированы в образовательный процесс студентов химических специальностей.

Avogadro – это свободное программное обеспечение для построения, редактирования и визуализации молекулярных структур. **Основные возможности:** создание 3D-моделей молекул; оптимизация геометрии с использованием встроенных силовых полей; подготовка входных файлов для квантово-химических программ (ORCA, Gaussian, NWChem); визуализация орбиталей, зарядов, поверхностей электронной плотности. ORCA – мощный бесплатный квантово-химический пакет, широко используемый в академической среде. **Возможности:** расчёты методом DFT и *ab initio*; оптимизация геометрии, частотный анализ; моделирование переходных состояний; расчёт спектров (ИК, КР, УФ-вид, ЭПР); моделирование реакционных путей. Программа идеальна для студентов, которые осваивают DFT и хотят проводить реальные научные расчёты.

Gaussian – один из самых известных коммерческих квантово-химических пакетов, который дает высокую точность, имеет большую библиотеку методов. Для её использования необходима платная лицензия, что ограничивает использование.

WebMO – веб-интерфейс, который позволяет запускать квантово-химические расчёты через браузер. Имеет следующие возможности: создание молекул онлайн; запуск расчётов в ORCA, Gaussian и других пакетах; визуализация результатов; удобный интерфейс для учебных лабораторных работ; не требует установки сложного ПО, подходит для учебных курсов и удалённой работы студентов.

В качестве примера приведен мини-кейс *«Компьютерное моделирование антиоксидантной активности фенольных молекул»*.

**Объекты исследования:** небольшой ряд фенольных молекул (например: фенол; гидрохинон; пирокатехин; резорцин; галловая кислота; ВНТ (бутилгидрокситолуол)).

**Используемые методы и инструменты:** Avogadro; ORCA / Gaussian / WebMO. Рекомендуемый уровень DFT B3LYP/6-31G(d) или PM6 (в зависимости от уровня подготовки и ресурсов).

**Шаг 1. Построение и оптимизация структур.** Студенты строят 3D-модели выбранных фенольных антиоксидантов в Avogadro. Проводят предварительную оптимизацию геометрии (молекулярная механика). Экспортируют структуры для квантово-химических расчётов.

**Шаг 2. Квантово-химические расчёты.** Для каждой молекулы выполняются оптимизация геометрии, расчёт энергии НОМО и LUMO; распределения зарядов (например, Mulliken); вычисляются энергии отрыва атома водорода от фенольной ОН-группы ( $\Delta E(H\cdot)$ ) — через сравнение энергии исходной молекулы и радикала.

*Шаг 3. Анализ реакционной способности.* Студенты сравнивают результаты (более высокая энергия НОМО обычно соответствует большей склонности к донорству электрона/водорода); анализируют значение  $\Delta E(H\bullet)$  (чем меньше энергия отрыва Н-атома, тем легче молекула проявляет антиоксидантные свойства); рассматривают делокализацию спиновой плотности в радикале (стабилизация радикала за счёт ароматической системы и заместителей).

*Шаг 4. Проведение реального эксперимента.* Можно использовать реакцию разложения пероксида водорода.

*Шаг 5. Формулировка выводов.* На основе полученных данных студенты: выстраивают ряд молекул по признаку антиоксидантной активности (от менее к более активным); связывают активность с числом и положением ОН-групп; наличием электронодонорных/электроноакцепторных заместителей; возможностью делокализации неспаренного электрона.

*Ожидаемый результат:* студенты приходят к выводу, что антиоксидантная активность фенольных соединений коррелирует с энергией НОМО и энергией отрыва Н-атома, также наличие нескольких ОН-групп и конъюгированных систем способствует стабилизации радикала и повышению активности.

Методический смысл рассмотренного мини-кейса заключается в том, что он показывает студентам, что квантово-химические расчёты — это не абстракция, а инструмент для *осмысленного прогнозирования реальных химических свойств*.

Компьютерное моделирование обеспечивает глубокое понимание молекулярных процессов, позволяя визуализировать электронную структуру, оценивать энергетические профили и прогнозировать реакционные пути. Однако эффективность их применения зависит от грамотной методической организации, включающей поэтапное обучение, развитие навыков критической оценки результатов и использование проектного подхода.

Таким образом, применение компьютерного моделирования в обучении студентов является не просто технологическим дополнением, а стратегически важным направлением развития химического образования, обеспечивающим подготовку специалистов, способных работать в условиях цифровой науки XXI века.

## Литература

1. Акопов, А. С. Компьютерное моделирование : учебник / А. С. Акопов. – 2-е изд. – Москва: ИНФРА-М, 2024. — 352 с.
2. Новикова, С. А. Компьютерное моделирование физико-химического процесса : учебно-методическое пособие / С. А. Новикова, Н. Ф. Бондарь. – Минск : БГТУ, 2012. – 84 с.
3. Тарасюк, Е. В. Компьютерное моделирование в химии : учебное пособие / Е. В. Тарасюк, Ю. А. Бессонова. – Минск : БГУ, 2022. – 120 с.