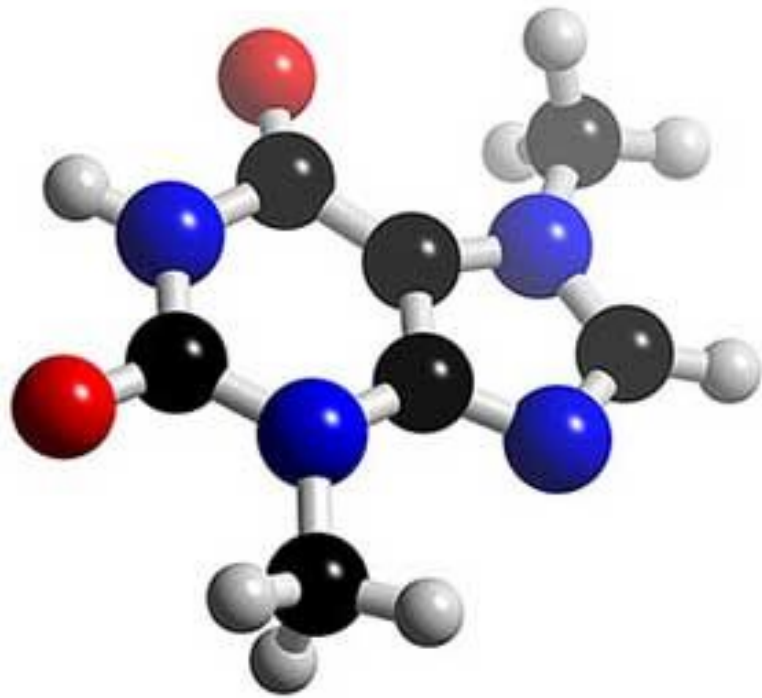


Створення 3D моделей атомів й молекул елементів



Підготувала учениця 11Б класу
Біловодської гімназії
Шевченко Уляна

Людина у будь-якій діяльності постійно користується моделями. Діти грають іграшками – зменшеними копіями реальних об'єктів.

У подальшому житті люди також використовують моделі – макет (проект) будинку, автомобіля, моделювання одягу та ландшафтного дизайну.

Моделювання – це особливий пізнавальний процес, метод теоретичного та практичного опосередкованого пізнання, коли суб'єкт замість безпосереднього об'єкта пізнання вибирає чи створює схожий із ним допоміжний об'єкт-замісник (модель), досліджує його, а здобуту інформацію переносить на реальний предмет вивчення.



Моделі та їх види

Моделі, які використовуються в науці, поділяються на дві групи. До першої групи відносяться всі матеріальні предметні моделі, які імітують структуру або функції об'єкта й безпосередньо сприймаються органами відчуття. До другої групи належать обчислювальні моделі, які існують як відображення об'єктів, що не можуть бути безпосередньо сприйняті за допомогою органів

відчуттів. Основні функції, які виконують моделі, це:

- ▶ - усвідомлення дійсності;
- ▶ - спілкування;
- ▶ - навчання і тренування;
- ▶ - інструмент для прогнозування;
- ▶ - здійснення експериментів.

Особливу роль в хімії відіграє молекулярне моделювання. Ще стародавні греки припустили, що матерія складається з атомів. Але до ХХ століття існування атомів і молекул було до кінця не підтверджено. Це пов'язано з роботами Бора та інших фізиків, які показали вже безсумнівно, що є атоми, і що є молекули. Уже до середини ХХ століття прогрес був величезний. Вже відкрили структуру біологічних молекул, структуру ДНК, структуру багатьох білків. У цей час уже були закладені ази молекулярного моделювання. Першими молекулярними моделістами були хіміки, які малювали структуру молекули на папері. Однак така проста форма запису часто не може дати поняття про будову молекули (як, наприклад, «емпірична» формула гемоглобіну - $C_{3032}H_{4816}N_{7800}O_{872}N_{780}S_8Fe_4$ - Практично нічого не говорить про його будову)

Протягом третьої чверті ХХ століття структуру молекул передавали практично виключно за допомогою так званих «фізичних моделей», тобто буквально «збирали» молекулу в збільшеному масштабі з використанням підручних матеріалів: пластмасових кульок, мідних стрижнів і тому подібного.



Хронологія розвитку моделей молекул

Автор (и)	Рік	Технологія	Опис
Кеплер	~ 1600	Упаковка сфер, симетрія сніжинок	
Лошмідт	1861	«Плоскі» малюнки	Зображення атомів і хімічних зв'язків за допомогою дотичних сфер
Вант-Гофф	1874	Папір	Тетраедричні моделі атомів, що призвели до розвитку стереохімії
Корі, Полінг, Колтун (СРК-моделі)	1951	Сферична модель атомів (пропорційно атомарним радіусів)	Теорія хімічного резонансу, розроблена Полінгом, і відкрита ним структура білкової α -спіралі в істотній мірі визначили уявлення про структуру біомакромолекул
Крик і Уотсон	1953	«Скелетна» модель: невеликі атоми, з'єднані відрізками дроту	Дволанцюгова структура ДНК була розшифрована завдяки наявності якісного «конструктора»

Перутц, Кендрю	1958	Модель електронної щільності молекули білка, склеєна з декількох шарів матеріалу	Перші отримані структури білкових молекул - міоглобіну і гемоглобіну - ще не були настільки точні, щоб визначити точне положення окремих атомів
Молекулярна графіка	1964	Комп'ютерний дисплей	Молекулярна графіка, хоча багато в чому замінила «фізичні» моделі молекул, є вдалим їх доповненням

Найбільш поширені просторові моделі

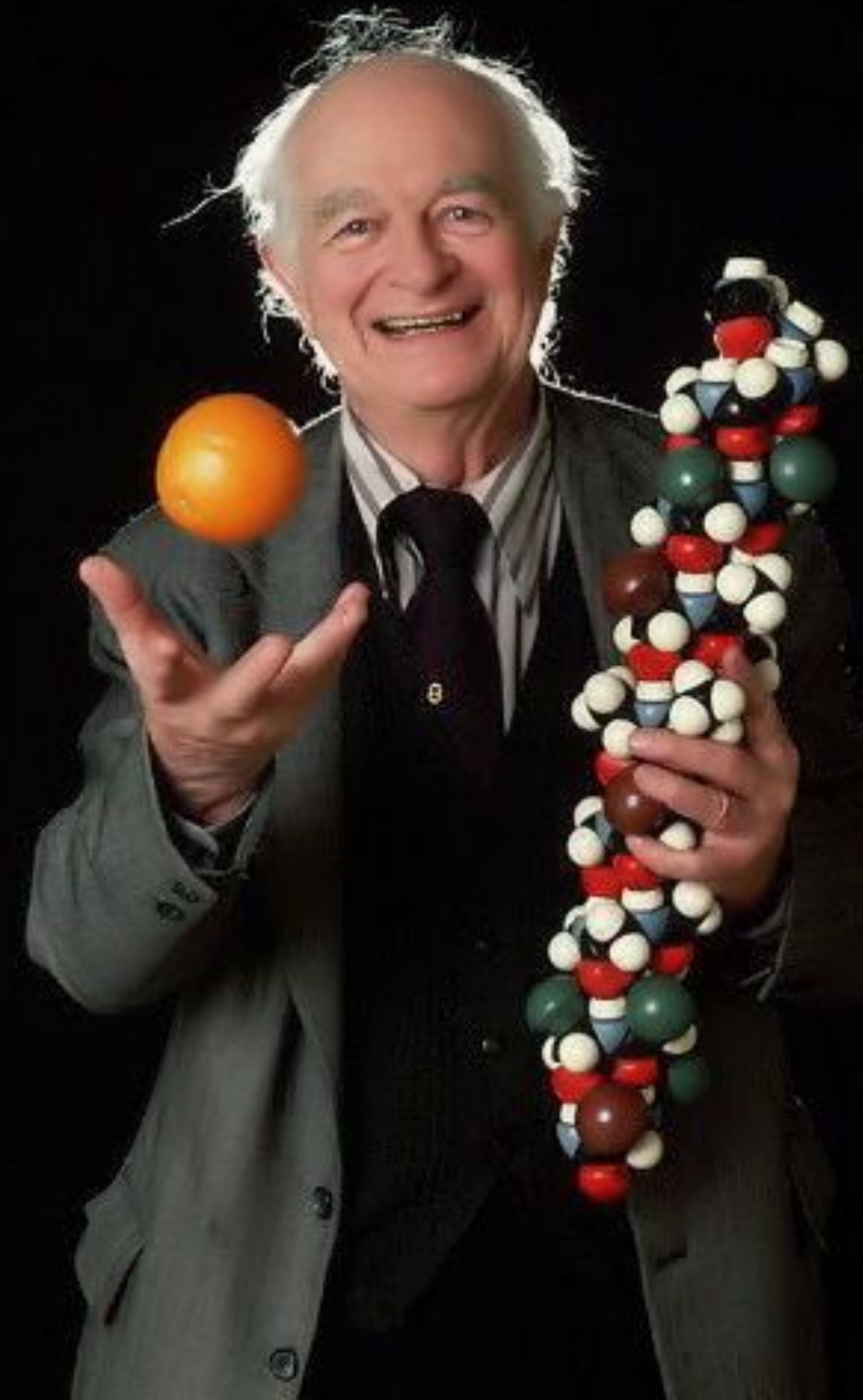
Моделі	Характеристика	Приклад
Масштабні (об'ємні, напівсферичні) моделі Стюарта (Space-filling model – «модель, що заповнює простір»), calotte model - модель-шапочки, СРК (перші літери прізвищ хіміків Роберта Корі, Лінуса Полінга і Уолтера Колтуна).	Ці моделі відображають взаємне розташування атомів, ефективні розміри атомів в масштабах пропорційних реальним, в деякій мірі валентні кути та інше, але не відображають електронну структуру модельованих з'єднань.	
		
Структурні (каркасні) моделі, моделі Дрейдінга	На відміну від СРК, не враховують об'ємність атомів. Такі моделі зручні для візуалізації складних структур типу біополімерів.	

Структурні (каркасні) моделі, моделі Дрейдінга	На відміну від СРК, не враховують об'ємність атомів. Такі моделі зручні для візуалізації складних структур типу біополімерів.	
Кулестрижневі моделі, моделі Петрес	подібні зі скелетними моделями, є їх різновидом.	
Стрічкові моделі, або стрічкові діаграми	Показують укладання полімерного ланцюга в просторі.	
Глобулярні моделі	Відображають загальну форму молекули без деталізації структури до рівня окремих атомів	
Орбітальні моделі	Відображають електронну структуру модельованих з'єднань відповідно до сучасних, заснованих на квантовій механіці уявлень	



Цікавий факт

Цікава історія відкриття альфа-спіральної структури білка. Відомий хімік Лайнус Полінг в одному з відеозаписів розповів, що захворів і лежав удома з жахливою нежиттю і читав детективи. У якийсь момент йому це набридло, він взяв листок і почав малювати поліпептидний ланцюг білків і а потім вирішив цей листок згортати. І тут йому стало очевидно, що ось вона - альфа-спіраль - саме таким чином ланцюг за допомогою водневих зв'язків утворює спіраль вторинної структури. Цей приклад доводить, що моделювання є способом наукового пізнання і допомагає робити наукові відкриття. Створення моделей білка, ДНК, фулерену було високо оцінено науковою спільнотою і їх автори Л. Полінг, Д. Ватсон, Ф. Крік, Р.Смолі та багато інших нагороджувались за свої відкриття Нобелівською премією.



Висновок

Треба пам'ятати, що будь-яка модель молекули - це абстракція, яку не слід сприймати абсолютно буквально як реальну молекулу.

Моделювання молекул можна виконувати за допомогою спеціальних наборів, але, на жаль, їх вартість досить велика (Набір атомів для складання об'ємних моделей молекул (лабораторний) - 1134 грн.)

Створюючи моделі власноруч, учні підкріплюють свої теоретичні знання практичними діями, мають можливість відчувати руками шлях пізнання, посилюючи процес пізнання емоційною, образною і сенсорною пам'яттю. Метод моделювання ефективно розвиває образне мислення учня, емоційно-моральну сферу його особистості, стимулює до саморефлексії і самопізнання, саморозкриття творчих здібностей і ціннісного ставлення до світу, сприяє розвитку особистих і соціальних навичок та формуванню навичок наукової праці.