

Использование программного пакета chembiooffice'2010 в профильном химическом классе

© Фатеев² Александр Владимирович, Полицинский¹ Евгений Валериевич
и Поleshch¹ Олег Хемович

¹ Кафедра естественно-научного образования. Юргинский технологический институт Томского политехнического университета. Ул. Ленинградская, 26. г. Юрга, 652055. Россия.

Тел.: (9138) 29-14-54. E-mail: poleshch@tspu.edu.ru

² Кафедра органической химии. Томский государственный педагогический университет.
пр. Комсомольский, 75. г. Томск, 634041. Россия. Тел.: (9528) 85-70-25.

E-mail: fateevav@tspu.edu.ru

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: пакет программ ChemOffice, химическое моделирование, конформации, энтальпии образования, эффективный заряд.

Аннотация

Даны рекомендации по использованию пакета химических приложений ChemOffice в преподавании химии в школе и для проведения научных физико-химических исследований. Показано, что данный программный пакет включает такие специализированные приложения как ChemDraw, позволяющее составлять и редактировать структурные формулы, Chem3D-программу для визуализации пространственного строения соединений, а также проведения физико-химических расчетов. На примере *n*-бутана рассмотрены различные конформации, обусловленные поворотом вокруг одинарных сигма-связей. Проведена визуализация занятых и свободных молекулярных орбиталей в молекулах этилена, ацетилена, бензола, дивинила. Указаны возможности программы для оценки эффективных зарядов на атомах и термодинамических параметров.