

## 1.6. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МОЛЕКУЛЯРНИХ СИСТЕМ В ПІДГОТОВЦІ ВЧИТЕЛІВ ХІМІЇ ТА ІНФОРМАТИКИ

*Метою дослідження* є проектування та реалізація комп'ютерно-орієнтованого навчання майбутніх учителів хімії та інформатики моделювання об'єктів (процесів, явищ та систем) квантової механіки на магістерському рівні вищої освіти. *Задачами дослідження* є обґрунтування необхідності навчання магістрів хімії – майбутніх учителів хімії та інформатики – комп'ютерного моделювання об'єктів квантової механіки за підтримки спеціалізованого програмного засобу «Активний конструктор ієрархічних систем», визначення змісту лабораторного практикуму з дисципліни (факультативного курсу) «Новітні інформаційні технології в наукових дослідженнях та освіті» та особливостей методики його навчання. *Об'єктом дослідження* є процес навчання бакалаврів та магістрів хімії – майбутніх учителів хімії та інформатики. *Предметом дослідження* є зміст та програмні засоби навчання комп'ютерного моделювання об'єктів квантової механіки. В роботі засвідчено необхідність ґрунтовного навчання майбутніх учителів хімії та інформатики теорії та практики комп'ютерного моделювання об'єктів квантової механіки, подано розгорнутий зміст комп'ютерно-орієнтованого лабораторного практикуму вибіркової дисципліни (факультативного курсу) «Новітні інформаційні технології в наукових дослідженнях та освіті» для магістрів спеціальності 014 Середня освіта (Хімія), зазначено особливості методики його упровадження. *Результати дослідження* планується узагальнити для формулювання рекомендацій щодо проектування освітніх стандартів та навчальних планів підготовки магістрів за спеціальністю 014 Середня освіта (Хімія) та спеціалізацією 014 Середня освіта (Інформатика).

**Ключові слова:** квантова механіка, комп'ютерне моделювання хімічних об'єктів, активний конструктор ієрархічних структур, нанотехнології.

Одним із головних завдань вчителя є допомога дитині

адаптуватися до дорослого життя, свідомо обрати майбутню професію. Доля високотехнологічних спеціальностей в майбутньому буде лише зростати. І тому вчителі предметів, які пов'язані з новітніми технологіями – фізики, математики, хімії, інформатики, біології – повинні постійно займатися самоосвітою, цікавитися та знайомити учнів із відкриттями та винаходами в цих галузях. Сучасна освіта вимагає широкого використання інформаційних технологій практично на кожному уроці. Одним з напрямків такого використання є комп'ютерне моделювання різноманітних процесів у математиці, фізиці, хімії, біології, економіці, історії тощо. Впровадження елементів комп'ютерного моделювання в навчальний процес дозволяє поглибити знання учнів, навчити їх самостійному пошуку та проведенню наукових досліджень із залученням до програм МАН. Використання комп'ютерного моделювання на уроках підвищує інтерес учнів не лише до вивчення конкретних тем та розділів з даного предмету, а й до вивчення інформатики. Учень починає бачити в комп'ютері не лише іграшку, засіб комунікації з однолітками чи фото- та відеоальбом великого обсягу, а й починає розуміти можливості цього потужного інструменту досліджень. Комп'ютерне моделювання дозволяє вивчати такі системи, які неможливо розглянути «вживу» чи, навіть, у мікроскоп. Наприклад: атомний остов – електрон, атом, вільна молекула, молекула адсорбована на металевих електродах. Остання система є важливим елементом сучасної наноелектроніки. Тому сучасний вчитель повинен володіти методами комп'ютерного моделювання і активно використовувати їх у своїй роботі. Зокрема при підготовці вчителя хімії та інформатики пропонується додати до навчального плану магістрів дисципліну або факультативний курс «Новітні інформаційні технології в наукових дослідженнях та освіті». В рамках цієї дисципліни передбачено виконання лабораторного практикуму, в основу якого покладено авторський курс, впроваджений професором Є.Я. Глушко та доцентом В.М. Євтеєвим [1]. Комп'ютерна підтримка курсу здійснюється програмним пакетом «Активний конструктор ієрархічних систем» (АКІС). Нами був вдосконалений пакет АКІС, перероблений і доповнений зміст практикуму.

Комп'ютерний практикум має сприяти більш глибокому засвоєнню фундаментальних понять квантової теорії та набуттю навичок створення моделей атомів та одновимірних кристалів у потенціальному підході. Курс розраховано на 20 годин лабораторних занять. В кожній лабораторній роботі за допомогою АКІС передбачається створення комп'ютерної моделі квантовомеханічної системи. Спочатку моделі окремих атомів різної конфігурації, а далі моделі одновимірних періодичних структур. Передбачається дослідження впливу зовнішнього однорідного поля та порівняння різних моделей однакових структур. За допомогою АКІС чисельно розв'язується рівняння Шредінгера, розраховуються основні характеристики електронної структури: набір хвильових функцій, енергетичних рівнів, дисперсія енергії, щільність станів, ефективна маса (Рис.1, 2).

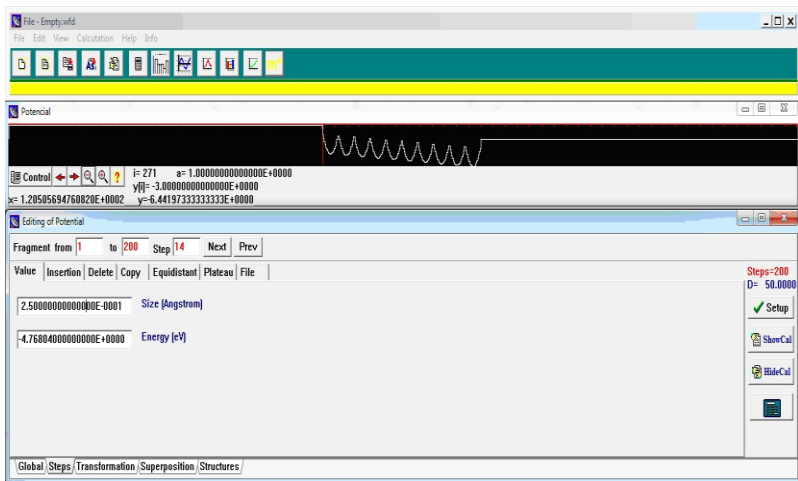


Рис. 1 Головне вікно АКІС. Побудова потенціалу

Курс розрахований на десять лабораторних робіт, методичні вказівки до виконання яких викладено в посібнику [2]. Деякі початкові параметри кожної моделі залежать від номеру варіанту, закріпленого за відповідним студентом. Це забезпечує самостійне виконання робіт і унеможливорює плагіат.



Рис. 2 Розраховані характеристики побудованого потенціалу: енергетичний спектр, хвильові функції та їх квадрати

Перелік лабораторних робіт:

1. Дослідження умов виникнення збудженого стану в симетричній потенціальній ямі.
2. Якісне дослідження хвильових функцій станів частинки у симетричній потенціальній ямі.
3. Дослідження енергетичного спектру в симетричній потенціальній ямі при змінній висоті бар'єру.
4. Дослідження енергетичного спектру глибокої потенціальної ями.
5. Дослідження енергетичного спектру несиметричної потенціальної ями.
6. Дослідження станів у обмеженій параболічній ямі.
7. Дослідження станів частинки у зовнішньому однорідному полі.
8. Дослідження станів у обмеженому потенціалі Кроніга-Пенні.
9. Дослідження станів у одновимірному кристалі параболічних потенціальних ям.
10. Потенціал Кроніга-Пенні у зовнішньому однорідному полі.

Важливим є інтерпретація побудованих моделей, їх

фізичний та хімічний зміст. Студенти переконуються, що навіть досліджуючи одновимірні моделі, досить прості з точки зору геометрії потенціалу, можна переконатися в правильності відкритих фундаментальних закономірностей, яким підпорядковуються хімічні структури. Тому у подальшій своїй роботі вчителя даний практикум і АКІС можна залучати при вивченні учнями відповідних тем на уроках хімії та фізики.

Логічним продовженням останньої лабораторної роботи є розгляд електронного переносу через низькорозмірні квантові перемички – молекулярні містки, що адсорбовані на металевих чи напівпровідникових електродах. Важливою особливістю таких наноструктур є ступінчастий характер вольт-амперних характеристик (ВАХ). Це дозволяє будувати на основі окремих адсорбованих молекул елементи електричних мереж в сучасній електронній техніці, зокрема в мікропроцесорах сучасних комп'ютерів. Відкритим залишається пояснення ступінчастого характеру ВАХ.

Для пояснення цього ефекту як правило використовують власний енергетичний спектр молекули. При цьому хімпотенціали металевих електродів знаходяться на декілька електронвольт вище за нього. Таким чином, щоб електронний перенос відбувався завдяки власним електронам, потрібне сильне збудження. В роботі [3] була запропонована квантова дискретна модель (QDM). Головним твердженням QDM є те, що в переносі беруть участь переважно рівні спорідненості молекули, які лежать поблизу хімпотенціалів більшості металів і напівпровідників. Згідно QDM зростання ВАХ відповідає проходження крізь ефективну область переносу рівня спорідненості, “плато” – міжрівневого проміжку.

Розгляд математичного апарату QDM може викликати певні труднощі у студентів, але якісні висновки та пояснення механізму поведінки ВАХ молекул чи атомарних ланцюжків є цілком зрозумілим.

Нами за допомогою QDM були розраховані спектр спорідненості, дискретні хвильові функції, ВАХ, заселеність рівнів, зарядженість, дипольні моменти, густина спонтанного інжекційного випромінювання різних молекулярних містків: атомарних ланцюжків золота, графенів різної конфігурації [4], молекул бістіолтертіофену [4] та 4,4'-біпірідину [5] (Рис.3).

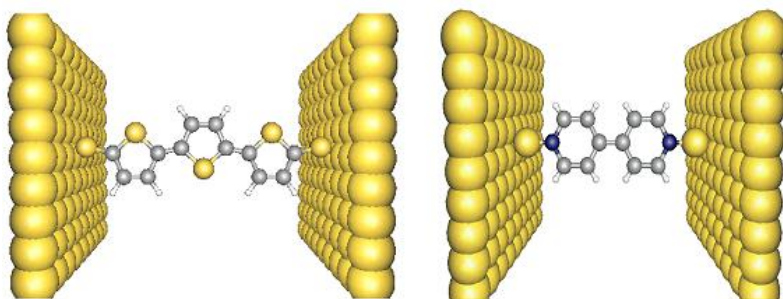


Рис. 3 Адсорбовані молекули бістіолтертіофену (Т3) та 4,4'-біпіридину

Для обчислень використовувалися відповідні параметри, попередньо узгоджені нами з експериментом [6, 7]. На рис. 4 приведено ВАХ молекули бістіолтертіофену (Т3), адсорбованої на золоті електроди.

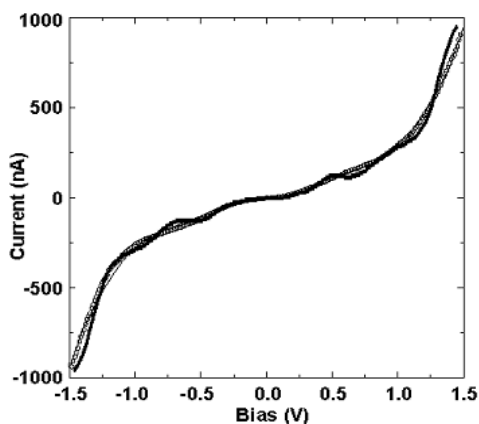


Рис. 4 ВАХ молекулярного містка Т3 між золотими електродами. Маркерна лінія – експеримент [6], суцільна лінія – розрахунок QDM [4]

Як видно з рис.4 лінії графіків практично збігаються. Це зайвий раз підтверджує правильність квантової дискретної моделі та теорії, яка пояснює механізм електронного переносу через адсорбовану молекулу. Ще одна ілюстрація гарного збігу експериментальної залежності і розрахунку показана на рис. 5.

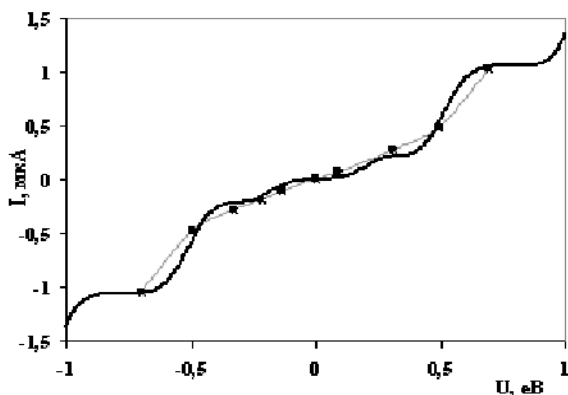


Рис. 5 ВАХ молекулярного містка 4,4'-біпірідину між золотими електродами. Маркерна лінія – експеримент [7], суцільна лінія – розрахунок QDM [5]

Деяко гірший збіг експериментальної та розрахованої ліній порівняно з вище наведеною молекулою можна пояснити тим, що експериментатори [7] використали значно менше точок для побудови графіку ніж автори [6] і просто доповнили згладженими лініями. Ми ж для побудови графіку ВАХ брали 300 точок, що явно достатньо для досягнення прийнятної точності. На цей нюанс також варто звернути увагу студентів під час розгляду цього питання.

Для розуміння причин виникнення сходинки на ВАХ треба розглядати в комплексі ВАХ та польові діаграми спектрів адсорбованих молекул (Рис. 6, 7).

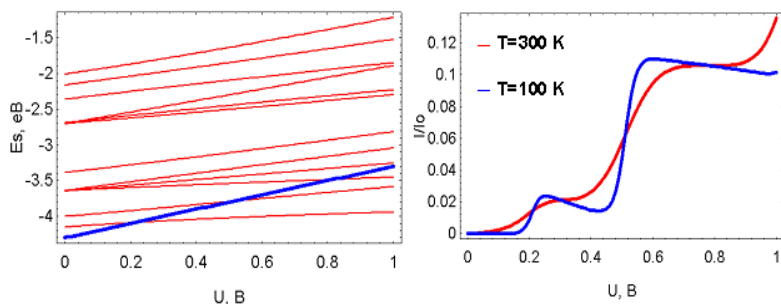


Рис. 6 Польова діаграма спектру та ВАХ 4,4'-біпірідину між золотими електродами

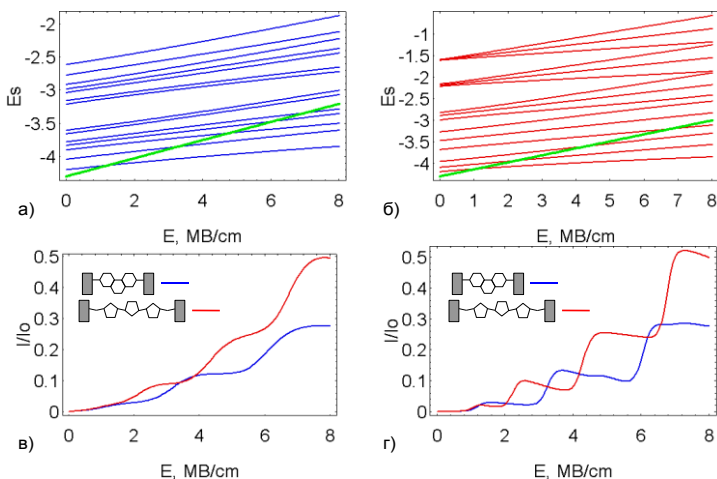


Рис. 7 Польові діаграми спектрів графену {3,1} та ТЗ адсорбованих на золоті електроди, на фрагментах а) і б) відповідно. ВАХ графену {3,1} та ТЗ при температурах 300 К і 100 К на фрагментах в) і г) відповідно

Як видно з наведених діаграм та графіків кожне зростання чи плато на ВАХ має чітку кореляцію з польовою діаграмою енергетичного спектру. Зниження температури підкреслює цю залежність, загострює сходинки ВАХ. Тобто, квантова дискретна модель дозволяє враховувати як параметр ще й температуру.

Ще однією з переваг QDM є можливість прогнозування ВАХ для тих молекул, для яких раніше не було проведено експериментів по адсорбції. Цікаво проводити порівняння з відповідними залежностями раніше розглянутих молекул. Таке прогнозування дає можливість підібрати молекулярний місток із наперед заданими характеристиками і не проводити експериментальні кошторисні пошуки. Приклад подібного прогнозування наведено на рис. 7. Для порівняння було вибрано молекулу графену {3,1} схожу по геометрії до молекули бістіолтертіофену ТЗ. З розрахунку видно, що при однаковій напрузі зовнішнього поля для графену очікуються більші струми.

Цікавим є також прогнозування адсорбції на неметалевих електродах. Наприклад, можна розглядати напівпровідникові германієві електроди. Адсорбція різних молекул на металевих



та неметалевих електродах досягається завдяки використанню в якості зв'язувального елементу атомів сірки. Як за нашими розрахунками повинна змінитися ВАХ і польова діаграма спектру для молекулярного містка можна побачити з рис. 8, 9.

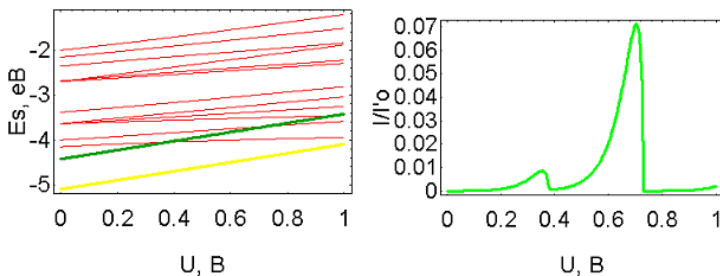


Рис. 8 Польова діаграма спектру та ВАХ 4,4'-біпіридіну між германієвими електродами.  $\Gamma_0 = I_0 * 10^{-6}$

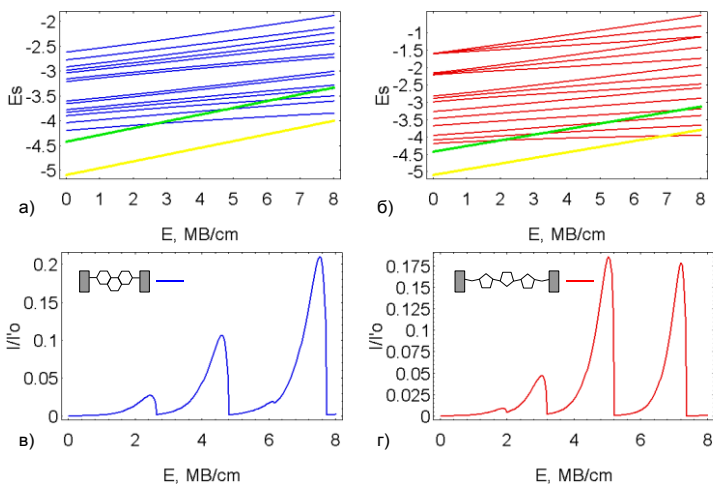


Рис. 9 Польові діаграми спектрів графена {3,1} та T3 адсорбованих на германієві електроди, на фрагментах а) і б) відповідно. ВАХ графена {3,1} та T3 при температурі 300 К на фрагментах в) і г) відповідно.  $\Gamma_0 = I_0 * 10^{-6}$

Порівняно з золотими електродами струми крізь молекулярні містки, які з'єднують германієві електроди очікується на шість порядків меншим. Це зв'язано з

особливостями будови енергетичного спектру германію, зокрема наявністю забороненої зони та відмінністю в заселеності електронних станів.

Продемонстрована квантова дискретна модель та результати, отримані на її основі, пропонуються як доповнення до основного курсу «Новітні інформаційні технології в наукових дослідженнях та освіті». Таке доповнення дозволяє не лише познайомити студентів із сучасними досягненнями в області нанотехнологій, а й дає можливість залучати їх до проведення самостійних досліджень в цій галузі. Інструментарій, який для цього пропонується, може бути використаний не лише на заняттях з цієї дисципліни, а й в майбутній роботі випускників вже в якості вчителів на факультативах чи в рамках відповідних тем під час уроків хімії, фізики.

### **Список використаних джерел**

1. Глушко Е.Я. Компьютерный лабораторный практикум «Основы квантовой механики твердого тела» / Е.Я. Глушко, В.Н. Евтеев. – Кривой Рог : КГПУ, 1999. – 25 с.
2. Комп'ютерний лабораторний практикум з основ квантової теорії. Методичний посібник / Укл. М.В. Моїсеєнко. – Кривий Ріг: КДПУ, 2005. – 30 с.
3. Глушко Е.Я. Электронный перенос и колебательные моды в конечной молекулярной цепочке // ФНТ. – 2000. – №26. – С.1144-1170.
4. Глушко Е.Я. Струм та інжекційне випромінювання у вуглецевих молекулах, що перемикають електроди / Е.Я. Глушко, В.М. Євтеєв, М.В. Моїсеєнко, М.А. Слюсаренко // УФЖ. – 2007. – Т.52, №2. – С.187-194.
5. Моїсеєнко М.В. Електронний перенос через молекулу 4,4'-біпірідину. / М.В. Моїсеєнко, Н.В. Моїсеєнко // Матеріали V Всеукраїнської конференції молодих науковців ІТОНТ-2006: Черкаси, 3-5 травня 2006, С. 20.
6. Kergueris C. Electron transport through a metal-molecule-metal junction / C. Kergueris [etc.] // Phys. Rev. – 1999. – Vol.B59, №19. – P.12505-12517.
7. Xu B.Q. Measurement of Single Molecule Conductance by Repeated Formation of Molecular Junctions / B.Q. Xu, N.J. Tao // Science. – 2003. – №301. – P.1221-1223.