Archive of SID

مقاله پژوهشی

پژوهش در آموزش شیمی، سال چهارم، شماره دوم، انتشار: بهار ۱۴۰۲

پژوهش در آموزش شیمی
مقالات منتشر شده در چهارمین همایش ملی آموزش شیمی ایران
http://chemedu.cfu.ac.ir

مطالعه تئوری آنتالپی واکنش‌ها با استفاده از نرم افزار Gaussian جایگزینی مناسب برای روش‌های آزمایشگاهی پرهزینه

ستارمحمودی اصل[۱*]،مریم ایثاری[۲]، مریم ربانی[۳]،علیرضا بارانی[۴]،محمد رضا ریاحی[۴]

[۱] کارمند دانشگاه، دکتری، رشته شیمی، دانشگاه فرهنگیان، پردیس فاطمه الزهرا(س)تبریز ، ایران

[۲] کارشناسی آموزش علوم تجربی، دانشگاه فرهنگیان، پردیس فاطمه الزهرا(س)تبریز، ایران

[۳] کارشناسی آموزش ابتدایی، دانشگاه فرهنگیان، پردیس فاطمه الزهرا(س)تبریز، ایران

[۴] کارشناسی آموزش علوم تجربی، دانشگاه فرهنگیان، پردیس علامه امینی تبریز، ایران

*mahmoudi.s.buali.sina.university@gmail.com

چکیده:

آزمایشهای پرهزینه یکی از مواردی است که اکثر پژوهشگران شیمی با مشکل مواجه کرده است با توجه به توسعه نرم افزارهای شیمی بررسی و مطالعه آزمایشها در بستر نرم افزارهای شیمی می تواند گامی مهم در پیشبرد اهداف آموزشی و علاقه دانشجویان رشته شیمی باشد در این مقاله اهمیت استفاده از نرم افزارهای شیمی جهت بررسی انجام واکنش یا مطالعه فرایند ترمودینامیکی واکنشهای شیمیایی مورد توجه قرار گرفته است این روشها می توانند جایگزینی مناسب جهت بررسی اینگونه مطالعات باشند در این مقاله با استفاده از نرم افزار گوسین به بررسی و محاسبه آنتالپی برخی از واکنشهای شیمیایی پرداخته شده است و نتایج به دست آمده از است محاسبات با نتایج آزمایشگاهی مقایسه شده است.مقایسه نتایج نشان می دهد که نتایج به دست آمده توافق خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارند و می تواند روشی مناسب برای مطالعه این حوزه باشد، درصد خطای محاسبات آزمایشگاهی با نتایج محاسباتی در حدود ۰.۰۰۳۴ می باشد

کلیدواژه‌ها انتالپی، ازمایشهای پرهزینه،روشهای نیمه تجربی،هارتری فاک

www.SID.ir

Archive of SID

مقدّمه

از انجایی که مطالعه آنتالپی واکنشها از نظر هزینه و مواد مصرفی یکی از مواردی می باشد که اکثر شیمیدانان با مشکلات عدیده ای مواجه می کند لاجرم بررسی تئوری آنها از طریق نرم افزارهای خاص می تواند یکی از روشهای جالب و کم هزینه برای بررسی آنتالپی انواع واکنشها می باشد نرم افزارهایی که برای معمولا برای اینکار استفاده می باشد بسیار متنوع می باشد یکی از مباحث پایه فیزیک جدید، مکانیک کوانتومی است. عبارت مکانیک کوانتومی اولین بار در سال ۱۹۲۴ توسط بورن مطرح‌شده است. مکانیک کوانتوم، توصیف صحیح از رفتار الکترونها می‌باشد. از دیدگاه تئوری، در مکانیک کوانتومی هر خاصیت اتم منفرد یا مولکول دقیقاً قابل پیش‌بینی است. (چیزِک و دیگران، ۱۹۹۱، ص. ۲۰۹). شیمی کوانتومی دانش کاربرد مکانیک کوانتوم در مسائل مربوط به شیمی است. درزمینه علوم پایه، علوم کامپیوتری گام‌های مؤثری برداشته و گواه این امر، طراحی و تولید صدها نرم‌افزار شبیه‌ساز است. به کمک این نرم‌افزارها، کارهای محاسباتی راحتتر انجام می‌شود. شیمی محاسباتی (مدل‌سازی مولکولی) تلاش می‌نماید تا نتایج مرتبط با مسائل شیمیایی را با استفاده از کامپیوتر به دست آورد. گوسین (Gaussian)، از قدرتمندترین نرم افزارهای محاسباتی حال حاضر است که با ورژن های مختلفی در دسترس قرار دارد. این نرم افزار با دارا بودن توابع پایه و کلیدواژه های متنوع، قابلیت انجام پیچیده ترین محاسبات کوانتومی را دارا می باشد و به محققان امکان بررسی بسیاری از خواص سیستم ها، پارامترهای ساختاری و شیمیایی و همچنین پیش بینی مسیر واکنش های مختلف را می دهد(آیلین فریش ۲۰۰۱). در مقالات مختلف معمولا انجام واکنش شیمیییایی با اثرات گرمای همراه است میزان گرمای مبادله شده در ترمودینامیک ممکن است کوچک ولی صفر نخواهد شد.یکی از کاربردهای مهم اصل اول ترمودینامیک اندازه گیری گرمای مبادله شده در یک واکنش شیمیایی است. برای یک واکنش شیمیایی آنتالپی استاندارد واکنش H به صورت تغیر آنتالپی برای فرایند تعداد استوکیومتری از مولهای خالص واکنشگرهای مجزا که هر یک در حالت استانداردشان در دمای T باشند به تعداد استوکیومتری از مولهای خالص فراورد های مجزا که هر یک در حالت استانداردشان در همان دمای T باشند تعریف می شود(ایرا لواین،۲۰۰۷)،(رضا علیزاده،۱۳۸۶)(منجمی،۱۳۸۳)

روش پژوهش

واکنشهایی که برای محایبه آنتالپی استاندارد تشکیل مورد بررسی قرار می گیرند عبارتند از.

$$H_2 + \frac{1}{2}O_2 -> H_2O$$

$$CH_3CHO + CH_3CH_3 \longrightarrow CH_3COCH_3 + CH_4$$

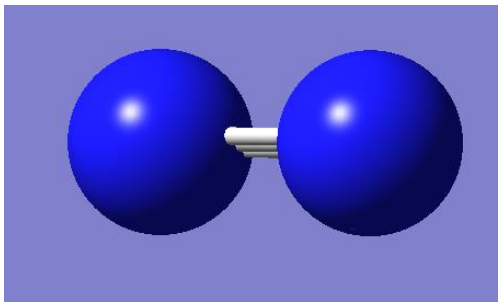
www.SID.ir

Archive of SID

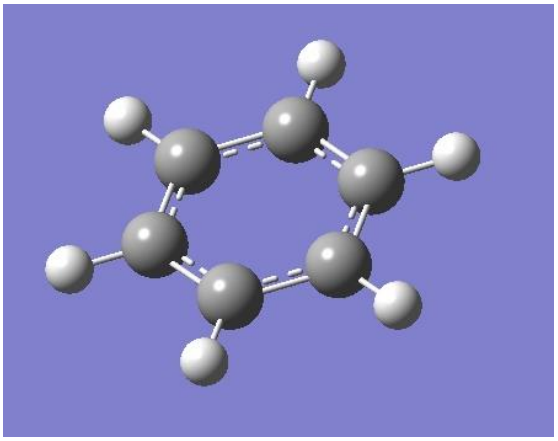
$$\frac{1}{2}N_2 + \frac{3}{2}H_2 \rightarrow NH_3$$

$$C_2H_4 + H_2O(l) \longrightarrow CH_3CH_2OH$$

$$C_6H_{6(l)} + \frac{15}{2}O_2 \longrightarrow 6CO_2 + H_2O$$



شکل۱- شکل GaussView مولکول N_2



شکل۲- شکل GaussView مولکول بنزن

در مرحله اول هریک از مولکولهای مواد اولیه و محصولات با استفاده از نرم افزار GaussView طراحی و سپس جهت فرایند اجرا محاسبات بهینه سازی و محاسبات آنتالپی مورد استفاده قرار

www.SID.ir

Archive of SID

گرفت نمونه شکل های محاسبات برای مولکول نیتروژن و بنزن به ترتیب در شکلهای ۱ و ۲ آورده شده است

نتایج حاصل از تک به تک واکنشها و مقایسه هر یک از نتایج با نتایج آزمایشگاهی به صورت کامل مورد ارزیابی قرار گرفته است برای محاسبه آنتالپی تشکیل هر یک از واکنشهای مورد نظر ابتدا واکنش دهنده ها و محصولات را به صورت جداگانه با استفاده از تراز تئوری HF/3-21G بهینه سازی شدند و سپس محاسبات فرکانس را با استفاده از تراز تئوریB3LYP/3-21G انجام داده شد در تمام محاسبات دما و فشار استاندارد را ۲۹۸ درجه کلوین و یک اتمسفر در نظر گرفته شده است. (رضا علیزاده،۱۳۸۶)(منجمی،۱۳۸۳).

مقادیرترموشیمی محاسبه شده توسط گوسین برای هر یک از واکنشهای بالا به صورت کامل برای تک به تک واکنشها ارائه شده است مفیدترین راه برای محاسبه آنتالپی واکنش،محاسبه گرمای تشکیل، و به دست آوردن جمع و تفریق آنهاست(Foresman,2003)(Braten,2006)

$$\Delta H^0(298) = \sum \Delta H_{product} - \sum \Delta H_{reactant}$$

اما گوسین مجموع الکترونی آنتالپی گرمایی را به دست آورده است که آنها راه میان بر هستند یعنی به سادگی تفاوت این مقدار برای واکنش دهنده و محصولات به دست آمده است رضا علیزاده،۱۳۸۶)(منجمی،۱۳۸۳).

$$\Delta H^0(298) = \sum (\varepsilon_0 + H_{corr})_{product} - \sum (\varepsilon_0 + H_{corr})_{reactant}$$

در آخر با استفاده از معادله ۱-۱ گرمای واکنش (آنتالپی واکنش) هر یک از واکنشهای مورد نظر را به دست می آوریم لازم به ذکر است که مقادیر ترموشیمی به دست آمده از طریق نرم افزار گوسین بر حسب واحد هارتری فاک ارائه می شود که باید آنها را به واحد کیلو کالری تبدیل کرد که رابطه میان هارتری فاک و کیلو کالری به صورت زیر می باشد رضا علیزاده،۱۳۸۶)(منجمی،۱۳۸۳).

$$1Hartree = 627.5095kcalmol^{-1}$$

یافته های پژوهش

مواد واکنش	$\varepsilon_0 + H_{corr}$	$\Delta H_{calculation}$	$\Delta H_{experimental}$
H_2	-۱,۱۵۶۷۱۸	-۵۷,۵۹۰۶۹۵	-۵۷,۸
O_2	-۱۴۹,۳۵۴۳۸۲		
H_2O	-۷۵,۹۲۵۶۸۷		

جدول ۱- محاسبات واکنش (۱)

www.SID.ir

Archive of SID

مواد واکنش	$\varepsilon_0 + H_{corr}$	$\Delta H_{calculation}$	$\Delta H_{exp\ erimental}$
CH_3CHO	-۱۵۳,۸۳۶۹۵	-۹,۹۵۳۲۵۶	-۹,۹۳
CH_3CH_3	-۷۹,۷۸۸۵۶		
CH_3COCH_3	-۱۹۳,۱۴۸۲۴		
CH_4	-۴۰,۴۹۳۱۴		

جدول ۲- محاسبات واکنش (۲)

مواد واکنش	$\varepsilon_0 + H_{corr}$	$\Delta H_{calculation}$	$\Delta H_{exp\ erimental}$
N_2	-۱۰۸,۸۳۸۲۰۸	-۱۱,۲۸۲۵۸	-۱۱,۰۴۰
H_2	-۱,۱۵۶۸۱۸		
NH_3	-۵۶,۱۷۲۳۳۳		

جدول ۳- محاسبات واکنش (۳)

مواد واکنش	$\varepsilon_0 + H_{corr}$	$\Delta H_{calculation}$	$\Delta H_{exp\ erimental}$
C_2H_4	-۷۸,۰۷۳۸۱۳	-۱۰,۹۰۱۳۰	-۱۰,۵۵
H_2O	-۷۵,۹۳۹۸۴۰		
CH_3CH_2OH	-۱۵۴,۰۳۱۰۴۴		

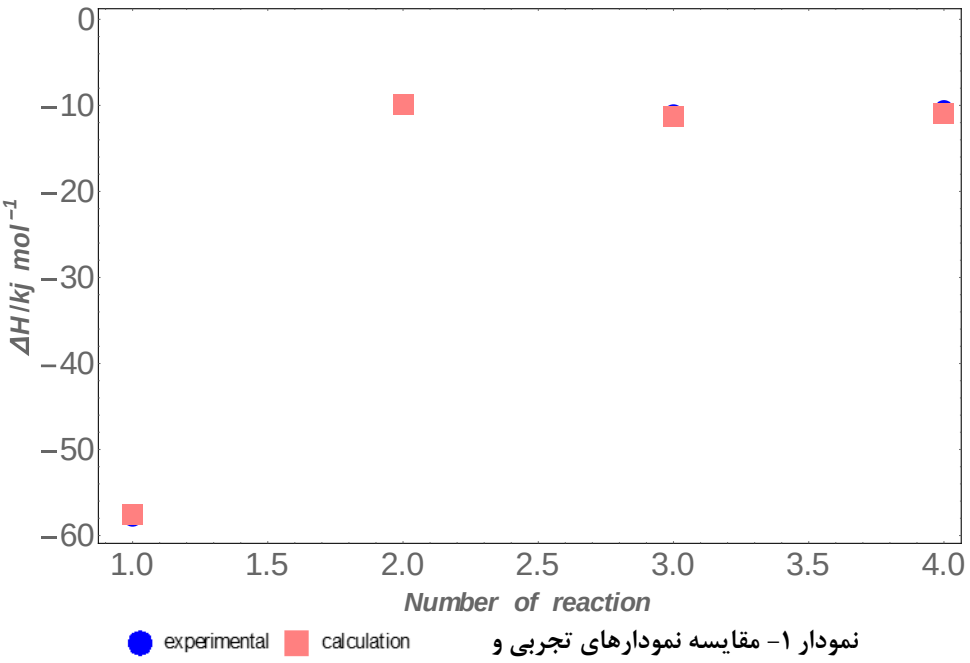
جدول ۴- محاسبات واکنش (۴)

مواد واکنش	$\varepsilon_0 + H_{corr}$	$\Delta H_{calculation}$	$\Delta H_{exp\ erimental}$
C_6H_6	-۲۳۲,۴۶۴۳۷۵	-۷۹۴,۴۹۹۰۸	-۷۸۱,۴
O_2	-۱۴۹,۳۵۴۳۸۲		
CO_2	-۱۸۷,۲۵۶۰۹۹		
H_2O	-۷۵,۹۳۹۸۴۰		

جدول ۵- محاسبات واکنش (۵)

www.SID.ir

Archive of SID



نمودار ۱- مقایسه نمودارهای تجربی و محاسباتی

بحث و نتیجه گیری

همانطور که جداول محاسبه و نمودار نشان می دهد نتایج به دست آمده از طریق نرم افزار گوسین مطابقت بسیار خوبی با نتایج آزمایشگاهی به دست آمده دارد که می توان گفت با استفاده از محاسبات مکانیک کوانتومی در مورد واکنشهای که هیچ اطلاعاتی در مورد گرمازا وگرما گیر بودن نداشته باشیم به راحتی میتوان از این محاسبات در مورد چگونگی انجام این نوع واکنشها پیشگویی لازم را به عمل آورد. از آنجایی که آنتالپی واکنش یکی از نکات خیلی مهم در مورد پیشبرد واکنش می باشد لذا پیشگویی گرمازا و گرما گیر بودن واکنش قبل از انجام هر واکنش می تواند یکی از نکات بسیار مهم در مورد واکنش باشد

منابع

ایران لواین ترجمه اسلامپور،پارسافر،مقاری،نجفی،شیمی فیزیک جلد اول،انتشارات فاطمی ۲۰۲

رضا علیزاده ساختارهای مدلسازی مولکولی (دانش مهندسی نانو)،انتشارات سیمای دانش،۲۴۱

آیلین فریش، مایکل‌جی فریش ترجمه مجید منجمی، مرجع کاربران گوسین ۹۸،انتشارات ترجمان خرد،۸۸

لواین.ا،ترجمه اسلامپور.غ،جلیلی.س،شیمی کوانتومی (جلد اول)

www.SID.ir

Archive of SID

J.B., Foresman, A.Ferich, Exploring Chemistry with Electronic Structure Method .(۲۰۰۳) ,

S.M.Braten, T.Helgaker, T.Vulpius, Mechenism, Energetics Kinetics and Dynamics of the reaction $C_2H_6 \longrightarrow C_2H_4+H_2$,organics mass spectrometry, 28, 1262-1269, 199

Cížek, J., Vinette, F., Weniger, E. J. "Symbolic computation in physics and chemistry: Applications of the inner projection technique and of a new summation method for divergent series." (1991). *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol. 40(S25), pp.209-223.

www.SID.ir

Archive of SID

Research article

Research in Chemistry Education, Vol 4, No 2, Publication: Spring 1402

Research in Chemistry Education

Articles published in the fourth national conference of chemical education in Iran

http://chemedu.cfu.ac.ir

Studying the enthalpy theory of reactions using Gussian software is a suitable alternative to expensive laboratory methods

Sattar Mahmoudi Asl [1*], Maryam Ithari [2], Maryam Rabbani [3], Alireza Barani [4], Mohammad Reza Riahi [4]

[1] *University employee, Ph.D., Chemistry, Farhangian University, Fatemeh Al-Zahra Campus, Tabriz, Iran*

[2] *Bachelor of Science Education, Farhangian University, Fatemeh Al-Zahra Campus, Tabriz, Iran*

[3] *Bachelor of Elementary Education, Farhangian University, Fatemeh Al-Zahra Campus, Tabriz, Iran*

[4] *Bachelor of Science Education, Farhangian University, Allameh Amini Campus, Tabriz, Iran*

Abstract

Expensive experiments are one of the cases that most chemistry researchers have encountered problems with, considering the development of chemistry software, examining and studying experiments in the context of chemistry software can be an important step in advancing the educational goals and interest of chemistry students. In this article, the importance of using From the chemistry software, attention has been paid to investigate the reaction or to study the thermodynamic process of chemical reactions. These methods can be a suitable alternative to investigate such studies. In this article, the importance of using chemistry software to investigate the reaction or to study the thermodynamic process of chemical reactions has been considered. These methods can be a suitable alternative to investigate such studies. Chemical reactions have been discussed and the results obtained from the calculations have been compared with the laboratory results. The comparison of the results shows that the obtained results have a good agreement with the laboratory results. The error percentage of the laboratory calculations with the ab intio results is about 0.0034..

Keywords: Enthalpy, expensive experiments, semi-empirical methods, Hartree-Fak

[*]Corresponding Author: (✉ mahmoudi.s.buali.sina.university@gmail.com)

www.SID.ir