

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ У ХІМІЧНИХ ТА ПРИКЛАДНИХ ДИСЦИПЛІНАХ

КОЛЕСНИКОВ А.В., СЕМЕНОВА С.В.

Одеська державна академія будівництва та архітектури, м. Одеса, Україна

Одним із напрямів, що отримали розвиток в освітньому процесі для майбутніх фахівців у галузі будівельного матеріалознавства, є дисципліни, що спрямовані на аналіз структури і властивості речовин та матеріалів. Такими є наступні дисципліни, що викладаються на кафедрі хімії та екології ОДАБА: «Хімія», «Органічна та фізична хімія, хімія силікатів», «Фізико-хімічні процеси в адитивних технологіях», «Дослідження та оптимізації складів матеріалів для адитивних технологій», «Фізико-хімічні методи дослідження будівельних матеріалів» тощо. Сучасний рівень викладання подібних курсів передбачає застосування комп'ютерних технологій, пов'язаних із різними аспектами моделювання. Програмні додатки, що використовуються на лекційних, лабораторних та практичних заняттях з наведених дисциплін, є у вільному доступі та пристосовані для опрацювання студентами.

При вивченні вищенаведених дисциплін існує необхідність роботи з хімічними структурними формулами різних сполук. У зв'язку з цим студентам пропонується до освоєння хімічні редактори – Biovia Draw (Isis Draw), ChemDraw, що дозволяють зобразити, наприклад, формулу полімеру та реакцію полімеризації, використовувати апарат зразків для зображення складних сполук, відображати електронні ефекти. Для аналізу просторової організації молекул полімерів студентам пропонується програмний додаток PC-Model 7.5 та HyperChem 8.0. Працюючи з цими пакетами студенти знайомляться з азами молекулярної механіки та конформаційного аналізу. Макроскопічна структура матеріалів досліджується з урахуванням аналізу мікроскопічних зображень. Студентам пропонується за допомогою системи аналізу зображень виконати автоматизоване дослідження структури відповідних матеріалів (наприклад, полімерів), виділити такі особливості, як сфероліти, глобули, фібрили, крейзи (структури руйнування), визначити статистико-геометричні властивості таких структур, побудувати графічне відображення отриманих даних.

Всі наведені методи аналізу різномасштабної структури матеріалів можна систематизувати, застосовуючи методи та програми наскрізного моделювання матеріалів – від молекулярного рівня до виробу, з використанням відповідних програм, наприклад Accelrys Material Studio. Такі програмні пакети дозволяють здійснити послідовний та систематичний підхід до проектування матеріалів, у тому числі на нанорівні, та отримати студентам важливі сучасні навички.