

*Лезенко Г. О., канд. хім. наук, доц.,
Шульга С. І., канд. хім. наук, доц.,
Мірошников О. М., канд. хім. наук, доц.,
Воловик Л. С., канд. хім. наук, доц.
(Національний університет харчових
технологій)*

ВИКОРИСТАННЯ КОМП'ЮТЕРНОГО ТРЕНАЖЕРА ДЛЯ ВИВЧЕННЯ БУДОВИ МОЛЕКУЛ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК МЕТОДАМИ ЯДЕРНОГО МАГНІТНОГО РЕЗОНАНСУ

При підготовці інженерів-технологів харчової промисловості значна увага має приділятися розробці прогресивних методів контролю технологічних процесів. В цьому плані виключно важливе значення має засвоєння хімічних дисциплін, зокрема органічної хімії та методів якісного і кількісного аналізу складу і будови органічних сполук, оскільки переважна більшість харчових сполук є органічними.

Для дослідження структури молекул органічних сполук у сучасній органічній хімії широко використовуються фізичні та фізико-хімічні методи досліджень. Серед цих досить різноманітних і чисельних методів найбільш ефективними вважають спектроскопічні методи, зокрема оптичну спектроскопію (електронні та коливальні спектри), спектроскопію ЯМР (зокрема ПМР) та ЯКР, спектри комбінаційного розсіювання, мас-спектрометрію тощо. Такі методи найчастіше використовуються на практиці.

Можливості, що відкриваються при застосуванні цих методів, особливо для вивчення будови складних органічних сполук, що складають більшість харчових сполук, добре відомі науковцям-дослідникам. У цілому ряді випадків успіхи у встановленні структури молекул вітамінів, ферментів та інших інгредієнтів харчової сировини та харчових продуктів були досягнуті виключно завдяки застосуванню спектроскопії. Удосконалення автоматичних спектрометрів здійснило переворот у методах визначення будови органічних сполук.

З одного боку, розгляд спектроскопічних методів у наш час введено у програми майже всіх вищих навчальних закладів. З іншого боку, відбувається розрив між засвоєнням теоретичних уявлень і набуттям практичних навичок у галузі застосування спектроскопічних приладів у навчальному процесі. Прикладна спектроскопія є наукою, в основному, емпіричною, тому після засвоєння студентами теоретичних основ різних видів спектроскопії, зокрема фізичних принципів, ознайомлення з принциповими схемами побудови спектроскопічних приладів та ін. необхідно закріпити одержані знання практичними навичками. Процес навчання здійснюється найбільш успішно, якщо він супроводжується застосуванням набутих знань до розгляду конкретних задач.

На жаль, придбання відповідної апаратури обмежується фінансовими можливостями вищих навчальних закладів, особливо тоді, коли мова йде про сучасні ЯМР-спектрометри та мас-спектрометри, які коштують сотні тисяч доларів.

Тому на часі постає питання про створення тренажерів, що моделюють функції зазначених приладів, а методи і прийоми роботи з ними максимально наближені до операцій, що виконуються при використанні відповідних спектрометрів. Для цієї мети перспективним є створення і поширення застосування комп'ютеризованих систем контролю знань, а також самопідготовки і самоконтролю – так званих комп'ютерних тренажерів. З одного боку, вони вимагають розробки досить складного програмного забезпечення, але з іншого – набагато підвищують ефективність навчання, оскільки викликають значну зацікавленість студентів, сприяють їх творчому підходу до засвоєння дисципліни. Організація значної кількості комп'ютерних класів (факультетського та окремих кафедральних) дозволяє забезпечити робочими місцями практично кожного студента у відповідності до розкладу занять та у позааудиторний час. Найбільш доцільним є застосування комп'ютерних тренажерів у разі розгляду і засвоєння, а особливо набуття практичних навичок для роботи з важкодоступними або недоступними з тих чи інших причин у навчальному процесі сучасними приладами та устаткуванням.

Нами було здійснено спробу застосувати для навчальних цілей при вивченні та розшифровці спектрів ЯМР (ПМР) програму FELIX, а на її основі створити комп'ютерний тренажер, який можна було би застосовувати для встановлення структури органічних сполук як на практичних заняттях, так і для самопідготовки студентів.

Програма FELIX була розроблена для дослідницьких цілей і є програмою для off-line оперування з даними спектрів ЯМР (ПМР). Вона дозволяє здійснити повний аналіз всіх видів спектральних даних, які надають спектри ЯМР. Її основною перевагою вважалася незалежність від досить дорогого часу використання ЯМР – спектрометра, тобто можливість вилучення інформації зі спектру поза спектрометром – звичайним перенесенням цього спектру на дисплей комп'ютера і подальшим оперуванням шляхом зміни спектральних параметрів. Можливість зміни параметрів базового спектру (записаного на диск з ЯМР – спектрометра) дозволяє з'ясувати деякі особливості спектру, наприклад його тонку структуру, мультиплетність, – навіть у тому випадку, коли їх не вдалося добути експериментальним шляхом.

Оскільки ця програма надає можливість off-line – оперування як а реальними, так і в уявними спектрами, то її пристосування для самопідготовки студентів в процесі засвоєння методу ЯМР дозволяє здійснити такі види вправ:

По-перше, з допомогою тренажера студента можна ознайомити з ЯМР (ПМР)-спектрами відомих речовин, а також необхідними довідковими даними (зокрема константами спин-спінової взаємодії), що передбачені програмою.

По-друге, змінюючи умови зйомки спектру (напруженість зовнішнього магнітного поля, частоту, швидкість розгортки спектру, тип розчинника, концентрацію досліджуваної речовини) введенням з клавіатури або з допомогою „мишки”, студент матиме можливість наочно спостерігати залежність спектрів ЯМР (зображення яких з'являється при цьому на дисплеї) від умов зйомки, тобто вплив зазначених чинників на такі спектральні характеристики, як інтегральна інтенсивність, форма (структура) сигналів, мультиплетність тощо.

Ідучи шляхом поступового ускладнення завдань, на наступному етапі можна розглянути найтипівіші випадки застосування ЯМР для структурного аналізу, серед яких: остаточне підтвердження вже відомої гаданої формули речовини; доведення чистоти препарату; встановлення структури, якщо є додаткові відомості про речовину – її якісний склад, бруто-формулу, давн про природу, походження та деякі хімічні

властивості; одержання часткових даних про структуру, якщо ЯМР-спектр є первинним джерелом інформації про невідому речовину.

На контрольному етапі роботи студент має розшифрувати запропоновані викладачем ЯМР-спектри невідомих речовин і встановити будову їх молекул.

На рис. 1 наведено приклад спектру ЯМР довільно обраної речовини, для якої студент користуючись довідковими даними і константами, які передбачаються програмою, може за положенням окремих сигналів у запропонованому спектрі та за їх формою, а також інтенсивністю в зазначених умовах зробити висновки про наявність у сполуці певних атомних угруповань і про їх взаємне розташування – тобто про структуру молекули цієї сполуки.

Запропонований комп'ютерний тренажер, крім застосування для самопідготовки студентів і контролю їх знань, може бути використаний у науково-дослідній роботі студентів, а також у разі необхідності в дистанційній формі навчання. В останньому випадку як тренувальний блок, так і контрольні завдання та відповіді студентів на ці завдання нескладно передавати з допомогою мережі Internet. Якщо виникає необхідність подання письмового звіту, то в цьому разі програмою передбачене роздрукування поетапно одержаних спектральних даних (відповідно заданим параметрам), а також коментарів та висновків до них.

У перспективі можливе створення подібних програм для засвоєння інших, зокрема спектральних, методів фізичних досліджень у курсі фізико-хімічних методів аналізу.

Література

1. Р. Драго. Физические методы в химии. (Пер. с англ.) – Изд-во «Мир», т. 1, т. 2, М., 1981
2. Дж. Бранд, Г. Эглинтон. Применение спектроскопии в органической химии. (Пер с англ.) – Изд-во «Мир», М., 1967

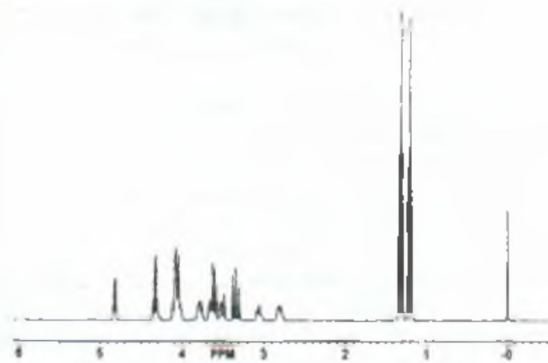


Рис. 1. Спектр ПМР невідомої речовини; стандартна сполука – ТМС (тетраметилсилан); шкала τ – у м.ч.