

STUDIUL TEORETIC AL STABILITĂȚII PRODUȘILOR OBTINUȚI LA PRIMA ETAPĂ A PROCESULUI DE BROMURARE A 2-METIL-BUTANULUI ÎN CADRUL CURSULUI DE CHIMIE ORGANICĂ

Eduard COROPCEANU¹, dr., prof. univ.

Ion ARSENE^{1,2}, dr., conf. univ.

Viorica ȘARGAROVSKI^{1,3}, dr., lect. univ., profesor gr. sup.

Zinaida PURCEL¹, studentă

¹Catedra Chimie, Universitatea de Stat din Tiraspol

²Institutul de Chimie al MECC

³IPLT „V. Vasilache”, Chișinău

Rezumat. Adaptarea metodelor de calcul a energiei sistemelor moleculare și a proceselor chimice la specificul cursurilor de chimie oferă cadrului didactic mecanisme suplimentare de modernizare și eficientizare a predării-învățării-evaluării la disciplinele de specialitate. Formarea competențelor în domeniu permite dezvoltarea personală pe parcursul întregii vieți prin adaptarea noilor tehnologii pentru soluționarea problemelor din domeniul chimiei și a științelor înrudite. Utilizarea metodelor de calcul bazate pe tehnologii informaționale moderne pentru profilul energetic al moleculelor chimice permite determinarea gradului de probabilitate al decurgerii unor reacții chimice, fapt care contribuie la dezvoltarea unor competențe durabile și cercetarea unor fenomene fine în aspect multilateral. În cadrul cursului Chimie organică este important de a determina calea cea mai eficientă din punct de vedere energetic pentru decurgerea unor procese. Cu ajutorul metodologiei propuse în baza soft-ului GAUSSIAN 09, utilizându-se setul de bază standard 6-31G se poate determina calea cea mai rentabilă energetic pentru formarea produșilor reacțiilor organice.

Introducere

Metodologia didactică contemporană este profund marcată de tehnologiile informaționale care cunosc o dezvoltare rapidă și oferă o serie de oportunități ce pot contribui la diversificarea mediului educațional. Apariția unor elemente suplimentare în metodologia didactică deschide noi posibilități pentru cadrele didactice, care manifestând creativitate și viziune personală, pot genera noi contexte educaționale în care educabilii pot atinge performanțe mai valoroase și un grad mai înalt de motivare. Utilizarea unor soft-uri pentru eficientizarea procesului de instruire are multiple efecte formative, deoarece: permite înțelegerea unor fenomene care nu pot fi explicate fără echipament specializat; permite însușirea unor tehnologii informaționale care pot fi adaptate la disciplina studiată; creează conexiuni interdisciplinare valoroase etc. Formarea profesională în baza metodologiei bazate pe tehnologii informaționale adaptate la specificul disciplinei permite dezvoltarea competenței de cercetare [1]. În rezultat, se pot forma personalități cu propriul stil de instruire, autodidacți, capabili de a rezolva diverse probleme prin metode inedite [2].

Utilizarea metodelor de calcul al energiei sistemelor moleculare este necesară pentru a determina probabilitatea existenței unor molecule în una dintre configurațiile geometrice posibile. Aceste modelări computaționale permit profesorului să argumenteze prin calcule individuale justetea afirmațiilor teoretice, atât pentru molecule anorganice, cât și organice [3]. Utilizarea acestor softuri specializate permite studiul unor reacții chimice (substituție,

condensare etc.) și a unor fenomene din domeniile conexe [4, 5]. Valorile energetice obținute permit formularea concluziilor referitor la probabilitatea existenței unei configurații spațiale pentru molecule sau posibilitatea desfășurării unor procese chimice. Această metodă este o cale eficientă pentru dezvoltarea competențelor specifice chimiei în context interdisciplinar.

Metode și materiale aplicate

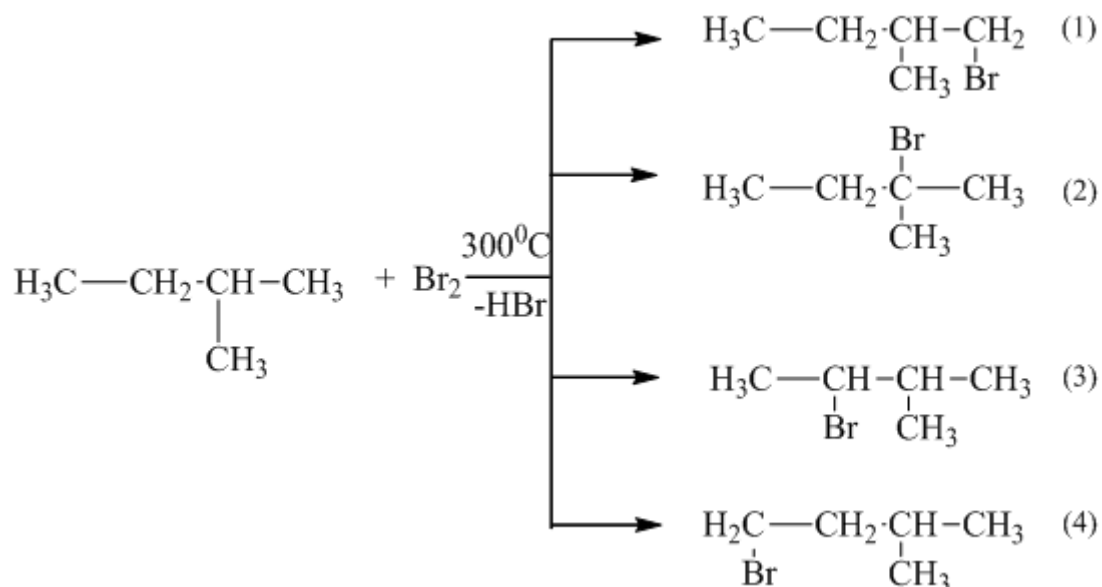
Pentru realizarea calculelor geometriilor optimizate pentru reactanți, intermediari și a produșilor de reacție au fost folosite instrumentele oferite de soft-ul GAUSSIAN 09 [6], utilizându-se setul de bază standard 6-31G [7] pentru atomii de carbon și hidrogen. Rezultatele obținute la modelarea mecanismelor studiate (toate reacțiile de substituție posibile) s-au realizat aplicând calcule cuanto-chimice *ab initio*.

Rezultate obținute și discuții

În chimia organică multe procese ar putea să se desfășoare după diferite scenarii în dependență de energetica reacțiilor, factorii externi care pot influența direcția decurgerii etc. Pentru profesorul de chimie este important de a avea, pe lângă materialul teoretic, argumente practice în baza calculelor referitor la rentabilitatea energetică pentru desfășurarea reacției chimice. În calitate de exemplu vom examina reacțiile posibile de bromurare a unui compus organic care conține diferite tipuri de atomi de carbon – 2-metil-butanul pentru a determina pe baza calculelor care dintre speciile examinate are o probabilitate mare de formare.

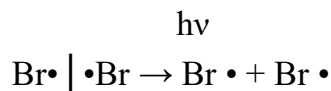
Deoarece radicalii liberi sunt particule cu reactivitate destul de înaltă și o durată de viață foarte scurtă, în tendința lor de stabilizare se combină câte doi sau participă în reacții cu alte substanțe prezente în sistem. Astfel, radicalii sunt inițiatori ai reacțiilor cu mecanism radicalic.

Procesul de substituție radicalică pentru compusul 2-metil-butan teoretic poate rezulta cu diverși produși de reacție:

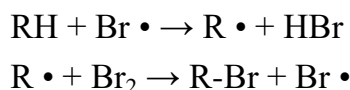


Reacția de bromurare a 2-metil-butanului este una înlănțuită și decurge în câteva etape: inițierea, propagarea și întreruperea reacției. Sub influența luminii sau temperaturii are loc obținerea radicalului de brom, care reacționează cu molecula de 2-metil-butan formând bromură de hidrogen și radicali liberi ai hidrocarburii:

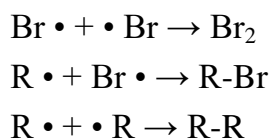
1. inițierea reacției:



2. propagarea reacției:



3. întreruperea reacției:



În acest caz bromurarea ar putea avea loc la 4 atomi de carbon diferiți cu obținerea a 4 radicali. Radicalii liberi pot reacționa cu radicalul de brom, formând bromurile: 1-bromo-3-metil-butan, 2-bromo-3-metil-butan, 2-bromo-2-metil-butan, 1-bromo-2-metil-butan.

Studiul teoretic al speciilor participante la reacția de bromurare

Pentru determinarea structurii geometrice a reactanților (R) și produșilor de reacție (P) au fost utilizate studiile *ab initio* în baza metodei SCF în aproximația UHF, folosind pentru funcțiile atomice baza 6-31n (UHF/6-31G) [7]. Toate calculele au fost efectuate folosind GAUSSIAN [6] – pachet de programe moderne utilizat pentru investigarea proprietăților structurale, a celor determinate de structura electronică a moleculelor sau a sistemelor moleculare complexe.

Utilizând unele metode de calcul teoretic pot fi corelați și prognozați o serie de parametri geometrici și energetici ce țin de structură moleculară, cât și profilul energetic al unor procese chimice etc. În baza acestui model au fost efectuate calcule pentru toate speciile care participă în această reacție de substituție radicalică.

Pentru început s-au calculat valorile energiilor totale a structurilor reactanților și produșilor de reacție (Tabelul 1).

Tabelul 1.

Valorile energiilor totale ale speciilor participante la reacție.

Nr	Denumirea speciei	Structura geometrică	E _{tot}
1	2-metil-butan	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array}$	-196,2522
2	1-bromo-2-metil-butan	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_2 \quad (1) \\ \quad \\ \text{CH}_3 \quad \text{Br} \end{array}$	-2765,4361

3	2- bromo-2-metil-butan	$\begin{array}{c} \text{Br} \\ \\ \text{H}_3\text{C}-\text{CH}_2-\text{C}-\text{CH}_3 \\ \\ \text{CH}_3 \end{array} \quad (2)$	-2765,4461
4	2- bromo-3-metil-butan	$\begin{array}{c} \text{H}_3\text{C}-\text{CH}-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{Br} \quad \text{CH}_3 \end{array} \quad (3)$	-2765,4414
5	1- bromo-3-metil-butan	$\begin{array}{c} \text{H}_2\text{C}-\text{CH}_2-\text{CH}-\text{CH}_3 \\ \quad \\ \text{Br} \quad \text{CH}_3 \end{array} \quad (4)$	-2765,4357

Pentru fiecare particulă din reacția menționată s-a optimizat structura geometrică și s-au calculat energiile totale. În baza energiilor obținute s-a construit graficul stabilității produșilor finali de substituție radicalică a 2-metil-butanului cu bromul, conform Figurii 1.

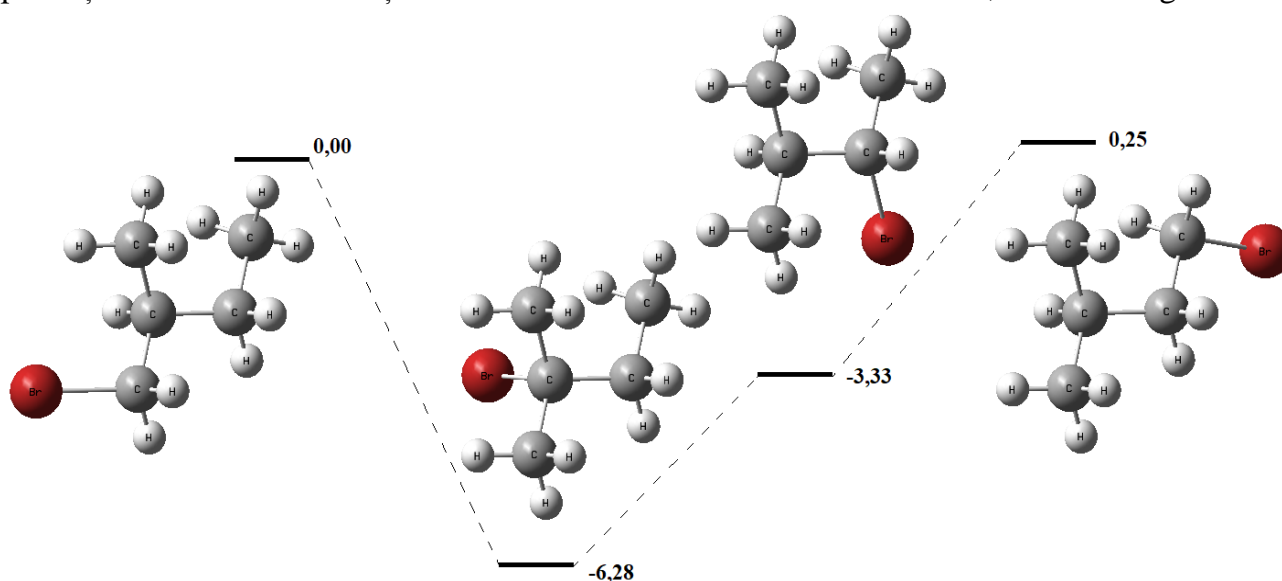


Figura 1. Schema energetică a stabilității produșilor în urma reacției de bromurare

În baza energiilor obținute și a figurii 1 putem concluziona, că cea mai stabilă specie obținută, în urma bromurării 2-metil-butanului este 2-bromo-2-metil-butanul cu o energie de stabilizare de -6,28 kcal/mol, ceea ce și confirmă datele din literatură.

La disciplina Chimie pot fi propuse mai multe modele care ar permite realizarea unor studii complexe a caracteristicilor moleculare și a unor mecanisme chimice. Se propune analiza unui model de aplicare integrată instruire-cercetare, în care se studiază mecanisme a moleculelor organice cu ajutorul calculului cuantico-chimic bazate pe soft-uri specializate, care permit determinarea energiei mecanismelor studiate și a probabilității decurgerii reacțiilor chimice.

Concluzii

Realitățile socio-economice, noile solicitări ale pieții muncii pun în fața sistemului educațional sarcina de a moderniza metodologia didactică și a o racorda la tendințele actuale ale evoluției tehnologiilor. În prezent elevii sunt motivați mai ales de activitățile care includ tehnologii informaționale. Așa cum tehnologiile informaționale pătrund în toate domeniile

de activitate umană, calificările profesionale sunt legate de competența digitală. Pentru a asigura dezvoltarea continuă a acestei competențe este necesar de a elabora o strategie bazată pe particularitățile etative ale elevilor, conținuturile curriculare și posibilitățile de implementare a tehnologiilor informaționale. Aplicarea tehnologiilor informaționale adaptate la specificul disciplinei Chimia permite explicarea desfășurării unor fenomene reieșind din rentabilitatea energetică calculată în baza aplicațiilor utilizate în prezent mai mult în chimia cuantică.

Cu ajutorul instrumentelor oferite de soft-ul GAUSSIAN 09 pot fi calculate energiile sistemelor moleculare organice, precum și a proceselor de substituție a atomilor de hidrogen prin atomi de halogen. În baza calculelor realizate, s-a stabilit, că la bromurarea 2-metilbutanului cel mai convenabil din punct de vedere energetic este formarea 2-bromo-2-metilbutanului.

Metoda descrisă se recomandă pentru utilizare la cursurile universitare de chimie, iar la nivelul învățământului general – pentru elevii care manifestă interes în domeniu.

Bibliografie

1. Coropceanu E., Chicuș D. Cercetarea – factor de integrare a științei și motivare pentru instruire. *Univers pedagogic*. 2015. N3 (47). p. 27-33.
2. Coropceanu E., Rija A., Arsene I., Putină M. Dezvoltarea abilităților de autoformare la chimie în baza unor tehnologii informaționale. *Studia universitatis moldaviae. Seria Științe ale educației*. 2014. Nr. 9(79). p. 92-98.
3. Codreanu S., Arsene I., Coropceanu E. Utilizarea unor modalități moderne de calcule cuanto-chimice a stării energiei sistemelor moleculare în cursul de chimie. *Acta et commentationes. Științe ale Educației*. 2017. Nr. 1. p. 147-156.
4. Codreanu S., Arsene I., Coropceanu E. Theoretical study of some phenomena and processes in the course of organic chemistry. *Annales Universitatis Paedagogicae Cracoviensis. Studia ad Didacticam Biologiae Pertinentia*. 2018. Nr. 8. p. 151-159.
5. Coropceanu E., Arsene I., Șargarovschi V., Purcel Z. Studiul instabilității unor izomeri ai alcoolilor nesaturați și a reacțiilor intermediare în procesul transformării tautomerice în cadrul cursului de chimie organică. *Acta et commentationes, Științe ale Educației*, 2019. Nr. 2(16). p. 32-42.
6. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. *Gaussian 09, Revision B.01*. Gaussian. Inc.: Wallingford. CT. 2009.
7. Hehre W.J., Radom L., Schleyer P.V.R., Pople J.A. *Ab Initio Molecular Orbital Theory*. Wiley: New York, 1986. 548 p.