第 23 卷 第 4 期 环 境 化 学 Vol. 23, No. 4
2004 年 7 月 ENVIRONMENTAL CHEMISTRY July 2004

饮用水中有机污染物分子的 VRML 模型 *

李 欣[1] 齐晶瑶[2] 袁一星[2]
(1 哈尔滨工业大学应用化学系, 哈尔滨, 150090; 2 北京工业大学环境与能源学院, 北京, 100022)

摘 要 用半经验量子化学计算 MNDO-PM3 方法, 计算了腐殖酸 (HA) 和 3-氯-4-(二氯甲基)-5-羟基-2(5H)-呋喃酮 (MX) 的几何构型、电子结构等. 用 MolSurf 软件建立了 HA 和 MX 的 VRML (虚拟现实造型语言) 模型.

关键词 饮用水, 有机污染物, 分子, 虚拟现实造型语言.

虚拟现实技术 (Virtual Reality, VR) 的兴起和发展为化学及环境科学工作者提供了一种崭新的强有力的工具来模拟和分析化学物质世界的各种真实现象. VRML (Virtual Reality Modeling Language) 是最主要的虚拟现实造型语言, 它最突出的特征是能够在 Internet 上创建动态的世界和感觉丰富的虚拟环境[1,2].

本文以腐殖酸 (HA) 和 3-氯-4-(二氯甲基-5-羟基-2(5H)-呋喃酮 (MX) 等分子为例, 构建水中有机污染物分子的 VRML 模型, 并进行分子结构的观察和分析.

1 计算方法和模拟软件

分子结构几何优化采用半经验量子化学计算 (MNDO-PM3), 计算使用两组 8 节点 PIII 并行计算系统, Linux 工作站. 分子的 VRML 模型建立使用 MolSurf 软件[3]. VRML 插件 (plug-in) 使用 Silicon Graphics 公司的 Cosmo Player.

2 MX 的 VRML 模型

MX 是水 (尤其是富含腐殖酸的水) 在氯化消毒过程中形成的副产物. MX 的物质结构与其性质是密切相关的, 如果对 MX 的物质结构和反应性能进行深入了解, 就能采取相应措施减少或避免其对环境所造成的危害.

图 1 是在 Cosmo player 插件支持下的一个三维虚拟的 MX 分子全景图, 并且能够以各种视角, 在各种位置和按各种缩放比例对分子全貌及其细节进行动态观察和研究.

图 2 显示了 MX 分子的 HOMO ($n = 31$) 和 LUMO ($n = 32$), 它们的电子能级分别为: - 10.908 和 - 1.394eV. MX 分子的 HOMO 与 LUMO 轨道中只有 π 轨道, 而其它 45 个轨道表示各种 σ 轨道之间的作用, 因此, HOMO 与 LUMO 轨道控制了 MX 分子的反应活性.

图 3 给出了 MX 分子的表面及电荷密度分布图, 分子表面体现了分子间相互作用的可能形状互补的部位.

2003 年 6 月 19 日收稿.
* 黑龙江省自然科学基金资助项目 (项目编号: E0204).

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

图 1　MX 分子的 VRML 模型

Fig. 1　VRML molecular model of MX

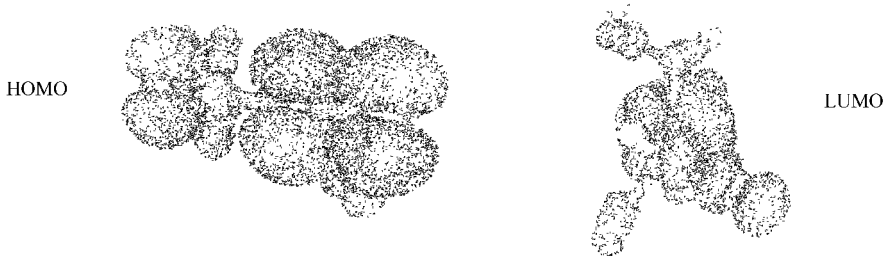

图 2　MX 分子的前线分子轨道

Fig. 2　HOMO and LUMO contours of electronic charge density showing different behaviors

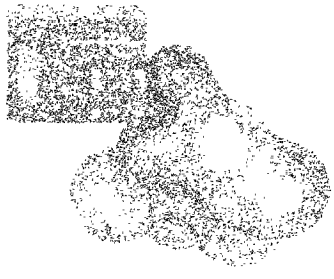

图 3　MX 分子的表面及电荷密度分布图

Fig. 3　Surface and electronic charge density distribution of MX

3　腐殖酸的 VRML 模型

腐殖酸 (HA) 含有羧基、酚羧基、羰基、醌基、甲氧基等多种官能团, 由于其结构的复杂性, 使其具有极为特殊的物理化学性质.

HA 分子模型采用 Stellink 提出的基本构造模块[4], VRML 模型如图 4 所示. 该模型分子式为 $C_{39}H_{43}NO_{15}$, 元素的组成为 C: 61.17 %, H: 5.66 %, N: 1.83 %, O: 31.34 %. HOMO (n = 147) 和 LUMO (n = 148) 的电子能级分别为 - 10.515eV 和 - 5.230eV.

4　结论

运用半经验的量子化学计算方法 MNDO-PM3 对 HA 和 MX 分子进行了分子结构几何

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

优化. 使用 MolSurf 软件构建了水中有机污染物的 VRML 模型. 以各种视角, 在各种位置和按各种缩放比例对分子全貌及其细节进行的动态观察和研究, 将有助于从理论上寻找控制与去除水中有机污染物的技术手段和方法.

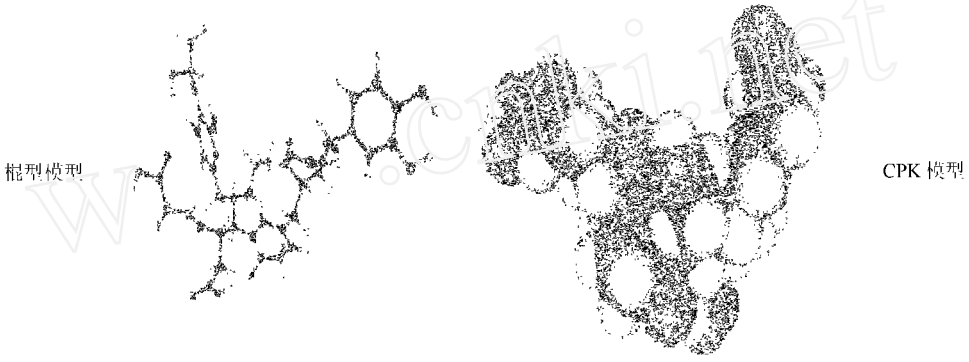

图 4 HA 分子的 VRML 模型

Fig. 4 VRML molecular model of HA

致谢: 感谢贵州大学高性能计算化学实验室提供远程计算服务.

参 考 文 献

[1] Wolfgang Broll, Tanja Koop, VRML: Today and Tomorrow [J]. *Computer & Graphics*, 1996, **20** (3): 427—434

[2] Igor Rojdestvenski, VRML Metabolic Network Visualizer [J]. *Computers in Biology and Medicine*, 2003, **33**: 169—182

[3] http://www2.chemie.uni-erlangen.de/projects/ChemVis/

[4] Steelink C, Implications of Elemental Characteristics of Humic Substances. In Aliken G R, McKnight D M, Warshaw R L et al. (Eds), Hunic Substances in Soil, Sediments and Water [M], Wiley Interscience, New York, 1985, 457—476

VRML MODELS OF ORGANIC POLLUTANTS IN DRINKING WATER

LI Xin[1] *QI Jing-yao*[2] *YUAN Yi-xing*[2]

(1 Department of Chemistry, Harbin Institute of Technology, Harbin, 150090;

2 The College of Architecture and Civil Engineering, Beijing University of Technology, Beijing, 100022)

ABSTRACT

Semi-empirical MNDO-PM3 method was used to optimize the molecular geometry of humic acid and 3-chloro-4(dichloromethyl)-5-hydroxy-2[5H]-furanone. The virtual reality modeling language (VRML) molecular models have been investigated using MolSurf software. These VRML molecular models can be viewed from freely chosen viewpoints. The visualization is not simply a display of some final computational results, but the graphical representation and the user interacting with it is the continuous source of new information.

Keywords: drinking water, organic pollutants, molecular, VRML.

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net