

Ф.7.03-09

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН

ЮЖНО-КАЗАХСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М. АУЭЗОВА



«Утверждаю»
Проректор по учебной и
учебно-методической работе
ЮКГУ им. М. Ауэзова
Байболов К.С.
«13» 2018 г.

ПРОГРАММА

курса (семинара) «Компьютерное моделирование в химии»
для слушателей курсов повышения квалификации
по специальности
«Химия»

Трудоемкость – 72 часов

Шымкент, 2018 г.

Составитель: к.т.н, доцент Жатканбаев Е.Т.

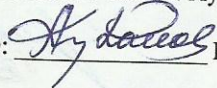
Программа рекомендована на заседании кафедры «Химия», протокол № 1 от 28.08.2018 г.

Заведующий кафедрой:  Ермаханов М.Н.

Программа рекомендована Отделом повышения квалификации научно-педагогических кадров, протокол № 1 от 03.09.2018 г.

Руководитель ОПКНПК:  Рисдаулетов Р.А.

Программа одобрена и рекомендована на заседании учебно-методического совета ЮКГУ им. М. Ауэзова, протокол № 1 от 03.09.2018 г.

Директор УМО:  Куланова Д.А.

СОДЕРЖАНИЕ

1. Предисловие	4
2. Содержание курса	5
3. Раздел 1. Работа с программными пакетами ChemOffice и HyperChem.	5
Визуализация пространственной структуры молекул	5
5. Раздел 2. Визуализация молекулярных структур с использованием программы Chem3D пакета ChemOffice	5
6. Раздел 3. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул	5
7. Раздел 4. Знакомство с программой HyperChem	5
8. Раздел 5. Основы рисования и методы редактирования	5
9. Раздел 6. Создание небольших молекул в 2-D и 3-D изображении	5
10. Раздел 7. Перемещение, вращение и масштабирование молекул	5
11. Раздел 8. Измерение свойств молекулярной структуры	5
12. Раздел 9. Минимизация энергии системы	6
13. Раздел 10. Расчет молекулярных орбиталей (МО)	6
14. Раздел 11. Электронные состояния этилена	6
15. Раздел 12. Исследование конформаций и динамики молекул методами классической механики. Конформационный анализ и динамика	6
17. Раздел 13. Смешение вычислительных методов	6
Список рекомендуемой литературы	7

Предисловие

Одним из важнейших элементов химического исследования является анализ геометрической структуры соединений. Эта область науки получила название структурная химия. Важнейшими экспериментальными методами, позволяющими исследовать геометрическую структуру молекул, являются адсорбционная и эмиссионная спектроскопия, а также дифракционные методы. Структурные формулы отражают связанность различных атомов в молекуле друг с другом. До появления компьютеров в качестве таких моделей широко применялись механические модели молекул. За последнее десятилетие создано большое количество различных программных пакетов, позволяющих решать задачи визуализации как плоских, так и пространственных моделей молекул. Первые версии программ позволяли решать в основном задачи редактирования структурных формул и визуализации пространственных структур.

Настоящая программа лекционных занятий предназначена для слушателей курсов повышения квалификации по специальности «Химия».

Содержание курса

Раздел 1. Работа с программными пакетами ChemOffice и HyperChem. Визуализация пространственной структуры молекул
Редактирование структурных химических формул в программе ChemDraw. Важнейшие элементы главной панели. Важнейшие элементы контрольной панели. Схемы химических реакций в ChemDraw.

Раздел 2. Визуализация молекулярных структур с использованием программы Chem3D пакета ChemOffice
Пользовательский интерфейс программы Chem3D Ultra 6.0. Контрольная панель. Окно визуализации.

Раздел 3. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул
Использование двумерной модели, созданной в одном из простых химических редакторов. Написание брутто-формулы соединения в рабочем поле окна. Непосредственное редактирование с использованием кнопок на панели инструментов.

Раздел 4. Знакомство с программой HyperChem
Считывание файла *c60.hin* (молекула фуллерена). Открывание меню Display. Выход из HYPERCHEM.

Раздел 5. Основы рисования и методы редактирования
Рисование связей. Отмена выбора атомов. Удаление отдельного атома или связи. Удаление нескольких атомов или связей. Копирование атомов в *Clipboard* (память). Очистка PO HYPERCHEM.

Раздел 6. Создание небольших молекул в 2-D и 3-D изображении
Создание 2-D – эскиза. Создание ароматического кольца. Редактирование индивидуальных атомов.

Раздел 7. Перемещение, вращение и масштабирование молекул
XY Перемещение. Z перемещение. Использование инструмента Z перемещения. Использование инструмента Zoom. Сосредоточение и масштабирование. XY вращение. Z Вращение. Z отрезание.

Раздел 8. Измерение свойств молекулярной структуры
Создание 2-D эскиза. Редактирование эскиза. Построение 3-D структуры.

Раздел 9. Минимизация энергии системы

Выбор Single Point на меню Compute. Определение отражательной плоскости. Оптимизация ванны циклогексана. Создание Циклогексана в форме твист-ванны. Оптимизация циклогексана в форме Твист- ванны. Минимизирование структуры твист-ванны.

Раздел 10. Расчет молекулярных орбиталей (МО)

Создание структурной модели воды. Выравнивание структуры. Вычисление волновой функции. Изображение полной плотности спина. Изображение индивидуальных молекулярные орбиталей.

Раздел 11. Электронные состояния этилена

Оптимизация основного состояния этилена. Расчет энергии корреляции. Орбитали основнотояния этилена. Расчет электронного спектра этилена. Результаты расчета спектра.

Раздел 12. Исследование конформаций и динамики молекул методами классической механики.

Конформационный анализ и динамика

Создание молекулярную модель бутана. Значения двугранных углов стандартной модели циклопентана. Значения двугранных углов модели циклопентана в конформации «конверт». Значения двугранных углов модели циклопентана в конформации «твист».

Раздел 13. Смешение вычислительных методов

Распределение зарядов, на атомах метановой кислоты в вакууме, рассчитанное методом CNDO. Молекулярные модели метановой кислоты в вакууме (слева) и в растворе с выделенными группами атомов для выполнения операции наложения. Молекулярные модели метановой кислоты после выполнения наложения (Overlay). Карта распределения зарядов на фрагменте аланина по результатам квантово-химического расчета методом CNDO. Двумерный (а) и трехмерный (б) графики распределения электростатического потенциала на фрагменте аланина по результатам квантово-химического расчета методом CNDO. Квантово-химический анализ полумпирическим методом отдельных фрагментов большой молекулы.

Список рекомендуемой литературы:

1. Полещук О.Х., Кижнер Д.М. Лабораторные работы по компьютерному моделированию химических реакций. Часть I. Методические указания. Издательство ТГПУ. Томск 2007. – 172 с.
2. Полещук О.Х., Кижнер Д.М. Лабораторные работы по компьютерному моделированию химических реакций. Часть II. Учебно-методическое пособие. Издательство ТГПУ. Томск 2007. – 160 с.
3. Соловьев М. и др. Компьютерная химия. – М.: Высшая школа, 2005.
4. Кларк Т. Компьютерная химия: Пер с англ. – М.: Мир, 1990, 383 с., ил.
5. Салем Л. Электроны в химических реакциях. – М.: Мир, 1985.
6. Буркерт У., Эллинджер Н.Л. Молекулярная механика. – М.: Мир, 1986.
7. Tatewaki H., Huzinaga S.J. Comput. Chem. Osaka. 1980.