
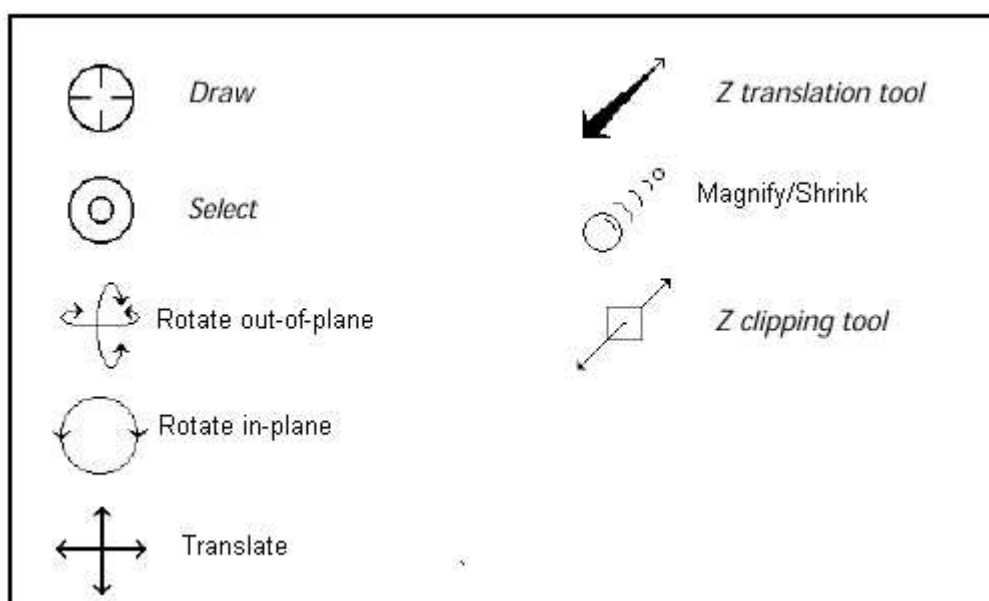


Знакомство с пакетом молекулярного моделирования HyperChem начнем, естественно, с освоения панели инструментов и пунктов меню. Для начала выполним небольшое упражнение, которое продемонстрирует, как работают разные инструменты. После выполнения этого упражнения выполните задания 1 и 2, пользуясь таблицей «Как это выполнить?», и подготовьте отчет. Обратите внимание на качество рисунков и таблиц.

### Упражнение.

- 1 Выбор элемента.** Двойной щелчок на инструменте DRAW (или: Build-Default Element). Откроется периодическая система элементов. Выбрать углерод. Если курсор отличен от  выбрать DRAW.
- 2 Нарисовать** углеродный скелет изобутана. (Проводим линии с нажатой левой кнопкой мыши.)
- 3 Добавление H и построение трехмерной модели.** Двойной щелчок на инструменте SELECT (или: Build-AddH&Model Build)
- 4 Нарисовать углеродный скелет этана.
- 5 Кратные связи.** Щелчок на связи левой кнопкой. Повторить.
- 6 Убрать кратные связи.** Щелчок на связи правой кнопкой. Повторить.
- 7 Двойной щелчок на инструменте SELECT (или: Build-AddH&Model Build)
- 8 Выделить молекулу** изобутана. Select – Molecules. Инструмент SELECT – Щелчок на молекуле.
- 9 Перемещение, вращение** всей молекулярной системы или выделенных молекул. Для каждого из инструментов Translate, Rotate-out-of-plane, Rotate-in-plane перемещать курсор а) с нажатой левой кнопкой в) с нажатой правой кнопкой
- 10 Отменить выделение** молекулы изобутана – инструмент SELECT – щелчок правой кнопкой мыши в любом черном месте экрана.
- 11 Выделить группу** -CH<sub>3</sub> молекулы этана. (Все связи C-H).  
Меню: Select – Atoms. Проверить, стоит ли галочка на Multiple Selection. Щелкать на всех связях C-H. (ИЛИ: Выбрать инструмент Select, нажав ОБЕ кнопки мыши, «нарисовать» прямоугольник, охватывающий все атомы группы CH<sub>3</sub>.)
- 12 Проекция Ньюмена.** С помощью инструмента Rotate out-of-plane представить молекулу этана в таком ракурсе, чтобы один атом углерода заслонял другой.
- 13 Вращение группы атомов.** Инструмент Rotate-in-plane. Перемещать курсор горизонтально вправо и влево с нажатой ПРАВОЙ кнопкой мыши.







## Как это выполнить?

### Установки рабочего окна

1	Изменение цвета фона окна	File – Preferences... вкладка Window Color
2	Изменение цвета связей (атомов)	File – Preferences... вкладка Bond Color

### Создание модели молекулы.

1	Выбрать тип атома (элемент)	Build – Default Element или двойной щелчок на кнопке Draw панели инструментов 
2	Нарисовать атом <sup>1</sup>	Кнопка Draw панели инструментов, щелчок левой кнопкой мыши в нужном месте экрана
3	Нарисовать связь	Передвигать курсор мыши с нажатой левой кнопкой
4	Нарисовать кратную связь	То же, дважды (трижды) или кликнуть на одинарной связи.
5	Построение грубой 3D модели молекулы	Build – Add H&Model Build или двойной щелчок на кнопке Select панели инструментов 
6	Изменение цвета атомов	Display – Element Color
7	Изменение способа представления молекулы	Display - Rendering
8	Изменение масштаба молекулы	Кнопка Magnify/shrink панели инструментов, мышь 
9	Занести рисунок молекулы в буфер	Edit – Copy Image (или F9)
10	Перемещение молекулы	Кнопка Translate панели инструментов, мышь 
11	Вращение молекулы в плоскости экрана	Кнопка Rotate-in-plane панели инструментов, мышь 
12	Вращение молекулы вне плоскости экрана	Кнопка Rotate-out-of-plane, мышь 

<sup>1</sup> – Атомы водорода можно не рисовать, их можно прибавить автоматически на все незаполненные валентности (Build – Add Hydrogen)

### Работа с моделью молекулы.

1	Вывести на экран символы элементов	Display – Labels – Symbol
2	Вывести на экран номера атомов	Display – Labels –Number
3	Вывести на экран атомные массы	Display – Labels –Mass
4	Вывести на экран заряды атомов	Display – Labels -Charge
5	Выделить атом. Отменить выделение. Найти координаты атома.	Кнопка Select панели инструментов, щелчок левой кнопкой мыши на атоме. Отмена - щелчок правой кнопки мыши. Координаты атома высвечиваются в статусной строке.
6	Выделить группу атомов	Включить опцию Select – Multiple Selections. Выделить атомы.
7	Найти расстояние между атомами.	Выделить два атома. Расстояние высвечивается в статусной строке.
8	Найти угол A <sub>1</sub> -A <sub>2</sub> -A <sub>3</sub>	Выделить три атома. Угол высвечивается в статусной строке
9	Найти главные моменты инерции	Display – Show Inertial Axes. Моменты инерции высвечиваются в статусной строке.
10	Оптимизация геометрии молекулы полуэмпирическими методами.	1) Выбрать метод оптимизации: Setup – Semi-empirical. 2) Выбрать алгоритм минимизации: Compute – Geometry Optimisation. В статусной строке – энергия молекулы.

### Запись информации в файл

1	Сохранить информацию о структуре молекулы в числовом файле	File – Save as... Тип файла - *.ent; должны быть включены PDB опции: <b>Hydrogens</b> и <b>Connectivity</b>
---	--	---

## Задание 1

1. Нарисовать молекулу трихлоруксусной кислоты  $\text{CCl}_3\text{COOH}$ .
2. Изменить цвет атомов хлора.
3. Изменить способ представления модели молекулы. При каком способе представления видны кратные связи?
4. Проверить возможности перемещения молекулы, вращения ее а) в плоскости б) вне плоскости экрана, изменения масштаба изображения молекулы.
5. Вывести на экран а) символы элементов, б) нумерацию атомов, в) атомные массы, г) заряды атомов.

**Отчет о работе:** документ WORD, содержащий 2 рисунка с подписями: а) наиболее наглядную на Ваш взгляд модель молекулы, б) штриховую модель молекулы с указанием символов элементов (Черно-белый вариант для печати, обратить внимание на фон, добиться четкого изображения как символов элементов, так и связей.).

## Задание 2

1. Для каждой из молекул  $\text{C}_3\text{H}_8$ ,  $\text{C}_3\text{H}_6$ ,  $\text{C}_6\text{H}_6$  построить 3D-модель, найти и занести в таблицу длины связей C-C и C=C, валентные углы C-C-C. Сравнить длины связей и валентные углы в разных молекулах. Посмотреть заряды на атомах.
2. Провести оптимизацию<sup>1</sup> геометрии молекул (полуэмпирическим методом CNDO, Fletcher-Reeves, gradient=0.1). Найти и занести в таблицу длины связей, валентные углы, заряды на атомах C. Как изменились длины связей и валентные углы после нахождения оптимальной геометрии молекул? Как изменились заряды на атомах?

**Отчет о работе:** документ WORD, содержащий а) сводную таблицу свойств молекул до и после проведения оптимизации геометрии, б) Ваши выводы. (Результат анализа представленных в таблице данных).

**<sup>1</sup> Перед оптимизацией всегда строить грубую трехмерную модель молекулы!!!**

**(Build – Add H&Model Build или двойной щелчок на кнопке Select панели инструментов  )**