

Министерство образования и науки Российской Федерации
Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова
Кафедра органической и биологической химии

КОМПЬЮТЕРНАЯ ХИМИЯ

Методические указания

Рекомендовано
Научно-методическим советом университета для студентов,
обучающихся по направлению Химия

Ярославль
ЯрГУ
2013

УДК 543.06:543.2:004(072)
ББК Г.я73
К 59

*Рекомендовано
Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного издания. План 2013 года.*

Рецензент
кафедра органической и биологической химии
Ярославского государственного университета им. П. Г. Демидова

Компьютерная химия: методические указания
К 59 / сост. Д. А. Базлов, В. Ю. Орлов, А. Д. Котов, А. В. Цивов;
Яросл. гос. ун-т им. П. Г. Демидова. — Ярославль :
ЯрГУ, 2013. — 76 с.

Методические указания знакомят студентов-химиков с основами пользования программами для написания формул химических соединений, их редактирования, компьютерного моделирования основных физико-химических свойств: ChemOffice и HyperChem.

Предназначены для студентов, обучающихся по направлению 020100.62 Химия (дисциплины «Компьютерная химия» (блок СД), «Компьютерное обеспечение химического анализа» (цикл БЗ)), очной формы обучения.

УДК543.06:543.2:004(072)
ББК Г.я73

© ЯрГУ, 2013

Оглавление

Введение.....	3
Практические занятия.....	5
Практическая работа 1 Знакомство с программным пакетом ChemOffice. Химический редактор ChemDraw.....	5
Практическая работа 2 ChemDraw. Запись схемы реакции с указанием реакционных центров.....	9
Практическая работа 3 Знакомство с интерфейсом программы HyperChem.....	11
Практическая работа 4 HyperChem. Построение и редактирование молекул.....	17
Практическая работа 5 Создание небольших молекул в 2D и 3D.....	22
Практическая работа 6 HyperChem. Формирование полипептида.....	25
Практическая работа 7 Измерение параметров структур.....	28
Практическая работа 8 Создание и редактирование полипептидной цепи.....	30
Практическая работа 9 Минимизация энергии системы.....	37
Практическая работа 10 Моделирование динамики и состояния равновесия.....	49
Литература.....	73