

УДК 517.9(075)  
ББК 22.161.6я7  
Т13

*Печатается по решению редакционно-издательского совета  
Казанского национального исследовательского технологического университета*

*Рецензенты*  
канд. хим. наук Э. И. Мусина  
канд. хим. наук, доц. И. В. Федюнина

**Тагашева Р. Г.**

**Т13** Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии : практикум / Р. Г. Тагашева, А. Г. Сафиулина; Минобрнауки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2022. – 128 с.

ISBN 978-5-7882-3140-2

Описана работа программы HyperChem, предназначенной для проведения квантово-химических расчетов электронной структуры молекул и физико-химических свойств (молекулярных структур и орбиталей, электронных и инфракрасных спектров).

Предназначен для магистров, обучающихся по направлению подготовки 18.04.01 «Химическая технология» по всем программам магистратуры кафедры «Технологии основного органического и нефтехимического синтеза».

Подготовлен на кафедре технологии основного органического и нефтехимического синтеза.

**УДК 517.9(075)**  
**ББК 22.161.6я7**

ISBN 978-5-7882-3140-2

© Тагашева Р. Г., Сафиулина А. Г., 2022

© Казанский национальный исследовательский  
технологический университет, 2022

## Содержание

Введение.....	3
<i>Лабораторная работа 1. Основные понятия в HyperChem. Создание простых молекул .....</i>	<i>4</i>
<i>Лабораторная работа 2. Измерение свойств молекулы.....</i>	<i>21</i>
<i>Лабораторная работа 3. Создание полипептида .....</i>	<i>26</i>
<i>Лабораторная работа 4. Работа с макромолекулами .....</i>	<i>37</i>
<i>Лабораторная работа 5. Минимизация энергии системы .....</i>	<i>45</i>
<i>Лабораторная работа 6. Моделирование динамики и состояния равновесия.....</i>	<i>55</i>
<i>Лабораторная работа 7. Исследование конформаций и динамики молекул методами классической механики .....</i>	<i>69</i>
<i>Лабораторная работа 8. Вычисление молекулярных орбиталей.....</i>	<i>85</i>
<i>Лабораторная работа 9. Взаимодействие воды с N-метилацетамидом .....</i>	<i>95</i>
<i>Лабораторная работа 10. Протонирование воды .....</i>	<i>101</i>
<i>Лабораторная работа 11. Колебания и перемещение различных состояний аммиака.....</i>	<i>105</i>
<i>Лабораторная работа 12. Самое низкое возбужденное электронное состояние этилена .....</i>	<i>112</i>
<i>Лабораторная работа 13. Смещение вычислительных методов.....</i>	<i>120</i>
Литература .....	125