



National Research Tomsk State University

Томский государственный университет  
Физический факультет



Физический  
факультет  
Томского  
государственного  
университета



# ВВЕДЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

*Д.А. Сунчугашев*

МАОУ школа «Перспектива», г. Томск  
Физический факультет НИ ТГУ, г. Томск

Научно-практическая конференция «Применение прогрессивных образовательных ресурсов в педагогической деятельности, повышающих уровень учебных компетенций обучающихся в школе и университете»  
г. Томск, Россия 10-11 мая 2022 г.

# ВВЕДЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Вода и ее формула  $\text{H}_2\text{O}$ , бензол имеет формулу  $\text{C}_6\text{H}_6$ , этиловый спирт –  $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$  или  $(\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-OH})$ , или газы, такой как пропан  $\text{C}_3\text{H}_8$  ( $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ )

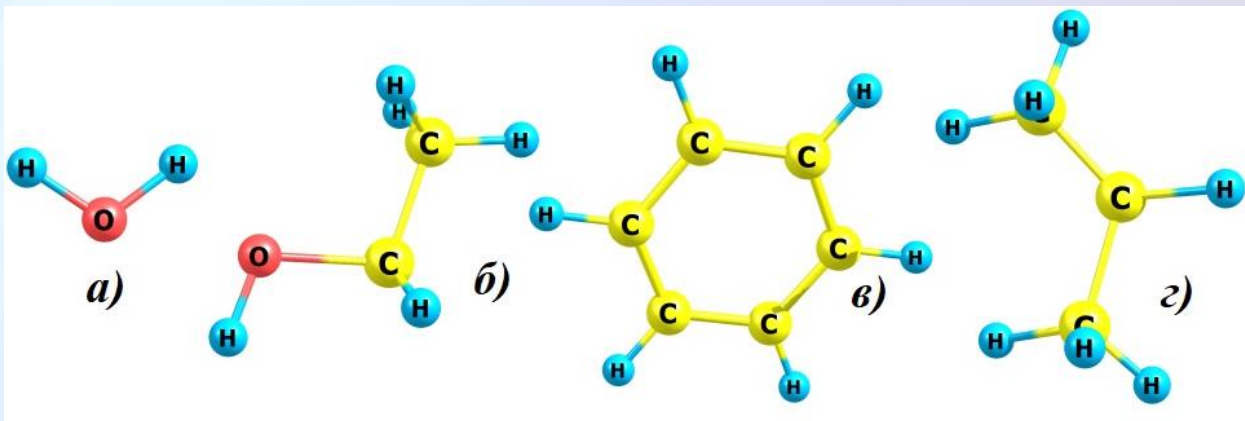
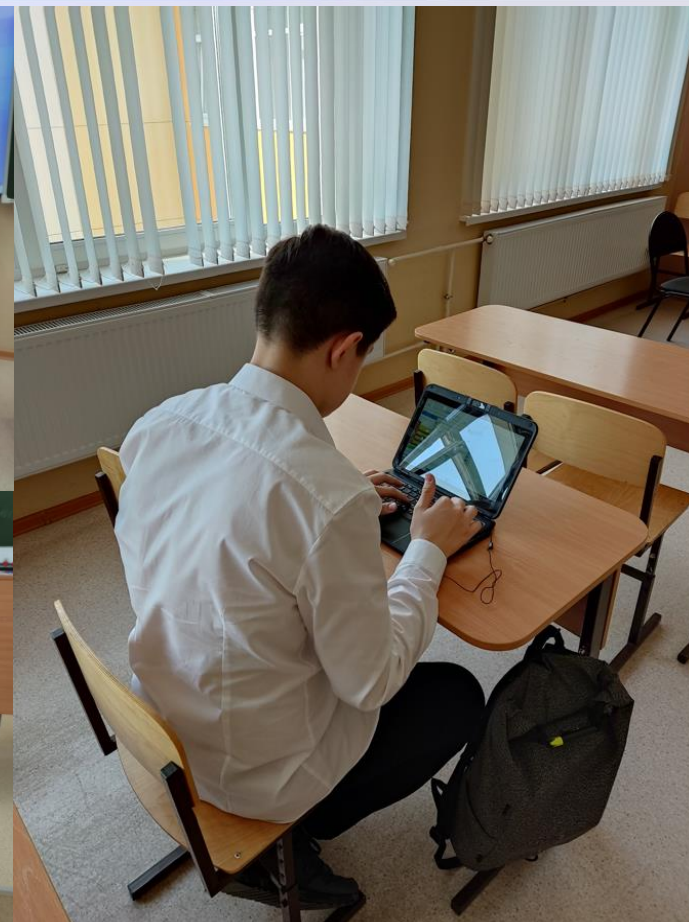
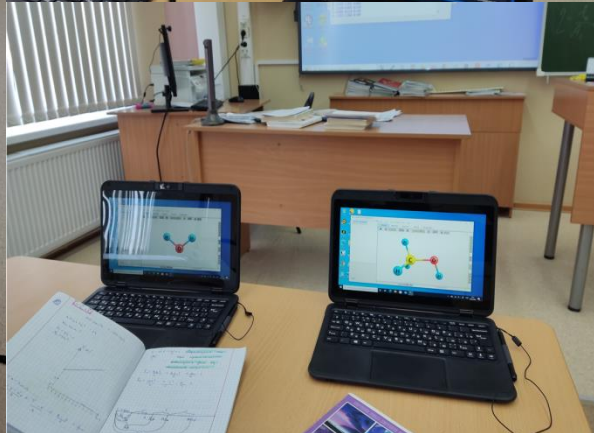
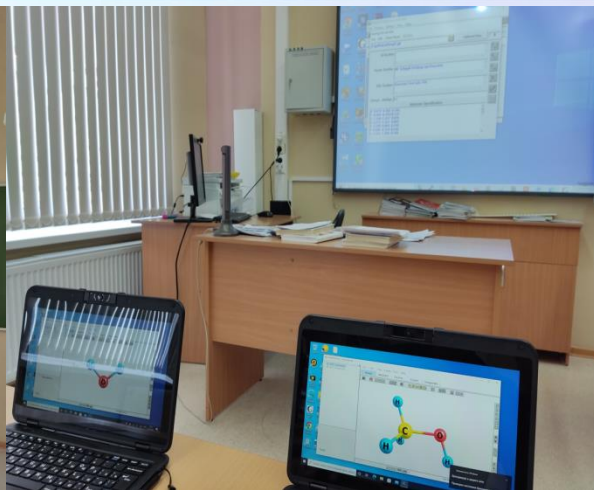
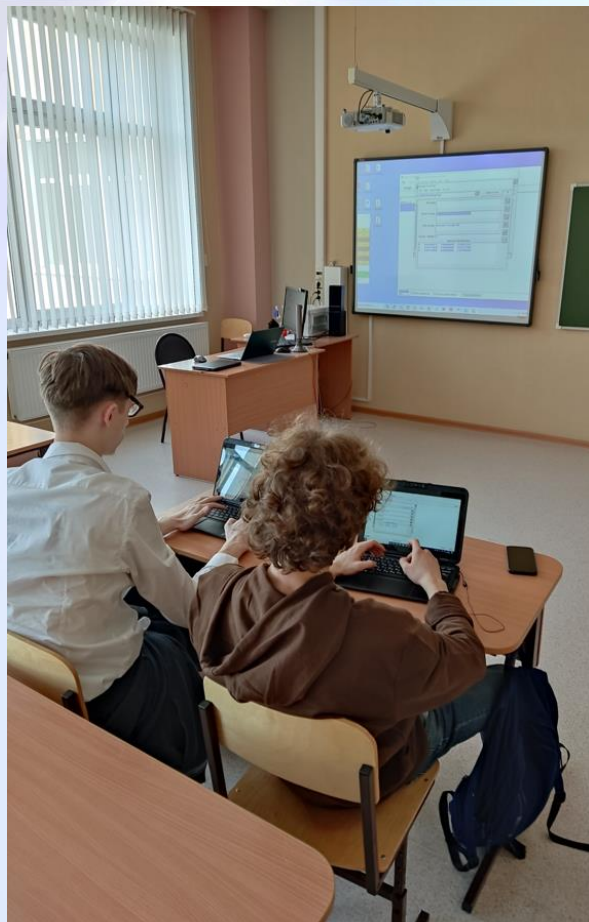


Рис. 1. Структура молекул: а) воды, б) этиловый спирт, в) бензол, г) пропан



- развитие вычислительной техники

# Работа с программой



# Работа в группах

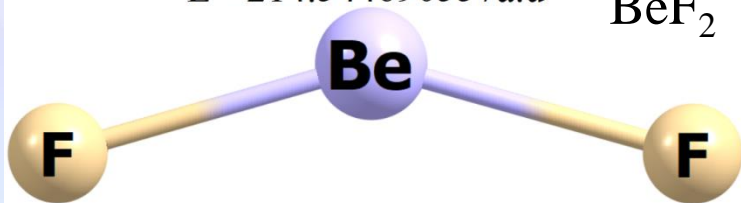


# ВВЕДЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

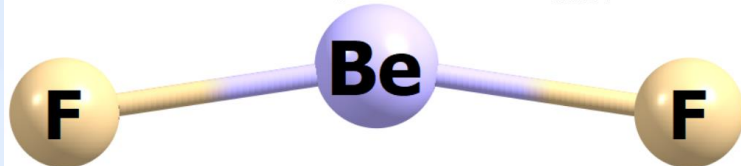
## Минимум энергии

$E = -214.544690557 \text{ a.u.}$

$\text{BeF}_2$



$E = -214.590669521 \text{ a.u.}$



$E = -214.592483156 \text{ a.u.}$



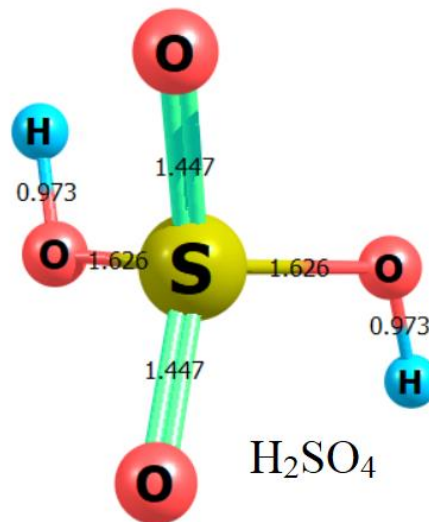
$E = -214.592731866 \text{ a.u. (min)}$



## Длина связи

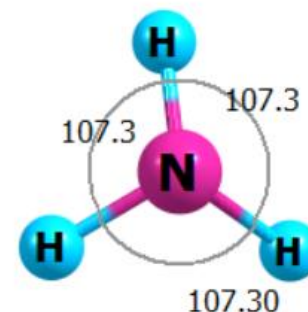


$\text{HCl}$

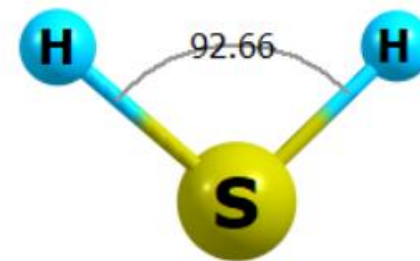


$\text{H}_2\text{SO}_4$

## УГЛЫ



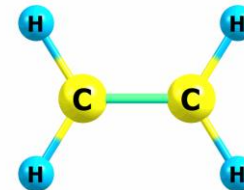
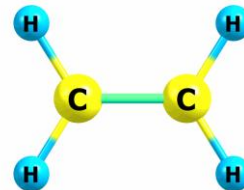
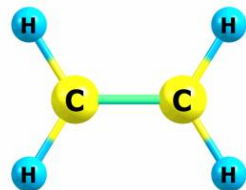
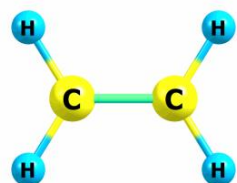
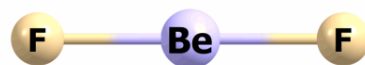
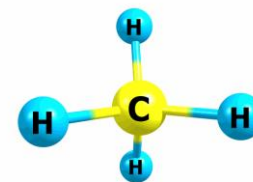
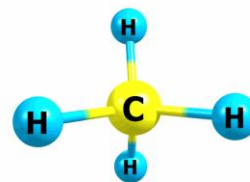
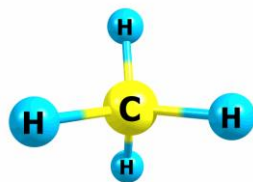
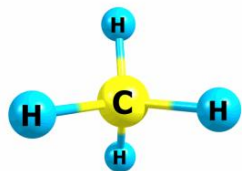
$\text{NH}_3$



$\text{H}_2\text{S}$

# ВВЕДЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

## Частоты колебаний



# Результаты и выводы

- Пробное тестовое моделирование
- Изучение молекул и молекулярных соединений (моделирование соединений и их параметров)
- Заинтересовать обучающихся к изучению различных наук и изучать взаимосвязи между ними.
- Лабораторные работы и возможность проектной деятельности

# **ВВЕДЕНИЕ В МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

**Спасибо за внимание!**