Методы молекулярной механики для расчета геометрии молекул ( Chem3D) №1



Торсионные углы





Торсионный угол 180

Total Energy: -4.2759 kcal/mol

Энергия велика, поэтому данная конфигурация не выгодна.





Торсионный угол 86

Total Energy: -6.3407 kcal/mol





Торсионный угол 70

Total Energy: -10.9708 kcal/mol

Вывод: в ходе лабораторной работы было выявлено, что при изменении торсионного угла произошло уменьшение общей энергии, что говорит о том, что конечная оптимизированная молекула более устойчива.