

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«МУРМАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

АПАТИТСКИЙ ФИЛИАЛ

**Методические указания к выполнению практических работ**

**По дисциплине:** Б1В.03ДВ.02.02 Методы квантово-химических расчетов  
указывается цикл (раздел) ОП, к которому относится дисциплина, название дисциплины

**для направления подготовки (специальности)** 04.03.01 Химия  
код и наименование направления подготовки (специальности)

Неорганическая химия и химия координационных соединений  
наименование профиля /специализаций/образовательной программы

**Квалификация выпускника, уровень подготовки** бакалавр  
(указывается квалификация (степень) выпускника в соответствии с ФГОС ВО)

**Кафедра - разработчик:** химии и строительного материаловедения  
название кафедры - разработчика рабочей программы

**Разработчик(и)** О.Р. Стародуб, доцент, к.х.н.  
(ФИО, должность, ученая степень, (звание))

**Апатиты  
2019**

## Пояснительная записка

1. **Методические указания** составлены на основе ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия, утвержденного приказом Минобрнауки РФ от 17 июля 2017 года, № 671, учебного плана в составе ОП по направлению подготовки 04.03.01 Химия, профилю «Неорганическая химия и химия координационных соединений».

### 2. Цели и задачи учебной дисциплины (модуля).

**Целью дисциплины** (модуля) «Методы квантово-химических расчетов» является подготовка обучающегося в соответствии с квалификационной характеристикой бакалавра и рабочим учебным планом направления 04.03.01 Химия, что предполагает ознакомление обучающихся с теорией движения материи в микромире, когда изучаемые объекты представляют собой электроны, атомы, молекулы и их малые ансамбли, к описанию движения которых не применимы методы классической механики

**Задачей дисциплины** является освоение студентами следующих основных понятий:

- особенности поведения частиц в микромире, корпускулярно-волновой дуализм, принцип неопределенности Гейзенберга;
- основные постулаты квантовой механики, предпосылки их появления, несовместимость с принципами классической механики и согласованность обоих подходов в предельном случае;
- уравнение Шредингера как уравнение движения в микромире, способы его решения. Стационарное уравнение Шредингера. Полярные координаты;
- функция состояния системы, вероятностный характер получаемый с её помощью информации;
- понятие операторов квантовой механики. Собственные функции и собственные значения операторов; теория химической связи в молекулах с позиций квантовой теории;
- основные подходы решения квантово-химических задач, включая молекулы химических соединений;
- общие принципы упрощения векового уравнения при решении квантово-химических задач;
- решение квантово-химических задач в тг-приближении простым методом Хюккеля. Порядок химической связи и плотности зарядов на атомах.

### 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Методы квантово-химических расчетов»

Процесс изучения дисциплины «Методы квантово-химических расчетов» направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия:

**ПК-1-г** Способность выбирать технические средства и методы испытаний для решения технологических задач, поставленных специалистом более высокой квалификации;

**ПК-2-г** Способность осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить паспортизацию товарной продукции

Результаты формирования компетенций и планируемые результаты обучения

представлены в таблице 1.

**Таблица 1 – Планируемые результаты обучения**

№ п/п	Код компетенции	Компоненты компетенции, степень их реализации	Результаты обучения
1	<p><b>ПК-1-т</b> Способность выбирать технические средства и методы испытаний для решения технологических задач, поставленных специалистом более высокой квалификации;</p>	<p>Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью</p>	<p><b>Знать:</b> основы применения численных методов для решения квантово-химических задач моделирования систем и процессов;  <b>Уметь:</b> использовать специализированное ПО (GAMESS, ChemDraw) для решения квантово-химических задач и задач обработки данных квантово-химического эксперимента;                      - представлять полученные экспериментальные данные в виде отчетов, графиков и т.д.                      - владеть компьютерными технологиями обработки экспериментальных данных, пользоваться средствами электронной почты для делового общения;                      - определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения;                      - понимать принципы работы современной научной аппаратуры;  <b>Владеть:</b> современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов при проведении научных исследований  <i><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b></i>                      ПК-1-т-1. Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИОКР                      ПК-1-т-2 Готовит элементы документации, проекты планов и программ отдельных этапов НИОКР                      ПК-1-т-3. Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИОКР</p>
2	<p><b>ПК-2-т</b> Способность осуществлять контроль качества сырья, компонентов и выпускаемой продукции химического назначения, проводить</p>	<p>Компоненты компетенции соотносятся с содержанием дисциплины и компетенция реализуется полностью</p>	<p><b>Знать:</b> основы применения численных методов для решения квантово-химических задач моделирования систем и процессов;  <b>Уметь:</b> использовать специализированное ПО (GAMESS, ChemDraw) для решения квантово-химических задач и задач обработки данных квантово-химического эксперимента;                      - представлять полученные экспериментальные данные в виде отчетов, графиков и т.д.                      - владеть компьютерными технологиями обработки экспериментальных данных,</p>

	<p>паспортизацию товарной продукции</p>	<p>пользоваться средствами электронной почты для делового общения;  - определять и анализировать проблемы, планировать стратегию их решения;  - понимать принципы работы современной научной аппаратуры;  <b>Владеть:</b> современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов при проведении научных исследований  <i><b>Индикаторы сформированности компетенций в реализуемой части:</b></i>  ПК-2-т-1. Выполняет стандартные операции на высокотехнологическом оборудовании для характеристики сырья, промежуточной и конечной продукции химического производства  ПК-2-т-2. Составляет протоколы испытаний, паспорта химической продукции, отчеты о выполненной работе по заданной форме</p>
--	---	---

**Таблица 2 - Перечень практических работ**

№ п\п	Наименование практических работ	Кол-во часов	№ темы по табл. 4 РП
1	2	3	4
1.	Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. МО гомоядерных двухатомных молекул. Электронные конфигурации гомоядерных молекул. МО гетероядерных двухатомных молекул.	4	7
2.	Расчет энергий МО по методу Хюккеля: циклобутadiен, бензол, этилен, циклические полиены, молекулы с гетероатомами, полициклоароматические соединения.	4	9
3.	Визуализация пространственной структуры молекул. Редактирование структурных химических формул в программе ChemDraw.	5	11
	<b>Итого:</b>	<b>13</b>	

## Рекомендации к выполнению практических работ

### Практическое задание № 1.

**Тема:** Расчет молекулы водорода по методу МО ЛКАО. МО гомоядерных двухатомных молекул. Электронные конфигурации гомоядерных молекул. МО гетероядерных двухатомных молекул.

Для построения молекулярных орбиталей будем пользоваться минимальным базисом из 1s-АО атомов водорода:

$$\varphi = c_1\chi_1 + c_2\chi_2; \quad \chi_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-R_a}; \quad \chi_2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-R_b} \quad (1)$$

где  $a$  и  $b$  — индексы атомов водорода;  $R_a$  и  $R_b$  — расстояния электронов до соответствующих ядер.

Уравнения Рутаана для базиса (27.1) имеют вид

$$\begin{aligned} c_1 (F_{11} - \varepsilon) + c_2 (F_{12} - \varepsilon S_{12}) &= 0 \\ c_1 (F_{21} - \varepsilon S_{21}) + c_2 (F_{22} - \varepsilon) &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Вследствие эрмитовости матриц  $F_{\mu\nu}$  и  $S_{\mu\nu}$  и симметрии задачи выполняются равенства:

$$F_{12} = F_{21}; \quad F_{11} = F_{22}; \quad S_{12} = S_{21} = S \quad (3)$$

Уравнения Рутаана решаются итеративным путем, но в рассматриваемом случае из-за простоты задачи и ее симметрии уже первая итерация ведет к самосогласованному решению. Уравнения (2) имеют нетривиальные решения только в том случае, если детерминант системы равен нулю:

$$\begin{vmatrix} F_{11} - \varepsilon & F_{12} - \varepsilon S \\ F_{12} - \varepsilon S & F_{11} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (4)$$

где  $\varepsilon$  - энергия МО молекулы водорода.

Раскрывая детерминант получим квадратное уравнение

$$(F_{11} - \varepsilon)^2 + (F_{12} - \varepsilon S)^2 = 0 \quad (5)$$

корнями которого являются значения

$$\varepsilon_1 = \frac{F_{11} + F_{12}}{1 + S}; \quad \varepsilon_2 = \frac{F_{11} - F_{12}}{1 - S} \quad (6)$$

Подставляя значения  $\varepsilon_1$  в (2) вместо  $\varepsilon$ , получим уравнения для нахождения коэффициентов  $c_1$  и  $c_2$  в соответствующей МО:

$$\begin{aligned} c_1 \left( F_{11} - \frac{F_{11} + F_{12}}{1 + S} \right) + c_2 \left( F_{12} - \frac{F_{11} + F_{12}}{1 + S} S \right) &= 0 \\ c_1 \left( F_{12} - \frac{F_{11} + F_{12}}{1 + S} S \right) + c_2 \left( F_{11} - \frac{F_{11} + F_{12}}{1 + S} \right) &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Проведя простые преобразования, запишем систему уравнений в виде

$$c_1(F_{11}S - F_{12}) + c_2(-F_{12} + F_{11}S) = 0 \quad (8)$$

$$c_1(SF_{12} - F_{11}) + c_2(F_{11} - F_{12}S) = 0$$

Отсюда  $c_1 = c_2$ ;  $\varphi_1 = c_1(\chi_1 + \chi_2)$  (9)

Из условия нормировки МО  $\varphi_1$

$$\int \varphi_1^2 d\tau = c_1^2 \left( \int \chi_1^2 d\tau + 2 \int \chi_1 \chi_2 d\tau + \int \chi_2^2 d\tau \right) = 1 \quad (10)$$

получим

$$c_1^2(2 + 2S) = 1; \quad c_1 = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S}} \quad (11)$$

Второе решение получаем, подставляя в (2) вместо  $\varepsilon$  выражение для  $\varepsilon_2$ . Это решение имеет вид:  $c_1 = -c_2$

Соответствующая орбиталь:  $\varphi_2 = c_1(\chi_1 - \chi_2)$  (12)

Условие нормировки  $\varphi_2$  приводит к выражению:  $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2 - 2S}}$

Окончательно молекулярные орбитали молекулы водорода запишутся в виде

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{2 + 2S}}(\chi_1 + \chi_2) = \varphi_S \quad (13)$$

$$\varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{2 - 2S}}(\chi_1 - \chi_2) = \varphi_A$$

где  $\varphi_S$  — молекулярная орбиталь, симметричная относительно перестановки ядер, а  $\varphi_A$  — антисимметричная МО.

Следует отметить, что в рассматриваемом простом случае явный вид МО  $\varphi_S$  и  $\varphi_A$  можно было легко получить прямо из требований симметрии молекулы. Выражения для энергии МО (6) удобно преобразовать к следующему виду:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_S = F_{11} + \frac{F_{12} - F_{11}S}{1 + S}; \quad (14)$$

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_A = F_{11} - \frac{F_{12} - F_{11}S}{1 - S}$$

Считая в первом приближении атомные орбитали ортогональными, получим

$$\begin{aligned} \varepsilon_S &= F_{11} + F_{12}; \\ \varepsilon_A &= F_{11} - F_{12} \end{aligned} \quad (15)$$

Из уравнений (15) видно, что атомные уровни энергии водорода, приближенно равные  $F_{11}$  при  $R \rightarrow \infty$ , расщепляются так, что один из новых уровней оказывается выше, а второй — ниже первоначального уровня. Величина расщепления определяется значениями  $F_{12}$  и интеграла перекрывания  $S$ , что иллюстрирует рисунок. Величина матричного элемента  $F_{12}$  отрицательна, поэтому более низкой энергией обладает уровень  $\varepsilon_S$ . Благодаря знаменателю, равному  $(1+S)$ , расщепление несимметрично

относительно  $F_{11}$  причем

$$\frac{F_{12} - F_{11}S}{1 - S} > \frac{F_{12} - F_{11}S}{1 + S} \quad (16)$$

Молекулярную орбиталь  $\varphi_s$  называют *связывающей*. Молекулярную орбиталь  $\varphi_A$  — *разрыхляющей* или *антисвязывающей*.

Для гомоядерной двухатомной молекулы, составленной из элементов второго периода, ограничивая базис валентными  $1s$ -,  $2s$ - и  $2p$ -орбиталями, искомые МО в форме ЛКАО можно записать в виде

$$\begin{aligned} \varphi_1 = & c_1 1s_a + c_2 1s_b + c_3 2s_a + c_4 2s_b + c_5 2p_{xa} + c_6 2p_{xb} + \\ & + c_7 2p_{ya} + c_8 2p_{yb} + c_9 2p_{za} + c_{10} 2p_{zb} \end{aligned} \quad (1)$$

где а и b — обозначения ядер.

Задача, таким образом, сводится к решению секулярного уравнения десятого порядка и соответствующей системы 10 алгебраических уравнений. В результате будут получены **10** (по числу базисных АО) различных МО молекулы. Число **заполненных** МО определяется числом электронов в молекуле. Расчеты показывают, что в каждой МО гомоядерной двухатомной молекулы несколько (обычно **два**) коэффициентов  $c_{i\mu}$  **велики**, остальные или равны нулю, или практически неотличимы от него. Для того чтобы атомные орбитали входили в МО с большим вкладом, необходимо выполнение следующих условий:

- 1) энергии, соответствующие АО, должны быть сравнимы по величине;
- 2) АО должны иметь отличное от нуля перекрывание, т. е. они должны обладать одинаковыми свойствами симметрии относительно оси молекулы.

Рассмотрим классификацию и обозначения МО гомоядерных молекул. При этом принимаются во внимание:

- 1) симметрия орбитали относительно **оси** молекулы;
- 2) симметрия относительно **плоскости**, перпендикулярной оси молекулы;
- 3) **тип** АО, в которые переходят МО при увеличении межъядерного расстояния;
- 4) симметрия МО относительно **центра инверсии**.

Молекулярные орбитали, симметричные относительно отражения в плоскости молекулы, называют  **$\sigma$ -орбиталями**, антисимметричные относительно такого отражения орбитали называют  **$\pi$ -орбиталями**. Молекулярные орбитали двухатомных молекул характеризуются квантовым



числом  $\lambda$ , аналогичным квантовому числу  $m$  в атоме, которое определяет величину проекции орбитального момента электрона на молекулярную ось. Для  $\sigma$ -орбиталей  $\lambda = 0$ , для  $\pi$ -орбиталей  $\lambda=1$ . Аналогично, имеются орбитали с  $\lambda=2, 3, \dots$ , называемые соответственно  $\delta, \phi, \dots$ . Молекулярные орбитали с  $\lambda \neq 0$  являются дважды вырожденными, т. е. проекция момента на ось молекулы может быть равна  $\pm \lambda \hbar$ .

Все МО характеризуются индексами **g** (gerade — четный) и **u** (ungerade — нечетный). Эти обозначения зависят от того, инвариантна МО (g) или меняет знак (u) при инверсии относительно центра симметрии.

Для обозначения антисвязывающих или разрыхляющих орбиталей (к которым относятся орбитали, антисимметричные относительно плоскости, перпендикулярной оси молекулы) используют обычно символы  $\sigma^*, \pi^*, \delta^*$  и т. д. Четность и нечетность МО лежат в основе правил отбора разрешенных электронных переходов. Возможны переходы **u**  $\leftrightarrow$  **g** и невозможны переходы **u**  $\leftrightarrow$  **u** и **g**  $\leftrightarrow$  **g**.

Молекулярная орбиталь определяется также типом АО, из которых она построена и в которые она переходит при увеличении межъядерного расстояния. Например, запись  $\sigma 1s$  означает, что данная МО  $\sigma$ -типа построена из  $1s$ -АО и переходит в них при  $R \rightarrow \infty$  (разъединенные атомы).

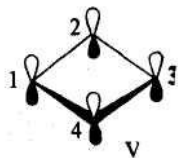
Для двухатомных молекул, состоящих из различных атомов (гетероядерные молекулы), МО несимметричны. В связывающих МО коэффициенты при АО более электроотрицательного атома больше. Для антисвязывающих МО вклад более электроотрицательного атома меньше. При классификации МО обычно не указывают АО, из которых они образованы, а сохраняют только тип ( $\sigma, \pi, \dots$ ) МО и ее порядковый номер внутри данного типа.

В гетероядерных молекулах отнесение орбитали к связывающему типу наиболее тесно определяется по соответствующей ей карте дифференциальной плотности, т. е. если на связи электронная плотность по сравнению с плотностью свободных атомов увеличивается, то орбиталь связывающая, при уменьшении плотности — орбиталь разрыхляющая. Корреляционная диаграмма для гетероядерной двухатомной молекулы строится аналогично корреляционной диаграмме гомоядерной молекулы на основании расчетов и спектральных данных.

## Практическое задание № 2.

**Тема:** Расчет энергий МО по методу Хюккеля: циклобутadiен, бензол, этилен, циклические полиены, молекулы с гетероатомами, полициклоароматические соединения.

Рассмотрим подробнее расчет энергии МО циклобутadiена (V), разделив его на несколько стадий, однотипных для любого расчета по методу МОХ.



1. Выделим систему  $p_z$ -АО, которые должны быть включены в линейные комбинации с образованием МО, и пронумеруем их, начиная с любой АО. остальные  $p$ - и  $s$ -орбитали атомов углерода образуют  $\sigma$ -остов молекулы и расположены по энергии ниже  $\pi$ -МО.

2. Запишем секулярный определитель в матричном виде, расположив  $x$  по диагонали и присвоив, в соответствии с приближениями хюккелевского метода, **значение 1** тем внедиагональным матричным элементам,

$$\begin{vmatrix} x & 1 & 0 & 1 \\ 1 & x & 1 & 0 \\ 0 & 1 & x & 1 \\ 1 & 0 & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

которые соответствуют **соседним** атомам, например первому и второму, и **нуль** — **несоседним**, например первому и третьему:

3. Раскроем определитель по элементам любой строки или колонки и получим характеристическое уравнение для молекулы циклобутadiена

$$x^4 - 4x^2 = x^2(x^2 - 4) = 0,$$

корнями которого будут  $x_1 = -2$ ,  $x_2 = x_3 = 0$ ,  $x_4 = 2$ . Отрицательные значения корней согласно определению  $x = (\alpha - E)/\beta$  соответствуют связывающим МО, нулевые — несвязывающим и положительные — антисвязывающим. В соответствии с правилом Хунда четыре  $\pi$ -электрона циклобутadiена размещаются на энергетических уровнях, как показано на рис. 71.

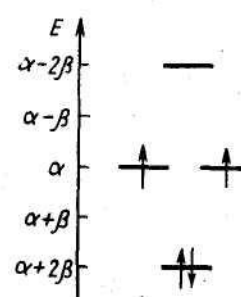


Рис. 71. Диаграмма энергетических уровней циклобутadiена

**Правило Хюккеля:** ароматической является плоская моноциклическая сопряженная система, содержащая  $(4n + 2)$   $\pi$ -электронов (где  $n = 0, 1, 2, \dots$ ). Так, для бензола число  $\pi$ -электронов равно 6; таким образом он удовлетворяет Хюккелевскому критерию ароматичности ( $n = 1$ ). Число  $(4n + 2)$  называется Хюккелевским числом электронов.

Следует отметить, что в образовании сопряженной системы электронов могут участвовать не только  $\pi$ -электроны, но и неподеленная электронная пара или пустая  $p$ -орбиталь, следовательно, ароматическими могут быть не только нейтральные, но и заряженные частицы - катионы и анионы.

Для оценки устойчивости циклических полностью сопряженных полиенов удобно пользоваться графическим методом **Фроста**. Для этого правильный многоугольник, с числом углов, равным количеству атомов углерода в цикле, вписывают в круг таким образом, чтобы одна из вершин находилась в самой нижней точке круга. Точки, в которых вершины многоугольника касаются круга, считают уровнями энергии молекулярных  $\pi$ -орбиталей. При этом оценка уровней энергии  $\pi$ -орбиталей сводится к решению простой чисто геометрической задачи.

Горизонтальный диаметр обозначает несвязывающий уровень; орбитали, расположенные ниже горизонтального диаметра - связывающие, а расположенные выше - антисвязывающие.

### Практическое задание № 3.

**Тема:** Визуализация пространственной структуры молекул. Редактирование структурных химических формул в программе ChemDraw.

В отличие от редакторов двумерных редакторов химических формул программы Chem3D и HyperChem позволяют осуществлять полное трехмерное моделирование и визуализацию химических соединений. Основным приложением пакета ChemOffice является программа CS Chem3D. В данном разделе будет рассмотрено только создание и редактирование трехмерных моделей химических соединений в пакете CS Chem3D.

Существует несколько способов создания трехмерной модели химического соединения.

1. Использование двумерной модели, созданной в одном из простых химических редакторов. Двумерная модель в виде структурной формулы соответствующего соединения может быть создана в приложении CS ChemDraw или в другом «химическом редакторе», например ISIS/Draw, а затем перенесена в окно Chem3D через буфер обмена Windows при помощи операций «копировать» и «вставить». При вставке в окно Chem3D структурная формула автоматически преобразуется в трехмерную модель, при этом соответствующим длинам валентных связей и углов между атомами присваиваются стандартные для данных элементов значения. Для тех редакторов, с которыми Chem3D не поддерживает интерфейса через буфер обмена Windows, импорт модели может быть осуществлен через файл одного из стандартных химических форматов (файлы с расширением .alc, .mol, .msm, .mor и многие другие).
2. Написание брутто-формулы соединения в рабочем поле окна. После нажатия кнопки с буквой «А» на панели инструментов курсор приобретает вид перекрестья с буквой «А» в центре. Если щелкнуть мышью в любом месте рабочего окна, появляется поле ввода текста, в котором можно заглавными латинскими буквами набрать брутто-формулу соответствующего соединения, например  $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{C}_6\text{H}_5$ . После нажатия клавиши ввода в рабочем окне будет создана трехмерная модель соответствующего соединения. Следует иметь в виду, что одной и той же брутто-формуле могут отвечать различные структурные изомеры, поэтому возможно, что созданная модель потребует затем дальнейшего редактирования.
3. Непосредственное редактирование с использованием кнопок на панели инструментов. Этот способ является основным, поскольку позволяет создать трехмерную модель любой сложной конфигурации. При нажатии одной из кнопок на панели инструментов, соответствующей одинарной (наклонная черта), двойной (две наклонных черты) или тройной (три наклонных черты) связи, курсор в рабочем поле окна

принимает вид перекрестья. Для того чтобы получить трехмерную модель молекулы из двух углеродных атомов, достаточно провести черту при помощи левой клавиши мыши в рабочем поле окна. Нужное количество атомов водорода, соответствующее выбранному типу связи, будет добавлено автоматически. Дальнейшее редактирование может проводиться добавлением новых связей взамен выбранных атомов водорода, изменением геометрии модели, путем перетаскивания мышью выбранных атомов, созданием циклов, путем переноса и последующего наложения нужных атомов углерода, образующих цикл, изменением типа связи. Для того чтобы изменить тип связи, нужно щелкнуть на кнопке на панели инструментов, соответствующей нужному типу связи, и с нажатой клавишей мыши соединить чертой два выбранных атома углерода. Для создания модели с гетероатомами, например кислорода или азота, нужно выбрать на панели инструментов кнопку текстового ввода (кнопка с буквой «А»), выделить щелчком мыши нужный атом (водорода или углерода) и набрать в текстовом поле символ необходимого атома или брутто-формулу заместителя.

В процессе редактирования возможно вращение созданной модели или отдельных ее частей в пространстве, изменение размеров отображаемой области, отражение и перемещение. Вращение модели в двух перпендикулярных плоскостях производится при помощи полос прокрутки в нижней и правой частях рабочей области окна. При помещении курсора в область полос прокрутки он приобретает вид ладони. Перемещая в таком состоянии курсор с нажатой левой клавишей мыши вдоль полосы прокрутки, можно вращать модель вокруг горизонтальной и вертикальной оси (правая вертикальная и нижняя полосы прокрутки соответственно). Если необходимо вращать отдельные элементы модели вокруг выбранной связи, нужно выделить нужную связь, выбрав щелчком мыши один или более нужных атомов

## Список рекомендуемой литературы

№ п\п	Название учебников, учебных пособий и других источников	Авторы (под ред.)	Издательство	Год издания
1	2	3	4	5
<b>Основная:</b>				
1.	Лекции по квантовой механике и квантовой химии: учебное пособие по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» для студентов специальности 020101.65 Химия»	О.Р. Стародуб	Мурманский государственный технический университет	2012
<b>Дополнительная:</b>				
1.	Квантовая механика и квантовая химия.	Н.Ф.Степанов	Москва, «Мир», Изд-во Моск. Ун-та	2001
2	Квантовая механика :учебник <a href="http://www.studentlibrary.ru/book/I/SBN9785927507061.html?SSr=010134171b106b0b2512518">http://www.studentlibrary.ru/book/I/SBN9785927507061.html?SSr=010134171b106b0b2512518</a>	Ведринский Р.В	Изд-во ЮФУ	2009
3.	Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие <a href="https://e.lanbook.com/book/113631">https://e.lanbook.com/book/113631</a>	Барановский В.И.	Издательство "Лань"	2019