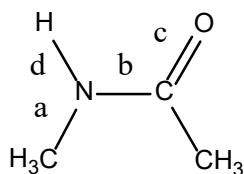


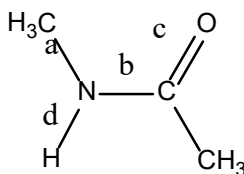
# Modelowanie cząsteczkowe – Ćwiczenie 1

Data

Porównanie trwałości i budowy geometrycznej cis- i trans- N-metyloacetamidu.



Cis



Trans

Ćwiczenie obejmuje narysowanie, optymalizację budowy geometrycznej oraz porównanie trwałości cis- i trans- N-metyloacetamidu przy użyciu metod półempirycznych (PM3) i mechaniki molekularnej (pole siłowe MM+).

| Energia             | PM3 (kcal/mol) | MM+ (kcal/mol) | Wartości doświadczalne |
|---------------------|----------------|----------------|------------------------|
| $E_{cis}$           |                |                | X                      |
| $E_{trans}$         |                |                | X                      |
| $E_{cis}-E_{trans}$ |                |                | 2,07                   |

|                                   | cis<br>PM3 | cis<br>MM+ | wartości<br>doświadczalne | trans<br>PM3 | trans<br>MM+ | wartości<br>doświadczalne |
|-----------------------------------|------------|------------|---------------------------|--------------|--------------|---------------------------|
| dł. N-CH <sub>3</sub> (a)         |            |            | 1,445                     |              |              | 1,447                     |
| dł. N-CO (b)                      |            |            | 1,357                     |              |              | 1,353                     |
| dł. C=O (c)                       |            |            | 1,200                     |              |              | 1,200                     |
| kąt H-N-CH <sub>3</sub><br>(d, a) |            |            | 114,0                     |              |              | 121,5                     |
| kąt H-N-CO<br>(d, b)              |            |            | 127,4                     |              |              | 119,4                     |
| kąt H-N-C=O<br>(d, b, c)          |            |            | 0,0                       |              |              | 180,0                     |

Osoby: