**Лабораторная работа 9**

**Полная энергия молекулярной системы (Orca)**

Выполнить оптимизацию (начальные приближения для геометрии следует взять из cccbdb NIST), рассчитать частоты колебаний для 298.15 K (доказав тем самым через отсутствие отрицательных частот устойчивость молекулы) найти полную энергию и энергию Гиббса в Eh для молекулы с настройками:

1. ацетон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
2. бутанон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
3. ацетилацетон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
4. 2-пентанон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
5. 1-фенил-1-пропанон (=этилфенилкетон), BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
6. хлорацетон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
7. ацетамид, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
8. гуанин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
9. цитозин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
10. тимин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
11. креатинин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
12. тетразол, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
13. циклопентанон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
14. 2-гидроксипиридин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
15. 1H-изоиндол, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
16. 1H-1,2,3-триазол, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, газ
17. ацетон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
18. бутанон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
19. ацетилацетон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
20. 2-пентанон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
21. 1-фенил-1-пропанон (=этилфенилкетон), BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
22. хлорацетон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
23. ацетамид, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
24. гуанин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
25. цитозин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
26. тимин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
27. креатинин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
28. тетразол, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
29. циклопентанон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
30. 2-гидроксипиридин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
31. 1H-изоиндол, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
32. 1H-1,2,3-триазол, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, газ
33. ацетон, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
34. бутанон, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
35. ацетилацетон, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
36. 2-пентанон, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
37. 1-фенил-1-пропанон (=этилфенилкетон), BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
38. хлорацетон, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
39. ацетамид, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
40. гуанин, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
41. цитозин, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
42. тимин, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
43. креатинин, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
44. тетразол, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
45. циклопентанон, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
46. 2-гидроксипиридин, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
47. 1H-изоиндол, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
48. 1H-1,2,3-триазол, BP86/6-311G(d), D3BJ, газ
49. ацетон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
50. бутанон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
51. ацетилацетон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
52. 2-пентанон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
53. 1-фенил-1-пропанон (=этилфенилкетон), BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
54. хлорацетон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
55. ацетамид, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
56. гуанин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
57. цитозин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
58. тимин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
59. креатинин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
60. тетразол, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
61. циклопентанон, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
62. 2-гидроксипиридин, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
63. 1H-изоиндол, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
64. 1H-1,2,3-триазол, BLYP/DEF2-TZVP, D3BJ, вода
65. ацетон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
66. бутанон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
67. ацетилацетон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
68. 2-пентанон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
69. 1-фенил-1-пропанон (=этилфенилкетон), BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
70. хлорацетон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
71. ацетамид, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
72. гуанин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
73. цитозин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
74. тимин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
75. креатинин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
76. тетразол, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
77. циклопентанон, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
78. 2-гидроксипиридин, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
79. 1H-изоиндол, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
80. 1H-1,2,3-триазол, BLYP/DEF2-SVP, D3BJ, вода
81. ацетон, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
82. бутанон, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
83. ацетилацетон, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
84. 2-пентанон, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
85. 1-фенил-1-пропанон (=этилфенилкетон), BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
86. хлорацетон, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
87. ацетамид, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
88. гуанин, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
89. цитозин, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
90. тимин, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
91. креатинин, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
92. тетразол, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
93. циклопентанон, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
94. 2-гидроксипиридин, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
95. 1H-изоиндол, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода
96. 1H-1,2,3-триазол, BP86/6-311G(d), D3BJ, вода