

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №8. Графічна побудова хімічних структур за допомогою візуалізатора GaussView

Мета: Вивчити основи графічного моделювання хімічних структур за допомогою візуалізатора програми квантово-хімічних розрахунків Gaussian – програми GaussView.

1 Теоретичні відомості до лабораторної роботи наведені у лекції 9.

2. Порядок виконання роботи

Виконати наступне завдання згідно з номером свого варіанту.

За допомогою програми GaussView створити молекулу заданої нижче речовини та визначити її геометричні параметри (див. лекцію 9).

- | | |
|----------------------------------|---------------------------------------|
| 1. Етилбензол. | 11. Фруктоза. |
| 2. Кофеїн. | 12. Глюкоза. |
| 3. Оцтова кислота. | 13. 1-метил-2-етилбензол. |
| 4. 2-ацетилоксибензойна кислота. | 14. Гліцин (). |
| 5. Тетранітрометан. | 15. 2,2-динітроетиленбензол. |
| 6. 1,1 дифторетилен. | 16. 1,2,3-тринітроксипропан. |
| 7. Гідроксид амонію. | 17. Метилнітрамін. |
| 8. Адреналін. | 18. Сірчана кислота (серная кислота). |
| 9. Гексанітроетан. | 19. Титанат барію. |
| 10. Нітроетан. | 20. Орто-, мета- і пара-нітроанілін. |

Контрольні питання

1. Призначення програми GaussView.
2. Інтерфейс програми та меню інструментів.
3. Способи створення молекул в GaussView.
4. Визначення геометричних параметрів молекул в GaussView.