**ТООЦООЛЛЫН ХИМИ ХИЧЭЭЛИЙН УЛИРЛЫН ШАЛГАЛТ**

**2022-2023 ОНЫ ХИЧЭЭЛИЙН ЖИЛ**

**Нийт 30 оноо 90 минут**

Нэр:\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Оюутны код:\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Этаны молекул метил радикал үүсгэн задардаг.

C2H6 → 2•CH3

1. Эх болон бүтээгдэхүүн бодисын хувьд геометр оптимизац хийж Хүснэгт 1-ийг бөглөнө үү. (5 оноо)

Хүснэгт 1. Геометр оптимизацын үр дүн

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  | Холбооны урт /С-С/ | Холбооны урт /С-H/ | Холбооны өнцөг /H-С-H/ | Холбооны өнцөг /H-С-C/ | Торзион өнцөг  /H-C-C-H/ |
|  | Эх бодис |  |  |  |  |  |
|  | Бүтээгдэхүүн |  |  |  |  |  |

Сонгосон арга....................., Сонгосон базис сет/функц.......................

Геометр оптимизацын үндсэн зарчмыг тайлбарлана уу. (2 оноо)

|  |
| --- |
|  |

1. Хартри-Фок, нягтын функционал онол, хагас эмпирик аргаас 2-ыг нь сонгож, эх болон бүтээгдэхүүн бодисын нийт энергийг тооцоолж, этаны молекул дахь С-С холбооны задралын энергийг олно уу. Тооцооны дүнг Хүснэгт 2-т бичнэ үү. Энэ холбооны задралын энергийн туршилтын утга 377 0.4 кЖ⋅моль-1 болно.

(10 оноо)

Хүснэгт 2. Тооцооллын үр дүн, [кЖ⋅моль-1]

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № | Арга | Сонгосон базис сет/функц | Эх бодисын нийт энерги | Бүтээгдэхүүн бодисын нийт энерги | Холбооны задралын энерги |
|  |  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |  |

Аль арга нь туршилтын утгатай илүү тохирч байна вэ? Энэ аргын онолын үндэслэл нь юу вэ?

|  |
| --- |
|  |

Ямар базис сет/функционалыг сонгосон бэ? Яагаад? Сонгосон базис сетийн бүтцийг тайлбарлана уу.

|  |
| --- |
|  |

1. Этаны молекул, анион, катионоос 2-ыг нь сонгож, энергийн бодолт хийж, бүсийн өргөн, диполийн момент, нийт энергийн утгыг Хүснэгт 3-т бичнэ үү. (10 оноо)

Хүснэгт 3. Тооцооллын үр дүн, [кЖ⋅моль-1]

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| № | Молекул / Ион | Бүсийн өргөн | Диполийн момент | Нийт энерги |
|  |  |  |  |  |
|  |  |  |  |  |

1. Аль молекул, ионы бүсийн өргөн их байсан бэ? Бүсийн өргөний утгаар молекул/ионы ямар шинж чанарыг тайлбарлах боломжтой вэ?

|  |
| --- |
|  |

1. Диполийн момент нь адил байсан уу? Яагаад?

|  |
| --- |
|  |

1. Электростатик потенциалын гадаргуу (цэнэгийн тархалтын диаграмм)-аас урвалын идэвхтэй төв, урвалд орох чадварын талаар ямар дүгнэлт хийж болох вэ?

|  |
| --- |
|  |

Амжилт хүсье!