ТООЦООЛЛЫН ХИМИ Лаборатори №1

**МОЛЕКУЛЫН ГЕОМЕТР ОПТИМИЗАЦИ ХИЙХ**

***Мэдлэг, чадвар:*** Gaussian программд оролтын файл бэлтгэн геометр оптимизаци хийдэг болно. Геометр оптимизаци хийсэн гаралтын файлаас мэдээллийг ялгах чадвартай болно. Вошийн диаграмм байгуулах.

***Удирдамж:***

1. B3LYP/6-311G(D,P) базис сет ашиглаж янз бүрийн геометр бүтцийн хувьд энергийн тооцоолол хийнэ.
2. Оптимацийн тооцоололыг мөн адил B3LYP/6-311G(D,P) базис сет ашиглаж хийнэ.
3. Тооцоолол хийгдсэн .chk файлуудын нээж **Edit**>**MOs,** цэс рүү ороход гарч ирсэн шинэ цонхноос орбиталын энергийн утгуудыг тэмдэглэж авна.
4. Шинэ цонхны *Visualize* цэс рүү орж дүүргэгдсэн (a1 буюу хэтэрхий багаас бусад) болон дүүргэгдээгүй хамгийн доод орбиталуудыг сонгож update хийж идэвхжүүлнэ.
5. *Isovalue* -ийн утгыг 0.07 тохируулж харагдацыг сайжруулна.
6. Дэвсгэр өнгө дээр хулганы туслах товчийг дарж туслах цэсээс *Display format* сонгож *Surface* дээр хагас нэвтэрсэн орбиталын дүрслэлийг үүсгэнэ.
7. Орбиталын дүрслэлийг скрийншот хийж авна.
8. Янз бүрийн геометр бүтцийн хувьд орбиталуудын харьцуулалтуудыг хийж тайлан бичиж дүгнэлт гаргана.

|  |  |
| --- | --- |
| Баярдаваа.Лув | H2O |
| Баярмаа.Энх | H2S |
| Бэрцэцэг.Сан | H2Se |
| Мөнхнаран.Бул | CO2 |
| Намуун.Чин | NO2 |
| Одгэрэл.Бат | SO2 |
| Халиун.Бол | H2S |

|  |
| --- |
| Нэр\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Огноо \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  Сэдэв\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ |

Лабораторын өмнөх тайлангийн хуудас

Зорилго:

1. H2Be молекулын орбиталыг зурна уу.
2. \_\_\_\_\_молекулын орбиталыг зурна уу.
3. Өгөгдсөн молекул ямар эрлийзжилтэнд орох боломжтой вэ?

Тооцоонд хэрэглэгдсэн аргын тухай мэдээлэл:

Үр дүн, хэлэлцүүлэг:

* Холбооны уртын өөрчлөлт
* Өнцгийн өөрчлөлт
* H2Be Вошийн диаграмм байгуулах

Дүгнэлт: