ТООЦООЛЛЫН ХИМИ Лаборатори №2

**ПОТЕНЦИАЛ ЭНЕРГИЙН ГАДАРГУУ**

***Мэдлэг, чадвар:*** ПЭГ-ыг байгуулах, байгуулсан ПЭГ-аас тогтвортой цэгүүдийг тодорхойлох, ПЭГ-ийг тайлбарлах чадвартай чадвартай болно.

***Удирдамж:***

1. B3LYP/6-311G(D,P) базис сет ашиглаж янз бүрийн геометр бүтцийн хувьд энергийн тооцоолол хийнэ. Холбооны урт 0-ээс оптимал утгаас хоёр дахин их болтол өнцгийг 0°-с 360° хүртэл өөрчлиж энергийн тооцоололыг гүйцэтгэнэ.
2. Оптимацийн тооцоололыг мөн адил B3LYP/6-311G(D,P) базис сет ашиглаж хийнэ.
3. Холбооны урт болон өнцгийн холбогдолоор ПЭГ-ыг байгуулна.
4. Глобал болон локал хамгийн их болон бага утга, суудлын цэгүүдийг тодорхойлно.
5. Rigid scan болон Relax scan аргийг хэрэглэж өмнөх үйлдлийг давтаж гүйцэтгэнэ.
6. Янз бүрийн аргаар хийсэн тооцоон үр дүнгүүдийн харьцуулалтуудыг хийж тайлан бичиж дүгнэлт гаргана.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Молекул | Үелэх системийн бүлгийн дугаар |
| Баярдаваа.Лув | X2O | 1 |
| Баярмаа.Энх | XH2 | 2 |
| Бэрцэцэг.Сан | X2O3 | 13 |
| Мөнхнаран.Бул | XO2 | 14 |
| Намуун.Чин | X2O3 | 15 |
| Одгэрэл.Бат | XO2 | 16 |
| Халиун.Бол | XH2 | 2 |

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

Лабораторын тайлангийн хуудас

Зорилго:

Тооцоонд хэрэглэгдсэн аргын тухай мэдээлэл:

Үр дүн, хэлэлцүүлэг:

* Холбооны уртын өөрчлөлт, Өнцгийн өөрчлөлт, Тооцоолсон энергийн хамааралаар 3D график байруулна.
* Глобал болон локал хамгийн их болон бага утга суудлын цэгүүдийг тодорхойлсон утгуудаар хүснэгт график байгуулж дүгнэлт гаргана.
* Тооцоололд хэрэглэсэн гурван аргыг хооронд нь харьцуулна.

Дүгнэлт: