ТООЦООЛЛЫН ХИМИ Лаборатори №4

**MОЛЕКУЛ ДАХЬ ХАЛАГЧ БҮЛГИЙН НӨЛӨӨ**

***Мэдлэг, чадвар:*** Энергийн тооцоололоос үндэслэн молекул дахь халагч бүлгийн нөлөөг тайлбарлах чадвартай болно.

*Даалгавар. Молекулын ямар нэг атом янз бүрийн радикалаар халагдсан үеийн энергийн тооцоо*

1. Өгөгдсөн молекул болон хоёр янзын халагч бүлгийг сонгон авч геометр оптимизаци хийж, энергийг тооцоолно уу.
2. Mета болон пара байрлалд халагч бүлгүүд байгаа тохиолдолд геометр оптимизаци хийж, энергийг тооцоолно уу.

Үүнд:

* Өгөгдсөн молекулын байгуулалтын томьёог GaussView программд оруулан, оролтын файл бэлтгэнэ үү.
* HF/STO-3G, HF/6-31G аргаар энергийн тооцоог хийнэ үү.
* Бүсийн өргөн тооцоолно уу.
* Диполийн момент, цэнэгийн тархалтын диаграмм байгуулна уу.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № | **ID** | **Молекул** | **Халагч бүлэг** |
| 1 | Баярдаваа.Лув | Бензол | Сульфо, гидроксил, метил, карбоксил, оксо |
| 2 | Баярмаа.Энх | Нафталин | Хлор, гидроксил, етил, карбоксил, оксо |
| 3 | Бэрцэцэг.Сан | Бензол | Бром, гидроксил, метил, карбоксил, оксо |
| 4 | Мөнхнаран.Бул | Нафталин | Нитро, гидроксил, етил, карбоксил, оксо |
| 5 | Намуун.Чин | Бензол | Хлор, гидроксил, метил, карбоксил, оксо |
| 6 | Одгэрэл.Бат | Нафталин | Бром, гидроксил, етил, карбоксил, оксо |
| 7 | Халиун.Бол | Бензол | Нитро, гидроксил, метил, карбоксил, оксо |

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

Лабораторын тайлангийн хуудас

Зорилго:

Тооцоонд хэрэглэгдсэн аргын тухай мэдээлэл:

Үр дүн, хэлэлцүүлэг:

*Даалгавар. Органик нэгдэлийн химийн шинж чанар*

* Тооцооны дүнгээс нийт энерги, диполийн момент, HOMO, LUMO түвшний энергийг хүснэгтээр илэрхийлнэ үү.
* Бүсийн өргөн энергийг тооцоолно уу.
* Цэнэгийн тархалтын диаграммыг байгуулж харьцуулсан дүгнэлт гарган уу.
* Тооцооны үр дүнг онолын үндэслэлтэй тайлбарлан дүгнэлт хийнэ үү.

Дүгнэлт: