ТООЦООЛЛЫН ХИМИ Лаборатори №5

**БОДИСЫН БҮТЭЦ ТОГТООХ СУДАЛГААНД ТООЦООЛОЛ ХИМИЙГ ХЭРЭГЛЭХ НЬ**

***Мэдлэг, чадвар:*** Бодисын бүтцийг тогтооход NMR cпектрын тооцоололыг хэрэглэх чадвартай болно.

Цөмийн соронзон резнонас нь орчин үеийн химийн судалгаанд хэрэглэгддэг. Цаг хугацаа, өртөг шаардсан шинжилгээ тул хийлгэх эсэх шийдвэр гаргахад шаардлага гардаг.

Жич: Монгол улсын хэмжээнд ширээний 1-2 л резнонатор байдаг бөгөөд ихэвчлэн хамтарсан судалгаа хийгддэг өндөр хөгжилтэй орнуудад явуулж энэхүү шинжилгээг хийдэг ч гаалиар гаргах асуудал зарим тохиолдолд хүндрэлтэй байдаг.

*Даалгавар. Молекулын цөмийн соронзон резнонасын тооцоолол*

1. Багшийн өгсөн эх бодсуудын харилцан үйлчлэлээр үүсэх бүтээгдэхүүн бодсуудыг таамаглаж бичих
2. Өгсөн урвалын хувьд эх болон бүтээгдэхүүн бодисын молекулын байгуулалтын томьёог GaussView программд оруулан, оролтын файл бэлтгэнэ үү.
3. HF/6-31G+ аргаар геометр оптимизаци хийж, энергийг тооцоолно уу.
4. Диполийн моментын үр дүнд үндэслэж уусгагчийн сонгон авна.
5. Сонгон авсан уусгагчийн орчинд “NMR” тооцоолол хийнэ.

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

Лабораторын тайлангийн хуудас

Зорилго:

Тооцоонд хэрэглэгдсэн аргын тухай мэдээлэл:

Үр дүн, хэлэлцүүлэг:

*Даалгавар. Бодисын бүтэц тогтоох судалгаа*

* Эх болон бүтээгдэхүүн бодисын молекулын байгуулалтын томъёог таамаглаж бичих, ашигласан эх сурвалжийг дурьдах
* Тооцоолсон спектрүүдийг харьцуулах
* Спектрийн харьцуулалтанд үндэслэн хольцийн явагдах урвалыг таамаглах боломжтой эсэхийг тодорхойлох

Дүгнэлт: