ТООЦООЛЛЫН ХИМИ Лаборатори №8

**ШИЛЖИЛТИЙН ТӨЛӨВ БА УРВАЛЫН ДОТООД КООРДИНАТЫН СУДАЛГАА**

***Мэдлэг, чадвар:*** Химийн урвалын явц дах энергийн өөрчлөлтийн диаграмм байгуулах чадвартай болно.

**SiH2 + H2 = SiH4**

*Даалгавар. Шилжилтийн төлөвийн тооцоолол*

1. Өгсөн урвалын эх болон бүтээгдэхүүн бодисын молекулын байгуулалтын томьёог GaussView программд оруулан, оролтын файл бэлтгэнэ үү.
2. Эх болон бүтээгдэхүүн бодисын молекулын хувьд геометр оптимизац хийнэ үү.
3. Оптимал геометрыг ашиглаж шилжилтийн төлөвийг (TS) тооцоолно уу.

* Эх бодсуудын байгуулалтын томьёо дээр бүтээгдэхүүн бодисын байгуулалтын томьёог **add to Molecule group** коммандаар хийнэ.
* Тооцоололыг **QST2** аргаар хийнэ.

1. Шилжилтийн төлөвийг ашиглаж өгсөн урвалын явц дах энергийн өөрчлөлтийн диаграмм байгуулах тооцоолол (IRC) хийлгэнэ үү.

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

Лабораторын тайлангийн хуудас

Зорилго:

Тооцоонд хэрэглэгдсэн аргын тухай мэдээлэл:

Үр дүн, хэлэлцүүлэг:

*Даалгавар. Бодисын бүтэц тогтоох судалгаа*

* Оролт болон гаралтын молекулын байгуулалтыг зургийн эмхэтгэнэ үү.
* Шилтжилтийн төлөвийн молекулын байгуулалтыг оруулна уу.
* Шилжилтийн төлөвийг ашиглаж өгсөн урвалын явц дах энергийн өөрчлөлтийн диаграмм байгуулна уу.

Дүгнэлт:

* Энергийн өөрчлөлтийн диаграммаас дүгнэлт гарган уу.
* Туршилтыг хийхэд гарсан бэрхшээл хэрхэн шийдснээ бичнэ үү.