

# Індивідуальні завдання для комп'ютерного роздрахунку

Виконання індивідуального завдання, передбаченого навчальним планом, мають на меті набуття студентами уміння та навичок опанувати та застосовувати застосовувати програмні пакети для здійснення квантово-механічних обчислень.

В якості рекомендації для індивідуального завдання студентам надається перелік сполук які для комп'ютерного розрахунку в програмі Gaussian.

- 1) Розрахуйте структуру та властивостей молекули  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_4$ ,  $\text{CO}_2$ . За розрахованими даними коливального спектра визначити енергію дисоціації.
- 2) Дослідіть залежність повної енергії молекули гідразину  $\text{N}_2\text{H}_4$  від кута внутрішнього обертання і вкажіть для неї найбільш стійку конфігурацію.
- 3) Обчисліть величину переносу заряду від атома азоту до молекули  $\text{BF}_3$ . Яка частина заряду локалізована на атомах бору і фтору?
- 4) Обчисліть силову константу та енергію нульових коливань для молекули  $\text{HI}$ .
- 5) Побудуйте графік потенціальної функції  $U(\varphi)$  у молекулі 1,2-діброметану:

