

Індивідуальні завдання для комп'ютерного розрахунку

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 H_2O , CH_4 , CO_2 . За розрахованими даними коливального спектра визначити енергію дисоціації.
- 2) Дослідіть залежність повної енергії молекули гідрозину N_2H_4 від кута внутрішнього обертання і вкажіть для неї найбільш стійку конфігурацію.
- 3) Обчисліть величину переносу заряду від атома азоту до молекули BF_3 . Яка частина заряду локалізована на атомах бору і фтору?
- 4) Обчисліть силову константу та енергію нульових коливань для молекули HI .
- 5) Побудуйте графік потенціальної функції $U(\varphi)$ у молекулі 1,2-диброметану:

