

Розрахункові завдання з квантової хімії в ORCA

Завдання 1. Оптимізація геометрії та визначення дипольних моментів молекул

Виконати оптимізацію геометрії молекули методом HF з базисним набором cc-pVDZ. Після оптимізації дипольні моменти молекул.

1. аміаку NH_3 ;
2. вуглекислого газу CO_2 ;
3. монооксиду вуглецю CO .

Очікувані результати:

- Результати записані в таблицю.

Завдання 2. Розрахунок УФ-спектру формальдегіду методом EOM-CCSD

Виконати розрахунок збуджених електронних станів молекули H_2CO (формальдегід) методом EOM-CCSD, використовуючи попередньо оптимізовану геометрію. Визначити положення смуг в УФ-видимому спектрі.

Очікувані результати:

- Оптимізована геометрія молекули.
- Енергії збуджених станів (у eV).
- Осциляторні сили.

Завдання 3. Оптимізація та розрахунок ІЧ-спектрів для молекули ацетилену

Провести повну геометричну оптимізацію молекули C_2H_2 методом HF, а також розрахувати її ІЧ-спектр.

Очікувані результати:

- Оптимізована геометрія молекули.
- Визначені частоти ІЧ-переходів (у cm^{-1}) та нм та інтенсивності ІЧ-переходів.
- Результати записані в таблицю. Наведений спектр у вигляді графіка.