

# 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  $\text{NH}_3$ ;
2. вуглекислого газу  $\text{CO}_2$ ;
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  $\text{H}_2\text{CO}$  (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 ( $\text{у см}^{-1}$ ) та нм та інтенсивності ІЧ-переходів.
- Результати записані в таблицю. Наведений спектр у вигляді графіка.