

Задание для практической и самостоятельной работы №1

Используя программу Gaussview построить геометрическую конфигурацию молекулы воды ( $H_2O$ ) и молекулы димера воды ( $H_2O + H_2O$ ) с учетом группы симметрии.

Используя программу Gaussian с применением методов (HF, B3LYP, MP2) и базисного набора 6-311+G (d, p) рассчитать: оптимальную конфигурацию, колебательные частоты, интенсивности инфракрасного поглощения света, интенсивности комбинационного рассеяния света.

Для димера воды дополнительно вычислить энергию водородной связи в единицах (кДж/моль).

Полученные в результате расчета параметры внести в таблицы:

Таблица 1. Геометрические параметры молекулы воды (метод HF базис 6-311+G (d, p))

Геометрический параметр (длина связи, угол между связями, двугранный угол)	Значение (длина в ангстремах, угол в градусах)

Таблица 2. Геометрические параметры молекулы димер воды (метод HF базис 6-311+G (d, p))

Геометрический параметр (длина связи, угол между связями, двугранный угол)	Значение (длина в ангстремах, угол в градусах)

Таблица 3. Колебательный спектр молекулы воды (метод HF базис 6-311+G (d, p))

Номер колебания	Тип симметрии колебания	Колебательное волновое число ( $cm^{-1}$ )	Интенсивность инфракрасного поглощения света	Интенсивность комбинационного рассеяния света

Таблица 4. Колебательный спектр молекулы димер воды (метод HF базис 6-311+G (d, p))

Номер колебания	Тип симметрии колебания	Колебательное волновое число ( $cm^{-1}$ )	Интенсивность инфракрасного поглощения света	Интенсивность комбинационного рассеяния света

Таблица 5. Энергетические параметры молекул воды и димера воды (метод HF базис 6-311+G (d, p))

Молекула	Полная энергия в ед. (Hartree)	Энергия межмолекулярного взаимодействия (водородной связи в димере воды) в ед. (кДж/моль)
$H_2O$		-
$(H_2O)+(H_2O)$		

Аналогичные таблицы заполнить и для других методов расчета.