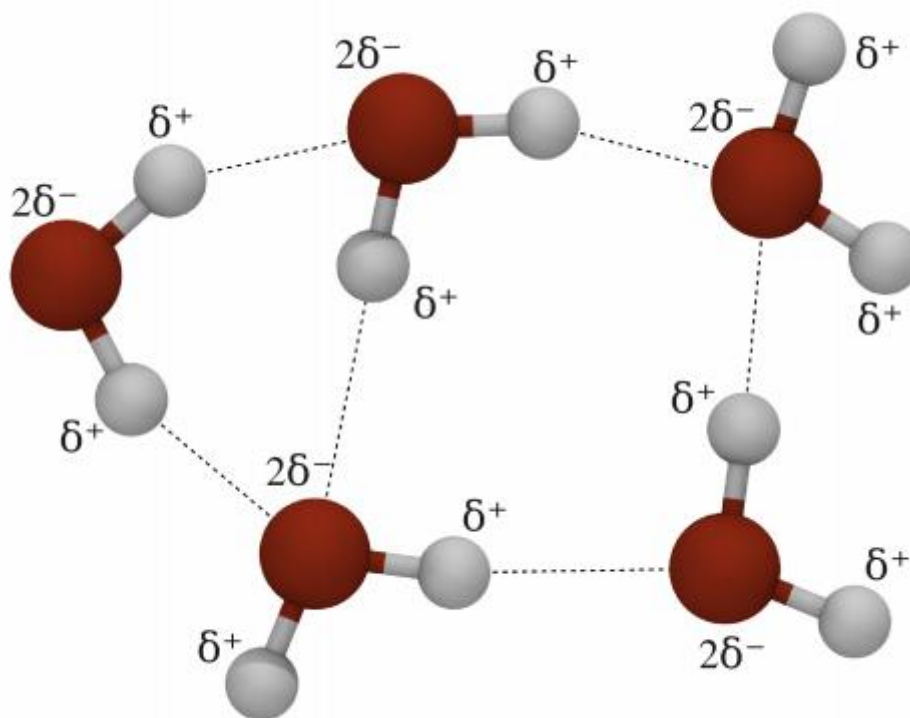


## Задание №2

Используя программу Gaussview построить геометрическую конфигурацию молекулярной модели жидкой воды, которая показана на рис.1 (при построении модели длины водородных связей должны находиться в пределах 1.8 -2.1 ангстрема).

Рис.1 Молекулярная модель жидкой воды



Используя программу Gaussian с применением методов V3LYP и базисного набора 6-311+G (d, p) рассчитать: оптимальную конфигурацию, колебательные частоты, интенсивности инфракрасного поглощения света, интенсивности комбинационного рассеяния света.

Вычислить среднюю энергию одной водородной связи в единицах (кДж/моль).

Полученные в результате расчета параметры внести в таблицы:

Таблица 1. Геометрические параметры молекулярной модели жидкой воды (метод V3LYP базис 6-311+G (d, p))

| Геометрический параметр (длина связи, угол между связями, двухгранный угол) | Значение (длина в ангстремах, угол в градусах) |
|---|--|
|   |  |
|   |  |

Таблица 2. Колебательный спектр молекулярной модели жидкой воды (метод V3LYP базис 6-311+G (d, p))

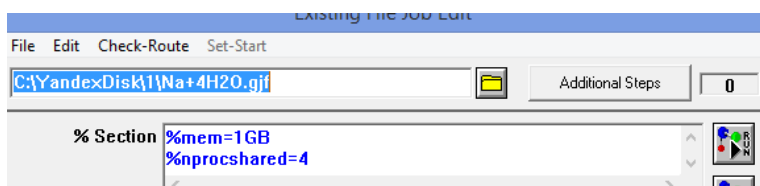
| Номер колебания | Тип симметрии колебания | Колебательное волновое число (см <sup>-1</sup> ) | Интенсивность инфракрасного поглощения света | Интенсивность комбинационного рассеяния света |
|-----------------|-------------------------|--|--|---|
|                 |                         |  |  |   |
|                 |                         |  |  |   |

Таблица 3. Энергетические параметры молекулы воды и молекулярной модели жидкой воды (метод V3LYP базис 6-311+G (d, p))

| Молекула            | Полная энергия в ед. (Hartree) | Средняя энергия одной водородной связи в модели жидкой воды в ед. (кДж/моль) |
|---------------------|--------------------------------|--|
| H <sub>2</sub> O    |                                | -  |
| 5(H <sub>2</sub> O) |                                |  |

Примечание.

При расчетах в Программе Gaussian, для увеличения скорости расчета в файле надо указать сколько оперативной памяти использовать (максимум 1 гигабайт) и сколько процессоров (включая виртуальных) можно использовать (максимум можно использовать четыре процессора)



Посмотреть сколько у вас процессоров можно открыв (Панель управления-Диспетчер устройств-Процессоры).

