

Задание №5

Используя программу Gaussview построить геометрические конфигурации молекулярных моделей азотистых оснований, которые показаны на рис.1

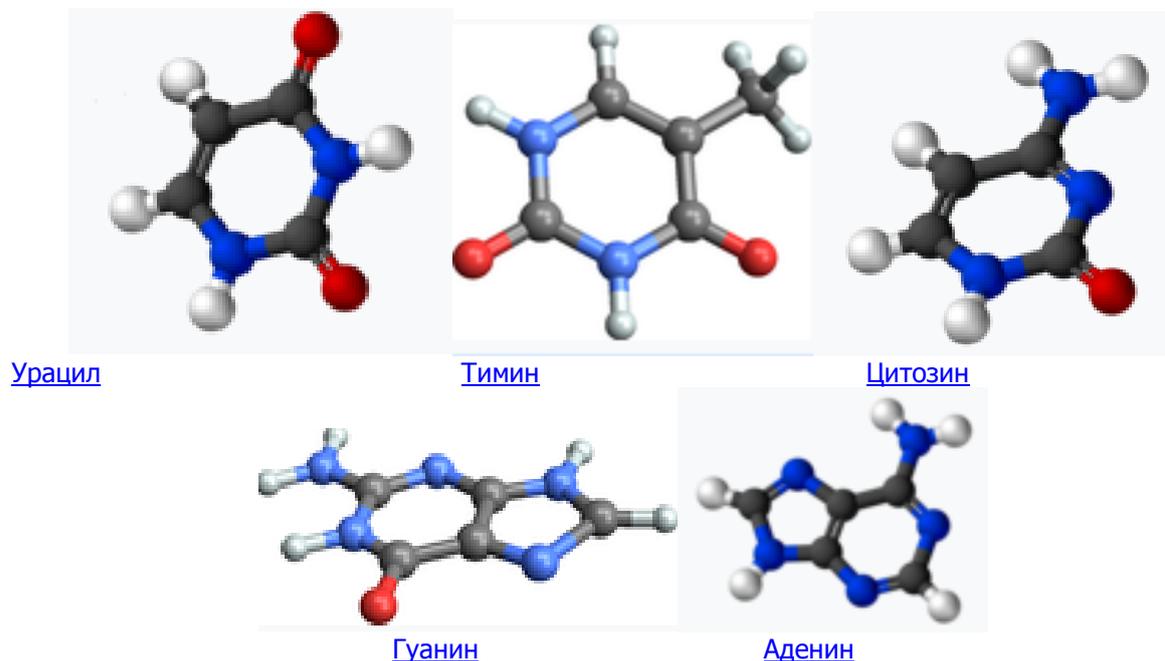


Рис.1 Молекулярные модели азотистых оснований (для проверки построенной модели можно открыть гиперссылку нажав на названии аминокислоты, в следующем открытом окне надо выбрать рисунок с надписью 3D, в следующем открытом окне нажав левой клавишей мыши на рисунке можно его вращать в пространстве).

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

Полученные в результате расчета параметры внести в таблицы:

Таблица 1. Геометрические параметры молекулярной модели жидкой воды (метод B3LYP 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 B3LYP базис 6-311+G (d, p))

Номер колебания	Тип симметрии колебания	Колебательное волновое число (см ⁻¹)	Интенсивность инфракрасного поглощения света	Интенсивность комбинационного рассеяния света