

Задание №7

Используя программу Gaussview построить геометрическую конфигурацию молекулярной модели глицерина, которые показаны на рис.1

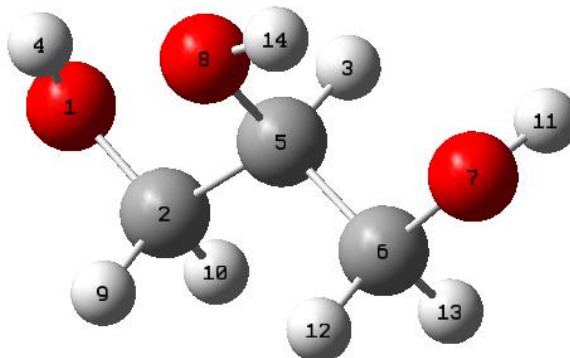


Рис.1 Молекулярные модель глицерина.

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. Рассчитать зависимость энергии молекулы в зависимости от изменения значения двухгранного угла (угол меняется 36 раз по 10 градусов (всего 360 градусов)), который задается номерами атомов (рис.1) (2, 5, 6, 7). Построить график зависимости энергии от изменения данного двухгранного угла.

Полученные в результате расчета параметры внести в таблицы:

Таблица 1. Геометрические параметры глицерина (метод B3LYP базис 6-311+G (d, p))

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

Таблица 2. Колебательный спектр глицерина (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
Глицерин				

Таблица 3. Зависимости энергии молекулы глицерина от изменения двухгранного угла с номерами атомов (2, 5, 6, 7) (метод B3LYP базис 6-311+G (d, p))

Значение двухгранного угла (градусы)	Полная энергия в ед. (Hartree)
	-
	-
	-