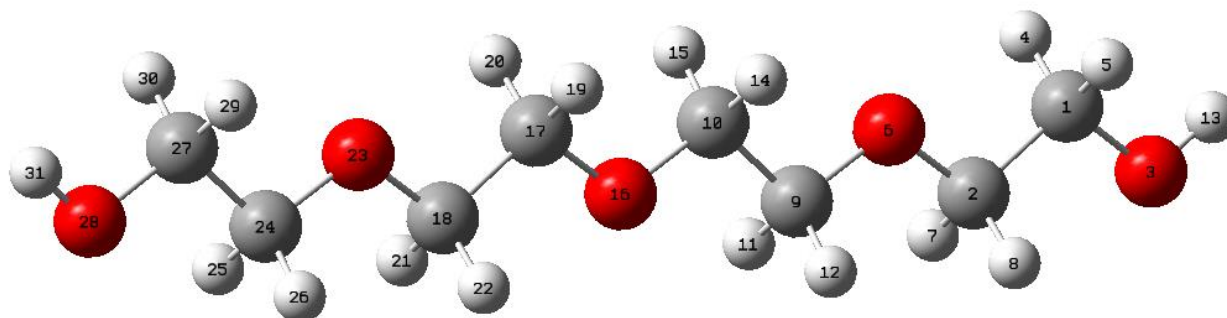
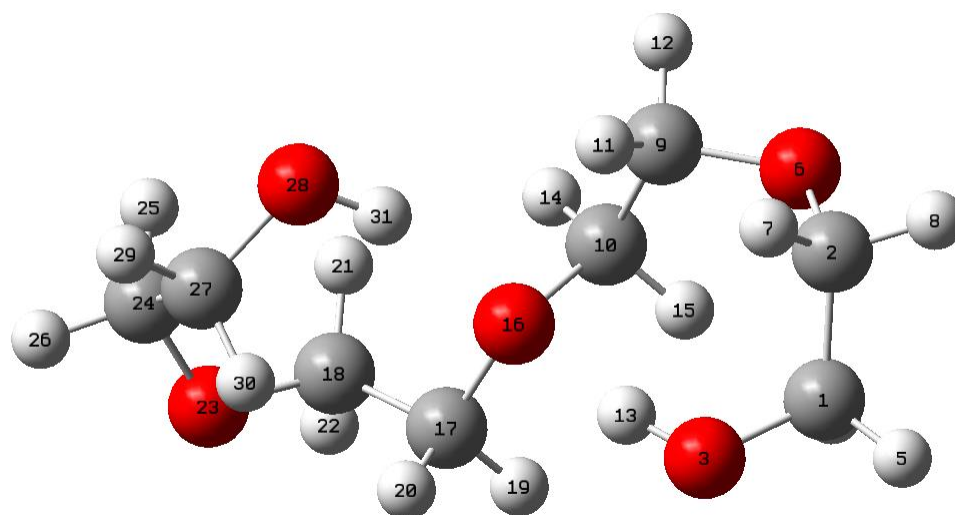


Задание №8 и №9

Используя программу Gaussview построить геометрическую конфигурацию молекулярной модели полиэтиленгликоля (PEG 200) в транс и гош конформациях , которые показаны на рис.1



транс конформация



гош конформация

Рис.1 Молекулярные модель PEG 200 в двух конформаиях транс и гош

Используя программу Gaussian с применением методов B3LYP и базисного набора 6-31G (d) 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 PEG200 (метод B3LYP базис 6-31G (d))

Геометрический параметр (длина связи, угол между связями, двухгранный угол)	Значение (длина в ангстремах, угол в градусах)
PEG200 (транс)	
PEG200 (гош)	

Таблица 2. Колебательный спектр PEG200 (метод B3LYP базис 6-31G (d))

Номер колебания	Тип симметрии колебания	Колебательное волновое число (см <sup>-1</sup> )	Интенсивность инфракрасного поглощения света	Интенсивность комбинационного рассеяния света
PEG200 (транс)				
PEG200 (гош)				

Таблица 3. Энергетические параметры PEG200 в двух разных конформациях транс и гош.

Конформация	Полная энергия в ед. (Hartree)
транс	
гош	