

Seminar 10: Gaussian GaussView

Rezultatele obtinute la fiecare punct se pun intr-un fisier word (nume_practic10.doc).

1. Completati tabelul:

	Unghiul initial (.gif file)	Unghiul optimizat (.chk file)	Unghiul-experimental	Legatura initiala (Å) (.gif file)	Legatura optimizata (Å) (.chk file)
H₂O			104,5°		
NH₃			107,3°		
CH₄			109,5°		

Optimizati geometria moleculelor cu Gaussian. Determinati unghiul si lungimea legaturilor folosind GaussView. urmati urmatorii pasi

→ Construiti molecula H₂O.

→ Determinati unghiul H-O-H si lungimea legaturilor O-H inainte de optimizare (.gif).

→ Rulati un calcul (Optimizare) folosind ce metoda si set de baza doriti. Indicati-le !

→ Determinati unghiul H-O-H si lungimea legaturilor O-H dupa optimizare (folosind fisierul de output!).

→ Efectuati aceeasi pasi pentru NH₃ si CH₄

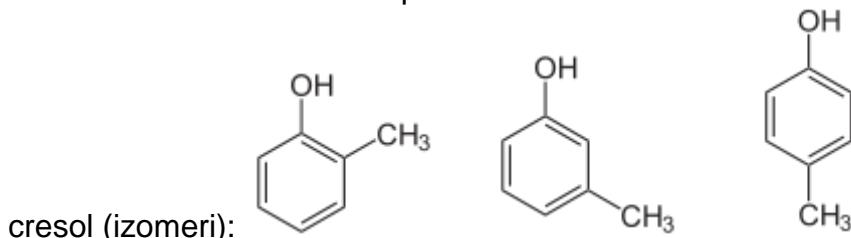
→ Care din valori sunt mai aproape de cele experimentale?

2. Vizualizarea orbitatilor moleculari:

→ Construiti molecula cresol (C₇H₈O)

→ Rulati un calcul un calcul *AM1 single point*.

→ Vizualizati orbitatii moleculari si indicati pozitia orbitalilor HOMO si LUMO.



3. Calcularea freventelor de vibratie si vizualizarea vibratiilor:

→ Efectuati optimizarea geometriei precum si calculul frecventelor de vibratie (Opt+Freq(Raman)) pentru Formaldehida (CH₂O) folosind metoda DFT si setul de baza 6-21G.

→ Deschideti fisierul .log obtinut

→ Vizualizati vibratiile corespunzatoare formaldehydei precum si spectrele IR si Raman.

→ Comparati frecventele calculate cu cele experimentale folosind tabelul urmator:

vibratia	frecventa experimentală (intensitatea)	frecventa calculată (intensitatea)
CH ₂ symm. stretch	2783 (strong)	
CO stretch	1746 (very strong)	
CH ₂ scissors	1500 (strong)	
CH ₂ anti. stretch	2843 (very strong)	
CH ₂ rock	1249 (strong)	
CH ₂ wag	1167 (strong)	