**Όνομα Επώνυμο:** <ΕΙΣΑΓΕΤΕ ΟΝΟΜΑΤΕΠΩΝΥΜΟ>

**Αριθμός Μητρώου:** <ΕΙΣΑΓΕΤΕ ΑΡΙΘΜΟ ΜΗΤΡΩΟΥ >

Οξικό Οξύ

# Μέρος 1. Βελτιστοποίηση Γεωμετρίας και Συχνότητες

Πραγματοποιήστε βελτιστοποίηση γεωμετρίας και υπολογισμό συχνοτήτων για τις διαμορφώσεις Α, Β του οξικού οξέος που σας δίνονται.

**Μέθοδος:** HF/3-21G

## **1.1**. Χαρακτηρισμός Δομών

Συμπληρώστε τον πίνακα με βάση τα αποτελέσματα των υπολογισμών.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Διαμόρφωση | Ενέργεια (hartree) | Αριθμός μιγαδικών (αρνητικών) συχνοτήτων | Είδος στάσιμου σημείου(ελάχιστο, μεταβατική κατασταση) | Εικόνα |
| Α |  |  |  |  |
| Β |  |  |  |  |

Πλήθος Κανονικών Τρόπων Δόνησης: <ΕΙΣΑΓΕΤΕ ΠΛΗΘΟΣ ΔΟΝΗΣΕΩΝ>

## **1.2.** Θερμοχημικά Δεδομένα

Μόνο για τη διαμόρφωση που *δεν* εμφανίζει μιγαδικές (αρνητικές) συχνότητες, συμπληρώστε τις τιμές για τις ακόλουθες θερμοχημικές ποσότητες.

## Διαμόρφωση <επιλέξτε Α,Β >

E + ZPE = hartree

E298 = hartree

H298 = hartree

G298 = hartree

# **Μέρος 2.** Φάσματα Υπερύθρου

Εισάγετε την εικόνα του φάσματος υπερύθρου (ΙR) της διαμόρφωσης που υπολογίσατε στο Μέρος 1, η οποία *δεν εμφανίζει* μιγαδικές (αρνητικές) συχνότητες δόνησης.

## IR Διαμόρφωσης <επιλέξτε Α,Β >

# **Μέρος 3.** Κανονικοί Τρόποι Δόνησης

Καταγράψτε τους κανονικούς τρόπους δόνησης για τη διαμόρφωση που υπολογίσατε στο Μέρος 1, η οποία *δεν εμφανίζει* μιγαδικές (αρνητικές) συχνότητες δόνησης. Στην εικόνα που θα εισάγετε να φαίνονται ευκρινώς τα διανύσματα μετατόπισης των ατόμων.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Δόνηση | Περιγραφή | Συχνότητα (cm–1) | A/A | Εικόνα |
| Τάσης C=O καρβοξυλίου |  |  |  |  |
| Τάσης C–H μεθυλίου | Συμμετρική |  |  |  |
|  | Αντισυμμετρική |  |  |  |
|  | Αντισυμμετρική |  |  |  |
| Τάσης Ο–Η υδροξυλίου |  |  |  |  |

# **Μέρος 4.** Μεταβατική Κατάσταση

Ξεκινώντας από διαμόρφωση Α, μεταβάλετε τη δίεδρη γωνία [3126] σε 150 μοίρες και εκτελέσετε υπολογισμό βελτιστοποίησης γεωμετρίας για τον εντοπισμό *μεταβατικής κατάστασης*.

Σώστε το αρχείο με ονομασία **AceticAcid-A-TS.gjf**

Συμπληρώστε τον πίνακα με βάση τα αποτελέσματα των υπολογισμών.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Μιγαδική (αρνητική) Συχνότητα (cm–1) | Ενέργεια (hartree) | Δίεδρη Γωνία [3126] | Εικόνα |
|  |  |  |  |

# **Μέρος 5.** Παραμόρφωση και Βελτιστοποίηση

Στο Μέρος 1 μετά τις βελτιστοποιήσεις καταλήξατε σε μία διαμόρφωση που εμφανίζει αρνητική συχνότητα. Παραμορφώστε τη δομή ως προς αυτήν τη συχνότητα για να λάβετε νέα αρχική γεωμετρία την οποία θα βελτιστοποιήσετε.

Σώστε το αρχείο με ονομασία **AceticAcid-B-Corr.gjf**

Καταγράψτε τα στοιχεία της νέας βελτιστοποιημένης δομής με βάση τα αποτελέσματα των υπολογισμών.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Ενέργεια (hartree) | Αριθμός μιγαδικών (αρνητικών) συχνοτήτων | Δίεδρη Γωνία [3126] | Εικόνα |
|  |  |  |  |