

ÖDEVDE İSTENİLENLER

1. Molekül Semi Empirical/PM3 seviyesinde optimize edilip ve optimize molekül için UV ve IR spektrumlarını hesaplanacak. (Convergence limit=0.01 veya 0.0001; Iteration limit=50; Optimization Algorithm= Polac Ribiere; RMS gradient=0.01).
2. Optimize edilmiş molekülün 3 boyutlu şekli, IR ve UV spektrumları, moleküler orbital diyagramı ve LUMO+4'ten HOMO-4'e kadar olan 10 orbitalin şekilleri ödevde eklenecek.
3. UV spektrumu log dosyasından osilatör kuvveti en yüksek olan beş geçiş seçilerek, geçiş dalgaboyu, osilatör kuvveti ve geçişin hangi orbitallere ait olduğu belirtilerek yazılacak. (Örnek: Geçiş=H→L+1 Oscillator Strength=0.4495 Geçiş Dalgaboyu=302.5 nm)
4. IR spektrumundan ilk beş normal moda ait titreşim frekans değerleri verilecek.
5. Molekülün deneysel UV λ_{\max} değeri literatürden bulunup hesaplanan değerle karşılaştırılacak ve yorumlanacak.

SON TESLİM TARİHİ : 22.ARALIK.2014