

## Projekty

### Zestaw obowiązkowych składników projektu

- 1 Opis cząsteczki, jej zastosowania, cechy charakterystyczne, ciekawostki, ...
- 2 Badanie zbieżności energii ze wzrostem rozmiaru bazy N (z optymalizacją geometrii) wg poniższego wzoru
- 3 Skan wybranego kąta lub długości wiązania (z wykresem)
- 4 Ładunki na atomach (tabela + rysunek)
- 5 Rysunek HOMO/LUMO lub gęstości elektronowej
- 6 Energia jonizacji (sprawdzenie tw. Koopmansa)
- 7 Widmo IR
- 8 Wnioski

Baza	N	E/j.at.	CPU time
STO-3G			
3-21G			
6-31G			
6-31G(d)			
6-311G(d)			
6-311++G(d,p)			

Projekt, w formie pliku pdf, należy przekazać w Teams/Zadania

### Projekt można rozszerzyć o np.

- Rysunki warstwic lub powierzchni gęstości elektronowej i/lub potencjału elektrostatycznego
- Względna stabilność izomerów, jeśli istnieją
- Widma NMR
- Wpływ rozpuszczalnika na wybrany parametr
- Efekt izotopowy w widmie IR
- Jeśli znane jest ([webbook.nist.gov/chemistry](http://webbook.nist.gov/chemistry)) eksperymentalne widmo IR, interpretacja tego widma przy pomocy widma obliczonego
- Inne wg własnej inicjatywy