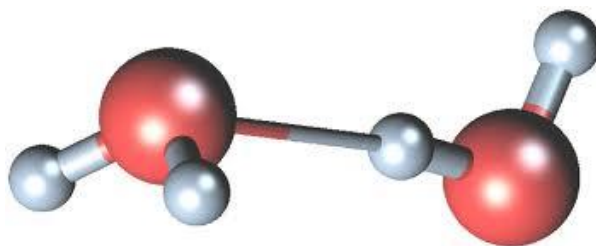


ANALIZA UTICAJA VODONIČNE VEZE NA STRUKTURNE PARAMETRE I VIBRACIONA SVOJSTVA MOLEKULA

Vodonična veza je odgovorna za „neobična“ svojstva vode, kao što su izuzetno visoke temperature topljenja i ključanja, mali koeficijent kompresibilnosti, veliki površinski napon. Pri obrazovanju vodonične veze dolazi do promene strukturnih parametara (dužina veza, uglova između veza) i jačina veza. Ove promene će biti ispitane na dimeru vode. Monomer i dimer vode su optimizovani korišćenjem programskog paketa *Gaussian 03*, na B3LYP/6-31+G(d,p) nivou.



ZADATAK

1. Izabrati sistem koji ćete analizirati: HOH...OH₂, DOD...OD₂, HOH...OD₂, DOD...OH₂.
2. Pomoću programa *Gaussview* proceniti strukturne parametre monomera i dimera vode.
3. Da li prisustvo vodonične veze utiče na strukturne parametre? Objasniti.
4. Izvršiti asignaciju vibracija ispitivanih sistema. Odrediti vibraciju niskofrekventne vibracije (tzv. „vibraciju vodonične veze“) kojom se modifikuje rastojanje između donora i akceptora.
5. Na koji način vodonična veza utiče na vibracije molekula? Na koju vibraciju utiče u najvećoj meri? Da li je ovde reč o crvenom ili plavom pomeraju? Objasniti.
6. Proceniti energiju vodonočne veze:

$$E_{\text{vv}} = E_{\text{dimer}} - 2 \cdot E_{\text{monomer}}$$