

TUGAS KIMIA KOMPUTASI

Dosen : Drs. Iqmal Tahir, M.Si

Email : iqmal@ugm.ac.id

Nama :

Tanggal :

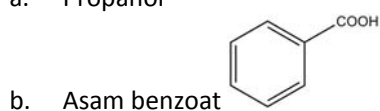
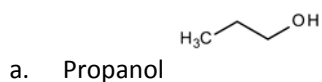
No Mahasiswa :

Harap dikumpulkan di loker Drs. Iqmal Tahir, M.Si (Jurusan Kimia FMIPA UGM).

Soal dan Pertanyaan :

1. Evaluasi spektroskopi vibrasi senyawa dapat dilakukan dengan pendekatan kimia komputasi. Langkah yang dilakukan adalah dengan menggunakan metoda mekanika kuantum. Untuk dua senyawa berikut lakukan pemodelan molekul untuk analisis spektroskopi vibrasional. Pelajari masing-masing gerakan vibrasi yang terjadi pada setiap bilangan gelombang utamanya.

Petunjuk : Buatlah struktur dan lakukan optimasi geometri kedua struktur dengan menggunakan metoda semiempirik MNDO. Lanjutkan perhitungan dengan menggunakan analisis vibrasi/rotasi dan kemudian dievaluasi pada bagian spektrum vibrasional.



Jawaban (gunakan lembar sebaliknya jika kurang) :