

Übungen zur Molekül- und Clusterphysik

SS 2010

3. Übungsblatt

1. **Installieren** Sie das Quantenchemie-Paket GAMESS und machen Sie sich damit vertraut. Die Dokumentation findet Sie unter www.msg.ameslab.gov/GAMESS.

2. H₂ Molekül

- Berechnen Sie die Bindungsenergie des H₂ Moleküls in Abhängigkeit vom Abstand der beiden H-Atome für die beiden niedrigsten Energieeigenwerte. Welcher Zustand ist bindend und welcher antibindend und welche Zustände sind besetzt. Verwenden Sie einen STO-3G Basissatz
- Betrachten Sie das H₂⁻ Molekülion (STO-3G). Welche Orbitale sind in diesem Molekül besetzt und wie ändern sich die Potentialkurven, die Dissoziationsenergie und der Bindungsabstand relativ zum H₂ Molekül.
- Bestimmen Sie die Bindungsenergie des H₂ Moleküls mit den Basissätzen STO-3G, STO-6G, N31-6G und TZV. Optimieren Sie die Geometrie des Moleküls automatisch. Vergleichen Sie mit dem experimentellen Wert.

3. Einfache Moleküle (CO, N₂, O₂, H₂O)

- Berechnen Sie diese einfachen Moleküle mittels eines STO-3G Basissatzes.
 - Zeichnen Sie ein Termschema mit allen Molekülzuständen.
 - Skizzieren Sie jeweils dazu das entsprechende Molekülorbital und markieren sie insbesondere den HOMO und LUMO Zustand.
 - Geben Sie an, welche Orbitale besetzt sind und ob die Orbitale einem bindenden oder antibindenden Zustand zuzuordnen sind.
- Für welche Orbitale ist im Fall des CO die Annahme reiner atomarer Orbitale gerechtfertigt ?
- Vergleichen Sie die CO, N₂ und O₂ HOMO und LUMO Orbitale. Diskutieren Sie die Unterschiede und Gemeinsamkeiten.
- Führen für H₂O eine Optimierung mit 3 verschiedenen Basissätzen ihrer Wahl durch. Wie ändert sich der Winkel des Moleküls mit dem Basissatz und für welchen erhalten Sie das beste Ergebnis.