

Übungen zur Clusterphysik

SS 2012

2. Übungsblatt

1. **Installieren** Sie das Quantenchemie-Paket GAMESS unter einem Betriebssystem ihrer Wahl und machen Sie sich damit vertraut. Die Dokumentation findet Sie z.B. unter www.msg.ameslab.gov/GAMESS.
2. **H₂ Molekül und Molekülionen**
 - (a) 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
 - (b) Betrachten Sie die H₂⁺ und H₂⁻ Molekülion (STO-3G). Welche Orbitale sind in diesem Molekül besetzt und wie ändern sich die Potentialkurven, die Dissoziationsenergien und die Bindungsabstände relativ zum H₂ Molekül.
 - (c) Bestimmen Sie die Bindungsenergien und Abstände H₂, H₂⁺ und H₂⁻ mit den Basissätzen STO-3G, STO-6G, N31-6G und TZV. Optimieren Sie die Geometrie des Moleküls automatisch. Vergleichen Sie mit den experimentellen Werten.
 - (d) Berechnen Sie weiterhin H₂ und H₂⁻ mittels DFT, dem Basissatz N31-6G und mindestens drei verschiedenen Funktionalen (jeweils ein Korrelations-, ein Austausch- und ein gemischtes Funktional) und vergleichen Sie mit den ab initio Ergebnissen. Welche Methode liefert das beste Ergebnis ?