

Übungen zur Clusterphysik

SS 2012

3. Übungsblatt

1. Einfache Moleküle

- (a) Berechnen Sie die geometrische und elektronische Struktur der einfachen Moleküle CO, N₂, O₂, H₂O, CO₂ und O₃ mittels eines STO-3G Basissatzes.
- Zeichnen Sie ein Termschema mit allen Molekülzuständen für die Singulett als auch die Triplettzustände für die Geometrie des Grundzustandes und geben Sie jeweils an, mit wie vielen Elektronen die Zustände besetzt sind.
 - Geben Sie an, welche Orbitale besetzt sind und ob die Orbitale einen bindenden oder antibindenden Zustand zuzuordnen sind.
 - Skizzieren Sie jeweils das HOMO-2, HOMO-1, HOMO und LUMO Molekülorbital.
- (b) Für welche Orbitale ist im Fall des CO die Annahme reiner atomarer Orbitale gerechtfertigt ?
- (c) Führen Sie für H₂O eine Optimierung mit mindestens 3 weiteren, verschiedenen Basissätzen ihrer Wahl durch. Wie ändert sich der Winkel des Moleküls mit dem Basissatz und für welchen erhalten Sie das beste Ergebnis.

2. Stickoxide und DFT

Berechnen Sie die Moleküle N₂, NO, N₂O und NO₂ mittels STO-3G und N31-6G Basissatz mittels Hartree-Fock (HF) sowie mittels Dichtefunktionaltheorie. Verwenden Sie im Fall der DFT mindestens drei verschiedene Funktionale und zwar jeweils ein reines Korrelations- bzw. Austauschfunktional und das B3LYP als gemischtes Funktional. Wie unterscheiden sich die Ergebnisse (Geometrie, Bindungsenergie) ? Vergleichen Sie die Rechenzeiten relativ zu der HF STO-3G Rechnung.

3. Fragmentation

Berechnen Sie die Energie, die benötigt wird um von den Molekülen Methan (CH₄) und CCl₄ jeweils ein H bzw. Cl Atome abzutrennen. Wie viel Energie wird aufgrund der Relaxation des zurückbleibenden Fragmentes frei ?