

Übungen zur Clusterphysik

SS 2013

1. Übungsblatt

1. **Installieren** Sie das Quantenchemie-Paket GAMESS sowie das Grafikprogramm MacMolPlt unter einem Betriebssystem ihrer Wahl und machen Sie sich damit vertraut. Die Dokumentation findet Sie z.B. unter www.msg.ameslab.gov/GAMESS. Berechnen Sie zum Test ein H_2 Molekül.

2. H_2 Molekül und Molekülionen

- (a) Berechnen Sie die Energie des H_2 Moleküls in Abhängigkeit vom Abstand der beiden H-Atome für die beiden Energieeigenwerte. Welcher Zustand ist bindend und welcher antibindend und welche Zustände sind besetzt. Verwenden Sie einen STO-3G Basissatz.
- (b) Betrachten Sie die H_2^+ und H_2^- Molekülion (STO-3G). Welche Orbitale sind in diesen Molekülen besetzt und wie ändern sich die Potentialkurven, die Dissoziationsenergien und die Bindungsabstände relativ zum H_2 Molekül.
- (c) Vergleichen Sie für H_2 eine STO-3G und eine N21-3G Rechnung. Worin unterscheiden sich die beiden Rechnungen ?
- (d) Bestimmen Sie die Bindungsenergien und Abstände von H_2 , H_2^+ und H_2^- mit den Basissätzen STO-3G, STO-6G, N31-6G und TZV. Optimieren Sie die Geometrie des Moleküls automatisch und vergleichen Sie mit den experimentellen Werten.
- (e) Berechnen Sie weiterhin H_2 und H_2^- 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, d.h. welcher Wert für den Abstand und die Bindungsenergie liegt am nächsten an den experimentellen Werten ?