

Praktikum Computational Chemistry

In dieser Übung wird das Wasserstoffmolekülion H_2^+ mittels quantenchemischer Rechnungen mit dem Programm GAMESS untersucht. Kopieren Sie hierzu die Muster-Eingabedatei

`/raid/home/exchange/manthe/uebung11/muster.inp`

auf Ihre Directory. Diese Datei spezifiziert die Position der beiden H-Atome, wobei hier die kartesischen Koordinatenwerte $(0, 0, -R/2)$ und $(0, 0, R/2)$ gewählt wurden. Ersetzen Sie $R/2$ durch den entsprechenden numerischen Wert in Ångström um eine Rechnung mit dieser Struktur durchzuführen. In der Zeile nach der Koordinatenangabe ist, wie bei der letzten Übung, der an diesem Atom zu nutzende Basissatz anzugeben. Dann können Sie die elektronischen Strukturrechnungen genau wie bei der vorangegangenen Übung jetzt für ein Molekül durchführen. Die Gesamtenergie (elektronische Energie incl. Kern-Kern-Abstoßung) wird in der Ausgabe als

FINAL ROHF ENERGY

bezeichnet.

1. Berechnen Sie die elektronische Energie des H_2^+ für den vqz-Basissatz bei verschiedenen H–H-Abständen R . Stellen Sie die Potentialkurve $V(R)$ graphisch dar. Bestimmen Sie graphisch anhand dieser Potentialkurve den Gleichgewichtsabstand R_e (d.h. das Minimum von $V(R)$) und den zugehörigen Energiewert $V(R_e)$. Berechnen Sie die klassische Dissoziationsenergie. Bei welchem Abstand R hat sich der Wert $V(R)$ dem asymptotischen Wert bis auf 0.5 kcal/mol bzw. 0.1 kcal/mol angenähert?
2. Führen Sie nun eine entsprechende Rechnung mit automatischer Strukturoptimierung durch. Dazu muß in der ersten Zeile der Eingabedatei die Parametereinstellung „RUNTYP=energy“ in „RUNTYP=optimize“ geändert werden. Dann führt GAMESS sukzessive Rechnungen bei verschiedenen Strukturen aus und ermittelt iterativ die Minimumsstruktur. Betrachten Sie die Ausgabedatei und entnehmen Sie den ermittelten Gleichgewichtsabstand R_e und den zugehörigen Energiewert $V(R_e)$. Vergleichen Sie mit dem Ergebnis aus Teilaufgabe 1.
3. Bestimmen Sie mit Hilfe der automatischen Strukturoptimierung Gleichgewichtsabstände R_e , Gleichgewichtsenergien $V(R_e)$ und klassischen Dissoziationsenergien für die verschiedenen Basissätze, die in Aufgabenblatt 10 genutzt wurden. Diskutieren Sie die Basissatzabhängigkeit der Ergebnisse. Vergleichen Sie Energiegrößen mit kT .