
Quantenchemie

Übungsblatt 5

1. Generalized Gradient Approximations

Mit der Generalized Gradient Approximation (**GGA**) werden neben der lokalen Ladungsträgerdichte auch Informationen über die räumliche Änderung der Ladungsdichte in der Dichtefunktionaltheorie berücksichtigt. Die DFT-GGA lässt sich ebenfalls zur Abstandsoptimierung und Schwingungsfrequenzberechnung verwenden. Nutzen sie dazu sowohl als Exchange Functional als auch als Correlation Functional die Funktionale von Perdew, Burke and Ernzerhof. Bestimmen sie die optimierten Abstände und die Eigenfrequenz der Stickstoff- und Neondimere unter der Verwendung verschiedener Basissätze. Notieren sie sich ebenfalls die Eigenwerte der einzelnen Orbitale.

2. Hybrid functionals

In der Dichtefunktionaltheorie kann die Austausch- und Korrelationsenergie auch mit einem hybriden Ansatz beschrieben werden, der die Eigenschaften der GGA Funktionale als auch des Hartree-Fock Lösungsansatzes kombiniert. Suchen sie sich ein geeignetes Funktional aus und berechnen sie analog die Eigenschaften aus Aufgabe 1. Vergleichen sie die Ergebnisse (insbesondere die Energiewerte der Orbitale) zu den Werten der LDA und GGA Ansätze. (vgl http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/k_dft.htm)

3. Kohlenstoffkette

Nutzen Sie die Exchange- und Korrelationfunktionale aus Aufgabe 1 zur geometrischen Optimierung der Kohlenstoffkette. Nutzen Sie dazu die Datei `~rohry/QC_uebung_share/uebung5/C3H8.com` als Ausgang und erweitern/beschneiden sie diese. Tragen sie die Energien in Abhängigkeit der Moleküllänge auf. Welche Zusammenhänge sind erkennbar?