

---

## Quantenchemie

### Übungsblatt 6

#### 1. Optische Anregungen

Berechnen sie mit Hilfe von TD-DFT die ersten optischen Anregungen (TD(Nstates=10)) von Wasser.

#### 2. Van-der-Waals-Kräfte

Um bei einem Dichtefunktional die Van-der-Waals-Kräfte zu berücksichtigen, kann die D3 Version der Grimme Dispersion (`EmpiricalDispersion=GD3`) hinzugefügt werden. Berechnen sie für die Dimere die optimierten Bindungslängen (z.B. mit B3LYP, cc-pVQZ).

#### 3. Die Møller-Plesset Korrektur

Hartree-Fock-Rechnungen können durch die Berücksichtigung der Elektronenkorrelation im Rahmen der Møller-Plesset Korrektur verbessert werden. Führen sie wieder eine Abstandsoptimierung der beiden Dimere durch und notieren sie die Zeit der unterschiedlichen verwendeten Basissätze. Verwenden sie dazu die unterschiedlichen MPn-Methoden. (vgl [http://www.gaussian.com/g\\_tech/g\\_ur/k\\_mp.htm](http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/k_mp.htm))