Computer practikum QCB III, Opdracht 6

27 mei 2004

6 Gaussian, dipoolmomenten en water

Opgave 6.1 *Werk rustig de bovenstaande Gaussian-98 instructie door en speel met het programma tot je vertrouwd bent met het interface. Opmerking: het programma verstopt sommige files in* `C:\TEMP`.

Opgave 6.2 *Bereken de bindingsafstand en het dipoolmoment van HF in een Hartree-Fock berekening met een STO-3G basis. Gebruik bij deze opgave het "pop=full"keyword om de MOs in de uitvoer te zien te krijgen.*

Opgave 6.3 *Bekijk de MO coefficiënten in de uitvoer van de vorige berekening. Welke MO is volgens deze berekening de belangrijkste bindende MO? Kloppen de coefficiënten in deze MO met de richting van het dipoolmoment dat je hebt berekend? Vergelijk Werkcollege QCB III, opgaven 12 en 13 voor het LiH molecuul.*

Opgave 6.4 *Optimaliseer de geometrie van H_2O in een HF/STO-3G berekening.*

Opgave 6.5 *Voer een single-point (HF/STO-3G) berekening uit voor H_2O in de lineaire geometrie. Kies de O-H afstand gelijk aan de eerder gevonden waarde. Hoeveel eV kost het om water lineair te maken (1 Hartree = 27.21 eV)?*

Opgave 6.6 *Bereken de energie als functie van de HOH bindingshoek, waarbij je deze hoek in een paar stappen varieert van 180° tot 90°. Maak een plot van deze functie met Matlab.*