# Computer practikum QCB III, Opdracht 8

10 juni 2004

## 8 MO berekeningen, basis sets

**Opgave 8.1** *Bereken de evenwichtsstruktuur (d.w.z. de struktuur met de laagste energie) van $NH_3$ in een Hartree-Fock berekening met het programma Gaussian-98. Doe dit met de optie OPTIMIZE en bekijk de H-N-H bindingshoek en het dipoolmoment. Gebruik eerst een STO-3G basis en een 3-21G basis en constateer dat de optimale H-N-H hoek sterk afhangt van de keuze van de basis. Verzadig nu de basis met s functies op de H-atomen en $s, p$ functies op het N-atoom, d.w.z. voeg meer s en p functies toe tot de totale energie bijna niet meer verandert. Kies hiervoor de basis sets 3-21+G, 6-31G, 6-31+G en 6-31++G. De evenwichtsstruktuur wordt nu bijna vlak (H-N-H hoek bijna* $120°$*). Voeg dan polarizatie-functies toe (d functies op N en p functies op H) met behulp van de Gaussian basis sets 6-31+G(d,p) en 6-31+G(2d,2p) en constateer dat nu de struktuur meer pyramidaal wordt en vrijwel overeenkomt met de experimentele struktuur. Experimenteel is de H-N-H evenwichtshoek* $106.7°$*. Wat is er gebeurd met het dipoolmoment?*

**Opgave 8.2** *Doe nu hetzelfde voor $PH_3$ met de 6-31+G(2d,2p) basis. Bedenk een tweetal mogelijke redenen waarom $PH_3$ meer pyramidaal is dan $NH_3$, d.w.z. een kleinere H-X-H hoek heeft.*