

Computer practikum QCB III, Opdracht 8

10 juni 2004

8 MO berekeningen, basis sets

Opgave 8.1 Bereken de evenwichtsstructuur (d.w.z. de structuur 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 evenwichtsstructuur wordt nu bijna vlak (H-N-H hoek bijna 120°). Voeg dan polarisatie-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 structuur meer pyramidaal wordt en vrijwel overeenkomt met de experimentele structuur. 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.