



Theoretische Modellierung und Simulation

Übungsblatt Nr. 11, 27.06.2018

Die Übungsblätter können heruntergeladen werden von

<http://www.uni-ulm.de/theochem/>

Die Aufgaben werden besprochen in den Übungen im Chemie-Computer-Labor O26/198 am Donnerstag, dem 05.07.2018, und am Freitag, dem 06.07.2018, jeweils 12 bis 14 Uhr

Aufgabe 21: Elektronische Struktur

Berechnen Sie für Methan (CH_4) die Gleichgewichtsstruktur sowohl mit Hartree-Fock und mit DFT. Bestimmen Sie das elektronische Spektrum, d.h. die Energien der elektronischen Ein-Teilchen-Zustände. Gibt es Entartungen? Was ist die Energiedifferenz zwischen dem höchsten besetzten Molekülorbital (engl. *Highest Occupied Molecular Orbital* (HOMO)) und dem niedrigsten unbesetzten Molekülorbital (engl. *Lowest Unoccupied Molecular Orbital* (LUMO))? Diese Zustände spielen eine besondere Rolle für die Reaktivität von Molekülen.

Stellen Sie das HOMO und das LUMO mit Hilfe der graphischen Benutzeroberfläche dar (z.B. mit GaussView). Plotten Sie außerdem die gesamten elektronische Ladungsdichte als Isooberfläche.

Zusatzaufgabe: Führen Sie die gleiche Schritte für Benzol (C_6H_6) durch.