

Aufgabenblatt 4: Theoretische Chemie II (Molecular Modeling)

1. Schreiben Sie die Formeln für die Gesamtenergien von HF und DFT auf und vergleichen Sie diese. Was sind Gemeinsamkeiten, was sind die Unterschiede? Was versteht man unter der Austausch- und der Coulombrepulsion (oder entsprechend 'Loch'). In welchen Methoden wird was berücksichtigt?
2. Beschreiben Sie knapp und anschaulich die Funktion von 'double zeta' Basissätzen. Wählen sie dazu ein Beispielmolekül und veranschaulichen dies graphisch.
3. Wieviele Basisfunktionen werden bei einem 6-31G* Basissatz für Ethylen verwendet. Erläutern Sie die einzelnen Funktionen. Wieviele bei 6-311++G(2d,2p)? Wie stark steigt die Rechenzeit, wenn man eine N^3 Skalierung voraussetzt?
4. Wie funktioniert die Geometrieoptimierung?
5. Erläutern Sie die Hohenberg Kohn Theoreme.

6. Betrachten Sie die Funktion

$$f(x) = 4x^4 - 3x^2.$$

Wie groß ist die Krümmung am Ursprung?

7. Berechnen Sie für die Funktion

$$f(x, y) = x^4 + 2x^2y^2 - 2x^2 + 2y^2$$

die Hessematrix **H**.

Plotten Sie die Funktion, um eine grobe Vorstellung von ihrem Verlauf zu bekommen (gnuplot: `plot [-1.5:1.5][-0.8;0.8] x**4 + 2 * x**2 * y**2 - 2 * x**2 + 2 * y**2`)
 Berechnen Sie die Gradienten in den Punkten (0;0) und (1,0) und charakterisieren Sie diese Punkte.