

Proton Hydroxid Wasser Protonenaffinität

Hartree-Fock				
STO-3g				0.901
3-21g				0.717
6-31g				
g	???	-75.3118	-75.9854	???
g(d,p)	???	???	???	???
g(2df,2pd)	???	-75.3372	-76.0310	???
++g	???	???	???	???
++g(d,p)	???	-75.3842	-76.0313	???
++g(2df,2pd)	???	-75.3895	-76.0390	???
6-311g				
g	???	-75.3425	-76.0110	???
g(d,p)	???	-75.3614	-76.0470	???
g(2df,2pd)	???	-75.3657	-76.0526	???
++g	???	-75.3848	-76.0168	???
++g(d,p)	???	-75.4057	-76.0534	???
++g(2df,2pd)				0.650
B3LYP				
6-311++g(2df,2pd)	???	-75.8303	-76.4635	???

Aufgabe:

Starten Sie Optimierungen für Hydroxidionen und Wassermoleküle!

Zeichnen Sie dazu die Moleküle in GaussView und stellen bei "Calculate" die entsprechende Ladung und den Basissatz ein!

Berechnen Sie die mit "???"markierten Felder

Wie groß ist die Energie eines Protons? Warum?

Ändern Sie nichts am Diagramm. Es ist alles so eingestellt, dass es ordentlich aussieht, wenn alle Werte eingetragen sind.

Was ist wichtiger für die Protonenaffinität? Diffuse Funktionen oder Polarisationsfunktionen?

Schauen Sie in den beigelegten Output-Dateien nach, wie das Dipolmoment sich bei den Basissätzen

(6-311g, 6-311++g, 6-311g(2df,2pd), 6-311++g(2df,2pd))

ändert! Was ist wichtiger fürs Dipolmoment? Diffuse Funktionen oder Polarisationsfunktionen?

