

Lehrpraxis „Lab@Home“

F. Arnold, J.-O. Joswig

In diesem Dokument sollen einige Beispiele aus der Lehrpraxis des „Lab@Home“ gezeigt werden, um die praktische Umsetzung der beschriebenen Methoden zu verdeutlichen und anderen Lehrenden Anregungen für ihre eigenen Praktika zu geben.

Aufgabe 3: Geometrieoptimierung mit Dichtefunktionaltheorie

Führen Sie mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie Geometrieoptimierungen für die Ihnen gegebenen Moleküle durch: (i) das zweiatomige Molekül, (ii) ein drei- oder vieratomiges Molekül, zwei organische Moleküle mit (iii) sp^3 - bzw. (iv) sp^2 -Kohlenstoffen. Gehen Sie dabei von selbst gewählten Startwerten für Bindungslängen und -winkel aus. Vergleichen Sie anschließend die erhaltenen Geometrien mit experimentellen Literaturwerten.

Hinweise:

- Experimentell bestimmte Bindungslängen/-winkel finden Sie in „Strukturdaten.pdf“.
- Die Funktionsweise des ADF-Moleküleditors ist in den Software-Informationen beschrieben.
- Führen Sie in allen Fällen eine Voro Optimierung (Zahnrad-Symbol) durch.
- Die individuellen Einstellungen für die ADF-Rechnungen und Molekülzuordnungen finden Sie im pdf-Dokument „T1-Einstellungen“. Zusätzlich verwenden Sie bitte:
 - Optionsmenü Main:
 - Preset: Geometry Optimization
 - XC Potential in SCF: *individuell einzustellen*
 - Basis set: *individuell einzustellen*
 - Frozen Core: None
 - Numerical Quality: Very Good
- Starten der ADF-Rechnung: *File* → *Run* (oder *Ctrl+R*).

Abbildung 1: Beispiel für eine Aufgabe zum Thema „Geometrieoptimierung“ aus Versuch Nummer 1. Die zu verwendenden Moleküle sowie die individuell einzustellenden Programmparameter sind in einem separaten Dokument für alle Studierenden angegeben.

Aufgabe 3: Geometrieoptimierung mit Dichtefunktionaltheorie

Molekül 1 (2-atomig)		HBr
Bindungslängen [Å]	H-Br	1,44

Molekül 2 (3-/4-atomig)		NH ₃
Bindungslängen [Å]	N-H	1,02
Bindungswinkel [Grad]	HNH	105,7

Molekül 3		Hexafluorethan (gestaffelt) (C ₂ F ₆)
Bindungslängen [Å]	C-C	1,57
	C-F	1,35
Bindungswinkel [Grad]	CCF	109,9
	FCF	109,1
Diederwinkel [Grad]	FCCF	180,0

Abbildung 2: Zur Vereinfachung der Korrektur der Ergebnisse sollten von den Studierenden alle erhaltenen Werte in ein Datenblatt eingetragen werden. Hier gezeigt ist ein Beispiel der Lösungen eines Studierenden für die in Abb. 1 gezeigte Aufgabe. Die Diskussion der erhaltenen Ergebnisse erfolgte separat im Praktikumsprotokoll.

A2: Geometrieoptimierung									
DONE									
We need total energies of optimized diatomic molecules and the respective single atoms (pay attention to the correct multiplicity)									
Possible basis sets and functionals:		GGA:PBE, GGA:BLYP, GGA:BP86			Procedure for obtaining the optimized molecule's properties				
Frozen core:		None			1. Pre-optimize the molecule with a force field (rack-wheel symbol)				
Numerical Quality:		Very Good			2. Optimize the molecule with the respective settings (Geom & Freqs)				
ADF version to be used:		2019.30X			3. Extract bond length				
All bond length in Å									
optimized molecule									
perf/checked									
Molecule									
Re [Å] exp.									
GGA:PBE									
GGA:BLYP									
GGA:BP86									
DZP TZP DZP TZP DZP TZP									
HF	0.9169	0.945	0.937	0.947	0.94	0.945	0.938	TJL/HHL	
HCl	1.2746	1.293	1.296	1.297	1.299	1.294	1.297	TJL/HHL	
NaH	1.8873	1.891	1.895	1.889	1.892	1.892	1.897	TJL/HHL	
LiF	1.5639	1.615	1.576	1.617	1.578	1.618	1.581	TJL/HHL	
LiBr	2.1704	2.227	2.181	2.234	2.188	2.235	2.188	TJL/HHL	
NaBr	2.5020	2.509	2.521	2.524	2.536	2.514	2.528	TJL/HHL	
CO	1.1283	1.138	1.14	1.14	1.141	1.138	1.14	RD/HHL	
CS	1.5349	1.547	1.55	1.551	1.553	1.547	1.55	RD/HHL	
ClF	1.6283	1.681	1.675	1.705	1.697	1.684	1.677	TJL/HHL	
BrF	1.7590	1.825	1.807	1.847	1.826	1.827	180.9	TJL/HHL	
CRC Handbook									

Abbildung 3: Beispiel für die Referenzdaten, die von den Mitarbeitenden der Arbeitsgruppe gemeinsam in einem geteilten Dokument vorproduziert wurden. Jede individuelle Rechnung wurde von zwei Personen unabhängig voneinander durchgeführt, um Fehler zu minimieren. Diese Referenzdaten wurden genutzt, um vorab die Zuverlässigkeit der zu verwendenden Datensätze zu überprüfen und später die Ergebnisse der Studierenden zu bewerten.

PC3: Spezielle Physikalische Chemie

Custom

Aktuelles

Wichtige Links

- PC3 auf Opal: [PC3 Spezielle Physikalische Chemie](#)
- Quelle für Literaturwerte: [CRC Handbook of Chemistry and Physics](#)

Deadlines

F Florian Arnold
13:47 Hier steht ein Beispieltext um zu demonstrieren, dass eine Chatfunktion mit direktem Kontakt zu den Lehrenden besteht.

M 13:52

F Florian Arnold
Hier steht ein Beispieltext um zu demonstrieren, dass eine Chatfunktion mit direktem Kontakt zu den Lehrenden besteht.

Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

M tippt...

Verschlüsselte Nachricht senden...

Abbildung 4: Nachgestellte Beispielansicht des verwendeten Forums (Matrix), das eine direkte Kommunikation zwischen Studierenden und Lehrenden ermöglicht.