

# Protokoll

## Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

---

K.B.  
Matthias Ernst  
Gruppe 11

Datum des Praktikumstags: 23.10.2007  
Protokoll-Datum: 24.10.2007  
Assistent: A. Bihlmeier

Testat:

### 1. Versuch (C1) - Berechnung kleiner Moleküle

#### Aufgabenstellung

Mithilfe des Programmpakets Turbomole und eines vorgefertigten Skripts soll zunächst die Potentialkurve des N<sub>2</sub>-Moleküls berechnet werden. Es sollen eine Strukturoptimierung für das N<sub>2</sub>-Molekül durchgeführt und die Schwingungsfrequenz berechnet werden.

Anschließend werden die Reaktionsenergien für die Reaktionen  $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$  und

$\text{O}_2 + 2\text{H}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$  berechnet werden. Für die erste Reaktion soll die Abhängigkeit vom Basissatz (SVP und SV) ermittelt werden. Für Sauerstoff sollen außerdem die Orbitalbesetzung und für Wasser die Schwingungsfrequenzen ermittelt werden.

Alle Rechnungen werden mit der Hartree-Fock-Methode durchgeführt.

#### Theoretischer Hintergrund

Im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung lässt sich die Schrödingergleichung (im Folgenden SG genannt) für gegebene Kernlagen in eine effektive elektronische SG separieren, wobei die Positionen der Kerne noch als Parameter berücksichtigt werden (die SG wird sozusagen für "eingefrorene Kerne" gelöst). Diese Näherung ist zulässig, da die Elektronen eine sehr viel geringere Masse als die Kerne haben, sich somit sehr viel schneller als die Kerne bewegen und somit auf jede Änderung der Energie der Kerne quasi sofort reagieren können, während die Bewegung der Kerne von der der Elektronen quasi nicht beeinflusst wird.

Die el. SG lässt sich allerdings nur für Ein-Elektronen-Systeme exakt lösen, für mehr als ein Elektron sind analytische Lösungen aufgrund der Interaktion der Elektronen nicht möglich.

Es gilt allerdings das Variationsprinzip. Dieses besagt, dass die Energie eines Systems mit einer (hier noch nicht normierten) "Test"wellenfunktion  $\Psi_t$  immer größer oder, im Fall der Grundzustandswellenfunktion, gleich der Energie des Grundzustands  $E_0$  ist:

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \Psi_t | \hat{H} | \Psi_t \rangle}{\langle \Psi_t | \Psi_t \rangle} \geq E_0$$

Unter der Voraussetzung, dass die Wellenfunktion einen Parameter enthält, lässt sich also mit dem Variationsprinzip eine sukzessive Verbesserung der Wellenfunktion erreichen, indem man den Parameter variiert, sodass die Energie minimal wird (dabei ist zu berücksichtigen, dass die exakte Grundzustandsenergie in der Regel nicht bekannt ist).

Im Rahmen der Hartree-Fock-Methode wird davon ausgegangen, dass sich jedes Elektron zwar im

# Protokoll

## Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

---

mittleren Feld aller anderen Elektronen bewegt, die Elektronen aber nicht explizit miteinander interagieren, weshalb die Wellenfunktion als Produkt von Einteilchenwellenfunktionen, auch Orbitale genannt, darstellbar ist. Damit das Pauli-Prinzip gilt (Antisymmetrie der Wellenfunktion bei Vertauschen zweier Elektronen), wird als Ansatz für die Wellenfunktion eine Slaterdeterminante verwendet, die die Elektronen in den Orbitalen enthält. Eine solche Slaterdeterminante (normiert) sieht wie folgt aus (in den Zeilen stehen die Elektronen, in den Spalten die Orbitale):

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{(n!)}} \begin{vmatrix} \Phi_1(\vec{r}_1) & \Phi_1(\vec{r}_2) & \dots & \Phi_1(\vec{r}_n) \\ \Phi_2(\vec{r}_1) & \Phi_2(\vec{r}_2) & \dots & \Phi_2(\vec{r}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_n(\vec{r}_1) & \Phi_n(\vec{r}_2) & \dots & \Phi_n(\vec{r}_n) \end{vmatrix}$$

Dabei gilt die Nebenbedingung, dass die Orbitale orthonormiert sein sollen.

Unter dieser Nebenbedingung führt die Minimierung der Slater-Determinante auf die Hartree-Fock-Gleichungen, welche effektive Einteilchengleichungen sind:

$$\hat{f} \Phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \Phi_i(\vec{r})$$

Der Fock-Operator enthält Integrale über die verwendeten Molekülorbitale, weshalb eine direkte analytische Lösung unmöglich ist. Stattdessen verwendet man ein SCF-Verfahren (SCF steht für self-consistent field). Dabei verwendet man sinnvolle Startorbitale, löst die HF-Gleichungen und führt mit den dann gewonnenen, verbesserten Orbitalen, das Verfahren wiederum durch, solange, bis das Verfahren konvergiert ist, sprich nur noch Änderungen in der Energie unterhalb eines bestimmten Limits auftreten.

Für die Molekülorbitale kann ein LCAO-Ansatz gemacht werden:  $\Phi(\vec{r}) = \sum_k c_{ki} \chi_k(\vec{r})$

Dabei werden für  $\chi_k$  als Basisfunktionen in der Regel Gauß-Funktionen bzw. die Superposition mehrerer Gaußfunktionen verwendet. Je nach Anzahl und Typ der verwendeten Funktionen, kann mit dem jeweiligen Basissatz ein mehr oder weniger gutes Ergebnis erreicht werden. Dabei verlängert sich i.A. die Rechenzeit bei Vergrößerung des Basissatzes deutlich.

Auch bei theoretisch unendlich großem Basissatz kann die exakte Grundzustandsenergie allerdings nicht erreicht werden, weil die Korrelation der Elektronen nicht berücksichtigt wird.

### **Versuchsdurchführung**

Alle Rechnungen wurden mit dem Programmpaket Turbomole und der vorgegebenen Skript-Vorlage "turbo.in" durchgeführt. Für die Berechnung der Potentialkurve des N<sub>2</sub>-Moleküls wurde das schon vorhandene Skript n2.svp verwendet, welches eine Bindungslänge erfragt und die zugehörige potentielle Energie ausgibt.

Die Startgeometrien wurden mit dem Programm eBuilder erstellt, für die Ermittlung der Molekülenergien, der Bindungslängen und der Bindungswinkel wurden die Skripte eiger, dist und bend verwendet, die Schwingungsfrequenzen wurden mit aoforce berechnet.

# Protokoll

## Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

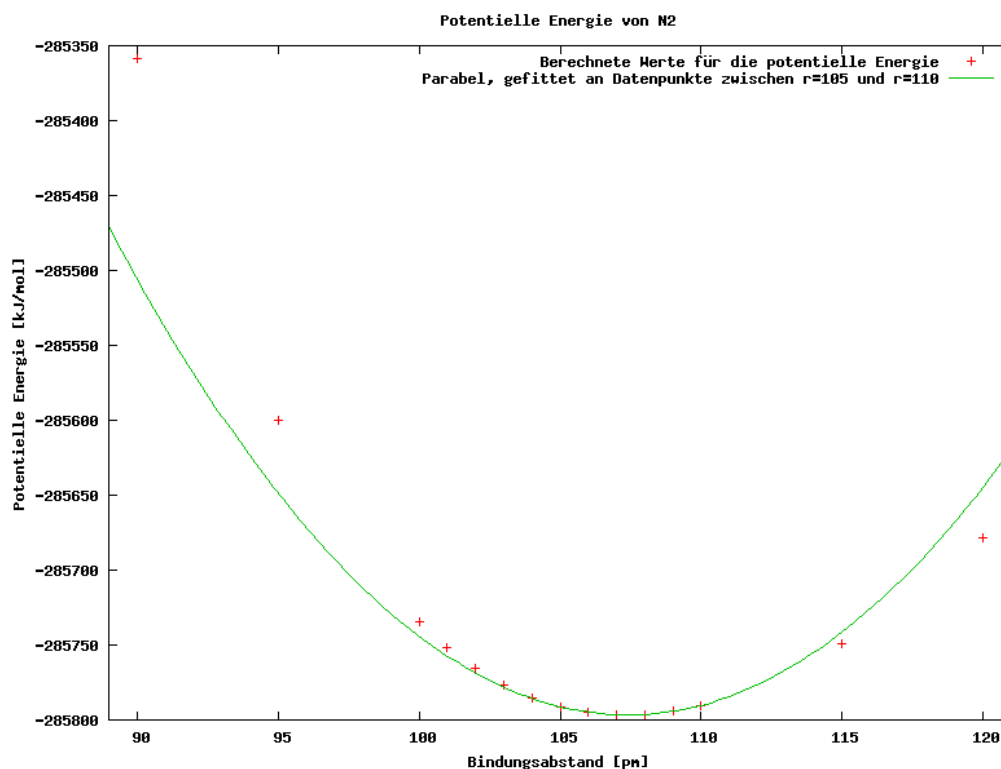
### Auswertung

#### 1. Potentialkurve, Strukturoptimierung und Schwingungsfrequenz des N<sub>2</sub>-Moleküls

Folgende Werte wurden berechnet [Basis SVP]:

R [pm]	R [bohr]	E [H]	E [kJ/mol]
90	1,70	-108,68738057	-285358,72
95	1,80	-108,77933276	-285600,14
100	1,89	-108,83064826	-285734,87
105	1,98	-108,85207084	-285791,11
101	1,91	-108,83702871	-285751,62
102	1,93	-108,84229449	-285765,44
103	1,95	-108,84651416	-285776,52
104	1,97	-108,84975252	-285785,03
110	2,08	-108,85178086	-285790,35
106	2,00	-108,85352702	-285794,94
107	2,02	-108,85417577	-285796,64
108	2,04	-108,85406885	-285796,36
109	2,06	-108,85325514	-285794,22
115	2,17	-108,83594866	-285748,78
120	2,27	-108,80922635	-285678,62

Für die Potentialkurve des N<sub>2</sub>-Moleküls ergab sich damit folgendes Bild:



Der kleinste berechnete Wert liegt bei  $r_e=107\text{pm}$ . Die pot. Energie  $E_e$  beträgt  $-285796.64\text{ kJ/mol}$ .

Außerdem wurde an die Werte zwischen  $105\text{pm}$  und  $110\text{pm}$  eine Parabel der Form

$$V(x) = a \cdot (x - r_e)^2 + E_e \text{ gefittet (was also der harmonischen Näherung des Potentials entspricht).}$$

Aus dem Fit ergaben sich die Parameter zu  $r_e=107.41\text{pm}$ ,  $V(r_e)=E_0= -285797\text{ kJ/mol}$  und  $a=0,961221\text{ kJ}/(\text{mol} \cdot \text{pm})$ . Der Gleichgewichtsabstand beträgt für die Parabel also  $107.41\text{pm}$ .

Aus  $a$  lässt sich die Kraftkonstante des Moleküls berechnen, diese ist  $k=2a$ , also

# Protokoll

## Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

$k = 1,922442 \text{ kJ}/(\text{mol} \cdot \text{pm}^2) = 1.922442 \cdot 10^{27} \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{m}^2) = 3192.365 \text{ N}/\text{m} = 31.92 \text{ N}/\text{cm}$ . Die reduzierte Masse von Stickstoff beträgt  $7 \text{ g}/\text{mol}$ , daraus ergibt sich nach  $\omega = \sqrt{k/\mu}$  die Schwingungsfrequenz zu  $\omega = 5.2406 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$  und damit  $\tilde{\nu} = \omega/(2 \cdot \pi \cdot c) = 2782.13 \text{ cm}^{-1}$  für die Wellenzahl. Die mit Turbomole berechneten Werte für die Bindungslänge beträgt  $107.35 \text{ pm}$ , die Nullpunktsenergie  $-285796.8 \text{ kJ}/\text{mol}$  und die Schwingungsfrequenz (in Wellenzahlen)  $2791.87 \text{ cm}^{-1}$ .

Hier nochmals tabellarisch die berechneten Werte:

Art der Rechnung	$R_e$ [pm]	$E_e$ [kJ/mol]	$\nu$ [cm <sup>-1</sup> ]
Einzelne Punkte	107	-285796.64	
Harmonische Näherung (Parabel)	107.41	-285797	2782.13
Harmonische Näherung (Turbomole, aoforce)	107.35	-285796.8	2791.87
Experiment	109.76		2358.07

(Experimentelle Daten aus P. W. Atkins, Physikalische Chemie, 2. Aufl., Wiley-VCH Weinheim, 1996)

### 2. Berechnung der Reaktionsenergie für die Reaktion $\text{O}_2 + 2\text{H}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O}$ (Reaktion 2)

Molekül	Basissatz	$E$ [H]	$E$ [kJ/mol]	$E$ [eV]	$r$ [bohr]	$r$ [pm]	Winkel [°]
H <sub>2</sub>	SVP	-1.1289286	-2964.0	-30.7197	1.41	74.69	
O <sub>2</sub>	SVP	-149.4962503	-392502.4	-4068.0023	2.18	115.34	
H <sub>2</sub> O	SVP	-75.9613385	-199436.5	-2067.0144	1.79	94.50	105.13
Summe (Rkt.)		-0.1685695	-442.6	-4.5870132			
Experiment			-523.4				
H <sub>2</sub>					1.40	74.14	
O <sub>2</sub>					2.28	120.74	
H <sub>2</sub> O					1.81	95.75	104.51

(Exp. Daten aus D. R. Lide (Hrsg.), Handbook of chemistry and physics, 88. Aufl., CRC Press, 2006)  
Dabei wurde die Gesamtenergie der Reaktion nach dem Satz von Hess berechnet:

$$\Delta E = E_{\text{Produkte}} - E_{\text{Edukte}} \stackrel{\text{hier}}{=} 2 \cdot E(\text{H}_2\text{O}) - \{2 \cdot E(\text{H}_2) + E(\text{O}_2)\}$$

### 3. Berechnung der Reaktionsenergie für die Reaktion $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$ (Reaktion 1)

Die folgenden Werte wurden berechnet:

Molekül	Basissatz	$E$ [H]	$E$ [kJ/mol]	$E$ [eV]	$r$ [bohr]	$r$ [pm]	Winkel [°]
N <sub>2</sub>	SV	-108.7753326	-285589.6	-2959.9291	2.06	109.21	
H <sub>2</sub>	SV	-1.1246064	-2952.7	-30.6021	1.41	74.71	
NH <sub>3</sub>	SV	-56.1123252	-147322.9	-1526.8949	1.9	100.32	115.24
Summe (Rkt.)		-0.0754986	-198.2	-2.0544			
N <sub>2</sub>	SVP	-108.8542217	-285796.8	-2962.0758	2.03	107.35	
H <sub>2</sub>	SVP	-1.1289286	-2964.0	-30.7197	1.41	74.69	
NH <sub>3</sub>	SVP	-56.1488845	-147418.9	-1527.8898	1.9	100.57	106.92
Summe (Rkt.)		-0.0567616	-149.0	-1.5446			
Experiment			-157.7				
N <sub>2</sub>						109.77	
H <sub>2</sub>						74.14	
NH <sub>3</sub>						101.2	106.7

(Exp. Daten aus D. R. Lide (Hrsg.), Handbook of chemistry and physics, 88. Aufl., CRC Press, 2006)  
Auch hier wurde wieder der Satz von Hess verwendet:

$$\Delta E = E_{\text{Produkte}} - E_{\text{Edukte}} \stackrel{\text{hier}}{=} 2 \cdot E(\text{NH}_3) - \{3 \cdot E(\text{H}_2) + E(\text{N}_2)\}$$

# Protokoll

## Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

---

### 4. Berechnung der Molekülorbitale von O<sub>2</sub>

Orbital Nr.	Spin	Symmetrie	Besetzung	Energie [H]	Energie [eV]
30	β	3 e1u	0	2,464770	67,07
29	α	3 e1u	0	2,385968	64,93
28	β	5 a2u	0	1,475544	40,15
27	α	5 a2u	0	1,431884	38,96
26	β	2 e1g	0	1,294700	35,23
25	α	2 e1g	0	1,167106	31,76
24	β	2 e1u	0	1,165650	31,72
23	β	4 a2u	0	1,147707	31,23
22	β	5 a1g	0	1,132535	30,82
21	α	5 a1g	0	1,118282	30,43
20	α	4 a2u	0	1,112561	30,27
19	α	2 e1u	0	1,051808	28,62
18	β	4 a1g	0	0,978495	26,63
17	α	4 a1g	0	0,947620	25,79
16	β	3 a2u	0	0,601175	16,36
15	α	3 a2u	0	0,521261	14,18
14	β	1 e1g	0	0,132960	3,62
13	α	1 e1g	2	-0,534945	-14,56
12	β	1 e1u	2	-0,606659	-16,51
11	β	3 a1g	1	-0,716081	-19,49
10	α	3 a1g	1	-0,783432	-21,32
9	α	1 e1u	2	-0,866442	-23,58
8	β	2 a2u	1	-0,956001	-26,01
7	α	2 a2u	1	-1,159926	-31,56
6	β	2 a1g	1	-1,629799	-44,35
5	α	2 a1g	1	-1,751317	-47,66
4	β	1 a2u	1	-20,681759	-562,78
3	β	1 a1g	1	-20,682943	-562,81
2	α	1 a2u	1	-20,738274	-564,32
1	α	1 a1g	1	-20,738773	-564,33

### 5. Berechnung der Schwingungsfrequenzen und Nullpunktsschwingungsenergie von Wasser

Symmetrie	Schwingungsfrequenz (cm <sup>-1</sup> )	IR-Intensität (km/mol)	Auswahlregeln		Experimenteller Wert für Schwingungsfrequenz
			IR	RAMAN	
a1	1750,66	82,64	Ja	Ja	1595
a1	4148,18	26,8	Ja	Ja	3657
b1	4244,21	74,38	Ja	Ja	3756

Exp. Daten von <http://nist.webbook.gov/chemistry> (Stand: 29.10.2007)

Die Nullpunktsschwingungsenergie wurde zu 0.0231076H berechnet.

# Protokoll

## Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

---

### **Fehlerbetrachtung und Diskussion**

#### *1. Potentialkurve, Strukturoptimierung und Schwingungsfrequenz des N<sub>2</sub>-Moleküls*

##### *a) Vergleich Strukturoptimierung/Potentialkurve*

Die Bindungslänge aus dem Minimum der an die Punkte gefitteten Parabel liegt nur um 0,05pm neben dem tatsächlichen Minimum der Potentialkurve, dies entspricht einem Fehler von 0,05%. Die Nullpunktenergie weicht um 0,02kJ/mol ab, wenn man sie auf ganze Zahlen rundet, stimmt sie überein. Die Schwingungsfrequenzen stimmen bis auf 9,74 Wellenzahlen überein, der Fehler beträgt dabei 0,34%.

Es zeigt sich also, dass die Annahme eines harmonischen Potentials und die Verwendung von mehr Datenpunkten als die für die Parabel verwendeten nur geringfügig (<0,5%) falsche Werte liefert.

##### *b) Vergleich Strukturoptimierung/Experiment*

Die berechnete Bindungslänge weicht um 2,41pm vom experimentellen Wert ab, der Fehler beträgt 2,2%.

Die berechnete Schwingungsfrequenz weicht allerdings um 433,8 Wellenzahlen ab, der Fehler hierfür beträgt 18,4%.

Vor allem die Schwingungsfrequenz weicht also erheblich vom experimentellen Wert ab. Dies liegt einerseits an zu kleinen Basissatz sowie der Methode, andererseits ist gerade die Berechnung von Schwingungsfrequenzen aufgrund der zweiten Ableitung des Potentials sehr empfindlich gegenüber kleinen Abweichungen in der Molekülgeometrie vom tatsächlichen Wert sowie gegen kleine Ungenauigkeiten bei der Ermittlung der Potentialhyperfläche.

Experimentell zugänglich sind die Schwingungsfrequenzen von nicht polaren Molekülen (wie z.B. N<sub>2</sub>, die damit auch nicht IR-aktiv sind), i.A., d. h. wenn sich ihre Polarisierbarkeit bei der Schwingung ändert, mittels der Raman-Schwingungsspektroskopie.

#### *2. Reaktionsenergie und Basissatzabhängigkeit*

##### *a) Reaktion 2*

Die Bindungslänge von Wasser weicht um 0,25pm (1,31%) von der experimentellen ab, der Bindungswinkel um 0,62° (0,59%) und die Reaktionsenergie um 80,8% (15,44%).

Die Geometrie wird also recht gut wiedergegeben, die Reaktionsenergie jedoch weniger gut.

##### *b) Reaktion 1, SV*

Die Bindungslänge von Ammoniak weicht um 0,88pm (0,87%) von der experimentellen ab, der Bindungswinkel um 8,54° (8,00%) und die Reaktionsenergie um 40,5kJ/mol (25,68%). Diese Werte sind also nicht sonderlich exakt.

##### *c) Reaktion 1, SVP*

Die Bindungslänge von Ammoniak weicht um 0,63pm (0,62%) von der experimentellen ab, der Bindungswinkel um 0,22° (0,21%) und die Reaktionsenergie um 8,7kJ/mol (5,52%).

Man sieht deutlich, dass die Verbesserung des Basissatzes alle relevanten Parameter deutlich verbessert. Dies erwartet man auch nach dem Variationsprinzip, da man mit einer besseren Basis eine bessere Wellenfunktion und somit eine bessere Grundzustandsenergie finden sollte.

Insgesamt wurde hier als systematischer Fehler die Korrektur um die Nullpunktsschwingungsenergie vernachlässigt. Dies führt i.d.R. zu einer Verbesserung der Resultate, da experimentell ja nur die Differenz der Dissoziationsenergie zur Nullpunktsschwingungsenergie, als Bindungsdissoziationsenergie  $D_0$  im Gegensatz zur Energie am Potentialminimum  $D_e$  bezeichnet,

# Protokoll

## Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

gemessen werden kann.

Weitere Verbesserungen lassen sich einerseits durch weitere Verbesserung des Basissatzes (theoretisch bis zum Basissatzlimit der Methode) erreichen, andererseits auch durch Verwendung besserer Methoden (anbieten würden sich hier post-HF-Methoden wie MP2, Coupled-Cluster oder aber möglicherweise als anderer Ansatz DFT).

### d) Schwingungsfrequenz von $H_2O$

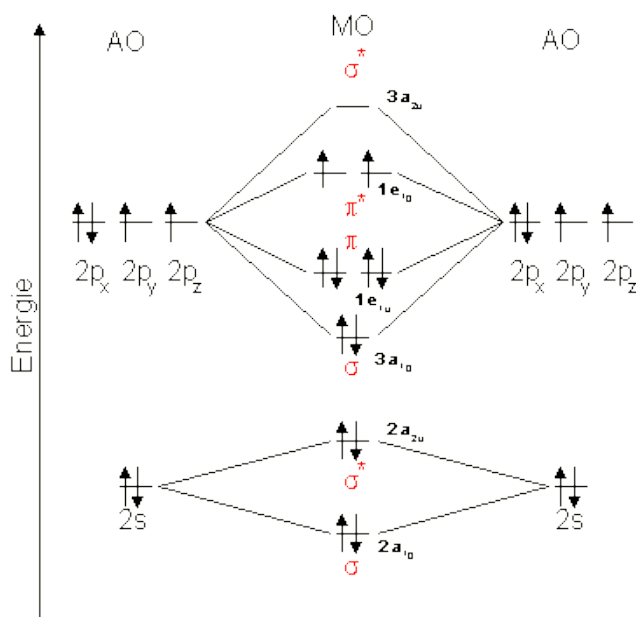
Bei Wasser findet man durch Ausreduzieren der durch die Normalschwingungen aufgestellten Darstellung drei Normalschwingungen, von denen zwei  $a_1$ -Symmetrie und eine  $b_1$ -Symmetrie aufweist. Dabei muss es sich um eine symmetrische ( $a_1$ ) und eine antisymmetrische ( $b_1$ ) Valenzschwingung sowie eine Deformationsschwingung ( $a_1$ ) handeln. Die Zuordnung erfolgt nach Vergleich mit einer Rechnung, lässt sich aber wie folgt abschätzen: die Deformationsschwingung hat niedrigste Energie, da sich hierbei nur der Winkel, nicht aber die Bindungslängen ändern. Die symmetrische Valenzschwingung liegt niedriger als die antisymmetrische.

Die größte Abweichung der Rechnung vom Experiment liegt bei der symmetrischen Valenzschwingung vor, nämlich  $491,18 \text{ cm}^{-1}$  (13,43%).

Auch hier werden die Schwingungsfrequenzen durch die Rechnung nicht gut wiedergegeben, eine Begründung wurde oben bereits angeführt.

### e) MO-Schema von $O_2$

Das MO-Schema sieht folgendermaßen aus (Grafik modifiziert von [www.chemgapedia.de](http://www.chemgapedia.de), die 1s-Orbitale wurden weggelassen):



Erstellen lässt es sich wiederum durch Ausreduzieren der diesmal durch die s- und p-Orbitale aufgestellten Darstellung.

Hierbei sind also alle bindenden Orbitale doppelt besetzt, je mit  $\alpha$ - und  $\beta$ -Spin. Außerdem ist das antibindende  $2a_{2u}$ -Orbital doppelt besetzt. Einfach besetzt sind das entartete  $1e_{1g}$ -Orbital, da eine doppelte Besetzung aufgrund der Hundschen Regel energetisch ungünstiger wäre und dazu außerdem noch Austauschenergie für Spinpaarung aufgebracht werden müsste.

Die Bindungsordnung ergibt sich zu 2, außerdem gibt das MO-Schema korrekterweise das paramagnetische Verhalten des (im Grundzustand

vorliegenden) Triplet-Sauerstoffes wieder.

### f) Schwächen der HF-Methode

Für Reaktion 1 liefert HF gute Ergebnisse, weil es eine isogyrische Reaktion ist (s. u.), dabei ist die Anzahl der gepaarten und ungepaarten Elektronen gleich und systematische Fehler heben sich z.T. gegenseitig auf. Bei Reaktion 2 ist das nicht der Fall ( $O_2$  hat ja im Grundzustand 2 ungepaarte Elektronen), daher kommen die systematischen Fehler der Methode voll zum Tragen.

Die Hartree-Fock-Methode betrachtet ein Elektron im mittleren Feld der anderen, vernachlässigt also

# Protokoll

## Physikalisch-Chemisches Praktikum für Fortgeschrittene

---

die explizite Korrelation zwischen den Elektronen. Verbessern lässt sich das, wie bereits geschrieben, durch post-HF-Methoden wie MP2, Coupled-Cluster etc.

*g) Zusatzfrage 1: Warum Slaterdeterminante als Ansatz für Wellenfunktion?*

Die Slaterdeterminante gibt einerseits den Ansatz der Wellenfunktion als Produkt von Einteilchenwellenfunktionen wieder (das würde auch das Hartree-Produkt erfüllen). Andererseits gewährleistet sie auch aufgrund der Eigenschaft der Determinante, bei Vertauschen von Zeilen oder Spalten das Vorzeichen zu ändern, die Antisymmetrie der Wellenfunktion aufgrund des Pauli-Prinzips (Elektronen sind Fermionen).

*h) Zusatzfrage 2: Was sind isodesmische Reaktionen, warum funktioniert die HF-Methode für solche gut?*

Man bezeichnet Reaktionen als isogyrisch, bei denen die Anzahl der gepaarten und der ungepaarten Elektronen gleich bleibt (z.B. hier bei Reaktion 1). Als isodesmisch werden Reaktionen bezeichnet, bei denen die Art und Anzahl der Bindungen erhalten bleibt (diese sind also auch isogyrisch). Dabei heben sich die systematischen Fehler bei der Berechnung der Gesamtenergie aus der Energie der einzelnen Bindungen genau auf, weshalb die Rechnung auch mit wenig aufwändigen, aber im Normalfall eher unpräzisen Methoden wie HF gute Ergebnisse liefert.

Hiermit bestätige ich, dass ich das Protokoll eigenständig geschrieben habe.

Karlsruhe, den \_\_\_\_\_ 2007

\_\_\_\_\_  
Matthias Ernst