

DURCHFÜHRUNG EINFACHER QUANTENCHEMISCHER RECHNUNGEN FÜR MOLEKÜLEN

VERMITTELTE ARBEITSTECHNIKEN:

- Definition molekularer Systeme in quantenchemischen Programmen
- Definition von Basisätzen
- Durchführung von RHF, DFT und MP2 Berechnungen und Analyse der Ergebnisse
- Strukturoptimierung von Grundzuständen
- Berechnung von IR/Raman Spektren
- Verwendung einfacher Lösungsmittelmodelle

PROGRAMME

- je nach Bedarf Gaussian oder Molpro (QC-Berechnungen)
- Molden, Avogadro (Visualisierung)

DURCHFÜHRUNG

An einfachen Testsystemen (z.B. HF, CH₃F, usw.) werden die wesentlichen Schritte die zum Aufsetzen einer quantenchemischen Rechnung notwendig sind diskutiert und die Ergebnisse anschließend besprochen. (ca. ½ bis 1 Tag)

Die genaue Auswahl der Systeme, Methoden/Basisätze und Techniken für weitere Berechnungen erfolgt unter Berücksichtigung des Promotionsthemas. Eine weitere Betreuung von an die Promotion angelehnten QC Projekten ist möglich.