

Robert Strothmann, 5040218
Jonas Schulz, 5153815
David Ueberle, 4903184

Jonas.Scholz@fu-berlin.de
Robert.Strothmann@zedat.fu-berlin.de
Ueberleda@zedat.fu-berlin.de

Laborbericht / Versuchsprotokoll

S1 - Quantenchemie auf dem Rechner

Datum der Versuchsdurchführung: 26. April 2018
Datum der Protokolleinreichung: 10. Mai 2018
Assistent/in: MSc. Christian Becker
Dateiname: S1-5040218-5153815-4903184-1

Mit der Einreichung wird versichert, dass das Protokoll von den oben eingetragenen Personen in gemeinschaftlicher Arbeit angefertigt worden ist und dass sämtliche Quellen, die zur Erstellung des Protokolls genutzt wurden, im 6. Teil des Protokolls (Literatur) kenntlich gemacht worden sind.

1 Einleitung

Viele Eigenschaften von Molekülen lassen sich durch das Konzept der Quantenmechanik verstehen. Die Beschreibung und Berechnung dieser Eigenschaften ist analytisch nicht immer möglich, und numerisch erst durch die Entwicklung von leistungsstarken Computern erschwinglich geworden. Bei einer numerischen Lösung von quantenmechanischen Problemen begiebt sich der Wissenschaftler auf einen schmalen Grad aus optimalen Ergebnissen und geringsten Rechenaufwand, muss folglich also besonders interdisziplinär arbeiten. Solche Untersuchungen sind im wesentlichen Teilgebiet der theoretischen Physik und Chemie, haben jedoch als Möglichkeit der Vorraussage und Einschätzung den Weg in ein weites Feld der angewandten Wissenschaft wie Materialwissenschaft, organische und anorganische Chemie, Festkörperphysik sowie supramolekulare Chemie gefunden.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Quantentheorie ^[1]:

Die im Folgenden beschriebenen Systeme werden über die zeitunabhängige Schrödingergleichung ausgedrückt (Eq. 1).

$$\mathcal{H}(r, R) \Psi(r, R) = E \Psi(r, R) \quad (1)$$

Jedoch steigt die Komplexität der Gleichung stark an, umso größer die Systeme werden, da sämtliche Elektronen und Kerne betrachtet werden müssen. Eine Möglichkeit der Vereinfachung ist hier die Born-Oppenheimer-Näherung (Eq. 2).

$$\mathcal{H}(r, R) = \mathcal{H}_K(R) + \mathcal{H}_e(r, R) \quad (2)$$

Der große Massenunterschied zwischen Atomkern und Elektronen lässt eine Separierung der Bewegungen dieser folgen. Ferner benutzt man eigentlich die deutlich geringeren Geschwindigkeit einer Kernbewegung im Bezug zur Elektronenbewegung, basierend auf den unterschiedlichen Massen. Diese Überlegung führt zur Schlussfolgerung, dass die kinetische Energie der Kerne bei konstantem Kernabstand keinen Einfluss auf die Elektronen besitzt, folglich nur ein parametrisches Potential der beteiligten Kernabstände resultiert. Es ergibt sich die elektronische Schrödingergleichung (Eq. 3) mit dem Hamilton-Operator wobei die Energie nur noch parametrisch von den Koordinaten der Kerne abhängig ist.

$$\mathcal{H}_e(r, R) \Psi(r, R) = (E(R) - \mathcal{V}_{KK}(R)) \Psi_e(r, R) \quad (3)$$

Die Potentialfläche bezogen auf die Gesamtenergie des Systems über dem Bindungsabstand folgt aus der Lösung der zuvor beschriebenen elektronischen Schrödingergleichung. Durch die Born-Oppenheimer-Näherung spielen Isotopeneffekte keine Rolle, da die Kerne als in Ruhe approximiert werden und somit keine kinetische Energie besitzen. Die einzigen Terme in denen die Masse der Kerne vorkommen entfallen somit.

Die Potentialenergieflächen sind abhängig von dem elektronischen Zustand des Moleküls, da die Schrödingergleichung über die Wellenfunktion mit den Quantenzahlen verbunden ist. Für die Schwingungsspektroskopie ist der Grundzustand besonders relevant, da sich die meisten physikochemische Fragestellungen aufgrund von praxisnähe auf Systeme im Grundzustand beschränken. Der Grundzustand verdeutlicht in der Regel einen hochpopulierten Gleichgewichtszustand. Ferner ist die Detektion von kurzlebigen, angeregten Zuständen (wenn überhaupt möglich) nicht trivial.

2.2 Verwendete Methoden :

Zur Bestimmung der gesuchten Energiewerte bezogen auf die Bindungslänge der zweiatomigen Moleküle CO und HCl wurde mithilfe des Programms -Gaussian- die zeitunabhängige Schrödingergleichung gelöst. Im Allgemeinen berechnet -Gaussian- die Wellenfunktion im Rahmen der Born-Oppenheimer-Näherung genau für eine Kerngeometrie. Folglich wurde ein Intervall von Bindungslängen der betreffenden Moleküle gewählt, und jeweils für jede Geometrie ein Energiewert bestimmt, um representative Ergebnisse zu erhalten.

Berechnet wurden die Energien für beide Moleküle mit selbem Intervall an Bindungslängen in zwei vorimplementierten Methoden (B3LYP & CCSD). Allgemein bestehen die Unterschiede der Methoden in den verwendeten Näherungen, um Elektron-Elektron WW zu beschreiben. Im wesentlichen beruhen die Näherung auf Dichtefunktionalen für Elektronen und der daraus resultierenden WW (DFT) oder auf Beschreibung wirkenden Kräfte auf den Elektronen durch ein externes Kraftfeld (HF). Generell gibt es Unterscheidungen von verwendeten quantenmechanischen Methoden, die sich auf die Wahl der Parameter (z.B empirisch) beziehen. Desweiteren gibt es auch die Unterscheidbarkeit basierend auf den mathematischen Weg, wie die betreffenden Funktionale für Elektron-Elektron WW konstruiert werden. Relativistische Effekte der Elektronen können bei leichten Atomen im Molekül wie HCl und CO vernachlässigt werden. Sollte dies nicht der Fall sein, müssen diese explizit durch Korrelationseffekte berücksichtigt werden. Der bei allen Berechnungen verwendete Basissatz (6-31G/6-31*) aus modifizierten Wasserstofforbitalen wurde, aufgrund geringer Anzahl an Basen, was eine geringe Rechenzeit bewirkt, und auf die Komplexität der Basen bezogen gute Qualität, gewählt.

3 Durchführung

Die Prozessierung erfolgt durch einen input file, welcher alle wichtigen Informationen der durchzuführenden Berechnung dem Computer übergibt. Dieser file beinhaltet im wesentlichen drei wichtige Blöcke. Der erste Befehlsblock am Anfang bezieht sich auf zugewiesene hardware Rechte, der folgende Block übergibt die Methode sowie weitere frei wählbare, vorimplementierte Optionen für die Berechnung (z.B die rekursive Berechnung für mehrere vordefinierte Bindungsabstände). Der letzte Block beinhaltet im wesentlichen die Eigenschaften des betrachteten quantenmechanischen Systems, wie die Gesamtladung, Spineigenschaften, sowie Atomtypen und Geometrien. Die Geometrien können sowohl in kartesischen Koordinaten, als auch in einer Z-Matrix angegeben sein. Die Darstellung in der Z-Matrix impliziert eine besonders große Vergleichbarkeit

von geometrischen Eigenschaften wie Bindungslängen/- Winkeln und Torsionswinkeln im Molekül zu weiteren Referenzsystemen mit gleichem betrachteten Molekül.

Zur Analyse wurden die zu berechnenden Daten aus dem output file manuell exportiert und weiter in -python- bearbeitet.

4 Auswertung

Die mittels Gaussian erhaltenen Gleichgewichtsabstände wurden in Tabelle 4.1 zusammengetragen. Dabei handelt es sich um den Atomabstand R , welcher bei den jeweiligen minimalsten Energiewerten einer Datenreihe zu finden ist. Die Dissoziationsenergie wurden erhalten, indem der größte Energiewert der Asymptote vom kleinsten Energiewert der Kurve subtrahiert worden ist. Anschließend wurde der erhaltene Energiewert von Hartree in kJ/mol gemäß der Beispielrechnung 4 umgerechnet, um diese mit den gefundenen Literaturwerten besser vergleichen zu können.

$$0.48 \text{ H} = 0.48 \cdot (2 \cdot hcR_{\infty}) \approx 2.092 \cdot 10^{-18} \text{ J}$$

$$2.092 \cdot 10^{-18} \text{ J} \cdot N_A \approx 1260 \text{ kJ/mol} \quad (4)$$

Tabelle 4.1: Berechnete Gleichgewichtsabstände und Dissoziationsenergien von HCl und CO aus den mittels GAUSSIAN erhaltenen Werten mit der Methode B3LYP und dem Basissatz 6-31G bzw. der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G*. Ferner sind experimentell bestimmte Literaturwerte der zu untersuchenden Größen gezeigt.^{[2] [3]}

Molekül	Methode	Gleichgewichtsabstand R	Dissoziationsenergie	
		in Ångstrom	in Hartree	in kJ/mol
CO	B3LYP	1.17	0.48	1260
CO	CCSD (SCF)	1.11	0.49	1290
CO	CCSD (MP2)	1.15	0.59	1550
CO	CCSD (MP3)	1.13	0.55	1440
CO	Literatur	1.128323		1077
HCl	B3LYP	1.33	0.19	498
HCl	CCSD (SCF)	1.27	0.34	892
HCl	CCSD (MP2)	1.28	0.19	498
HCl	CCSD (MP3)	1.28	0.16	420
HCl	Literatur	1.27455		429

Berechnung der Dissoziationsenergie

Wie in Abbildung 4.1 und Abbildung 4.3 zu sehen beschreiben die mit B3LYP errechneten Werte den Verlauf eines Morsepotentials. Es sei hier erwähnt, dass das tatsächliche Minimum der Kurven nicht bei Null liegt, sondern das Minimum von allen Energiewerten subtrahiert worden ist, um dieses als Nullpunkt zu definieren. Dadurch ist es nun möglich anhand der Grafen eine qualitative Aussage über die Dissoziationsenergie, sowie den Gleichgewichtsabstand zu machen.

Der Verlauf der Werte, welche durch die CCSD Methode für CO, sowie HCl erhalten wurden, sind in ebenso aufgetragen worden. Bei der Betrachtung der Werte kann beobachtet werden, dass die Entwicklung durch CCSD um das Minimum noch etwas genauer, als es mittels B3LYP der Fall war, gelungen ist. Jedoch beschreibt die Energie nach der Dissoziation des Moleküle besonders bei HCl einen Verlauf der gänzlich den Erwartungen widerspricht. Gründe für dieses abweichende Verhalten können in einer schlechten bzw. nicht vorhandenen Modellierung der long range WW liegen.

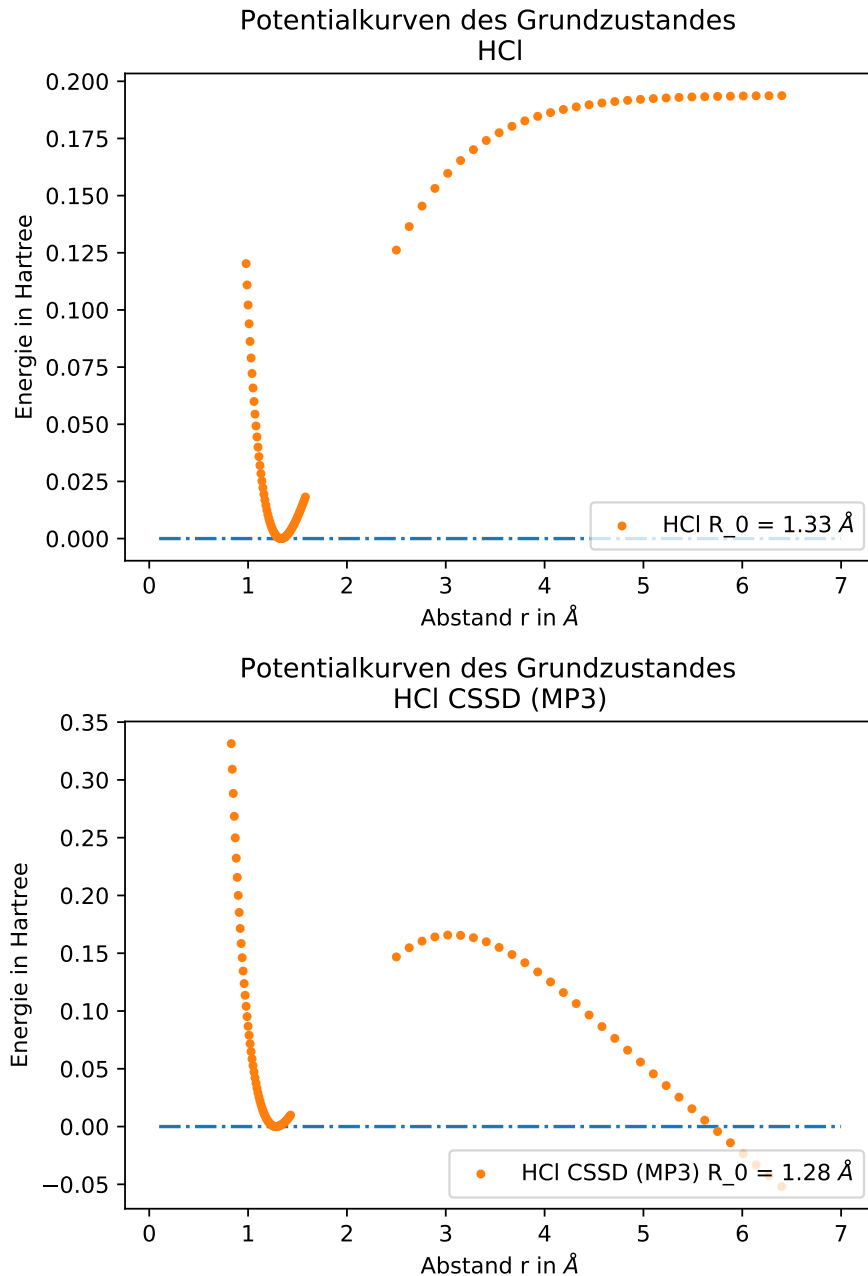


Abbildung 4.1: Grafische Auftragung der mit der Born-Oppenheimer-Näherung erhaltenen Energien bei verschiedenen Kernabständen von HCl. Die Werte wurden mittels GAUSSIAN mit der Methode B3LYP und dem Basissatz 6-31G (oben) bzw. mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G* (unten) erhalten. Die Grafiken wurde mit Python erstellt und über Spyder ausgegeben.

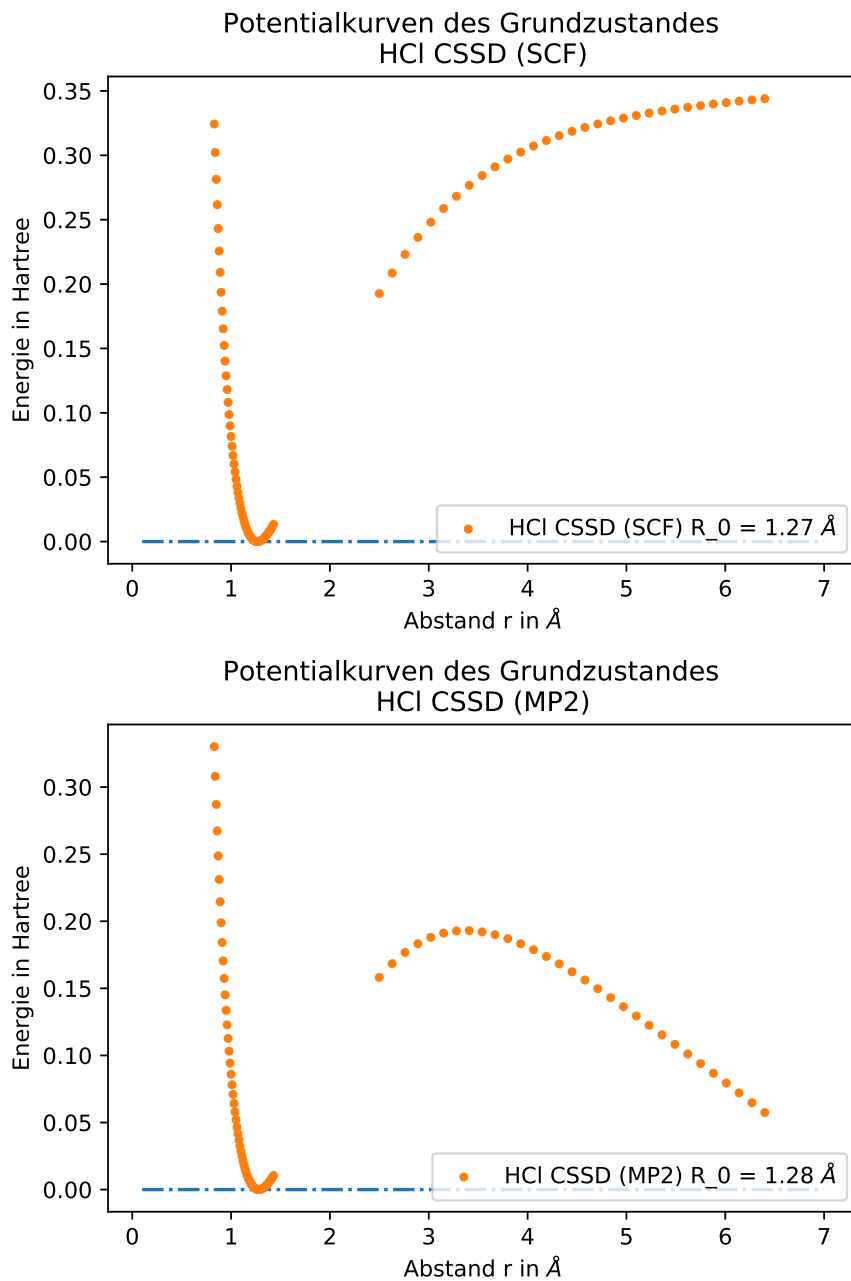


Abbildung 4.2: Grafische Auftragung der mit der Born-Oppenheimer-Näherung erhaltenen Energien bei verschiedenen Kernabständen von HCl. Die Werte wurden mittels GAUSSIAN mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G* erhalten. Die Grafiken wurde mit Python erstellt und über Spyder ausgegeben.

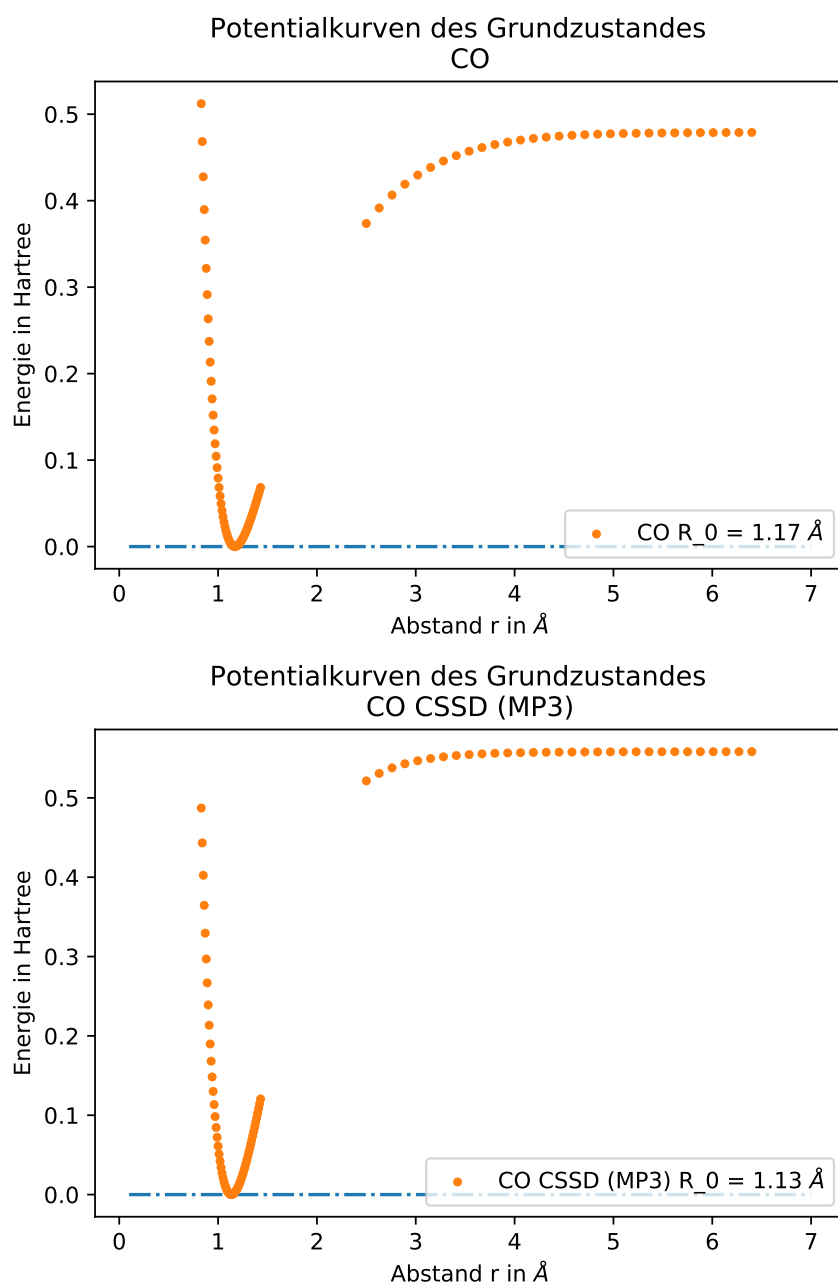


Abbildung 4.3: Grafische Auftragung der mit der Born-Oppenheimer-Näherung erhaltenen Energien bei verschiedenen Kernabständen von CO. Die Werte wurden mittels GAUSSIAN mit der Methode B3LYP und dem Basissatz 6-31G (oben) bzw. mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G* (unten) erhalten. Die Grafiken wurde mit Python erstellt und über Spyder ausgegeben.

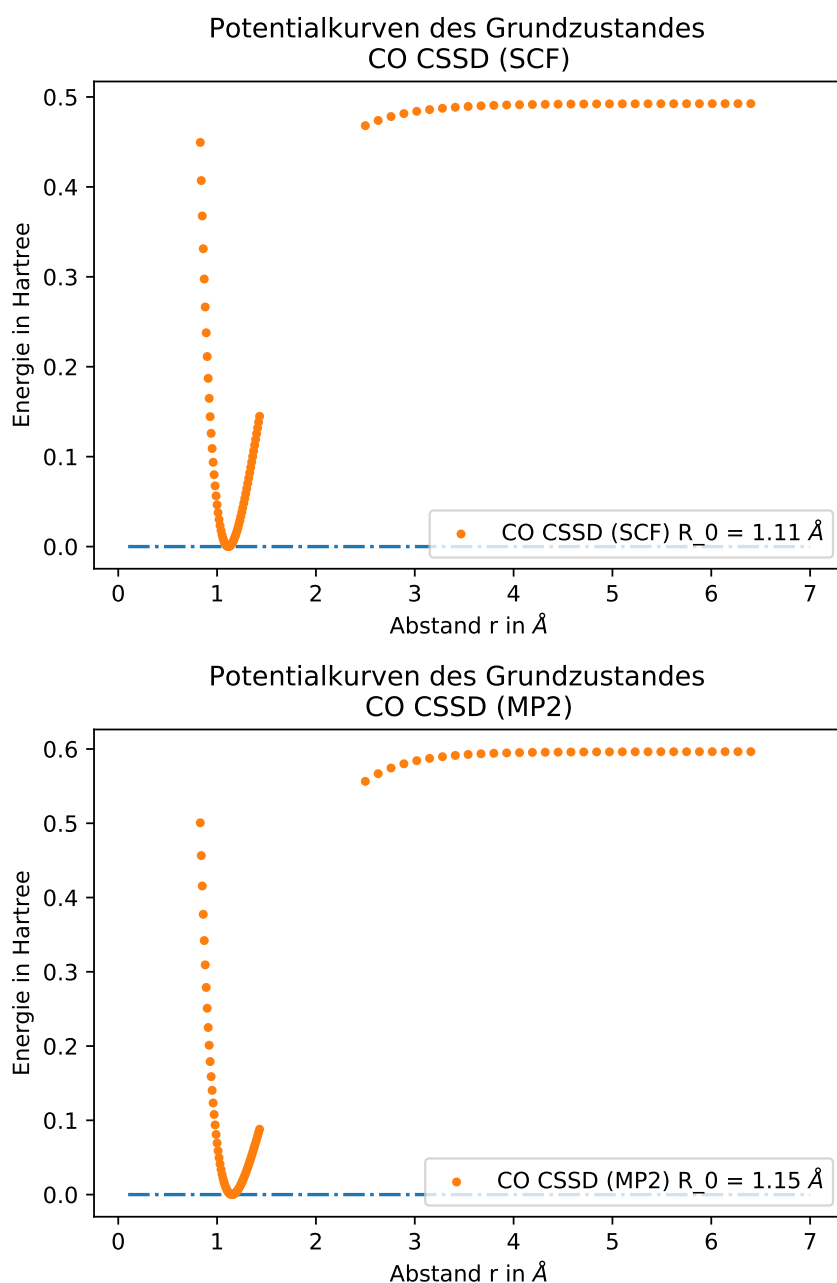


Abbildung 4.4: Grafische Auftragung der mit der Born-Oppenheimer-Näherung erhaltenen Energien bei verschiedenen Kernabständen von CO. Die Werte wurden mittels GAUSSIAN mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G* erhalten. Die Grafiken wurde mit Python erstellt und über Spyder ausgegeben.

5 Zusammenfassung

Die erhaltenen Bindungslängen stimmen in guter Näherung mit den Literaturwerten überein (siehe Tabelle 4.1.) Die mittels der CCSD-Methode gewonnenen Werte nähern sich besser an den Gleichgewichtsabstand der Literatur an als die mit der B3LYP Methode. Die ermittelten Dissoziationsenergien für das CO Molekül sind wie zu erwarten wesentlich größer gegenüber dem HCl Molekül. Die Werte decken sich jedoch deutlich schlechter mit der Literatur als es bei dem Gleichgewichtsabstand der Fall ist. Im Allgemeinen sind jedoch richtige Größenordnung und richtige Relation zu erkennen.

6 Literaturverzeichnis

1. W. Kutzelnigg, Einführung in die Theoretische Chemie, Wiley-VCH, Weinheim 2001
2. NIST Webbook - link : <https://webbook.nist.gov>
3. A. F. Holleman & Nils Wiberg, Lehrbuch der anorganischen Chemie, de Gruyter, New York 2016

7 Rohdaten

Tabelle 7.1: Rohdaten der Energien nach Born Oppenheimer Näherung für verschiedene Bindungsabstände berechnet über GAUSSIAN für HCl und CO mit der Methode B3LYP und dem Basissatz 6-31G

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hatree	Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree
0.83	-112.7369	0.98	-460.63329
0.84	-112.78074	0.99	-460.64262
0.85	-112.82153	1.0	-460.65139
0.86	-112.85945	1.01	-460.65961
0.87	-112.89468	1.02	-460.66733
0.88	-112.92737	1.03	-460.67456
0.89	-112.95769	1.04	-460.68134
0.9	-112.98577	1.05	-460.68768
0.91	-113.01175	1.06	-460.6936
0.92	-113.03576	1.07	-460.69913
0.93	-113.05792	1.08	-460.70429
0.94	-113.07834	1.09	-460.70909
0.95	-113.09713	1.1	-460.71356
0.96	-113.11438	1.11	-460.7177
0.97	-113.1302	1.12	-460.72154
0.98	-113.14466	1.13	-460.72509
0.99	-113.15786	1.14	-460.72836
1.0	-113.16986	1.15	-460.73137
1.01	-113.18075	1.16	-460.73414
1.02	-113.1906	1.17	-460.73667
1.03	-113.19946	1.18	-460.73898
1.04	-113.2074	1.19	-460.74109
1.05	-113.21448	1.2	-460.74299
1.06	-113.22075	1.21	-460.7447
1.07	-113.22626	1.22	-460.74623
1.08	-113.23107	1.23	-460.74759
1.09	-113.23521	1.24	-460.74878
1.1	-113.23873	1.25	-460.74983
1.11	-113.24167	1.26	-460.75072
1.12	-113.24406	1.27	-460.75148
1.13	-113.24595	1.28	-460.75211
1.14	-113.24737	1.29	-460.75262
1.15	-113.24835	1.3	-460.75301
1.16	-113.24891	1.31	-460.75329
1.17	-113.2491	1.32	-460.75347
1.18	-113.24892	1.33	-460.75355
1.19	-113.24841	1.34	-460.75353
1.2	-113.24759	1.35	-460.75343
1.21	-113.24649	1.36	-460.75324
1.22	-113.24512	1.37	-460.75298

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hatree	Atomabstand in Ängstrom	Energie in Hartree
1.23	-113.2435	1.38	-460.75263
1.24	-113.24165	1.39	-460.75222
1.25	-113.23959	1.4	-460.75174
1.26	-113.23734	1.41	-460.7512
1.27	-113.2349	1.42	-460.7506
1.28	-113.2323	1.43	-460.74995
1.29	-113.22955	1.44	-460.74924
1.3	-113.22666	1.45	-460.74849
1.31	-113.22363	1.46	-460.74769
1.32	-113.2205	1.47	-460.74685
1.33	-113.21725	1.48	-460.74596
1.34	-113.21391	1.49	-460.74504
1.35	-113.21048	1.5	-460.74409
1.36	-113.20696	1.51	-460.74309
1.37	-113.20338	1.52	-460.74207
1.38	-113.19974	1.53	-460.74101
1.39	-113.19603	1.54	-460.73993
1.4	-113.19228	1.55	-460.73883
1.41	-113.18848	1.56	-460.73769
1.42	-113.18465	1.57	-460.73654
1.43	-113.18078	1.58	-460.73537
2.5	-112.87545	2.5	-460.62736
2.63	-112.85758	2.63	-460.61709
2.76	-112.84261	2.76	-460.60812
2.89	-112.83006	2.89	-460.6004
3.02	-112.81951	3.02	-460.59381
3.15	-112.81066	3.15	-460.5882
3.28	-112.80324	3.28	-460.58345
3.41	-112.79705	3.41	-460.57944
3.54	-112.79191	3.54	-460.57606
3.67	-112.78767	3.67	-460.57323
3.8	-112.78418	3.8	-460.57086
3.93	-112.78133	3.93	-460.56888
4.06	-112.77902	4.06	-460.56724
4.19	-112.77715	4.19	-460.56587
4.32	-112.77565	4.32	-460.56474
4.45	-112.77446	4.45	-460.56381
4.58	-112.77352	4.58	-460.56304
4.71	-112.77279	4.71	-460.5624
4.84	-112.77221	4.84	-460.56189
4.97	-112.77177	4.97	-460.56146
5.1	-112.77143	5.1	-460.56112
5.23	-112.77116	5.23	-460.56083
5.36	-112.77095	5.36	-460.5606
5.49	-112.77079	5.49	-460.56042

B3LYP Werte für HCL		B3LYP Werte für CO	
Atomabstand in Ångstrom	Energie in Hartree	Atomabstand in Ångstrom	Energie in Hartree
5.62	-112.77066	5.62	-460.56028
5.75	-112.77055	5.75	-460.56016
5.88	-112.77046	5.88	-460.56006
6.01	-112.77039	6.01	-460.55998
6.14	-112.77032	6.14	-460.55991
6.27	-112.77026	6.27	-460.55986
6.4	-112.7702	6.4	-460.55982

Tabelle 7.2: Rohdaten der Energien nach Born Oppenheimer Näherung für verschiedene Bindungsabstände berechnet über GAUSSIAN für HCl mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G*

Atomabstand in Ångstrom	Energien nach der CCSD Methode für HCl		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
0.83	-112.28837	-112.52057	-112.53124
0.84	-112.33083	-112.56469	-112.57517
0.85	-112.37019	-112.60571	-112.61597
0.86	-112.40663	-112.6438	-112.65385
0.87	-112.44032	-112.67915	-112.68897
0.88	-112.47143	-112.71192	-112.72149
0.89	-112.50012	-112.74226	-112.75157
0.9	-112.52652	-112.77031	-112.77936
0.91	-112.55077	-112.79622	-112.80499
0.92	-112.57301	-112.82012	-112.82858
0.93	-112.59334	-112.84211	-112.85027
0.94	-112.6119	-112.86233	-112.87016
0.95	-112.62878	-112.88087	-112.88836
0.96	-112.64408	-112.89784	-112.90497
0.97	-112.6579	-112.91334	-112.92009
0.98	-112.67033	-112.92744	-112.9338
0.99	-112.68145	-112.94025	-112.9462
1.0	-112.69135	-112.95183	-112.95735
1.01	-112.7001	-112.96226	-112.96734
1.02	-112.70776	-112.97162	-112.97624
1.03	-112.71441	-112.97997	-112.98411
1.04	-112.7201	-112.98738	-112.99101
1.05	-112.7249	-112.9939	-112.99701
1.06	-112.72887	-112.99959	-113.00216
1.07	-112.73204	-113.0045	-113.00651
1.08	-112.73448	-113.00868	-113.01011
1.09	-112.73623	-113.01219	-113.01301
1.1	-112.73734	-113.01505	-113.01524
1.11	-112.73784	-113.01732	-113.01686
1.12	-112.73777	-113.01904	-113.0179
1.13	-112.73718	-113.02024	-113.0184

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für HCl		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
1.14	-112.73609	-113.02095	-113.01839
1.15	-112.73454	-113.02121	-113.01791
1.16	-112.73256	-113.02106	-113.01697
1.17	-112.73018	-113.02051	-113.01563
1.18	-112.72742	-113.0196	-113.01389
1.19	-112.72432	-113.01835	-113.01179
1.2	-112.7209	-113.01679	-113.00935
1.21	-112.71717	-113.01494	-113.00659
1.22	-112.71317	-113.01282	-113.00354
1.23	-112.70891	-113.01046	-113.00021
1.24	-112.70441	-113.00786	-112.99662
1.25	-112.69969	-113.00506	-112.99279
1.26	-112.69477	-113.00206	-112.98874
1.27	-112.68966	-112.99888	-112.98449
1.28	-112.68439	-112.99554	-112.98004
1.29	-112.67895	-112.99205	-112.97541
1.3	-112.67338	-112.98843	-112.97061
1.31	-112.66767	-112.98467	-112.96567
1.32	-112.66185	-112.98081	-112.96058
1.33	-112.65593	-112.97684	-112.95535
1.34	-112.6499	-112.97278	-112.95001
1.35	-112.6438	-112.96863	-112.94456
1.36	-112.63762	-112.96441	-112.939
1.37	-112.63137	-112.96011	-112.93335
1.38	-112.62507	-112.95576	-112.92761
1.39	-112.61872	-112.95134	-112.9218
1.4	-112.61233	-112.94688	-112.91591
1.41	-112.6059	-112.94237	-112.90996
1.42	-112.59945	-112.93781	-112.90395
1.43	-112.59298	-112.93322	-112.89788
2.5	-112.26977	-112.46478	-112.49705
2.63	-112.26398	-112.45445	-112.48758
2.76	-112.25963	-112.44681	-112.48062
2.89	-112.25634	-112.44115	-112.47546
3.02	-112.25383	-112.43695	-112.47163
3.15	-112.25192	-112.43385	-112.46877
3.28	-112.25044	-112.43155	-112.46664
3.41	-112.24931	-112.42985	-112.46505
3.54	-112.24842	-112.42859	-112.46386
3.67	-112.24774	-112.42766	-112.46296
3.8	-112.2472	-112.42696	-112.46229
3.93	-112.24679	-112.42645	-112.46179
4.06	-112.24647	-112.42606	-112.46142
4.19	-112.24622	-112.42577	-112.46114
4.32	-112.24603	-112.42556	-112.46093

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für HCl		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
4.45	-112.24589	-112.4254	-112.46078
4.58	-112.24577	-112.42528	-112.46066
4.71	-112.24568	-112.42518	-112.46056
4.84	-112.24561	-112.42511	-112.46049
4.97	-112.24555	-112.42505	-112.46043
5.1	-112.2455	-112.425	-112.46038
5.23	-112.24546	-112.42495	-112.46034
5.36	-112.24543	-112.42492	-112.4603
5.49	-112.2454	-112.42489	-112.46027
5.62	-112.24537	-112.42486	-112.46025
5.75	-112.24535	-112.42484	-112.46023
5.88	-112.24533	-112.42482	-112.46021
6.01	-112.24531	-112.4248	-112.46019
6.14	-112.2453	-112.42479	-112.46017
6.27	-112.24528	-112.42477	-112.46016
6.4	-112.24527	-112.42476	-112.46015

Tabelle 7.3: Rohdaten der Energien nach Born Oppenheimer Näherung für verschiedene Bindungsabstände berechnet über GAUSSIAN für HCl mit der Methode CCSD und dem Basissatz 6-31G*

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für CO		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
0.83	-459.73567	-459.86221	-459.87618
0.84	-459.75776	-459.88436	-459.89835
0.85	-459.77861	-459.90528	-459.91929
0.86	-459.79828	-459.92503	-459.93906
0.87	-459.81684	-459.94366	-459.95771
0.88	-459.83434	-459.96124	-459.9753
0.89	-459.85082	-459.97781	-459.9919
0.9	-459.86635	-459.99342	-460.00753
0.91	-459.88097	-460.00813	-460.02226
0.92	-459.89472	-460.02197	-460.03613
0.93	-459.90764	-460.035	-460.04918
0.94	-459.91979	-460.04724	-460.06145
0.95	-459.93119	-460.05875	-460.07298
0.96	-459.94188	-460.06955	-460.08381
0.97	-459.9519	-460.07969	-460.09396
0.98	-459.96128	-460.08919	-460.10349
0.99	-459.97006	-460.09808	-460.11241
1.0	-459.97826	-460.1064	-460.12076
1.01	-459.98591	-460.11418	-460.12856
1.02	-459.99304	-460.12144	-460.13585
1.03	-459.99968	-460.12821	-460.14264
1.04	-460.00585	-460.13451	-460.14897

Atomabstand in Ängström	Energien nach der CCSD Methode für CO		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
1.05	-460.01157	-460.14036	-460.15486
1.06	-460.01686	-460.1458	-460.16032
1.07	-460.02175	-460.15083	-460.16538
1.08	-460.02626	-460.15548	-460.17006
1.09	-460.03041	-460.15977	-460.17438
1.1	-460.0342	-460.16372	-460.17836
1.11	-460.03768	-460.16734	-460.18201
1.12	-460.04083	-460.17065	-460.18535
1.13	-460.0437	-460.17367	-460.1884
1.14	-460.04628	-460.17641	-460.19117
1.15	-460.0486	-460.17889	-460.19368
1.16	-460.05066	-460.18111	-460.19593
1.17	-460.05248	-460.1831	-460.19795
1.18	-460.05408	-460.18486	-460.19974
1.19	-460.05545	-460.1864	-460.20132
1.2	-460.05663	-460.18774	-460.20269
1.21	-460.05761	-460.18889	-460.20387
1.22	-460.05841	-460.18986	-460.20487
1.23	-460.05903	-460.19066	-460.2057
1.24	-460.05949	-460.19129	-460.20637
1.25	-460.05979	-460.19177	-460.20688
1.26	-460.05995	-460.1921	-460.20725
1.27	-460.05997	-460.19229	-460.20747
1.28	-460.05985	-460.19236	-460.20757
1.29	-460.05961	-460.1923	-460.20755
1.3	-460.05926	-460.19212	-460.20741
1.31	-460.05879	-460.19184	-460.20716
1.32	-460.05822	-460.19145	-460.20681
1.33	-460.05755	-460.19096	-460.20636
1.34	-460.05679	-460.19038	-460.20582
1.35	-460.05594	-460.18972	-460.20519
1.36	-460.05501	-460.18897	-460.20449
1.37	-460.054	-460.18815	-460.2037
1.38	-460.05292	-460.18726	-460.20285
1.39	-460.05177	-460.1863	-460.20193
1.4	-460.05056	-460.18528	-460.20095
1.41	-460.04929	-460.1842	-460.19992
1.42	-460.04796	-460.18307	-460.19882
1.43	-460.04658	-460.18188	-460.19768
2.5	-459.86738	-460.0342	-460.06076
2.63	-459.85138	-460.02393	-460.05283
2.76	-459.83685	-460.01559	-460.04709
2.89	-459.82373	-460.0091	-460.04347
3.02	-459.81191	-460.00435	-460.04186
3.15	-459.80129	-460.00122	-460.04212

Atomabstand in Ängstrom	Energien nach der CCSD Methode für CO		
	(SCF) in Hartree	(MP2) in Hartree	(MP3) in Hartree
3.28	-459.79178	-459.99959	-460.04411
3.41	-459.78327	-459.99933	-460.04765
3.54	-459.77567	-460.00029	-460.05257
3.67	-459.7689	-460.00233	-460.05868
3.8	-459.76287	-460.00531	-460.0658
3.93	-459.7575	-460.00909	-460.07376
4.06	-459.75273	-460.01357	-460.0824
4.19	-459.74848	-460.01861	-460.09157
4.32	-459.7447	-460.02412	-460.10114
4.45	-459.74133	-460.03	-460.111
4.58	-459.73832	-460.0362	-460.12106
4.71	-459.73563	-460.04264	-460.13124
4.84	-459.7332	-460.04927	-460.14147
4.97	-459.73102	-460.05604	-460.15172
5.1	-459.72904	-460.06294	-460.16193
5.23	-459.72723	-460.06993	-460.17209
5.36	-459.72558	-460.07698	-460.18217
5.49	-459.72407	-460.0841	-460.19216
5.62	-459.72267	-460.09126	-460.20206
5.75	-459.72136	-460.09846	-460.21186
5.88	-459.72015	-460.10569	-460.22157
6.01	-459.71901	-460.11296	-460.23118
6.14	-459.71793	-460.12025	-460.24071
6.27	-459.71692	-460.12758	-460.25015
6.4	-459.71595	-460.13493	-460.25951