**Cvičení 3**

**Disperzní interakce mezi atomy argonu**

V tomto cvičení si ukážeme vliv metody a báze na výpočtu interakčních energií komplexů, které jsou vázány slabými molekulovými (Van der Waalsovými) interakcemi. Jako prototypický systém nám poslouží dimer atomů argonu, které jsou vázány pouze disperzními (Londonovými) silami. Výpočet disperzních sil představuje pro kvantovou chemii velký problém. Jednoduché metody jako HF nebo DFT tyto interakce nejsou z principu věci popsat.

Interakční energii spočteme tak, že od celkové energie dimeru odečteme dvojnásobek energie jednoho atomu (musí být spočten se stejnou metodou a bází!).

1. Vykreslete křivku interakční energie dimeru Ar pro metody HF, MP2, CCSD(T), BP86 a BP86 s Grimmeho disperzní korekcí (D3). Pro všechny výpočty použijte bázi aug-cc-pVDZ. Ukázkový vstup pro scan podél koordináty najdete ve složce Ex3\_Ar2.
2. Vliv báze…metoda CCSD(T)
3. BSSE