

Handleiding Molecuulwijzer



Welkom!

Deze handleiding is ontwikkeld door de Outreach Commissie van de afdeling Scheikunde en Farmaceutische Wetenschappen aan de Vrije Universiteit Amsterdam als ondersteuning bij het gebruik van de online Molecuulwijzer. De tool maakt het werken met moleculen in 3D inzichtelijk en toegankelijk voor onderwijsdoeleinden.

De Molecuulwijzer website is ontwikkeld voor gebruik op een computer, zodat alle functies optimaal werken en duidelijk zichtbaar zijn. Hoewel de website ook te gebruiken is op een telefoon, is deze niet volledig geoptimaliseerd voor kleinere schermen. Alle screenshots in deze handleiding zijn dan ook afkomstig van de computerweergave; op de telefoon kan de weergave enigszins afwijken.

Mocht er informatie ontbreken of heb je vragen of suggesties, dan kun je contact met ons opnemen via digitalechemie@vu.nl.

Wij wensen je veel succes en plezier bij het ontdekken en onderzoeken van moleculen in 3D.

Hartelijke groet,

Thomas Hansen, Pascal Vermeeren en Guusje van Schaick

Inhoudsopgave

1. Basisfuncties	4
1.1 Moleculen vinden	4
1.2 Moleculen bekijken	6
2. Analysefuncties	8
2.1 Afstanden en hoeken bepalen	8
2.2 IR-spectra	10
2.3 Chemische reacties en reactiepaden	12
2.4 Waterstofbruggen	14
2.5 Isomerie	15
3. Applicaties	17
3.1. Biologische applicaties	17
4. Hoe zijn wij aan de data gekomen?	19

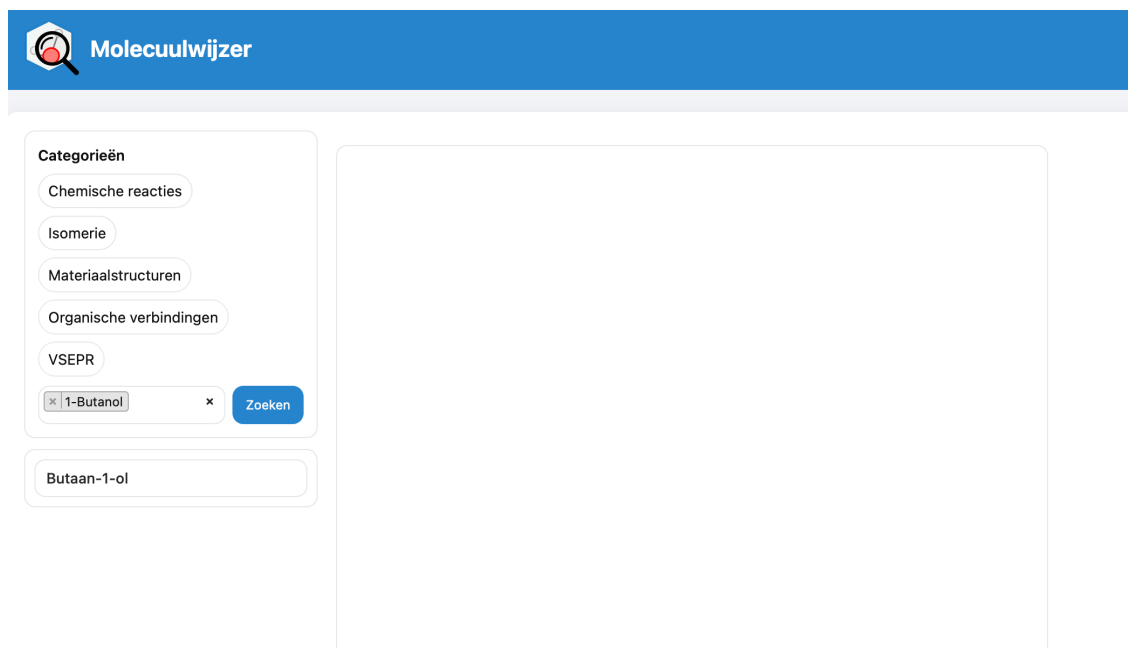
1. Basisfuncties

1.1 Moleculen vinden

De zoekfunctie maakt het mogelijk om doelgericht te zoeken naar specifieke moleculen of groepen van moleculen met vergelijkbare eigenschappen. Er kan gezocht worden op molecuulnaam, functionele groep of door de categorieën te doorbladeren.

Zoeken op molecuulnaam

Typ een molecuulnaam in het zoekveld en druk op *Zoeken*. De zoekresultaten verschijnen als een lijst onder het zoekveld. In het voorbeeld hieronder is gezocht naar het molecuul 1-butanol. Er kan zowel gezocht worden op de molecuulnamen in de oude IUPAC-naamgeving (bijv. *1-butanol*) als de nieuwe naamgeving (bijv. *butaan-1-ol*). Om de zoekactie te resetten, druk op het Molecuulwijzer-logo.



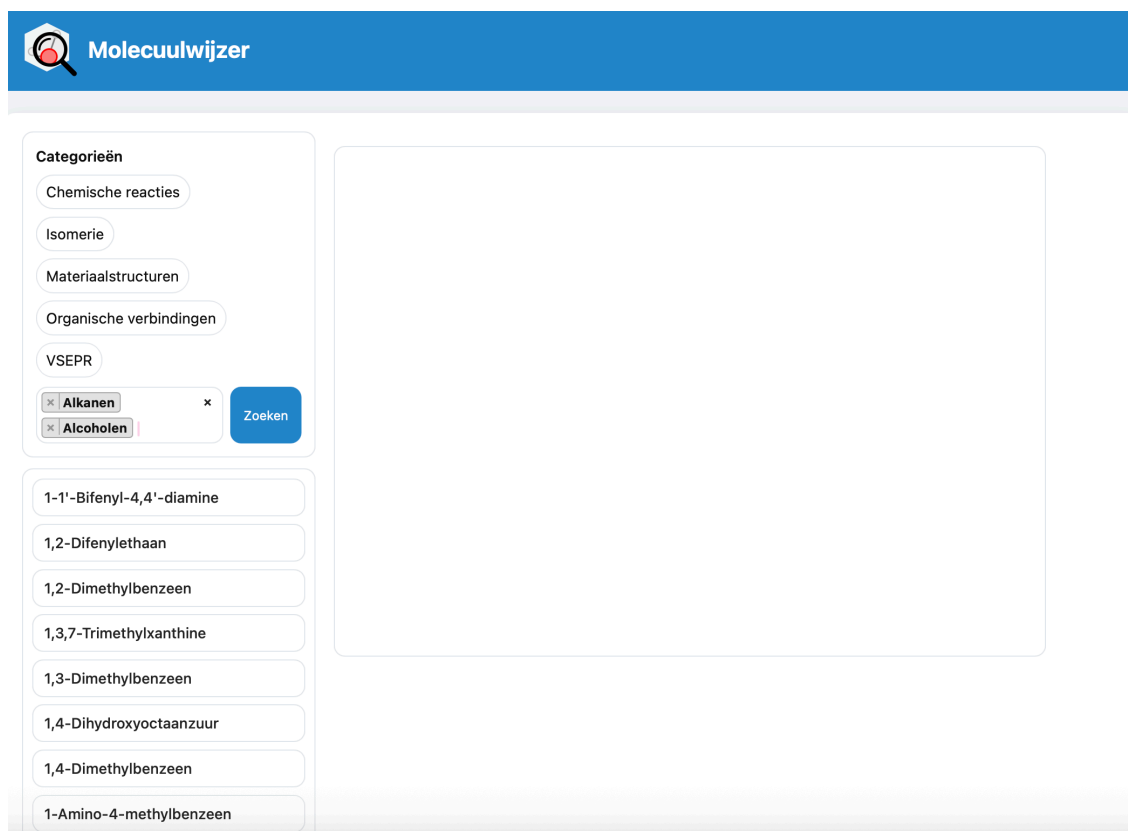
Zoeken op kenmerken

Via deze weg kunnen moleculen worden gefilterd op basis van gedeelde eigenschappen, structuren of thema's. Denk hierbij aan chemische (functionele) groepen, zoals alkanen of alcoholen, maar ook aan onderwerpen als biochemische structuren, vertakt of DNA.

Kenmerken worden in de zoekresultaten vetgedrukt weergegeven. Er kunnen meerdere kenmerken gecombineerd worden om de zoekresultaten verder te verfijnen. In het onderstaande voorbeeld zijn de kenmerken *alkanen* en *alcoholen* geselecteerd. De lijst onder het zoekveld toont vervolgens alleen moleculen die aan beide kenmerken voldoen. Scrollen door lijst met zoekresultaten toont alle moleculen die binnen deze criteria vallen.

Het is ook mogelijk om specifiek te zoeken naar moleculen waarvoor een IR-spectrum beschikbaar is. Door het kenmerk *IR-spectroscopie* te selecteren, worden alleen moleculen weergegeven die over een IR-spectrum beschikken. Dit kenmerk kan gecombineerd worden met andere kenmerken, bijvoorbeeld: *alcoholen*. Meer informatie over het analyseren van IR-spectra is te vinden in **2.2 IR-spectra**.

Om de filters te resetten, druk op het Molecuulwijzer-logo.



Bladeren door molecuulcategorieën

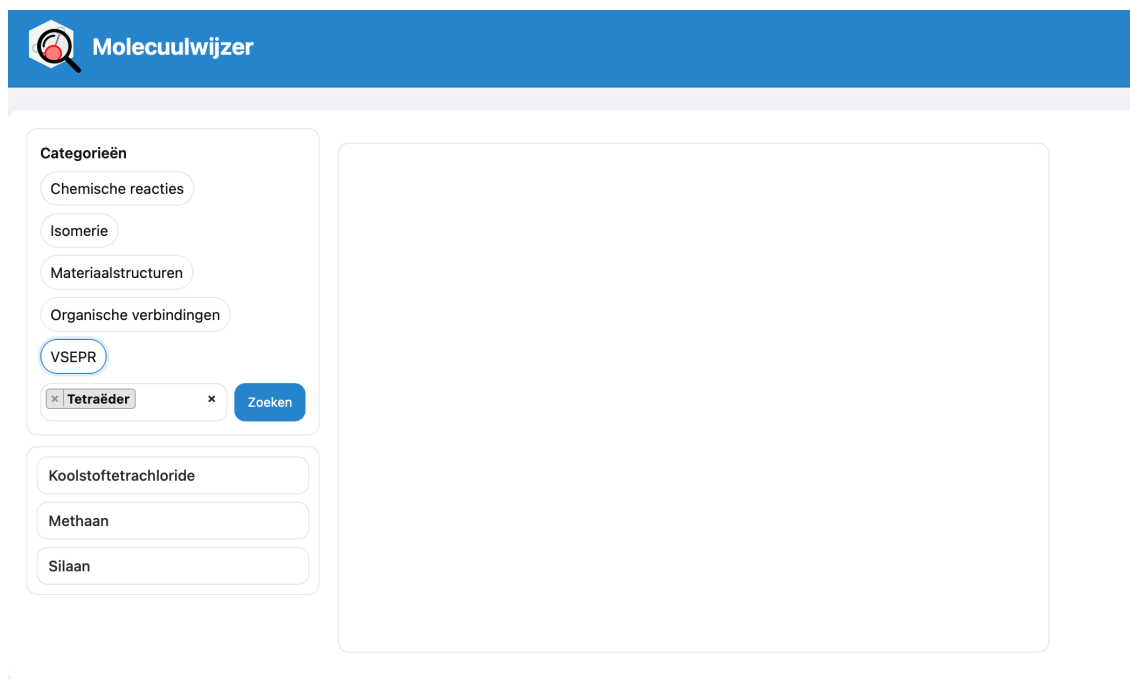
De database is overzichtelijk opgebouwd in categorieën zodat verschillende typen moleculen ook ontdekt kunnen worden zonder gebruik te maken van zoektermen. Deze manier van zoeken is vooral handig wanneer nog niet precies vaststaat naar welk molecuul wordt gezocht.

Er zijn vijf hoofdcategorieën:

- Chemische reacties
- Isomerie
- Materiaalstructuren
- Organische verbindingen
- VSEPR

Selecteer een categorie om de bijbehorende moleculen weer te geven. Door te scrollen door de lijst met zoekresultaten, worden alle moleculen binnen de gekozen categorie getoond. Ook kan de zoekbalk binnen de categorieën worden gebruikt om de resultaten verder te verfijnen.

Om de categorie te deselecteren, druk op een geselecteerde categorie om deze uit te schakelen, of druk op het Molecuulwijzer-logo om de zoekactie volledig te resetten.



1.2 Moleculen bekijken

Door op een molecuul in de zoekresultaten te klikken, wordt het desbetreffende molecuul weergegeven in het visualisatievenster. Het molecuul wordt daarbij standaard roterend weergegeven. De automatische rotatie kan worden gestopt door de optie *Rotatie* onder het visualisatievenster te deselecteren.

Er wordt altijd een legenda in het venster getoond die aangeeft welke kleur overeenkomt met welk atoomtype. Deze legenda kan worden verborgen door de optie *Legenda* onder het visualisatievenster te deselecteren.

Wanneer (een deel van) het molecuul niet goed zichtbaar is, kunnen de volgende acties worden uitgevoerd:

- **Draaien:** klik op het visualisatievenster en beweeg de muis om het molecuul te draaien.
- **In- en uitzoomen:** klik op het visualisatievenster en scroll om in of uit te zoomen op het molecuul.

Dubbelklikken op een molecuul in de zoekresultaten herstelt de weergave naar de oorspronkelijke positie, grootte en automatische rotatie.

 **Molecuulwijzer**

Categorieën

Chemische reacties

Isomerie

Materiaalstructuren

Organische verbindingen

VSEPR

Zoeken

Fosforpentachloride

Koolstofdioxide

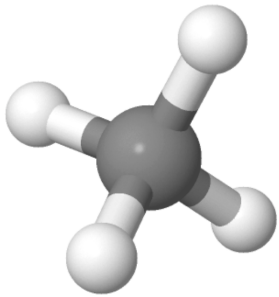
Koolstofmonoxide

Koolstoftetrachloride

Methaan
Tetraëder

Ozon

Methaan



H

C

JSmol

Rotatie ☐ Legenda ☒ Afstanden ☐ Hoeken ☐ IR-spectrum ☐

2. Analysefuncties

2.1 Afstanden en hoeken bepalen

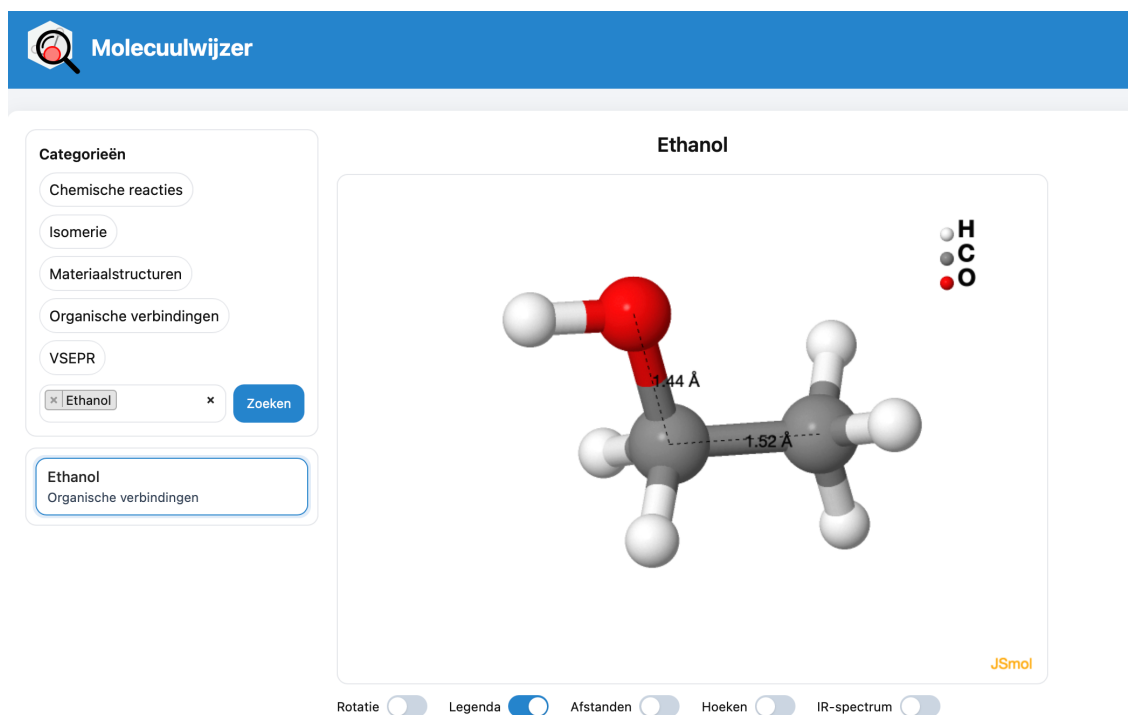
Voor een nauwkeurige analyse van ruimtelijke structuren kunnen de meetfuncties worden gebruikt. In het visualisatievenster van de Molecuulwijzer is het mogelijk afstanden en hoeken tussen atomen weer te geven.

Afstanden bepalen

Er zijn twee manieren om afstanden te bekijken:

- **Alle afstanden weergeven:** gebruik de optie *Afstanden* onder het visualisatievenster om alle afstanden weer te geven. Deze functie biedt een algemeen overzicht van de bindingsafstanden binnen het gekozen systeem. Door deze optie uit te schakelen, worden de afstanden weer verborgen.
- **Afstand tussen twee atomen meten:** dubbelklik op het eerste atoom, verplaats de muis naar het tweede atoom (roze tekst verschijnt) en dubbelklik opnieuw om de afstand te meten. Afstanden kunnen worden gemeten tussen naburige atomen of tussen atomen die verder van elkaar liggen. De gemeten afstand kan worden verwijderd door dezelfde stappen te herhalen als bij het meten.

De gemeten bindingsafstand wordt weergegeven in Ångström (Å), waarbij geldt dat $1 \text{ Å} = 100 \text{ pm}$.



Verdieping: Afstanden binnen moleculen

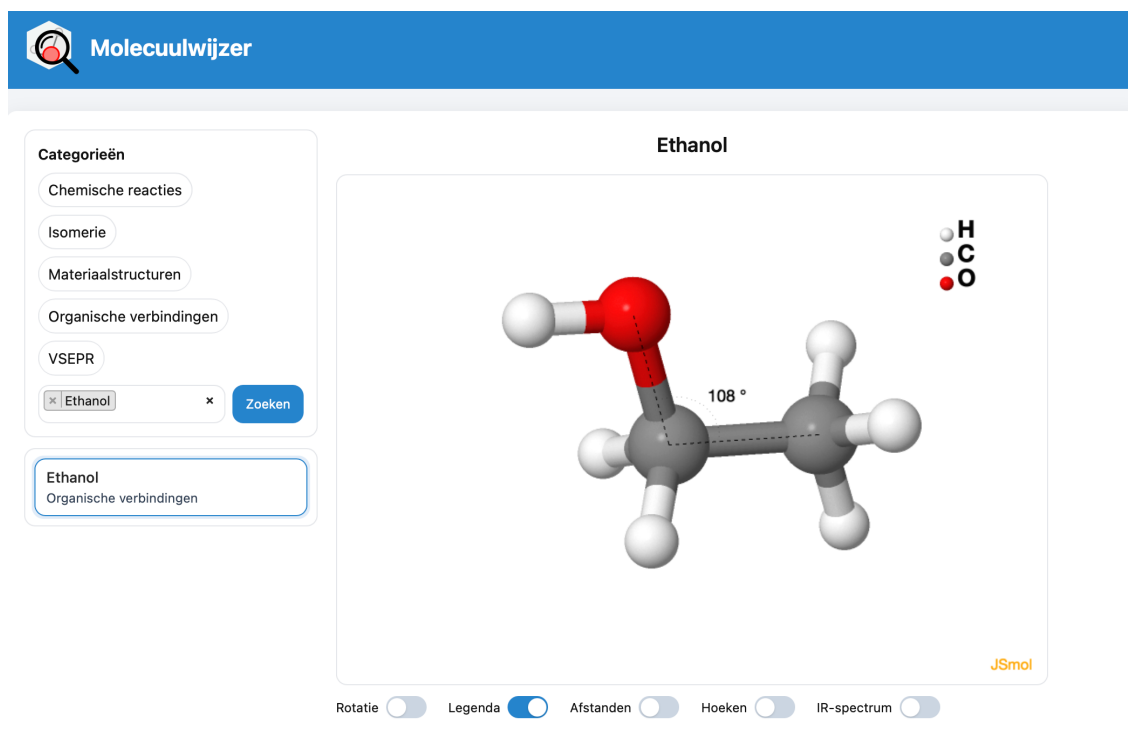
Het bepalen van afstanden binnen moleculen is van groot belang voor het begrijpen van hun structuur en stabiliteit. De afstand tussen twee gebonden atomen, de bindingslengte, geeft inzicht in de sterkte en aard van de chemische binding. Daarnaast kunnen ook afstanden tussen atomen van verschillende moleculen worden gemeten om niet-covalente interacties te onderzoeken, zoals waterstofbruggen, van der Waals of π - π -interacties. Deze gegevens zijn essentieel voor het begrijpen van moleculaire herkenning, zelfassemblage en biochemische interacties.

Hoeken bepalen

Er zijn twee manieren om hoeken te bekijken:

- **Alle hoeken weergeven:** gebruik de optie *Hoeken* onder het visualisatievenster om alle hoeken in de structuur te tonen. Deze functie biedt een algemeen overzicht van de bindingshoeken binnen het gekozen systeem. Door deze optie uit te schakelen, worden alle hoeken weer verborgen.
- **Hoek tussen drie atomen meten:** dubbelklik op het eerste atoom, beweeg de muisaanwijzer naar het tweede atoom en klik eenmaal (er verschijnt roze tekst). Beweeg vervolgens de muis naar het derde atoom en dubbelklik om de hoek te meten. De gemeten hoek kan worden verwijderd door dezelfde stappen te herhalen als bij het meten.

De bindingshoek wordt getoond in graden ($^{\circ}$).



Verdieping: Hoeken binnen moleculen

Het meten van hoeken binnen moleculen geeft inzicht in hun geometrie en ruimtelijke oriëntatie. De bindingshoek weerspiegelt de manier waarop atomen zich rondom een centraal atoom positioneren en is daarmee bepalend voor de vorm van het molecuul.

Kennis van bindingshoeken is essentieel voor het begrijpen van moleculaire symmetrie, reactiviteit en de ruimtelijke organisatie van chemische bindingen. Moleculen vertonen vaak karakteristieke hoeken die overeenkomen met bekende ruimtelijke geometrieën, zoals lineair (180°), vlak trigonaal (120°) en tetraëdrisch ($109,5^\circ$).

Het herkennen van deze typische hoeken helpt bij het bepalen van de VSEPR-structuur en bij het interpreteren van de ruimtelijke opbouw van het molecuul. Tip: kies de categorie *VSEPR* om voorbeelden van verschillende systemen te ontdekken!

2.2 IR-spectra

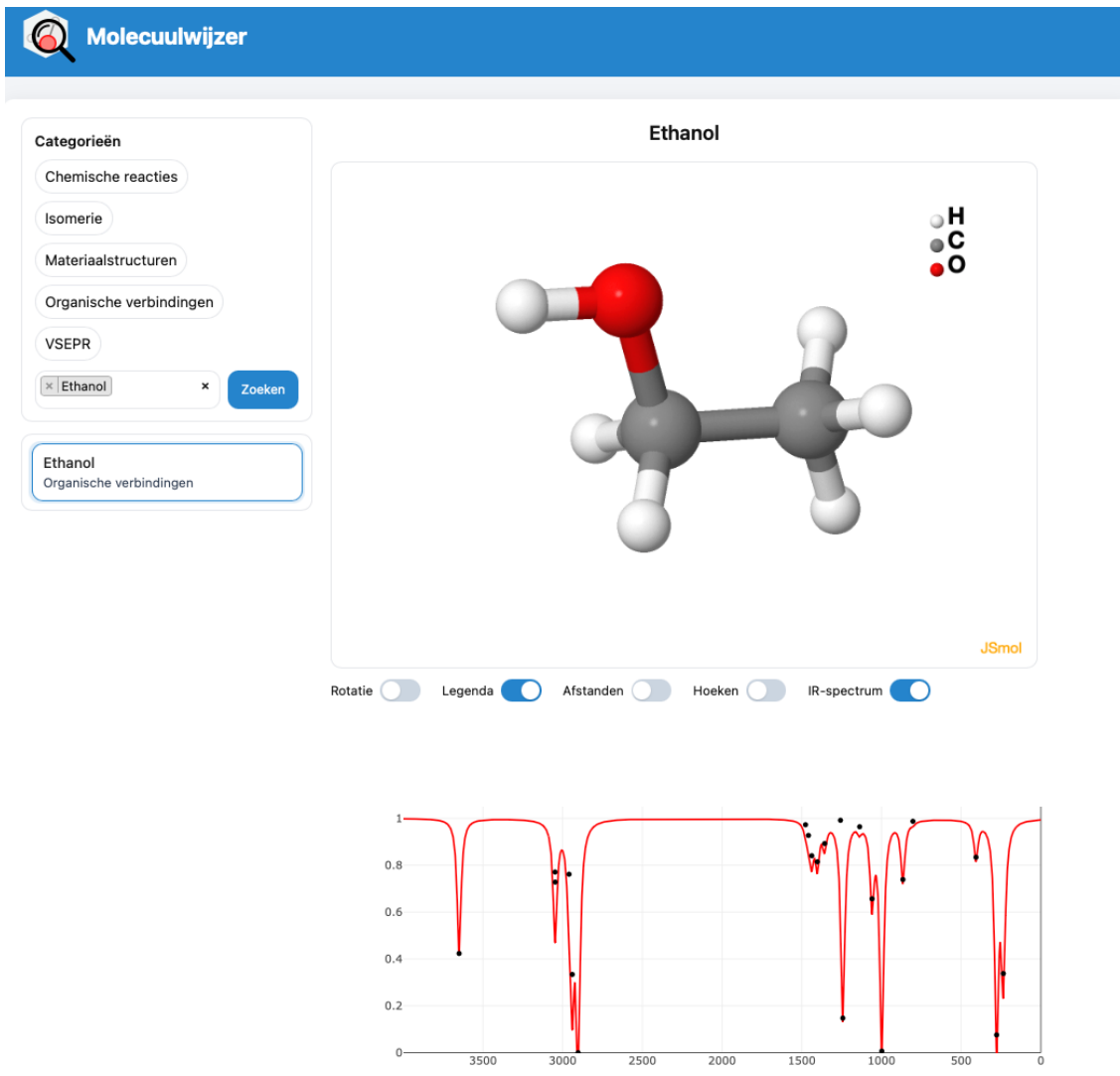
Voor de (an)organische moleculen in de Molecuulwijzer is er een (infrarood) IR-spectrum beschikbaar dat gekoppeld is aan het visualisatievenster. Ook kan de zoekterm *IR-spectroscopie* gebruikt worden om alle moleculen met een beschikbaar IR-spectrum weer te geven in de lijst met zoekresultaten. Activeer de optie *IR-spectrum* onder het visualisatievenster om het spectrum te tonen. Het IR-spectrum is interactief: er kan worden in- en uitgezoomd om specifieke gebieden in meer detail te bekijken.

IR-spectra visualiseren en analyseren

Beweeg de muis over een piek om het golfgetal (cm^{-1}) af te lezen. Klik op een zwarte markering bij een piek om de overeenkomende vibratiemodus in het visualisatievenster te tonen. Zo worden (theoretische) spectra direct gekoppeld aan de vibraties in het molecuul.

Door in het IR-spectrum te klikken en met de muis te slepen, kan worden ingezoomd op een specifieke regio. Een dubbele klik op het spectrum herstelt de oorspronkelijke weergave.

Het IR-spectrum kan verborgen worden door de optie uit te schakelen onder het visualisatievenster.



Verdieping: IR spectra

Elke piek in het spectrum komt overeen met een specifieke vibratie van atomen of bindingen binnen een molecuul. Doordat verschillende bindingstypen energie op karakteristieke frequenties absorberen, kan het IR-spectrum worden gebruikt om functionele groepen te identificeren, zoals O-H, C=O of N-H bindingen.

Het analyseren van deze absorptiepieken geeft waardevolle informatie over de chemische structuur en moleculaire samenstelling van een stof. IR-spectroscopie vormt daarmee een krachtig hulpmiddel voor structurele analyse en het bevestigen van de identiteit van verbindingen.

2.3 Chemische reacties en reactiepaden

Binnen de categorie *Chemische reacties* zijn verschillende voorbeelden van interessante reacties beschikbaar. Zo kunnen reactiebarrières en overgangstoestanden van eliminatie- en substitutiereacties bestudeerd worden via de optie *Reactiepad*, zichtbaar onder het visualisatievenster na het selecteren van de gewenste reactie. Daarnaast kunnen animaties van verbrandingsreacties bekeken worden, waarbij stap voor stap de afbraak geobserveerd kan worden.

Reactiepad visualiseren en analyseren

1. **Reactiepad weergeven:** selecteer de optie *Reactiepad* onder het visualisatievenster om het energieprofiel van een chemische reactie te tonen. De grafiek laat het verloop zien van reactanten, via de overgangstoestand, naar de producten.
2. **Structuren bekijken:** Beweeg je muis over een zwart punt in de grafiek om de relatieve energie van dat stadium af te kunnen lezen. Klik vervolgens op een punt om de overeenkomende structuur in het visualisatievenster weer te geven. Elk punt vertegenwoordigt een belangrijk reactiestadium: het reactantcomplex, de overgangstoestand of het productcomplex.
3. **Reactieverloop afspelen:** gebruik de besturing onder de grafiek om de animatie van het reactiepad te starten, pauzeren of in een loop af te spelen. De afspeelsnelheid kan worden aangepast van 0,25x tot 2x de standaardsnelheid.
4. **In- en uitzoomen:** door in op het reactiepad te klikken en met de muis te slepen, kan worden ingezoomd op een specifieke regio. Een dubbele klik op het reactiepad herstelt de oorspronkelijke weergave.



Categorieën

Chemische reacties

Isomerie

Materiaalstructuren

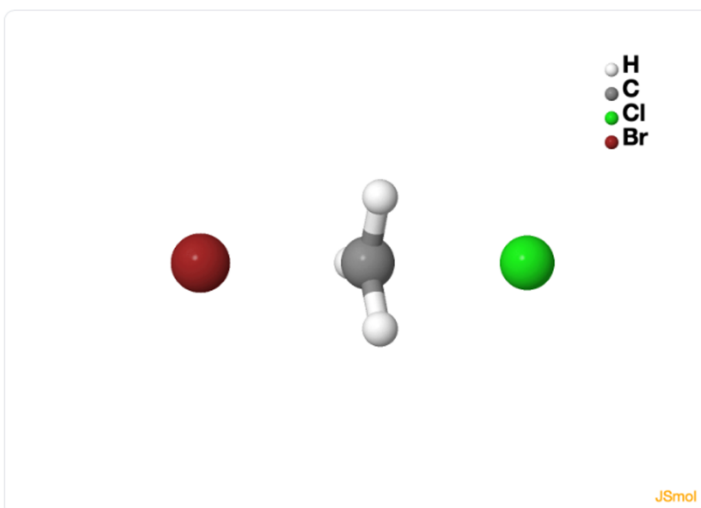
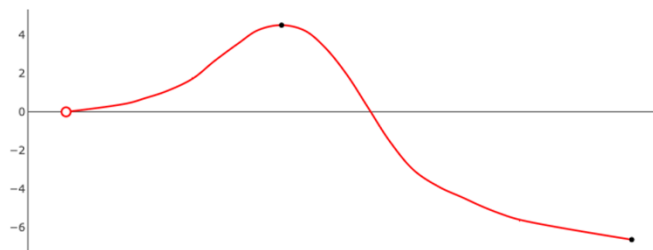
Organische verbindingen

VSEPR

Zoeken

E2 (CH3CH2Cl + F^-)E2 (CH3CH2F + Br^-)SN2 (CH3Br + Cl^-)

Substitutie reactie

SN2 (CH3CH2Cl + F^-)SN2 (CH3CH2F + Br^-)SN2 (CH3CH2F + Cl^-)SN2 (CH3Cl + Cl^-)SN2 (CH3Cl + F^-)SN2 (CH3F + F^-)SN2 (CH3I + Cl^-)SN2 (CH3Br + Cl^-)Rotatie ☐ Legenda ☒ Afstanden ☐ Hoeken ☐ Reactiepad ☒ Loop ☐

▶ || 0.25x 0.5x 1x 1.5x 2x

Verdieping: Reacties & reactiepaden

De relatieve energie van een reactie kan worden berekend met de formule:

$$\Delta E = E[AB] - E[A] - E[B]$$

waarbij $E[A]$ en $E[B]$ de energieën van reactanten zijn en $E[AB]$ de energie is van het reactiecomplex op een bepaald punt in het energieprofiel.

De overgangstoestand wordt aangeduid met een zwarte markering op de hoogste piek van de curve. De hoogte van deze piek stelt de reactiebarrière voor: de hoeveelheid energie die nodig is om de reactie te laten plaatsvinden.

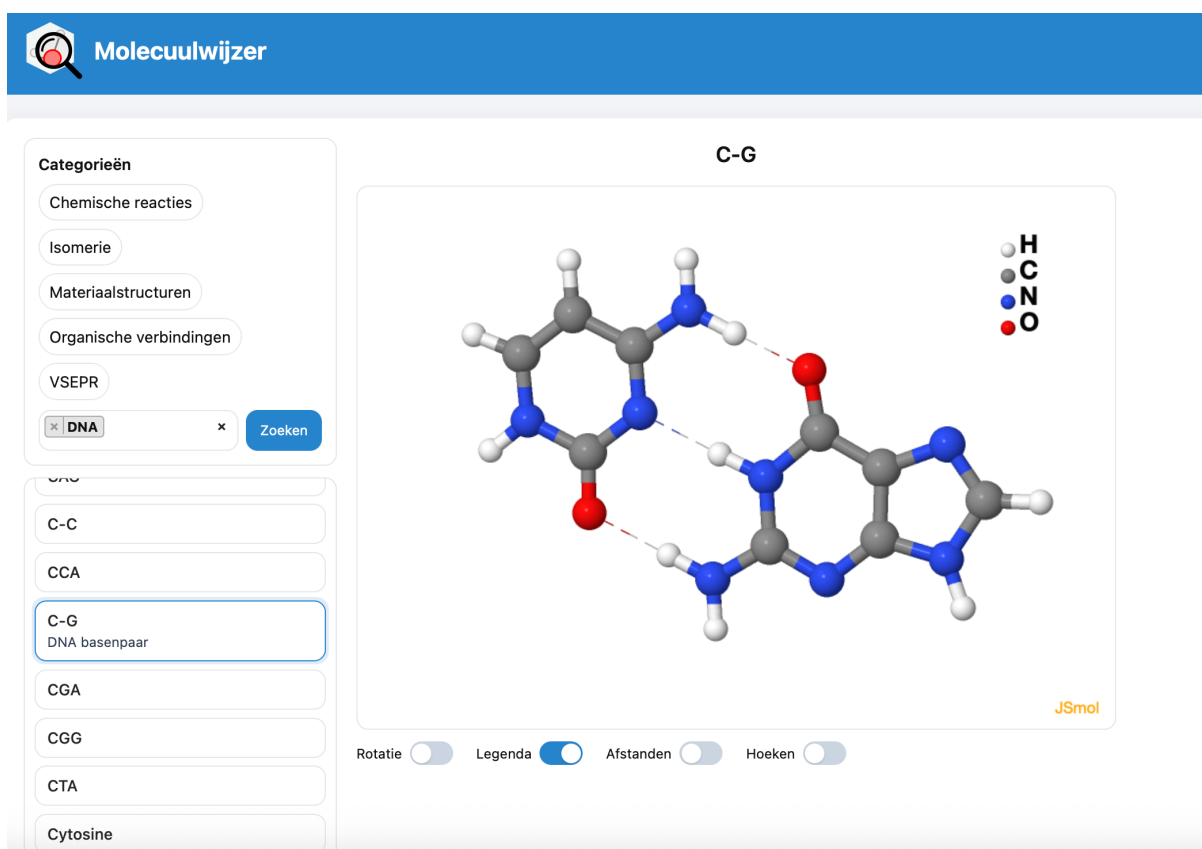
2.4 Waterstofbruggen

Waterstofbruggen zijn niet-covalente interacties die ontstaan tussen een waterstofatoom dat gebonden is aan een sterk elektronegatief atoom, zoals zuurstof, stikstof of fluor, en een vrij elektronenpaar van een ander elektronegatief atoom. Ondanks dat deze interacties zwakker zijn dan covalente bindingen, spelen waterstofbruggen een cruciale rol in de structuur, stabiliteit en herkenning van moleculen. Er kunnen waterstofbruggen gevormd worden: intermoleculair (tussen atomen van twee moleculen) en intramoleculair (binnen hetzelfde molecuul tussen twee functionele groepen).

Wanneer waterstofbruggen aanwezig zijn, geeft de Molecuulwijzer deze automatisch weer met stippellijnen tussen de betrokken atomen. De afstand tussen deze atomen kan, net als bij andere interacties en bindingen, worden gemeten met de afstandmeetfunctie.

Voorbeelden van waterstofbruggen in de Molecuulwijzer:

- Intermoleculair:
 - Tussen de nucleobasen guanine en cytosine (C-G) zitten drie waterstofbruggen
- Intramoleculair:
 - L-Asparagine: waterstofbrug bevindt zich tussen de amidegroep ($-\text{CONH}_2$) en het zuurstofatoom van de carbonzuurgroep ($-\text{COOH}$).



2.5 Isomerie

In de Molecuulwijzer zijn voorbeelden opgenomen die de verschillende vormen van isomerie laten zien. Er wordt onderscheid gemaakt tussen drie hoofdtypen:

- **Plaatsisomerie**, waarbij functionele groepen zich op verschillende posities in het molecuul bevinden;
- **Spiegelbeeld isomerie**, waarbij twee moleculen elkaars spiegelbeeld zijn maar niet overlappen (enantiomeren);
- **Cis/trans-isomerie**, ook bekend als *Z/E*-isomerie, waarbij dezelfde groepen zich in verschillende ruimtelijke oriëntaties rond een dubbele binding of ring bevinden.

Welke vorm van isomerie van toepassing is op een molecuul, wordt weergegeven onder de molecuulnaam in de lijst met zoekresultaten na het selecteren van het betreffende molecuul.

Isomeren weergeven en bestuderen

Selecteer de categorie *Isomerie* om de beschikbare voorbeelden te bekijken. In de lijst onder het zoekveld verschijnen alle moleculen die binnen deze categorie vallen. Wanneer een voorbeeld wordt geopend in het visualisatievenster, worden beide isomeerstructuren naast elkaar weergegeven. Hierdoor kunnen subtiele verschillen in stereochemie en spiegelbeeldisomerie eenvoudig worden bestudeerd.

De afzonderlijke isomeren kunnen ook los van elkaar worden geopend voor specifieke analyses, zoals het meten van afstanden of het onderzoeken van het IR-spectrum. Typ hiervoor de molecuulnaam in het zoekveld; beide isomeren worden dan afzonderlijk weergegeven.



Categorieën

Chemische reacties

Isomerie

Materiaalstructuren

Organische verbindingen

VSEPR

Zoeken

Butanol

Carvone

Citronellol

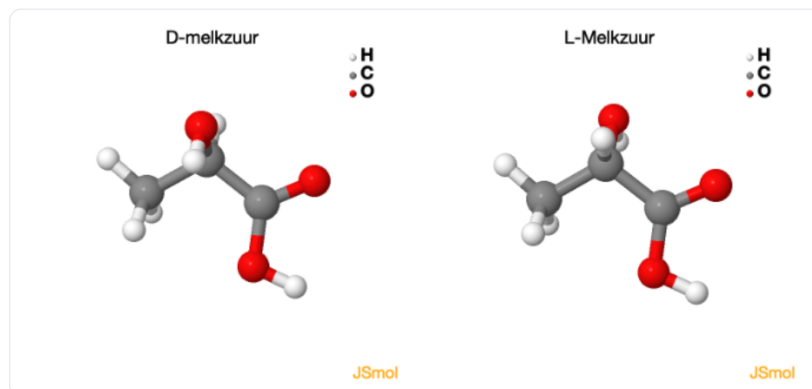
Dichlooretheen

Limoneen

Melkzuur

Spiegelbeeld isomerie

Methylbenzenol



Legenda ☒

Verdieping: Isomerie

Verbindingen met dezelfde molecuulformule maar een andere rangschikking van atomen, zogenaamde isomeren, kunnen sterk uiteenlopende eigenschappen vertonen. Deze verschillen ontstaan doordat de manier waarop atomen in de ruimte zijn geordend, direct invloed heeft op de chemische bindingen en daarmee op de stabiliteit, reactiviteit en interactie met andere moleculen. Zo kunnen structurele isomeren andere functionele groepen bevatten en daardoor een heel ander reactiegedrag vertonen, terwijl stereoisomeren, die alleen verschillen in de ruimtelijke oriëntatie van atomen, vaak een andere geur, kleur of biologische werking hebben.

In de farmacie speelt dit een bijzonder belangrijke rol: één en hetzelfde molecuul kan als linker- of rechterspiegelbeeld (enantiomeer) voorkomen, waarbij slechts één van de twee biologisch actief of veilig is. Het andere enantiomeer kan minder effectief zijn of zelfs schadelijke bijwerkingen veroorzaken. Bewustzijn van isomerie is daarom essentieel bij het ontwerpen, analyseren en toepassen van chemische stoffen, zowel in onderzoek als in de industrie.

3. Applicaties

3.1. Biologische applicaties

De Molecuulwijzer bevat een selectie van relevante biologische moleculen die in levende organismen voorkomen, waaronder suikers, aminozuren, nucleotiden en lipiden. Gebruik de zoekterm *Biochemische structuur* om deze moleculen te vinden. Als een specifiek molecuul ontbreekt, neem dan gerust contact met ons op; wij kijken graag of we het kunnen toevoegen.

Bouwstenen van DNA en RNA

DNA en RNA bestaan uit nucleotiden, de bouwstenen van ons genetisch materiaal. Elke nucleotide bevat een suiker, een fosfaatgroep en een nucleobase. Deze basen, adenine (A), thymine (T), cytosine (C), guanine (G) en in RNA uracil (U), vormen samen de genetische code van het leven.

Voorbeelden in de Molecuulwijzer:

- **Nucleobasen**, zoals adenine en cytosine
- **Baseparen**, zoals A-T en C-G
- **Mismatch-baseparen**, zoals A-A of G-T
- **DNA-fragmenten**, bestaande uit korte ketens van drie baseparen

Zoektermen: *Nucleotiden, DNA, DNA base, DNA basenpaar, RNA basenpaar, Mismatched basenpaar & DNA keten 3 basenparen*

Bouwstenen van eiwitten: aminozuren

Aminozuren zijn de essentiële bouwstenen van het menselijk lichaam. Ze vormen de basis van eiwitten, die een centrale rol spelen in talloze biologische processen. Eiwitten zorgen onder meer voor weefselopbouw, versnellen chemische reacties als enzymen en vervoeren moleculen door het lichaam.

Elk aminozuur heeft een vergelijkbare basisstructuur, bestaande uit een centraal koolstofatoom dat is gebonden aan een aminogroep ($-NH_2$), een carboxylgroep ($-COOH$), en een variabele R-groep. De R-groep verschilt per aminozuur en bepaalt de specifieke eigenschappen van elk aminozuur. Omdat het centrale koolstofatoom vier verschillende bindingen heeft, is het chiraal. Hierdoor kunnen aminozuren in twee spiegelbeeldvormen voorkomen: de L-vorm en de D-vorm. In levende organismen komen vrijwel uitsluitend L-aminozuren voor, die de bouwstenen vormen van eiwitten.

In de Molecuulwijzer zijn alle 20 natuurlijke L-aminozuren te vinden.

Zoekterm: *Aminozuren*

Suikers als energiebron

Suikers, ook wel koolhydraten genoemd, zijn een essentiële energiebron voor het menselijk lichaam. Ze leveren de brandstof die cellen nodig hebben om te functioneren, vooral in hersenen, spieren en rode bloedcellen.

Na het eten van suikers worden de grotere koolhydraten, zoals zetmeel, stap-voor-stap afgebroken tot enkelvoudige suikers, zoals glucose, die via het bloed naar de cellen worden vervoerd. Daar worden ze omgezet in energie via de celademhaling.

Voorbeelden in de Molecuulwijzer:

- **Monosachariden**, zoals glucose en fructose, zijn enkelvoudige suikers die direct als energiebron dienen.
- **Disachariden**, zoals sacharose, bestaan uit twee gekoppelde monosachariden.
- **Suikeralcoholen** (polyolen), zoals xylitol (molecuul afgeleid van xylose en gebruikt als tandvriendelijke zoetstof).

Zoekterm: *Suikers & Koolhydraten*

Bouwstenen van celmembranen en vetten

Lipiden, ook wel vetten, zijn belangrijke bouw- en energiemoleculen in het lichaam. Ze vormen de structuur van celmembranen en dienen als energieopslag en isolatie.

Voorbeelden in de Molecuulwijzer:

- **Fosfolipide**: de belangrijkste bouwstenen van celmembranen, bestaande uit een hydrofiele kop en twee hydrofobe staarten.
- **Vetzuren** (en hun dimeren), zoals linoleïnezuur, caprinezuur en myristoleïnezuur, die voorbeelden zijn van onverzadigde vetzuur(stapelingen).
- **Triglyceriden** (triacylglycerolen) opgebouwd uit glycerol en drie vetzuren, zoals caprinezuur, en de voornaamste vorm van vetopslag in het lichaam.

Zoekterm: *Lipiden, Fosfolipide, Vetzuren, Vetzuurstapeling*

4. Hoe zijn wij aan de data gekomen?

Alle gegevens in de database zijn verkregen met behulp van kwantumchemische berekeningen op basis van de dichtheidsfunctionaaltheorie (DFT). DFT is een rekenmethode die de verdeling van elektronen in een molecuul of vaste stof beschrijft en zo helpt bij het voorspellen van moleculaire eigenschappen zoals energie, structuur en reactiviteit. Deze berekeningen zijn uitgevoerd met de Amsterdam Modelling Suite (AMS) van het Nederlandse bedrijf Software for Chemistry & Materials (SCM). Alle moleculaire structuren en kristalstructuren zijn geoptimaliseerd tot de laagst mogelijke energie. Optimaliseren betekent dat de berekening de atomaire posities aanpast tot de meest stabiele (energetisch gunstige) vorm van het molecuul is gevonden. De IR-spectra zijn verkregen door de trillingsfrequenties van elke volledig geoptimaliseerde moleculaire structuur te berekenen. De reactiepaden zijn bepaald door te starten vanuit de overgangstoestand, waarna de berekening de steilste afdalingsweg naar de reactanten en producten volgt.

Computationele Instellingen

De elektronen in de atomen worden beschreven met behulp van Slater-basisfuncties.^[1] Een basisset is een verzameling wiskundige functies die gebruikt wordt om de elektronenverdeling in een atoom of molecuul te benaderen. In dit geval is gebruikgemaakt van twee sets Slater-functies, aangevuld met één set polarisatie-functies die hogere energietoestanden beschrijven. Samen vormt dit een DZP-basisset (Double Zeta plus Polarization). De uitwisselingsinteractie (exchange interactie), die voortkomt uit het Pauli-uitsluitingsprincipe, en de correlatie-interactie, die rekening houdt met het feit dat elektronen elkaar afstoten en daardoor elkaars beweging beïnvloeden, worden gezamenlijk benaderd met de BP86 exchange-correlation-functionaal.^[2,3] Daarnaast zijn dispersie-interacties meegenomen met een empirische dispersiecorrectie (D3(BJ)).^[4-6] Dispersie-interacties, ook wel van der Waals-krachten genoemd, zijn verantwoordelijk voor zwakke bindingen tussen moleculen, bijvoorbeeld tussen lagen in grafiet of tussen edelgasatomen. De relativistische effecten, die rekening houden met het feit dat elektronen in zware atomen zeer snel bewegen en daardoor zich iets anders gedragen dan klassieke mechanica voorspelt, zijn behandeld met de ZORA-benadering.^[7,8] De gebruikte instellingen voor de berekeningen kunnen kort worden samengevat als: ZORA-BP86/DZP.

Referenties

- [1] E. van Lenthe, E. J. Baerends, *J. Chem. Phys.* **2003**, 24, 1142.
- [2] A. D. Becke, *Phys. Rev. A* **1988**, 38, 3098.
- [3] J. P. Perdew, *Phys. Rev. B* **1986**, 33, 8822.
- [4] S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, *J. Chem. Phys.* **2010**, 132, 154104.
- [5] S. Grimme, S. Ehrlich, L. Goerigk, *J. Comput. Chem.* **2011**, 32, 1456.
- [6] E. R. Johnson, A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **2005**, 123, 024101.
- [7] E. van Lenthe, E. J. Baerends, J. G. Snijders, *J. Chem. Phys.* **1993**, 99, 4597.
- [8] E. van Lenthe, E. J. Baerends, J. G. Snijders, *J. Chem. Phys.* **1994**, 101, 9783.