

Quantenchemie

① Grundlagen und Methoden

• Hartree-Fock-Verfahren

Variationsansatz:

• Slater determinanten Ansatz

• minimiert Energie

⇒ Gleichung von Hartree-Fock, beschreibt auch WW zw. Teilchen

• Entwicklung der Wellenfunktion Eigenwert zu ein teilchen-Hamiltonian um besten Hauptfunktionen

• Fock-Operatoren, hier sind Koeffizienten zu bestimmen

⇒ Selbstkonsistente Wellenfunktion

Nachteile:

• $E_{HF} > E_{\text{exakt}}$ $\Delta E = E_{\text{Korrelation}}$ wegen Variationsansatz

• keine dynamische Elektronenkorrelation

Anwendung

• Hauptgruppenelemente

GG-Abstände

• nicht für delokalisierte Systeme

• Rechenzeit $\sim N^4$

Dichtefunktionaltheorie

• Starke Korrelationsproblem in Gleichung

• universell anwendbar (fast alle Atome aus Periodensystem)

• typische System: 500 Atome

• kein Van-der-Waals WW

Jellium Modell

- Homogenes Kontinuum über alle Ueigen
- nur für Ueigenwert $\omega > 2$