

Berechnen von Clustern (Quantenmechanische Rechnungen)

alt: Hartree - Fock - Theorie

neu: Dichtefunktionaltheorie

ein Teilchen: Glas

⇒ viele Teilchen:

Ansatz mit Slater - Determinante (exakte Lösung ohne Coulombwert)

Variationsprinzip ⇒ Hartree Fock

Wellenfkt. in Hamilton - Basis (aus einzelnen Molekülen) schreiben

⇒ nur noch Entwicklungskoeff. berechnen

ABER Eigenfkt. in Gauß - Fkt entwickeln

⇒ Eine Energie ⇒ für nächste Energie nochmal

Das Ergebnis konvergiert gegen die wahre Energie

⇒ $E_{HF} > E_{wahr}$ ⇒ korrigiere E_{HF}

SCHLECHT für delokalisierte Elektronen

Dichtefunktionaltheorie

(Überblick / Vergleich → Folie)

Prüfe Jellium - Modell mit Quantenchemie