

Kombination von Rechnung und Experiment

Störungsrechnung: Kernladung homogen verteilen
Störung mit ΔZ Kernladung

Stoichiometrie Anteil der Elemente in Material

Geometrie

In Theorie:

Geometrie ausrechnen, messbare Sachen ausrechnen
 \Rightarrow Vergleich mit Experiment

Geometrie ausrechnen?

amorphes Kristall

NMR: Wechselwirkung zw. Kernspin und B-Feld
wird durch Elektronen in Kernnähe
abgeschirmt

Was braucht man zur Rechnung?

Basis aus Linearkombination von Eigenfunktionen