
Inhaltsverzeichnis

1	Hartree-Fock	1
1.1	Der molekulare Hamiltonoperator	1
1.2	Die Wellenfunktion	3
1.3	Die Energie als Erwartungswert von Ψ^{SD}	6
1.4	Der Fockoperator	9
1.5	Das Variationsprinzip	10
1.6	LCAO-Ansatz	12
1.7	Die Roothaan-Gleichungen	16
1.8	Dichtematrix	18
1.9	Der eigentliche Algorithmus	19
1.10	RHF, UHF und ROHF	20
1.11	Probleme von Hartree-Fock	21
2	Configuration Interaction	25
2.1	Dissoziation von H_2	26
2.2	Der CI-Ansatz	28
2.3	Die CI-Matrix	31
2.4	Abgebrochene CI-Entwicklungen	33
3	Coupled Cluster	37
3.1	Der Anregungsoperator \hat{T}	37
3.2	Abgebrochene CC-Entwicklungen	39
3.3	Eigenschaften von Coupled Cluster	40

4	Dichtefunktionaltheorie	43
4.1	Die orbitalfreie Dichtefunktionaltheorie	43
4.2	Kohn-Sham-DFT	46
4.3	Dichtefunktionale	48
4.4	Probleme von DFT	49
Literatur		55

Quantitative Rechenverfahren der Theoretischen
Chemie

Ein Einstieg in Hartree-Fock, Configuration Interaction
und Dichtefunktionale

Püschner, D.

2017, X, 54 S. 9 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-658-18241-0