

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Hartree-Fock</b>	1
1.1	Der molekulare Hamiltonoperator	1
1.2	Die Wellenfunktion	3
1.3	Die Energie als Erwartungswert von $\Psi^{SD}$	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
<b>2</b>	<b>Configuration Interaction</b>	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
<b>3</b>	<b>Coupled Cluster</b>	37
3.1	Der Anregungsoperator $\hat{T}$	37
3.2	Abgebrochene CC-Entwicklungen	39
3.3	Eigenschaften von Coupled Cluster	40

---

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



<http://www.springer.com/978-3-658-18241-0>

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