



Uwe Huniar (Autor)  
**Gedämpfter Hartree-Fock Austausch für  
Dichtefunktionaltheorie**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2137>

Copyright:  
Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,  
Germany  
Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: [info@cuvillier.de](mailto:info@cuvillier.de), Website: <https://cuvillier.de>

# Inhaltsverzeichnis

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Einleitung und Motivation</b>                           | <b>1</b>  |
| <b>1 Grundlagen</b>  | <b>5</b>  |
| 1.1 Einheiten . . . . .                                    | 5         |
| 1.2 Hamiltonoperator . . . . .                             | 5         |
| 1.3 Hartree–Fock . . . . .                                 | 6         |
| 1.4 Dichtefunktionaltheorie . . . . .                      | 10        |
| 1.5 Funktionale . . . . .                                  | 15        |
| 1.6 Hybridfunktionale . . . . .                            | 16        |
| <b>2 Gedämpfter Hartree-Fock Austausch</b>                 | <b>19</b> |
| 2.1 Ansatz . . . . .                                       | 19        |
| 2.2 Integralauswertung . . . . .                           | 22        |
| 2.2.1 Obara-Saika-Rekursion . . . . .                      | 23        |
| 2.2.2 Modifiziertes Obara-Saika-Schema . . . . .           | 25        |
| 2.3 RI Näherung . . . . .                                  | 27        |
| 2.3.1 RI-Integralauswertung bei großen Abständen . . . . . | 28        |
| <b>3 Testrechnungen mit gedämpftem Austausch</b>           | <b>33</b> |
| 3.1 Energien . . . . .                                     | 33        |
| 3.1.1 G2-1 Testsatz . . . . .                              | 34        |
| 3.1.2 G2-2 Testsatz . . . . .                              | 36        |
| 3.1.3 Größere Systeme . . . . .                            | 37        |
| 3.1.4 Wellenfunktion . . . . .                             | 39        |
| 3.2 Geometrien . . . . .                                   | 40        |
| 3.2.1 G2-1 Testsatz . . . . .                              | 40        |
| 3.2.2 Größere Testbeispiele . . . . .                      | 42        |
| 3.3 Rechenzeiten . . . . .                                 | 42        |
| <b>4 Nitrogenase</b>                                       | <b>47</b> |
| 4.1 Einleitung . . . . .                                   | 47        |
| 4.2 Strukturen . . . . .                                   | 53        |
| 4.2.1 Minimastrukturen des Kofaktors . . . . .             | 55        |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 4.3      | Möglicher Zyklus der Nitrogenase . . . . . | 55        |
| 4.3.1    | HD Austausch . . . . .                     | 57        |
| <b>5</b> | <b>Zusammenfassung</b>                     | <b>59</b> |
| <b>A</b> | <b>Tabellen</b>                            | <b>61</b> |
| <b>B</b> | <b>Abbildungen</b>                         | <b>73</b> |