

# 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 Zusammenfassung</b>	<b>59</b>
<b>A Tabellen</b>	<b>61</b>
<b>B Abbildungen</b>	<b>73</b>