



Theoretische Chemie II – Tutorium 4. Termin

Christoph Teufl (Christoph.Teufl@student.uibk.ac.at)

Lukas Meinschad (Lukas.Meinschad@uibk.ac.at)

Themen des Tutoriums

Kapitel 1

- Einführung in die Quantenmechanik
- Eigenwertproblem der Schrödingergleichung



Kapitel 2

- Einfache quantenmechanische Systeme
- Harmonischer Oszillator
- Wasserstoffatom



Kapitel 3

- Quantenmechanische Beschreibung von Molekülen
- Hamiltonoperator für Mehrelektronensysteme
- Born-Oppenheimer Näherung

Dieses Mal:

Kapitel 4

- Schwingungsanalyse
- Kern-Schrödingergleichung
- Schwingungsanalyse in Normalmoden



Kapitel 5

- Approximation von Mehrelektronenfunktionen
- Atomorbitale und Molekülorbitale als Einelektronenfunktionen



Kapitel 6

- Full-CI Verfahren
- Lösung der Schrödingergleichung
- Beispiel Berechnung des H_2

Kapitel 7

- Basisfunktionen und Basissätze
- STOs und GTOs
- Beispiele anhand verschiedener Moleküle



Kapitel 8 und 9

- Hartree Fock Methode (HF)
- Roothaan-Gleichung
- Limits und Verbesserungen

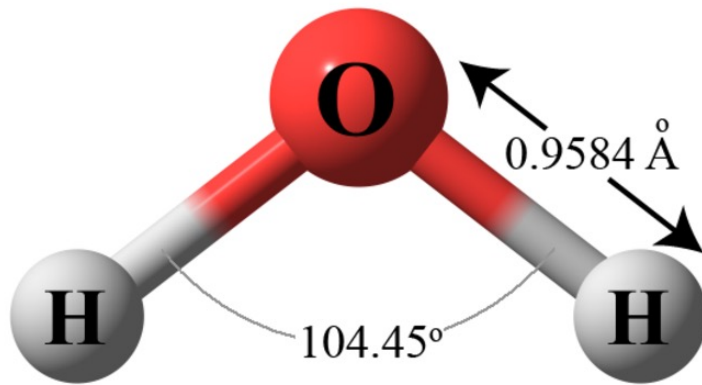


Kapitel 10

- Post HF-Methoden
- Störungstheorie
- Dichtefunktionaltheorie

Wiederholung: Vom Molekül zum

Um den Hamiltonoperator für Moleküle aufzustellen braucht man ein Koordinatensystem als Referenz



$$\mathbf{R}_{AB} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$$

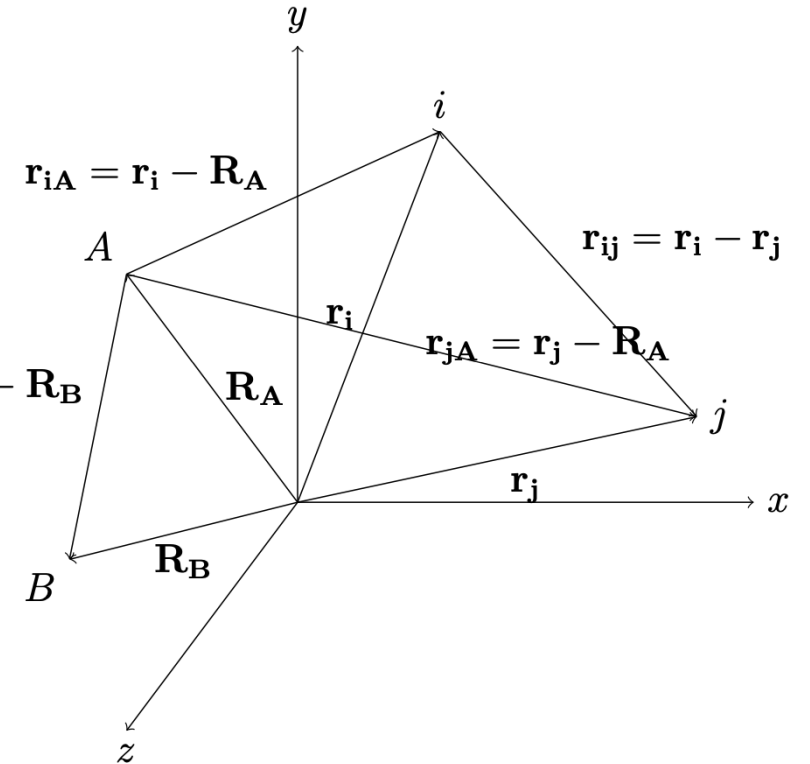


Figure 1: Molecular coordinate system: i, j = electrons; A, B = nuclei.

Wiederholung: Der Hamiltonoperator für

$$\hat{H} = \underbrace{-\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \vec{\nabla}_i^2}_{\hat{T}_{el}} - \underbrace{\sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \vec{\nabla}_A^2}_{\hat{T}_{nuc}} - \underbrace{\sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}}}_{\hat{V}_{el,nuc}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}}}_{\hat{V}_{el}} + \underbrace{\sum_{A=1}^{M-1} \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}}_{\hat{V}_{nuc}}$$

- Summe der kinetischen Energie der Kerne \hat{T}_{nuc}
- Summe der kinetischen Energie der Elektronen \hat{T}_{el}
- Summe der potentiellen Energie (Attraktiv) zwischen Kern und Elektronen $\hat{V}_{el,nuc}$
- Summe der potentiellen Energie (Repulsiv) der Elektronen \hat{V}_{el}
- Summe der potentiellen Energie (Repulsiv) der Kerne \hat{V}_{nuc}

Wiederholung: Die Born Oppenheimer

Zentrale Annahme: Man kann die Wellenfunktion der Kerne und Elektronen getrennt beachten

Für Elektronen:

- Kinetische Energie der Kerne vernachlässigen
- Abstoßung der Kerne als Konstante

$$\hat{H}_{elec} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}}$$



$$\hat{H}_{elec} \psi_{elec}(\vec{r}_i, \vec{R}_A) = \epsilon_{elec} \psi_{elec}(\vec{r}_i, \vec{R}_A)$$

Wiederholung: Die Born Oppenheimer

Zentrale Annahme: Man kann die Wellenfunktion der Kerne und Elektronen getrennt beachten

Für Elektronen:

- Kinetische Energie der Kerne vernachlässigen
- Abstoßung der Kerne als Konstante

$$\hat{H}_{elec} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}}$$



$$\hat{H}_{elec} \psi_{elec}(\vec{r}_i, \boxed{\vec{R}_A}) = \epsilon_{elec} \psi_{elec}(\vec{r}_i, \boxed{\vec{R}_A})$$

Als Anmerkung:

Die Kernkoordinaten kommen als Parameter in der Wellenfunktion vor.

d.h für unterschiedliche Anordnungen der Kerne wird auch $\psi_{elec}(\vec{r}_i, \vec{R}_A)$ anders

Wiederholung: Die Born Oppenheimer

Zentrale Annahme: Man kann die Wellenfunktion der Kerne und Elektronen getrennt beachten

Für Elektronen:

- Kinetische Energie der Kerne vernachlässigen
- Abstoßung der Kerne als Konstante

$$\hat{H}_{elec} = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}}$$

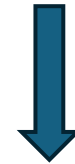


$$\hat{H}_{elec} \psi_{elec}(\vec{r}_i, \vec{R}_A) = \epsilon_{elec} \psi_{elec}(\vec{r}_i, \vec{R}_A)$$

Für Kerne:

- Man verwendet für Elektronische Terme **Erwartungswert**

$$\hat{H}_{nucl} = - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \vec{\nabla}_A^2 + \epsilon_{tot}(\vec{R}_A)$$



$$\hat{H}_{nucl} \chi(\vec{R}_A) = E_{nucl} \chi(\vec{R}_A)$$

Genauere Betrachtung des Kern-Hamiltonoperators

$$\hat{H}_{nucl} = - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \vec{\nabla}_A^2 + \epsilon_{tot}(\vec{R}_A)$$

Welche Bestandteile hat dieser Operator?

- M_A ... Masse des jeweiligen Kerns
- ∇^2 ... Laplace Operator
- $\epsilon_{tot}(\vec{R}_A)$... potentielle Energie

Genauere Betrachtung des Kern-Hamiltonoperators

$$\hat{H}_{nucl} = - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \vec{\nabla}_A^2 + \epsilon_{tot}(\vec{R}_A)$$

Welche Bestandteile hat dieser Operator?

- M_A ... Masse des jeweiligen Kerns
- ∇^2 ... **Laplace Operator**
- $\epsilon_{tot}(\vec{R}_A)$... potentielle Energie

Ableitungsoperator zweiter Ordnung im euklidischen Raum

$$\nabla^2 f = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$$

<https://www.youtube.com/watch?v=EW08rD-GFh0>

Genauere Betrachtung des Kern-Hamiltonoperators

$$\hat{H}_{nucl} = - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \vec{\nabla}_A^2 + \epsilon_{tot}(\vec{R}_A)$$

Welche Bestandteile hat dieser Operator?

- M_A ... Masse des jeweiligen Kerns
- ∇^2 ... Laplace Operator
- $\epsilon_{tot}(\vec{R}_A)$... **potentielle Energie**

$$\epsilon_{tot}(\vec{R}_A) = \sum_{A=1}^{M-1} \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} + E_{elec}(\vec{R}_A)$$

Enthält also die Interaktionen der Kerne und der Elektronen, dies im Abhängigkeit der Kernkoordinaten!

Die Potentialhyperfläche

Wir sehen:

- Es ist jede Kernanordnung \vec{R}_A also mit einer potentiellen Energie verbunden
- Die Wechselwirkung der Kerne und Elektronen bestimmt man durch
Lösen der elektronischen Schrödingergleichung
- Man kann sich ϵ_{tot} also wie eine Hyperfläche vorstellen

Es gilt: Pro Atom $M \rightarrow x,y,z$ Koordinaten
 $\rightarrow 3M$ Dimensional

$$\epsilon_{tot}(\vec{R}_A) = \sum_{A=1}^{M-1} \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} + E_{elec}(\vec{R}_A)$$

Die Potentialhyperfläche

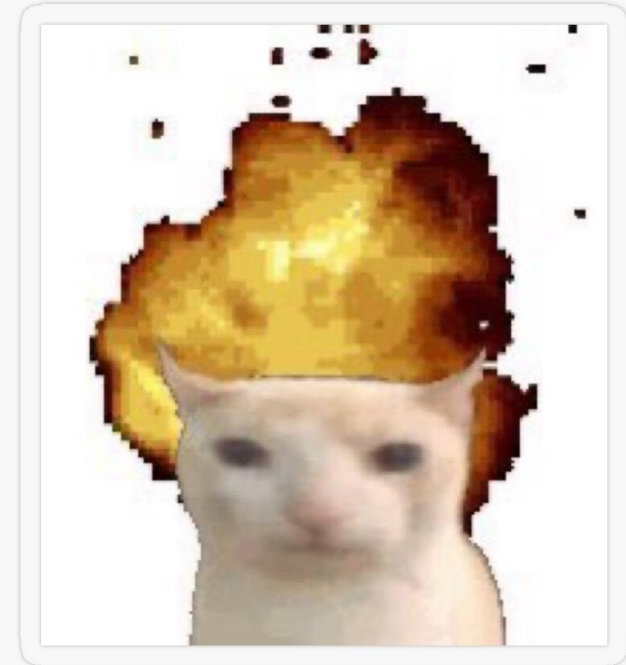
Wir sehen:

- Es ist jede Kernanordnung \vec{R}_A also mit einer potentiellen Energie verbunden
- Die Wechselwirkung der Kerne und Elektronen bestimmt man durch **Lösen der elektronischen Schrödingergleichung**
- Man kann sich ϵ_{tot} also wie eine Hyperfläche vorstellen

Es gilt: Pro Atom M \rightarrow x,y,z Koordinaten
 \rightarrow 3M Dimensional

$$\epsilon_{tot}(\vec{R}_A) = \sum_{A=1}^{M-1} \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} + E_{elec}(\vec{R}_A)$$

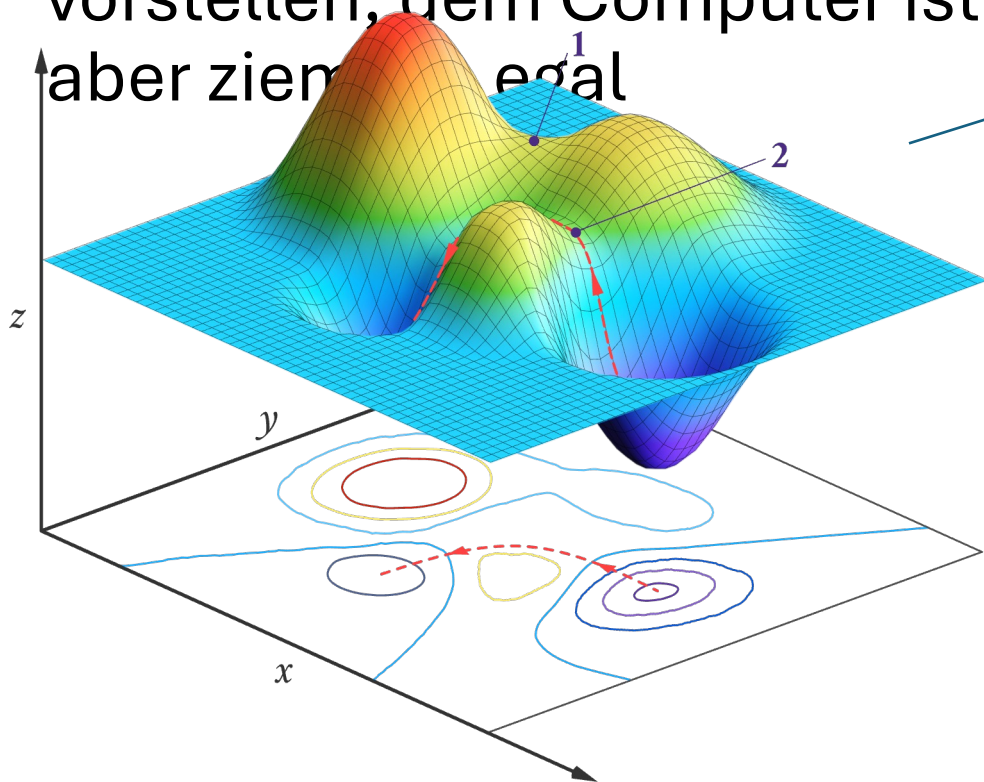
To much dimensions!!!



Die Potentialhyperfläche

Natürlich können wir uns 3M

Dimensionale Räume nicht vorstellen, dem Computer ist das aber ziemlich egal



$$\epsilon_{tot}(\vec{R}_A) = \sum_{A=1}^{M-1} \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} + E_{elec}(\vec{R}_A)$$

Man visualisiert meist Potentialhyperflächen in Abhängigkeit von zwei Koordinaten x, y

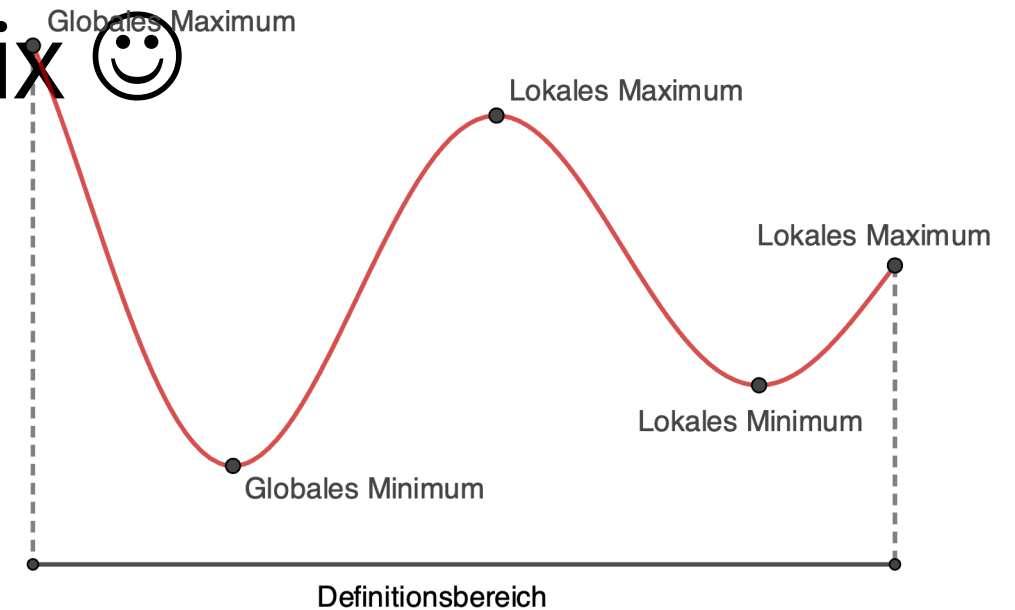


Wie finde ich nun nochmal Minima, Maxima, Sattelpunkte?

Wiederholung: Minima, Maxima, Sattelpunkte, Extremstellen, Hesse Matrix 😊

Für eine Funktion $f: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ hat in x_0 :

- Lokales Minimum $\exists U \in D: f(x_0) \leq f(x) \forall x \in U$
- Lokales Maximum $\exists U \in D: f(x_0) \geq f(x) \forall x \in U$



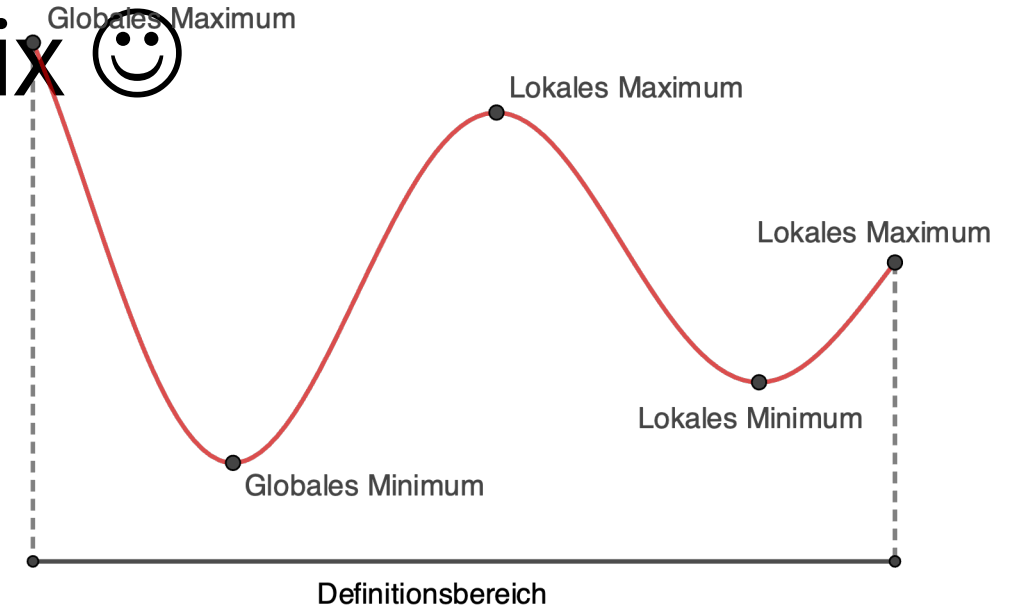
Wiederholung: Minima, Maxima, Sattelpunkte, Extremstellen, Hesse Matrix 😊

Für eine Funktion $f: D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ hat in x_0 :

- Lokales Minimum $\exists U \in D: f(x_0) \leq f(x) \forall x \in U$
- Lokales Maximum $\exists U \in D: f(x_0) \geq f(x) \forall x \in U$

In einer Extremstelle ist die erste Ableitung Null, im Mehrdimensionalen schreiben wir das mit dem Gradienten

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) = \mathbf{0}$$



Wiederholung: Minima, Maxima, Sattelpunkte, Extremstellen, Hesse Matrix 😊

Diese Extremstellen können wir nun durch die Matrix der zweiten Ableitungen aka **Hesse Matrix** weiter untersuchen, insbesondere haben wir eine Möglichkeit Minima und Maxima zu unterscheiden

$$H_f(x) := \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(x) \right)_{i,j=1,\dots,n} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(x) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(x) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n}(x) \end{pmatrix}$$

- Sind alle Eigenwerte positive → Minimum
- Sind alle Eigenwerte negative → Maximum
- Ist die Matrix indefinit → Sattelpunkt

Die Kern Schrödinger Gleichung

$$\hat{H}_{nucl}\chi(\vec{R}_A) = E_{nucl}\chi(\vec{R}_A)$$

$$\left[-\sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \vec{\nabla}_A^2 + \epsilon_{tot}(\vec{R}_A) \right] \chi(\vec{R}_A) = E_{nucl}\chi(\vec{R}_A)$$

Wir merken uns:

Man kann Kern Schrödingergleichung mit denselben Methoden lösen wie die elektronische Schrödingergleichung

- Vibrational Configuration Interaction (VCI) → Full-CI
- Vibrational Self-Consistent-Field (VSCF) → Hartree Fock

Man braucht jedoch die Potential-Hyperfläche!!

Schwingungsanalyse in Normalmoden

Im Zuge der harmonischen Näherung, machen wir eine Taylorreihenentwicklung der potentiellen Energie $\epsilon_{tot}(\vec{R}_A)$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (\vec{R}_A - \vec{R}_0)^n$$
$$\epsilon_{tot}(\vec{R}) \approx \epsilon_{tot}(\vec{R}_0) + \sum_{A=1}^M \frac{\partial \epsilon_{tot}(\vec{R})}{\partial \vec{R}_A} (\vec{R}_A - \vec{R}_0) + \frac{1}{2} \sum_{B=1}^M \sum_{A=1}^M \frac{\partial^2 \epsilon_{tot}(\vec{R})}{\partial \vec{R}_A \partial \vec{R}_B} (\vec{R}_A - \vec{R}_0)(\vec{R}_B - \vec{R}_0)$$

Wir setzen also $a = R_0$ was unserer Gleichgewichtsstruktur entspricht und brechen nach den zweiten Glied ab:

Schwingungsanalyse in Normalmoden

$$\epsilon_{tot}(\vec{R}) \approx \epsilon_{tot}(\vec{R}_0) + \sum_{A=1}^M \frac{\partial \epsilon_{tot}(\vec{R})}{\partial \vec{R}_A} (\vec{R}_A - \vec{R}_0) + \frac{1}{2} \sum_{B=1}^M \sum_{A=1}^M \frac{\partial^2 \epsilon_{tot}(\vec{R})}{\partial \vec{R}_A \partial \vec{R}_B} (\vec{R}_A - \vec{R}_0) (\vec{R}_B - \vec{R}_0)$$

Energetischer Nullpunkt beliebig verschiebbar,

Setze $\epsilon_{tot}(\vec{R}_0) = 0 \Rightarrow \frac{\partial \epsilon(\vec{R})}{\partial \vec{R}_i} = 0$

$$\epsilon_{tot}(\vec{R}) \approx \frac{1}{2} \sum_{B=1}^M \sum_{A=1}^M \frac{\partial^2 \epsilon_{tot}(\vec{R})}{\partial \vec{R}_A \partial \vec{R}_B} (\vec{R}_A - \vec{R}_0) (\vec{R}_B - \vec{R}_0) = \frac{1}{2} (\vec{R}_A - \vec{R}_0)^T H (\vec{R}_B - \vec{R}_0)$$

Die Kernschrödingergleichung nach der

$$\sum_{A=1}^M \left(-\frac{1}{2M_A} \vec{\nabla}_A^2 + k_A (\vec{R}_A - \vec{R}_0)^2 \right) \chi(\vec{R}) = E_{nucl} \chi(\vec{R})$$

Das kommt uns doch bekannt vor oder?

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} u(x) = E u(x)$$

Die Kernschrödingergleichung nach der

$$\sum_{A=1}^M \left(-\frac{1}{2M_A} \vec{\nabla}_A^2 + k_A (\vec{R}_A - \vec{R}_0)^2 \right) \chi(\vec{R}) = E_{nucl} \chi(\vec{R})$$

Das kommt uns doch bekannt vor oder?

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) + \frac{m\omega^2 x^2}{2} u(x) = E u(x)$$

→ Wir haben die 3M dimensionale Schrödingergleichung in 3M eindimensionale Schrödingergleichungen entkoppelt!

Algorithmus zum Lösen:

- Transformation in Massegewichteten Koordinaten
- Diagonalisierung der Hesse Matrix → Koordinatentransformation
- Eigenwerten sind Kraftkonstanten / Schwingungsfrequenzen
- Eigenvektoren sind Normalmoden

Matrix-Diagonalisierung

Was heißt es wenn man eine Matrix diagonalisiert?

Ist eine Matrix A diagonalisierbar, so existiert eine Diagonalmatrix D_A die folgende Ähnlichkeitsbedingung erfüllt

$$D_A = S^{-1}AS$$

Man macht also folgenden Algorithmus

1. Berechnen der Eigenwerte λ_i der Matrix
2. Bestimmen der Eigenräume $E(\lambda_i)$ man löst also $(A - \lambda_i I) = 0$
3. Man schreibt Eigenvektoren in Matrix $S = (b_1, \dots, b_n)$
4. Und fügt die Eigenwerte an die richtige Position in der Diagonalmatrix $D_A = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$

Vibrational Normal Modes

Normalmoden beschreiben verschiedene Vibrationen in Molekülen. Hierbei sind die Moden selbst voneinander unabhängig und

Table 1: Overview of degrees of freedom

	Total Degree of Freedom	Translational degrees of freedom	Rotational degrees of freedom	Vibrational degrees of freedom
<i>Nonlinear Molecules</i>	$3N$	3	3	$3N - 6$
<i>Linear Molecules</i>	$3N$	3	2	$3N - 5$

Wann N die Anzahl der Kerne ist dann haben wir $3N$ Koordinaten gesamt

Vibrational Normal Modes

Normalmoden beschreiben verschiedene Vibrationen in Molekülen. Hierbei sind die Moden selbst voneinander unabhängig und

Table 1: Overview of degrees of freedom

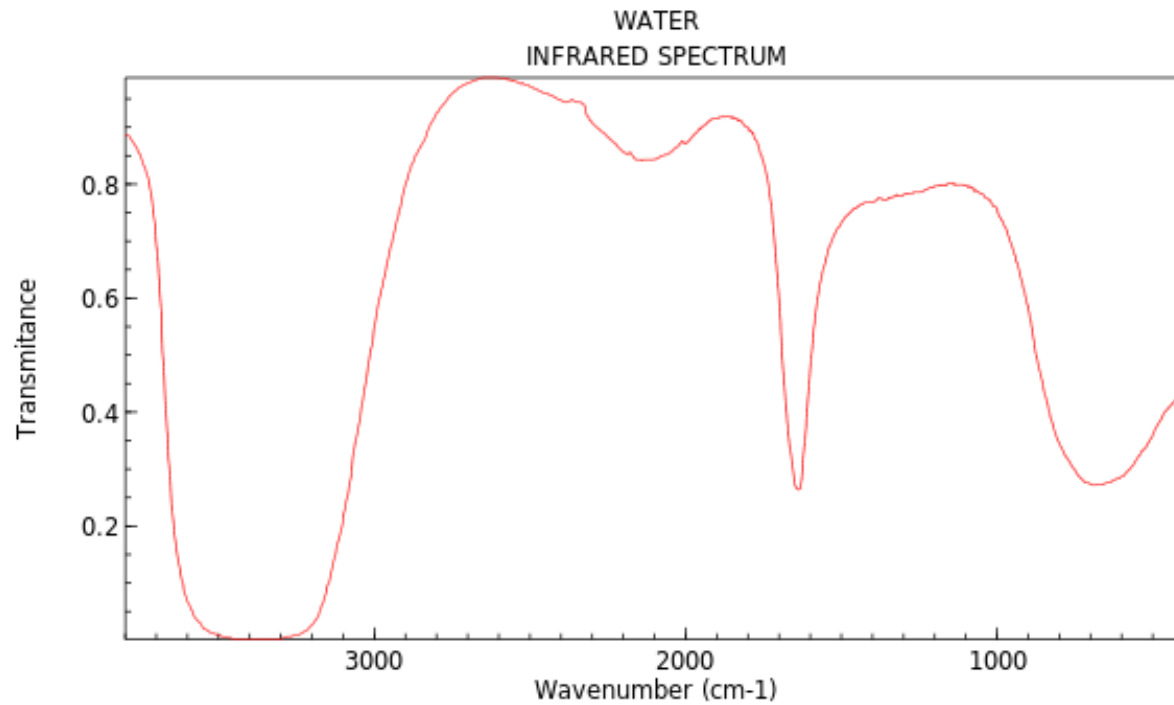
	Total Degree of Freedom	Translational degrees of freedom	Rotational degrees of freedom	Vibrational degrees of freedom
<i>Nonlinear Molecules</i>	$3N$	3	3	$3N - 6$
<i>Linear Molecules</i>	$3N$	3	2	$3N - 5$

Wann N die Anzahl der Kerne ist dann haben wir $3N$ Koordinaten
gesamt

Wir merken uns:

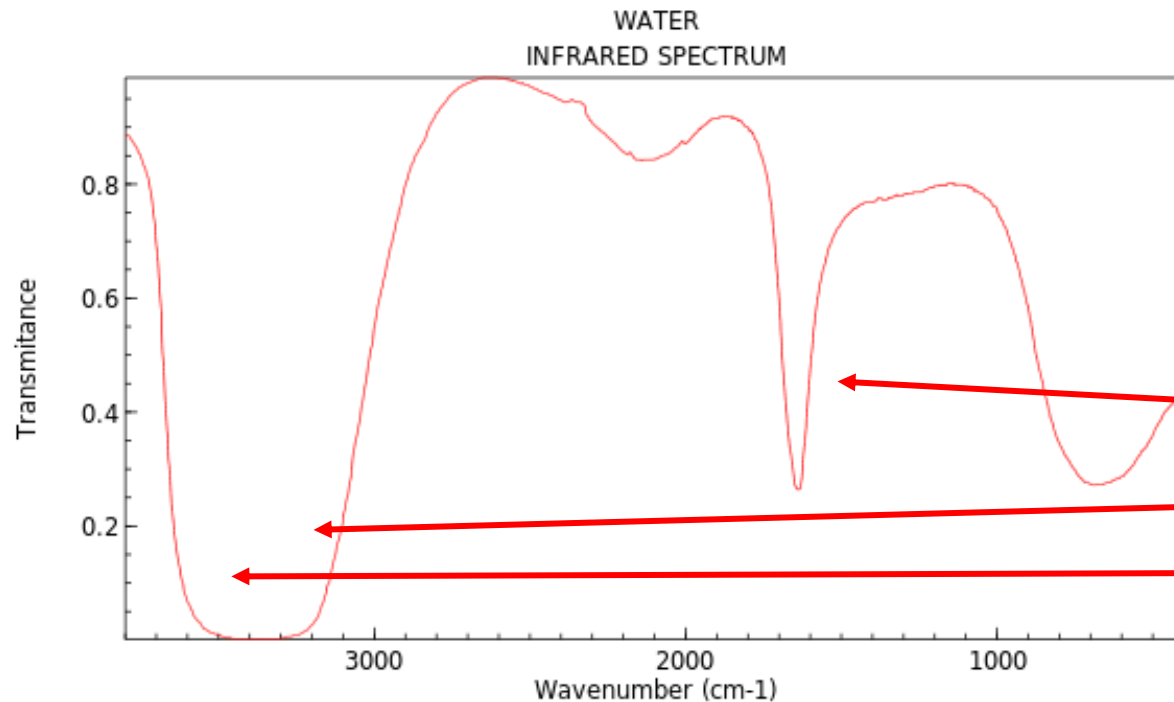
Translation und Rotationsfreiheitsgrade haben immer Eigenwert 0 in der Diagonalisierung der Hesse Matrix → es tritt keine Änderung der potentiellen Energie auf

Schwingungsanalyse Beispiel Wasser



NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

Schwingungsanalyse Beispiel Wasser

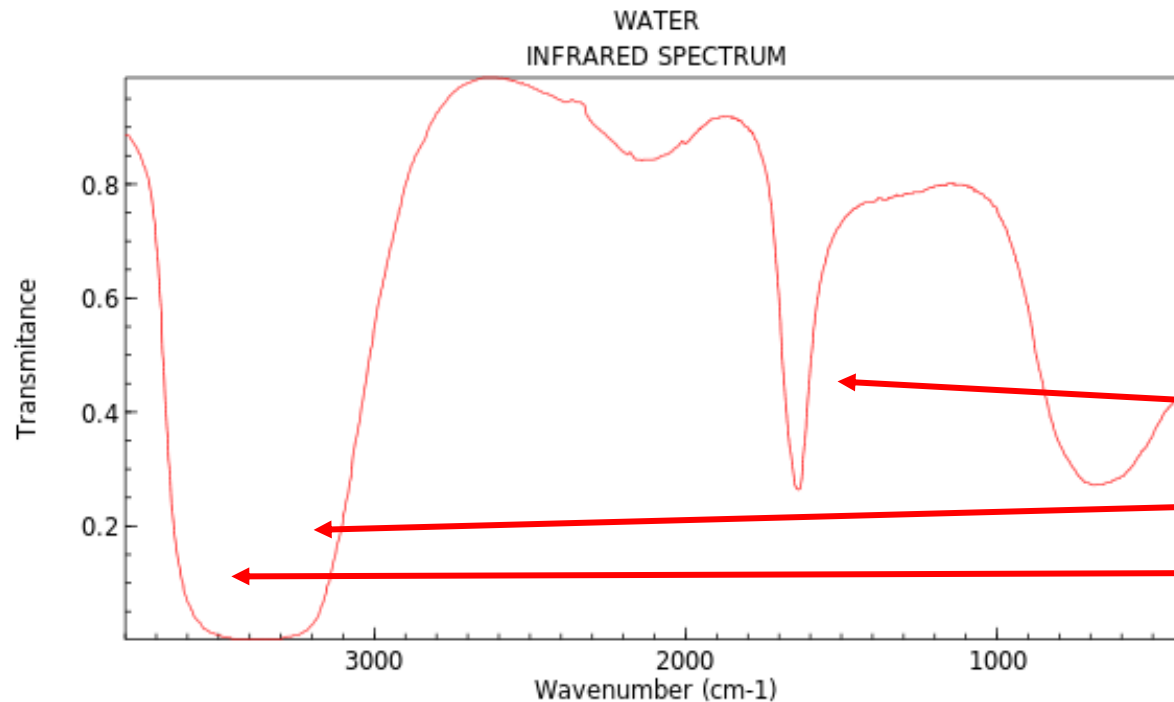


NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

Berechnung mit [Molpro](#) 6-311G(d,p) Basissatz

Vibration	Wavenumber
Nr	[1/cm]
1	1750.94
2	4142.11
3	4237.38

Schwingungsanalyse Beispiel Wasser

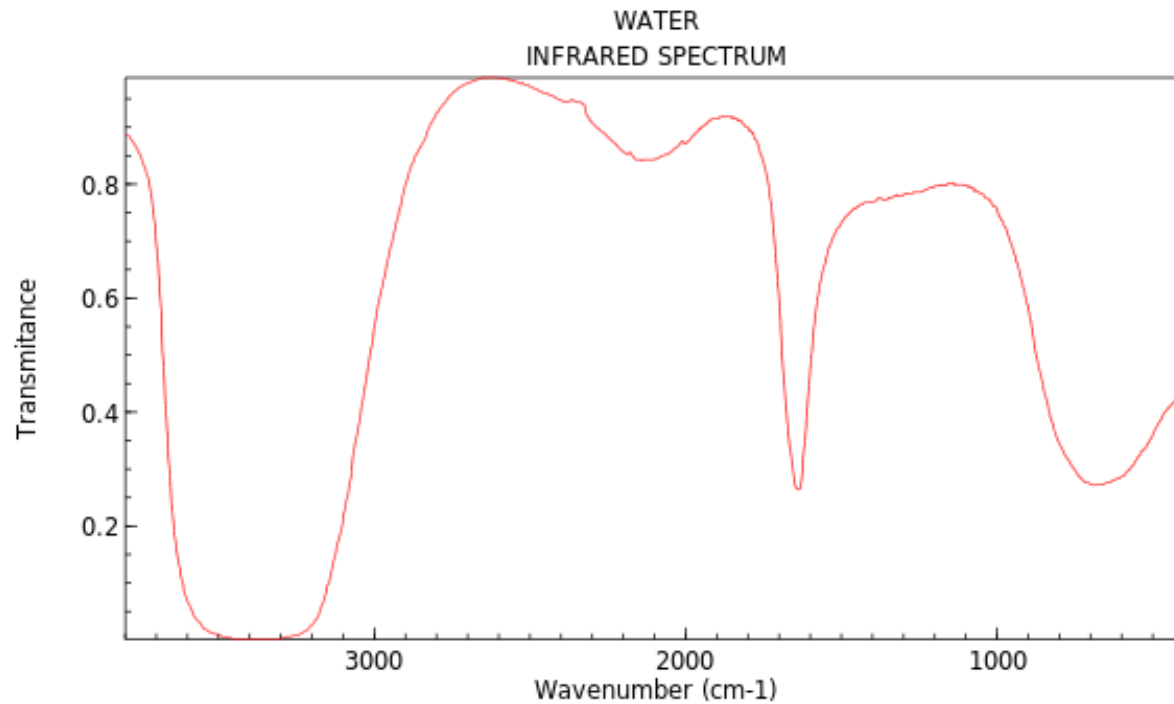


NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

Berechnung mit [Molpro](#) 6-311G(d,p) Basissatz

Vibration	Wavenumber
Nr	[1/cm]
1	1750.94
2	4142.11
3	4237.38

Schwingungsanalyse Beispiel Wasser



NIST Chemistry WebBook (<https://webbook.nist.gov/chemistry>)

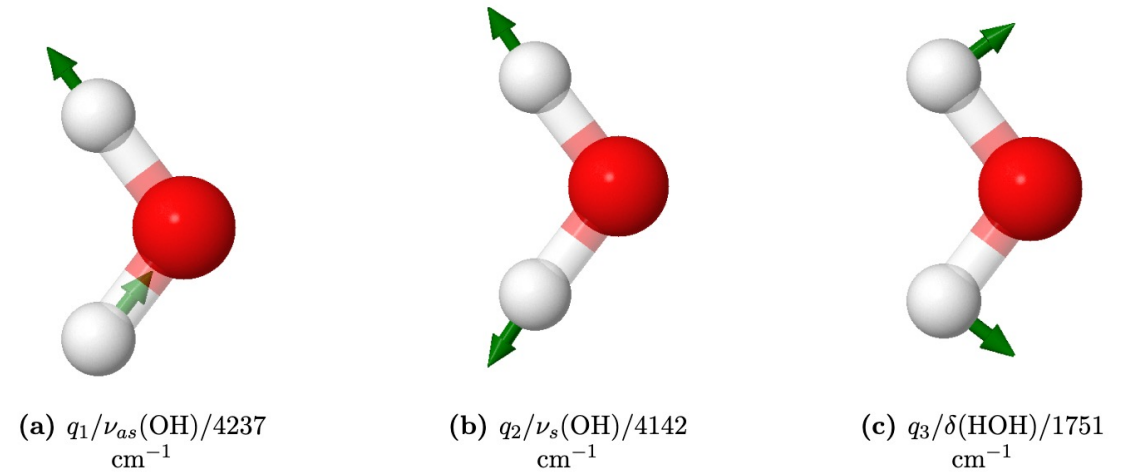


Figure 1: Vibrational Modes for (H₂O) (normal mode q_i / chemists notation / harmonic frequencies ω); shown harmonic frequencies are calculated on HF/6-311G(d,p) level of theory

Man sieht also bereits in diesem trivialen Beispiel ist es möglich spektroskopische Daten mittels QM-Rechnungen zu verifizieren

Solving the eigenvalue

Mass weighted Second Derivative Matrix

	OX1	OY1	OZ1	HX2	HY2
OX1	-0.0000000				
OY1	0.0000000	0.0502202			
OZ1	0.0000000	-0.0000000	0.0335472		
HX2	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0000000	
HY2	0.0000000	-0.1000338	0.0599467	0.0000000	0.4320315
HZ2	0.0000000	0.0761207	-0.0668228	0.0000000	-0.2710332
HX3	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0000000	0.0000000
HY3	0.0000000	-0.1000338	-0.0599467	0.0000000	-0.0335161
HZ3	0.0000000	-0.0761207	-0.0668228	0.0000000	0.0322169
	HZ2	HX3	HY3	HZ3	
HZ2	0.2484835				
HX3	0.0000000	-0.0000000			
HY3	-0.0322169	0.0000000	0.4320315		
HZ3	0.0177256	0.0000000	0.2710332	0.2484835	

Mass Weighted 2nd Derivative Matrix Eigenvalues

1-	9	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.116021	0.649283	0.679494
----	---	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

Solving the problem

Mass weighted Second Derivative Matrix

	OX1	OY1	OZ1	HX2	HY2
OX1	-0.0000000				
OY1	0.0000000	0.0502202			
OZ1	0.0000000	-0.0000000	0.0335472		
HX2	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0000000	
HY2	0.0000000	-0.1000338	0.0599467	0.0000000	0.4320315
HZ2	0.0000000	0.0761207	-0.0668228	0.0000000	-0.2710332
HX3	0.0000000	0.0000000	0.0000000	-0.0000000	0.0000000
HY3	0.0000000	-0.1000338	-0.0599467	0.0000000	-0.0335161
HZ3	0.0000000	-0.0761207	-0.0668228	0.0000000	0.0322169
	HZ2	HX3	HY3	HZ3	
HZ2	0.2484835				
HX3	0.0000000	-0.0000000			
HY3	-0.0322169	0.0000000	0.4320315		
HZ3	0.0177256	0.0000000	0.2710332	0.2484835	

Mass Weighted 2nd Derivative Matrix Eigenvalues

1-	9	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.116021	0.649283	0.679494
----	---	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------

Ausblick aufs nächste Mal

Approximation von Mehrelektronenwellenfunktionen

Einführen von Spinfunktionen

$$\int d\omega \alpha^*(\omega) \alpha(\omega) = \int d\omega \beta^*(\omega) \beta(\omega) = 1$$

Antisymmetrie Prinzip der Wellenfunktionen

$$\Phi(x_1, \dots, x_i, \dots, x_j, \dots, x_N) = -\Phi(x_1, \dots, x_j, \dots, x_i, \dots, x_N)$$

Slater Determinanten $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) - \psi_1(x_2)\psi_2(x_1))$

Themen des Tutoriums

Kapitel 1

- Einführung in die Quantenmechanik
- Eigenwertproblem der Schrödingergleichung



Kapitel 2

- Einfache quantenmechanische Systeme
- Harmonischer Oszillator
- Wasserstoffatom



Kapitel 3

- Quantenmechanische Beschreibung von Molekülen
- Hamiltonoperator für Mehrelektronensysteme
- Born-Oppenheimer Näherung

Kapitel 4

- Schwingungsanalyse
- Kern-Schrödingergleichung
- Schwingungsanalyse in Normalmoden



Nächstes Mal:

Kapitel 5

- Approximation von Mehrelektronenfunktionen
- Atomorbitale und Molekülorbitale als Einelektronenfunktionen



Kapitel 6

- Full-CI Verfahren
- Lösung der Schrödingergleichung
- Beispiel Berechnung des H_2

Kapitel 7

- Basisfunktionen und Basissätze
- STOs und GTOs
- Beispiele anhand verschiedener Moleküle



Kapitel 8 und 9

- Hartree Fock Methode (HF)
- Roothaan-Gleichung
- Limits und Verbesserungen



Kapitel 10

- Post HF-Methoden
- Störungstheorie
- Dichtefunktionaltheorie

