



# Berechnung von Molekül-Grundzustandsenergien mit Ab-Initio-Methoden

Fachbereich Informatik  
Bachelorarbeit  
Deniz Güven

Betreuer:  
6. Juli 2021

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>2</b>
1.1	Chemischer Hintergrund . . . . .	2
1.2	Ziel dieser Bachelor-Arbeit . . . . .	2
1.3	Relevanz für die Chemie . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Theorie und Methoden</b>	<b>3</b>
2.1	Allgemeine Theorie . . . . .	3
2.2	Hartree-Fock . . . . .	3
2.3	DFT . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Ergebnisse/ Numerische Experimente</b>	<b>4</b>
3.1	Erklärung der Experimente . . . . .	4
3.2	Experimente(HF, DFT, FULL-CI(exakt) über NWCHEM oder Literatur) . . . . .	4
3.3	Vergleich der Methoden/Deutung der Ergebnisse (HF vs. DFT)	4
<b>4</b>	<b>Diskussion/Ausblick</b>	<b>5</b>
4.1	Einordnung von HF und DFT in der Chemie . . . . .	5
4.2	Wie könnte man von diesem Punkt aus weitermachen? . . . .	5

# Kapitel 1

## Einleitung

### 1.1 Chemischer Hintergrund

Atome sind cool[1], weil man die essen kann.

(Grundlegende Dinge über Chemie) Entwicklung der Atom-Modelle bis zur quantenmechanischen Formulierungen

### 1.2 Ziel dieser Bachelor-Arbeit

### 1.3 Relevanz für die Chemie

(Reaktionsabläufe besser verstehen ...)

# Kapitel 2

## Theorie und Methoden

### 2.1 Allgemeine Theorie

(die für beide Methoden gilt): - Schrödinger-Gleichung (Zeitunabhängige) - Beschreibung/Lösung durch Eigenfunktionen/Eigenwerte - Verwendete Approximationen/Annahmen (Born-Oppenheimer-Näherung, ...)

### 2.2 Hartree-Fock

- Herleitung (Variations-Prinzip: Minimierung der Energie, Schrödingergleichung u Operatoren) - Lösungsweg über das SCF-Verfahren (Matrix-Darstellung, ...) - Verwendung von Basisfunktionen (Konstruktion der Wellenfunktion) - Implementierung (größten Probleme: Integral-Evaluierung und Matrix-Diagonalisierung)

### 2.3 DFT

- Herleitung (Nur die Idee/Ergebnisse, da wahrscheinlich über meinem Niveau) - Konkrete Umsetzung durch die Kohn-Sham-Gleichung (Terme in der Schrödinger-Glg. + XC-Funktionale) - Lösung durch FEM + PINVIT (+ LDA) - Implementierung über UG4 LUA

# Kapitel 3

## Ergebnisse/ Numerische Experimente

### 3.1 Erklärung der Experimente

- Eigen-Energien als Benchmark + Moleküle zum Testen (Simple wie H<sub>2</sub>O, CH<sub>4</sub>, ... und Komplexe wie z.b. Benzol, das eine Elektronen-Delokalisation aufweist)

### 3.2 Experimente(HF, DFT, FULL-CI(exakt) über NWCHEM oder Literatur)

- Präsentation der Ergebnisse(Graphen, Tabellen, usw.) - Werden Effekte bei komplexen Molekülen korrekt erfasst?

### 3.3 Vergleich der Methoden/Deutung der Ergebnisse (HF vs. DFT)

- Genauigkeit, Kosten, Skalierbarkeit, ...

# Kapitel 4

## Diskussion/ Ausblick

### 4.1 Einordnung von HF und DFT in der Chemie

-> Andere Klassen von Methoden (zb. semiempirische Methoden) -> Verbesserung dieser Methoden (Post-Hartree-Fock-Methoden) -> Eingliederung dieser Methoden in der Praxis (Was kann man mit diesen Eigenenergien/Funktionen eigentlich machen?).

### 4.2 Wie könnte man von diesem Punkt aus weitermachen?

-> Code-Optimierung, Anspruchsvoller Methoden implementieren (aufbauend auf HF), Geometrie-Optimierung, ...

# Literaturverzeichnis

- [1] T. Helgaker, P. Jørgensen, and J. Olsen. *Molecular Electronic-Structure Theory*. Wiley, 2013.