

Abschn. 5.5 Numerische Durchführung

DFT: $E_g = E[n]$, $n(\vec{r})$ Elektronendichte

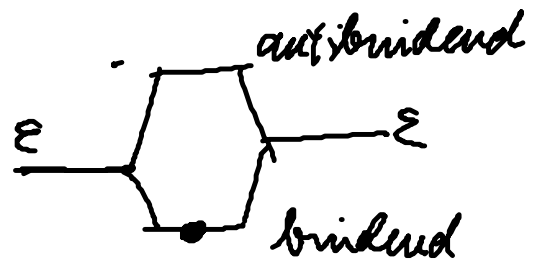
aus N -Elektronenpotenzial $v(\vec{r}) = v(\vec{r}, \vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_M)$

$E_g(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_M) \Rightarrow$

1) Molekülstruktur Min. E_g : $\frac{\partial E_g}{\partial \vec{R}_1} = 0$; $\frac{\partial E_g}{\partial \vec{R}_2} = 0$, ... $\frac{\partial E_g}{\partial \vec{R}_M} = 0$
Verfahren des konjugierten Gradienten

2) $\frac{\partial E_g}{\partial \vec{R}_J} = -\vec{F}_J$ aus $M_J \ddot{\vec{R}}_J(t) = \vec{F}_J$; $\ddot{\vec{R}}_J(t) = \frac{1}{M_J} \vec{F}_J = -\frac{1}{M_J} \frac{\partial E_g}{\partial \vec{R}_J}$

Δt mit $\ddot{\vec{R}}_J(t) \approx \frac{1}{\Delta t^2} (\vec{R}_J(t-\Delta t) - 2\vec{R}_J(t) + \vec{R}_J(t+\Delta t))$



Kapitel 6 Anwendungen der DFT