

<p style="text-align: center;"><b>3. Übungssektion: – Computerorientierte Theoretische Physik Basissysteme in der Quantenchemie</b></p>
---

**Erster Übungstermin dieser Sektion: ab 22.11.2018. Die Nachbereitungsaufgaben sind in der Übung, die diese Sektion abschließt, abzugeben/zu besprechen.**

**Vorbereitungsaufgabe 1 :** *Basissysteme in der Quantenchemie*

1. Wir wollen uns mit der Idee, die hinter der Verwendung eines optimierten Basissystems steckt vertraut machen. Dazu suchen Sie sich ein Basissystem ihrer Wahl und machen eine Literaturrecherche wie die Coulombwechselwirkungselemente und der freie Anteil des Hamiltonians für das Basissystem gelöst werden. Schauen Sie dazu in Quantenchemiebücher wie *F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, Wiley* oder andere, um die Paper zu finden in denen die Koppelungselemente gelöst wurden oder dokumentiert wurden.
2. Falls Sie sich für Gaussian Type Orbitals entscheiden, so finden Sie die Matrixelemente in dem ursprünglichem Paper *S.F. Boys, Proc. R. Soc. (London) A, 200, 542 (1950)*.

**Aufgabe 2 :** *Lösung der Eigenzustände eines kleinen Quantensystems*

1. Überlegen Sie sich ein einfaches Quantensystem, für das Sie mit Hilfe des gewählten Basissystems die quantenmechanischen Zustände bestimmen. (Für Eigenwertbestimmungen verwenden Sie SlepC und Petsc, siehe letzte Übung).
2. Bei der Wahl der Methode sind Sie frei: z.B. Einelektronenproblem (nicht nur ein H-Atom, aber das  $H_2^+$  Molekül wäre möglich.), Hartree-Fockgleichungen, oder CI mit Singles für komplexere Anordnungen. Sie können z.B. auch kleine Cluster von zwei Atomen oder kleine Molekülen sich anschauen.
3. Verwenden Sie möglichst nur die Valenzelektronen und nur wenige Atomtypen. Wir wollen keine akkurate Beschreibung erhalten, sondern Phänomene untersuchen, wie was passiert, wenn die Abstände variiert werden. Das heißt grobe Approximation der Orbitale reichen aus!