

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

Erster Übungstermin dieser Sektion: ab 21.11.2019. Die Nachbereitungsaufgaben sind in der Übung, die diese Sektion abschließt, abzugeben/zu besprechen.

Bemerkung: Bearbeiten Sie entweder die Aufgaben der Wahlmöglichkeit A oder B!

Vorbereitungsaufgabe 1 : *Verwendung eines Quantenchemieprogramms (Wahlmöglichkeit A)*

1. Inzwischen gibt es viele Quantenchemieprogramme, die für viele Probleme eingesetzt werden können. Wir wollen erste Erfahrung mit *www.quantum-espresso.org* machen, dass auf der Dichtefunktionaltheorie und ebenen Wellenbasissätzen basiert.
2. Gehen Sie dazu auf den Mathecluster und versuchen Sie quantum espresso herunter zu laden und zu kompilieren. Sie sollten sich mit der grundlegenden Vorgehensweise zur Benutzung des Clusters vertraut machen. Zur Kompilation sollten die richtigen Module geladen werden (hier vermutlich *intel/2019.3, gcc/6.4.0, omp-gcc-3.1.3*). Machen Sie sich mit der Pseudopotentialdatenbank <https://www.quantum-espresso.org/pseudopotentials> vertraut und der Bedienungsanleitung von Quantum-Espresso. Ziel wird es sein, Bandstrukturen für einige Materialien zu berechnen und Parameter zu variieren.

Vorbereitungsaufgabe 2 : *Basissysteme in der Quantenchemie (Wahlmöglichkeit B)*

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 3 : *Erste Schritte mit Quantum Espresso (Wahlmöglichkeit A)*

1. Ein guter Weg sich mit einer Software vertraut zu machen, sind die angebotenen Tutorials. Unter <https://gitlab.com/QEF/material-for-ljubljana-qe-summer-school/tree/master/Day-1> gibt es z.B. erste Lektionen für den ersten Tag einer Sommerschule. Wählen Sie sich (außer der Kompilation) 2-3 Beispiele aus und versuchen Sie diese Nachzuvollziehen und auf dem Cluster nachzurechnen. (Machen Sie sich bitte auch mit den physikalischen Grundlagen der Materialien vertraut!).
2. Verändern Sie bei den Beispielen unbedingt auch Parameter (z.B. cutoff), um die Konvergenz zu testen oder variieren Sie Abstände oder tauschen Sie Atome (über das Pseudopotential) aus und schauen Sie was passiert.

Aufgabe 4 : Lösung der Eigenzustände eines kleinen Quantensystems (Wahlmöglichkeit B)

1. Überlegen Sie sich ein einfaches Quantensystem, für das Sie mit Hilfe des gewählten Basissystems die quantenmechanischen Zustände bestimmen. (Für Eigenwertbestimmungen verwenden Sie Slep_c 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!