



# Quantenmechanik gebundener Atome



Vorlesung im SS 2017  
Prof. Dr. Udo Scherz

## 1 Teilchenzahlformalismus

- 1.1 Teilchenzahlzustände
- 1.2 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren
- 1.3 Antivertauschungsrelationen für Fermionen
- 1.4 Feldoperatoren
- 1.5 Spinabhängige Feldoperatoren
- 1.6 Zeitabhängige Feldoperatoren

## 2 Moleküle

- 2.1 Born-Oppenheimer-Näherung
- 2.2 Kinetische Energie der Atomkerne
- 2.3 Molekülschwingungen
- 2.4 Wasserstoffmolekül

## 3 Hartree-Fock-Verfahren

- 3.1 Hartree-Fock-Gleichungen
- 3.2 Koopmans-Theorem

## 4 Dichtefunktionaltheorie

- 4.1 Hohenberg-Kohn-Theorem
- 4.2 Kohn-Sham-Gleichungen
- 4.3 Austausch-Korrelations-Funktional
- 4.4 Berechnung der Atomlagen
- 4.5 Numerische Durchführung

## 5 Anwendungen der Dichtefunktionaltheorie

- 5.1 Atomare und elektronische Struktur
- 5.2 Kanonische Gesamtheit
- 5.3 Thermodynamische Potenziale
- 5.4 Temperaturabhängige Eigenschaften