

DURCHFÜHRUNG EINFACHER QUANTENCHEMISCHER RECHNUNGEN FÜR FESTKÖRPER

VERMITTELTE ARBEITSTECHNIKEN:

- Definition periodischer (0D, 1D, 2D, 3D) Systeme in quantenchemischen Programmen
- Definition von Basisätzen
- Durchführung von RHF und DFT Berechnungen und Analyse der Ergebnisse
- Strukturoptimierung von Grundzuständen (Zellparameter, Interne Koordinaten, constant volume)
- Berechnung von 1-Elektronen Eigenschaften (Atomare Ladungen, elektronische Bandstruktur und Zustandsdichte, Elektronendichte)

PROGRAMME

- Crystal

DURCHFÜHRUNG

An einfachen Testsystemen (z.B. MgF_2 , ZnF_2) werden die wesentlichen Schritte die zum Aufsetzen einer periodischen quantenchemischen Rechnung notwendig sind diskutiert und die Ergebnisse besprochen. Anschließend wird die Berechnung verschiedener 1-Elektroneneigenschaften demonstriert. (ca. $\frac{1}{2}$ bis 1 Tag)

Die genaue Auswahl der Systeme, Methoden/Basisätze und Techniken für weitere Berechnungen erfolgt unter Berücksichtigung des Promotionsthemas. Eine weitere Betreuung von an die Promotion angelehnten QC Projekten ist möglich.