

Inhaltsverzeichnis

Verwendete Symbole und Abkürzungen	iii
1 Einleitung	1
2 Explizit korrelierte Störungstheorie	5
2.1 Zweite Quantisierung	5
2.2 Das Hylleraas-Funktional	8
2.3 Explizite Elektronenkorrelation	11
2.4 CABS-Singles	17
2.5 Integrale für F12-Methoden	18
3 Die Geminalbasis in explizit korrelierten Methoden	21
3.1 Die Methode CCS(F12)	21
3.2 Ergebnisse	22
3.3 Anmerkungen	28
4 Der Gradient für RI-MP2-F12	31
4.1 Theorie analytischer Gradienten	31
4.2 Vorüberlegungen zu MP2-F12-Gradienten	36
4.3 Berechnung der 1-Teilchen-Dichtematrix	40
4.4 Gradient für Ansatz 3	46
4.5 Gradient für CABS-Singles	54
5 Implementierung	57
5.1 OpenMP-Parallelisierung	57
5.2 Ablauf einer Gradientenberechnung	59

Inhaltsverzeichnis

6	Bewertung	65
6.1	Numerische Untersuchungen	65
6.2	Dipolmomente	67
6.3	Geometrien	70
6.4	Resümee	82
7	Anwendungen	85
7.1	Trimerisierung von Pyrazin	85
7.2	Argon-Anlagerung an kaltes <i>n</i> -Propanol	87
8	Schlussbemerkungen	91
<hr/>		
Anhang		93
A	Verwendete Programmpakete	94
B	Anhang zu Kapitel 2	96
C	Tabellen und explizite Ausdrücke zu Kapitel 3	100
D	Erläuterungen zu Kapitel 4	108
E	Tabellen zu Kapitel 6	115
F	Vorgehensweise im Rahmen der Anwendungen	120
	Literaturverzeichnis	123