

Quantenchemische ab initio Untersuchungen offenschaliger Verbindungen der d- und f-Elemente

Michael Dolg

*Institut für Theoretische Chemie, Universität zu Köln, Greinstr. 4,
D-50939 Köln, Germany*

Abstract zum Vortrag im SFB 608, 16. Juli 2003

Noch heute stellen offenschalige Verbindungen der d- und f-Elemente schwer behandelbare Problemfälle für die ab initio Quantenchemie dar. Die Gründe liegen u.a. in den starken relativistischen Beiträgen sowie den (teilweise entgegenwirkenden) Beiträgen der Elektronenkorrelation. Der Vortrag gibt einen Überblick über diese Schwierigkeiten sowie darüber, in welchem Maße relativistische ab initio Pseudopotentiale kombiniert mit korrelierten Wellenfunktionsrechnungen dennoch nützliche Ergebnisse für diese Systeme liefern können.