

Elektronenkorrelation im He bzw. H₂

A) Molekülorbitale im H₂

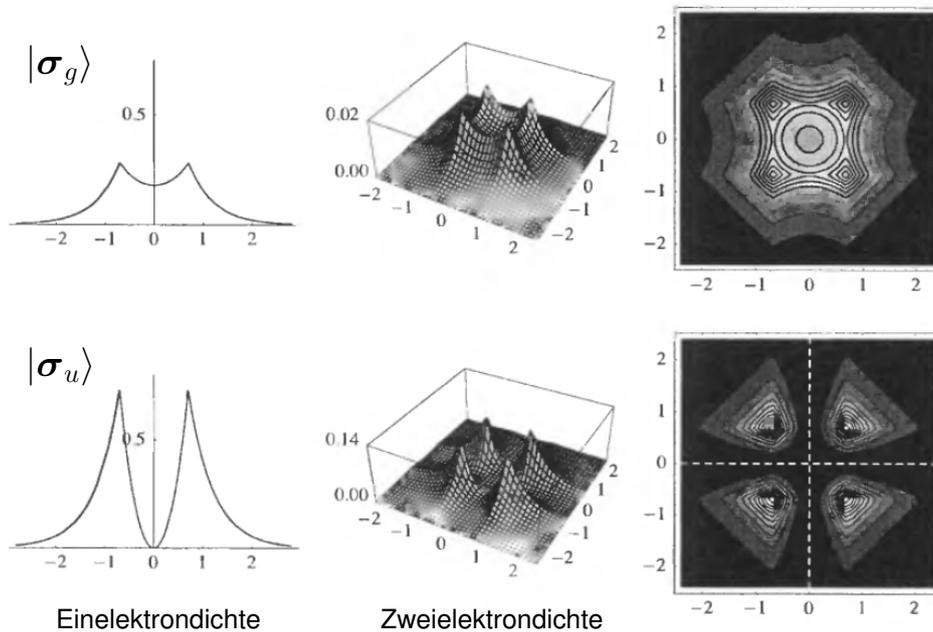


Abb. 1 – Ein- und Zweielektronendichten im bindenden (σ_g) und anti-bindenden (σ_u) Molekülorbital von H₂. Reproduziert aus Helgaker *et al.* "Molecular Electronic-Structure Theory".

B) Merksätze

1. Hartree-Fock beinhaltet Fermi- Korrelation.
2. Zur Beschreibung von Coulombkorrelation sind weitere Determinanten notwendig.
3. Die Fermikorrelation entsteht durch die Antisymmetrie der WF.
4. Die Coulombkorrelation entsteht durch die Coulombwechselwirkung.
5. Im Minimalbasis-CI lässt sich die statische Korrelation beschreiben.
6. Durch die Ausweitung der Minimalbasis können sich Elektronen besser ausweichen.
Diesen Effekt nennt man dynamische Korrelation.

C) Literatur

1. Attilia Szabo, Neils S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, Dover Publications, ISBN: 0486691861 (1989).
2. Trygve Helgaker, Poul Jorgensen, Jeppe Olsen, *Molecular Electronic-Structure Theory*, Wiley, ISBN: 1118531477 (2013).