

MO 31: Poster: Quantum Chemistry (Theory)

Zeit: Dienstag 16:30–18:30

Raum: Poster A

MO 31.1 Di 16:30 Poster A

Knotenoptimierung für Quanten-Monte-Carlo — ●RAPHAEL BERNER, ANNETT SCHWARZ und ARNE LÜCHOW — Institut für Physikalische Chemie, RWTH Aachen University, 52056 Aachen, Germany

Die Fixed-Node-Methode ist das am häufigsten verwendete Verfahren, um die Antisymmetrie einer Fermionen-Wellenfunktion in einer Diffusions-Quanten-Monte-Carlo-Rechnung (DMC) explizit zu berücksichtigen. Die dabei erhaltene Energie $E^{(FN)}$ hängt entscheidend von der Qualität der Knotenhyperfläche der verwendeten Trialfunktion ϕ ab. Ein Maß für die Güte dieser Knotenfläche ist der mittlere Abstand $\bar{\eta}$ der Knotenhyperfläche der beiden Funktionen ϕ und $\hat{H}\phi$. Löst ϕ die Schrödingergleichung exakt, so ist der lokale Wert von η überall Null. Durch eine entsprechende Parametrisierung der Wellenfunktion kann diese durch Minimierung von $\bar{\eta}$ optimiert werden. Neuere Untersuchungen ergaben, dass der lokale Wert von η von der Lage auf der Knotenhyperfläche abhängt. Von besonderem Interesse ist deshalb die Untersuchung von η an ausgezeichneten Punkten auf der Knotenfläche, wie den Koinzidenzpunkten von Elektronen gleichen Spins. Erste Ergebnisse zur Optimierung von Wellenfunktionen kleiner Atome und Moleküle mit Hilfe von $\bar{\eta}$ werden präsentiert.

MO 31.2 Di 16:30 Poster A

Relativistic 2-spinor minimax density functional calculations for ZnO, CdO, HgO, UubO, and Cu₂, Ag₂, Au₂, Rg₂ — ●OSSAMA KULLIE and DIETMAR KOLB — FB18, Uni Kassel, Heinrich-Plett Str. 40, 34132 Kassel, Germany

Fully relativistic 2-spinor Density functional calculations can be done with the help of the minimax principle. In this poster we show that the two spinor minimax method, utilizing the finite element methods (FEM), gives highly accurate values in relativistic Dirac-Fock-Slater (DFS) density functional calculations for two atomic molecules, especially considering systems with up to super heavy atoms like *UubO*, *Rg₂*. We demonstrated that one obtain benchmark values for bond length, vibrational frequency, and dissociation energy. We compare our result with our LCAO calculations, with literature values and with experimental values so far are available, and show that our highly accurate values shed a new light on the quality of the DFS-density functional[1].

[1] O. Kullie, H. Zhang, J. Kolb and D. Kolb, Relativistic density functional calculations using two-spinor minimax Finite-Element method and linear combination of atomic orbitals for *ZnO*, *CdO*, *HgO*, *UubO*, and *Cu₂*, *Ag₂*, *Au₂*, *Rg₂*