



# Der rote Faden / Struktur der VL

Referenzdaten  
Exp. vs Rechnung

Statistik

Robustheit  
Hauptgruppen  
vs Ü-metalle

**10) Benchmarking**  
Wie man eine nicht systematisch verbesserbare Methode systematisch verbessert.

o-empirisch:  
Perdew, ...  
PBE, SCAN, TPSS

irgendwo dazwischen:  
Becke/Head-Gordon/Martin/...  
B97, B3PW91/B3LYP,  $\omega$ B97M-V  
B2PLYP, DSD-BLYP-D4,  $\omega$ B97M(2)

empirisch:  
Truhlar, ...  
Mo5, Mo6

**4-8) Moderne Funktionalentwicklung**  
fundamental, exakte Limits & Constraints vs  
pragmatisch/empirisch, Fit an Exp./WFT Rechnungen

1/2) Chemie ist per WFT theor. berechenbar aber schwer.

3) HK: Geht auch über die Dichte – ist einfacher.

3) KS: Dichte via hilfs-WF mit  $V_{xc} = \text{LDA}$ : wie praktisch!

4)  $V_{xc} = \text{LDA} + \text{GGA}$  Dichtegradient für viel bessere Thermochemie.

5)  $V_{xc} = \text{DFT}_{xc} + \text{D/LR}_c$  Disp.-korrektur verbessert NCIs, grosse Mol., Solids

6)  $V_{xc} = \text{GGA} + \text{HF}_x$  Hybrid: Fock-X gegen selbst-WW, DFT-Durchbruch

**9) Anwendung**  
Bindungsenergie, BSSE, Thermochemie, Säure-Base Addukte, Moleküldesign

**11/12) Semiempirik/3c**  
historische Aspekte, HF vs DFT basiert, Theorie, Performance, Anwendungsbsp.

**13/14) Festkörper**  
Bloch: MOs → Bänder Bandlücke, k-Raum, Pseudopotentiale, relativ. Effekte

7)  $V_x = \text{SR}(\text{DF}) + \text{LR}(\text{HF})$  Range-Separation: "best of both worlds" Kinetik = Thermo

7)  $V_{xc} = \text{Hybrid} + \text{MP2}_c$  → Doppelhybride: genau & robust aber auch teurer

LRC/screened Hybrid

B2PLYP, DSD Ansatz