

# Zusammenfassung

Dissertation von Jochen Autschbach: „Zur Berechnung relativistischer Effekte und zum Verständnis ihrer Trends bei Atomen und Molekülen“, Universität Siegen, 1999.

Nach einer Diskussion quantenchemischer Standardmethoden (Kapitel 1) und relativistischer Quantenchemie (Kapitel 2) werden in Kapitel 3 relativistische Effekte atomarer Schalen untersucht. Eine detaillierte Analyse relativer (prozentualer) relativistischer Effekte von Orbitalradien und -energien der Atome 1 bis 118 deckt neuartige relativistische periodische Trends auf. Eine Erklärung verschiedener Anomalien relativistischer Effekte bei Atomen, darunter auch das bekannte „Gold-Maximum“, kann mit Hilfe der gefundenen periodischen Trends und der scheinbar unsystematischen Atomgrundzustands-Konfigurationen gegeben werden.

Kräfte in Molekülen werden in Kapitel 4 besprochen — insbesondere auf der Basis des Hellmann-Feynman-Theorems. Verschiedene, in Kapitel 5 und 6 benötigte Formeln werden in Kapitel 4 hergeleitet und diskutiert. Kapitel 5 enthält eine Dichtefunktional-Studie der Bindungskräfte in  $N_2$  und HCl. Durch Analyse der räumlichen Herkunft der Hellmann-Feynman-Kräfte kann gezeigt werden, daß sowohl die Topologie der molekularen Deformationsdichte als auch die kernnahe Rumpfpolarisierung etwa gleichbedeutend für die Berechnung der Bindungs-Kräfte sind.

In Kapitel 6 werden relativistische Bindungsenergien und -Kräfte von zweiatomigen Goldverbindungen analysiert. Die relativistischen Energieänderungen werden mit Hilfe einer Implementierung der nichtsingulären relativistischen Störungstheorie DPT in das Amsterdamer Dichtefunktionalprogramm berechnet. Verschiedene paradoxe Interpretations-schemata werden zur Erklärung der Herkunft von relativistischen Bindungsenergie- und -kraft-Änderungen verwendet. Unterschiedliche mathematische Formulierungen erzeugen verschiedene physikalische Bilder. Eine „chemische“ Interpretation ist vorzuziehen und kann gegeben werden.