Finite-Elemente Mehrgittermethode(FEM-MG) und ein modifiziertes Energiefunktional für vergleichende Dichtefunktionaluntersuchungen

O. Beck, A. v. Kopylow, D. Kolb
Fachbereich Physik, Universität Gesamthochschule Kassel

Die Kombination eines modifizierten Energiefunktionals, das auf Potentialfehler erster Ordnung korrigiert ist, mit der Finite-Elemente-MehrgitterMethode erlaubt die schnelle und genaue vergleichende Untersuchung einer Reihe häufig benutzter Austausch-Korrelationsfunktionale, ohne daß für jedes Dichtefunktional eine neue selbstkonsistente Rechnung notwendig ist [1]. Ferner ist die Konvergenz der totalen Energie um Faktoren gegenüber einer herkömmlichen scf-Iteration beschleunigt (superlinear). Die für 2-atomige Moleküle der ersten Langperiode erhaltenen Abweichungen in den Dissoziationsenergien, Bindungsabständen und Vibrationsfrequenzen zeigen eine erhebliche Aufstreuung zwischen den verschiedenen Dichtefunktionalen, aber auch signifikante gemeinsame Trends, deren qualitatives Verständnis diskutiert wird.

[1] A. v. Kopylow, D. Heinemann, D. Kolb J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys. **31** (1998) 4743