

Einladung

zum

ZHR - Kolloquium

Titel: Konvergenzverbesserung quantenchemischer
abinitio-Rechnungen an *quasi*-eindimensionalen
stereoregulären Polymeren mit Hilfe von
Extrapolationsverfahren

Referent: Herr Priv. Doz. Dr. Ernst Joachim Weniger
Universität Regensburg
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie

Kurzfassung:

Quasi-eindimensionale stereoreguläre Polymere wie beispielsweise Polyacetylen sind gegenwärtig von erheblichem Interesse, und zwar sowohl in technologischer als auch in wissenschaftlicher Hinsicht. Es gibt zwei prinzipiell unterschiedliche Verfahren, um quantenmechanische Elektronenstrukturrechnungen an solchen Systemen durchzuführen. Das eine Verfahren - die sogenannte Kristallorbitalmethode - basiert auf der Festkörperphysik und verwendet periodische Randbedingungen. Das andere Verfahren basiert auf den Methoden der Quantenchemie und approximiert den im

Prinzip unendlich ausgedehnten quasi-eindimensionalen stereoregulären Polymer durch Oligomere, die aus einer endlichen Anzahl von Monomereinheiten bestehen. Auf diese Weise kann man die hochentwickelte Technologie quantenchemischer Molekülprogramme verwenden.

Es gibt allerdings das prinzipielle Problem, daß Oligomere endlicher Länge nicht unbedingt geeignet sind, diejenigen Eigenschaften von Polymeren zu beschreiben, die ganz entscheidend von ihrer im Prinzip unendlichen Ausdehnung abhängen. Das führt in der Regel zu einer unbefriedigenden Konvergenz der Oligomerrechnung. In einem solchen Fall können Extrapolationsverfahren sehr hilfreich sein. Dabei führt man quantenmechanische Rechnungen an einer Folge von Oligomeren mit wachsender Länge durch. Im nächsten Schritt versucht man dann, den Grenzwert dieser Folge - den unendlich ausgedehnten Polymer - mit Hilfe geeigneter Extrapolationsverfahren zu approximieren. Im Rahmen dieses Vortrags wird die Konstruktion geeigneter Extrapolationsverfahren und ihre wesentlichen Eigenschaften besprochen. Außerdem wird am Beispiel des Polyacetylen die praktische Nützlichkeit der oben beschriebenen Vorgehensweise demonstriert.

Ort: Willers-Bau, Raum C 102
Zeit: Dienstag, den 11. Juli 2000, 15.00 Uhr

gez. Prof. Dr. W.E. Nagel

Zentrum für Hochleistungsrechnen (ZHR) zhrweb@zhr.tu-dresden.de

06-Juni-2000

URL:

<http://www.tu-dresden.de/zhr/Veranstaltungen/Kolloquium/weniger_000711.html>