

Prof. Dr. Harry Yserentant, Technische Universität Berlin

„Regularität und Approximierbarkeit elektronischer Wellenfunktionen“

Abstract

Die Schrödingergleichung bildet die theoretische Basis der Chemie. Bis auf relativistische Effekte, die nur bei Anwesenheit schwerer Kerne in Erscheinung treten, beschreibt sie die Welt der Atome und Moleküle vollständig. Eine erste Vereinfachung stellt die elektronische Schrödingergleichung dar, bei der die Bewegung der Elektronen von der der Kerne separiert wird. Die elektronische Schrödingergleichung entzieht sich der Behandlung mit den üblichen numerischen Verfahren, da ihre Lösungen, die elektronischen Wellenfunktionen, bei einem System von N Elektronen von $3N$ Variablen abhängen, einer für jede Elektronenkoordinate. Der Vortrag beschäftigt sich mit der Frage, wie neue Erkenntnisse über Struktur und Regularität der elektronischen Wellenfunktionen helfen können, diesen "Fluch der Dimension" zu brechen.