

Abstract

In this work the development of a frozen-orbital environment for the use within the incremental scheme is introduced. The implementation has been realized as a part of the *Quantum Objects Library (QOL)*, which has been developed at the Institute for Theoretical Chemistry at the University of Cologne.

The generation of the frozen-orbital environment is derived from the model potential ansatz for the valence approximation of atoms and is transferred to the application of molecular systems. The combination of this valence approximation and the correlation approximation of the incremental scheme is explained and its advantages to current incremental scheme approaches is analyzed. The necessary modification of the model potential Hamiltonian for this application and the resulting accuracy is discussed for different molecular systems.

The presented implementation offers the application of the incremental scheme to molecular clusters. Besides significantly reduced wall times for the calculations, the proposed scheme also requires only a fraction of the memory resources compared to previous realizations of the incremental scheme.

Kurzzusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Entwicklung einer *frozen-orbital* Umgebung für die Verwendung innerhalb der Inkrementenmethode vorgestellt. Die Implementierung wurde in die *Quantum Objects Library (QOL)* integriert. Die *QOL* ist ein Quantenchemieprogramm des Instituts für Theoretische Chemie der Universität zu Köln.

Die Erstellung der *frozen-orbital* Umgebung ist aus dem Modellpotential Ansatz für die Valenzorbital-Näherung von Atomen abgeleitet und wird hier auf die Anwendung molekularer Systeme übertragen. Die Kombination aus dieser Valenzorbital-Näherung und der Korrelationsenergie-Näherung der Inkrementenmethode wird erläutert und ihre Vorteile gegenüber aktuellen Inkrementenmethoden analysiert. Die für diese Anwendung notwendige Modifikation des Modellpotential-Hamiltonoperators und die daraus resultierende Genauigkeit wird an verschiedenen molekularen Systemen diskutiert.

Die vorgestellte Implementierung bietet die Möglichkeit zur Berechnung der Korrelationsenergie molekularer Cluster. Neben deutlich reduzierten Rechenzeiten bei der Anwendung dieser Methode benötigt der beschriebene Ansatz nur einen Bruchteil der Speicherressourcen im Vergleich zu früheren Implementierungen der Inkrementenmethode.