

## Zusammenfassung

Diese Arbeit befaßt sich mit der Entwicklung und Anwendung approximativer Methoden zur Bestimmung der elektronischen Struktur molekularer Systeme. Sogenannte *tight-binding* Methoden stellen eine Möglichkeit der Näherung von *ab initio* Theorien dar und erlauben einen signifikanten Rechenzeitgewinn gegenüber den *ab initio* Methoden durch eine näherungsweise Bestimmung der Hamilton-Matrixelemente. Die herkömmlichen *tight-binding* Verfahren sind in ihrem Anwendungsbereich jedoch stark eingeschränkt. Systeme, bei denen ein signifikanter Ladungstransfer auftritt, sind nur in Einzelfällen behandelbar.

Deshalb wird hier eine erweiterte, selbstkonsistente *tight-binding* Methode aus der Dichtefunktionaltheorie hergeleitet. Die Berechnung von Reaktionsenergien, Wasserstoffbrückenenergien, Gleichgewichtsgeometrien und Schwingungsfrequenzen für einen großen Testsatz organischer Moleküle zeigt die breite Anwendbarkeit und hohe Genauigkeit dieser Methode.

Zur Beschreibung dynamischer Eigenschaften von konjugierten Kohlenwasserstoffketten wird eine  $O(N)$  Methode mit einem *tight-binding* Verfahren kombiniert. Dadurch wird ein lineares Anwachsen der Rechenzeit mit der Systemgröße erreicht. Testrechnungen an kleinen Polyenen dokumentieren die Einsetzbarkeit der Methode in diesem Kontext. Es schließt sich eine Untersuchung der Dynamik von Brethern, neutralen Solitonen und Solitonenkollisionen auf trans-Polyazetylenketten an.