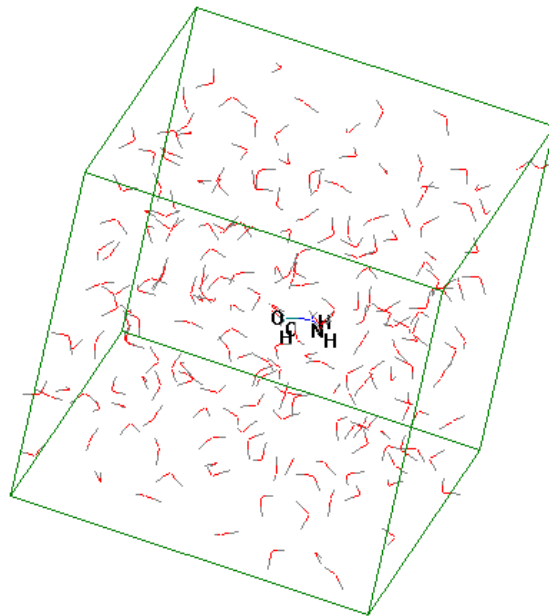
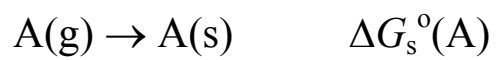


## Kondensierte Phase - Solvation

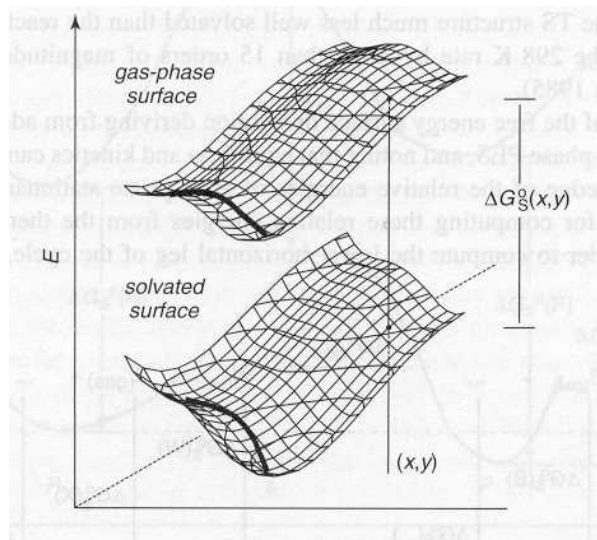
Molekül wird mit Solvensmolekülen umgeben



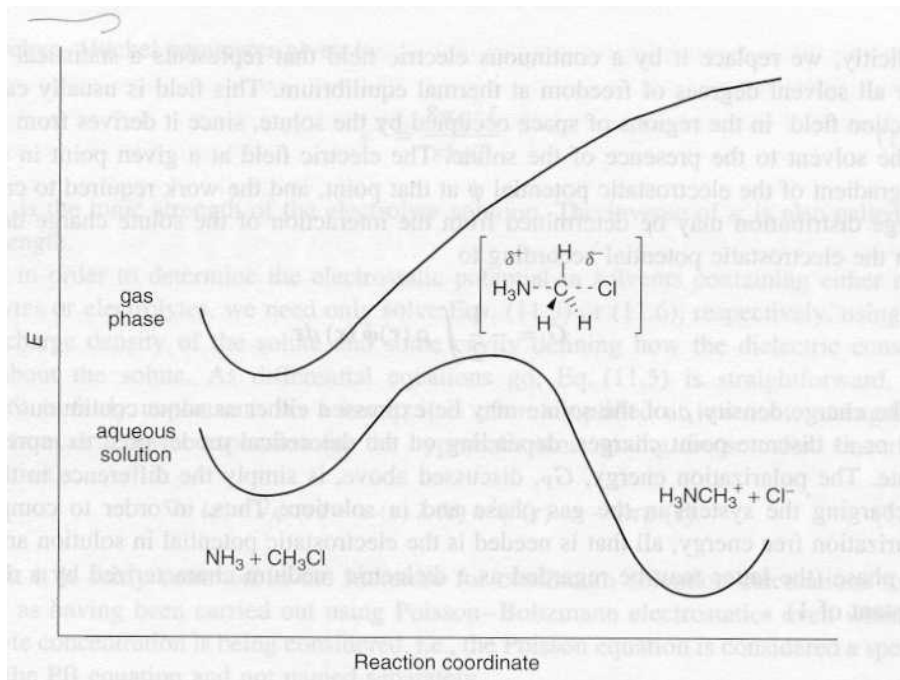
Gibb'sche Solvationsenergie



Einfluss auf Potentialflächen



## Menschutkin Reaktion von $\text{NH}_3$ und Chlormethan



### Kontinuumsmodelle – Elektrostatische Wechselwirkungen

#### Idealisierte Kavität

#### Ladung in Kugel – Born'sche Gleichung

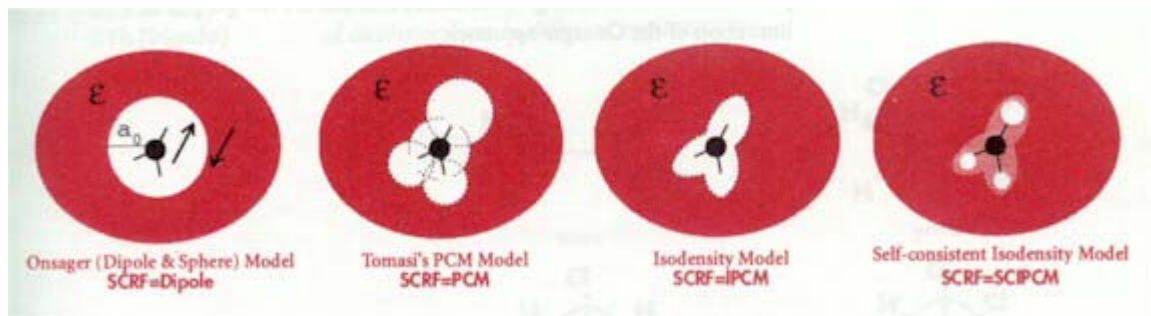
#### Dipol in Kugel – Kirkwood-Onsager

#### Einbindung der Polarisationsenergie in Hamilton Operator – SCRF (self consistent reaction field)

#### Verbesserungen

1. Verwendung der tatsächlichen Ladungsverteilung (nicht nur Dipol)
2. Realistische Solvatoberfläche

„Polarizable Continuum Model“



## Hybridmethoden QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics)