

Praktikum Computational Chemistry Blatt 1

1. Harmonischer Oszillator in masse- und frequenzgewichteten Koordinaten

- (a) Schreiben Sie eine Fortran-Subroutine `Hermite_Polynome` (`h`, `q`, `nmax`), die für gegebene q und n_{max} die Hermite-Polynome $H_n(q)$, $n = 0, 1, \dots, n_{max}$ berechnet und die Resultate in das Feld $h(0:n_{max})$ schreibt (d.h. $h(n) = H_n(q)$, $n = 0, 1, \dots, n_{max}$). Die Subroutine sollte wie folgt aussehen:

```
      subroutine Hermite_Polynome (h, q, nmax)
      !
      ! Berechnet die Funktionswerte der Hermite-Polynome.
      !
      implicit none
      integer n, nmax
      real*8  q, h(0:nmax)
      .
      .
      .
      end subroutine Hermite_Polynome
```

Speichern Sie diese Subroutine in die Datei `Hermite_Polynome.f`.

- (b) Kopieren Sie die Datei `/raid/home/exchange/cc/uebung01/Hermite_Tabelle.f` in Ihr Verzeichnis. Das Programm `Hermite_Tabelle.f` erstellt eine Tabelle von Hermite-Polynomen für verschiedene Werte von q . Kompilieren Sie das Programm (`gfortran Hermite_Tabelle.f Hermite_Polynome.f -o Hermite_Tabelle.x`). Führen Sie das Programm aus (`./Hermite_Tabelle.x > Hermite_Tabelle`) und plotten Sie die Hermite-Polynome mit `xmgr` (`xmgr -nxy Hermite_Tabelle`) oder mit `gnuplot` (`gnuplot; plot for [j=2:nmax+2] "Hermite_Tabelle" using 1:j with lines linecolor j lw 5 title "(j-2)`). Überprüfen Sie die Resultate durch Vergleich mit den Hermite-Polynomen aus der Vorlesung.
- (c) Schreiben Sie eine Subroutine `HO_Funktionen` (`psi`, `q`, `nmax`), die für gegebenes q und n_{max} die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators $\psi_n(q)$, $n = 0, 1, \dots, n_{max}$ berechnet. Speichern Sie diese Subroutine als `HO_Funktionen.f`. (Hinweis: Benutzen Sie die schon geschriebene Subroutine `Hermite_Polynome`.)
- (d) Kopieren Sie die Datei `/raid/home/exchange/cc/uebung01/HO_Tabelle.f`. Das Programm `HO_Tabelle.f` erstellt eine Wertetabelle von Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators für verschiedene Argumente q . Kompilieren Sie das Programm und plotten Sie die Funktionen.

2. Schwingungseigenfunktionen des HCl in harmonischer Näherung

Die Schwingungseigenfunktionen als Funktion der Auslenkung x sind gegeben als

$$\psi_n^{\text{HCl}}(x) = \sqrt{\alpha} \psi_n(\alpha x),$$

wobei $\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$, μ die reduzierte Masse und $\psi_n(q)$ die harmonische Oszillatoreigenfunktion in masse- und frequenzgewichteten Koordinaten sind. Die reduzierte Masse ist definiert als

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_{\text{H}}} + \frac{1}{m_{\text{Cl}}}. \quad (1)$$

Gegeben sei: $\alpha = 9.385 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1} = 9.385 \text{ \AA}^{-1}$.

- (a) Kopieren Sie HO_Tabelle.f nach HCl_Tabelle.f. Modifizieren Sie das Programm HCl_Tabelle.f so, dass es eine Tabelle der Funktionen $\psi_n^{\text{HCl}}(x)$ als Funktion von x in \AA erstellt. Plotten Sie die Wellenfunktionen.
(Zusätzliche Frage: Welche Einheit hat $\psi_n^{\text{HCl}}(x)$?).
- (b) Plotten Sie die Wellenfunktionen als Funktion von x in atomaren Einheiten a_0 .
(Hinweis: $1 a_0 = 0.529 \text{ \AA}$).

Vorbereitung für nächsten Versuch:

Das nächste Thema wird Störungstheorie sein. Wichtige Fragen in diesem Zusammenhang sind (siehe TC1 Skript):

1. Wie lauten die Ausdrücke für die Energie in nullter, erster und zweiter Ordnung Störungstheorie?
2. Wie lauten die Ausdrücke für die Wellenfunktion in nullter und erster Ordnung Störungstheorie?