

## Praktikum Computational Chemistry Blatt 3

In dieser Übung werden Sie die Eigenwerte des Schwingungs-Hamiltonoperators von HCl berechnen, wobei Sie das HCl-Potential (wie in Übung 2) durch eine Taylor-Entwicklung vierter Ordnung annähern. Auf diese Weise berechnen Sie die genauen Energieeigenwerte für das Taylor-Modell in vierter Ordnung.

### Vorbereitung:

Erzeugen Sie das Verzeichnis `uebung03` (`mkdir uebung03`), und wechseln Sie in dieses Verzeichnis (`cd uebung03`). Kopieren Sie die folgenden Dateien:

- `/raid/home/exchange/cc/uebung03/Hdiag.f`
- `/raid/home/exchange/cc/uebung03/lapack.lib.f90`
- `qMatrizen.f` aus Ihrem Verzeichnis `uebung02`

### Aufgaben:

- (a) Das Programm `Hdiag.f` diagonalisiert die Hamiltonmatrix für gegebenes  $n_{max}$ . Vervollständigen Sie das Programm.  
(Hinweis: Benutzen Sie die Funktionen `q3mat` und `q4mat`.)
  - (b) Starten Sie das Programm mit verschiedenen Werten für  $n_{max}$ , z.B.  $n_{max} = 5$ .
  - (c) Wiederholen Sie die Rechnung für die Serie  $n_{max} = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 10$  und notieren Sie für jede Rechnung die niedrigste Energie. Für welches  $n_{max}$  konvergiert die Rechnung innerhalb von  $1 \text{ cm}^{-1}$ , d.h. das Ergebnis ändert sich um weniger als  $1 \text{ cm}^{-1}$ ?
  - (d) Bestimmen Sie auf ähnliche Weise, für welches  $n_{max}$  die zweit-, dritt-, und zehnt-niedrigste Energie konvergiert (innerhalb von  $1 \text{ cm}^{-1}$ ).
  - (e) Vergleichen Sie die konvergierten Resultate für die ersten drei Energieeigenwerte mit den störungstheoretischen Resultaten aus Übung 2.
- (a) Starten Sie das Programm mit  $n_{max} = 0$ . Schreiben Sie das Ergebnis in die Datei `Tabelle` (`Hdiag.x > Tabelle`).
  - (b) Starten Sie das Programm mit  $n_{max} = 0, 1, \dots, 10$ , und fügen Sie die Resultate der Datei `Tabelle` hinzu (`Hdiag.x >> Tabelle`).
  - (c) Plotten Sie die Tabelle mit `xmgr` oder `gnuplot`. Welche Eigenwerte sind für  $n_{max} = 10$  konvergiert?

- (d) Starten Sie das Programm mit  $n_{max} = 20, 30, 40, 50, 60$ , und fügen Sie die Resultate ebenfalls an die Datei `Tabelle` an (`Hdiag.x >> Tabelle`). Plotten Sie die Tabelle wieder mit `xmgr` oder `gnuplot`. Wie viele der ersten 29 Eigenwerte sind für  $n_{max} = 20, 30, 40, 50, 60$  konvergiert?

### Vorbereitung für nächsten Versuch:

Das nächste Thema wird das Morsepotential sein. Sie können zur Vorbereitung folgende Aufgabe bearbeiten:

1. Wir betrachten ein Teilchen der Masse  $m$  in einem Morsepotential

$$V(R) = D_e(1 - e^{-\alpha(R-R_e)})^2, \quad D_e > 0, \alpha > 0$$

Dieses Potential wird oft zur näherungsweisen Beschreibung der Schwingung in einem zweiatomigen Molekül benutzt. In diesem Fall bezeichnet  $R$  den Abstand und  $m$  die reduzierte Masse der beiden Atome.

- (a) Bestimmen Sie die Gleichgewichtslage (d.h. das Minimum) in diesem Potential.
- (b) Bestimmen Sie den Grenzwert  $V(\infty) = \lim_{R \rightarrow \infty} V(R)$ .
- (c) Für welche  $R$  gilt  $V(R) > D_e$ ?