

## Praktikum Computational Chemistry Blatt 4

In dieser Übung werden die Eigenwerte eines Morseoszillators, der das Potential des HCl-Moleküls approximiert, untersucht. Das Potential ist

$$V(q) = D(1 - e^{-\beta q})^2 \quad (1)$$

mit den Parametern  $D$  und  $\beta$ ,  $q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(r - r_e)$ ,  $r$  ist der H-Cl-Kernabstand. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\hbar\omega\frac{\partial^2}{\partial q^2} + V(q) \quad (2)$$

und kann mit dem Hamiltonoperator  $\hat{H}_0$  des harmonischen Oszillators geschrieben werden als

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(q) - \frac{1}{2}\hbar\omega q^2. \quad (3)$$

Die Eigenwerte der gebundenen Zustände ( $n \leq 24$ ) sind:

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) - \hbar\omega(n + \frac{1}{2})^2 x, \quad x = \frac{\hbar\beta^2}{2\mu\omega} \quad (4)$$

Gegeben sind:

$$\begin{aligned} D &= 37475.8883 \text{ cm}^{-1} \\ \beta &= 0.199667282 \\ \hbar\omega &= 2988.10422 \text{ cm}^{-1} \\ x &= 0.0199335117 \end{aligned}$$

1. Schreiben Sie ein Programm, das die Eigenwerte in ähnlicher Weise wie in Übung 3 berechnet. Benutzen Sie hierzu die Dateien `MorseMatrix.f`, `Hdiag.f` und `lapack_lib.f90` aus dem Verzeichnis `/raid/home/exchange/cc/uebung04`. Verwenden Sie beim kompilieren die Option `-lopenblas`.
2. Berechnen Sie die Energieeigenwerte für verschiedene Basisgrößen. Bestimmen Sie möglichst viele Eigenwerte und schätzen Sie deren Konvergenzfehler ab.
3. Vergleichen Sie die konvergierten Resultate mit den exakten Energieeigenwerten (Gleichung 4).
4. **Zusatzaufgabe:** Plotten Sie die Eigenzustände des Morseoszillators und vergleichen Sie diese mit den Eigenzuständen des harmonischen Oszillators.

### **Vorbereitung für nächsten Versuch:**

Für das nächste Thema wird das Teilchen im Kasten wichtig sein. Wichtige Fragen in diesem Zusammenhang sind (siehe TC1 Skript):

1. Wie sieht der Hamiltonoperator aus?
2. Wie sehen die Energieeigenwerte aus?
3. Wie sehen die Energieeigenfunktionen aus?