Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe,
Dr. Wolfgang Eisfeld

Praktikum Computational Chemistry
Blatt 5

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

$$V(r) = D(1 - e^{-\beta(r-r_e)})^2.$$

Der Hamiltonoperator ist

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r)$$

Gegeben sind: $D = 0.170756062$, $\beta = 0.98477812$, $r_e = 2.41030006$ und $m = 1786.66461$ in atomaren Einheiten.
Die Eigenwerte der gebundenen Zustände ($0 \leq n \leq 24$) sind:

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) - \hbar\omega(n + \frac{1}{2})^2 x\,,\ \hbar\omega = 2988.10422\ \mathrm{cm}^{-1}\,,\ x = 0.0199335117$$

1. Kopieren Sie die Dateien

   - /raid/home/exchange/cc/uebung05/Hdiag.f90
   - /raid/home/exchange/cc/uebung05/MorseMatrixSin.f90
   - /raid/home/exchange/cc/uebung05/lapack_lib.f90

   Das Programm Hdiag.f90 berechnet die Eigenwerte in der Basis der Eigenfunktionen des Teilchens im Kasten (Sinusfunktionen) für einen einimensionalen Morseoszillator. Hdiag.f90 benutzt Routinen aus MorseMatrixSin.f90. Die Eingabewerte für Hdiag.f90 sind x_{max} und E_{max} in atomaren Einheiten. Verwenden Sie beim Kompilieren wieder die Option -lopenblas.

2. Schätzen Sie mittels einer graphischen Darstellung des Potentials oder einer analytischen Rechnung einen sinnvollen Startwert für x_{max} ab.

   Hinweis: Um alle gebundenen Zustände zu erhalten, sollte das Potential für Koordinatenwerte $x \geq x_{max}$ konstant, d.h. gleich D sein.

3. Berechnen Sie die untersten 40 Energieeigenwerte für das oben abgeschätzte x_{max}, indem Sie die Ergebnisse bezüglich des Grenzfalls $E_{max} \to \infty$ (bzw. der entsprechenden Werte x_{min} und n_{max}) konvergieren.

4. Wiederholen Sie die obige Prozedur für einen Satz steigender x_{max}-Werte. Untersuchen Sie die Abhängigkeit der berechneten Eigenwerte von x_{max}. Identifizieren Sie die gebundenen Zustände. Wie verhalten sich die Kontinuumslösungen?

5. Vergleichen Sie die berechneten Eigenenergien der gebundenen Zustände mit den exakten Energieeigenwerten und den Ergebnissen der letzten Übung. Vergleichen Sie die Konvergenzeigenschaften der verschiedenen Basisentwicklungen.

Vorbereitung für nächsten Versuch:

Das nächste Thema wird die numerische Potentialquadratur sein. Hierfür ist die Integraldefinition als Grenzwert einer Folge hilfreich. Wichtige Fragen in diesem Zusammenhang sind (siehe Mathe1 Skript):

1. Wie kann man eine stetige Funktion zur Flächenberechnung nähern?
2. Wie berechnet man die Fläche der Näherung?
3. Wie erhält man hieraus die Fläche unter der Funktion?