

Praktikum Computational Chemistry Blatt 6

In dieser Übung werden weiterhin die Energieeigenwerte des HCl-Moleküls untersucht. Zwei Potentiale werden betrachtet: das bekannte Morsepotential V_{Morse} und eine genaue Potentialfunktion V_{HCl} , die auf *ab initio* Berechnungen der elektronischen Struktur beruht. Das genaue Potential ist

$$V_{HCl}(r) = \frac{c_0 e^{-\beta_0 r}}{r} + \sum_{i=1}^6 c_i r e^{-\beta_i r} \quad (1)$$

Die vierzehn Parameter $\{c_i, \beta_i; i = 0, 6\}$ wurden durch Anpassung an die *ab initio* Daten ermittelt.

Kopieren Sie die Dateien

- /raid/home/exchange/cc/uebung06/Hdiag.f90
- /raid/home/exchange/cc/uebung06/PotMatrix.f90.
- /raid/home/exchange/cc/uebung06/lapack_lib.f90.

Das Programm Hdiag.f90 nutzt lapack_lib.f90 (-lopenblas) und PotMatrix.f90. Hdiag.f90 berechnet die Eigenwerte in der Teilchen-im-Kasten-(Sinus)-Basis für ein Potential, welches durch den Aufruf der Subroutine PotMorse oder PotHCl entsprechend gewählt wird. Die Eingabe von Hdiag.f90 umfaßt x_{max} , E_{max} (in atomaren Einheiten) und $ratio = N/n_{max}$, wobei N die Anzahl der Summationspunkte in der Quadratur und n_{max} die Anzahl der Basisfunktionen ist. Die Ausgabedaten von Hdiag.f90 sind x_{min} , n_{max} , N , die untersten 40 Energieeigenwerte und die zwei obersten Eigenwerte.

1. Wählen Sie die Subroutine PotMorse in Hdiag.f90.

Setzen Sie $x_{max} = 17$ und $E_{max} = 0.9$.

- Konvergieren Sie für das Morsepotential **alle** von Hdiag.f ausgedruckten Eigenwerte in Abhängigkeit von *ratio*.
- Konvergieren Sie die Energieeigenwerte der **gebundenen** Zustände des Morsepotentials in Abhängigkeit von *ratio*.

2. Wählen Sie die Subroutine PotHCl in Hdiag.f90. Wählen Sie nun $ratio = 1$ und variieren Sie x_{max} und E_{max} . Bestimmen Sie konvergierte Energieeigenwerte und vergleichen Sie die Resultate mit denen des Morsepotentials.

Vorbereitung für nächsten Versuch:

Das nächste Thema wird weiter das Schwingungsproblem von HCN bearbeiten. Im Zusammenhang mit mehrdimensionalen Systemen sind folgende Fragen wichtig (siehe TC2 Skript):

1. Wie sieht der Hamiltonoperator eines mehrdimensionalen Systems im Allgemeinen aus?
2. Was ist der einfachste Ansatz für eine mehrdimensionale Wellenfunktion?
3. Wann ist dieser exakt?