

## Praktikum Computational Chemistry

### Blatt 7

In dieser Übung werden die Schwingungszustände des HCN-Moleküls in kollinearer Näherung untersucht. Das Potential  $V$  wurde durch Anpassung einer Funktion an die Resultate genauer *ab initio* Berechnungen bestimmt (Bowman *et al*, J. Chem. Phys. **99**, 308 (1993)).

Kopieren Sie die Dateien

- /raid/home/exchange/cc/uebung07/Hdiag.f
- /raid/home/exchange/cc/uebung07/PotMatrix.f
- /raid/home/exchange/cc/uebung07/HMatrix.f
- /raid/home/exchange/cc/uebung07/hcn\_spln2.dat

Das Hauptprogramm Hdiag.f nutzt LAPACK (-lopenblas), HMatrix.f und PotMatrix.f. Hdiag.f berechnet die Eigenwerte in der zweidimensionalen Harmonischen-Oszillator-Basis in Jacobikoordinaten. Die Koordinate  $r$ , der C–N-Abstand, ist die erste Koordinate und die Koordinate  $R$ , der H–CN-Abstand, die zweite Koordinate in den entsprechenden Feldern. Die Eingabe von Hdiag.f umfaßt  $max_1$  und  $max_2$ , die Basisgröße in der ersten und zweiten Koordinate. Ausgegeben werden die untersten 51 Energieeigenwerte in  $\text{cm}^{-1}$ .

1. Die Subroutine HMatrix soll alle Elemente von  $H$  berechnen. Sie ist aber nicht komplett. Vervollständigen Sie (vermutlich mit zwei Zeilen an verschiedenen Positionen) die leere vier-Index-Schleife in HMatrix.f. In HMatrix.f werden atomare Einheiten benutzt.
2. Konvergieren Sie die Schwingungsenergieeigenwerte bis  $20000 \text{ cm}^{-1}$  mit einer Genauigkeit von  $0.1 \text{ cm}^{-1}$ .
3. Ordnen Sie den Energieniveaus bis  $20000 \text{ cm}^{-1}$  Quantenzahlen  $n_r, n_R$  zu. Nutzen Sie hierzu die approximative Beschreibung durch das Modell des Harmonischen Oszillators.

#### Vorbereitung für nächsten Versuch:

Das nächste Thema wird die Hartree-Näherung sein. Wichtige Fragen in diesem Zusammenhang sind (siehe TC2 Skript):

1. Welche Form des Hamiltonoperators nimmt man für diese Näherung an?
2. Wie lautet der Ansatz für die Wellenfunktion?
3. Wie lauten die Hartreegleichungen?
4. Wie berechnet man die Gesamtenergie des Systems?