

# Kvantová chemie

## Cvičení 8

Bornova-Oppenheimerova aproximace

## Problém 1 (Hůla)

Předpokládejte, že atomy v dvojatomové molekule interagují prostřednictvím Lennardova-Jonesova potenciálu  $W(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$ . Určete parametry  $\varepsilon$  a  $\sigma$ , víte-li, že rovnovážná vzdálenost atomů v molekule je  $r_e = 1\text{Å}$  (Ångström) a vazebná energie  $D_e \equiv -W(r_e) = 1\text{eV}$  (elektronvolt).

## Problém 2 (Hlobílková)

Určete Hessovu matici dvojatomové molekuly, jejíž atomy interagují prostřednictvím potenciálu  $W(r)$ , v rovnovážné konfiguraci  $\vec{r}_1 = [0,0,0]$  a  $\vec{r}_2 = [0,0,r_e]$  a ukažte, že má pět nulových vlastních čísel a jedno vlastní číslo nenulové. Čemu je rovno?