

# Schrödingerjeva enačba

Miha Čančula

21. marec 2012

## 1 Metoda

Za numerično reševanje diferencialne enačbe sem uporabil metodo Numerova. Ker enačbo nima območij, kjer bi se  $R(x)$  ali njen odvod hitro spreminjal, sem lahko uporabil konstanten, relativno velik korak.

Za velike  $x$  lahko člene  $z$  v imenovalcu zanemarimo in enačbo postane približno  $R''(x) = -ex$ . Energija  $e$  je za vezana stanja negativno, zato sta rešitvi enačbe eksponentno naraščanje in padanje. Fizikalna stanja imajo samo padajočo komponento, zaradi končne natančnosti računalniške aritmetike in velikega koraka pa se nisem mogel znebiti naraščajoče komponente. Težavi sem se izognil tako, da sem integracijo začel z obeh strani, s čimer sem padajočo komponento pretvoril v naraščajočo. Delni funkciji sem zlepil tako, da sem zahteval enakost vrednosti in odvodov.

Zgornjo mejo sem predstavljav v odvisnosti od energije. Stanja z nižjo energijo so bolj vezana, zato pri velikem  $x$  hitreje konvergirajo proti 0. Za iskanje teh stanj sem za zgornjo mejo integracije postavil  $x = 20$ . Vzbujena stanja z višjimi energijami počasneje padajo, zato sem zgonjo mejo predstavljav od 20 do 100. Izbira previsoke zgornje meje za nizkoenergijska stanja ne povzročin samo dolgotrajnega računanja, ampak v takšnem primeru metoda konvergira k višjeenergijskim stanjem. Srednjo točko, kjer sem obe delni funkciji zlepil, sem vedno izbral med četrtino in polovico zgornje meje.

## 2 Vodikov atom

Z opisanim postopkom mi je uspelo najti le stanja z nizko energijo in nizko vrtilno količino  $l$ . Ta stanja so prikazana na sliki ??.

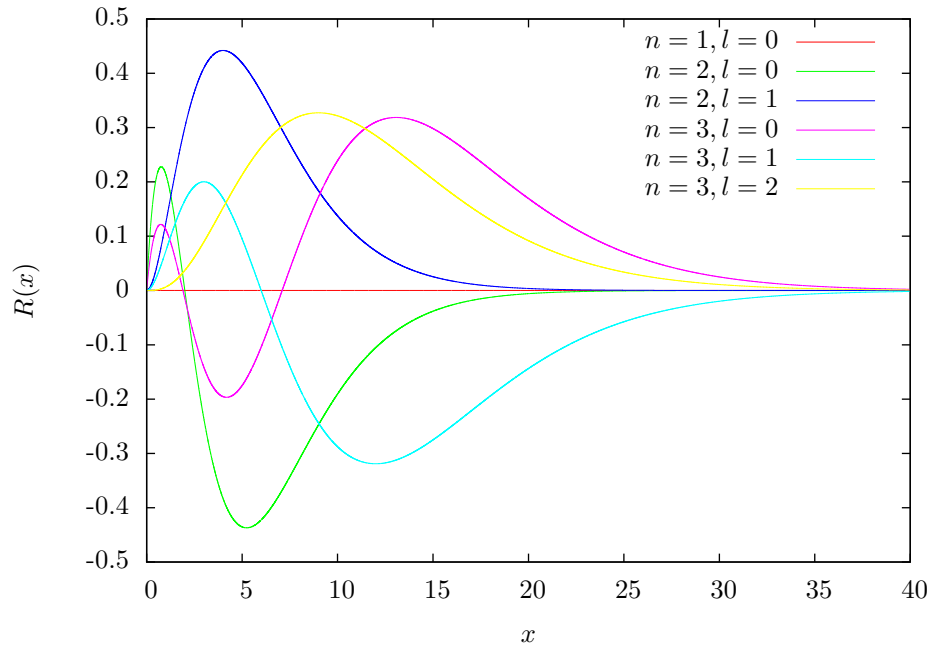
## 3 Helijev atom

Tu sem uporabil dvojno iteracijo, tako da sem začel s približkom za potenical  $\Phi(x)$ , s katerim sem enako kot za vodikov atom izračunal valovno funkcijo elektrona  $R(x)$ . Na podlagi dobljene gostote naboja sem izračunal nov približek za  $\Phi(x)$  z metodo RK4. Za začetne podatke vsakega koraka (odvod  $R'(0)$  in vrednost pri izbranem velikem  $x$ ) sem vzel rezultat prejšnjega.

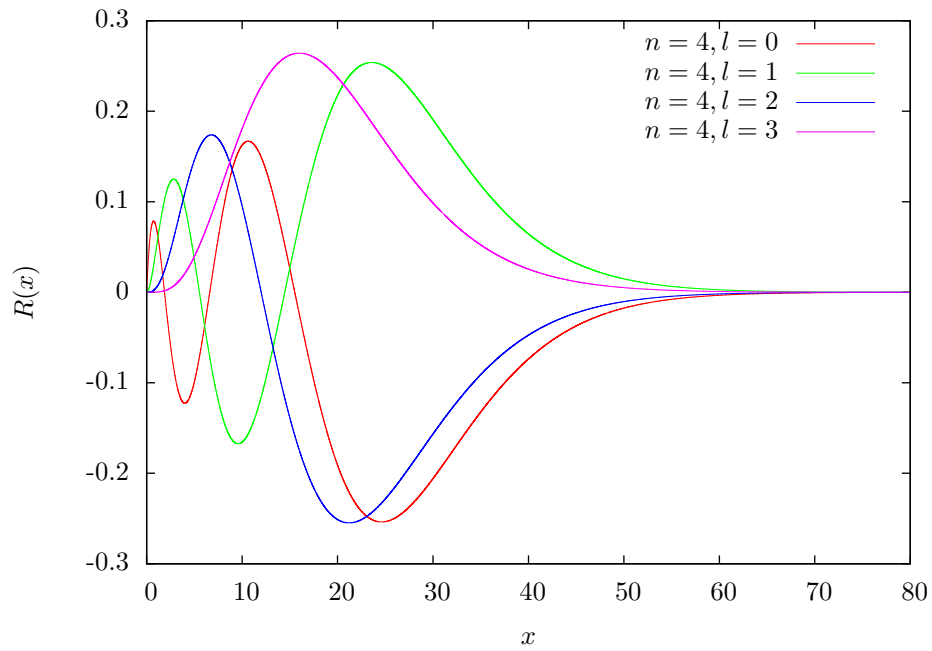
Iteriranje sem ustavil, ko je izraz

$$\int \left| \varphi_k''(x) - \frac{R_k(x)^2}{x} \right|^2 dx \quad (1)$$

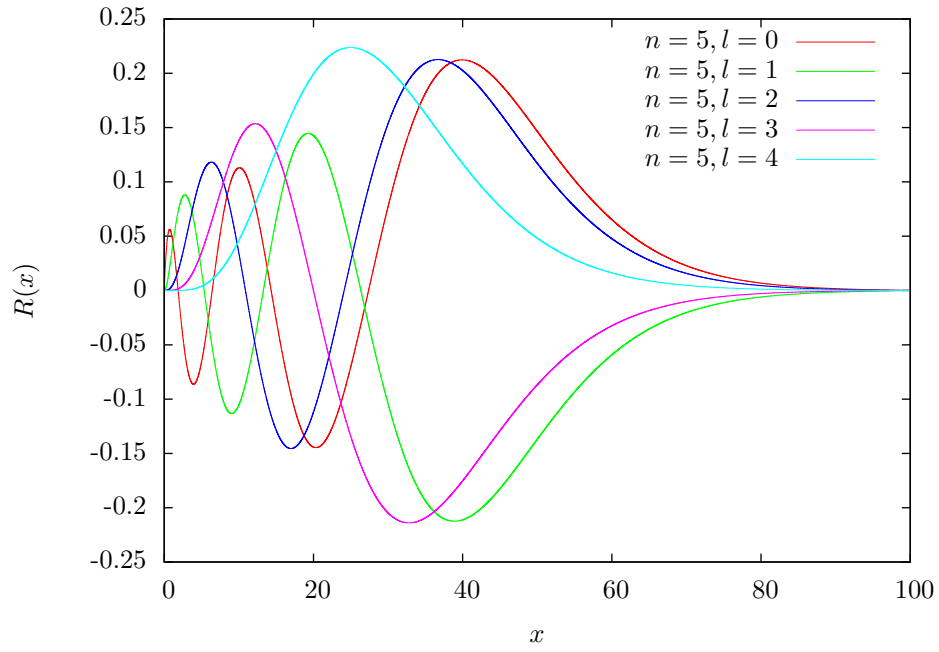
postal dovolj majhen, pri čemer sta  $R_k$  in  $\varphi_k$  približka za valovno funkcijo in potencial po  $k$ -tih iteracijah. Integral sem seveda nadomestil s končno vsoto, zgornjo mejo za vrednost izraza pa sem postavil na okrog  $10^{-7}$ , kar pri dolžini koraka  $10^{-3}$  ustreza absolutni napaki  $10^{-5}$  na vsakem koraku.



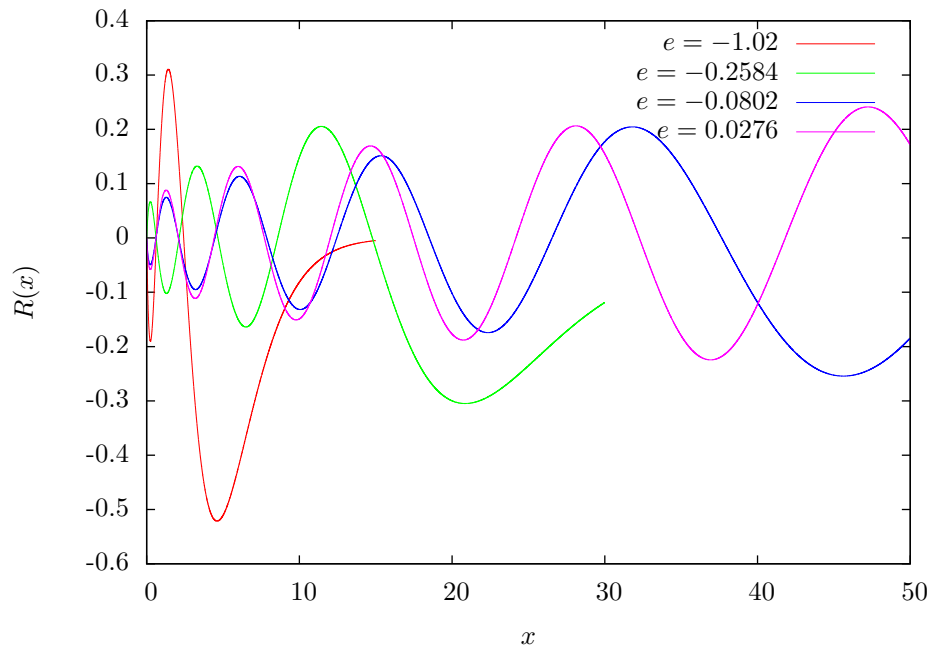
Slika 1: Lastna stanja elektrona v vodikovem atomu,  $n \leq 3$



Slika 2: Lastna stanja elektrona v vodikovem atomu,  $n = 4$



Slika 3: Lastna stanja elektrona v vodikovem atomu,  $n = 5$



Slika 4: Lastna stanja elektrona v helijeve atomu