

# Schrödingerjeva enačba

Miha Čančula

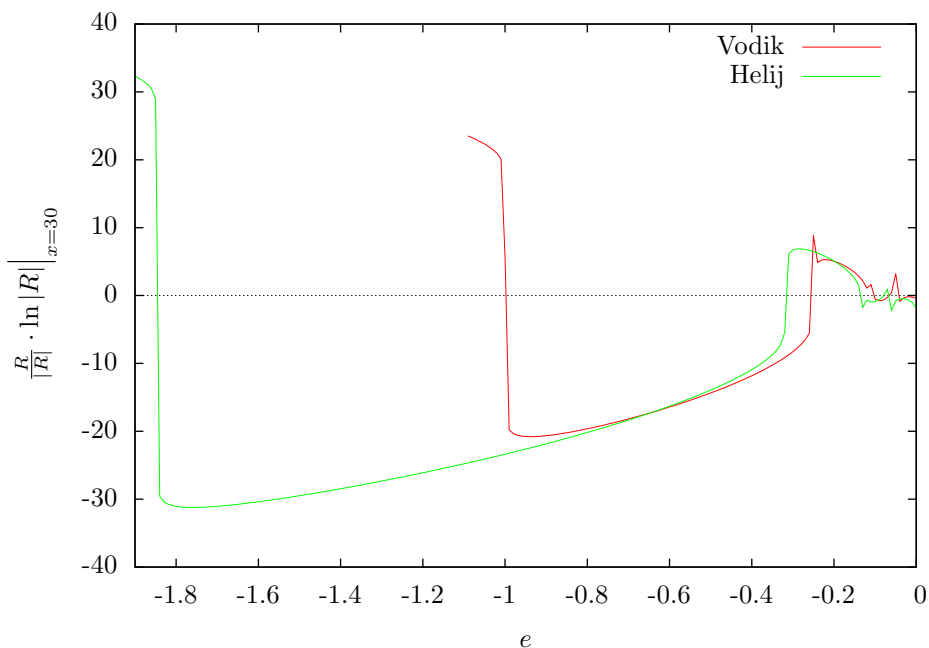
22. marec 2012

## 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. Dobre rezultate sem dobil pri  $h = 10^{-3}$ . Potencial in normalizacijo valovne funkcije sem izračunal z metodo RK4 in interpolacijo.

Lastne energije sem določil z bisekcijo, tako da sem pri različnih energijah izračunal vrednosti  $R(x)$  pri nekem velikem  $x_0$ . Za rob območja sem vzel različne vrednosti, saj so stanja z višjimi (manj negativnimi) energijami slabše vezana in  $R$  počasneje pada. V večini primerov je bil mejni  $x$  med 20 in 100.

Pri bisekciji je treba najprej najti zgornjo in spodnjo mejo za rešitev. Za to sem si narisal graf na sliki 1. Ta prikazuje vrednost  $R(x_0)$  pri različnih energijah. Za vodikov atom je dovolj en graf, saj energija ni odvisna od števila  $l$ . Točke, kjer funkcija prečka absciso nam povejo lastne energije sistema.

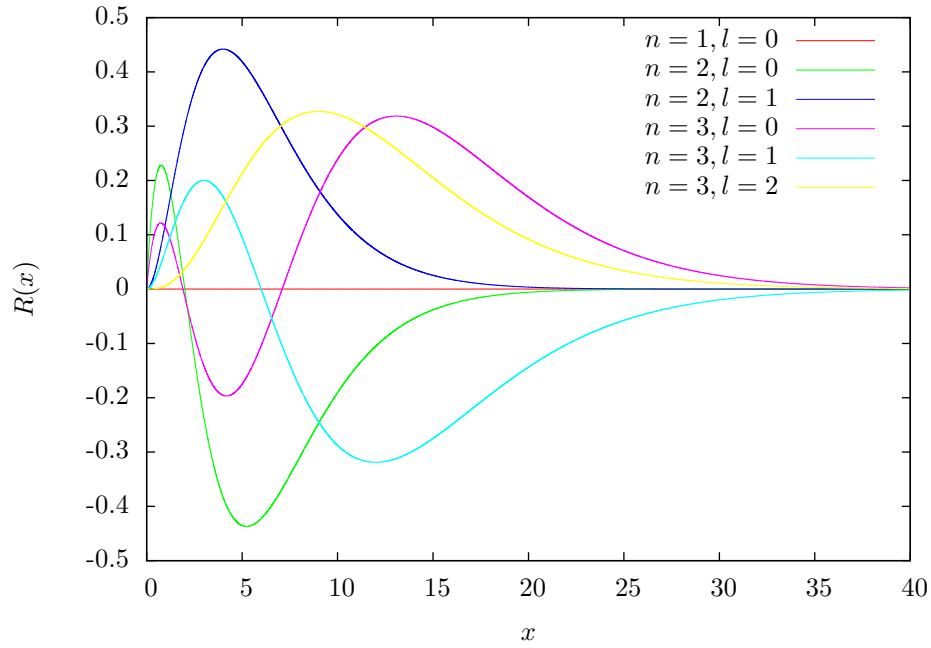


Slika 1: Lastna stanja elektrona v vodikovem atomu,  $n \leq 3$

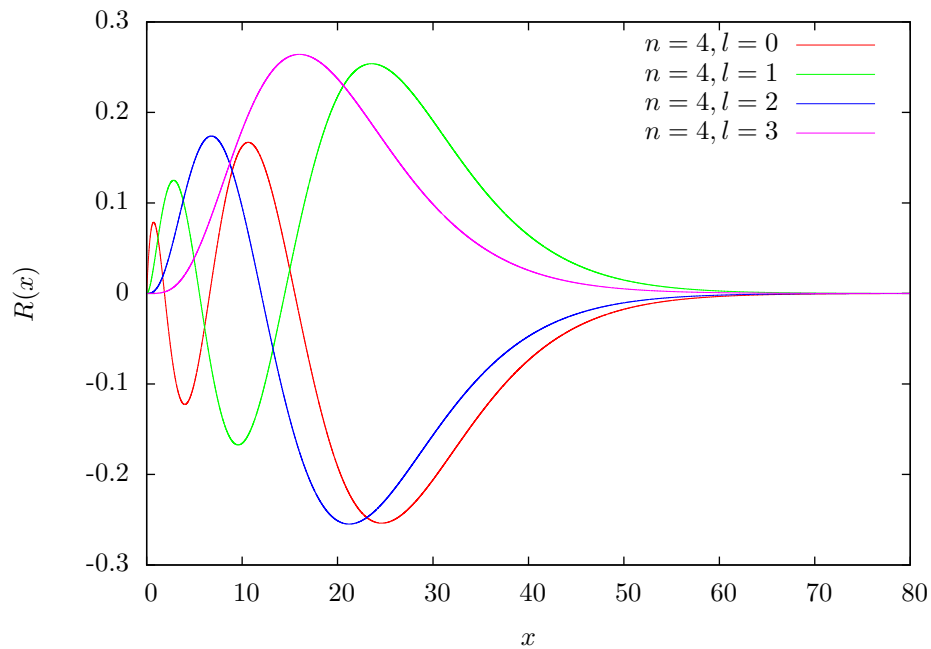
Graf za helij pa je narisal s privzetkom, da velja potencial, ki ga povzroča elektron v začetnem približku. Vsaka rešitev za  $R(x)$  seveda določa svoj potencial, zato odvisnost ni natančna. Služi le kot pomagalo, tako da lahko ocenimo lastne energije.

## 2 Vodikov atom

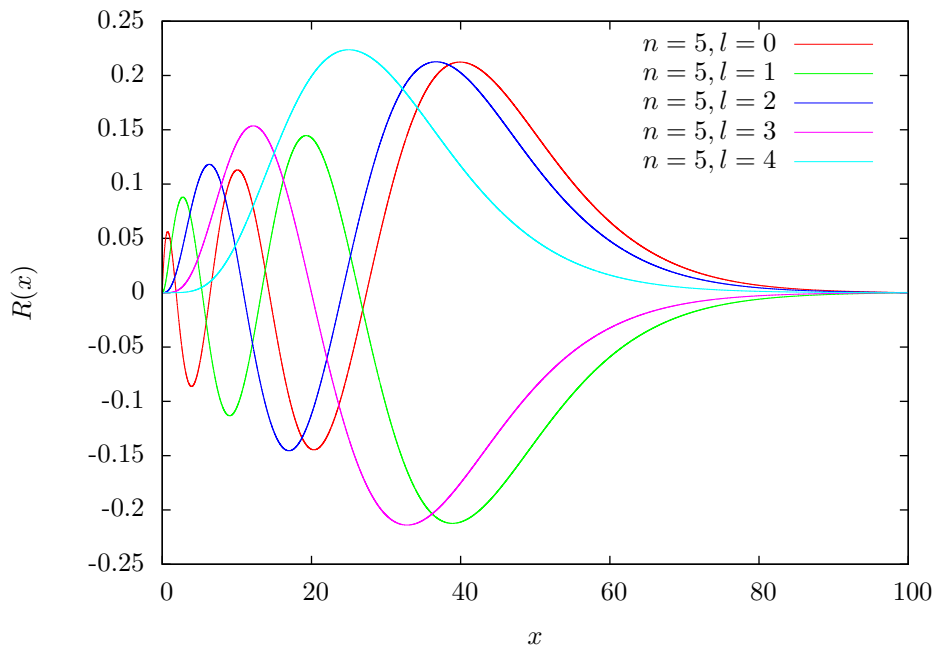
Z opisanim postopkom mi je uspelo najti nekaj najnižjih stanj vodikovega atoma. Funkcije  $R(x)$  in pripadajoče energije so na slikah 2, 3 in 4.



Slika 2: Lastna stanja elektrona v vodikovem atomu,  $n \leq 3$



Slika 3: Lastna stanja elektrona v vodikovem atomu,  $n = 4$



Slika 4: Lastna stanja elektrona v vodikovem atomu,  $n = 5$

Vidimo, da se stanja z višjo energijo res raztezajo proti višjim  $x$ , zato sem moral zgornjo mejo integracije sproti prilagajati.

### 3 Helijev atom

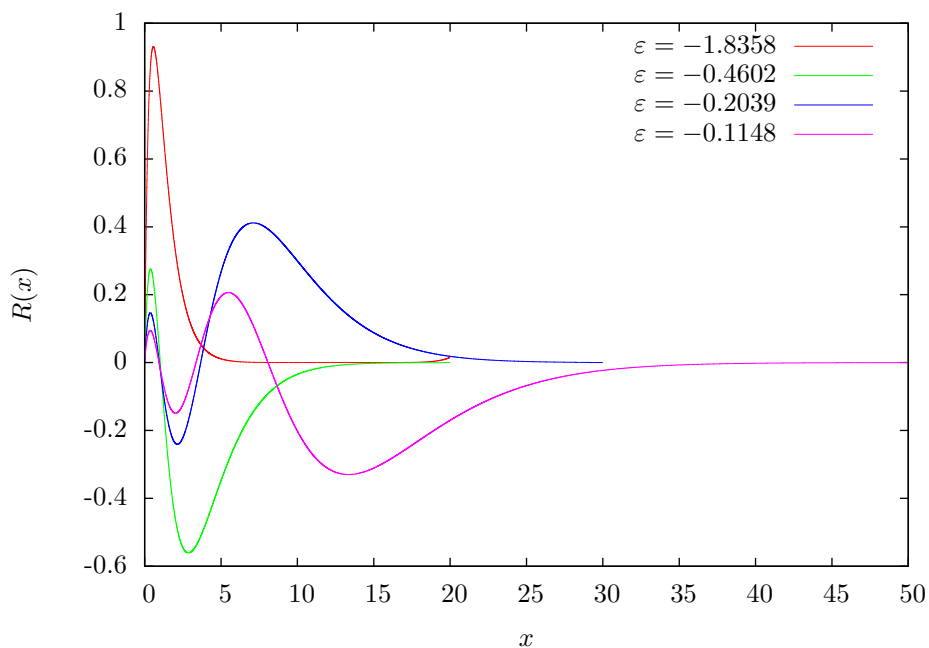
Tu sem uporabil dvojno iteracijo, tako da sem začel s približkom za potencial  $\Phi(x)$ , s katerim sem enako kot za vodikov atom izračunal valovno funkcijo elektrona  $R(x)$ . Na podlagi dobljene gostote naboja sem izračunal nov približek za  $\Phi(x)$  z metodo RK4.

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.

Pri heliju sem naletel na težavo z bisekcijo, saj algoritem deluje le, če po vsakem izračunu potenciala obstaja lastno stanje z energijo v izbranem intervalu. Zato sem moral uporabiti precej širok začetni interval, kar oteži iskanje šibko vezanih lastnih stanj.



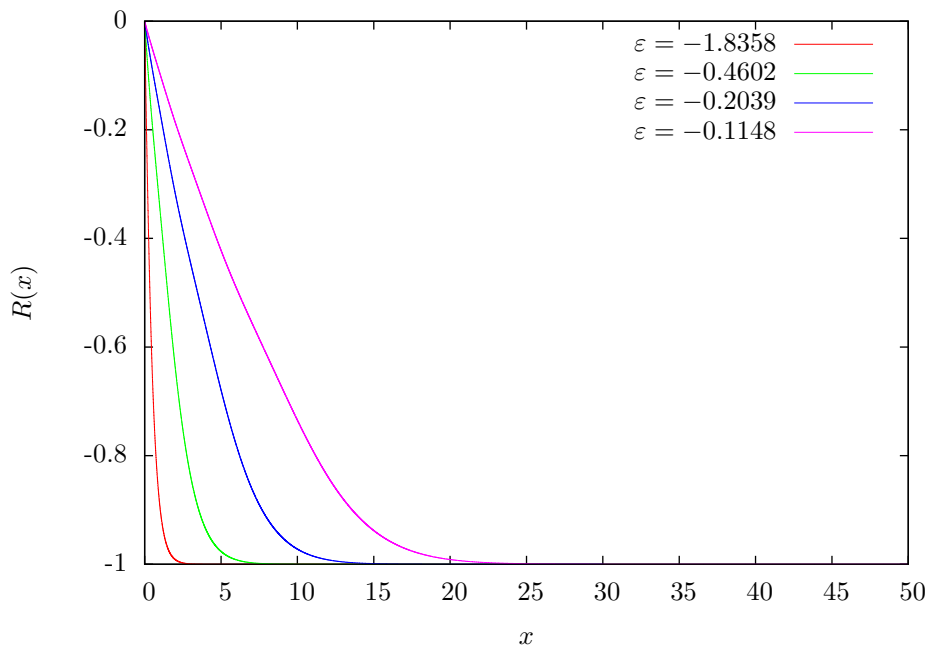
Slika 5: Enodelčna lastna stanja obeh elektronov v helijevem atomu

Graf prikazuje le stanja, kjer sta oba elektrona v istem stanju (le z različnima spinoma). Fizikalno so možna tudi stanja, ko je le eden izmed elektronov vzbujen, ampak uporabljena metoda takšnih primerov ne najde. Za izračun ionizacijske energije je dovolj le poznavanje osnovnega stanja.

Primerjal sem tudi potenciale različnih stanj helijevih elektronov, ki so na sliki 6. Potencial je določen le do konstante, ki nima fizikalnega pomeni, za konstanto pa spremeni izračune energije. Za lažje primerjanje rezultatov sem za izračun potenciala uporabil formulo iz navodil

$$\varphi(x) = - \int_0^x R^2(y) dy - x \int_x^\infty \frac{R^2(y)}{y} dy \quad (2)$$

Potencial začne pri vrednosti  $\varphi(0) = 0$ , v neskončnosti pa doseže vrednost  $\varphi(\infty) \rightarrow -1$ . Po pričakovanju se potencial elektronov z višjo energijo, ki so v povprečju bolj oddaljeni od jedra, razteza do večjega  $x$ , preden se ustali pri konstantni vrednosti.



Slika 6: Električni potencial, ki ga povzroča porazdelitev naboja elektronov v helijeve atomu

Pri reševanju enačb za helijev atom dobimo kot rezultat dve različni energiji:  $\varepsilon$ , ki je Lagrangeov multiplikator v enačbi, in skupno vezavno energijo obeh elektronov  $E$ .  $\varepsilon$  predstavlja energijo enega elektrona v skupnem polju jedra in drugega elektrona, zato je njegova vrednost v osnovnem stanju dobra ocena za prvo ionizacijsko energijo. Na podlagi zgornjih izračunov bi napovedali, da je prva ionizacijska energija helija enaka

$$E_1 = E_0 \cdot \varepsilon = 24,98 \text{ eV} \quad (3)$$

Rezultat je blizu pravi vrednosti, ki je 24,59 eV. Razliko lahko pojasnimo s tem, da odvzem enega elektrona spremeni potencial drugega, zaradi česar se spremeni njegovo stanje in posledično energija. Drugi elektron bo verjetno prešel v energijsko bolj ugodno stanje, kar povzroči zmanjšanje ionizacijske energije.