

Schrödingerjeva enačba

Miha Čančula

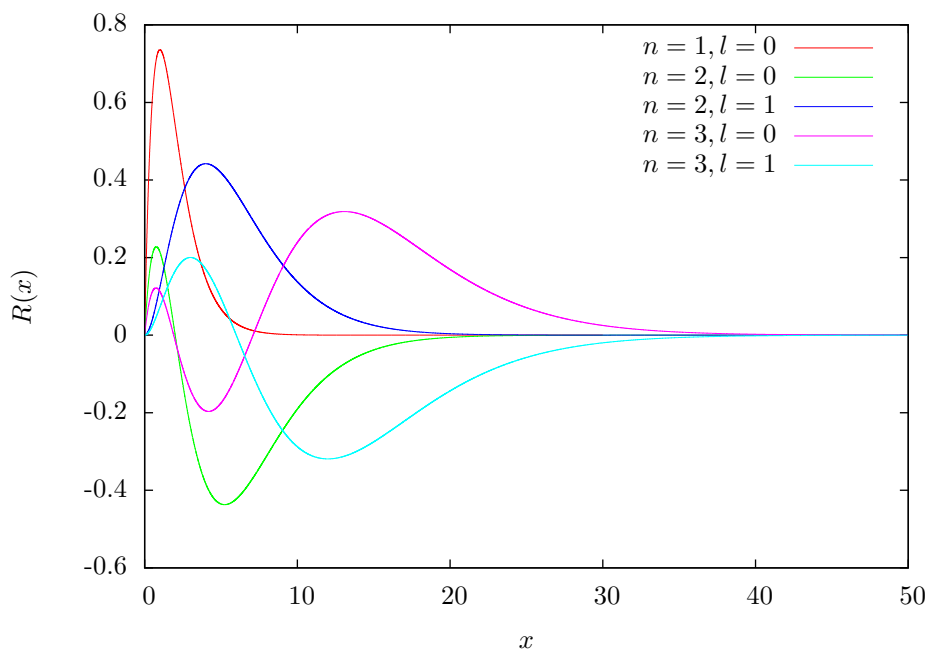
20. marec 2012

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 x 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.

2 Vodikov atom



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 $\Phi(x)$. Postopek sem ponovil stokrat. Za začetne podatke vsakega koraka (odvod $R'(0)$ in vrednost pri izbranem velikem x) sem vzel rezultat prejšnjega.