

Wydział, kierunek: WFiIS, FT	Imię i nazwisko: Marcin Mikołajczyk	Rok: 4	Grupa: 1
Data wykonania: 11 listopada 2025	Data oddania: 11 listopada 2025	OCENA:	

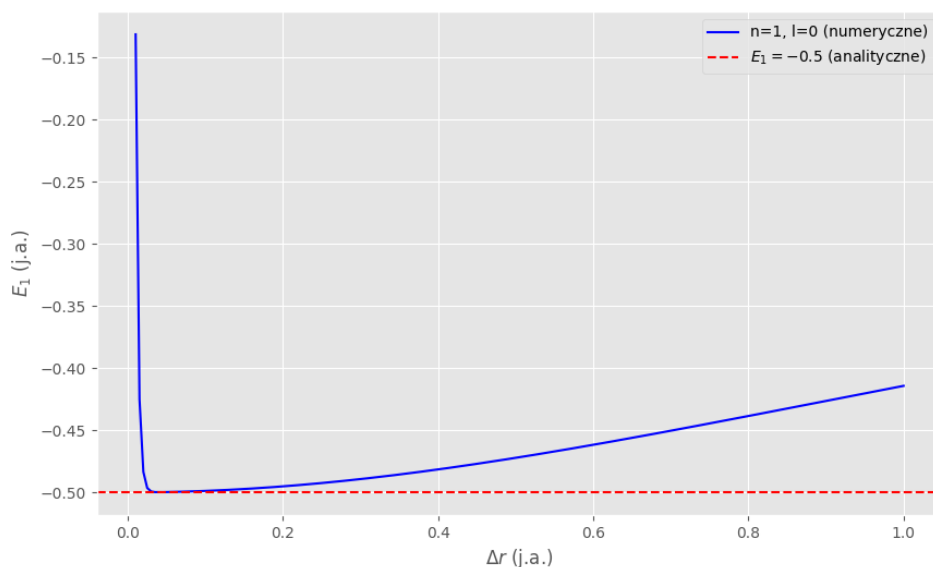
Laboratorium 5 - Problemy symetrii radialnej

1 Energie własne - rola Δr

Zgodnie z poleceniem, zbadano zależność numerycznie wyznaczonych energii własnych E_n od kroku siatki Δr . Obliczenia wykonano dla $n = 1, 2, 3$ oraz odpowiednich wartości orbitalnej liczby kwantowej l . Wyniki porównano z wartościami analitycznymi, dany wzorem $E_n = -1/(2n^2)$ w jednostkach atomowych.

1.1 $E_{n=1}$ dla $l = 0$

Dla stanu podstawowego $n = 1, l = 0$, analityczna wartość energii wynosi $E_1 = -0.5$ j.a. Wykres (Rys. 1) pokazuje, że numerycznie obliczona energia silnie zbiega do wartości analitycznej dla Δr w zakresie około 0.05 do 0.2 j.a., osiągając minimum bardzo blisko wartości oczekiwanej. Dla $\Delta r \rightarrow 0$ oraz dla dużych Δr , błąd numeryczny rośnie.

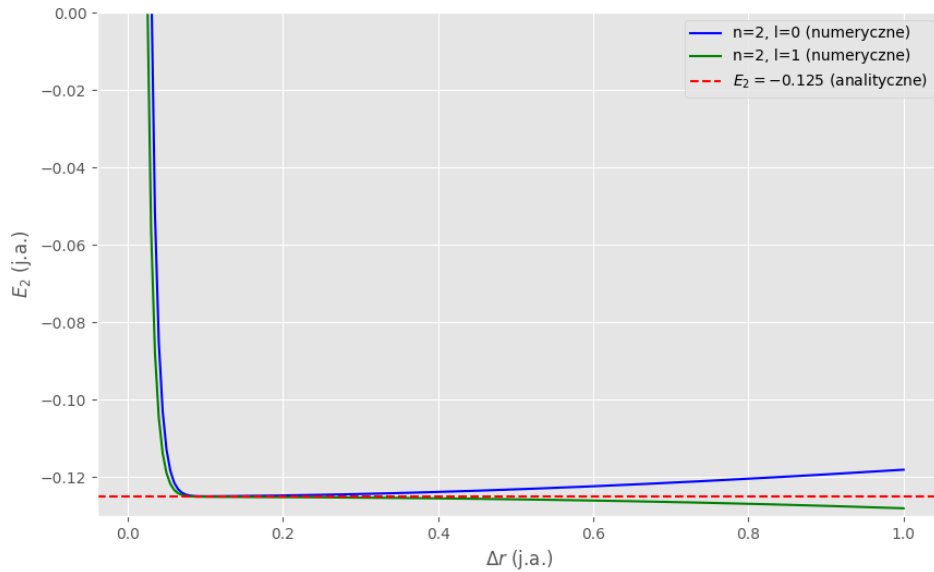


Rysunek 1: Zależność energii E_1 ($n = 1, l = 0$) od kroku Δr . Linia przerywana to wartość analityczna $E_1 = -0.5$ j.a.

1.2 $E_{n=2}$ dla $l = 0, 1$

Dla $n = 2$, analityczna wartość energii wynosi $E_2 = -1/(2 \cdot 2^2) = -0.125$ j.a., niezależnie od l . Wykres (Rys. 2) pokazuje, że zarówno dla $l = 0$ (stan 2s), jak i $l = 1$ (stan 2p), obliczone energie

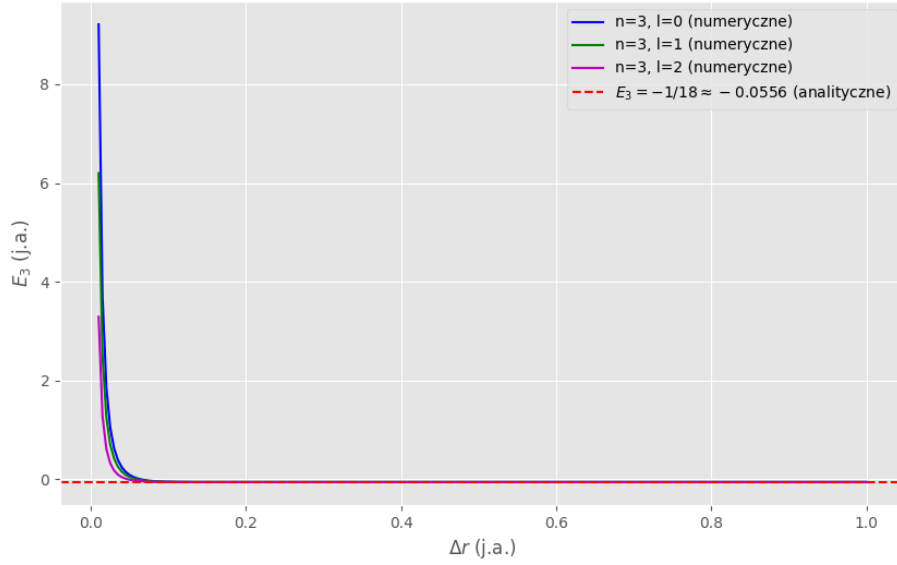
zbiegają do wartości analitycznej. Obserwujemy degenerację energii względem l , gdyż obie linie (niebieska i zielona) niemal idealnie się pokrywają.



Rysunek 2: Zależność energii E_2 ($n = 2, l = 0$ oraz $n = 2, l = 1$) od kroku Δr . Linia przerywana to wartość analityczna $E_2 = -0.125$ j.a.

1.3 $E_{n=3}$ dla $l = 0, 1, 2$

Dla $n = 3$, analityczna wartość energii wynosi $E_3 = -1/(2 \cdot 3^2) = -1/18 \approx -0.0556$ j.a. Podobnie jak w poprzednim przypadku, obserwujemy (Rys. 3) zbieżność do wartości analitycznej oraz degenerację energii względem l (stany 3s, 3p, 3d). Linie dla $l = 0, 1, 2$ pokrywają się, a ich zachowanie względem Δr jest analogiczne do $n = 1$ i $n = 2$.



Rysunek 3: Zależność energii E_3 ($n = 3, l = 0, 1, 2$) od kroku Δr . Linia przerywana to wartość analityczna $E_3 \approx -0.0556$ j.a.

Na podstawie powyższych wykresów, jako optymalną wartość kroku siatki do dalszych obliczeń wybrano $\Delta r = 0.1$ j.a., ponieważ dla tej wartości błąd numeryczny energii wydaje się być bliski minimalnemu dla wszystkich badanych stanów.

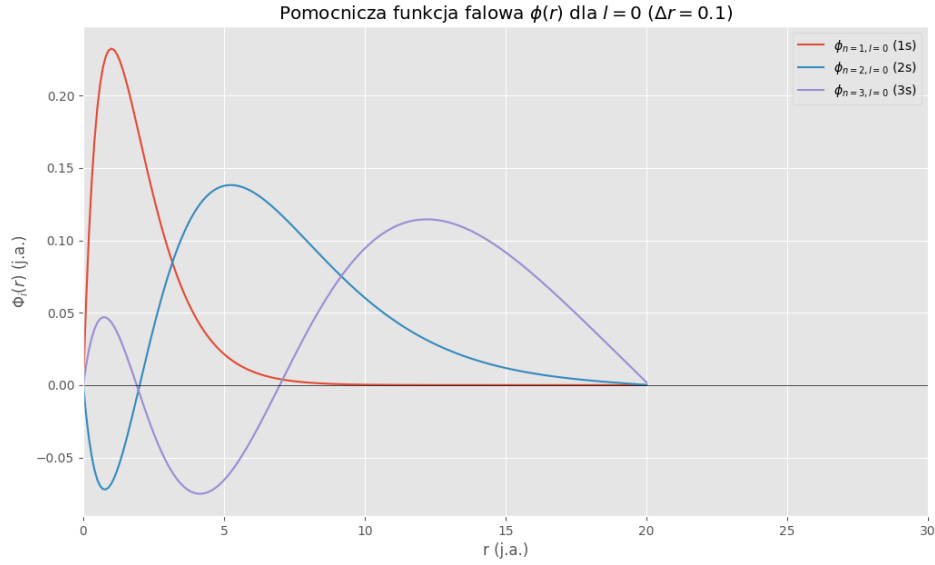
2 Pomocnicza funkcja falowa $\phi(r)$

Dla wybranej wartości $\Delta r = 0.1$ j.a. oraz $l = 0$ wykreślono pomocnicze funkcje falowe $\phi_{n,l=0}(r)$ dla trzech najniższych stanów własnych (1s, 2s, 3s). Zgodnie z podstawieniem $\psi(r) = \phi(r)/r$ oraz warunkiem brzegowym $\phi(r = 0) = 0$, wszystkie funkcje zaczynają się od zera.

Na wykresie (Rys. 4) widać, że:

- Funkcja $\phi_{n=1}$ (1s) nie ma węzłów (oprócz $r = 0$).
- Funkcja $\phi_{n=2}$ (2s) ma jeden węzeł.
- Funkcja $\phi_{n=3}$ (3s) ma dwa węzły.

Liczba węzłów funkcji $\phi_{n,l=0}$ jest równa $n - l - 1 = n - 1$, co zgadza się z teorią.

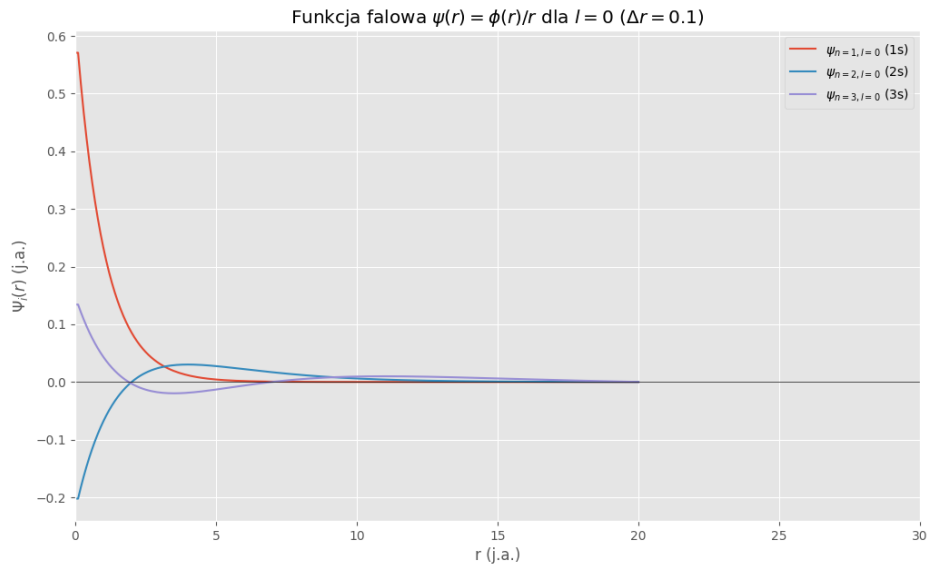


Rysunek 4: Pomocnicza funkcja falowa $\phi_{n,l=0}(r)$ dla $n = 1, 2, 3$ ($l = 0, \Delta r = 0.1$ j.a.).

3 Funkcja falowa $\psi(r) = \phi(r)/r$

Używając tych samych parametrów co w poprzednim punkcie ($\Delta r = 0.1$ j.a., $l = 0, n = 1, 2, 3$), wykreślono radialne funkcje falowe $\psi_{n,l=0}(r) = \phi_{n,l=0}(r)/r$.

Wyniki przedstawiono na Rys. 5. Ponieważ $\phi(r)$ zachowuje się jak r^{l+1} (tutaj r^1) dla $r \rightarrow 0$, funkcja $\psi(r) = \phi(r)/r$ zachowuje się jak r^l (tutaj r^0 , czyli stała). Oznacza to, że dla $l = 0$ funkcja falowa $\psi(r)$ ma niezerową wartość w $r = 0$, co jest kluczowe dla znalezienia elektronu w jądrze. Wykresy potwierdzają to zachowanie. Podobnie jak dla $\phi(r)$, liczba węzłów radialnych dla $\psi_{n,l=0}(r)$ wynosi $n - l - 1$.



Rysunek 5: Funkcja falowa $\psi_{n,l=0}(r) = \phi_{n,l=0}(r)/r$ dla $n = 1, 2, 3$ ($l = 0, \Delta r = 0.1$ j.a.).

Literatura

- [1] *Instrukcja do ćwiczenia UPEL MOFiT2, dostęp 11 listopada 2025*