

Eindimensionales H-Atom

Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi - \frac{e^2}{|x|} \psi = E \psi$$

Definieren eine Grösse α wie folgt:

$$E = \frac{-\hbar^2}{2m a_0^2 \alpha^2}$$

a_0 ist der Bohr Radius

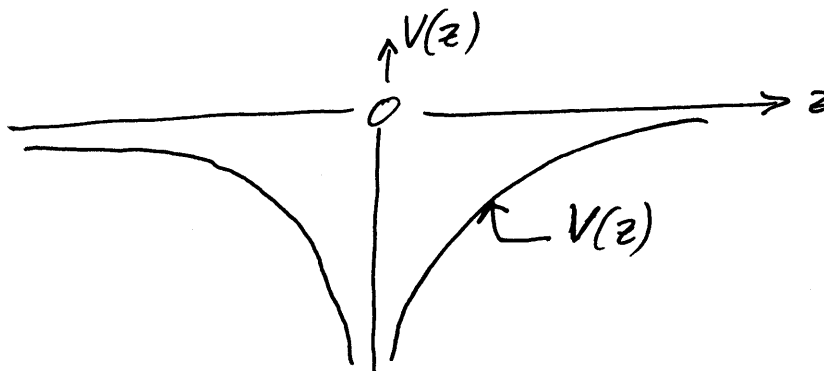
Ersetzen x durch eine Variable z wie folgt:

$$z = \frac{2x}{\alpha a_0}$$

und erhalten

$$\frac{d^2}{dz^2} \psi - \frac{1}{4} \psi + \frac{\alpha}{|z|} \psi = 0$$

Weil Potential symmetrisch



müssen Wellenfunktionen gerade oder ungerade sein, d. h.

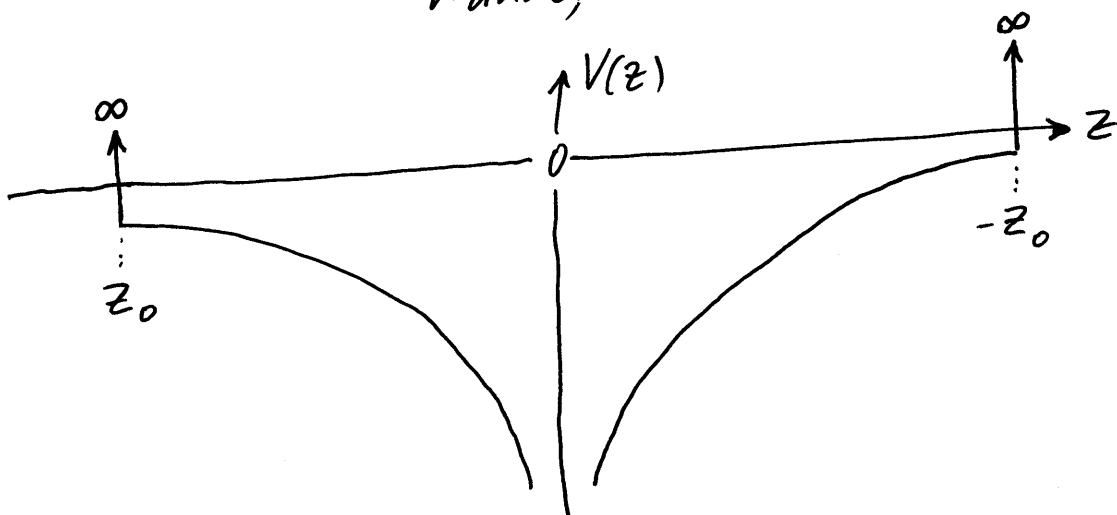
$$\psi(z) = \psi(-z) \text{ oder } \psi(z) = -\psi(-z)$$

Bei den geraden, d.h. für $\psi(-z) = -\psi(z)$, wäre $\psi(0) \neq 0$. Geht nicht¹. Für die „zulässigen“ Eigenfunktionen erhält man

$$E_n = \frac{-\hbar^2}{2ma_0^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

Dies entspricht $\alpha \in \mathbb{N}$.

Übung Numerik: Platzieren symmetrisch zwei Wände,



die für das Elektron unüberwindlich sind.
Nehmen $z_0 = -5$ und lösen Schrödingergleichung mit dem Eulerschen Polygonzugverfahren mit Startbedingung $\psi(z_0) = 0$ und

$$\left. \frac{d\psi(z)}{dz} \right|_{z=z_0} = 1.$$

¹ G. Palma and U. Raff, Can. J. Phys. 84(9), 2006

Es gilt

$$\psi'' = \left(\frac{1}{4} - \frac{\alpha}{|z|} \right) \psi$$

Definieren

$$\Phi = \psi'$$

$$\Phi' = \psi''$$

Es gilt dann

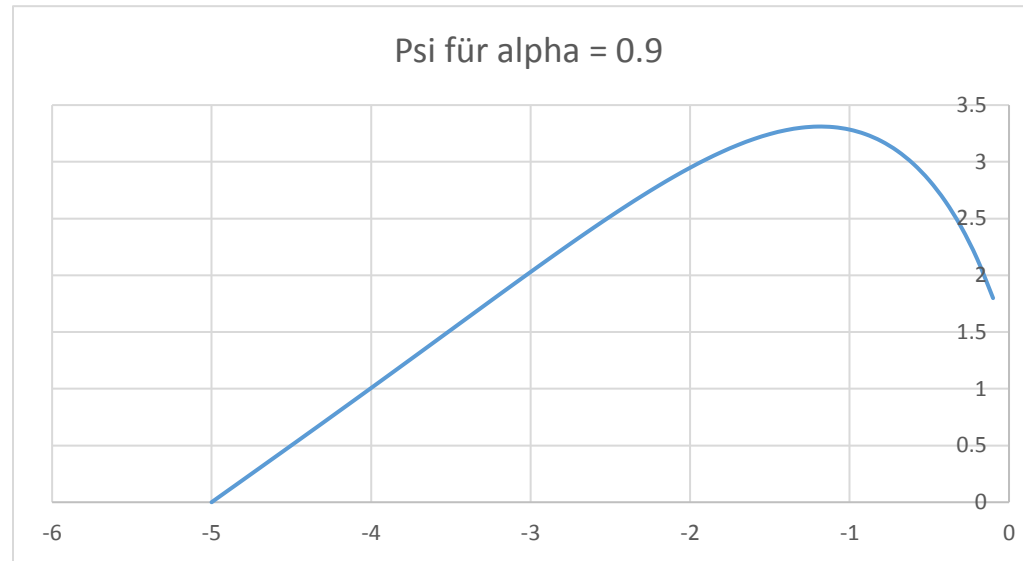
$$\Phi_{i+1} \leftarrow \Phi_i + h \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{\alpha}{|z|} \right) \psi_i$$

$$\psi_{i+1} \leftarrow \psi_i + h \cdot \Phi_i$$

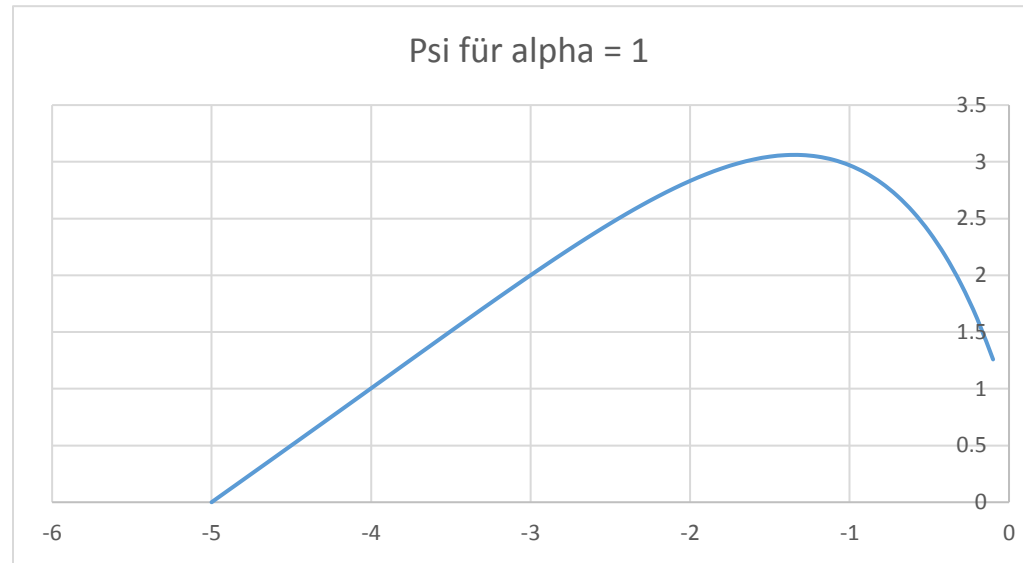
Nehmen $h=0.1$ und berechnen Lösungen für $\alpha_1=0.9$, $\alpha_2=1$ und $\alpha_3=1.5$.

Von den drei Lösungen sollte nur diejenige mit $\alpha=1$ das gewünschte Verhalten bei $z=0$ zeigen, d.h. $\psi(0)=0$. Wegen Rundungsfehlern wird dies nicht exakt der Fall sein und im Übrigen müsste dafür $z_0 \rightarrow -\infty$.

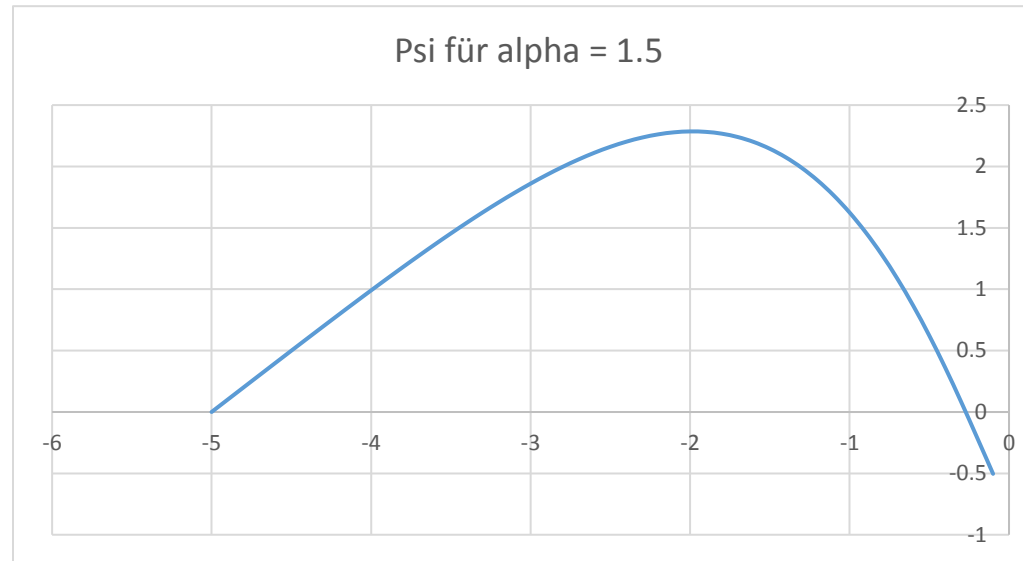
z	Psi	Phi
-5	0	1
-4.9	0.1	1
-4.8	0.2	1.00066327
-4.7	0.30006633	1.00191327
-4.6	0.40025765	1.00366897
-4.5	0.50062455	1.00584429
-4.4	0.60120898	1.00834741
-4.3	0.70204372	1.01108018
-4.2	0.80315174	1.01393733
-4.1	0.90454547	1.01680573
-4	1.00622604	1.01956349
-3.9	1.10818239	1.02207906
-3.8	1.2103903	1.02421018
-3.7	1.31281132	1.02580279
-3.6	1.4153916	1.02668983
-3.5	1.51806058	1.02668983
-3.4	1.62072956	1.0256055
-3.3	1.72329011	1.02322207
-3.2	1.82561232	1.01930551
-3.1	1.92754287	1.01360047
-3	2.02890292	1.00582812
-2.9	2.12948573	0.9956836
-2.8	2.22905409	0.98283326
-2.7	2.32733741	0.96691144
-2.6	2.42402856	0.94751696
-2.5	2.51878025	0.924209
-2.4	2.61120115	0.89650242
-2.3	2.7008514	0.8638624
-2.2	2.78723764	0.8256982
-2.1	2.86980746	0.78135578
-2	2.94794303	0.73010922
-1.9	3.02095396	0.67115036



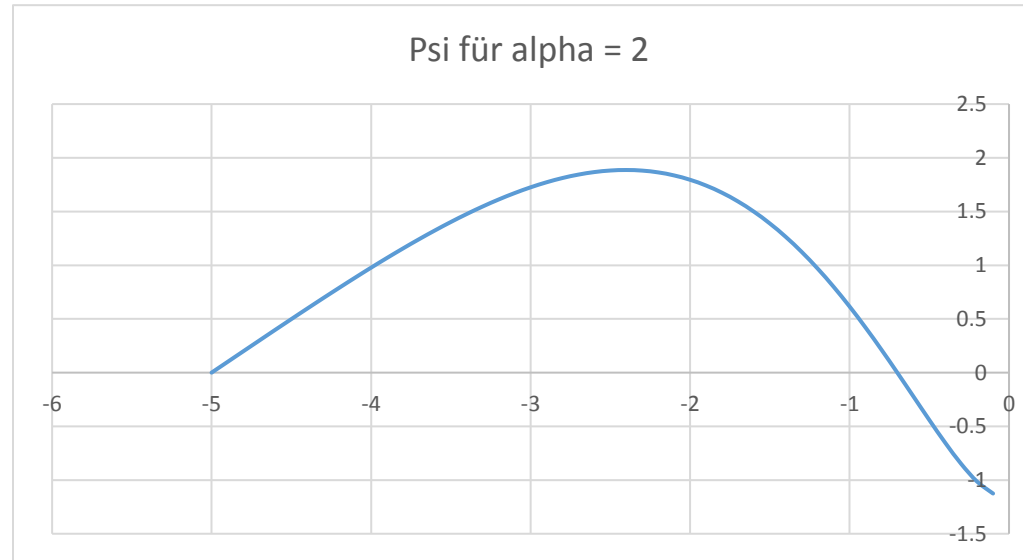
z	Psi	Phi
-5	0	1
-4.9	0.1	1
-4.8	0.2	1.00045918
-4.7	0.30004592	1.00129252
-4.6	0.40017517	1.00240971
-4.5	0.50041614	1.00371463
-4.4	0.6007876	1.00510467
-4.3	0.70129807	1.0064701
-4.2	0.80194508	1.00769329
-4.1	0.90271441	1.00864799
-4	1.00357921	1.00919843
-3.9	1.10449905	1.00919843
-3.8	1.20541889	1.00849041
-3.7	1.30626794	1.00690434
-3.6	1.40695837	1.0042565
-3.5	1.50738402	1.00034828
-3.4	1.60741885	0.99496476
-3.3	1.70691532	0.98787321
-3.2	1.80570264	0.97882139
-3.1	1.90358478	0.96753574
-3	2.00033836	0.9537194
-2.9	2.0957103	0.93704992
-2.8	2.18941529	0.9171768
-2.7	2.28113297	0.89371878
-2.6	2.37050485	0.8662607
-2.5	2.45713092	0.83435006
-2.4	2.54056592	0.79749309
-2.3	2.62031523	0.75515033
-2.2	2.69583027	0.70673146
-2.1	2.76650341	0.65158948
-2	2.83166236	0.5890138
-1.9	2.89056374	0.51822225



z	Psi	Phi
-5	0	1
-4.9	0.1	1
-4.8	0.2	0.99943878
-4.7	0.29994388	0.99818878
-4.6	0.39976276	0.9961147
-4.5	0.49937422	0.99307302
-4.4	0.59868153	0.98891157
-4.3	0.69757268	0.98346901
-4.2	0.79591959	0.9765744
-4.1	0.89357702	0.96804669
-4	0.99038169	0.95769427
-3.9	1.08615112	0.9453145
-3.8	1.18068257	0.93069323
-3.7	1.27375189	0.91360441
-3.6	1.36511233	0.89380961
-3.5	1.4544933	0.87105774
-3.4	1.54159907	0.84508465
-3.3	1.62610754	0.8156129
-3.2	1.70766883	0.78235161
-3.1	1.78590399	0.74499636
-3	1.86040362	0.70322925
-2.9	1.93072655	0.65671916
-2.8	1.99639846	0.60512215
-2.7	2.05691068	0.5480822
-2.6	2.1117189	0.48523215
-2.5	2.16024211	0.41619518
-2.4	2.20186163	0.34058671
-2.3	2.2359203	0.2580169
-2.2	2.26172199	0.16809402
-2.1	2.27853139	0.07042875
-2	2.28557427	-0.03536021
-1.9	2.28203825	-0.14963892



z	Psi	Phi
-5	0	1
-4.9	0.1	1
-4.8	0.2	0.99841837
-4.7	0.29984184	0.99508503
-4.6	0.39935034	0.98982185
-4.5	0.49833253	0.98244255
-4.4	0.59657678	0.97275275
-4.3	0.69385206	0.96055005
-4.2	0.78990706	0.94562416
-4.1	0.88446948	0.92775721
-4	0.9772452	0.9067241
-3.9	1.06791761	0.88229297
-3.8	1.15614691	0.8542259
-3.7	1.2415695	0.82227974
-3.6	1.32379747	0.78620711
-3.5	1.40241818	0.74575774
-3.4	1.47699395	0.70068002
-3.3	1.54706196	0.65072287
-3.2	1.61213424	0.59563809
-3.1	1.67169805	0.53518305
-3	1.72521636	0.46912402
-2.9	1.77212876	0.39724
-2.8	1.81185276	0.31932744
-2.7	1.8437855	0.23520571
-2.6	1.86730607	0.14472364
-2.5	1.88177844	0.04776737
-2.4	1.88655518	-0.05573045
-2.3	1.88098213	-0.1657795
-2.2	1.86440418	-0.28231861
-2.1	1.83617232	-0.40519979
-2	1.79565234	-0.53416904
-1.9	1.74223544	-0.66884297



z	Psi	Phi
-5	0	1
-4.9	0.1	1
-4.8	0.2	0.99637755
-4.7	0.29963776	0.98887755
-4.6	0.39852551	0.97724268
-4.5	0.49624978	0.96121502
-4.4	0.59237128	0.94053795
-4.3	0.68642508	0.91495828
-4.2	0.7779209	0.88422879
-4.1	0.86634378	0.84811103
-4	0.95115489	0.80637862
-3.9	1.03179275	0.75882087
-3.8	1.10767483	0.70524702
-3.7	1.17819954	0.64549088
-3.6	1.24274862	0.57941617
-3.5	1.30069024	0.5069225
-3.4	1.35138249	0.42795202
-3.3	1.39417769	0.34249695
-3.2	1.42842739	0.25060797
-3.1	1.45348819	0.15240359
-3	1.46872854	0.04808064
-2.9	1.47353661	-0.062074
-2.8	1.46732921	-0.1776704
-2.7	1.44956217	-0.29820102
-2.6	1.41974207	-0.42302443
-2.5	1.37743962	-0.55134727
-2.4	1.3223049	-0.68220403
-2.3	1.2540845	-0.81443452
-2.2	1.17264104	-0.94665865
-2.1	1.07797518	-1.07724822
-2	0.97025036	-1.20429529
-1.9	0.84982083	-1.32557659

