

Projekt nr C.7.7

Zastosowanie metody Numerova do rozwiązania równania Schrödingera dla potencjałów sferycznie symetrycznych

Wprowadzenie

Poszukiwane są skwantowane wartości energii, jakie może przyjmować cząstka poruszająca się w trójwymiarowym, sferycznie symetrycznym potencjale. Wartości te znane są analitycznie w przypadku kilku potencjałów, z których dwa najbardziej znane to potencjał kulombowski (atom wodoru) i oscylator harmoniczny. Niestety, bardzo często potencjały występujące w różnych zagadnieniach fizycznych nie należą do tej, bądź co bądź, wąskiej klasy. W takim przypadku narzucone warunki symetrii potencjału (potencjał zależny tylko od r , czyli od odległości od centrum) pozwalają nam wykonać całą separację części kątovej funkcji falowej w taki sam sposób jak dla atomu wodoru (patrz np. Schiff - Mechanika kwantowa). Na część kątową funkcji falowej dostaje się rozwiązania wyrażające się przez tzw. funkcje kuliste $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$, mające dwa indeksy: l oraz m . Jak wiadomo ze standardowego kursu mechaniki kwantowej odpowiadają one odpowiednio za całkowity moment pędu ($L^2 = l(l+1)\hbar^2$) oraz za rzut momentu pędu na dowolnie wybraną oś, np. oś z ($L_z = m\hbar$). Na część radialną funkcji falowej dostaje się następujące równania:

$$\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{dR}{dr} \right] + \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)}{2mr^2} \right] R = 0. \quad (1)$$

Jeżeli radialnej części funkcji falowej będzie się szukać w postaci:

$$R(r) = \chi(r)/r, \quad (2)$$

to równanie na funkcję $\chi(r)$ przybierze postać:

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} + \left[\frac{2m[E - V(r)]}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0. \quad (3)$$

W rozpatrywanym tutaj problemie istotne będą dwie klasy potencjałów:

1. potencjały podobne do kulombowskiego: $V(r) = -Ze^2/r^\alpha$ ($\alpha > 0$)
2. potencjały podobne do oscylatora harmonicznego: $V(r) = kr^\gamma/2$ ($\gamma > 0$)

Przyjęcie konkretnej postaci potencjału pozwala sprowadzić równanie (3) do postaci równania bezwymiarowego, co oznacza możliwość wyliczenia wartości własnych energii, wyrażających się bezpośrednio przez stałe fizyczne i pozwala uniknąć przyjmowania tych stałych np. za jednostkowe.

Jeżeli przyjmiemy w równaniu (3) potencjał postaci:

$$V(r) = Cr^\gamma, \quad (4)$$

to równanie przybierze postać:

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{2mCr^\gamma}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0. \quad (5)$$

Na równaniu (5) można wykonać transformację skalującą poprzez wybranie charakterystycznej jednostki odległości a_0 i energii E_0 . Jeżeli przyjmie się, że:

$$\frac{1}{a_0^{\gamma+2}} = \frac{2m|C|}{\hbar^2}, \quad (6)$$

to równanie (5) można przekształcić do postaci:

$$a_0^2 \frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[\frac{2mEa_0^2}{\hbar^2} - \text{sgn}(C) \frac{r^\gamma}{a_0^\gamma} - \frac{l(l+1)a_0^2}{r^2} \right] \chi = 0. \quad (7)$$

Zamiana zmiennych na $\rho = r/a_0$ i $E' = 2mEa_0^2/\hbar^2$ daje równanie postaci:

$$\frac{d^2\chi}{d\rho^2} + \left[E' - \text{sgn}(C)\rho^\gamma - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] \chi = 0. \quad (8)$$

Dla potencjału kulombowskiego mamy $C = -Ze^2$ i $\gamma = -1$, co daje:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{2Zme^2} \quad \text{oraz} \quad E' = \frac{E\hbar^2}{2mZ^2e^4} \quad (9)$$

Dla oscylatora harmonicznego otrzymuje się:

$$a_0^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \quad \text{oraz} \quad E' = \frac{2E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (10)$$

Zadania do wykonania

1. Napisać procedurę całkującą równanie (8) metodą Numerova, zaczynając od zera do danego ograniczenia górnego dla promienia. Przy starcie dla metody Numerova przyjąć wartość funkcji zero dla $\rho = 0$ oraz wartość rzędu przyjętego kroku całkowania h dla $\rho = h$, co wystarcza do rozpoczęcia całkowania. Tak długo dobierać wartość energii E' , aż całkowanie równania doprowadzi do wartości $\chi = 0$ dla górnej wartości ρ . (Por. instrukcja dla projektu nr 7.1).

2. Wyznaczyć najniższe cztery energie własne dla $l=0, 1, 2$ dla obu postaci potencjału. Porównać z odpowiednimi wartościami dokładnymi, znanymi z podręczników mechaniki kwantowej. Wrysować radialne części funkcji falowej dla tych poziomów energii.
3. Przyjąć potencjał w postaci (4) i metodą jak w punkcie 2. wyznaczyć zależność pierwszych czterech energii własnych w funkcji parametru γ w zakresie od -0.5 do -2.0 dla potencjału typu atomu wodoru oraz w zakresie od 1.5 do 2.5 dla potencjału oscylatora harmonicznego.

Literatura

1. Schiff, Mechanika kwantowa
2. Koonin, Computational Physics
3. Instrukcja do projektu nr 7.1