

Variationsverfahren numerisch

Um den Grundzustand eines quantenmechanischen Zustandes zu bestimmen, kann man folgendes Variationsverfahren anwenden:

1. Man erzeugt sich eine Wellenfunktion $\psi(\underline{r})$, welche von einem oder mehreren Parametern abhängt.
2. Man berechnet die Erwartungswerte der kinetischen und der potentiellen Energie:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \nabla^2 \quad \text{und} \quad \underline{V}(\underline{r})$$

Für sphärisch symmetrische Zustände wie z.B. die s-Grundzustände in Atomen ist das Potential nur von $r = |\underline{r}|$ abhängig, und es genügt, nur den Radialteil der Wellenfunktion zu betrachten. In Kugelkoordinaten sieht der Laplace-Operator so aus:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \quad . \text{ Für das Coulomb-Potential gilt: } V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r}$$

In atomaren Einheiten hat man:

$$\hat{T} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \quad \text{und} \quad \hat{V} = \frac{1}{r}$$

Das Volumenelement ist $dV = 4 \cdot \pi \cdot r^2 \cdot dr$.

Für eine reelle Wellenfunktion $\psi(r)$ (normiert) berechnet man die Erwartungswerte:

$$\langle \hat{T} \rangle = -\frac{4 \cdot \pi}{2} \cdot \int_0^{\infty} \psi(r) \cdot r^2 \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) dr = -2\pi \cdot \int_0^{\infty} \psi(r) \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) dr$$

$$\langle \hat{V} \rangle = 4\pi \cdot \int_0^{\infty} \psi(r) \cdot r^2 \cdot \frac{1}{r} \psi(r) dr = 4\pi \cdot \int_0^{\infty} \psi(r) \cdot r \psi(r) dr$$

Die Normierung der Wellenfunktion ist: $4\pi \cdot \int_0^{\infty} \psi(r) \cdot r^2 \psi(r) dr = 1$

```

Np=10000;
delr=20/Np;
r=[0:delr:(Np-1)*delr];

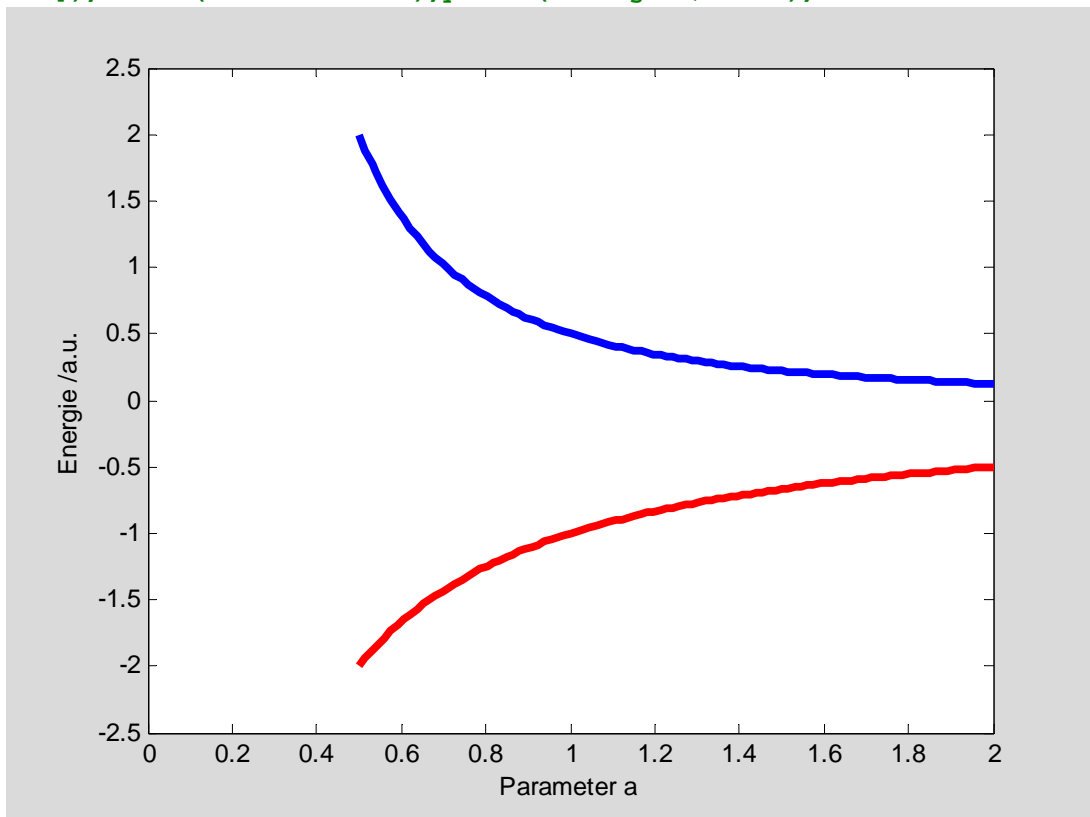
a=1.0;

```

```
psi=exp(-r/a);  
ekin(r,psi),  
ans =    0.5000  
ecoulomb(r,psi),  
ans =    1.0000
```

Jetzt berechnen wir für eine Reihe von Radien a die Energien:

```
Na=100;  
a=linspace(0.5,2.0,Na);  
Ekinetic=zeros(1,Na);  
Epot=zeros(1,Na);  
tic;  
for il=1:Na  
psi=exp(-r/a(il));  
Ekinetic(il)=ekin(r,psi);  
Epot(il)=ecoulomb(r,psi);  
end  
toc,  
Elapsed time is 0.119932 seconds.  
  
plot(a,Epot,'r',a,Ekinetic,'b','Linewidth',3);axis([0 2 -2.5  
2.5]);xlabel('Parameter a');ylabel('Energie /a.u.');
```

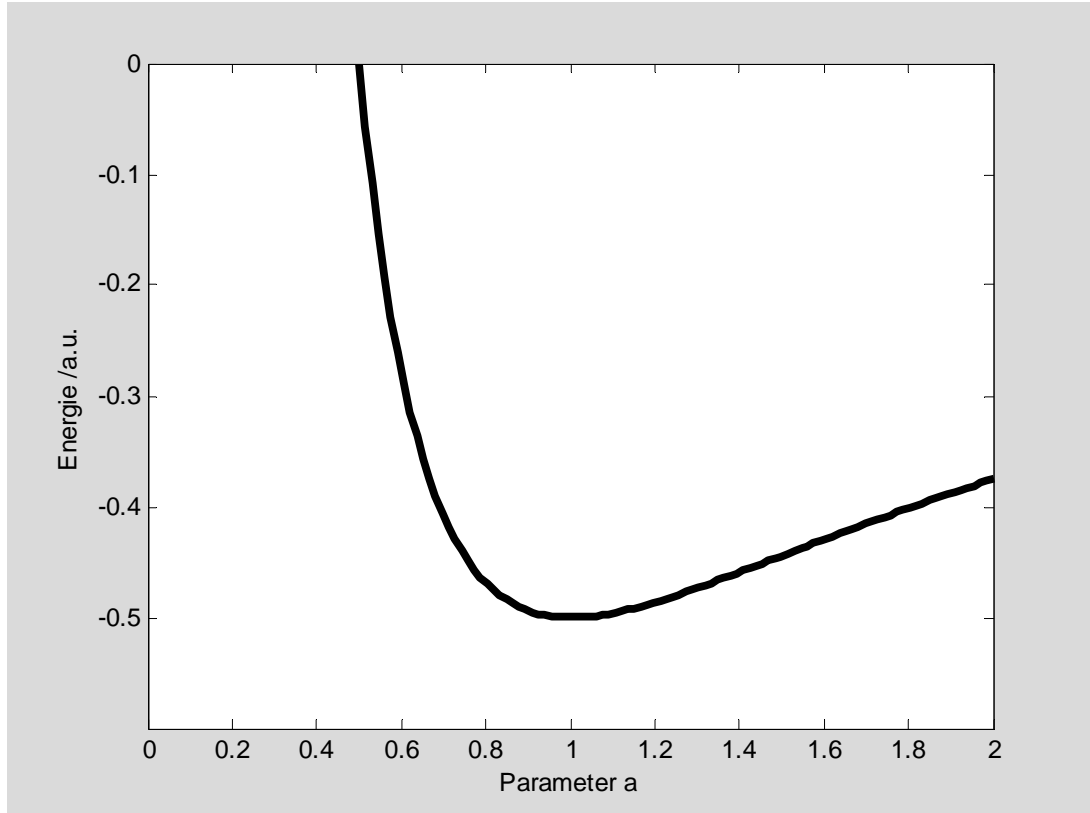


Kinetische Energie: ----blau Coulomb-Energie: ----rot

Die Gesamtenergie des Atoms ist die Summe aus kinetischer Energie und potentieller Energie.

```
Eges=Ekinetic+Epot;
```

```
plot(a,Eges,'k','Linewidth',3);axis([0 2 -0.6 0]);xlabel('Parameter a');ylabel('Energie /a.u.');
```



Das Minimum der Gesamtenergie liegt bei a=1.0 und Eges=-0.5;

Dies ist für das Wasserstoffatom auch die korrekte Lösung. Man hat also mit der Exponentialfunktion die richtige Wellenfunktion. Besser kann man nicht werden, aber leicht schlechter, indem man andere Wellenfunktionsstypen nimmt, z.B. Gauß-Funktionen.

$$\psi_{\text{gauss}} = \exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right)$$

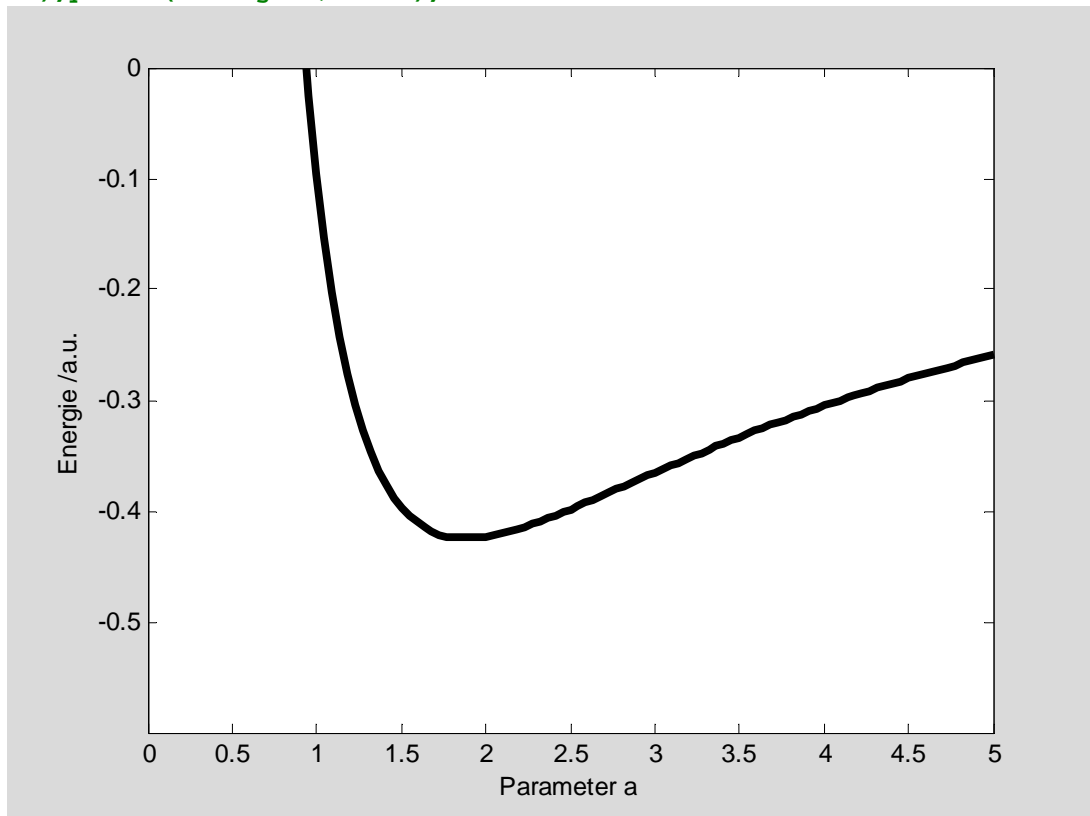
```
a=1.0;
psigauss=exp(-r.*r/(a*a));
eges=ekin(r,psigauss)+ecoulomb(r,psigauss),
eges = -0.0958
```

Man hat also zwar eine negative Gesamtenergie auch für eine Gaussfunktion, aber für $a=1$ nur eine Bindungsenergie von etwa $1/5$.

```
Na=100;
a=linspace(0.5,5.0,Na);
Ekinetic=zeros(1,Na);
Epot=zeros(1,Na);
tic;
for i1=1:Na
psi=exp(-r.*(r/(a(i1)*a(i1))));
Ekinetic(i1)=ekin(r,psi);
Epot(i1)=ecoulomb(r,psi);
end
toc,
Eges=Ekinetic+Epot;
```

Elapsed time is 0.129939 seconds.

```
plot(a,Eges,'k','Linewidth',3);axis([0 5 -0.6 0]);xlabel('Parameter a');ylabel('Energie /a.u.');
```



Es ergibt sich ein Minimum für $a=1.864$, aber die niedrigste Bindungsenergie ist jetzt nur -0.4244 .

Kann man mit Gaußfunktionen besser werden? Ja, indem man eine Linearkombination verschiedener Gaußfunktionen nimmt.

```
psi_2=0.465323*exp(-r.*r/(0.5497*0.5497))+0.44089*exp(-  
r.*r/(1.90832*1.90832));
```

```
eges=ekin(r,psi_2)+ecoulomb(r,psi_2),
```

```
eges = -0.4714
```

Das sieht schon deutlich besser aus, aber es geht noch wesentlich besser:

```
parameter=[0.0886475,3.12177;0.281562,1.73574;0.287974,0.908043;0.188688  
,0.429851;0.10033,0.172388;0.0455492,0.0477374];
```

```
gausssum=zeros(1,Np);
```

```
for il=1:6
```

```
gausssum=gausssum+parameter(il,1)*exp(-r.*r/(parameter(il,2)^2));
```

```
end
```

```
eges=ekin(r,gausssum)+ecoulomb(r,gausssum),
```

```
eges = -0.4999
```

Man erkennt, dass sich mit einer gewichteten Summe von 6 Gaußfunktionen unterschiedlicher Breiten die Bindungsenergie auf 0.0001 Differenz zum richtigen Wert von -0.5 ergibt.

Schrödinger Gleichung in atomaren Einheiten s_e_atomare_einheiten.jnt

Das Elektron im Coulomb-Potential $V_C(\underline{r}) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$ wird durch folgende Schrödinger-Gleichung beschrieben:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \nabla_{\underline{r}}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right\} \psi(\underline{r}) = E \cdot \psi(\underline{r}) \quad (1)$$

Um diese Gleichung "dimensionslos" zu machen, wählen wir folgende Schritte:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \nabla_{\underline{r}}^2 - \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot \hbar^2} \cdot \frac{1}{r} \right\} \psi(\underline{r}) = \frac{m_e}{\hbar^2} \cdot E \cdot \psi(\underline{r}) \quad (1a)$$

Die Definition einer Länge $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \cdot \hbar^2}{m_e \cdot e^2} = 5.29177208 \cdot 10^{-11} \text{ m}$

Führt zu:
$$\left\{ -\frac{1}{2} \nabla_{\underline{r}}^2 - \frac{1}{a_0} \cdot \frac{1}{r} \right\} \psi(\underline{r}) = \frac{m_e E}{\hbar^2} \cdot \psi(\underline{r})$$

Wir führen eine dimensionslose Länge \tilde{r} ein: $r = a_0 \cdot \tilde{r}$

-1-

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{a_0} \frac{\partial}{\partial \tilde{r}}, \quad \frac{\partial^2}{\partial r^2} = \frac{1}{a_0^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{r}^2}$$

$$\left\{ -\frac{1}{a_0^2} \cdot \frac{1}{2} \nabla_{\tilde{r}}^2 - \frac{1}{a_0} \cdot \frac{1}{\tilde{r}} \right\} \psi(\tilde{r}) = \frac{m_e \cdot E}{\hbar^2} \cdot \psi(\tilde{r}) \quad * a_0^2$$

$$\left\{ -\frac{1}{2} \nabla_{\tilde{r}}^2 - \frac{1}{\tilde{r}} \right\} \psi(\tilde{r}) = \frac{m_e \cdot E}{\hbar^2} \cdot a_0^2 \cdot \psi(\tilde{r}) = \tilde{E} \cdot \psi(\tilde{r})$$

$$\tilde{E} = \frac{m_e}{\hbar^2} \cdot \frac{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot \hbar^4}{m_e^2 \cdot e^4} \cdot E = \frac{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot \hbar^2}{m_e \cdot e^4} \cdot E = \frac{E}{E_0}$$

Die Energieeinheit ist: $E_0 = \frac{m_e \cdot c^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \cdot \hbar^2} = 4.35974 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 27.2114 \text{ eV}$

In atomaren Einheiten (Länge: a_0 , Energie: 27.2114 eV)

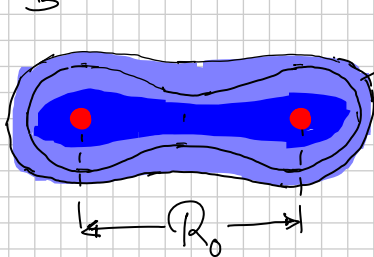
läuft die S.E.

$$\left\{ -\frac{1}{2} \nabla - \frac{1}{\tilde{r}} \right\} \psi(\tilde{r}) = \tilde{E} \cdot \psi(\tilde{r})$$

-2-

MO-Modell: H_2^+ - Molekül

Das einfachste Molekül ist das H_2^+ - Molekulation. Das Experiment zeigt, daß die Konfiguration aus zwei Protonen & einer Elektron stabil gebunden ist. Der Gleichgewichtsabstand $R_0 = 0.106 \text{ nm} = 106 \text{ pm}$ und die Bindungsenergie $E_B = -2.648 \text{ eV}$.

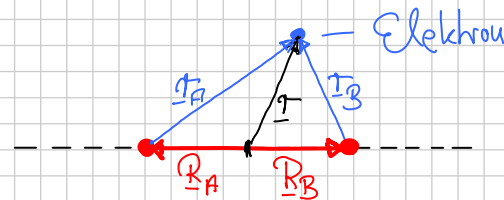
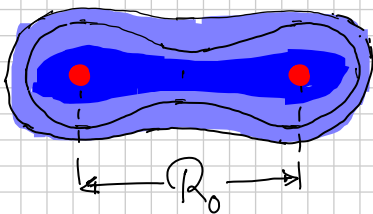


Elektronendichte

Die Elektronendichte hat Zylindersymmetrie, und ist symmetrisch bezüglich des Schwerpunktes.

Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den drei Teilchen (zwei Protonen, ein Elektron) sorgt für die Bindung.

-1-



$$\underline{R} = \underline{R}_B - \underline{R}_A$$

Den Hamilton-Operator kann man leicht angeben:

m_p : Masse des Protons, m_e : Masse des Elektrons

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \cdot \nabla_{\underline{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \cdot \nabla_{\underline{R}_A}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \cdot \nabla_{\underline{R}_B}^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{R}$$

kinetische
Energie des
Elektrons

kinetische Energie
der Kerne

Coulomb Anziehung
Elektron-Kerne

Coulomb
Abstoßung
Kerne

Sehr kleine Wechselwirkungen wie z.B. magnetische Dipol-Dipol W.W. zwischen Kernen-Elektron & zwischen den Kernen sind schon vernachlässigt.

-2-

Formal benötigt man eine Wellenfunktion $\Psi_{\text{mol}}(\underline{r}, \underline{R}_A, \underline{R}_B)$ und müsste die Schrödinger-Gleichung (SE) lösen:

$$\hat{H} \cdot \Psi_{\text{mol}}(\underline{r}, \underline{R}_A, \underline{R}_B) = E \cdot \Psi_{\text{mol}}(\underline{r}, \underline{R}_A, \underline{R}_B)$$

zeitunabhängige SE
für stationäre Zustände

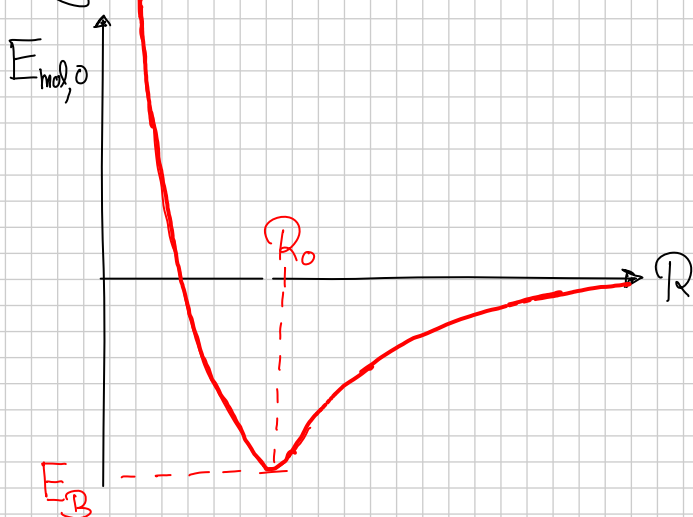
Selbst für dieses einfachste Dreikörper-Problem kann man die SE nicht lösen! Für alle anderen Moleküle kann man die SE erst recht nicht lösen!

Born-Oppenheimer Näherung: Die Kerne in Molekülen sind so schwer gegenüber den Elektronen (1836-mal schwerer für Protonen; noch schwerer für alle anderen Kerne), daß man die kinetische Energie der Kerne erst einmal vernachlässigt.

Man "hält die Kerne fest" und löst zuerst die elektronische SE. Die Kernbewegungen (Rotation, Schwingungen) werden danach gelöst. -3-

Bei einem zweiatomigen Molekül wie H_2^+ (H_2 , N_2 , O_2 , CO , NO etc.) ist die Born-Oppenheimer Näherung besonders anschaulich:

Man löst die SE für alle relevanten Kernabstände R und gewinnt damit Molekulare Potentialkurven $E_{\text{mol}}(R)$. Für den elektronischen Grundzustand sieht $E_{\text{mol},0}(R)$ immer ähnlich aus:



Beim H_2^+ -Molekül lassen sich diese Molekulare Potentialkurven analytisch durch Lösen der Schrödinger-Gleichung bestimmen, da man nur ein Elektron hat.

Für alle anderen Moleküle muß man zu anderen Lösungsverfahren greifen! -4-

Molekül-Orbital-Theorie (Molecular orbital theory)

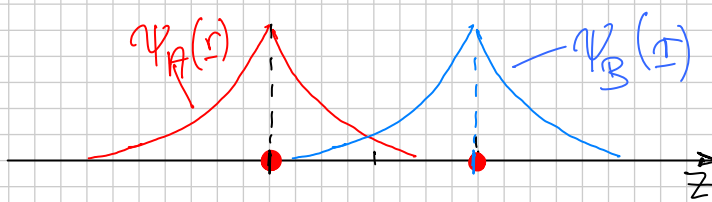
1. Man startet mit der Born-Oppenheimer Näherung.
2. Für ein N -Elektronen Molekül betrachtet man die Elektronen zuerst als unabhängig & vernachlässigt ihre gegenseitigen Wechselwirkungen.
3. Man konstruiert sich geeignete Molekülorbitale $\Psi(\underline{r})$ z.B. als Kombination von Atomorbitalen:
LCAO: Linear Combination of Atomical Orbitals
- 4) Man sucht mit dem Variationsverfahren durch Änderung geeigneter Parameter (z.B. Radien der atomaren Orbitale) die niedrigste Energie des Molekülorbitals (MO)
- 5) Man besetzt jedes MO mit maximal 2 Elektronen mit entgegengesetzten Spin.

-5-

Dieses Verfahren führen wir explizit an den Beispielen H_2^+ und H_2 durch. Für den Grundzustand gewinnen wir dadurch die Potentialkurve $E_{\text{mol},0}(R)$

Sowohl beim H_2^+ als auch später beim H_2 hat man bei der Konstruktion des niedrigsten Molekülorbitals eine sehr gute Ausgangsposition: Man hat die exakten Lösungen für die Atomorbitale des H-Atoms.

Aus Symmetriegründen kommen für die Konstruktion des MO-Orbitals nur in Frage:



$$\Psi_+(\underline{r}) = \Psi_A(\underline{r}) + \Psi_B(\underline{r}) \quad \text{und} \quad \Psi_-(\underline{r}) = \Psi_A(\underline{r}) - \Psi_B(\underline{r})$$

-6-

In der Born-Oppenheimer Näherung lautet der \hat{H} -Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_A} + \frac{1}{r_B} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R}$$

In atomaren Einheiten:
$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla_r^2 - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} + \frac{1}{R}$$

Jetzt berechnet man die Erwartungswerte dieses Hamilton-Operators mit der MO-Wellenfunktion. Alle Wellenfunktion hier sind reell.

$$E_+ = \int (\psi_A(r) + \psi_B(r)) \hat{H} (\psi_A(r) + \psi_B(r)) d\tau$$

Sicht: Volumenintegration.

$$E_- = \int (\psi_A(r) - \psi_B(r)) \hat{H} (\psi_A(r) - \psi_B(r)) d\tau$$

Man definiert folgende Integrale

$$\langle \hat{H}_{AA} \rangle = \int \psi_A(r) \hat{H} \psi_A(r) d\tau$$

$$\langle \hat{H}_{BB} \rangle = \int \psi_B(r) \hat{H} \psi_B(r) d\tau = \alpha \quad \text{Coulomb Integral}$$

-7-

$$\left. \begin{aligned} \langle \hat{H}_{AB} \rangle &= \int \psi_A(r) \hat{H} \psi_B(r) d\tau = \beta \\ \langle \hat{H}_{BA} \rangle &= \int \psi_B(r) \hat{H} \psi_A(r) d\tau = \beta \end{aligned} \right\} \text{Resonanz-Integral}$$

$$S_{AB} = \int \psi_A(r) \psi_B(r) d\tau = \int \psi_B(r) \psi_A(r) d\tau = S_{BA} \quad \text{Überlapp-Integral}$$

Die Schrödingergleichung:
$$\hat{H} \cdot (\psi_A(r) + \psi_B(r)) = E_+ \cdot (\psi_A(r) + \psi_B(r))$$

$$\int (\psi_A(r) + \psi_B(r)) \hat{H} (\psi_A(r) + \psi_B(r)) d\tau = E_+ \iiint (\psi_A(r) + \psi_B(r)) \cdot (\psi_A(r) + \psi_B(r)) d\tau$$

$$\langle \hat{H}_{AA} \rangle + \langle \hat{H}_{BB} \rangle + \langle \hat{H}_{AB} \rangle + \langle \hat{H}_{BA} \rangle = E_+ \cdot (1 + 1 + S_{AB} + S_{BA})$$

$$2 \cdot \alpha + 2 \cdot \beta = E_+ \cdot (2 + 2 \cdot S) \Rightarrow E_+ = \frac{\alpha + \beta}{1 + S}$$

α und β sind Energien, S ist einfach eine Zahl $0 \leq S \leq 1$

-8-

Für die Wellenfunktion $\Psi_- = \Psi_A - \Psi_B$ erhält man:

$$\int (\Psi_A - \Psi_B) \hat{H} (\Psi_A - \Psi_B) d\tau = E_- \int (\Psi_A - \Psi_B) (\Psi_A - \Psi_B) d\tau$$

$$2 \cdot \langle \hat{H}_{AA} \rangle - 2 \cdot \langle \hat{H}_{AB} \rangle = E_- \cdot (2 - 2 \cdot S)$$

$$2 \cdot \alpha - 2 \cdot \beta = 2 \cdot E_- \cdot (1 - S)$$

$$E_- = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}$$

Wie berechnet man nun diese Integrale? Beim H_2^+ und H_2 sind die atomaren Wellenfunktionen einfach & bekannt, und man kann analytische Ausdrücke angeben. In allen anderen Fällen wertet man diese Integrale numerisch aus. Wir berechnen diese Integrale hier numerisch und vergleichen mit den analytischen Ausdrücken. Diese Berechnungen finden sich z.B. in Atkins, Friedman, "Molecular Quantum Mechanics", chapt. 8.2, p. 264 ff. Die numerische Rechnung mit MATLAB findet sich in 'ueberlapp.docx' ausdiesseend. -9-

Dort berechnet man ein $R_0 = 2.5 \cdot a_0 = 132 \text{ pm}$ und $E_B = -1.714 \text{ eV}$.

Die experimentellen Werte sind: $R_{\text{exp}} = 106 \text{ pm}$ & $E_{B,\text{exp}} = -2.648 \text{ eV}$.

Man erkennt: Diese einfache LCAO-Rechnung liefert einen um ca. 24% zu großen Gleichgewichtsabstand & eine um ca. 35% zu kleine Bindungsenergie. Kann man mit MO besser werden?

Ja, man nimmt z.B. modifizierte Atomorbitale, welche im Wesentlichen etwas kleiner sind. Dies wird separat behandelt.

Überlappintegral numerisch

Bei der Behandlung des H_2^+ Moleküls baut man das MO aus zwei H 1s Funktionen auf. Dann benötigt man das Überlappintegral der beiden Wellenfunktionen.

In Zylinderkoordinaten ρ und z führt dies auf eine 2D-Integration bezüglich $d\rho$ und dz . Das Volumenelement in Zylinderkoordinaten ist:

$$dV = 2\pi \cdot \rho \cdot d\rho \cdot dz$$

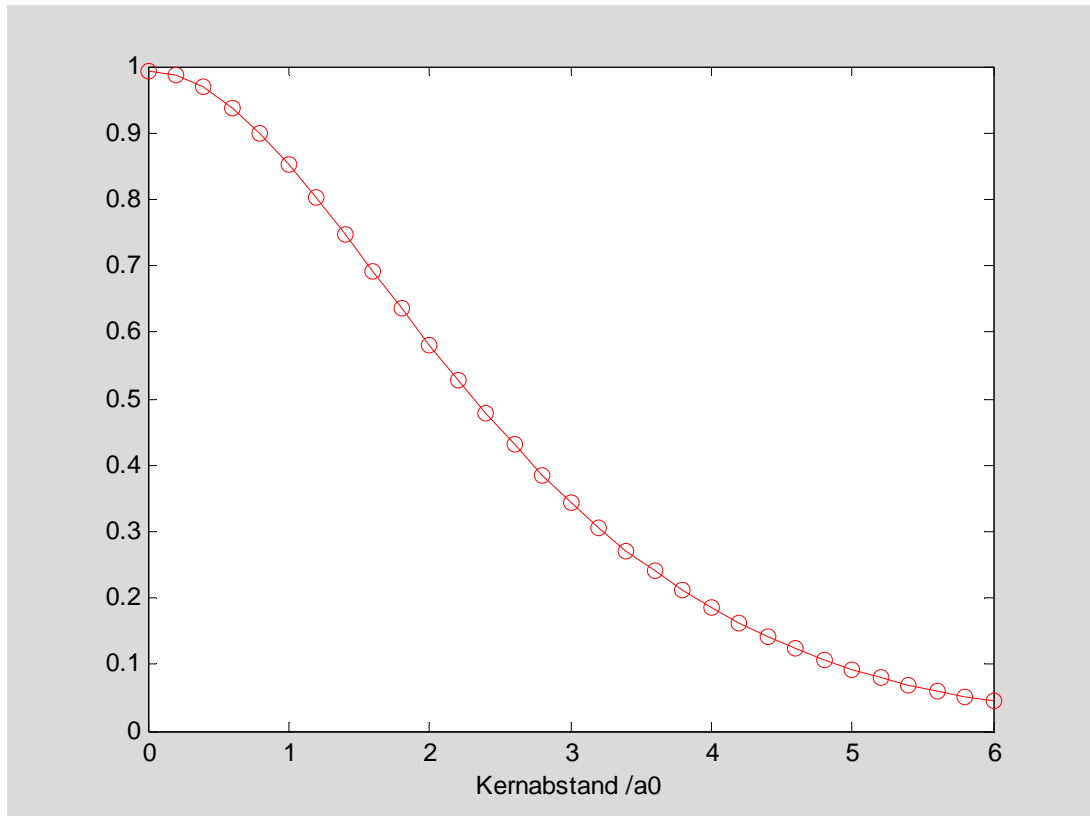
Wir führen die Integration über N_z und N_{ρ} Punkte "zu Fuss" durch.

```
Nz=1000;
Nrho=500;
z=linspace(-10,10,Nz);
rho=linspace(0,10,Nrho);
delz=20/Nz;
delrho=10/Nrho;

NR=31;
ueberlapp=zeros(1,NR);
R=linspace(0,6.0,NR);
for i3=1:NR
wert=0.0;
tic;
for i1=1:Nz
for i2=1:Nrho;
rA=sqrt((z(i1)+0.5*R(i3))^2+rho(i2)*rho(i2));
rB=sqrt((z(i1)-0.5*R(i3))^2+rho(i2)*rho(i2));
psi=exp(-rA)+exp(-rB);
wert=wert+psi*psi*2*pi*rho(i2)*delrho*delz;
end
end
wert=wert/(2*pi);
ueberlapp(i3)=wert-1;
end
toc,
```

Elapsed time is 2.954421 seconds.

```
plot(R,ueberlapp,'ro-');axis([0 6 0 1]);xlabel('Kernabstand /a0');
```

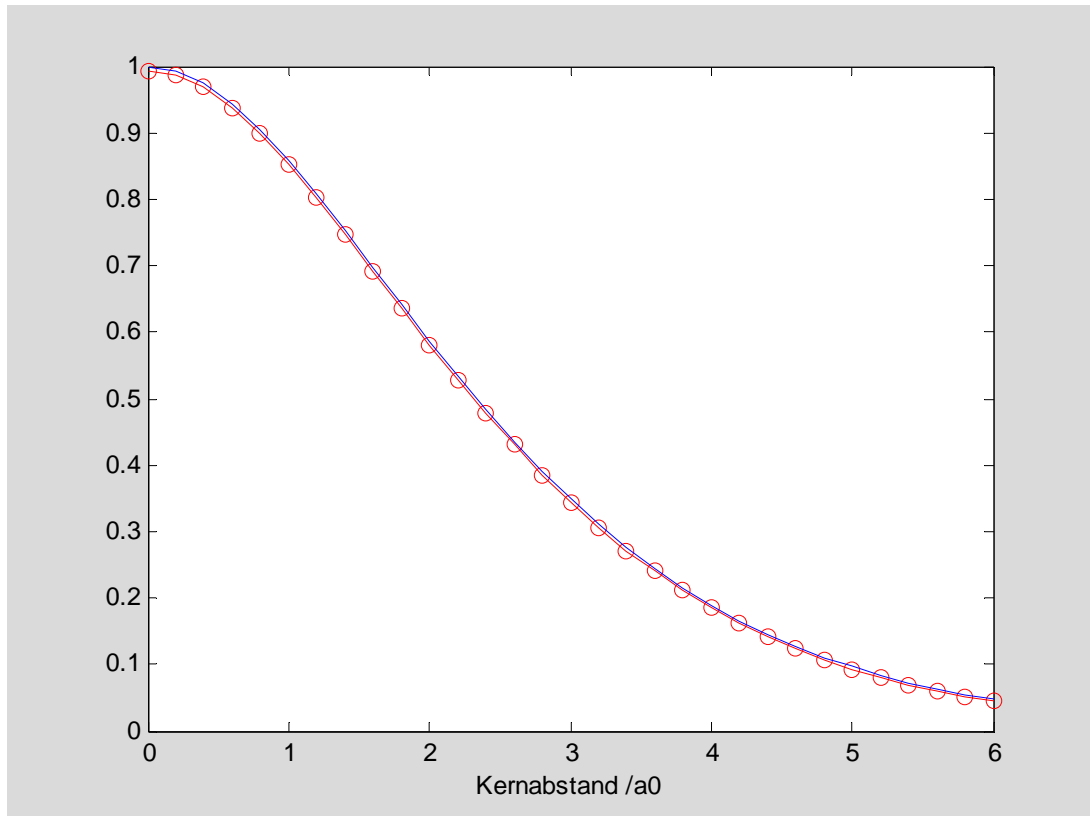


Der analytische Ausdruck für das Überlappintegral ist:

$$S = \left(1 + R + \frac{1}{3}R^2\right) \cdot \exp(-R)$$

```
S=(1+R+R.*R/3).*exp(-R);
```

```
plot(R,ueberlapp,'ro-',R,S,'b-');axis([0 6 0 1]);xlabel('Kernabstand /a0');
```



Die numerische Berechnung und der analytische Ausdruck stimmen überein.

Beim Coulomb Integral lautet ein Term:

$$j' = \iint \frac{|\psi_A(\rho, z)|^2}{r_B} 2 \cdot \pi \cdot d\rho \cdot dz$$

```

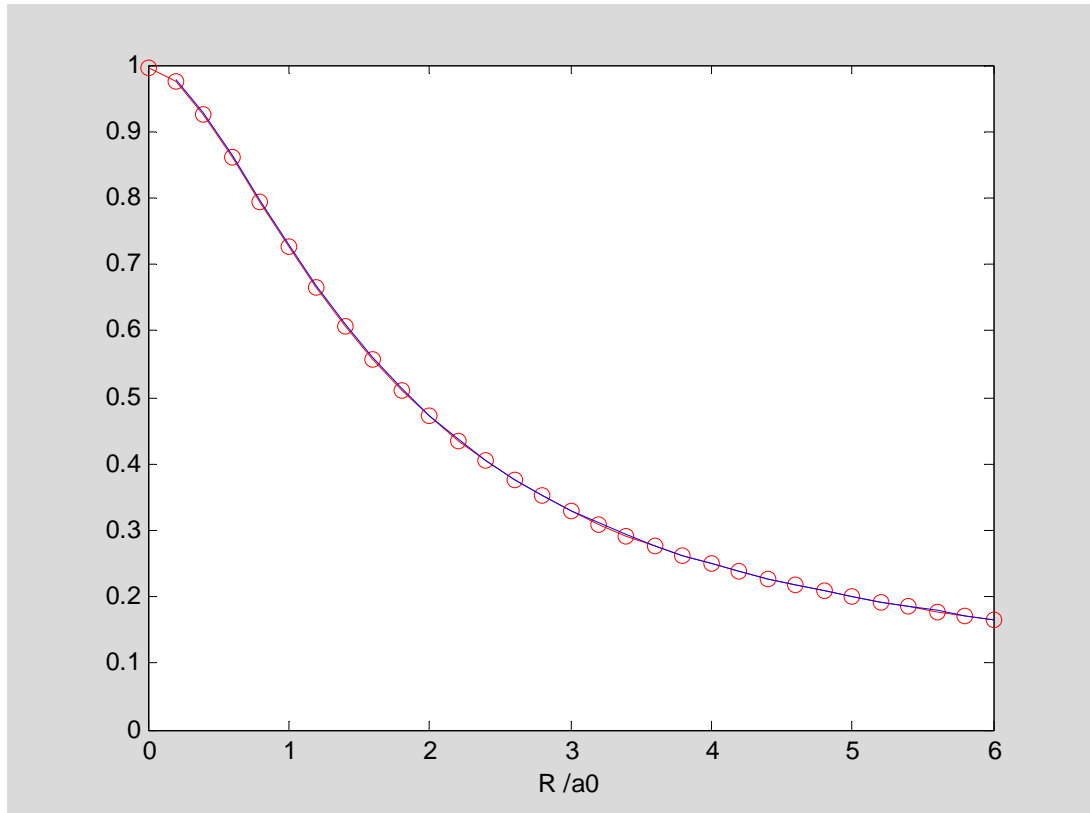
NR=31;
jstrich=zeros(1,NR);
R=linspace(0,6.0,NR);
for i3=1:NR
wert=0.0;
tic;
for i1=1:Nz
for i2=1:Nrho;
rA=sqrt((z(i1)+0.5*R(i3))^2+rho(i2)*rho(i2));
rB=sqrt((z(i1)-0.5*R(i3))^2+rho(i2)*rho(i2));
psi=exp(-rA);
wert=wert+psi*psi/rB*2*pi*rho(i2)*delrho*delz;
end
end
wert=wert/(pi);
jstrich(i3)=wert;
end
toc,
    
```

Elapsed time is 2.924965 seconds.

Der analytische Ausdruck ist:

```
jstrichana=1./R.*(1-(1+R).*exp(-2*R));
```

```
plot(R,jstrich,'ro-',R,jstrichana,'b-');axis([0 6 0 1]);xlabel('R /a0');
```



Als letztes benötigen wir noch einen Beitrag zum Resonanzintegral:

$$k' = \iint \frac{\psi_A \cdot \psi_B}{r_A} \cdot 2\pi \cdot \rho \cdot d\rho \cdot dz$$

```
NR=31;
kstrich=zeros(1,NR);
tic;
for i3=1:NR
wert=0.0;
for i1=1:Nz
for i2=1:Nrho;
rA=sqrt((z(i1)+0.5*R(i3))^2+rho(i2)*rho(i2));
```

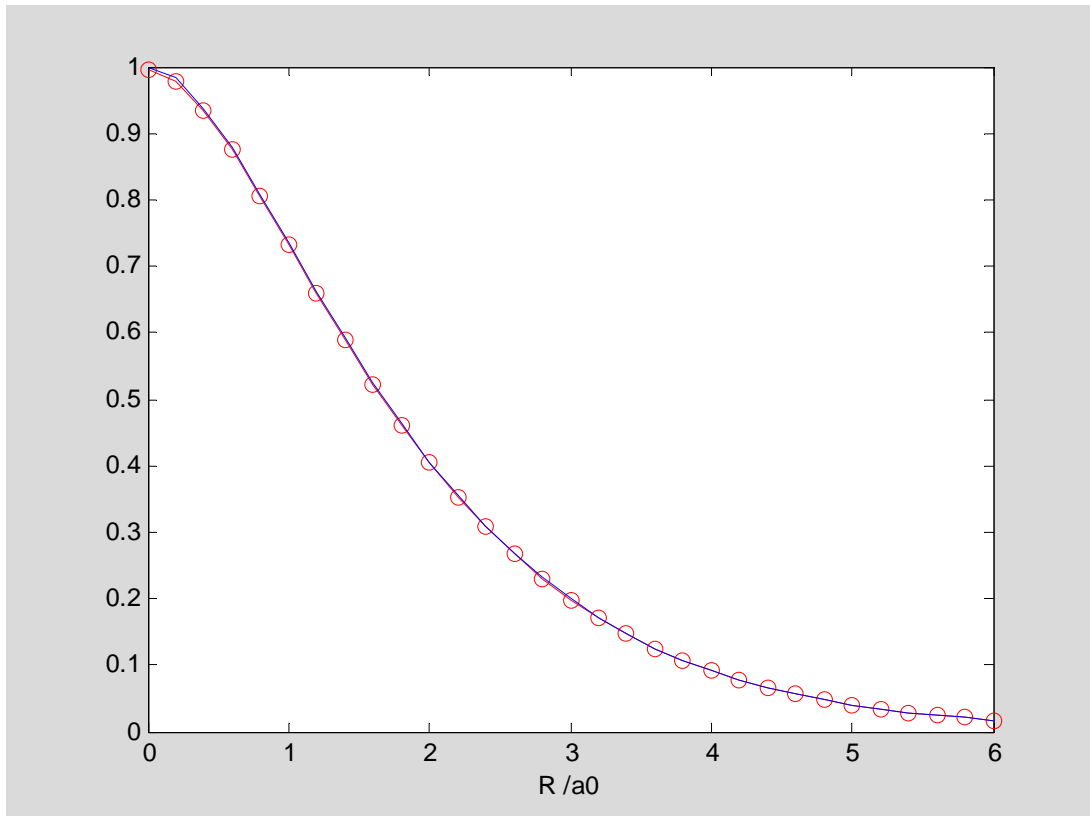


```
rB=sqrt((z(i1)-0.5*R(i3))^2+rho(i2)*rho(i2));
psiA=exp(-rA);
psiB=exp(-rB);
wert=wert+psiA*psiB/rA*2*pi*rho(i2)*delrho*delz;
end
end
wert=wert/(pi);
kstrich(i3)=wert;
end
toc,
```

Elapsed time is 95.923729 seconds.

```
kstrichana=(1+R).*exp(-R);
```

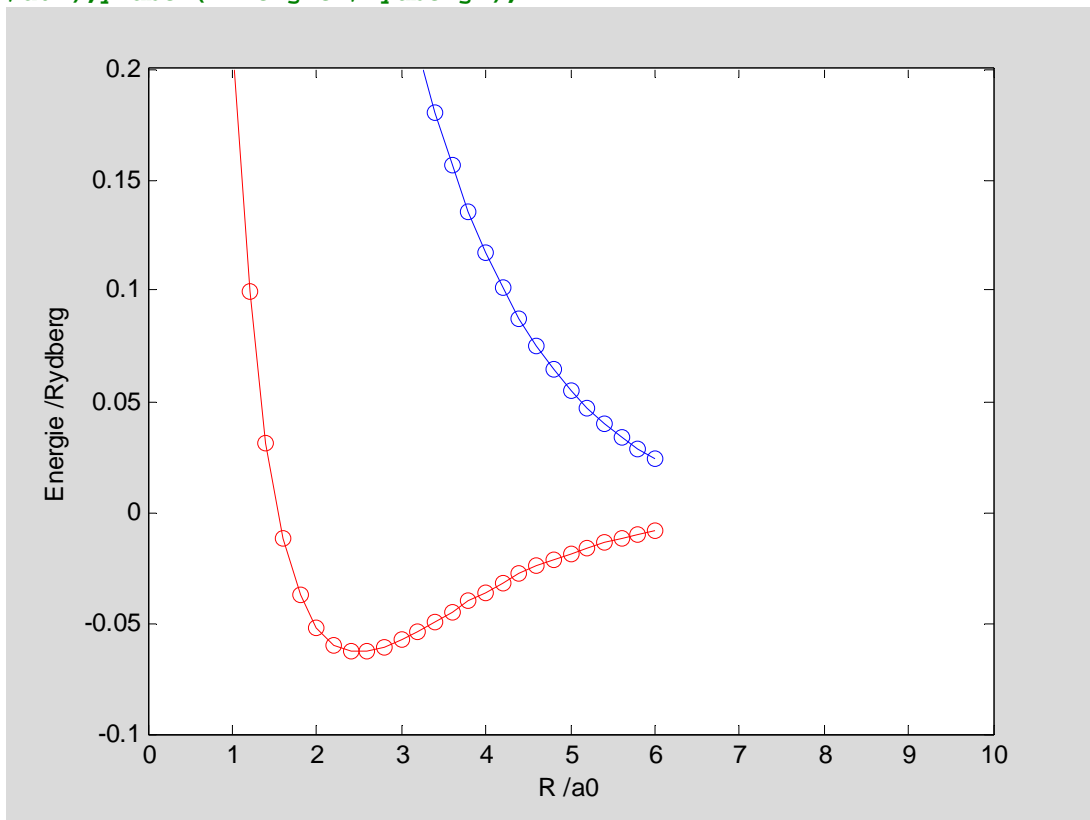
```
plot(R,kstrich,'ro-',R,kstrichana,'b-');axis([0 6 0 1]);xlabel('R /a0');
```



Jetzt haben wir alles zusammen, um die Energie des + und - Zustandes des H_2^+ zu berechnen:

```
Eplus=1./R-(jstrich+kstrich)./(1+S);
Eminus=1./R-(jstrich-kstrich)./(1+S);
```

```
plot(R,Eplus,'ro-',R,Eminus,'bo-');axis([0 10 -0.1 0.2]);xlabel('R /a0');ylabel('Energie /Rydberg');
```



Der Kernabstand für die minimale Energie ist ca. $2.5 \cdot a_0$. Die Bindungsenergie ist -0.06302 Rydberg = -1.714 eV.