Projekt nr C.2.1

Zastosowanie metody Numerova do całkowania radialnego równania Poissona

Wprowadzenie

Potencjał skalarny pola elektrostatycznego wytworzonego przez sferycznie symetryczny rozkład ładunku obliczamy z równania Poissona, które można zredukować do postaci:

$$\frac{d^2\varphi}{dr^2} = -\frac{r\rho}{\varepsilon_0} \tag{1}$$

Rozwiązując to równanie otrzymujemy funkcję pomocniczą $\varphi(r)$, a stąd potencjał elektrostatyczny według wzoru:

$$\Phi(r) = \frac{\varphi(r)}{r}. \tag{2}$$

Jeżeli zatem zadana jest gęstość ładunku $\rho(r)$, to rozwiązanie równania (1) pozwala nam na wyznaczenie potencjału zgodnie ze wzorem (2).

Rozważmy gęstość ładunku odpowiadającą elektronowi w stanie podstawowym atomu wodoru, czyli:

$$\rho(r) = -\frac{e}{\pi a^3} e^{-2r/a} \tag{3}$$

gdzie $e > 0$ jest ładunkiem elementarnym, natomiast a jest promieniem Bohra. Dla tego rozkładu ładunku potencjał da się obliczyć analitycznie; odpowiedni wzór ma postać:

$$\Phi(r) = -\frac{e}{4\pi\varepsilon_0 r}\left[1 - (r/a + 1)e^{-2r/a}\right] \tag{4}$$

Celem projektu jest wyznaczenie tego potencjału metodą numeryczną. Zakładamy następujące warunki brzegowe:

$$\varphi_0 = \varphi(0) = 0 \tag{5}$$

$$\varphi_1 = h\varphi'_0 \tag{6}$$

gdzie $$\varphi'_0 = \left.\frac{d\varphi}{dr}\right|_{r=0} \tag{7}$$

Zadania do wykonania

1. Za pomocą metody Numerova wykonać całkowanie równania (1) w kierunku rosnących wartości r w przedziale $[0,R]$. Przyjąć odpowiednio dużą wartość R.
2. Wyznaczyć potencjał elektrostatyczny Φ w funkcji promienia r. Wyniki przedstawić w postaci tabelarycznej i graficznej. W jednej z kolumn tabeli umieścić również wartości otrzymane analitycznie (wzór (4)).
3. Sprawdzić, czy dla dużych r pojawia się rozwiązanie niefizyczne, tzn. $\Phi = const.$ Jeżeli rozwiązanie takie występuje, to zmodyfikować wyniki odejmując niefizyczne rozwiązanie od rozwiązania numerycznego.
4. Wykonać całkowanie równania (1) metodą Numerova, całkując do wnętrza obszaru (w kierunku malejących r). jako warunki brzegowe przyjąć:

   $$\varphi(R) = \varphi(R+h) = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0} \tag{8}$$

   gdzie

   $$Q = \int \rho(r)\, d^3 r \tag{9}$$

   Porównać wyniki uzyskane przy całkowaniu na zewnątrz i do wnętrza.

Uwagi

- Wyrazić wielkości fizyczne w atomowych jednostkach długości i energii.
- Wartość φ'_0 powinna być dobrana w rozsądny sposób.

Literatura

Wykład