

## Projekt nr C.7.4

# Rozwiązywanie metodą różnicową równania Schrödingera z potencjałem Yukawy

## Wprowadzenie

Radialne równanie Schrödingera dla atomu wodoropodobnego ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R(r) + V(r)R(r) = ER(r) \quad , \quad (1)$$

gdzie  $V(r)$  przyjmujemy w formie potencjału Yukawy:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-r/D} \quad , \quad (2)$$

w którym  $D$  jest tzw. długością ekranowania. Jeżeli  $D \rightarrow \infty$ , to potencjał Yukawy przechodzi w potencjał Coulomba, dla którego istnieją rozwiązania analityczne problemu własnego (1). Jeżeli  $D \neq 0$ , to równanie (1) może być rozwiązane numeryczną metodą różnicową.

Rozwiązując numerycznie równanie (1) w przestrzeni  $r$  należy uwzględnić fakt, że dla stanu o danych liczbach kwantowych  $n, l$  nie istnieją stany związane dla  $D < D_0(n, l)$ , gdzie  $D_0(n, l)$  jest pewną krytyczną wartością długości ekranowania. Tę wartość  $D_0$  należy wyznaczyć numerycznie.

W celu sformułowania problemu w sposób dogodny do obliczeń numerycznych dokonujemy zamiany zmiennych:

$$\rho = \frac{2Zr}{a_0 \lambda_{n,l}} \quad (3)$$

$$\epsilon_{n,l} = -\frac{Z^2 \hbar^2 a_0^2 \mu \lambda_{n,l}^2}{2} \quad (4)$$

$$d = \frac{2ZD}{a_0 \lambda_{n,l}} \quad (5)$$

gdzie  $\lambda_{n,l}$  jest wartością własną radialnego równania Schrödingera w przestrzeni  $\rho$ , a  $d$  jest przetransformowaną długością ekranowania. Po dokonaniu tej transformacji równanie (1) przechodzi w:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left( \frac{\lambda_{n,l} e^{-\rho/d}}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) R = 0. \quad (6)$$

Transformacja (5) zmienia przedział długości ekranowania z  $D_0 \leq D \leq \infty$  na  $0 \leq d \leq \infty$  dla zmodyfikowanej długości ekranowania. Teraz stany związane istnieją dla całego zakresu zmienności  $d$ .

### Metoda numeryczna

W celu rozwiązania równania (6) stosujemy metodę różnicową, zgodnie z którą pochodne przybliżamy za pomocą wyrażeń różnicowych.:

$$\frac{dR_i}{d\rho} = \frac{R_{i+1} - R_{i-1}}{2\Delta\rho}, \quad (7)$$

$$\frac{d^2 R_i}{d\rho^2} = \frac{R_{i+1} + R_{i-1} - 2R_i}{(\Delta\rho)^2}, \quad (8)$$

gdzie  $i$  jest indeksem numerującym krok.

Po przejściu do równania różnicowego otrzymujemy przepis na iteracyjne rozwiązanie równania (6):

$$R_{i+1} = \frac{1}{i+1} \left\{ -(i-1)R_{i-1} + \left[ i \left( 2 + \frac{1}{4}(\Delta\rho)^2 \right) + \frac{l(l+1)}{i} - \lambda_{n,l} \Delta\rho e^{-\rho/d} \right] R_i \right\}. \quad (9)$$

Warunki początkowe dla stanów  $s$  uzyskujemy z asymptotycznego rozwiązania równania (6):  $R = 1 - \lambda\rho/2$ , gdzie  $R(0)$  przyjęto równe 1. Natomiast dla  $l > 0$ ,  $R(0) = 0$  przy czym  $R(\Delta\rho) = R_1$  jest dowolne. Można przyjąć  $R_1 = (\Delta\rho)^2$ . Warunek graniczny znikania funkcji  $R(\rho) = 0$  dla  $\rho \rightarrow \infty$  z konieczności musimy zastąpić warunkiem  $R(\rho) = 0$  dla  $\rho = \rho_0$ .

Rozwiązanie równania polega na znalezieniu wartości własnych oraz wyliczeniu funkcji własnych. Wartości własne znajdziemy wykorzystując fakt, że wartość funkcji  $R(\rho_0)$  zmienia znak na przeciwny, gdy raz liczymy ją dla wartości  $\lambda_{n,l}$  nieco mniejszej niż rzeczywista wartość własna równania (6) a drugi raz dla tej wartości nieco większej niż rzeczywista wartość własna. Procedura szukająca wartości własnych dla danych  $l$  i  $d$  będzie sprawdzała, czy  $R(\rho_0)$  zmienia znak dla kolejnych wartości  $\lambda_{n,l} = \lambda_0, \lambda_0 + \Delta\lambda, \lambda_0 + 2\Delta\lambda, \dots$ , gdzie za  $\lambda_0$  przyjmujemy  $\lambda_0 \approx l+1$ . Gdy nastąpi zmiana znaku  $R(\rho_0)$  oznacza to, że wartość własną mamy osaczoną między  $\lambda_n$  a  $\lambda_{n+1}$ . Wtedy możemy wyznaczyć wartość własną korzystając z dowolnej procedury szukającej zera funkcji. (Najlepiej użyć metody szybciej zbieżnej niż bisekcja, np. dostępnej w bibliotece Numerical Recipes funkcji ZBRENT).

Dalekozasięgowy „ogon” potencjału kulombowskiego jest tłumiony eksponencjalnie dla dużych  $\rho$ , gdy zmodyfikowana długość ekranowania jest mała. Z tego powodu przy rozwiązaniu numerycznym warto zastosować zmienny krok: dla małych  $\rho$  krok powinien być mniejszy niż dla dużych wartości tej zmiennej.

## Zadania do wykonania

1. Napisać program liczący wartości własne dla danych: orbitalnej liczby kwantowej oraz danej długości ekranowania.
2. Napisać program, który dla podanej orbitalnej liczby kwantowej oraz danej długości ekranowania i obliczonej dla tych parametrów wartości własnej wylicza funkcję własną. Obliczoną funkcję umieścić w pliku w formacie czytany przez GRAPHERa.
3. Wykonać wykresy otrzymanych funkcji falowych i gęstości prawdopodobieństwa.
4. W celu przetestowania poprawności działania programu należy odtworzyć jak najwięcej stanów  $s$  dla znanego przypadku potencjału kulombowskiego.

## Wskazówki

Dla obliczeń prowadzonych w podwójnej precyzji można przyjąć pierwszy krok równy ok.  $\Delta_1\rho = 0.008$  dla  $d > 1$  lub  $\Delta_1\rho = 0.008d$  dla  $d < 1$  oraz drugi krok przyjąć jako wielokrotność kroku pierwszego, np.  $\Delta_2\rho = 0.024$  dla  $d > 1$  lub  $\Delta_2\rho = 0.024d$  dla  $d < 1$ . Liczba kroków powinna być przyjęta ok. 5000, za wyjątkiem przypadku energii zbliżającej się do 0. Wtedy należy obliczać funkcje falowe w ok. 20000 krokach. Odpowiedzi na pytania: jak długo liczyć z krokiem pierwszym?, kiedy przejść na drugi?, czy wybrany krok jest wystarczająco mały?, czy dobrze wybrano wartość  $\rho_0$ ?, trzeba znaleźć eksperymentalnie, korzystając z następującego testu:

1. najpierw liczymy wartość własną z pewnymi obranymi danymi,
2. aby się upewnić, czy wybraliśmy wystarczająco duże  $\rho_0$  powtarzamy obliczenia dla  $\rho_0$  zwiększonego o 10%,
3. aby sprawdzić, czy wybrany krok jest wystarczająco mały (czyli produkuje zanedbywalnie małe błędy) zmniejszamy krok o 10% wykonując obliczenia z wartością  $\rho_0$  zwiększoną jak w poprzednim punkcie.

Jeżeli trzy najniższe wartości własne zgadzają się ze sobą z dokładnością do kilku miejsc znaczących, oznacza to, że wszystkie wartości parametrów wybraliśmy właściwie. Program należy przetestować dla przypadku atomu z potencjałem kulombowskim (tzn.  $D \rightarrow \infty$ ) dla stanów  $s$ , dla których znane są rozwiązania w postaci analitycznej.

## Literatura

Wykład