

3. vaja: diferencialne enačbe - robni problemi

1. naloga

Imamo elektron v končni potencialni jami globine $-V_0$. Napišite program, s katerim poiščete valovno funkcijo numerično. Jamo postavite tako, da je simetrična glede na izhodišče od $-a$ do a (a lahko postavite enak 1). Upoštevajte, da so rešitve sode in lihe glede na izhodišče. Začetni pogoj na sredini jame je za sode začetna vrednost 1 in odvod 0, za lihe pa začetna vrednost 0 in odvod 1. Energijo določite z bisekcijo tako, da ima funkcija daleč od izhodišča vrednost 0. Funkcije normirate, ko dobite željeno energijo. V poročilu predstavite rešitve ter energije. Maso in Planckovo konstantno postavite na vrednost 1. Primerjajte rešitve za končno in neskončno potencialno jamo.

D1. naloga

Imamo naslednji reakcijsko-difuzijski problemu v ravnovesnem stanju. V porozni plasti debeline H , kjer ni konvekcije, se porablja reaktant s koncentracijo C . Porozna plast je lahko sestavljena iz celic (v tem primeru je lahko reaktant raztopljeni kisik) ali katalitični premaz (v tem primeru je lahko reaktant ogljikov monoksid v izpušnih plinih). Enačba za koncentracijo je

$$D \frac{d^2 C}{dx^2} = r$$

D je difuzivnost in r hitrost reakcije. V sloju se reaktant porablja, vendar pa novi reaktant difundira v plact iz raztopine, kjer ima koncentracijo C_0 . Iz tu dobimo prvi robni pogoj

$$C(H) = C_0$$

Na drugi strani porozne plasti imamo nepropustno steno. Robni pogoj na tej strani je enak

$$\left. \frac{dC}{dx} \right|_{x=0} = 0$$

Kakšen je koncentracijski profil, če je konstantna temperatura po vsej plasti? Za hitrost reakcije uporabite različne rede (0., 1. in 2. red). Poznamo kje analitično rešitev? Kaj se spremeni, če temperatura ni konstantna?

D2. naloga

Napišite program, ki bo najprej nasul trde kroge željene gostote v ravnino. Nato simulirajte naključno hojo s konstantno velikim korakom. Na začetku smo na sredini škatle, potem pa naredimo korak izbrane dolžine v naključno izbrani smeri. Če je, kjer želimo stopiti krog, se vrnemo v točko, iz katere delamo korak. Kako se oddaljenost od izhodišča spreminja s številom korakov in z gostoto krogov? Kako se oddaljenost spreminja v odvisnosti od števila korakov, če naredimo povprečje več hoj? Kakšen je delež neuspešnih korakov v odvisnosti od gostote in dolžine koraka?