Matematyczne Metody Fizyki II

Mariusz Przybycień

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza

Wykład 10

Problem S-L - cząstka kwantowa w pudle potencjału

- Przykład: Rozważmy cząstkę o masie μ w pudle (nieskończonego) potencjału o bokach a, b, c. Nieskończenie głęboka studnia oznacza, że funkcje falowe znikają na ściankach.
  - Równania Schrödingera: $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)$
  - Separacja zmiennych, $\psi(x, y, z, t) = X(x)\,Y(y)\,Z(z)\,T(t)$, prowadzi do:

$$\frac{d^2X}{dx^2} + \lambda X = 0, \qquad \frac{d^2Y}{dy^2} + \sigma Y = 0, \qquad \frac{d^2Z}{dz^2} + \kappa Z = 0, \qquad \frac{dT}{dt} + i\omega T = 0,$$

gdzie $\omega \equiv \frac{\hbar}{2\mu}(\lambda + \sigma + \kappa)$.

  - Warunki brzegowe:

$$\begin{aligned} \psi(0, y, z, t) = \psi(a, y, z, t) = 0 \quad &\Rightarrow \quad X(0) = 0 = X(a) \\ \psi(x, 0, z, t) = \psi(x, b, z, t) = 0 \quad &\Rightarrow \quad Y(0) = 0 = Y(b) \\ \psi(x, y, 0, t) = \psi(x, y, c, t) = 0 \quad &\Rightarrow \quad Z(0) = 0 = Z(c) \end{aligned}$$

  - Rozwiązania problemu S-L:

$$X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{a}\,x\right), \qquad \lambda_n = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2, \qquad \text{dla } n = 1, 2, \ldots$$

$$Y_m(y) = \sin\left(\frac{m\pi}{b}\,y\right), \qquad \sigma_m = \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2, \qquad \text{dla } m = 1, 2, \ldots$$

$$Z_l(z) = \sin\left(\frac{l\pi}{c}\,z\right), \qquad \kappa_l = \left(\frac{l\pi}{c}\right)^2, \qquad \text{dla } l = 1, 2, \ldots$$

Problem S-L - cząstka kwantowa w pudle potencjału

- Równanie opisujące ewolucję w czasie ma rozwiązanie:

$$T(t) = C_{lmn} e^{-i\omega_{lmn} t} \quad \text{gdzie} \quad \omega_{lmn} = \frac{\hbar}{2\mu}\left[\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b}\right)^2 + \left(\frac{l\pi}{c}\right)^2\right]$$

- Pełne rozwiązanie równania Schrödingera:

$$\psi(x,y,z,t) = \sum_{l,m,n=1}^{\infty} A_{lmn} \sin\left(\frac{n\pi}{a}\, x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{b}\, y\right) \sin\left(\frac{l\pi}{c}\, z\right) e^{-i\omega_{lmn} t}$$

- Stałe A_{lmn} wyznaczamy na podstawie początkowego kształtu funkcji falowej, $\psi(x,y,z,0)$
- Energia cząstki: $$E = \hbar\omega_{lmn} = \frac{h^2}{8\mu}\left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right)$$

  Każdy układ (n,m,l) reprezentuje stan cząstki. Stan podstawowy to $(1,1,1)$. Stany wyższe są zdegenerowane, np. stany $(1,1,2)$, $(1,2,1)$, $(2,1,1)$ mają tą samą energię.

- Dla kubicznej studni potencjału, $a = b = c \equiv L$, mamy ($V = L^3$):

$$E = \frac{h^2}{8\mu L^2}(n^2 + m^2 + l^2) = \frac{h^2}{8\mu V^{2/3}}(n^2 + m^2 + l^2)$$

- Przepisując powyższe równanie w postaci: $n^2 + m^2 + l^2 = R^2 \equiv \dfrac{8\mu E V^{2/3}}{h^2}$,

  widać, że dla dużych R liczba stanów o energii mniejszej lub równej E jest równa $\frac{1}{8}V$:

$$N = \frac{1}{8}\,\frac{4\pi}{3} R^3 = \frac{\pi}{6}\left(\frac{8\mu E}{h^2}\right)^{3/2} V \quad \Rightarrow \quad n = \frac{N}{V} = \frac{\pi}{6}\left(\frac{8\mu}{h}\right)^{3/2} E^{3/2}$$

Funcja Greena jako jądro operatora całkowego

- Rozwiązanie równania różniczkowego: $-i\dfrac{dy}{dx} = f(x), \;\; y(a) = y_0$, na przedziale $[a, b]$:

$$y(x) = y_0 + i\int_a^x f(x')dx' \quad \text{lub inaczej} \quad y_0 + i\int_a^b \theta(x - x')f(x')dx'$$

gdzie $\theta(t)$ jest funkcją Heaviside'a.

- Definiujemy operator całkowy K:

$$y(x) = y_0 + Kf(x), \quad \text{gdzie} \;\; Kf(x) = i\int_a^b \theta(x - x')f(x')dx'$$

gdzie $i\theta(x - x')$ nazywamy jądrem operatora K, a jeśli to jądro pochodzi z rozwiązania równania zawierającego operator różniczkowy, to nazywamy go funkcją Greena tego operatora różniczkowego dla zadanych warunków brzegowych.

- $G(x, x') = i\theta(x - x')$ jest funkcją Greena operatora $i\frac{d}{dx}$ z warunkiem brzegowym $y(a) = y_0$.

- Znajdziemy rozwiązanie równania: $\dfrac{d^2y}{dx^2} = f(x), \;\; y(a) = y_0, \;\; y'(a) = y_1$, dla $a \leqslant x \leqslant b$:

$$y(x) = y_0 + y_1(x-a) + \int_a^x dx'' \int_a^{x''} dx' f(x') = y_0 + y_1(x-a) + \int_a^b (x - x')\theta(x - x')f(x')dx'$$

- $G(x, x') = (x - x')\theta(x - x')$ jest funkcją Greena operatora d^2/dx^2 z $y(a) = y_0, \;\; y'(a) = y_1$.
- Przy innych warunkach brzegowych, $y(0) = y_0, \;\; y(1) = y_1$, rozwiązanie ma postać:

$$y(x) = y_0 + (y_1 - y_0)x + \int_0^1 G(x, x')f(x')dx' \quad \text{gdzie} \;\; G(x, x') = \begin{cases} -x'(1 - x), & 0 \leqslant x' \leqslant x \\ -x(1 - x'), & x \leqslant x' \leqslant 1 \end{cases}$$

Funkcja Greena

Wiemy, że rozwiązania r. S-L z zadanymi warunkami brzegowymi mają postać ortogonalnych funkcji własnych $y_n(x)$ stowarzyszonych z wartościami własnymi λ_n:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}y_n\right] + q(x)y_n + \lambda_n w(x)y_n = 0$$

Najwygodniej posługiwać się znormalizowanymi funkcjami własnymi:

$$\phi_n(x) = y_n(x)/\langle y_n|y_n\rangle^{1/2} \quad \Rightarrow \quad \langle \phi_m|\phi_n\rangle = \int_a^b \phi_m(x)\phi_n(x)w(x)\mathrm{d}x = \delta_{nm}$$

Chcemy znaleźć rozwiązanie równania niejednorodnego (uwaga $k \neq \lambda_n$):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}y\right] + q(x)y + kw(x)y = f(x)$$

Rozwiązanie równania można przedstawić w postaci rozwinięcia w zbiorze ortonormalnych funkcji własnych: $y(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\phi_n(x)$

Wstawiając tą postać rozwiązania do równania otrzymujemy:

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n \left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right] + q(x)\right\}\phi_n(x) + kw(x)\sum_{n=1}^{\infty} c_n\phi_n(x) = f(x)$$

Funkcja Greena

Z drugiej strony mamy: $\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]+q(x)\right\}\phi_n(x)=-\lambda_n w(x)\phi_n(x)$

a więc: $\sum_{n=1}^{\infty} c_n(-\lambda_n+k)w(x)\phi_n(x)=f(x)$

Mnożąc obie strony przez $\phi_m(x)$ i całkując otrzymujemy:

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n(-\lambda_n+k)\int_a^b w(x)\phi_n(x)\phi_m(x)\mathrm{d}x=\int_a^b f(x)\phi_m(x)\mathrm{d}x$$

Korzystając z ortonormalności funkcji $\phi_n(x)$ znajdujemy:

$$c_n=\frac{1}{k-\lambda_n}\int_a^b f(x)\phi_n(x)\mathrm{d}x \quad\Rightarrow\quad y(x)=\sum_{n=1}^{\infty}\left[\frac{1}{k-\lambda_n}\int_a^b f(x')\phi_n(x')\mathrm{d}x'\right]\phi_n(x)$$

Zapisujemy rozwiązanie w postaci:

$$y(x)=\int_a^b f(x')\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\phi_n(x')\phi_n(x)}{k-\lambda_n}\mathrm{d}x'\equiv\int_a^b f(x')G(x',x)\mathrm{d}x'$$

gdzie zdefiniowaliśmy funkcję Greena: $G(x',x)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\phi_n(x')\phi_n(x)}{k-\lambda_n}$

Funkcja Greena a delta Diraca

Definicja: Funkcja delta Diraca: $F(x) = \int_a^b F(x')\delta(x'-x)\mathrm{d}x', \;\; a < x < b$

Funkcja Greena jest rozwiązaniem r. niejednorodnego dla $f(x) = \delta(x'-x)$:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}G(x',x)\right] + q(x)G(x',x) + kw(x)G(x',x) = \\
&\quad = \left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[p(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right] + q(x)\right\}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\phi_n(x')\phi_n(x)}{k-\lambda_n} + kw(x)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\phi_n(x')\phi_n(x)}{k-\lambda_n} = \\
&\quad = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{-\lambda_n w(x)\phi_n(x')\phi_n(x)}{k-\lambda_n} + kw(x)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\phi_n(x')\phi_n(x)}{k-\lambda_n} = w(x)\sum_{n=1}^{\infty}\phi_n(x')\phi_n(x)
\end{aligned}
$$

Z drugiej strony, rozwijając funkcję delta Diraca mamy:

$$
\begin{aligned}
\delta(x'-x) &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n\phi_n(x) \quad \Rightarrow \quad a_n = \langle\delta(x'-x)|\phi_n(x)\rangle \\
\delta(x'-x) &= \sum_{n=1}^{\infty}\langle\delta(x'-x)|\phi_n(x)\rangle\phi_n(x) = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\left[\int_a^b\delta(x'-x)\phi_n(x)w(x)\mathrm{d}x\right]\phi_n(x) = w(x')\sum_{n=1}^{\infty}\phi_n(x')\phi_n(x)
\end{aligned}
$$

Ponieważ $\delta(x'-x) = \delta(x-x')$ więc widać, że funkcja Greena jest rzeczywiście rozwiązaniem r. niejednorodnego dla $f(x) = \delta(x'-x)$.

Funcja Greena dla problemu S-L

- Przykład: Rozwiązanie problemu S-L, $\dfrac{d^2y}{dx^2} + \lambda x = 0$, $y(0) = y(1) = 0$, ma postać:

$$\lambda_n = n^2\pi^2, \qquad y_n(x) = \sqrt{2}\sin(n\pi x)$$

  - Funkcja Greena dla tego problemu S-L ma więc postać:

$$G(x, x') = -\frac{2}{\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin(n\pi x)\sin(n\pi x')}{n^2}$$

- Przykład: Rozważmy równanie oscylatora harmonicznego (masa $m = 1$):

$$\ddot{x}(t) + 2\gamma\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = f(t)$$

  - Transformacja Fouriera obu stron rówania daje (zakładamy, że istnieją $\mathcal{F}(f(t))$ i $\mathcal{F}(x(t))$):

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}(\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + \omega_0^2 x)e^{-ikt}dt = F(k)$$

  - Po scałkowaniu pierwszego wyrazu przez części i skorzystaniu z relacji $\mathcal{F}(\dot{x}(t)) = ikX(k)$, dostajemy:

$$(2\gamma + ik)(ikX(k)) + \omega_0^2 X(k) = F(k) \quad \Rightarrow \quad X(k) = \frac{F(k)}{-k^2 + 2i\gamma k + \omega_0^2}$$

  - Odwrotna transformata Fouriera:

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}X(k)e^{ikt}dk = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\int_{-\infty}^{\infty}dk\,\frac{f(t')e^{-ikt'}}{-k^2 + 2i\gamma k + \omega_0^2}e^{ikt}$$

Oscylator harmoniczny

- Ogólne rozwiązanie rówania ma więc postać: $x(t) = Ax_1(t) + Bx_2(t) + \int_{-\infty}^{\infty} G(t,t')f(t')\,dt'$
- Niezależne rozwiązania rówania jednorodnego to:

$$x_1(t) = e^{-\gamma t}\sin\left[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,t\right] \quad \text{oraz} \quad x_2(t) = e^{-\gamma t}\cos\left[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,t\right]$$

- Funkcja Greena: $G(t,t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ik(t-t')}}{-k^2+2i\gamma k+\omega_0^2}dk = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ik(t-t')}dk}{(k-k_1)(k-k_2)}$

  gdzie $k_1 = \sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}+i\gamma$ oraz $k_2 = -\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}+i\gamma$.
- Zakładamy, że $\omega_0 > \gamma$, czyli, że oba bieguny są w górnej półpłaszczyźnie, a więc domykamy kontur w górnym półokręgiem.
- Obliczamy residua w k_1 i k_2, a następnie znajdujemy funkcję Greena (dla $t > t'$):

$$G(t,t') = -\frac{1}{2\pi}(2\pi i)\left[\frac{e^{ik_1(t-t')}}{k_1-k_2}+\frac{e^{ik_2(t-t')}}{k_2-k_1}\right] = \frac{\sin\left[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,(t-t')\right]}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}e^{-\gamma(t-t')}$$

- Znajdziemy rozwiązanie dla funkcji wymuszającej w postaci $f(t) = F_0e^{-\alpha t}$ przy założeniu, że w chili $t=0$ układ znajdował się w spoczynku ($A = 0 = B$):

$$x(t) = \frac{F_0e^{-\gamma t}}{\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}}\int_0^t \sin\left[\sqrt{\omega_0^2-\gamma^2}\,(t-t')\right]e^{(\gamma-\alpha)t'}\,dt'$$

- Po obliczeniu całki otrzymujemy:

$$x(t) = \frac{F_0}{\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}} \frac{\sin\left[\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}\, t - \delta\right]}{\sqrt{\omega_0^2 + \alpha^2 - 2\alpha\gamma}} e^{-\gamma t} + \frac{F_0}{\omega_0^2 + \alpha^2 - 2\alpha\gamma} e^{-\alpha t}$$

gdzie $\operatorname{tg}\delta = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}/(\alpha - \gamma)$ oraz $0 < \delta < \pi$.

- Zaniedbując tłumienie otrzymujemy: $x(t) = \dfrac{F_0}{\omega_0} \dfrac{\sin(\omega_0 t - \delta)}{\sqrt{\omega_0^2 + \alpha^2}} + \dfrac{F_0}{\omega_0^2 + \alpha^2} e^{-\alpha t}$

  Dla dużego t drgania stają się harmoniczne.

- Całkowita energia przekazana do układu: $E = \dfrac{1}{2}\dot{x}^2 + \dfrac{1}{2}\omega_0^2 x^2 = \dfrac{F_0^2}{2(\omega_0^2 + \alpha^2)}$

- Przykład (funkcja Greena w 3D): Znajdziemy funkcję Greena dla równania:

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \lambda \psi(\vec{r}) = f(\vec{r})$$

Stosujemy transformatę Fouriera, $F(\vec{k}) = \dfrac{1}{(2\pi)^{3/2}} \displaystyle\int f(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d^3\vec{r}$, do obu stron równania:

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \nabla^2 \psi(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d^3\vec{r} + \lambda \Psi(\vec{k}) = F(\vec{k})$$

Funkcja Green w 3D

- Korzystajc z twierdzenia Greena, $\int_V (F\nabla^2 G - G\nabla^2 F) d^3\vec{r} = \int_S (F\vec{\nabla}G - G\vec{\nabla}F)\cdot\vec{n}\, dS$, (całkujemy po całej przestrzeni, więc przy obliczaniu całki powierzchniowej całkujemy po sferze o pronieniu $R \to \infty$), otrzymujemy:

$$(-k^2 + \lambda)\Psi(\vec{k}) = F(\vec{k})$$

- Musimy rozważyć dwa przypadki: $\lambda \geqslant 0$ oraz $\lambda < 0$. Dla $\lambda = -\kappa^2 < 0$, mamy:

$$\Psi(\vec{k}) = -\frac{F(\vec{k})}{k^2 + \kappa^2} \qquad \Rightarrow \qquad \psi(\vec{r}) = h(\vec{r}) - \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{F(\vec{k})}{k^2 + \kappa^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, d^3\vec{k}$$

  gdzie $h(\vec{r})$ jest rozwiązaniem rówania jednorodnego.

- Funkcja Greena ma postać:

$$\psi(\vec{r}) = h(\vec{r}) + \int G(\vec{r},\vec{r}')f(\vec{r}')\, d^3\vec{r}'$$

$$G(\vec{r},\vec{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k^2 + \kappa^2}\, d^3\vec{k} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-\kappa|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$