Прикладные методы анализа 2020
Занятие 22.09.2020

Подстановка Лапласа для решения дифференциальных уравнений: приложение к квантомеханическим задачам.

Частица в двумерной круглой потенциальной яме: постановка. Классический гамильтониан для частицы в круглой двумерной потенциальной яме

$$H_{cl} = (p_1^2 + p_2^2)/2m + U(x_1, x_2), \quad U = -U_0\Theta(r_0 - \sqrt{x_1^2 + x_2^2}). \tag{1}$$

Энергия частицы, удерживающейся в яме, таким образом, может быть от $-U_0$ до 0.

Теперь мы переходим к квантовой механике. В результате импульс у нас превращается в оператор сдвига $p_j \to -i\hbar\partial/\partial x_i$ и перестает коммутировать с оператором координаты:

$$[p_j, x_k] = -i\delta_{jk}\hbar. \tag{2}$$

Некоммутативность означает, что мы не можем одновременно измерить координату и импульс (т.н. принцип неопределенности Гейзенберга). Гамильтониан становится самосопряженным дифференциальным оператором второго порядка:

$$\hat{H} = -\hbar^2/2m\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right) + U(x_1, x_2), \quad U = -U_0\Theta(r_0 - \sqrt{x_1^2 + x_2^2}). \tag{3}$$

При этом состояния частиц описываются волновыми функциями $\psi(x) \in L^2$, которые являются векторами в бесконечномерном гильбертовом пространстве. Измеряя некоторую наблюдаемую, например энергию, мы можем получить только собственные значения соответствующего наблюдаемой самосопряженного оператора. Если в результате измерений мы получаем собственное значение λ_n, то состояние коллапсирует к соответствующему собственному состоянию оператора измеряемой наблюдаемой. Вероятность получить с.з. λ_n равна квадрату модуля скалярного произведения измеряемого состояния с соответствующим собственным значением, который для одномерной задачи на прямой записывается следующим образом:

$$|\langle\lambda_n|\psi\rangle|^2 = \left|\int_{\mathbb{R}} \lambda_n^*(x)\psi(x)\right|^2. \tag{4}$$

Сама волновая функция по определению – это скалярное произведение $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, т.е. это координаты абстрактного вектора гильбертова пространства в соответствующем "координатном"базисе, а квадрат модуля волновой функции $|\psi(x)|^2 = |\langle x|\psi\rangle|^2$ равен плотности вероятности обнаружить частицу в данной точке x.

Частица в двумерной круглой потенциальной яме: сведение к вырожденному гипергеометрическому уравнению. Предельный случай бесконечно глубокой потенциальной ямы. Наша задача: найти собственные значения гамильтониана, т.е. решить дифференциальное уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}\right)\psi(x) - U_0\Theta(r_0 - \sqrt{x_1^2 + x_2^2})\psi(x) = E\psi(x). \tag{5}$$

Фактически у нас есть два разных дифференциальных уравнения: вне ямы и внутри ямы. Нам нужно будет решить оба уравнения, после чего потребовать условие непрерывности волновой функции и ее производной на границе ямы (т.н. сшивка). Это требование будет объяснено в процессе решения.

Мы интересуемся связанным состоянием частицы. Это означает, что нас устроят только такие собственные состояния, которые локализованы в районе ямы, т.е. чтобы квадрат модуля волновой функции $|\psi(x)|^2$ убывал при удалении от ямы.

Первый этап – это естественный переход к полярным координатам r, ϕ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right)\psi(r,\phi)-U_0\Theta(r_0-r)\psi(r,\phi)=E\psi(r,\phi). \tag{6}$$

Будем искать решение в виде $\psi(r,\phi)=R(r)\Phi(\phi)$. Постфактум мы объясним, почему больше ничего искать не надо. Имеем:

$$\frac{r^2\hbar^2}{2m}\frac{\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)R(r)}{R(r)}+r^2U_0\Theta(r_0-r)+Er^2=\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} \tag{7}$$

Мы видим, что левая часть зависит только от r, а правая – только от ϕ, значит обе стороны – константы. Значит $\Phi(\phi)=C_1e^{\alpha\phi}+C_2e^{-\alpha\phi}$. Из условия периодичности по ϕ мы получаем, что эта константа равна n^2, где $n\in\mathbb{Z}_{\geq 0}$. Получаем, что $R(r)$ удовлетворяет уравнению:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+1/r\frac{\partial}{\partial r}-n^2/r^2\right)R(r)-U_0\Theta(r_0-r)R(r)=ER(r). \tag{8}$$

Этот способ называется разделением переменных. Поскольку L^2 функция раскладывается в ряд Фурье по ϕ, то мы видим, что мы не потеряли никаких собственных состояний.

Теперь стандартная процедура — это обезразмеривание уравнения. А именно, сделаем замену

$$\rho=r/r_t,\ r_t=\frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}},\ \epsilon=-E/U_0,\ \rho_0=r_0/r_t \tag{9}$$

и получим окончательно уравнение

$$\left(\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{d}{d\rho}+\rho\Theta(\rho_0-\rho)+n^2/\rho\right)R(\rho)=\rho\epsilon R(\rho) \tag{10}$$

Теперь можно легко объяснить, почему мы требуем условия непрерывности $R(\rho)$ и $dR(\rho)/d\rho$. Проинтегрируем последнее уравнение по $d\rho/\rho$ на маленьком отрезке, содержащем ρ_0 и устремим отрезок к 0. Мы получим, что скачок производной должен быть равен 0.

Докажем ряд простых фактов про уровни (собственные значения энергии):

a) Собственное значение $E\geq U_0$. Рассмотрим среднюю энергию $\langle E\rangle=\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$. Она больше, либо равна $-U_0$ Это следует из того, что кинетический член гамильтониана — это сумма квадратов самосопряженных операторов и среднее от него неотрицательное. Наконец, из того, что среднее всегда не меньше $-U_0$, следует, что и основное состояние больше $-U_0$.
b) Для связанных состояний собственные значения $E\leq 0$. Это следует из рассмотрения асимптотики собственной волновой функции на больших расстояниях от ямы. Она приближенно равна $e^{-\sqrt{\epsilon}\rho}$, т.е. при положительной энергии

волновая функция осциллирует, а при отрицательной — экспоненциально убывает, т.е. в первом случае частица не локализована в районе ямы, а во втором — локализована.

c) Основное состояние аксиально симметрично (т.е. $n = 0$). Предположим, что основное состояние имеет $|n| > 0$ и равно $f(r)e^{in\phi}$. Рассмотрим состояние $\psi(r,\phi) = f(r)$ (несобственное, вообще говоря). Исходя из вида гамильтониана, его средняя энергия меньше, чем у $f(r)e^{in\phi}$. Но средняя энергия не может быть меньше энергии основного состояния.

Далее мы хотим найти основное связанное состояние частицы в яме, т.е. берем $n = 0$.

Подстановка Лапласа или импульсное представление. Будем искать решение уравнения в виде

$$R(\rho) = \int_C dz u(z) e^{z\rho}, \tag{11}$$

где C — некоторый контур на комплексной плоскости.

Тогда получаем:

$$\rho R^{(m)}(\rho) = \int_C z^m u(z) de^{z\rho} = z^m \rho u(z) e^{z\rho}\Big|_{C_s}^{C_f} - \int_C dz \frac{d}{dz}(z^m u(z)) e^{z\rho}, \tag{12}$$

таким образом, достаточное условие, чтобы уравнение решалось — это дифференциальное уравнение

$$u'(z)(z^2 + A) + u(z)z, \quad A = \left\{ \begin{array}{l} 1 - \epsilon = \kappa^2,\ \rho < \rho_0 \\ -\epsilon = -\varkappa^2,\ \rho > \rho_0 \end{array} \right., \tag{13}$$

при этом требуется, чтобы выполнялось условие зануления члена, возникающего из интегрирования по частям:

$$e^{z\rho} u(z)(z^2 + A)\Big|_{C_s}^{C_f} = 0, \tag{14}$$

это достигается подходящим выбором контура.

Основное упрощение заключается в том, что мы можем перейти от уравнения второго порядка к уравнению первого порядка, которое легко решается. В случае, если бы ρ было бы не радиальной координатой, а обычной координатой на прямой, подстановка Лапласа означает переход к так называемому импульсному представлению:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = \int dp \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle, \tag{15}$$

где мы волновую функцию $\psi(x)$ разложили по базису собственных функций оператора импульса $\langle x|p\rangle = e^{ipx}$. Такой переход оправдан, когда полиномиальный порядок оператора координаты ниже, чем оператора импульса, т.е. для импульса не выше линейного. Мы рассмотрим пример линейного потенциала на прямой позднее.

Функции Бесселя и сшивка. Найдем решение и определим подходящий контур в нашем случае. Решая дифференциальное уравнение, получаем

$$u(z) = \frac{const}{\sqrt{z^2+A}},\ e^{z\rho}\sqrt{z^2+A}\Big|_{C_s}^{C_f} = 0. \tag{16}$$

Посмотрим на то, какие контуры мы можем выбрать в каждом из случаев. В качестве нулей мы можем брать либо отрицательную бесконечность, где зануляется экспонента, либо нули корня. Ещё мы хотим, чтобы полученный контур не стягивался в нулевой. Фактически, у нас получается по два независимых контура в каждом случае (см. рисунок): один соединяет два нуля корня, а другой идет от одного из этих нулей в отрицательную бесконечность. Так, конечно, и должно быть, поскольку у дифференциального уравнения второго порядка два линейно независимых решения. Выясним асимптотики этих в бесконечности и нуле и посмотрим, какие нам подходят.

$$1: \quad \rho < \rho_0: \quad \int_{-\kappa}^{\kappa} \frac{dt e^{it\rho}}{\sqrt{\kappa^2 - t^2}} \to_{\rho\to 0} const \tag{17}$$

$$2: \quad \rho < \rho_0: \quad \int_{0}^{+\infty} \frac{e^{-\rho t} e^{i\kappa\rho} dt}{\sqrt{t^2 - 2it\kappa}} \to_{\rho\to 0} \infty \tag{18}$$

$$3: \quad \rho > \rho_0: \quad \int_{\varkappa}^{+\infty} \frac{dt e^{-t\rho}}{\sqrt{t^2 - \varkappa^2}} \to_{\rho\to +\infty} 0 \tag{19}$$

$$4: \quad \rho > \rho_0: \quad \int_{-\varkappa}^{+\varkappa} \frac{dt e^{t\rho}}{\sqrt{t^2 - \varkappa^2}} \to_{\rho\to +\infty} i\infty \tag{20}$$

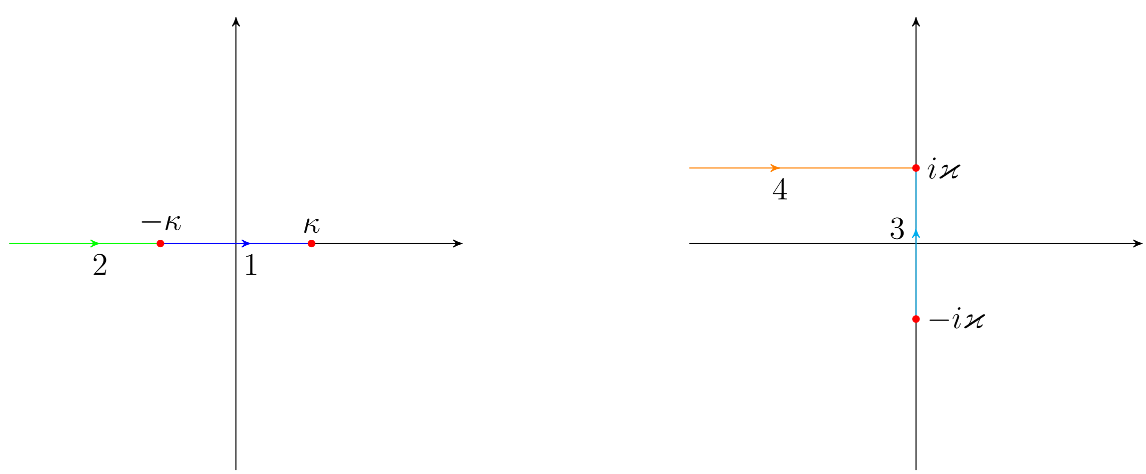

Рис. 1. Контуры интегрирования

Таким образом:

$$R_<(\rho) = \int_{-\kappa}^{\kappa} \frac{dt e^{it\rho}}{\sqrt{\kappa^2 - t^2}} = 2\int_0^1 \frac{dt \cos(\kappa\rho t)}{\sqrt{1-t^2}} \tag{21}$$

$$= 2\sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k \frac{(\kappa\rho)^{2k}}{(2k)!} \int_0^1 \frac{t^{2k} dt}{\sqrt{1-t^2}} = \pi \sum_{k=0} (-1)^k \frac{(\kappa\rho)^{2k}}{2^{2k} k!^2} = \pi J_0(\kappa\rho)$$

— функция Бесселя первого рода нулевого порядка (почему мы имеем право поменять суммирование и интегрирование?);

$$R_>(\rho) = \int_{\varkappa}^{+\infty} \frac{dte^{-t\rho}}{\sqrt{t^2-\varkappa^2}} = K_0(\varkappa\rho) \tag{22}$$

— модифицированная функция Бесселя второго рода порядка n. Проверим квадратичную интегрируемость в области $\rho > \rho_0$

$$\begin{aligned} K_0(\varkappa\rho) &= \int_1^{+\infty} \frac{dte^{-t\varkappa\rho}}{\sqrt{t^2-1}} = e^{-\rho\varkappa}\int_0^{+\infty} \frac{dte^{-t\varkappa\rho}}{\sqrt{t(t+2)}} \\ &= \frac{e^{-\rho\varkappa}}{\sqrt{2\rho\varkappa}}\int_0^{+\infty} \frac{dte^{-t}}{\sqrt{t}}(1+t/(2\varkappa\rho))^{-1/2} = \frac{e^{-\rho\varkappa}}{\sqrt{2\rho\varkappa}}\sqrt{\pi}(1+O((\varkappa\rho)^{-1})). \end{aligned} \tag{23}$$

Перейдем к сшивке в точке ρ_0. С точностью до относительной нормировочной константы C

$$R_>(\rho_0) = CR_<(\rho_0), \quad R'_>(\rho_0) = CR'_<(\rho_0), \tag{24}$$

или, исключая эту константу,

$$R_>(\rho_0)R'_<(\rho_0) = R_<(\rho_0)R'_>(\rho_0) \tag{25}$$

Давайте предположим, что наша яма мелкая, т.е. $\rho_0 << 1$. Тогда посмотрим на асимптотики этих функций при $\rho_0 \to 0$. Нам нужно ещё вычислить асимптотику функции K_0 при $\rho \to 0$:

$$\begin{aligned} K_0(\kappa\rho) &= \int_{\rho\varkappa}^{1} \frac{dt(1+(e^{-t}-1))}{\sqrt{t^2-(\varkappa\rho)^2}} + \int_1^{+\infty} \frac{dte^{-t}}{\sqrt{t^2-(\varkappa\rho)^2}} \\ &= \int_1^{1/\varkappa\rho} \frac{dt}{\sqrt{t^2-1}} + \int_0^1 \frac{dt(e^{-t}-1)}{t} + \int_1^{+\infty} \frac{dte^{-t}}{t} + o(1) \\ &= -\log\frac{\rho\varkappa}{2} + \gamma + o(1), \end{aligned} \tag{26}$$

где в последнем переходе мы использовали интеграл $\int_0^{+\infty} dte^{-t}\log t = \gamma$, который мы получили интегрированием по частям.

Окончательно получаем:

$$1/2(\kappa\rho_0^2)^2 \log\frac{2e^{\gamma}}{\rho_0\varkappa} = 1, \tag{27}$$

или

$$E_0 = -\frac{2\hbar^2 e^{2\gamma}}{mr_0^2}\exp\left(-\frac{2\hbar^2}{mr_0^2 U_0}\right). \tag{28}$$

Еще один простой случай, когда задача имеет простое решение — это предел бесконечной ямы. Тогда условие сшивки говорит, что $\psi = 0$ вне (и на границе) ямы. Тут ответы для всех уровней энергии даются нулями функции Бесселя $J_0(\rho)$.