Løsning av partielle differensialligninger ved hjelp av Greens-funksjoner

Vi husker metoden med Greensfunksjoner for ordinære inhomogene diff. ligninger:

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = R(x) \ ,$$
$$y(x) = \int_a^b G(x,x')R(x')dx' \ ,$$

der Greensfunksjonen G(x,x’) er bestemt av ligningen

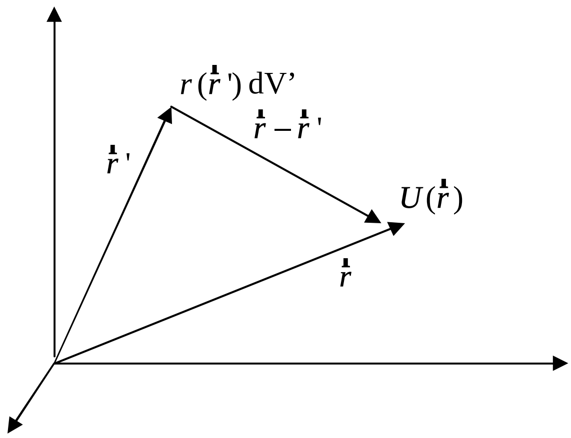
$$\frac{d^2G(x,x')}{dx^2} + P(x)\frac{dG(x,x')}{dx} + Q(x)G(x,x') = \delta(x-x') \ .$$

Integrasjonsgrensene a og b er bestemt av grensebetingelsene, for eksempel y(a)=y(b)=0, som medfører G(a,x’)=G(b,x’)=0. x og x’ er da begrenset til området [a,b]. Alternative betingelser kan være y(a)=0 og y’(a)=0. Da kan vi typisk ha a=0 og b=∞.

Vi vil nå undersøke om vi kan bruke en tilsvarende måte til å løse inhomogene partielle differensialligninger. Som eksempel tar vi først den viktige Poissons ligning i tre dimensjoner:

$$\nabla^2 U(\vec{r}) = -\frac{\rho(\vec{r})}{\varepsilon_0} \ , \qquad (1)$$

der $U(\vec{r})$ er potensialet som skyldes ladningsskyen $\rho(\vec{r}\,')$.



I likhet med løsningen ovenfor for ordinære ligninger prøver vi:

$$U(\vec{r}) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\int G(\vec{r},\vec{r}\,')\rho(\vec{r}\,')dV(\vec{r}\,') \qquad (2)$$

der dV er et volumelement som refererer til posisjonen $\vec{r}\,'$. Vi setter inn i Poissons ligning:

$$\nabla^2 U(\vec r) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\int \nabla^2 G(\vec r, \vec r\,')\,\rho(\vec r\,')\,dV(\vec r\,') \;, \qquad (3)$$

og merker oss at ∇^2 bare virker på den variable $\vec r$ slik at ∇^2 virker på integranden i integralet ovenfor.

Videre ser vi at vi får riktig løsning for $U(\vec r)$ ved å bestemme $G(\vec r, \vec r\,')$ av ligningen

$$\nabla^2 G(\vec r, \vec r\,') = \delta(\vec r - \vec r\,') \;, \qquad (4)$$

der $\delta(\vec r - \vec r\,')$ er den tredimensjonale δ -funksjonen, som har egenskaper som den en-dimensjonale:

$$\delta(\vec r - \vec r\,') = \delta(x - x')\,\delta(y - y')\,\delta(z - z') \;,$$
$$\int f(\vec r\,')\,\delta(\vec r - \vec r\,')\,dV(\vec r\,') = f(\vec r) \;.$$

Vi ser nå at ligning (4) for $G(\vec r, \vec r\,')$ innsatt i (3) passer med Poisson-ligningen:

$$\nabla^2 U(\vec r) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\int \delta(\vec r - \vec r\,')\,\rho(\vec r\,')\,dV(\vec r\,') = -\frac{\rho(\vec r)}{\varepsilon_0} \;.$$

Hvordan bestemmes så $G(\vec r, \vec r\,')$ av ligningen (4) ovenfor? Vi ser at den ligner på Poissons ligning, men har en enklere høyreside, og skulle dermed være enklere å løse. Vi tar utgangspunkt i at "ladningsskyen" $\rho(\vec r)$ fra en punktladning er gitt ved

$$\rho(\vec r) = q\,\delta(\vec r - \vec r\,') \;, \quad \text{som gir}$$
$$\int \rho(\vec r)\,dV(\vec r) = q\int \delta(\vec r - \vec r\,')\,dV(\vec r) = q \;.$$

Etter Coulombs lov er potensialet $U(\vec r)$ i posisjonen $\vec r$ fra en punktladning i posisjonen $\vec r\,$' gitt ved

$$U(\vec r) = \frac{q}{4\pi\varepsilon_0 |\vec r - \vec r\,'|}$$

Av Poissons ligning følger da for en punktladning:

$$\frac{q}{4\pi\varepsilon_0}\nabla^2 \frac{1}{|\vec r - \vec r\,'|} = -\frac{\rho(\vec r)}{\varepsilon_0} = -\frac{q\,\delta(\vec r - \vec r\,')}{\varepsilon_0}$$

som gir

$$\nabla^2 \frac{1}{|\vec r - \vec r\,'|} = -4\pi\,\delta(\vec r - \vec r\,') \;. \qquad (5)$$

Når vi sammenligner ligningene (4) og (5) har vi også en løsning for $G(\vec{r},\vec{r}\,')$:

$$G(\vec{r},\vec{r}\,') = -\frac{1}{4\pi\,|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \ . \qquad (6)$$

Løsningen av Poissons ligning er da fra ligning (2):

$$U(\vec{r}) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\int G(\vec{r},\vec{r}\,')\,\rho(\vec{r}\,')\,dV(\vec{r}\,')$$
$$= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\,dV(\vec{r}\,') \ . \qquad (7)$$

Denne løsningen er egentlig lett å forstå, den gir oss potensialet $U(\vec{r})$ i $\vec{r}$ som en ”sum” av bidrag fra små ladningsbiter $\rho(\vec{r}\,')dV(\vec{r}\,')$ i posisjonen $\vec{r}$ ’ etter Coulombs lov. Dette resultatet er typisk for Greensfunksjoner. De gir oss løsningen for et komplisert problem i form av en sum av bidragene til løsningen (dvs. størrelsen vi vil beregne) fra de enkelte ”kilder”, for eksempel små ladningsbiter, små massedeler.

I det mer generelle tilfellet med en ligning av formen

$$\Delta u(\vec{r}) = f(\vec{r}) \ ,$$

der D er en differensialoperator ($\Delta = \nabla^2$ for Poisson-ligningen), har vi løsningen

$$u(\vec{r}) = \int G(\vec{r},\vec{r}\,')\,f(\vec{r}\,')\,dV(\vec{r}\,') \ ,$$

med $G(\vec{r},\vec{r}\,')$ bestemt av

$$\Delta G(\vec{r},\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \ .$$

I tillegg kommer så grensebetingelser.

Schrödingerligningen

Et annet viktig eksempel på bruk av Greensfunksjoner gjelder løsningen av Schrödinger-ligningen for et ikke-bundet problem, dvs. med energi E>0:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + E_p(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \ , \quad E>0 \text{ , som gir}$$

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \ , \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \ , \ U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}E_p(\vec{r}) \ . \qquad (8)$$

Prøver med en Greensfunksjon:

$$\psi(\vec{r}) = f(\vec{r}) + \int G(\vec{r},\vec{r}\,')U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')dV(\vec{r}\,') \ , \qquad (9)$$

der $f(\vec{r})$ er bestemt av den homogene ligningen

$$(\nabla^2 + k^2)f(\vec{r}) = 0 \ . \qquad (10)$$

Vi får da til slutt følgende resultat når (9) settes inn i (8), og (10) benyttes:

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) &= \int (\nabla^2 + k^2)G(\vec{r},\vec{r}\,')U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')dV(\vec{r}\,') \qquad (11)\\ &= U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \ .\end{aligned}$$

Denne siste ligningen bestemmer også Greensfunksjonen, som blir gitt ved

$$(\nabla^2 + k^2)G(\vec{r},\vec{r}\,') = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') \ . \qquad (12)$$

Å løse denne ligningen og bestemme Greensfunksjonen gir en litt mer omfattende øvelse i kompleks integrasjon som vi ikke tar med her. Resultatet er imidlertid

$$G(\vec{r},\vec{r}\,') = -\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{4\pi\,|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \ .$$

Vi ser at ligning (12) for $G(\vec{r},\vec{r}\,')$ svarer til ligning (8) for $\psi(\vec{r})$, men nå med et "potensial" gitt bare i det ene punktet $\vec{r} = \vec{r}\,'$. Det er viktig å merke seg at Greensfunksjonen i utgangspunktet ikke avhenger av det aktuelle fysiske system, dvs. ikke av potensialet $U(\vec{r})$. Egenskaper ved systemet kommer bare inn via grensebetingelser.

Den praktiske løsningen av et slikt kvantemekanisk problem består i først å anta $\psi(\vec{r}\,') = f(\vec{r}\,')$, sette denne approksimative løsningen inn på høyresiden i ligningen (9) som bestemmer $\psi(\vec{r})$, og dermed finne en mer nøyaktig løsning (iterasjon). Dette gir den såkalte første Born-approksimasjon i den kvantemekaniske teorien for spredning. Deretter gjentas prosessen (andre Born-approksimasjon etc.) til løsningen forhåpentlig konvergerer.