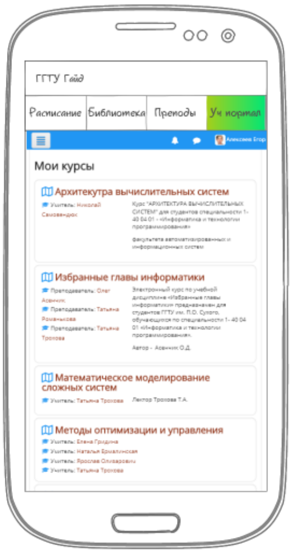

Рис. 4. Внешний вид страницы учебного портала

После полной реализации всех режимов работы приложение будет готово к внедрению и поможет студентам первого года обучения быстрее адаптироваться к учебному процессу университета.

СЕКЦИЯ VIII
ФИЗИЧЕСКИЕ И МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ

ФУНКЦИЯ ГРИНА УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

П. В. Асвинова, В. Ю. Златина

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого», Республика Беларусь

Научный руководитель В. Ю. Гавриш

Задача столкновения двух частиц в классической механике с учетом прицельного расстояния и скорости частиц решается известными методами. В квантовой механике меняется сама постановка вопроса, поскольку понятие траектории, а с нею и прицельного расстояния, теряет смысл.

В работе продемонстрирована процедура получения дифференциального сечения с последующим переходом расчета функции Грина. Авторы, используя методы функции комплексного переменного, получают выражения для амплитуды рассеяния плоской волны.

Связь дифференциального сечения с амплитудой рассеяния. Известно [1], [2], что свободная частица массы m описывается плоской волной. Используя нормировку, при которой плотность потока в волне равна скорости частицы $\vec{\upsilon}$, получаем, что

$$\psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}}. \tag{1}$$

Рассеянные частицы будут описываться расходящейся сферической волной

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}} + f\left(\vec{k}', \vec{k}\right)\frac{\mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}}}{\vec{r}} \tag{2}$$

с функцией $f\left(\vec{k}', \vec{k}\right)$, которую называют амплитудой рассеяния. Элемент дифференциального сечения рассеяния $d\sigma$, соответствующий элементу телесного угла $d\Omega$, определяется выражением [1]:

$$d\sigma = \frac{dn}{j_{in}}. \tag{3}$$

Число частиц dn пропорционально плотности потока рассеянных частиц j_{out}

$$dn = j_{out}\vec{r}^{\,2} d\Omega; \tag{4}$$

используя выражение для плотности тока вероятности

$$j(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*\right), \tag{5}$$

после некоторых вычислений для падающей (1) и рассеянной волны (2) из общего выражения (3) следует выражение для дифференциального сечения

$$d\sigma = \left| f\left(\vec{k}', \vec{k}\right) \right|^2 d\Omega. \tag{6}$$

Из соотношения (6) следует, что задача о вычислении сечения рассеяния сводится к поиску амплитуды рассеяния $f\left(\vec{k}', \vec{k}\right)$.

Метод функции Грина. В разделе кратко изложим метод функции Грина, который представляет собой один из универсальных методов решения дифференциальных уравнений в частных производных.

Пусть дифференциальное уравнение имеет вид

$$\hat{Q}\, f(x) = f_0(x), \tag{7}$$

где $\hat{Q}$ – линейный дифференциальный оператор; $f(x)$ – искомая функция; $f_0(x)$ – некоторая заданная функция. Каждой функции $g(x)$ соответствует свое решение. Такое соответствие можно представить в виде операторного соотношения

$$f(x) = \hat{L}\, f_0(x), \tag{8}$$

в котором $\hat{L}$ есть некоторый оператор, определяемый видом оператора $\hat{Q}$. Для решения поставленной задачи введем функцию $G(x, x')$, являющуюся решением уравнения

$$\hat{Q}\, G(x, x') = \delta(x - x'), \tag{9}$$

где $\delta(x - x')$ – дельта-функция Дирака. Функцию $G(x, x')$ называют функцией Грина [3], соответствующей задаче. С помощью $G(x, x')$ решение уравнения (7) может быть представлено в виде

$$f(x) = \int G(x, x') f_0(x')\, dx'. \tag{10}$$

Действительно, подействуем на соотношение (10) оператором $\hat{Q}$. Учитывая (9), получаем, что

$$\hat{Q}\, f(x) = \int \hat{Q} G(x, x') f_0(x')\, dx' = \int \delta(x - x') f_0(x')\, dx' = f_0(x). \tag{11}$$

Функция Грина свободной частицы. Свободная частица описывается уравнением Шредингера

$$\hat{H}_0\, \psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}) = E\, \psi^0_{\vec{k}}(\vec{r}), \tag{12}$$

где $\hat{H}_0$ – гамильтониан. Для свободной частицы гамильтониан представлен оператором кинетической энергии

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \tag{13}$$

Волновая функция, соответствующая выражению (12), определяется формулой (1).

В случае наличия оператора взаимодействия $\hat{V} = V(\vec{r})$ уравнение Шредингера принимает вид

$$\left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}). \tag{14}$$

Для простоты будем полагать, что взаимодействие исчезает на больших расстояниях от силового центра, т. е. $V(\vec{r} \to \infty) = 0.$ Перепишем (14) в виде

$$\left(\hat{H}_0 - E\right)\psi(\vec{r}) = -\hat{V}\,\psi(\vec{r}), \tag{15}$$

решение которого будем проводить методом функции Грина. Для этого перейдем от дифференциального уравнения Шредингера (15) к эквивалентному интегральному уравнению

$$\psi(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}} + \int G_0(E,\vec{r},\vec{r}')V(\vec{r}')\psi(\vec{r}')d\vec{r}', \tag{16}$$

где $G_0(E,\vec{r},\vec{r}')$ – функция Грина, соответствующая оператору $\hat{H}_0$ и удовлетворяющая уравнению

$$\left(E - \hat{H}_0\right)G_0(E,\vec{r},\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \tag{17}$$

с дельта-функцией Дирака $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ [2]. Легко убедиться, что если $G_0(E,\vec{r},\vec{r}')$ является функция Грина, соответствующая оператору $\hat{H}_0,$ то справедливо так называемое спектральное разложение, или спектральное представление функции Грина [1]:

$$G_0(E,\vec{r},\vec{r}') = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n^0(\vec{r})\psi^{*0}_{\;n}(\vec{r}')}{E_0 - E_n}, \tag{18}$$

которое в случае непрерывного спектра $\hat{H}_0$ определяется интегралом вида

$$G_0(E,\vec{r},\vec{r}') = \int \frac{\psi_\chi^0(\vec{r})\psi^{*0}_{\;\chi}(\vec{r}')}{E_0 - E_n}\frac{d\vec{\chi}}{(2\pi)^3}. \tag{19}$$

Выполняя несложные преобразования, связанные с интегрированием по направлениям вектора $\vec{\chi},$ получаем выражение

$$G_0(E,\vec{r},\vec{r}') = \frac{m}{2\pi^2\hbar^2}\frac{1}{i|\vec{r} - \vec{r}'|}\int \frac{\mathrm{e}^{i|\vec{\chi}||\vec{r}-\vec{r}'|}}{\dfrac{2mE_0}{\hbar^2} - |\vec{\chi}|^2}\frac{d\vec{\chi}}{(2\pi)^3}, \tag{20}$$

в котором было учтено, что $|\vec{k}| = \sqrt{2mE_0/\hbar^2}$.

Выражение (20) не определяет функции Грина однозначно. Рассмотрим два способа обхода полюсов: добавим к положительной вещественной величине E_0 малую добавку $\pm i\varepsilon$. Выражение для функции Грина обозначим индексами (+) или (–) соответственно

$$G_0^{(\pm)}(E,\vec{r},\vec{r}\,') = \lim_{\varepsilon\to 0} G_0(E \pm i\varepsilon,\vec{r},\vec{r}\,'), \quad (21)$$

которое с помощью техники вычетов [3] может быть приведено к следующему виду:

$$G_0^{(+)}(E,\vec{r},\vec{r}\,') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|},$$

$$G_0^{(-)}(E,\vec{r},\vec{r}\,') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{-i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}. \quad (22)$$

Случай расходящейся волны соответствует $G_0^{(+)}(E,\vec{r},\vec{r}\,')$; с учетом (20) приходим к

$$\psi(\vec{r}) = \mathrm{e}^{i\vec{k}\vec{r}} - \int \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{i|\vec{k}||\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} V(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')d\vec{r}\,', \quad (23)$$

откуда путем сравнения с общим выражением (16) получаем, что амплитуда рассеяния определяется функцией Грина (17) и явным видом оператора взаимодействия $\hat{V} = V(\vec{r})$.

Решение интегрального уравнения (23) даже в случае простейшего оператора $\hat{V} = V(\vec{r})$ проводят приближенно методом итераций, поэтому указанные расчеты в силу громоздких выражений в работе приводится не будут.

Таким образом, в работе получен явный вид функции Грина уравнения Шредингера. Полученные выражения могут быть использованы для решения задач рассеяния на кулоновском потенциале, а также для других часто используемых потенциалов в физических приложениях.

Литература

1. Ландау, Л. Д. Курс теоретической физики : в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 2008. – Т. 3. Квантовая механика. – 800 с.
2. Владимиров, В. С. Уравнения математической физики / В. С. Владимиров. – М. : Наука, 1967. – 436 с.
3. Лаврентьев, М. А. Методы теории функций комплексного переменного / М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. – М. : Наука, 1973. – 749 с.

ВОПРОСЫ ПРИМЕНЕНИЯ МАШИННОЙ ГРАФИКИ ПРИ РЕШЕНИИ ТЕХНИЧЕСКИХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ЗАДАЧ МАШИНОСТРОЕНИЯ

П. В. Асвинова

Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П. О. Сухого», Республика Беларусь

Научный руководитель О. А. Лапко

Программирование на языке графических образов становится неотъемлемой частью процесса решения технических и технологических задач, вместе с тем машинная графика – привычным занятием людей самых разных профессий.