Ćwiczenia 4
Zszywanie rozwiązań

Analiza IV

20 marca

[…], le vice le plus désespérant [est] celui de l'ignorance qui croit tout savoir et qui s'autorise alors à tuer.

1 Teoria

Na dzisiejszych zajęciach zajmować się będziemy następującym problemem – mamy równanie liniowe, które potrafimy rozwiązać w obszarach A i B. Pojawia się pytanie – jakie warunki należy nałożyć na rozwiązanie na brzegu $\partial A \cap \partial B$, aby otrzymać fizyczne rozwiązanie?

1.1 Równanie falowe

W pewnym przybliżeniu jednowymiarowe równanie falowe w płytkim akwenie o głębokości $h(x)$ można opisać za pomocą układu równań:

$$\begin{aligned} \zeta_t + (uh)_x &= 0 \\ u_t &= -g\zeta_x, \end{aligned} \tag{1}$$

na zmienne ζ i u opisujące pionowe wychylenie nad poziom morza oraz prędkość poziomą, odpowiednio. Jeżeli morze ma stałą głębokość $h(x) = h$, to powyższy układ jest równoważny równaniu falowemu. W ogólnym przypadku pojawią się dodatkowe wyrazy proporcjonalne do h_x. Załóżmy, że w punkcie x_0, funkcja h jest niegładka, ale lokalnie całkowalna (może np. mieć skok w wartości). Fizycznie spodziewamy się, że mimo to ζ będzie ciągła (przekonuje nas o tym dowolna obserwacja fal) oraz że strumień wody przepływającej uh musi być ciągły (w przeciwnym razie w punkcie x_0 gromadziłaby się woda, zakładamy, też że choć zbiornik jest płytki, to amplituda fali jest zaniedbywalnie mała w porównaniu z nim). Na potrzeby dalszej dyskusji zauważmy, że możemy zamiast tego przyjąć ciągłość $\zeta_x h$[1].

1.2 Równanie Schrödingera

Rozważać będziemy stacjonarne równanie Schrödingera postaci

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})\right]\Psi = E\Psi. \tag{2}$$

Dla prostoty ograniczymy się do jednego wymiaru, to znaczy $\Psi \in L^2(\mathbb{R})$. Jakiekolwiek warunki zszycia wprowadzimy, powinny wzbudzić one natychmiastowy niepokój poznawczy w Czytelniku_czce. Wszak $L^2(\mathbb{R})$ składa się nie z funkcji f, a z klas równoważności tychże $[f]$. Dla przypomnienia: $f' \in [f]$ wtedy i tylko wtedy, gdy zbiór $\{x \in \mathbb{R} : f(x) - f'(x) \neq 0\}$ jest miary zero. W takim razie, żądanie (dajmy na to) by Ψ było klasy C^1 wydaje się pozbawione sensu.
Należy rozumieć tego typu warunki (razem zresztą z samym równaniem (2)) następująco – zakładamy najpierw, że Ψ jest odpowiednio gładkie, aby można było w ogóle wypisać równanie Schrödingera i wyprowadzić z niego pewne warunki na brzegu, a następnie

[1] Czemu?

ograniczamy się jedynie do takich klas równoważności $[\Psi]$, dla których istnieje reprezentant $\Psi \in [\Psi]$ spełniający te warunki gładkości[2]. O $V(x)$ będziemy zakładać, że jest dystrybucją. Jeżeli jest to dystrybucja regularna, wówczas nasze rozumienie (2) się nie zmienia. W przeciwnym wypadku, należy rozumieć to jako równanie dystrybucyjne (mówiąc potocznie: zyskuje ono sens dopiero pod całką). To założenie może wydawać się nadmierną generalizacją, ale okazuje się, że w praktyce istotnie potencjały mogą mieć charakter dystrybucyjny.
Niech $x_0 \in \mathbb{R}$ będzie punktem, w którym V nie wybucha zbyt gwałtownie[3]. Całkując równanie (2) na odcinku $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ i biorąc granicę $\epsilon \to 0^+$ otrzymujemy

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi'(x_0) = \lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx\,(E\Psi(x) - V(x)\Psi(x)) = 0, \tag{3}$$

na mocy naszego założenia o naturze punktu x_0, jeżeli tylko Ψ jest ciągłe w x_0. Zatem widzimy, że naturalnym warunkiem zszycia w tym wypadku jest wzięcie ciągłości pierwszych pochodnych w x_0. Przypadek, gdy $V(x)$ zachowuje się jeszcze gorzej w x_0 zostanie omówiony w zadaniach.
Warto tu wspomnieć o jeszcze jednej subtelności. Często, zarówno tu jak i na kursie mechaniki kwantowej, szukać będziemy rozwiązań (2) w postaci fal płaskich. Wzbudza to na pewno gwałtowną reakcję wśród Czytelników_czek – wszak fale płaskie nie są elementami $L^2(\mathbb{R})$. Praktykę tę można legitymizować sobie dwojako. Po pierwsze, przyjąć, że w rzeczywistości cały układ zamknięty jest w bardzo dużym pudełku z narzuconymi odpowiednimi (dajmy na to: periodycznymi) warunkami brzegowymi na ściankach. Wówczas oczywiście pęd staje się również skwantowany, ale jeżeli L jest większe niż dowolna skala długości, która pojawia się w problemie, to fizycznie możemy to ignorować. Skoro jednak ograniczyliśmy zakres całkowania do skończonego (choć bardzo długiego) przedziału, to fale płaskie stają się całkowalne z kwadratem. Drugie (bardziej wyrafinowane) wyjaśnienie jest takie, że w rzeczywistości poszukujemy ciągłego spektrum hamiltonianu $\hat{H}$. Niezależnie od interpretacji, warunki zszycia jako warunki lokalne nie zależą od tego czy Ψ jest *bona fide* reprezentantem wektora z przestrzeni Hilberta czy nie.

2 Praktyka

2.1 Równanie falowe

Zadanie 1.1 *(fale w płytkim morzu)*
Rozważać będziemy równania (1).

(i) Proszę przepisać (1) jako jedno równanie drugiego rzędu na ζ i sprawdzić, że w przypadku stałej głębokości jest to równanie falowe. Z jaką prędkością przemieszcza się fala?

(ii) Dalej w przybliżeniu stałej głębokości, proszę znaleźć najogólniejsze rozwiązanie zakładając, ze mamy do czynienia z monochromatyczną falą $\zeta = \eta(x)e^{-i\omega t}$ oraz $u = U(x)e^{-i\omega t}$.[4]

(iii) Załóżmy teraz, że wysokość zmienia się skokowo:

$$h(x) = h_1 + (h_2 - h_1)\,\theta(x+a)\theta(a-x). \tag{4}$$

Proszę znaleźć ogólne rozwiązanie w każdym z obszarów i wypisać warunki zszycia pomiędzy nimi.

(iv) Proszę znaleźć rozwiązanie zakładając, że fala początkowo przesuwa się na lewo, do momentu gdy część przechodzi przez przeszkodę, a część się odbija.

2.2 Równanie Schrödingera

Zadanie 2.1 *(schodek potencjału)*
W tym zadaniu przećwiczymy w praktyce korzystanie z warunków zszycia dla równania Schrödingera. Niech

$$V(x) = V_0\theta(a-x)\theta(a+x). \tag{5}$$

[2] Dotykamy tu pewnych subtelnych kwestii związanych z tym, że operatory (np. hamiltonian) mają swoje dziedziny i związku z tym wyrażenie $\hat{H}\,|\Psi\rangle$ dla dowolnego $|\Psi\rangle$ po prostu sensu nie ma.

[3] Dokładniej: zakładamy, że V obcięte do pewnego otoczenia x_0 jest dystrybucją regularną

[4] Oczywiście,w rzeczywistości interesuje nas tylko część rzeczywista rozwiązania

(i) Szukamy najpierw rozwiązań związanych (tzn. całkowalnych z kwadratem). Proszę przy tym założeniu rozwiązać równanie (2) w obszarach $x < -a$, $-a < x < a$, $a < x$ i uzasadnić, że koniecznie $V_0 < 0$

(ii) Proszę zszyć otrzymane powyżej rozwiązania na granicy tych obszarów. Ile się otrzymuje rozwiązań?

(iii) Rozważmy ogólną studnię potencjału V z charakterystyczną głębokością $|V_0|$ i długością $2a$. Proszę oszacować ile będzie stanów związanych.

(iv) Teraz będziemy poszukiwać rozwiązań rozproszeniowych, już dla dowolnego V_0. Przyjmijmy, że funkcja falowa jest postaci

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= e^{ipx} + Re^{-ipx}, && \text{gdy } x < -a\\ \Psi(x) &= Te^{ipx}, && \text{gdy } x > a.\end{aligned}$$

Proszę uzupełnić ten ansatz o zachowanie wewnątrz schodka/studni. Jakiej sytuacji fizycznej on odpowiada?

(v) Proszę znaleźć ew. warunki kwantyzacji energii oraz T, R w funkcji tejże energii.

(vi) Proszę przedyskutować otrzymane wyniki w zależności od relacji między E i V_0.

Zadanie 2.2 *(potencjał typu delta)*
W tym zadaniu przekonamy się, co się stanie, gdy V jest bardziej osobliwe niż dotychczas zakładaliśmy. Istotnie, niech

$$V(x) = g\delta(x). \tag{6}$$

(i) Naśladując wyprowadzenie z Teorii, proszę wyprowadzić warunki zszycia w $x = 0$. Co się zmienia?

(ii) Używając tych warunków, proszę znaleźć wszystkie stany związane. Dla jakich g istnieją?

(iii) Czy liczba stanów związanych z poprzedniego podpunktu jest zaskakująca? Jak się ma do oszacowania z poprzedniego zadania?