1 Integralska formulacija Greenove funkcije

Od prej imamo Fredholmovo integralsko enačbo:

$$u(\vec{r}) = h(\vec{r}) + \lambda \int_{\mathcal{D}} G_0(\vec{r}, \vec{r_0}) V(\vec{r_0}) u(\vec{r_0})\, \mathrm{d}^3\vec{r_0}$$

Primer. Sskanje vezanih lastnih stanj v 1D ($E < 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)u = Eu$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \kappa^2\right) u = -\frac{2m}{\hbar} V(x) u, \qquad \kappa^2 = -\frac{2mE}{\hbar}$$

Dobili smo operator $\mathcal{L} = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \kappa^2$. Gre za Helmholtzov operator, za katerega smo napisali 2D in 3D Greenove funkcije. V 1D se zadeve lotimo tako, da poiščemo funkcijo, ki ima v nekem x_0 singularnost, drugje pa reši homogeno enačbo za deni operator. V tem primeru so rešitve homogene enačbe eksponentne funkcije, torej je

$$G_0(x, x_0) = -\frac{1}{2\kappa}\, e^{-\kappa|x-x_0|}$$

Tako najdemo tudi funkcijo h:

$$h = c_1 e^{-\kappa x} + c_2 e^{\kappa x}$$

Zaradi lastnosti rešitve $u(|x| \to \infty) = 0$ je $c_1 = c_2 = 0$. Tako dobimo pogoj, ki mu morajo zadoščati lastne funkcije u:

$$u(x) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{h}{\hbar^2\kappa}\, e^{-\kappa|x-x_0|} V(x_0) u(x_0)\, \mathrm{d}x_0$$

Opomba. Če je $V(x) \sim \delta(x)$, je lastna funcija ravno $\exp(-\kappa|x - x_0|)$ in imamo samo eno vezano stanje.

1.1 Sipalni problem

Primer. Sipanje v kvantni mehaniki, 3D. Imamo vpadni val $\exp(i\vec{k_0} \cdot \vec{r})$ na nek potencial $V(\vec{r})$.

$$(\nabla^2 + k_0^2) u = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) u(\vec{r})$$

Pri tem je $k_0^2 = 2mE/\hbar^2$. Za Helmholtzov problem v 3D imamo Greenovo funkcijo

$$G_0(\vec{r}, \vec{r_0}) = -\frac{e^{ikr_0}}{4\pi r}$$

Poiščimo še funkcijo h kot rešitev enačbe

$$\mathcal{L}h = 0$$

Ker moramo poskrbeti za robni pogoj v $r \to \infty$, izberemo kar vpadni val $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$. Rešitev mora torej izpolnjevati pogoj

$$u(\vec{r}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r} - \vec{r_0})}}{4\pi|\vec{r} - \vec{r_0}|} V(\vec{r_0}) u(\vec{r_0})\, \mathrm{d}^3\vec{r}$$

Tej enačbi se reče tudi Lippmann-Schwingerjeva enačba. Če je V šibek (oziroma $\lambda \ll 1$), lahko napišemo preturbacijsko vrsto za Fredholovo enačbo:

Ničti red:

$$u_0(\vec{r}) = h(\vec{r})$$

Prvi red:

$$u_1(\vec{r}) = \lambda \int G_0(\vec{r}, \vec{r_1}) V(\vec{r_1}) h(\vec{r_1})\, \mathrm{d}^3\vec{r_1}$$

Drugi red:

$$u_2(\overrightarrow{r}) = u_1(\overrightarrow{r}) + \lambda^2 \int G_0(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r_0}) G_0(\overrightarrow{r_1}, \overrightarrow{r_2}) V(\overrightarrow{r_1}) V(\overrightarrow{r_2})\, \mathrm{d}^3\overrightarrow{r_1}\, \mathrm{d}^3\overrightarrow{r_2}$$

Tretji red: (namesto h vstavimo u_1 in očedimo, kar se očediti da). Dobljeni vrsti pravimo tudi Neumannova ali Bornova vrsta.

Definiramo linearni operator

$$K_0(u) = \int_{\mathcal{D}} G_0(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r_0}) V(\overrightarrow{r_0}) u(\overrightarrow{r_0})\, \mathrm{d}^3\overrightarrow{r_0}$$

Tako lahko Friedholmovo enačbo predstavimo kot

$$u = h + \lambda K_0 u$$

$$(I - \lambda K_0)\, u = h$$

$$u = (1 - \lambda K_0)^{-1}\, h$$

Neumannova (Bornova) vrsta je nekakčen Taylorjev razvoj operatorja $(I - \lambda K_0)^{-1}$.

Opomba. Kakšen je konvergenčni radij take vrste? Je končen, obstaja pa tudi boljša vrsta, ki vedno konvergira, imenovana Firedholmova vrsta. Mi je ne bomo potrebovali.