Greens-funksjoner i fysikken

Karl Kristian Ladegård Lockert

28. september 2020

Abstract

I dette foredraget skal vi lære litt om Greens funksjoner og anvendelser i fysikken. Håper dette kan være en inspirasjon og kan, om ikke annet, gi en forsmak på spennende tema i forskjellige fag. De mest relevante emnene er

- MA1103 - Flerdimensjonal Analyse (Anbefalt forkunnskap)
- TMA4120 - Matematikk 4K (Fordelaktig å ha kjennskap til komplekse funksjoner)
- TFY4205 - Kvantemekanikk II (Smakebit)
- TFY4210 - Kvanteteorien for faste stoffer (Smakebit)

1 Innhold

Vi skal se på:

- En halvformell definisjon (i tilfelle det er matematikere til stede i rommet) + motivasjon
- Et eksempel: "Skjermet poisson-likning". Dette eksempelet er relevant for
  - Relativistisk kvantemekanikk gjennom Klein-Gordon likn.
  - Skjerming av $\vec{E}$-felt i plasma
  - Granulær flyt (strømning i porøse medier)
- Greens-funksjoner i kvantemekanikk + (om vi har tid: [1])
  - Relasjon til spreding (kollisjonsteori) gjennom Born-Approksimasjon
  - Relasjon til Feynman-diagrammer

2 Definisjon: Hva er en Greens-funksjon?

Definisjon 1 *En Greens-funksjon G assosiert til en lineæroperator $\mathcal{L}$ er systemets respons fra en enhetsimpuls hvor systemet er beskrevet av $\mathcal{L}$.*

[1] Det ble ikke tid

Eller sagt på en annen måte: En greens funksjon er svaret på spørsmålet

> "Hvordan reagerer systemet dersom vi gir det et spark?"

$\mathcal{L}$ beskriver et system som for eksempel kan være [2]

- $\nabla^2 - \frac{\partial^2}{\partial t^2}$: Bølgelikning / Klein-gordon likning for spin-0 partikler med vilkårlig ladning
- $\nabla^2 - \frac{\partial}{\partial t}$: Diffusjonslikning/ varmelikning / Schrödingerlikningen
- ∇^2 : Poissons likning. (F.eks Newtonsk gravitasjon og elektrostatikk)

En enhetsimpuls er typisk modellert som en Dirac-delta-fordeling $\delta(\vec{r} - \vec{r'})$. Matematisk blir da definisjonen av en Greens-funksjon da

$$\mathcal{L}G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$$

Hvorfor er denne definisjonen nyttig? Vi ønsker å løse problemer av typen

$$\mathcal{L}u(x) = f(x) \tag{1}$$

hvor $f(x)$ er kjent, og altså da finne en eksplisitt form (eventuelt en tilnærming) til $u(x)$. Formelt ønsker vi å løse et grenseverdiproblem

$$\begin{aligned} \mathcal{L}u &= f,\, x \in \Omega \\ u &= g,\, x \in \partial\Omega. \end{aligned} \tag{2}$$

Anta så at vi har funnet $G(x, y)$ slik at

$$\begin{aligned} \mathcal{L}G(x, y) &= \delta(x - y), \quad x \in \Omega \\ G(x, y) &= 0, \quad x \in \partial\Omega. \end{aligned} \tag{3}$$

Multiplisér så med en kilde $f(y)$ og integrer over hele Ω. På høyre side har vi

$$\int_\Omega \mathrm{d}y\, f(y)\delta(x - y) = f(x), \qquad x \in \Omega, \tag{4}$$

mens på venstre side har vi, ved å benytte oss av at $\mathcal{L}$ er en lineæroperator,

$$\int_\Omega \mathrm{d}y\, \mathcal{L}G(x, y)f(y) = \mathcal{L}\int_\Omega \mathrm{d}y\, G(x, y)f(y) = \mathcal{L}u(x). \tag{5}$$

hvor den siste likheten kommer fra unikhet i lineærtransformasjoner (høyre og venstre side skal være like, derfor ser vi at integralet nødvendigvis må være $u(x)$). Altså har vi $\mathcal{L}u(x) = f(x)$, akkurat som vi ønsket å finne i likning (1) [3]. Dersom vi har gitt $f(x)$, kan vi finne $u(x)$ ved

$$u(x) = \int\limits_0^\infty \mathrm{d}y\, G(x, y)f(y). \tag{6}$$

[2] NB: det er bare tilfeldig at ∇^2 er med i alle eksemplene av $\mathcal{L}$ her.

[3] Strengt tatt er det flere ledd her som dukker opp fra grensebetingelser og slikt, men de bryr vi oss ikke om...

Tolkning

Så hva kan vi si fra dette? Siden det opprinnelige målet er å finne en løsning for $u(x)$, ser vi fra likningen over at man summerer alle bidrag fra en kilde og integrerer dets bidrag, modulert med en respons, over hele rommet. $G(x, y)$ er en slags formidler av signaler fra koordinat y til x.

> For en **kilde** f, vil løsningen (u(x)) av et system styrt av $\mathcal{L}$, være bestemt av hvordan systemet **responderer** til f i punkt y, summert over alle y i rommet.

Du tar med andre ord signalstyrken i punkt y, ser hvordan dette **propagerer**[4] til punkt x, og legger til dette i en sum. Så presist jeg får det: $u(x)$ er systemets (beskrevet av $\mathcal{L}$) **respons** i punktet x fra impulser i alle punkter y, med styrke $f(y)$.

Konklusjon

Dersom man har funnet $G(x, y)$ assosiert til en lineæroperator $\mathcal{L}$ har man **vunnet**. Da kan man sette inn en **vilkårlig** kilde $f(x)$ og integrere for å finnee løsningen av en **inhomogen** difflikning.

3 Eksempel: Skjermet Poissons-likning i $d = 3$

Dette er et veldig typisk eksempel, fordi det brukes veldig mange steder. Eksempel på bruk er Klein-Gordon likningen for spinløse partikler, elektrostatisk skjerming, og granulær flyt. Vi starter med å skrive ned likningen

$$(\nabla^2 - \lambda^2)u(\boldsymbol{r}) = -f(\boldsymbol{r}) \implies (\nabla^2 - \lambda^2)G(\boldsymbol{r}) = -\delta(\boldsymbol{r}) \tag{7}$$

La oss anta at løsningen på problemet tilfredsstiller $u(\boldsymbol{r}), u'(\boldsymbol{r}) \longrightarrow 0$ når $|\boldsymbol{r}| \longrightarrow \infty$. Problemet ser fortsatt ikke helt enkelt ut, så hva kan vi prøve? Da tyr vi til en fysikers første leveregel og beste triks:

> Når du er usikker på hvor du kan gå videre, prøv en fourier transform.

3.1 Fourier-rom

Dirac-delta kan uttrykkes i fourierkomponenter som

$$\delta(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3k \, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{8}$$

Tilsvarende ser vi etter en fourier-representasjon av $G(\boldsymbol{r})$,

$$G(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3k \, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} G(\boldsymbol{k}). \tag{9}$$

[4] Nei, det er ikke tilfeldig at man snakker mye om propagatorer i diverse feltteorier – det er essensielt den samme størrelsen man ser på!

Merk at det nå er $G(\boldsymbol{k})$ som er den ukjente – har vi funnet den er det bare en invers fourier transform for å finne $G(\boldsymbol{r})$. Vi setter inn disse representasjonene i likning (7) og får

$$\frac{\nabla^2 - \lambda^2}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 k \, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} G(\boldsymbol{k}) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 k \, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{10}$$

Vi flytter nå gradienten inn i integralet på venstre side. Dette kan vi gjøre ettersom integralet omhandler k.

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 k \, ((ik)^2 - \lambda^2) \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} G(\boldsymbol{k}) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 k \, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{11}$$

Ettersom denne summen av planbølger er lik, bør helst amplituden for hver frekvens være lik også, og vi får derfor at

$$G(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{k^2 + \lambda^2}, \tag{12}$$

og videre at

$$G(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathrm{d}^3 k \, \frac{\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{k^2 + \lambda^2} \tag{13}$$

Har vi vunnet nå? Nei, ikke helt. Vi kan faktisk løse dette integralet.

3.2 Sidespor til kompleksanalyse

Vi velger først å innføre sfæriske koordinater for $\boldsymbol{k}$. Vi velger helt fritt hvilken orientering dette koordinatsystemet skal ha, og velger velger en basis hvor den tredje k_z ligger langs z-aksen. Med dette får vi

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} = |k||r| \cos\theta, \tag{14}$$

samt at differensialen er uttrykt ved

$$\mathrm{d}^3 k = \mathrm{d}\varphi \, \mathrm{d}(\cos\theta) \, k^2 \, \mathrm{d}k \tag{15}$$

$$\begin{aligned} G(r) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \int_{-1}^{1} \mathrm{d}(\cos\theta) \int_0^{\infty} \mathrm{d}k \, k^2 \frac{\mathrm{e}^{ikr\cos\theta}}{k^2 + \lambda^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \mathrm{d}k \, \frac{k^2}{ikr} \frac{\mathrm{e}^{ikr} - \mathrm{e}^{-ikr}}{k^2 + \lambda^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{ir} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, k \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{k^2 + \lambda^2}. \end{aligned} \tag{16}$$

Her har vi gjort flere ting: φ-integralet bidrar kun med en faktor 2π, mens når man integrerer $\cos\theta$ må man huske variabelbytte og man får med en ekstra faktor $\frac{1}{ikr}$.

Dette er et integral med to "simple" poler i det komplekse plan gitt ved

$$k^2 + \lambda^2 = (k + i\lambda)(k - i\lambda). \tag{17}$$

Altså, for $\text{Im}\{k\} = \pm\lambda$ må vi være ekstra forsiktige. "Men vent, går ikke bare integralet over den reelle aksen?", spør du. Jo det stemmer det, men trikset vi skal bruke for å kommer oss videre involverer å integrere over den reelle tallinjen, pluss en halvsirkel som slutter denne "randen". Ideen er altså å bruke Cauchys residyteorem

$$\int_{\mathcal{C}} \mathrm{d}z\, f(z) = 2\pi i \sum_{z^*} \text{Res}[f(z^*)] \tag{18}$$

hvor $\mathcal{C}$ er den lukkede halvsirkelen, og z^* er poler i $f(z^*)$ innenfor $\mathcal{C}$ [5]. Håpet er at integralet for hele denne halvmånen skal konvergere, og at integralet langs halvsirkelen skal bli null når dens radius strekkes til uendelig. Problemet nå er at vi ikke vet om vi skal lage en halvsirkel i det øvre eller nedre (komplekse) halvplan.

Den enkleste måten å velge øvre eller nedre halvsirkel på er å prøve seg frem. La oss velge nedre halvplan. Da har vi at langs denne er $\text{Im}\{k\} < 0$. Setter vi inn dette i likning (16), ser vi at

$$\mathrm{e}^{ikr} = \mathrm{e}^{i\,\text{Re}\{k\}r}\mathrm{e}^{i\cdot i\,\text{Im}\{k\}r} \tag{19}$$

Her støter vi på et problem; $i^2\,\text{Im}\{k\} = -\,\text{Im}\{k\} > 0$, som vil si at eksponensialen vil blåse opp når vi lar $|k| \to \infty$. Integralet vil derfor ikke være definert, og vi må forkaste dette.

Vi velger derfor det øvre halvplan. Her er $\text{Im}\{k\} > 0$ og vi får tilsvarende $\mathrm{e}^{-\,\text{Im}\{k\}r}$ – men dennen gangen er dette bare en dempende faktor. Faktisk er den såppas dempende at når $|k| \to \infty$ vil hele dette integralet gå mot null! [6]

Okei, la oss se hva Cauchys teorem gir oss. Vi har èn pol i det øvre halvplan, og den ligger i $k = i\lambda$. Vi skal finne residyen til en funksjon på formen

$$f(z) = \frac{z\mathrm{e}^{izr}}{z^2 + \lambda^2}, \tag{20}$$

og finnes ved

$$\begin{aligned} \text{Res}[f(i\lambda] &= \lim_{z\to i\lambda}(z - i\lambda)f(z) && (21)\\ &= \lim_{z\to i\lambda}\frac{z\mathrm{e}^{izr}}{z + i\lambda} && (22)\\ &= \frac{i\lambda\mathrm{e}^{-\lambda r}}{2i\lambda} = \frac{1}{2}\mathrm{e}^{-\lambda r} && (23) \end{aligned}$$

Dermed er integralet over hele halvsirkelen $\pi i\mathrm{e}^{-\lambda r}$. Siden vi netopp har argumentert for at den åpne halvsirkelen gir null bidrag, må alt komme fra integralet langs den reelle tallinjen. Perfekt!

La oss sette inn dette resulatet i likning (16), og vi oppnår

$$G(r) = \frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\lambda r}}{r}. \tag{24}$$

Dette er det såkalte "Yukawa-potensialet" og beskriver en slags elektromagnetisme, bare at fotonet har en effektiv masse λ! Nå er vi i mål med dette eksempelet, og når noen forbipasserende

[5] Om du ikke ved hva residyen er, så kan det lettest forstås her som et tall som sier noe om hvordan funksjonen blåser opp. Det er selvsagt mye mer teori å fylle på, men tenk bare på det som en slags vekt i et punkt.

[6] Om dette hadde vært en 4K-eksamen hadde man kanskje måttet vise eksplisitt at det blir null.

på gata spør deg “hei du, hva er løsningen på likningen

$$(\nabla^2 - \lambda^2)u(\boldsymbol{r}) = -f(\boldsymbol{r}) \tag{25}$$

for en generell funksjon $f(\boldsymbol{r})$ i tre dimensjoner?”, kan du med stolheten i behold svare kort og godt: “Jo men det er jo bare

$$u(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}^3r' \, \frac{\mathrm{e}^{-\lambda|r-r'|}}{|r-r'|} f(\boldsymbol{r}') \tag{26}$$

også løse den når du vet hva f er”.

4 Kort om Green’s funksjoner i kvantefysikk

4.1 Born-approksimasjon og spredning

I ikke-relativistisk kvantemekanik styres dynamikken, og derfor energien, av Hamilton-operatoren gjennom Schrödinger-likningen

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right)\Psi = 0 \tag{27}$$

Om vi legger til en liten perturbasjon[7] gjennom f.eks en ny interaksjon eller eksternt potensial, kan vi skrive dette som

$$\hat{H} \to \hat{H}_0 + \hat{V}(x), \tag{28}$$

og den perturberte Schrödinger likningen tar form

$$\underbrace{\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}_0\right)}_{\mathcal{L}}\Psi = \underbrace{\hat{V}(x)\Psi}_{\text{“kilde”}}, \tag{29}$$

som vi skriver på kjent form

$$\mathcal{L}\Psi = U(x). \tag{30}$$

Mer her at vi har brukt den faktiske løsningen av likningen i definisjonen av kilden, og ikke kan komme spesielt langt direkte. Det vi kan gjøre, derimot, er å sette opp en iterativ metode ala Max Born.

Vi starter med en Hamilton-operator

$$\hat{H} = -\frac{\nabla^2}{2m} + V(x). \tag{31}$$

Likning likning (30) gir da [8]

$$\left(E + \frac{\nabla^2}{2m}\right)\Psi = V(x)\Psi \tag{32}$$

som vi skriver om til

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\Psi = U(x)\Psi, \tag{33}$$

[7] en liten endring, forstyrrelse

[8] Ettersom det er et tidsuavhengig perturbasjon er tidsutviklingen $\Psi(x,t) = \mathrm{e}^{-iEt}\Psi(x)$

med $U(x) = 2mV(x)$ og $k^2 \equiv 2mE$. Merk at dette er nøyaktig det samme problemet som vi løste i eksempelet i stad! Det er her vi må gjøre noe forskjellig og ty til iterative løsninger, igjen fordi vi ikke aner hvordan Ψ skal see ut! La oss si vi ønsker å studere hvordan potensialet $V(x)$ kommer til å spre en innkommende kollimert elektronstråle $\varphi = \mathrm{e}^{iqx}$, med impuls q. Startpunktet vårt vil da være å si at det ikke har skjedd noen spredning $\psi_0 = \varphi = \mathrm{e}^{iqr}$. Videre setter vi da opp (husk tilbake til likning (6))

$$\psi_1(x) = \varphi - \int_0^\infty \mathrm{d}x'\, G(x,x')\underbrace{U(x')\psi_0(x')}_{\text{“Kilde”}} \tag{34}$$

$$\psi_2(x) = \varphi - \int_0^\infty \mathrm{d}x'\, G(x,x')U(x')\psi_1(x') \tag{35}$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(x) = \varphi - \int_0^\infty \mathrm{d}x'\, G(x,x')U(x')\psi_{n-1}(x') \tag{36}$$

og man kan få mer og mer nøyaktig svar på hvoran denne elektronstrålen vil spre seg.

4.2 "Annen kvantisering" - Okkupasjonsrepresentasjon

Nå noe helt annet innen kvantefysikk, nemlig interaksjon mellom mange partikleri et system. Dette blir veldig overfladisk så ikke stol på meg [9] Et system av N partikler kan skrives som en (Slater)determinant av èn-partikkel tilstander. Vi ønsker kjapt å lage noen operatorer som virker på denne totale N-partikkel bølgefunksjonen. Disse operatorene har i oppgave å øke eller redusere antallet partikler i en èn-partikkel-tilstand. Vi skriver disse

- $c_\mu^\dagger$: lager en partikkel i tilstand μ.
- c_ν: sletter en partikkel i tilstand ν.

(μ, ν) er sett av kvantetall, typisk $(r, n, l, m, \sigma, k, etc.)$.

I denne formalismen ønsker man å se på responsen til systemet, men selv om det finnes en korrespondanse fra det vi har sett tidligere til dette, er det ikke lett å se. Vi definerer (to-punkts) Green's funksjonen i dette systemet til å være

$$G(\mu, t; \nu, t') \equiv i\langle \mathcal{T}\{c_\mu(t)c_\nu^\dagger(t')\}\rangle, \tag{37}$$

hvor $\mathcal{T}$ er en tids-ordnings-operator. Denne definisjonen sier essensielt

> “Gitt at vi lager (dvs skyter inn) en partikkel i tilstand ν ved tidspunkt t', hva er sannsynligheten for at det forlater (blir emittert) en partikkel i tilstand μ ved tidspunkt t? ”

Å regne ut slike sannsynligheter er ofte ikke enkelt. Bare sannsynligheten av en tilfeldig observabel ser litt skremmende ut

$$\langle A\rangle = \frac{\sum_n \langle\psi_n|A|\psi_n\rangle}{\sum_n \langle\psi_n|\psi_n\rangle}. \tag{38}$$

[9] Meld deg heller opp til TFY4210, det er gøy!