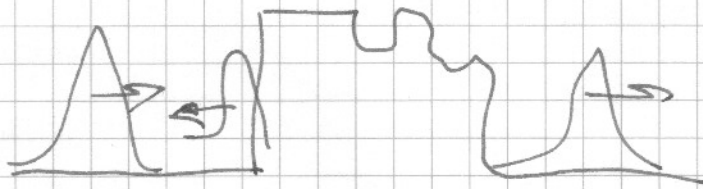


ROZWIĄZANIA PROBLEMÓW KWANTOWO-MECHANICZNYCH ZALEŻNYCH OD CZASU (c.d.)



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

przedstawienie położeniowe

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

$$\hat{V} = V(x)$$

przedstawienie pędowe

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} p^2$$

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

Dla $\hat{H}$ niezależnego od czasu

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t - t_0)} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t} = u(\delta t)$$

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t (\hat{T} + \hat{V})} \cong$$

$$\cong e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\hat{T}}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{V}} e^{-\frac{i}{\hbar} \delta t \frac{\hat{T}}{2}} + \mathcal{O}(\delta t^3)$$

$$|\psi(t + \delta)\rangle \cong u^T\left(\frac{\delta}{2}\right) u^V(\delta) u^T\left(\frac{\delta}{2}\right) |\psi(t)\rangle$$



$$|\psi(t+\delta)\rangle = u^T(\frac{\delta}{2}) u^V(\delta) u^T(\frac{\delta}{2}) |\psi(t)\rangle$$

① Działanie $u^T u$ na $|\psi(t)\rangle \equiv |\psi_1\rangle$

$$u^T(\frac{\delta}{2}) |\psi(t)\rangle =$$

$$= \int d^3p u^T(\frac{\delta}{2}) |p\rangle \underbrace{\langle p | \psi(t) \rangle}_{\psi_p(t)}$$

$\psi_p(t)$ - funkcja falowa w przedstawieniu pędowym

$$u^T(\frac{\delta}{2}) = \exp\left\{-\frac{i}{2\hbar} \frac{\hat{p}^2}{2m} \delta\right\} \quad \hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$$

$$u^T(\frac{\delta}{2}) |p\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{2\hbar} \frac{p^2}{2m} \delta\right\} |p\rangle =: u_p^T(\frac{\delta}{2}) |p\rangle$$

$:= u_p^T(\frac{\delta}{2})$ to jest liczba nie operator

$$|\psi_1\rangle = \int d^3p |p\rangle u_p^T(\frac{\delta}{2}) \psi_p(t) = \int d^3p |p\rangle \psi_{p1}$$

② $|\psi_2\rangle = u^V(\delta) |\psi_1\rangle = \int d^3x u^V(\delta) |x\rangle \langle x | \psi_1 \rangle =$

$$= \int d^3x u^V(\delta) |x\rangle \underbrace{\int d^3p \langle x | p \rangle \psi_{p1}}_{\psi_1(\vec{x})} =$$

$$= \int d^3x |x\rangle u_x^V(\delta) \psi_1(\vec{x})$$

$\psi_1(\vec{x}) = \mathcal{F}(\psi_1(\vec{p}))$
 $\langle x | p \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{x}}$

$$|\psi_2\rangle = \int d^3x |x\rangle u_x^V(\delta) \psi_1(x) = \int d^3x |x\rangle \psi_2(x)$$

③ $|\psi_3\rangle = |\psi(t+\delta)\rangle = u^T(\frac{\delta}{2}) |\psi_2\rangle =$

$$= \int d^3p u^T(\frac{\delta}{2}) |p\rangle \langle p | \psi_2 \rangle =$$

$$= \int d^3p u_p^T(\frac{\delta}{2}) |p\rangle \mathcal{F}^{-1}(\psi_2(x)) =$$

$$= \int d^3p |p\rangle \psi_3(p, t+\delta)$$

$\mathcal{F}$ - transformata Fouriera
 $\mathcal{F}^{-1}$ - odwrotna transformata Fouriera



$$\begin{aligned}
 \psi(x, t+\delta) &\equiv \langle x | \psi_3 \rangle = \\
 &= \int d^3p \langle x | p \rangle u_p^T\left(\frac{\delta}{2}\right) \mathcal{F}^{-1}(\psi_2(x)) = \\
 &= \mathcal{F}\left(u_p^T\left(\frac{\delta}{2}\right) \mathcal{F}^{-1}(\psi_2(x))\right)
 \end{aligned}$$

Algorytm

- 1) zadajemy $\psi(x, t)$
- 2) liczymy transformatę Fouriera $\rightarrow \psi(p, t)$
- 3) liczymy $\psi_1(p) = u_p^T\left(\frac{\delta}{2}\right) \psi(p, t)$
- 4) liczymy transformację Fouriera $\psi_1(x) = \mathcal{F}(\psi_1(p))$
- 5) liczymy $\psi_2(x) = u_x^V(\delta) \psi_1(x)$
- 6) odwrotna transformata Fouriera $\psi_2(p) = \mathcal{F}^{-1}(\psi_2(x))$
- 7) liczymy $\psi_3(p) = u_p^T\left(\frac{\delta}{2}\right) \psi_2(p)$

Jeżeli potrzebujemy $\psi(x, t+\delta) \rightarrow \text{OUTPUT}$

$$8) \text{ to } \psi(x, t+\delta) = \mathcal{F}(\psi_3(p))$$

Jeżeli liczymy dalej to

$$9) \text{ GO TO } 3) \quad \text{z } \psi(p, t) = \psi_3(p)$$

Powtórz punkty 3) - 8) żeby obliczyć
 $\psi(x, t+\delta+\delta)$

it.d.

WAŻNE $\rightarrow$ EFEKTYWNY SPOSÓB PRZEPROWADZANIA
 TRANSFORMATY FOURIERA.



TRANSFORMATA FOURIERA

$$H(f) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{2\pi i f t} dt$$

$$h(t) = \int_{-\infty}^{\infty} H(f) e^{-2\pi i f t} df$$

Jeżeli t ma wymiar czasu
to f (częstość) jest w cyklach na sekundę

$$\omega = 2\pi f$$

$$H(\omega) \equiv H(f) \Big|_{f = \frac{\omega}{2\pi}}$$

$$H(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{i\omega t} dt$$

$$h(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} H(\omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

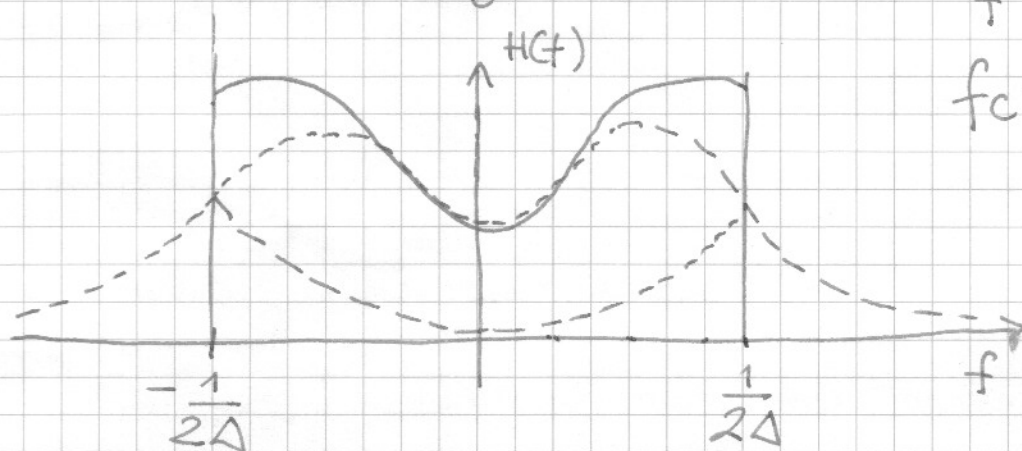
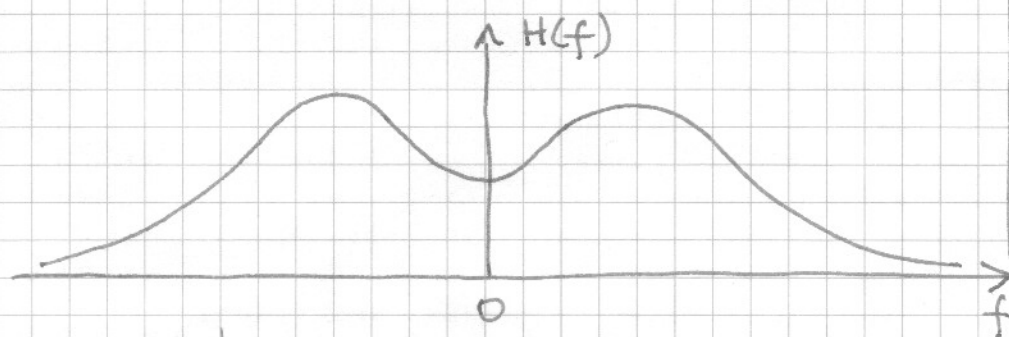
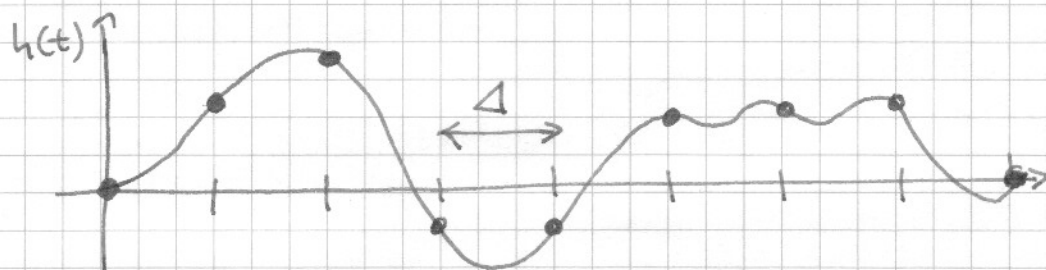
$$(h(t) \Leftrightarrow H(f))$$

Dyskretna transformata Fouriera

Załóżmy, że znamy $h(t)$ w N dyskretnych punktach

$$h_k \equiv h(t_k) \quad t_k = k\Delta \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

→ N liczb stanowiących INPUT



"Numerical Recipes
The Art of
Scientific
Computing"

W. H. Press
S. A. Teukolsky
W. T. Vetterling
B. P. Flannery

Cambridge
University
Press

pp. 605-639

f_c - krytyczna
częstość
Nyquista

$$f_c = \frac{1}{2\Delta}$$



$$-f_c < f < f_c$$

- Jeżeli próbujemy funkcję $h(t)$ z przedziałem Δ , to jej transformata Fouriera jest znana tylko dla częstotści f z przedziału $[-f_c, f_c]$
- Jeżeli znamy funkcję w N punktach to także transformatę Fouriera możemy policzyć w N punktach.
- Obliczamy więc, transformatę w dyskretnych punktach częstotści

$$\Delta f_n \equiv \frac{1}{N\Delta}$$

$$n = -\frac{N}{2}, \dots, \frac{N}{2}$$

UWAGA: n przyjmuje $N+1$ wartości, ale transformaty Fouriera dla $n = -\frac{N}{2}$ i $\frac{N}{2}$ nie są od siebie niezależne

$$\begin{aligned} H(f_n) &= \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{2\pi i f_n t} dt \approx \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i f_n t_k} \Delta = \\ &= \Delta \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i k n / N} \end{aligned}$$

$$H_n \equiv \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i k n / N}$$

Dyskretna transformata Fouriera

$$H(f_n) \equiv \Delta H_n$$

Odwrotna dyskretna transformata Fouriera pozwala na otrzymywanie zbioru $\{h_k\}$ ze zbioru $\{H_n\}$

$$h_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} H_n e^{-2\pi i k n / N}$$

Dyskretne twierdzenie Parsevala

$$\sum_{k=0}^{N-1} |h_k|^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} |H_n|^2$$



dyskretną

9-6

Jeżeli wykonujemy transformatę Fouriera to potrzebujemy N^2 operacji.

Imy duży N jest to kosztowne (tzw. zużycie dużo CPU time)

Do ~~lat~~ połowy lat 1960, to była ~~jedyną~~ jedyna możliwość.

W połowie lat 1960 znaleziono algorytm, który pozwala na wykonanie transformaty Fouriera dyskretną

w $N \log_2 N$ krokach

tzw. Fast Fourier Transform (FFT)

* J.W. Cooley & J.W. Tukey

* Danielson & Lanczos

Brigham, E.O., 1974 "The Fast Fourier Transform" (Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall)

$$\begin{aligned} F_k &= \sum_{j=0}^{N-1} e^{2\pi i j k / N} f_j = \\ &= \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi i k (2j) / N} f_{2j} + \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi i k (2j+1) / N} f_{2j+1} \\ &= \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi i k j (N/2)} f_{2j} + W^k \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi i k j (N/2)} f_{2j+1} \\ &= F_k^e + W^k F_k^o \end{aligned}$$

W^k - liczba zespolona

F_k^e - transformata Fouriera otrzymana z $\frac{N}{2}$ 'parzystych' punktów z dyskretyzacji $h(t)$

F_k^o - otrzymana z $\frac{N}{2}$ 'nieparzystych' punktów

Formuła Danielsona-Lanczosa może być stosowana rekurencyjnie $\Rightarrow$ FFT

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H(x,t) \psi(x,t)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi(t+\Delta t) - \psi(t)}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi(t+\Delta t) - \psi(t-\Delta t)}{2\Delta t}$$

$$\psi(t+\Delta t) = -\frac{i}{\hbar} \Delta t H \psi(t) + \psi(t)$$

$$\bar{\psi}(t) = \begin{bmatrix} \psi(x_1, t) \\ \psi(x_2, t) \\ \vdots \\ \psi(x_{N-1}, t) \\ \psi(x_N, t) \end{bmatrix}$$

$$\bar{\psi}(t+\Delta t) = -\frac{i}{\hbar} \Delta t \bar{H} \bar{\psi}(t) + \bar{\psi}(t)$$

Metoda Runge-Kutta

równanie różniczkowe

$$\dot{x} = f(x, t)$$

gdzie x może być np. wektorem $\bar{\psi}$

wtedy $f(x, t)$ jest równe

$$\bar{\psi}(t+\Delta t) = \bar{\psi}(t) +$$

$$f(x, t) = -\frac{i}{\hbar} \bar{H} \bar{\psi}(t)$$

$$+ \frac{\Delta t}{6} [f(\bar{y}_1, \tau_1) + 2f(\bar{y}_2, \tau_2) + 2f(\bar{y}_3, \tau_3) + f(\bar{y}_4, \tau_4)]$$

gdzie

$$\bar{y}_1 = \bar{\psi}(t) \quad \tau_1 = t$$

$$\bar{y}_2 = \bar{\psi}(t) + \frac{\Delta t}{2} f(\bar{y}_1, \tau_1); \quad \tau_2 = t + \frac{\Delta t}{2}$$

$$\bar{y}_3 = \bar{\psi}(t) + \frac{\Delta t}{2} f(\bar{y}_2, \tau_2); \quad \tau_3 = t + \frac{\Delta t}{2}$$

$$\bar{y}_4 = \bar{\psi}(t) + f(\bar{y}_3, \tau_3) \Delta t; \quad \tau_4 = t + \Delta t$$

