بسم الله الرحمن الرحیم

Q. Wave Packet (FFT)

معادله شرودینگر معادله دیفرانسیلی - دینامیکی است که می‌خواهد اطلاعاتی درخصوص دینامیک و تحولات سیستم‌های کوانتومی به دست دهد. شکل این معادله درصورتی که وابستگی زمانی داشته باشد به صورت زیر است:

$$1D \rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)$$

حل این معادله به صورت زیر است:

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\psi(x,0)$$

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

یکانی بودن عملگر تحول یعنی $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ باعث می‌شود که احتمال پایسته باشد البته لازم است که دینامیک تحولات حقیقی به دست آوریم یعنی:

$$\left(e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\right)^{\dagger} = \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\right)^{-1} \Longrightarrow \int |\psi(x,t)|^2\,dx = \int |\psi(x,0)|^2\,dx$$

این معادله درباره دلخواه $a \leqslant x \leqslant b$ با وجود شرایط اولیه $\psi_{ini} = \psi(x,t_0)$ دارای جواب یکتا unique است. به طور کلی شرایط مرزی به صورت زیر است:

① first type: $\quad C\psi(x,t) + C'\psi'(x,t) = 0 \quad$ for $x = a, b$

② Second type: $\quad K\psi(b,t) + \psi'(b,t) = 0$

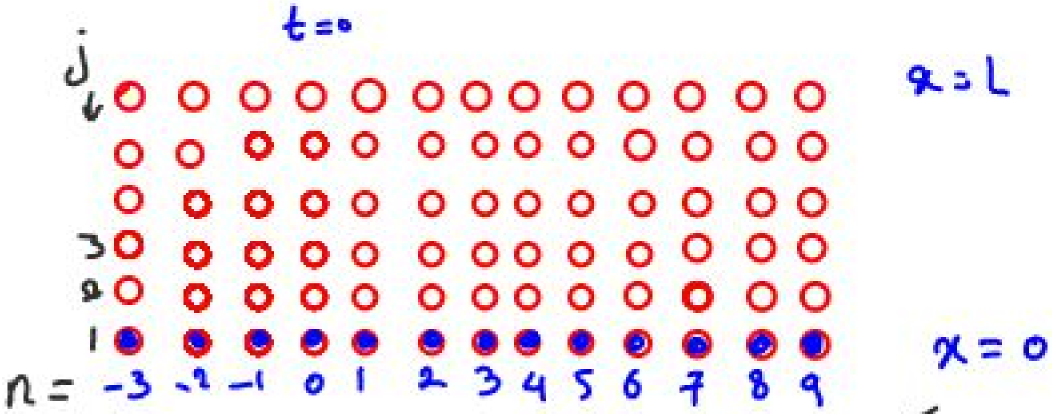
$$K = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$$

③ Third type: Periodic Boundary Condition

$$\psi(a,t) = \psi(b,t)$$

در اینجا می‌خواهیم از روش گسسته‌سازی و تبدیل فوریه مسئله را دنبال کنیم:

Discretizing the Schrodinger Equation



همانطور که در شکل بالا مشاهده می‌شود باید گسسته سازی کرد:

$$0\leqslant x\leqslant L \longrightarrow h\equiv \Delta x=\frac{L}{N} \qquad \tau=\Delta t \quad \Rightarrow \begin{cases} x_j=hj \\ j=0,\dots,N \\ t_n=n\tau \end{cases}$$

پس تابع موج در (x_j,t_n) ψ به صورت $\psi_j^n(x_j,t_n)$ است.

همچنین پتانسیل به صورت $V_j\equiv V(x_j)$

Time Evolution (FT)

اکنون که شرایط مرزی را مشخص کردیم آماده‌ایم که به صورت گسسته معادله را حل کنیم پس

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi\equiv(\mathcal{T}+\mathcal{V})\psi$$

$\mathcal{T}$: Differential operator

$\mathcal{V}$: Multiplicative operator

} in Position space

با توجه به تبدیل فوریه $x\longrightarrow p$ خواهیم داشت:

$$\tilde{\psi}(p,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}dx\,\exp\left(-i\frac{px}{\hbar}\right)\psi(x,t)$$

پس در فضای فوریه داریم:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int e^{+i\frac{px}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,t)\,dt=-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\int e^{+i\frac{px}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,t)\,dt$$

$$+\int \tilde{V}(q)\, e^{\frac{iqx}{\hbar}}\, dq \int \tilde{\psi}(p)\, e^{ipx/\hbar}\, dp\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

یعنی:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(p,t) = \frac{p^2}{2m}\tilde{\psi}(p,t) + \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(p-q)\,\tilde{\psi}(q)\,dq$$

همانطور که ملاحظه می‌شود در فضای اندازه حرکت T یک عملگر ضربی است در حالی که پتانسیل عملگر ضربی نیست.

قبلاً دیدیم که حل معادله به صورت:

$$\psi(x,t) = e^{-i(T+V)\frac{(t-t_0)}{\hbar}}\ \psi(x,t_0)$$

$$\psi(x,t+\tau) = e^{-i(T+V)\frac{\tau}{\hbar}}\ \psi(x,t)$$

با توجه به عبارت:

$$e^{A}e^{B} = e^{C}$$

$$C = A + B + \tfrac{1}{2}[A,B] + \cdots$$

پس

$$e^{-i\frac{(T+V)}{\hbar}\tau} \simeq e^{-i\frac{T\tau}{\hbar}}\ e^{-i\frac{V\tau}{\hbar}}$$

یا

$$= e^{-iV\tau/2\hbar}\ e^{-i\frac{T\tau}{\hbar}}\ e^{-i\frac{V\tau}{2\hbar}}$$

اکنون آماده‌ایم شروع کنیم یعنی:

Initial value

① $\psi(x,t) \rightarrow \psi'(x) = e^{\frac{iV\tau}{2\hbar}}\ \psi(x,t)$

② $\tilde{\psi}'(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\ e^{\frac{-ipx}{\hbar}}\ \psi'(x)$

③ $\tilde{\psi}'(p) \rightarrow \tilde{\psi}''(p) = e^{-\frac{ip^2\tau}{2m\hbar}}\ \tilde{\psi}'(p)$

④ $\psi''(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\ e^{+\frac{ipx}{\hbar}}\ \tilde{\psi}''(p)$

(5) $$\psi(x,t+\tau) = e^{-\frac{iV(x)\tau}{2\hbar}}\,\psi''(x)$$

پس برای هر τ در طول زمان جلو می‌رویم تا به t_n برسیم. البته در حالت گسسته توجه کنید که

$$-\infty < x < +\infty \longrightarrow 0 < x < L \,, \quad x_j = j\frac{L}{N} = jh \,, \quad j = 0, \ldots, N-1$$

$$-\infty < p < +\infty \longrightarrow -\frac{N}{2}\frac{2\pi\hbar}{L} < p < \frac{N}{2}\frac{2\pi\hbar}{L} \,, \quad p_k = \frac{2\pi\hbar}{L}k \,, \quad k = 0, \pm 1, \ldots, \pm N/2$$

شرط تناوبی داریم

$$e^{\frac{ipL}{\hbar}} = 1$$

$$\psi(0,t) = \psi(L,t)$$

Exercise: $$\psi(x,0) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^{1/4} e^{ik_0 x - \frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}}$$

فقط یک نکته درخصوص FT و FFT اضافه کنم:

جدول ↓