

articles/2012/03/alcatel-lucent-makes-400-gbps-play.html. 11. Чернихівський Є.М. Математичне моделювання телекомунікаційних систем та мереж : навч. посібник / Є.М. Чернихівський. – Львів : Вид-во Львівської політехніки, 2011. – 272 с.

УДК 530.145

В.М. Фітьо

Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра фотоніки

ЗАСТОСУВАННЯ ПЕРЕТВОРЕННЯ ФУР’Є ДЛЯ РОЗВ’ЯЗАННЯ ОДНОВИМІРНОГО РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА

© Фітьо В.М., 2012

V.M. Fitio

APPLYING FOURIER TRANSFORMATION FOR SOLUTION OF THE ONE-DIMENSIONAL SCHRÖDINGER EQUATION

© Fitio V.M., 2012

Розроблено числовий метод розв’язання стаціонарного одновимірного рівняння Шредінгера. Метод ґрунтується на перетворенні Фур’є хвильового рівняння. Внаслідок чого отримуємо інтегральне рівняння, в якому інтеграл замінюємо підсумовуванням. Остаточно отримуємо задачу лінійної алгебри на власні числа та власні вектори, які відповідають дискретним рівням енергії та Фур’є-образам хвильових функцій. За допомогою зворотного Фур’є-перетворення отримуємо хвильову функцію. Для одновимірного скінченного кристала дискретні рівні енергії розщеплюються і формують заборонені та дозволені зони. Метод перевірений на багатьох прикладах і характеризується високою точністю пошуку дискретних рівнів енергії.

Ключові слова: перетворення Фур’є, рівняння Шредінгера, згортка, рівні енергії.

Developed a numerical method of solution of the one-dimensional steady Schrödinger equation. This method is based on Fourier transformation of the wave equation. As a result, we obtain integral equation, in which we replace integral with summation. Finally we get the problem of linear algebra on eigenvalues and eigenvectors that correspond to discrete energy levels and the Fourier transform of wave functions. Using inverse Fourier transformation we get wave function. For one-dimensional finite crystal discrete energy levels are split and form band gaps and allowed zones. This method was tested on many examples and is characterized by precision search of discrete energy levels.

Key words: Fourier transformation, Schrödinger equation, convolution, energy levels.

Вступ

Навіть останнім часом тривають пошуки розв’язків одновимірного стаціонарного рівняння Шредінгера, причому стараються сформулювати потенціальну енергію так, щоб відповідне рівняння можна точно розв’язати аналітично [1,2,3]. Проте існує невелика кількість функціональних залежностей потенціальної енергії, коли можна отримати аналітичний розв’язок [4]. Існує

аналогічна проблема визначення постійних поширення хвильоводних мод у градієнтних планарних хвильоводів [5,6]. Хвильове рівняння для планарних хвильоводів за своєю структурою ідентичне одновимірному стаціонарному рівнянню Шредінгера. Відомий числовий метод пошуку постійних поширення хвильоводних мод [5] ґрунтується на заміні другої похідної у хвильовому рівнянні різницеvim оператором. Але цей метод не забезпечує високої точності, оскільки числове диференціювання є джерелом шумів внаслідок заокруглень у числовому процесі. Для пошуку постійних поширення планарних градієнтних хвильоводів запропоновано ефективний метод [7], який ґрунтується на перетворенні Фур'є хвильового рівняння. У випадку локалізованих мод перетворення Фур'є цілком допустимо застосувати, оскільки самі хвильові функції та їх перші похідні прямуєть у нескінченності до нуля. Внаслідок перетворення Фур'є ми від диференціального рівняння переходимо до інтегрального, в якому інтеграл представлений у вигляді згортки Фур'є-образів двох функцій. Замінивши інтегрування підсумовуванням, остаточно переходимо до задачі вищої алгебри на власні числа та власні вектори. Власні числа дорівнюють квадрату постійних поширення, а власні вектори є дискретними фур'є-образами полів відповідних хвильоводних мод. Цей метод забезпечує високу точність пошуку постійних поширення хвильоводних мод та відповідних полів. Отже, задача розв'язку хвильового рівняння для градієнтних планарних хвильоводів повинна бути ідентичною задачі розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера, що полягає у знаходженні дискретних рівнів енергії та відповідних хвильових функцій. Отже, можна очікувати, що метод, описаний у роботі [7], буде ефективний для розв'язання рівняння Шредінгера.

Одномірне хвильову рівняння Шредінгера та його Фур'є-образ

Одномірне стаціонарне рівняння Шредінгера має вигляд:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (1)$$

Доволі часто в квантовій механіці використовують знерозмірене рівняння [4], яке отримують шляхом заміни змінних. Зрозмірене рівняння (1) буде виглядати так:

$$-\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (2)$$

Функції $\psi(x)$, як розв'язок стаціонарного рівняння Шредінгера, і які відповідають дискретним рівням енергії, та їх перші похідні прямуєть до нуля, якщо $x \rightarrow \pm\infty$. Отже, для цих функцій, їх перших та других похідних існує перетворення Фур'є. Напишемо відповідні співвідношення для $\psi(x)$. Отже, Фур'є-образи $\psi(x)$, першої та другої похідних $\psi(x)$ дорівнюють:

$$\psi(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \exp(-i2\pi ux) dx, \quad (3)$$

$$i2\pi u \psi(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi(x)}{dx} \exp(-i2\pi ux) dx, \quad (4)$$

$$-(2\pi u)^2 \psi(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \exp(-i2\pi ux) dx. \quad (5)$$

Крім цього для функцій, відносно яких існує перетворення Фур'є, тобто $F\{g(x)\} = G(u)$, $F\{h(x)\} = H(u)$, справедливо ще таке співвідношення:

$$F\{g(x)h(x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} G(u-v)H(v) dv, \quad (6)$$

де $F\{\dots\}$ позначено перетворення Фур'є. Вираз (6) виражає зміст теореми згортки.

Здійсимо перетворення Фур'є правих і лівих частин рівнянь (2), використовуючи (3), (5) та (6), внаслідок цього отримаємо:

$$4\pi^2 u^2 \psi(u) + \int_{-\infty}^{\infty} U(u-v) \psi(v) dv = E \psi(u). \quad (9)$$

Отже від диференціального рівняння (2) на власні функції та власні числа ми перейшли до інтегрального (9). В цьому останньому рівнянні ми можемо інтеграл замінити сумою, а неперервні u і v замінити на дискретні змінні, внаслідок отримаємо:

$$4\pi^2 (s\Delta)^2 \psi(s\Delta) + \sum_{p=-(N-1)/2}^{(N-1)/2} U(s\Delta - p\Delta) \psi(p\Delta) \Delta = E \psi(s\Delta), \quad (10)$$

де $\Delta = u_{\max} / N$, $u_s = s\Delta$, $v_p = p\Delta$, $-(N-1)/2 \leq s, p \leq (N-1)/2$, s, p – цілі числа.

u_{\max} потрібно взяти таким, що на частотах $|u| \geq u_{\max} / 2$ значення $\psi(u)$ практично дорівнювали нулю, також N повинно бути достатньо великим і зручніше непарним. Очевидно, що сума в (10) має N доданків.

Напишемо останнє рівняння для всіх дискретних просторових частот $u_s = s\Delta$, причому s міняється від $-(N-1)/2$ до $(N-1)/2$, тоді сукупність цих рівнянь у кількості N можна записати у вигляді матричного рівняння, причому E є спільною для всіх s :

$$(\mathbf{P} + \mathbf{U}) \Psi = E \Psi, \quad (11).$$

де \mathbf{P} – діагональна матриця, елементи якої рівні $4(\pi s\Delta)^2$, \mathbf{U} – квадратна симетрична матриця, елементи якої рівні $U(s\Delta - p\Delta) \Delta$, Ψ – вектор-стовпець, елементи якого дорівнюють $\psi(s\Delta)$.

Отже, в решті-решт задача звелася до задачі на власні числа (енергія) та власні вектори (дискретний Фур'є-образ $\psi(x)$), що відповідає заданому значенню енергії. Ми можемо мати декілька власних значень та відповідних власних векторів. Здійснивши обернене дискретне Фур'є-перетворення власного вектора, отримуємо власну функцію $\psi(x)$. Для квантово-механічних задач всі власні числа (дискретні рівні енергії) лежать у межах потенціальної ями. Якщо ми маємо потенціальну яму скінченної глибини, то точність визначається N і Δ . Якщо потенціальна енергія міняється від нуля до нескінченності (наприклад $U = x^2$), то в цьому методі ми змушені обмежувати потенціальну енергію, тобто до певного значення вона проходить як $U(x)$, а далі приймає постійне значення. Очевидно, що в цьому випадку ми можемо визначити найточніше найнижчі рівні енергії. В наших числових розрахунках, результати яких наведені нижче, ми використали найпростіший спосіб заміни інтегрування на підсумовування, що спричинило необхідність проводити обчислення при великих значеннях N , щоб забезпечити високу точність. Можливо, якщо ми застосуємо точніші методи заміни інтегрування підсумовуванням, наприклад правило Сімпсона чи правило Уеддла [8], то можемо зменшити N для досягнення тієї самої точності, а разом з тим і тривалість розрахунку, або за того самого N істотно підвищити точність.

Приклади числового розв'язання одномірного рівняння Шредінгера

Приклад 1. Рівняння Шредінгера згідно з виразом (2), для якого $U = \begin{cases} x^2, & |x| \leq a, \\ a^2, & |x| > a = 7. \end{cases}$ Параметри

числового процесу рівні: $N = 1001$, $u_{\max} = 8.0$. Внаслідок числового розрахунку отримано 25 власних значень енергії. З них 13 (найнижчі рівні енергії) отримані з високою точністю і, відповідно, дорівнюють: $E_0 = 1.00000000025, \dots$ $E_6 = 13.00000000025, \dots$ $E_{12} = 24.999999971$, що збігається з

даними [4], де $E_n = 2n + 1$. На рис. 1б наведено хвильові функції для трьох найнижчих значень енергії. Бачимо добре накладання точок на неперервні криві.

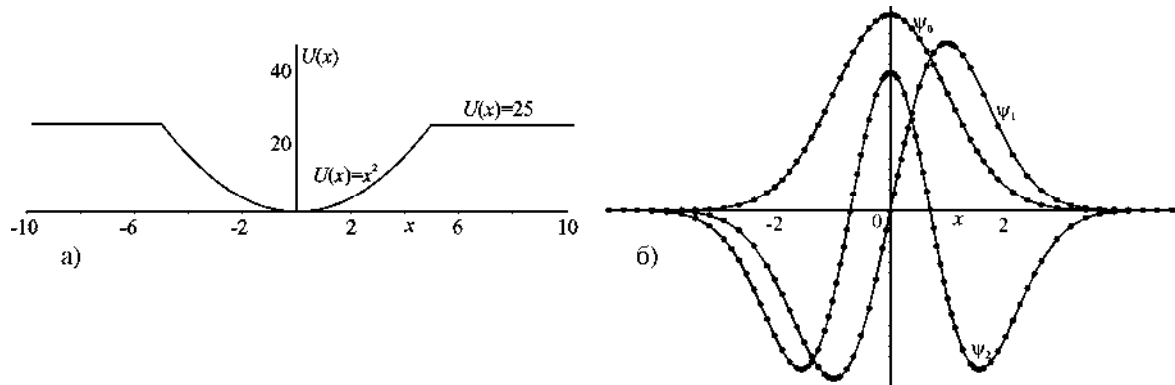


Рис. 1. Модифікована потенціальна енергія гармонічного осцилятора – а); хвильові функції трьох найнижчих рівнів енергії, неперервні криві відповідають точним хвильовим функціям, а точки – результатам розрахунку розробленим методом – б)

Приклад 2. Рівняння Шредінгера згідно з виразом (2), для якого $U = \begin{cases} |x|, & |x| \leq a, \\ a, & |x| > a = 16. \end{cases}$

Параметри числового процесу: $N = 501$, $u_{\max} = 5.01$. При таких даних серед найменших 11 власних значень є такі: $E_0 = 1.01879311, \dots, E_5 = 5.52055983, \dots, E_{10} = 8.48848676$. Ця задача розв'язується аналітично точно [4], причому відповідні точні значення: $E_0 = 1.01879297, \dots, E_5 = 5.52055983, \dots, E_{10} = 8.48848673$. Бачимо добрий збіг даних, отриманих пропонуваним та точним аналітичним методами.

Приклад 3. Рівняння Шредінгера згідно з виразом (2), для якого $U = \begin{cases} x^4, & |x| \leq a, \\ a^4, & |x| > a = 3. \end{cases}$

Параметри числового процесу: $N = 1001$, $u_{\max} = 25$. За таких даних знайдено найменших 11 власних значень E_n , серед яких є: $E_0 = 1.0603646, \dots, E_5 = 21.238375, \dots, E_{10} = 50.256257$. Ця квантова задача аналітично точно не розв'язується, тому наближеними методами визначено значення найнижчого рівня енергії, яке дорівнює: $E_0 \approx 1.156194$ [4]. Тобто наближене значення знайдено з доволі великою похибкою. Цю задачу також можна розв'язати числовим різницеvim методом [5], але він дає розв'язки з нижчою точністю: $E_0 = 1.0603593, \dots, E_5 = 21.237897, \dots, E_{10} = 50.253695$.

Числове моделювання одновимірного кристалу

Одновимірний кристал побудований на основі періодичного розміщення потенціальних ям, які для прикладу описуються такою аналітичною функцією:

$$U(x) = a - a \exp(-\pi x^2), \quad (12)$$

де a – деяке позитивне число, що визначає глибину потенціальної ями.

Фур'є-образ цієї функції:

$$F\{U(x)\} = a\delta(u) - a \exp(-\pi u^2). \quad (13)$$

Якщо нас буде періодично розміщених N_1 (N_1 – непарне) потенціальних ям на відстані L одна від одної, то будемо мати одновимірний кристал, потенціальна енергія, якого буде описуватися виразом:

$$U(x)_{kr} = a - a \sum_{n=(N_1-1)/2}^{(N_1-1)/2} \exp[-\pi(x-n\Lambda)^2] . \quad (14)$$

Після нескладних математичних перетворень отримаємо Фур'є-образ функції (14):

$$F\{U(x)_{kr}\} = a\delta(u) - a \exp(-\pi u^2) \frac{\sin[\pi N_1 \Lambda u]}{\sin(\pi \Lambda u)} . \quad (15)$$

На рис. 2 наведені другі доданки правих частин виразів (13) і (15), взятих із знаком "+", причому відповідний доданок виразу (13) помножений на N_1 . Якщо $N_1 \rightarrow \infty$, то ширина піків кривої 2 прямує до нуля, а їх висота прямує до нескінченності згідно з виразом $aN_1 \exp(-\pi u^2)$.

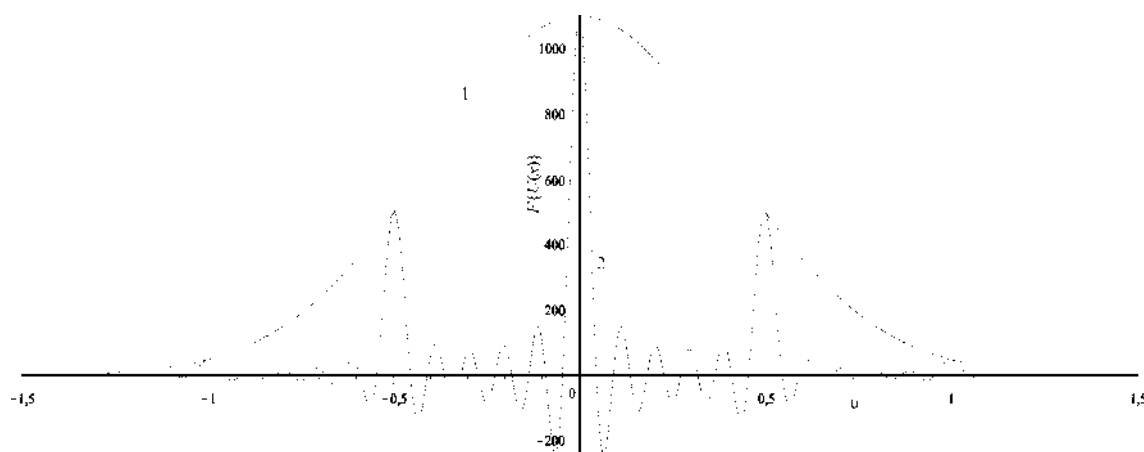


Рис. 2. Фур'є-образи (без дельта-функцій) потенціальної енергії ізолюваної ями (крива 1) та одновимірного кристала (крива 2) при таких параметрах: $a = 100$, $N_1 = 11$, $\Lambda = 2$.

Для потенціальної енергії згідно з виразом (12) при параметрах числового процесу $N = 1001$ і $u_{\max} = 10 \div 20$ знайдено п'ять рівнів енергії ($a = 100$):

$$E_0 = 16.539595, E_1 = 47.036248, E_2 = 72.011285, E_3 = 90.446940, E_4 = 99.832730.$$

Якщо маємо одновимірний кристал з 11 потенціальними ямами ($N_1 = 11$) відповідно до виразу (14), то перші чотири рівні розщеплюються на 11 підрівнів і утворюють дозволені зони, проте рівень E_4 розщеплюється лише на два підрівні: $E_{40} = 99.041696$ і $E_{41} = 99.551008$. Ширини дозволених зон зростають із збільшенням енергії. Числовий аналіз одновимірного кристала проводився при таких параметрах: $N = 1001$, $u_{\max} = 25$, $\Lambda = 2$.

На рис. 3 наведені потенціальні енергії та рівні енергії для ізолюваної потенціальної ями та одновимірного кристала.

Масштаб для рис. 3а і 3б по вертикалі однаковий, початок координат для обох рисунків суміщений. Найнижчий рівень розщеплюється найменше, причому $E_{00} = 16.533261$, $E_{010} = 16.536713$. Рівень E_3 розщеплюється найсильніше: $E_{30} = 87.157709$, $E_{310} = 93.704412$.

У табл. 1 та 2 наведено залежність розрахованих рівнів енергії E_{00} і E_{010} залежно від параметрів числового процесу u_{\max} та N . У цих таблицях жирним шрифтом відзначені цифри, що є незмінними при зміні N та u_{\max} . Для $N = 1001$ при зміні u_{\max} від 7.5 до 40 перших шість десяткових розрядів E_{00} та E_{010} після крапки є постійними. Для $u_{\max} = 20$ при зміні N від 501 до 1501 перших шість десяткових розрядів також є постійними. Якщо врахувати, що E_{00} та E_{010}

відрізняються в третьому десятковому розряді після крапки, то можна стверджувати, що найнижчий рівень розщеплюється на 11 підрівнів за числом потенціальних ям одновимірного кристала.

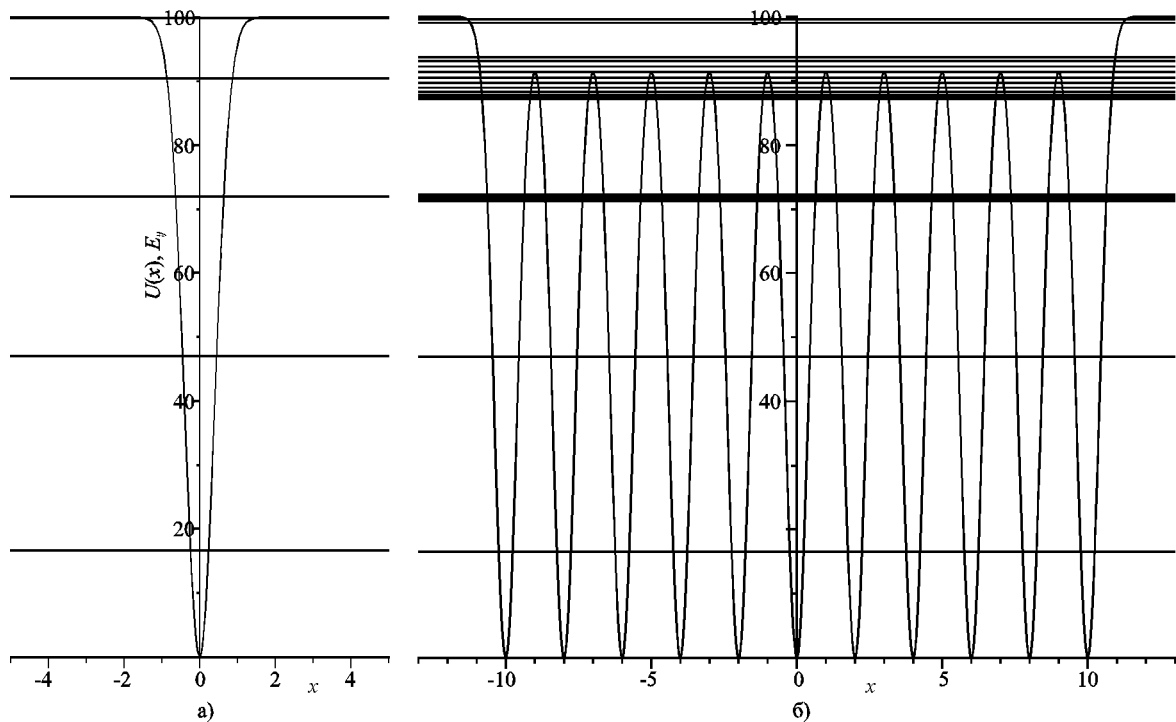


Рис. 3. Залежність потенціальної енергії від координати та рівні енергії (горизонтальні прямі): а – ізольована яма; б – одновимірний кристал

Таблиця 1

Залежність розрахованих значень рівнів енергії від u_{\max} при $N = 1001$.

u_{\max}	5	7.5	10	15	20	25	40	45
E_{00}	16.53351417	16.53326096	16.53326057	16.53326014	16.53326061	16.53326060	16.53326060	16.53326073
E_{010}	16.53684865	16.53671385	16.53671325	16.53671298	16.53671323	16.53671333	16.53671320	16.53326060

Таблиця 2

Залежність розрахованих значень рівнів енергії від $N = 1001$ при $u_{\max} = 20$.

N	451	501	601	701	801	1001	1201	1501
E_{00}	16.53326057	16.53326057	16.53326059	16.53326057	16.53326053	16.53326061	16.53326064	16.53326057
E_{010}	16.53671013	16.53671333	16.53671335	16.53671333	16.53671330	16.53671323	16.53671341	16.53671334

Можна допустити, що найнижчий рівень розщеплюється найменше, тому що на цьому рівні енергії бар'єр між сусідніми ямами за шириною є найбільшим.

Висновки

Розроблено новий числовий метод розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера, який ґрунтується на перетворенні Фур'є. Внаслідок чого отримуємо інтегральне рівняння. Остаточо

замінивши інтеграл сумою, та написавши відповідне рівняння для набору дискретних частот, отримаємо задачу вищої алгебри на власні числа та власні вектори, де власні числа рівні дискретним рівням енергії, а власні вектори – дискретним фур'є-образам хвильових функцій. Здійснивши обернене перетворення Фур'є над власним вектором, отримаємо хвильову функцію в координатній області. Метод перевірений на багатьох прикладах і показав високу точність визначення дискретних рівнів енергії. Завдяки високій точності визначення дискретних рівнів енергії, а також відповідних хвильових функцій, його можна використати для перевірки різноманітних аналітичних методів розв'язку стаціонарного рівняння Шредінгера.

Знайдено дискретні рівні енергії для одновимірного кристала, що містить 11 періодично розміщених потенціальних ям. Показано, що у разі утворення одновимірного кристалу дискретні рівні розщеплюються і утворюють дозволені зони, а кратність розщеплення дорівнює кількості ям, що формують одновимірний кристал. Енергетична ширина дозволеної зони розширюється за збільшення енергії відповідного дискретного рівня ізольованої потенціальної ями. Цей висновок узгоджується з даними [8].

1. Caticha A. Construction of exactly soluble double-well potentials // *PHYSICAL REVIEW A*.—V.51, No 5.—1995.—p.4264 – 4267. 2. Dutra A.S. Conditionally exactly soluble class quantum potentials // *PHYSICAL REVIEW A*.—V.47, No 4.—1993.—p.R2435 – R.2437. 3. Tkachuk V. M., Fityo T. V. Multidimensional quasi-exactly solvable potentials with two known eigenstates // *Phys. Lett. A*.— 2003. — V. 309, Iss. 5–6.— P. 351–356. 4. Вакарчук О.І. Квантова механіка, видання друге. – Львівський національний університет імені Івана Франка – Львів 2004. – 784 с. 5. Ржанов А.Г., Григас С.Э. Алгоритм численного расчета волноводных и вытекающих мод многослойных оптических волноводов // *ЖТФ*.— Т.80, вып. 11.— 2010.— С. 67–72. 6. Dietrich Marcuse, *Light Transmission Optics*.—Van Nostrand Reinhold Company.— New York 1972. – 520 p. 7. Фітьо В.М., Ромах В.В., Бобицький Я.В. Локалізовані моди градієнтних планарних хвилеводів. Аналогії в квантовій механіці // *Збірник наукових праць “Електроніка та інформаційні технології”*, вип.1.— 2011.— С.134–141. 8. Корн Г., Корн Т. *Справочник по математике для научных работников и инженеров: Пер. с англ.* - М.: Наука, 1974. – 832 с. 8. Киттель Ч. *Введение в физику твердого тела: Пер. с англ.* - М.: Наука, 1988. – 792 с.