

Janne Heikkinen

**Schrödingerin yhtälön ratkaiseminen
keskeisdifferenssimenetelmällä**

Tietotekniikan kandidaatintutkielma

19. lokakuuta 2020

Jyväskylän yliopisto

Informaatioteknologian tiedekunta

Tekijä: Janne Heikkinen

Yhteystiedot: japeheik@student.jyu.fi

Työn nimi: Schrödingerin yhtälön ratkaiseminen keskeisdifferenssimenetelmillä

Title in English: Solving Schrödinger's equation with finite-difference time-domain methods

Työ: Kandidaatintutkielma

Sivumäärä: 19+0

Tiivistelmä: Tutkielmassa käydään läpi miten Schrödingerin aaltoyhtälö voidaan ratkaista numeerisesti. Käydään kaksi eri menetelmää, keskeisdifferenssimenetelmä, sekä yleistetty keskeisdifferenssimenetelmä. Menetelmille käydään läpi miten aaltoyhtälö voidaan diskretoida, määritellään absorptiorajat, sekä stabiilisuusehdot. Molemmilla menetelmillä saadaan pieni virhe ja pidettyä ratkaisu stabiilisenä, mutta kirjallisuudesta löytyy mahdollisesti parempia menetelmiä eri tilanteisiin.

Avainsanat: keskeisdifferenssimenetelmä, yleistetty keskeisdifferenssimenetelmä, Absorptiorajat

Abstract: In this Bachelor's thesis we go through how you can solve Schrödinger's equation numerically. We go through two methods, finite-difference time-domain method and generalized finite-difference time-domain method. We go through how to discretize Schrödinger's equation, define absorbing boundary conditions and stability conditions. Both methods can achieve low error and stable results but there are potentially better methods depending on the circumstances.

Keywords: finite-difference time-domain method, generalized finite-difference time-domain method, fdtd, absorbing boundary conditions

Sisältö

1	JOHDANTO	1
2	MATEMAATTINEN MALLI	2
	2.1 Yksiulotteinen Schrödingerin yhtälö	2
	2.2 Absorptioreunaehtojen matemaattinen tausta	3
3	DISKRETOINTI	6
	3.1 Absorptioreunaehdot keskeisdifferenssimenetelmällä	7
	3.2 Absorptioreunaehdot yleistetyllä keskeisdifferenssimenetelmällä	7
4	STABIILISUUS	10
	4.1 Stabiilisuus keskeisdifferenssi menetelmällä	10
	4.2 Stabiilisuus yleistetyllä keskeisdifferenssimenetelmällä	11
5	MENETELMIEN VERTAILUA	13
6	YHTEENVETO	14
	LÄHTEET	15

1 Johdanto

Heisenberg toi kvanttimekaniikan esille vuonna 1925. Vuotta myöhemmin Erwin Schrödinger esitteli kehittämänsä aaltomekaniikan (TSAPARLIS 2001). Aaltomekaniikan yhtälö on perustavanlaatuisen kvanttimekaniikassa, kuten esimerkiksi Newtonin lait klassisessa mekaniikassa. Schrödingerin yhtälöä ei ole voitu johtaa tai todistaa, mutta sen on todettu pätevän kokeellisesti. Schrödingerin yhtälö on paljon käytetty esimerkiksi kemiassa, jossa tutkitaan esimerkiksi atomeita ja molekyyliä. Kane Yee julkaisi vuonna 1966 tutkimuksen, jossa käsitellään elektrodynamiikassa Maxwellin yhtälön diskretointia ajan ja paikan suhteen (Taflove 2007). Tämä tutkimus toimii perustana keskeisdifferenssimenetelmälle, jota on käytetty esimerkiksi rintasyövän aikaisessa tunnistuksessa rintakudosta tutkimalla. Kun käsitellään nanoluokan mittakaavassa olevia systeemejä, kuten virtapiirejä tai kvanttitietokoneita, klassisella mekaniikalla ei saadaa hyödyllistä tietoa systeemistä. (Goldberg, Schey ja Schwartz 1967) julkaisivat keskeisdifferenssialgoritmin Schrödingerin yhtälölle, jolla on mallinnettu esimerkiksi kvanttipisteitä (quantum dots) ja kvanttiporttien aikakehitystä (quantum logic gates) (Nagel 2009). Keskeisdifferenssimenetelmään voidaan lisätä absorptioreunaehdot, joilla voidaan vähentää laskenta-alueilla olevilla keinotekoisilla rajoilla tapahtuvia heijastuksia, jolloin laskenta-alue voidaan pienentää (Shibata 1991). Luvussa 2 käsitellään aluksi yksiulotteisen Schrödingerin yhtälön matemaattinen perusta, jota tarvitaan yhtälön diskretoimiseen. Tämän jälkeen siirrytään tutkimaan absorptiorajojen muodostamiseen tarvittavaa matematiikkaa. Luvussa 3 käsitellään keskeisdifferenssimenetelmää kahdella eri tavalla. Aluksi käydään Schrödingerin yhtälön diskretointiin käytettyä perinteistä keskeisdifferenssimenetelmää, josta siirrytään sille tarvittavien absorptioreunaehtojes diskretointiin. Tämän jälkeen käydään läpi yleistetyn keskeisdifferenssimenetelmän absorptioreunaehtojes diskretointi, jonka jälkeen käydään Schrödingerin yhtälön diskretointi yleistetyllä keskeisdifferenssimenetelmällä. Luvussa 4 käydään keskeisdifferenssimenetelmään stabiilisuuteen tarvittavat ehdot, jonka jälkeen ehdot käydään läpi myös yleistetylle menetelmälle. Luvussa 5 käydään läpi keskeisdifferenssimenetelmillä saadut tulokset, jonka jälkeen menetelmiä verrataan muihin kirjallisuudessa löytyviin menetelmiin. Luvussa 6 käydään läpi tutkielman keskeiset menetelmät ja niillä saadut tulokset.

2 Matemaattinen malli

2.1 Yksiulotteinen Schrödingerin yhtälö

De-Broglie muotoili vuonna 1924 hypoteesin, että jokaisella liikkuvalla hiukkasella on aaltominaisuuksia, kuten esimerkiksi elektronilla ja protonilla (Broglie 1924). Erwin Schrödinger muodosti tämän hypoteesin pohjalta toisen asteen differentiaaliyhtälön

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right) \Psi(x,t), \quad (2.1)$$

jonka avulla voidaan selittää hiukkasen ja aineen aaltoluonnetta. Tämän yhtälön avulla voidaan selvittää tietyn suuruisen energian omaavan hiukkasen aaltofunktio Ψ , jonka ratkaisun jälkeen tiedetään kaikki tiedot tai tuntemattomat tiedot voidaan johtaa sen avulla. Ottamalla aaltofunktiosta itseisarvo ja neliöimällä se saadaan hiukkasen esiintymistodennäköisyys tietyllä alueella tietyllä ajanhetkellä. Energia riippuu hiukkasen potentiaalista, sekä sen reunaehtoista, jotka voivat olla jatkuvia tai kvantittuneita (BARDE ym. 2015). Schrödingerin yhtälössä potentiaali U on matkan x ja efektiivisen massan m funktiona ja $\hbar = h/2\pi$, jossa h on Planckin vakio.

Schrödingerin yhtälö yksiulotteisena vastaa harmonisen oskillaattorin mallia. Harmonisten oskillaattoreiden avulla voidaan käsitellä fysiikassa värähtelyyn liittyviä ongelmia, koska oskillaattorin potentiaalilla voidaan värehdyspektri, jossa kaikki spektrin pisteet ovat yhtä kaukana edellisestä ja seuraavasta pisteestä. Oskillaattoripotentiaali toimii myös hyvänä approksimaationa mille tahansa potentiaalille, jossa ollaan kiinnostuneita alhaisista viritystiloista lokaalien tai globaalien minimien lähistöllä. Harmonisen oskillaattoripotentiaalilla voidaan myös kvantti-ilmiöitä käsitellessä kuvata hiukkasen luonnetta hiukkasena sekä aaltona (Herrmann 2018).

Schrödingerin yhtälö jaetaan reaaliseen ja imaginääriseen osaan, jotta voidaan välttää imaginääriluvuilla laskeminen. Jako kahteen osaan saadaan sijoittamalla yhtälöön (2.1)

$$\Psi(x,t) = \Psi_{\text{reaali}}(x,t) + i\Psi_{\text{imag}}(x,t). \quad (2.2)$$

Näin saadaan Schrödingerin yhtälölle reaalin osa

$$\frac{\partial \Psi_{\text{reaali}}(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_{\text{imag}}(x,t)}{\partial x^2} + \frac{U(x,t)}{\hbar} \Psi(x,t) \quad (2.3)$$

ja imaginäärinen osa

$$\frac{\partial \Psi_{\text{imag}}(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_{\text{reaali}}(x,t)}{\partial x^2} - \frac{U(x,t)}{\hbar} \Psi(x,t). \quad (2.4)$$

Schrödingerin yhtälön reaali- ja imaginääriosien oletetaan olevan sileä, jolloin funktioiden jokaiset derivaatat ovat jatkuvia funktion rajaamilla alueilla (Moxley, Zhu ja Dai 2012). Potentiaalin oletetaan myös olevan riippuvainen pelkästään matkasta.

2.2 Absorptioreunaehtojen matemaattinen tausta

Laskenta-alueen rajaamiseen on useampia menetelmiä. Esimerkiksi Neumannin reunaehto, jossa aaltoyhtälön arvon gradientti on normaali reunan suhteen, toimii reunaehdon mallina. Toinen esimerkki on Dirichletin reunaehto, jossa aaltoyhtälön arvo asetetaan suoraan reunaehdoksi (Mazumder 2016). Tässä tutkielmassa kuitenkin käsitellään absorboivaa reunaehto, jossa simuloidaan ääretöntä potentiaaliukuoppaa. Absorptiorajoja käytetään laskenta-alueen pienentämiseksi ja rajaamiseksi, etenkin kun luonnolliset rajat ovat äärettömän suuret. Aaltoyhtälöön sovelletaan absorptioreunaehtoja (*Absorbing boundary condition*). Myös muilla menetelmillä, kuten Dirichletin ja Neumannin reunaehdoilla, on mahdollista saada tarkkoja tuloksia, mutta laskenta-alue saattaa kasvaa suureksi, jolloin laskenta-aika voi kasvaa merkittävästi. Laskenta-ajan pienentämiseksi absorptioreunaehtojen käyttö on hyvä vaihtoehto. Tässä työssä käsitellään absorptioreunaehdoille dispersiivistä tapausta, jossa tasoaallon ratkaisut ovat muotoa $e^{-i(\omega t - kx)}$. Aallon eteneminen riippuu osittain tai kokonaan aallon aaltoluuvusta k . Dispersioehdoksi kutsutaan aaltoyhtälön ratkaisuisissa kulmataajuutta ω aaltoyhtälön funktiona, jonka avulla saadaan aallon vaihenopeus yksittäisille aallolle, sekä ryhmänopeus aaltopaketeille, eli useammille aallolle (Fevens ja Jiang 1999). Reunaehtojen löytämiseksi tarkastellaan erikoisratkaisua

$$\Psi(x,t) = e^{-i(\omega t - kx)}, \quad (2.5)$$

jotka ovat dispersioehdon täyttävät rajatut energiatasot. Yhtälö on muunnettu muotoon

$$\hbar k = \pm(2m(\hbar\omega - U))^{\frac{1}{2}}, \quad (2.6)$$

jossa plus- ja miinus-merkit tarkoittavat oikealle ja vasemmalle kulkevia aaltoja. Koska yhtälö (2.6) ei ole rationaalinen, sen approksimoidaan olevan

$$\hbar k = \pm g_1(\hbar\omega - U) \pm g_2, \quad (2.7)$$

jossa g_1 ja g_2 ovat

$$g_1 = \frac{(2m\alpha_2)^{\frac{1}{2}} - (2m\alpha_1)^{\frac{1}{2}}}{\alpha_2 - \alpha_1}, \quad g_2 = \frac{\alpha_2(2m\alpha_1)^{\frac{1}{2}} - \alpha_1(2m\alpha_2)^{\frac{1}{2}}}{\alpha_2 - \alpha_1}. \quad (2.8)$$

Yhtälö (2.7) saatetaan osittaisdifferentiaalimuotoon toteamalla $\partial_x \iff ik$ ja $\partial_t \iff i\omega$, jolloin saadaan

$$i\hbar\partial_t\Psi(x,t) = \left(-i\hbar\frac{1}{g_1} + U - \frac{g_2}{g_1}\right)\Psi(x,t). \quad (2.9)$$

Oletetaan

$$v_1 = \frac{\hbar k_1}{m} = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda_1 m}, \quad v_2 = \frac{\hbar k_2}{m} = \frac{\hbar 2\pi}{\lambda_2 m}, \quad (2.10)$$

jossa $\lambda_i, i = 1, 2$ on aallonpituus ja $k_j, j = 1, 2$ on aaltoluku. Dispersiorelaation avulla nähdään, että aaltonumero k_j vastaa differentiaalia $i\partial_x$, jolloin reunaehtot asettamalla saadaan

$$\left(i\partial_x + \frac{mv_1}{\hbar}\right)\left(i\partial_x + \frac{mv_2}{\hbar}\right)\Psi(x,t) = 0, \quad (2.11)$$

jolla saadaan schrödingerin yhtälöiden osien (2.3) ja (2.4) avulla aaltofunktiot vasemmalla ja oikealla reunalla, jotka voidaan ilmaista muodossa

$$\pm\hbar\partial_x\Psi_{reaali}(x,t) - \hbar c_1\partial_t\Psi_{reaali}(x,t) + (c_1U - c_2)\Psi_{imag}(x,t) = 0, \quad (2.12)$$

$$\pm\hbar\partial_x\Psi_{imag}(x,t) - \hbar c_1\partial_t\Psi_{imag}(x,t) + (c_1U - c_2)\Psi_{reaali}(x,t) = 0, \quad (2.13)$$

jossa positiivinen merkki pätee vasemmalle kulkevaan aaltoon ja negatiivinen oikealle, sekä

$$c_1 = \frac{2}{(v_1 + v_2)}, c_2 = \frac{mv_1v_2}{(v_1 + v_2)}. \quad (2.14)$$

v_1 ja v_2 saavat negatiivisen arvon vain kun aalto kulkee vasemmalle ja positiivisen kulkiesaan oikealle. Keskeinen ero yleistetyin menetelmän absorptioreunaehdojen muodostamisessa on käytetyt matemaattiset menetelmät. Keskeisdifferenssimenetelmässä tarkastellaan aaltoyhtälön erikoisratkaisua dispersioehdon avulla, kun yleistetyssä menetelmässä dispersioehdot sovelletaan aaltopaketin nopeuksien avulla. Molemmissa menetelmissä tarvitaan aaltopaketin nopeutta ratkaisun muodostamisessa. Tavallisessa menetelmässä saadaan aallon vaihenopeus, sekä yleistetyssä muodostettua diskretoitava differentiaaliyhtälö. Menetelmät eroavat kuitenkin paljon toisistaan nopeuksien analysoinnin jälkeen, sillä yleistetyssä menetelmässä lähdetään heti nopeuksien avulla muodostamaan osittaisdifferentiaaliyhtälöä paikan suhteen, jonka jälkeen aaltoyhtälö jaetaan reaali- ja imaginääriosiin, jolloin yhtälö voidaan esittää sekä paikan että ajan suhteen osittaisdifferentiaaliyhtälönä. Tavallisessa menetelmässä taas erikoisratkaisun ja dispersioyhtälön avulla saatu välitulos saadaan muokattua osittaisdifferentiaaliyhtälöksi ajan suhteen, mutta paikan suhteen sitä ei tehdä.

3 Diskretointi

Mallissa esiintyvät derivaatat approksimoidaan differenssimenetelmällä, jolloin yhtälön (2.1) saadaan muotoon

$$i\hbar \frac{\Psi(x, t + \Delta t) - \Psi(x, t - \Delta t)}{2\Delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(x + \Delta x, t) - 2\Psi(x, t) + \Psi(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} + U(x)\Psi(x, t). \quad (3.1)$$

Schrödingerin yhtälön reaali- (2.3) ja imaginääriosaa (2.4) voidaan diskretoida käyttämällä Taylorin sarjaa. Taylorin sarjan mukaan funktion arvo mielivaltaisessa pisteessä voidaan ilmaista funktion derivaatan sekä referenssipisteen avulla, jolloin funktio voidaan laajentaa summaksi ("Comparison of Taylor finite difference and window finite difference and their application in FDTD" 2006). Yleistetyn keskeisdifferenssimetodin tapauksessa laajennetaan aaltofunktion reaali- ja imaginääriosat $\Psi_{\text{reaali}}(x, t_n)$, sekä $\Psi_{\text{reaali}}(x, t_{n-1})$ ja referenssipisteeksi asetetaan $t = t_{n-1/2} = (n - 1/2)\Delta t$, josta seuraa

$$\Psi_{\text{reaali}}(x, t_n) = \Psi_{\text{reaali}}(x, t_{n-1}) + 2 \sum_{p=0}^{\infty} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^{2p+1} \frac{1}{(2p+1)!} \Psi_{\text{reaali}}(x, t_{n-1/2}) \partial t^{2p+1}. \quad (3.2)$$

Edellisen yhtälön derivaattoja arvioidaan viidennen asteen derivaattaan asti, jotka sijoittamalla edelliseen yhtälöön, päästään tulokseen

$$\Psi_{\text{reaali}}(x, t_{n+1}) = \Psi_{\text{reaali}}(x, t_{n-1}) + 2 \sum_{p=0}^N \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^{2p+1} \frac{(-1)^{p+1}}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{2m} \partial x^2 - \frac{U}{\hbar}\right)^{2p+1} \Psi(x, t_{n-1/2}) + O(\Delta t^{2N+3}), \quad (3.3)$$

jossa O:lla merkataan Taylorin Sarjassa olevia jäljelle jääviä termejä, joita ei oteta mukaan sarjaan. Toisin sanoen O:lla ilmaistaan Taylorin sarjan virhettä. Kun yhtälön reaali- ja imaginääriosaa arvioidaan keskeisdifferenssi menetelmällä diskretoimalla ne paikan suhteen $\partial x^2 \Psi_{\text{reaali}}(k\Delta x, t_n)$ sekä $\partial x^2 \Psi_{\text{imag}}(k\Delta x, t_{n+1/2})$, saadaan reaali- ja imaginääriosaksi diskretoitua

$$\Psi_{\text{reaali}}^n(k) = \Psi_{\text{reaali}}^{n-1}(k) + 2 \sum_{p=0}^N \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^{2p+1} \frac{(-1)^{p+1}}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{2m} \partial x^2 - \frac{U}{\hbar}\right)^{2p+1} \Psi_{\text{imag}}^{n-1/2}(k) \quad (3.4)$$

ja imaginääriosaksi

$$\Psi_{imag}^{n+1/2}(k) = \Psi_{imag}^{n-1/2}(k) + 2 \sum_{p=0}^N \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^{2p+1} \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{U}{\hbar}\right)^{2p+1} \Psi_{reaali}^n(k) \quad (3.5)$$

3.1 Absorptioreunaehdot keskeisdifferenssimenetelmällä

Laskenta suoritetaan laskenta-alueelle jaetuissa pisteissä. Kyseessä on yksiulotteinen laskenta-alue, joten sen oletetaan olevan väli $[0, N]$, joka jaetaan pituudeltaan Δx suuruisiin väleihin. Diskreetointipisteet ovat muotoa $n\Delta x, n = 0, \dots, N$. Vastaavasti tehdään diskreetointi ajan suhteen jakamalla väli $[0, T]$ keskenään samansuuruisiin aika-askeliin, joiden pituus on Δt . Kukin ajanhetki voidaan esittää muodossa $l\Delta t, l = 0, \dots, T$. Aika- ja paikka diskretoinnin avulla aaltofunktio voidaan esittää ajanhetkellä Δt paikassa $n\Delta x, n = 0, \dots, N$ merkinnällä $\Psi_n^l = \Psi(n\Delta x, l\Delta t)$ (Shibata 1991). M Tämän jälkeen voidaan aaltoyhtälölle asettaa ehdot $\Psi_0^l = \Psi_N^l$. Yhtälö(2.9) saadaan keskeisdifferenssimenetelmällä muotoon

$$\begin{aligned} & -i\hbar \frac{1}{g_1} \frac{\Psi(x + \Delta x, t + \Delta t) + \Psi(x + \Delta x, t) - \Psi(x, t + \Delta t) - \Psi(x, t)}{2\Delta x} + \\ & \left(U - \frac{g_2}{g_1}\right) \frac{\Psi(x + \Delta x, t + \Delta t) + \Psi(x + \Delta x, t) - \Psi(x, t + \Delta t) - \Psi(x, t)}{4}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

joista saadaan vasen reunaehto sijoittamalla $x = 0$

$$\Psi_0^l = \frac{-C_1(\Psi_1^l - \Psi_1^{l-1} - \Psi_0^{l-1}) + C_2(\Psi_1^l + \Psi_1^{l-1} - \Psi_0^{l-1}) + C_3(\Psi_1^l + \Psi_1^{l-1} + \Psi_0^{l-1})}{C_1 + C_2 - C_3} \quad (3.7)$$

ja oikea reunaehto sijoittamalla $x = N\Delta x$

$$\Psi_N^l = \frac{-C_1(\Psi_{N-1}^l - \Psi_N^{l-1} - \Psi_{N-1}^{l-1}) + C_2(\Psi_N^l + \Psi_{N-1}^{l-1} - \Psi_{N-1}^{l-1}) + C_3(\Psi_N^l + \Psi_{N-1}^{l-1} + \Psi_{N-1}^{l-1})}{C_1 - C_2 - C_3}, \quad (3.8)$$

joissa $C_1 = \frac{i\hbar}{2\Delta t}$, $C_2 = -\frac{i\hbar}{2\Delta x g_1}$ ja $C_3 = \frac{U - \frac{g_2}{g_1}}{4}$. Termit $C_i, i = 1, 2, 3$ on sijoitettu yhtälöön (3.6), jotta se voidaan esittää selkeämmin sijoitusten jälkeen.

3.2 Absorptioreunaehdot yleistetyllä keskeisdifferenssimenetelmällä

Asettamalla rajat vasemmalle reunalle, $k = 1$, ja oikealle, $k = N - 1$ ja approksimoimalla keskeisdifferenssimenetelmällä aaltofunktion reaalista ja imaginääristä osaa saadaan imagi-

nääriselle osalle

$$\Psi_{imag}(x_k, t_{n+1/2}) \approx \frac{\Psi_{imag}^{n+1/2}(k) + \Psi_{imag}^{n+1/2}(k+1)}{2}, \quad (3.9)$$

$$\partial_x \Psi_{imag}(x_k, t_{n+1/2}) \approx \frac{\Psi_{imag}^{n+1/2}(k+1) - \Psi_{imag}^{n+1/2}(k)}{\Delta x}, \quad (3.10)$$

$$\partial_t \Psi_{imag}(x_k, t_{n+1/2}) \approx \frac{\Psi_{imag}^{n+1/2}(k+1) - \Psi_{imag}^{n-1/2}(k)}{\Delta t}, \quad (3.11)$$

sekä aaltoyhtälön reaaliosalle

$$\Psi_{reaali}(x_k, t_n) \approx \frac{\Psi_{reaali}^n(k) + \Psi_{reaali}^n(k+1)}{2}, \quad (3.12)$$

$$\partial_x \Psi_{reaali}(x_k, t_n) \approx \frac{\Psi_{reaali}^n(k+1) - \Psi_{reaali}^n(k)}{\Delta x}, \quad (3.13)$$

$$\partial_t \Psi_{reaali}(x_k, t_n) \approx \frac{\Psi_{reaali}^n(k+1) - \Psi_{reaali}^{n-1}(k)}{\Delta t}, \quad (3.14)$$

yhtälöistä huomataan, että aaltoyhtälön imaginääriosaa diskretoidaan puoli aikayksikköä reaaliosaa edellä laskentapisteessä hetkellä $n + 1/2$, kun reaaliosaa kulkee ajanhetkellä n . Yhtälöt diskretoidaan erikseen ajan, paikan, sekä aaltoyhtälön keskiarvon suhteen arvoilla k ja $k+1$.

sijoittamalla edellä johdeutut yhtälöt reunaehtoihin (2.12), sekä (2.13), saadaan diskretoidut reunaehdot imaginääriosalle muotoon

$$-\Psi_{imag}^{n+1/2}(k) \left(\frac{\pm 1}{\Delta x} + \frac{c_1}{\Delta t} \right) \pm \frac{\Psi_{reaali}^n(k+1)}{\Delta x} + \frac{c_1 \Psi_{reaali}^{n-1}(k)}{\Delta t} = -\frac{\Psi_{imag}^{n-1/2}(k) + \Psi_{imag}^{n-1/2}(k+1)}{2\hbar(c_1 U - c_2)}, \quad (3.15)$$

sekä reaaliosalle

$$-\Psi_{reaali}^{n+1}(k) \left(\frac{\pm 1}{\Delta x} - \frac{c_1}{\Delta t} \right) \pm \frac{\Psi_{imag}^{n+1/2}(k+1)}{\Delta x} - \frac{c_1 \Psi_{imag}^{n-1/2}(k)}{\Delta t} = -\frac{\Psi_{reaali}^n(k) + \Psi_{reaali}^n(k+1)}{2\hbar(c_1 U - c_2)}. \quad (3.16)$$

Reaaliosassa huomataan, että imaginääriosassa ollut termi $\frac{\pm 1}{\Delta x}$ vaihtuu muotoon $\frac{\mp 1}{\Delta x}$, jolloin reaaliyhtälön vasemman puolen vasen termi on vasemmalla reunalla aina positiivinen, kun

imaginääriosan vasen termi on oikealla reunalla aina positiivinen. Sijotuksen jälkeen huomataan myös, että reaaliosa diskretoidaan puoli aikayksikköä edellä $n + 1/2$, kun imaginääriosaa diskretoidaan puoli aikayksikköä jäljessä hetkellä $n - 1/2$. Erona toiseen diskretointimenetelmään huomataan, että tässä menetelmässä otetaan aluksi aaltoyhtälöistä keskiarvo eri pisteissä, sekä derivaatat ajan ja paikan suhteen reaali- ja imaginääriosissa. Toisessa menetelmässä asetetaan aaltofunktion arvo vasemmalla reunalla samaksi kuin oikealla reunalla. Lisäksi yleistetyssä menetelmässä approksimoidaan edellä mainittuja osia, kun toisessa menetelmässä ne asetetaan yhtä suuriksi. Lopputuloksen erona huomataan, että yleistetyssä menetelmässä käsitellään reaali- ja imaginääriosaa erikseen ja otetaan aaltoyhtälölle huomioon imaginääriosassa ajankohta n , kun taas reaaliolosassa ajankohta $n - 1/2$ tietyille laskentapisteille. Toisessa metodissa otetaan laskentapisteelle huomioon ajanhetket l sekä edeltävä ajanhetki $l - 1$ kahdessa eri paikassa N sekä $N - 1$.

4 Stabiilisuus

4.1 Stabiilisuus keskeisdifferenssi menetelmällä

Ehdot stabiilisuudelle keskeisdifferenssimenetelmässä saadaan valitsemalla jokin aloitustila, johon valitaan Gaussin aaltopaketti, jolloin tilaksi saadaan

$$\Psi(x, 0) = e^{ik_0x} e^{-(x-x_0)^2/2\sigma_0^2}, \quad (4.1)$$

jossa k_0 on keskimääräinen liikemäärä ja σ on aaltopaketin hajonta paikassa x . Aaltoyhtälölle täytyy asettaa rajat, jolloin x_0 ja σ_0 täytyy valita siten, että $\Psi(0, 0)$ ja $\Psi(N, 0) \approx 0$, jossa N on oikean puoleinen raja. Yhtälöä tarvitsee rajoittaa, jotta aaltopaketti ei törmää suoraan seinään, eikä sijaitse laskenta-alueella, jolloin asetetaan alkupisteeksi $x_0 = N/4$ ja loppupisteeksi $x = 3N/4$, johon aaltopaketin sallitaan liikkuvan. Näin aaltopaketilla on tilaa liikkua puolet rajojen määrittelemästä pituudesta, kun neljäsosa pituudesta on otettu pois molemmilta reunoilta. Nämä rajoitukset saadaan vaatimalla, että aaltopaketin keskinopeus $v_0 = N/2T$, jossa T on tarvittava aika, jonka aaltopaketti tarvitsee liikkuaakseen pisteestä $x = N/4$ pisteeseen $x = 3N/4$. Näin estetään aaltopaketin laajeneminen, jotta se pysyisi mahdollisimman yhtäläisenä

Kun aaltopaketti liikkuu paikkaan x se on laajentunut yhtälön

$$\sigma^2 = (\Delta t_0^4 + 16 \frac{T^2}{\Delta t} \Delta x^4 / 2\Delta^2 / \Delta t) \quad (4.2)$$

mukaan, jolloin termin $16 \frac{T^2}{\Delta t} \Delta x^4 / 2\Delta^2 / \Delta t$ täytyy olla pieni verrattuna Δt_0^4 . Yhtälö pätee Gaussin aaltopaketille, mutta pätee melko luotettavasti myös potentiaalissa olevalle paketille. Vielä tarvitsee määrittellä aaltonumeron maksimiarvo $k_{max} = \pi/\Delta x$, jolloin aaltonumeron täytyy olla tätä pienempi. Systeemissä ilman potentiaalia riittää tutkia ominaistiloja, jolloin tarkka approksimaatio aaltonumerolle on

$$k_m^2 \Delta x^2 / 12 \ll 1. \quad (4.3)$$

Tasapotentialissa aallonumeron arvoksi saadaan

$$(k_m^2 + U)\Delta x/12 \ll 1. \quad (4.4)$$

Aaltopaketilla on vielä vaihevirhettä, jolloin määritellään aaltopaketille maksimienergia $\omega_m = k_m^2$ sekä keskimääräinen energia $\omega_0 = k_0^2$. Vaiheen virhe saadaan minimoitua epäyhtälöllä

$$(T\Delta t/12)(k_m^6 - k_0^6) \ll 1 \quad (4.5)$$

(Goldberg, Schey ja Schwartz 1967).

4.2 Stabiilisuus yleistetyllä keskeisdifferenssimenetelmällä

Yleistetyn keskeisdifferenssimenetelmän stabiilisuutta voidaan arvioida Von Neumannin stabiilisuusanalyysillä. Analyysiissä etsitään ehdot, joilla numeerisesti, sekä teoreettisesti saadut tulokset eroavat mahdollisimman vähän toisistaan. Potentiaalın U oletetaan pysyvän vakiona (Pereda ym. 2001). Diskretoitua schrödingerin yhtälöä lähdetään analysoimaan arvioimalla Laplaceen operaattorin $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ olevan toisen asteen keskeisdifferenssioperaattori $\frac{1}{\Delta x^2}\partial_x^2$, jolloin reaaliosa saadaan muotoon

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{reaali}^n(k) \approx \frac{1}{\delta x^2}\partial_x^2 = \frac{1}{\Delta x^2}(\Psi_{reaali}^n(k+1) - 2\Psi_{reaali}^n(k) + \Psi_{reaali}^n(k-1)) + O(\delta^2) \quad (4.6)$$

Von Neumannin analyysissä sijoitetaan aluksi $\Psi_{reaali}^n(k) = \lambda_{reaali}^n e^{ik\beta\Delta x}$, sekä $\Psi_{imag}^{n+1/2}(k) = \lambda_{imag}^n e^{ik\beta\Delta x}$, jossa λ_{reaali} ja λ_{imag} ovat vahvistuskertoimia aaltoyhtälön reaalı- ja imaginääriosille. Vahvistuskerroin kertoo virheen kasvun jokaisessa aikaiteraatiossa (Moxley, Zhu ja Dai 2012). Jotta keskeisdifferenssimenetelmä pysyy stabiilina, virhe ei saa kasvaa ajan kuluessa, jolloin ehdon $|\lambda| \leq 1$ täytyy toteutua. Yhtälön (4.6) reaaliosa saatetaan muotoon

$$\frac{1}{\Delta x^2}\delta_x^2\Psi_{reaali}^n(k) = \frac{1}{\Delta x^2}\left(-4\sin^2\frac{\beta\Delta x}{2}\right)\lambda_{reaali}^n e^{ik\beta\Delta x} \quad (4.7)$$

ja imaginääriosaan

$$\frac{1}{\Delta x^2}\delta_x^2\Psi_{imag}^{n+1/2}(k) = \frac{1}{\Delta x^2}\left(-4\sin^2\frac{\beta\Delta x}{2}\right)\lambda_{imag}^n e^{ik\beta\Delta x}. \quad (4.8)$$

Yhtälön reaali- (3.4) ja imaginääriosaan (3.5) sijoitetaan yhtälö (4.7) sekä yhtälö (4.8) ja poistamalla yhteinen tekijä $e^{ik\beta\Delta x}$, jolloin reaaliosa saadaan muotoon

$$\lambda_{\text{reaali}}^n = \lambda_{\text{reaali}}^{n-1} + 2 \sum_{N}^{p=0} \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{m} r \sin^2 \frac{\beta\Delta x}{2} + \frac{U\Delta t}{2\hbar} \right)^{2p+1} \lambda_{\text{imag}}^{n-1} \quad (4.9)$$

sekä imaginääriosa

$$\lambda_{\text{imag}}^n = \lambda_{\text{imag}}^{n-1} + 2 \sum_{N}^{p=0} \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{m} r \sin^2 \frac{\beta\Delta x}{2} + \frac{U\Delta t}{2\hbar} \right)^{2p+1} \lambda_{\text{reaali}}^n. \quad (4.10)$$

Yhtälöä (4.9) muokataan muuttamalla vahvistuskertoimet $\lambda_{\text{reaali}}^n \rightarrow \lambda_{\text{reaali}}^{n+1}$, $\lambda_{\text{reaali}}^{n-1} \rightarrow \lambda_{\text{reaali}}^n$ ja $\lambda_{\text{imag}}^{n-1} \rightarrow \lambda_{\text{imag}}^n$, jolloin vähentämällä muokatusta yhtälöstä yhtälö (4.7) ja poistamalla imaginäärinen vahvistuskerroin yhtälön (4.8) avulla saadaan toiseen asteen yhtälö reaaliosalle

$$\lambda_{\text{reaali}}^2 - (2 - \alpha^2) + 1 = 0, \quad (4.11)$$

jossa

$$\alpha = 2 \sum_{N}^{p=0} \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{m} r \sin^2 \frac{\beta\Delta x}{2} + \frac{U\Delta t}{2\hbar} \right)^{2p+1}. \quad (4.12)$$

Jotta yhtälö (4.12) toteuttaa ehdot $|\lambda_{\text{reaali}}| \leq 1$ sekä $|2 - \alpha^2| \leq 1$, jolloin keskeisdifferenssi-menettelmä on stabiili vain jos $|\alpha| \leq 2$.

Muodostetaan stabiilisuusehtoon

$$\left| \sum_{p=0}^N \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{m} r \sin^2 \frac{\beta\Delta x}{2} + \frac{U\Delta t}{2\hbar} \right)^{2p+1} \right| \leq 1. \quad (4.13)$$

Kun lasketaan raja-arvo

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{p=0}^N \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{m} r \sin^2 \frac{\beta\Delta x}{2} + \frac{U\Delta t}{2\hbar} \right)^{2p+1} = \sin \left(\left(\frac{\hbar}{m} r \sin^2 \frac{\beta\Delta x}{2} + \frac{U\Delta t}{2\hbar} \right)^{2p+1} \right), \quad (4.14)$$

jolloin voidaan todeta yhtälön (4.13) olevan stabiili aina kun $N \rightarrow \infty$, mutta ääretöntä lukua ei voida valita. Jotta stabiilisuusehto pätee, täytyy ottaa huomioon tilanne kun $|\lambda_{\text{reaali}}| = 1$, koska yhtälöllä (4.12) on mahdollisesti kaksoisjuuri. Määrätään $\sin^2 \frac{\beta\Delta x}{2}$ maksimiarvoksi 1, josta päästään lopulliseen stabiilisuusehtoon

$$\left| \sum_{p=0}^N \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{m} r + \frac{U\Delta t}{2\hbar} \right)^{2p+1} \right| \leq c < 1, \quad (4.15)$$

jossa c on vakio.

5 Menetelmien vertailua

Keskeisdifferenssimenetelmän numeerisista voidaan huomata, että aaltopaketti absorboituu laskenta-alueen lopussa ilman heijastumista. Heijastumiselle voidaan saada matala virhe laajalle energia-alueelle. Kun tutkitaan menetelmää usemman seinän järjestelmässä, huomataan aallon energiatasojen olevan hyvin lähellä siirtymämatriisimetodilla saatuja tuloksia (Shibata 1991). Laskenta-ajassa menetelmä häviää porrastetulle eksplisiittiselle sekä Chebyshevin metodeille (Zhidong, Jinyu ja Zhiping 2009), mutta on nopeampi kuin implisiittinen metodi. Chebyshevin metodi on myös tehokkaampi ja vakaampi isommilla aika-askelilla. Absorboivat reunaehdot toimivat. Keskeisdifferenssimenetelmän reunaehdot ovat vähemmän tehokkaat kuin porrastetun eksplisiittisten ja implisiittisten metodien, mutta parempia kuin Chebyshevin metodin. kompleksinen keskeisdifferenssimenetelmällä saadaan tarkempi arvo ominaistiloille kuin keskeisdifferenssimenetelmällä, kun verrataan analyttisiä tuloksia numeerisiin. kompleksisella menetelmällä saadaan myös paremmat virhearviot ominaistiloille ja aaltoyhtälö saadaan suppenemaan nopeammin (“High-order symplectic FDTD scheme for solving a time-dependent Schrödinger equation” 2013).

Yleistettyä keskeisdifferenssimetodia simuloidaan liikuttamalla hiukkasta vapaassa tilassa. Kun absorptiorajoja ei ole asetettu, hiukkasessa havaitaan vääristymiä: Rajojen kanssa hiukkanen häviää saavutettuaan rajan. Neljännen asteen Yleistetyllä keskeisdifferenssimenetelmällä saadaan vähemmän häiriötä kuin toisen asteen menetelmällä. Toisen ja neljännen asteen menetelmillä saadaan vähemmän häiriötä kuin kvanttikeskeisdifferenssimenetelmällä (Moxley, Zhu ja Dai 2012). Yleistetty keskeisdifferenssimenetelmä on eksplisiittinen, joten siihen pätee edellisen kappaleen vertailu porrastettuun eksplisiittiseen, implisiittiseen ja Chebyshevin metodiin. Yleistetty ja tavallista keskeisdifferenssimenetelmän heikkouksia on koetettu paikata osittaiskeskeisdifferenssimenetelmällä vähentämällä rajalla tapahtuvaa heijastumista, sekä nopeuttamaan heijastumisen häviämistä. Aaltolukua ei tarvitse määrittellä, joka voisi johtaa vanhemmissa menetelmissä suurempaan heijastumiseen. Laskenta-alueella ei tarvitse jakaa osiin absorptiorajojen avulla. Ongelmina on yhtäaikaisen laskennan hitaus, eikä menetelmää voi vielä käyttää korkeamman asteen Laplacen operaattoreilla kuten yleistettyä keskeisdifferenssimenetelmää (Wilson 2020).

6 Yhteenveto

Tutkielmassa aluksi käytiin läpi diskreetointiin tarvittava matemaattinen tausta. Schrödingerin yhtälö jaettiin reaaliseen- ja imaginääriseen osaan. Jakoa käytettiin yleistetyn keskeisdifferenssimenetelmän absorptiorajojen muodostamiseen. Perinteisen keskeisdifferenssimenetelmän rajojen muodostamiseen käytettiin dispersioehtoa. Matemaattiselta pohjalta Schrödingerin yhtälö muokattiin numeeriseen muotoon määrittelemällä askelväli ajalle ja paikalle. Absorptioreunaehdot saatiin määrittelemällä laskenta-alue ajalle ja paikalle sekä jakamalla laskentavälit tasaisiin askelväleihin ja asettamalla aaltoyhtälön ratkaisun olevan sama rajojen alku- ja loppupisteessä. Yleistetyllä menetelmällä reaali- ja imaginääriosien jaon jälkeen otettiin molemmista toiset derivaatat ajan ja paikan suhteen, jonka jälkeen pystyttiin määrittelemään reunaehdot. Yleistettyä keskeisdifferenssimenetelmää varten käytettiin Taylorin sarjakehitelmää. Stabiilisuusehdot saatiin perinteiselle keskeisdifferenssimenetelmälle tutkimmalla gaussin aaltopakettia ja määrittelemällä sille sallitut aaltoluvut. Yleistetyn menetelmän stabiilisuutta lähdettiin tutkimaan Taylorin sarjakehitelmän avulla ja määrittelemällä vahvistuskertoimelle sallitut arvot. Stabiilisuus todettiin laskemalla raja-arvo äärettömään saadusta stabiilisuusehdosta, jonka jälkeen määriteltiin ehto, jossa vahvistuskerroin on 1. Tämän jälkeen saatiin lopullinen stabiilisuusehto. Molemmilla ehdoilla aaltopaketti saatiin häviämään määritellyillä rajoilla, mutta yleistetyllä keskeisdifferenssimenetelmällä pystyttiin määrittelemään väljemmät reunaehdot laskun suorittamiseen.

Lähteet

Wilson, Joshua. 2020. “ABC Method and Fractional Momentum Layer for the FDTD Method to Solve the Schrödinger Equation on Unbounded Domains”. Tohtorinväitöskirja, Louisiana Tech University.

BARDE, Nilesh P., Sandeep D. PATIL, Pravin M. KOKNE ja Pranav P. BARDAPURKAR. 2015. “Deriving time dependent Schrödinger equation from Wave-Mechanics, Schrödinger time independent equation, Classical and Hamilton-Jacobi equations”. *Leonardo Electronic Journal of Practices and Technologies (LEJPT)* 14 (26): 31–48.

Broglie, Louis de. 1924. “XXXV. A tentative theory of light quanta”. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 47 (278): 446–458.

“High-order symplectic FDTD scheme for solving a time-dependent Schrödinger equation”. 2013. *Computer Physics Communications* 184 (3): 480–492.

Fevens, Thomas, ja Hong Jiang. 1999. “Absorbing Boundary Conditions for the Schrodinger Equation”. *SIAM Journal on Scientific Computing* 21 (elokuu): 255–282.

Goldberg, Abraham, Harry M. Schey ja Judah L. Schwartz. 1967. “Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum-Mechanical Transmission and Reflection Phenomena”. *American Journal of Physics* 35 (3): 177–186.

Herrmann, Richard. 2018. “Solutions of the fractional Schrödinger equation via diagonalization - A plea for the harmonic oscillator basis part 1: the one dimensional case”. *arXiv: General Physics*.

“Comparison of Taylor finite difference and window finite difference and their application in FDTD”. 2006. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 193 (2): 516–534.

Mazumder, Sandip. 2016. “Chapter 1 - Introduction to Numerical Methods for Solving Differential Equations”. Teoksessa *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, toimittanut Sandip Mazumder, 1–49. Academic Press.

Moxley, Frederick Ira, Fei Zhu ja Weizhong Dai. 2012. “A Generalized FDTD Method with Absorbing Boundary Condition for Solving a Time-Dependent Linear Schrodinger Equation”.

Nagel, James. 2009. “A Review and Application of the Finite-Difference Time-Domain Algorithm Applied to the Schrodinger Equation”. *Applied Computational Electromagnetics Society Journal* 24 (helmikuu).

Pereda, Jose, Luis Vielva, Angel Vegas ja A. Prieto. 2001. “Analyzing the stability of the FDTD technique by combining the Von Neumann method with Routh-Hurwitz criterion”. *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on* 49 (maaliskuu): 377–381.

Shibata, Tsugumichi. 1991. “Absorbing boundary conditions for the finite-difference time-domain calculation of the one-dimensional Schrödinger equation”. *Physical review. B, Condensed matter* 43 (huhtikuu): 6760–6763.

Taflove, Allen. 2007. “A perspective on the 40-year history of FDTD computational electrodynamics”. *Applied Computational Electromagnetics Society Journal* 22 (maaliskuu): 1.

TSAPARLIS, Georgios. 2001. “TOWARDS A MEANINGFUL INTRODUCTION TO THE SCHRÖDINGER EQUATION THROUGH HISTORICAL AND HEURISTIC APPROACHES”. *Chem. Educ. Res. Pract.* 2 (3): 203–213.

Zhidong, Chen, Zhang Jinyu ja Yu Zhiping. 2009. “Solution of the time-dependent Schrödinger equation with absorbing boundary conditions”. *Journal of Semiconductors* 30, numero 1 (tammikuu): 012001.