Métodos Computacionais – Ondas

Aula: Transformada de Fourier “no espaço”

Aula: FT “no espaço” - Objetivos

Nesta aula, pretendemos:

1) Do ponto de vista da Física (motivação): ter um primeiro contato com potenciais periódicos e funções periódicas no espaço. Como exemplo: elétrons em um sólido cristalino.
2) Do ponto de vista conceitual: expandir a aplicação da Transformada de Fourier para funções periódicas no espaço.
3) Do ponto de vista computacional: implementar/adaptar um script de Transformada de Fourier discreta para funções periódicas no espaço e entender o seu significado Físico.

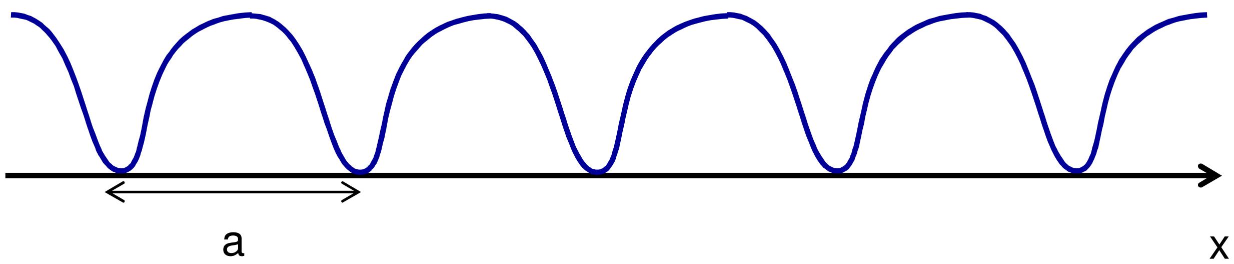
Tarefa: Adaptar o script da aula anterior para calcular a transformada de Fourier $|Y(k)|^2$ vs k de uma função y(x) periódica no espaço.

Tempo aproximado: 20 a 30 min (lembrando que o *debug* é a maior parte disso!).

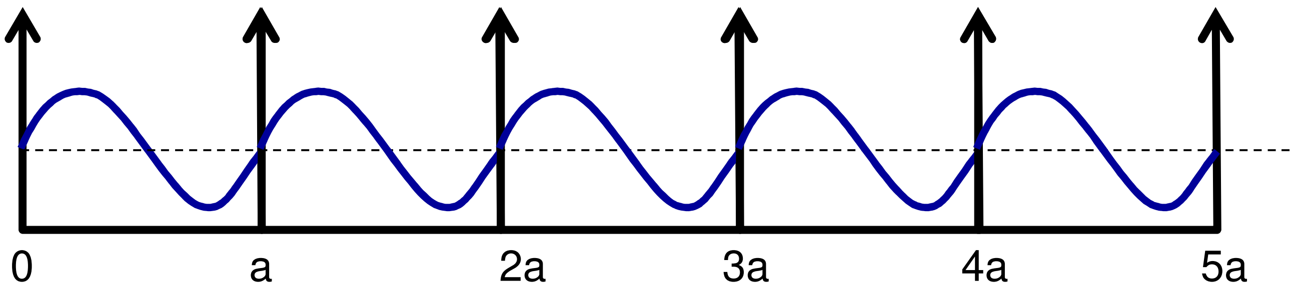
Motivação: elétrons em potenciais periódicos

- Potencial periódicos no espaço: $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$

Exemplo (1D): $V(x) = V(x + n.a)$



Função de onda: $|\Psi(x+a)|^2 = |\Psi(x)|^2$



- Transformada de Fourier “no espaço”:

$$V(x) = \sum_G V_G e^{ixG}$$

A periodicidade de V(x) implica em:

$$\boxed{e^{iaG} = 1 \Rightarrow G_n = \frac{2n\pi}{a}}$$

com n inteiro.

Transformada de Fourier de y(x) (espaço)

Transformada de Fourier de y(x) *:*

$$\boxed{Y(k/2\pi) = \int_{-\infty}^{\infty} y(x) e^{ikx}\ dx}$$

Número de onda:
k=2π/λ

Dimensão de k: rad (m^{-1})

Transformada inversa:

$$\boxed{y(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} Y(k/2\pi) e^{-ikx}\ dk}$$

Transformada de Fourier de y(x): discreta

Função y(x) discreta: $$y(x) \rightarrow y(x_j) \equiv y(j)$$

$$x_j = (j-1)\,\Delta x \qquad \begin{cases} x_j = 0, \Delta x, 2\Delta x, \ldots, (N_x - 1)\Delta x \\ j = 1, 2, \ldots, N_x \end{cases}$$

Discretização da integral:

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} y(x) e^{ikx}\, dx \rightarrow \sum_{j=1}^{N_x} y(j) e^{ik_p x_j}}$$

onde

$$x_j = (j-1)\,\Delta x$$ e definimos: $$k_p \equiv \frac{2\pi(p-1)}{N_x \Delta x}$$

Transformada de Fourier de y(x): discreta

Função y(x) discreta: $y(x) \rightarrow y(x_j) \equiv y(j)$

$$x_j = (j-1)\,\Delta x \qquad \begin{cases} x_j = 0, \Delta x, 2\Delta x, ..., (N_x - 1)\Delta x \\ j = 1, 2, \ldots, N_x \end{cases}$$

Transformada de Fourier: $Y(k) \rightarrow Y(k_p) \equiv Y(p)$ onde

$$\boxed{Y(p) = \sum_{j=1}^{N_x} y(j) e^{2\pi i (p-1)(j-1)/N_x}}$$

$$k_p \equiv \frac{2\pi(p-1)}{N_x \Delta x} \qquad \begin{cases} k_p = 0, \dfrac{2\pi}{N_x \Delta x}, \dfrac{4\pi}{N_x \Delta x}, ..., \dfrac{2\pi(N_x - 1)}{N_x \Delta x} \\ p = 1, 2, \ldots, N_x \end{cases}$$

FT espaço– Tarefa – Parte 1

Considere uma função y(x) que se anule em $x_n = n.L$ na forma:

$$y(x) = \sum_n a_n \sin \frac{n\pi x}{L}$$

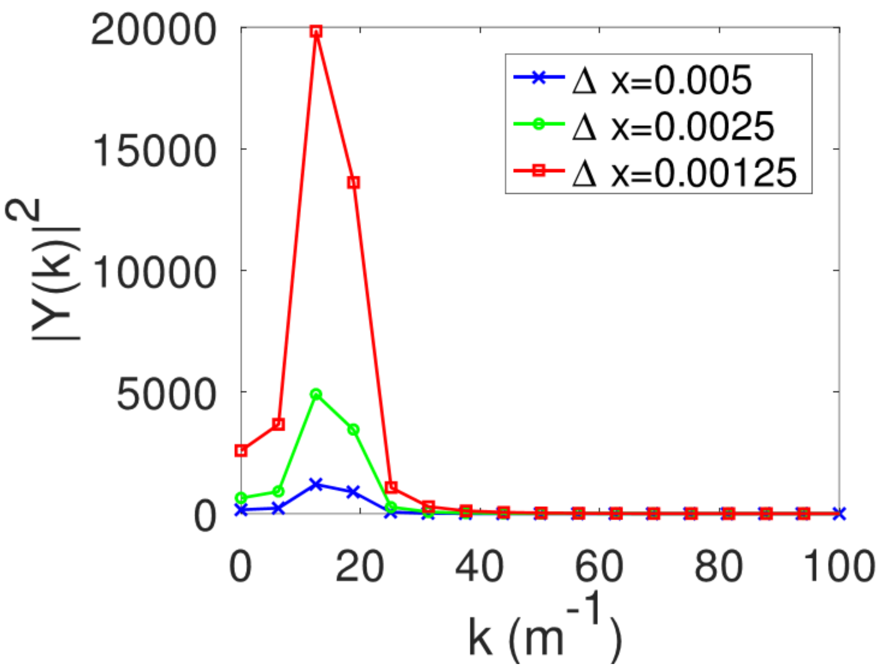
- *Escolha os a_n's e os valores de n que entram na série.*
- *Calcule a transformada de Fourier espacial $Y(k_p)$ de $y(x_j)$ considerando inicialmente um passo $\Delta x = 0{,}005$ m e $0 \leq x \leq L$.*
- *Diminua o passo pela metade e veja o que ocorre.*
- *Dica: Faça primeiro apenas um valor de n (por exemplo, n=5) e faça um gráfico de $|Y(k_p)|^2$ para k_p variando entre 0 e 100 m^{-1}.*
- *Responda:*

1) As posições dos picos de $|Y(k_p)|^2$ correspondem ao esperado?

2) Como seria possível melhorar a ***resolução*** *de $|Y(k_p)|^2$ para este sinal?*

FT espaço – Parte 1 - Debug

$$y(x) = 0,5 \sin \frac{5\pi x}{L}$$




```
Deltax = 0.005000 Deltak = 6.251926 Nx=201 Nks=201
p=1:  |YFourier(p)|^2= 161.94725
p=2:  |YFourier(p)|^2= 228.63309
p=3:  |YFourier(p)|^2= 1206.24150
p=4:  |YFourier(p)|^2= 892.96211
p=5:  |YFourier(p)|^2= 68.67869
p=6:  |YFourier(p)|^2= 18.44237
Deltax = 0.002500 Deltak = 6.267517 Nx=401 Nks=401
p=1:  |YFourier(p)|^2= 648.28892
p=2:  |YFourier(p)|^2= 917.01702
p=3:  |YFourier(p)|^2= 4914.39408
p=4:  |YFourier(p)|^2= 3459.87264
p=5:  |YFourier(p)|^2= 270.71145
p=6:  |YFourier(p)|^2= 72.96121
Deltax = 0.001250 Deltak = 6.275341 Nx=801 Nks=801
p=1:  |YFourier(p)|^2= 2593.65564
p=2:  |YFourier(p)|^2= 3672.30525
p=3:  |YFourier(p)|^2= 19835.98434
p=4:  |YFourier(p)|^2= 13617.87599
p=5:  |YFourier(p)|^2= 1074.46323
p=6:  |YFourier(p)|^2= 290.07401
```

FT espaço – Tarefa – Parte 2

Agora considere uma função y(x) Gaussiana:

$$y(x) = e^{-k^2(x-x_c)^2}$$

- *Calcule a transformada de Fourier espacial $Y(k_p)$ de $y(x_j)$ para x_c=0,5m e k=30 m^{-1}*
- *Considere Δx=0,01 m e $0 \leq x \leq L$.*
- *Faça um gráfico de $|Y(k_p)|^2$ para k_p variando entre 0 e 100 m^{-1}.*
- *Faça agora para $0 \leq x \leq 5L$. O que acontece? Por quê?*

FT espaço – Tarefa – Parte 3

Por fim, consideremos uma função periódica no espaço “artificial”:

$$y_{\text{per}}(x) = y(x \bmod L) \quad \text{tal que} \quad y_{\text{per}}(x+L) = y_{\text{per}}(x)$$

Como exemplo, vamos usar uma “sequência” de Gaussianas:

$$y_{\text{per}}(x) = e^{-k^2[(x \bmod L)-x_c]^2}$$

- *Calcule a transformada de Fourier espacial $Y(k_p)$ de $y_{per}(x_j)$ para x_c=0,5m e k=30 m^{-1}*
- *Considere Δx=0,01 m e $0 \leq x \leq 5L$.*
- *Faça um gráfico de $|Y(k_p)|^2$ para k_p variando entre 0 e 100 m^{-1}.*
- *Como esse se compara em relação ao último gráfico? Você consegue pensar em uma interpretação física?*