

# Projekt: MES dla oscylatora harmonicznego 2D

12 listopada 2025

## 1 Hamiltonian

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2), \quad (1)$$

z  $m = 0.067m_0$  oraz  $\hbar\omega = 10$  meV. Chcemy znaleźć przybliżone rozwiązanie równania własnego

$$H\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x), \quad (2)$$

w ramach metody elementów skończonych. Wykorzystamy bazę funkcyjną

$$\Psi_n(x) = \sum_{i=1}^N c_i^n g_i(x), \quad (3)$$

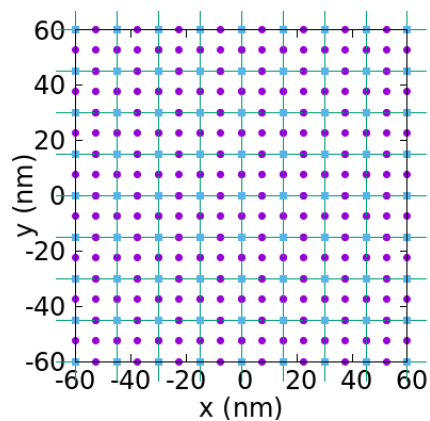
gdzie  $n$  to numer stanu własnego, a  $g_i$  to funkcja kształtu związana z węzłem o numerze  $i$ . Wartości i funkcje własne znajdziemy rozwiązując uogólnione równanie własne

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c}. \quad (4)$$

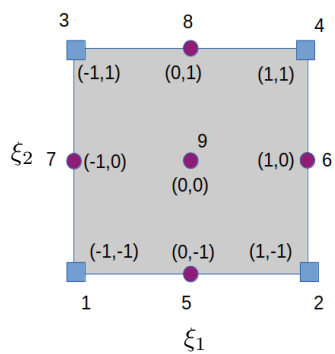
Elementy macierzowe dane są przez  $H_{ji} = \langle g_j | H | g_i \rangle$  oraz  $S_{ji} = \langle g_j | g_i \rangle$ .

## 2 Elementy i buchalteria węzłów

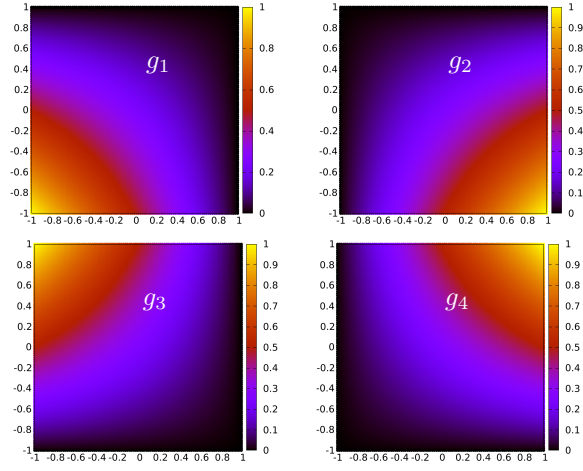
Wygenerujemy  $(2N)^2$  identycznych kwadratowych elementów w pudle obliczeniowym rozmiarze  $L \times L$ . Bok każdego z elementów ma długość  $a = L/(2N)$ . Elementy numerujemy od 1 do  $N^2$ . Numerujemy również węzły od 1 do  $(4N+1)^2$ . W każdym elemencie należy ponumerować węzły lokalnie (rysunek 2). Numeracji lokalnej z rysunku 2 trzymamy się w tekście oraz wzorach poniżej. Potrzebna nam będzie tablica odsyłająca z elementu  $k$  i z węzła lokalnego  $i$  do globalnego numeru węzła  $nlg(k, i)$ , którą wygeneruje prowadzący. Studenci nie muszą programować generacji siatki. Prowadzący wygeneruje węzły oraz numerację dla pudła obliczeniowego z  $L = 100$  nm. Dla uzyskania pudła o boku  $D$  studenci przeskalują współrzędne podane przez prowadzącego o czynnik  $D/L$ .



Rysunek 1: Elementy wygenerowane dla  $N = 4$ ,  $L = 120$  nm. Kwadratami zaznaczone są węzły narożne. Fioletowe kropki to pozostałe węzły.



Rysunek 2: Każdy element w swojej przestrzeni referencyjnej jest kwadratem o boku 2. Lokalna numeracja węzłów i ich współrzędne  $(\xi_1, \xi_2)$ .



Rysunek 3: Biliniowe funkcje kształtu oparte na węzłach narożnych. W węźle  $i$ ,  $g_k(\vec{\xi}_i) = 0$  dla  $k \neq i$  oraz  $g_i(\vec{\xi}_i) = 1$  dla  $k = i$ .

### 3 Element w przestrzeni odniesienia i funkcje kształtu

W metodzie elementów skończonych używa się tzw. przestrzeni odniesienia. W przestrzeni odniesienia każdy z elementów jest kwadratem o współrzędnych  $\vec{\xi} = (\xi_1, \xi_2) \in [-1, 1] \times [-1, 1]$ . Dla elementu  $k$  przejście z przestrzeni odniesienia do przestrzeni rzeczywistej ma postać

$$x(\xi_1, \xi_2) = \sum_{i=1}^4 x_{nlg(k,i)} g_i(\xi_1, \xi_2), \quad (5)$$

$$y(\xi_1, \xi_2) = \sum_{i=1}^4 y_{nlg(k,i)} g_i(\xi_1, \xi_2), \quad (6)$$

gdzie  $x_l, y_l$  to współrzędne węzła narożnego o globalnym numerze  $l = nlg(k, i)$ , gdzie  $i = 1, 2, 3$  lub  $4$ , a  $g_i$  to biliniowe funkcje kształtu zdefiniowane jako

$$g_1(\vec{\xi}) = f_1(\xi_1)f_1(\xi_2) \quad (7)$$

$$g_2(\vec{\xi}) = f_2(\xi_1)f_1(\xi_2) \quad (8)$$

$$g_3(\vec{\xi}) = f_1(\xi_1)f_2(\xi_2) \quad (9)$$

$$g_4(\vec{\xi}) = f_2(\xi_1)f_2(\xi_2), \quad (10)$$

przy

$$f_1(\xi) = \frac{1 - \xi}{2} \quad (11)$$

$$f_2(\xi) = \frac{1 + \xi}{2}. \quad (12)$$

Przy tak zdefiniowanych funkcjach kształtu mamy  $g_i(\vec{\xi}_l) = \delta(i, l)$  (rysunek 3).

Funkcje biliniowe  $g_i$  posłużą nam do mapowania, funkcję falową będziemy jednak opisywać w bazie funkcji bikwadratowych (rysunek 4)

$$h_1(\vec{\xi}) = q_1(\xi_1)q_1(\xi_2) \quad (13)$$

$$h_2(\vec{\xi}) = q_3(\xi_1)q_1(\xi_2) \quad (14)$$

$$h_3(\vec{\xi}) = q_1(\xi_1)q_3(\xi_2) \quad (15)$$

$$h_4(\vec{\xi}) = q_3(\xi_1)q_3(\xi_2) \quad (16)$$

$$h_5(\vec{\xi}) = q_2(\xi_1)q_1(\xi_2) \quad (17)$$

$$h_6(\vec{\xi}) = q_3(\xi_1)q_2(\xi_2) \quad (18)$$

$$h_7(\vec{\xi}) = q_1(\xi_1)q_2(\xi_2) \quad (19)$$

$$h_8(\vec{\xi}) = q_2(\xi_1)q_3(\xi_2) \quad (20)$$

$$h_9(\vec{\xi}) = q_2(\xi_1)q_2(\xi_2), \quad (21)$$

z

$$q_1(\xi) = \xi(\xi - 1)/2 \quad (22)$$

$$q_2(\xi) = (1 - \xi)(1 + \xi) \quad (23)$$

$$q_3(\xi) = \xi(\xi + 1)/2. \quad (24)$$

W elemencie  $k$  funkcja falowa rozpięta jest na 9 funkcjach kształtu związanych z narożnymi węzłami. Funkcja falowa w punkcie  $\vec{\xi} \rightarrow \vec{r}$  w elemencie  $k$  dana jest wzorem

$$\Psi(\vec{r}(\vec{\xi}) \in \Omega_k) = \sum_{i=1}^9 \Psi_{nlg(k,i)} h_i(\xi_1, \xi_2). \quad (25)$$

## 4 macierze lokalne

### 4.1 macierz przekrywania

We wzorze (4) pojawiają się elementy macierzy Hamiltona i przekrywania. The ostatnie mają postać

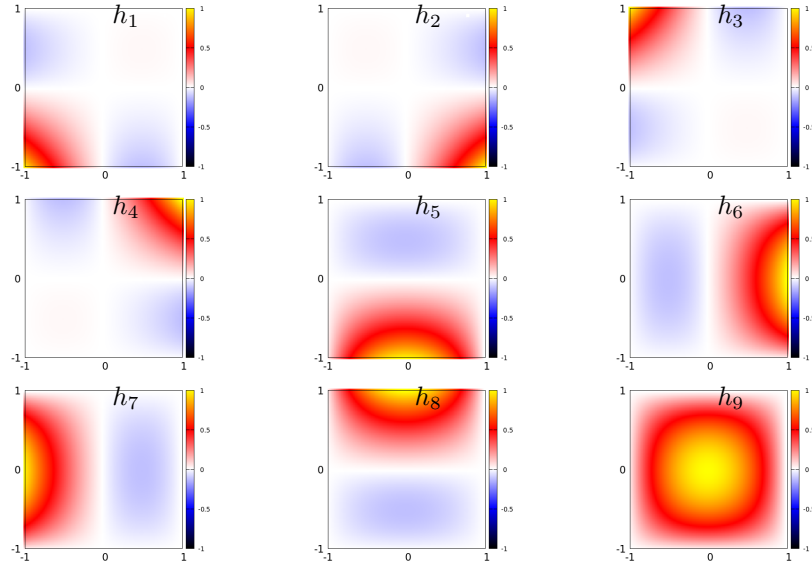
$$S_{ji} = \langle h_j | h_i \rangle = \int \int_{\Omega} dx dy h_j(x, y) h_i(x, y).$$

Całkę można rozpisać na sumę przyczynków od elementów  $\Omega_k$ ,

$$S_{ji} = \sum_k \int_{\Omega_k} dx dy h_j(x, y) h_i(x, y).$$

Całkować łatwiej w przestrzeni odniesienia. W ramach jednego elementu zdefiniujemy lokalną macierz przekrywania  $9 \times 9$

$$s_{ji}^k = \frac{a^2}{4} \int_{\Omega_k} h_j(\xi_1, \xi_2) h_i(\xi_1, \xi_2) d\xi_1 d\xi_2,$$



Rysunek 4: Bikwadratowe funkcje kształtu. W węzle  $i$ ,  $h_k(\vec{\xi}_i) = 0$  dla  $k \neq i$  oraz  $h_i(\vec{\xi}_i) = 1$  dla  $k = i$ .

gdzie  $a^2/4$  to jacobian przejścia ze współrzędnych  $(x, y)$  do  $(\xi_1, \xi_2)$ .

Gdy uwzględnimy potencjał będziemy mieli pod całką wielomiany stopnia 6 w każdym z kierunków scałkowane po przedziale od -1 do 1 w  $\xi_1$  oraz  $\xi_2$ . Jednowymiarową całkę z iloczynu funkcji bikwadratowych można policzyć dokładnie czteropunktowa kwadratura Gaussa:

$$\int_{-1}^1 dx f(x) = \sum_{k=1}^4 w_k f(p_k),$$

gdzie  $w_1 = w_2 = (18 + \sqrt{30})/36$ ,  $w_3 = w_4 = (18 - \sqrt{30})/36$  oraz  $p_1 = -\sqrt{\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{6/5}}$ ,

$p_2 = \sqrt{\frac{3}{7} - \frac{2}{7}\sqrt{6/5}}$ ,  $p_3 = \sqrt{\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{6/5}}$  i  $p_4 = -\sqrt{\frac{3}{7} + \frac{2}{7}\sqrt{6/5}}$ .

Macierz  $s_{ji}^k$  przy naszym wyborze elementów jest taka sama dla każdego elementu  $k$ . Wzór Gaussa zastosowany w obydwu kierunkach daje

$$s_{ji}^k = s_{ji} = \frac{a^2}{4} \sum_{l=1}^4 \sum_{n=1}^4 w_l w_n h_j(p_l, p_n) h_i(p_l, p_n)$$

Policzyć i wypisać elementy lokalnej macierzy przekrywania. Prowadzący pokaże jakiego wyniku należy się spodziewać.

## 4.2 macierz energii kinetycznej

Macierz Hamiltona jest sumą macierzy energii potencjalnej oraz energii kinetycznej. Macierz energii kinetycznej można przedstawić w postaci całki z iloczynu skalarnego gradientów funkcji kształtu dzięki antyhermitowskości operatora  $\nabla$

$$\mathcal{T}_{ji} = \langle h_j | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 | h_i \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \nabla h_j | \nabla h_i \rangle.$$

Podobnie jak wyżej wyliczamy lokalne macierze energii kinetycznej, wykorzystując fakt, iż  $\frac{d}{dx} = \frac{d\xi_1}{dx} \frac{d}{d\xi_1} = \frac{2}{a} \frac{d}{d\xi_1}$  oraz  $dx = \frac{2}{a} d\xi_1$ .

$$t_{ji}^k = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{\Omega_k} d\xi_1 d\xi_2 \left( \frac{dh_j}{d\xi_1} \frac{dh_i}{d\xi_1} + \frac{dh_j}{d\xi_2} \frac{dh_i}{d\xi_2} \right)$$

kwadraturą Gaussa

$$t_{ji}^k = t_{ji} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l=1}^4 \sum_{n=1}^4 w_l w_n \left( \frac{dh_j}{d\xi_1} \Big|_{p_l, p_n} \frac{dh_i}{d\xi_1} \Big|_{p_l, p_n} + \frac{dh_j}{d\xi_2} \Big|_{p_l, p_n} \frac{dh_i}{d\xi_2} \Big|_{p_l, p_n} \right)$$

Dwupunktowy iloraz różnicowy pochodnej dokładnie zróżniczkuje nasze funkcje kształtu, np.

$$\frac{h_j(\xi_1, \xi_2)}{d\xi_2} \Big|_{p_l, p_n} = \frac{h_j(p_l, p_n + \Delta) - h_j(p_l, p_n - \Delta)}{2\Delta}$$

Policzyć i wypisać elementy lokalnej macierzy energii kinetycznej. Prowadzący pokaże wynik.

## 4.3 macierz energii potencjalnej

... liczymy podobnie do macierzy przekrywania z tym, że lokalne macierze energii potencjalnej, w przeciwieństwie do macierzy energii kinetycznej oraz przekrywania, są różne dla każdego elementu

$$v_{ji}^k = \frac{a^2 m \omega^2}{4} \int_{\Omega_k} (x(\xi_1, \xi_2)^2 + y(\xi_1, \xi_2)^2) h_j(\xi_1, \xi_2) h_i(\xi_1, \xi_2) d\xi_1 d\xi_2.$$

Całkujemy jak wyżej korzystając z kwadratury Gaussa. Tym razem potrzebujemy wyliczyć  $x$  oraz  $y$  dla punktów Gaussa zdefiniowanych we współrzędnych odniesienia elementu  $k$ .

$$v_{ji}^k = \frac{a^2 m \omega^2}{4} \sum_{l=1}^4 \sum_{n=1}^4 w_l w_n (x(p_l, p_n)^2 + y(p_l, p_n)^2) h_j(p_l, p_n) h_i(p_l, p_n)$$

Do wyliczenia  $x(p_l)$  oraz  $y(p_n)$  używamy mapowania ze wzorów (5,6).

Wyprowadzić macierz energii potencjalnej dla jednego z elementów. Do weryfikacji z prowadzącym.

## 5 składamy macierze globalne

Globalne macierze składamy sumując elementy lokalne z odesłaniem ich do globalnych numerów węzłów

```
pętla po wszystkich elementach k
pętla po i1 od 1 do 9
pętla po i2 od 1 do 9
    S(nlg(k, i1), nlg(k, i2)) += s(i1, i2)
    H(nlg(k, i1), nlg(k, i2)) += t(i1, i2) + v(k, i1, i2)
```

## 6 narzucamy warunki brzegowe

Narzucamy warunek znikania wszystkich funkcji falowych na brzegu. Wystarczy, że zadamy, aby interesujące nas stany zniknęły na brzegu pudła. Aby to osiągnąć modyfikujemy macierze **H** oraz **S** tak aby usunąć sprzężenie węzłów brzegowych z węzłami w środku pudła i wyrzucić je do zakresu widma, który będziemy ignorować w analizie rozwiązań.

Znajdujemy węzły brzegowe, tj. te, które leżą na brzegu pudła obliczeniowego. Jeśli węzeł  $i$  jest brzegowy, to zerujemy całą kolumnę i wiersz  $i$  w macierzach **S** i **H**. Następnie wstawiamy na diagonalu  $S_{ii} = 1$ , a na diagonalu  $H_{ii} = -1410$ . Po diagonalizacji dostaniemy zdegenerowany stan -1410. Stany fizycznie interesujące pojawią się dla dodatnich energii.

## 7 Widmo

Rozwiązać równanie własne  $\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c}$ .<sup>1</sup> Na wejściu podajemy macierze **S** oraz **H**. Na wyjściu dostaniemy wartości własne  $E$  oraz odpowiadające im wektory własne **c**, takie, że składowa  $i$ -ta wektora odpowiada wartości funkcji falowej w węźle  $i$ . Zbadać niskoenergetyczne widmo w zakresie dodatnich wartości własnych w zależności od  $L$  oraz  $N$ .

Znaleźć optymalne  $L$ : dla ustalonego  $N$  szukamy  $L$ , przy którym energia jest minimalna. Znaleźć optymalne  $N$  jest takie, że dalsze jego zwiększanie nie zmniejsza zauważalnie energii najniższych stanów.

Narysować funkcje falowe dla 6 najniższych stanów dla optymalnych wartości  $L$  oraz  $N$ . Wartości funkcji falowych w węzłach dane są przez odpowiednie składowe odpowiedniego wektora własnego, tj.  $c_i^n = \Psi_i^n$  to wartość funkcji falowej w węźle  $i$  dla  $n$  tego stanu własnego. W ramach elementu liczymy funkcję falową jako superpozycję 9 funkcji kształtu  $h_i$  wg. wzoru 25.

---

<sup>1</sup>na przykład `scipy.linalg import eigh`

## 8 ewolucja w czasie

Ewolucja w czasie funkcji falowej dana jest przez równanie Schroedingera

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (26)$$

Rozwiążemy go w bazie funkcji kształtu

$$\Psi(x, t) = \sum_{k=1}^N d_k(t) h_k(x). \quad (27)$$

Cała zależność od czasu jest niesiona przez *zespólone* współczynniki rozwinięcia  $d_k(t)$ . W metodzie CN dyskretyzacja czasu ma postać

$$\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) + \frac{\Delta t}{2\hbar i} (H\Psi(x, t + dt) + H\Psi(x, t)). \quad (28)$$

Po podstawieniu rozwinięcia w bazie funkcji kształtu oraz wyrzutowaniu równania na  $l$ -tą funkcję kształtu dostajemy układ równań liniowych na  $\mathbf{d}(t + dt)$ ,

$$\left[ \mathbf{S} - \frac{\Delta t}{2\hbar i} \mathbf{H} \right] \mathbf{d}(t + dt) = \left[ \mathbf{S} + \frac{\Delta t}{2\hbar i} \mathbf{H} \right] \mathbf{d}(t). \quad (29)$$

Macierze hamiltonianu i przekrywania policzyliśmy wyżej.

Jako warunek początkowy wstawimy superpozycję stanu podstawowego i pierwszego stanu wzbudzonego  $\mathbf{d}(t = 0) = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2$ . Policzyć i narysować  $x(t)$  (hint: zbudujmy elementy macierzowe operatora położenia  $\mathbf{X}$  podobnie jak budowaliśmy elementy macierzowe dla potencjału: liczymy macierze lokalne (całujemy  $x$ ), a potem składowy globalną. Wtedy

$$x(t) = \mathbf{d}^\dagger(t) \mathbf{X} \mathbf{d}(t). \quad (30)$$

$x(t)$  powinien oscylować z okresem  $T = \frac{2\pi}{\Delta E}$ , gdzie  $\Delta E = E_2 - E_1$ . Przyjąć  $\Delta t = 100$  [jednostki atomowej czasu]. Czy to odpowiednio mały krok? Jak bardzo można powiększać krok czasowy?

Narysować zdjęcia funkcji falowej w ramach jednego okresu (4 rysunki wystarczą).

## 9 Punktacja

1. Za wygenerowanie macierzy lokalnych przekrywania i energii – 25 pkt.
2. Rozwiązanie równania własnego – 25 pkt.
3. Dyskusja  $L$  oraz  $N$  – 25 pkt.
4. Rachunek z czasem – 25 pkt.