

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

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

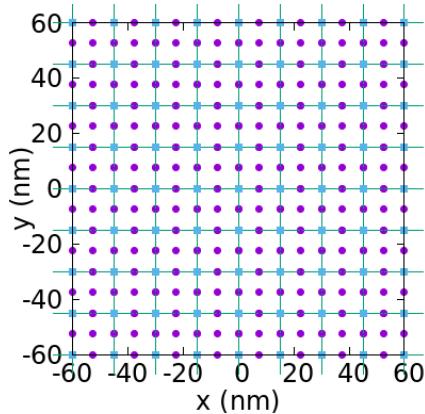
gdzie n to numer stanu własnego, a g_i to funkcja kształtu związana z węzłem o numerze i . Wartości i funkcje własne znajdziemy rozwiązując uogólnione równanie własne

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

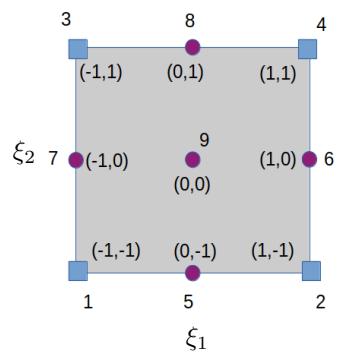
Elementy macierzowe dane są przez $H_{ji} = \langle g_j | H | g_i \rangle$ oraz $S_{ji} = \langle g_j | g_i \rangle$.

2 Elementy i buchalteria węzłów

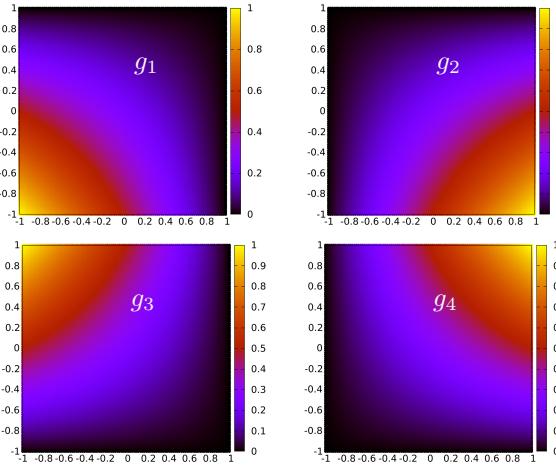
Wygenerujemy $(2N)^2$ identycznych kwadratowych elementów w pudle obliczeniowym rozmiarze $L \times L$. Bok każdego z elementów ma długość $a = L/(2N)$. Elementy numerujemy od 1 do N^2 . Numerujemy również węzły od 1 do $(4N + 1)^2$. W każdym elemencie należy ponumerować węzły lokalnie (rysunek 2). Numeracji 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 przeskalaują 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 (ξ_1, ξ_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

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

4 macierze lokalne

4.1 macierz przekrywania

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

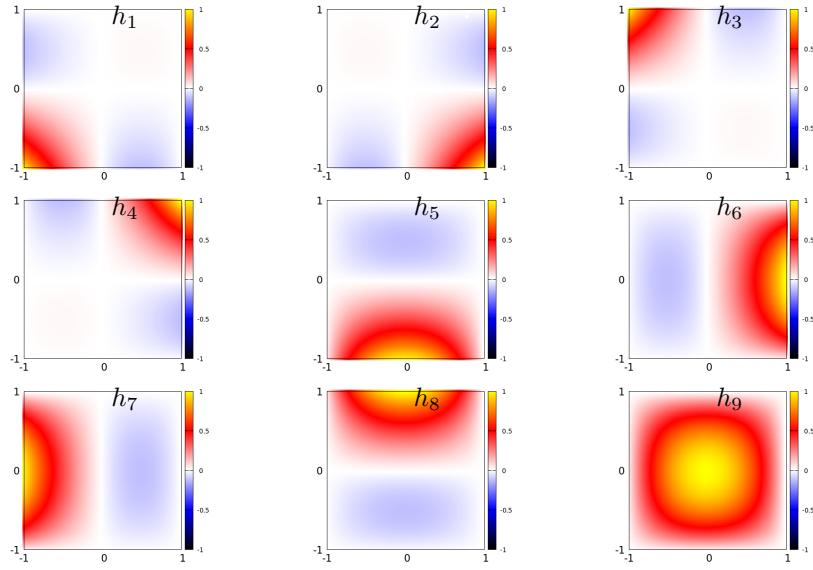
$$S_{ji} = \langle h_j | h_i \rangle = \int \int_{\Omega} dx dy h_j(x, y) h_i(x, y).$$

Całkę można rozpisać na sumę przyczynków od elementów Ω_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 9×9

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



Rysunek 4: Bikwadratowe funkcje kształtu. W węźle 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 jakobian przejścia ze współrzędnych (x, y) do (ξ_1, ξ_2) .

Gdy uwzględnimy potencjał będziemy mieli pod całką wielomiany stopnia 6 w każdym z kierunków scałkowane po przedziale od -1 do 1 w ξ_1 oraz ξ_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 ∇

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

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 zróżniczuje 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

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

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

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

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 zadbane, aby interesujące nas stany znikaly 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 diagonali $S_{ii} = 1$, a na diagonali $H_{ii} = -1410$. Po diagonalizacji dostaniemy zdegenerowany stan -1410. Stany fizycznie interesujące pojawią się dla dodatnich energii.

7 Widmo

Rozwiązać równanie własne $\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{Sc}$.¹ 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 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.

¹na przykład scipy.linalg import eigh

8 ewolucja w czasie

Ewolucja w czasie funkcji falowej dana jest przez równanie Schrödingera

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

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 *zespolone* 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 (całkujemy x), a potem składamy 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. Rozwiążanie równania własnego – 25 pkt.
3. Dyskusja L oraz N – 25 pkt.
4. Rachunek z czasem – 25 pkt.