

Projekt: MES dla oscylatora harmonicznego 2D

18 października 2023

Harmonogram

Projekt przygotowujemy w czterech krokach. Za wykonanie każdego otrzymać można po 25% punktów. Orientacyjne terminy oddania zadań częściowych:

1. 19.10.2023 – zadanie 1 oraz 2
2. 9.11.2023 – zadanie 3 oraz 4 i 4a
3. 23.11.2023 – zadanie 5 oraz 6
4. 7.12.2023 – zadanie 7

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

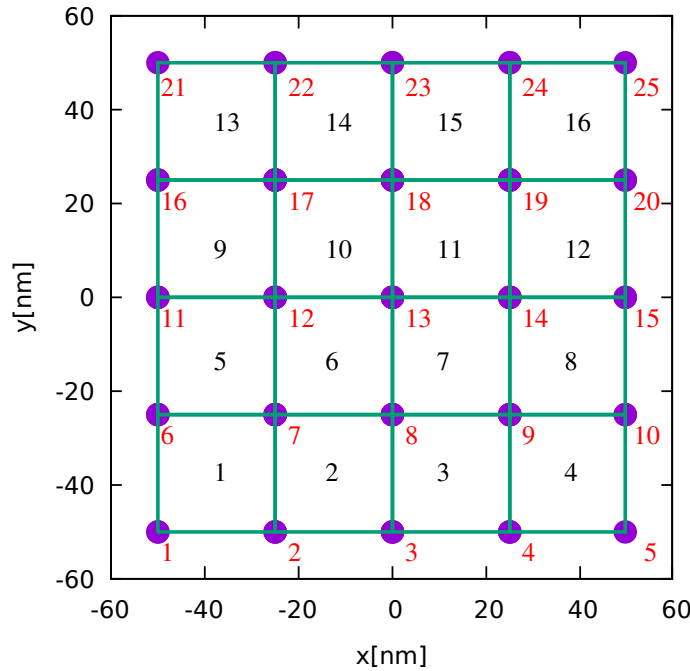
$$\Psi_n(x) = \sum_{i=1}^N c_i^n g_i(x), \quad (3)$$

gdzie n to numer stanu własnego, a g_i to funkcje kształtu rozpięte na węzłach w metodzie elementów skończonych.

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 $S_{ji} = \langle g_j | g_i \rangle$.



Rysunek 1: Elementy wygenerowane dla $N = 2$, $L = 100$ nm. Na czarno podana jest numeracja elementów, a na czerwono globalna numeracja węzłów. Kolejność numerowania jest dowolna. Proszę traktować przedstawioną numerację wybór jako przykład.

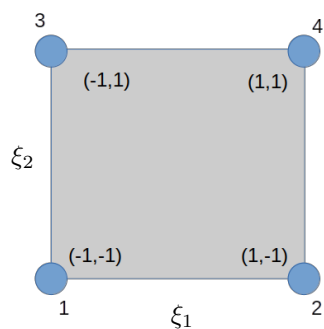
2 Elementy i buchalteria węzłów

Wygenerujemy $(2N + 1)^2$ węzłów rozłożonych na siatce kwadratowej o rozmiarze $L \times L$. Węzłom trzeba nadać tzw. numery globalne, które na rysunku 1 zaznaczone są kolorem czerwonym. Kwadraty na rysunku 1 ponumerowane kolorem czarnym to elementy, każdy z boku o długości $a = L/(2N)$.

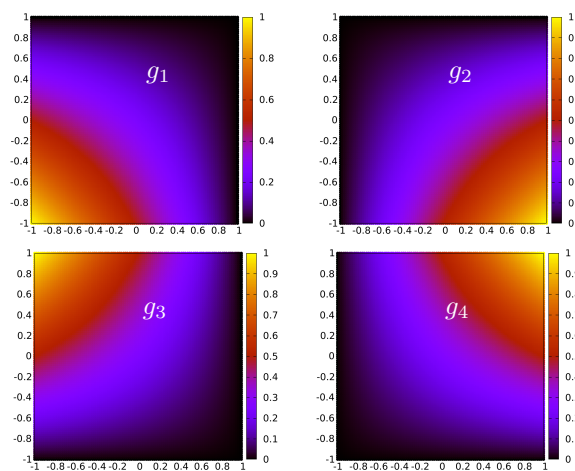
W każdym elemencie należy ponumerować węzły lokalnie (rysunek 2). Numeracji lokalnej z rysunku 2 trzymamy się w tekście oraz wzorach poniżej.

Potrzebna nam będzie tablica odsyłająca z elementu k i z węzła lokalnego i do globalnego numeru węzła $nlg(k, i)$. Globalny numer węzła o numerze lokalnym i w elemencie k , tak że np. $nlg(11, 1) = 13$, $nlg(11, 2) = 14$, $nlg(11, 3) = 18$, $nlg(11, 4) = 19$.

Zadanie 1 Napisać program generujący siatkę $(2N + 1) \times (2N + 1)$ węzłów, oraz siatkę elementów, przypisującą lokalny numery węzłów do ich numerów globalnych. Do punktacji: przyjąć $L = 100$ nm, $N = 2$, $a = L/(2N)$. Wypisać tabelę: numer elementu (od 1 do 16), numer lokalny węzła (od 1 do 4), numer globalny węzła (od 1 do 25), współrzędne x oraz y węzła.



Rysunek 2: Każdy element w swojej przestrzeni referencyjnej jest kwadratem o boku 2. Lokalna numeracja węzłów i ich współrzędne. Tej numeracji proszę się trzymać, w związku z wyborem funkcji kształtu.



Rysunek 3: Wewnątrz elementu funkcja falowa jest rozpięta na czterech funkcjach kształtu. 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

$$\vec{r}(\vec{\xi}) = \sum_{i=1}^4 \vec{r}_{nlg(k,i)} g_i(\xi_1, \xi_2), \quad (5)$$

gdzie $\vec{r} = (x, y)$ a g_i to funkcje kształtu zdefiniowane jako

$$g_1(\vec{\xi}) = f_1(\xi_1) f_1(\xi_2) \quad (6)$$

$$g_2(\vec{\xi}) = f_2(\xi_1) f_1(\xi_2) \quad (7)$$

$$g_3(\vec{\xi}) = f_1(\xi_1) f_2(\xi_2) \quad (8)$$

$$g_4(\vec{\xi}) = f_2(\xi_1) f_2(\xi_2), \quad (9)$$

oraz

$$f_1(\xi) = \frac{1 - \xi}{2} \quad (10)$$

$$f_2(\xi) = \frac{1 + \xi}{2}. \quad (11)$$

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

Przejście z przestrzeni odniesienia do przestrzeni rzeczywistej obsługuje transformacja

$$x = \frac{x_{nlg(k,1)}}{2}(1 - \xi_1) + \frac{x_{nlg(k,2)}}{2}(1 + \xi_1) \quad (12)$$

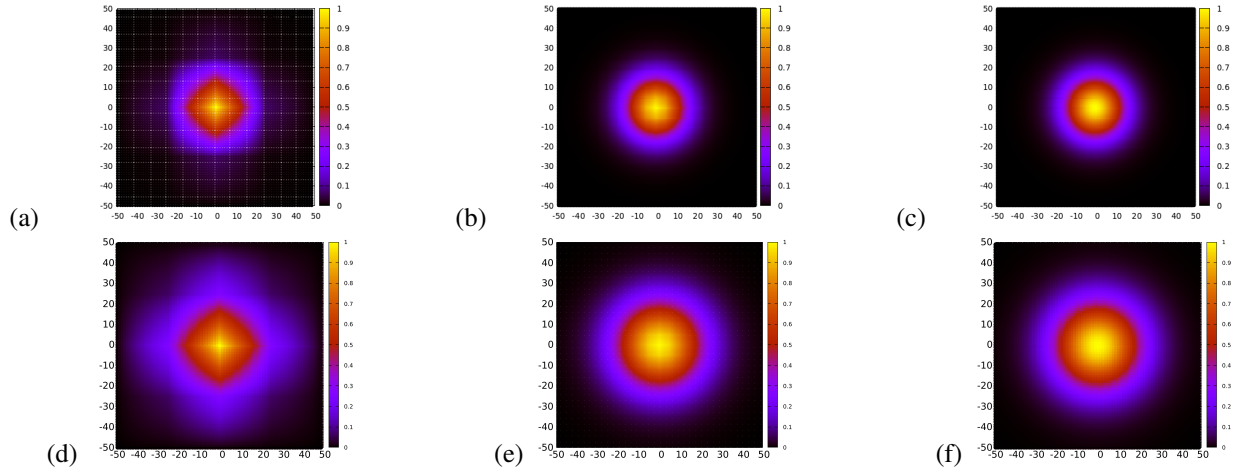
$$y = \frac{y_{nlg(k,1)}}{2}(1 - \xi_2) + \frac{y_{nlg(k,3)}}{2}(1 + \xi_2) \quad (13)$$

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

$$\Psi(\vec{r}(\vec{\xi}) \in \Omega_k) = \sum_{i=1}^4 \Psi_{nlg(k,i)} g_i(\xi_1, \xi_2), \quad (14)$$

Zadanie 2 Sprawdźmy jak wygląda funkcja jeśli w węzłach przyjmujemy $\Psi_n = \Psi(x_n, y_n) = \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_n^2 + y_n^2))$, gdzie n jest globalnym numerem węzła. Przyjmujemy $L = 100$ nm, $\hbar\omega = 10$ meV, $N = 2$ oraz $N = 10$. Wyprowadzić do pliku wartości funkcji w pudle w sposób następujący:

W każdym elemencie próbujemy wartość funkcji falowej w przestrzeni odniesienia ze skokiem 0.1 w ξ_1 oraz ξ_2 . Wyliczamy położenie w przestrzeni rzeczywistej wg wzorów 12-13. Wewnątrz każdego elementu funkcja falowa jest rozpięta przez cztery funkcje kształtu 'ważone' jej wartością na węzłach wg wzoru (14). Wyniki powinny być jak na rysunku 4(a-c).



Rysunek 4: Po lewej: funkcja falowa rozpięta na funkcjach kształtu wg zadania 2 dla $N = 2$, środek: dla $N = 10$, po prawej dokładna funkcja falowa. Pierwszy wiersz: $\hbar\omega = 10$ meV, drugi wiersz $\hbar\omega = 5$ meV

4 macierze lokalne

4.1 macierz przekrywania

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

Całkę można rozpisać na sumę przyczynków od elementów Ω_k ,

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

Całkować łatwiej w przestrzeni odniesienia. W ramach jednego elementu zdefiniujemy lokalną macierz przekrywania 4×4

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

gdzie $a^2/4$ to jacobian przejścia ze współrzędnych (x, y) do (ξ_1, ξ_2) .

Gdy uwzględnimy potencjał będziemy mieli pod całką wielomiany stopnia 4 w każdym z kierunków scałkowane po przedziale od -1 do 1 w ξ_1 oraz ξ_2 . Jednowymiarową całkę potrafi policzyć dokładnie trójpunktowa kwadratura Gaussa:

$$\int_{-1}^1 dx f(x) dx = \sum_{k=1}^3 w_k f(p_k),$$

gdzie $p_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}$, $p_2 = 0$, $p_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}$, $w_1 = 5/9$, $w_2 = 8/9$, $w_3 = 5/9$.

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

$$s_{ji}^k = s_{ji} = \frac{a^2}{4} \sum_{l=1}^3 \sum_{n=1}^3 w_l w_n g_j(p_l, p_n) g_i(p_l, p_n)$$

Zadanie 3 Policzyc i wypisać elementy lokalnej macierzy przekrywania. Wynik, jaki powinien wyjść

$$S = \frac{a^2}{4} \frac{1}{9} \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 2 & 4 \end{pmatrix}$$

4.2 macierz energii kinetycznej

Macierz

$$T_{ji} = \langle g_j | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 | g_i \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \nabla g_j | \nabla g_i \rangle$$

korzystając z antyhermitowości operatora ∇ . 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 $dx = \frac{2}{a} d\xi_1$.

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

Całkujemy kwadraturą Gaussa jak wyżej

$$t_{ji}^k = t_{ji} = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{l=1}^3 \sum_{n=1}^3 w_l w_n \left(\frac{dg_j}{d\xi_1} \Big|_{p_l, p_n} \frac{dg_i}{d\xi_1} \Big|_{p_l, p_n} + \frac{dg_j}{d\xi_2} \Big|_{p_l, p_n} \frac{dg_i}{d\xi_2} \Big|_{p_l, p_n} \right)$$

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

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

Zadanie 4 Policzyc i wypisać elementy lokalnej macierzy przekrywania. Wynik, jaki powinien wyjść

$$t = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 4 & -1 & -1 & -2 \\ -1 & 4 & -2 & -1 \\ -1 & -2 & 4 & -1 \\ -2 & -1 & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

4.3 macierz energii potencjalnej

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

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

Do wyliczenia $x(\xi_1)$ oraz $y(\xi_2)$ używamy wzorów (12) i (13).

Zadanie 4a Dla $L = 100$ nm i $N = 2$ proszę wypisać diagonalne elementy macierzy potencjału wydzielone przez elementy macierzy przekrywania v_{ii}^k/s_{ii} (w meV) dla elementu, którego numer na Rysunku 1 jest 11.

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 4
pętla po i2 od 1 do 4
  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 (na rysunku 1 : brzegowe są węzły 1-5, 21-25, oraz 16,20,11,15,6 i 10). Jeśli węzeł i jest brzegowy, to zerujemy całą kolumnę i wiersz i . 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.

Zadanie 5 Rozwiązać równanie własne $\mathbf{H}c = E\mathbf{S}c$. Zbadać 15 najniższych, dodatnich wartości własnych energii w zależności od L oraz N .

Zadanie 6 Narysować funkcje falowe dla 6 najniższych stanów dla optymalnych wartości L oraz N . (optymalne N : takie, że dalsze jego zwiększanie nie zmniejsza zauważalnie energii. optymalne L : dla ustalonego N szukamy L , przy którym energia jest minimalna). W tym celu: dla każdego stanu przypisujemy wartości funkcji w węzłach i dalej postępujemy jak w zadaniu 2. Wartości funkcji falowych w węzłach dane są przez odpowiednie składowe odpowiedniego wektora własnego, tj. c_i^n to wartość funkcji falowej w węźle i dla n tego stanu własnego.

7 ewolucja w czasie

Ewolucja w czasie funkcji falowej dana jest przez równanie Schroedingera

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (15)$$

Rozwiążemy go w bazie funkcji kształtu

$$\Psi(x, t) = \sum_{k=1}^N d_k(t) g_k(x). \quad (16)$$

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

$$\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) + \frac{dt}{2\hbar i} (H\Psi(x, t + dt) + H\Psi(x, t)). \quad (17)$$

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

$$\left[\mathbf{S} - \frac{dt}{2\hbar i} \mathbf{H} \right] \mathbf{d}(t + dt) = \left[\mathbf{S} + \frac{dt}{2\hbar i} \mathbf{H} \right] \mathbf{d}(t). \quad (18)$$

Macierze hamiltonianu i przekrywania policzyliśmy wyżej.

Zadanie 7 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

$$x(t) = \mathbf{d}^\dagger(t) \mathbf{X} \mathbf{d}(t). \quad (19)$$

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

Uwaga: ze względu na degenerację pierwszego stanu wzbudzonego nie mamy kontroli nad formą wektora własnego, który może być dowolną superpozycją $x\psi_0$ oraz $y\psi_0$. Może zdarzyć się sytuacja, w której $x(t)$ będzie stałe, wtedy w warunku początkowym proszę użyć $\mathbf{d}(t = 0) = \mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_3$.

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