

# Projekt: MES dla oscylatora harmonicznego 2D

29 października 2024

## Harmonogram

Projekt przygotowujemy w czterech krokach. Za wykonanie każdego otrzymać można po 25% punktów.

- Etap I: zadanie 1 oraz 2
- Etap II: zadanie 3 oraz 4 i 4a
- Etap III: zadanie 5 oraz 6
- Etap IV: 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

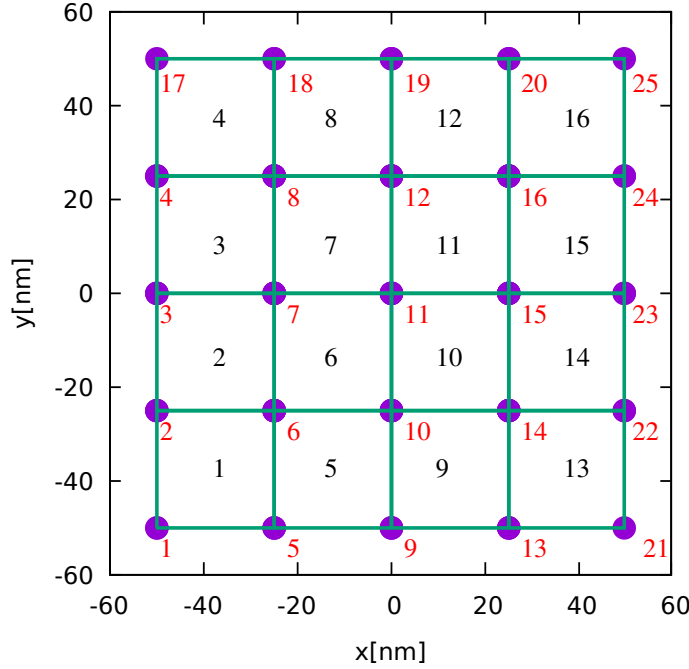
$$\Psi_n(x) = \sum_{i=1}^N c_i^n g_i(x), \quad (3)$$

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. (numeracja jak na rysunki pomoże w porównywaniu wyników z programem prowadzącego, co ułatwia szukanie ewentualnych błędów).

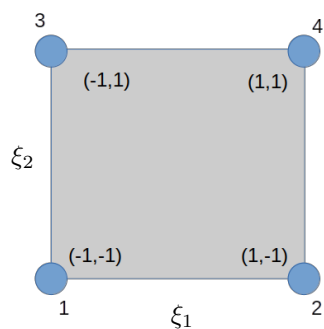
## 2 Elementy i buchalteria węzłów

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  $a = L/(2N)$ .

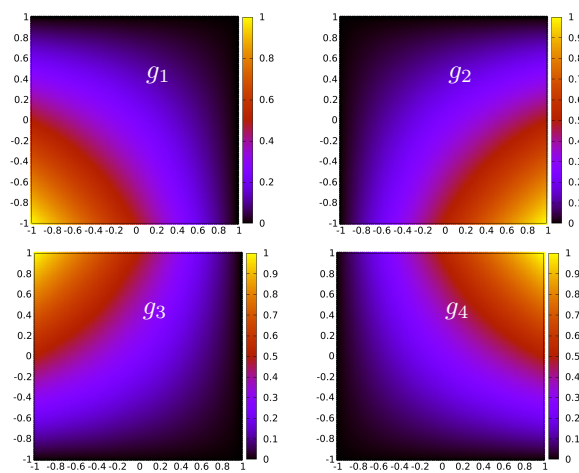
W każdym elemencie należy ponumerować węzły lokalnie (rysunek 2). Numeracji lokalnej z rysunku 2 trzymamy się w tekście oraz wzorach poniżej. Numeracja globalna – z rysunku 1 – może być wprowadzona dowolnie. Numeracji lokalnej z rysunku 2 się trzymamy.

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.  $nlg(11, 1) = 11$ ,  $nlg(11, 2) = 15$ ,  $nlg(11, 3) = 12$ ,  $nlg(11, 4) = 16$ .

**Zadanie 1** Napisać program generujący siatkę  $(2N + 1) \times (2N + 1)$  węzłów, oraz siatkę elementów, oraz przyporządkowanie lokalny  $\rightarrow$  globalny w formie tablicy  $nlg(k, i)$ . Do punktacji: przyjąć  $L = 100$  nm,  $N = 2$ ,  $a = L/(2N)$ . Wypisać tabelę:



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  $k = i$ .

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.

### 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).

Dla elementu  $k$  przejście z przestrzeni odniesienia do przestrzeni rzeczywistej obsługuje transformacja

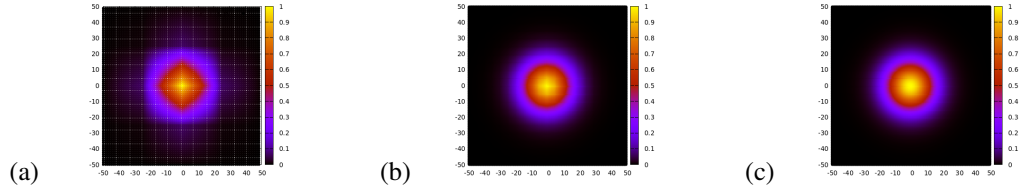
$$x = \frac{x_{nlg(k,1)}}{2}(1 - \xi_1) + \frac{x_{nlg(k,2)}}{2}(1 + \xi_1) \quad (12)$$

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

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 sposób następujący:



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.

W każdym elemencie próbujemy wartość funkcji falowej w przestrzeni odniesienia ze skokiem 0.1 w  $\xi_1$  oraz  $\xi_2$ . 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).

## 4 macierze lokalne

### 4.1 macierz przekrywania

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

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

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

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

Całkować łatwiej w przestrzeni odniesienia. W ramach jednego elementu zdefiniujemy lokalną macierz przekrywania  $4 \times 4$

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

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

Gdy uwzględnimy potencjał będziemy mieli pod całką wielomiany stopnia 4 w każdym z kierunków scałkowane po przedziale od -1 do 1 w  $\xi_1$  oraz  $\xi_2$ . 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 Hamiltona jest sumą macierzy energii potencjalnej oraz energii kinetycznej. Macierz energii kinetycznej można przedstawić w postaci całki z iloczynu skalarnego gradientów funkcji kształtu dzięki antyhermitowości operatora  $\nabla$

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

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, w przeciwieństwie do macierzy energii kinetycznej oraz przekrywania, są różne dla każdego elementu

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

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

$$v_{ji}^k = \frac{a^2}{4} \frac{m\omega^2}{2} \sum_{l=1}^3 \sum_{n=1}^3 w_l w_n (x(p_l)^2 + y(p_n)^2) g_j(p_l, p_n) g_i(p_l, p_n)$$

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 macierz potencjału 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, 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.

**Zadanie 5** Rozwiązać równanie własne  $\mathbf{H}\mathbf{c} = E\mathbf{S}\mathbf{c}$ .<sup>1</sup> Na wejściu podajemy macierze  $\mathbf{S}$  oraz  $\mathbf{H}$ . Na wyjściu dostaniemy wartości własne  $E$  oraz odpowiadające im wektory własne  $\mathbf{c}$ , takie, że składowa  $i$ -ta wektora odpowiada wartości funkcji falowej w węźle  $i$ . 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

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

---

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



$x(t)$  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).