Koka FEM på Schrödinger Kvanthagar

Håkan T. Johansson, F96

1999-10-08

Sammanfattning

Den tidsoberoende schrödingerekvationen har lösts för några 2D kvanthagar med hjälp av finita elementmetoden.

1 Kvanthagar

Inspirerad av inlämningsuppgift 2:5, bilderna på den där bifogade hemsidan [1] och i läroboken [2] har jag valt sju olika områden. Alla har samma area, se figur 1.

1. Kvadrat,
2. Rektangel, sidor med förhållande $1:2$,
3. Rektangel, sidor med förhållande $1:\sqrt{2}$,
4. Liksidig triangel,
5. Cirkel,
6. Stadiumområde, långsidan dubbelt så lång som kurvans radie,
7. Halvcirkel.

2 Schrödingerekvationen

För partikeln som studeras (tex en elektron) gäller att inhägnaden är rymningssäker, så att partikeln omöjligtvis kan befinna sig utanför randen. Detta uttrycks

$$V = \begin{cases} 0, & \Omega \\ \infty, & \neg\Omega \end{cases} \tag{1}$$

Vidare betraktas partikeln kvantmekaniskt, så att den styrs av schrödingerekvationen

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi = i\hbar\frac{d\Psi}{dt}. \tag{2}$$

Då endast stationära tillstånd studeras, kan (2) separeras, och egenvärdesproblemet

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi = E\Psi. \tag{3}$$

erhålls. Om vi endast studerar principuppträdandet för de stationära tillståden kan konstanter såsom $\hbar$ och m kastas bort. Genom utnyttjande av villkoret på potentialen utanför området fås problemet

$$\begin{cases} -\Delta\Psi = \epsilon\Psi, & \Omega \\ \Psi = 0, & \partial\Omega \end{cases} \tag{4}$$

där ϵ är ett mått på tillståndets energi, och Ω betecknar kvanthagen.

3 FEM

För att lösa den tidsoberoende SE, använder jag finita elementmetoden. Ett C++-program genererar noder, trianglar och matriser, medan MATLAB löser egenvärdesproblemen och ordnar grafiken.

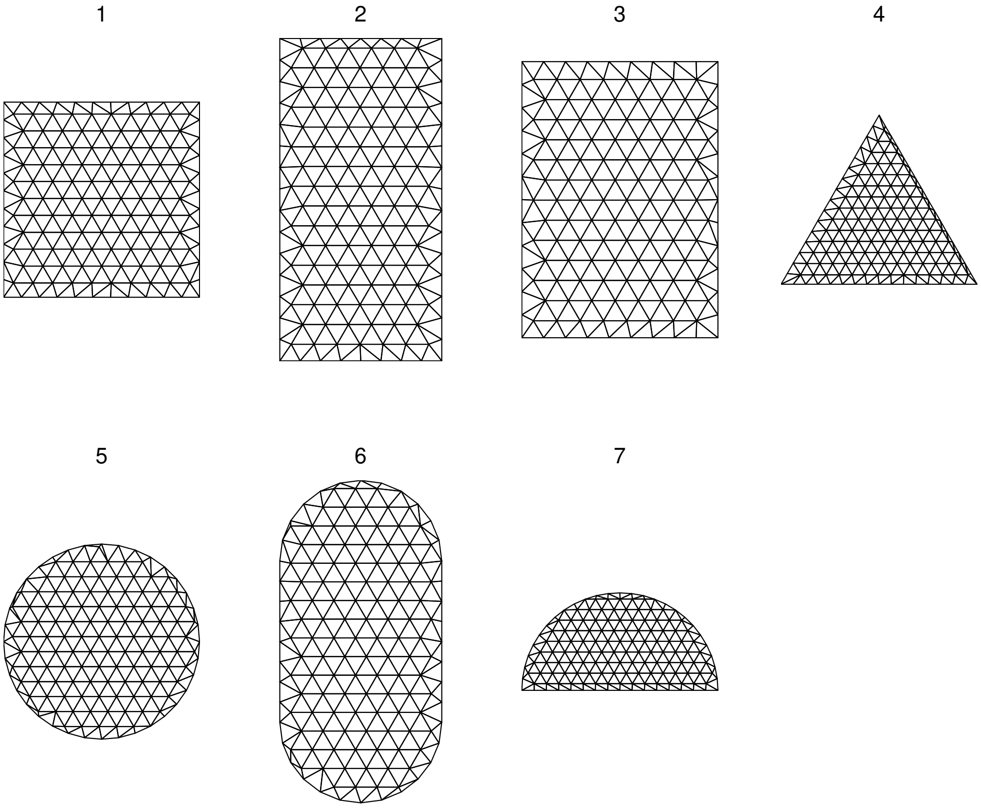
3.1 Rutnät

FEM låter oss beräkna funktionsvärden i ett antal diskreta punkter (noder), som först måste väljas. Dessutom måste området delas upp i trianglar mellan punkterna, så att ekvationssystem för beräkningen kan ställas upp. För enkelhets skull har jag valt att dela upp området i liksidiga trianglar med konstant sidlängd h. Dessa genereras för hela området, utom för de trianglar som skulle sticka ut utanför randen. Runt randen placeras noder med avståndet h. Randnoderna förbinds till sist med lämpliga ytternoder i den inre trianguleringen. Figur 1 visar trianguleringarna för de valda områdena. Naturligtvis kan h varieras.

3.2 Ekvationssystem

Låt antalet noder i en triangulering vara m. Låt $\varphi_i(\mathbf{r})$ vara bilinjära baståltfunktioner, med värdet 1 i noden i och värdet 0 i alla andra noder. Då kan vågfunktionen Ψ för ett egentillstånd approximeras med en bilinjär funktion $u(\mathbf{r})$, med värdet u_i i noden i. Vi kan skriva $u = \sum_{i=1}^{m} u_i\varphi_i$, så att (4) blir

$$-\nabla^2\sum_{i=1}^{m} u_i\varphi_i - \epsilon\sum_{i=1}^{m} u_i\varphi_i = 0. \tag{5}$$



Figur 1: De aktuella kvanthagarna, indelade i trianglar. Alla områden har arean 1.

Då (5) för $k = 1, 2 \ldots m$ multpliceras med $\int_\Omega \varphi_k$ erhålls ett ekvationssystem som uttrycker vår vilja att $-\nabla^2 u$ skalla ligga så nära ϵu som möjligt:

$$\int_\Omega \varphi_k \left(-\nabla^2 \sum_{i=1}^{m} u_i \varphi_i - \epsilon \sum_{i=1}^{m} u_i \varphi_i \right) = 0, \quad k = 1, 2 \ldots m \tag{6}$$

Eftersom integralerna kan beräknas för basfunktionerna, kan det skrivas på matrisform

$$Au = \epsilon B u, \tag{7}$$

$$A_{ki} = -\int_\Omega \varphi_k \nabla^2 \varphi_i = -[\varphi_k \nabla \varphi_i]_{\partial\Omega} + \int_\Omega \nabla \varphi_k \nabla \varphi_i = \int_\Omega \nabla \varphi_k \nabla \varphi_i, \tag{8}$$

$$B_{ki} = \int_\Omega \varphi_k \varphi_i. \tag{9}$$

I (8) har villkoret $u = 0$ på randen utnyttjats. (8) och (9) blir nollskillda endast då k och i indexerar grannoder, så att (7) blir glest.

3.3 Egenvärdesberäkning

Det generaliserade egenvärdesproblemet (7) kan tex lösas med MATLABs kommado `eigs`, som kan ge ett fåtal egenvärden med egenvektorer runt ett önskat egenvärde.

3.3.1 Verifiering i rektangulärt område

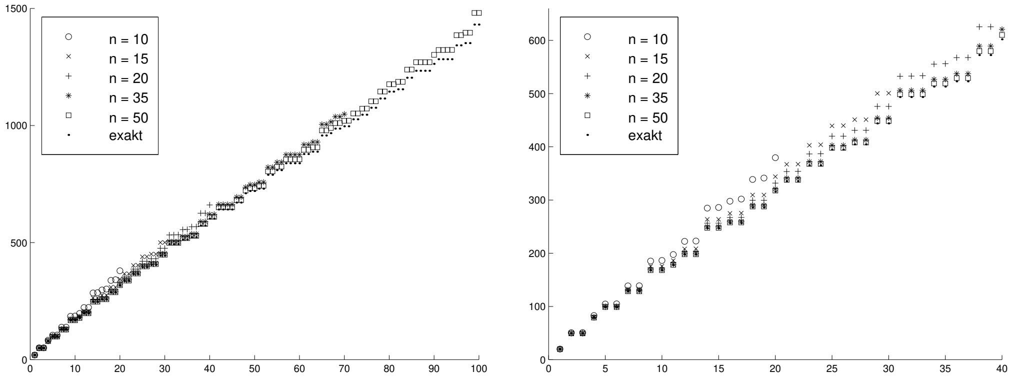
De stationära tillstånden med tillhörande energier kan beräknas exakt bla för rektangulära områden av formen $0 < x < a, 0 < y < b$, så att vi har lösningen till (4):

$$\Psi_{n,m} = N \sin(\frac{n\pi x}{a}) \sin(\frac{m\pi y}{b}), \tag{10}$$

$$\epsilon_{n,m} = \pi^2(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2}), \tag{11}$$

med N en normeringskonstant.

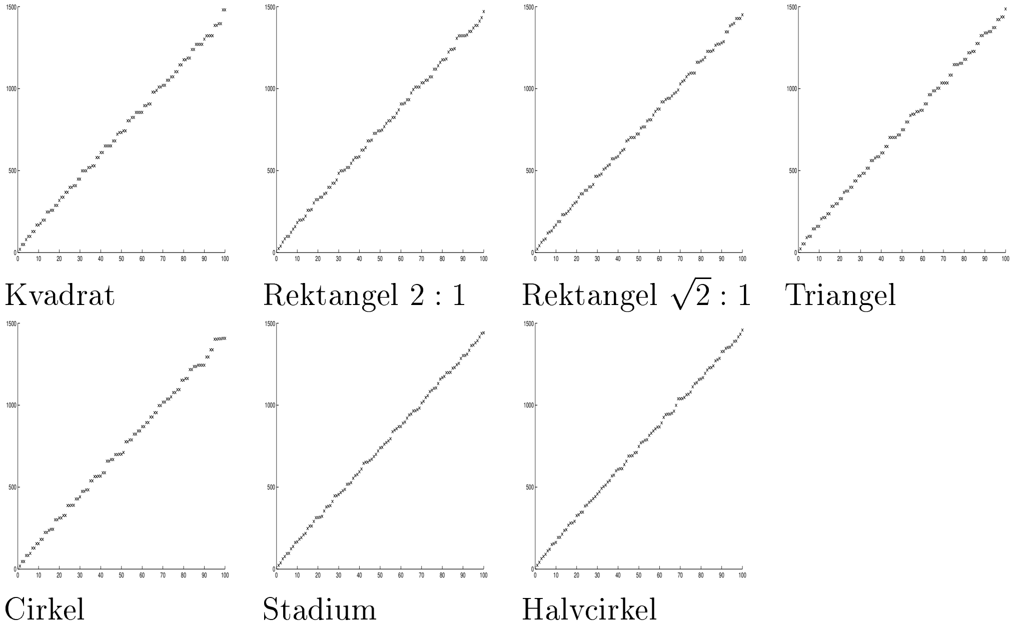
I figur 2 ses $\epsilon_{n,m}$, tillsammans med approximationer beräknade med olika fina nät. I figuren observeras dels egenvärdens degeneration (som diskuteras i avsnitt 4.1), samt att approximationerna försämras allteftersom egenvärdena blir större. Det senare beror på att höga egenvärden svarar mot många oscillationer hos egenfunktionerna, och vår linjära modell får till slut svårt att hänga med. Problemet (4) har oändligt många egenvärden, medan våra matriser bara kan representera ett antal motsvarande dess storlek. Anledningen till att approximationerna blir större än de riktiga värdena är att vår, vid höga frekvenser, grovt tillyxade linjära modell i genomsnitt överdriver andraderivatan (i de skarpa kanterna), som ju är måttet på systemets kinetiska energi. Eftersom vi har valt potentialen noll, är det dessutom systemets totala energi.



Figur 2: De första egenvärdena för en kvadratisk, oändligt djup potentiallåda med arean 1, beräknade med `eigs`. $1/n$ anger kantlängden i trianguleringen.

4 Egenvärden

Figur 3 visar utvecklingen av de första 100 egenvärdena för de valda kvantinhägnaderna. Det mest slående är att figurerna är nästan likadana. Detta är nog inte så konstigt egentligen, eftersom alla inhägnader har samma area och förutom ungefär en faktor 2 har samma höjd-bredd förhållande och därmed ser ungefär lika ut.

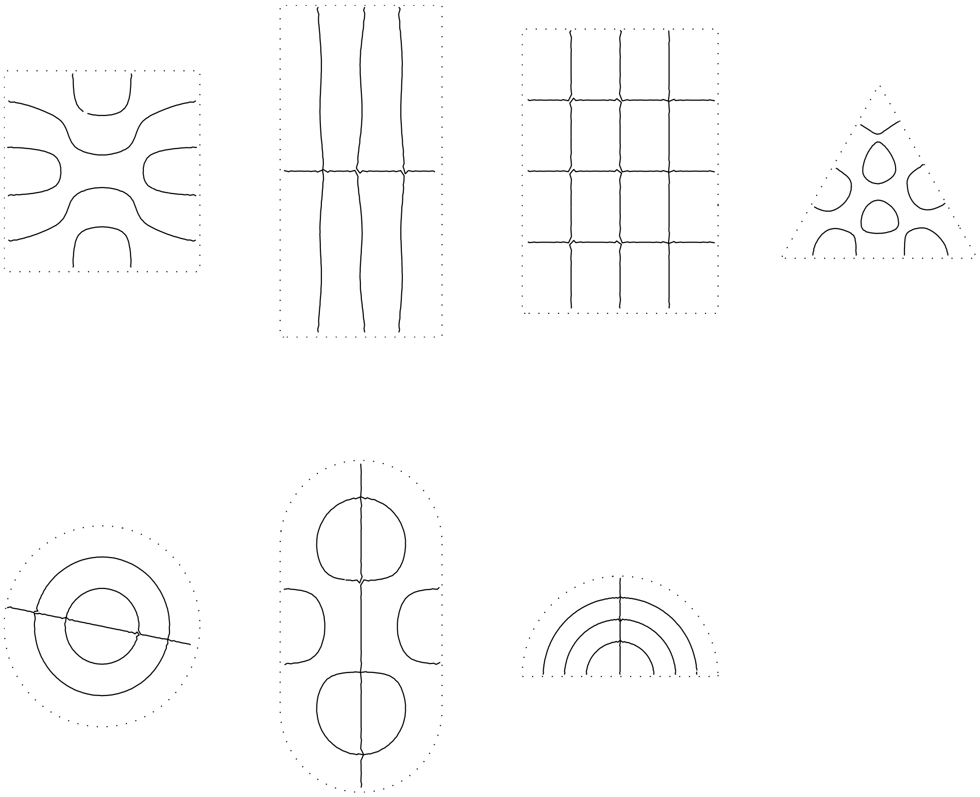


Figur 3: De första 100 egenvärdena för kvantinhägnaderna. De tre fyrkantområdena och cirkeln har degenererade energinivåer, medan de övriga tre ej visar några sådana tendenser (syns inte riktigt i figurerna, men avslöjas då värdena granskas). Trianguleringarnas kantlängd har varit $\approx 1/50$.

4.1 Degeneration

Degenerationen av energiegenvärdena för rektangulära områden fås av (11), nämligen så att då vi för olika n och m kan få samma resultat av $n^2 + m^2\frac{a^2}{b^2}$, har vi hittat en degenererad energinivå. Detta är möjligt både för kvadraten ($a = b = 1$) och den första rektangeln ($a = 2b$). Min tanke var ett rektangeln med $a = \sqrt{2}b$ skulle vara degenerationsfri, men det visar sig att tex $3^2 + \frac{3^2}{\sqrt{2}^2} = \frac{18+9}{2} = \frac{27}{2} = \frac{2+25}{2} = 1^2 + \frac{5^2}{\sqrt{2}^2}$, så att även denna form har degenererade egenvärden. En fyrkant med $a = \pi b$ borde däremot vara degenerationsfri.

Vårt problem (4) kan för det cirkulära området separeras, vilket ger besselfunktioner i r-led som lösningar ($J_m(kr)$ med k kvantiserat av $J_m(kR) = 0$, då R är områdets radie), modulerade med $\cos m\theta$ resp $\sin m\theta$, $m = 0, 1, 2\ldots$. Egenvärdet blir samma för en egenfunktion om den varierats med sin eller cos, varför dessa egenvärden blir tvåfaldigt degenererade, utom för $m = 0$ då sin-lösningen försvinner. För halvcirkeln ger randvillkoret $\Psi = 0$ i $\theta = 0$ och $\theta = \pi$ att endast sin-varianten kan användas som lösning, och då för $m = 1, 2, 3\ldots$. Detta gör att halvcirkeln inte får några degenererade egenvärden.



Figur 4: Egenfunktioners nollskärningar för egenvärdena närmast 350. Trianguleringens kantlängd har varit $\approx 1/35$.

5 Egenfunktioner

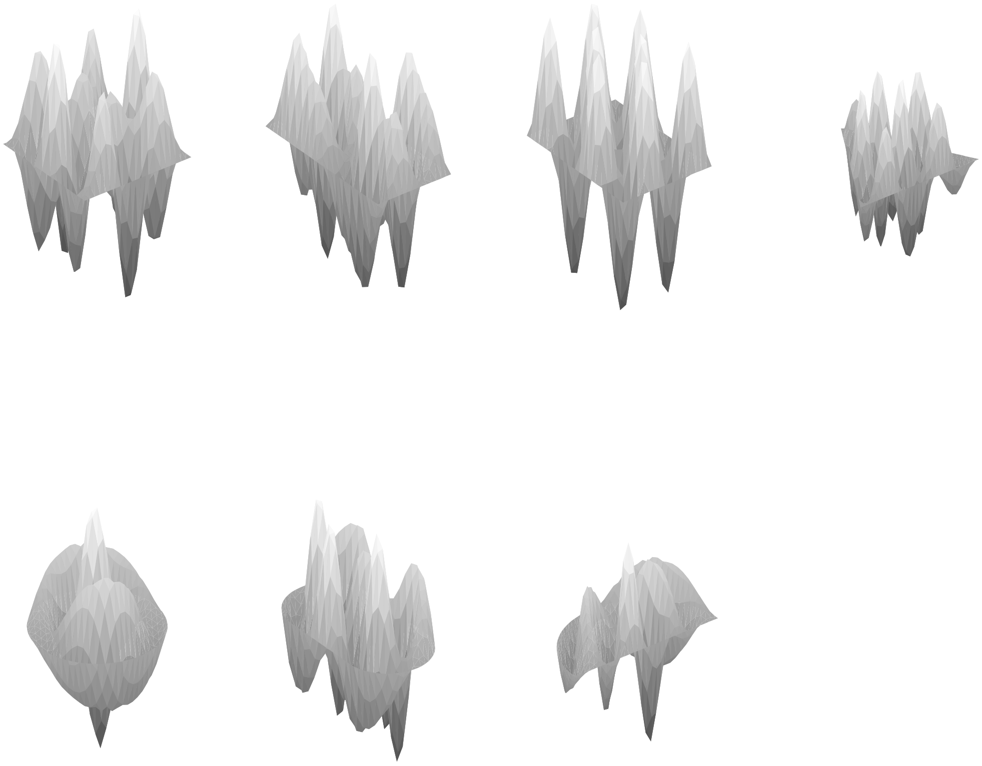
Figurerna 4-6 visar några valda egenvärdes motsvarande egenfunktioner. Nodlinjerna är helt enkelt ritade där den bilinjära approximationen till egenfunktionen är noll, dvs för alla trianglar där någon nod är under noll och någon över noll har en linje ritats. Detta gör att högst en linje kan gå genom varje triangel, så att korsningar mellan nodlinjer i egenfunktionerna måste uttolkas ur bilderna. Nodlinjer som passerar nära varandra bör tolkas som korsningar.

Generellt syns[1] att en karakterisk längd, samma för alla områden, finns för varje ungefärligt egenvärde.

5.1 Kvadradiskt område

Nodlinjerna för detta område är felaktiga, särskilt för egenvärdet runt 350 (figur 4). De skall skära varandra precis som de rektangulära områdena. Från figur 2 vet vi ju dock

[1]Observera att figurerna inte är helt skalenliga.



Figur 5: Egenfunktioner för egenvärdena närmast 350. Trianguleringens kantlängd har varit $\approx 1/20$ (urspr. $\approx 1/35$ (minska .ps-storlek)) .

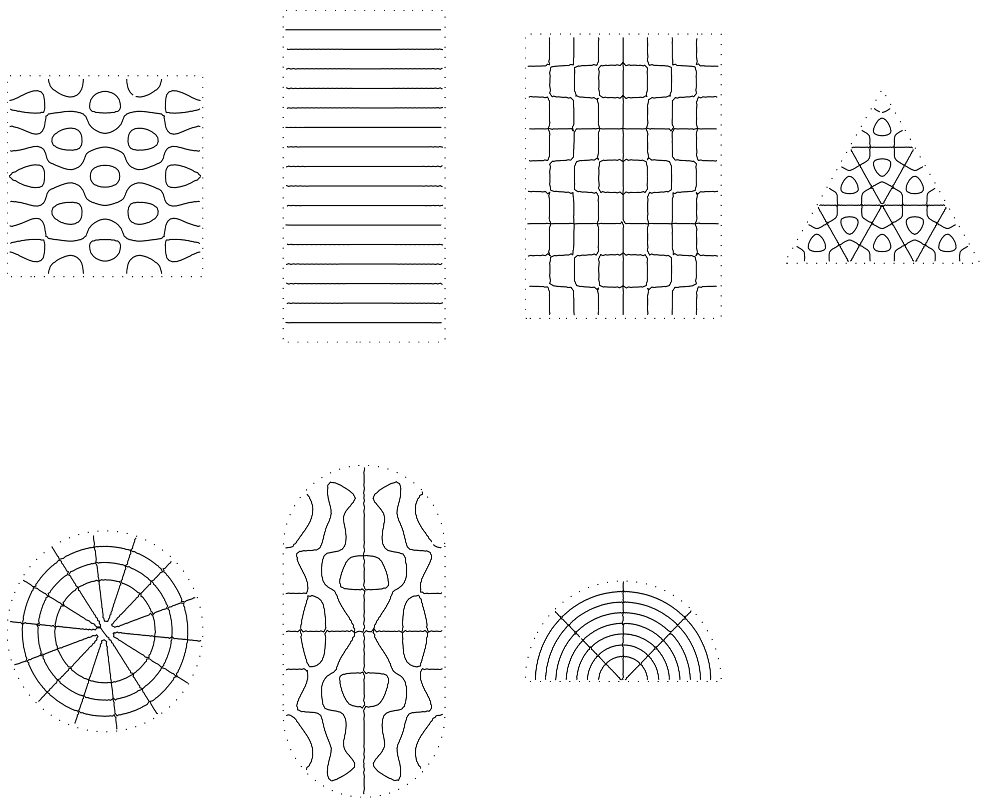
att egenvärdena tycks vara korrekt beräknade. Det skulle kunna var trianguleringen som spökar.

5.2 Rektangulärt område

Ser ut som väntat.

5.3 Triangelområde

Med 'ledning' av nodlinjernas uppträdande hos det kvadradiska området är det vanskligt att uttala sig om nodlinjerna för fallet $\epsilon \approx 350$. Däremot bör vi i fallet $\epsilon \approx 1500$ utsträcka de deformerade trianglarna så att vi har delat upp den ursprungliga triangeln i successivt mindre, likadana trianglar. Att tre trianglar redan är skarpa beror naturligtvis på att trianguleringen är baserad på liksidiga tringlar.



Figur 6: Egenfunktioners nollskärningar för egenvärdena närmast 1500. Trianguleringens kantlängd har varit $\approx 1/50$.

5.4 (Halv-)cirkelområde

Erbjuder inga överraskningar.

5.5 Stadiumområdet

Har ett rörigt nodmönster, som bottnar i den lömska geometrin. Eftersom vi skall kunna skriva ett godtyckligt tillstånd som en summa av egentillstånd får det inte finnas någon speciell punkt (eller speciella punkter) som alltid är noll (eller samtidigt är noll). Tillsammans med kravet $-\Delta\Psi = \epsilon\Psi$ över hela området, som kräver kontinuitet, finns det tydligen ingen annan utväg än det tillsynes planlösa nodschemat.

Referenser

[1] *http://www.almaden.ibm.com:80/vis/stm/gallery.html*

[2] *Quantum Mechanics,* kap 16.4, Richard W. Robinett, Oxford University Press.