Jan Westergren
Molekylfysikgruppen
Institutionen för experimentell fysik
Chalmers tekniska högskola &
Göteborgs universitet

September 1998

Finita elementmetoden

– för schrödingerekvationen

En partikel i en endimensionell låda

Vi skall lösa schrödingerekvationen på ett intervall I = [–*L*/2 , *L*/2]. Utanför I antar vi att Ψ är försumbart liten så vi sätter den till noll där. Vi skall alltså lösa problemet

$$\begin{aligned} &-\Psi'' + V(x)\Psi = e\Psi \\ &\Psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \Psi\left(\frac{L}{2}\right) = 0 \end{aligned} \tag{1}$$

Om vi multiplicerar med en godtycklig funktion $s(x)$, som har en kontinuerlig andraderivata och uppfyller $s\,(-L/2) = s\,(L/2) = 0$, och sedan integrerar över I får vi

$$-\int_{-L/2}^{L/2} \psi'' s(x)dx + \int_{-L/2}^{L/2} V(x)\Psi s(x)dx = e\int_{-L/2}^{L/2} \Psi s(x)dx$$

Eftersom $s\,(x)$ är noll i ändpunkterna ger partiell integration av första termen

$$-\int_{-L/2}^{L/2} \psi'' s(x)dx = -\left[\psi' s(x)dx\right]_{-L/2}^{L/2} + \int_{-L/2}^{L/2} \psi' s'(x)dx = 0 + \int_{-L/2}^{L/2} \psi' s'(x)dx$$

Det visar sig att lösningarna till (1) är samma som de funktioner $\Psi(x)$ som för alla möjliga funktioner $s\,(x)$ uppfyller

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi' s'(x)dx + \int_{-L/2}^{L/2} V(x)\Psi s(x)dx = e\int_{-L/2}^{L/2} \Psi s(x)dx \tag{2}$$

ψ'' har kontinuerlig andraderivata.

Först nu inför vi en förenkling! Vi antar att vi bara söker efter $\Psi(x)$ bland kontinuerliga, styckvis linjära funktioner som uppfyller $\Psi(-L/2) = \Psi(L/2) = 0$ och att $s\ (x)$ också är en kontinuerlig, styckvis linjär funktion. Vi formulerar följande problem:

Finn de kontinuerliga, styckvis linjära funktionerna Ψ_L som uppfyller

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi_L' s_L'(x)dx + \int_{-L/2}^{L/2} V(x)\Psi_L s_L(x)dx = e\int_{-L/2}^{L/2} \Psi_L s_L(x)dx \tag{3}$$

- för alla funktioner $s_L(x)$ som är kontinuerliga och styckvis linjära och har $s_L\left(-\frac{L}{2}\right) = s_L\left(\frac{L}{2}\right) = 0.$
- $\Psi_L\left(-\frac{L}{2}\right) = \Psi_L\left(\frac{L}{2}\right) = 0$

Nu lägger vi in en indelning av x-axeln. Vi inför också s.k. basfunktioner. Vi kallar basfunktionerna φ_i, och deras utseende visas i fig 1. De är noll förutom över intervallet $[x_{i-1}\ ,\ x_{i+1}]$. I toppen har de värdet 1.

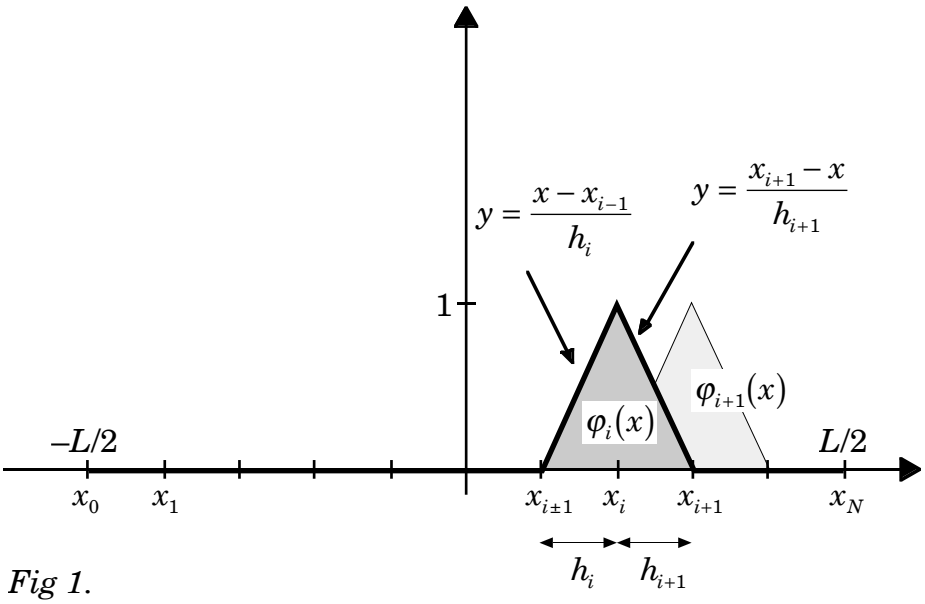


Fig 1.

Vi delar in axeln i N delar vilket ger oss N –1 basfunktioner. De styckvis linjär funktionerna kan nu skrivas som en summa av basfunktionerna med olika koefficienter framför.

$$\Psi_L(x) = \sum_{i=1}^{N-1} a_i\varphi_i \tag{4}$$

$$s_L(x) = \sum_{j=1}^{N-1} b_j\varphi_j \tag{5}$$

Intervallets ändlägen kallar vi x_0 respektive x_N.

Med (4) och (5) insatta i (3) skall våra lösningar Ψ_{L} uppfylla

$$\int_{x_0}^{x_N}\left(\sum_{i=1}^{N-1}a_i\varphi_i'\right)\left(\sum_{j=1}^{N-1}b_j\varphi_j'\right)dx+\int_{x_0}^{x_N}V(x)\left(\sum_{i=1}^{N-1}a_i\varphi_i\right)\left(\sum_{j=1}^{N-1}b_j\varphi_j\right)dx=e\int_{x_0}^{x_N}\left(\sum_{i=1}^{N-1}a_i\varphi_i\right)\left(\sum_{j=1}^{N-1}b_j\varphi_j\right)dx \Leftrightarrow$$

$$\sum_{j=1}^{N-1}b_j\left\{\sum_{i=1}^{N-1}a_i\int_{x_0}^{x_N}\varphi_j'\varphi_i'dx+\sum_{i=1}^{N-1}a_i\int_{x_0}^{x_N}V(x)\varphi_j\varphi_i dx-e\sum_{i=1}^{N-1}a_i\int_{x_0}^{x_N}\varphi_j\varphi_i dx\right\}=0$$

För att summan över j skall vara noll för alla kombinationer av b_j krävs att att alla termer i summan skall vara noll . Då får vi

$$\sum_{i=1}^{N-1}a_i\int_{x_0}^{x_N}\varphi_j'\varphi_i'dx+\sum_{i=1}^{N-1}a_i\int_{x_0}^{x_N}V(x)\varphi_j\varphi_i dx=e\sum_{i=1}^{N-1}a_i\int_{x_0}^{x_N}\varphi_j\varphi_i dx,\qquad j=1,\ldots,N-1$$

Dessa N–1 ekvationer kan skrivas i matrisform som

$$\left\{\begin{bmatrix}\int_{x_0}^{x_N}\varphi_1'\varphi_1'dx & \ldots & \int_{x_0}^{x_N}\varphi_1'\varphi_{N-1}'dx\\ \ldots & & \\ \ldots & & \ldots\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\int_{x_0}^{x_N}V(x)\varphi_1\varphi_1dx & \ldots & \int_{x_0}^{x_N}V(x)\varphi_1\varphi_{N-1}dx\\ \ldots & & \\ \ldots & & \ldots\end{bmatrix}\right\}\cdot\begin{bmatrix}a_1\\ \ldots\\ a_{N-1}\end{bmatrix}=$$

$$=e\begin{bmatrix}\int_{x_0}^{x_N}\varphi_1\varphi_1dx & \ldots & \int_{x_0}^{x_N}\varphi_1\varphi_{N-1}dx\\ \ldots & & \\ \ldots & & \ldots\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}a_1\\ \ldots\\ a_{N-1}\end{bmatrix}$$

eller som

$$\{\mathbf{A}+\mathbf{C}\}\mathbf{a}=e\mathbf{B}\mathbf{a}\Leftrightarrow\mathbf{B}^{-1}\{\mathbf{A}+\mathbf{C}\}\mathbf{a}=e\mathbf{a}$$

Genom att ta fram egenvärdena och egenfunktionerna till $\mathbf{B}^{-1}\{\mathbf{A}+\mathbf{C}\}$ kan vi rita upp lösningarna till schrödingerekvationen och motsvarande energier. Matriselementen i **A** och **B** beräknas analytiskt. För **C** kan man utan större fel förenkla,

$$\int_{x_0}^{x_N}V(x)\varphi_i\varphi_i dx\approx V\left(x_i-\frac{h_i}{2}\right)\cdot\int_{x_i-h_i}^{x_i}\varphi_i\varphi_i dx+V\left(x_i+\frac{h_{i+1}}{2}\right)\cdot\int_{x_i}^{x_i+h_{i+1}}\varphi_i\varphi_i dx$$

En partikel i en tvådimensionell låda

Vi skall nu lösa schrödingerekvationen på en rektangel Ω, se fig 2. Rektangelns kant kallar vi randen och betecknar Γ. Vi formulerar vårt problem:

$$\begin{aligned} &-\Delta\Psi + v(x,y)\Psi = e\Psi \\ &\Psi = 0 \text{ på } \Gamma. \end{aligned} \qquad (6)$$

$$\Delta\Psi = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}$$

$$\mathbf{x} = (x, y)$$

Återigen multiplicerar vi ekvationen med en godtycklig funktion $s(x,y)$, som har kontinuerliga andraderivator och som är noll på Γ. Vi integrerar sedan över hela Ω.

$$-\int_\Omega s(x,y)\Delta\Psi d\mathbf{x} + \int_\Omega s(x,y)v(x,y)\Psi d\mathbf{x} = e\int_\Omega s(x,y)\Psi d\mathbf{x}$$

Den partiella integrationen i en dimension motsvaras av Greens formel i två dimensioner.

$$-\int_\Omega s(x,y)\Delta\Psi d\mathbf{x} = -\int_\Gamma s(x,y)\frac{\partial\Psi}{\partial\mathbf{n}}d\sigma + \int_\Omega \nabla s(x,y)\cdot\nabla\Psi d\mathbf{x} = 0 + \int_\Omega \nabla s(x,y)\cdot\nabla\Psi d\mathbf{x}$$

$$\nabla\Psi = \left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}, \frac{\partial\Psi}{\partial y}\right) \qquad \frac{\partial\Psi}{\partial\mathbf{n}} = \frac{\partial\Psi}{\partial x}dx + \frac{\partial\Psi}{\partial y}dy$$

Ekvation (6) är ekvivalent med att lösningarna $\Psi(x,y)$ för alla möjliga funtioner $s(x,y)$ uppfyller

$$\int_\Omega \nabla s(x,y)\cdot\nabla\Psi d\mathbf{x} + \int_\Omega s(x,y)v(x,y)\Psi d\mathbf{x} = e\int_\Omega s(x,y)\Psi d\mathbf{x}$$

ψ har kontinuerliga andraderivator.

Det som motsvarar axelindelning i en dimension är en triangulering i två dimensioner, se fig 2. Våra numeriska lösningar är funktioner som är kontinuerliga och linjära över dessa små trianglar.

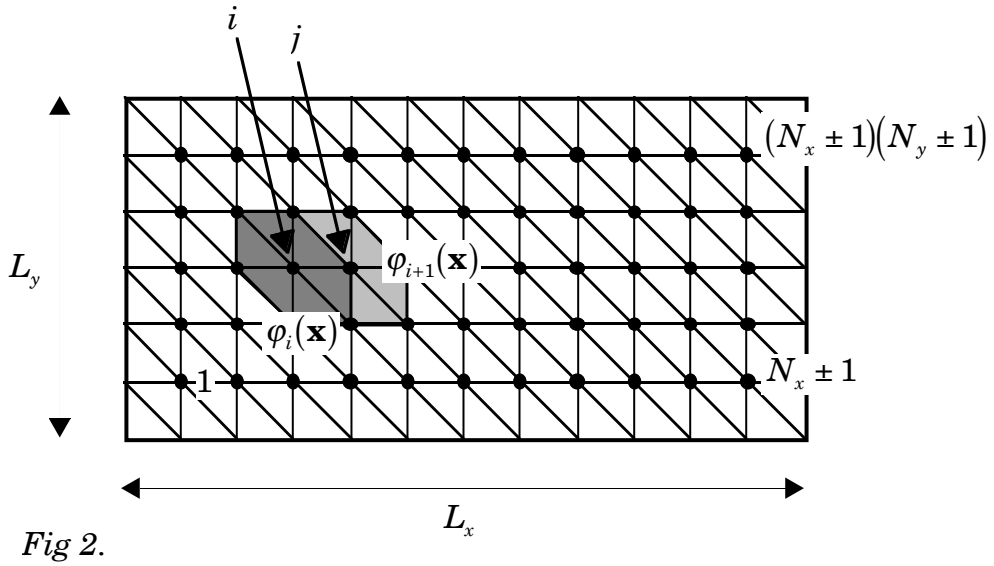


Fig 2.

Varje punkt motsvarar en nod. Vi har N_x–1 stycken i x-led och N_y–1 i y-led. För enkelhets skull justerar vi L_y så att

$$\frac{L_x}{N_x} = \frac{L_y}{N_y}$$

Basfunktionen φ_i, är sådan att den är 1 i noden i och går sedan linjärt ner till 0 i de noder som den delar en triangel med, dvs den är en pyramid med höjden 1. I övriga rektangeln är den 0, se fig 3.

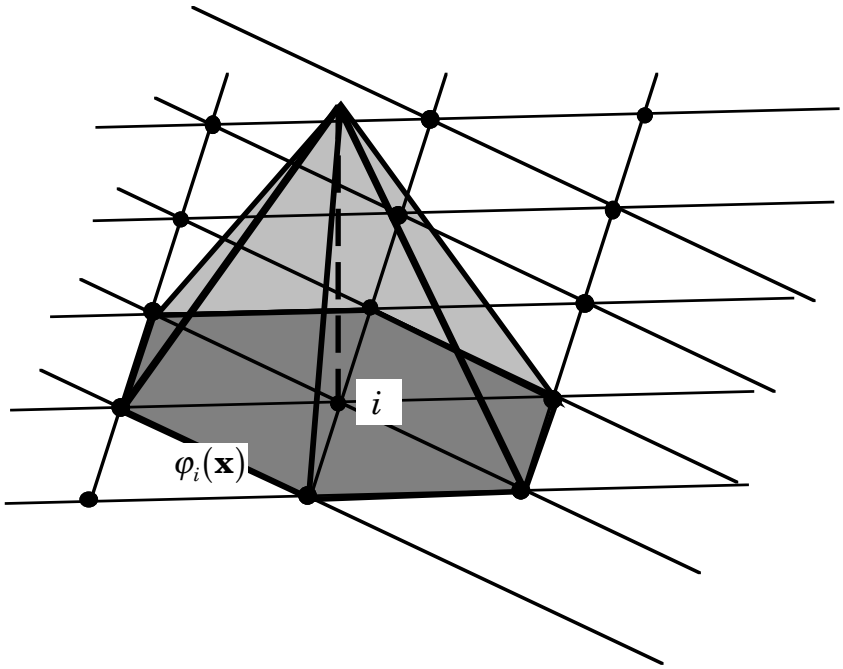


Fig 3.

Vårt problem att lösa blir

Finn funktionerna Ψ_L som uppfyller

$$\int_\Omega \nabla s_L(x,y)\cdot\nabla\Psi_L d\mathbf{x} + \int_\Omega s_L(x,y)v_L(x,y)\Psi_L d\mathbf{x} = e\int_\Omega s_L(x,y)\Psi_L d\mathbf{x} \qquad (7)$$

- för alla funktioner $s_L(x,y)$ som är styckvis linjära och har $s_L = 0$ på Γ.
- $\Psi_L = 0$ på Γ.

De styckvis linjära funktionerna kan skrivas som en summa av basfunktionerna med olika koefficienter framför.

$$\Psi_L(x,y) = \sum_{i=1}^{N-1} a_i\varphi_i(x,y)$$

$$s_L(x,y) = \sum_{j=1}^{N-1} b_j\varphi_j(x,y)$$

Dessa uttryck sätter vi in i (7) och får till slut

$$\left\{\begin{bmatrix} \int_\Omega \nabla\varphi_1\cdot\nabla\varphi_1 d\mathbf{x} & \dots & \int_\Omega \nabla\varphi_1\cdot\nabla\varphi_{N-11} d\mathbf{x} \\ \dots & & \\ \dots & & \dots \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \int_\Omega v(x,y)\varphi_1\varphi_1 d\mathbf{x} & \dots & \int_\Omega v(x,y)\varphi_1\varphi_{N-1} d\mathbf{x} \\ \dots & & \\ \dots & & \dots \end{bmatrix}\right\}\cdot\begin{bmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_{N-1} \end{bmatrix} =$$

$$= e\begin{bmatrix} \int_\Omega \varphi_1\varphi_1 d\mathbf{x} & \dots & \int_\Omega \varphi_1\varphi_{N-1} d\mathbf{x} \\ \dots & & \\ \dots & & \dots \end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_{N-1} \end{bmatrix}$$

Detta skriver vi

$$\{\mathbf{A}+\mathbf{C}\}\mathbf{a} = e\mathbf{B}\mathbf{a} \Leftrightarrow \mathbf{B}^{-1}\{\mathbf{A}+\mathbf{C}\}\mathbf{a} = e\mathbf{a}$$

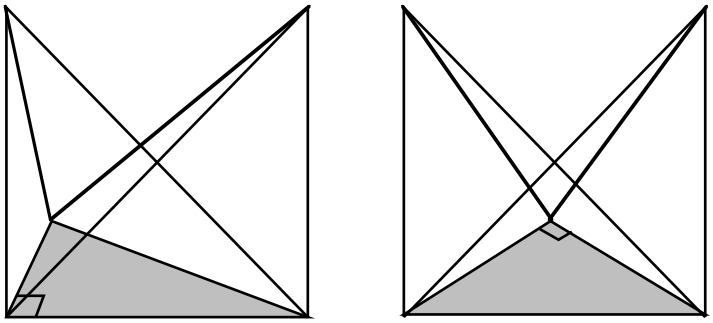
När vi tittar på en partikel i låda kan vi sätta potentialen till noll.

$$v \equiv 0 \Rightarrow \mathbf{C} = \mathbf{0}$$

När vi skall beräkna integralerna i A och B finns det med vår triangulering två fall.

1) Nod i eller j sitter i ett 90°-hörn.
2) Nod i och j sitter i 45°-hörn.

Fallen illustreras i fig 4.



Fall 1 *Fall 2*

Fig 4.

Du kan läsa mer om finita elementmetoden i Claes Johnsons bok
Numerical solution of partial differential equations by the finite element method
(Studentlitteratur)