

September 1998

Finite 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

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

Om vi multiplicerar med en godtycklig funktion $s(x)$, som har en kontinuerlig andra-derivata 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

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

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

$$\begin{aligned} \int_{-L/2}^{L/2} \Psi' s'(x) dx + \int_{-L/2}^{L/2} V(x)\Psi s(x) dx &= e \int_{-L/2}^{L/2} \Psi s(x) dx \\ \Psi'' &\text{ har kontinuerlig andraderivata.} \end{aligned} \quad (2)$$

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

$$\int_{-L/2}^{L/2} \Psi'_L s'_L(x) dx + \int_{-L/2}^{L/2} V(x) \Psi_L s_L(x) dx = e \int_{-L/2}^{L/2} \Psi_L s_L(x) dx \quad (3)$$

- 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.

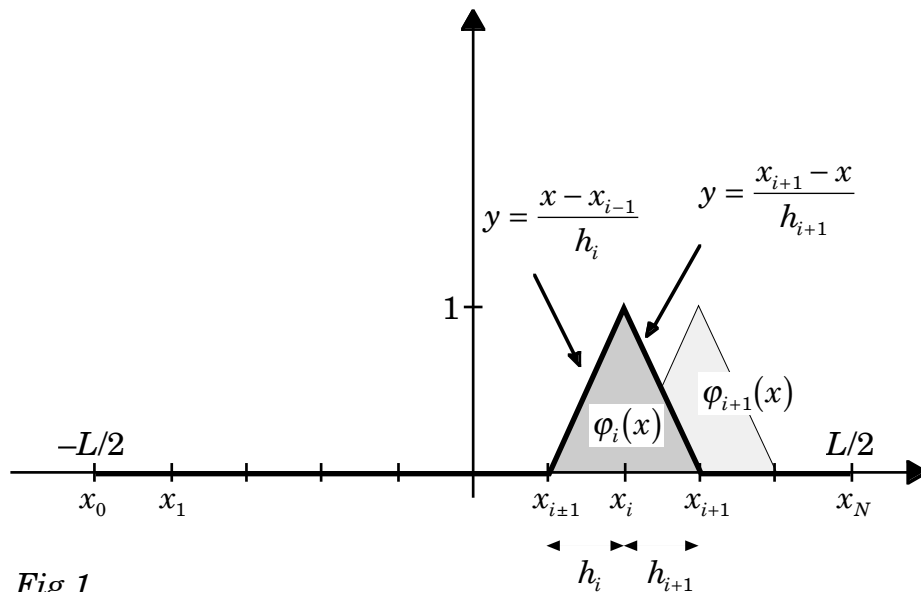


Fig 1.

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

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

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

Intervallets ändlägen kallar vi x_0 respektive x_N .

Med (4) och (5) insatta i (3) skall våra lösningar Ψ_L uppfylla

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

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

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

$$\sum_{i=1}^{N-1} a_i \int_{x_0}^{x_N} \phi'_j \phi'_i dx + \sum_{i=1}^{N-1} a_i \int_{x_0}^{x_N} V(x) \phi_j \phi_i dx = e \sum_{i=1}^{N-1} a_i \int_{x_0}^{x_N} \phi_j \phi_i dx, \quad j = 1, \dots, N-1$$

Dessa $N-1$ ekvationer kan skrivas i matrisform som

$$\left\{ \begin{bmatrix} \int_{x_0}^{x_N} \phi'_1 \phi'_1 dx & \dots & \int_{x_0}^{x_N} \phi'_1 \phi'_{N-1} dx \\ \dots & & \dots \\ \dots & & \dots \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \int_{x_0}^{x_N} V(x) \phi_1 \phi_1 dx & \dots & \int_{x_0}^{x_N} V(x) \phi_1 \phi_{N-1} dx \\ \dots & & \dots \\ \dots & & \dots \end{bmatrix} \right\} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_{N-1} \end{bmatrix} =$$

$$= e \begin{bmatrix} \int_{x_0}^{x_N} \phi_1 \phi_1 dx & \dots & \int_{x_0}^{x_N} \phi_1 \phi_{N-1} dx \\ \dots & & \dots \\ \dots & & \dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_{N-1} \end{bmatrix}$$

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 $\mathbf{A}$ och $\mathbf{B}$ beräknas analytiskt. För $\mathbf{C}$ kan man utan större fel förenkla,

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

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:

$$\begin{aligned} & \boxed{\begin{aligned} -\Delta\Psi + v(x,y)\Psi &= e\Psi \\ \Psi &= 0 \text{ på } \Gamma. \end{aligned}} \\ \Delta\Psi &= \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} \\ \mathbf{x} &= (x, y) \end{aligned} \tag{6}$$

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.

$$\begin{aligned} -\int_{\Omega} s(x,y)\Delta\Psi d\mathbf{x} &= -\int_{\Gamma} s(x,y) \frac{\partial\Psi}{\partial\mathbf{n}} d\sigma + \int_{\Omega} \nabla s(x,y) \cdot \nabla\Psi d\mathbf{x} = 0 + \int_{\Omega} \nabla s(x,y) \cdot \nabla\Psi d\mathbf{x} \\ \nabla\Psi &= \left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}, \frac{\partial\Psi}{\partial y} \right) \quad \frac{\partial\Psi}{\partial\mathbf{n}} = \frac{\partial\Psi}{\partial x} dx + \frac{\partial\Psi}{\partial y} dy \end{aligned}$$

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

$$\boxed{\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla s(x,y) \cdot \nabla\Psi d\mathbf{x} + \int_{\Omega} s(x,y)v(x,y)\Psi d\mathbf{x} &= e \int_{\Omega} s(x,y)\Psi d\mathbf{x} \\ \Psi &\text{ har kontinuerliga andraderivator.} \end{aligned}}$$

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.

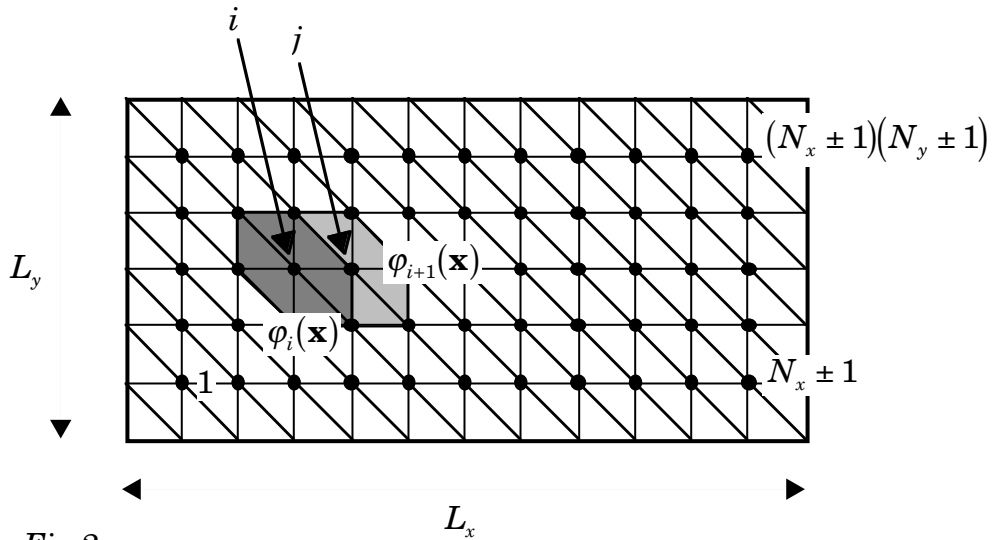


Fig 2.

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.

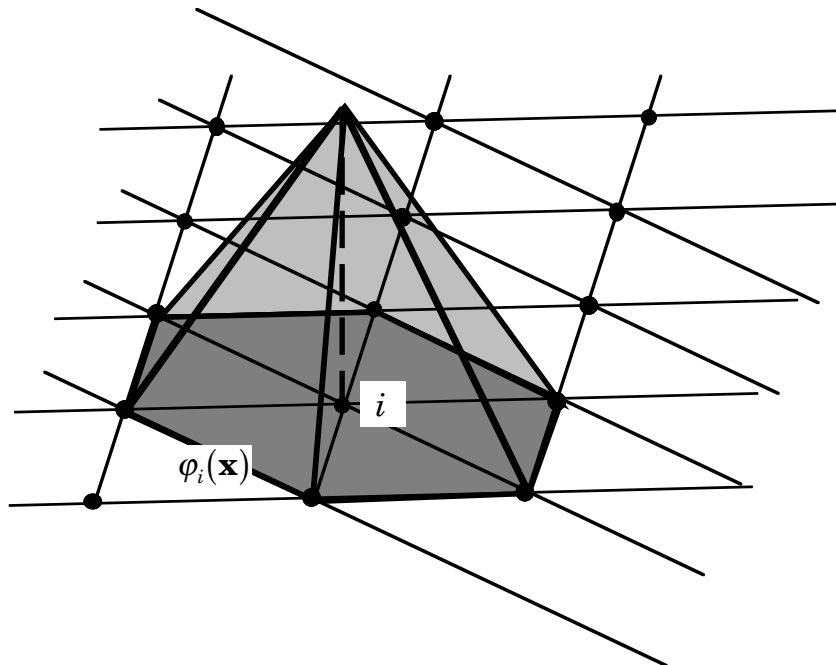


Fig 3.

Vårt problem att lösa blir

Finn funktionerna Ψ_L som uppfyller

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

- 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

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

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

Detta skriver vi

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

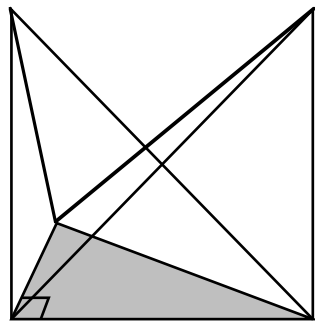
När vi tittar på en partikel i låda kan vi sätta potentialen till noll.

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

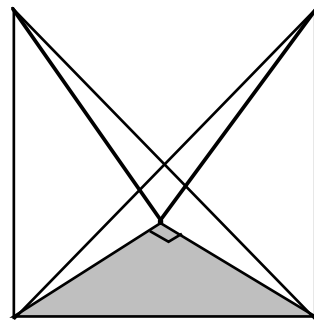
När vi skall beräkna integralerna i A och B finns det med vår triangulering två fall.

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

Fallen illustreras i fig 4.



Exall 1



Exall 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)