

Schrödinger Denkleminin Sonlu Fark Yöntemi Çözümünde Chebyshev

Noktaları Kullanımı

*Aytaç Çelik**

Sinop Üniversitesi, Mühendislik ve Mimarlık Fakültesi, Metalurji ve Malzeme Mühendisliği

Bölümü, Sinop

Öz

Günümüzde Schrödinger denkleminin hassas ve aynı zamanda hızlı çözümü oldukça önem arz etmektedir. Bu çalışmada Schrödinger denkleminin sonlu fark yöntemi ve Chebyshev noktaları kullanılarak daha hassas ve dolayısıyla hızlı çözümü önerilmektedir. Sınırlandırılmış nano boyutlardaki çözüm bölgesi Chebyshev noktaları ile tanımlanmış ve elde edilen Hermitian olmayan asimetric Hamiltonian benzerlik transformasyonu ile simetric Hermitian Hamiltonian'a çevrilmiştir. Bu yöntemle elde edilen Hamiltonian'ın homojen aralıklı noktalar ile çözülmüş problemlere göre daha düşük nokta sayısı ile ve metodolojik değişime gerek duymadan doğru sonuca yakınsadığı gösterilmiştir.

Anahtar kelimeler: Schrödinger denklemi, Chebyshev noktaları, Sonlu fark yöntemi, Benzeşim dönüşümü

Finite Difference Solution of Schrödinger Equation with Chebyshev Grid Points

Abstract

Fast and accurate solution of Schrodinger equation is very important. In this work, accurate and eventually fast solution of Schrodinger equation with finite difference and Chebyshev grid points is proposed. Confined dimensions are discretized by Chebyshev grid points and resultant non-Hermitian Hamiltonian is symmetrized by similarity transformation to get Hermitian Hamiltonian. Analysis of the resultant Hamiltonian shows that convergence of eigenvalues is achieved without any methodological change and less grid points by using Chebyshev grid.

Keywords: Schrödinger equation, Chebyshev grid points, Finite difference method, Similarity Transformation.

* Corresponding author
e-mail: aytaccelik@gmail.com

Received: 16.05.2018
Accepted: 23.05.2018

Giriş

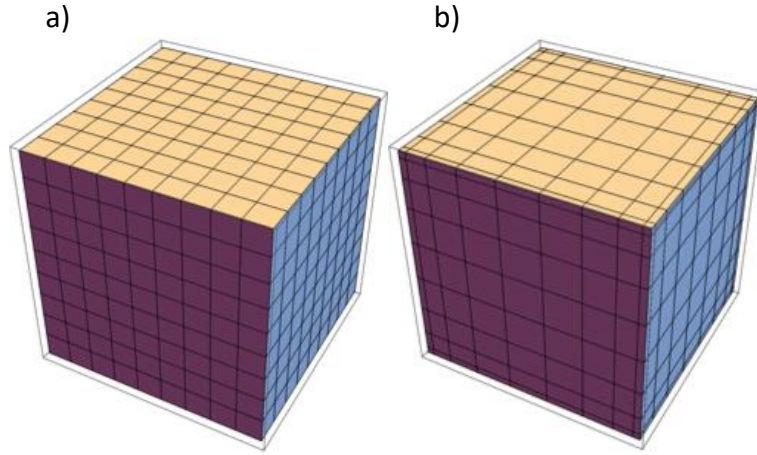
Hesaplama kuantum mekanik birçok fiziksel fenomeni açıklayan ve malzeme biliminden elektroniğe birçok alanda uygulaması bulunan Schrödinger denkleminin çözümüyle ilgilenir. Günümüz bilgisayarları ile bu fiziksel olayları Schrödinger denklemi gibi diferansiyel denklemlerinin çözümü büyük hesaplama kapasitesine ihtiyaç duyar ve problemi tanımlarken kullanılacak nokta sayısının artması yüksek hafıza kullanımına ve hesaplama süresinin artmasına neden olacaktır. Bu ihtiyaçlar nano aygıtların modellemesinde gereklilik olan yük dağılımı için Poisson denklemi ile tutarlı şekilde çözülmesi ile daha da artacaktır. Bu problemlerin en basit çözüm yöntemlerinden biri sonlu fark yöntemidir [3], bu yöntemde fonksiyonun türevi nokta etrafında yaklaşık olarak hesaplanır. Sonlu fark yönteminde hata, $O(N^{-m})$, nokta sayısı, N , ile azalırken, yaklaşımın basamağına ve çözümün düzgünlüğüne bağlı bir katsayı olan, m , ile artar. Çözüm noktalarının seçimi çözümün hassasiyetinde önemli rol oynar, dolayısıyla noktaların konumları ile ayarlanarak hassasiyet artışı elde edilebilir. Bu şekilde hassas çözüm arayan yöntemlerin en bilinenlerinden olan Pseudo-Spectral yöntem eğer çözüm düzgün ise kullanılır. Pseudo-Spectral yöntem homojen olmayan

açıklama gereği yeni yöntemlere ihtiyacı arttırmıştır [1,2]. Dolayısıyla Schrödinger denkleminin çözümü için daha hassas ve aynı zamanda verimli yöntemler geliştirmek önemli bir hedef haline gelmiştir.

noktalar kullanarak Runge fenomeni olarak bilinen çözümün sınırlardaki dalgalanmasından kaçınır ve sonucunda çözümünün hassasiyetini artırır [4]. Pseudo-Spectral yöntemin kullandığı en temel yapılarından biri Chebyshev yapısıdır. Chebyshev noktaları aşağıdaki basit formül ile ifade edilebilir:

$$x_i = \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{i\pi}{N-1}\right) + \frac{b+a}{2} \quad (i = 0, 1, \dots, N-1) \quad (1)$$

Chebyshev noktaları arasındaki mesafe sınır noktaları olan a ve b yakınlarında $\sim N^{-2}$ ile orantılı iken, bölge içerisinde $\sim N^{-1}$ ile orantılıdır. Runge homojen ağ yapısının sadece çözüm bölgesinin içerisinde çözüme yakınsadığını ve sınırlarda ise Runge fenomeni nedeni ile çözümden uzaklaştığını göstermiştir [5]. Diğer yandan Chebyshev noktalarında sınırdaki hatalar görülmediğinden çözüme daha hızlı yakınsamaktadır. Literatürde Pseudo-Spectral yöntemin dalga fonksiyonları yardımı ile ve sonlu elemanlar yöntemi ile nano aygıtların



Şekil 1. Homojen aralıklı (a) ve Chebyshev dağılımlı (b) noktalar ile oluşturulmuş kafes yapı

kuantum hesabında kullanan birçok makale mevcuttur [6-10]. Schrödinger denkleminin fiziksel anlamı olması için Hermitian Hamiltonian yani simetrik ve reel köklere sahip olması gerekmektedir, fakat problemin Chebyshev noktaları ile çözümünde karşımıza simetrik olmayan non-Hermitian Hamiltonian çıkar. Literatürde çözümü zor olan kauntum mekanik problemlerde zorlukları aşmak için kullanılan benzeşim dönüşümü elde edilen asimetric Hamiltonian'ın simetrik Hermitian Hamiltonian'a çevrilmesinde kullanılabilir [11-13].

Bu makalede şu sorulara cevap aranacaktır: İlk olarak Chebyshev noktaları ile Hamiltonian oluşturulması tartışılacak. İkinci olarak kutudaki parçacık problemi için oluşturulan 1 ve 3 boyutlu problem çözümlere sonuçlar karşılaştırılacaktır.

Matematiksel Yöntem

Karakteristik değer denkleminin zamandan bağımsız (durağan) Schrödinger denkleminin aşağıdaki forma sahiptir:

$$H \cdot \psi = E \cdot \psi \quad (2)$$

Burada H Hamiltonian, ψ dalga fonksiyonu ve E ise enerjiyi ifade etmektedir.

3 boyutta açık formu:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right] \cdot \psi(x, y, z) = E \cdot \psi(x, y, z) \quad (3)$$

Denklem 3'deki ilk terim kinetik operatördür. İkinci terim ise parçacık üzerine etkiyen gücü ifade eden potansiyel enerji V terimidir. Durağan dalga fonksiyonu ψ ve dalganın enerjisi ise E ile verilmektedir. Bu denklemin çözümünün bir önemli özelliği E_i ve E_j gibi farklı

enerjilere sahip dalga fonksiyonları ψ_i ve ψ_j orthonormaldir.

Schrödinger denklemi karakteristik değer denklemdir. Enerji, E , değerleri denklemin karakteristik değerleri olup dalga fonksiyonu ψ denklemin karakteristik fonksiyonudur.

Hamiltonian kinetik enerji ve potansiyel enerji olarak iki parça yazılabilir:

$$H = K + V \tag{4}$$

Manyetik alanın yokluğunda kinetik enerji operatörü Laplacian ile verilir:

$$K = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 \quad (\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) \tag{5}$$

Kapalı sistemler için (kutudaki parçacık problemi gibi) enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları Schrödinger denklemi ile hesaplanabilir. Schrödinger denklemi çözümü için en genel yöntem denklemin matris problemi olarak ifade ederek karakteristik değerler ve karakteristik fonksiyonlar için çözmektir. Çözüm için seçilen noktaların dağılımı çözümün yakınsamasında önemli rol oynar.

Karakteristik değer probleminin çözümünde ikinci dereceden türev için standart sonlu fark yöntemi kullanılarak

Hamiltonian oluşturulmuştur. Chebyshev noktaları ile oluşturulan Hamiltonian'ın Laplacian kısmı non-Hermitian olmaktadır. Non-Hermitian Hamiltonian'ın benzerlik dönüşümü uygulanarak Hermitian hale getirilmesi gerekmektedir. Bu amaçla, Kinetik enerji operatörü bileşenlerine ayrılır:

$$K = K_x + K_y + K_z \tag{6}$$

$$K_x = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, K_y = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2}, K_z = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{7}$$

Her bir kinetik enerji operatörü bileşeni ayrı ayrı sonlu fark yöntemi ile oluşturulur. Chebyshev yapısı homojen olmadığından bu işlem Vandermonde sistemi ile gerçekleştirilir (Apendiks A). Operatörü oluştururken ikinci dereceden yaklaşım kullanılabilir bu şekilde ikinci dereceden yaklaşım bize 3 köşegen elementi olan fakat simetrik olmayan (non-Hermitian) matris verecektir. Simetrik olmayan matris kompleks karakteristik değerlere sahiptir. Bu matrisi simetrik hale çevirmek için aşağıda matematiksel olarak ifade edilen benzerlik dönüşümü kullanılır:

$$K_j^{sim} = D_j^{-1} \cdot K_j^{anti-sim} \cdot D_j \quad (j = x, y, z) \tag{8}$$

Burada D köşegen bir matris olup elimizdeki Hamiltonianın değerleri ile oluşturulur, K_j^{sim} ve $K_j^{anti-sim}$ benzer matrisler olarak adlandırılır (Apendiks B). Sonuç benzer matris homojen dağılımlı noktalar ile yaratılmış Hamiltonian ile aynı reel karakteristik değerlere sahiptir. Benzerlik dönüşümü sonrası elde edilen K_x^{sim}, K_y^{sim} ve K_z^{sim} aşağıda gösterilen şekilde Kronecker çarpımı kullanılarak 2 boyutlu veya 3 boyutlu kinetik operatörlerin oluşturulmasında kullanılabilir:

$$K_{2B}^{sim} = I_{Ny} \otimes K_x^{sim} + K_y^{sim} \otimes I_{Nx} \quad (9)$$

$$K_{3B}^{sim} = I_{Nz} \otimes (I_{Ny} \otimes K_x^{sim} + K_y^{sim} \otimes I_{Nx}) + K_z^{sim} \otimes I_{Nx \cdot Ny} \quad (10)$$

Kinetik operatör yukarıdaki şekilde oluşturulduktan sonra potansiyel operatör ile toplanarak Hamiltonian oluşturulup problemin çözümü aranabilir.

Bulgular ve Tartışma

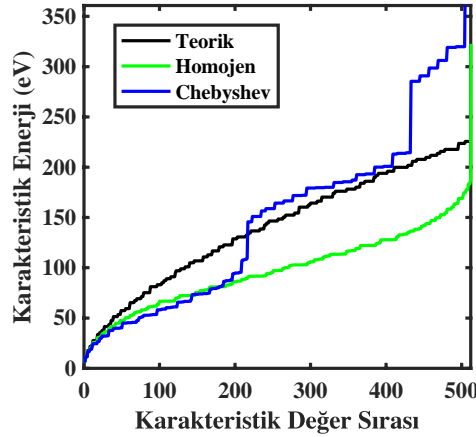
Chebyshev noktaları ile çözüm 1 nm kenar uzunluğuna, L , sahip bir kutuda parçacık probleminde bir, iki ve üç boyutlu sistemler

için uygulanmış ve sonuçların aşağıda sunulmuştur. Bu amaçla elektronun efektif kütlesi $m_e = 0,19 m_o$, $q = 1.60217733e^{-19} C$ ve potansiyel duvarı için 10 eV ve 1000 eV olmak üzere 2 farklı değer alınmıştır. Burada m_o elektronun kütlesidir. Böyle bir sistemde teorik karakteristik enerjileri aşağıdaki formül ile hesaplanabilir:

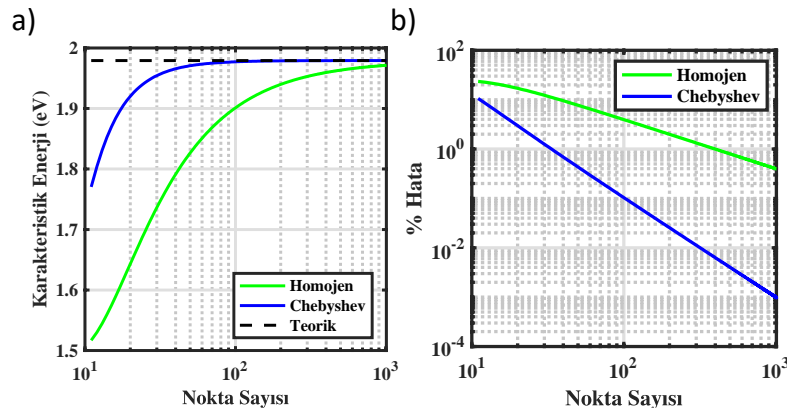
$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m q} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (11)$$

$$k_i = \frac{n \pi}{L_i} \quad (i = x, y, z) \quad (12)$$

3 boyutlu çözümlerde nokta sayısını boyut başına 50'nin üzerine çıkarmanın hesaplamayı bilgisayar kaynakları (işlemci gücü ve hafıza kapasitesi) açısından neredeyse imkânsız hale getirmesi kuantum hesaplamaların en büyük problemlerinden biridir buradaki çalışmada da 15 nokta sayısı ile 3 boyutlu çözümler ile elde ettiğimiz sonuçlar üzerinden tüm karakteristik değerlerin davranışını irdelerken, bu davranışların nokta sayısına göre değişimi 1 boyutlu çözümler üzerinden sunulacaktır. Bu hesaplama zorluğu özellikle NEGF (Non-Equilibrium Green Function) gibi reel uzay kuantum mekanik hesaplamalarda yüksek hassasiyete ulaşmak için süper bilgisayarların kullanımını zorunlu tutmaktadır [2].



Şekil 2. $V = 1000 \text{ eV}$ lik potansiyel duvarı ile elde edilen 3 Boyutlu kutuda parçacık probleminin karakteristik değerleri karşılaştırması.



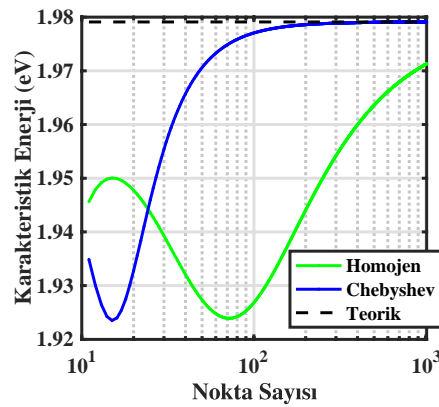
Şekil 3. $V = 10 \text{ eV}$ 'luk potansiyel duvar ile elde edilen karakteristik değerler (a) ve teorik değerlere göre % hata miktarı (b) gösterilmektedir.

Homojen ve Chebyshev Hamiltonianlar ile Schrödinger denklemi 3B kutudaki parçacık için 1000 eV 'luk potansiyel duvarı ile çözüldüğünde Chebyshev noktalar ile oluşturulan Hamiltonian çözümünün ilk karakteristik değerlerde teorik çözüme daha yakın sonuç verdiği ve hesaplanan yüksek karakteristik enerjiler için ise teorik değer üstünde değerler vermeye başladığı görülmüştür. Chebyshev Hamiltonian

sonuçlarının ilk karakteristik enerjilerde Homojen Hamiltonian ile yakın sonuçlar bulunduğu gözlemlenirken 200. ve 440. karakteristik değerler arası Chebyshev Hamiltonian'ın sonuçlarının teorik değere çok daha yakın olduğu gözlemlenmektedir. Chebyshev Hamiltonian 450. homojen Hamiltonian 500. Karakteristik enerji değerinden sonra teorik değerden hızla uzaklaşmaktadır (Şekil 2). Buna karşın

homojen noktalar ilk karakteristik değerleri Chebyshev noktalara yakın başarıda hesaplarken yüksek karakteristik enerji değerlerinde hesap hassasiyeti giderek düşmektedir. Nokta sayısı ile değişimi görmek için yapılan 1 boyutlu çözümlerde düşük potansiyel bariyer değerinde

Chebyshev noktaların teorik değere çok daha yakın sonuçlar verdiği görülmektedir (Şekil 3). Potansiyel bariyer şiddeti artırıldığında her iki çözümde de teorik değere yaklaşılmakla beraber davranışta dalgalanmalar gözlemlenmektedir (Şekil 4).



Şekil 4. $V = 1000$ eV lik potansiyel duvarı ile elde edilen karakteristik enerjilerin nokta sayısı ile değişimi.

Hassasiyet	Homojen		Chebyshev	
	Nokta Sayısı	Zaman (sn.)	Nokta Sayısı	Zaman (sn.)
%95	70	$2,242 \cdot 10^{-4}$	7	$2,307 \cdot 10^{-5}$
%97	131	$4,998 \cdot 10^{-4}$	10	$2,857 \cdot 10^{-5}$
%99	389	$4,223 \cdot 10^{-3}$	24	$5,179 \cdot 10^{-5}$
%99,9	-	-	94	$2,654 \cdot 10^{-4}$

Tablo 1. Nokta sayısına bağlı hesaplama hassasiyeti ve zamanı tablosu.

Tablo 1. Bir boyutlu problemin 2,6 GHz işlemci gücü ve 16 GB RAM'e sahip bir iş istasyonunda yapılan hesaplama zamanlarını ve karakteristik enerji değerine ne kadar yaklaştıklarını (hassasiyetlerini) yüzde olarak göstermektedir. Chebyshev çözümünün %95 hassasiyetteki sonuca 10 kat daha hızlı ulaştığı görülmektedir. Daha

yüksek hassasiyet değerlerine çıktığında bu fark daha da artmaktadır. Her iki yöntemde de nokta sayısı artırıldığında hassasiyet artmakta fakat Chebyshev çözümün çok daha hızlı teorik çözüme yakınsadığı görülmektedir (Şekil 3-4). 200 nokta ile yapılan hesaplarda Chebyshev noktalar teorik değere yakınsamaktadır,

diğer yandan Chebyshev çözümün 50 nokta ile ulaştığı sonuca homojen çözüm ancak 1000 nokta ile ulaşmaktadır. Burada göz önüne alınması gereken önemli nokta homojen çözümün hatalarını minimize etmek için yüksek potansiyel duvarı kullanılmış olmasıdır, yani hesabın Chebyshev noktası ile elde edilen sonuçlardaki hassasiyeti yakalaması için reel olmayan bir sınır koşulu devreye sokulmuştur. Bu durumda bile Chebyshev noktası ile çözümün daha hassas çözüm elde ettiği görülmektedir.

Sonuçlar

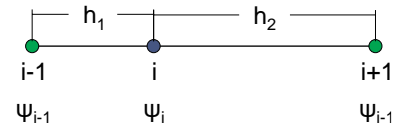
Bu makalede, Chebyshev noktaları kullanılarak kurulan sonlu fark yöntemi ile Schrödinger denklemi çözülmüş ve homojen dağılmış noktalı çözüm ile karşılaştırılmıştır. Chebyshev noktaları sonucu elde edilen simetrik olmayan Hamiltonian benzerlik dönüşümü ile simetrik hale getirilmiştir. Chebyshev noktaları ile çözüm yönteminin basit ve metodolojik bir değişikliğine gerek duymadığı ve daha yüksek yakınsama elde ettiği gösterilmiştir (Tablo 1.). Özellikle kuantum taşınım problemleri gibi geniş enerji seviyelerinde hassaslık gerektiren doğrusal olmayan çözümlerde bu hassasiyet oldukça önemlidir. Chebyshev noktaları kullanılarak hassas çözüme daha az nokta

kullanımı ile ulaşma süresini kısaltacağı gösterilmiştir.

Apendiks A: Vandermonde sistemi

İkinci dereceden sonlu fark sistemi 2 noktası kullanılarak tanımlanabilir. Bu sayede noktalara etkiyen diferansiyel operatör aşağıdaki şekilde yazılır:

$$D_2\psi_i = a\psi_i + b\psi_{i-1} + c\psi_{i+1} \quad (A1)$$



Şekil 5. Ağ noktaları

Taylor seri açılımı ile a, b, ve c değerleri hesaplanabilir. Bu hesabı yapan doğrusal sisteme Vandermonde sistemi denir [3]:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 \\ 0 & \frac{h_1^2}{2} & \frac{h_2^2}{2} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 \\ \frac{h_1^2+h_2^2}{2} \\ \frac{h_1^2+h_2^2}{2} \\ \frac{h_1^2+h_2^2}{2} \end{bmatrix} \quad (A2)$$

Apendiks B: Benzerlik dönüşümü

Benzerlik dönüşümü aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$K_j^{sim} = D_j^{-1} \cdot K_j^{anti-sim} \cdot D_j \quad (j = x, y, z)$$

(B1)

Burada D köşegen bir matris olup, K_j^{sim} ve $K_j^{anti-sim}$ benzer matrisler olarak adlandırılır. D matrisinin köşegen elemanları aşağıdaki özyinelemeli karekök formülü ile hesaplanır. Bu yöntem sadece karekök ifadesinin içi pozitif ise yapılabilmektedir.

$$d_1 = 1 \Rightarrow d_2 = \sqrt{\frac{c_1}{b_1}} \cdot d_1 \Rightarrow d_3 = \sqrt{\frac{c_2}{b_2}} \cdot d_2 \Rightarrow \dots$$

(B2)

$$D = \begin{pmatrix} d_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & d_N \end{pmatrix} \quad (B3)$$

Kaynaklar

[1] L. Vitos, 2007. Computational quantum mechanics for materials engineers: the EMTO method and applications, Springer.

[2] Datta, Supriyo, 2012. Lessons From Nanoelectronics: A New Perspective On Transport, World Scientific.

[3] Randall J. LeVeque, 2007. Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems, SIAM, Philadelphia, PA.

[4] L.N. Trefethen, 2000. Spectral Methods in MATLAB, SIAM, Philadelphia, PA.

[5] Runge, Carl, (1901) Uber empirische Funktionen und die Interpolation zwischen aquidistanten Ordinaten.} Zeitschrift für Mathematik und Physik., 46: 224-243.

[6] Q. Liu, C. Cheng, H. Z. Massoud, 2004. The Spectral Grid Method: A Novel Fast Schrödinger-Equation Solver for Semiconductor Nanodevice Simulation. IEEE TRANSACTIONS ON COMPUTER-AIDED DESIGN OF INTEGRATED CIRCUITS AND SYSTEMS., v. 23, n.8, p. 1200-1208.

[7] J. Lee, Q. H. Liu, 2005. An Efficient 3-D Spectral-Element Method for Schrödinger Equation in Nanodevice Simulation. IEEE TRANSACTIONS ON COMPUTER-AIDED DESIGN OF INTEGRATED CIRCUITS AND SYSTEMS., v. 24, n.12, p. 1848-1858.

[8] W. Lin, N. Kovvali, L. Carin, 2006. Pseudospectral method based on prolate spheroidal wave functions for semiconductor nanodevice simulation. Computer Physics Communications., v. 175, p. 78-85.

[9] C. Huang, 2009. Semiconductor nanodevice simulation by multidomain spectral method with Chebyshev, prolate spheroidal and Laguerre basis functions. *Computer Physics Communications.*, v. 180, p. 375-383.

[10] Q. Liu, C. Cheng, H. Z. Massoud, 2008. 3-D self-consistent Schrödinger-Poisson solver: the spectral element method. *J. Comput. Electron.*, 7: 337-341.

[11] G. Dattoli, C. Centioli, A. Torre, 1988. The Similarity Transformation Method and Diagonalization of Two-Photon Hamiltonians. *Il Nuovo Cimento B*, v. 101, i. 5, p. 557–567.

[12] L. Meissnera, M. Nooijen, 1995. Effective and intermediate Hamiltonians obtained by similarity transformations. *J. Chem. Phys.*, Vol. 102, No. 24.

[13] Jacob M. Wahlen-Strothman, Carlos A. Jiménez-Hoyos, Thomas M. Henderson, and Gustavo E. Scuseria, 2015. Lie algebraic similarity transformed Hamiltonians for lattice model systems. *PHYSICAL REVIEW B* 91, 041114(R)