L'approccio geometrico discreto per la soluzione dell'equazione di Schrödinger tempo invariante

Ruben Specogna, Francesco Trevisan

Dipartimento di Ingegneria Elettrica, Gestionale e Meccanica, Università degli Studi di Udine
Via delle Scienze 208, 33100 Udine

Recentemente, si è cercato di evidenziare la struttura geometrica alla base di differenti teorie fisiche. Questa idea ha trovato un solido fondamento fisico matematico nei lavori di E. Tonti nell'ambito dell'elettromagnetismo e della teoria dell'elasticità [1-5], di A. Bossavit con la comprensione delle proprietà geometriche alla base del metodo di Galerkin negli elementi finiti applicati all'elettromagnetismo computazionale [6-7], di A. Di Carlo con la formulazione geometrica della conduzione del calore [8] o di T. Weiland riguardo alla 'Finite Integration Technique' applicata alla propagazione elettromagnetica [9-10].

Emerge pertanto una struttura geometrica comune alla base di molte leggi fisiche che consente di riformulare tale leggi in forma discreta rispetto ad una coppia di complessi di celle orientati ed interallacciati, uno duale dell'altro, ottenendo l'Approccio Geometrico Discreto (AGD) per la fisica computazionale; alcuni esempi di tale approccio applicato alle equazioni di Maxwell sono descritti nei lavori [11-12].

In questo quadro, ci siamo proposti di dimostrare come sia possibile applicare il *modus operandi* del AGD anche alla equazione di Schrödinger tempo invariante discretizzata rispetto ad un complesso primale simpliciale, basato su tetraedri [13]. Ne è risultato un nuovo ed efficiente strumento di modellizzazione numerica indispensabile per descrivere diversi fenomeni quantistici che hanno luogo nei moderni dispositivi elettronici nanostrutturati dove è fondamentale riuscire a tenere in conto la reale struttura tridimensionale del dispositivo [14-15].

L'idea di base è la riformulazione dell'equazione di Schrödinger tempo invariante in termini di nuove quantità scalari, vettoriali e tensoriali coinvolte in due diverse categorie di equazioni di bilancio e legate da equazioni costitutive nel continuo. Successivamente, dopo una discretizzazione del dominio spaziale in elementi geometrici quali nodi, lati, facce e volumi di una coppia di complessi di celle simpliciale con duale baricentrico, si sono introdotte quantità integrali (dette gradi di libertà), quali circolazioni o flussi, corrispondenti alle quantità scalari, vettoriali e tensoriali introdotte, associandole a nodi, lati, facce e volumi dei complessi di celle. I gradi di libertà sono legati da controparti discrete ma *esatte* delle equazioni di bilancio. Successivamente si costruiscono le controparti discrete delle equazioni costitutive, esatte solo per campi *uniformi* all'interno di ciascun elemento, tali da mappare i gradi di libertà associati agli enti geometrici di un complesso con i corrispondenti gradi di libertà associati ad enti geometrici del complesso duale.

Un grosso vantaggio è che l'AGD porta naturalmente ad un problema agli autovalori *standard* e simmetrico risolubile in modo molto efficiente anche per un numero elevato di elementi; al contrario gli Elementi Finiti portano ad un problema agli autovalori generalizzato, nettamente più oneroso da risolvere.

L’approccio proposto è stato validato [13] dapprima il problema di riferimento della particella in un parallelepipedo per il quale esiste la soluzione analitica; successivamente si è analizzato il problema applicativo di ‘quntum-dot’ piramidali all’interno di eterostrutture disomogenee in silicio ed ossido [16].

Riferimenti Bibliografici

[1] E. Tonti, ``On the formal structure of physical theories," Quaderni dei Gruppi di Ricerca Matematica del CNR, 1975.

[2] E. Tonti, ``Algebraic topology and computational electromagnetism, 4-th International Workshop on Electric and MAgnetic Fields", Marseille (Fr) 15-15 May, pp. 284-294, 1998.

[3] E. Tonti, ``On the geometrical structure of elecromagnetism," in Gravitation, Electromagnetism and Geometrical Structures for the 80th birthday of A. Lichnerowicz, G. Ferrarese, Ed. Bologna, Italy: Pitagora Editrice, pp. 281-308, 1995.

[4] E. Tonti, ``A direct discrete formulation of field laws: the Cell Method", CMES: Computer Modeling in Engineering and Sciences, vol. 2, pp. 237–258, 2001.

[5] E. Tonti, F. Zarantoello, `` Algebraic Formulation of Elastostatics: the Cell Method. CMES: Computer Modeling in Engineering and Sciences, vol. 39, pp. 201–236, 2009.

[6] A. Bossavit, ``How Weak is the "Weak Solution" in Finite Element Methods?", IEEE Trans. Mag. vol. 34, No. 5, pp. 2429-2432, 1998.

[7] A. Bossavit, L. Kettunen ``Yee-like Schemes on Staggered Cellular Grids: A synthesis Between FIT and FEM Approaches", Vol. 36, No. 4, July 2000.

[8] A. Di Carlo, A. Tiero, ``The Geometry of Linear Heat Conduction", in Trends in Applications of Mathematics to Mechanics (W. Schneider, H. Troger, F. Ziegler, Eds.), Longman (Harlow), 1991, pp. 281-287.

[9] T. Weiland, ``Time domain electromagnetic field computation with finite difference methods", Int. Journal Num. Modelling, Vol. 9, pp 295-319,1996.

[10] M. Clemens, T. Weiland, ``Discrete Electromagnetism with the Finite Integration Technique", PIER 32, Ed. F.L. Teixeira, EMW Publishing, Cambridge, Massachusetts, USA, 2001, pp. 65--87.

[11] F. Trevisan, L. Kettunen ``Geometric interpretation of finite dimensional eddy current formulations," Int. Jou. for Numerical Methods in Engineering, Vol. 67, No. 13, 2006, pp. 1888-1908.

[12] L. Codecasa, R. Specogna, F. Trevisan, ``Symmetric Positive-Definite Constitutive Matrices for Discrete Eddy-Current Problems," IEEE Trans. Mag., Vol. 42, No. 2, 2007, pp. 510-515.

[13] R. Specogna, F. Trevisan, “A discrete geometric approach to solving time independent Schrödinger equation'”, Journal of Computational Physics, Vol. 230, 2011, pp. 1370-1381.

[14] C. R. Anderson, ``Efficient solution of the Schroedinger–Poisson equations in layered semiconductor devices", Journal of Computational Physics 228, pp. 4745–4756, 2009.

[15] A. Trellakis, A. T. Galick, A. Pacelli, and U. Ravaioli, ``Iteration Scheme for the Solution of the Two-dimensional Schrödinger -Poisson Equations in Quantum Structures," J.of Appl. Physics, vol. 81, no. 12, pp. 7880--7884, 1997.

[16] Tsung-Min Hwang, Wen-Wei Lin, Wei-Cheng Wang, Weichung Wang, ``Numerical simulation of three dimensional pyramid quantum dot", Journal of Computational Physics 196, pp. 208–232, 2004.