GPU-beschleunigte Simulation der Wellenpaketstreuung in einem periodischen Gitter

Zusammenfassung

In diesem Dokument wird eine numerische Simulation der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung in zwei Raumdimensionen beschrieben. Ein lokalisiertes Wellenpaket streut an einem endlichen periodischen Gitterpotential, das aus gaußförmigen Streuzentren besteht. Die zeitliche Entwicklung wird mithilfe der Split-Step-Fourier-Methode berechnet, welche auf einer GPU unter Verwendung von cuFFT implementiert ist. Die komplexwertige Wellenfunktion wird in Echtzeit mittels einer phasen- und amplitudenbasierten Farbcodierung visualisiert.

Inhaltsverzeichnis

1 Physikalisches Modell

Wir betrachten die nichtrelativistische Quantendynamik eines einzelnen Teilchens der Masse m in zwei Raumdimensionen (x, y). Die Dynamik wird durch die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung (TDSE) beschrieben:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, y, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y) \right] \psi(x, y, t), \tag{1}$$

wobei $\psi(x, y, t) \in \mathbb{C}$ die Wellenfunktion und $\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2$ der Laplace-Operator ist.

Die Wellenfunktion ist normiert:

$$\int_{\mathbb{R}^2} |\psi(x, y, t)|^2 \, dx \, dy = 1, \tag{2}$$

wobei $|\psi|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte darstellt.

2 Anfangszustand: Gaußsches Wellenpaket

Als Anfangszustand wird ein gaußsches Wellenpaket mit ebenem Phasenfaktor verwendet:

$$\psi(x, y, 0) = \exp\left(-\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{4\sigma^2} \right) \exp(i(k_x x + k_y y)) \, . \tag{3}$$

Dabei bezeichnen:

- (x_0, y_0) das Zentrum des Pakets,
- σ die räumliche Ausdehnung,
- (k_x, k_y) den mittleren Wellenvektor.

Das Wellenpaket besitzt einen mittleren Impuls $\boldsymbol{p} = \hbar(k_x, k_y)$ und eine endliche Impulsstreuung.

3 Periodisches Gitterpotential

Das Streupotential besteht aus einem endlichen rechteckigen Gitter gaußförmiger Barrieren:

$$V(x, y) = V_0 \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \exp\left(-\frac{(x - x_i)^2 + (y - y_j)^2}{2\sigma_V^2} \right) . \tag{4}$$

Hierbei sind:

- V_0 die Barrierenhöhe,
- σ_V die effektive Ausdehnung der Streuzentren,
- (x_i, y_j) die Gitterpunkte mit Gitterabständen (a_x, a_y).

Dieses Potential modelliert ein endliches Kristallgitter und erzeugt Beugungs- und Interferenzeffekte.

4 Absorbierende Randbedingungen

Um unphysikalische Reflexionen an den Rändern des endlichen Simulationsgebiets zu vermeiden, wird nach jedem Zeitschritt eine absorbierende Maske angewandt:

$$\psi(x,y,t) \leftarrow \psi(x,y,t)\, A(x,y), \tag{5}$$

mit

$$A(x,y) = \exp\left[-\alpha \left(1 - \frac{d(x,y)}{d_{\max}}\right)^4\right], \tag{6}$$

wobei $d(x,y)$ der Abstand zum nächsten Rand und α ein Absorptionsparameter ist.

5 Operatorzerlegung

Der Hamiltonoperator wird in kinetischen und potentiellen Anteil zerlegt:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}, \qquad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \qquad \hat{V} = V(x,y). \tag{7}$$

Da $\hat{T}$ und $\hat{V}$ nicht kommutieren, wird der Zeitentwicklungsoperator mithilfe der Strang-Zerlegung approximiert:

$$e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar} \approx e^{-i\hat{T}\Delta t/(2\hbar)} e^{-i\hat{V}\Delta t/\hbar} e^{-i\hat{T}\Delta t/(2\hbar)} + \mathcal{O}(\Delta t^3). \tag{8}$$

Diese Methode ist unitär und von zweiter Ordnung in der Zeit.

6 Numerischer Algorithmus: Split-Step-Fourier-Methode

Die zeitliche Entwicklung der Wellenfunktion erfolgt durch alternierende Propagation im Orts- und Impulsraum. Die kinetische Propagation wird im Fourierraum durchgeführt, wo der Operator diagonal ist.

Algorithm 1 Split-Step-Fourier-Methode zur Lösung der TDSE

Require: $\psi(x,y,0)$, $V(x,y)$, Zeitschritt Δt, Anzahl der Schritte N_t
Ensure: $\psi(x,y,t_n)$ für $n = 1,\ldots,N_t$

for $n = 0$ **bis** $N_t - 1$ **do**
  $\tilde{\psi}(\boldsymbol{k}) \leftarrow \mathcal{F}\{\psi(x,y,t_n)\}$
  $\tilde{\psi}(\boldsymbol{k}) \leftarrow \tilde{\psi}(\boldsymbol{k}) \exp\left(-i\frac{\hbar|\boldsymbol{k}|^2}{2m}\frac{\Delta t}{2}\right)$
  $\psi(x,y) \leftarrow \mathcal{F}^{-1}\{\tilde{\psi}(\boldsymbol{k})\}$
  $\psi(x,y) \leftarrow \psi(x,y) \exp\left(-i\frac{V(x,y)\Delta t}{\hbar}\right)$
  $\tilde{\psi}(\boldsymbol{k}) \leftarrow \mathcal{F}\{\psi(x,y)\}$
  $\tilde{\psi}(\boldsymbol{k}) \leftarrow \tilde{\psi}(\boldsymbol{k}) \exp\left(-i\frac{\hbar|\boldsymbol{k}|^2}{2m}\frac{\Delta t}{2}\right)$
  $\psi(x,y,t_{n+1}) \leftarrow \mathcal{F}^{-1}\{\tilde{\psi}(\boldsymbol{k})\}$
  $\psi(x,y,t_{n+1}) \leftarrow \psi(x,y,t_{n+1}) \cdot A(x,y)$
end for

7 Visualisierung der Wellenfunktion

Die komplexe Wellenfunktion wird mittels einer HSV-Farbcodierung dargestellt:

$$\text{Farbton (Hue)} = \frac{\arg(\psi) + \pi}{2\pi}, \tag{9}$$

$$\text{Helligkeit (Value)} = \left(\frac{|\psi|^2}{\max(|\psi|^2)} \right)^{\gamma}, \tag{10}$$

$$\text{Sättigung (Saturation)} = 1. \tag{11}$$

Der Exponent $\gamma < 1$ verstärkt schwache Interferenzstrukturen.

8 Physikalische Interpretation

Die Simulation zeigt:

- Dispersion des Wellenpakets,
- Beugung an einem periodischen Gitter,
- Interferenz und Phasensingularitäten,
- partielle Reflexion und Transmission.

Die Ergebnisse verbinden Freiraumpropagation mit kristalliner Streuphysik.

9 Schlussfolgerung

Die Split-Step-Fourier-Methode in Kombination mit GPU-Beschleunigung erlaubt eine effiziente und physikalisch konsistente Simulation zeitabhängiger Quantendynamik. Die phasenaufgelöste Visualisierung ermöglicht eine intuitive Analyse komplexer Interferenzphänomene in Echtzeit.