Simulación Acelerada en GPU de la Dispersión de un Paquete de Ondas en un Enrejado Periódico Finito

Resumen

Este documento presenta el modelo físico, la formulación matemática y el algoritmo numérico utilizados para simular la dispersión de un paquete de ondas cuántico en dos dimensiones espaciales. El sistema está gobernado por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y se resuelve mediante el método Split-Step Fourier. Un potencial periódico finito compuesto por dispersores gaussianos induce fenómenos de difracción e interferencia. La simulación se acelera en GPU utilizando cuFFT y la función de onda compleja se visualiza en tiempo real mediante una codificación de color basada en fase y amplitud.

Índice

1. Modelo Físico

Consideramos la dinámica cuántica no relativista de una partícula de masa m que se mueve en dos dimensiones espaciales (x, y) bajo la influencia de un potencial externo $V(x, y)$. La evolución temporal de la función de onda $\psi(x, y, t)$ está gobernada por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

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

donde $\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_y^2$ es el operador laplaciano.

La función de onda se normaliza de tal forma que:

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

y $|\psi(x, y, t)|^2$ representa la densidad de probabilidad.

2. Condición Inicial: Paquete de Ondas Gaussiano

El estado inicial se elige como un paquete de ondas gaussiano modulado por una onda plana:

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

donde:

- (x_0, y_0) es el centro inicial del paquete,
- σ controla su anchura espacial,
- (k_x, k_y) es el vector de onda medio.

El paquete posee un momento medio $\boldsymbol{p} = \hbar(k_x, k_y)$ y una dispersión finita en el espacio de momentos.

3. Potencial Periódico Finito

La dispersión se induce mediante un potencial periódico finito formado por barreras gaussianas:

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

donde:

- V_0 es la altura de las barreras,
- σ_V controla el tamaño efectivo de cada dispersor,
- (x_i, y_j) definen un enrejado rectangular con separaciones (a_x, a_y).

Este potencial modela un cristal finito y produce patrones complejos de difracción e interferencia.

4. Condiciones de Borde Absorbentes

Para evitar reflexiones no físicas en los bordes del dominio computacional, se aplica una máscara absorbente suave tras cada paso temporal:

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

con

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

donde $d(x,y)$ es la distancia al borde más cercano y α controla la intensidad de absorción.

5. Descomposición del Operador

El operador Hamiltoniano se descompone como:

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

Dado que $\hat{T}$ y $\hat{V}$ no conmutan, el operador de evolución temporal se aproxima mediante la descomposición de Strang de segundo orden:

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

Este esquema es unitario y reversible en el tiempo hasta segundo orden.

6. Algoritmo Numérico: Método Split-Step Fourier

El operador cinético es diagonal en el espacio de momentos, mientras que el operador potencial lo es en el espacio real. La propagación temporal se realiza alternando entre ambos espacios mediante transformadas rápidas de Fourier.

Algorithm 1 Método Split-Step Fourier para la ecuación de Schrödinger

Require: $\psi(x,y,0)$, $V(x,y)$, paso temporal Δt, número de pasos N_t
Ensure: $\psi(x,y,t_n)$ para $n = 1,\ldots,N_t$

for $n = 0$ **hasta** $N_t - 1$ **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. Visualización de la Función de Onda

La función de onda compleja se visualiza mediante una codificación de color HSV:

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

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

$$\text{Saturación} = 1, \tag{11}$$

donde $\gamma < 1$ realza las franjas de interferencia de baja intensidad.

Esta representación permite observar simultáneamente fase, interferencia y fenómenos de difracción.

8. Interpretación Física

La simulación reproduce fenómenos cuánticos fundamentales:

- dispersión libre del paquete de ondas,
- difracción por un enrejado periódico finito,
- interferencia y singularidades de fase,
- reflexión y transmisión parciales.

El sistema conecta el régimen de propagación libre con la física de la dispersión cristalina.

9. Conclusión

El método Split-Step Fourier combinado con aceleración en GPU proporciona una herramienta eficiente y físicamente consistente para simular la dinámica cuántica dependiente del tiempo. La visualización con resolución de fase permite un análisis intuitivo y detallado de patrones complejos de interferencia y dispersión en potenciales estructurados.