

# Numerische Lösung der Schrödinger Gleichung auf unbegrenzten Gebieten

Maike Schulte

in Zusammenarbeit mit Anton Arnold, Naoufel Ben Abdallah, Matthias  
Ehrhardt und Ivan Sofronov

Institut für Numerische und Angewandte Mathematik  
Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Kleinwalsertal, 22. Februar 2008

- Exkurs zur Quantenphysik

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick

- Exkurs zur Quantenphysik
- Analytische transparente Randbedingungen (TRB) für die Schrödinger Gleichung

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

- Exkurs zur Quantenphysik
- Analytische transparente Randbedingungen (TRB) für die Schrödinger Gleichung
- Diskrete transparente Randbedingen (DTRB) für die Schrödinger Gleichung
  - Herleitung der DTRB, Implementierung der DTRB
  - 2D Beispiele: Gauß'sche Wellenpakete, Quantenwellenleiter

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick



## Überblick

### Quantenphysik

### Analytische TRB

### DTRB für die 2D Schrödinger Gleichung

#### Beispiele

### Schrödinger- Poisson Modell

#### Beispiel

### DTRB für die Schrödinger Gleichung auf Kreisgebieten

#### Beispiele

### Ausblick

- Exkurs zur Quantenphysik
- Analytische transparente Randbedingungen (TRB) für die Schrödinger Gleichung
- Diskrete transparente Randbedingen (DTRB) für die Schrödinger Gleichung
  - Herleitung der DTRB, Implementierung der DTRB
  - 2D Beispiele: Gauß'sche Wellenpakete, Quantenwellenleiter
- Schrödinger-Poisson Modell
  - effizienter *subband decomposition* Algorithmus
  - Beispiel

## Überblick

### Quantenphysik

### Analytische TRB

### DTRB für die 2D Schrödinger Gleichung Beispiele

### Schrödinger- Poisson Modell Beispiel

### DTRB für die Schrödinger Gleichung auf Kreisgebieten Beispiele

### Ausblick

- Exkurs zur Quantenphysik
- Analytische transparente Randbedingungen (TRB) für die Schrödinger Gleichung
- Diskrete transparente Randbedingen (DTRB) für die Schrödinger Gleichung
  - Herleitung der DTRB, Implementierung der DTRB
  - 2D Beispiele: Gauß'sche Wellenpakete, Quantenwellenleiter
- Schrödinger-Poisson Modell
  - effizienter *subband decomposition* Algorithmus
  - Beispiel
- Lösung der Schrödinger Gleichung auf Kreisgebieten
  - approximierte DTRB
  - Beispiele

## Überblick

### Quantenphysik

### Analytische TRB

### DTRB für die 2D Schrödinger Gleichung Beispiele

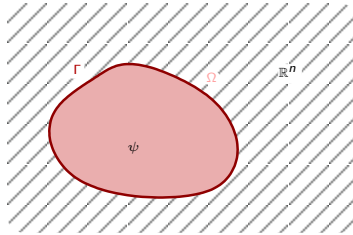
### Schrödinger- Poisson Modell Beispiel

### DTRB für die Schrödinger Gleichung auf Kreisgebieten Beispiele

### Ausblick

- Exkurs zur Quantenphysik
- Analytische transparente Randbedingungen (TRB) für die Schrödinger Gleichung
- Diskrete transparente Randbedingen (DTRB) für die Schrödinger Gleichung
  - Herleitung der DTRB, Implementierung der DTRB
  - 2D Beispiele: Gauß'sche Wellenpakete, Quantenwellenleiter
- Schrödinger-Poisson Modell
  - effizienter *subband decomposition* Algorithmus
  - Beispiel
- Lösung der Schrödinger Gleichung auf Kreisgebieten
  - approximierte DTRB
  - Beispiele
- Ausblick

# Transparente Randbedingungen



- gegeben: PDGL auf einem unbeschränkten Gebiet (z.B. auf  $\mathbb{R}^n$ ), Ganzraumlösung:  $\psi(x, t)$
- gesucht: numerische Lösung der PDGL auf einem begrenzten Teilgebiet  $\Omega$ 
  - neue *künstliche* Randbedingungen müssen auf  $\Gamma = \partial\Omega$  formuliert werden: neues Anfangs-Randwert-Problem
- Randbedingungen heißen *transparent*, wenn die Lösung des Anfangs-Randwert-Problems mit der auf  $\Omega$  eingeschränkten Ganzraum-Lösung übereinstimmt.

## Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick

# Anwendung transparenter Randbedingungen

## Wellenausbreitungsphänomene:

### Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

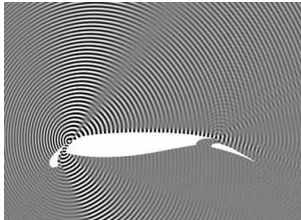
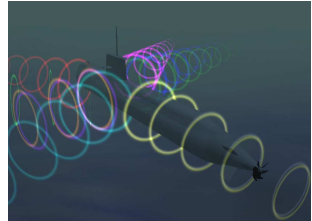
Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick



# Anwendung transparenter Randbedingungen

## Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

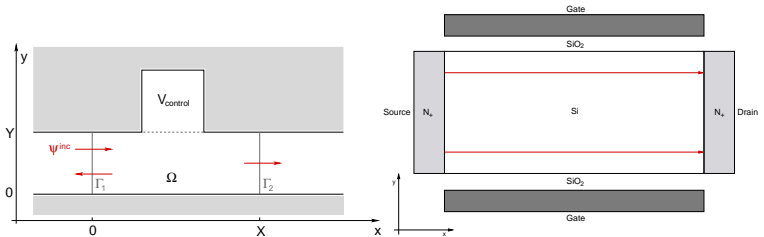
Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick



- Simulation von Bauelementen in Quantenwellenleitern, z.B. Quantentransistoren, Double Gate MOSFETs, etc. (mit inhomogenen TRB für die 2D Schrödinger Gleichung, Kopplung mit Poisson-Gleichung)
- Analysiere Stationärzustände und transientes Verhalten
- Simulation von Schaltzeiten
- effiziente Algorithmen

# Kleiner Exkurs: Quantenphysik

- Alltagsphysik: physikalische Größen und Zustände ändern sich kontinuierlich

Überblick

**Quantenphysik**

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick

# Kleiner Exkurs: Quantenphysik

- Alltagsphysik: physikalische Größen und Zustände ändern sich kontinuierlich
- in der Größenordnung ca. Milliardstel Meter ( $10^{-9}$  m) gilt: Änderungen können auch sprunghaft erfolgen

Überblick

**Quantenphysik**

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick



# Kleiner Exkurs: Quantenphysik

- Alltagsphysik: physikalische Größen und Zustände ändern sich kontinuierlich
- in der Größenordnung ca. Milliardstel Meter ( $10^{-9}\text{m}$ ) gilt: Änderungen können auch sprunghaft erfolgen
- Max Planck (um 1900): Strahlung wird nur als ganzzahliges Vielfaches einer Größe  $h \cdot n$  mit  $n \in \mathbb{N}$  ausgesandt

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

# Kleiner Exkurs: Quantenphysik

- Alltagsphysik: physikalische Größen und Zustände ändern sich kontinuierlich
- in der Größenordnung ca. Milliardstel Meter ( $10^{-9}$  m) gilt: Änderungen können auch sprunghaft erfolgen
- Max Planck (um 1900): Strahlung wird nur als ganzzahliges Vielfaches einer Größe  $h \cdot n$  mit  $n \in \mathbb{N}$  ausgesandt
- Albert Einstein (1905): Lichtquantenhypothese: Licht der Frequenz  $n$  besteht aus Teilchen der Energie  $E = h \cdot n$ , die Photonen (Lichtteilchen) genannt werden

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

# Kleiner Exkurs: Quantenphysik

- Alltagsphysik: physikalische Größen und Zustände ändern sich kontinuierlich
- in der Größenordnung ca. Milliardstel Meter ( $10^{-9}\text{m}$ ) gilt: Änderungen können auch sprunghaft erfolgen
- Max Planck (um 1900): Strahlung wird nur als ganzzahliges Vielfaches einer Größe  $h \cdot n$  mit  $n \in \mathbb{N}$  ausgesandt
- Albert Einstein (1905): Lichtquantenhypothese: Licht der Frequenz  $n$  besteht aus Teilchen der Energie  $E = h \cdot n$ , die Photonen (Lichtteilchen) genannt werden
- Louis de Broglie (1923): Materiewellen-Hypothese: Ausgehend von den Teilcheneigenschaften des Lichtes müssen Elektronen auch Welleneigenschaften aufweisen (erst 1927 experimentell belegt)

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

# Kleiner Exkurs: Quantenphysik

- Alltagsphysik: physikalische Größen und Zustände ändern sich kontinuierlich
- in der Größenordnung ca. Milliardstel Meter ( $10^{-9}\text{m}$ ) gilt: Änderungen können auch sprunghaft erfolgen
- Max Planck (um 1900): Strahlung wird nur als ganzzahliges Vielfaches einer Größe  $h \cdot n$  mit  $n \in \mathbb{N}$  ausgesandt
- Albert Einstein (1905): Lichtquantenhypothese: Licht der Frequenz  $n$  besteht aus Teilchen der Energie  $E = h \cdot n$ , die Photonen (Lichtteilchen) genannt werden
- Louis de Broglie (1923): Materiewellen-Hypothese: Ausgehend von den Teilcheneigenschaften des Lichtes müssen Elektronen auch Welleneigenschaften aufweisen (erst 1927 experimentell belegt)
- Erwin Schrödinger (1926): Eine abstrakte Funktion  $\psi \in \mathbb{C}$  (Wellenfunktion) beschreibt Zustände eines Teilchens oder eines physikalischen Systems.  $\psi$  erfüllt die postulierte Schrödinger Gleichung

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

# Kleiner Exkurs: Quantenphysik

- Alltagsphysik: physikalische Größen und Zustände ändern sich kontinuierlich
- in der Größenordnung ca. Milliardstel Meter ( $10^{-9}\text{m}$ ) gilt: Änderungen können auch sprunghaft erfolgen
- Max Planck (um 1900): Strahlung wird nur als ganzzahliges Vielfaches einer Größe  $h \cdot n$  mit  $n \in \mathbb{N}$  ausgesandt
- Albert Einstein (1905): Lichtquantenhypothese: Licht der Frequenz  $n$  besteht aus Teilchen der Energie  $E = h \cdot n$ , die Photonen (Lichtteilchen) genannt werden
- Louis de Broglie (1923): Materiewellen-Hypothese: Ausgehend von den Teilcheneigenschaften des Lichtes müssen Elektronen auch Welleneigenschaften aufweisen (erst 1927 experimentell belegt)
- Erwin Schrödinger (1926): Eine abstrakte Funktion  $\psi \in \mathbb{C}$  (Wellenfunktion) beschreibt Zustände eines Teilchens oder eines physikalischen Systems.  $\psi$  erfüllt die postulierte Schrödinger Gleichung
- Max Born: Die Stärke der Welle - mathematisch ausgedrückt durch das Quadrat der Wellenfunktion - an irgendeinem Punkt im Raum ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen an diesem Punkt anzutreffen

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

Überblick

Quantenphysik

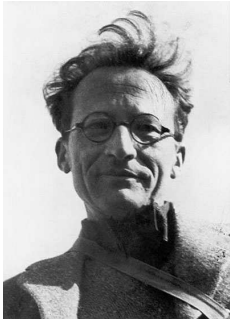
Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick



## Schrödinger:

- Quantenmechanik kann das Verhalten von Atomen, Elektronen oder Lichtteilchen nur dadurch erklären, dass sie annimmt, diese Teilchen seien vor einer Messung nicht in einem einzigen Zustand, sondern in allen möglichen Zuständen gleichzeitig
- erst die Beobachtung (eine Messung) bringt das Teilchen dazu, den Überlagerungszustand zu verlassen und sich spontan für einen der möglichen Zustände entscheiden
- Beispiel: radioaktives Atom zerfällt in einer bestimmten Zeitspanne mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit, auf quantenmechanischer Ebene wäre es gleichzeitig intakt und zerfallen



Überblick

**Quantenphysik**

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick

Einige berühmte Zitate zur Quantenmechanik:

- Erwin Schrödinger: Ich mag sie nicht, und es tut mir leid, jemals etwas damit zu tun gehabt zu haben.

Überblick

**Quantenphysik**

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick

Einige berühmte Zitate zur Quantenmechanik:

- Erwin Schrödinger: Ich mag sie nicht, und es tut mir leid, jemals etwas damit zu tun gehabt zu haben.
- Niels Bohr: Diejenigen, die nicht schockiert sind, wenn sie zum ersten mal mit Quantenmechanik zu tun haben, haben sie nicht verstanden.



Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick

Einige berühmte Zitate zur Quantenmechanik:

- Erwin Schrödinger: Ich mag sie nicht, und es tut mir leid, jemals etwas damit zu tun gehabt zu haben.
- Niels Bohr: Diejenigen, die nicht schockiert sind, wenn sie zum ersten mal mit Quantenmechanik zu tun haben, haben sie nicht verstanden.
- Albert Einstein: Ich kann mir nicht vorstellen, daß Gott mit Würfeln spielt!

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick

Einige berühmte Zitate zur Quantenmechanik:

- Erwin Schrödinger: Ich mag sie nicht, und es tut mir leid, jemals etwas damit zu tun gehabt zu haben.
- Niels Bohr: Diejenigen, die nicht schockiert sind, wenn sie zum ersten mal mit Quantenmechanik zu tun haben, haben sie nicht verstanden.
- Albert Einstein: Ich kann mir nicht vorstellen, daß Gott mit Würfeln spielt!
- Enrico Fermi: I am still confused, but on a higher level. (Ich bin immer noch verwirrt, aber auf einem höheren Niveau.)

- Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_*} \Delta_x + V(x, t) \right) \psi(x, t), \quad x \in \Omega, t > 0$$

beschreibt mathematisch den Elektronenfluss in einem allgemeinen quantenmechanischen Leiter  $\Omega \subset \mathbb{R}$  als eine Einteilchennäherung für ein Vielteilchensystem.

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

# Kleiner Exkurs: Quantenphysik

- Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_*} \Delta_x + V(x, t) \right) \psi(x, t), \quad x \in \Omega, t > 0$$

beschreibt mathematisch den Elektronenfluss in einem allgemeinen quantenmechanischen Leiter  $\Omega \subset \mathbb{R}$  als eine Einteilchennäherung für ein Vielteilchensystem.

- Die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit**  $W_\Omega$  eines Teilchens im Intervall  $\Omega$  zur Zeit  $t \in \mathbb{R}^+$  ist durch die Gleichung

$$W_\Omega(t) = \int_{\Omega} |\psi(x, t)|^2 dx$$

gegeben.

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D

Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson

Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger

Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

- Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m_*} \Delta_x + V(x, t) \right) \psi(x, t), \quad x \in \Omega, t > 0$$

beschreibt mathematisch den Elektronenfluss in einem allgemeinen quantenmechanischen Leiter  $\Omega \subset \mathbb{R}$  als eine Einteilchennäherung für ein Vielteilchensystem.

- Die **Aufenthaltswahrscheinlichkeit**  $W_\Omega$  eines Teilchens im Intervall  $\Omega$  zur Zeit  $t \in \mathbb{R}^+$  ist durch die Gleichung

$$W_\Omega(t) = \int_{\Omega} |\psi(x, t)|^2 dx$$

gegeben.

- Mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit  $W_{\mathbb{R}}(t) = 1$  folgt die physikalische Forderung

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x, t) = 0 \quad (\psi(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R})), \quad t \in \mathbb{R}^+$$

# Analytische TRB für die Schrödinger Gleichung

**AWP:** zeitabhängige 2D Schrödinger Gleichung auf Streifen  $\mathbb{R} \times (0, Y)$ :

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

$$(x, y) \in \mathbb{R} \times (0, Y), t > 0$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \psi(x, y, t) = 0$$

$$\psi(x, 0, t) = \psi(x, Y, t) = 0$$

$$\psi(x, y, 0) = \psi^I(x, y) \in L^2(\mathbb{R} \times (0, Y))$$

**Annahmen:**

- $\text{supp } \psi^I \subset \Omega := \{x \in \mathbb{R} \mid x_l < x < x_r\} \times (0, Y)$
- $V$  sei konstant auf  $\mathbb{R}^2 \setminus \Omega$ :

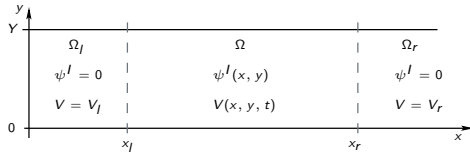
$$V(x, y, t) = V_l \text{ für } (x, y) \in \Omega_l := (-\infty, x_l] \times (0, Y)$$

$$V(x, y, t) = V_r \text{ für } (x, y) \in \Omega_r := [x_r, \infty) \times (0, Y)$$

**Ziel:**

Berechne die Lösung  $\psi(x, y, t) \in \mathbb{C}$  auf  $\Omega \times \mathbb{R}^+$  mit TRB an  $x = x_l, x_r$ .

# Analytische TRB für die Schrödinger Gleichung



- Sinus-Transformation:  $\psi(x, y, t) = \sum_{m \in \mathbb{N}} \hat{\psi}_m(x, t) \sin\left(\frac{m\pi y}{Y}\right)$
- Einsetzen in die 2D Schrödinger Gleichung ergibt auf  $\Omega_l, \Omega_r$ :

$$\begin{aligned}
 & i \sum_{m \in \mathbb{N}} \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_m(x, t) \sin\left(\frac{m\pi y}{Y}\right) \\
 &= \sum_{m \in \mathbb{N}} \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V_{l,r} \right] \left( \hat{\psi}_m(x, t) \sin\left(\frac{m\pi y}{Y}\right) \right)
 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \forall m : \quad i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_m(x, t) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left( V_{l,r} + \frac{1}{2} \left( \frac{m\pi}{Y} \right)^2 \right) \right] \hat{\psi}_m(x, t)$$

$\Rightarrow$  löse eindimensionale Schrödinger Gleichungen

# Analytische TRB für die Schrödinger Gleichung

- 1D Schrödinger Gleichung:

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

- $L^2((0, Y) \times \mathbb{R}) = L^2(\Omega) \oplus L^2(\Omega_l \cup \Omega_r)$

→ Aufspaltung zu gekoppeltem System:

$$(x, t) \in \Omega \times \mathbb{R}^+ :$$

$$i v_t = -\frac{1}{2} v_{xx} + V(x, t) v$$

$$v_x(x, t) = w_x(x, t), \quad x = x_l, x_r$$

$$v(x, 0) = \psi^l(x)$$

$$(x, t) \in (\Omega_r \cup \Omega_l) \times \mathbb{R}^+ :$$

$$i \hbar w_t = -\frac{1}{2} w_{xx} + V_{l,r} w$$

$$w(x, t) = v(x, t), \quad x = x_l, x_r$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} w(x, t) = 0$$

$$w(x, 0) = 0$$



Laplace-Transformation auf den äußeren Gebieten:

$$\hat{w}(s) := \int_{\mathbb{R}^+} w(t) e^{-st} dt$$

$$\Rightarrow \hat{w}_{xx}(x, s) = -2i(s + iV_r) \hat{w}(x, s) \quad x \in \Omega_r$$

Lösung:

$$\hat{w}(x, s) = e^{-i \sqrt{2i(s+iV_r)}(x-x_r)} \hat{v}(x_r, s)$$

$$\Rightarrow \hat{w}_x(x, s) \Big|_{x=x_r} = -\sqrt{2} e^{-\frac{i\pi}{4}} \sqrt{s + iV_r} \hat{w}(x, s) \Big|_{x=x_r}$$

Mit der inversen Laplace-Transformation folgen die analytischen TRB

$$\psi_x(x_r, t) = -\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\frac{\pi}{4}} e^{-iV_r t} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{\psi(x_r, \tau) e^{iV_r \tau}}{\sqrt{\tau - t}} d\tau, \quad t > 0.$$

# Analytische TRB für die Schrödinger Gleichung

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

## Theorem (DiMenza, 1995)

Sei  $\Omega = (0, X) \subset \mathbb{R}$ . Das Anfangs-Randwert-Problem

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \psi(x, t), \quad x \in \Omega, t > 0$$

$$V(x, t) = V_l \text{ für } x \leq 0$$

$$V(x, t) = V_r \text{ für } x \geq X$$

$$\psi(x, 0) = \psi^l(x), \quad \text{supp } \psi^l(x) \subseteq \Omega$$

$$+ \text{TRB an } x = 0, X$$

hat für  $\psi^l(x) \in H^1(\Omega)$  eine eindeutige Lösung, die auf  $\Omega$  mit der Ganzraum-Lösung übereinstimmt.

## Theorem (Ben Abdallah, Méhats, Pinaud, 2004)

Erweiterung auf 2D, 3D für  $\psi^l(x) \in H^2(\Omega)$ .

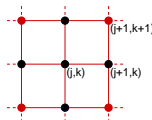
# Diskrete TRB für die 2D Schrödinger Gleichung

Äquidistantes Gitter:

$$x_j = j\Delta x, \quad j \in \mathbb{Z},$$

$$y_k = k\Delta y, \quad 0 \leq k \leq K, \quad k \in \mathbb{N},$$

$$t_n = n\Delta t, \quad n \in \mathbb{N}$$



Gitterfunktion:  $\psi_{j,k}^n \approx \psi(j\Delta x, k\Delta y, n\Delta t)$  auf  $\Omega = ]0, X[ \times ]0, Y[$

Differenzenoperatoren:

$$D_t^+ \psi_{j,k}^n = \frac{\psi_{j,k}^{n+1} - \psi_{j,k}^n}{\Delta t}$$

$$D_x^2 \psi_{j,k}^n = \frac{\psi_{j+1,k}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j-1,k}^n}{\Delta x^2}$$

$$D_y^2 \psi_{j,k}^n = \frac{\psi_{j,k+1}^n - 2\psi_{j,k}^n + \psi_{j,k-1}^n}{\Delta y^2}$$

kompaktes 5/9-Punkt Schema im Ort, Crank-Nicolson Schema in der Zeit:

$$iD_t^+ \psi_{j,k}^n = \left[ -\frac{1}{4}(D_x^2 + D_y^2) + \frac{1}{2}V_{j,k}^{n+1/2} \right] (\psi_{j,k}^{n+1} + \psi_{j,k}^n)$$

$\Rightarrow$  Schema ist unbedingt stabil:  $\|\psi^n\|_2 = \|\psi^0\|_2, \quad n \geq 0.$

# Diskrete TRB für die 2D Schrödinger Gleichung

Diskrete Schrödinger Gleichung:

$$iD_t^+ \psi_{j,k}^n = \left[ -\frac{1}{4}(D_x^2 + D_y^2) + \frac{1}{2}V_{j,k}^{n+1/2} \right] (\psi_{j,k}^{n+1} + \psi_{j,k}^n)$$

Diskrete Sinus-Transformation in y-Richtung:

$$\hat{\psi}_{j,m}^n := \frac{1}{K} \sum_{k=1}^{K-1} \psi_{j,k}^n \sin\left(\frac{\pi km}{K}\right) \quad m = 1, \dots, K-1$$

**Motivation:**

Löse diskrete stationäre Schrödinger Gleichung in 1D:

$$-\frac{1}{2}D_y^2 \chi_k^m = E^m \chi_k^m, \quad k = 1, \dots, K-1$$

$$\chi_0^m = \chi_K^m = 0.$$

Eigenfunktionen:  $\chi_k^m = \sin\left(\frac{\pi km}{K}\right)$

Eigenwerte:  $E^m = \frac{1}{\Delta y^2} \left(1 - \cos\left(\frac{\pi m}{K}\right)\right)$

$$\Rightarrow \quad -\frac{1}{2}\left(D_y^2 \psi_{j,k}^n\right)_m^{\hat{}} = \frac{1}{\Delta y^2} \left(1 - \cos\left(\frac{\pi m}{K}\right)\right) \hat{\psi}_{j,m}^n.$$

# Diskrete TRB für die 2D Schrödinger Gleichung

## Definition ( $\mathcal{Z}$ - Transformation):

Die  $\mathcal{Z}$ -Transformation einer gegebenen Folge  $(\psi^n)_{n \in \mathbb{N}}$  wird definiert durch

$$\mathcal{Z} \{ \psi^n \} = \Psi(z) := \sum_{n=0}^{\infty} \psi^n z^{-n}, \quad z \in \mathbb{C}, |z| > 1.$$

Es gilt:

- $\mathcal{Z} \left( \hat{\psi}_{j,m}^{n+1} \right) = -z \hat{\psi}_{j,m}^0 + z \Psi_j^m(z)$
- $\psi_{J+1,k}^0 = \psi_{J-1,k}^0 = \psi_{J,k}^0 = 0$  für  $k = 0, \dots, K$ , denn:  $\text{supp } \psi^l \subset \Omega$

## $\mathcal{Z}$ -transformierte Schrödinger Gleichung:

$$\Psi_{J+1}(z) + \left[ \frac{Az + B}{Cz + D} \right] \Psi_J(z) + \Psi_{J-1}(z) = 0.$$

Lösungsansatz:  $\Psi_j(z) = \nu^j(z)$

$$\nu^2(z) + \left[ \frac{Az + B}{Cz + D} \right] \nu(z) + 1 = 0,$$

physikalischer Hintergrund:  $\lim_{j \rightarrow \infty} \Psi_j(z) = 0$

$\Rightarrow |\nu(z)| > 1$  und  $\nu(z) \Psi_J(z) = \Psi_{J-1}(z) \rightarrow \mathcal{Z}$ -transformierte DTRB

# Diskrete TRB für die 2D Schrödinger Gleichung

## Theorem (DTRB für die 2D Schrödinger Gleichung)

Die Sinus-transformierten DTRB an  $x = 1$  ( $j = J$ ) für das kompakte 5/9-Punkt Schema sind von der Form

$$\widehat{\psi}_{J-1,m}^n - s_{J,m}^{(0)} \widehat{\psi}_{J,m}^n = \sum_{k=1}^{n-1} s_{J,m}^{(n-k)} \widehat{\psi}_{J,m}^k + \eta_{J-1,m} \widehat{\psi}_{J-1,m}^{n-1}, \quad n \geq 1.$$

- keine numerischen Reflexionen am künstlichen Rand
- DTRB sind nicht-lokal in Ort und Zeit, DTRB sind durch Faltungsterm in der Zeit gegeben  $\rightarrow$  analog zu analytischen TRB
- effiziente Implementierung der DTRB im Sinus-Fourier-Raum
- Approximation der DTRB möglich: Reduktion des numerischen Aufwands pro Mode von  $\mathcal{O}(n^2)$  zu  $\mathcal{O}(Ln)$  mit  $L \ll n$
- $s_{j,m}^{(n)} \sim \mathcal{O}(n^{-3/2}) \rightarrow$  analog zu analytischen TRB
- Ordnung des Schemas:  $\mathcal{O}(\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta t^2) / \mathcal{O}(\Delta x^4 + \Delta y^4 + \Delta t^2)$

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreiskegeln

Beispiele

Ausblick

DTRB im Fourier-Sinus-Raum:

$$\hat{\psi}_{J-1,m}^n - s_{J,m}^0 \hat{\psi}_{J,m}^n = \sum_{\nu=1}^{n-1} s_{J,m}^{n-\nu} \hat{\psi}_{J,m}^{\nu} - \eta_{J-1,m} \hat{\psi}_{J-1,m}^{n-1}$$

- nicht-lokal in Ort und Zeit
- Berechnung der **Faltung** im Sinus-transformierten Raum
- Sinus-Inversion der **linken Seite**:

$$\left( s_{J,m}^0 \hat{\psi}_{J,m}^n \right)_{J,k,l}^{\vee} = \frac{1}{K} \sum_{m,l} s_m^0 \sin\left(\frac{\pi km}{K}\right) \sin\left(\frac{\pi kl}{K}\right) \psi_{J,l}^n$$

- Kopplung der aller Randpunkte, 5-Diagonalstruktur des Systems wird zerstört
- Systemmatrix ist groß (10.000 – 60.000 Unbekannte), schlecht konditioniert, positiv definit, dünn besetzt (ca. 1%)

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

# Beispiel 1: Gauß'sche Wellenpakete

Initialfunktion:

$$\psi'(x, y) = \sum_{\ell \in \mathbb{Z}} (-1)^\ell e^{-120 \left[ \left(x - \frac{1}{4}\right)^2 + \left(y - \frac{1}{4} + \ell\right)^2 \right] - i(120x + 100y)}, \quad (x, y) \in \Omega = (0, 1)^2$$

Diskretisierung:  $\Delta x = \Delta y = 1/120$ ,  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-5}$

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D

Schrödinger

Gleichung

Beispiele

Schrödinger-

Poisson

Modell

Beispiel

DTRB für die

Schrödinger

Gleichung auf

Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick



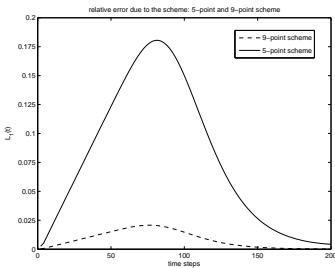
# Beispiel 1: Fehleranalyse

Relativer Fehler:

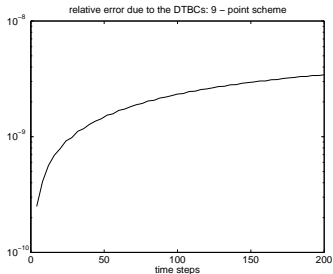
$$L(\psi, \varphi, t_n, \Omega) := \frac{\|\psi(x_j, y_k, t_n) - \varphi(x_j, y_k, t_n)\|_{L^2(\Omega)}}{\|\varphi(x_j, y_k, t_n)\|_{L^2(\Omega)}}$$

$\psi$ : Numerische Lösung

$\varphi$ : Exakte Lösung oder numerische Referenzlösung



Fehler bzgl. des Schemas



Fehler bzgl. der DTRB

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D

Schrödinger

Gleichung

Beispiele

Schrödinger-

Poisson

Modell

Beispiel

DTRB für die

Schrödinger

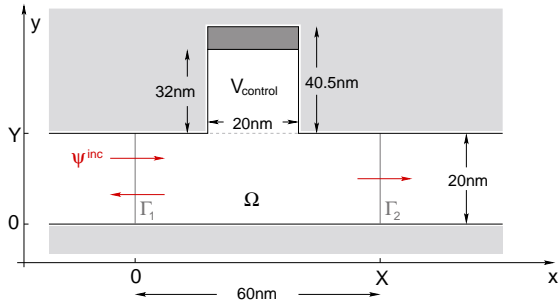
Gleichung auf

Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

## Beispiel 2: Simulation eines Quantentransistors



- einströmende Welle:

$$\psi^{\text{inc}}(0, y, t) = \sin(\pi y) e^{\frac{-iEt}{\hbar}}, \quad E = 29.9 \text{ meV}$$

- inhomogene DTRB an  $x = 0\text{nm}$ , DTRB an  $x = 60\text{nm}$

# Beispiel 2: Simulation eines Quantentransistors

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

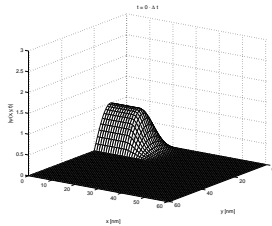
Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

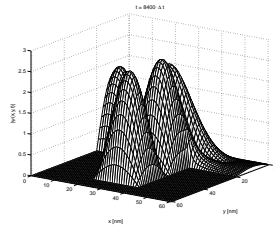
DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

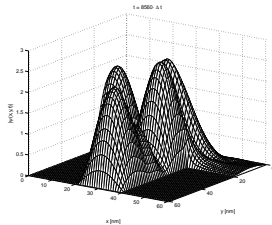
Ausblick



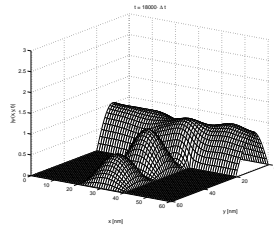
$t = 0$



$t = 1.68\text{ps}$



$t = 1.71\text{ps}$



$T = 3.60\text{ps}$

# Das Schrödinger-Poisson Modell zur Simulation von Double Gate MOSFETs

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

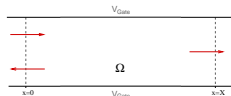
Ausblick

## Mängel im bisherigen Modell:

- Potentiale auf den Außenräumen werden als konstant angenommen
- Wechselwirkung der Elektronen untereinander wird nicht berücksichtigt

## Annahmen:

- Streifen  $\mathbb{R} \times (0, Y)$  modelliert 2D Bauelement
- $\Omega = (0, X) \times (0, Y)$ : aktive Zone des Bauelements
- Superposition von einströmenden ebenen Wellen modellieren Elektronenfluss durch das Bauelement
- für  $x \leq 0$ ,  $x \geq X$  ist das externe Potential durch  $V_1(y) + V_2(t)$  gegeben, in  $\Omega$  durch  $V_e(x, y, t)$ .



## Lemma

Sei  $\psi(x, y, t)$  die Lösung der Schrödinger Gleichung mit dem Potential

$V(x, y, t) = V_1(y) + V_2(t)$ . Definiere  $\varphi(x, y, t) := e^{-\int_0^t V_2(\tau) d\tau} \psi(x, y, t)$ , dann löst  $\varphi$  die Schrödinger Gleichung mit  $V(x, y, t) = V_1(y)$ .

## Schrödinger-Poisson System:

$$i\hbar \frac{\partial \psi_\lambda}{\partial t}(x, y, t) = -\frac{\hbar^2}{2m_*} \Delta \psi_\lambda(x, y, t) + V(x, y, t) \psi_\lambda(x, y, t), \quad (x, y) \in \Omega$$

$$\psi_\lambda(x, 0, t) = \psi_\lambda(x, Y, t) = 0, \quad (\text{inhomogene}) \text{ TRB an } x = 0, x = X$$

$$V(x, y, t) = V_e(x, y, t) + V_s(x, y, t)$$

$$V_e(x, y, t) = \begin{cases} \tilde{V}_e(x, y, t) & : (x, y) \in \Omega, t > 0, \\ V_1(y) + V_2(t) & : x \leq 0, x \geq X, t > 0, \\ \infty & : y \leq 0 \text{ oder } y \geq Y, t > 0 \end{cases}$$

$$-\Delta V_s(x, y, t) = \sum_m \int |\psi_\lambda(x, y, t)|^2 f \left( E_m + \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2m_*} - \mu \right) d\lambda,$$

+ Dirichlet/Neumann-Randbedingungen für  $V_s$

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D

Schrödinger

Gleichung

Beispiele

Schrödinger-

Poisson

Modell

Beispiel

DTRB für die

Schrödinger

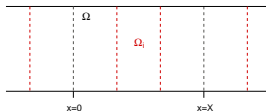
Gleichung auf

Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

# Subband decomposition Algorithmus



1D stationäre Schrödinger Gleichung auf  $\Omega_i$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \chi_m(x, y, t) + V(x, y, t) \chi_m(x, y, t) = E_m(x, t) \chi_m(x, y, t),$$

$$\chi_m(x, 0, t) = \chi_m(x, Y, t) = 0, \quad m \in \mathbb{N}, (x, y) \in \Omega_i$$

Transformation bezüglich der Eigenfunktionen  $\chi_m$ :

$$\psi_\lambda(x, y, t) = \sum_{m=0}^{\infty} \varphi_{\lambda, m}(x, t) \chi_m(x, y, t)$$

$$\varphi_{\lambda, m}(x, t) = \langle \psi_\lambda(x, y, t), \chi_m(x, y, t) \rangle = \int_0^Y \psi_\lambda(x, y, t) \chi_m(x, y, t) dy$$

$\Rightarrow$  neue gekoppelte 1D Gleichungen für  $\varphi_{\lambda, m}(x, t)$

# Subband decomposition Algorithmus

gekoppelte 1D Gleichungen:

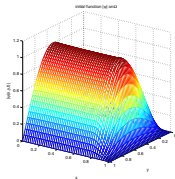
$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{\lambda_{x,y,m}}(x, t) = & -\frac{\hbar^2}{2m_*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi_{\lambda_{x,y,m}}(x, t) + E_m(x, t) \varphi_{\lambda_{x,y,m}}(x, t) \\
 & - i\hbar \sum_{q=1}^{\infty} \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \chi_q(x, y, t), \chi_m(x, y, t) \right\rangle \varphi_{\lambda_{x,y,q}}(x, t) \\
 & - \frac{\hbar^2}{m_*} \sum_{q=1}^{\infty} \left\langle \frac{\partial}{\partial x} \chi_q(x, y, t), \chi_m(x, y, t) \right\rangle \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{\lambda_{x,y,q}}(x, t) \\
 & - \frac{\hbar^2}{2m_*} \sum_{q=1}^{\infty} \left\langle \frac{\partial^2}{\partial x^2} \chi_q(x, y, t), \chi_m(x, y, t) \right\rangle \varphi_{\lambda_{x,y,q}}(x, t)
 \end{aligned}$$

**Subband decomposition Algorithmus:**

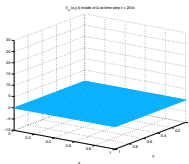
- Abschneiden der Summen bei  $q = M$ , löse  $M$  gekoppelte und  $> M$  ungekoppelte 1D Gleichungen  
→ Reduktion des numerischen Aufwands
- $\chi_m$  ist außerhalb  $\Omega$  unabhängig von  $x, t$   
→ Kopplungsterme verschwinden für  $x \leq 0, x \geq X$   
→ DTRB für 1D Schrödinger Gleichung nutzbar

# Beispiel: gekoppeltes Schrödinger-Poisson System

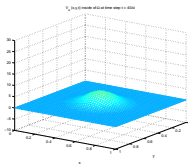
- $\Omega = (0, 1)^2$ , inhomogene DTRB an  $x = 0$ , homogene DTRB an  $x = 1$
- Initialfunktion:  $\varphi_1^I(x) = e^{8ix} + \text{Dämpfung}$ :



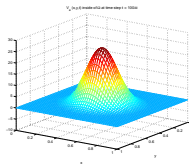
- Inhomogenität:  $\varphi_1^{inc}(x=0, t) = e^{-iEt}$ ,  $E = \frac{64\hbar^2}{2m_*} \sim 37$
- externes Potential: zeitlich ansteigende Gaußglocke



$t \leq 30\Delta t$



$t = 40\Delta t$



$t \geq 100\Delta t$

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick



# Beispiel: gekoppeltes Schrödinger-Poisson System

Potential  $V(x, y, t)$

Lösung  $|\psi(x, y, t)|$

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

**Beispiel**

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

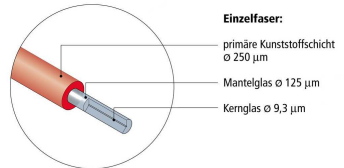
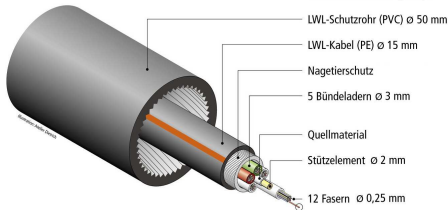
Ausblick

2D Schrödinger Gleichung in Polarkoordinaten:

$$i\psi_t(r, \theta, t) = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} (r\psi_r(r, \theta, t))_r + \frac{1}{r^2} \psi_{\theta\theta}(r, \theta, t) \right) + V(r, \theta, t)\psi$$

- Kreisgebiet  $(r, \theta) \in \Omega = [0, R] \times [0, 2\pi]$
- $\text{supp } \psi^I \subset \Omega$
- periodische RB in  $\theta = 0, \theta = 2\pi$ , TRB in  $r = R$
- Anwendungen z.B. in der Lichtwellenleitersimulation:

#### Aufbau/Querschnitt Lichtwellenleiter (LWL):



#### Einzelfaser:

- primäre Kunststoffschicht  
ø 250 µm
- Mantelglas ø 125 µm
- Kernglas ø 9,3 µm

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten  
Beispiele

Ausblick

# Herleitung der DTRB für die Schrödinger Gleichung auf Kreisgebieten

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

**Strategie:** Berechne TRB für diskrete Schrödinger Gleichung

- Crank-Nicolson Differenzenschema, 5-Punkt Diskretisierung
- Diskrete Fourier Transformation in  $\theta$ -Richtung
- $\mathcal{Z}$ -Transformation in der Zeit

**Schwierigkeiten:**

- Singularität in  $r = 0$ : off-set Gitter  $r_j = (j + \frac{1}{2})\Delta r$
- $\mathcal{Z}$ -Transformation liefert homogene DGL 2. Ordnung mit variablen

Koeffizienten:  $a_j \psi_{j+1,m}(z) + b_j(z) \psi_{j,m}(z) + c_j \psi_{j-1,m}(z) = 0$

- **$\mathcal{Z}$ -transformierte DTRB:**  $l_{j+1,m}(z) \psi_{j,m}(z) = \psi_{j+1,m}(z)$
- Entwicklung von  $l_j(z)$  in eine Laurentreihe für jede Mode  $m$ :

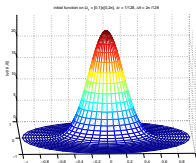
$$l_j(z) = l_j^0 + l_j^1 z^{-1} + \dots + l_j^n z^{-n} + \dots, \quad |z| \geq 1.$$

- Koeffizientenvergleich liefert stabile "Rekursion von unendlich" für  $l_j^n$ , Startwert  $l_{\infty,m}^n$  bildet die 1D DTRB der  $m$ . Mode

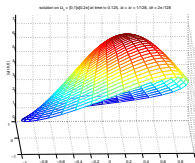
# Beispiel 1: exakte DTRB

Löse freie Schrödinger Gleichung auf dem Einheitskreis  $\Omega$  mit exakten DTRB an  $r = 1$

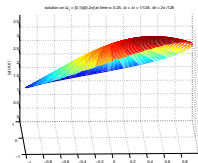
- Initialfunktion:  $\psi'(r, \theta) = 25 e^{2ir \cos \theta - 2ir \sin \theta - \frac{25r^2}{2}}$
- Diskretisierung:  $\Delta r = \Delta t = 1/128$ ,  $\Delta \theta = 2\pi/128$



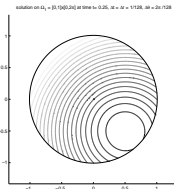
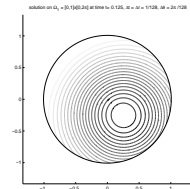
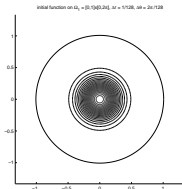
Initialfunktion



$T = 0.125$



$T = 0.25$



Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

Relativer Fehler:

$$L(\psi, \varphi, t_n, \Omega) := \frac{\|\psi(r_j, \theta_k, t_n) - \varphi(r_j, \theta_k, t_n)\|_{L^2(\Omega)}}{\|\varphi(r_j, \theta_k, t_n)\|_{L^2(\Omega)}}$$

$\psi$ : Numerische Lösung

$\varphi$ : Exakte Lösung oder numerische Referenzlösung

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

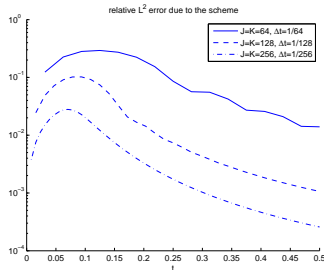
DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung  
Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell  
Beispiel

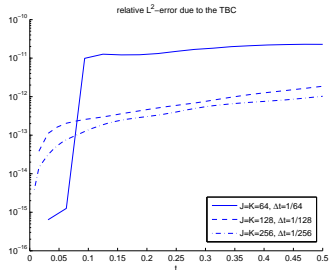
DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick



Fehler bzgl. des Schemas



Fehler bzgl. der DTRB

# Approximation der DTRB:

Nutze “sum-of-exponentials”-Ansatz [Arnold, Ehrhardt, Sofronov]:

$$s_{J+1,m}^n \approx \tilde{s}_{J+1,m}^n := \sum_{l=1}^L b_{l,m} q_{l,m}^{-n}$$

- berechne Padé-Approximation  $\tilde{g}(x) = \frac{P_{L-1}(x)}{Q_L(x)}$  der Reihe

$$g(x) = s_{J+1,m}^1 + s_{J+1,m}^2 x + s_{J+1,m}^3 x^2 + \dots, \quad |x| \leq 1$$

- Taylor-Reihe  $\tilde{g}(x) = \tilde{s}_{J+1,m}^1 + \tilde{s}_{J+1,m}^2 x + \tilde{s}_{J+1,m}^3 x^2 + \dots$  erfüllt  $\tilde{s}^n = s^n$  für  $n = 1, \dots, 2L$
- $q_l$  sind die Nullstellen von  $Q_L(x)$  mit  $|q_l| > 1$ ,  $b_l = \frac{P_{L-1}(q_l)}{Q'_L(q_l)} q_l$

$$\rightarrow \sum_{\nu=1}^{n-1} \tilde{s}_{J+1,m}^{n-\nu} \hat{\psi}_{J,m}^{\nu} = \sum_{l=1}^L c_{J,l,m}^{n-1} \quad \text{mit} \quad c_{J,l,m}^{n-1} = q_{l,m}^{-1} c_{J,l,m}^{n-2} + b_{l,m} q_{l,m}^{-1} \hat{\psi}_{J+1,m}^{n-2}$$

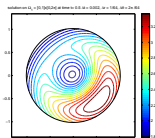
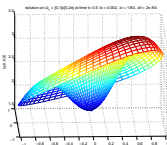
→ numerischer Aufwand reduziert sich von  $\mathcal{O}(Kn^2)$  auf  $\mathcal{O}(KLn)$ ,  $L \sim 20$

## Beispiel 2: approximierte DTRB für Kreisgebiete

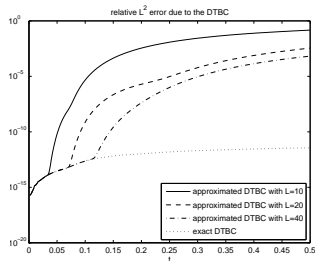
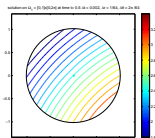
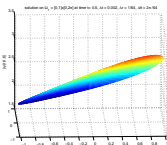
Löse freie Schrödinger Gleichung auf dem Einheitskreis  $\Omega$  mit approximierten DTRB an  $r = 1$

- Initialfunktion:  $\psi^I(r, \theta) = 100 e^{10ir \cos \theta - 10ir \sin \theta - 25r^2}$
- Diskretisierung:  $\Delta r = 1/64$ ,  $\Delta \theta = 2\pi/64$ ,  $\Delta t = 0.0002$

L=10



L=40



Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

Ausblick

Überblick

Quantenphysik

Analytische TRB

DTRB für die 2D  
Schrödinger  
Gleichung

Beispiele

Schrödinger-  
Poisson  
Modell

Beispiel

DTRB für die  
Schrödinger  
Gleichung auf  
Kreisgebieten

Beispiele

**Ausblick**

- schwächere Annahmen an das Potential auf den Außenräumen
- 3D Simulationen physikalischer Modelle (z.B. MOSFETs, Resonant Tunneling Diodes, etc.)
- nicht-lineare Schrödinger Gleichung
- DTRB für andere Gleichungen
- ...