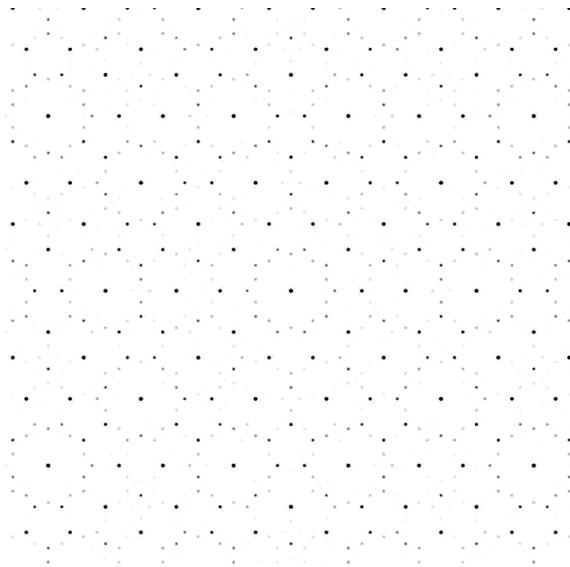


GPU gestützte, interaktive Visualisierung von Beugungsphänomenen

GPU supported interactive visualisation
of diffraction phenomena

Benjamin Busam
B.Sc. Thesis



Zentrum für Mathematik
Technische Universität München
D-85747 Garching
2011

Technische Universität München
Zentrum für Mathematik

Bachelorarbeit

GPU gestützte, interaktive Visualisierung von Beugungsphänomenen

Benjamin Busam

Abgabedatum: 07. Februar 2011

Betreuer:
Prof. Dr. Dr. J. Richter-Gebert
Dipl.-Inf. M. von Gagern

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit selbstständig und nur mit den angegebenen Hilfsmitteln angefertigt habe.

München, den 07. Februar 2011

(Benjamin Busam)

Danke

An dieser Stelle möchte ich mich bei all denjenigen bedanken, die mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben.

Ein besonderer Dank gilt hierbei meinen Betreuern Herrn Prof. Richter-Gebert und Herrn Gagern, die sich mit sehr viel Engagement, immer neuen Ideen in zahlreichen gewinnbringenden Gesprächen viel Zeit genommen haben, meine Gedanken und Einfälle anzuhören und zu diskutieren.

Bedanken möchte ich mich auch bei allen Freunden und Bekannten, die sich orthographischer und formaler Korrekturen annahmen und die Arbeit nach inhaltlicher Stringenz durchgesehen haben.

Großer Dank gebührt ebenso meiner Freundin Monika, die vor allem während der letzten Wochen auf viel gemeinsame Zeit verzichten musste und stets ein offenes Ohr für mich hatte.

Zusammenfassung

Moderne Grafikkarten verfügen heute selbst bei Einzelplatzrechnern über leistungsfähige Grafikprozessoren. Mit ihrer Hilfe sind komplexe zwei- und dreidimensionale Szenen und Bilder in Echtzeit darstellbar. Dies ermöglicht es, Simulationen mit hoher Performance interaktiv zu gestalten und den User parallel zur Kalkulation mit einzubinden.

Auf dieser Basis und vor dem Hintergrund physikalischer Gesetzmäßigkeiten entwickeln wir ein mathematisches Modell zur Berechnung von Interferenzerscheinungen elektromagnetischer Wellen, die durch angeregte Atome emittiert werden. Wir werden zu dem Problem einen Algorithmus finden und diesen schließlich auf der GPU implementieren. Außerdem realisieren wir eine Anbindung an eine dynamische Geometrie-Software, um dem Anwender mittels einer intuitiven Oberfläche auf relativ simplem Weg Ergebnisse liefern zu können. Schließlich werden wir einige Resultate diskutieren und dabei auf Effizienz und Probleme eingehen.

Abstract

Modern video adapters have powerful graphic processors even in the case of common personal computers. Hence it is possible to visualise complex two- or three-dimensional scenes and pictures in real-time. That is why one can create interactive high-performance simulations which can be controlled by the user while calculating in background.

Based on physical relations we will see how to excite atoms and we will develop a mathematical model to compute interference phenomena caused by electromagnetic waves. Those problems will be solved using an algorithm which runs directly on the GPU. Furthermore we will realise a plugin for a dynamical geometry software which can be used intuitively. Thereby we get a user-friendly interface and a way to analyse different atomic settings very fast. Finally we discuss the results and take a look on the efficiency of our programme.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Physikalisch-Mathematischer Kontext	3
2.1	Physikalische Wellen	3
2.1.1	Mathematische Beschreibung von Wellen	3
2.1.2	Superpositionsprinzip	5
2.1.3	Elektromagnetische Wellen	5
2.1.4	Kugelwellen	8
2.2	Interferenzphänomene	11
2.2.1	Huygens-Fresnelsches Prinzip	11
2.2.2	Interferenz am Doppelspalt	12
2.2.3	Kohärenz	15
2.3	Atome und erzwungene Oszillation	16
2.3.1	Gitter und Kristalle	16
2.3.2	Bragg-Reflexion	18
3	Modellierung	21
3.1	Räumliche Konstellation	21
3.1.1	Zeigerdarstellung	22
3.1.2	Vom Zeiger zur Intensität	24
3.1.3	Intensität und Schirmabstand	25
3.1.4	Rotation der Atomwolke	25
3.2	Algorithmus zur Intensitätsberechnung	26
4	Implementierung	29
4.1	Relevante Komponenten	29
4.1.1	OpenGL, GLSL und JOGL	30
4.1.2	Cinderella.2 und CindyScript	30
4.2	Code und Funktion	30
4.2.1	Berechnungsablauf	31
4.2.2	Graphisches Output	31
4.2.3	CindyScript Plugin	32
5	Output und Analyse	35
5.1	Beispiele und Ergebnisse	35
5.1.1	Biatomare Interferenz	35

5.1.2	Quasikristalline Strukturen und Penrose-Parkettierung	35
5.1.3	Laser und zweidimensionale Gitter	37
5.2	Performance und numerische Probleme	37
5.2.1	Vergleich der Berechnung auf CPU und GPU	37
5.2.2	Numerische Schwierigkeiten	39
6	Ausblick	41
A	Appendix	I
A.1	Dateiregister und Funktionsübersicht	I
	Literaturverzeichnis	III

1 Einleitung

*Crystallography is in for a minor upheaval,
with the recognition of forbidden icosahedral symmetry
by both construction and experiment.
(nature)*

Im November 1984 standen die Feststoffphysiker auf einmal vor einer lange als unmöglichen angesehenen Symmetrie im Beugungsspektrum eines Stoffes im kristallinen Zustand.¹ Sie sahen eine Symmetrie, wie sie schon das Deckblatt dieser Arbeit zeigt: Bei einer ganzen Umdrehung des Bildes um einen bestimmten Punkt kommt es fünffach zur Überdeckung. Diese fünffache Rotationssymmetrie zog damals eine ganze Reihe von Diskussionen und Publikationen nach sich und bereitete den Weg zur mathematischen Analyse derartiger Strukturen.²

Elektromagnetische Wellen liefern die physikalische Grundlage solcher Muster. Durch sie kann man Atome in Feststoffen anregen, sodass diese Wellen derselben Wellenlänge emittieren. Regt man viele Atome an, so überlagern sich diese Wellen und es kommt zu Interferenzerscheinungen, die man experimentell auf einem ebenen Schirm visualisieren kann. Derartige Versuche sind nicht immer ohne weiteren Aufwand und eine starke Kostenexpansion durchführbar. Doch es stellt sich heraus, dass diese Phänomene unter Kenntnis physikalischer Theorien mathematisch modellierbar sind.

Ziel dieser Arbeit soll sein, ein Programm zu entwickeln, das die Kalkulation derartiger Phänomene übernimmt und direkt entstehende Muster ausgeben kann. Wir werden sehen, dass ein Algorithmus zur Berechnung eines solchen Bildes gut parallelisierbar ist und ihn aus diesem Grund teilweise auf der GPU implementieren.

Außerdem wollen wir dem Anwender eine Möglichkeit zur Verfügung stellen, auf einfache Weise interaktiv und in Echtzeit ins Geschehen einzugreifen und verschiedene Parameter zu variiieren oder hinzuzufügen.

Wir werden in den folgenden Kapitel hierfür zunächst den physikalischen und mathematischen Rahmen liefern, um ein entsprechendes Modell zu realisieren. Daraus entwickeln wir einen Algorithmus zur Erzeugung des angesprochenen Diffraktionsmusters, den wir daraufhin auf den gegebenen Komponenten implementieren. Schließlich werden wir das fertige Programm testen und Schwierigkeiten diskutieren.

¹Vgl. [SEN95], S.1ff.

²Erst 2009 konnte ein solcher „Quasikristall“ in der Natur gefunden werden. Alle vorherigen Formen waren im Labor synthetisch hergestellt. Siehe [BEA09].

2 Physikalisch-Mathematischer Kontext

Physics is mathematical
(Bertrand Russell)

In dieser Arbeit wollen wir im Detail ein Programm entwickeln, das uns mathematische Modelle physikalischer Phänomene visualisiert. Bevor wir ein solches ausarbeiten und vorstellen können, beschäftigen wir uns intensiv mit der hier zu Grunde liegenden Theorie, respektive den für unser Vorhaben relevanten Gesetzmäßigkeiten der Natur. Ziel dieses Kapitels soll gleichermaßen sein, uns einen qualitativen Überblick und ein Verständnis für die auftretenden Erscheinungen zu verschaffen, wie auch die daraus resultierenden Ergebnisse quantitativ mathematisch fassen zu können.

Wir beginnen mit der Betrachtung physikalischer Wellen.

2.1 Physikalische Wellen

Unter einer **physikalischen Welle** versteht man ein räumlich und zeitlich variables Feld, welches Energie (jedoch keine Materie) durch den Raum transportiert.¹ Dabei werden immer zwei physikalische Größen ineinander transformiert.

Eine Wasserwelle auf einem Teich lässt beispielsweise die Wassermoleküle an der Oberfläche auf und ab schwingen. Sie überträgt dabei Energie und Impuls dieser Teilchen, ohne dass eines der Moleküle dabei den Teich an sich überqueren könnte. Eine solche Schwingung muss dabei nicht notwendigerweise periodisch sein. Auch ein Wellenzug, den man über den See wandern sieht, stellt schon eine Welle dar.

Man unterscheidet gewöhnlich zwei verschiedene Arten von Wellen. Solche, die parallel zu ihrer Ausbreitungsrichtung schwingen, wie beispielsweise Schall, der sich als Druckwelle fortpflanzt, werden longitudinal genannt. Wellen bei denen Auslenkung und Expansion orthogonal aufeinander stehen, nennt man Transversalwellen.

2.1.1 Mathematische Beschreibung von Wellen

Mathematisch formuliert handelt es sich bei Wellen um reell- oder komplexwertige Funktionen $A(x_1, x_2, \dots, x_n, t)$, welche an jedem Raumpunkt definiert sind und die

¹Vgl. [MEN09], Stichwort: „Welle“.

Wellengleichung lösen.

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} - \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial^2 A}{\partial x_i^2} \right) = 0 \quad (2.1)$$

Bei der (homogenen) Wellengleichung (auch als d'Alembert-Gleichung bezeichnet) (2.1) handelt es sich um eine homogene lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung; man rechnet sie den hyperbolischen Differentialgleichungen zu.²

Lösungen dieser Gleichung, die so genannten Wellenfunktionen, hängen also im Allgemeinen vom Ort $r = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ und der Zeit t ab. Eine allgemeine Funktion zu finden, welche die Wellengleichung löst, ist keineswegs trivial und wir wollen hier lediglich eine spezielle Lösung der homogenen Wellengleichung in einer räumlichen Dimension betrachten, wie sie uns von der Anschauung zum Modellieren später noch nützlich sein kann.

$$A(x, t) = A_0 \sin(kx + \omega t) \quad (2.2)$$

$$k = \frac{\omega}{c}$$

Zweimaliges partielles Ableiten von (2.2) nach x bzw. t und einsetzen in (2.1) bestätigt, dass $A(x, t)$ die d'Alembert-Gleichung löst.

A_0 bezeichnet man als Amplitude, sie gibt die maximal mögliche Auslenkung der Welle an. Mit $\varphi(x, t) = kx + \omega t$ beschreibt man die Phase der Welle zum Referenzzeitpunkt t am Ort x . Schließlich ist c die Geschwindigkeit, mit der sich die Phase der Welle ausbreitet, und ω wird Kreisfrequenz genannt. Die Kreisfrequenz gibt an, wie schnell ein entsprechender Zeiger, wie in Abbildung (2.1) dargestellt, um den Ursprung rotiert. λ bezeichnet in diesem Kontext die Wellenlänge unserer Funktion.

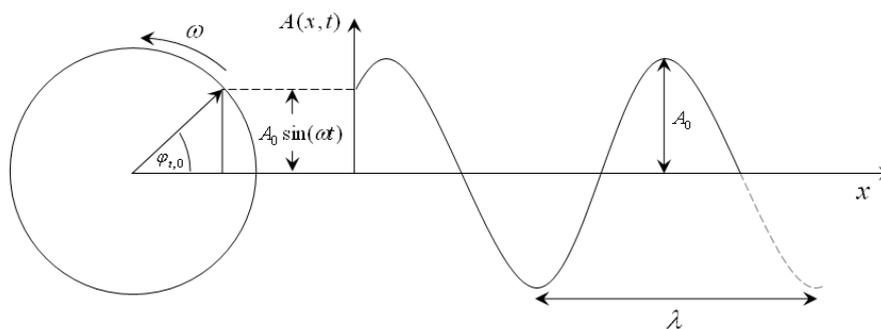


Abbildung 2.1: Spezielle Lösung der homogenen Wellengleichung in einer räumlichen Dimension

²Siehe [BHW04], S.299.

2.1.2 Superpositionsprinzip

In Situationen, in denen verschiedene Wellen des gleichen Typs vorkommen, lösen alle stets die zugehörige lineare Wellengleichung. Linearkombinationen von Lösungen der Differentialgleichung selbst müssen daher auch wieder Funktionen sein, die den Restriktionen von (2.1) genügen, also ebenfalls Wellen. Wellenfunktionen einzelner Wellen $A_i(x, t)$ überlagern und durchdringen sich dabei ungestört und für die Auslenkung der resultierenden Wellenfunktion $A(x, t)$ gilt

$$A(x, t) = \sum_{i=0}^n A_i(x, t). \quad (2.3)$$

Diesen Überlagerungsvorgang bezeichnet man als **Superposition**. Er ist Ursache zahlreicher physikalischer Phänomene und dient im Weiteren als Fundament unserer Untersuchung.

Um uns anschaulich klar zu machen, was das Superpositionsprinzip für Wellen bedeutet, betrachten wir schematisch die beiden Extremsituationen aus Skizze (2.2). In der oberen Darstellung sind die beiden Wellen in Phase und es kommt somit zur Addition ihrer Auslenkungen, ohne dass dabei die Wellenlänge der resultierenden Funktion variiert. Im zweiten Fall stehen die angesprochenen Zeiger (ihre Phase mod 2π) an jeder Stelle genau um π versetzt zueinander und heben sich somit überall auf. Es kommt zur vollständigen Auslöschung der resultierenden Welle.

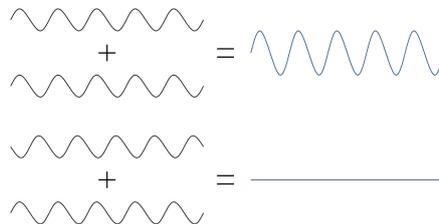


Abbildung 2.2: Superposition von Wellen in verschiedener Phasenbeziehung³

2.1.3 Elektromagnetische Wellen

Unter bestimmten Voraussetzungen, wie wir sie noch in Kapitel (2.2) kennenlernen werden, kommt es bei Licht zu Phänomenen, die durch dieses Superpositionsprinzip im sichtbaren Spektrum erzeugt werden. Abbildung (2.3) zeigt eine Fotografie, die durch sich überlagernde elektromagnetische Felder entstanden ist.

Bisher steht das Konzept der Welle noch wenig greifbar im Raum. Wir wollen nun konkreter werden, die Vorstellung mit Inhalten anreichern und die für die weitere

³Abbildung nach der Vorlage von [GPU07], S.125.

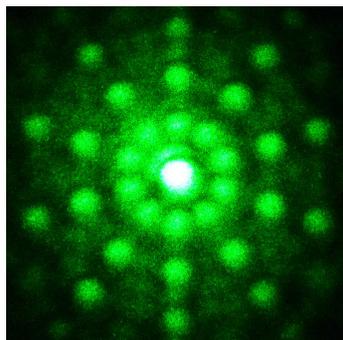


Abbildung 2.3: Interferenzmuster von grünem Licht eines Lasers

Ausarbeitung relevanten elektromagnetischen Wellen genauer fixieren. Dieser Abschnitt soll lediglich einen groben Abriss der Eigenschaften und Ursachen elektromagnetischer Wellen geben, mit denen wir uns im Modellierungs- und Visualisierungsteil in Kapitel (3) und (4) beschäftigen werden und welche ursächlich für die Diffraktionsphänomene sind, die wir darstellen wollen. Sehen wir uns diese also etwas näher an.⁴

Als **elektromagnetische Wellen** bezeichnet man Wellen, die aus einem gekoppelten elektrischen (E-Feld) und magnetischen Feld (B-Feld) bestehen. Aufgrund der Maxwell-Gleichungen⁵ bedingt ein sich zeitlich veränderndes E-Feld ein B-Feld und umgekehrt. Die Vektoren E , B und k , also E-Feld, B-Feld und Ausbreitungsrichtung, bilden dabei ein Rechtssystem.

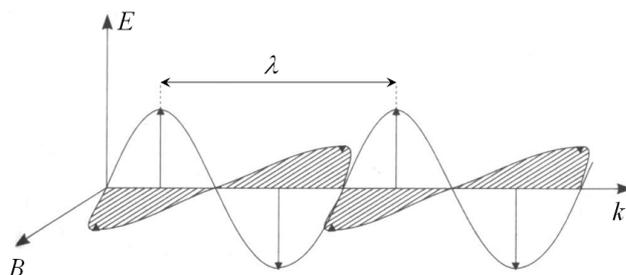


Abbildung 2.4: Linear polarisierte elektromagnetische Welle⁶

Als Transversalwellen sind EM-Wellen polarisiert: Da das E-Feld orthogonal zur

⁴Im Folgenden vgl. [TIP04], S.970.

⁵Vgl. [LLF09], S.79ff.

⁶Angepasste Grafik, im Original von [HGF04].

Ausbreitungsrichtung steht, kann sich die Richtung der Schwingung während der Ausbreitung der Welle ändern. Variiert diese ungeordnet, so spricht man von einer unpolarisierten Welle. Grafik (2.4) zeigt eine in E-Achsenrichtung linear polarisierte elektromagnetische Welle, wie sie für uns im Weiteren interessant sein wird.⁷

Weiter pflanzen sich EM-Wellen im Vakuum immer mit Lichtgeschwindigkeit fort und benötigen damit insbesondere kein Trägermedium wie beispielsweise die akustische Schallwelle.

Für die Auswertung und Analyse von Beobachtungen im Kontext mit elektromagnetischer Strahlung ist man meist an der zeitlich gemittelten Intensität $\langle I \rangle_t$ des zugrunde liegenden Feldes an einem bestimmten Punkt interessiert, denn Lichtintensität ist vergleichbar einfach beobachtbar und messbar. Es lässt sich zeigen, dass die mittlere Intensität⁸ einer elektromagnetischen Welle proportional ist zum zeitlich mittleren Betrag des Quadrats der Amplitude der Welle. Denn es gilt für einen weit entfernten Punkt⁹:

$$\langle I \rangle_t = \langle |S| \rangle_t \propto \langle |E \times B| \rangle_t \quad (2.4)$$

mit dem Poynting-Vektor S .¹⁰

Da $E \perp B$ und $|B| \propto |E|$ im Vakuum gelten, folgt

$$\langle I \rangle_t \propto \langle E^2 \rangle_t. \quad (2.5)$$

Damit gilt für eine einzelne durch

$$E(x, t) = E_0 \sin(kx + \omega t) \quad (2.6)$$

bestimmte Welle:

$$\langle I \rangle_t \propto E_0^2 \quad (2.7)$$

$$I_0 := \langle I \rangle_t = \alpha E_0^2 \quad (2.8)$$

mit dem Proportionalitätsfaktor $\alpha \in \mathbb{R}^+$.

Da die EM-Welle schon durch die Oszillation des E-Feldes gemäß der Maxwell-Gleichungen vollständig determiniert ist, reicht es aus, diese Schwingung zu betrachten.

Im nächsten Abschnitt soll es um einfache periodisch schwingende Quellen von Wellen gehen, wie wir sie als Sender für elektromagnetische Strahlung bei der Modellierung unserer GPU gestützten Software benötigen.

⁷Eine detailliertere Untersuchung der abgebildeten Welle würde über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen und findet sich beispielsweise bei [DEO06], S.195f.

⁸Als Intensität oder Energieflussdichte bezeichnet man die Energie, die in einer Zeiteinheit durch eine zur Ausbreitungsrichtung senkrechte Flächeneinheit transportiert wird.

⁹Vgl. [DEO06], S.196f.

¹⁰ $S = E \times H$ mit magnetischer Feldstärke $H \propto B$ im Vakuum.

2.1.4 Kugelwellen

Wir werden im Weiteren **idealisierte punktförmige Quellen** kennenlernen, die als Monopolstrahler Wellen **periodisch** und **isotrop** in den Raum aussenden.¹¹ Außerdem bedarf es des Verständnisses und Anwendens der Konzepte solcher Felder für die Ausführungen in Abschnitt (2.2) - Grund genug, uns ausführlicher mit diesen Kugelwellen auseinanderzusetzen.¹²

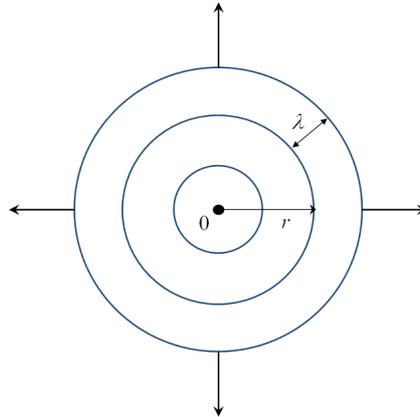


Abbildung 2.5: Querschnitt durch eine Kugelwelle¹³

Legen wir deshalb den Fokus auf eine solche Welle und betrachten diese mit Quelle im Ursprung. Abbildung (2.5) zeigt einen Querschnitt dieser Kugelwelle mit einer den Ursprung enthaltenden Ebene. Die angedeuteten Kreise visualisieren hier gegenüber dem Sender konzentrisch gelegene Kugelflächen gleicher Phase. Sie breiten sich, wie angedeutet, vom Ursprung gleichermaßen in alle Raumrichtungen aus - vergrößern ihren Radius mit fortschreitender Zeit also immer mehr. Da die Welle Energie des Erregers durch den Raum transportiert und keine Energie hinzukommt, muss jede der gekennzeichneten Kugelflächen dieselbe Energiemenge enthalten. Da die Energie isotrop und homogen auf den Kugelflächen verteilt ist, muss auf jeder Fläche, die vom gleichen Raumwinkel eingeschlossen wird, dieselbe Energiemenge vorhanden sein oder anders ausgedrückt: Da die emittierte Leistung eine expandierende Fläche durchsetzt, fällt die mittlere Intensität in jenem Maß ab, wie die Fläche anwächst. Es gilt also

$$\langle I \rangle_t \propto \frac{1}{A_{Kugel}} = \frac{1}{4\pi r^2} \propto \frac{1}{r^2}. \quad (2.9)$$

Damit ist die mittlere Intensität in einem Punkt reziprok proportional zum Quadrat seiner Entfernung zur Quelle. Sie nimmt also proportional zum Abstandsquadrat ab.

¹¹Vgl. [MMA04], S.683f.

¹²Im Folgenden vgl. [DMW06], S.373ff.

¹³Grafik nach der Vorlage von [DMW06], S.373.

Mit wachsender Entfernung vom Sender werden Kugelwellen ebenen Wellenfronten lokal immer ähnlicher, wie Grafik (2.6) zeigt. Bei Betrachtungen ausschließlich weit von der Quelle entfernter Gebiete spricht man vom Fernfeld und der Fraunhofer-Näherung; möchte man Phänomene entsprechend nahe des Erzeugers analysieren, verwendet man entsprechend die Begriffe Nahfeld und Fresnel-Näherung.¹⁴

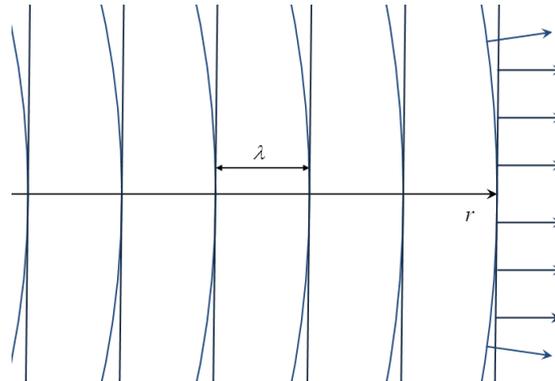


Abbildung 2.6: Kugelwelle und ebene Welle im Fernfeld

Für den konkreten Fall eines Punktes P auf einem Schirm im Abstand a zur Quelle Q wie in Skizze (2.7) ergibt sich damit für die Intensität I_0 in der Quelle

$$\langle I(d) \rangle_t = I_0 \frac{1}{(r(d))^2} = I_0 \frac{1}{a^2 + d^2}. \quad (2.10)$$

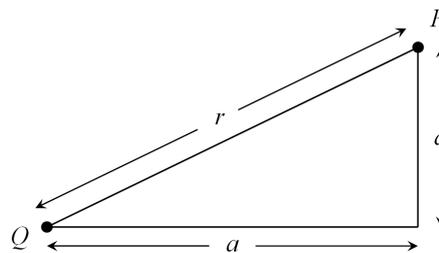


Abbildung 2.7: Skizze zur Beziehung von Abstand a , Wellenweg r und d

Taylorentwicklung in $d = 0$ liefert

$$\langle I(d) \rangle_t = I_0 \left(\frac{1}{a^2} - \frac{d^2}{a^4} + \frac{d^4}{a^6} - \frac{d^6}{a^8} + \frac{d^8}{a^{10}} + \mathcal{O}(d^9) \right). \quad (2.11)$$

Für $d \ll a$ liefert der erste Term also schon eine sinnvolle Näherung.

¹⁴Siehe [TIP04], S.1099f.

Aufgrund dieser Tatsachen können und werden wir Kugelwellen im Fernfeld hinreichend gut durch ebene Wellenfronten approximieren. Dadurch ist es möglich, drei enorm vereinfachende und rechenzeitsparende Annahmen zu treffen:¹⁵

1. Nahe beieinanderliegende Punktquellen erzeugen im Fernfeld parallele Wellenfronten.
2. Die zeitlich gemittelte Intensität auf einem Schirm parallel zur Wellenfront im Fernfeld ist konstant.
3. Parallele Strahlen zweier sehr nahe beieinanderliegender Sender sind im Fernfeld inzident. Ein Schirmpunkt wird dort unter dem selben Winkel getroffen, den die Strahlen der Sender bei identischem Schirmabstand mit ihrer Verbindungsgerade einschließen.

Die ersten beiden Punkte haben wir bereits angesprochen, zu Punkt drei liefert Abbildung (2.8) eine Idee.

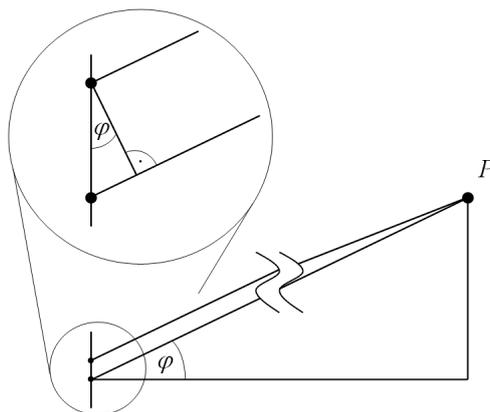


Abbildung 2.8: Inzidenz paralleler Strahlen im Fernfeld

Außerdem halten wir fest, dass sich für die beschriebene Quelle die Wellenfunktion entlang der Strahlen ausgehend vom Sendezentrum gemäß Gleichung (2.2) verhält, weshalb wir bei der quantitativen Betrachtung solcher von

$$E(x, t) = E_0 \sin(kx + \omega t) \quad (2.12)$$

ausgehen können. Wir werden hiervon bei der Modellierung zum Erstellen einer computergestützten Berechnung von Wellenüberlagerungen in Kapitel (4) Gebrauch machen. Auch die übrigen Annahmen werden mit entsprechender Bebilderung später mehrmals verwendet.

¹⁵Im Folgenden vgl. [SEN95], S.77f.

Zunächst widmen wir uns jedoch der detaillierteren Betrachtung von Phänomenen im Kontext des Wellenweges und möglicher durch Externa verursachter Modulationen. Hierfür werden insbesondere die Kugelwellen von Bedeutung sein.

2.2 Interferenzphänomene

Die räumliche Auslenkungsverteilung einer Welle und ihre Ausbreitungsrichtung können durch Reflexion an Flächen oder durch Beugung an Öffnungen und Hindernissen beeinflusst werden. All diese Prozesse kann man mit Hilfe des Huygensschen Prinzips¹⁶ interpretieren und analysieren. Wir wollen deshalb ausgehend von jener fundamentalen Betrachtungsweise von Wellen einige für die anschließende Modellierung wichtige Konzepte kennenlernen und verstehen.

2.2.1 Huygens-Fresnelsches Prinzip

Nach dem **Huygensschen Prinzip** kann jeder Punkt einer Wellenfläche gleicher Phase als Ausgangspunkt für eine elementare Kugelwelle, wie sie im vorigen Abschnitt angesprochen wurde, angesehen werden. Diese „Elementarwellen“ erben Ausbreitungsgeschwindigkeit, Frequenz und Phase von der Primärwelle.¹⁷ Die Sekundärwellen breiten sich demnach in alle Richtungen aus und überlagern sich gemäß dem Superpositionsprinzip (2.1.2). Dabei ergibt die Enveloppe aller Elementarwellen die Wellenfront der Ausgangswelle zu einem späteren Zeitpunkt. Skizze (2.9) veranschaulicht den Sachverhalt links für eine ebene Wellenfront und rechts für eine Kreiswelle.

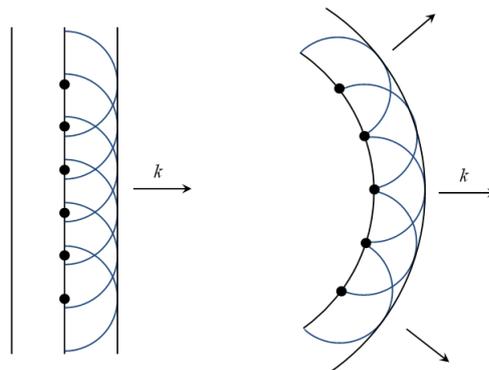


Abbildung 2.9: Huygens-Fresnelsches Prinzip am Beispiel zweier Wellen

Anhand dieser Grundlage wollen wir nun betrachten, was am Rand von „Hindernissen“ mit einfallenden Wellen geschieht.

¹⁶Auch Huygens-Fresnelsches Prinzip genannt.

¹⁷Siehe beispielsweise [BEP05], S.136.

2.2.2 Interferenz am Doppelspalt

Um nachgehend komplexere Überlagerungssituationen darzustellen und beliebige Konstellationen computergestützt zu errechnen, schaffen wir mit Hilfe eines simplen Beispiels ein Grundverständnis, das es uns ermöglichen sollte, die Prinzipien auf eine allgemeinere Ebene zu übertragen.

Die Modifikation von Feldern analysieren wir deshalb ausgehend von einem einfachen Szenario: Eine ebene Wellenfront trifft, wie der Querschnitt in Darstellung (2.10) zeigt, auf ein frontparalleles schmales Hindernis mit zwei infinitesimal kleinen¹⁸ nahe beieinanderliegenden Öffnungen. Historisch betrachtet spricht man hier vom „Doppelspalt“, da bei der ursprünglichen Anordnung mit gleichem Querschnitt eine Schlitzblende als Hindernis verwendet wurde.¹⁹ Wir werden uns bei der Untersuchung an dieser Stelle auch auf den abgebildeten Querschnitt beschränken, um später den allgemeinen Fall direkt am Modell zu diskutieren.

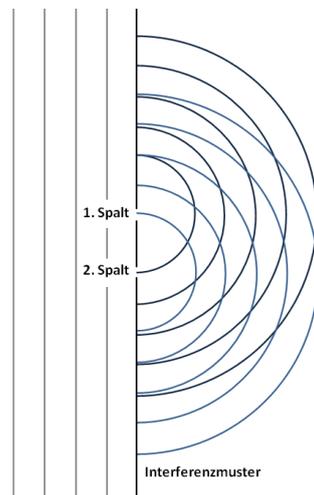


Abbildung 2.10: Beugung am Doppelspalt

Interessant ist nun, was auf der rechten Seite des Hindernisses mit der Welle geschieht. Zunächst ist es möglich, das Huygenssche-Prinzip auf die Erregerwelle zum Zeitpunkt des Einfallens auf das Hindernis anzuwenden. Wir erhalten, wie schon in Abbildung (2.10) dargestellt, zwei sich kugelförmig ausbreitende Elementarwellen. Diese „Ablenkung“ am Hindernis bezeichnet man als **Beugung** oder **Diffraktion**. Insbesondere fällt auf, dass sich die Welle dadurch im geometrischen Schattenraum des Hindernisses ausbreitet und es dort zur Superposition der beiden Kugelwellen kommt. Solche Überlagerungen bezeichnet man als **Interferenz**. Durch Beugung und Interferenz kann es zu dauerhaften Interferenzerscheinungen kommen, die man

¹⁸In der Praxis geht man von einem Lochdurchmesser aus, der deutlich kleiner ist als die Wellenlänge der einfallenden Front.

¹⁹Siehe [TIP04] S.1084.

auf einer weit entfernten Ebene untersuchen kann. Anhand des vorliegenden Beispiels wollen wir nun analysieren, was sich bezüglich der Referenzgrößen der ebenen Wellenfront links des Hindernisses für die superponierte Welle im Fernfeld rechts davon ergibt.

Unter den Annahmen aus Abschnitt (2.1.4) können wir dies nun im Gesamten quantitativ fassen. Dazu fokussieren wir die Öffnungen im Hindernis, wie sie in Illustration (2.11) vergrößert dargestellt sind.

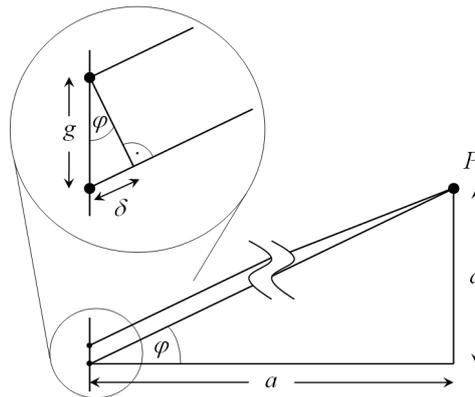


Abbildung 2.11: Gangunterschied zweier Strahlen hinter Doppelspalt²⁰

Da wir annehmen können, dass die beiden parallelen Strahlen auf einem entfernten Schirm inzident sind, ergibt sich eine Weglängendifferenz von

$$\delta \approx g \sin(\varphi). \quad (2.13)$$

Das bedeutet für eine Kugelwelle, die sich entlang eines solchen Strahls gemäß $A(x, t) = A_0 \sin(kx + \omega t)$ wie in Abschnitt (2.1.1) verhält, dass sich maximale **konstruktive Interferenz** genau dann ergibt, wenn die Amplituden für beide Wellengänge synchron zusammenfallen. Damit ist der Weglängenunterschied konstruktiver Interferenz also

$$\begin{aligned} \delta &= m\lambda \\ m &\in \mathbb{Z}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

λ stellt dabei nicht nur die Wellenlänge der beiden Kugelwellen dar, sondern ist gleichzeitig auch die Wellenlänge der einfallenden Wellenfront links des Spalts. Mit analoger Argumentation folgt, dass sich die Felder der beiden Punktquellen für

$$\delta = \left(m + \frac{1}{2}\right) \lambda \quad (2.15)$$

²⁰Abbildung nach der Vorlage von [TIP04], S.1085.

aufheben, also vollständig **destruktive Interferenz** vorherrscht. Diese beiden Extremsituationen hatten wir auch schon eingangs in Abbildung (2.2) visualisiert. Wir entnehmen der Darstellung (2.11) weiter, dass für die Größen a , y und φ der Zusammenhang

$$\tan(\varphi) = \frac{d}{a} \quad (2.16)$$

gilt. Mit der Näherung

$$\tan(\varphi) \approx \sin(\varphi) \quad (2.17)$$

für kleine Winkel φ folgt damit für Punkte d_{max} maximal konstruktiver und Punkte d_{min} vollständig destruktiver Interferenz

$$d_{max} = m \frac{\lambda g}{a} \quad (2.18)$$

$$d_{min} = \left(m + \frac{1}{2}\right) \frac{\lambda g}{a}. \quad (2.19)$$

Demnach erhält man äquidistante Punkte minimaler und maximaler Interferenz, also helle bzw. dunkle Stellen.

Bei der Superposition der Wellen addieren sich ihre Auslenkungen, nicht ihre Intensitäten, weshalb wir einer quantitativen Auswertung der Vorüberlegungen aus Abschnitt (2.7) bedürfen. Damit können wir eine Intensitätsverteilung für die zeitlich mittlere Intensität der kumulierten Wellen in Abhängigkeit von d darstellen. $I_0 := \langle I \rangle_t$ gibt gerade die Intensität an, mit der eine Lichtquelle einen zur Wellenfront parallelen Schirm im Fernfeld gleichmäßig ausleuchtet. Es ergibt sich der in Grafik (2.12) gezeigte Zusammenhang.

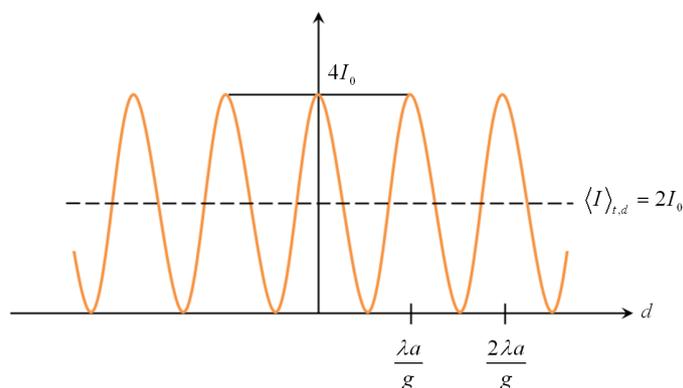


Abbildung 2.12: Mittlere Intensität am Schirm in Abhängigkeit von d

Die maximale zeitlich gemittelte Intensität ist $4I_0$. Die gestrichelte Linie deutet die mittlere räumliche Intensität von $2I_0$ an.

Wir wollen nun weiter der Frage nachgehen, was für die zeitliche Stabilität von Interferenzerscheinungen nötig ist.

2.2.3 Kohärenz

Stationäre Interferenzphänomene sind bei Überlagerung beliebig erzeugter Wellen im Allgemeinen nicht zeitlich stabil. Hierfür sind kohärente Wellen nötig.

Verschiedene, unabhängige Erreger von Wellen erzeugen nur dann ein zeitlich stabiles Wellenfeld, wenn diese einerseits mit der gleichen Frequenz ω oszillieren. Wäre dies nicht der Fall, so würde bei der zeitlichen Mittelung durch die bezüglich t variable Amplitude die Interferenzstruktur verloren gehen. Andererseits muss an jedem Ort r die Phasendifferenz der Felder untereinander zeitlich konstant sein. Wellen mit dieser Eigenschaft nennt man räumlich **kohärent**. Die Superposition so gearteter Wellen liefert ein im Allgemeinen vom Ort abhängiges, stationäres Wellenfeld, wie im Fall des Doppelspalts.²¹ In Abschnitt (2.2.2) war eine einzige ebene Wellenfront ursächlich für die beiden Elementarwellen, weshalb diese Voraussetzungen per se erfüllt waren.

In der Praxis werden deshalb für Versuche im Spektrum des sichtbaren Lichts Laser eingesetzt, welche nicht nur ein besonders enges Frequenzspektrum aufweisen, sondern auch über eine extrem große Kohärenzlänge verfügen. Das heißt, der maximale Weglängenunterschied zweier Strahlen eines Lasers, bei dem noch Interferenzmuster erkennbar sind, ist mit einer Länge von bis zu $10^7 m$ sehr groß.²²

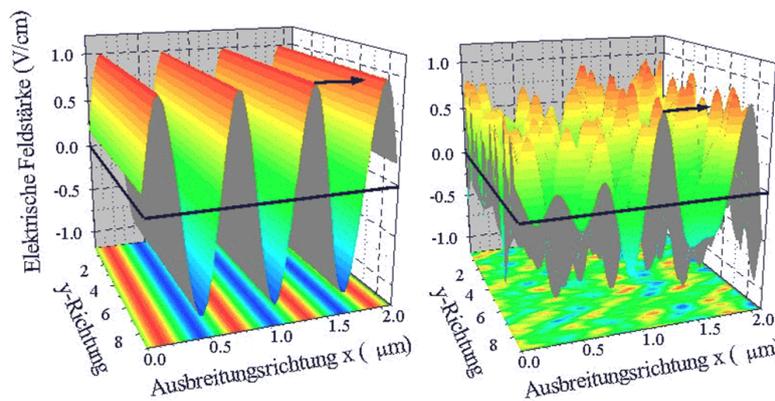


Abbildung 2.13: Links: Kohärentes, monochromatisches Licht eines Lasers.
Rechts: Inkohärentes polychromatisches Licht einer Glühbirne.²³

Abbildung (2.13) zeigt die angesprochene Situation zu einem festen Zeitpunkt für Laserlicht im Vergleich zum Licht einer gewöhnlichen Glühbirne. Es lassen sich zwei

²¹Siehe hierzu [DMW06], S. 382f.

²²Siehe [LIT05], S.245.

²³Angepasste Grafik. Im Original von [HZB11].

auffällige Unterschiede feststellen. Erstens zeigt der linke Bildteil Peaks gleicher Amplitude, also eine monochromatische EM-Welle, wohingegen bei der Glühbirne Maxima verschiedener Höhen auszumachen sind. Damit besteht ihr Licht aus einem breiten Frequenzspektrum. Zweitens ist die Phasendifferenz des Feldes bezüglich der Raumkomponente y im Licht der Glühbirne variabel, wohingegen das Laserlicht Kohärenz zeigt. Durch diese Eigenschaften dient uns Laserlicht auch als praktisches Vergleichsmittel zur Verifikation der visuellen Ausgabe des Programms in Kapitel (4).

Nachdem wir nun gesehen haben, dass es bei Überlagerung von Wellen zu interessanten und durchaus nicht direkt ersichtlichen Phänomenen kommen kann, wollen wir im Folgenden den Zusammenhang elektromagnetischer Strahlung mit physikalischen Stoffen im Kontext ihrer Atommodelle betrachten.

2.3 Atome und erzwungene Oszillation

Bisher sind wir immer von einer gegebenen Welle ausgegangen, deren Erzeuger wir zwar mathematisch beschreiben konnten, den wir aber nicht genauer kannten. Insbesondere ist noch nicht angesprochen worden, wie die Erregung zu Stande kommt. Es soll im Weiteren um elektromagnetische Strahlung gehen, wie sie von angeregten Atomen ausgesandt wird. Hierzu eruieren wir, was bei Bestrahlung atomarer Gitter geschieht.

2.3.1 Gitter und Kristalle

Besonders interessant sind Interferenzphänomene, die durch Anregung bestimmter Atomanordnungen entstehen. Wir wollen deshalb kurz über Kristalle sprechen.²⁴

Kristalle sind Körper, deren Atome eine Fernordnung besitzen, also regelmäßig sich periodisch wiederholende, gleichbleibende Struktureinheiten vorweisen. Diese Struktureinheiten nennt man Translationszellen. Ein Kristall lässt sich demgemäß, wie Schema (2.14) illustriert, immer aus Translationszelle und Basis durch iterierte Translation aufbauen.

Die Theorie wie auch die mathematische Analyse spezifischer kristalliner Strukturen ist weitreichend und kann beispielsweise mit [CBG08] begonnen werden. Wir wollen dies hier jedoch nicht weiter ausführen, sondern ebenfalls bündig über **Quasikristalle** sprechen.

Von einem Quasikristall spricht man im Kontext global aperiodischer Strukturen, die lokal regelmäßige Formen aufweisen; sie besitzen also keine translatorische Fernordnung. Insbesondere erwähnenswert dabei ist, dass im Gegensatz zu einem Kristall, in welchem nur 1-, 2-, 3-, 4- und 6-zählige Rotationssymmetrien möglich sind, es

²⁴Im Folgenden vgl. [KBB98], S.16ff.

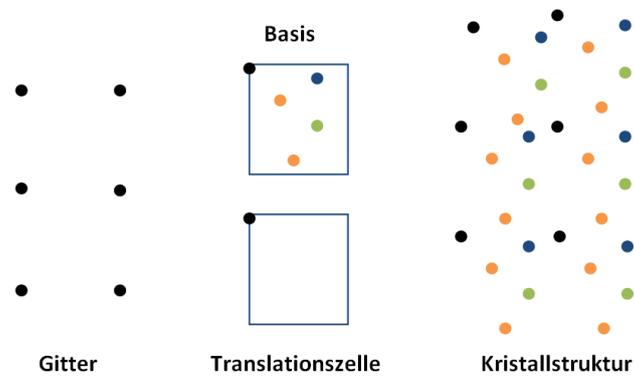


Abbildung 2.14: Elementare Einheiten eines zweidimensionalen Kristalls

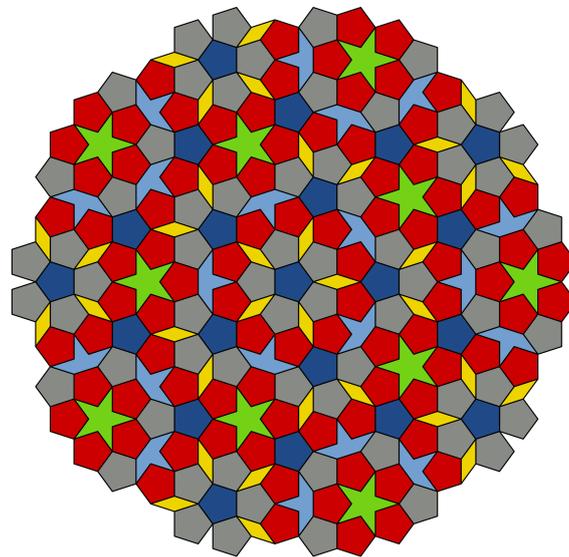


Abbildung 2.15: Zweidimensionaler Quasikristall

im Quasikristall auch zu 5-zähliger Symmetrie kommen kann, wie Abbildung (2.15) zeigt.²⁵

Dies hat spezielle Auswirkungen auch auf die Beugungsmuster, die durch Anregung von Atomen in derartigen Strukturen entstehen, weshalb wir uns im nächsten Schritt mit den durch Energieübertrag erzwungenen Oszillationen jener Atome beschäftigen werden.

2.3.2 Bragg-Reflexion

Kristalle erzeugen bei der Bestrahlung mit Röntgenstrahlung elektromagnetische Wellen, welche sich auf einem Schirm messbar überlagern.

Dieser Abschnitt soll zum einen den realen Bezug eines Programms zur Darstellung von Interferenzphänomenen darstellen und zum andern die Grundlage für die nachgehende Modellierung von atomaren Kugelwellen liefern. Dazu sehen wir uns zuerst Grafik (2.16) an.

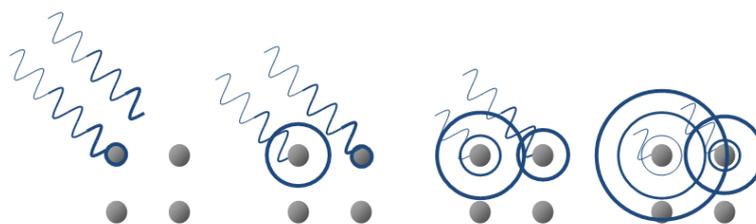


Abbildung 2.16: Erzwungene Oszillation von Atomen durch EM-Wellen

Einfallende elektromagnetische Strahlung im Röntgenspektrum trifft auf einen Kristall. Ein Großteil der Strahlung durchdringt den Kristall ungehindert, jedoch reflektiert ein Teil der einfallenden Strahlung an verschiedenen Ebenen im Kristall. Man nennt dies **Bragg-Reflexion**. Interferenzmuster der ausgehenden Wellen lassen sich in der Praxis mit Hilfe eines Detektors oder einer Fotoplatte messen und darstellen. Dieser Prozess geschieht dadurch, dass im elektromagnetischen Feld der einfallenden Strahlung Elektronen der Atome zu erzwungenen Oszillationen angeregt werden und selbst elektromagnetische Kugelwellen gleicher Wellenlänge (also ebenfalls Röntgenstrahlung) emittieren. Aufgrund der Skalenunterschiede von Wellenlänge und Gitterabstand auf der einen Seite und Atomradius andererseits summieren sich die Elektronenwellen näherungsweise zu Wellen der zugehörigen Atome auf. Sie können also als idealisierte Kugelwellen wie in Abschnitt (2.1.4) angesehen werden. Ebenso können Interferenzphänomene im Fernfeld unter diesen Modellannahmen postuliert werden. Genau dies machen wir uns zu Nutze und berechnen mit dem genannten Modell derartige Diffraktionserscheinungen auf der GPU.

²⁵Vgl. hierfür mit [SEN95], S.59ff.

Hier wollen wir zunächst den Gedanken noch weiter führen und anhand von Illustration (2.17) sehen, unter welchem Winkel φ Maxima zu erkennen sein werden.²⁶

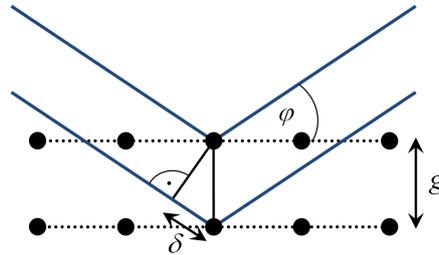


Abbildung 2.17: Schema zur Bragg-Reflexion am Kristallgitter

Der Abbildung entnehmen wir, dass gilt

$$\delta = g \sin(\varphi). \quad (2.20)$$

Für den Gangunterschied von Maxima gilt eine zu Kapitel (2.2.2) analoge Argumentation. Damit folgt

$$\begin{aligned} 2\delta_{max} &= n\lambda \\ n &\in \mathbb{N}_0. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Also ist

$$\varphi_{max} = \arcsin\left(\frac{n\lambda}{2g}\right). \quad (2.22)$$

Ist die Bragg-Gleichung (2.22) für eine Schar paralleler Gitterebenen erfüllt, kommt es zu konstruktiver Interferenz unter dem Winkel φ_{max} .

Im Folgenden werden wir die erarbeiteten Gesetzmäßigkeiten und Überlegungen auf eine allgemeine Situation anwenden und daraus einen Code entwickeln, der es ermöglicht, Interferenzphänomene möglichst zeiteffektiv, variabel und benutzerfreundlich visualisieren zu können.

²⁶Siehe auch [DAM05], S.14f.

3 Modellierung

*La natura è scritta in lingua matematica,
e i caratteri son triangoli, cerchi,
e altre figure geometriche.
(Galileo Galilei)*

Ausgehend von den im vorigen Kapitel angesprochenen physikalischen Gesetzmäßigkeiten und deren mathematischer Beschreibungen soll nun ein möglichst realitätsnahes Modell für die allgemeine Bestimmung von Superposition bei Kugelwellen im Raum erstellt werden. Wir gehen dabei pragmatisch bezüglich anstehenden Rechenaufwands vor.

3.1 Räumliche Konstellation

Zunächst werfen wir einen Blick auf die Anordnung der zu betrachtenden Komponenten.

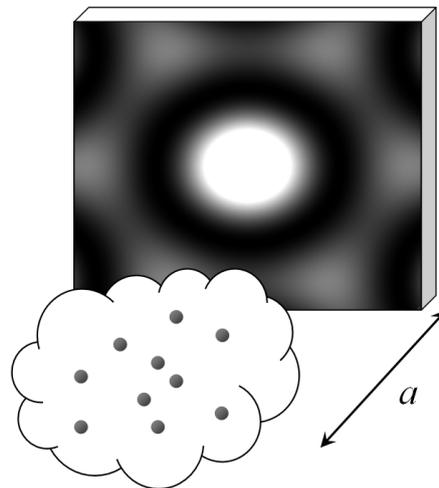


Abbildung 3.1: Punktwolke und Schirm mit Interferenzerscheinung

In einem bestimmten Bereich sollen angeregte Atome als quasi-punktförmige Quellen für wellenlängengleiche Kugelwellen identischer Amplitude dienen. Deren Diffraktionserscheinungen respektive die zeitlich gemittelte Intensität der superponierten

Welle wird dann in bestimmten Punkten auf einem weit von der Atomwolke entfernten Schirm kalkuliert, wie Abbildung (3.1) darstellt.

Zur Visualisierung der Beugungsmuster auf dem Schirm identifizieren wir Intensitätswerte zwischen 0 und 1 mit einer linear von schwarz bis weiß verlaufenden Graustufenskala; größere Werte wollen wir ebenfalls weiß darstellen. Hierbei verwenden wir einen Schirm in einer gewissen Auflösung. Da der Monitor eine Visualisierung nicht beliebig fein darstellen kann, sondern minimal einem Pixel eine Farbe zuzuordnen vermag, bestimmt diese Auflösung, in welchen und in wie vielen Schirmpunkten konkrete Intensitätsberechnungen getätigt werden müssen. Es reicht damit also aus, eine Möglichkeit zu finden, die Intensität pro Pixel zu bestimmen, um dies für alle zu tönenden Bildschirmpunkte durchführen zu können.

Nun ist die Überlegung, hierfür die Intensität in einem allgemeinen Schirmpunkt P in Abhängigkeit von Wellenlänge, Position und Wellenamplitude der Sender darzustellen. Betrachten wir zunächst den Querschnitt in Illustration (3.2), der eine Quelle Q und den Punkt P enthält mit $r = \|P - A\|_2$.

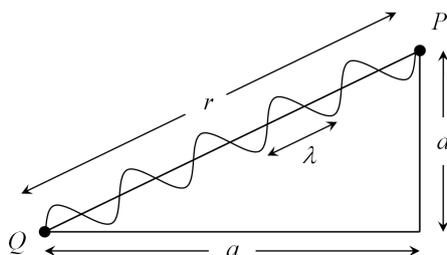


Abbildung 3.2: Querschnitt mit Quelle Q und Schirmpunkt P

Die Wellenfunktion des E-Felds entlang des Strahls lässt sich damit erneut wie in (2.12) durch

$$E(r, t) = E_0 \sin(kr + \omega t) \quad (3.1)$$

ausdrücken.

3.1.1 Zeigerdarstellung

Den anschließenden Überlegungen soll eine geometrische Anschauung zugrunde gelegt werden, die uns später helfen wird, die Intensitäten elegant auszuwerten. Wir benutzen dafür die Zeigerdarstellung aus Abschnitt (2.1.1).

Halten wir zunächst einen Schirmpunkt fest (d.h. $r = \text{const}$) und beobachten dort die Veränderung des E-Feldes ausgehend von einer Quelle als den Imaginärteil eines **rotierenden Zeigers** um den Ursprung der komplexen Zahlenebene wie in Grafik (3.3).

Die Zeigerlänge entspricht hierbei der Schwingungsamplitude von E .

Nun verwenden wir die erste Vereinfachung aus (2.1.4). Zur Erinnerung:

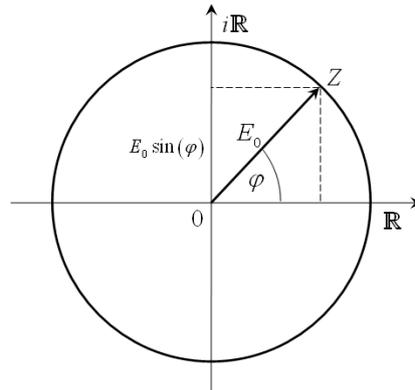


Abbildung 3.3: Zeitliche Veränderung des E-Feldes in einem Schirmpunkt

- Nahe beieinanderliegende Punktquellen erzeugen im Fernfeld parallele Wellenfronten.

Das heißt, dass die E-Feld-Vektoren zweier Sender unter Fraunhofer-Näherung parallel zueinander stehen, weshalb man bei konstanter Phasenbeziehung der Wellen derartige Zeiger Z_1 und Z_2 vektoriell addieren kann, um die resultierende Auslenkung der superponierten Welle mittels Z_{res} darstellen zu können.

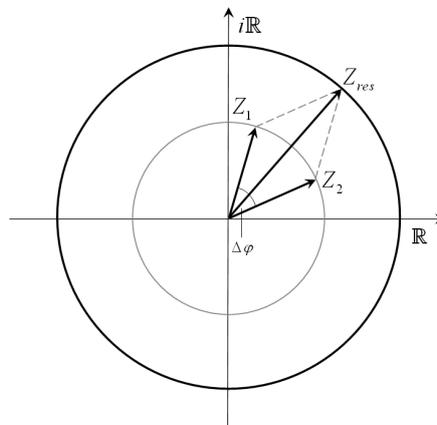


Abbildung 3.4: Zeiger des überlagerten E-Feldes durch Zeigeraddition

Wir erhalten erneut eine Sinusschwingung gleicher Frequenz aber unterschiedlicher Amplitude, die sich durch

$$E_{res} = \text{Im}(Z_{res}) \tag{3.2}$$

$$= \text{Im}(E_0 e^{i\varphi_1} + E_0 e^{i\varphi_2}) \tag{3.3}$$

beschreiben lässt.

Für beliebige n Quellen erhalten wir also

$$E_{res} = \text{Im} \left(\sum_{l=1}^n E_0 e^{i\varphi_l} \right) \quad (3.4)$$

$$= \text{Im} \left(E_0 \sum_{l=1}^n e^{i\varphi_l} \right), \quad (3.5)$$

wobei uns das Ausklammern von E_0 einen FLOP pro Quelle für jeden Pixel spart - also bei sehr großen Bildern und/oder vielen Quellen Performance liefert.

3.1.2 Vom Zeiger zur Intensität

Aus Gleichung (2.7) ist bekannt, dass die quadrierte Amplitude E_0^2 einer sinusförmigen Schwingung proportional zur mittleren Intensität $\langle I \rangle_t$ ist. Wir wählen zur qualitativen Betrachtung den Proportionalitätsfaktor $\alpha = 1$. Wenn wir also Bilder erzeugen wollen, so müssen wir E_0 betrachten. Einerseits können wir nun zwar die Amplitude der überlagerten Welle berechnen, andererseits stehen wir noch vor dem Problem, dass die zeitlich und räumlich gemittelte Intensität $\langle I \rangle_{t,x}$ damit umso größer wird, je mehr Atome im Spiel sind. Das ist für die Identifikation von Intensitätswerten mit dem Intervall $[0, 1]$ problematisch: Schirmpunkte würden bei zunehmender Atomanzahl immer häufiger Intensitäten > 1 liefern und damit immer häufiger dem Farbwert „weiß“ zugeordnet. Diese Crux werden wir nun durch geschickte Normierung lösen.

Die Idee ist, in irgendeiner Form mit der Anzahl der Atome zu normieren. Dazu überlegen wir, was die maximale räumlich und zeitlich gemittelte Intensität für mehrere Kugelwellen ist. Es kommt genau dann in jedem Schirmpunkt zur maximalen, nämlich parallelen Zeigeraddition, wenn alle Sender im gleichen Punkt liegen. Dann ist

$$\langle I(n) \rangle_{t,x} = \left(\text{Im} \left(E_0 \sum_{l=1}^n e^{i\varphi_l} \right) \right)^2 \quad (3.6)$$

$$= \left(E_0 \sum_{l=1}^n e^{i\varphi} \right)^2 \quad (3.7)$$

$$= n^2 E_0^2, \quad (3.8)$$

da der resultierende Zeiger Z_{res} gemäß Abbildung (3.5) gerade die Länge nE_0 besitzt. Insbesondere ist

$$\langle I(1) \rangle_{t,x} = E_0^2. \quad (3.9)$$

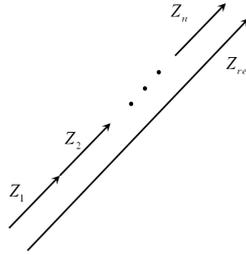


Abbildung 3.5: Maximale Zeigeraddition für einen Schirmpunkt

Wir normieren deshalb mit dem Faktor f mit

$$f := \frac{1}{n^2}. \quad (3.10)$$

Damit ist auf der einen Seite bei einer Amplitude von $E_0 = 1$ maximal die Farbe weiß erreichbar, auf der anderen Seite bleibt der Einfluss von E_0 auf das Gesamtergebnis erhalten.

3.1.3 Intensität und Schirmabstand

Die zweite Annahme zur Fernfeldapproximation lautet

- Die zeitlich gemittelte Intensität auf einem Schirm parallel zur Wellenfront im Fernfeld ist konstant.

Damit gilt für einen im Verhältnis zum Schirmabstand a kleinen Bereich

$$\langle I \rangle_t \propto \frac{1}{a^2}.$$

Das wollen wir bewusst **nicht** mit in unsere Berechnungen einbringen, da wir an qualitativen Ergebnissen interessiert sind und dieser Sachverhalt lediglich das Beugungsmuster bei Vergrößerung der Entfernung abdunkeln beziehungsweise bei Verkleinerung aufhellen würde. Dennoch sind wir uns im Weiteren dieses Sachverhalts bewusst.

3.1.4 Rotation der Atomwolke

Wir wollen später ebenfalls Effekt-Visualisierungen ermöglichen, die bei Rotation der Atomwolke um die Achsen X , Y und Z aus Bild (3.6) entstehen.

Mit Hilfe von Drehmatrizen R_X , R_Y und R_Z lässt sich ein beliebiger Punkt mit Koordinatenvektor $r = (x, y, z)^T$ durch Matrix-Vektor-Multiplikation um die Koor-

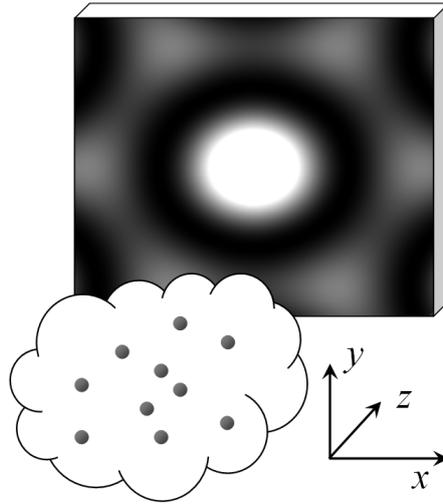


Abbildung 3.6: Rotationsachsen für Drehung der Atome

dinatenachsen X , Y beziehungsweise Z drehen. Dabei sind

$$R_X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\alpha_X) & -\sin(\alpha_X) \\ 0 & \sin(\alpha_X) & \cos(\alpha_X) \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

$$R_Y = \begin{pmatrix} \cos(\alpha_Y) & 0 & \sin(\alpha_Y) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\alpha_Y) & 0 & \cos(\alpha_Y) \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

$$R_Z = \begin{pmatrix} \cos(\alpha_Z) & -\sin(\alpha_Z) & 0 \\ \sin(\alpha_Z) & \cos(\alpha_Z) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

die Rotationsmatrizen. Nun können wir vor der Intensitätsberechnung die neuen Koordinaten r_{new} eines gedrehten Punktes gemäß

$$r_{new} = R_Z R_Y R_X r_{old} = R_{XYZ} r_{old} \quad (3.14)$$

bestimmen. Durch Zusammenfassen der Matrizen R_X , R_Y und R_Z in R_{XYZ} spart man sich erneut Rechenzeit, indem man pro Atom auf zwei performancelastige Matrix-Vektor-Multiplikationen verzichten kann.

3.2 Algorithmus zur Intensitätsberechnung

Zusammenfassend ergibt sich aus den Vorüberlegungen das Schema aus Grafik (3.7).

Nach erfolgter Rotation aller Atome kann man durch zentrische Streckung und Nor-

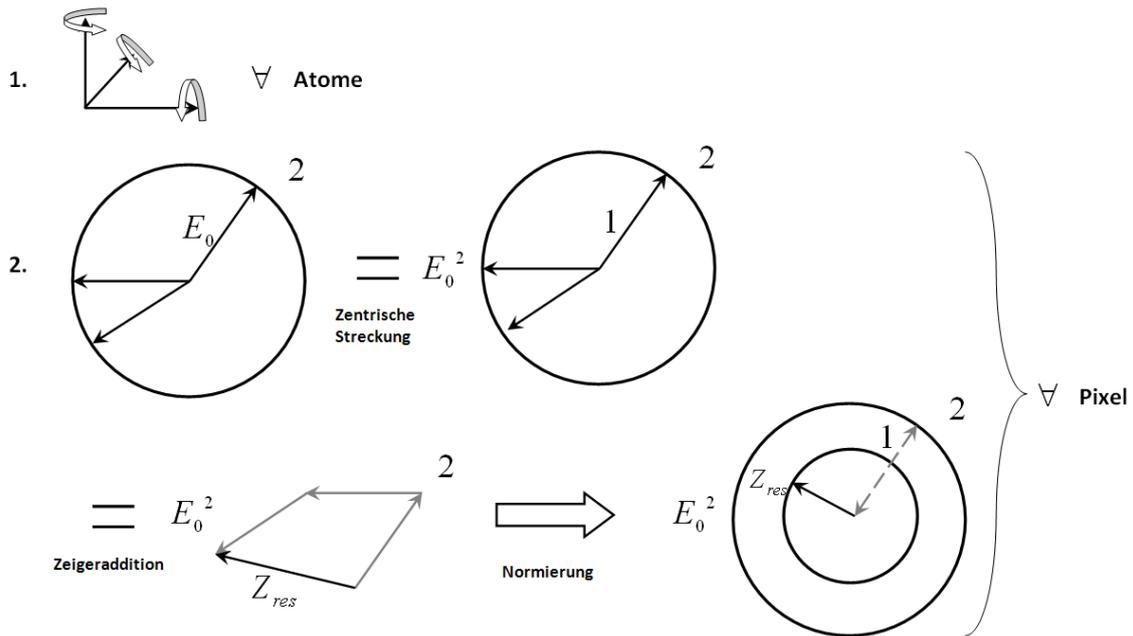


Abbildung 3.7: Ablaufdiagramm zur Funktionsweise des Algorithmus

mierung des Zeigerdiagramms den Intensitätswert durch Zeigeraddition wie illustriert errechnen.

Die Schritte zur Implementierung im Fall von n Atomen A_l sind also im Einzelnen unter Verwendung von Gleichungen (3.14), (3.9), (3.10) und (3.4):

1. Prüfe ob $\alpha_X = \alpha_Y = \alpha_Z = 0$
 - a) Falls ja \rightarrow Springe zu 2.
 - b) Falls nein \rightarrow Für $k = 1 \dots n$:
 - i. $r_{k,new} = R_{XYZ} r_{k,old}$
2. $n_{quad} := n^2$
3. Für Pixel P führe aus:
 - a) Für $k = 1 \dots n$:
 - i. $r_k = \|P - A_k\|_2$
 - b) $\langle I \rangle_t(P) = \langle I(1) \rangle_{t,x} n_{quad}^{-1} (\sum_{k=1}^n \exp(i\omega r_k))^2$
 - c) Färbe Pixel P mit zugehöriger Farbe

Damit haben wir einen allgemeinen Algorithmus an der Hand, den wir im folgenden Kapitel in JAVA und GLSL¹ implementieren wollen.

¹GLSL bedeutet „OpenGL Shading Language“ und ist eine Programmiersprache, die es ermöglicht, auf der GPU eigene Programme (so genannte Shader) auszuführen.

4 Implementierung

*Alles Wirkliche ist nur
Realisierung der Idee.
(Georg Wilhelm Friedrich Hegel)*

Es gilt nun den in Kapitel (3) erarbeiteten Algorithmus in einem Programm zu implementieren. Dabei wollen wir einerseits flexibel mit dem Anwender der Software interagieren können und andererseits möglichst zeit- und rechenleistungseffizient auftreten. Dies bewerkstelligen wir grob gesehen durch einen Prozess mit drei Komponenten wie in Illustration (4.1) skizziert.

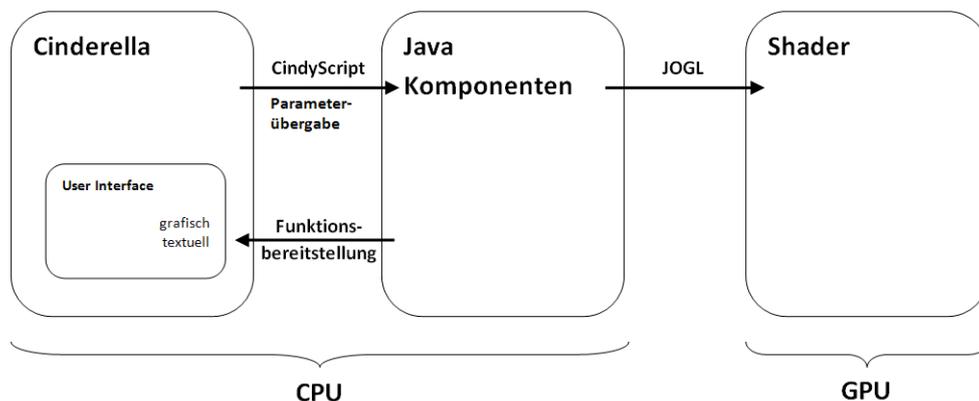


Abbildung 4.1: Programmschema mit Zuordnung

Auf der Ebene der Software Cinderella wird dabei dem Anwender ein grafisches und textuelles Interface zur Verfügung gestellt, welches von einer Java Umgebung bereitgestellte Funktionen zur Übergabe von Parametern an diese nutzt. Die Java Komponente ihrerseits übergibt vorgefertigte Parameter an ein Shadermodul, welches das Diffraktionsmuster errechnet. Der Performancegewinn zeichnet sich wie angedeutet dadurch aus, dass die Bildberechnung auf der dafür optimierten GPU geschieht, während sich alles Übrige auf der CPU abspielt.

Bevor wir genauer auf den Code und dessen Möglichkeiten eingehen wollen, stellen wir die einzelnen Komponenten vor.

4.1 Relevante Komponenten

Die Vermittlungseinheit zwischen Cinderella und dem Shader ist in Java programmiert, um eine plattformunabhängige Nutzung zu ermöglichen. Von ihr aus kann

man jedoch nicht ohne weiteres Shadercode an die GPU übermitteln, weshalb wir einige weitere wichtige Teile kurz vorstellen wollen.

4.1.1 OpenGL, GLSL und JOGL

Die Open Graphics Library, kurz **OpenGL**¹, stellt ein plattform- und programmiersprachenunabhängiges Software Interface zur Graphischen Hardware dar.² Sie stellt standardmäßig etwa 250 Befehle zur Verfügung mit deren Hilfe die GPU angesteuert werden kann. Mit OpenGL ist es möglich, komplexe zwei- und dreidimensionale Szenen in Echtzeit darzustellen. Wir werden damit die Echtzeitsimulation des Beugungsmusters bei Parametervariation realisieren.

Seit Version 2.0 stellt OpenGL eine eigene Programmiersprache zur Verfügung: Die OpenGL Shading Language, kurz **GLSL**.³ GLSL ist eine C-ähnliche Sprache mit deren Hilfe eigene Programme, sogenannte Shader, auf der GPU ausgeführt werden können.⁴ Sie ist abgestimmt auf Grafikberechnung und hat deshalb direkt bestimmte Vektoren und Matrizen als Datentypen implementiert.

Außerdem werden wir uns des plattformunabhängigen Frameworks **JOGL** (**J**ava **B**indings for **O**pen**G**L) bedienen, um OpenGL unter Java nutzen zu können.⁵

4.1.2 Cinderella.2 und CindyScript

Cinderella.2 ist die zweite Version einer dynamischen Geometrie-Software, die auf Java basiert. Das Programm erlaubt in intuitiver Weise das schnelle Erstellen und interaktive Agieren mit geometrischen Konstruktionen.⁶

Durch die integrierte funktionale Programmiersprache **CindyScript** ist es möglich, Aktionen aus Cinderella heraus mit Skriptzeilen zu verknüpfen und so bei bestimmten Vorgängen den Code auszuführen. Mit Hilfe einer Plugin-Extension lassen sich auf Java basierende Add-Ons in CindyScript initialisieren. Hierdurch kann man CindyScript neue, in Java geschriebene Funktionen zur Verfügung stellen. Diese Schnittstelle dient uns zur Realisierung der Kommunikation zwischen Cinderella und dem Java-Modul, das den Shader anpricht.

4.2 Code und Funktion

Im Folgenden werden wir in schematischer oder stichpunktartiger Weise die einzelnen Programmteile und ihr Zusammenwirken erklären. Jede Funktion des Codes

¹Die Webpräsenz von OpenGL findet sich unter: <http://www.opengl.org/>

²Vgl. [GSO99], S.4f.

³Die aktuelle Dokumentation zur neuesten GLSL Version findet sich unter:
<http://www.opengl.org/documentation/glsl/>

⁴Siehe [OGL06], S.2ff.

⁵Weitere Informationen zum Open-Source Projekt JOGL finden sich unter: <http://jogamp.org/>

⁶Die Web-Präsenz von Cinderella findet man unter: <http://www.cinderella.de/>

einzelnen aufzulisten und zu erklären, würde bei Weitem den Rahmen sprengen. Ein Dateiregister mit den jeweils wichtigen Aufgaben findet man im Anhang (A). Für den interessierten Leser gibt es den vollständigen und kommentierten Code zusammen mit den relevanten Libraries und übrigen Dateien auf der beigefügten DVD.

4.2.1 Berechnungsablauf

Wir implementieren jetzt den Algorithmus zur Intensitätsberechnung aus Abschnitt (3.2). Dabei gehen wir nach Grafik (4.2) vor.

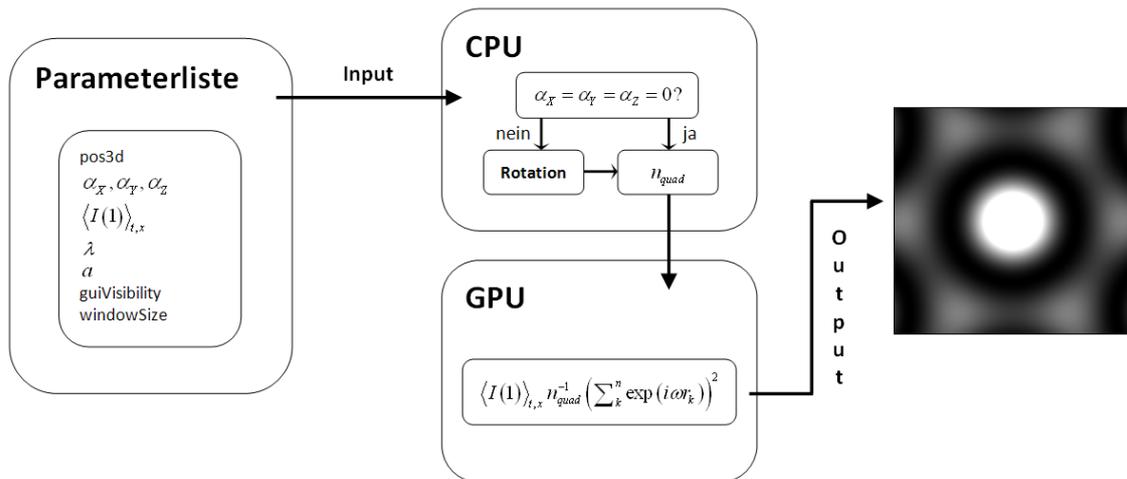


Abbildung 4.2: Programmablauf bei Aufruf

Um den Shader so schlank wie möglich zu halten, damit dieser bei der Pixelfärbung optimiert vorgehen kann und nicht zu viel übergeben werden muss, setzen wir den Algorithmus in zwei Teilen durch. Die Punkte 1. und 2. werden durch die CPU berechnet und Punkt 3. wird auf der GPU realisiert.

Wir setzen hierfür den Schirm auf $(x, y, abst)^T$ mit $x, y \in [-1, 1]$, wobei $abst$ einer der realisierten Parameter ist, und übersetzen dann den Algorithmus eins zu eins in Java beziehungsweise GLSL. Die einzige Ausnahme dabei macht eine Identifikation der komplexen Ebene \mathbb{C} mit dem euklidischen Raum \mathbb{R}^2 , da man in GLSL nicht mit komplexen Zahlen rechnen kann. Mittels der Eulerschen Identität $e^{i\varphi} = \cos(\varphi) + i\sin(\varphi)$ lässt sich aber auch dies direkt einbinden.

4.2.2 Graphisches Output

Schließlich sieht die fertige Programmoberfläche aus, wie es Abbildung (4.3) zeigt. Die beiden Komponenten für das Beugungsmuster und das GUI sind Instanzen der Klassen DiffractionScreen.java beziehungsweise Gui.java. Das angezeigte Bild wurde dabei vom Shader erzeugt. Die Klasse DiffractionScreen.java verwaltet die gesamten physikalisch-mathematischen Parameter zur Berechnung des Interferenzmusters und

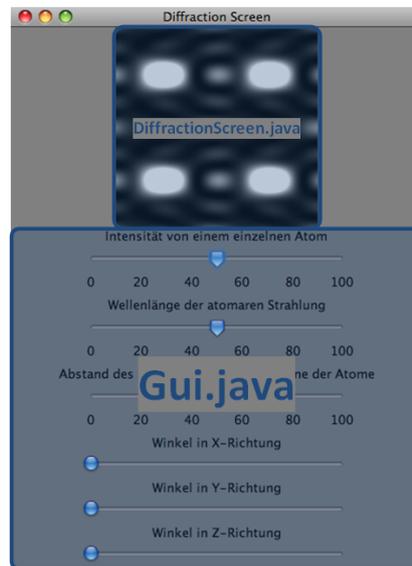


Abbildung 4.3: Vollständige Programmoberfläche aus Diffraktionsmuster und GUI

kann mittels der beiden essentiellen rückgabefreien Funktionen `resetUniforms()` und `repaint()` dem Shader alle relevanten Parameter übergeben beziehungsweise das Bild neu zeichnen. Die GPU ist dabei optimiert, Aufgaben und Probleme zu lösen, die pro Pixel ausgeführt werden müssen.⁷ Solche Vorgänge weisen viele Gemeinsamkeiten auf und sind immer in hohem Maße parallelisierbar, was man sich zu Nutze macht.⁸ Wir wollen hier aber nicht detaillierter über die Inhalte der verschiedenen Klassen sprechen und verweisen den Interessierten wieder auf den Code auf der beigelegten DVD beziehungsweise den Glossar (A).

4.2.3 CindyScript Plugin

Die Software kann CindyScript als Plugin mit dem Namen „diffrac“ zur Verfügung gestellt werden. Dazu geht man wie folgt vor:

- `diffrac.jar` mit Hilfe der `build.xml` (target „jar“) erstellen. Eine vorkompilierte Version findet sich bereits auf der DVD im Anhang.
- Im Cinderella Package den Ordner „diffrac“ anlegen unter `/Contents/Resources/app/Plugins/`
- Kopiere von der DVD folgende Dateien in `/Contents/Resources/app/Plugins/diffrac/`:

⁷Vgl. [MAP08], S.121f.

⁸Siehe [CDT04], S.8.

- diffrac.jar
- gluegen-rt.jar
- jogl.jar
- libgluegen-rt.jnilib
- libjogl_awt.jnilib
- libjogl_cg.jnilib
- libjogl.jnilib

Nun kann man in CindyScript (am Besten unter Initialisierung) mit `use(„diffrac“);` das Plugin laden.

Nach erfolgtem Laden stehen nun unter CindyScript folgende Funktionen zur Verfügung:

- `DifPts(ArrayList<Double> coords)`
entnimmt aus $coords = [x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n]$ die Koordinaten für n angeregte Atome mit Koordinatenvektoren $r_i = (x_i, y_i, z_i)^T$, $i = 1 \dots n$.
- `DifSetInt(float intens)`
setzt die Intensität der Strahlung eines einzelnen Atoms auf $intens$.
- `DifSetLambda(float lambda)`
legt die Wellenlänge der atomaren Strahlung auf $lambda$ fest.
- `DifSetAbst(float abst)`
variiert den Abstand des Schirms von der Ebene $z = 0$ auf $abst$.
- `DifSetAlphaI(float alphaI)` mit $I \in \{X, Y, Z\}$
Rotiert die Atomwolke im Winkel $alphaI$ um die Achse I .
- `DifSetWindowSize(int width, int height)`
erzeugt ein Beugungsmuster der Auflösung $width \times height$.
- `DifSetGuiVisibility(boolean guivis)`
schaltet das interne GUI an ($guivis = true$) bzw. aus ($guivis = false$).

Ein Beispielprogramm sieht also in etwa so aus:
In „Initialisierung“:

4 Implementierung

```
1 use(" 'diffraction' "); //Benutze diffraction Plugin
3 DifSetWindowSize(500, 500); //Legt Fenstergröße auf 500x500 fest
  DifSetInt(2); //Setzt die Intensität auf 2
5 DifSetLambda(0.0075); //Wellenlänge auf 0.0075
7 pts() := ( //Speichert Punkte in 3er Tupeln in Liste
  lst = [];
9   forall(allpoints(), p,
  lst = lst ++ [p.x, p.y, 0]
11 );
  lst;
13 )
```

In „Zeichnen“:

```
1 difPts(pts()); //Übergibt aktuelle Punkte an Shader
```

Damit erhält man für die angegebene Punktekonfiguration das Ergebnis aus Abbildung (4.4).

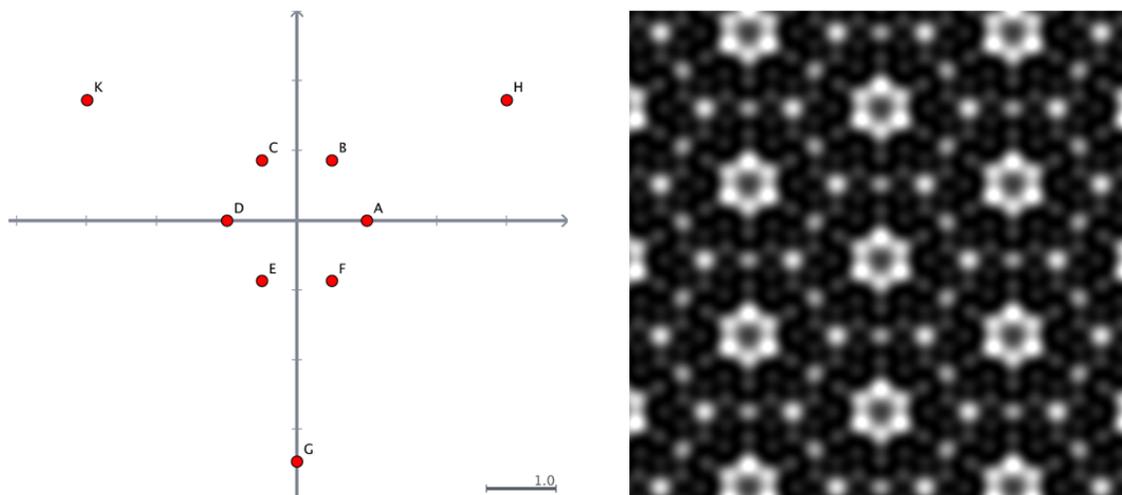


Abbildung 4.4: Punktekonfiguration und zugehöriges Diffraktionsmuster

Das angegeben Programm findet sich als Beispiel-cdy auf der DVD im Ordner /Beispiel - cdy/.

5 Output und Analyse

Les effets produits peuvent être plus symétriques que les causes.
(Pierre Curie)

Nun, da die Software lauffähig ist und mit dem Benutzer interagieren kann, wollen wir den vorherigen Überlegungen einige Beispiele und Gedanken anschließen. Dazu benutzen wir den Shader zunächst einmal für die Berechnung diverser Beugungsphänomene. Anschließend wollen wir noch einige Worte zur Performance und numerischen Problemen verlieren.

5.1 Beispiele und Ergebnisse

Im Folgenden stellen wir einige Atomkonstellationen und ihre zugehörigen Interferenzgrafiken dar. Die grundlegende und weitreichende Interpretation von diesen soll dabei jedoch nicht im Fokus unsere Betrachtungen liegen - sie würde schlichtweg den Rahmen dieser Arbeit sprengen. Für den Einstieg in die geometrische Analyse nachstehender Grafiken im Kontext quasikristalliner Strukturen eignet sich beispielsweise [SEN95].

5.1.1 Biatomare Interferenz

Steigen wir dort ein, wo wir begonnen haben - bei der Doppellochanordnung. Setzen wir also zwei Punkte $A = (-1, 0, 0)^T$ und $B = (1, 0, 0)^T$. Wir erhalten für diese biatomare Anordnung genau wie zu Anfang errechnet die grafische Ausgabe (5.1) zur abgedruckten Intensitätsverteilung.

5.1.2 Quasikristalline Strukturen und Penrose-Parkettierung

Unter Penrose-Parkettierungen versteht man lückenlose aperiodische Kachelungen der euklidischen Ebene. Es gibt eine Reihe von Möglichkeiten, dies mit sehr wenigen Kacheln zu realisieren. Sie stehen in engem Zusammenhang mit Quasikristallen. Schneidet man eine quasikristalline Struktur im dreidimensionalen Raum entlang einer Ebene, so ergibt der Schnitt ein Penrosemuster. Das Titelbild der Arbeit ist aus einem solchen Muster errechnet, wengleich hier die Farbskala aus Betrachtungsgründen invertiert wurde. Die zugehörige Atomkonstellation ist in Grafik (5.2) zu sehen.

Man kann hier besonders gut die eingangs angesprochene fünfzählige Rotationssymmetrie erkennen.

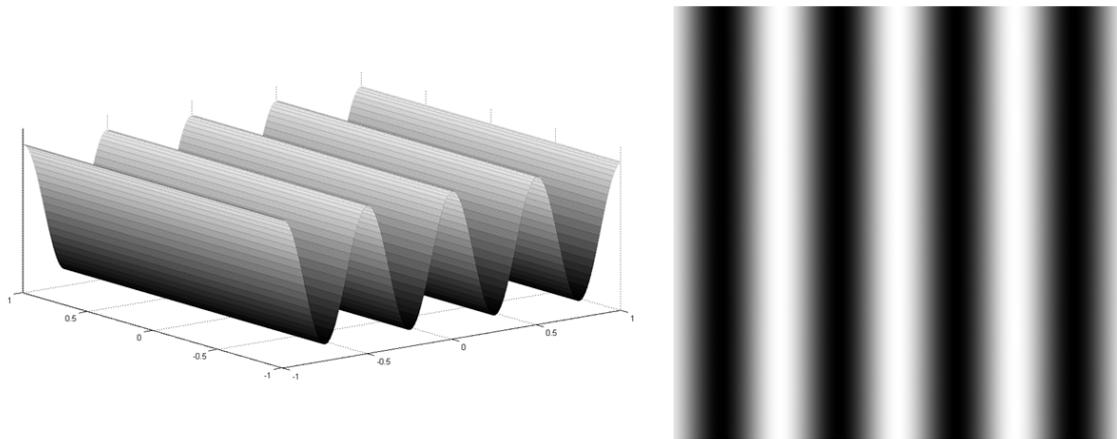


Abbildung 5.1: Intensitätsverteilung und Diffraktionsmuster analog zur Doppellochanordnung

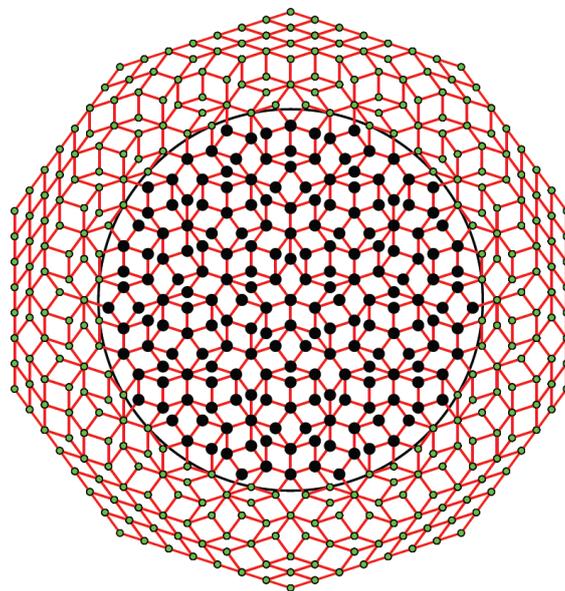


Abbildung 5.2: Penrosemuster, das dem Titelbild zu Grunde liegt

5.1.3 Laser und zweidimensionale Gitter

Nun wollen wir das theoretische kalkulierte Interferenzmuster noch mit realen Messdaten vergleichen. Dazu bedienen wir uns zweier Laser verschiedener Wellenlängen. In den Strahlenweg des roten und grünen Lasers halten wir eine mit einem Laserdrucker sehr eng bedruckte Folie des angegebenen Musters, wie in Skizze (5.3) dargestellt.

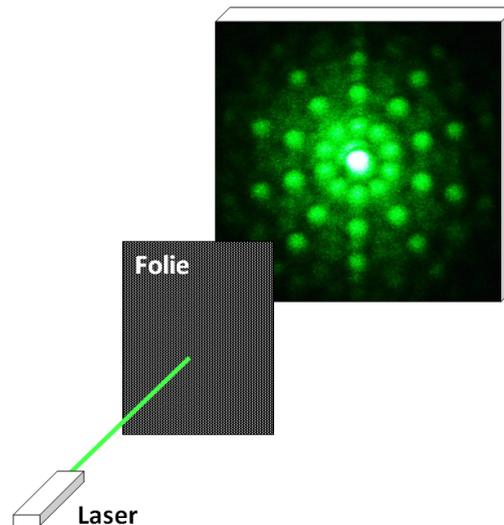


Abbildung 5.3: Anordnung beim Erzeugen eines Laser-Interferenzmusters

Die nicht bedruckten Teile der Folie fungieren nun näherungsweise als Erreger von Kugelwellen und ermöglichen so die Beobachtung eines Diffraktionsbildes auf einer entfernten Wand. Durch Folienbewegung gleichen wir dabei ungewollte Nebenmaxima aus.

In den Abbildungen (5.4) und (5.5) sehen wir die jeweiligen Gitter zusammen mit den Fotografien und errechneten Interferenzmustern.

Wir stellen fest, dass sich eine Übereinstimmung ergibt, wenn wir die Atomkoordinaten auf die Ecken des Druckmusters festlegen, wie es in Illustration (5.4) durch die grünen Punkte angedeutet ist.

5.2 Performance und numerische Probleme

5.2.1 Vergleich der Berechnung auf CPU und GPU

Wir wollen nun eine Berechnung des Beugungsmusters auf der CPU mit einer durch unser Programm durchgeführten Kalkulation vergleichen. Dazu stellen wir

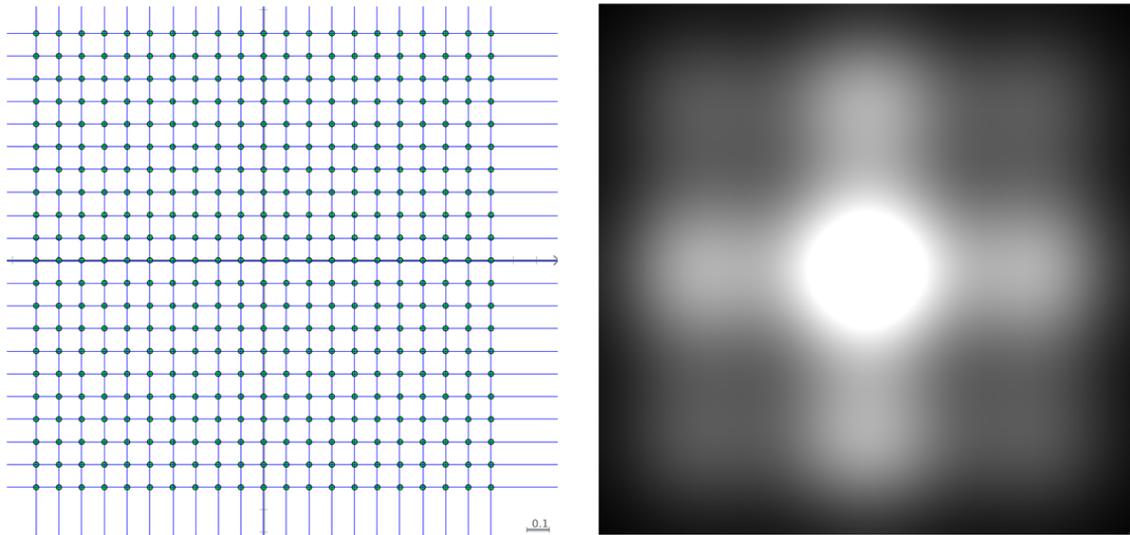


Abbildung 5.4: Atomanordnung in Gitterstruktur
und kalkulierte Intensitätsverteilung

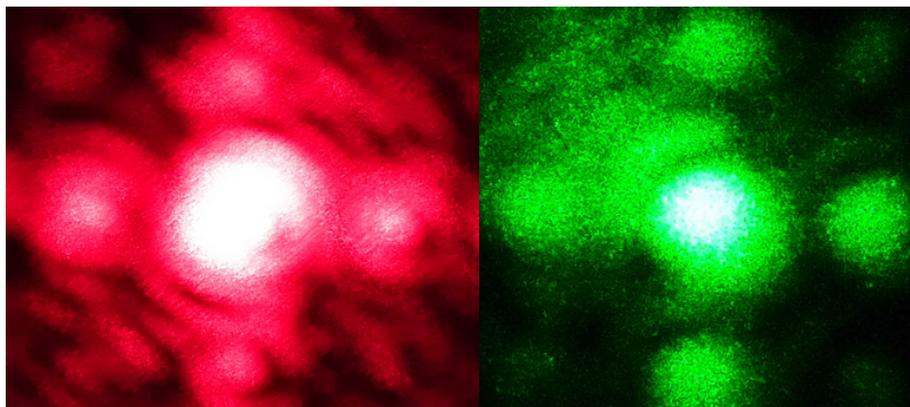


Abbildung 5.5: Reale Fotografien der Interferenz des Gitters
mit Lasern verschiedener Wellenlänge

die CindyScript-Funktion „colorplot“ der Plugin Funktion „DifPts“ für verschieden viele Atome gegenüber.

Wir werten die mittlere Bildfrequenz in Frames per Second (fps) in Bezug auf die Punktzahl für verschiedene Auflösungen aus und erhalten die Grafiken aus (5.6).¹

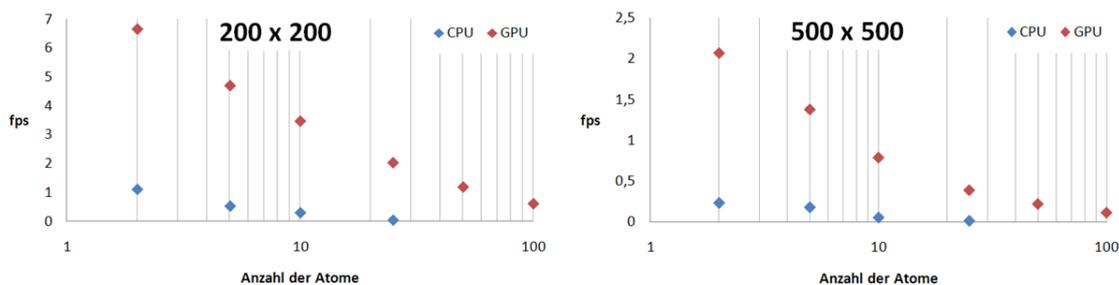


Abbildung 5.6: Performancevergleich der Bildermittlung auf CPU und GPU für Auflösungen von 200×200 und 500×500

Schon bei der geringen Auflösungen von 200×200 ist der Shader der CPU gestützten Berechnung deutlich überlegen und man stellt fest, dass sich bezüglich der logarithmisch aufgetragenen Atomanzahl auf der X-Achse gegenüber der Bildwiederholrate ein erkennbarer Zusammenhang ergibt. Aus Abbildung (5.6) ist direkt ersichtlich, dass eine größere Atomanzahl die CPU-gestützte Untersuchungen von Parametervariationen in Echtzeit praktisch unmöglich macht. Bei höheren Auflösungen tritt der Unterschied derart deutlich zu Tage, dass bei Beteiligung vieler Punkte eine alleinig auf dem Hauptprozessor kalkulierte Grafik anwendungsuntauglich wird.

5.2.2 Numerische Schwierigkeiten

Numerische Probleme konnten bisher bei der Intensitätsberechnung in Größenordnung der voreingestellten Parameter nicht festgestellt werden. Allerdings macht Punkt 3.a)i. des Algorithmus aus Abschnitt (3.2) bisweilen Schwierigkeiten. Für extrem große Schirmabstandswerte sind die r_k maschinengenauigkeitsbedingt gleich. Für $\lambda < d \ll abst$, wobei d der maximale Durchmesser der Atomwolke ist, folgt

¹Die Testmaschine hierfür war ein MacBook, 1.67 GHz PowerPC G4 mit MacOSx v.10.5.8 ausgestattet mit einer ATI Radeon 9600 XT mit OpenGL v.2.0 ATI-1.5.48.

damit:

$$\langle I(1) \rangle_{t,x} n_{quad}^{-1} \left(\sum_{k=1}^n \exp(i\omega r_k) \right)^2 \quad (5.1)$$

$$\approx \langle I(1) \rangle_{t,x} n_{quad}^{-1} \left(\sum_{k=1}^n \exp(i\omega r) \right)^2 \quad (5.2)$$

$$= \langle I(1) \rangle_{t,x} n^{-2} n^2 (e^{i\varphi})^2 \quad (5.3)$$

$$= \langle I(1) \rangle_{t,x}^2 \quad (5.4)$$

Dies hat zur Folge, dass dem gesamten Schirm nur ein Farbbereich zugeordnet wird und kein Interferenzbild mehr erkennbar ist. Wie löst man also dieses Problem?

Dem aufmerksamen Leser wird nicht entgangen sein, dass wir noch nicht alle Näherungsannahmen aus Abschnitt (2.1.4) mit eingebracht haben. Wir wenden uns dieser Approximationsannahme noch kurz zu:

- Parallele Strahlen zweier sehr nahe beieinanderliegender Sender sind im Fernfeld inzident. Ein Schirmpunkt wird dort im selben Winkel getroffen, den die Strahlen der Sender bei identischem Schirmabstand mit ihrer Verbindungsgerade einschließen.

Es sollte also möglich sein, dieses Problem zu umgehen, indem man nicht den gesamten Strahlenweg misst, sondern die Wegdifferenzen innerhalb der Atomwolke.

Eine Idee hierfür wäre, einem beliebigen Punkt Q mit Koordinaten in Atomnähe die Phase 0 (bezüglich eines Schirmpunktes P) zuzuordnen. Ausgehend von diesem könnte man dann für alle beteiligten Atome die Phasendifferenzen bezüglich einer schirmparallelen Ebene durch Q und bezüglich des Winkels, den diese „parallele Strahlen“ in Richtung P haben, messen. Da für die Zeigeraddition nur Phasenunterschiede relevant sind, kann Q wirklich beliebig gewählt werden, also beispielsweise als Baryzentrum der Atome. Richtig und effizient implementiert sollte dies das angesprochene numerische Problem umgehen und auch für extrem große Entfernungen sinnvolle Intensitätsverteilungen liefern.

6 Ausblick

*This is not the end.
It is not even the beginning of the end.
But it is, perhaps, the end of the beginning.
(Winston Churchill)*

Auf der Basis physikalischer Naturphänomene konnten wir ein theoretisches Modell entwickeln, welches wir insbesondere durch die Optimierung der GPU für parallelisierbare Probleme laufzeitoptimiert implementiert haben. Es ist mit der vorgestellten Software dank der Anbindung an Cinderella nun möglich, den Benutzer mit in das Szenario einzubinden und ihn aktiv und dynamisch in Echtzeit mit den Komponenten interagieren zu lassen. Dadurch haben wir eine Chance geschaffen, Interferenzphänomene insbesondere vor dem Hintergrund geometrischer Fragestellungen zu verstehen, indem durch simples Austesten diverser Eventualitäten direkte Ergebnisse zu Tage treten.

Es scheint damit plausibel, an dieser Stelle einen direkten Anknüpfungspunkt für das Studium komplexer ebener und räumlicher Vorgänge und Sachverhalte im Kontext von Diffraktionserscheinungen herzustellen. Eine Möglichkeit auf diese Arbeit aufzubauen ist damit sicherlich der Einsatz der Software zum Erstellen und Variieren von Atomkonstellationen. Hier stellen wohl gerade die Quasikristalle und Penrose-Parkettierungen ein interessantes Anwendungsgebiet dar, das mit Hilfe des Programms detailliert analysiert werden kann.

Auf der anderen Seite kann man wohl noch einiges am Code selbst entwickeln und fortführen. So könnte man gewiss die Ideen zur Lösung numerischer Schwierigkeiten aus Abschnitt (5.2.2) umsetzen oder ein Web-Applet zur Online-Nutzung des CindyScript-Plugins erstellen.

Gleichwohl stellen angesprochene physikalische Eigenschaften und Beobachtungen neue Herausforderungen dar und werfen ihrerseits weitere Fragen auf. Wie verhält sich mein Interferenzbild im Nahfeld unter Fresnel-Beugung? Worin besteht im konkreten Fall der Unterschied zum Fernfeldmuster? In welcher Größenordnungen brauchen mich Nahfeldeffekte nicht mehr zu interessieren?

Auch die Variabilität zuvor als konstant angenommener Parameter birgt neue Entwicklungsmöglichkeiten. So könnte man zum Beispiel detaillierter auf den Strahlenverlauf eingehen und Beugungseffekte am Übergang verschieden dichter Materialien analysieren. An dieser Stelle gibt es ebenfalls interessante Aspekte bezüglich der Interaktion mit dem User. Ein Pool optischer Instrumente wie Prismen, Filter, Linsen oder Blenden könnten beispielsweise bereitgestellt und aktiv vom Anwender im

Strahlenweg bewegt werden. An dieser Stelle gäbe es ebenfalls Anknüpfungspunkte zu eleganter Berechnung mit Mitteln der Projektiven Geometrie.

Darüber hinaus ließen sich die Überlegungen der Bachelorarbeit vielleicht auch als Fundament nutzen, um virtuell Hologramme zu errechnen oder ausgehend von Interferenzmustern auf denkbare Atomkonstellationen zu schließen.

Schlussendlich bleibt festzuhalten, dass das Spektrum an Verfahren zur Weiterentwicklung und Anwendung sehr breit ist und durch die relativ simple Bedienung via Cinderella dem Anwender auch ohne lange Einarbeitungszeit Resultate zur Verfügung gestellt werden können.

A Appendix

A.1 Dateiregister und Funktionsübersicht

ArbExtensionsShaderInterface.java	Bewerkstelligen u.a. Parameterübergabe an Shader.
OpenGLShaderInterface.java	
ShaderInterface.java	Können als „Black-Box“ betrachtet werden.
Build.xml	Buildfile für Ant. Stellt Targets zur Verfügung: Insbesondere „run“, „jar“. Ermöglicht das Erstellen einer Jar-Datei für Cinderella. Siehe auch: http://ant.apache.org/
DiffracPlugin.java	Sorgt für Plugin-Möglichkeit zu Cinderella. Stellt CindyScript bestimmte Funktionen zur Verfügung.
Diffraction.gsl	Shadercode in GLSL. Wird zur Laufzeit vom Grafikkartentreiber kompiliert. Berechnet Pixelintensität. Ordnet dem Pixel die Farbe zu.
DiffractionScreen.java	Verwaltet und übergibt Parameter. Kommunikation mit Shader über <code>resetUniforms()</code> , <code>repaint()</code> . Liefert Bestimmung maximaler Atomanzahl.
Gui.java	Baut und verwaltet GUI. Interaktion mit User außerhalb von CindyScript.
InitException.java	Für Exceptions bei Plugin Initialisierung.
ShaderPanel.java	Legt u.a. Schirmkoordinaten fest.
Start.java	Enthält Startfunktion für Nutzung außerhalb von CindyScript. In build.xml als Klasse unter „run“ eingetragen.

Literaturverzeichnis

- [BEA09] L. Bindi, P.J. Steinhardt, N. Yao, P.J. Lu: *Natural Quasicrystals*, Science 324 no. 5932 pp. 1306-1309, DOI: 10.1126/science.1170827, PMID 19498165, 2009. Online verfügbar unter <http://www.sciencemag.org/content/324/5932/1306>, Stand: 30.01.2011.
- [BEP05] A. Böge, J. Eichler: *Physik - Grundlagen, Versuche, Aufgaben, Lösungen*, 10. Auflage, Vieweg, Wiesbaden, 2005
- [BHW04] K. Burg, H. Haf, F. Wille: *Partielle Differentialgleichungen - Höhere Mathematik für Ingenieure, Naturwissenschaftler und Mathematiker*, 3. Auflage, Teubner, Wiesbaden, 2004
- [CBG08] J.H. Conway, H. Burgiel, C. Goodman-Strauss: *The Symmetries of Things*, 1. Auflage, A K Peters, Ltd., Wellesley, 2008
- [CDT04] M. McCool, S. Du Toit: *Metaprogramming GPUs with Sh*, 1. Auflage, A K Peters, Ltd., Wellesley, 2004
- [DAM05] W. Demtröder: *Experimentalphysik 3 - Atome, Moleküle und Festkörper*, 3. Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2005
- [DEO06] W. Demtröder: *Experimentalphysik 2 - Elektrizität und Optik*, 4., überarbeitete und erweiterte Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, 2006
- [DMW06] W. Demtröder: *Experimentalphysik 1 - Mechanik und Wärme*, 4. Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2006
- [GPU07] R. Fernando (Edt.): *GPU Gems - Programming Techniques, Tips, and Tricks for Real-Time Graphics*, 5. Auflage, Addison-Wesley, Boston, San Francisco, New York, Toronto, Montreal, London, Munich, Paris, Madrid, Capetown, Sydney, Tokyo, Singapore, Mexico City, 2007
- [GSO99] G. Glaeser, H. Stachel: *Open Geometry - OpenGL[®] + Advanced Geometry*, 1. Auflage, Springer, New York, Berlin, Heidelberg, 1999
- [HGF04] S. Schindhelm: *Elektrosmog*, Facharbeit des Jahrgangs 2004, Hardenberg-Gymnasium, Fürth, Online verfügbar unter: <http://www.hardenberg-gymnasium.de/physik/facharbeiten/elektrosmog/elektrosmog.htm>, Stand: 30.01.2011

- [HZB11] G. Schiwietz: *Einführung in die Physikalischen Grundpraktika II und III*, Vorlesungsunterlagen von der TU Berlin, WS 2010/2011, Thema: Wellenoptik - Beugungsversuche mit Laserlicht, Webveröffentlichung auf den Seiten von HB - Helmholtz Zentrum Berlin, <https://www.helmholtz-berlin.de/media/media/spezial/people/schiwietz/html/VL38.html>, Stand: 20.01.2011
- [KBB98] W. Kleber, H.-J. Bautsch, J. Bohm: *Einführung in die Kristallographie*, 18., stark bearbeitete Auflage, Verlag Technik GmbH, Berlin, 1998
- [LIT05] G. Litfin: *Technische Optik in der Praxis*, 3. Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2005
- [LLF09] L.D. Landau, E.M. Lifschitz: *Lehrbuch der theoretischen Physik II - Klassische Feldtheorie*, 12. Auflage, Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 2009
- [MAP08] M. Apetri: *3D-Grafik Programmierung*, 2., vollständig überarbeitete und aktualisierte Auflage, mitp, Heidelberg, 2008
- [MEN09] *Microsoft Encarta 2009 - Enzyklopädie*, Elektronische Enzyklopädie auf DVD, Version 2009, 1993-2008 Microsoft Corporation, Redmond 2008
- [MMA04] G. Müller, M. Möser (Hrsg.): *Taschenbuch der Technischen Akustik*, 3., erweiterte und überarbeitete Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2004
- [OGL06] D. Shreiner, M. Woo, J. Neider, T. Davis: *OpenGL Programming Guide - The Official Guide to Learning OpenGL[®], Version 2*, 5. Auflage, Addison-Wesley, Upper Saddle River, NJ, 2006
- [SEN95] M. Senechal: *Quasicrystals and Geometry*, 1. Auflage, Cambridge University Press, Cambridge, 1995
- [TIP04] P.A. Tipler, G. Mosca: *Physik - Für Wissenschaftler und Ingenieure*, Hrsg.: D. Pelte, 2. deutsche Auflage, Elsevier: Spektrum Akademischer Verlag, München, 2004