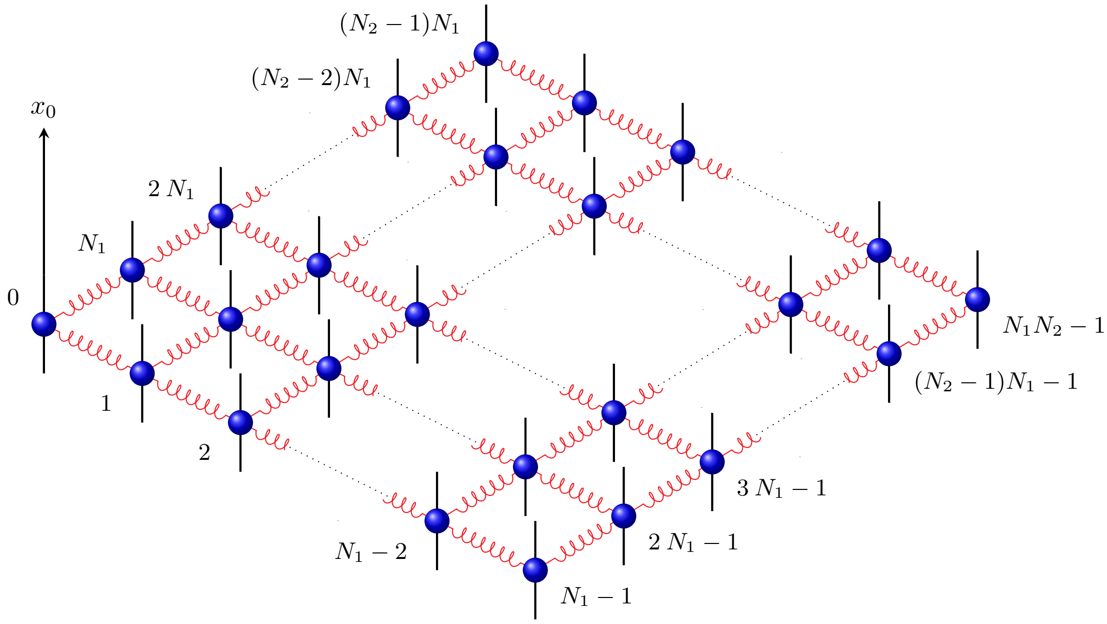
LASSE MÜLLER: lmueller@itp.uni-frankfurt.de
LAURIN PANNULLO: pannullo@itp.uni-frankfurt.de

# Aufgabenblatt 8

*Wird besprochen am 22.06, 23.06*[1] *und 29.06, 30.06*[2].

## Aufgabe 1 [*Ein einfaches Modell für einen Kristall*] (7+3+10+5+4+3+4+4 = 20+20 Pkt.)

Wir betrachten ein System von $M = N_1 \times N_2$ identischen Massepunkten, die ein 2-dimensionales Gitter bilden. Jeder Massepunkt hat die Masse $m$ und ist mit seinen nächsten Nachbarn durch identische Federn mit Federkonstante $k$ verbunden. Die Auslenkungen $x_0(t), \ldots, x_{M-1}(t)$ aus der Ruhelage sind auf eine Dimension beschränkt.




### ERSTER TEIL

Während der gesamten Bearbeitung des Problems beschränken wir uns auf den Fall, dass lediglich ein Massepunkt an der Ecke des Gitters bei $t = 0$ ausgelenkt ist. Die Anfangsbedingungen lauten damit

$$\begin{cases} x_j(t=0) = \delta_{j,0}\, L \\ \dot{x}_j(t=0) = 0 \end{cases} \quad \text{mit} \quad \begin{array}{l} j \equiv N_1\, j_2 + j_1 \\ j_1 = 0,1,\ldots,N_1-1, \quad j_2 = 0,1,\ldots,N_2-1 \end{array} . \tag{1}$$

(i) Nimm an, dass das skizzierte Gitter einen Torus bildet und die Punkte am Rand mit zusätzlichen Federn verbunden sind, sodass sie ebenfalls vier nächste Nachbarn haben. In diesem Spezialfall periodischer Randbedingungen kann das Problem analytisch gelöst werden.

(a) Schreibe die Lagrangefunktion des Systems auf und leite die Bewegungsgleichungen in dimensionslosen Größen her.

(b) Reduziere die Bewegungsgleichungen auf ein Eigenwertproblem, indem du folgenden Ansatz für die Zeitabhängigkeit der Auslenkungen benutzt,

$$\hat{x}_{j_1,j_2}(\hat{t}) = v_{j_1,j_2}^{n_1,n_2}\ \exp\big(\imath\, \hat{\omega}_{n_1,n_2}\, \hat{t}\big)\ .$$

Die Indizes $n_1 = 0,1,\ldots,N_1-1$ und $n_2 = 0,1,\ldots,N_2-1$ indizieren dabei die $N_1 \cdot N_2$ Normalschwingungen des Systems.

[1] Der erste Teil von Aufgabe 1 wird an diesen Tagen besprochen.
[2] Der zweite Teil von Aufgabe 1 wird an diesen Tagen besprochen.

(c) Benutze nun den Ansatz

$$v_{j_1,j_2}^{n_1,n_2} = \exp\Big(2\pi\imath\Big(\frac{j_1\, n_1}{N_1} + \frac{j_2\, n_2}{N_2}\Big)\Big)\,,$$

um die Eigenfrequenzen $\hat{\omega}_{n_1,n_2}$ zu bestimmen.

(d) Bestimme alle $\hat{\omega}_{n_1,n_2}$ für $N_1 = N_2 = 4$. Bestimme die Koeffizienten $A_{n_1,n_2}$ der allgemeinen Lösung

$$\hat{x}_{j_1,j_2}(\hat{t}) = \sum_{n_1,n_2} A_{n_1,n_2} v_{j_1,j_2}^{n_1,n_2}\ \exp\big(\imath\,\hat{\omega}_{n_1,n_2}\,\hat{t}\big)$$

so, dass die Anfangsbedingungen 1 erfüllt sind.

(ii) Das Problem soll nun numerisch gelöst werden. Betrachte hierzu die Eigenwertgleichung aus Teilaufgabe (i-b) und bringe sie in die Form

$$\hat{K}\cdot\mathbf{v}^{n_1,n_2} = \hat{\omega}^2_{n_1,n_2}\,\mathbf{v}^{n_1,n_2} \qquad \text{mit} \qquad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_{0,0} \\ v_{1,0} \\ \vdots \\ v_{N_1,N_2} \end{pmatrix}.$$

Bestimme die Kraftmatrix $\hat{K}$.

(iii) Implementiere die Jacobi Methode um die Eigenwerte und -vektoren einer allgemeinen, reellen und symmetrischen Matrix berechnen zu können. Um sicher zu gehen, dass dein Programm korrekt funktioniert, solltest du es an einfachen Matrizen testen. Verwende hierfür die Matrizen

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

und vergleiche numerische und analytische Ergebnisse.

Zweiter Teil

(iv) Schreibe nun ein Programm, welches die Bewegungsgleichungen numerisch löst, indem der in Teilaufgabe (iii) implementierte Algorithmus verwendet wird, um das in Teilaufgabe (ii) aufgestellte Eigenwertproblem zu lösen. Die Kraftmatrix soll dabei den periodischen Randbedingungen aus Teilaufgabe (i) entsprechen und es sollen die Anfangsbedingungen aus Gl. (1) verwendet werden. Verifiziere die numerische Lösung mit der analytischen Lösung aus Teilaufgabe (i-d) für $N_1 = N_2 = 4$. Vergleiche hierzu die Werte von $v_{j_1,j_2}^{n_1,n_2}$ sowie $\hat{\omega}_{n_1,n_2}$ und plotte auch die Zeitentwicklung von $\hat{x}_j(\hat{t})$ für $j \in \{0,3,7,15\}$ und $0 \leqslant \hat{t} \leqslant 30$ sowohl für die analytische als auch die numerische Lösung.

(v) Ändere nun die Randbedingungen des Systems zu einer ebenen Anordnung der Massepunkte (freie Randbedingungen), bei der die Massepunkte an den Rändern nur zwei bzw. drei nächste Nachbarn besitzen (wie oben skizziert). Löse das Problem erneut numerisch für $N_1 = N_2 = 4$ und die Anfangsbedingungen aus Gl. (1) und plotte die Zeitentwicklung von $x_j(\hat{t})$ für $j \in \{0,3,7,15\}$ und $0 \leqslant \hat{t} \leqslant 30$. Interpretiere die sich ergebenden Unterschiede gegenüber der Lösung des Systems mit periodischen Randbedingungen, z.B. die Unterschiede, die für $\hat{x}_{15}(\hat{t}) = \hat{x}_{3,3}(\hat{t})$, auftreten.

Setze $N_1 = N_2 = 7$ und verwende freie Randbedingungen für die folgenden Teilaufgaben.

(vi) Löse das Problem numerisch für die Anfangsbedingungen aus Gl. (1) und plotte $x_j(\hat{t})$ für $j \in \{0,6,24,48\}$ und $0 \leqslant \hat{t} \leqslant 30$. Bestimme daraus die Zeit, die eine Anregung benötigt, um sich durch das Kristallgitter auszubreiten. Benutze dieses Ergebnis, um im Rahmen des betrachteten Modells die Federkonstante eines Eisenkristalls mit der Schallgeschwindigkeit $c_s \approx 5\,\mathrm{km/s}$, der Teilchenmasse $m \approx 10^{-25}\,\mathrm{kg}$ und dem Gitterabstand $a \approx 3\cdot 10^{-10}\,\mathrm{m}$ abzuschätzen.

(vii) Reduziere nun die Federkonstante der Wechselwirkungen der Massepunkte der mittleren Zeile ($j = 21,\ldots,27$) auf $k' = k/5$. Löse das Problem numerisch für die Anfangsbedingungen aus Gl. (1) und plotte $\hat{x}_j(\hat{t})$ für $j \in \{0,6,24,48\}$ und $0 \leqslant \hat{t} \leqslant 30$. Welchen Einfluss hat diese Veränderung der Wechselwirkungen auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Anregung?

(viii) Betrachte nun wieder das Gitter mit einheitlicher Federkonstante, jedoch mit einer zusätzlichen Kopplung des mittleren Massepunktes ($j = 24$) an das Laborsystem mit einer Feder, die eine Federkonstante $k' = 5\,k$ besitzt. Dies verändert das Potential $V$ in der Lagrangefunktion gemäß

$$V \;\rightarrow\; V' = V + \frac{1}{2}\,k'\left[x_{24}(\hat{t})\right]^2 = V + \frac{5}{2}\,k\left[x_{3,3}(\hat{t})\right]^2 .$$

Warum tritt keine verschwindende Eigenfrequenz mehr auf? Wie und warum ändert sich die Ausbreitungsgeschwindigkeit der betrachteten Anregung?