Technische Universität Braunschweig

INSTITUT FÜR THEORETISCHE PHYSIK

Prof. Dr. Wolfram Brenig
Alexander Schwenke

8 . Übungsblatt | Physikalische Rechenmethoden I | WS 2022/23

Abgabe: Do., 12.01.2023 bis 11:30 Uhr in Stud.IP

Übungsblätter gibt es unter `https://lnk.tu-bs.de/joFKnf`.

31. Diagonalisierung von Matrizen (7 Punkte)

(a) Für welche φ ist die Drehmatrix

$$M_\varphi = \begin{bmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) \\ -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{bmatrix} \tag{1}$$

mit reellen Eigenwerten diagonalisierbar?

(b) Bestimmen Sie das charakteristische Polynom sowie die Eigenwerte und -vektoren der Matrix:

$$A = \begin{bmatrix} -5 & 0 & 7 \\ 6 & 2 & -6 \\ -4 & 0 & 6 \end{bmatrix} \tag{2}$$

32. Hermitesche Matrizen und Entartung (6 Punkte)

Gegeben sei die Matrix

$$A = \begin{bmatrix} 4 & (1-\mathrm{i})\sqrt{3} & 1+\mathrm{i} \\ (1+\mathrm{i})\sqrt{3} & 3 & -\mathrm{i}\sqrt{3} \\ 1-\mathrm{i} & \mathrm{i}\sqrt{3} & 5 \end{bmatrix} \tag{3}$$

(a) Zeigen Sie, dass die Matrix A hermitesch ist, d. h. $A = A^\dagger \equiv (A^T)^*$, wobei * die komplexe Konjugation ist.

(b) Hermitesche Matrizen haben reelle Eigenwerte. Zeigen Sie dies am Beispiel von A.

(c) Bestimmen Sie die Eigenvektoren von A. Geben Sie die Matrix S an, welche A auf Diagonalform $D = S^{-1}AS$ transformiert.

(d) Bestimmen Sie die zugehörige Orthonormalbasis.
Hinweis: Betrachten Sie den entarteten Unterraum mithilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens gegenüber dem Rest des Unterraums.

33. Molekülschwingungen (7 Punkte)

Gegeben sei ein dreiatomiges Kettenmolekül, welches aus Atomen der Masse m bestehe, verbunden durch Federn der Federkonstante c. Die Auslenkungen aus der Gleichgewichtslage seien mit x_j bezeichnet. Die Bewegungsgleichungen für das System lauten damit:

$$m\ddot{x}_1 = c(x_1 - x_2) \tag{4}$$
$$m\ddot{x}_2 = c(x_2 - x_1) + c(x_2 - x_3) \tag{5}$$
$$m\ddot{x}_3 = c(x_3 - x_2)\,. \tag{6}$$

(a) Skizzieren Sie das Molekül.

(b) Überführen Sie mithilfe des Schwingungsansatzes $x_j = x_{j,0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha t}$ das Gleichungssystem in ein Eigenwertproblem.
Bestimmen Sie die Eigenwerte $\lambda = \alpha^2$ und die dazugehörigen Eigenvektoren.

(c) Interpretieren Sie die Eigenschwingungsmoden graphisch und in Worten.

Bitte wenden! →

34. **Feiertagsprojekt: LU-Zerlegung und diskrete Poisson-Gleichung (10 Punkte + 15 Bonuspunkte)**

(a) Zeigen Sie per Konstruktion mithilfe des Gauß-Jordan-Verfahrens mit Zeilenpivotisierung, dass für $A \in \mathbb{M}(n \times n, \mathbb{R})$

$$PA = LU \tag{7}$$

gilt, wobei P, L, $U \in \mathbb{M}(n \times n, \mathbb{R})$ sind.
P ist eine Matrix, die (bei Multiplikation von links) Zeilen vertauscht, L ist eine untere Dreiecksmatrix, U ist eine obere Dreiecksmatrix.

(b) Schreiben Sie ein Programm, dass die Zerlegung aus (7) bestimmt.

Die Poisson-Gleichung beschreibt den Zusammenhang zwischen elektrischem Potential ϕ und Ladungsdichte ρ:

$$\Delta\phi(\vec{r}) = \rho(\vec{r}), \qquad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \dots \tag{8}$$

mit dem Laplace-Operator Δ und dem Ortsvektor $\vec{r}$.

Betrachten Sie die Poisson-Gleichung im Folgenden auf einem zweidimensionalen Quadratgitter mit Gitterabstand $h_x = h_y = h$ und der Größe $n \cdot n$.

(c) Zeigen Sie, dass sich für eine Funktion f die zweiten Ableitungen an dem Gitterpunkt $\vec{x}_{i_1,i_2}$ zu

$$\begin{aligned} \left.\frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}\right|_{\vec{x}_{i_1,i_2}} &= \frac{f(\vec{x}_{i_1-1,i_2}) - 2f(\vec{x}_{i_1,i_2}) + f(\vec{x}_{i_1+1,i_2})}{h^2} \\ \left.\frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}\right|_{\vec{x}_{i_1,i_2}} &= \frac{f(\vec{x}_{i_1,i_2-1}) - 2f(\vec{x}_{i_1,i_2}) + f(\vec{x}_{i_1,i_2+1})}{h^2} \end{aligned} \tag{9}$$

nähern lassen.

(d) Diskretisieren Sie mithilfe von (9) die Poisson-Gleichung unter der Bedingung, dass ϕ auf den Rändern des Gitters verschwindet.
Bringen Sie dafür (8) in die Form

$$A\vec{u} = \vec{b}, \tag{10}$$

mit einer geeigneten Matrix A und machen Sie die Gleichung in geeigneter Weise dimensionslos.

(e) Lösen Sie die diskretisierte Poisson-Gleichung mithilfe Ihres Programms zur LU-Zerlegung für folgende Fälle und visualisieren Sie Ihre Ergebnisse.

i. einer Punktladung in einem Punkt $\vec{x}_0$, also

$$\rho(\vec{r}) \propto \begin{cases} 1 & \text{für } \vec{r} = \vec{x}_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \tag{11}$$

Wählen Sie dabei $\vec{x}_0$ beliebig, aber nicht auf dem Rand des Gitters.

ii. zwei Punktladungen (in $\vec{x}_0$ und $\vec{x}_1$) mit entgegengesetzter Ladung.
Probieren Sie verschiedene Abstände von $\vec{x}_0$ und $\vec{x}_1$ aus.

iii. Selbstverständlich können Sie nun auch mit beliebigen $\rho(\vec{r})$ spielen, die Sie interessieren.

Starten Sie mit $n = 10$, $h = 1/n$ und betrachten Sie verschiedene n.

Schöne Feiertage!