Prof. Jan Kierfeld
jan.kierfeld@tu-dortmund.de

Sommersemester 2016
Technische Universität Dortmund

# Computational Physics
# Übungsblatt 1

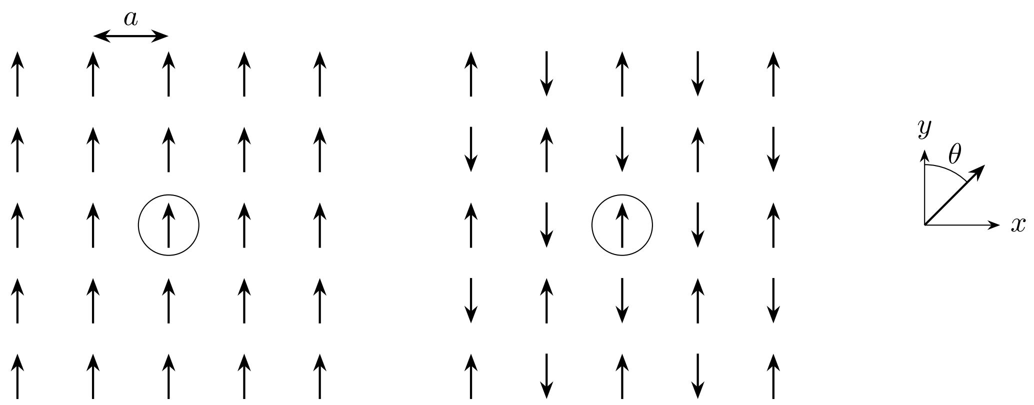
Ausgabe: 15.04.2016 Abgabe: 22.04.2016

---

Senden Sie Ihre Abgaben (Plots, Datensätze und Quellcode) als gepacktes Archiv (z.B. als zip-File) per E-Mail an Ihre Übungsgruppenleiter.

## Aufgabe 1. Drehmomente (10 P.)

Wir betrachten ein zweidimenionales quadratisches System aus identischen magnetischen Dipolen mit magnetischen Momenten $\boldsymbol{m}_{kl}$ der Stärke $M$ an Gitterplätzen $\boldsymbol{R}_{kl} = ka\boldsymbol{e}_x + la\boldsymbol{e}_y$ ($k, l = -N, ..., -1, 0, 1, ..., N$, also $(2N+1)^2$ Momente) mit einer Gitterkonstante $a$ (siehe Abbildung oder das Modell im Eingang das Physikgebäudes, dort allerdings mit einem Dreicksgitter).




(i) ferromagnetisch (ii) antiferromagnetisch

Wir wollen das Drehmoment auf den magnetischen Dipol in der Mitte des Systems ($k = l = 0$) als Funktion seines Winkels $\theta$ mit der $y$-Achse berechnen. Die übrigen Momente sollen dabei in den Konfigurationen (i) und (ii) (siehe Abbildung) *fixiert* sein.

a) Schreiben Sie ein Programm zur Berechnung der Gesamtwechselwirkungsenergie $E(N, \theta)$ des Moments in der Mitte mit allen übrigen Momenten als Funktion des Winkels $\theta$ für Konfigurationen (i) und (ii). Gehen Sie dabei von der Wechselwirkungsenergie

$$E = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{|\boldsymbol{R}|^3} \left( -3(\hat{\boldsymbol{R}} \cdot \boldsymbol{m})(\hat{\boldsymbol{R}} \cdot \boldsymbol{n}) + (\boldsymbol{m} \cdot \boldsymbol{n}) \right) \tag{1}$$

zwischen zwei Dipolmomenten $\boldsymbol{m}$ und $\boldsymbol{n}$ mit Abstandsvektor $\boldsymbol{R}$ ($\hat{\boldsymbol{R}} \equiv \boldsymbol{R}/|\boldsymbol{R}|$ ist der zugehörige Einheitsvektor) aus. Plotten Sie die Funktion $E(N, \theta)$ für $N = 2, 5, 10$ jeweils für Konfiguration (i) und (ii).

**Abgabe:** drei Datensätze ($N = 2, 5, 10$) mit jeweils zwei Spalten $\theta$ und $E$ und den Quellcode

b) Differenzieren Sie die Wechselwirkungsenergie numerisch nach $\theta$, um den Betrag des Drehmoments

$$T(N, \theta) = \left| \frac{\partial E}{\partial \theta} \right| \tag{2}$$

auf das Moment in der Mitte zu berechnen. In welche Richtung zeigt der Vektor $\boldsymbol{T}$ des Drehmomentes? Plotten Sie $T(N, \theta)$ für $N = 2, 5, 10$ jeweils für Konfiguration (i) und (ii).

Kontrollieren Sie Ihr Ergebnis, indem Sie den Drehmomentvektor direkt über

$$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{m} \times \boldsymbol{B}(0) \tag{3}$$

berechnen, wobei nun das Gesamtmagnetfeld $\boldsymbol{B}(0)$, das durch die anderen Momente in der Mitte bei $\boldsymbol{R} = 0$ erzeugt wird, numerisch zu berechnen ist.

**Abgabe:** drei Datensätze ($N = 2, 5, 10$) mit jeweils drei Spalten $\theta$, $T$ über die Ableitung und $T$ über das Drehmomente und den Quellcode

## Aufgabe 2. Integrationsroutine (10 P.)

Schreiben Sie eine Integrationsroutine für

a) Trapezregel,

b) Mittelpunktsregel,

c) Simpsonregel

an die jeweils folgende vier Argumente übergeben werden sollen:

1) Integrand $f(x)$,

2) untere Integrationsgrenze $a$,

3) obere Integrationsgrenze $b$,

4) Integrationsintervallbreite $h$ oder Anzahl der Integrationsintervalle $N$ (bei der Simpsonregel sollte $N$ gerade sein).

**Abgabe:** kompilierbaren Quellcode und Compilerkommando oder makefile

## Aufgabe 3. Eindimensionale Integrale (nicht abzugeben)

Berechnen Sie folgende Integrale

a)

$$I_1 = \int_1^{100} \mathrm{d}x \, \frac{\exp(-x)}{x} \tag{4}$$

(Kontrolle: $I_1 \simeq 0.219\,384$)

b)

$$I_2 = \int_0^1 \mathrm{d}x\, x \sin\left(\frac{1}{x}\right) \tag{5}$$

(Kontrolle: $I_2 \simeq 0.378\,530$)

numerisch jeweils mittels

1) Trapezregel,
2) Mittelpunktsregel,
3) Simpsonregel.

Halbieren Sie die Intervallbreite $h$ bis die relative Änderung des Ergebnisses kleiner als $10^{-4}$ wird.