Master - Arbeit

Title of Master Thesis

vorgelegt von

David Symhoven

an der

Fachbereich Physik
Lehrstuhl für Plasma and Computational Physics

Gutachter:

Prof.Dr.Hartmut Ruhl

München, 2017

Erklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Arbeit selbständig verfasst zu haben und keine anderen als die in der Arbeit angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt zu haben.

München, Datum der Abgabe

München, 31.03.2017, David Symhoven

Abstract:
Blah Blah Blah Mr. Freeman

Symbole und Konstanten

Plank'sches Wirkungsquantum	h	$6.62606957(29) \cdot 10^{-34}$ J s
Plank'sches Wirkungsquantum	$\hbar$	$1.054571726(47) \cdot 10^{-34}$ J s
Boltzmann - Konstante	k_B	$1.3806488(13) \cdot 10^{-23}$ J K^{-1}
Avogadro - Konstante	N_A	$6.02214129(27) \cdot 10^{23}$ mol^{-1}
Permitivität des Vakuums	ϵ_0	$8.85418781762 \cdot 10^{-12}$ A s V^{-1} m^{-1}
atomare Masseneinheit	u	$1.660538921(73) \cdot 10^{-27}$ kg
Elektronenvolt	eV	$1.602176565(35) \cdot 10^{-19}$ J
1 Angström	Å	10^{-10} m
1 Nanosekunde	ns	10^{-9} s
1 Pikosekunde	ps	10^{-12} s
1 Femtosekunde	fs	10^{-15} s
Ort	$\vec{r}$	[m]
Geschwindigkeit	$\vec{v}$	[m s^{-1}]
Beschleunigung	$\vec{a}$	[m s^{-2}]
Impuls	$\vec{p}$	[kg m s^{-1}]
Kraft	$\vec{F}$	[N]
Masse	m	[kg]
Energie	E	[J]
Temperatur	T	[K]
Druck	p	[N m^{-2}]
Entropie	S	[J K^{-1}]
Potential	V	nicht eindeutig
chemisches Potential	μ	nicht eindeutig
Zeit	t	[s]
diskretisierte Zeit	Δt	[s]
Frequenz	ω	[s^{-1}]
Gesamtteilchenanzahl	N	
Anzahl der Freiheitsgerade	f	
Nabla - Operator	∇	$\left(\frac{\partial}{\partial r_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial r_n}\right)$
Laplace - Operator	Δ	$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2}$
Hamilton - Operator	$\mathcal{H}$	$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$
Lagrange - Funktion	$\mathcal{L}$	$\mathcal{L} = T - V$

Inhaltsverzeichnis

Deklaration ii

1 Einleitung 2

2 Grundlagen 3

2.1 Liénard-Wiechert Potentiale . . . 3

2.2 Numerik . . . 3

2.2.1 Bewegungsgleichung . . . 3

2.2.2 Euler-Verfahren . . . 3

2.2.3 Leap-Frog-Verfahren . . . 4

2.2.4 Boris-Pusher . . . 4

2.2.5 Vay-Pusher . . . 4

2.3 Hybride Felder . . . 4

2.3.1 Maxwell-Gleichungen . . . 4

2.3.2 Maxwell-Solver . . . 4

2.3.3 Nah-und Fernfelder . . . 4

Literaturverzeichnis 6

1

Einleitung

Now it's going loose ...[1]

2

Grundlagen

2.1 Liénard-Wiechert Potentiale

2.2 Numerik

Der folgende Abschnitt beschäftigt sich mit dem numerischen Aspekt der Arbeit. Wir stellen die zugrunde liegende Bewegungsgleichung und deren Historie vor. Anschließend gehen wir auf diverse Methoden ein, mit Hilfe derer sich Differentialgleichungen lösen lassen. Über die vergangenen Jahre wurden unzählige Verfahren entwickelt, wobei jedes seine Stärken und Schwächen hat. Deshalb sollte zunächst immer wohl überlegt sein, was erreicht werden soll. Einige Methoden sind sehr einfach, dafür unpräzise, andere sind sehr aufwändig zu implementieren, dafür sehr genau. Eine Methode für alle Probleme gibt es leider nicht.
Im Anschluss wollen wir dann noch die numerische Komplexität ausgewählter Algorithmen definieren und berechnen.

2.2.1 Bewegungsgleichung

Wie aus der Mechanik bekannt, ist die Dynamik eines Teilchens durch die auf ihn wirkenden Kräfte vorgeschrieben. In unserem Fall wirkt eine Kraft aufgrund von elektrischen und magnetischen Feldern. Dies können zum einen externe Felder, aber auch Felder sein, die durch die Bewegung anderer Teilchen entstehen, wie wir im Abschnitt 2.1 bereits gesehen haben.
Unsere Systemdynamik wird durch die *Lorentz-Newton* Gleichung beschrieben

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}s} &= u^\mu \\ \frac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}s} &= F^\mu_{\ \nu}\, u^\nu + g^\mu, \end{aligned} \tag{2.1}$$

deren Herleitung länglich ist und wir deshalb auf Literatur verweisen möchten. Der Term $F^\mu_{\ \nu}$ beschreibt den elektromagnetischen Feldstärketensor

$$F^\mu_{\ \nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ E_x & 0 & B_z & -B_y \\ E_y & -B_z & 0 & B_x \\ E_z & B_y & -B_x & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.2}$$

Der Dämpfungsterm g^μ berücksichtigt den Fakt, dass bewegte Ladungen Felder abstrahlen und dadurch kinetische Energie verlieren. Die Strahlungsdämpfung wurde erstmals durch Max *Abraham* und Hendrick *Lorentz* in ihrer gleichnamigen Gleichung im Rahmen der klassischen Elektrodynamik behandelt. 1938 verallgemeinerte *Dirac* dann die Gleichung, unter Berücksichtigung der Relativitästheorie. Wir wollen uns nun damit beschäftigen, wie wir die Bewegungsgleichung (2.1) numerisch integrieren können.

2.2.2 Euler-Verfahren

Das wohl einfachste aller Verfahren ist das *Euler* Verfahren.

2.2.3 Leap-Frog-Verfahren

2.2.4 Boris-Pusher

2.2.5 Vay-Pusher

2.3 Hybride Felder

2.3.1 Maxwell-Gleichungen

2.3.2 Maxwell-Solver

2.3.3 Nah-und Fernfelder

Abbildungsverzeichnis

Literaturverzeichnis

[1] C. Schirm, M. Matt, F. Pauly, J. C. Cuevas, P. Nielaba, and E. Scheer. A current-driven single-atom memory. *Nature Nanotechnology*, 8(9):645–648, 2013.