Universität Ulm
Institut für Numerische Mathematik

Prof. Dr. Dirk Lebiedz
Marc Fein
Jochen Siehr

Übungen 8 zur Modellierung und Simulation III (WS 2012/13)

`http://www.uni-ulm.de/mawi/mawi-numerik/lehre/wintersemester-20122013/vorlesung-modellierung-und-simulation-3.html`

Aufgabe 8.1 (Elektron im Potentialkasten)
Wir betrachten Elektronen in einem Potentialkasten.

(A) Berechnen und zeichnen Sie für ein Elektron, das sich in einem Kasten der Länge $L = 1\,\text{Å}$ befindet, die Energien E_n der Eigenzustände $\Psi_n(x)$ und die zugehörigen Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für die Quantenzahlen $n = 1, 2, 3$.

(B) Berechnen Sie die Anzahl der Eigenzustände eines Elektrons in einem Kasten der Länge $L = 100\,\text{Å}$, deren Energie kleiner oder gleich dem Zahlenwert von E_3 aus (A) ist.

(C) Nehmen Sie an, dass im 1,3,5-Hexatrien (CH_2=CH-CH=CH-CH=CH_2) die sechs π-Elektronen über die ganze Länge des Moleküls frei beweglich sind. Das Grundgerüst des Moleküls (Kerne und σ-Elektronen) soll als ein eindimensionaler Kasten, der von unendlich hohen Potentialwällen begrenzt ist, angesehen werden. Die Länge der C-C-Bindung beträgt $1.54\,\text{Å}$, die der C=C-Bindung $1.35\,\text{Å}$. Zeichnen Sie die Wellenfunktion $\Psi_n(x)$ und die Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die vier untersten Energie-Eigenzustände eines π-Elektrons. Berechnen Sie die Energie und Quantenzahl n des höchsten besetzen Zustands. Zeichen Sie die gesamte π-Elektronendichte für das Hexatrien im Grundzustand. Berechnen Sie die Wellenlänge im Hexatrien-Absorptionsspektrum für den Übergang in den ersten elektronisch angeregten Zustand.

Aufgabe 8.2 (FitzHugh–Nagumo Modell)
Die FitzHugh–Nagumo (FHN) Gleichungen sind eine einfache Reformulierung des Hodgkin–Huxley-Modells, für welches Hodgkin und Huxley den Medizin-Nobelpreis 1952 gewannen.
Das Hodgkin–Huxley-Modell simuliert die elektrische Signalübertragung des Tintenfisch-Riesenaxons. Das Riesenaxon kann als langer, dünner Kanal angesehen werden, an dessen äußerer Membran Signale entlang laufen. Die FHN-Gleichungen beschreiben dieselben Phänomene wie das Hodgkin–Huxley-Modell und sind gegeben durch

$$\begin{aligned} \dot{u} &= f(u) - v + I_a \\ \dot{v} &= \varepsilon\,(u - \gamma v + \delta) \\ f(u) &:= u\,(a-u)\,(u-1)\,, \end{aligned} \tag{1}$$

wobei u die Spannung auf der Membran modelliert und v eine kombinierte Kraft repräsentiert, die nötig ist, um einen Ruhezustand zu erreichen. Weiter repräsentiert I_a eine Stromstärke, die von außen angelegt ist. Die Parameterwerte sind gegeben als $\varepsilon = 0.01$, $\gamma = 0.5$, $\delta = 0$ und $a = -1$.

(A) Nutzen Sie die `MATLAB`-Codes zu Blatt 7, um (1) numerisch zu lösen. Variieren Sie dabei die angelegten Stromstärke zwischen 0 und 1.

(B) Plotten Sie ein Phasenportrait des Modells. Zeichnen Sie die Nullklinen und die Trajektorie aus (A) ein.

(C) In der Diplomarbeit `http://www.siehr.net/publications/Siehr2007.pdf` behauptet der Autor auf S. 21, dass bei einem Wert von $I_\mathrm{a}^\mathrm{H} := 0.4763$ eine Hopf-Bifurkation auftritt. Überprüfen Sie diese Behauptung mit numerischen Experimenten.
