

|   |                                   |                                   |
|---|-----------------------------------|-----------------------------------|
| Universität Osnabrück<br>Fachbereich Physik | Numerische Physik<br>WS 2003/2004 | PD Dr. Jürgen Schnack<br>Projekte |
|---|-----------------------------------|-----------------------------------|

## Projektvorschläge

Die folgenden Projekte sollen in Form eines kleinen Aufsatzes (5-10 Seiten Text, Graphiken nicht gerechnet) bearbeitet werden. Dabei sollen die Grundlagen der Rechnung dargestellt und das geschriebene Programm erläutert werden. Die Ergebnisse der Rechnung sind ebenfalls geeignet darzustellen.

Sie können ein Werkzeug Ihrer Wahl benutzen (matlab, mathematica, Fortran, C). Literaturempfehlungen erhalten Sie auf Wunsch von mir.

Die Projekte können zu zweit bearbeitet werden. Abgabetermin ist die erste Semesterwoche des Sommersemesters 2004. Ich hätte dabei gern den Text als PDF oder Postscript sowie das erarbeitete Programm als Quelltext.

### 1 Ising-Modell in 2 und 3 Dimensionen (Daum, Golubchik)

Stellen Sie die theoretischen Grundlagen dar. Was weiß man über den Phasenübergang? Simulieren Sie das zwei- bzw. dreidimensionale Ising-Modell mit möglichst vielen Spins. Untersuchen Sie für das zweidimensionale Ising-Modell die Abhängigkeit der Übergangstemperatur von der Systemgröße.

### 2 Molekulardynamik von Argon-Clustern (Wiemann, Damnik)

Erarbeiten Sie die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung von Argon-Clustern; stellen Sie dabei auch die verwendete Wechselwirkung dar. Berechnen Sie die Grundzustände von Clustern bis  $N = 10$  und stellen Sie die Grundzustandsenergie und die quadratischen Radien dar. Klären Sie grundlegende Begriffe der Streutheorie und simulieren Sie einige Stöße von Argonclustern bei unterschiedlichen Stoßparametern und Energien.

### 3 Flüssigkeit-Gas-Phasenübergang bei Argon-Clustern (Name, Name)

Erarbeiten Sie die theoretischen Grundlagen zur Beschreibung von Argon-Clustern; stellen Sie dabei auch die verwendete Wechselwirkung dar. Führen Sie in einem kugelförmigen Volumen eine Monte-Carlo-Rechnung mit dem Metropolisalgorithmus durch, um die innere Energie und die Wärmekapazität eines Argongases aus 4 (vielleicht schafft Ihr Rechner auch mehr) Argonatomen zu bestimmen. Das Volumen sollte zwei bis dreimal so groß wie der Cluster sein. Kann man einen „Phasenübergang“ sehen? Erläutern Sie den Metropolis-Algorithmus.

## 4 Integratoren (Stiene, Taubitz)

Erklären Sie, wie die Integratoren Euler, Runge-Kutta dritter und vierter Ordnung und ein Integrator mit adaptiver Schrittweite funktionieren und vergleichen Sie die Funktionsweisen an einem von Ihnen gewählten Beispiel. Leiten Sie die zugrunde liegenden Gleichungen her.

## 5 Dreikörperproblem (Rosemann, Sander)

Beschreiben Sie die Bewegung von Sonne, Erde und Mond theoretisch und berechnen Sie die Positionen für ein Jahr. Überprüfen Sie die Genauigkeit. Wie lang ist Ihr Jahr? Ist der Mond da, wo er sein soll? Vergleichen Sie mit einem Sternkalender z.B. dem von Paul Ahnert.

## 6 Dreikörperproblem (Bornebusch, Wissing)

Auf vielfachen Wunsch noch einmal, aber anders: Beschreiben Sie die Bewegung von Sonne, Erde und Jupiter theoretisch und berechnen Sie die Positionen für ein Jahr. Überprüfen Sie die Genauigkeit. Wie lang ist Ihr Jahr? Ist die Erde da, wo sie sein soll? Wie hängt das Ergebnis von der Schrittweite ab? Vergleichen Sie mit einem Sternkalender z.B. dem von Paul Ahnert.

## 7 Bestimmung von Clebsch-Gordan-Koeffizienten (Stein- hilber)

Erläutern Sie, was Clebsch-Gordan-Koeffizienten sind. Bestimmen Sie die Clebsch-Gordan-Koeffizienten für die Kopplung zweier beliebiger Spins durch exakte Diagonalisierung des Gesamtspinquadrats. Erstellen sie eine Tabelle für die Kopplung von Spins mit den Quantenzahlen  $s = 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, 7/2$ . Es gibt 21 Kombinationsmöglichkeiten. Vergleichen Sie Ihre Koeffizienten mit denen, die Mathematica bereitstellt.

## 8 Tunneleffekt (Abe, Wenke)

Geben Sie die Grundlagen zum quantenmechanischen Tunneleffekt wieder. Lösen Sie die zeitabhängige Schrödingergleichung numerisch für ein Gaußsches Wellenpaket in einer Raumdimension, das sich von links kommend auf eine Potentialbarriere zubewegt. Untersuchen und diskutieren Sie die Ergebnisse für unterschiedliche Potentialhöhen und -breiten sowie kinetische Energien des Wellenpakets. Wählen Sie dem Problem angepasste Einheiten.

## 9 Nosé–Hoover–Thermostat (Schnalle)

Eine Alternative zu klassischen Monte-Carlo-Rechnungen bilden die sogenannten Thermostaten und hier insbesondere die Nosé–Hoover–Thermostaten. Erarbeiten Sie sich, was

sich dahinter verbirgt und stellen Sie die Theorie kurz dar. Programmieren Sie einen Thermostaten, mit dem Sie die innere Energie und die Wärmekapazität eines klassische Teilchens in einem  $x^4$ -Potential ausrechnen können.