

Universität Osnabrück Fachbereich Physik	Numerische Physik WS 2004/2005	Apl. Prof. Dr. Jürgen Schnack Projekte
---	-----------------------------------	---

Projektvorschläge

Die folgenden Projekte sollen in Form eines kleinen Aufsatzes (5-10 Seiten Text und Graphiken) 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 2005. Ich hätte dabei gern den Text als PDF oder Postscript sowie das erarbeitete Programm als Quelltext.

1 Approximative Diagonalisierung versus Störungstheorie

In einem unendlich hohen Kastenpotential der Breite L befinde sich in der Mitte eine rechteckige Potentialbarriere der Breite d und Höhe V_0 .

Berechnen Sie die Energieeigenwerte durch approximative Diagonalisierung in der Basis der Eigenzustände des ungestörten Kastenpotentials. Untersuchen Sie die Konvergenz als Funktion der mitgenommenen Zustände in Abhängigkeit von d/L und $V_0/E_1^{(0)}$, wobei $E_1^{(0)}$ die Grundzustandsenergie des ungestörten Kastenpotentials ist.

Vergleichen Sie die drei niedrigsten Energieeigenwerte mit dem Ergebnis der Störungstheorie bis zweiter Ordnung.

2 Wang-Landau-Sampling für das zweidimensionale Ising-Modell – Ibbenbüren-Connection aus Dieckmann, Heine, Kalfhues

Eine Einschränkung des Metropolisalgorithmus besteht darin, daß man die thermodynamischen Mittel für jede Temperatur wieder neu berechnen muß. Es wäre doch gut, wenn man durch eine geeignete Monte-Carlo-Methode die Zustandsdichte unmittelbar bestimmen könnte, um daraus dann durch simple numerische Integration mit dem Boltzmann-Faktor die entsprechenden Mittel zu bestimmen. Genau dies tut der Wang-Landau-Algorithmus [1].

Erarbeiten Sie die Grundlagen und stellen Sie sie dar. Modellieren Sie das im Artikel von Landau, Tsai und Exler [1] besprochene zweidimensionale Isingmodell selbst.

3 Ising-Modell in 2 und 3 Dimensionen – Helge Riedrich

Stellen Sie die theoretischen Grundlagen dar. Was weiß man über den Phasenübergang? Simulieren Sie das zwei- bzw. dreidimensionale Ising-Modell mit möglichst vielen Spins mit Hilfe des Metropolisalgorithmus [3]. Erklären Sie diesen. Untersuchen Sie für das zweidimensionale Ising-Modell die Abhängigkeit der Übergangstemperatur von der Systemgröße.

4 Ising-Modell in 2 und 3 Dimensionen – Suendorf & Gödeker

Stellen Sie die theoretischen Grundlagen dar. Was weiß man über den Phasenübergang? Simulieren Sie das zwei- bzw. dreidimensionale Ising-Modell mit möglichst vielen Spins mit Hilfe des Metropolisalgorithmus [3]. Erklären Sie diesen. Untersuchen Sie für das zweidimensionale Ising-Modell die Abhängigkeit der Übergangstemperatur von der Systemgröße.

5 Flüssigkeit-Gas-Phasenübergang bei Argon-Clustern – Greuling, Langer

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 [3] 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.

6 Dreikörperproblem – Bartsch, Pelzer

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.

7 Dreikörperproblem – Andreas Bröermann

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.

8 Bestimmung von Clebsch-Gordan-Koeffizienten – Kuschel, Tobergte

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.

9 Bestimmung von Clebsch-Gordan-Koeffizienten – Katrin Brörmann

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.

10 Nosé–Hoover–Thermostat – Hannu Wichterich

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 [4, 2]. Programmieren Sie einen Thermostaten, mit dem Sie die innere Energie und die Wärmekapazität eines klassische Teilchens in einem x^4 -Potential ausrechnen können.

Literatur

- [1] D. P. Landau, S. H. Tsai, M. Exler, *A new approach to Monte Carlo simulations in statistical physics: Wang-Landau sampling*, Am. J. Phys. **72** (2004) 1294
- [2] D. Mentrup, *Isothermal quantum dynamics: Investigations for the harmonic oscillator*, Ph.D. thesis, University of Osnabrück (2003), download from <http://elib.uni-osnabrueck.de/cgi-bin/diss/user/catalog?start1=yes>
- [3] M. Metropolis, A. Metropolis, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, *Equation of state calculations by fast computing machines*, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087
- [4] C. Schröder, *Numerische Simulationen zur Thermodynamik magnetischer Strukturen mittels deterministischer und stochastischer Wärmebadankopplung*, Ph.D. thesis, University of Osnabrück (1999), download from <http://elib.uni-osnabrueck.de/dissertations/physics/Chr.Schroeder/>