

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2010	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
--	---------------------------	---

Aufgabenblatt 9

9.1 Minimumssuche

Erweitern Sie das in der Vorlesung vorgestellte und auf meiner Webseite verlinkte Mathematica-Notebook `Vorlesung-15.nb` um die folgenden Funktionen:

- Programmieren Sie ein Gradientenverfahren. Nutzen Sie die analytische Ableitung, die Mathematica bereitstellt. Beginnen Sie mit verschiedenen Startwerten und untersuchen Sie, in welches Minimum die Suche hineinläuft.
- Berechnen Sie mit Mathematica die Matrix G der zweiten Ableitungen am Ort des Minimums und bestimmen Sie die Eigenwerte.

9.2 Grundzustand von Lennard-Jones-Clustern

Cluster aus Argonatomen können in guter Näherung klassisch modelliert werden. Ihre Hamiltonfunktion lautet

$$H(p, q) = \frac{0.1036446}{2m} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i^2 + 4\epsilon \sum_{i<j} \left(\frac{\sigma^{12}}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^{12}} - \frac{\sigma^6}{|\vec{x}_i - \vec{x}_j|^6} \right). \quad (1)$$

Dabei sind $m = 39.948$, $\epsilon = 10.3$ und $\sigma = 3.405$. Die Einheiten sind so gewählt, dass Energien in meV, Längen in Å, Geschwindigkeiten in Å/ps und Massen in u angegeben sind. \vec{p}_i und \vec{x}_i bezeichnen den Impuls sowie den Ort des i -ten Argonatoms.

- Schauen Sie sich zur Wiederholung das Mathematica-Notebook zur Grundzustandssuche bei Argonclustern an.**

- Erstellen Sie ein kleines „Periodensystem für Argoncluster“; berechnen Sie dazu die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von der Zahl der Argonatome für $N = 2, \dots, 12$.

Bemerkung: Bei dieser Aufgabe sei Ihnen freigestellt, wie Sie das Problem lösen (Mathematica, C, Fortran, ...). Mit Mathematica werden Sie die Erfahrung machen, dass das Notebook für größere Teilchenzahlen recht langsam wird. Echte ProgrammiererInnen nehmen deshalb ...! ;)

- Vergleichen Sie in Ihrer Gruppe die gefundenen Grundzustandsenergien. Haben Sie alle dieselben Werte? Diskutieren Sie!
- Stellen Sie die Energien als Funktion der Teilchenzahl graphisch dar. Wie könnte die Grundzustandsenergie mit der Teilchenzahl skalieren? Kennen Sie ein Modell, in dem diese Fragen für ein etwas anderes System beantwortet werden? Diskutieren Sie!