

Universität Bielefeld Fakultät für Physik	Computerphysik SS 2012	Prof. Dr. Jürgen Schnack jschnack@uni-bielefeld.de
--	---------------------------	---

Aufgabenblatt 1

1.1 Arbeit mit Funktionen in Mathematica

- Definieren Sie eine Funktion $f(x) = \tan(x)$ und eine Funktion $g(x) = x$. Plotten Sie diese Funktionen zusammen in einer Grafik. Finden Sie eine Nullstelle (**Zusatz: alle Nullstellen**) von $h(x) = f(x) - g(x)$ mit $x \neq 0$.
- Differenzieren Sie $f(x)$ und stellen Sie die Ableitung zusammen mit $f(x)$ graphisch dar.
- Integrieren Sie $f(x)$ bestimmt zwischen $x_1 = 0$ und $x_2 = 1$. Versuchen Sie die analytische und die numerische Integration. Probieren Sie bei der numerischen Integration verschiedene Verfahren aus (Hilfe nutzen!) und vergleichen Sie die Ergebnisse.

1.2 Bearbeiten von Daten

Ein experimentell arbeitender Kollege hat Ihnen einen Datensatz gegeben, der den magnetischen Anteil der spezifischen Wärmekapazität $c(T)$ einer magnetischen Verbindung enthält. Die Temperaturen sind in Kelvin gegeben, die Wärmekapazität hingegen in *arbitrary units*.¹ Sie wissen zum Glück, dass es sich bei der Verbindung um gekoppelte Vanadiumspins mit $s = 1/2$ handelt. Normieren Sie die Daten so, dass c – die Wärmekapazität pro Spin – in Vielfachen von k_B angegeben wird.

- Theoretischer Hintergrund:* Das Problem kann man durch eine Betrachtung der Entropie lösen. Es gilt

$$s(T) = \int_0^T dT' \frac{c(T')}{T'}. \quad (1)$$

Dabei ist $s(T)$ die Entropie pro Spin. Für $T \rightarrow \infty$ wissen Sie,² dass $s \rightarrow k_B \ln(2)$.

- Vorgehen:* Schreiben Sie ein Mathematica-Notebook, das die Daten in ein Feld einliest. Teilen Sie c durch T . Stellen Sie c/T als Funktion von T mit `ListPlot` dar. Integrieren Sie die Daten bis ∞ . Dazu sollten Sie wissen, dass c für große T wie $1/T^2$ abfällt. Sie können auf verschiedene Weisen integrieren, z.B. indem Sie erst mittels `Interpolation` aus den Daten eine Funktion generieren. Oder Sie nähern das Integral durch eine Summe. Normieren Sie die Daten.

¹Theoretische Physiker leisten sich die Unsitte, \hbar und c gleich Eins zu setzen, Experimentalphysiker mögen *arbitrary units*. So bleibt das Leben spannend!

²Wenn Sie das nicht wissen, gehen Sie zurück auf Theorie 3. Gehen Sie nicht über das Prüfungsamt und sammeln Sie nicht 9 ECTS-Punkte ein.