

|  |                           |   |
|--|---------------------------|---|
| Universität Bielefeld<br>Fakultät für Physik | Computerphysik<br>SS 2012 | Prof. Dr. Jürgen Schnack<br>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*.<sup>1</sup> 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,<sup>2</sup> 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  $\infty$ . 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.

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

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