

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

Aufgabenblatt 7

7.1 Nullstellensuche

Gegeben sei eine reelle Funktion, von der Sie wissen, dass sie von einer reellen Unabhängigen abhängt und dass sie mehrere Nullstellen im Intervall $[-20, 20]$ besitzt. Finden Sie diese Nullstellen mit einem Verfahren Ihrer Wahl.

Alle Dateien, die Sie benötigen, befinden sich in dem zur Verfügung gestellten Archiv. Im Hauptprogramm `nullsuche.c` werden die Funktionswerte über die Funktion `funktion1(x)` zur Verfügung gestellt. Diese Funktion liegt nur als Objekt-Datei vor; Sie wissen also nicht, was drin steht. Ergänzen Sie das Programm `nullsuche.c`, so dass es die Nullstellen findet. Zum Compilieren und Linken geben Sie den folgenden Befehl ein:

```
gcc -o nullsuche nullsuche.c funktion1.o
```

7.2 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!

- d. 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!