Universität Bielefeld	Computerphysik	Prof. Dr. Jürgen Schnack
Fakultät für Physik	SS 2016	jschnack@uni-bielefeld.de

Aufgabenblatt 1

1.1 Einarbeitung im Computerkabinett (Präsenz, 12.+13. 4. 2016)

Erarbeiten Sie im Computerkabinett zusammen mit den Tutoren die folgenden Punkte.

- a. Einschalten und Linux booten;
- b. Account zugewiesen bekommen, einloggen und neues Password setzen.
- c. Vertraut machen mit dem LINUX-System: xterm, einfache Kommandos im xterm (ls, cd, pwd, mkdir, ...);
- d. Mathematica aufrufen, 1+1 berechnen, notebook speichern;
- e. USB-Stick einstecken, Verzeichnis suchen, Mathematica-Notebook auf eigenen Stick kopieren;
- f. Browser finden, Spiegel online aufrufen und sofort zum nächsten Punkt weitergehen;
- g. http://freeengineer.org/learnUNIXin10minutes.html Hier lernen Sie UNIX in 10 Minuten;
- h. Mathematica aufrufen und die Hilfe und Tutorien anschauen;
- i. Tutoren nach Dingen fragen, die Sie interessieren oder die Sie nicht verstehen;
- j. Rechner herunterfahren.

Sie können die verbleibende Übungszeit nutzen, um mit den folgenden Aufgaben zu beginnen, die zur nächsten Woche auf sind.

1.2 Arbeit mit Funktionen in Mathematica (Hausaufgabe + Email, Einsendeschluss Mitternacht vor der Übung am 19./20. 4. 2016)

a. Wenn Sie Mathematica noch nicht installiert haben, beschaffen Sie sich einen Aktivierungskey von der Physikfachschaft und installieren Sie Mathematica.

Wenn Sie mit einem anderen Programm (z.B. Maple oder Maxima) arbeiten wollen, können Sie das gern tun. Sie sollten dann den Tutoren neben den entsprechenden Notebooks immer auch ein pdf zukommen lassen, da wir z.B. Maple nicht betreiben.

- b. 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 $x \neq 0$.
- c. Differenzieren Sie f(x) und stellen Sie die Ableitung zusammen mit f(x) graphisch dar.
- d. 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.
- e. **Zusatzaufgabe:** Lösen Sie diese Probleme mit Maxima, einem freien Mathematica ähnlichen Programm. Diese Lösung würde ich gern im Wiki auf stud.ip veröffentlichen.

1.3 Bearbeiten von Daten (Hausaufgabe + Übung am 19./20. 4. 2016)

Bereiten Sie diese Übung zu Hause so weit vor, wie Sie kommen und diskutieren Sie Ihre Ideen in der Übung.

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. 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.

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

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

Dabei ist s(T) die Entropie pro Spin. Für $T \to \infty$ kann man zeigen,² dass $s \to k_B \ln(2)$.

b. 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 nutzen Sie, 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!

²Sie lernen das in Theorie III.