

Aufgabenblatt 3

3.1 Gleichverteilungssatz

Leiten Sie den verallgemeinerten Gleichverteilungssatz für unabhängige Glieder der Hamiltonfunktion der Form αx^n für gerade n her. α sei dabei größer Null.

3.2 Nose-Hoover-Thermostat

- a. Laden Sie das Mathematica-Notebook **NH-1.nb** herunter und studieren Sie es.
- b. Warum stimmt die zeitgemittelte potentielle Energie des äußeren harmonischen Oszillators im Gegensatz zur kinetischen Energie nicht mit dem Gleichverteilungssatz überein?
- c. Ermitteln Sie mit dem Notebook die mittlere Energie des Coulombgases für $N = 5$ als Funktion der Temperatur und vergleichen Sie mit Ihren Kommilitonen.
- d. Modifizieren Sie das Notebook wie folgt: Ersetzen Sie die Coulomb-Wechselwirkung durch das Lennard-Jones-(12,6)-Potential und reparieren Sie auch die kinetische Energie entsprechend (Einheiten). Schalten Sie das äußere Potential des harmonischen Oszillators aus. Ermitteln Sie jetzt für kleine Temperaturen die mittlere Energie als Funktion der Temperatur für das Argon-Cluster mit $N = 13$. Welches Problem tritt bei größeren Temperaturen auf?