



## Übungen zur Computerphysik, WS 2007/08

### 7. Übung

(Besprechung am 12.12.2007)

#### **Aufgabe 22** „maxwell boundary“

Programmieren Sie eine „molecular - dynamics - simulation“ (vgl. Alg. „event - disks“) mit Maxwell RB nach Algorithmus „maxwell boundary“. Anstelle einer Box verwenden sie eine Röhre mit  $L_x \gg L_y$  (z.B. 1000:1). An den horizontalen Wänden (Seiten der Röhre) sollen die bekannten reflektierenden Bedingungen gelten und Maxwell RB an den vertikalen Wänden (Enden der Röhre).

(Stellen Sie sicher, dass positive x-Geschwindigkeiten an der linken Wand erzeugt werden und umgekehrt). Lassen Sie die Maxwell RB mit 2 unterschiedlichen Temperaturen verknüpft sein,  $T_{left}$  und  $T_{right}$ . Können Sie entlang der x-Achse eine Temperaturverteilung messen?

#### **Aufgabe 23** „harmonic wavefunction“

Benutzen Sie den Algorithmus „harmonic wavefunction“ um die Wellenfunktionen  $\{\Psi_0^{h.o.}(x), \dots, \Psi_{20}^{h.o.}(x)\}$  auf einem feinen Gitter im Intervall  $x \in [-5, 5]$  zu erzeugen. Überzeugen Sie sich davon, dass die Wellenfunktionen normiert und orthogonal sind und außerdem die Schrödingergleichung lösen. (für  $\hbar = m = \omega = 1$ ; Ausgabe einer Tabelle)  
Hinweis: Auf einem Gitter ergibt sich der Gradient zu:

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x_k) \simeq \frac{\Psi(x_{k+1}) - \Psi(x_k)}{\Delta_x}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x_k) \simeq \frac{\Psi(x_{k+1}) - 2*\Psi(x_k) + \Psi(x_{k-1}))}{\Delta_x^2}$$

#### **Aufgabe 24** „harmonic density“

Bestimmen Sie mit Hilfe der Algorithmen „harmonic density“ und „harmonic wavefunction“ die Dichtematrix des harmonischen Oszillators. Plotten Sie die diagonale Dichtematrix  $\rho^{h.o.}(x, x, \beta)$  für verschiedene Temperaturen.