

Prof. Dr. Harald Engel
Dr. Jan F. Totz

3. Übungsblatt – TP VI: Statistische Physik des Gleichgewichts

Abgabe: Bis Fr. 23.11.2018 14:00 Uhr im EW 148

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden sehr ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte das Deckblatt von der Homepage verwenden! Die Abgabe erfolgt in Zweiergruppen.

Aufgabe 5 (20 Punkte): Toda Kette

Betrachten Sie eine eindimensionale offene Kette aus N gekoppelten Oszillatoren, deren Hamiltonian gegeben ist durch:

$$H = H(\underline{q}, \underline{p}) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m} + V(q_{i+1} - q_i) \right).$$

Untersuchen Sie numerisch den Einfluss von nichtlinearer Kopplung bezüglich der Energieverteilung auf die Freiheitsgrade des Systems. Führen Sie Ihre numerische Simulationen für $N = 1024$ Oszillatoren für 200 bis 1000 Perioden der langsamsten Mode des Systems mit Hilfe des Euler- oder Verlet-Verfahrens durch. Verwenden Sie Dirichlet-Randbedingungen, die gegeben sind durch: $q_0 = q_{N+1} = 0$. Stellen Sie Ihre Ergebnisse in einem Raumzeitdiagramm dar (Raum/Index und Zeit als Achsen, Oszillatorauslenkungen q_n farblich) und plotten Sie den zeitlichen Verlauf der Energiemoden $E_k = 1/2(\dot{A}_k^2 + \omega_k A_k)$ mit Fourierkoeffizienten

$$A_k = \sqrt{2/N} \sum_{l=1}^N q_l \sin(lk\pi/N + 1).$$

Interpretieren Sie Ihre numerischen Ergebnisse ausführlich und insbesondere in Bezug auf Energieerhaltung, -gleichverteilung und Ergodizität.

- (a) Wie verteilt sich die Energie für harmonisch gekoppelten Oszillatoren mit dem Potential $V(r) = ab/2 r^2$? Geben sie eine analytische Begründung und simulieren Sie das System mit einer passenden Anfangsbedingung numerisch.
- (b) Wiederholen Sie die Simulation für das nichtlineare Toda-Potential

$$V(r) = \frac{a}{b} \left(e^{-br} + br - 1 \right)$$

und finden Sie für eine kleine Amplitude a/b der Nichtlinearität eine sich zeitlich periodisch wiederholende Dynamik. Verwenden Sie als Anfangsbedingung die Grundmode des harmonischen Systems mit einer geringen Anfangsenergie.

- (c) Finden Sie für eine kleine Amplitude a/b der Nichtlinearität Solitonen. Verwenden Sie als Anfangsbedingung eine hohe Harmonische des harmonischen Systems mit einer großen Anfangsenergie.
- (d) Finden Sie für eine große Amplitude a/b der Nichtlinearität den Fall, dass das System thermalisiert.
- (e) (Bonus) Wiederholen Sie die numerischen Simulationen für den Fall, dass die Oszillatoren an ein Wärmebad koppeln und/oder periodische Randbedingungen.

3. Übung WS 18/19

- | | |
|-------------------------|---|
| Vorlesung: | <ul style="list-style-type: none">• Di 10:00 Uhr – 12:00 Uhr im EW 202• Do 14:00 Uhr – 16:00 Uhr im EW 202 |
| Übung: | <ul style="list-style-type: none">• Mi 14:00 Uhr – 16:00 Uhr im EW 731 |
| Website: | <ul style="list-style-type: none">• http://www.tu-berlin.de/?198939 |
| Scheinkriterien: | <ul style="list-style-type: none">• Mindestens 50% der Übungspunkte• Regelmäßige und aktive Teilnahme am Tutorium• Abgeschlossene Projektarbeit |