

Leistungsnachweis 1:

Monte-Carlo Simulationen

Nutzen Sie das Softwarepaket LeMonADE (github.com/LeMonADE-project/LeMonADE) oder die Python-Klassen von vorherigen Übungen zur Lösung der folgenden Aufgaben. Für die Bewertung stellen Sie ein *kurzes* Protokoll mit dem groben Arbeitsablauf und den Antworten zu den Fragen zusammen. Binden Sie ihre Simulationsergebnisse entsprechend als Bilder, Diagramme oder Tabellen ein. Das Protokoll ist am Ende der Einheit per mail abzugeben, die benutzten main-Funktionen und *eigener* Quellcode als zip oder tar Archiv.

Adsorption von Monomeren

1. Erstellen Sie eine Startkonformation mit 512 einzelnen Monomeren in einer kubischen Box mit 64^3 Gitterplätzen.
2. Implementieren Sie absorbierenden Wände um diese Monomere an zwei gegenüberliegenden Wänden mit verschiedenen Adsorptionsenergien $\epsilon[0, 10]$ zu simulieren. Messen Sie die mittlere Anzahl adsorbierter Monomere.
3. Tragen Sie die Adsorptionsisotherme $N_{ads}/N(\epsilon)$ auf und vergleichen Sie mit der analytischen Vorhersage der Boltzmann Statistik

$$\frac{N_{ads}}{N}(\epsilon) = \frac{\exp(\epsilon/k_B T)}{\exp(\epsilon/k_B T) + V_0/V_{abs}}$$

4. Leiten Sie diesen Ausdruck her. Nehmen Sie als Ausgangspunkt die Entropie des idealen Gases $S = S(T) - k_B N \ln(V/v_0 N)$.

Ising Modell

1. Nutzen Sie die Materialien der Übung über das Ising Modell um die magnetische Suszeptibilität aus den Fluktuationen der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen über- und unterhalb der kritischen Temperatur zu bestimmen. Was erwarten Sie in der Nähe der kritischen Temperatur?