

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.

Ising Model

1. Nutzen Sie die Materialien der Übung über das 2D Ising Modell. Berechnen Sie die magnetische Suszeptibilität aus den Fluktuationen der Magnetisierung für verschiedene Temperaturen über- und unterhalb der kritischen Temperatur ohne externes Magnetfeld. Was erwarten Sie in der Nähe der kritischen Temperatur?

Self Avoiding Walk

1. Erschaffen Sie mit LeMonADE eine große Anzahl an selbstvermeidenden Zufallspfaden (SAW) für 6 verschiedene Polymerisationsgrade N im Bereich von $[10, 1000]$. Benutzen Sie dazu das FeatureExcludedVolumeSc. Was beobachten Sie (qualitativ) hinsichtlich der Zeitdauer für die Erschaffung der Pfade als Funktion von N (wächst diese linear)?
2. Berechnen Sie End-zu-End Abstände und Gyrationenradien der SAW und vergleichen Sie mit theoretischen Vorhersagen. Welchem Polymermodell entspricht der SAW? Welche fraktale Dimension haben Ihre Systeme (aus Daten bestimmen)?
3. Berechnen Sie die Streufunktion $S(q)$ um die in Aufgabe 2 getroffenen Aussagen mit einer zweiten Methode zu verifizieren. Benutzen Sie dazu den AnalyzerScatteringFunction und beachten Sie, dass der SAW dazu ausreichend groß sein sollte. Vergleichen Sie die Ergebnisse für die Fraktale Dimension mit der vorherigen Aufgabe.