

NUMERISCHE METHODEN IN DER PHYSIK

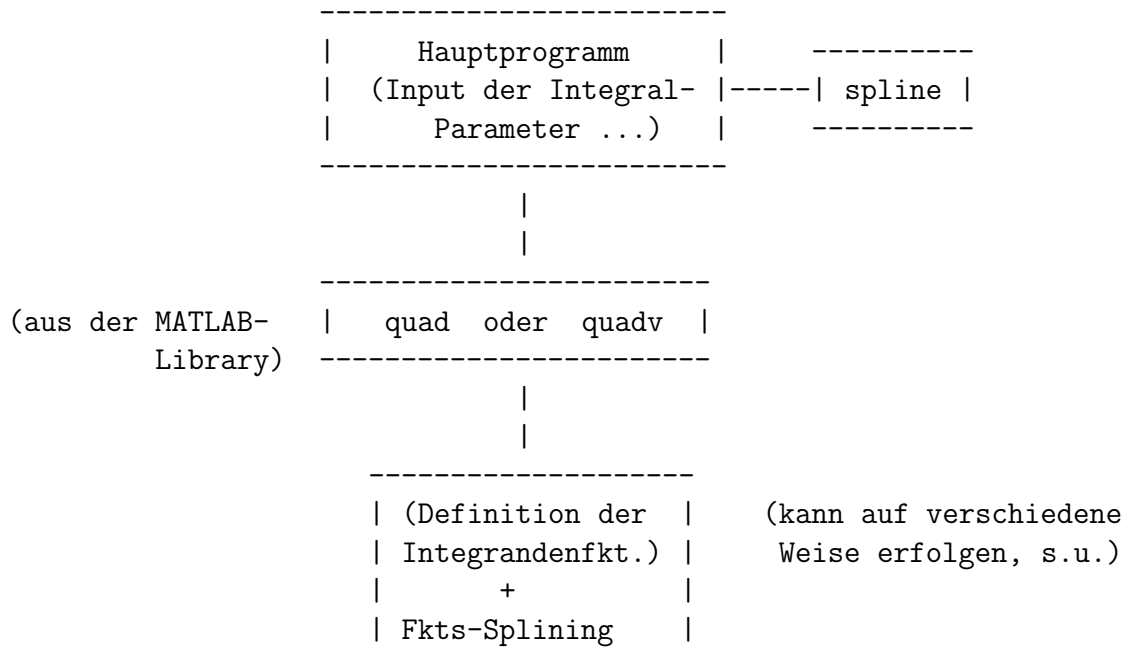
Erste Übung WS 2012/2013 [MATLAB]

Numerische Auswertung bestimmter Integrale mittels MATLAB-Funktionen

Die zu verwendenden Matlab-Programme sind

quad.m adaptive recursive Simpson's rule
quadv.m

Struktur des Gesamtprogrammes:



- Diese erste Übung dient neben der Lösung eines physikalisch interessanten Problems auch als *Einstiegsproblem*, um Ihre MATLAB-Kenntnisse aufzufrischen. Aus diesem Grund finden Sie auf dem File *integral_test.m* das vollständige Listing eines Testprogramms, das ein konkretes Integrationsproblem (1. Aufgabe) mittels einer der von MATLAB angebotenen Quadratur-Routinen numerisch löst.

Programmstruktur MATLAB

```
% MATLAB-Program   integral_test
% Dieses Programm berechnet das bestimmte Integral-Testproblem
% mittels der von MATLAB angebotenen Funktionen
% QUAD (adaptive Simpson-Quadratur)

% H. Sormann   4-10-2000
% Last Update 30- 9-2010

clear all

% Exakter Integralwert fuer a=0:
exakt=pi^2/12 - 0.5*log(2)^2;

% Eingabe der absoluten Toleranz:
abstol=1.e-7;

% numerisches Integrationsergebnis = result
% Zahl der benoetigten Funktionswerte = number

% Wie Sie der Programm-Beschreibung von QUAD entnehmen
% koennen, gibt es verschiedene Moeglichkeiten, die zu integrierende
% Funktion zu definieren. Im folgenden sind einige einfache Moeglich-
% keiten angegeben.
%
% a=0.5;
% F=@(x)log(1+x)./x./(1+x).*exp(-a*x);   % Achtung: Vektor-Operatoren !!
% [result,number]=quad(F,0.0,1.0,abstol);
%
% oder
%
% F=inline('log(1+x)./x./(1+x).*exp(-a*x)');
% [result,number]=quad(F,0.0,1.0,abstol);
%
% oder noch kompakter:
%
% [result,number]=quad(@(x)log(1+x)./x./(1+x).*exp(-a*x),0.0,1.0,abstol);
%
%
```

```

%
% Im Folgenden soll nun die Aufgabe 1 geloest werden, wobei der Integrand
% in einem eigenen Matlab-Skript mit dem Namen "integrand.m"
% definiert ist (s.u.). Die Rechnung soll fuer 5 Werte des globalen
% Parameters a durchgefuehrt werden, wobei der jeweilige Wert von a
% ueber eine Global-Definition an das Programm "integrand.m"
% uebermittelt wird:

    global a
    af=[0 0.2 0.5 1.0 2.0];
    for i=1:length(af)
        a=af(i);
        [result,number]=quad(@integrand,0.0,1.0,abstol);

        if(i==1)
% Berechnung des erreichten absoluten Fehlers:
            absError=abs(result-exakt);
% Ausgabe auf Bildschirm:
            fprintf('\nNUM. METH. IN DER PHYSIK WS 2010/2011  MATLAB  \n');
            fprintf('PROGRAMM = integral_test.m\n');
            fprintf('INTEGRAL-TESTPROBLEM fuer a = 0.0\n');
            fprintf('EXAKT =          %12.10f\n',exakt);
            fprintf('Ergebnis =      %12.10f\n',result);
            fprintf('geforderte Gen. (abs) = %12.6e\n',abstol);
            fprintf('erreichte Gen. (abs) = %12.6e\n',absError);
            fprintf('Dazu waren %5i Funktionsaufrufe noetig.\n\n',number);
            fprintf('          a          ergeb\n');
        end
        fprintf('%5i  %7.3f  %10.7f\n',number,a,result);
    end

% So sieht das Matlab-Skript "integrand.m" aus:
%
%     function fct = integrand(x)
%         global a
%         fct=log(1+x)./x./(1+x).*exp(-a*x);    % Vektor-Operatoren !!
%

```

Eine genauere Beschreibung des Programmes *quad.m* mit verschiedenen Variationsmoeglichkeiten erhalten Sie im Matlab-Fenster, wenn Sie

```
help quad
```

eingeben.

1. Aufgabe

Austesten der MATLAB-Programme *quad* und *quadv* durch Anwendung auf das bestimmte Integral

$$I(a) = \int_0^1 dx \frac{\ln(1+x)}{x(1+x)} e^{-ax},$$

wobei a ein reeller, positiver Parameter ist. Für $a = 0$ ist dieses Integral exakt lösbar:

$$I(0) = \frac{\pi^2}{12} - \frac{1}{2}(\ln 2)^2 = 0.5822405265\dots$$

Berechnen Sie auf numerischem Weg die Werte $I(a)$ für $a = 0/0.2/0.5/1.0/2.0$, wobei jeweils die Unterschreitung des absoluten Fehlers 10^{-7} gefordert ist.

Testergebnis mittels *quad* für $a=0$:

```
NUM. METH. IN DER PHYSIK  WS 2009/2010  MATLAB  QUAD
PROGRAMM = integral_0.m
INTEGRAL-TESTPROBLEM
```

```
EXAKT =          0.5822405265
Ergebnis =      0.5822405293
```

```
geforderte Gen. (abs) = 1.000000e-07
erreichte Gen. (abs) = 2.789027e-09
Dazu waren      26 Funktionsaufrufe noetig.
```

Die gesamten numerischen Werte lauten:

a	Ergebnis	Zahl der Fkts.aufrufe
0.0	0.5822405	26
0.2	0.5369832	26
0.5	0.4784139	26
1.0	0.4005981	34
2.0	0.2954009	42

Die obigen 5 Integrale unterscheiden sich nur durch verschiedene Werte von a . In einem solchen Fall bietet Matlab die sehr praktische Routine *quadv.m* an, die es ermöglicht, diese 5 Integrale sozusagen synchron zu rechnen.

Wie das funktioniert, sehen Sie sofort an den folgenden Ausschnitten aus den Matlab-Programmen:

Alte Version:

```
global a
af=[0 0.2 0.5 1.0 2.0];
for i=1:length(af)
    a=af(i);
    [result,number]=quad(@integrand,0.0,1.0,abstol);
    fprintf('%5i   %7.3f   %10.7f\n',number,a,result);
end
```

mit dem matlab-Skript `integrand.m`

```
function fct = integrand(x)
    global a
    fct=log(1+x)./x./(1+x).*exp(-a*x); % Vektor-Operatoren bzgl. x !
```

Neue Version:

```
global af
af=[0 0.2 0.5 1.0 2.0]';
[result,number]=quadv(@integrandV,0.0,1.0,abstol)
fprintf('\nZahl der Aufrufe = %5i\n\n',number);
fprintf('    a        ergebn');
fprintf('%7.3f   %10.7f\n',[af result]');
```

mit dem matlab-Skript `integrandV.m`

```
function fct = integrandV(x)
    global af
    fct=log(1+x)/x/(1+x)*exp(-af*x); % Vektor-Operatoren bzgl. af !
```

2. Aufgabe

Interpolation einer Punktmenge mittels des Matlab-Routine *spline.m* für das folgende Beispiel:

Die gegebene Punktmenge lautet:

x	y
1.0	0.2
1.25	-0.1
1.5	-0.6
1.75	0.0
2.0	0.5

Die einfachste Matlab-Lösung dieses Problems könnte wie folgt aussehen:

```
x=[1.0 1.25 1.50 1.75 2.0];
y=[0.2 -0.1 -0.6 0.0 0.5];

xspl=linspace(1.0,2.0,1000);
yspl=spline(x,y,xspl);
plot(xspl,yspl,'k-',x,y,'ko');
axis([1 2.0 -0.7 0.7]);
grid on
xlabel('X'); ylabel('Y'); legend('Spline-Interpolation','Stuetzpunkte');
```

Diese einfache Vorgangsweise hat Nachteile, wenn in einem grösseren Zusammenhang immer wieder Interpolationen ein und derselben Punktmenge für vorher nicht bekannte Argumente durchgeführt werden müssen.

In einem solchen Fall wäre es unökonomisch, die Routine *spline* immer wieder aufzurufen, weil dann jedesmal dieselben Spline-Koeffizienten (s. Skriptum, Abschnitt 3.2.1) aufs Neue berechnet werden.

Viel besser ist es, die Spline-Koeffizienten ein für alle Mal zu berechnen, und diese (gespeicherten) Werte immer wieder aufs neue anzuwenden. Im Folgenden wird gezeigt, wie das geht:

Einmalige Berechnung der Spline-Koeffizienten:

```
x=[1.0 1.25 1.50 1.75 2.0];
y=[0.2 -0.1 -0.6 0.0 0.5];

pp=spline(x,y);
```

Ab nun können die auf *pp* abgespeicherten Spline-Koeffizienten auf beliebige (neue) Stützpunktvektoren *xspl* angewendet werden:

```
yspl=ppval(pp,xspl);

plot(xspl,yspl,'r-');
axis([1.0 2.0 -0.7 0.7]);
```

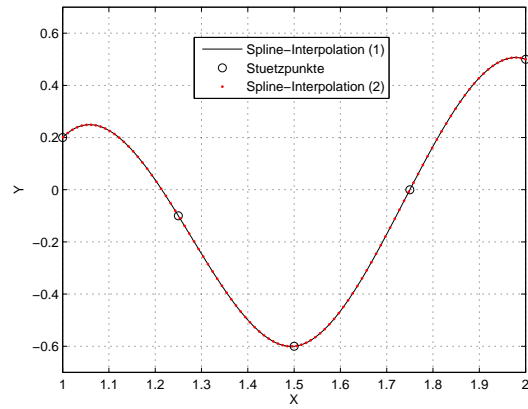


Figure 1: Demonstration einer Spline-Interpolation (Aufgabe 2).

Verwenden Sie diese Methode für die Spline-Interpolation der elektronischen Zustandsdichte in der nächsten Aufgabe.

3. Aufgabe

Numerische Berechnung der Wärmekapazität der Elektronen in Metallen

1. Problemstellung:

Obwohl die theoretischen Grundlagen dieses physikalischen Problems in der statistischen Physik, der Quantentheorie und der Festkörperphysik "beheimatet" sind, also in Fachgebieten, die Sie zum grössten Teil noch vor sich haben, wird es Ihnen keine Schwierigkeiten bereiten, die Basisphysik dieser Übungsaufgabe zu verstehen:

- **erste Aussage:** um die Temperatur eines Körpers zu erhöhen, muss dem Körper Energie zugeführt werden, d.h.: die innere Energie eines Körpers ist eine Funktion seiner (absoluten) Temperatur (in Kelvin):

$$E = E(T). \quad (1)$$

- **zweite Aussage:** diese innere Energie ist die Summe der Energien aller Teilchen, aus welchen der Körper besteht. Da sich ein metallischer Festkörper aus seinem (regelmässigen) Ionengitter und den in diesem Gitter relativ frei beweglichen Elektronen zusammensetzt, wird dessen Thermodynamik durch die *innere Energie des Ionengitters* und durch die *innere Energie der Metallelektronen* bestimmt:

$$E(T) = E_{ion}(T) + E_e(T) \quad (2)$$

In dieser Übung geht es um den elektronischen Anteil der Gesamtenergie. Wegen des regelmässigen (periodischen) Aufbaus des Kristalls genügt es, die Verhältnisse in einer *Einheitszelle* Ω_0 zu untersuchen. Daraus folgt die *Energiedichte*

$$u_e(T) = \frac{E_e(T)}{\Omega_0} = \frac{1}{\Omega_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \epsilon N(\epsilon) f(\epsilon, T). \quad (3)$$

Diese Formel für die innere Energiedichte eines Elektronengases in einem kristallinen Festkörper ist nicht schwer zu verstehen:

ϵ ist die Energie irgendeines Elektronenzustandes, die Funktion $N(\epsilon)$ ist die Dichte der quantenmechanisch zur Verfügung stehenden Elektronenzustände, und $f(\epsilon, T)$ gibt an, mit welcher statistischen Wahrscheinlichkeit ein Quantenzustand der Energie ϵ bei einer absoluten Temperatur T von einem Elektron besetzt wird: da es sich bei den Elektronen um *fermionische* Elementarteilchen handelt, gilt die Ihnen sicher bereits bekannte *Fermi-Dirac*-Statistik mit der Verteilungsformel

$$f(\epsilon, T) = \frac{1}{e^{[\epsilon - \mu(T)]/k_B T} + 1} \quad (4)$$

wobei die Funktion $\mu(T)$ das *chemische Potential* des Elektronengases darstellt.

Summiert (bzw. integriert) man im Sinne von Gl. (3) über den gesamten Energieraum, erhält man die Gesamtenergie E_e der Metallelektronen im Volumen Ω_0 (bzw. deren Energiedichte) bei der Temperatur T

$$u_e(T) = \frac{1}{\Omega_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \epsilon N(\epsilon) \frac{1}{e^{[\epsilon - \mu(T)]/k_B T} + 1}. \quad (5)$$

Wichtiger als diese Gesamtenergie ist für die Thermodynamik des Festkörpers die Angabe darüber, wie sich die innere Energie unter Variation von T verändert. Die entsprechende Grösse

$$c_v(T) = \frac{\partial}{\partial T} u_e(T) \quad (6)$$

nennt man die *Wärmekapazität (heat capacity)* pro Volumeneinheit der Elektronen im Festkörper mit der Dimension $J/(m^3 K)$.

Eine wichtige Grösse, die zur Auswertung von Gl. (5) erforderlich ist, ist die schon erwähnte *Zustandsdichte (density-of-states DOS)* des Elektronengases. Diese materialabhängige Funktion, welche die Dimension einer inversen Energie (meist $1/eV$) hat, kann mit Hilfe moderner *Bandstrukturprogramme* sehr genau berechnet werden. Alle DOS-Funktionen, die Sie für diese Übung benötigen, stehen zum Downloaden zur Verfügung.

Bevor über die numerische Berechnung von $c_v(T)$ gesprochen wird, folgt noch eine kurze Wiederholung der Fermi-Dirac-Formel:

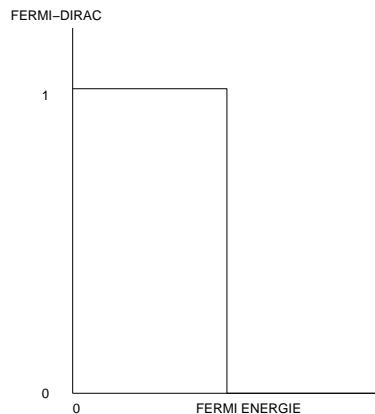
Um diese Formel zu verstehen, geht man am besten vom absoluten Temperatur-Nullpunkt

$$f(\epsilon, 0) = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{1}{e^{[\epsilon - \mu(T)]/k_B T} + 1} = \Theta(\mu(0) - \epsilon) \quad (7)$$

aus, wobei Θ die *Stufenfunktion (Heaviside function)* mit der Eigenschaft

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ 1 & \text{für } x > 0 \end{cases}$$

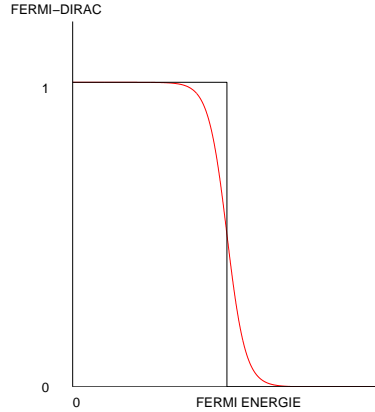
ist. Somit ergibt sich Gl. (7) in der Form



Am absoluten Nullpunkt sind alle quantenmechanisch möglichen Energiezustände bis zur Energie $\mu(0)$ sicher besetzt (Besetzungswahrscheinlichkeit = 1), und ab dieser Energie sind alle Zustände sicher unbesetzt (Besetzungswahrscheinlichkeit = 0). Die Energie, bei welcher der Sprung von 1 auf 0 (Fermi-Kante) erfolgt, heisst die *Fermienergie*:

$$\mu(0) = \epsilon_F . \quad (8)$$

Erhöht man nun die Temperatur, kommt es durch thermische Anregung der Elektronen zu einer "Abschmierung" der Fermi-Kante:



Eine noch nicht diskutierte Frage ist die Abhängigkeit des chemischen Potentials von der Temperatur. Im Mittelpunkt dieser Diskussion steht eine Gleichung, welche der Gl. (5) sehr ähnlich ist, bis auf einen bedeutsamen Unterschied:

$$Z_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon N(\epsilon) \frac{1}{e^{[\epsilon-\mu(T)]/k_B T} + 1} . \quad (9)$$

Was bedeutet das Integral auf der rechten Seite dieser Gleichung? Es handelt sich offenbar um die Integration über alle - bei einer bestimmten Temperatur - besetzten Energiewerte, und der Wert dieses Integrals muss natürlich die (bekannte) *Zahl der Valenzelektronen in der Einheitszelle Ω_0 sein!*

D.h., die Gl. (9) kann als *implizite Bestimmungsgleichung* für die Funktion $\mu(T)$ angesehen werden. Für jede gewählte Temperatur T muss der Wert von μ genauso lauten, dass das Integral in Gl. (9) exakt die Zahl Z_0 ergibt.

Wurde das chemische Potential des Elektronengases $\mu(T)$ auf diese Weise bestimmt, sind im Prinzip alle Grössen bekannt, die man zur numerischen Auswertung der Gleichungen (5) und (6) benötigt:

$$c_v(T) = \frac{1}{\Omega_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \epsilon N(\epsilon) \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{e^{[\epsilon-\mu(T)]/k_B T} + 1} \right\} . \quad (10)$$

Für die konkreten Rechnungen wird aus praktischen Gründen die Energieskala so gewählt, dass die Fermienergie den Wert Null hat. Diese Skalenschiebung hat keinen Einfluss auf das Ergebnis $c_v(T)$, und die aus Glg.

(9) resultierenden Werte $\mu(T)$ bedeuten dann einfach die Abweichungen von der Fermienergie.

Eine analytische Durchführung der Ableitung nach T in Gl. (10) führt zum Resultat

$$c_v(T) = -\frac{1}{\Omega_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \epsilon N(\epsilon) \frac{\exp[x(T)]}{\{\exp[x(T)] + 1\}^2} \frac{dx(T)}{dT} \quad (11)$$

mit

$$x \equiv \frac{\epsilon - \mu(T)}{k_B T}, \quad (12)$$

$$\frac{dx(T)}{dT} = [-\mu'(T)T - \epsilon + \mu(T)] / [k_B T^2] \quad (13)$$

und

$$\mu'(T) = \frac{d\mu(T)}{dT}. \quad (14)$$

Das Folgende ohne Beweis:¹ Für nicht zu grosse Temperaturen und für Metalle mit ausgeprägt kräftefreien Valenzelektronen (Alkalimetalle, Aluminium, Magnesium, Kupfer?,...) hat A. Sommerfeld schon in den 20er-Jahren des vorigen Jahrhunderts einen sehr einfachen Ausdruck für $c_v(T)$ angegeben, nämlich den linearen Zusammenhang

$$c_v(T) = \frac{\pi^2}{3\Omega_0} N(0) k_B^2 T. \quad (15)$$

Beachten Sie, dass wegen der oben erfolgten Verschiebung der Energie-Skala $\epsilon = 0$ die Fermi-Energie ϵ_F bedeutet: $N(0)$ bedeutet also *die Zustandsdichte der Elektronen an der "Fermi-Kante"*.

2. Die numerische Auswertung von $c_v(T)$

soll nun für die Metalle Natrium, Kupfer und Platin durchgeführt werden. Dabei kann für den interessierenden Temperaturbereich eine wesentliche Vereinfachung der obigen Formeln erfolgen: Testrechnungen haben gezeigt, *dass die Temperaturabhängigkeit des chemischen Potentials $\mu(T)$ vernachlässigbar klein ist!*

Das bedeutet, dass in den Gleichungen (11)-(14) die folgenden Näherungen gelten:

$$\mu(T) \approx \mu(0) = 0 \quad \text{und} \quad \mu'(T) \approx 0. \quad (16)$$

Unter Berücksichtigung dieser Approximationen erhält man nach kurzer Rechnung

$$c_v(T) = \frac{1}{\Omega_0 k_B T^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \epsilon^2 N(\epsilon) \frac{\exp(\epsilon/k_B T)}{[\exp(\epsilon/k_B T) + 1]^2}. \quad (17)$$

¹Eine genaue Darstellung dieser Sommerfeld-Näherung finden Sie z.B. in meinem Skriptum "Theoretische Festkörperphysik" in den Abschnitten 2.6ff.

Ihre Aufgabe besteht nun darin, die Gleichungen (15) und (17) per Computer für Na, Cu und Pt auszuwerten und zu diskutieren.

3. Das leidige Einheitenproblem:

Es ist zwar keine grosse Sache in der Physik, aber immer wieder ein Nervenproblem: "Wie gehe ich mit den Konstanten und Einheiten um, bevor ich die Formeln programmiere?"

Ich möchte Ihnen für diese Übung, bei der es für Sie ja hauptsächlich um die numerischen Probleme bzw. um die physikalische Bedeutung der Resultate geht, diese Arbeit abnehmen:

Wenn Sie c_v als *molare* Wärmekapazität in Einheiten [J/mol/K] nehmen, das Volumen Ω_0 der Einheitszelle in [Bohr³], die Energie ϵ in [eV], die Zustandsdichte N in [1/eV], und die Temperatur in [K], lautet die Formel (17)

$$c_v(T) = 1.2545786 \cdot 10^{13} \frac{m}{\rho} \frac{1}{\Omega_0 T^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \epsilon^2 N(\epsilon) \frac{\exp(x)}{[\exp(x) + 1]^2} \quad (18)$$

mit

$$x = 1.1604155 \cdot 10^4 \frac{\epsilon}{T},$$

und die Sommerfeld-Näherung (15) hat die Form

$$c_v(T) = 26.41409 \frac{m}{\rho} \frac{N(0)}{\Omega_0} T. \quad (19)$$

In den Gleichungen (18) und (19) bedeutet m die Atommasse des Materials (in Gramm) und ρ ist die Dichte in Einheiten [kg/m³].

4. Die Parameter der Rechnung:

	Ω_0 [Bohr ³]	Zustandsdichte $N(\epsilon)$ N in [1/eV], ϵ in [eV]	m	ρ [kg/m ³]	Schmelztemperatur [K]
Na	256.2881	dosNEU_Na	22.99	971	371
Cu	79.6810	dosNEU_Cu	63.55	8960	1357
Pt	101.9794	dosNEU_Pt	195.00	21450	2045

Alle Rechnungen sind im Bereich $100 \leq T \leq 4000$ K durchzuführen, mit einem Inkrement von $\Delta T=100$ K.

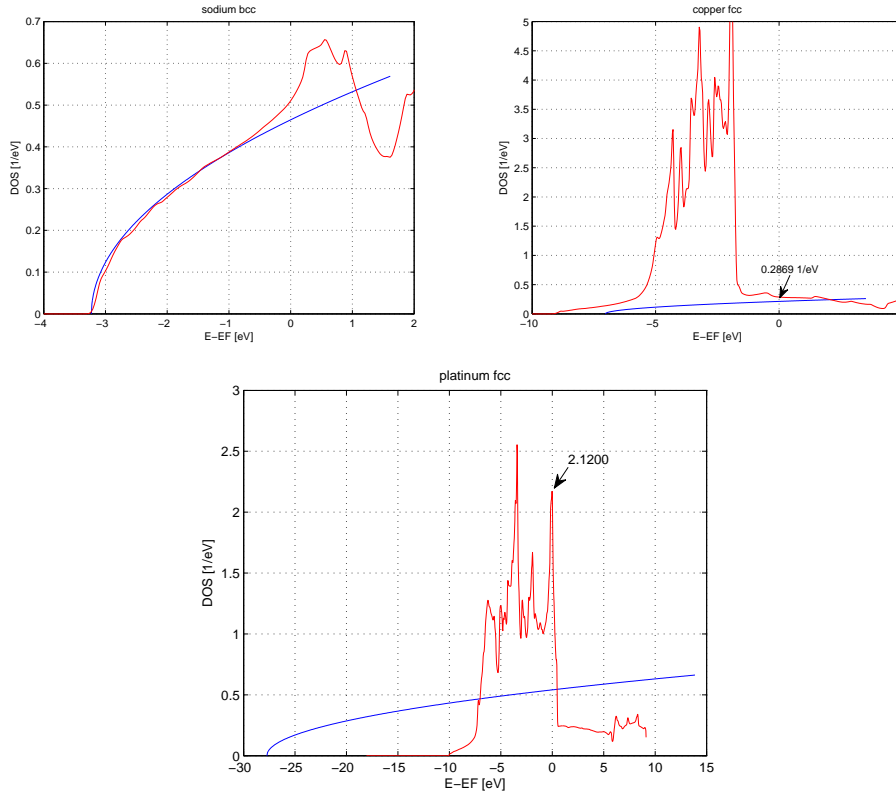
5. Die Zustandsdichten $N(\epsilon)$

für Na, Cu und Pt habe ich mit dem Bandstrukturprogramm WIEN2k² berechnet und unter den oben genannten Filenamen zum Downloaden bereitgestellt. Jeder File gibt in der ersten Zeile die Zahl der Datenpunkte,

²P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, WIEN2k: *An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program*, 2001.

und ab der zweiten Zeile finden Sie in der ersten Spalte die Energie ϵ in [eV] und in der zweiten Spalte die Zustandsdichte N in [1/eV]. $E = 0$ bezeichnet die Fermi-Energie.

In den folgenden Bildern sind die Zustandsdichten der drei Metalle dargestellt:



Diese Diagramme zeigen die DOS der Valenzelektronen in bcc Na (oben links), fcc Cu (oben rechts) und fcc Pt (unten), wobei die roten Kurven die DOS-Ergebnisse aus dem Bandstrukturprogramm WIEN2k darstellen. Die Energieskalen sind so gewählt, dass 0 die Fermienergie bedeutet.

Die blauen Kurven zeigen nun die entsprechenden "Sommerfeld"-Zustandsdichten; dies sind jene DOS-Kurven, welche den einfachen linearen Zusammenhang zwischen der Wärmekapazität c_v und der Temperatur T ergeben, die in Glg. (19) beschrieben ist.

Daraus kann man das Folgende ableiten:

- Beim Natrium ist die Übereinstimmung zwischen der "roten" und der "blauen" DOS-Kurve relativ gut, nur im Bereich der Fermienergie und darüber gibt es Abweichungen. Es ist also zu erwarten, dass die Näherungslösung (19) gut zum exakten Ergebnis (18) passen wird.
- Beim Kupfer scheint auf dem ersten Blick die "blaue" nichts mit der "roten" Kurve gemein zu haben. Dies ist jedoch nicht so: man kann

nämlich zeigen, dass bei der Formel (18) der grösste Beitrag zum Integral aus dem Bereich um die Fermienergie kommt, und dort sind die beiden Kurven relativ nahe beieinander. Es ist also auch beim Cu zu hoffen, dass die "Sommerfeld-Näherung" nicht weit vom exakten Ergebnis entfernt sein wird.

- Beim Platin ist es aber klar: hier hat die "blaue" keinerlei Ähnlichkeit mit der "roten" Kurve, insbesondere auch nicht im kritischen Bereich um die Fermienergie. Man muss bei diesem Material davon ausgehen, dass die "Sommerfeld-Approximation" (19) mit der aus Gl. (18) resultierenden exakten Lösung für die molare Wärmekapazität $c_v(T)$ nur sehr schlecht übereinstimmen wird.

6. Die numerische Auswertung der Glg. (18)

ist natürlich Ihre Sache. Ich möchte daher nur auf ein wichtiges Problem eingehen, nämlich auf die Frage: *Wie geht man bei der Integration in Gl. (18) mit der Funktion $N(\epsilon)$ um?*

Das Problem ist, dass Sie im Computer diese Funktion, die nur als Tabelle vorliegt, für jedes beliebige ϵ parat haben müssen. Die übliche Art, mit einer solchen Situation umzugehen, ist die folgende:

- Man berechnet die Spline-Koeffizienten der Tabellenwerte $N(\epsilon)$ mittels des Matlab-Programmes *spline.m*,
- Im Funktionsunterprogramm, wo die Integrandenfunktion ausgewertet wird, verwendet man die mittels *spline.m* einmal berechneten Spline-Koeffizienten, um für jedes gewünschte ϵ den Wert $N(\epsilon)$ zu erhalten (vgl. das Programmschema am Anfang dieser Übungsbeschreibung).

7. Die geforderten Ergebnisse:

- Berechnen Sie die exakten molaren Wärmekapazitätskurven $c_v(T)$ für die Elektronen in Natrium, Kupfer und Platin durch numerische Auswertung der Formel (18), und vergleichen Sie diese Ergebnisse mit den entsprechenden linearen Näherungen gemäss Gl. (19). Erstellen Sie für jedes Material ein eigenes Diagramm für den Temperaturbereich $100 \leq T \leq 4000$ K.
- Es ist natürlich klar, dass Temperaturen bis zu 4000 K hypothetisch sind, da bei diesen Temperaturen die gegebenen Metalle längst keine Festkörper mehr sind. Markieren Sie daher in Ihren Diagrammen die jeweiligen, in der Parameter-Tabelle angegebenen Schmelztemperaturen.
- Überprüfen Sie insbesondere, ob Ihre exakten c_v -Kurven im Grenzfall kleiner Temperaturen ($T \leq 500$ K) die jeweilige "Sommerfeld-Gerade" annähern.