

Computersimulationen von Vielteilchensystemen

Projekt 4: *Pfadintegral Monte Carlo: Harmonischer Oszillator*

Auch Festkörper zeigen bei tiefen Temperaturen quantenmechanische Eigenschaften. Ein Beispiel hierfür ist die Nullpunkts-Energie. Eine Möglichkeit diese zu berechnen liefert der Pfad-Integral-Monte-Carlo (PIMC) Formalismus, welches den Monte-Carlo Formalismus auf Pfadintegrale anwendet. Ein einfaches System, bei dem das exakte quantenmechanische Ergebnis bekannt ist, ist der harmonische Oszillator. In diesem Projekt soll dieser für unterschiedliche Temperaturen und Anzahl an sogenannten Trotter Teilchen durchgeführt und mit den analytischen Ergebnissen verglichen werden.

Durchführung:

- a) Erarbeiten Sie einen Programmablaufplan für die Anwendung des PIMC Formalismus auf ein Teilchen mit mehreren Trotterteilchen im harmonischen Potential (was muss das Programm wann machen, wie sieht ein MC-Schritt aus?).
- b) Schreiben Sie ein PIMC-Programm, welches den Metropolis-Algorithmus bei gegebener Temperatur verwendet. Die Parameter des Systems sollen hierfür flexibel aus einer Datei eingelesen und das Ergebnis mit einzelnen Zwischenschritten in eine andere Datei geschrieben werden.
- c) Verändern Sie systematisch die Zahl an Trotter Teilchen und die Temperatur und machen Sie Statistik.
- d) Vergleichen Sie Ihre Simulationsergebnisse mit den analytischen Erwartungen.
- e) Präsentieren Sie die Grundgedanken des PIMC Algorithmus und beschreiben Sie deren Anwendung auf das gegebene System. Präsentieren Sie Ihre Ergebnisse.

Literatur

- [1] Kai Nordlund, Vorlesungsskript zu „Basics of Monte Carlo simulations“, Helsinki Institute of Physics (2006).
- [2] Frenkel, Smit - Understanding Molecular Simulation
- [3] Feynman, Hibbs - Quantum Mechanics and Path Integrals
- [4] <http://www.dep.fmph.uniba.sk/~martonak/Simulacie/PIMC.pdf>
- [5] <https://courses.physics.illinois.edu/phys466/fa2016/lnotes/pimcnotes.pdf>