Numerische Methoden der Vielteilchenphysik
1. Übung

Erlangen, 23.11.01

1) Klassisches Monte-Carlo

Als Modell eines Quantendots mit effektiv zwei Freiheitsgraden (x, y) betrachten wir im folgenden das N-Teilchen/Elektronen-System

$$H \;=\; T \;+\; V \;=\; \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} \;+\; \sum_{i=1}^{N} \frac{m\omega^2}{2} r_i^2 \;+\; \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \;\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \, |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

im kanonischen Zustand $\exp(-\beta H)/Z$ wobei $Z = \mathrm{Tr}\exp(-\beta H)$ mit $\beta = 1/k_B T$.

Die in Einheiten von $k_B T$ skalierte potentielle Energie läßt sich dabei als Funktion der Parameter $\alpha = m\omega^2 a_0^2 / 2k_B T$ und $\gamma = e^2/4\pi\varepsilon_0 a_0 k_B T$ ausdrücken als

$$\beta V \;=\; \alpha \sum_{i=1}^{N} r_i^2 \;+\; \gamma \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \;\frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}\,,$$

wobei die Positionen r in Bohrschen Radien a_0 skaliert wurden.

a) Machen Sie sich zunächst mit dem vorliegenden Programm 'qdclassmc.c(/.f)' vertraut und ordnen Sie seine einzelnen Teile und ihre Funktion der in der Vorlesung dargelegten Vorgehensweise zu.

b) Untersuchen Sie dann, jeweils als Funktion der Parameter α, γ und N einschließlich dem Spezialfall $\gamma = 0$ (nur harmonische Oszillatoren), folgende Observable:

   i) Die Gesamtenergie $E = N k_B T + \langle V \rangle$

   ii) Die radiale (Einteilchen-) Dichte

$$\rho(r) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \delta(r - |\mathbf{r}_i|) \right\rangle$$

   iii) Die Paarkorrelationsfunktion

$$g(r) = \left\langle \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \delta(r - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right\rangle$$

c) Untersuchen Sie die Konvergenz des Verfahrens und deren Beeinflussung durch Änderung der Vorschriften zur Generierung von Testkonfigurationen.