
16.1.2006

Ziel: Simulation im kanonischen Ensemble, also

$$\rho(\underline{x}) = \frac{1}{Z}\exp(-H(\underline{x})/T)\,, \tag{11.6}$$

mit Z = Zustandssumme $Z = \sum_{\{\underline{x}\}}\exp(-H(\underline{x})/T)$.

Methode: benutze Markovkette. Hier:

Metropolis Algorithmus definiert durch Unwahrscheinlichkeiten $W_{\underline{y}\underline{z}} = W(\underline{y} \to \underline{z})$.

Grundidee: (gegeben $\underline{y} = \underline{y}(t)$)

1. Suche Konfiguration $\underline{z} \neq \underline{y}$ zufällig gemäß Wahrscheinlichkeit $A(\underline{y} \to \underline{z})$
2. Mit Wahrscheinlichkeit $\tilde{W}(\underline{y} \to \underline{z})$ wird $\underline{z}$ akzeptiert, also $\underline{y}(t+1) = \underline{z}$.
   $\tilde{W}(\underline{y} \to \underline{z})$ heißt Akzeptanz-Wahrscheinlichkeit

   Mit Wahrscheinlichkeit $1 - \tilde{W}(\underline{y} \to \underline{z})$ wird $\underline{z}$ verworfen, also $\underline{y}(t+1) = \underline{y}$

$\to$ Gesamt-Wahrscheinlichkeit:

$$W(\underline{y} \to \underline{z}) = A(\underline{y} \to \underline{z})\tilde{W}(\underline{y} \to \underline{z}) \quad (\underline{y} \neq \underline{z})\,. \tag{11.7}$$

(Gesamt-Wahrscheinlichkeit, dass $\underline{y}$ bleibt: $W(\underline{y} \to \underline{y}) = 1 - \sum_{\underline{z}\neq\underline{y}} W(\underline{y} \to \underline{z})$).

(11.7) in detaillierte Balance Bedingung (11.4):

$$\frac{\tilde{W}(\underline{y} \to \underline{z})}{\tilde{W}(\underline{z} \to \underline{y})} = \frac{\rho(\underline{z})}{\rho(\underline{y})}\frac{A(\underline{z} \to \underline{y})}{A(\underline{y} \to \underline{z})}\,. \tag{11.8}$$

Für Metropolis Algorithmus, Wahl:

$$\tilde{W}(\underline{y} \to \underline{z}) = \min\left(1, \frac{\rho(\underline{z})}{\rho(\underline{y})}\frac{A(\underline{z} \to \underline{y})}{A(\underline{y} \to \underline{z})}\right)\,, \tag{11.9}$$

Man sieht leicht, dass Gl. (11.8) gilt.

Wie sieht $A(.)$ aus? In weitem Rahmen frei wählbar

Am einfachsten: Single-Spin-Flip Dynamik:
Sei $\underline{y} = (s_1, s_2, \ldots, s_N)$. Wahl eines Spins j zufällig, damit $\underline{z} = (s'_1, s'_2, \ldots, s'_N)$ mit

$$s'_i = \begin{cases} -s'_i & \text{für } i = j \\ s'_i & \text{sonst} \end{cases}$$

Alle Spins gleich wahrscheinlich: $A(\underline{y} \to \underline{z}) = 1/N$ und $A(\underline{y} \to \underline{z}) = 0$ für alle anderen $\underline{z}$.
(11.9) $\Rightarrow$

$$\tilde{W}(\underline{y} \to \underline{z}) = \min\left(1, \frac{\rho(\underline{z})}{\rho(\underline{y})}\right) = \min\big(1, \exp(-[H(\underline{z}) - H(\underline{y})]/T)\big)\,. \tag{11.10}$$

⇒Akzeptanz-Wahrscheinlichkeit = Fkt der Energieänderung $\Delta H = H(\underline{z}) - H(\underline{y})$
leicht zu berechnen, nur Nachbarn von j gehen ein:
$\Delta H = \Delta H(j) = 2J\sum_{\langle i,j\rangle} s_i s_j$

$$\Rightarrow \quad \tilde{W}(\underline{y} \to \underline{z}) = \begin{cases} 1 & \text{für} \Delta H < 0 \\ \exp(-\Delta H/T) & \text{sonst} \end{cases} \tag{11.11}$$

Beobachtung: für T klein ⇒Änderungen, mit $\Delta H > 0$ selten akzeptiert

Realisierung in C:

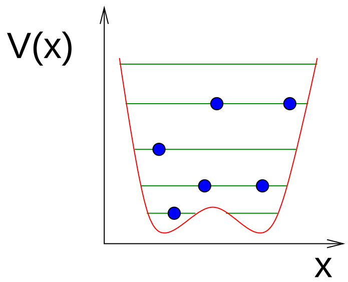
```
/************************** mc_T() *************************/
/** Does Metropolis MC-simulation with ferromagnet at T>0.  **/
/** PARAMETERS: (*)= return-paramter                        **/
/**       spin: spin-configuration [1..N]                   **/
/**        dim: dimension of system                         **/
/**          N: number of spins                             **/
/**       next: gives neighbours next[0..N][0..2*dim+1]     **/
/**  mc_sweeps: number of MC sweeps                         **/
/**          T: temparture in units of J                    **/
/** RETURNS:                                                **/
/**     0                                                   **/
/************************************************************/
int mc_T(short int *spin, int dim, int N, int *next,
         int mc_sweeps, double T)
{
    int t, r, t2, num_mc;
    double delta_e, p;

    for(num_mc=0; num_mc<mc_sweeps*N; num_mc++)                /* do MC */
    {
      t = 1+ (int) (drand48() * N);                /* choose spin randomly */
      delta_e = 0.0;
      for(r=0; r<2*dim; r++)           /* calulate local energy -> delta_e */
      {
        t2 = NEXT(t,r);  /* r='direction', r=0:+x, r=1:-x, r=2:+y,     ... */
        delta_e += 2.0*spin[t]*spin[t2];
      }
      p = drand48();                          /* draw random number in ]0,1] */
      if( (delta_e <= 0)||(p< exp(-delta_e/T) ))            /* flip spin ? */
      {
        spin[t]=-spin[t];                                     /* flip spin */
      }
    }
    return(0);
}
```

Kapitel 12

Ideale Quantengase

Quantenstatistik: identische Teilchen = ununterscheidbar, je nach Teilchensorte Fermionen (halbzahliger Spin, Wellenfunktion total antimetrisch) oder Bosonen (W-Fkt total symmetrisch)

hier: Teilchen WW-frei aber in äußerem Potential:



$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{N} \hat{H}_n$$

(alle $\hat{H}_n$ gleichartig)
Einteilchen Schrödinger-Gl. sei gelöst: $\hat{H}_n|n,j\rangle = \epsilon_j|n,j\rangle$ mit Einteilchenenergien ϵ_j

⇒Hamiltonian für beliebige Teilchenzahl in 2. Quantisierung (Besetzungszahldarstellung), mit $\hat{a}_j^+/\hat{a}_j$ = Erzeuger/Vernichter im Zustand j

$$\hat{H} = \sum_j \epsilon_j \hat{a}_j^+ \hat{a}_j =: \sum_j \epsilon_j \hat{n}_j$$

$\hat{n}_j$ = Besetzungszahloperator mit Eigenwerten $0, 1$ (Fermionen) und $0, 1, 2, \ldots$ (Bosonen)
⇒Energieeigenwerte von $\hat{H}$: $E_{n_1 \ldots n_\infty} = \sum_j \epsilon_j n_j$ ($\sum_j n_j = N$ und $n_j = 0, 1$ für Fermionen)

<u>Kanonische Zustandssummen</u>

$$\begin{aligned} Z_N^{\text{Bose}} &= \sum_{n_1 \ldots n_\infty = 0, \sum_j n_j = N}^{\infty} e^{-\beta \sum_j \epsilon_j n_j} \\ Z_N^{\text{Fermi}} &= \sum_{n_1 \ldots n_\infty = 0, \sum_j n_j = N}^{1} e^{-\beta \sum_j \epsilon_j n_j} \end{aligned}$$

Wegen Nebenbedingung $\sum_J n_j = N$: nicht geschlossen auswertbar ($N \to \infty$: mit Sattelpunktsmethode etwas kompliziert möglich)

einfacher: <u>großkanonische Zustandssumme</u>

$$
\begin{aligned}
Z_\mu &\overset{(10.70)}{=} \sum_{N=0}^{\infty} Z_N e^{\beta\mu N} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n_1\ldots n_\infty,\, \sum_j n_j = N} e^{-\beta\sum_j(\epsilon_j-\mu)n_j} \\
&= \sum_{n_1\ldots n_\infty} e^{-\beta\sum_j(\epsilon_j-\mu)n_j} \\
&= \sum_{n_1\ldots n_\infty} \prod_j x_j^{n_j} \quad (x_j := e^{-\beta(\epsilon_j-\mu)}) \\
&= \sum_{n_1\ldots n_\infty} x_1^{n_1} x_2^{n_2} x_3^{n_3} \ldots \\
&= \prod_j \left(\sum_n x_j^n \right) \\
&= \begin{cases} \prod_j (1+x_j) & \text{Fermi} \\ \prod_j \frac{1}{1-x_j} & \text{Bose} \end{cases}
\end{aligned}
\tag{12.1}
$$

Bose: für Konvergenz $\sum_n x_j^n = 1/(1-x_j)$ $x_j < 1$ also $\mu < \epsilon_i$.

<u>TD Potential</u>

$$
\Omega \overset{(10.69)}{=} -k_B T \ln Z_\mu = \mp \frac{1}{\beta} \sum_{j=0}^{\infty} \ln\left(1 \pm e^{-\beta(\epsilon_j-\mu)}\right) \tag{12.2}
$$

Oberes Vorzeichen: Fermi, unteres: Bose

⇒Teilchenzahl

$$
N = \langle \hat{N} \rangle = -\frac{\partial\Omega}{\partial\mu} = \pm\frac{1}{\beta} \sum_j \frac{\pm\beta e^{-\beta(\epsilon_j-\mu)}}{1 \pm e^{-\beta(\epsilon_j-\mu)}} = \sum_j \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_j-\mu)} \pm 1} \tag{12.3}
$$