



Übungen zur Computerphysik, WS 2007/08

8. Übung

(Besprechung am 19.12.2007)

Aufgabe 25 „matrix square“

Implementieren Sie den Algorithmus „matrix square“ auf einem feinen Gitter mit äquidistanten Punkten. Überprüfen Sie Ihr Programm anhand des harmonischen Oszillators. Starten Sie von der hoch-Temperatur Dichtematrix und iterieren Sie mehrmals. Bei jeder Iteration verdoppelt sich β . Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit der exakten Lösung.

Aufgabe 26 „particle in box“

Betrachten Sie ein Teilchen der Masse $m = 1$ in einer Box der Länge L . Berechnen Sie die Wahrscheinlichkeit $\pi^{box}(x)$ (Wahrs. das Teilchen an der Stelle x und zur inversen Temperatur β zu finden) auf drei verschiedene Weisen:

- summieren Sie explizit über alle Zustände der Box-Wellenfunktionen mit Eigenwerten $E_n = 1/2(n * \pi/L^2)$ (verwenden Sie den Alg. „harmonic density“)
- benutzen Sie den Alg. „matrix square“ um $\rho^{box}(x, x', \beta)$ aus dem hoch-Temperatur Limes
 $\rho^{box}(x, x', \beta) = \rho^{free}(x, x', \beta)$ für $0 < x, x' < L$; 0 sonst
zu berechnen.
- Berechnen Sie $\pi^{box,L}(x)$ aus dem Ausdruck
 $\rho^{box,[0,L]}(x, x', \beta) = \sum_{-\infty}^{\infty} [\rho^{free}(x, x' + 2\omega * L, \beta) - \rho^{free}(x, -x' + 2\omega * L, \beta)]$
Beachten Sie die verschiedenen Normierungen der Dichte Matrix und der Wahrscheinlichkeit $\pi^{box,L}(x)$.

Aufgabe 27 „naive harmonic path“

Implementieren Sie den Algorithmus „naive harmonic path“. Überprüfen Sie ihr Programm, indem Sie ein Histogramm der Position x_k für $k = 0$ und $k = N/2$ plotten. Überzeugen Sie sich, daß die Verteilung von x_0 und $x_{N/2}$ mit allen anderen übereinstimmt. Überzeugen sie sich außerdem, daß die Verteilung von x_0 und $x_{N/2}$ mit der analytischen Form 1 von $\rho^{h.o}(x, x', \beta)$ übereinstimmt.

$$(1) \quad \rho^{h.o}(x, x', \beta) = \text{sqrt}(1/2\pi \sinh(\beta)) * \exp(-2\tanh(\beta/2))$$

mit $Z = 1/(2\sinh(\beta/2))$