

Kristallisation indirekter, massen-asymmetrischer Elektron-Loch-Paare

Diplomarbeit

Universität Rostock
Institut für Physik

angefertigt an der

Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
Institut für Theoretische Physik und Astrophysik

Vorgelegt von: Dipl.-Inf. Hilko Cords
Betreuer: PD Dr. Thomas Bornath (Universität Rostock),
Prof. Dr. Michael Bonitz (CAU Kiel)
Eingereicht am: 26.01.2006

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	5
2.1	Physikalische Kenngrößen	5
2.2	Pfadintegrale	5
2.3	Der lineare harmonische Oszillator	8
2.4	Energieberechnung	9
2.5	Phasenübergänge, Wignerkristallisation	10
3	Indirekte Elektron-Loch-Paare	11
3.1	Halbleiterquantenpunkte	11
3.2	Indirekte Elektron-Loch-Paare	12
3.3	Wigner-Kristallisation	12
4	PIMC	15
4.1	Numerische Simulation	15
4.1.1	Gleitkommazahlen	15
4.1.2	Zufallszahlen	15
4.1.3	Monte-Carlo-Methode	16
4.1.4	Klassischer Metropolis-Algorithmus	18
4.1.5	Statistischer Fehler	21
4.1.6	Beispiel: Ising-Modell	21
4.2	PIMC	25
4.3	Metropolis-Algorithmus	28
4.3.1	whole-particle-move	29
4.3.2	single-slice-move	30
4.3.3	Bisection-Algorithmus	31
4.4	Acceptance Ratio	33
4.5	PIMC-Algorithmus	34
4.6	Zweischichtsysteme verschiedener Teilchen	35
4.7	Implementierung	37

4.7.1	Teilchenzahldichte	39
4.7.2	Paarkorrelationsfunktion	40
4.7.3	Relative Abstandsfluktuation	40
5	Simulationsergebnisse	41
5.1	Modell	41
5.2	Einheitensystem, Entdimensionalisierung	43
5.3	Referenzsysteme	45
5.3.1	Elektron im nD-harmonischen Potential	45
5.3.2	1 und 2 Elektronen im harmonischen Potential (2D)	47
5.3.3	5-8 Elektronen im harmonischen Potential (2D)	48
5.3.4	Relative Abstandsfluktuation für 3 Elektronen (2D)	53
5.3.5	Zweischichtsysteme	53
5.3.6	8 indirekte Exzitonen	61
5.4	Phasenübergang in Elektron-Loch-Paaren	61
5.4.1	3 Elektron-Loch-Paare	61
5.4.2	6 Elektron-Loch-Paare	70
6	Zusammenfassung und Ausblick	75
A	Visualisierung	77
A.1	Implementierungsumgebung	77
A.2	Visualisierung von Wahrscheinlichkeitsdichten	78
A.3	DensityPlot	79
A.4	Beispiele	83
A.4.1	Cluster im dreidimensionalen harmonischen Potential	84
A.4.2	10 Elektronencluster (2D)	86
	Literaturverzeichnis	87

Abbildungsverzeichnis

4.1	Ising-Modell: Energie	23
4.2	Ising-Modell: Magnetisierung	24
4.3	Ising-Modell: Beispielkonfigurationen	25
4.4	Anschauung: Slices als Polymer.	28
4.5	Bisection-Algorithmus	32
4.6	Zweischichtsysteme	35
4.7	Ablaufdiagramm der PIMC-Sim	37
5.1	Elektron im nD-harmonischen Potential	46
5.2	1 und 2 Elektronen im 2D-harmonischen Potential	47
5.3	Radiale Teilchenzahldichte $n(r)$ von 5,6,7,8 Elektronen im 2D-harmonischen Oszillator	50
5.4	Teilchenzahldichten und Paarkorrelationsfunktion $g(r)$, $n(r)$, $n(x, y)$ von 5, 6, 7, 8 Elektronen im 2D-harmonischen Potential	51
5.5	Energiekonvergenz über MC-Schritte: 5 Elektronen im 2D-harmonischen Oszillator	52
5.6	3 Elektronen: Relative Abstandsfluktuation $u_r(n)$	52
5.7	Konvergenz über slices m bei 2 Elektronen in 2 Schichten . . .	54
5.8	2 Elektronen in 2 Schichten: $n(r)$, $g(r)$	55
5.9	2 Elektronen in 2 Schichten: $n(x,y)$	56
5.10	2 Elektronen in 2 Schichten: Variation der Temperatur T	57
5.11	2 Elektronen in 2 Schichten: Variation der Dichte n	57
5.12	3 indirekte Elektron-Loch-Paare: Dichte $n(x, y)$ in Ortsdarstellung.	58
5.13	3 indirekte Elektron-Loch-Paare: Konvergenz über slices . . .	58
5.14	1,2,3 indirekte Elektron-Loch-Paare: Radiale Dichte $n(r)$ und Paarkorrelation $g(r)$	59
5.15	5,6 indirekte Elektron-Loch-Paare: Radiale Dichte $n(r)$ und Paarkorrelation $g(r)$	60
5.16	8 Exzitonen: $n(r)$, $g(r)$	60

5.17	3	Elektron-Loch-Paare: Relative Abstandsfluktuation $u_r(m_{Ratio})$ für Dichten $n=1\dots 0.7$	62
5.18	3	Elektron-Loch-Paare: Relative Abstandsfluktuation $u_r(m_{Ratio})$ für Dichten $n=1\dots 1.0$	63
5.19	3	Elektron-Loch-Paare: Relative Abstandsfluktuation $u_r(m_{Ratio})$ für Dichten $n= 1\dots 1.0$ (vergrößert)	64
5.20	3	Elektron-Loch-Paare: Phasendiagramm.	65
5.21	3	Elektron-Loch-Paare: $n_e(r)$, $n_h(r)$, Massenverhältnis $m_{Ratio} = 1$	66
5.22	3	Elektron-Loch-Paare: $n_e(r)$, $g_{ee}(r)$, Massenverhältnis $m_{Ratio} = 1, 2, 10, 30, 100$	67
5.23	3	Elektron-Loch-Paare: $n_h(r)$, $g_{hh}(r)$, Massenverhältnis $m_{Ratio} = 1, 2, 10, 30, 100$	67
5.24	3	Elektron-Loch-Paare: $g_{eh}(r)$, Massenverhältnis $m_{Ratio} = 1, 2, 10, 30, 100$	68
5.25	3	Elektron-Loch-Paare: Dichte $n(x, y)$ für verschiedene Massenverhältnisse	69
5.26	6	Elektron-Loch-Paare: $u_r(m_{ratio})$ bei $n=0.6$	70
5.27	6	Elektron-Loch-Paare: Phasendiagramm.	72
5.28	6	Elektron-Loch-Paare: $u_r(m_{ratio})$ bei $n=0.4$	73
5.29	6	Elektron-Loch-Paare: $u_r(m_{ratio})$ bei $n=0.3, 0.5, 0.7$	74
A.1		Screenshots <code>DensityPlot</code>	77
A.2	5 und 6	Elektronen im harmonischen Potential (1D)	78
A.3		Prinzip der dreidimensionalen Dichteveranschaulichung	80
A.4		Visualisierung von dreidimensionalen Dichten	81
A.5	5	Elektronen	83
A.6	7	Elektronen (3D)	83
A.7	12	Elektronen (3D)	84
A.8	13	Elektronen (3D)	84
A.9	13	Elektronen: Teilchenzahldichte $n(r)$	85
A.10	10	Elektronencluster	86
A.11	10	Elektronencluster: $n(r)$, $g(r)$	86

Tabellenverzeichnis

3.1	Quanteneffekte, Confinement (qualitativ)	11
4.1	Volumen einer Hyperkugel	18
4.2	Volumen einer Hyperkugel, MC-Simulation im Zeitvergleich mit diskreter Unterteilung	19
5.1	Grundzustandsenergien von 1 und 2 Elektronen im 2D har- monischen Potential	48
5.2	Energien von 5,6,7 und 8 Elektronen im 2D harmonischen Potential bei $k_B T = 0.1 \hbar \omega$	49
5.3	2 Elektronen in 2 Schichten: Energien bei Variation von T . .	56
5.4	2 Elektronen in 2 Schichten: Energien bei Variation von n . .	56
5.5	Elektron-Loch-Paare: Energien.	59

Kapitel 1

Einleitung

Die Kristallisation eines Elektronengases in Metallen bei niedrigen Dichten und Temperaturen ist erstmals 1934 von E. Wigner theoretisch nachgewiesen worden: Der Wigner-Kristall [Wig34]. Seitdem wird dieses auf starker Wechselwirkung basierende Phänomen eingehend erforscht. Perspektiven zu Anwendungen sind im Bereich der Supraleitung, der Bose-Kondensation, der Quantenlaser und der Quantencomputer (z.B. Speicherung eines Q-Bits) gegeben.

Schließlich wurde Elektronenkristallisation - wenn auch noch nicht in der von Wigner vorausgesagten Art - auf der Oberfläche von kalten Heliumtropfen experimentell nachgewiesen [GA79]. Zudem wurde berechnet, dass Elektronenkristallisation in Halbleiterquantenpunkten möglich ist [FBL01a]. Ein Nachweis der Kristallisation von indirekten Exzitonen (gekoppelte Elektron-Loch-Paare) wurde in [LFBL03] vorgestellt. Als indirekt werden die Exzitonen (und auch die im Rahmen dieser Arbeit simulierten Elektron-Loch-Paare) bezeichnet, wenn sich die Elektronen und die Löcher in verschiedenen Halbleiterschichten befinden. Indirekte Exzitonen bieten den Vorteil einer längeren Lebenszeit von einigen μs , da der Abstand zwischen den Schichten eine Rekombination verhindert. Der bosonische Charakter indirekter Exzitonen lässt auf das Auftreten einer Bosekondensation bei derartigen Systemen schließen [LB97]. Die Abhängigkeit der Kondensation vom Massenverhältnis kann z.B. dazu führen, dass der Druck fällt, bei dem die Bose-Kondensation auftritt. Eine Untersuchung von direkten Elektron-Loch-Systemen im dreidimensionalen unendlichen Raum erfolgt in [BFF⁺05]. Es wird eine Kristallisation von Löchern in Halbleiter-Valenzbändern nachgewiesen. Das kritische Massenverhältnis m^{kr} von effektiver Löcher- zu effektiver Elektronenmasse liegt in der Ordnung $m^{kr} \approx 80$ [BFF⁺05]. Das Elektron-Loch-Massenverhältnis bei üblichen Halbleitermaterialien liegt unter dem Wert 10. Heutzutage können jedoch aus dem Forschungsbereich der Physik Neuer

Materialien hervorgehend spezielle Materialien mit einem Massenverhältnis von bis zu 70 hergestellt werden. Unter hohem Druck lassen sich in einigen Materialien noch größere Massenverhältnisse erzielen [WBM04]. Diese neuen Materialien motivieren die in dieser Arbeit vorgenommenen Untersuchungen:

Die Massenabhängigkeit einer Kristallisation von indirekten, massenasymmetrischen und spinlosen Elektronen-Loch-Paaren in Quantenpunkten wird in dieser Arbeit untersucht. Der Vorteil indirekter Elektron-Loch-Systeme liegt zum einen - wie oben bereits erwähnt - in ihrer langen Lebenszeit begründet, während direkte Elektronen-Loch-Paare schnell rekombinieren. Zum anderen können über den Parameter des Schichtabstandes d verschiedene physikalische Effekte eingestellt werden, was bei direkten Elektron-Loch-Paaren lediglich mit verschiedenen Materialien erreicht werden könnte. Relevanter Parameter für den Nachweis einer Kristallisation ist das Massenverhältnis von Loch- zu Elektronmasse $m_{\text{Ratio}} = m_h/m_e$. Zwei Halbleiter-Schichten (Elektronen in Schicht 1, Löcher in Schicht 2), die durch eine Isolatorschicht getrennt sind und sich jeweils in einem eigenen externen harmonischen Potential befinden, stellen die technische Umsetzung des Systems dar. Derartige Quantenpunkt-Schichtsysteme können heutzutage in der Praxis hergestellt werden [MCA⁺99] und sind aufgrund der material- und abmessungsbedingten Quanteneffekte verstärkt in das Blickfeld der Forschungsgemeinde gerückt.

Diese Arbeit weist eine Kristallisation der Löcher von Elektron-Loch-Paaren in Abhängigkeit vom Massenverhältnis m_{Ratio} für konstante Dichten nach. Die Elektronen verbleiben wegen ihrer geringen Masse in einem fluiden Zustand, da ihre jeweiligen Wellenfunktionen sich weiterhin überlappen. An dieser Stelle unterscheidet sich das hier simulierte System von einem Exzitonenkristall [FBL03], da in diesem sowohl die Löcher als auch die Elektronen kristallisieren. Zur inhaltlichen Abgrenzung von Exzitonenkristallen werden im weiteren Verlauf dieser Arbeit die hier nachgewiesenen Kristalle als *Elektron-Loch-Kristalle* bezeichnet.

Die Berechnungen wurden mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programm `PathSim` zur Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulation (PIMC) durchgeführt. Die PIMC-Methode bietet sich aufgrund ihrer guten Konvergenz für die Simulation starker Wechselwirkung und Quanteneffekten von Partikeln an [Bar02]. Berechnet werden für verschiedene Systeme Wahrscheinlichkeitsdichten, Paarkorrelationsfunktionen und Energien.

Übersicht der Kapitel Zielstellung dieser Arbeit ist zum einen die Entwicklung und Anwendung eines Pfad-Integral-Monte-Carlo-Simulationsprogrammes. Mit diesem soll die Massenabhängigkeit von

Elektron-Loch-Systemen zum Nachweis eines möglichen Phasenübergangs untersucht werden. Des Weiteren soll ein Visualisierungsprogramm entwickelt werden, mit dem zwei- und vor allem dreidimensionale Wahrscheinlichkeitsdichten für beliebig viele Partikel visualisiert und interaktiv in Echtzeit im Raum rotiert werden können.

Nachdem im zweiten Kapitel zunächst die grundlegenden Begrifflichkeiten, Definitionen und physikalischen Zusammenhänge erläutert werden, schließt sich ein Kapitel über indirekte Elektron-Loch-Paare an, in dem auf wichtige physikalische Eigenschaften derartiger Systeme eingegangen wird.

Ein Schwerpunkt dieser Arbeit liegt auf der numerischen Umsetzung von Feynmans Pfadintegralformulierung der Quantenmechanik für Vielteilchensysteme im Gleichgewicht. Die numerische Umsetzung dieser Formulierung wird in Kapitel 4 behandelt. Eine praktische Umsetzung erfolgte im Rahmen dieser Arbeit.

In Kapitel 5 werden die mit `PathSim` berechneten Resultate dargestellt. Es gliedert sich in drei Abschnitte: Zunächst wird das zugrundeliegende Modell - inklusive Hamilton-Operator der behandelten Systeme - betrachtet, und die verwendeten Einheitensysteme werden vorgestellt. Im zweiten Abschnitt werden einige mit `PathSim` berechnete Systeme betrachtet, zu denen Referenzdaten existieren: Die errechneten Ergebnisse werden mit den jeweiligen Referenzdaten verglichen, um die korrekte Funktionsweise `PathSims` zu demonstrieren. Der dritte und letzte Abschnitt des 5. Kapitels stellt die im Rahmen dieser Arbeit erzielten neuen Resultate vor und diskutiert diese: Es wird ein Phasenübergang von Elektron-Loch-Paaren in Abhängigkeit des Massenverhältnisses m_{Ratio} für 3 und 6 Elektron-Loch-Paare nachgewiesen und ein Phasendiagramm im Massenverhältnis-Dichte-Raum vorgestellt.

Zum Abschluss der physikalischen Betrachtungen dieser Arbeit wird in Kapitel 6 eine Zusammenfassung und ein Ausblick gegeben.

Ein weiteres Ergebnis dieser Arbeit ist das Visualisierungsprogramm `DensityPlot`, welches dreidimensionale Dichteverteilungen als halbtransparente Wolken im Raum darstellt und es ermöglicht, diese interaktiv in Echtzeit zu rotieren. Dem Konzept der zugrunde liegenden Implementierung und der Implementierung selbst ist Anhang A gewidmet. Zudem werden an dieser Stelle Visualisierungsbeispiele von im Rahmen dieser Arbeit mit `PathSim` simulierten dreidimensionalen Systemen gegeben: n ($n=5,7,12,13$) identische Teilchen im harmonischen Potential. Dabei ist die visuelle Darstellung ein wichtiger Aspekt, da die Datenflut der abgetasteten Dichtematrix bis in den GB -Bereich hinein gehen kann.

An dieser Stelle sei auch erwähnt, dass in dieser Arbeit bei einigen Begriffen die englische Bezeichnung gewählt wurde. In diesen Fällen erschien eine Übersetzung nicht sinnvoll, da die jeweiligen Begriffe entweder keine sinnvolle

Entsprechung in der deutschen Sprache besitzen oder aber in diesem Bereich der theoretischen Physik unter der entsprechenden Bezeichnung verwendet werden.

Kapitel 2

Grundlagen

2.1 Physikalische Kenngrößen

Im Folgenden werden die in dieser Arbeit häufig verwendeten physikalischen Definitionen gegeben:

- Thermische Wellenlänge für freie Teilchen $\lambda = h/\sqrt{2\pi mk_B T}$ (m : Masse, T : Temperatur, k_B : Boltzmann-Konstante), was der deBroglie-Wellenlänge entspricht. Sie stellt ein Maß für die quantenmechanische Ausdehnung der Teilchen dar und entspricht für ein gebundenes Teilchen der Ausdehnung der Wellenfunktion.
- Effektiver Bohrradius $a_B^* = \frac{\epsilon}{q_1 q_2} \frac{\hbar^2}{m_{ij}}$ (ϵ : effektive Dielektrizitätskonstante, q : Ladung, m_{ij} : reduzierte Masse $m_{ij}^{-1} = m_i^{-1} + m_j^{-1}$).
- Mittlerer Teilchenabstand r_0 .
- Brueckner-Parameter $r_s = \frac{r_0}{a_B^*}$.

2.2 Pfadintegrale

Neben Schrödingers und Heisenbergs Formulierungen der Quantenmechanik wurde 1948 ein gleichwertiger Ansatz von Feynman vorgestellt: die Pfadintegrale. Pfadintegrale bieten sich, wie im Folgenden gezeigt werden soll, für numerische Simulationen an.

Nach dem klassischen Prinzip der stationären Wirkung (Hamilton'sches Prinzip, 1D)

$$\delta S = S(x_{\text{extr}} + \delta x) - S(x_{\text{extr}}) = 0 \quad (2.1)$$

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt \quad (2.2)$$

$$L(\dot{x}, x, t) = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \quad (2.3)$$

ist der klassische Weg eines Teilchens der Masse m in einem Potential $V(x)$ über das Minimum der Wirkung S definiert. Dabei bezeichnet $L = T - V$ die Lagrange-Funktion des Massenpunktes. Diese Formulierung ist gleichbedeutend mit den Bewegungsgleichungen nach Newton oder Lagrange. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit dieses Teilchens ist lediglich von dem über dieses Extremum definierten Weg abhängig. Die diesem im abstrakten Raum benachbarten Wege sind lediglich im Sinne der Variationsrechnung notwendig, um die Bewegungsgleichungen des Partikels aufzustellen.

Quantenmechanisch betrachtet wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nicht nur durch den extremal verlaufenden Weg beeinflusst, sondern durch alle prinzipiell möglichen Wege. Ihr Einfluss ist dabei entsprechend der Wirkung S in der Einheit \hbar für den jeweiligen Weg gewichtet ([Bar02],[BFF⁺05]).

Nach [FH65] kann dies folgendermaßen ausgedrückt werden: Die Übergangswahrscheinlichkeit $P(b, a)$ von Punkt x_a zum Zeitpunkt t_a zu Punkt x_b zum Zeitpunkt t_b ist

$$P(b, a) = |K(b, a)|^2 \quad (2.4)$$

wobei

$$K(b, a) = \sum_{\text{alle Pfade von a nach b}} \phi(x(t)), \quad (2.5)$$

mit einem Beitrag aller Pfade

$$\phi(x(t)) = A \cdot e^{\frac{i}{\hbar} S(x(t))}. \quad (2.6)$$

Die Konstante A dient der Normierung von K , und S ist die Wirkung des entsprechenden klassischen Systems.

Da die Zahl der Pfade im Limes gegen ein Kontinuum strebt, geht die Summe (2.5) in ein Riemann-Integral über. In diesem Fall wird die unabhängige Variable t mit N Schritten der Breite ϵ diskretisiert. Wenn t von t_a nach t_b reicht, gilt dann $N \cdot \epsilon = t_b - t_a$. Es wird nun ein Pfad über selektierte Punkte x_i über t_i gebildet ($x_{i+1} - x_i = \epsilon, i = 0 \dots N$). Die Summe über all diese Pfade konvergiert dann zu dem multidimensionalen Integral [FH65]

$$K(b, a) \sim \int \int \dots \int \phi(x(t)) dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1}, \quad (2.7)$$

wobei N die Anzahl der Diskretisierungsschritte der Länge $x_i - x_{i-1} = \epsilon$ bezeichnet (im Folgenden in Anlehnung an die überwiegend englischsprachige Literatur „slices“ genannt). Je kleiner ϵ wird, desto genauer wird die vollständige Menge aller möglichen Pfade approximiert. Sei der Lagrange-Operator mit (2.3) gegeben, so ergibt sich ein Normalisierungsfaktor von

$$A = \left(\frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{-\frac{N}{2}} \quad (2.8)$$

und damit [FH65]:

$$K(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \int \dots \int e^{\frac{i}{\hbar} S(b, a)} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} \quad (2.9)$$

$$S(b, a) = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt. \quad (2.10)$$

Zusammengefasst ergibt sich das von Feynman eingeführte Pfadintegral:

$$K(b, a) = \langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S(b, a)} \mathcal{D}x(t). \quad (2.11)$$

\mathcal{D} steht für das Produkt von N Differentialen. Die notwendige Diskretisierung zur numerischen Berechnung von S (vgl. Gl. 2.2) erfolgt für N slices der Größe τ mit [Bar02]

$$S_N = \tau \sum_{j=1}^N \left(\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\tau} \right)^2 - V(x_j) \right). \quad (2.12)$$

Die Wellenfunktion Ψ kann nun mit K definiert werden:

$$\Psi(x_2, t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_2, t_2; x_1, t_1) \Psi(x_1, t_1) dx_1. \quad (2.13)$$

Der Zustand Ψ , mit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\Psi(x_i, t_i)|^2$, kann somit mit der Übergangswahrscheinlichkeit von (x_{i-1}, t_{i-1}) , also $K(x_2, t_2; x_1, t_1)$, beschrieben werden [FH65]. D.h. die Amplitude der Wellenfunktion ist bei (x_2, t_2) (mit der Wahrscheinlichkeit $|\Psi|^2$) lediglich abhängig von dem Integral über alle möglichen vorhergehenden Konfigurationen multipliziert mit der Übergangswahrscheinlichkeit K von (x_1, t_1) nach (x_2, t_2) . Die gesamte Historie des Teilchens kann also in einer einzigen Wellenfunktion ausgedrückt werden, und theoretisch kann bei Kenntnis der Wellenfunktion zum Zeitpunkt t_0 jeder später folgende Zustand zum Zeitpunkt $t > t_0$ berechnet werden.

2.3 Der lineare harmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator bietet sich zum einen als einfaches Modell zum Überprüfen und zur Verifikation von Algorithmen an, da z.B. analytische Rechnungen für Einteilchensysteme existieren. Zum anderen kann ein externes Potential mit Hilfe des harmonischen Oszillators oftmals hinreichend genau beschrieben werden. Nachfolgend werden kurz die Eigenschaften, wie sie für diese Arbeit relevant sind, behandelt.

Der Hamilton-Operator des linearen harmonischen Oszillators im kanonischen Ensemble lautet

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (2.14)$$

Der Dichteoperators $\hat{\rho}$ als $N \times N$ -Matrix für das kanonische Ensemble ($\beta = \frac{1}{k_B T}$) in Ortsdarstellung lautet [Fey90]

$$\rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R}' \rangle = \sum_i \phi_i^*(\mathbf{R}) \phi_i(\mathbf{R}') e^{-\beta E_i}. \quad (2.15)$$

Mit der Besetzungswahrscheinlichkeit $e^{-E_i/k_B T}$ eines gegebenen Zustandes i ergibt sich die Zustandssumme Z als Spur des Dichteoperators $\hat{\rho}$

$$Z = \int d\mathbf{R} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}; \beta). \quad (2.16)$$

Für den harmonischen Oszillator folgt das bekannte Ergebnis (z.B. [Bar02])

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle = \frac{e^{-(1/2)\beta \hbar \omega}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}}. \quad (2.17)$$

Mit

$$\langle H \rangle = \frac{Tr\{\rho H\}}{Tr\{\rho\}} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \int_R \langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R} \rangle \quad (2.18)$$

ergibt sich dann nach [Fey90] der analytische Wert für die mittlere Energie des linearen harmonischen Oszillators:

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \coth \left(\frac{1}{2} \beta \hbar \omega \right). \quad (2.19)$$

Die analytischen Ergebnisse werden später mit den numerisch erzielten PIMC-Simulationsergebnissen verglichen.

2.4 Energieberechnung

Für ein n -Teilchen-System beinhaltet der n -Teilchen Dichteoperator $\hat{\rho}$ die vollständige statistische Information über das System. Die Observablen sind dabei über den Dichteoperator $\hat{\rho}$ (vgl. Gl. 2.15) zu berechnen:

$$\langle \hat{O} \rangle(\beta) = \frac{\text{Tr}(\hat{O}\hat{\rho}(\beta))}{\text{Tr}(\hat{\rho}(\beta))} = \frac{\int d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | \hat{O} \hat{\rho}(\beta) | \mathbf{R} \rangle}{\int d\mathbf{R} \langle \mathbf{R} | \hat{\rho}(\beta) | \mathbf{R} \rangle} \quad (2.20)$$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}}. \quad (2.21)$$

Einige Größen können auch über die Ableitung der Zustandssumme Z bestimmt werden, z.B. die Gesamtenergie oder die kinetische Energie für den harmonischen Oszillator ([FB06]) entsprechend Gl. 2.18

$$\langle H \rangle = E = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z) = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (2.22)$$

$$E_{\text{kin}} = -\frac{m}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial m}. \quad (2.23)$$

Gleichung (2.22) ergibt nach [FB06] für ein Fermi-System mit n slices in der Dimension d ($d = 1, 2, 3$):

$$E = E_{\text{kin}} + \left\langle \frac{1}{n} \sum_{k=0}^n V(\mathbf{R}^k) \right\rangle - \left\langle |\phi_{ij}|^{-1} \frac{\partial |\phi_{ij}|}{\partial \beta} \right\rangle \quad (2.24)$$

$$E_{\text{kin}} = \frac{dn}{2\beta} - \left\langle \sum_{k=0}^n \frac{nm}{2\hbar^2 \beta^2} (\mathbf{R}^{k+1} - \mathbf{R}^k)^2 \right\rangle. \quad (2.25)$$

Die ersten beiden Terme in (2.24) repräsentieren die kinetische und die potentielle Energie, der dritte Summand bezieht sich auf die Spinwechselwirkung, die in dieser Arbeit vernachlässigt wird. Definiert ist sie über die Austauschdeterminante $|\phi_{ij}| = \sum_{\alpha} \det ||\varphi_{ij} \delta_{\sigma_i \sigma_j}||$ mit dem Zustand α aller Spinvariablen ($\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$) [FB06]. Ein Nachteil dieser Art der Berechnung der kinetischen Energie besteht darin, dass zwei verhältnismäßig große Zahlen (für große n) subtrahiert werden und dementsprechend das Resultat eine relativ große Streuung besitzt. Deshalb wird in Kapitel 4 ein weiterer Ausdruck für E_{kin} hergeleitet, der diese Problematik vermeidet.

2.5 Phasenübergänge, Wignerkristallisation

Ein Phasenübergang ist laut [Nol02] qualitativ definiert als eine *Singularität, Nicht-Analytizität oder Diskontinuität einer relevanten thermodynamischen Funktion, die ansonsten analytisch ist*. In vielen Fällen ist der relevante Kontrollparameter die Temperatur (z.B. Ferromagnetismus, der Supraleitung, Bosekondensation). Diese Arbeit betrachtet den Phasenübergang zum Wignerkristall (auch: Elektronenkristall, Coulomb-Kristall) von Coulomb-Strukturen, die sich in einem Zustand starker Korrelation befinden. Streng genommen tritt ein Phasenübergang nur in infiniten Systemen auf. In mesoskopischen Systemen, wie sie in dieser Arbeit betrachtet werden, gibt es nur ein analoges Phänomen, so dass anstelle von Diskontinuitäten z.T. auch graduelle Übergänge einen Phasenübergang charakterisieren. In dieser Arbeit wird der Begriff Phasenübergang für diese Übergänge entsprechend [FBL01a] verwendet.

Zum Nachweis eines Phasenüberganges von mesoskopischen Elektronensystemen wird das Prinzip des „Quantum orientational melting“ ([ZKB02], [FBL01a]) genutzt. Mit Hilfe der relativen Winkel-Fluktuation u_ϕ und der relativen Abstandsfluktuation u_r als charakteristische Größen kann ein Phasenübergang nachgewiesen werden [FBL01a]:

$$u_\phi \equiv \sqrt{\langle \delta\phi^2 \rangle} = \frac{2}{m_{S_1} m_{S_2}} \sum_i^{m_{S_1}} \sum_j^{m_{S_2}} \sqrt{\frac{\langle |\phi_j - \phi_i|^2 \rangle}{\langle |\phi_j - \phi_i| \rangle^2} - 1} \quad (2.26)$$

$$u_r \equiv \sqrt{\langle \delta r^2 \rangle} = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i < j}^N \sqrt{\frac{\langle r_{ij}^2 \rangle}{\langle r_{ij} \rangle^2} - 1}. \quad (2.27)$$

ϕ_i und ϕ_j sind die Winkelpositionen der Partikel auf den Schalen S_1 und S_2 . m_{S_1} und m_{S_2} beschreiben die Anzahl der Partikel auf den jeweiligen Schalen. Schließlich bezeichnet r_{ij} den Abstand zwischen Partikel i und j . Die Kontrollgröße der Fluktuation stellt einen abstrakten Phasenübergang dar. Diese Art der Definition des Phasenüberganges von Elektronensystemen ist eine sehr theoretische und sollte nicht mit einem klassischen Phasenübergang verwechselt werden. Dennoch wird aufgrund der strukturellen Ähnlichkeit in der Literatur und aus diesem Grund auch in dieser Arbeit der Begriff Phasenübergang verwendet.

Kapitel 3

Indirekte Elektron-Loch-Paare in Halbleitern

3.1 Halbleiterquantenpunkte

Mit modernen Kristallwachstumstechniken können Halbleitermikrostrukturen mit derart geringen Abmessungen erzeugt werden, dass die Eigenschaften des Materials hauptsächlich von Quanteneffekten bestimmt werden. Notwendige Bedingung ist qualitativ das Unterschreiten der deBroglie-Wellenlänge $\lambda_{dB} = \frac{2\pi\hbar}{p}$ von der Systemabmessung L_x, L_y, L_z in mindestens einer Dimension:

Abmessung	Material
$\lambda_{dB} \ll L_x, L_y, L_z$	3D Bulk
$L_x < \lambda_{dB} \ll L_y, L_z$	2D Quantenfilm (Quantum Well)
$L_x, L_y < \lambda_{dB} \ll L_z$	1D Quantendraht (Quantum Wire)
$L_x, L_y, L_z < \lambda_{dB}$	0D Quantenpunkt (Quantum Dot)

Tab. 3.1: **Quanteneffekte**, Confinement (qualitativ).

Die Elektronen in derartigen Strukturen bewegen sich nicht nur in den periodischen atomaren Potentialen sondern zusätzlich in einem Potentialtopf, dessen Abmessung der Ausdehnung des Materials entspricht [HK90]. Die Anzahl der eingeschlossenen Elektronen lässt sich präzise kontrollieren. Die räumliche Lokalisierung kann z.B. durch ein externes Feld geschehen. Im Rahmen dieser Arbeit werden Zweischichtsysteme (vertikal gekoppelte Quantenpunkte) untersucht, die in der Praxis als ein Dreischichtsystem

tem, bestehend aus Halbleiter, Isolator und Halbleiter geeigneter Materialien (z.B. *GaAs*) hergestellt werden [RPV01]. Diese können als Basis zur Untersuchung von Zweischicht-Elektronensystemen, aber auch zur Untersuchung von Elektronen-Loch-Paaren, also indirekten Exzitonen (siehe folgenden Abschnitt), genutzt werden.

3.2 Indirekte Elektron-Loch-Paare

Wenn in einem Halbleitermaterial Elektronen zum Übergang aus dem Valenzband in das Leitungsband angeregt werden, können die zwischen dem Elektron und dem Loch wirkenden Coulomb-Kräfte einen Bindungszustand erzeugen: das Elektron-Loch-Paar. Dieses Exziton (oder Elektron-Loch-Paar) stellt für einen beschränkten Zeitraum eine stabile Bindung dar - in der Praxis zerfallen diese nach einigen hundert *ns* wieder. Aus diesem Grund wird die Untersuchung von indirekten Elektronen-Loch-Paaren motiviert. Durch Energiezufuhr (z.B. Laser) können in einem Zweischichtsystem Zustände erzeugt werden, indem sich in einer Schicht ein Elektronenüberschuss und in der anderen Schicht ein Löcherüberschuss bildet. Die Löcher stellen positiv geladene Leerstellen des Substratmaterials dar, die in Bezug auf Ladung, Masse und Beweglichkeit Elektronen sehr ähnlich sind. Die genauen Eigenschaften jedoch sind materialabhängig. Wegen der Lokalisation der Löcher und Elektronen in jeweils eigenen Schichten wird eine schnelle Rekombination vermieden, und die Lebensdauer des indirekten Elektron-Loch-Paares beträgt einige μs (die des direkten Paares: einige *ns*). Indirekte Exzitonen werden im Rahmen dieser Arbeit mit Bezug auf das Massenverhältnis von Löchern zu Elektronen untersucht.

Die Kristallisation von Exzitonen wurde in [FBL03] nachgewiesen: In dem dort beschriebenen System kristallisieren sowohl die Elektronen als auch die Löcher. Bei den im Rahmen dieser Arbeit simulierten Systemen kristallisieren lediglich die Löcher, so dass in dieser Arbeit der Begriff Elektron-Loch-Kristall verwendet wird, um eine Abgrenzung von dem Begriff Exzitonenkristallisation zu schaffen. Die Betrachtung lediglich eines Elektrons und eines Lochs würde hingegen einem Exziton entsprechen.

3.3 Wigner-Kristallisation

Das Verhalten einer beschränkten Anzahl Elektronen bei hohen Dichten oder tiefen Temperaturen wurde in den letzten Jahren zunehmend untersucht. Speziell das Verhalten der Partikel in Quantenpunkten ist in den Blickwinkel

der Forschergemeinde gerückt. Es wurde für mesoskopische zweidimensionale Quanten-Elektronensysteme bei endlichen Temperaturen eine Wigner-Kristallisation nachgewiesen, also eine vom Potential abhängige räumlich lokalisierte Anordnung der Elektronen: Theoretisch: ([EHMG99], [YL99], [FBL00], [FBL01a]), Experimentell: ([Ash96], [AWGD93]). Klassische Rechnungen konnten ebenfalls eine Kristallisation und diskrete Schalen nachweisen: ([BP94], [Loz87], [SP95]). Anhand des Entartungsparameters

$$\chi \equiv n\lambda^d \quad (3.1)$$

(n : Dichte, $\lambda = h/\sqrt{2\pi mk_B T}$: therm. Wellenlänge, d : Dimension) wird das Verhalten des Systems beschrieben. $\chi = 1$ stellt die Grenze in der n/T Ebene zwischen klassischem ($\chi < 1$) und quantenmechanischem ($\chi > 1$) Verhalten dar. Da er für Wigner-Kristalle im Bereich um 1 liegt, lässt sich ein klassischer [Lud03] und ein quantenmechanischer [FBL01a] Ansatz rechtfertigen. Große Cluster mit $N > 100$ besitzen eine regelmäßige Dreiecks-Gitterstruktur.

Wigner-Kristallisation tritt ein, wenn das Verhältnis der Coulombenergie zur kinetischen Energie einen bestimmten Grenzwert überschreitet. Im klassischen Grenzfall ist dieses Verhältnis durch den Kopplungsparameter Γ und quantenmechanisch durch den Brueckner-Parameter r_s gegeben. Diese können auch den relevanten Kontrollparameter zum Nachweis eines Phasenüberganges darstellen:

$$r_s = \frac{a}{a_B} \sim \frac{|\langle U_{coulomb} \rangle|}{k_B T_F}. \quad (3.2)$$

a bezeichnet den mittleren Teilchenabstand und a_B ist der effektive Bohrradius mit $a_B = \frac{4\pi\epsilon}{x_i x_j} \frac{\hbar}{m_{ij}}$, m_{ij} bezeichnet die reduzierte Masse $m_{ij}^{-1} = m_i^{-1} + m_j^{-1}$. In dieser Arbeit handelt es sich um die Elektronenmasse m_e und die Löchermasse m_h . Die hier betrachteten Systeme liegen im Bereich $r_s \gg 1$, also einem Bereich in dem Wigner-Kristallisation auftritt.

Kapitel 4

Pfadintegral-Monte-Carlo Simulation (PIMC)

4.1 Numerische Simulation

4.1.1 Gleitkommazahlen

Numerische Simulation beinhaltet immer einen durch Diskretisierung bedingten Rundungsfehler. Reelle Zahlenwerte werden auf die Gleitkomma-Darstellung des Rechners gerundet und ziehen dementsprechend Folgefehler nach sich. Diese können z.B. bei zahlreichen Multiplikationen in Exponenten schnell zu unsinnigen Ergebnissen führen, was während der Programmierung beachtet werden sollte. Die Verwendung von `double`-Variablen (8 Bytes, Mantisse 52 Bits, Exponent: 11 Bits) reduziert den durch Rundung verursachten Fehler: sie bietet sich für nicht-kostenintensive Physiksimulationen an. Zudem sind heutzutage 64-Bit Prozessor-Architekturen keine Ausnahme mehr.

4.1.2 Zufallszahlen

Wirkliche Zufallszahlen können mit einer deterministischen Maschine nicht erzeugt werden. Ein Beispiel für wirklich zufällige Zahlenfolgen wäre z.B. der Zeitabstand zwischen zwei Zerfallsprozessen eines radioaktiven Präparates. Computergenerierte Zufallszahlen werden formal als Pseudo-Zufallszahlen bezeichnet¹. Basis sind zumeist iterative, diskrete Funktionen in Primzahlräumen. Eine häufig verwendete Methode zur Erzeugung von Zufalls-

¹Üblicherweise wird dennoch das Wort „Zufallszahl“ genutzt, da Missverständnisse unwahrscheinlich sind. Diese Arbeit schliesst sich diesem Vorgehen an.

zahlen ist die Kongruenzmethode [BSMM99]. Ein Folge ganzer Zahlen z_i ($i = 0, 1, 2, \dots$) wird nach

$$z_{i+1} = (c \cdot z_i + b) \bmod m \quad (4.1)$$

berechnet. z_0 ist eine beliebige positive Zahl und wird zur Initialisierung einer bestimmten Zufallsfolge genutzt. Die Wahl der Konstanten bestimmt maßgeblich die Qualität der Zufallszahlen. Die Zahlen z_i/m liegen zwischen 0 und 1 und können als gleichverteilt angesehen werden. Es existieren zahlreiche Arten, Zufallszahlen zu erzeugen, die sich in Bezug auf Performance und Qualität stark unterscheiden. Ein in der Wissenschaft häufig verwendeter Zufallszahlengenerator basiert auf der Subtraktionsmethode ([Knu00], [PTVF96]). In dieser Arbeit wurden die Resultate dieses Generators mit denjenigen der compilereigenen² verglichen: Im Ergebnis waren keine Unterschiede feststellbar. Die Subtraktionsmethode lieferte eine geringfügig bessere Performance.

Neben gleichverteilten Zufallszahlen können mit den entsprechenden mathematischen Umformungen auch Zufallszahlen erzeugt werden, die beliebigen Verteilungen genügen. Die Qualität von Zufallszahlen und damit die „Zufälligkeit“ kann mit Hilfe verschiedener Algorithmen bewertet werden. Genannt seien „test of frequencies“, „test of pairs“ und „test of blocks“ [PTVF96].

4.1.3 Monte-Carlo-Methode

Wenn bei einer Simulation gewisse Größen zufällig ausgewählt werden, spricht man von einer Monte-Carlo-Simulation oder einer zufallsbedingten Simulation [Stö99]. Ein klassisches Beispiel für die Monte-Carlo-Simulation ist die näherungsweise Berechnung des bestimmten Integrals $\int_0^1 f(x)dx$. Dazu wird angenommen, dass $0 \leq f(x) \leq 1$ gilt. Diese Bedingung kann z.B. durch eine Skalierung erfüllt werden. Dann werden eine Folge von Zufallszahlen im Bereich $[0, 1][0, 1]$ generiert und die Anzahl der innerhalb und ausserhalb der Funktion $f(x)$ liegenden Koordinaten m und n werden gezählt. Das Integral berechnet sich dann nach dem Prinzip der relativen Häufigkeit:

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{m}{m+n}. \quad (4.2)$$

Um eine bestimmte Genauigkeit zu erreichen, ist eine große Anzahl von Zufallszahlen notwendig. Der große Vorteil jedoch liegt in der Geschwindigkeit

²MS VisualC 6.0, GNU C/C++ 3.3.3

bei mehreren verschachtelten Integralen, z.B. im Vergleich zu der Methode der homogenen Diskretisierung, bei der die x-Achse in n gleichverteilte Bereiche unterteilt und die Summe der einzelnen Flächenstücke gebildet wird. Dieses Verfahren konvergiert nur sehr langsam mit zunehmendem n .

Dieser Vorteil wurde an Hand eines kleinen Programms zur Berechnung des Volumens einer n-dimensionalen Einheitskugel nachgewiesen. Der Flächeninhalt eines Einheitskreises ist $A_{2D} = \pi$, so dass der Bereich $[0, 1]$ einen viertel Einheitskreis darstellt ($A = \frac{1}{4}\pi$) mit $f(x) = 1 - x^2$. Auf die gleiche Art können die Funktionen für den n-dimensionalen Fall bestimmt werden: $f_{3D}(x, y) = 1 - x^2 - y^2$, $f_{4D}(x, y, z) = 1 - x^2 - y^2 - z^2$, Mit dem Program soll lediglich der Geschwindigkeitsvorteil der Monte-Carlo-Methode exemplarisch dargestellt werden, so dass auf Methoden zur Erhöhung der Effektivität wie die Trapez- oder Simpson-Regel bei der homogenen Diskretisierung verzichtet wurde. Diese würden das numerische Ergebnis der homogenen Diskretisierung verbessern, so dass auch weniger Schritte n zu genaueren Ergebnissen führen würden. Aus diesem Grund wurden beispielhaft die kleine Anzahl $n = 25$ Schritte gewählt, die im Ergebnis relativ ungenau sind, aber zumindest eine Einschätzung vermitteln, welchen Zeitaufwand die jeweilige Methode benötigt. Der analytische Wert für das Volumen einer n-dimensionalen Einheitskugel berechnet sich nach [BSMM99] mit:

$$V = \frac{\pi^{\frac{n}{2}} r^n}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)}, \quad (4.3)$$

wobei die Gammafunktion Γ folgendermaßen definiert ist:

$$\Gamma(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n! n^x}{x(x+1)(x+2)(x+3) \dots (x+n)} \quad x \in \mathbb{R} \setminus \{0, -1, -2, \dots\}. \quad (4.4)$$

In Tabelle 4.1 sind die Ergebnisse für verschiedene Anzahlen von Zufallszahlen bei der Monte-Carlo-Methode im Vergleich zum exakten Wert angegeben. Die Genauigkeit bei sehr hohen Dimensionen nimmt stark ab, da nur noch etwa 0.5% der Schüsse in das Volumen treffen. An dieser Stelle würden optimierende Verfahren einsetzen. Tabelle 4.2 stellt die Laufzeiten der beiden Verfahren dar. Ab einer Dimensionalität von $dim = 6$ ist der Geschwindigkeitsvorteil der MC-Simulation bei den beispielhaften Parametern gegeben. Die MC-Simulation liefert zudem mit der gegebenen Anzahl von $n = 1000000$ Schritten ein genaueres Ergebnis.

dim	100000	1000000	10000000	exakt
2	3.1455	3.14257	3.14104	3.141592654
3	4.1859	4.19617	4.1883	4.188790204
4	4.9454	4.91518	4.93004	4.934802202
5	5.2272	5.25776	5.26815	5.263789015
6	5.1648	5.14925	5.17549	5.167712783
7	4.67456	4.72525	4.7158	4.724765972
8	4.04224	4.07475	4.06532	4.058712129
9	3.38432	3.33926	3.31218	3.298508904
10	2.37568	2.51187	2.56881	2.550164042
11	1.92512	1.81862	1.86388	1.884103881
12	1.47456	1.22061	1.32669	1.335262770
13	1.31072	0.999424	0.908493	0.9106287555
14	0.8192	0.557056	0.638976	0.5992645299
15	0.32768	0.262144	0.353894	0.3814432811

Tab. 4.1: **Volumen einer Hyperkugel** der Dimension dim . Berechnet mit 100000, 1000000 und 10000000 Monte-Carlo-Schritten im Vergleich zum exakten Wert (Maple).

4.1.4 Klassischer Metropolis-Algorithmus

Eine Observable $\langle A \rangle = A(N, V, T)$ in einem kanonischen Ensemble (N Teilchen, Volumen V , Temperatur T) kann laut statistischer, klassischer Physik mit

$$A(N, V, T) = \frac{1}{Z(N, V, T)} \int_V \dots \int_V A_N(\mathbf{R}) e^{-\beta U_N(\mathbf{R})} d^N \mathbf{R} \quad (4.5)$$

berechnet werden ($\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$). Dabei ist $Z(N, V, T)$ die kanonische Zustandssumme

$$Z(N, V, T) = \frac{1}{N! \lambda^{DN}} \int_V \dots \int_V e^{-\beta U_N(\mathbf{R})} d^N \mathbf{R} \quad (4.6)$$

mit $\lambda = \left(\frac{2\pi m k_B T}{\hbar^2}\right)^{-\frac{1}{2}}$ (thermische Wellenlänge) und der Dimension D . Die Gleichgewichtsverteilung der Zustände \mathbf{R}_i ist dann laut Gl. (4.5) mit dem Boltzmannfaktor gegeben:

$$p_B(\mathbf{R}) = \frac{e^{-\beta U_N(\mathbf{R})}}{Z(N, V, T)}. \quad (4.7)$$

In dieser Arbeit werden Gleichgewichtszustände betrachtet, so dass die Verteilung aus Gl. (4.7) über die Zeit konstant ist. Diese Verteilung wird genutzt,

dim	dkr.st=25	dkr.t[s]	dkr.m.tr.	MC	MC t[s]	exakt
2	3.2122	0.000	3.1296	3.14257	0.203	3.141592654
3	4.4375	0.000	4.2071	4.19617	0.281	4.188790204
4	5.4503	0.000	4.9657	4.91518	0.312	4.934802202
5	5.2451	0.078	5.2863	5.25776	0.360	5.263789015
6	6.3019	1.047	5.2012	5.14925	0.406	5.167712783
7	6.0977	14.734	4.7650	4.72525	0.469	4.724765972
8	5.5673	173.422	4.0919	4.07475	0.531	4.058712129

Tab. 4.2: **Volumen einer Hyperkugel** der Dimension dim . Ergebnisse für eine diskrete Unterteilung mit $n = 25$ Schritten, die benötigte Zeit, diskrete Unterteilung mit Trapezregel (aus [FB06]), MC-Simulation mit $n = 1000000$, Simulationszeit und der exakte Wert. Ab etwa der 6. Dimension ist die Integrations-Geschwindigkeit der MC-Methode größer als die der homogenen Diskretisierung..

um Gl. (4.5) mit der MC-Methode zu integrieren (importance sampling). Die Wahrscheinlichkeitsverteilung (4.7) wird als Wahrscheinlichkeitsverteilung der abgetasteten Koordinaten genutzt. Damit vereinfacht sich (4.5) bei K gesamplen Punkten zu

$$A = \int_V \dots \int_V A_N(\mathbf{R}) p_B(\mathbf{R}) d^N \mathbf{R} \approx \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K A(\mathbf{R}_i). \quad (4.8)$$

Höhere Ordnungen, wie sie z.B zur Berechnung des Fehlers benötigt werden (siehe folgendes Kapitel), können nach [FB06] mit

$$\langle A^\mu \rangle \approx \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K A^\mu(\mathbf{R}_i). \quad (4.9)$$

berechnet werden. Dieses Vorgehen erweist sich als ausgesprochen effizient, da die Mikrozustände \mathbf{R}_i mit der Wahrscheinlichkeit p_B ausgewählt werden und damit ein sehr effizientes Sampling erfolgt. Die statistische Unsicherheit bei der Berechnung der Energie lässt sich z.B. über die Dispersion berechnen: $\sigma^2(E) = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle$.

Die Problematik zur Erzeugung einer Verteilung von Mikrozuständen nach p_B besteht darin, dass die Zustandssumme Z nicht unbedingt bekannt ist. Aus diesem Grund wird ein Markov-Prozess erzeugt, der ausgehend von einer Startkonfiguration \mathbf{R}_0 die weiteren Konfigurationen mit der Verteilung p_B erzeugt. Allgemein wird ein Prozess als Markov-Prozess bezeichnet, wenn ein zufälliges Abtasten des Konfigurationsraumes erfolgt. Somit müssen die Übergangswahrscheinlichkeiten von einem Zustand \mathbf{R}_i zu einem Zustand

\mathbf{R}_{i+1} definiert werden. Diese werden entsprechend [FB06] $v(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i + 1)$ bezeichnet. $v(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i + 1)$ muss folgende Eigenschaften erfüllen:

1. $\sum_{\mathbf{R}_{i+1}} v(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i + 1) = 1$, für alle \mathbf{R}_i . Die Wahrscheinlichkeit, dass das System einen bestimmten Zustand erreicht ist 1.
2. $\sum_{\mathbf{R}_i} p(\mathbf{R}_i) v(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i + 1) = p(\mathbf{R}_{i+1})$.
3. Ergodizität: Es kann von jedem Zustand in einer endlichen Anzahl von Schritten in jeden anderen Zustand übergegangen werden.
4. $v(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i + 1) \geq 0$, für alle \mathbf{R}_i .

Mit diesen Einschränkungen kann die Übergangswahrscheinlichkeit $v(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i + 1)$ definiert werden [FB06]:

$$v(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_i + 1) = \frac{p(\mathbf{R}_{i+1})}{p(\mathbf{R}_i)} = \begin{cases} e^{-\beta\delta U_N(\mathbf{R})} & , \delta U_N(\mathbf{R}) = U_N(\mathbf{R}_{i+1}) - U_N(\mathbf{R}_i) \geq 0 \\ 1 & , \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.10)$$

Wenn ein Schritt im Phasenraum die Energie U_N verringert, so wird er in jedem Fall akzeptiert. Wenn die Energie größer wird, so wird mit der Wahrscheinlichkeit $e^{-\beta\delta U_N(\mathbf{R})}$ akzeptiert. Es kann nachgewiesen werden, dass die derart generierte Sequenz von Zuständen der Verteilung nach Gl. 4.7 genügt [FB06].

An dieser Stelle sei die numerische Umsetzung des beschriebenen Markov-Prozesses für das kanonische Ensemble in Pseudocode nach [FB06] gegeben:

1. Initialisierung der Positionen \mathbf{R}_0 , der Anzahl der MC-Schritte K_{max} , der Observablen-Akkumulatoren A_Σ und der aktuellen Anzahl von MC-Schritten $K = 1$.
2. Auswahl eines zufälligen Teilchens i .
3. Auswahl eines Verschiebungsvektors $\delta\mathbf{r}^{(i)} = (\delta r_x, \delta r_y, \delta r_z)$ aus einem Würfel mit maximaler Kantenlänge δr_{max} . Die Wahl der Kantenlänge kann genutzt werden, um die Akzeptanzwahrscheinlichkeit bei etwa 50% zu halten, so dass eine optimale Sampling-Rate erzielt wird.
4. Versetzung von Teilchen i nach $\mathbf{r}_{i_{new}} = \mathbf{r}_i + \delta\mathbf{r}_i$.
5. Berechnung der Energiedifferenz des alten und des neuen Zustandes: $\delta U = U(\mathbf{R}_{new}) - U(\mathbf{R})$.

6. Wenn $\delta U \leq 0$ wird der Schritt akzeptiert, die Koordinaten angepasst und zu Schritt 8 gesprungen. Andernfalls weiter bei Schritt 7.
7. Generiere Zufallszahl $0 \leq \xi \leq 1$. Akzeptiere, wenn $\xi \leq e^{-\beta\delta U}$. Andernfalls stelle vorhergehende Konfiguration wieder her.
8. Akkumuliere die zu berechnenden Observablen-Zähler: $A_\Sigma + A(\mathbf{R})$. Erhöhe aktuelle MC-Schrittanzahl: $K = K + 1$.
9. Wenn $K < K_{max}$ fahre fort bei Schritt 2. Andernfalls Schritt 10.
10. Ende der Simulation. Die Observablen können über den Durchschnitt berechnet werden. Die Fehlerabschätzung lautet: $\langle A \rangle = \frac{1}{K_{max}} A_\Sigma \pm \sigma_A / \sqrt{K_{max}}$.

4.1.5 Statistischer Fehler

Der statistische Fehler ist über die relative, quadratische Schwankung einer Größe $\langle F \rangle$ definiert [Nol02]:

$$\text{err} = \sqrt{\frac{\langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2}{\langle F \rangle^2}}. \quad (4.11)$$

Umgekehrt ist $\langle F \rangle$ nur dann eine hinreichend genaue Beschreibung eines Systems, wenn $\text{err} \ll 1$ gilt.

4.1.6 Beispiel: Ising-Modell

Im Rahmen dieser Arbeit wurde mit Unterstützung von Dipl.-Phys. Patrick Ludwig beispielhaft der klassische Metropolis-Algorithmus realisiert, um das Ising-Modell zu berechnen. Dieses stellte eines der ersten Modelle eines Ferromagneten unter Berücksichtigung mikroskopischer Wechselwirkung dar: es wurde von E. Ising entwickelt [Isi25] und nach ihm benannt. Definiert wird es über die folgende Hamiltonfunktion:

$$H = -J \sum_{i,j}^N S_i S_j - \mu B_0 \sum_i^N S_i \quad (B_0 = \mu_0 H_0 \quad H_0 : \text{Magnetfeld}) \quad (4.12)$$

Das Modell beschreibt den Festkörper mit den wechselwirkenden magnetischen Momenten μ_i , die an den Gitterplätzen lokalisiert sind. Die Momente

werden durch klassische Spins S_i ($\mu_i = \mu S_i$) mit zwei antiparallelen Einstellmöglichkeiten ($S_i = \pm 1$; “up” und “down”-spin; \uparrow und \downarrow) beschrieben. Die Austauschwechselwirkung wird durch J vermittelt und findet nur zwischen benachbarten Spins statt.

Ising promovierte über die Fragestellung, ob über die mikroskopische Wechselwirkung J eine spontane Ordnung der Spins erklärt werden kann. Er löste sein Modell für den eindimensionalen Fall ($d = 1$) exakt, konnte jedoch keinen Phasenübergang nachweisen, wie es die Weißsche Theorie³ eigentlich verlangt. Erst sehr viel später⁴ konnte ein Phasenübergang zweiter Ordnung für $d \geq 2$ nachgewiesen werden.

In dem im Rahmen dieser Arbeit entstandenen Programm wird das Ising-Modell für zweidimensionale quadratische Gitterstrukturen ohne äußeres Magnetfeld angewendet. Somit können charakteristische Größen wie die Energie, die kritische Temperatur T_C oder die Magnetisierung M des Systems berechnet werden. Die mittlere Energie $\langle E \rangle$ berechnet sich nach dem Ising-Modell wie in Gl. 4.12 dargestellt, wobei der Durchschnitt zahlreicher Einzelzustände berechnet wird. Die vordere Summe $-J \sum_{i,j} S_i S_j$ wird über alle direkt benachbarten Spins durchgeführt. Die zweite Summe $-\mu B_0 \sum_i S_i$ ergibt sich in dem vorgestellten Modell zu Null, da ein System ohne äußeres Magnetfeld simuliert wird. Für den Fall $J > 0$ werden die parallelen Zustände $\uparrow\uparrow$ und $\downarrow\downarrow$ bevorzugt, da diese energetisch günstiger liegen. Dies entspricht somit einem Ferromagneten. Umgekehrt liegen für $J < 0$ antiparallele Spinorientierungen energetisch günstiger ($\uparrow\downarrow$ und $\downarrow\uparrow$), was einem Antiferromagneten entspricht. Die mittlere Magnetisierung $\langle M \rangle$ ergibt sich als Summe über alle Spins:

$$\langle M \rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N S_i \right\rangle. \quad (4.13)$$

Bei hohen Temperaturen sind die Spinorientierungen mehr oder weniger chaotisch verteilt. Eine Ordnung ergibt sich bei Unterschreitung der kritischen Temperatur T_C , die bei zweidimensionalen quadratischen Gittern bei $k_B \cdot T_C = 2,269185314213 J$ liegt.

Der Metropolis-Algorithmus zur Simulation des 2D-Ising-Modells hat folgenden Aufbau [FB06]:

³P. Weiß selbst gelang bereits vor Entwicklung der Quantenmechanik eine Modellierung des Phasenüberganges in einem Ferromagneten, obwohl es sich bei diesem Phänomen eigentlich um einen Quanteneffekt handelt [Nol02].

⁴1936: Existenzbeweis eines Phasenüberganges des Ising-Modells für $d \geq 2$, H.A. Kramers und G.H. Wannier

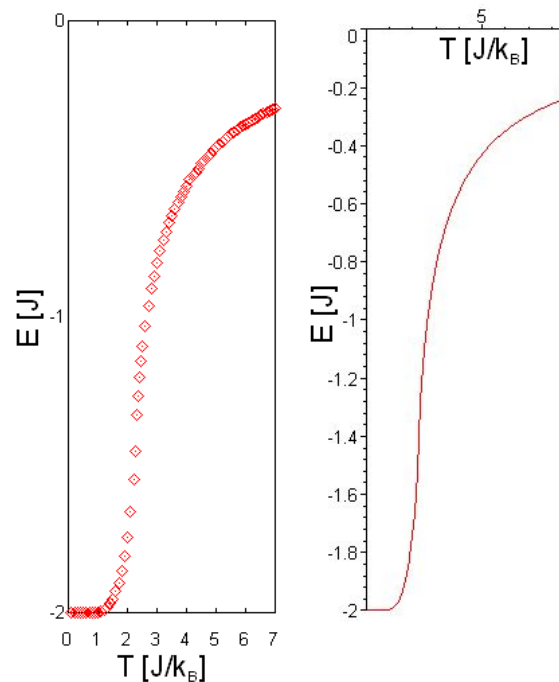


Abb. 4.1: **Ising-Modell: Energie.** Links: Simulierte Ergebnisse der Energie über die Temperatur bei 25000 MC-Schritten. Rechts: Referenz [Ran02].

1. Die Anfangsorientierungen der Spins werden zufällig gewählt. Die Anfangswerte der Energie und Magnetisierung werden berechnet. Als Basis dient ein quadratisches Gitter, so dass jeder Spin genau vier Nachbarn besitzt.
2. Wähle zufällig einen Spin i aus, dessen Orientierung geändert wird: $S_i \rightarrow -S_i$. Die Änderung wird entsprechend der Metropolis-Wahrscheinlichkeit akzeptiert bzw. zurückgewiesen.
3. Der vorhergehende Schritt wird n -mal durchgeführt. n sollte etwa der Anzahl von Gitterplätzen entsprechen.
4. Nach jedem Monte Carlo Schritt werden die physikalischen Observablen berechnet.
5. Schließlich werden die Durchschnittswerte der Observablen berechnet und ausgegeben. Die Durchschnittswerte werden auf Werte pro Spin normalisiert.

Um keine Randbedingungen betrachten zu müssen, wird ein periodisches, unendliches Gitter simuliert. Die Koordinaten bei einem $n \times m$ Gitter ergeben

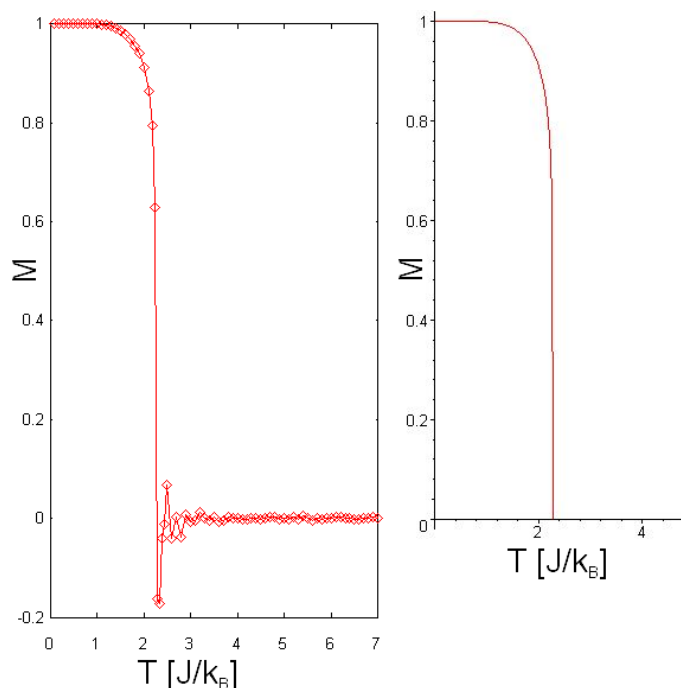


Abb. 4.2: **Ising-Modell: Magnetisierung.** Links: Simulierte Ergebnisse der Magnetisierung über die Temperatur bei 25000 MC-Schritten. Rechts: Referenz [Ran02]. Der Phasenübergang bei $T_C \approx 2.269J/k_B$ ist signifikant.

sich demnach zu $(x \bmod n, y \bmod m)$. Anschaulich gesprochen wechselwirken also die rechten Randelemente mit den linken, die oberen mit den unteren und entsprechend umgekehrt. Die im Algorithmus erwähnte Metropolis-Wahrscheinlichkeit ergibt sich folgendermaßen: Falls die Gesamtenergie nach einer Spinänderung niedriger als zuvor ist, wird die Änderung in jedem Fall akzeptiert. Andernfalls wird die Spinänderung nur dann akzeptiert, wenn

$$e^{\frac{\Delta E}{k_B T}} > \text{Zufallszahl aus } [0,1]. \quad (4.14)$$

Damit können auch lokale Minima wieder verlassen werden, was bei einem reinen Gradientenabstiegsverfahren nicht möglich wäre, bzw. adaptiv hinzugefügt werden müsste.

Die nachfolgend besprochenen Simulationen wurden für ein Gitter der Größe 100×100 mit 25000 Monte-Carlo-Schritten pro Temperatur durchgeführt. Die mikroskopische Wechselwirkung J wurde für die ferromagnetische Simulation auf $J = 1$ und für die antiferromagnetische Simulation auf $J = -1$ gesetzt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.1 für die Energie und in Abbildung 4.2 für die Magnetisierung aufgetragen. Zum Vergleich sind zudem Referenzdaten dargestellt, die exakt reproduziert wurden. Die kritische Tem-

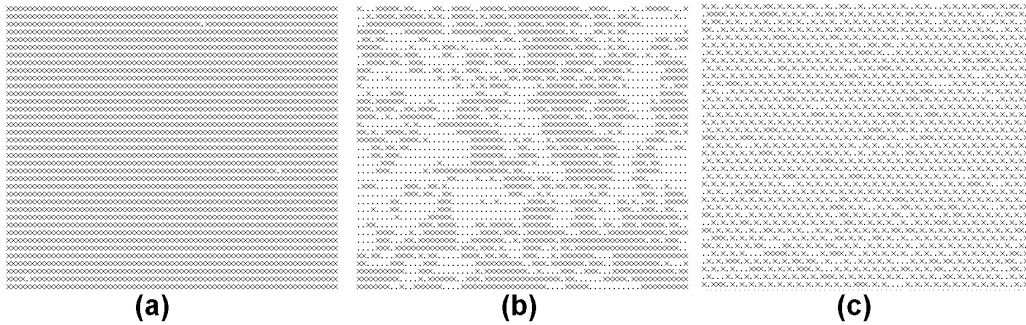


Abb. 4.3: **Ising-Modell: Beispielkonfigurationen.** Ausschnitt aus der Endkonfiguration des Gitters. "x" : \uparrow , "." : \downarrow . (a) Ferromagnet bei $k_B \cdot T = 1.0 J$; (b) Ferromagnet bei $k_B \cdot T = 3.0 J$; (c) Antiferromagnet bei $k_B \cdot T = 1.0 J$.

peratur T_C kann Abbildung 4.2 entnommen werden und entspricht dem Literaturwert. Zur Veranschaulichung der Bedeutung des Phasenüberganges sind in Abbildung 4.3(a),(b) die Endkonfigurationen bei den diskreten Temperaturen $T = 1.0 J/k_B$ und $T = 3.0 J/k_B$ dargestellt. Unterhalb der kritischen Temperatur gibt es eine Ordnung der Spins, oberhalb bilden sich Weißsche Bezirke, die chaotisch verteilt sind. Die antiparallele Ausrichtung der Spins unterhalb der kritischen Temperatur für Antiferromagneten ($J < 0$) ist für $T = 1.0 J/k_B$ in Abb. 4.3(c) abgebildet.

4.2 PIMC

Die grundlegenden Verfahren zur Berechnung von Grundzuständen, Wahrscheinlichkeitsdichten und Paarkorrelationsfunktionen mit Hilfe einer Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulation werden nun beschrieben. Praktische Grundlage ist das im Rahmen dieser Arbeit entstandene Programm zur PIMC-Simulation **PIMC-Sim**, welches die konkrete Umsetzung der beschriebenen Konzepte darstellt. Die mit **PIMC-Sim** simulierten Systeme werden in Kapitel 5 vorgestellt.

Die in Abschnitt 4.1.4 beschriebene klassische Art der Simulation kann in ähnlicher Weise quantenmechanisch durchgeführt werden. Der Boltzmann-Wahrscheinlichkeitsverteilung $p_B \sim e^{-U_N(\mathbf{R}/k_B T)} / Z$ zum Samplen der Partikel entspricht dann der Dichteoperator $\hat{\rho}$. Dieser lässt sich aber in der Quantenmechanik für ein System aus n wechselwirkenden Teilchen in der Regel nicht analytisch ausdrücken. An dieser Stelle setzte Feynman an und stellte den Dichteoperator mit Pfadintegralen dar. Der Kerngedanke besteht darin, den unbekanntem Dichteoperator $\hat{\rho}(T)$ bei einer bestimmten Temperatur T mit der Hochtemperatur-Asymptoten-Approximation auszudrücken, die analy-

tisch bekannt ist. In diesem Fall müssen jedoch nicht nur $3N$ Integrale gelöst werden, sondern wesentlich mehr Integrale, weshalb sich die MC-Integration anbietet (vgl. Abschn. 4.1.3). Für N Teilchen wird $\hat{\rho}$ eine $6N \times 6N$ Matrix, die in Koordinatenschreibweise als

$$\hat{\rho} \rightarrow \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \beta) = \langle \mathbf{R} | e^{-\beta \hat{H}} | \mathbf{R}' \rangle = \sum_i \phi_i^*(\mathbf{R}) \phi_i(\mathbf{R}') e^{-\beta E_i} \quad (4.15)$$

ausgedrückt werden kann. Damit bedeutet die Spur von $\hat{\rho}$ die Integration über die Diagonalelemente der Dichtematrix, die Zustandssumme wird also:

$$Z = \text{Tr } \hat{\rho} = \int_V d^N \mathbf{R} \rho(\mathbf{R}, \mathbf{R}; \beta). \quad (4.16)$$

Dieser Ausdruck kann direkt mit der MC-Methode integriert werden, wenn $\hat{\rho}$ bekannt ist. Das ist in der Regel nur für ideale Quantensysteme der Fall. Für realistische, nicht ideale Quantensysteme wird der folgende Ansatz benutzt:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\beta \hat{H}} = \left[\frac{1}{Z'} e^{-\delta \beta \hat{H}} \right]^n. \quad (4.17)$$

Dabei gilt $\delta \beta = \beta/n = 1/k_B T n$. Der Dichteoperator $\hat{\rho}$ wird somit als ein Produkt von n Dichteoperatoren des selben Systems bei n -fach höherer Temperatur dargestellt. In [FB06] wird gezeigt, dass ρ mit Hilfe der Hochtemperaturapproximation $\tilde{\rho}$ (falls bekannt) dargestellt werden kann:

$$\rho(q, q'; \beta) = \tilde{\rho}(q, q'; \beta) + A_n. \quad (4.18)$$

Dabei wurde $q \equiv (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ und $q' \equiv (\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N)$ eingeführt. Der Fehler A_n konvergiert dabei für $n \rightarrow \infty$ gegen 0. Mit Hilfe von n kann eine gewünschte Genauigkeit erreicht werden. Eine naheliegende Hochtemperaturapproximation für ein System mit dem Hamilton-Operator $\hat{H} = -\hbar^2 \sum_i \frac{\nabla_i^2}{2m_i}$ wäre z.B. (Herleitung siehe [FB06])

$$\rho(q, q'; \delta \beta) = \lambda_\delta^{-3N} e^{-\pi |q - q'|^2 / \lambda_\delta^2 - \delta \beta U(q)}, \quad (4.19)$$

mit $\lambda_\delta^2 = 2\pi \hbar^2 \delta \beta / m$ (thermische deBroglie Wellenlänge zum Quadrat), Masse m im Potential $U(q)$. Unstetigkeitsstellen, wie sie z.B. für die Coulomb-Wechselwirkung auftreten, müssen mit eigenen Hochtemperaturapproximationen dargestellt werden. Im Falle einer Coulomb-Wechselwirkung kann z.B. ein effektives Kelbg-Potential benutzt werden, das im Ursprung endlich definiert ist. Mit (4.19) und (4.16) ergibt sich dann [FBL01b]:

$$Z = \frac{1}{N! \lambda_\delta^{dNn}} \int dq^0 dq^1 \dots dq^{n-1} e^{-\delta \beta U(q^0)} e^{-\delta \beta U(q^1)} \dots e^{-\delta \beta U(q^{n-1})} \times \\ e^{-\pi (q^0 - q^1)^2 / \lambda_\delta^2} e^{-\pi (q^1 - q^2)^2 / \lambda_\delta^2} \dots e^{-\pi (q^{n-2} - q^{n-1})^2 / \lambda_\delta^2}. \quad (4.20)$$

Ersetzen der Wirkung S_m ergibt:

$$Z(\beta) = \frac{1}{\lambda_\delta^{dNn}} \frac{1}{N!} \int dq \dots \int dq^{n-1} e^{-\sum_{m=1}^{n-1} S_m} \quad (4.21)$$

$$S_m = \frac{m_e}{2\hbar^2 \delta\beta} (q^m - q^{m-1})^2 + \delta\beta V(q^m). \quad (4.22)$$

In Hinblick auf die Umsetzung in ein Computerprogramm wird die Definition mit Vektordarstellung $\mathbf{r}_m^1 \dots \mathbf{r}_m^N$ mit $m = 1 \dots n$ der N Partikel gegeben (\mathbf{r}_m^i ist Koordinate der m -ten slice des i -ten Partikels):

$$S_m = \frac{m_e}{2\hbar^2 \delta\beta} \sum_{k=0}^N (\mathbf{r}_m^k - \mathbf{r}_{m-1}^k)^2 + \delta\beta \sum_{k=0}^N V(\mathbf{r}_m^k) \quad (4.23)$$

$$V(\mathbf{r}_m^k) = \frac{e^2}{2\epsilon n} \sum_{\substack{0 \leq i \leq N \\ k \neq i}} \frac{1}{|\mathbf{r}_m^k - \mathbf{r}_m^i|} + \frac{m_e \omega^2}{2n} (\mathbf{r}_m^k)^2. \quad (4.24)$$

Dies entspricht der über die Wirkung S_m definierten Formulierung von Feynmans Pfadintegral (vgl. Abschn. 2.2). Nach [FB06] kann dieser Ausdruck als Integral über alle möglichen Trajektorien zur imaginären Zeit $t \rightarrow i\hbar\beta$ interpretiert werden, die von q nach q_n über alle Punkte q_m ($m = 1, \dots, n$) der time-slices $m\delta\beta$ reichen. Jedes Teilchen wird von $3n$ Koordinaten repräsentiert (vgl. Abb. 4.4(links)). Die inverse Temperatur β kann als imaginäre Zeit dieser Trajektorie betrachtet werden, und die Trajektorie wird mit n Punkten mit dem Zeitabstand $\delta\beta$ dargestellt. Die Wahl von n ergibt sich nach [FH65] mit der Beziehung

$$n > \frac{\hbar\omega}{k_B T}. \quad (4.25)$$

Der erste Term der Wirkung (4.22) ergibt sich aus der kinetischen Energie eines freien Teilchens. Diese Energie kann wie die Energie einer gespannten Feder interpretiert werden: $U_s = \frac{k}{2}(\Delta x)^2$. Damit würde die Veränderung der Position eines Teilchens der Veränderung der Federenergie U_s entsprechen. Die Abstände zwischen zwei benachbarten Punkten auf dem Pfad sind damit proportional zur deBroglie-Wellenlänge $\lambda = \left(\frac{2\pi\hbar^2 \delta\beta}{m_e}\right)^{\frac{1}{2}}$ ist. Bei abnehmender Temperatur vergrößert sich dieser durchschnittliche Abstand. Die Lokalisierung der Teilchen nimmt ab.

Die anschauliche Vorstellung von Federn lässt es zu, das System als über Federn verbundenes Polymer zu betrachten. Dabei sind jeweilige Nachbarn über Federn miteinander verbunden (vgl. Abb. 4.4(rechts)). Die verschiedenen Polymere interagieren lediglich zur gleichen time-slice $m\delta\beta$.

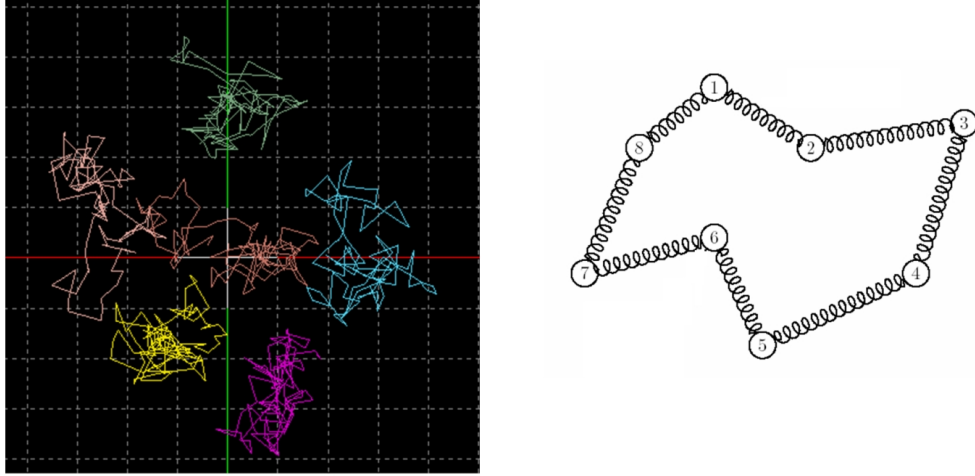


Abb. 4.4: **Slices**. Links: Bsp. einer slice-Konfiguration von 6 Partikeln (2D) während eines MC-Schrittes. (`DensityPlot`) Rechts: Anschauung der slices als über Federn verbundene Polymere.

4.3 Metropolis-Algorithmus

Die multidimensionalen Integrale des Dichteoperators (4.21) wird numerisch mit der Monte Carlo Methode - konkret mit dem Metropolis-Algorithmus - berechnet. Die N interagierenden Partikel besitzen eine Position im Konfigurationsraum für jede time-slice i ($i = 1..n$): $q^i = (\mathbf{r}_1^i, \dots, \mathbf{r}_N^i)$. Das Produkt der Exponentialfunktionen der Wirkung in (4.21) entspricht einer nicht-normierten Wahrscheinlichkeitsverteilung im Koordinatenraum. Diese Verteilung entspricht der klassischen Boltzmannverteilung [FB06], so dass das klassische Monte-Carlo-Verfahren (vgl. Abschn. 4.1.3) mit dem klassischen Metropolis-Algorithmus (vgl. Abschn. 4.1.4) im $(3N \cdot n)$ -dimensionalen Raum angewendet werden kann. Es wird entsprechend ein Markov-Prozess generiert, der ausgehend von der Startkonfiguration q_0 die weiteren Zustände mit der gegebenen Verteilung erzeugt. Die Übergangswahrscheinlichkeiten von einem Zustand zum nächsten müssen nun definiert werden und werden entsprechend Abschnitt 4.1.4 mit $v(q, q')$ bezeichnet. Die Wahrscheinlichkeitsdichte im Gleichgewichtszustand für identische Teilchen ist

$$p_q = \frac{1}{Z} e^{-\sum_{m=1}^{n-1} S_m(q)} \quad (4.26)$$

$$p_{q'} = \frac{1}{Z} e^{-\sum_{m=1}^{n-1} S_m(q')}. \quad (4.27)$$

Damit wird die Übergangswahrscheinlichkeit unabhängig von der Zustands-
summe Z

$$v(q, q') = \frac{p_{q'}}{p_q} = e^{-\sum_{m=1}^{n-1} (S_m(q') - S_m(q))}. \quad (4.28)$$

Üblicherweise wird der generalisierte Metropolis-Algorithmus genutzt: Die
Übergangswahrscheinlichkeit $v(q, q')$ wird zur Erzeugung des Markov Pro-
zesses in die Faktoren “sampling distribution” $T(q, q')$ und “acceptance pro-
bability” $A(q, q')$ zerlegt:

$$v(q, q') = T(q, q') \cdot A(q, q'). \quad (4.29)$$

In dem klassischen Metropolis-Algorithmus (vgl. Abschn. 4.1.4) wurde
die sampling distribution als konstant in einem Würfel und Null außer-
halb definiert. Damit wurde um einen zufälligen Vektor aus dem Bereich
 $(-dx..dx, -dy..dy, -dz..dz)$ verschoben. Nun sind wesentlich flexiblere Ar-
ten des Sampling möglich, und die zugehörigen Schritte werden entsprechend
 $A(q, q')$ akzeptiert oder zurückgewiesen. Falls ein Schritt zurückgewiesen
wird, verbleibt das System in Zustand q . Die auf den Bereich 0..1 geschnittene
Akzeptanzwahrscheinlichkeit berechnet sich zu:

$$A(q, q') = \min \left(1, T(s, s') \frac{p(q')}{p(q)} \right). \quad (4.30)$$

Die Berechnung einer durchschnittlichen physikalischen Observablen nach L
Schritten in der Markov-Kette erfolgt mit:

$$\langle O \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\frac{1}{L} \sum_{s=1}^L A(s)/p_s}{\frac{1}{L} \sum_{s=1}^L 1/p_s}. \quad (4.31)$$

Sowohl akzeptierte als auch zurückgewiesene Schritte fließen in die Berech-
nung des Durchschnitts ein.

Üblicherweise besitzt ein PIMC-Programm eine Bibliothek an verschiede-
nen Übergangsschritten, die jeweils eine eigene sampling distribution $T(q, q')$
besitzen. Damit wird eine vielschichtige Abtastung des Konfigurationsraumes
gewährleistet. Im Folgenden werden die am häufigsten Genutzten vorgestellt.

4.3.1 whole-particle-move

Bei diesem Move werden alle slices eines Partikels p um den glei-
chen zufälligen Vektor $\Delta r = (\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ aus einem Quader
 $(-r_x^{max} .. +r_x^{max}, -r_y^{max} .. +r_y^{max}, -r_z^{max} .. +r_z^{max})$ verschoben. Damit entspricht

dieser Move der klassischen Verschiebung des Massenmittelpunktes eines Partikels:

$$q'^p = q^p + \Delta r = \begin{pmatrix} x_p \\ y_p \\ z_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Die sampling distribution kann als gleichverteilt angesehen werden: $T(q, q') = \frac{1}{8r_x^{max}r_y^{max}r_z^{max}}$. Die Acceptance Probability berechnet sich unter Berücksichtigung von (4.28) mit

$$A = \min(1, v(q, q')). \quad (4.33)$$

4.3.2 single-slice-move

Die naheliegendste Veränderung eines Pfades ist die Veränderung eines einzelnen slices. Diese Veränderung bewirkt entsprechend (4.22) eine Veränderung der kinetischen und der potentiellen Energie. Es wird ein oder es werden mehrere Partikel und eine slice m ausgewählt und neu gesampled. Die benachbarten slices $m+1$ und $m-1$ werden dabei nicht verändert. $T(q, q')$ wird üblicherweise entsprechend freien Teilchen gewählt, da der Dichteoperator $\hat{\rho}$ für interagierende Partikel nur sehr aufwendig berechnet werden kann. Dadurch ist zur Berechnung der sampling distribution lediglich der kinetische Energieoperator vonnöten [FB06]:

$$T(q^m, q'^m) = \frac{\rho_{kin}(q^{m-1}, q'; \delta\beta) \rho_{kin}(q', q^{m+1}; \delta\beta)}{\rho_{kin}(q^{m-1}, q^{m+1}; 2\delta\beta)}. \quad (4.34)$$

Nach [FB06] ergibt sich für den d-dimensionalen Fall folgende Gaußverteilung:

$$T(q, q') = \frac{1}{2\lambda_\delta^{d/2}} e^{\frac{-2\pi(q'-\bar{q})^2}{\lambda_\delta^2}}. \quad (4.35)$$

Diese hat ihr Maximum im Mittelpunkt der benachbarten slices:

$$\bar{q} = \frac{1}{2}(q^{m-1} + q^{m+1}). \quad (4.36)$$

Die Akzeptanz bei dieser sampling distribution liegt für schwach gekoppelte Systeme nahe bei Eins. Die meisten Versuche werden somit akzeptiert. Mit $\delta\beta \rightarrow 0$ können stark gekoppelte Systeme immer auf schwach gekoppelte zurückgeführt werden, so dass der Ansatz für freie Teilchen hinreichend

ist, da bei schwach gekoppelten Systemen immer die kinetische die potentielle Energie überwiegt. Das Verfahren, lediglich ein slice in der Position zu verändern, ist verhältnismäßig ineffizient, da für große Veränderungen immer zahlreiche Monte-Carlo-Schritte benötigt werden. Zudem besteht starke Korrelation zwischen benachbarten MC-Schritten, die später bei der Berechnung von Observablen und des Fehlers berücksichtigt werden müssen. Diese Problematik kann durch wiederholtes Ausführen eines single-slice-moves pro Monte-Carlo-Schritt reduziert werden. Dennoch bieten sich andere effizientere Verfahren an, wie z.B. die im folgenden Abschnitt beschriebenen multi-level-moves.

4.3.3 Bisection-Algorithmus

Der Bisection- oder auch Multilevel-Monte-Carlo-Algorithmus behebt die im vorhergehenden Abschnitt beschriebene Problematik der Ineffizienz und der damit verbundenen sehr langsamen Konvergenz von Observablen. Aus diesem Grund wird ein Vorgehen motiviert, welches eine möglichst hohe Anzahl von slices in einem MC-Schritt verschiebt. Als Basis dient eine Baumstruktur, so dass zunächst lediglich ein slice verschoben wird. Nun wird die Akzeptanz überprüft. Falls der Schritt akzeptiert wird, werden dann 2, 4, ... slices verschoben, wobei nach jeder Verschiebung die Akzeptanz überprüft wird. Ziel ist, möglichst früh und damit schnell zu erkennen, ob weitere Verschiebungen möglich sind. Bei einer Zurückweisung kann der Algorithmus sofort abgebrochen werden.

Um einen vollständigen binären Baum zu erzeugen, werden slice-Ketten der Länge $m_0 = 2^{l_0-1}$ betrachtet. Der Parameter l_0 kann später zur Anpassung der acceptance ratio benutzt werden. Die Startposition s_0 der slice-Kette wird zufällig gewählt. Die Kette entspricht dem imaginären Zeitintervall $\delta\beta \cdot m_0$. Startpunkt q^{s_0} und Endpunkt $q^{s_0+m_0}$ bleiben statisch. Zwischen diesen soll nun ein neuer Pfad gesampled werden. Mit dem Mittelpunkt $q^{s_0+m_0/2}$ wird begonnen, da dieser den größten Abstand zu den beiden fixen Randpunkten besitzt und damit die größte Fluktuation besitzen kann. Im nächsten Schritt werden die Mittelpunkte der beiden entstandenen Intervalle gesampled, usw. Dieses Vorgehen wird rekursiv l_0 -fach wiederholt (vgl. Abb. 4.5). Bei jeder Wiederholung verdoppelt sich die Anzahl der gesampleten slices. Die transition probability wird in Abhängigkeit der aktuellen Tiefe l im Baum, also in Abhängigkeit von 2^{l-1} verschobenen slices definiert [FB06]:

$$T_l(q_l, q'_l) = \frac{p_l(s'_l)}{p_l(s_l)}. \quad (4.37)$$

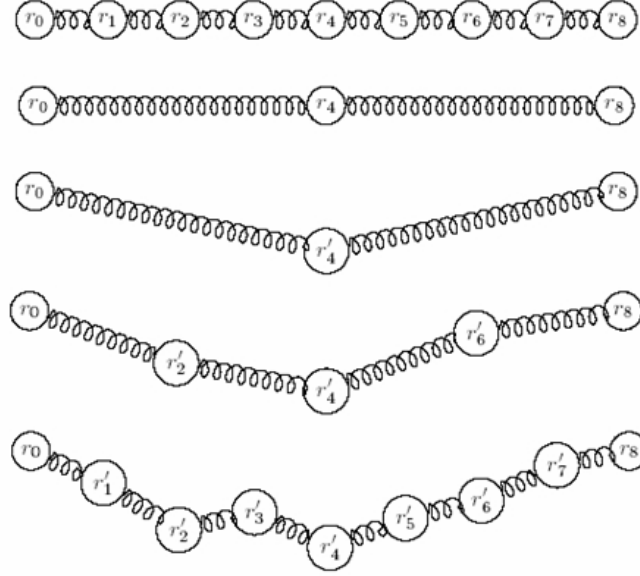


Abb. 4.5: Prinzip des Bisection-Algorithmus'.

Entsprechend wird die acceptance probability über die aktuelle und die vorhergehende Tiefe definiert:

$$A_l(q_l, q'_l) = \min \left(1, \frac{T_l(q_l) p_l(s'_l) p_{l-1}(s_l - 1)}{T_l(q'_l) p_l(s_l) p_{l-1}(s'_l - 1)} \right). \quad (4.38)$$

Die sampling distribution wird wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben über freie Partikel approximiert. Die aktuelle Baumtiefe l fließt dabei über die kinetische Energiedichtematrix bei der zur aktuellen Tiefe gehörenden Temperatur $2^l \cdot \delta\beta$ in die Berechnung ein:

$$T_l(q) = \frac{p_l(s'_l)}{p_l(s_l)} = \frac{1}{2^l \lambda_\delta^{\frac{d}{2}}} \cdot e^{\frac{-\pi(q-\bar{q})^2}{2^{l-1} \lambda_\delta^2}}. \quad (4.39)$$

\bar{q} bezeichnet dabei den Mittelpunkt des der aktuellen Tiefe zugehörigen darüberliegenden Intervalls (siehe Abb. 4.5).

Entsprechend (4.38) muss noch die Wahrscheinlichkeit $p_l(q_l)$ bei der jeweiligen Tiefe l definiert werden. Die beste Wahl ist die Definition über den vorhergehenden Zeitschritt $2^{l-1} \delta\beta$ [FB06]. Damit wird eine dem binären Baum entsprechende Hochtemperaturapproximation durchgeführt. Bei den Wurzeln des Baumes, bzw. den Abbruchbedingungen der Rekursion ist

$$p_{l_0}(q^m, \delta\beta) = \rho(q^{m-1}, q^m; \delta\beta) \rho(q^m, q^{m+1}; \delta\beta). \quad (4.40)$$

In [FB06] wird für die anderen Ebenen des Baumes entsprechend eine Definition über die vorhergehende Ebene vorgeschlagen. Für die erste Ebene $l = 1$ bei der Hochtemperaturapproximation β_0 und für slice $m + m_0/2$ wäre dies z.B.

$$p_1(q^{m+m_0/2}) = \rho(q^m, q^{m+m_0/2}; \beta_0/2) \rho(q^{m+m_0/2}, q^{m+m_0}; \beta_0/2). \quad (4.41)$$

Diese Darstellung benötigt jedoch eine separate Berechnung des Dichteoperators bei höheren Temperaturen. Diese ist sehr kostenintensiv und würde den Algorithmus um ein Vielfaches verlangsamen. Aus diesem Grund wird in dieser Arbeit eine ebenfalls übliche, numerisch jedoch attraktivere Approximation verwendet:

$$p_l(q_l) = p_{l_0}(q_l; 2^{l_0-l} \delta\beta). \quad (4.42)$$

Die Approximation der Wahrscheinlichkeiten der Wurzeln kann also weiterverwendet werden. Es wird lediglich eine andere (nämlich die eine Ebene vorhergehende) Temperatur $2^{l_0-l} \delta\beta$ benutzt.

4.4 Acceptance Ratio

Die in den vorhergehenden Abschnitten beschriebenen Methoden zum Sampling des Konfigurationsraumes sollten zur Steigerung der Effektivität in einem adaptiven Algorithmus implementiert werden. Ansonsten besteht die Problematik, dass nahezu alle ($A \approx 1$) Moves akzeptiert werden oder aber nahezu keines ($A \approx 0$). Beides sind unerwünschte Effekte, da Ersteres eine ineffektive Abtastung des Konfigurationsraumes und damit starke Korrelationen von aufeinanderfolgenden MC-Schritten und damit eine schlechte Konvergenz bedeutet, und Letzteres de facto keine Veränderung der Trajektorie und damit keine Konvergenz bedeutet. Ursache wären beim single-slice-sampling z.B. eine zu kleine bzw. zu große sampling distribution. Eine adaptive Lösung ist es, die Acceptance Ratio im Bereich um $A \approx 0.5$ zu halten, um eine gleichmäßige Anzahl von akzeptierten bzw. zurückgewiesenen Schritten zu erzielen. Der Wert 0.5 ist lediglich ein empirischer Wert - andere Verhältnisse sind denkbar. So wird eine optimale Samplingrate gewährleistet.

Beim whole-particle-move (vgl. Abschn. 4.3.1) können z.B. die Parameter r_x^{max} , r_y^{max} und r_z^{max} angepasst werden. Eine geeignete Anpassung wäre z.B. ($\Delta r = r_x^{max} = r_y^{max} = r_z^{max}$):

$$\Delta r = \Delta r \cdot \frac{A}{0.5}. \quad (4.43)$$

Auf diese Art wird Δr sehr schnell angepasst und ein Schwingen um den Wert $A \approx 0.5$ wird vermieden, wie es etwa bei $\Delta r = \Delta r + (A - 0.5)$ der Fall wäre. Auf Grund von nicht zu vermeidenden Korrelationen zwischen den einzelnen MC-Steps ist es günstig, die adaptive Anpassung nicht für jeden MC-Schritt, sondern etwa alle 50 – 100 Schritte vorzunehmen. Verwendet wird dann der Durchschnitt der Acceptance Ratio dieser letzten Schritte. Beim single-slice-move kann entsprechend vorgegangen werden. Für den Bisection Algorithmus wird die Baumentiefe l_0 verwendet (vgl. Abschn. 4.3.3). Wird l_0 verkleinert, so wird die Diffusion des Pfades im Konfigurationsraum verringert, da der Einfluss der fixierten Endpunkte zunimmt. Umgekehrt verringert sich die Akzeptanz bei steigendem l_0 , da mehr slices pro Schritt gesampled werden. Das Vorgehen entspricht demjenigen beim whole-particle-move. Lediglich wird l_0 um den Wert 1 verringert bzw. vergrößert. In der Praxis variiert l_0 im Bereich von 2..8.

4.5 PIMC-Algorithmus

Auf Grund der großen Bedeutung des PIMC-Algorithmus für diese Arbeit wird er an dieser Stelle in Anlehnung an [FB06] im Pseudocode gegeben. Er bezieht sich auf N identische Partikel mit jeweils n slices.

1. Zufällige Initialisierung der Anfangspositionen der N Teilchen: $R_0 = (r_1^0, \dots, r_N^0)$. Gestartet wird mit der klassischen Konfiguration, d.h. die Positionen aller slices eines Partikels sind zu Beginn gleich: $r_i^0 = r_i^m, m = 1..n$. Initialisierung der System Parameter.
2. Definition einer Bibliothek, welche Moves wie oft pro MC-Step ausgeführt werden sollen (single-slice-, whole-particle-, multilevel-moves).
3. Wähle zufälliges Partikel i aus.
4. Führe Bibliothek für das gewählte Partikel i aus.
5. Berechne $A(q, q')$. Erzeuge zufällige Zahl $rand \in \{0, 1\}$ und entscheide ob der aktuelle Schritt akzeptiert oder zurückgewiesen wird.
6. Bei Akzeptanz übernehme die neue Konfiguration q' , andernfalls wird die alte Konfiguration q beibehalten.
7. Berechne den Beitrag der aktuellen Konfiguration für die zu bestimmenden Observablen. Berechne den Beitrag zum Fehler.

8. Erhöhe die Anzahl der ausgeführten MC-Schritte. Falls gewünschte Anzahl erreicht, berechne die normierten Observablen. Andernfalls gehe zu Schritt (3).

4.6 Zweischichtsysteme verschiedener Teilchen

In dieser Arbeit werden, wie bereits erwähnt, Zweischichtsysteme bestehend aus Elektronen und Löchern betrachtet (vgl. Abb. 4.6). Die vorhergehend beschriebene Entwicklung zur PIMC-Simulation identischer Teilchen im 1D-, 2D- und 3D-Oszillatorpotential kann mit geringem Aufwand an die Bedürfnisse von Zweischichtsystemen nicht-identischer Teilchen angepasst werden.

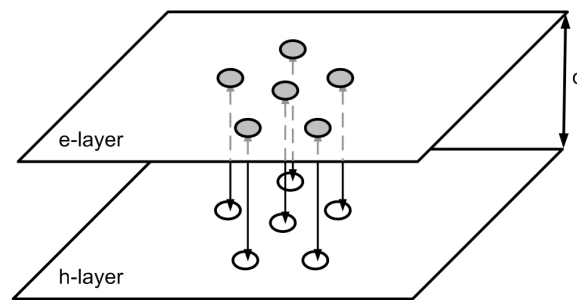


Abb. 4.6: **Zweischichtsystem mit Elektronen e und Löchern h** im Abstand d . Die Lokalisierung für jede Schicht erfolgt pro Layer durch ein eigenes harmonisches Potential.

Zunächst werden die beiden Teilchentypen definiert. Das heisst, dass zwei Teilchen (Elektronen, Löcher) mit jeweils eigener Masse (m_1, m_2) und eigener Ladung (Q_1, Q_2) definiert werden. Im Falle von Elektronen und Löchern gilt: $m_h = m_2 = m_1 = m_e$ und $Q_h = Q_2 = -Q_1 = -Q_e$. Es sind aber auch andere Konfigurationen denkbar. Für die Darstellung eines Zweischicht-Elektronensystems würde gelten: $m_1 = m_2 = m_e$ und $Q_1 = Q_2 = Q_e$. Zusätzlich sollte für jeden Partikeltyp eine eigene Oszillatorfrequenz definiert werden. Im Falle von Nicht-Schichtsystemen (also identische Teilchen im 1D-, 2D- oder 3D-Oszillatorpotential) ist diese Definition nicht von Relevanz, da alle Partikel sich im selben Potential bewegen (z.B. Plasma). Aber mit Hinblick auf Zweischichtsysteme und die Darstellung von Elektronen und Löchern, wobei die Löcher eine unterschiedliche Masse besitzen, ist die Definition eigener Potentiale notwendig, damit Elektronen und Löcher auf die gleiche Art lokalisiert werden. Dazu wird die massenabhängige Relation der

Frequenzen der beiden harmonischen Potentiale getroffen:

$$m_e \omega_e^2 = m_h \omega_h^2. \quad (4.44)$$

Innerhalb der Simulation erfährt jeder Partikeltyp lediglich das für ihn definierte Potential in der jeweiligen Schicht. Nun werden noch die Gleichungen zur Berechnung der potentiellen und kinetischen Energie (vgl. Gl. (4.24), Gl. (2.25)) auf verschiedene Partikeltypen $t = 1, 2, \dots$ angepasst:

$$V(\mathbf{r}_m^k) = \frac{1}{2\epsilon n} \sum_{\substack{0 \leq i \leq N \\ k \neq i}} \frac{Q_t Q_k}{|\mathbf{r}_m^k - \mathbf{r}_m^i|} + \frac{m_t \omega_t^2}{2n} (\mathbf{r}_m^k)^2 \quad (4.45)$$

$$E_{\text{kin},t} = \frac{dn}{2\beta} - \left\langle \sum_{k=0}^n \frac{nm_t}{2\hbar^2 \beta^2} (q^{k+1} - q^k)^2 \right\rangle. \quad (4.46)$$

Da die Acceptance Probability lediglich über die Wirkung S ausgerechnet wird, bedarf es hier keiner erneuten Anpassung, sondern sie wird nach oben beschriebener Veränderung von S korrekt für den jeweiligen Teilchentyp bestimmt.

Um das Zweischichtsystem zu realisieren bestehen zwei Möglichkeiten: Das System besteht aus zwei 2D-Ebenen. So können zwei zweidimensionale Systeme jeweils einzeln berechnet werden, wobei die zwischen den Schichten (Abstand d) wirkenden Kräfte (i.d.F. Coulombkräfte) separat zur Berechnung der Wirkung und der Energien hinzugefügt werden müssen. Diese unabhängige Betrachtung erfordert jedoch einige strukturelle Änderungen im Code. Deshalb wurde im Rahmen dieser Arbeit ein anderer Ansatz gewählt:

Das ganze System wird dreidimensional mit den verschiedenen Partikeltypen gerechnet, wobei Zwangsbedingungen eingefügt werden, die den einen Partikeltyp in Ebene 1 und den anderen Partikeltyp in Ebene 2 lokalisieren. So werden alle wirkenden Kräfte - insbesondere auch die Inter-Schichtkräfte - innerhalb des Systems korrekt berechnet, ohne explizite Behandlungen derselben einführen zu müssen, und eine maximale Flexibilität in der Wahl des zu simulierenden Systems ist gewährleistet. Dabei werden die Partikel in Ebene 1 mit dem harmonischen, externen Potential mit ω_1 und diejenigen in Ebene 2 mit ω_2 lokalisiert.

Prinzipiell ist es auf diese Art ohne erheblichen Aufwand möglich, ein beliebiges Potentiale zu benutzen. Die Verwendung des harmonischen Potentials stellt zwar keine erhebliche Einschränkung dar, da derartige Potentiale experimentell gut realisiert werden können, jedoch könnten diskretisierte numerische Potentiale, die interpoliert werden, jedes beliebige Potential nachbilden. Dies ist insbesondere mit Hinblick auf Experimente eine attraktive Möglichkeit. Gleiches gilt für das Wechselwirkungspotential: Statt eines

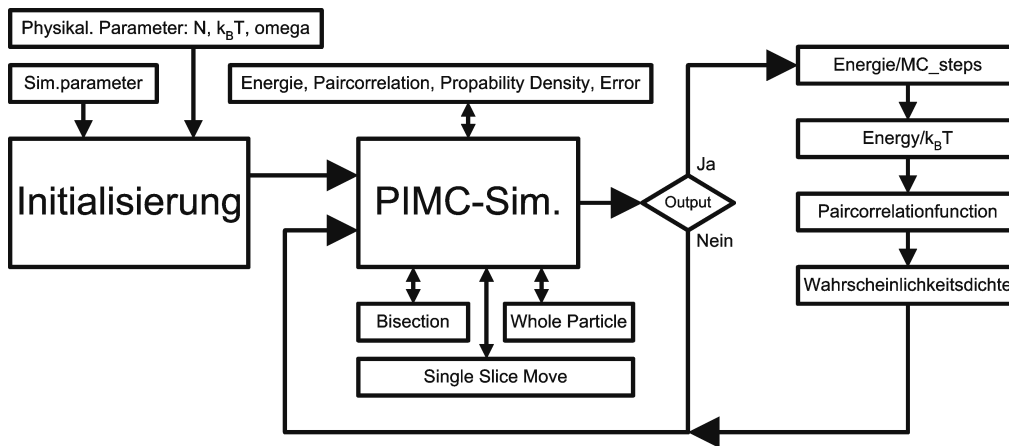


Abb. 4.7: **Ablaufdiagramm** des im Rahmen dieser Arbeit entstandenen Programms zur PIMC-Simulation PIMC-Sim.

Coulombpotentials, dessen Polstellen in bestimmten Fällen die Simulation behindern, könnte ein effektives Quantenpotential Verwendung finden. Oder, wenn man das Einlesen eines beliebigen diskreten Potentials ermöglicht, jedes denkbare Andere. Derartige Änderungen sind ohne großem Aufwand möglich und würden die Anzahl simulierbarer Systeme um ein Vielfaches erhöhen.

4.7 Implementierung

Alle beschriebenen Konzepte zur Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulation wurden im Rahmen dieser Arbeit mit dem Programm PIMC-Sim realisiert. Der Programmablauf ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Die Umsetzung basiert dabei im Kern auf dem in Abschnitt 4.5 gegebenen Metropolis-Algorithmus. Im Rahmen der Initialisierung können folgende Parameter gesetzt werden:

- Anzahl MC-Schritte mc
- Anzahl MC-Schritte bis Observablenberechnung (Einschwingen)
- Dimension d
- Anzahl Partikel n (bei Bedarf: Anzahl welchen Typs (z.B. 3 Elektronen, 5 Löcher))
- Anzahl slices m
- Schichten ja/nein - wenn ja: Schichtabstand d
- Temperatur $k_b T$

- Dichte n
- Partikeleigenschaften: Ladung e , Masse m , Frequenz ω . Bei Bedarf für verschiedene Teilchen.
- Bibliothek der auszuführenden Schritte (single slice-, whole particle-, bisection-move)

Bei Bedarf können bestimmte Systemparameter abgescannt werden: Diese Funktionalität ist entscheidend für die Suche nach Phasenübergängen. Aus Gründen der Lesbarkeit des Codes basiert die Mathematik auf Vektorobjekten, die die entscheidenden Vektoralgebraroutinen unterstützen. Die Leistungseinbußen liegen bei unter 10% und somit in einem akzeptablen Bereich. Somit ist auch eine einfache Dimensionsveränderung möglich, da lediglich die Dimensionalität der Vektoren angepasst wird. Zu jedem MC-Schritt wird die aktuelle slice-Konfiguration in eine Datei geschrieben. Da der Metropolis-Algorithmus mit dem Markov-Prozess den Dichteoperator im Ortsraum abtastet, kann aus dieser Datei die Ortsdichte bestimmt werden. Diese kann z.B. mit dem im Rahmen dieser Arbeit entstandenen Visualisierungsprogramm (siehe Kapitel A) graphisch dargestellt werden.

Um die laufende Simulation jederzeit kontrollieren zu können, ist es sinnvoll, alle in Dateien geschriebenen Informationen regelmäßig zu aktualisieren. Rechnungen können sich über Tage hinziehen, so dass eine graphische Darstellung bereits während des Simulationslaufes (z.B. Paarkorrelationsfunktion, Energiekonvergenz) gerade während der Fehlersuche unnötigen Rechenaufwand vermeiden kann. Der genaue Zeitaufwand einer Simulation kann ob der Linearität der Monte-Carlo-Simulation sehr genau angegeben werden, indem z.B. einige tausend MC-Schritte n gemacht werden, deren Zeitaufwand t_0 gemessen wird. Der genaue Zeitaufwand beträgt dann $t_{ges} = \frac{MCSteps}{n} t_0$.

Die potentielle und kinetische Energie werden entsprechend (4.45) und (4.46) berechnet. Getestet wurde auch ein anderer Estimator für die kinetische Energie (vgl. [FB06]). Der Nachteil von (4.46) besteht darin, dass die Differenz zweier sehr großer Zahlen gebildet wird (im Fall von großem n, m), so dass die Differenz stark fluktuiert. Die Verwendung von inkrementellen Koordinaten beseitigt diese Problematik (z.B. [FVBL01]):

$$\tilde{q}^j = q^0 + \sum_{i=1}^j \lambda_\delta \xi^i. \quad (4.47)$$

($j = 1..m - 1$), ξ^i sind Einheitsvektoren und q^0 ist die Teilchenkoordinate der ersten slice. Aus der thermodynamischen kinetischen Energie, definiert

über die Massenableitung der Zustandssumme

$$E_{kin} = \frac{m}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial m}, \quad (4.48)$$

ergibt sich dann für die kinetische Energie von Elektronen in der harmonischen Falle [FB06]:

$$E_{kin} = \frac{dnm}{2\beta} + \frac{m_e \omega^2}{2n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (q_i^j | \lambda_\delta \sum_{k=1}^j \xi^k) + \frac{e^2}{2\epsilon m} \sum_{i < j} \sum_{k=1}^m \frac{(q_i^k - q_j^k | \sum_{l=1}^k (\xi_i^l - \xi_j^l))}{|q_i^k - q_j^k|^3}. \quad (4.49)$$

In der Umsetzung werden zunächst die Koordinaten \tilde{q}^i ($i = 1..m-1$) berechnet. Die kinetische Energie kann dann direkt mit obiger Formel bestimmt werden. Die Summen über ξ werden unter Berücksichtigung von Gleichung (4.47) trivial:

$$\sum_{i=1}^j \xi^i = \frac{\tilde{q}^j - q^0}{\lambda_\delta}. \quad (4.50)$$

Die Grenzen numerischer Rechnungen traten auch bei der Berechnung der Acceptance Probability auf (vgl. Gl. (4.28)f.). Die Summe im Exponenten darf nicht in ein Produkt von Exponentialfunktionen zerlegt werden. Die numerische Genauigkeit ist zu gering, so dass es wegen der starken Streuung zu unsinnigen Ergebnissen kommen kann.

4.7.1 Teilchenzahldichte

Die Teilchenzahldichte $n(r)$ wird aus dem Durchschnitt der Teilchen- und slice-positionen über die Monte-Carlo-Schritte gebildet. Aufgrund des Markov-Prozesses stellt die Abtastung des Raumes für $mc \rightarrow \infty$ im Durchschnitt genau die Teilchenzahldichte im Raum dar. Somit wird der Raum entsprechend der Dimension von r in Streckenabschnitte, Kreisringe oder Kugelscheiben diskretisiert. Die Anzahl der Diskretisierungsschritte n_n ist frei wählbar. Gleiches gilt für den maximal zu berücksichtigenden Radius r_{max} . Es wird lediglich die Funktion der Partikel aufgestellt, für die $r < r_{max}$ gilt. Da die Teilchenzahldichte $n(r)$ ein normiertes Histogramm darstellt, wird die Anzahl der Partikel über den Abstand gezählt. Gespeichert wird diese Summe in einem Array. Abschließend erfolgt die Normierung auf die Fläche

und auf n : ($\int n(r)dr = n$). Der Flächennormierungsfaktor $1/A$ berechnet sich entsprechend der Dimension an Position x bei einer Diskretisierung Δr mit

$$A_{1D} = \Delta r \quad (4.51)$$

$$A_{2D} = \pi(x + \Delta r)^2 - \pi x^2 \quad (4.52)$$

$$A_{3D} = \frac{3}{4}\pi(x + \Delta r)^3 - \frac{3}{4}\pi x^3. \quad (4.53)$$

Im Falle von Zweischichtsystemen kann so die Dichte der Elektronen und die der Löcher bestimmt werden. Liegt eine Schicht außerhalb des Ursprunges, muss vor Bestimmung des Abstandes vom Ursprung eine Translation durchgeführt werden.

4.7.2 Paarkorrelationsfunktion

Die Berechnung der Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ entspricht weitestgehend derjenigen der Teilchenzahldichte. Zunächst werden die Abstände der Partikel bei gleichen slices bestimmt, woraus sich eine halbseitig gefüllte ($n \cdot m \times n \cdot m$)-Matrize ergibt. Diese Werte dienen dann zur Inkrementierung des Histogrammes. Die Normierung erfolgt ebenfalls entsprechend. Die mit zunehmender MC-Schrittzahl konvergierenden durchschnittlichen Abstände sollten in einer weiteren Matrix mit Hinblick auf die Berechnung der relativen Abstandsfluktuation (siehe nächsten Abschnitt) gesichert werden. Bei zwei Schichten, die mit Elektronen und Löchern aufgefüllt sind, können nun folgende Paarkorrelationsfunktionen bestimmt werden: Elektron-Elektron, Loch-Loch, Elektron-Loch (Projektion aller Partikel auf eine Ebene).

4.7.3 Relative Abstandsfluktuation

Die im Rahmen dieser Arbeit für den Nachweis eines Phasenüberganges genutzte relative Abstandsfluktuation (vgl. Gl. (2.27)) lässt sich direkt berechnen, wenn die durchschnittlichen Partikelabstände $\langle r_{ij} \rangle$ und dieselben zum Quadrat $\langle r_{ij}^2 \rangle$ bekannt sind. Die durchschnittlichen Partikelabstände werden während der Simulation in einer Matrix gespeichert, wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben. An derselben Stelle, an der diese Matrix erzeugt wird, werden die Quadrate dieser Abstände in einer weiteren Matrix gespeichert. Die pro Monte-Carlo-Schritt berechneten neuen Abstände (bzw. zum Quadrat) werden in diese Matrizen hinzuaddiert. $\langle r_{ij} \rangle$ und $\langle r_{ij}^2 \rangle$ können dann für jedes Partikelpärchen durch Dividieren der Monte-Carlo-Schritte bestimmt werden. Die Abstandsfluktuation kann auch aus der Paarkorrelationsfunktion bestimmt werden. In dieser Arbeit wird jedoch die oben beschriebene Art gewählt.

Kapitel 5

Simulationsergebnisse

Dieses Kapitel stellt die mit dem im vorhergehenden Kapitel beschriebenen Konzept der Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulation erzielten Simulationsergebnisse vor. Basis ist dabei das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Programm `PathSim`. Zunächst wird das der Simulation zugrundeliegende Modell und der zugehörige Hamiltonoperator für alle Systeme eingeführt. Nach einer kurzen Diskussion der Einheitensysteme werden zunächst berechnete Systeme vorgestellt, für die entweder eine analytische Lösung existiert (1 Partikel im n -dimensionalen harmonischen Potential) oder für die Vergleichswerte aus anderen wissenschaftlichen Veröffentlichungen vorliegen. Diese Systeme sollen exemplarisch die vielfältigen Möglichkeiten einer PIMC-Simulation vorstellen, aber vor allem sollen sie die korrekte Funktionsweise von `PathSim` demonstrieren. Diese Veröffentlichungen dienten unter anderem auch während der Entwicklung und Validierung des Programms `PathSim` als Referenzwerte. Behandelt werden hauptsächlich zweidimensionale Systeme, Zweischichtsysteme aus Elektronen und Löchern bei verändertem T, n und schließlich Konvergenzbetrachtungen.

Im zweiten Abschnitt dieses Kapitels (ab Abschnitt 5.4) werden dann die neuen Ergebnisse dieser Arbeit vorgestellt: Untersucht wird der Einfluss des Massenverhältnisses von Elektron-Loch-Paaren (m_h/m_e) auf einen Phasenübergang vom Fluid zum Kristall. Zwei indirekte Elektron-Loch-Systeme werden betrachtet: 3 und 6 Elektron-Loch-Paare im harmonischen Potential.

5.1 Modell

Diese Arbeit betrachtet Zweischichtsysteme mit den Schichtpositionen an $z = l_0$ und $z = l_1$ im Abstand $l_1 - l_0 = d$ (siehe Abb. 4.6, Kapitel 4), die zwei Quantenpunkten entsprechen. Diese können als zwei 2D-Schichten

angesehen werden, die von Elektronen und/oder Löchern besetzt sind und von einem umgebenden harmonischen Potential lokalisiert werden. Dabei besitzt jede Schicht ein eigenes Potential. Zwischen den Schichten wirkt lediglich das Wechselwirkungspotential, das in dieser Arbeit mit dem Coulomb-Potential beschrieben wird. In jeder Schicht befinden sich nur Partikel gleichen Typs (gleiche Masse, Ladung). Da die Coulombkraft eine Anziehung von Teilchen verschiedener Ladung bewirkt, würde dieser Effekt mit der PIMC-Simulation zu einer Explosion des numerischen Systems führen. Die räumlich mit dem Abstand d getrennten Schichten verhindern eine Rekombination der Elektron-Loch-Paare und erhöhen im Experiment deren Lebensdauer erheblich.

Der Hamiltonoperator für derartige Systeme lautet (dreidimensionaler Vektor r_i , $i = 1 \dots N$)

$$\hat{H}_{3D} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m \omega^2 (r_i)^2 + \sum_{i < j < N} \frac{e^2}{\epsilon |r_i - r_j|}. \quad (5.1)$$

Unter der Berücksichtigung zweier Schichten an l_0 und l_1 mit jeweils eigenen Potentialen erweitert sich der dreidimensionale Hamiltonoperator formal auf (Schichten in xy-Ebene)

$$\hat{H}_{3D} = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i (\delta_{r_{iz}l_0} \omega_0 + \delta_{r_{iz}l_1} \omega_1)^2 (r_i - l_{\delta_{r_{iz}l_1}})^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{e_i e_j}{\epsilon |r_i - r_j|}. \quad (5.2)$$

N bezeichnet dabei die Anzahl der Partikel, m_i die Masse des i -ten Partikels, δ_{xy} die Dirac'sche Deltafunktion ($\delta_{xy} = 1$; gdw. $x = y$; sonst 0), r_{iz} steht für die z -Komponente der Position von Partikel i und ω_0 bzw. ω_1 stehen für die Frequenz der externen Potentiale in Layer 0 bzw. Layer 1, e_i für die Ladung des i -ten Partikels, ϵ ist die Hintergrunddielektrizitätskonstante. Eine Translation des harmonischen Potentials ist notwendig, damit der Ursprung des jeweiligen Potentials im Ursprung der jeweiligen Ebene liegt.

Als Zwangsbedingungen für die Darstellung der Schichten im Dreidimensionalen (vgl. Abschn. 4.6) werden Folgende eingeführt:

- Elektronen/Löcher in Layer 1: $r_{iz} = l_0$
- Elektronen/Löcher in Layer 2: $r_{iz} = l_1$

Damit gilt für ein System aus N_e Elektronen in Schicht 1 und N_h Löcher in Schicht 2 ($N = N_e + N_h$):

$$\sum_{i=1}^N r_{iz} = N_e l_0 + N_h l_1. \quad (5.3)$$

Würde das System in 2D (also $2 \times 2D$ -Ebenen) betrachtet werden (und nicht wie in dieser Arbeit als 3D System mit Zwangsbedingungen), so müsste ein Korrekturfaktor in den Coulomb-Anteil des Hamiltonoperators eingefügt werden, um dem Schichtabstand d Rechnung zu tragen (e_i, e_j bezeichnen die Ladung des i -ten bzw. j -ten Partikels, r in diesem Fall einen zweidimensionalen Vektor, T_i ist der Typ von Partikel i):

$$\hat{H}_{2D} = \sum_{i < j < N} \frac{e_i e_j}{\epsilon \sqrt{(r_i - r_j)^2 + d^2(1 - \delta_{T_i T_j})}}. \quad (5.4)$$

5.2 Einheitensystem, Entdimensionalisierung

Zur Entdimensionalisierung des Hamiltonoperators \hat{H} wird zunächst entsprechend Gl. (5.1) die Längenskala r_0 eingeführt, für die gilt:

$$\frac{e^2}{\epsilon r_0} = \frac{m \omega^2 r_0^2}{2} \quad (5.5)$$

$$\iff r_0^3 = 2 \frac{e^2}{m \omega^2 \epsilon}. \quad (5.6)$$

Die Coulomb-Energie wird ebenfalls entsprechend Gl. (5.1) eingeführt:

$$E_c = \frac{e^2}{\epsilon r_0}. \quad (5.7)$$

Mit der zugehörigen Skalierung $r \rightarrow r/r_0$ und $E \rightarrow E/E_C$ lautet der entdimensionalisierte Hamiltonoperator nun:

$$\hat{H}_{3D} = \frac{n^2}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^N r_i^2 + \sum_{i < j}^N \frac{1}{|r_i - r_j|}. \quad (5.8)$$

n stellt die durchschnittliche Dichte des Quantensystems dar. Mit $n \equiv \sqrt{2} l_0^2 / r_0^2 = (a_B / r_0)^{1/2}$ und $l_0^2 = \hbar / (m \omega_e)$ ($a_B = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_e^2}$: effektiver Bohrradius, l_0^2 : Erweiterung der Grundzustandswellenfunktion für nichtwechselwirkende

Partikel). Somit kann der Brückner Parameter (vgl. Kapitel 3.3) nun über n definiert werden (a_B : effektiver Bohrradius):

$$r_s = \frac{r_0}{a_B} = \frac{1}{n^2}. \quad (5.9)$$

Das durch den Hamiltonoperator \hat{H} (5.8) beschriebene System kann somit im Grundzustand mit den Parametern der Teilchenzahl N und der Dichte n vollständig charakterisiert werden. Für n gilt entsprechend (5.9):

$$n^3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_e. \quad (5.10)$$

Für die Schichtsysteme kommt der Parameter d für den Schichtabstand hinzu und da die PIMC-Methode endliche Temperaturen simuliert, wird die dimensionslose Temperatur $T \equiv k_B T / E_C$ eingeführt.

Bei einigen Referenzsystemen kommt das atomare Einheitensystem zur Anwendung: Die Energie wird über das effektive Hartree $1 Ha = \frac{e^2}{\epsilon a_B}$ definiert und die Längeneinheit ist der effektive Bohrradius $a_B = \frac{\hbar \epsilon}{m_r e^2}$ mit $1/m_r = 1/m_h + 1/m_e$. Die Temperatur T_{atomic} wird ebenfalls in Ha gegeben. In diesem System wird der Dichteparameter n mit

$$\frac{m \omega^2 a_B^3 \epsilon}{e^2} = \sqrt{2} n^3 \quad (5.11)$$

definiert [FLG⁺03].

Um bestimmte Referenzen vergleichsweise nachzurechnen, wurde zusätzlich noch ein anderes System zur Parametrisierung der Wechselwirkung benutzt: Es wird als Längenskala die Längenskala des externen Potentials $l_0 = \sqrt{\hbar / m \omega_0}$ genutzt, um dann die Stärke des Confinementpotentials über den Parameter λ zu definieren:

$$\lambda = \frac{l_0}{a_B} = \frac{e^2}{\epsilon \omega_0 l_0}. \quad (5.12)$$

Damit gilt die Relation $\lambda \sim 1/n^2$. Die Energieskala entspricht $\hbar \omega_0$: Somit gilt für die Temperatur $T_{\text{osz}} \equiv k_B T / (\hbar \omega_0)$. Bei einer Definition der Stärke der Wechselwirkung über den Parameter λ oder bei einer expliziten Nennung der Längen- oder Energieskala wird dieses System verwendet, ansonsten gilt das vorher genannte Einheitensystem.

Die radiale Teilchendichte $n(r)$ wird wie üblich im Zweidimensionalen entsprechend der folgenden Gleichung normiert:

$$\int_0^\infty 2\pi r n(r) dr = N. \quad (5.13)$$

Die Faktoren für den ein- und dreidimensionalen Fall entsprechen (4.51) und (4.53). Diese Normierung sei bedacht für diejenigen Graphen, die unnormiert dargestellt werden. Die Einheiten sind dann als willkürliche Einheiten (**WKE**) bezeichnet. Der Informationsgehalt nimmt aufgrund der fehlenden Normierung nicht ab. Entsprechendes gilt für die radiale Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ im Zweidimensionalen:

$$\int_0^\infty r g(r) dr = 2\pi. \quad (5.14)$$

5.3 Referenzsysteme

Im Folgenden werden berechnete Systeme vorgestellt, zu denen Referenzergebnisse vorliegen. Prinzipiell können jegliche Partikel - nicht nur Elektronen - simuliert werden. Dazu müssen dann die Parameter der Ladung q und der Masse m angepasst werden.

5.3.1 Elektron im nD-harmonischen Potential

An dieser Stelle wird das denkbar einfachste System eines harmonischen Potentials vorgestellt: Ein Elektron im harmonischen Potential für den 1D-, 2D- und 3D-Fall. Dabei werden keine Schichten betrachtet, sondern lediglich ein Elektron in der jeweiligen Dimension, welches durch ein entsprechendes n-dimensionales harmonisches Potential lokalisiert wird. Aufgrund fehlender Wechselwirkung mit anderen Partikeln vereinfacht sich der in Abschnitt 5.8 vorgestellt Hamiltonoperator (Gl. 5.8) zu

$$\hat{H} = \frac{n^2}{2} \nabla_0^2 + r_0^2. \quad (5.15)$$

Die Simulation wurde mit 35000 Monte-Carlo-Schritten und 70 slices für das Elektron durchgeführt. Der Fehler berechnet sich entsprechend Abschnitt 4.1.5. Als analytischer Vergleichswert dient der in Abschnitt 2.3 von Feynman hergeleitete analytische Ausdruck für die potentielle und kinetische Energie des harmonischen Oszillators (2.19), die hier zum besseren Verständnis nochmals, aber für d-Dimensionen und $E_{ges} = E_{pot} + E_{kin}$ gegeben wird:

$$\langle E_{kin} \rangle = \langle E_{pot} \rangle = \frac{d \hbar \omega}{4} \coth \frac{\hbar \omega}{2kT} \quad (5.16)$$

$$\Leftrightarrow \langle E_{ges} \rangle = \langle E_{pot} \rangle + \langle E_{kin} \rangle = \frac{d \hbar \omega}{2} \coth \frac{\hbar \omega}{2kT} \quad (5.17)$$

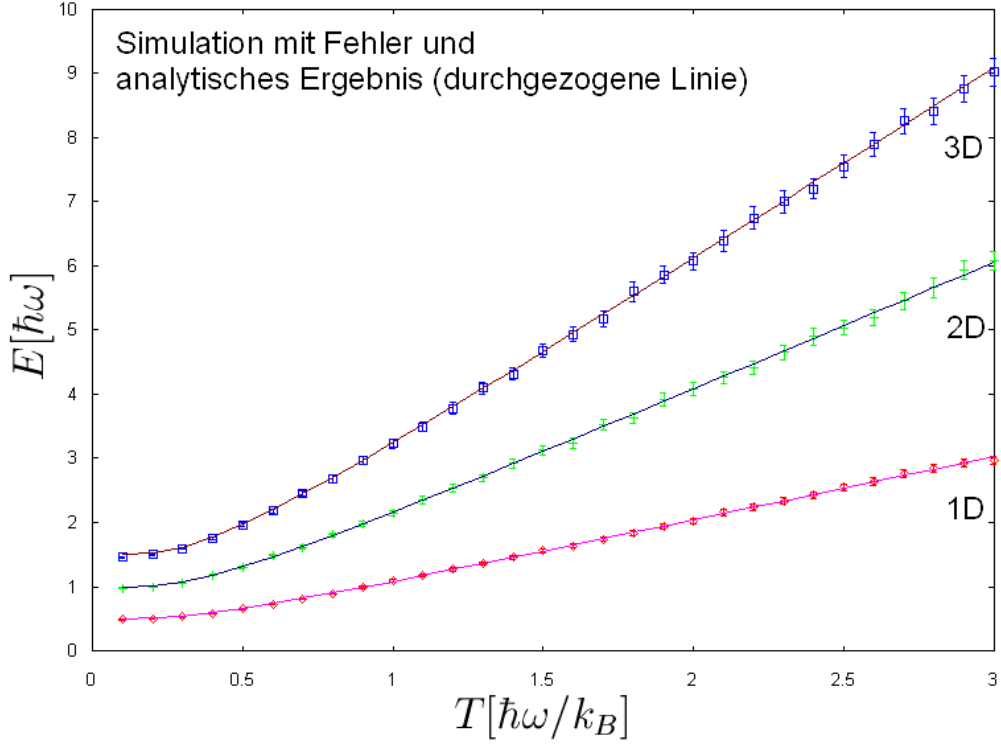


Abb. 5.1: **Elektron im nD-harmonischen Potential:** Energie über Temperatur. Simulierte Ergebnisse der mittleren Gesamtenergie $E = \langle E_{ges} \rangle = \langle E_{pot} \rangle + \langle E_{kin} \rangle$ über die Temperatur bei 35000 MC-Schritten pro Temperaturschritt und mit $m = 70$ slices (Punkte mit Fehlerbalken) im Vergleich mit dem analytischen Ergebnis (5.17) (durchgezogene Linie). Dargestellt sind alle 3 Dimensionen. Berechnet mit PathSim.

Die simulierten Ergebnisse inklusive Fehlerbalken und die analytisch Berechneten zum Vergleich sind in Abbildung 5.1 gegeben. Die analytischen Ergebnisse werden im Rahmen der Fehlergrenzen von der PIMC-Simulation reproduziert. Für $T \rightarrow 0$ ergibt sich der Grenzfall

$$\langle E_{ges} \rangle = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{d\hbar\omega}{2} \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} = \frac{d}{2} \coth \lim_{A \rightarrow \infty} A = \frac{d\hbar\omega}{2}. \quad (5.18)$$

Dieser Grenzfall entspricht der vielbehandelten Grundzustandsenergie von N Teilchen im d-dimensionalen Oszillator

$$\langle E_{ges} \rangle = \frac{Nd}{2} \hbar\omega. \quad (5.19)$$

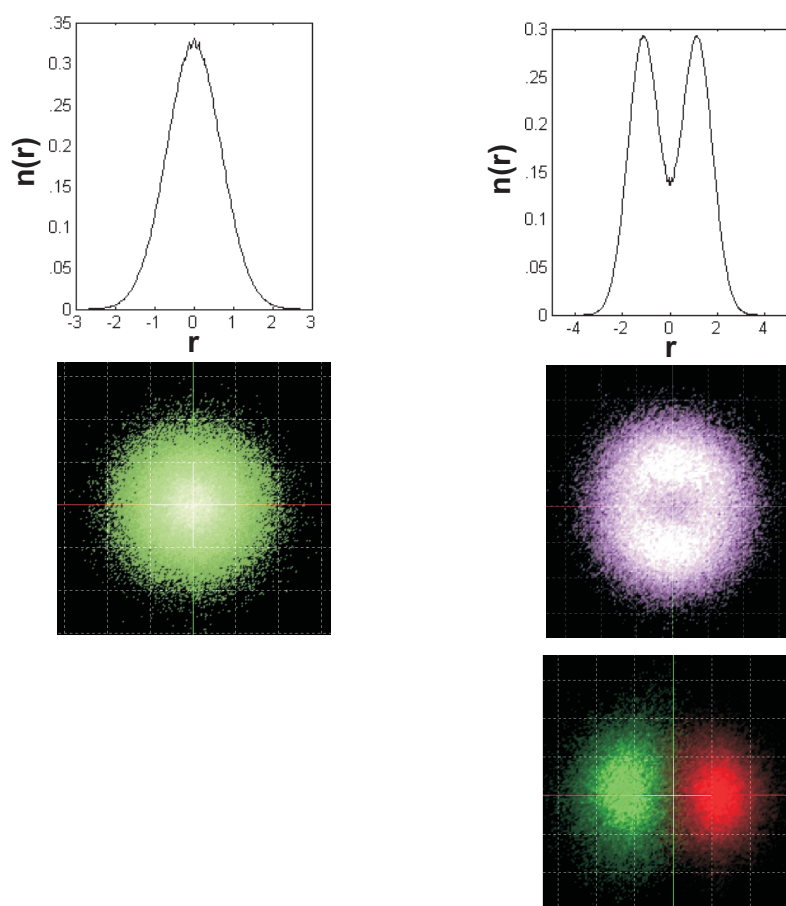


Abb. 5.2: **1 und 2 Elektronen im 2D-harmonischen Potential:** Oben: Simulierte radiale Teilchenzahldichte $n(r)$ ($[r] = l_0$). Unten: Simulierte zweidimensionale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte ρ . Die Dichte für 2 Elektronen ist einmal ungepinnt (Rechts-Mitte) und einmal mit dem Pinnen des rechten Elektrons gezeichnet (Rechts-Unten). Dargestellt mit `DensityPlot`.

5.3.2 1 und 2 Elektronen im harmonischen Potential (2D)

Entsprechend dem vorhergehenden Abschnitt werden nun ein und zwei Elektronen im zweidimensionalen Oszillatorpotential untersucht. Die numerisch erzielten Ergebnisse mit 50000 MC-Schritten und 80 slices bei einer Temperatur von $k_B T = 0.1 \hbar \omega_0$ sind in Abbildung 5.2 gegeben. Bei zwei Teilchen splittet sich die bei einem Elektron gaussverteilte Funktion $n(r)$ wie erwartet in zwei Maxima auf. Es ergeben sich die in Tabelle 5.1 dargestellten Energien für $T \rightarrow 0$ ohne Betrachtung des Spins.

N_e	$E_{ges} [\hbar\omega]$
1	0.987 ± 0.005
2	6.964 ± 0.009

Tab. 5.1: **Grundzustandsenergien** von 1 und 2 Elektronen im 2D harmonischen Potential. Vergleich mit Referenzdaten aus [EHMG99].

5.3.3 5-8 Elektronen im harmonischen Potential (2D)

Die Arbeit “Crossover from Fermi Liquid to Wigner Molecule Behavior in Quantum Dots” [EHMG99] untersucht das Verhalten von Elektronen in zweidimensionalen Quantenpunkten. Mit der Pfadintegral-Monte-Carlo-Methode werden bis zu 8 Elektronen betrachtet. Ein Phasenübergang von einer Fermi-Flüssigkeit zu einem Wigner-Kristall wird in Abhängigkeit des Kopplungsparameters r_s bei einer Temperatur von $T = 0.1\hbar\omega/k_B$ untersucht. Das Systemverhalten beim Übergang zum Wigner-Kristall und damit eine gitterähnliche Anordnung der Elektronen ist prinzipiell unabhängig von der Anzahl der Partikel. Eine große Anzahl von Energien für 3 bis 8 Elektronen mit verschiedenen Spins werden gegeben und dienen später teilweise als Vergleichswerte. Die Ergebnisse der Wahrscheinlichkeitsdichten für 5 bis 8 Teilchen bei dem Kopplungsparameter $\lambda = 8$ (5.12) werden in Abbildung 5.3 gezeigt. Die hier erzielten Simulationsergebnisse wurden mit den Parametern $mc = 25000$, $n = 100$ slices, $k_B T = 0.1\hbar\omega$ erzeugt. Die Übereinstimmung mit der Referenz [EHMG99] ist sehr gut. Das Besetzen der zweiten Schale ist bei der hohen Wechselwirkung $\lambda = 8$ bei Zufügen des 6. Elektrons ist in Abb. 5.3 und Abb. 5.4 ersichtlich. Es entsteht ein Bauch für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des hinzukommenden Elektrons, das sich innerhalb der umgebenden fünf restlichen, zirkular angeordneten Elektronen anordnet. Bei sieben und acht Partikeln stellt sich eine vergleichbare Schalenkonfiguration von (6,1) und (7,1) ein (vgl. Abb. 5.4). Diese Besetzung entspricht der klassischen Besetzung [Lud03]. Anhand der zweidimensionalen Ortsdichtedarstellung $n(x, y)$ ist dieser Effekt noch offensichtlicher. Die Ortsdichten wurden unter Pinnen des auf der x-Achse liegenden Teilchens bestimmt, um die Rotation zu vermeiden (Rotationssymmetrie des Hamiltonoperators in zwei und drei Dimensionen). Die Darstellung der 8 Teilchen ist als qualitativ zu bewerten. Erst kurz vor Druck dieser Arbeit wurde bemerkt, dass ein wenig neben der maximalen radialen Aufenthaltswahrscheinlichkeit gepinnt wurde. Somit stellt sich eine der gewünschten Konfiguration nur nahekommende Konfiguration ein (eine Symmetriachse liegt bei ungefähr $y = -x$): Korrekt ist ein symmetrisches Anordnen der 7 Elektronen auf der Kreisfläche

mit einer Symmetrie entlang der y-Achse. Der Eingriff in das physikalische System durch das Pinnen erscheint wegen der ohnehin verschwindenden Rotationsenergie gerechtfertigt, zudem verändert ein Pinnen eines Teilchens die jeweilige Energie des Systems nur geringfügig. Gleiches gilt für die radiale Teilchendichte $n(r)$.

Abbildung 5.5 zeigt die Konvergenz der Energie über die Anzahl der Monte-Carlo-Schritte inklusive Fehlerbalken. Jedes System benötigt eine Einschwingphase, die bei den im Rahmen dieser Arbeit simulierten Systeme immer unter 10000 MC-Schritten liegt. Während der Simulation werden dann z.B. $mc = 10000$ Schritte ausgeführt, die das System zum Einschwingen benötigt, wobei noch keine Observablen berechnet werden. Diese Berechnungen starten dann beim $mc+1$. Schritt. Die Energien in Abbildung 5.5 konvergieren dann monoton gegen den theoretisch zu erwartenden Wert. Die Fehlerbalken zeigen die zunehmende Präzision mit wachsender MC-Schrittanzahl auf.

Tabelle 5.2 vergleicht die mit der PIMC-Simulation berechneten Energiewerte mit denjenigen aus [EHMG99]. Die sehr genauen Energien aus [EHMG99] werden im Rahmen der Fehlergrenzen reproduziert.

N	E_{ges} (Referenz)	$E_{ges} = E_{kin} + E_{pot}$	E_{kin}	E_{pot}
5	$42,8 \pm 0,05$	$43,1 \pm 0,4$	$40,1 \pm 0,25$	$3,0 \pm 0,3$
6	$60,4 \pm 0,05$	$60,5 \pm 0,6$	$57,1 \pm 0,3$	$3,4 \pm 0,3$
7	$80,5 \pm 0,1$	$80,3 \pm 0,8$	$76,5 \pm 0,4$	$3,7 \pm 0,5$
8	$103,2 \pm 0,2$	$103,5 \pm 0,9$	$98,6 \pm 0,5$	$4,84 \pm 0,6$

Tab. 5.2: **Grundzustandsenergien** von 1,2 Elektronen im 2D harmonischen Potential.

Bei Werten über $\lambda = 4$ können Spineffekte vernachlässigt werden (vgl. [EHMG99]), da die Coulomb-Wechselwirkung die Spin-Wechselwirkung um Größenordnungen übersteigt. Gerade diese Systeme bieten sich für die hier beschriebene PIMC-Simulation an, da diese keine Spineffekte berücksichtigt, und somit dennoch genaue Ergebnisse liefert.

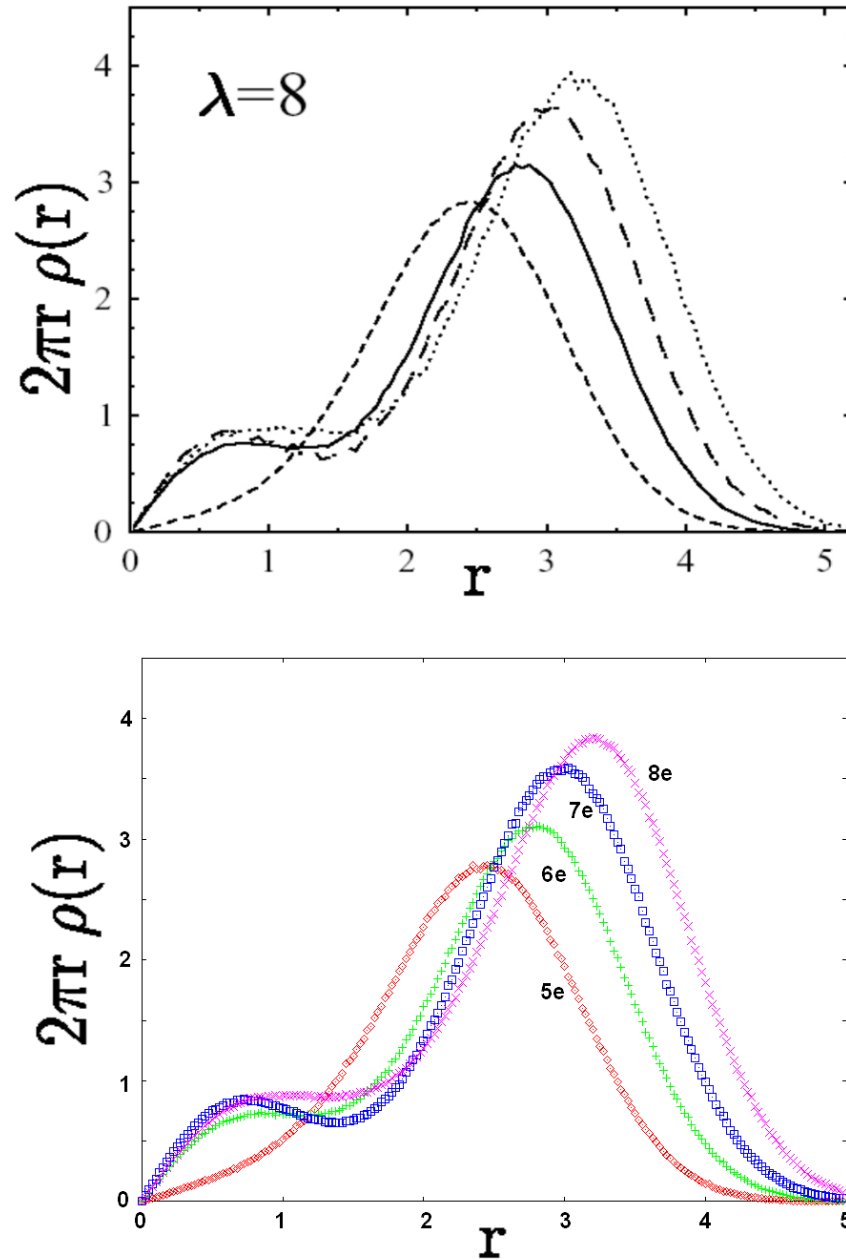


Abb. 5.3: Radiale Teilchenzahldichten $\rho(r) = n(r)$ von 5,6,7 und 8 Elektronen im 2D-harmonischen Potential bei $\lambda = 8$: Oben: Referenz [EHMG99]. Unten: Simulation mit PathSim.

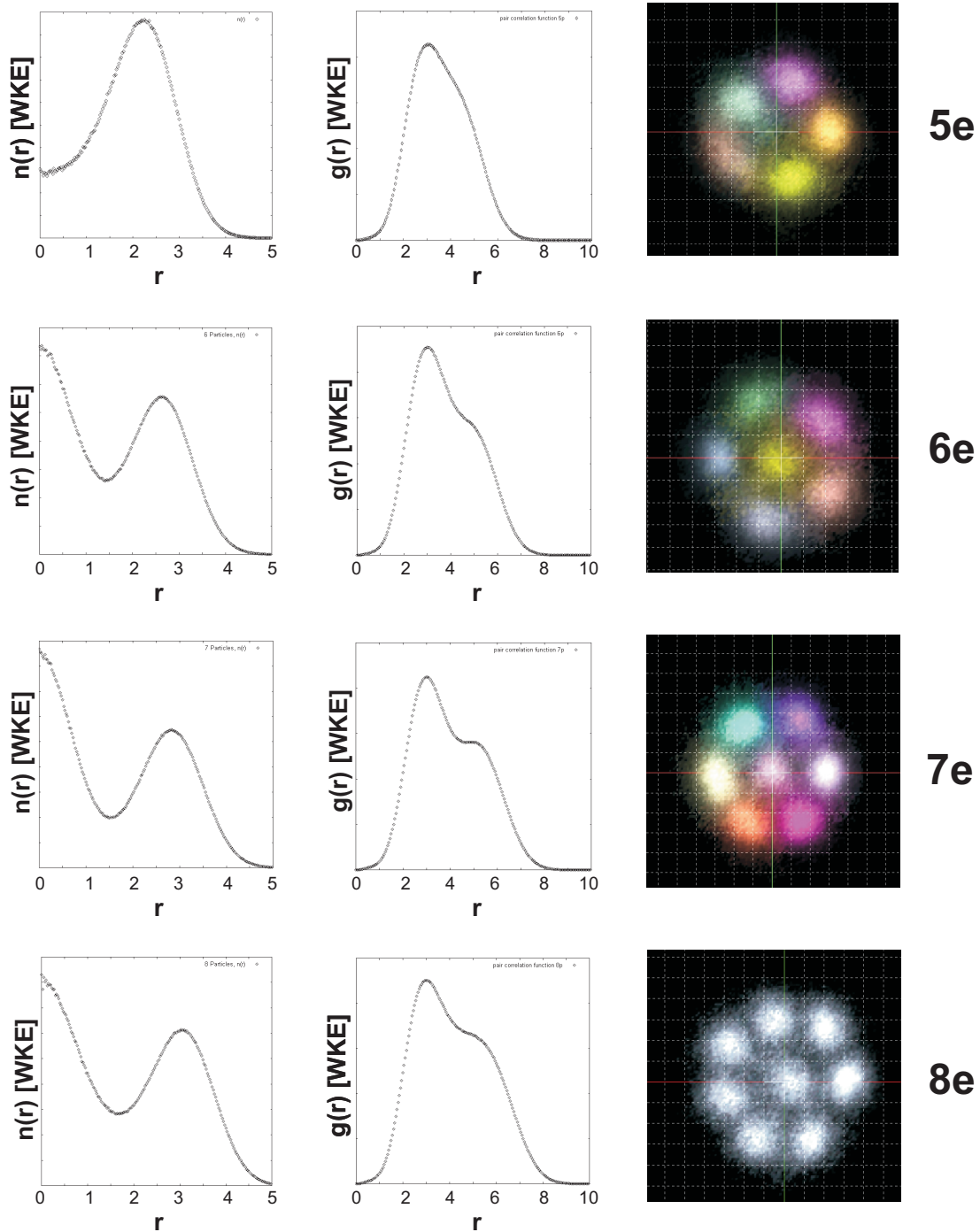


Abb. 5.4: Teilchenzahl-dichten und Paarkorrelationen $n(x, y)$, $g(r)$, $n(r)$ von 5,6,7 und 8 Elektronen im 2D-harmonischen Potential. Links: Jeweilige Teilchenzahl-dichte $n(r)$ im Bereich $r = 0 \dots 5l_0$ dargestellt. Mitte: Jeweilige Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ im Bereich $r = 0 \dots 10l_0$. Die Normierung der dargestellten Funktionen $n(r)$, $g(r)$ erfolgt entsprechend (5.13) und (5.14) Rechts: Teilchenzahl-dichte im Ortsraum $n(x, y)$. Gerendert mit DensityPlot.

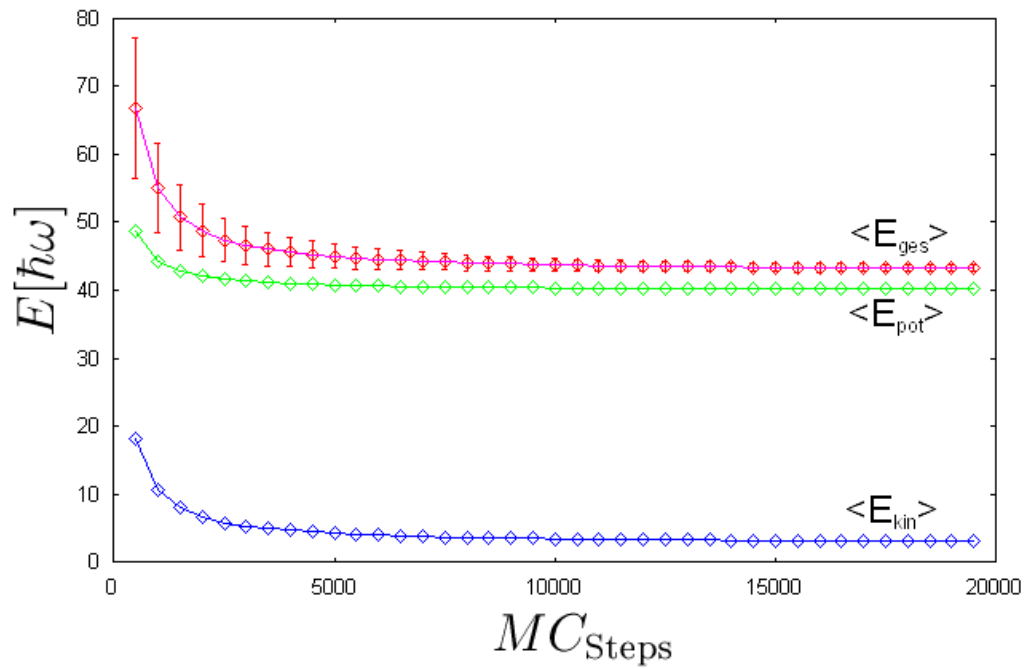


Abb. 5.5: **Energiekonvergenz über MC-Schritte:** 5 Elektronen im 2D-harmonischen Potential. Das System benötigt eine gewissen Anzahl von MC-Schritten zum Einschwingen. Die zunehmende Präzision in Abhängigkeit der MC-Schritte ist anhand der Fehlerbalken zu erkennen. Simuliert mit PathSim.

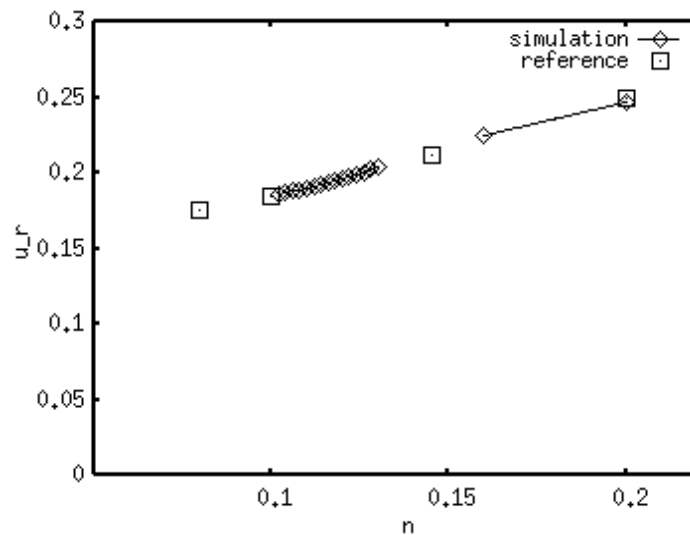


Abb. 5.6: **3 Elektronen:** Relative Abstandsfluktuation über Dichte $u_r(n)$.

5.3.4 Relative Abstandsfluktuation für 3 Elektronen (2D)

Ergebnisse für die relative Abstandsfluktuation $u_r(n)$ über die Dichte n , die im Rahmen der Veröffentlichung [FBL01a] für Systeme aus drei Elektronen berechnet wurden ([Fil05]), wurden auch im Rahmen dieser Arbeit nachgeprüft. Dadurch kann die korrekte Berechnung von u_r nachgewiesen werden. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.6 zu finden. Die Simulationsparameter sind (in atomaren Einheiten, vgl. Abschn. 5.2): $N_e = 3$, $dim=2$, Masse $m = m_e$, Ladung $q = q_e$, $k_B T_{\text{atomic}} = 5 \cdot 10^{-5} Ha$, $m = 100$ slices und $mc = 150.000/Dichte$. Die Referenzwerte werden reproduziert.

Drei Partikel sind jedoch zu wenig, um eine Unstetigkeit in u_r festzustellen. Es existiert lediglich eine Schale und zudem besitzen drei Partikel eine nur relativ geringe Fluktuation. Dies wird erst bei höheren Teilchenzahlen, wie etwa ab 6 Elektronen, möglich.

Die in [FBL01a] gegebenen Ergebnisse für den Nachweis eines Phasenübergangs anhand des Kontrollparameters u_r für einen aus 12 Elektronen bestehenden Wigner-Kristall, konnten leider nicht reproduziert werden, da die Konvergenz von u_r im Bereich des Phasenüberganges unbefriedigend war. Die erzielten Werte von u_r liegen jedoch in der gleichen Dimension und approximieren die in [FBL01a] vorgestellten Ergebnisse zumindest grob. Der Grund ist wohl in dem instantanen Positionsaustausch zweier Partikel zu sehen, der die Berechnung von u_r verkompliziert. Es müsste eine eigene Betrachtung dieses Austausches in `PathSim` eingeführt werden, die diesen verhindert oder zumindest korrekt in die Berechnung von u_r einfließen lässt (Vgl. dazu auch Abschnitt 5.4.2). Zudem wurden in der Simulation von [FBL01a] mehrere Millionen Monte-Carlo-Schritte benutzt.

5.3.5 Zweischichtsysteme

Ergebnisse für einfache Zweischichtsysteme, die ebenfalls mit PIMC-Simulationen berechnet worden sind, wurde freundlicherweise von Dr. Filinov (u.a. [FBL00], [FB06], [FBL01a]) zu Vergleichszwecken zur Verfügung gestellt. Im Folgenden werden diese Ergebnisse mit von `PathSim` erzeugten verglichen.

5.3.5.1 2 Elektronen, 2 Schichten, harmonisches Potential

Zwei Elektronen in zwei Schichten wurden mit folgenden Parametern simuliert: $N = 2$, zwei Layer ($N_{0z} = l_0, N_{1z} = l_1$), Masse $m_0 = m_1$, Ladung

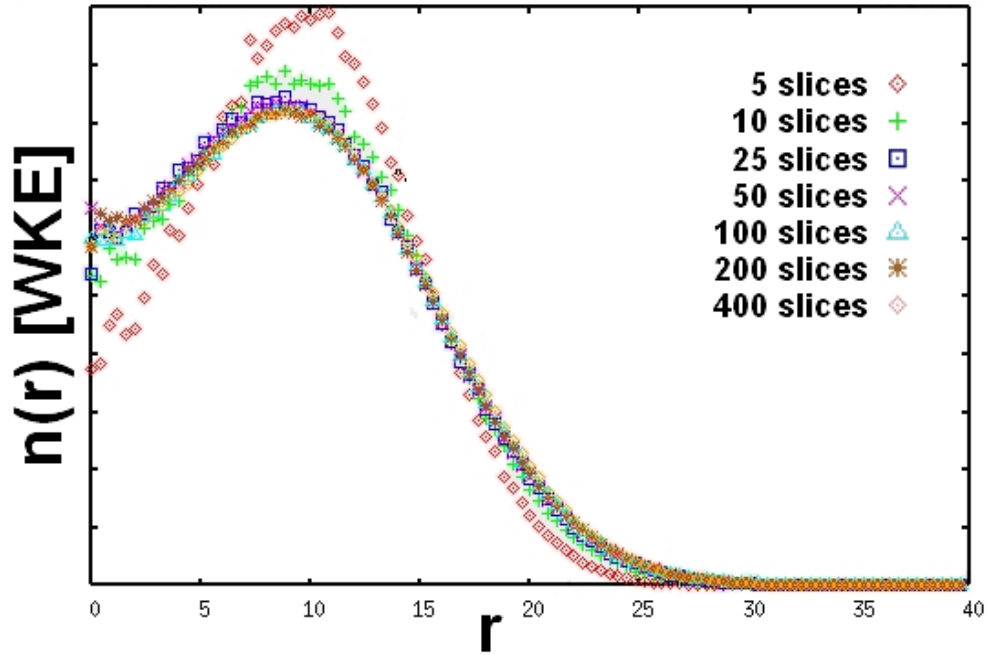


Abb. 5.7: **Konvergenz über slices** m ($m=5,10,25,50,100,200,400$): Ab etwa 50 slices ist bei diesem System (2 Elektronen in 2 Schichten: Abstand $d=10$, $n=0.2$, $mc=30.000$) eine gute Konvergenz gegeben. Simuliert mit PathSim.

$q_0 = q_1$, $k_B T = 0.001 Ha$, slices $m = 100$, Dichte $n = 0.2$, Schichtabstand $d = 10$. und $mc = 30.000$.

Für die Gesamtenergie $\langle E_{\text{ges}} \rangle$ in Ha ergibt sich:

- Simulation: 0.085 ± 0.0028
- Referenz: 0.082 ± 0.0015

Die Konvergenz über die Anzahl von slices ist in Abbildung 5.7 dargestellt. Ab etwa 50 slices ist eine gute Konvergenz gegeben. Die Teilchenzahldichte $n(r)$ und Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ im Vergleich zu den Referenzwerten sind in Abb. 5.8 gezeigt. Diese wurden unter Projektion der einen Schicht auf die andere gewonnen, da die Tiefeninformationen (z -Werte) für die Teilchenzahldichte keine Bedeutung besitzen. Die Normierung der dargestellten Funktionen erfolgt entsprechend Gl. (5.13) und Gl. (5.14). Eine fehlende Normierung mindert nicht den Informationsgehalt, da diese lediglich eine Streckung in y -Richtung vornimmt. Die Abweichungen bei $g(r)$ im Bereich um 0 rühren daher, dass die Referenzdaten $g(r)$ berechnen und PathSim $g(r) * r$, so dass die Division von r mit gnuplot durchgeführt wurde, was bei kleinen Radien die große Streuung noch verstärkt. Schließlich sind in Abb.

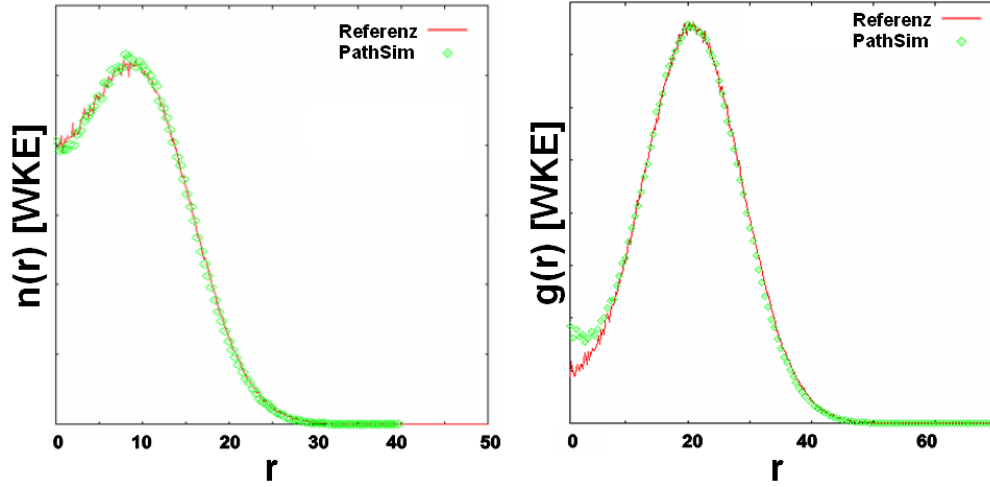


Abb. 5.8: **2 Elektronen in 2 Schichten:** $n(r)$, $g_{12}(r)$. Normierung entsprechend (5.13) und (5.14). Zur Abweichung von $g(r)$ für $r \rightarrow 0$: siehe Text. Parameter: siehe Abb. 5.7.

5.9 noch die Ortsdichten $n_e(x, y, z)$ und $n_h(x, y, z)$ aufgetragen. Einmal in 2D (pro Layer, ohne Pinnen) und einmal als vollständiges Zweischichtensystem im 3D-Raum: rotiert entlang der x-Achse, ohne Parallaxe.

5.3.5.2 2 Elektronen, 2 Schichten: Variation von T , n

Nun wird ein dem vorhergehenden Abschnitt vergleichbares System betrachtet: Zwei Elektronen in zwei Schichten. Die Simulationsparameter waren dabei: $N = 2$, zwei Layer ($N_{0z} = l_0, N_{1z} = l_1$), Masse $m_0 = m_1$, Ladung $q_0 = q_1$ slices $m = 100$, Schichtabstand $d = 10$. und $mc = 30.000$. Allerdings wird zum einen die Temperatur bei konstanter Dichte $n = 0.2$ variiert ($k_B T = 0.001, 0.0025, 0.01$) und zum anderen die Dichte n bei konstanter Temperatur $k_B T = 0.1$ Ha ($n=0.4, 0.5, 0.7$). Verglichen wird, soweit sie zur Verfügung standen, mit den Ergebnissen, die wie in Abschn. 5.3.5 beschrieben vorlagen.

Die jeweiligen Energien dieser beiden Systeme sind in Tabelle 5.3 und Tabelle 5.4 dargestellt. Die zugehörigen Graphen von $n(r)$ und $g(r)$ werden in Abb. 5.10 und Abb. 5.11 gezeigt.

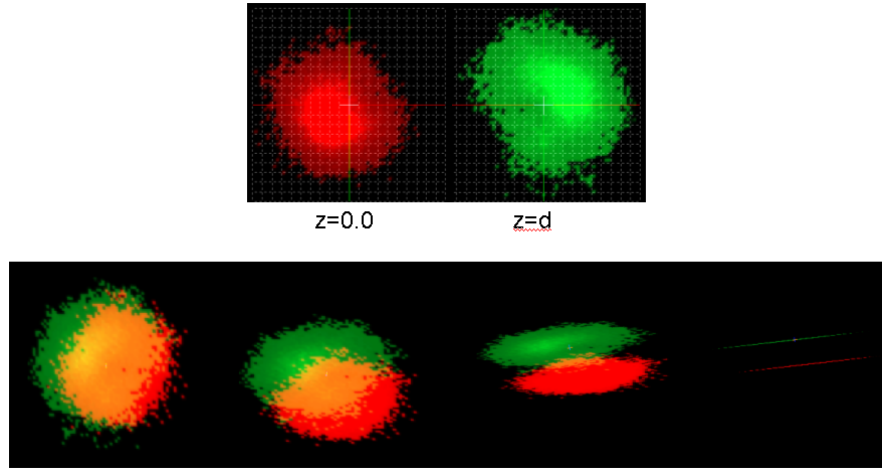


Abb. 5.9: **2 Elektronen in 2 Schichten: $n(x,y)$** . Darstellung der Ortsdichte pro Schicht (ohne Pinne, oben) und im dreidimensionalen Raum (Rotation um die x -Achse, ohne Parallaxe, unten). Das System ist links in der Draufsicht dargestellt und wird dann schrittweise um die x -Achse gedreht, bis rechts eine 90° Drehung vollzogen ist. Die abstoßend wirkenden Coulombkräfte bewirken eine Anordnung der Elektronen zwischen den Schichten, ähnlich dem Ergebnis von zwei Elektronen in 2D (sozusagen einer Schicht, vgl. dazu Abb. 5.2).

T	E_{Sim} [Ha]	E_{Ref} [Ha]
0.001	0.085 ± 0.0018	0.082 ± 0.0045
0.0025	0.088 ± 0.0017	0.085 ± 0.003
0.01	0.096 ± 0.0022	0.102 ± 0.006

Tab. 5.3: **2 Elektronen in 2 Schichten**: Gesamtenergien bei Variation von T . Vergleich mit Referenzdaten.

n	E_{Sim} [Ha]	E_{Ref} [Ha]
0.4	0.516 ± 0.02	0.522 ± 0.014
0.5	0.609 ± 0.07	0.602 ± 0.06
0.7	1.13 ± 0.1	1.05 ± 0.06

Tab. 5.4: **2 Elektronen in 2 Schichten**: Gesamtenergien bei Variation von n . Vergleich mit Referenzdaten.

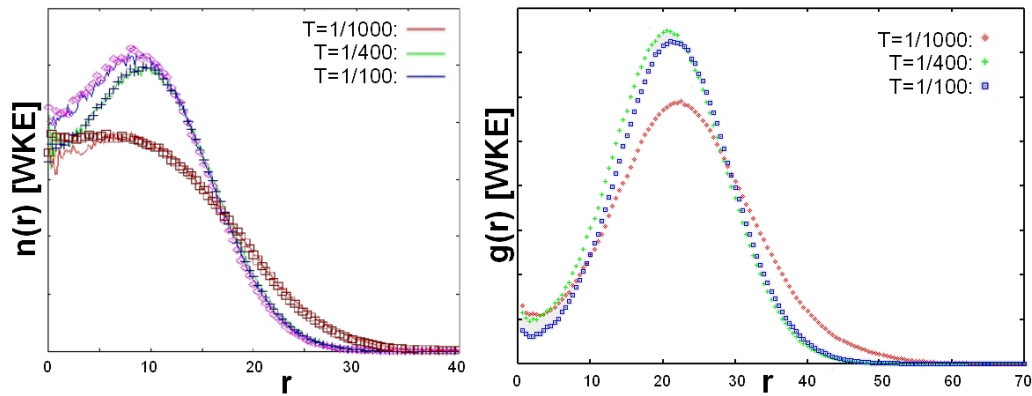


Abb. 5.10: **2 Elektronen in 2 Schichten: Variation von T.** Darstellung der Teilchenzahldichte $n(r)$ und der Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ für die Variationen der Temperatur $k_B T = 0.001$ (rot), 0.0025 (grün), 0.01 (blau) Ha.

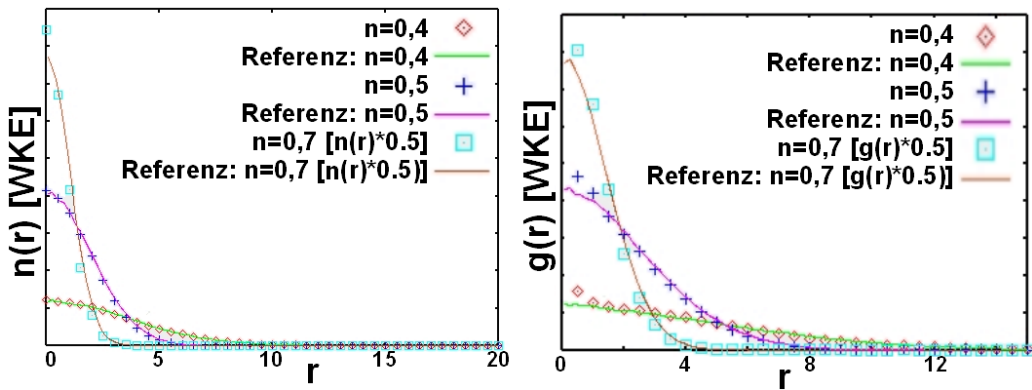


Abb. 5.11: **2 Elektronen in 2 Schichten: Variation von n.** Darstellung der Teilchenzahldichte $n(r)$ und der Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ für die Variationen der Dichte $n = 0.4, 0.5, 0.7$ Ha. Die Graphen für $n = 0.7$ wurde mit dem Faktor 0.5 skaliert. Die Dichte $n(r)$ ist im Vergleich zur Referenz dargestellt [Fil05].

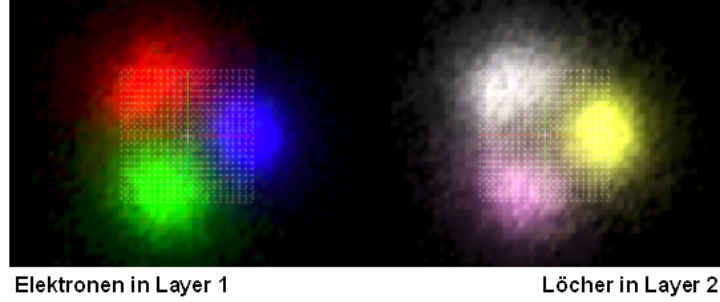


Abb. 5.12: **3 indirekte Elektron-Loch-Paare:** Dichte $n(x, y)$ in Ortsdarstellung. Links: Elektronen. Ein Elektron wurde gepinnt (blau). Deshalb ist dieses am stärksten lokalisiert. Rechts: Löcher. Die Lokalisierung der Löcher erfolgt lediglich durch das Pinnen des einen Elektrons. Aus diesem Grund sind die Löcher trotz gleicher Masse und gleichem Ladungsbetrag ein wenig mehr delokalisiert. Die Konfiguration entspricht prinzipiell der Konfiguration von 3 Elektronen im zweidimensionalen harmonischen Potential. Gerendert mit DensityPlot.

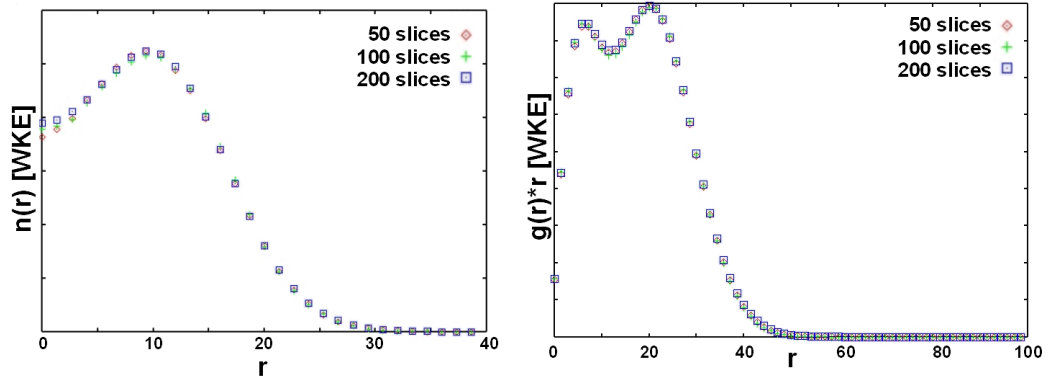


Abb. 5.13: **3 indirekte Elektron-Loch-Paare:** Konvergenz über slices $m = 50, 100, 200$ der radialen Dichte $n(r)$ und der Paarkorrelation $g(r) \cdot r$ (ungenormt). Die Normierung erfolgt mit Gl. (5.13) und Gl. (5.14).

5.3.5.3 Elektron-Loch-Paare

Indirekte Elektron-Loch-Paare werden bei folgenden Simulations-Parametern betrachtet: $N_{\text{EzZ}} = 1, 2, 3, 5, 6$ ($N_{\text{Gesamt}} = 2, 4, 6, 10, 12 = N_e + N_h = 2N_e = 2N_h$), zwei Layer ($N_{ez} = l_0, N_{hz} = l_1$), Masse $m_e = m_h$, Ladung $q_e = -q_h$, $k_B T = 0.0025 Ha$, slices $m = 100$, Dichte $n = 0.2$, Schichtabstand $d = 5$. und $mc = 50.000$. Die Energien dieser Systeme sind im Vergleich mit den zur Verfügung gestellten Referenzwerten (vgl. Abschn. 5.3.5) in Tabelle 5.5 dargestellt. Eine Übereinstimmung mit den Referenzergebnissen im Rahmen der Fehlergrenzen ist gegeben. In Abbildung 5.12 ist die Teilchenzahldichte im

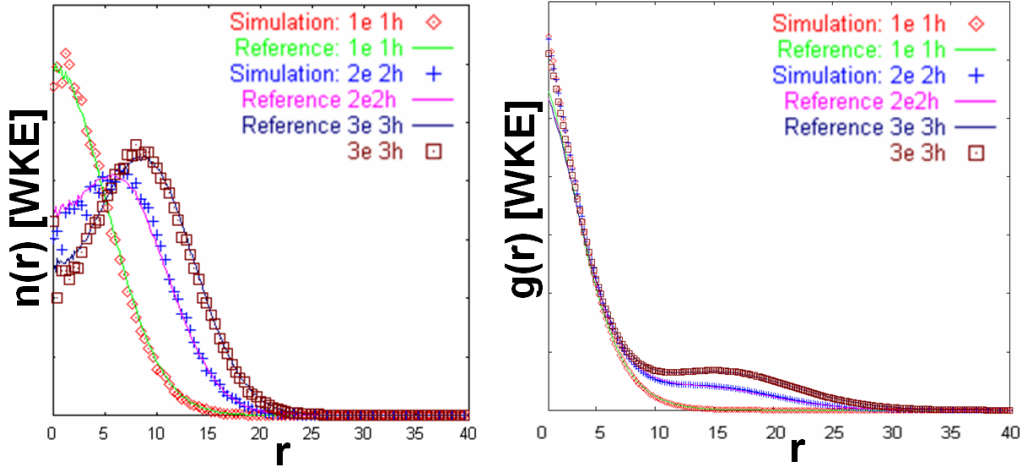


Abb. 5.14: **1,2,3 indirekte Elektron-Loch-Paare**: Radiale Dichte $n(r)$ und Paarkorrelation $g(r)$ (ungenormt). Die Normierung erfolgt mit Gl. (5.13) und Gl. (5.14).

Ortsraum für die jeweiligen Layer aufgetragen. Die zugehörigen Graphen $n(r)$ und $g(r)$ werden in Abb. 5.14 für $N_{\text{Exz}} = 1, 2, 3$ und Abb. 5.15 ($N_{\text{Exz}} = 5, 6$) gezeigt. Die Übereinstimmung mit den Referenzdaten ist signifikant.

$N_{\text{exz}} = (N_e + N_h)/2$	E_{Sim}	E_{Ref}
1	-0.102 ± 0.001	-0.1025 ± 0.0006
2	-0.181 ± 0.002	-0.181 ± 0.001
3	-0.248 ± 0.004	-0.248 ± 0.001
5	-0.344	-0.342
6	-0.379	-0.378

Tab. 5.5: **Elektron-Loch-Paare**: Energien für verschiedene Anzahlen Elektron-Loch-Paare N_{el} . Vergleich mit Referenzdaten ([FBL01a],[Fil05]). Parameter: siehe Text.

Abb. 5.13 stellt die Konvergenz der Teilchendichte und der Paarkorrelationsfunktion für die slice-Anzahlen $m = 50, 100, 200$ dar. Die Anzahl der slices über 50 verändert die jeweiligen Funktionen kaum, so dass die Anzahl $m = 100$ korrekte Resultate erzeugt.

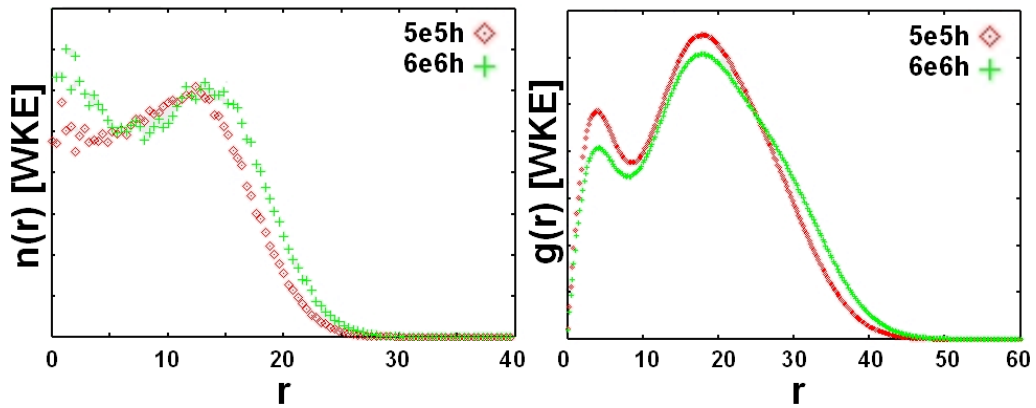


Abb. 5.15: **5,6 indirekte Elektron-Loch-Paare:** Radiale Dichte $n(r)$ und Paarkorrelation $g(r)r$ (ungenormt). Die Normierung erfolgt mit Gl. (5.13) und Gl. (5.14).

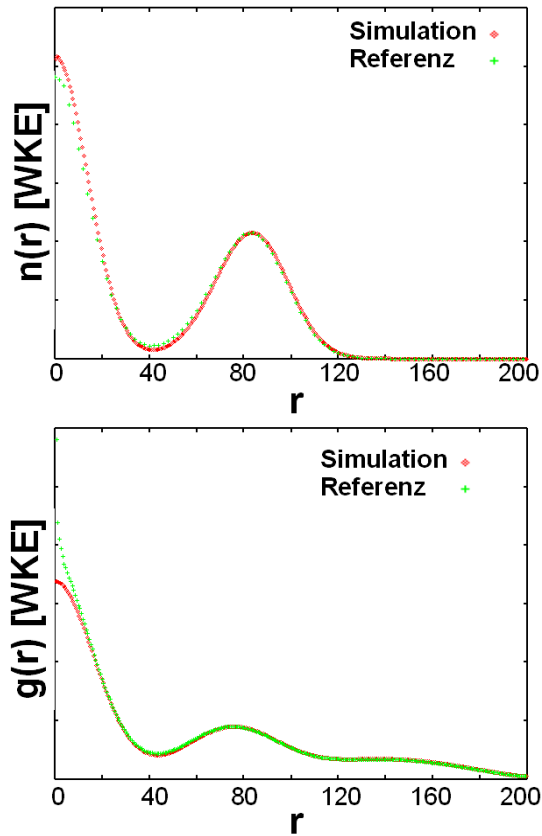


Abb. 5.16: **8 Exzitonen:** Radiale Teilchendichte $n(r)$ (oben) und Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ (unten) im Vergleich zur Referenz [FBL01a]. Die vertikale Skalierung wurde derjenigen der Referenz angeglichen. Simulationsparameter: $N_e = 8$, $N_h = 8$, Schichtabstand $d = 50$, Masse $m_h = m_e$, Ladung $q_h = -q_e$, $k_B T = 1./3000$. Ha , $m = 100$ slices, Dichte $n = 0.1$ und $mc = 15.000$

5.3.6 8 indirekte Exzitonen

Die im Rahmen der Arbeit [FBL01a] für 8 indirekte Exzitonen im harmonischen Potential erzeugte Teilchenzahldichte und Paarkorrelationsfunktion wurde freundlicherweise ebenfalls zu Vergleichszwecken zur Verfügung gestellt [Fil05]. Diese sind im Vergleich mit Ergebnissen aus `PathSim` in Abbildung 5.16 dargestellt. Die Parameter für die Simulation sind:

$N_e = 8$, $N_h = 8$, Schichtabstand $d = 50$, Masse $m_h = m_e$, Ladung $q_h = -q_e$, $k_B T = 1./3000$ Ha, $m = 100$ slices, Dichte $n = 0.1$ und $mc = 15.000$. Die Referenzdaten werden gut reproduziert. Im Bereich um $r = 0$ tritt die Problematik auf, dass die Referenzdaten bereits durch r geteilt wurden, die mit `PathSim` erzeugten jedoch erst im Nachhinein durch r geteilt wurden, so dass die flächenbedingte Streuung um den Ursprung herum verstärkt wird.

5.4 Phasenübergang in Elektron-Loch-Paaren

In diesem Abschnitt werden die im Rahmen dieser Arbeit berechneten Resultate für Elektron-Loch-Systeme, bestehend aus 3 und 6 indirekten Elektron-Loch-Paaren, bezüglich eines Phasenüberganges vorgestellt. Untersucht wird dabei das Massenverhältnis der Löcher zu Elektronen $m_{\text{Ratio}} = m_h/m_e$. Charakteristische Größe ist die relative Abstandsfluktuation $u_r(n)$. Diese wird genutzt, um schließlich ein Phasendiagramm im abstrakten n - m_{Ratio} -Raum zeichnen zu können.

5.4.1 3 Elektron-Loch-Paare

Ein System bestehend aus drei indirekten Elektron-Loch-Paaren ($N_e = N_h = 3$, Elektronen in Layer 1, Löcher in Layer 2) wird simuliert: ($N_{\text{Gesamt}} = 6 = N_e + N_h = 2N_e = 2N_h$), zwei Layer ($N_{ez} = l_0$, $N_{hz} = l_1$), Massenverhältnis $m_{\text{Ratio}} = m_h/m_e$, Ladung $q_e = -q_h$, $k_B T = 0.0025$ Ha, slices $m = 100$, Schichtabstand $d = l_1 - l_0 = 10$ und $mc = 50.000$ MC-Schritte pro Massenverhältnis m_{ratio} . Zunächst wird das Massenverhältnis m_{Ratio} bei verschiedenen, konstanten n gescannt: $n = 0.3 + i \cdot 0.1$; ($i = 0 \dots 7$). Reale Materialien (Halbleiterstrukturen) existieren z.Zt. bis zu einem Massenverhältnis von etwa $m_{\text{Ratio}} \approx 70$ [WBM04]. *GaAs* z.B. besitzt ein Massenverhältnis von etwa $m_{\text{Ratio}} \approx 5.1$ [RPV01]. In dieser Arbeit wird der Bereich $m_{\text{Ratio}} = 1 \dots 100$ abgetastet und $u_r(m_{\text{Ratio}})$ berechnet. Die Ergebnisse für verschiedene Dichten n für Löcher und Elektronen sind in Abbildung 5.17, 5.18 und 5.19 dargestellt. Zum einen nimmt die Fluktuation der Löcher mit zunehmender Masse mo-

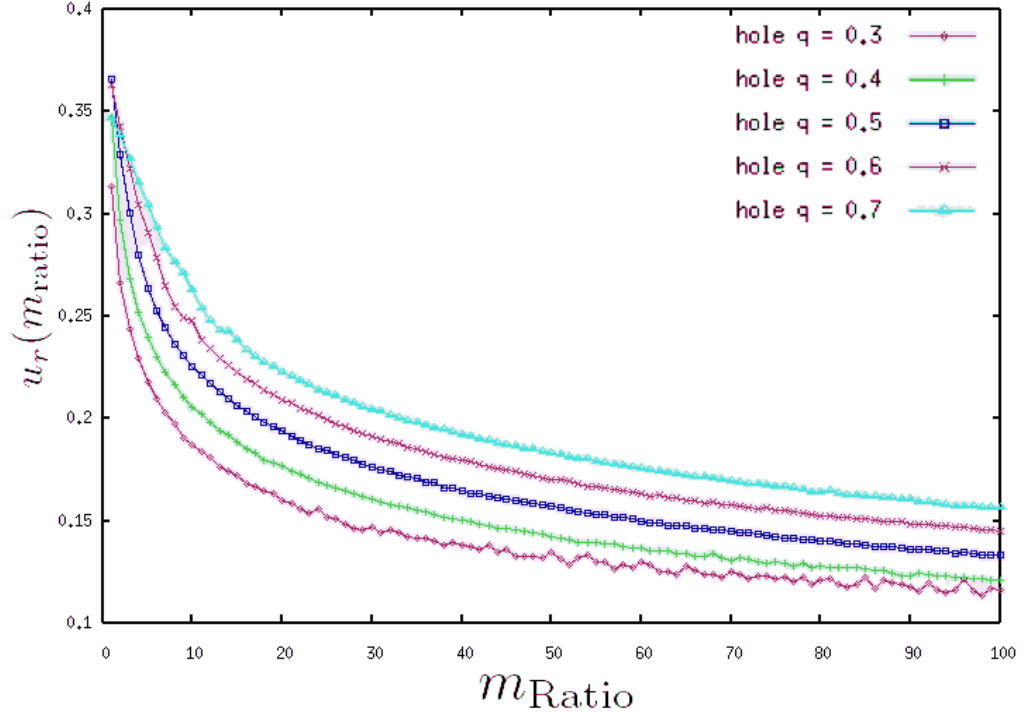


Abb. 5.17: **Relative Abstandsfluktuation** der Löcher $u_r(m_{\text{Ratio}})$ ($m_{\text{Ratio}} = 1 \dots 100$) für die konstanten Dichten $n=q=0.3, 0.4, \dots, 0.7$. Berechnet mit `PathSim`. Parameter: $N_{\text{Gesamt}} = 6 = N_e + N_h$, zwei Layer (Schichtabstand $d = 10$), Massenverhältnis $m_{\text{Ratio}} = m_h/m_e$, Ladung $q_e = -q_h$, $k_B T = 0.0025 Ha$, slices $m = 100$ und $mc = 50.000$ MC-Schritte pro Massenverhältnis m_{ratio} .

noton ab. Zum anderen nimmt die Elektronenfluktuation dementsprechend mit zunehmender Lokalisation der Löcher sehr gering ab, was auf die Wechselwirkung mit den stärker lokalisierten, schweren Löchern zurückzuführen ist. Bei steigender Dichte n mit konstantem Massenverhältnis m_{Ratio} nimmt die Fluktuation sowohl der Löcher als auch der Elektronen zu und somit die Lokalisation ab.

Unterhalb des kritischen Wertes von $u_r(m_{\text{Ratio}}) = 0.2$, was einer relativen Abstandsfluktuation von 20% entspricht, wird dieses Überschreiten in der Literatur oftmals als Phasenübergang zum Wigner-Kristall bezeichnet (Lindemann-Kriterium [Lin10], siehe Abb. 5.18). Dies ist keine Gesetzmäßigkeit, sondern eine für derartige Systeme übliche Definition, die von dem aus 6 Elektronen-Loch-Paaren bestehenden System (folgender Abschnitt) bestätigt wird. Das dort beschriebene System besitzt eine Unstetigkeit in der relativen Abstandsfluktuation, bei der diese ab einem kritischen Massenverhältnis m^{kr} auf einen Wert von $u_r \approx 0.2$ fällt. Der Wert ist als ungefähre Bereich eines Phasenüberganges zu interpretieren. Statt

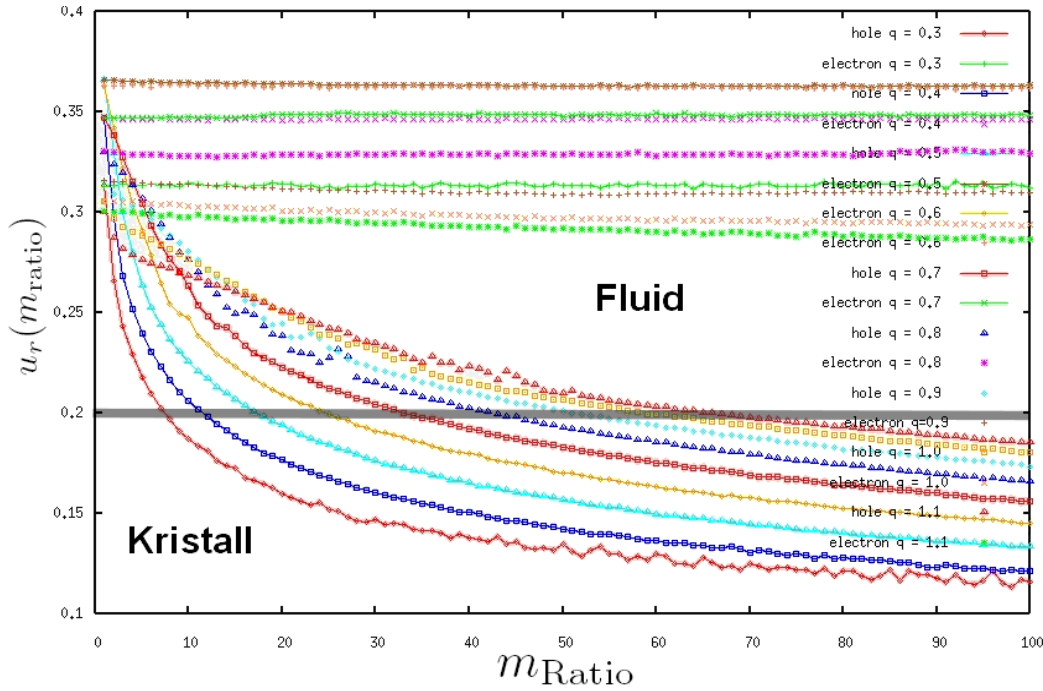


Abb. 5.18: **Relative Abstandsfluktuation** der Löcher und Elektronen $u_r(m_{\text{Ratio}})$ ($m_{\text{Ratio}} = 1 \dots 100$) für die konstanten Dichten $n=q=0.3, 0.4, \dots, 1.0$. Berechnet mit PathSim. Das Lindemann-Kriterium ist für $u_r = 0.2$ eingezeichnet. Diese Gerade trennt die fluide von der kristallinen Phase. Parameter: siehe Abb. 5.17.

$u_r(m_{\text{Ratio}})_{n=\text{const}}$ wird nun die Funktion $n_{u_r=0.2}(m_{\text{Ratio}})$ gezeichnet, also die Schnittpunkte der Geraden $u_r(m_R) = 0.2$ (horizontale Gerade) mit den dargestellten Funktionen $u_r(n)$ über die Dichte n (vgl. Abb. 5.18). Diese Funktion stellt eine grobe Trennlinie zwischen der fluiden und kristallinen Phase im n - m_{Ratio} -Phasenraum dar (vgl. Abb. 5.20). Eine quadratische Regressionsfunktion wurde durch die simulierten Werte gelegt. Diese quadratische Abhängigkeit der Dichte n zum Massenverhältnis m_{Ratio} ergibt sich aus folgenden Zusammenhängen:

Der Brückner-Parameter r_s , der ein Maß für den Zustand des Systems ist, lautet

$$r_s = \frac{\langle r \rangle}{a_B^{\text{eff}}}, \quad (5.20)$$

mit $\langle r \rangle$ als mittlerer Abstand, dem effektiven Bohrradius a_B^{eff} und der redu-

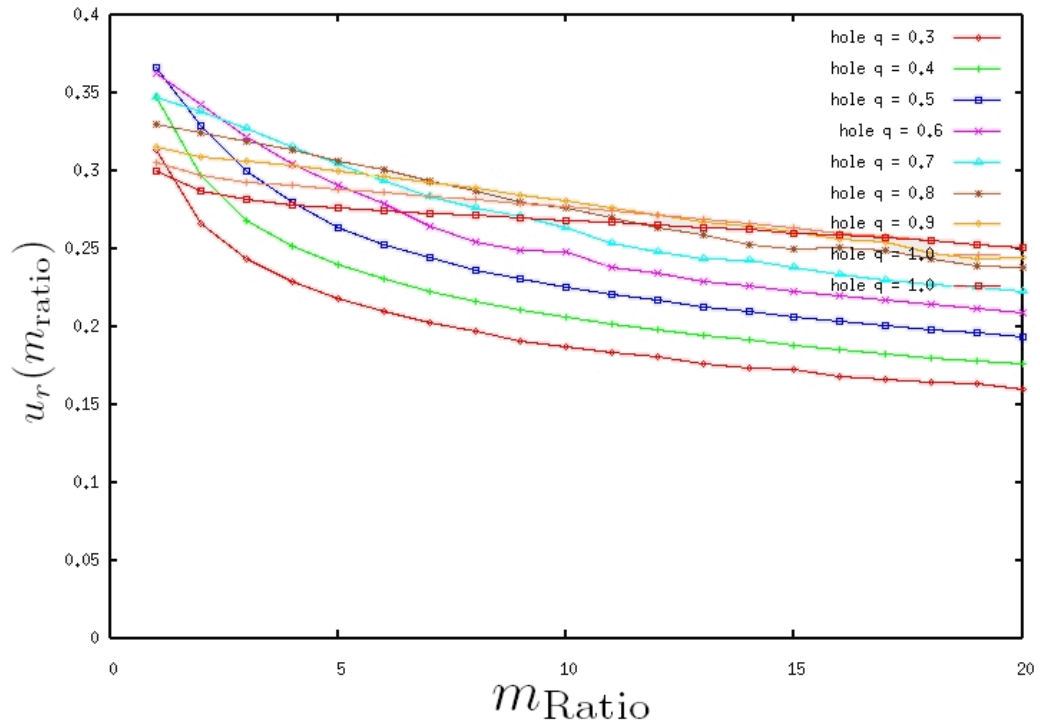


Abb. 5.19: **Relative Abstandsfluktuation** der Löcher $u_r(m_{Ratio})$ ($m_{Ratio} = 1 \dots 20$) für die konstanten Dichten $n=q=0.3, 0.4, \dots, 1.0$. Berechnet mit PathSim. Parameter: siehe Abb. 5.17.

zierten Masse m_r

$$a_B^{eff} = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_r e^2} \quad (5.21)$$

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}. \quad (5.22)$$

Nun wird ein Zusammenhang zwischen dem Brückner Parameter r_{se} für das Elektronensystem und der Masse der Elektronen hergestellt:

$$r_{se} = \frac{\langle r_e \rangle}{a_{Be}^{eff}} \sim m_e \quad (5.23)$$

$$r_{sh} = \frac{\langle r_h \rangle}{a_{Bh}^{eff}} \sim m_h \quad (5.24)$$

$$(5.25)$$

Der mittlere Abstand $\langle r_e \rangle$ bleibt nahezu konstant (vgl. Abb. 5.18). Mit dem Wissen, dass der kritische Brücknerparameter r_{se} umgekehrt proportional

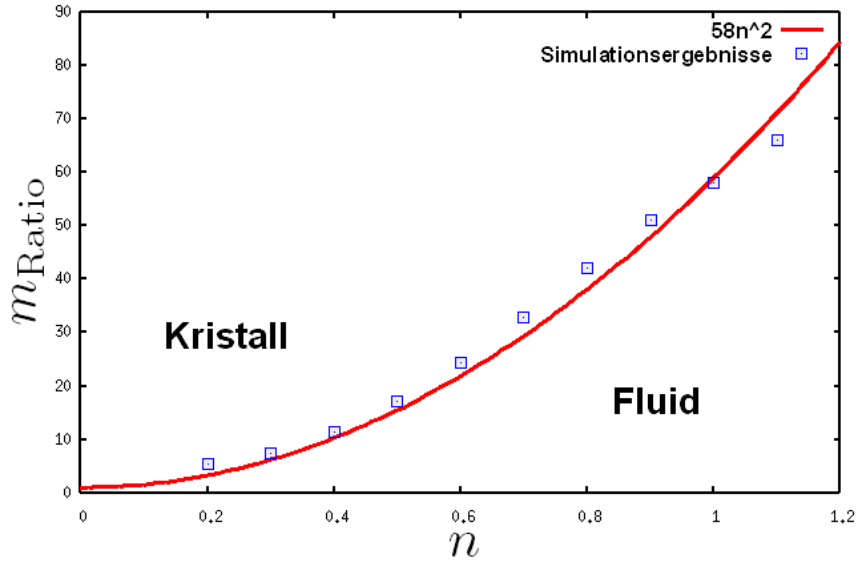


Abb. 5.20: **3 Elektron-Loch-Paare: Phasendiagramm** im $n - m_{\text{Ratio}}$ -Raum mit quadratischer Regressions-Funktion. Die kristalline Phase wird durch die Funktion $m_{\text{Ratio}}(n) \sim n^2$ von der fluiden Phase getrennt.

zur Dichte zum Quadrat ist (2D) und Gl. (5.9) ergibt sich:

$$\frac{r_{sh}^{cr}}{r_{se}^{cr}} = \frac{r_{sh}^{cr}}{1/n_e^2} \sim \frac{m_h}{m_e} = m_{\text{ratio}}. \quad (5.26)$$

$$(5.27)$$

Somit gilt bei gleichen Dichten $n_h = n_e$ für konstante r_{sh} : $n^2 \sim m_r$. Zusammenfassend gesprochen, wird die von m_{ratio} abhängende Funktion r_{sh} als Funktion von r_{se} dargestellt.

Im Folgenden werden einzelne konstante Massenverhältnisse bei konstanter Dichte $n = 0.2$ betrachtet, was einer horizontalen Geraden in Abb. 5.18 entspricht. Die Simulationsparameter sind die gleichen wie bei der vorhergehend beschriebenen Simulation. Da zwei Layer betrachtet werden, werden die Teilchendichte $n(r)$ und Paarkorrelationsfunktion $g(r)$ für folgende Konstellationen bei verschiedenen Massen angegeben:

- Elektronen-Layer (n_{ee}, g_{ee} , Abb. 5.22),
- Löcher-Layer (n_{hh}, g_{hh} , Abb. 5.23),
- Projektion von Elektronen und Löchern auf eine Ebene (g_{eh} , Abb. 5.24).

Ausgangspunkt ist das Massenverhältnis $m_{\text{ratio}} = 1.0$ (siehe Abb. 5.21). Dieses System entspricht dem in Abschnitt 5.3.5.3 behandelten System dreier Elektron-Loch-Paare. Die Löcher und die Elektronen besitzen wegen der

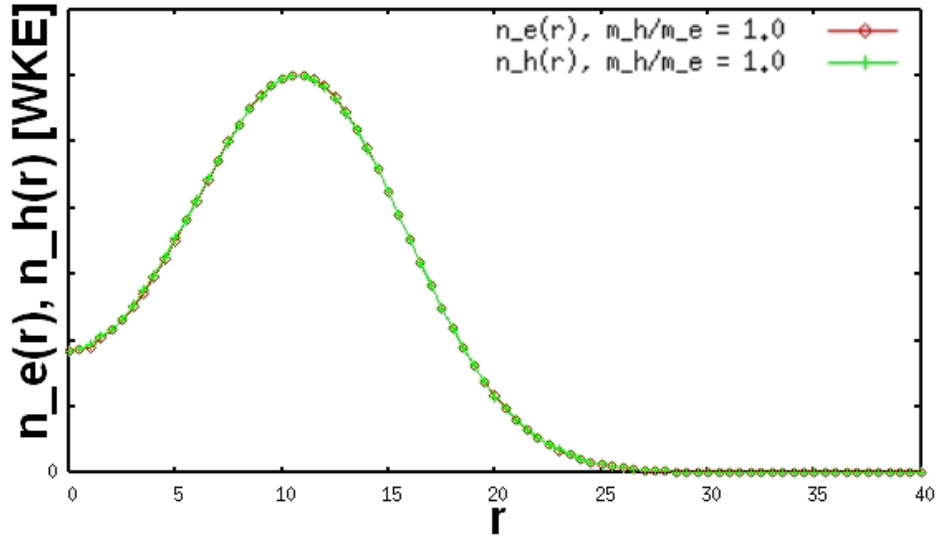


Abb. 5.21: **3 Elektron-Loch-Paare:** Teilchenzahldichte der Elektronen n_e und der Löcher n_h bei einem Massenverhältnis von $m_{\text{Ratio}} = 1$. Aufgrund gleicher Masse ist die radiale Dichte identisch. System-Parameter: siehe Abb. 5.17. $[r] : a_B$, $[n]$: willkürliche Einheiten.

Gleichheit ihrer Massen die gleichen radialen Wahrscheinlichkeitsverteilungen (vgl. auch Abb. 5.25).

Mit zunehmender Masse nimmt die Lokalisierung der Löcher zu (Abb. 5.23, Abb. 5.25). Bei einem Massenverhältnis von 10 ist die Dichte im Ursprung bereits exponentiell abfallend nahe Null, so dass keine Überlappung der beiden Wellenfunktionen stattfindet. Das Gegenteil ist bei $m_{\text{ratio}} = 1$ und 2 der Fall: Das Massenverhältnis, bei dem die Dichte im Ursprung auf den Wert Null abfällt, wäre eine andere Größe zur Charakterisierung des Phasenüberganges. Laut Abb. 5.20 liegt das kritische Massenverhältnis in diesem System etwa bei 5, deckt sich also mit der oben getätigten Aussage.

Die Lokalisierung der Elektronen nimmt mit wachsendem Massenverhältnis ebenfalls zu, allerdings in einem wesentlich kleineren Maße als die der Löcher. Dies ist auf die Wechselwirkung zwischen Löchern und Elektronen zurückzuführen. Im gesamten System nehmen die durchschnittlichen Abstände der Teilchen bei zunehmender Masse etwas ab (siehe Abb. 5.24), was einer Verkleinerung des Durchmessers des Systems entspricht. Die Lokalisation des gesamten Elektron-Loch-Systems hingegen nimmt zu und nähert sich einem kristallinen Zustand. Dieser Aspekt ist deshalb bemerkenswert, weil einzeln betrachtet lediglich die Löcher kristallisieren, während die Elektronen fluide bleiben. Das indirekte System jedoch ist stark lokalisiert.

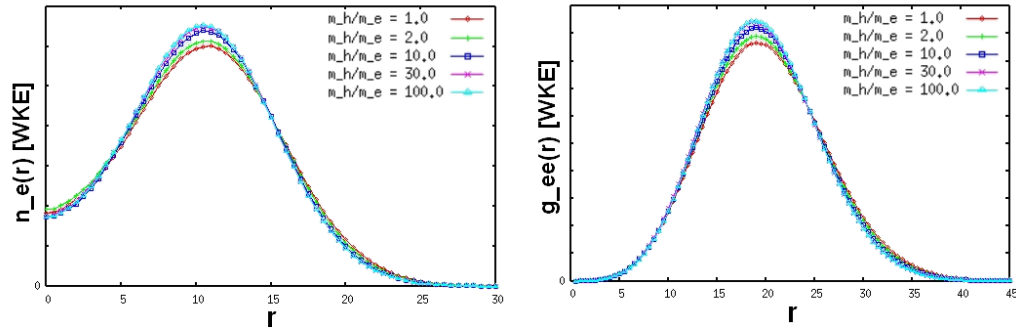


Abb. 5.22: **3 Elektron-Loch-Paare**: Teilchenzahldichte n_e und Paarkorrelationsfunktion g_{ee} der Elektronen in Layer 1 bei einem Massenverhältnis von $m_{\text{Ratio}} = 1,2,10,30,100$. System-Parameter: siehe Abb. 5.17.

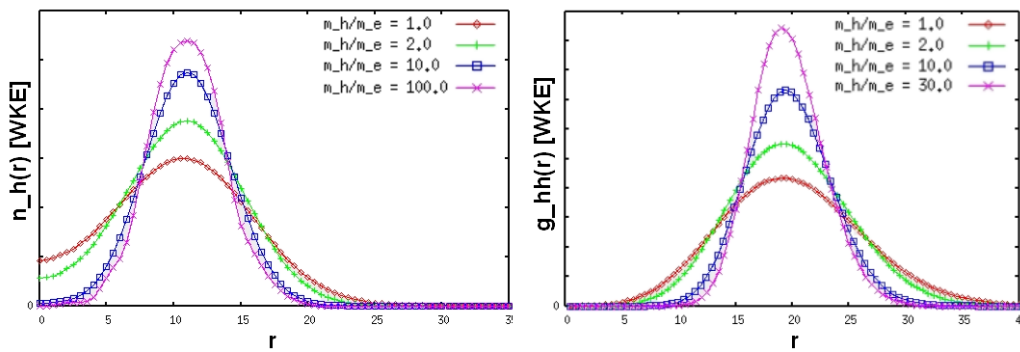


Abb. 5.23: **3 Elektron-Loch-Paare**: Teilchenzahldichte n_h und Paarkorrelationsfunktion g_{hh} der Löcher in Layer 2 bei einem Massenverhältnis von $m_{\text{Ratio}} = 1,2,10,30,100$. System-Parameter: siehe Abb. 5.17.

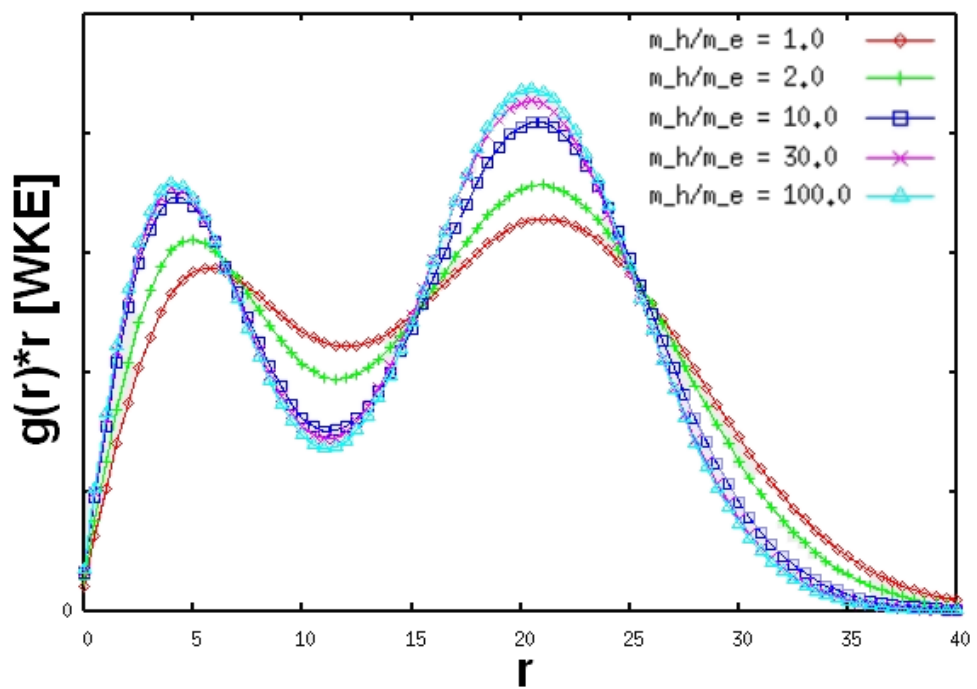


Abb. 5.24: **3 Elektron-Loch-Paare:** Paarkorrelationsfunktion g_{eh} , wobei die Elektronen in Layer 1 und die Projektion der Löcher auf Layer 1 betrachtet werden. Dargestellt sind die Massenverhältnisse $m_{\text{Ratio}} = 1, 2, 10, 30, 100$. System-Parameter: Abb. 5.17.

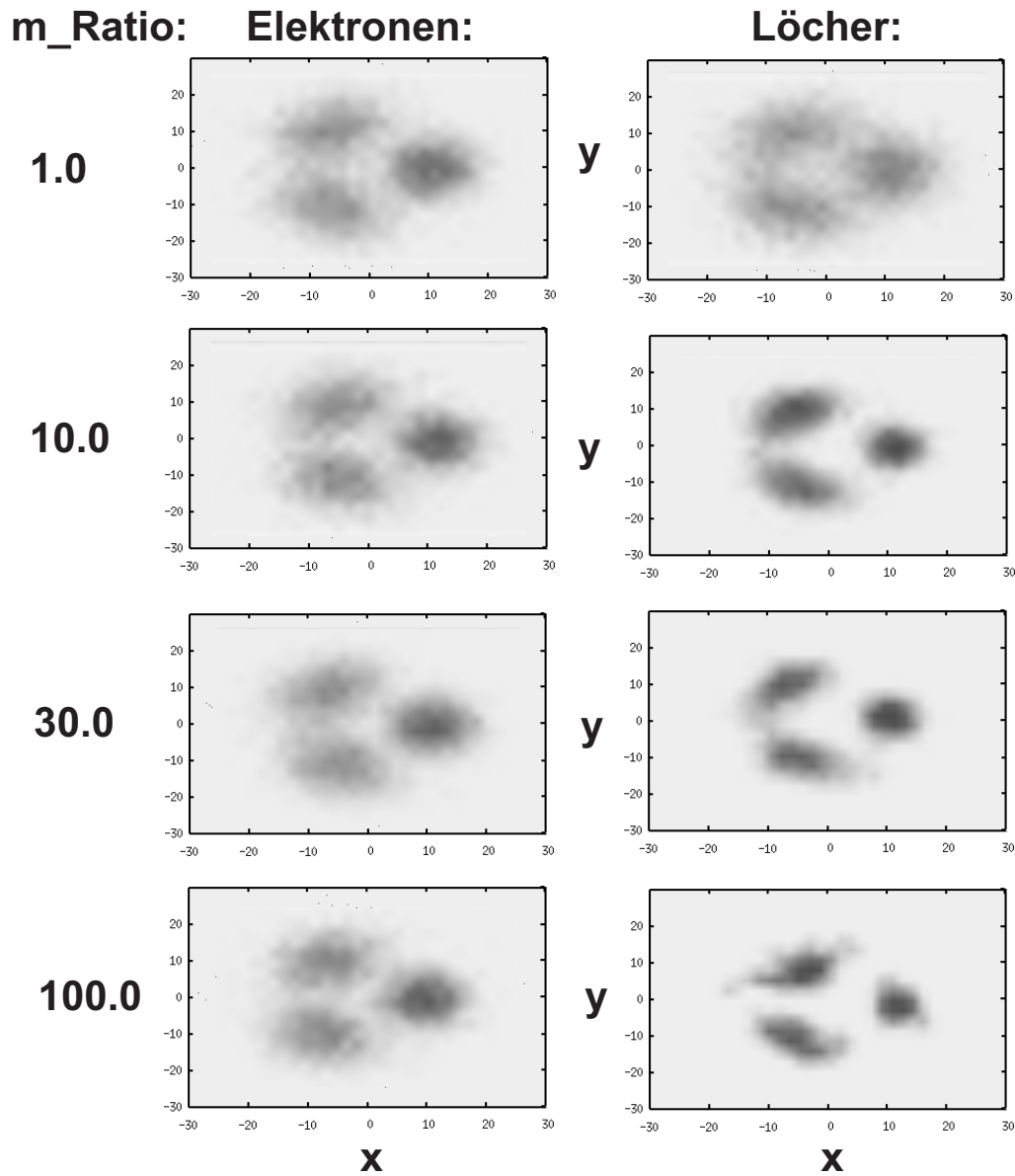


Abb. 5.25: **3 Elektron-Loch-Paare: Teilchenzahldichte $n(x, y)$** bei den verschiedenen Massenverhältnissen $m_{\text{ratio}} = 1, 10, 30, 100$. Die Lokalisierung der Löcher nimmt mit wachsendem Massenverhältnis stark zu. Diejenige der Elektronen nur leicht. Parameter: siehe Abb. 5.17.

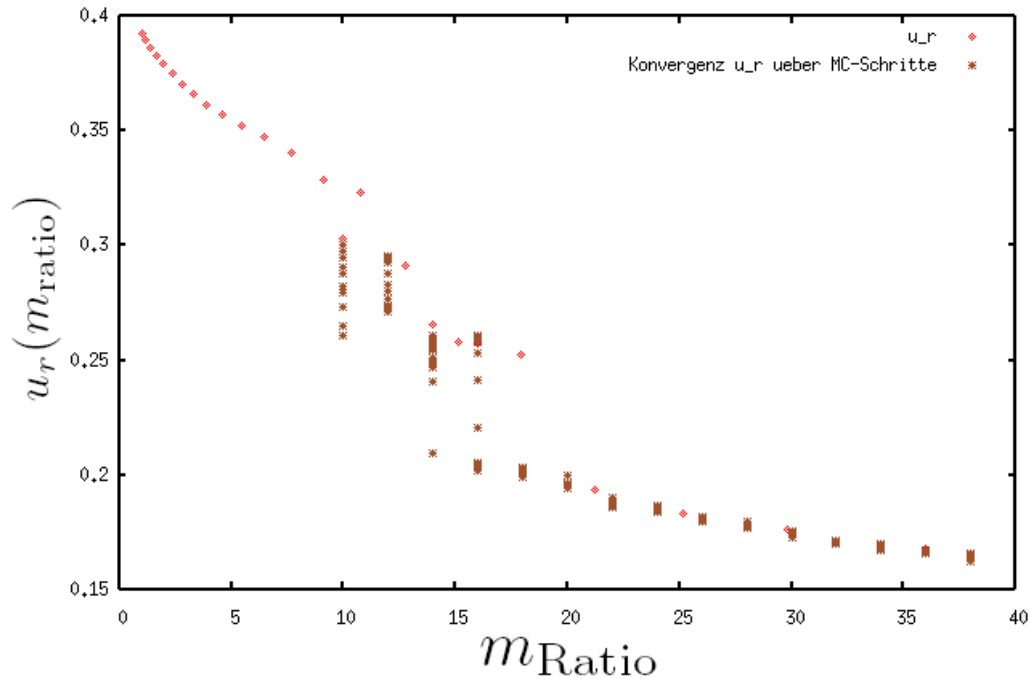


Abb. 5.26: **6 Elektron-Loch-Paare: Relative Abstandsfluktuation** $u_r(m_{\text{ratio}})$ bei $n = 0.6$. Die Unstetigkeit in der Fluktuation ist wie in der vorhergehenden Abbildung signifikant. Die Konvergenz der Fluktuation u_r über MC-Schritte ist ebenfalls eingetragen. Im Bereich des Phasenüberganges ist die Konvergenz bei der dargestellten Anzahl von MC-Schritten nicht gegeben. Ursache ist ein instantaner Partikelaustausch (siehe Text).

5.4.2 6 Elektron-Loch-Paare

Das im vorhergehenden Abschnitt beschriebene System, bestehend aus 3 Elektron-Loch-Paaren, wird hier bei gleichen Systemparametern für 6 Paare behandelt. 6 Elektron-Loch-Paare bieten den Vorteil, dass sich in der Konfiguration eine zweite Schale bildet (entsprechend dem Fall von 6 Elektronen in einer Schicht - siehe Kap. 5.3.3 und Abb. 5.4). Die Erwartung bei diesem System in der relativen Fluktuation einen wirklichen Sprung zu erhalten ist folglich von vornherein gegeben. Die relativen Abstandsfluktuationen $u_r(m_{\text{ratio}})$ für die Parameter $n = 0.4, 0.6$ sind in Abbildung 5.26 und 5.28 gegeben. Für die Berechnung wurden 200.000 Monte-Carlo-Schritte verwendet. Die Fluktuation der Elektronen ist in den Abbildungen nicht dargestellt: Diese bleibt, wie in dem im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen System für 3 Paare nahezu konstant und fällt mit zunehmendem Massenverhältnis nur sehr leicht ab. Die dargestellte Löcher-Fluktuationen weisen eine Unstetigkeit auf: Um den Bereich $u_r(m^{kr}) \approx 0.2$ tritt ein Sprung auf, der wie beschrie-

ben ein grobes Maß für eine Kristallisation darstellt. Die Fluktuation im Bereich des Phasenüberganges ist wegen der im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen statistischen Teilchenaustausche sehr hoch, so dass hier nur ein Bereich des kritischen Massenverhältnisses angegeben werden kann. Eine Verringerung der MC-Schritte verbessert entgegen dem üblichen Trend in diesem Bereich die Konvergenz ein wenig, da die Wahrscheinlichkeit der Teilchenaustausche in dem Bereich des Phasendiagrammes verringert wird, in dem Teilchenaustausche beginnen stattzufinden. In Abb. 5.29 ist die relative Abstandsfluktuation u_r über das Massenverhältnis $m_{\text{Ratio}} = 1 \dots 110$ für die Dichten $n=0.3, 0.5$ und 0.7 dargestellt. Zusätzlich ist für $n = 0.7$ die Konvergenz von u_r über die Monte-Carlo-Schritte dargestellt. Die Konvergenz ausserhalb des Bereiches des Phasenüberganges ist gut, innerhalb ist die Konvergenz wegen der stattfindenden Teilchenaustausche schlecht. Im Folgenden sind die kritischen Massenverhältnisse bei konstanter Dichte n gegeben:

- $n = 0.3$: $m_{\text{Ratio}}^{kr} = 5.5 \pm 1.5$
- $n = 0.4$: $m_{\text{Ratio}}^{kr} = 9.5 \pm 4.5$
- $n = 0.5$: $m_{\text{Ratio}}^{kr} = 8.5 \pm 3.5$
- $n = 0.6$: $m_{\text{Ratio}}^{kr} = 13.5 \pm 3.5$
- $n = 0.7$: $m_{\text{Ratio}}^{kr} = 17,5 \pm 5.5$

Mit leicht zunehmender MC-Schrittzahl nimmt die Streuung innerhalb des Unstetigkeitsbereiches nicht ab: Ursache ist das Auftreten von instantanen Teilchenaustauschen. Die Wellenfunktionen beginnen, sich im Bereich des Phasenüberganges zu überlappen, und ein Austausch wird wahrscheinlicher. In der kristallinen Phase treten derartige Teilchenaustausche exponentiell wenig auf - in der fluiden Phase permanent. Im Bereich des Phasenüberganges statistisch oft. Dieser Effekt wird anhand der in Abb. 5.26 und 5.29 dargestellten Konvergenz von $u_r(\text{MC_Steps})_{n=\text{const}}$ über die Monte-Carlo-Schritte deutlich: Aufgrund der statistischen Austausch im Phasenübergangsbereich konvergieren die u_r für die dargestellten 25.000 MC-Schritte nicht. Erst bei wesentlich mehr MC-Schritten, wenn alle Permutationen an Teilchenaustauschen statistisch oft durchlaufen sind, würden die Ergebnisse konvergieren. Eine auf den Erfahrungen dieser Arbeit beruhende erste Abschätzung wäre bei 6 Partikeln etwa 5.000.000 MC-Schritte pro Massenverhältnis. Derartige Berechnungen würden mehrere Wochen Rechenzeit benötigen oder aber sollten auf einem Cluster durchgeführt werden. Diese Untersuchungen konnten

im Zeitrahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden: Dann aber wäre die kritische Masse sehr genau bestimmbar.

Ansätze zur Lösung der Problematik des instantanen Austausches bzw. die Suche nach anderen charakteristischen Größen, die einen Phasenübergang beschreiben, werden derzeit an der CAU Kiel, Arbeitsgruppe Statistische Physik, untersucht. Ein möglicher Ansatz besteht darin, die Fläche der Paar-korrelationsfunktion bis zum ersten lokalen Minimum zu bestimmen, die per Definition auch ein Maß für den Zustand des Systems sein kann. Ergebnisse dieser Untersuchungen bleiben jedoch abzuwarten.

Mit den oben gegebenen kritischen Massenverhältnissen bei verschiedenen Dichten kann ein Phasendiagramm gezeichnet werden. Die Darstellung erfolgt in Abb. 5.27. Sie beschreibt die Trennlinie im Phasenraum der Löcher zwischen kristalliner und einer fluiden Phase. Der Zusammenhang zwischen kritischer Masse zu kritischer Dichte ist über die im vorhergehenden Abschnitt hergeleitete Relation $m_{\text{ratio}}^{\text{kr}} \sim (n^{\text{kr}}(m_{\text{ratio}}^{\text{kr}}))^2$ gegeben.

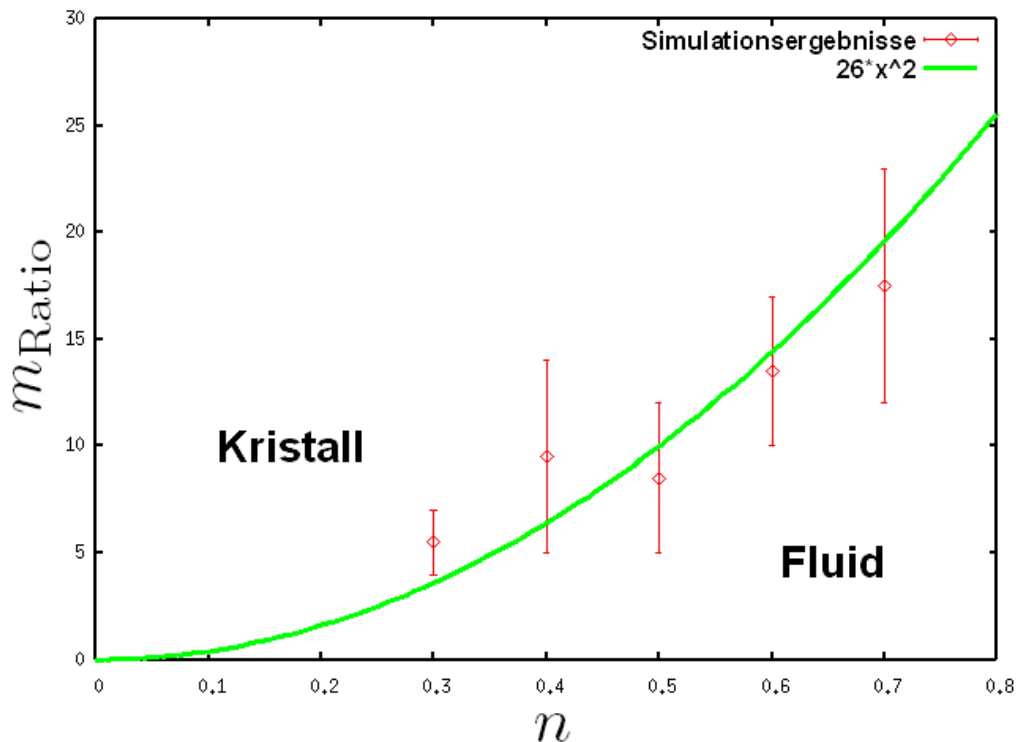


Abb. 5.27: **6 Elektron-Loch-Paare: Phasendiagramm** im $n - m_{\text{Ratio}}$ -Raum mit quadratischer Regressions-Funktion. Die kristalline Phase wird durch die Funktion m_{Ratio} von der fluiden Phase getrennt.

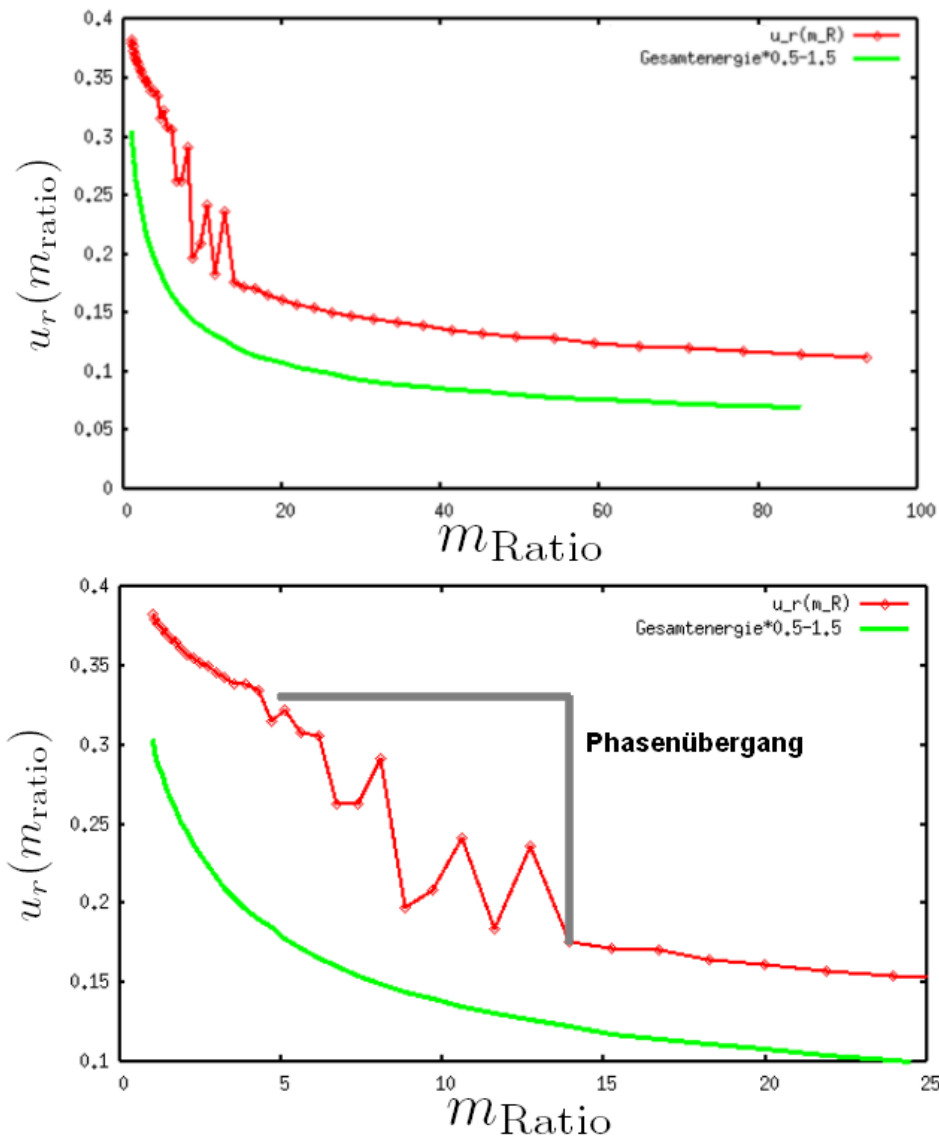


Abb. 5.28: **6 Elektron-Loch-Paare: Relative Abstandsfluktuation** $u_r(m_{\text{ratio}})$ bei $n = 0.4$. Die Unstetigkeit in der Fluktuation bei $m_R \approx 5 \dots 14$ ist signifikant. Des Weiteren ist die skalierte mittlere Gesamtenergie des Systems ($0.5\langle E \rangle - 1.5$) dargestellt. Unten: Vergrößerter Ausschnitt.

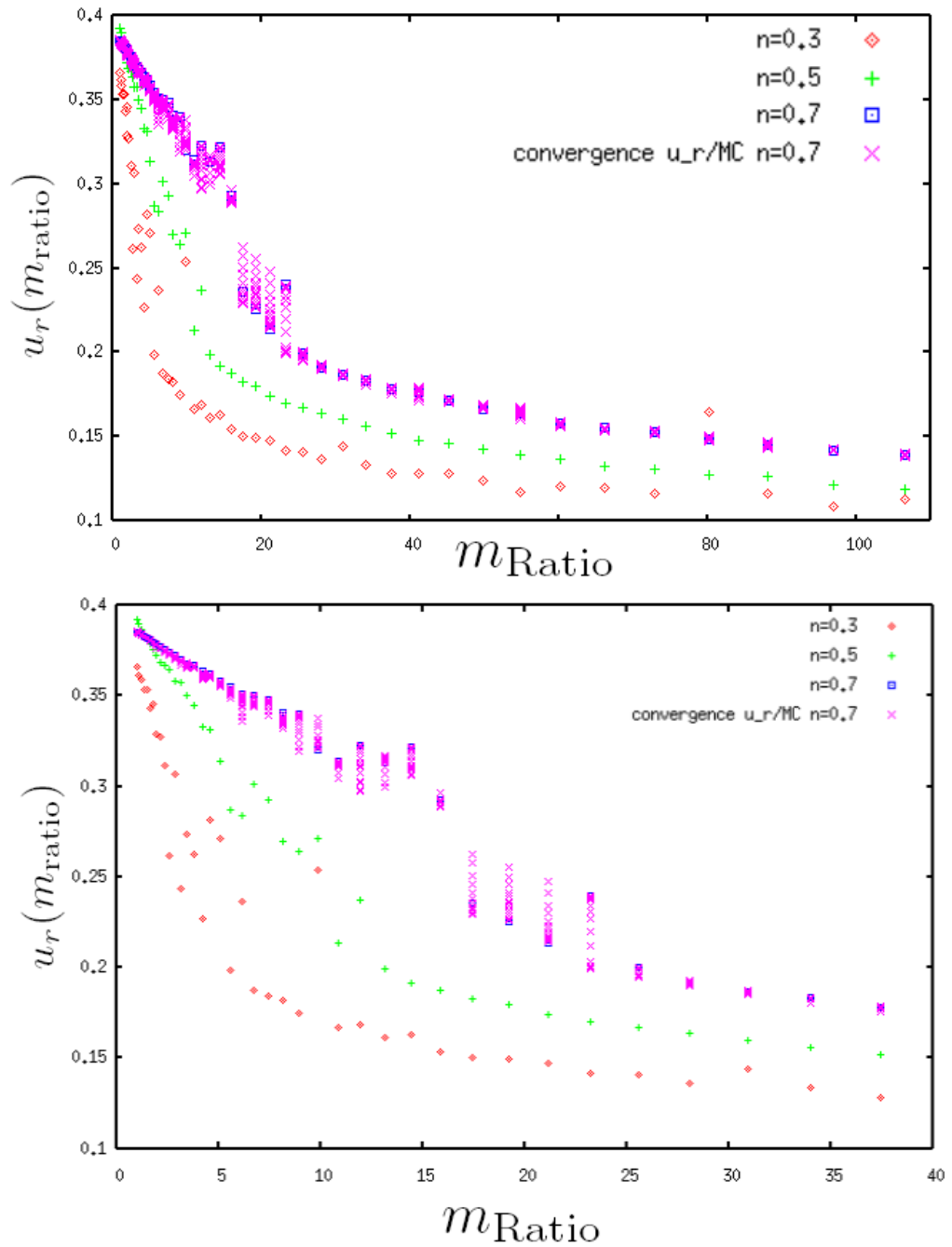


Abb. 5.29: **6 Elektron-Loch-Paare: Relative Abstandsfluktuation** $u_r(m_{\text{ratio}})$ der Löcher für $n = 0.3, 0.5, 0.7$. Die Unstetigkeiten in der Fluktuation der Löcher für $m_{\text{Ratio}} < 20$ sind signifikant. Unten: Vergrößerter Ausschnitt.

Kapitel 6

Zusammenfassung und Ausblick

Die Kristallisation von Elektronengasen ist seit dem theoretischen Nachweis E.Wigners [Wig34] in den Blick der Forschergemeinde gerückt. Zahlreiche Veröffentlichungen beschäftigen sich mit Kristallisationen in mesoskopischen Systemen. Diese Arbeit untersucht mittels Pfad-Integral-Monte-Carlo-Simulation das quantenmechanische Verhalten von indirekten, spinlosen Elektron-Loch-Paaren in Hinblick auf einen Phasenübergang. Abgetastet werden die Massenverhältnisse $m_{\text{Ratio}} = m_h/m_e = 1 \dots 100$ für konstante Dichten ab $n \approx 0.2$. Die indirekten Elektron-Loch-Paare befinden sich in zwei unabhängigen, im Abstand d angeordneten Halbleiterschichten, wobei die Elektronen sich in Layer 1 und die Löcher sich in Layer 2 befinden. Diese indirekten Paare bieten zum einen den Vorteil einer relativ langen Lebensdauer und zum anderen einer gewissen Kontrolle des Systemverhaltens über den Parameter des Schichtabstandes d .

Die hier vorgestellten Rechnungen für verschiedene Dichten $n > 0.2$ zeigen, dass die Löcher ab einem kritischen Massenverhältnis kristallisieren, die Elektronen hingegen in der fluiden Phase verweilen. Es findet also ein Phasenübergang der Löcher im Elektron-Loch-Kristall statt.

Für jeweils 3 und 6 Elektron-Loch-Paare wird ein Phasendiagramm im Dichte-Massenverhältnis-Raum (n - m_{Ratio} -Raum) berechnet (Abschn. 5.4). Dieses wird für 3 Elektron-Loch-Paare anhand des Kontrollparameters der relativen Abstandsfluktuation um $u_r(m_{\text{Ratio}}) \approx 0.2$ für konstante Dichten n bestimmt (vgl. Abschn. 4.7.3, Lindemann-Kriterium [Lin10]). Der Zusammenhang zwischen kritischem Massenverhältnis m^{kr} und kritischer Dichte n^{kr} ist mit $m^{\text{kr}} \sim (n^{\text{kr}})^2$ gegeben. Für das System aus 6 indirekten Elektron-Loch-Paaren tritt eine Unstetigkeit in der relativen Abstandsfluktuation $u_r(m_{\text{Ratio}})$ für konstante Dichten n auf (Abschn. 5.4.2). Anhand dieser Unstetigkeit wird das kritische Massenverhältnis m^{kr} und damit der Phasenübergang bestimmt. Alle hier vorgestellten Ergebnisse wurden mit dem im Rahmen dieser Arbeit

entwickelten Programm `PathSim` zur PIMC-Simulation berechnet.

Des Weiteren wurde im Rahmen dieser Arbeit das Visualisierungsprogramm `DensityPlot` entwickelt (Anhang A), welches die interaktive 3D-Visualisierung allgemeiner dreidimensionaler Dichteverteilungen ermöglicht, insbesondere Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten von Teilchen. Beispiele zu dreidimensionalen Systemen (12 und 13 Elektronen im 3D-harmonischen Potential) werden gegeben (Anhang A) und demonstrieren die Möglichkeiten von dreidimensionalen Rechnungen.

Die hier vorgestellte PIMC-Simulation, Zweischichtsysteme bestehend aus verschiedenen Teilchentypen berechnen zu können, stellt eine Basis für mögliche, weitergehende Berechnungen dar, die die Anzahl simulierbarer Systeme erheblich vergrößern würde:

Zunächst könnte ein systematisches Berechnen der Phasendiagramme für verschiedene Teilchenanzahlen durchgeführt werden. Dazu sollten noch entsprechende Routinen zur Behandlung des Teilchenaustausches im Bereich des Phasenüberganges entwickelt werden, um die Phasengrenze möglichst genau anzugeben. Bei niedrigen Dichten n könnte einen Phasenübergang auch bei den Elektronen gezeigt werden, so dass Exzitonenkristalle entstehen. Eine Untersuchung der Abhängigkeit des Phasenüberganges in Bezug auf den Schichtabstand d oder die Temperatur T könnte z.B. zu einem dreidimensionalen Phasendiagramm führen.

Eine Erweiterung um die Behandlung des Spins würde die Betrachtung von Bosonen und Fermionen ermöglichen. Für die Simulation beliebiger externer Potentiale könnten diskrete Felder eingelesen und entsprechend interpoliert werden, so dass jedes denkbare Potential simuliert werden könnte. Gleiches gilt für das Coulomb-Potential: Für die Simulation von Elektronen und Löchern in einer Schicht z.B. könnten effektive Potentiale eingeführt werden. Aufgrund der Singularität des Coulomb-Potentials explodieren derartige Systeme in der hier vorgestellten Simulationsumgebung. Auch könnten im Ggs. zu dieser Arbeit, die im Kern 2D-Schichten betrachtet, endliche Schichtdicken simuliert werden, die durch ein eigenes Potential definiert sind.

Zum aktuellen Zeitpunkt stößt die quantenmechanische Simulation von wesentlich mehr als 50 Partikeln an die Grenzen der akzeptablen Simulationszeit. Zum einen kann jede Monte-Carlo-Simulation ausgesprochen gut parallelisiert werden, so dass Rechner-Cluster die Performance nahezu linear mit der Anzahl der Rechner steigen lassen würden. Zum anderen könnten spezielle Algorithmen für Systeme mit großen Teilchenanzahlen entwickelt werden, die an entscheidenden Stellen Vernachlässigungen vornehmen - so müsste evtl. abstandsabhängig nicht jedes Teilchen mit jedem anderen wechselwirken.

Anhang A

Visualisierung

Die Visualisierung der Strukturen und Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten von Clustern ist Thema dieses Abschnittes. Dabei wird insbesondere auf die Darstellung dreidimensionaler Dichten eingegangen. Es ist das Visualisierungstool `DensityPlot` entwickelt worden (Abb. A.1), welches als Teil dieser Arbeit die Möglichkeiten und Grenzen einer dreidimensionalen Visualisierung von dreidimensionalen Dichten aufzeigt und gleichzeitig eine praktische Umsetzung der vorgestellten Konzepte darstellt.

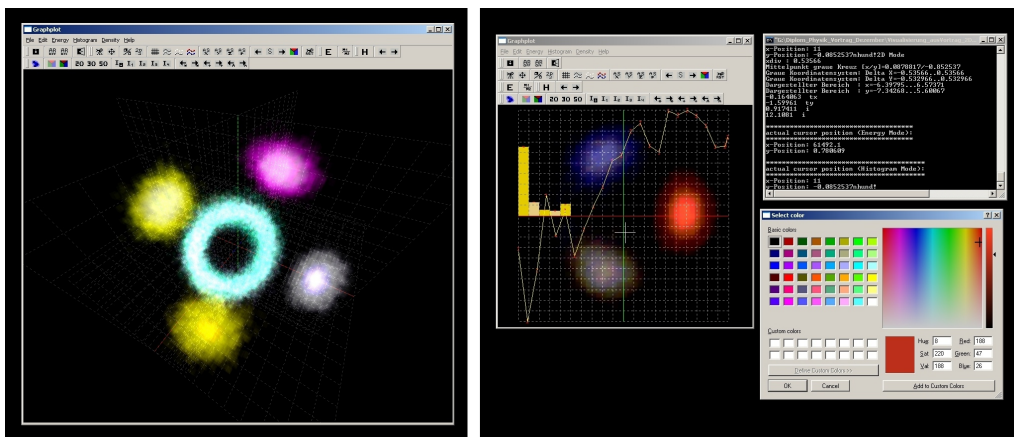


Abb. A.1: Screenshots des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programms `DensityPlot`. Es dient zur Visualisierung zwei- und dreidimensionaler Dichten.

A.1 Implementierungsumgebung

Die Implementierung des Programms `DensityPlot` erfolgte auf einem Pentium IV/2400MHz mit einer auf dem nVidia GeForce4 Ti4800 SE pro Chip

basierenden Graphikkarte unter Windows XP Professional und VS C++ 6.0.

Als Graphikbibliothek kam OpenGL 1.4 unter Verwendung von Glut 1.7 zum Einsatz. OpenGL ist in der Wissenschaft die am weitesten verbreitete Lösung und wurde somit auch im Rahmen dieser Arbeit verwendet. Zudem ist OpenGL auf den verschiedensten Plattformen verfügbar und bietet damit z.B. einen entscheidenden Vorteil gegenüber DirectX. Aus dem gleichen Grunde wurde zur Erzeugung des GUI QT 3.0.0 verwendet. Ansonsten wurden ausschließlich Standardlibraries genutzt, die jedem C++-Compiler beiliegen. Damit sind die entwickelten Programme unabhängig von dem Betriebssystem Windows und können unter jedem Betriebssystem compiliert werden, unter dem OpenGL und QT verfügbar sind (Linux, Solaris, ...). Getestet wurde `DensityPlot` noch in einer Linux-Umgebung auf einer ATI-Graphikkarte.

A.2 Visualisierung von Wahrscheinlichkeitsdichten

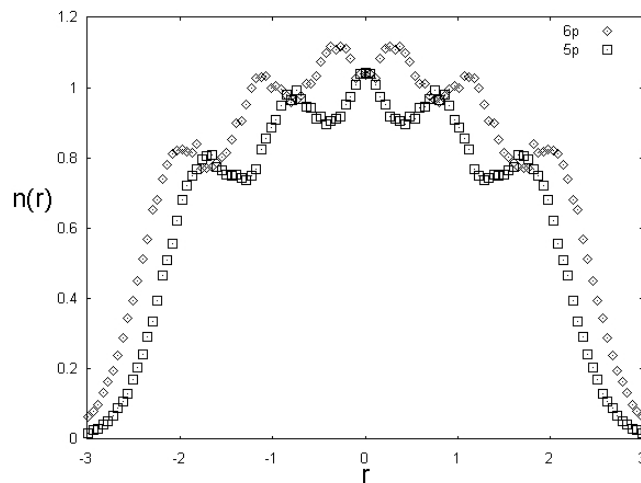


Abb. A.2: **5 und 6 Elektronen im eindimensionalen harmonischen Potential** Dies ist das gleiche Ergebnis, welches durch Lösung der entsprechenden Schrödinger-Gleichung erzielt würde: Die Überlagerung der Wellenfunktionen der Partikel führt zu Oszillationen in der Dichte. Die zwischen den beiden Graphen liegende Fläche entspricht Eins, also dem Integral über die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des hinzugefügten Elektrons. Berechnet mit PIMC-Sim.

Eindimensionale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten $|\Psi(r, t)|^2$ können als zweidimensionaler Graph dargestellt werden und liefern damit eine an-

schauliche Vorstellung: In Abbildung A.2 ist beispielsweise die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von fünf und sechs Elektronen im eindimensionalen Harmonischen Oszillator gegeben. Zweidimensionale Wahrscheinlichkeiten werden üblicherweise in einem $2,5D$ -Diagramm dargestellt, in dem die Wahrscheinlichkeiten in Farb- und Luminanzwerte kodiert sind (z.B. Abb. 5.12, Abschn. 5)). Eine andere Möglichkeit wäre die Darstellung als dreidimensionale Funktion, also eine topologische Darstellung. Die Darstellung dreidimensionaler Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten auf zweidimensionalen Medien beinhaltet das Problem der dreidimensionalen Informationsvisualisierung. Ein einfacher Lösungsansatz besteht darin, die Projektionen der Dichten auf z.B. die xy -, yz - und zx -Achse in einem $2,5D$ -Diagramm darzustellen, wobei die genormte Summe durch die z -, x - und y -Achse der Dichteinformationen in die Farb-Informationen kodiert wird. Dabei gehen jedoch einige Informationen über die räumliche Verteilung der Dichteinformationen verloren. In einer vollständigen dreidimensionalen Volumenvisualisierung, in der mit transparenten Dichteinformationen gearbeitet wird, können dagegen die vollständigen Informationen dargestellt werden. Durch Rotationen des Dichtevolumens kann die genaue Verteilung der Wahrscheinlichkeiten anschaulich erschlossen werden. Ohne die Möglichkeit der Rotation, wie es z.B. bei einer Darstellung als statische Abbildung der Fall ist, besteht jedoch wieder das Problem, dass viele Informationen fehlen, weil lediglich die Projektion der Dichteverteilungen auf die momentane Bildebene dargestellt wird. Die Verwendung von Transparenz (Alpha-Werten) ermöglicht eine Art Wolken-Darstellung, deren Intensität proportional zur Wahrscheinlichkeitsdichte an dieser Position ist. Zudem werden vom aktuellen Blickpunkt aus gesehene, weiter hinten liegende Dichteinformationen nicht vollständig verdeckt, so dass ein Farbwert die gesamten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten entlang dieser Blickgeraden repräsentiert. Anschaulich ist dieser Sachverhalt in Abb. A.3 dargestellt. Das vollständige Bild aller dreidimensionalen Informationen entsteht für den Betrachter jedoch erst, wenn die Visualisierung an einem Rechner mit interaktiver Rotationsmöglichkeit durchgeführt wird.

A.3 DensityPlot

Das im Rahmen dieser Arbeit entstandene Programm `DensityPlot` nutzt die 3D-Beschleunigungsmöglichkeiten moderner Graphikkarten bezüglich 3D-Graphik für eine interaktive Visualisierung zwei- und dreidimensionaler Wahrscheinlichkeitsdichten. Dreidimensionale Wahrscheinlichkeitsdichten, die mit dem Programm als Wolken dargestellt werden, werden unter Verwendung des Alphabuffers transparent gerendert, um die im vorhergehen-

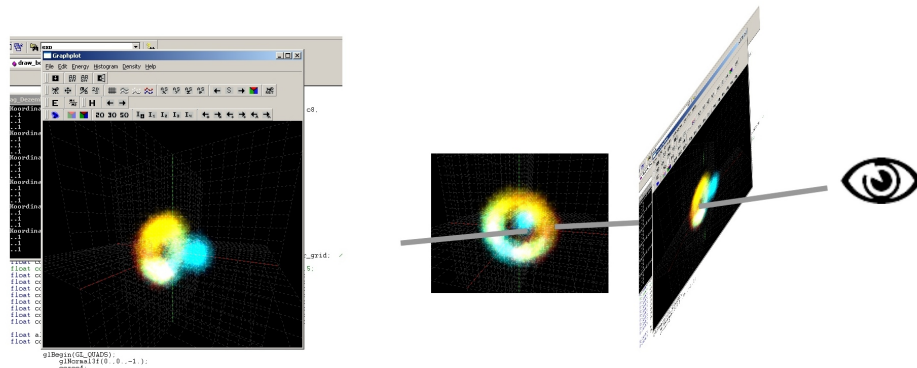


Abb. A.3: **Prinzip der dreidimensionalen Dichtevizualisierung** Die auf dem Monitor zweidimensionale Darstellung (links) repräsentiert die Dichte entlang einer Sichtgraden durch den dreidimensionalen Raum (rechts).

den Abschnitt beschriebenen Möglichkeiten zu realisieren (siehe die später behandelten Beispiele in Abb. A.5 bis A.8).

Der Kern des Programms `DensityPlot` besteht aus drei Klassen:

- `AppWin`
- `OpenGLFrame`
- `Vis`

`AppWin` initialisiert und behandelt das QT Widget zur Menüführung. `OpenGLFrame` initialisiert das OpenGL Widget und behandelt die innerhalb desselben emittierten Signale. Schließlich ist die Klasse `Vis` für die Initialisierung, Simulation und Darstellung der Dichten zuständig. Weitere für den Kern des Programms irrelevante Klassen zum Parsen der Parameterfiles und zur Verwaltung der Daten werden verwendet. Zunächst werden alle Raumkoordinaten aller Partikel, die z.B. mit `PathSim` erstellt wurden, eingelesen und in jeweils eigenen Objekten zuzüglich jeweiliger Parameter wie Anzahl der Koordinaten, Farbe, etc. gespeichert. In diesem Schritt werden auch für die Darstellung, bzw. die Normierung relevante Werte berechnet, wie z.B. die maximale Koordinatenwerte pro Dimension. Diese dienen zur Normierung des dargestellten Raumes auf einen der Bildschirmdarstellung angemessenen Bereich. Diese Daten können schon in einer Punktrepräsentation der Daten dargestellt werden. Im nächsten Schritt wird der Raum diskretisiert (z.B. $100 \times 100 \times 100$) und die Anzahl der innerhalb eines Quadranten liegenden Koordinaten in einem dreidimensionalen Histogramm abgelegt. Dabei wird jedes Partikel separat behandelt, um ihm später eigene visuelle

Eigenschaften zuweisen zu können. Diese Daten stellen die darzustellenden Dichteinformationen dar.

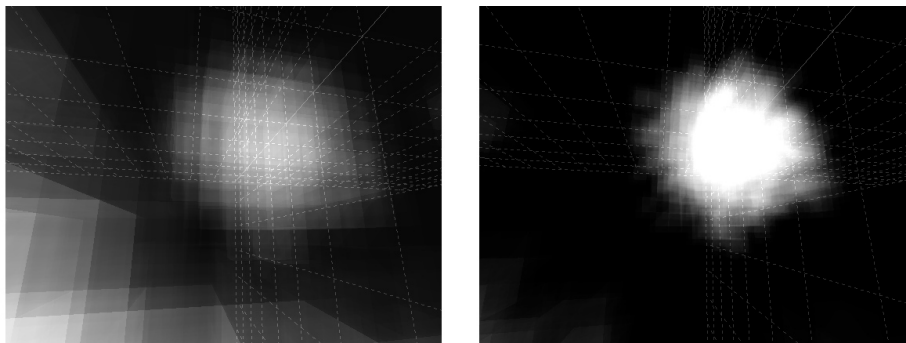


Abb. A.4: **Visualisierung von dreidimensionalen Dichten** Zahlreiche transparente Quader bilden die Basis für die Dichtedarstellung (links: Diskretisierung 20^3). Mit zunehmender Verfeinerung des Gitters nimmt die dargestellte Auflösung zu und die Qualität steigt (rechts: Diskretisierung 50^3). Damit allerdings auch der Aufwand für die Echtzeitdarstellung. Gerendert mit `DensityPlot`.

Das Gitter wird aus zahlreichen nebeneinanderliegenden Quadern gerendert, die das Gitter vollständig ausfüllen (siehe Abb. A.4). Da üblicherweise die meisten oder zumindest zahlreiche Positionen innerhalb des dreidimensionalen Histogrammes unbesetzt sind, reduziert sich die Anzahl der darzustellenden Quader erheblich. Bei einem Gitter der Kantenlänge 100 wären ansonsten $100^3 * 6$ (Kanten = 2 Dreiecke) = 12 Mio Dreiecke zu rendern, was bei heutigen Grafikkarten in Echtzeit mit Minimum 10 Frames/Sekunde undenkbar wäre.

Auf welche Art die Farben mit dem Alpha-Kanal verknüpft werden, ist von der jeweiligen Anwendung bzw. vom Datensatz abhängig. Gute Ergebnisse werden z.B. mit der Blending-Funktion `glBlendFunc(GL_SRC_ALPHA, GL_ONE)` erzielt, was der folgenden Relation entspricht:

$$\begin{pmatrix} R \\ G \\ B \\ A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \cdot R_1 + R_2 \\ A_1 \cdot G_1 + G_2 \\ A_1 \cdot B_1 + B_2 \\ A_1 \cdot A_1 + A_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Die gerenderte Endfarbe (R, G, B, A) ergibt sich aus der zu rendernden Farbe (R_1, G_1, B_1, A_1) und der an der aktuellen Position im Bildschirmspeicher bereits gerenderten Farbe (R_2, G_2, B_2, A_2) und ist ein Maß für die Dichte in diesem Bereich. Für gute Ergebnisse ist ein manuelles Justieren notwendig. Dieser Prozess ist nicht automatisierbar, da die Darstellung zu sehr von der Art des Datensatzes abhängt. Ein Normieren der Intensitäten entsprechend

der maximalen Dichte auf die Farbe Weiß liefert nicht notwendigerweise ein befriedigendes Ergebnis. Zum Justieren der Intensitäten wurde die interaktive Variationsmöglichkeit des Alpha-Wertes i und von k , j eingeführt, die den zu rendernden Farbwert (R_0, G_0, B_0, A_0) verändern:

$$\begin{pmatrix} R_1 \\ G_1 \\ B_1 \\ A_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k \cdot R_0 + j \\ k \cdot G_0 + j \\ k \cdot B_0 + j \\ i \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Mit diesen drei Kontrollvariablen $i, j, k \in [0, 1]$ ist in der Regel eine optimale Abstimmung möglich. Es sind aber auch andere, z.B. nicht-lineare Relationen von Dichte zur dargestellten Intensität denkbar.

Durch Wahl des Shadingmodells `GL_SMOOTH`, was einem Gouraud-Shading entspricht, wird ein weicherer Farbübergang zwischen den Quadern erzielt. Voraussetzung ist die Definition der Quader derart, dass an jeweils übereinanderliegenden Eckpunkten diese die gleichen Farbwerte erhalten.

Ein anderer Ansatz zur Visualisierung besteht in Multi-Texture-Planes zur Darstellung von Volumenausdehnungen [Cor04]. Basis ist ein aus der Volumenvisualisierung bekanntes Verfahren: zahlreiche Texturen werden dicht übereinander dargestellt und repräsentieren einen Voxel-Raum entsprechend der Diskretisierung des Konfigurationsraumes. Das darzustellende Volumen wird in den Voxelraum gerendert, wobei nicht genutzte Voxel einen Alpha-Wert von 1.0 erhalten, so dass sie vollständig transparent sind. Für flüssige Farbverläufe und zur Reduzierung von Artefakten bei Rotationen bietet es sich an, auch anderen Voxeln eine gewisse Transparenz zuzuweisen. Die Anzahl und der verwendete Abstand der Ebenen-Texturen bestimmen maßgeblich die Auflösung in z-Richtung. Bei einer Blickrichtung parallel zu den Ebenen-Texturen sind die einzelnen Texturen erkennbar. Abhilfe schafft ein blickpunktabhängiges Umschalten der Richtung, in der die Texturen gezeichnet werden. Zudem bestimmt die Anzahl auch in hohem Maße die maximal erreichbaren Frameraten. Mit diesem Verfahren könnten wesentlich hochauflösendere Volumenräume in Echtzeit dargestellt werden. Eine Umsetzung erscheint jedoch erst mit dem künftigen OpenGL Standard sinnvoll, in dem echte 3D-Volumen-Texturen unterstützt werden. In diese könnte dann die gesamte Dichte gespeichert werden und es wären Gittergrößen von $512 \times 512 \times 512$ in Echtzeit darstellbar.

Zur Kontrolle einer laufenden Simulation bietet `DensityPlot` die Möglichkeit, einen beliebigen Graphen mit Fehlerbalken und ein beliebiges Histogramm darzustellen. Diese müssen in einem externen File im ASCII-Format vorliegen. Sobald diese Files geändert werden, was z.B. durch einen

Schreibvorgang der Energiekonvergenz während eines Simulationslaufes geschehen kann, wird die Darstellung durch `DensityPlot` automatisch aktualisiert.

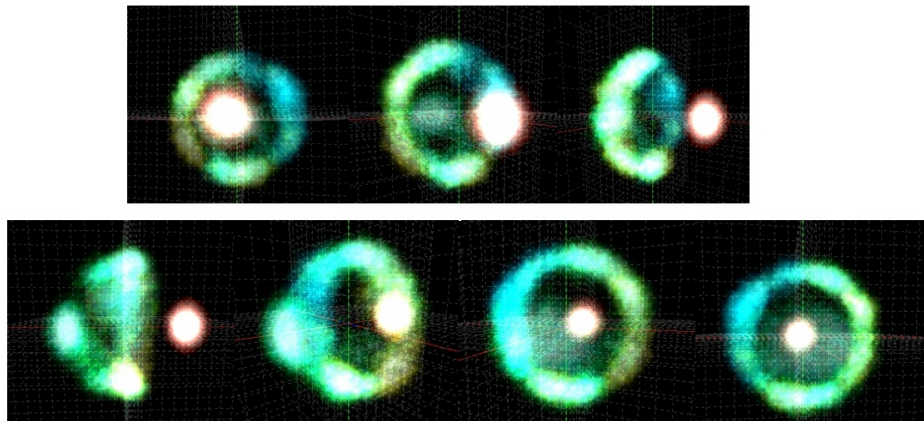


Abb. A.5: **5 Elektronen** Von oben links nach unten rechts wird in diskreten Schritten um die y-Achse (Senkrechte im Raum) gedreht, bis das System unten links schließlich um 180° rotiert wurde: Zunächst liegt das gepinnte Partikel (weiß) vorne und wandert dann nach rechts. Gerendert mit `DensityPlot`. Mit `DensityPlot` können dieses und die folgenden Systeme interaktiv und in Echtzeit rotiert werden - erst dann kommt die wirkliche Dreidimensionalität des Systems zum Ausdruck.

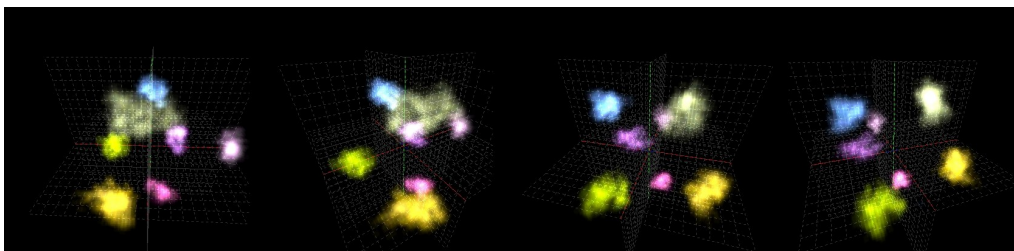


Abb. A.6: **7 Elektronen (3D)**. Rotiert wie in Abb. A.5. Die Darstellung von nur relativ wenigen MC-Schritten (hier: 2000) bewirkt relativ verschwommene Dichteinformationen, da der Konfigurationsraum noch nicht ausreichend abgetastet wurde. Gerendert mit `DensityPlot`.

A.4 Beispiele

In diesem Abschnitt werden einige Beispiele gegeben, die die Möglichkeiten von `DensityVis` zum einen und einer dreidimensionalen Dichtedarstellung

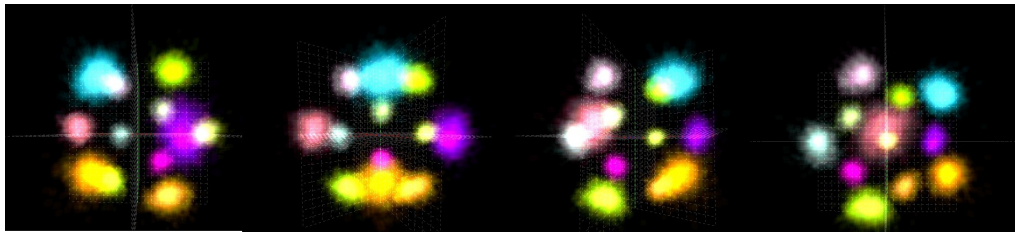


Abb. A.7: **12 Elektronen (3D)**. Rotiert wie in Abb. A.5. Alle zwölf Elektronen ordnen sich kugelförmig auf einer Schale an. Gerendert mit `DensityPlot`.

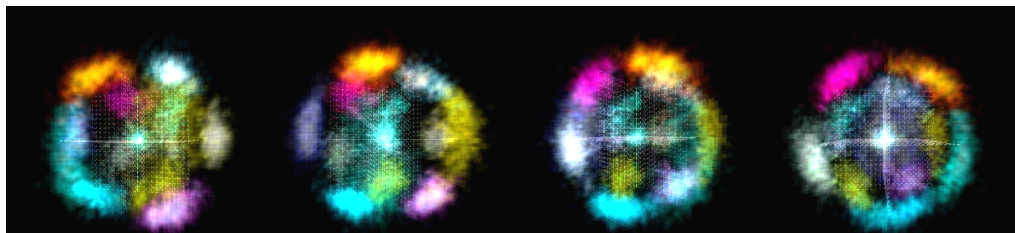
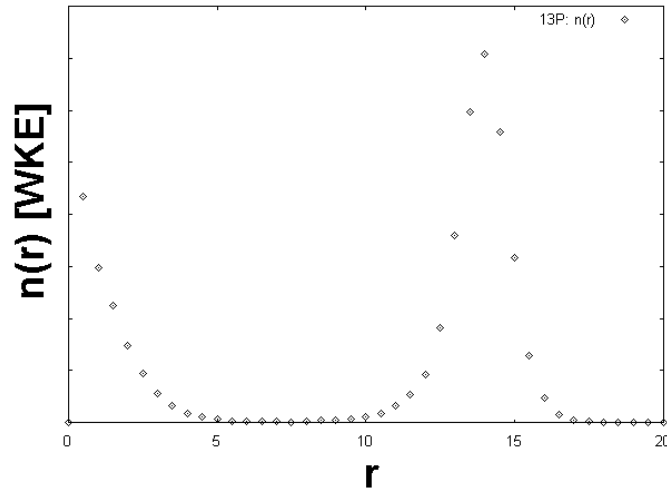


Abb. A.8: **13 Elektronen (3D)**. Rotiert wie in Abb. A.5. Das 13. Elektron (vgl. Abb. A.7) ordnet sich auf einer neuen Schale an, so dass nun ein Elektron im Ursprung liegt und 12 Elektronen kugelförmig auf der nächsten Schale sitzen. Ein Partikel auf der äußeren Schale ist gepinnt. Gerendert mit `DensityPlot`.

zum anderen aufzeigen sollen. Dabei werden die folgenden physikalischen Beispiele nur kurz besprochen, ausführliche Diskussionen simulierter Systeme sind in Kapitel 5 zu finden. Prinzipiell können mit `DensityPlot` dreidimensionale Dichten beliebiger Art dargestellt werden und nicht nur Teilchendichten. Im folgenden Abschnitt werden dreidimensionale Systeme identischer Teilchen im harmonischen Potential visualisiert, die mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Programm `PathSim` zur Pfadintegral-Monte-Carlo-Simulation berechnet wurden. Dann werden 10 Partikel im 2D-Potential betrachtet, um die zweidimensionalen Möglichkeiten zu demonstrieren.

A.4.1 Cluster im dreidimensionalen harmonischen Potential

Die Grundzustandskonfigurationen dreidimensionaler identischer Teilchen sind bekannt: Z.B. wurden in [ABB⁺04] die Grundzustandskonfigurationen bis zu 160 Partikeln mittels Molekulardynamik-Simulation bestimmt. Als Vergleichsbeispiel mit der quantenmechanischen PIMC-Simulation wurden diese für verschiedene Teilchenzahlen N und verschiedene Kopplungsparameter λ mit selbiger berechnet. Die nach [ABB⁺04] zu erwartenden Scha-

Abb. A.9: **13 Elektronen:** Teilchenzahldichte $n(r)$.

lenkonfigurationen für $N = 5, 7, 12, 13$ sind: (5), (7), (12), (12,1). Berechnet wurde die drei Systeme mit folgenden Parametern:

- 5 Elektronen: $k_B T = 0.5\hbar\omega$, $\lambda = 500.$, slices $n = 50$, MC-Steps $mc = 20000$
- 7 Elektronen: $k_B T = 0.1\hbar\omega$, $\lambda = 80.$, slices $n = 50$, MC-Steps $mc = 20000$
- 12 Elektronen: $k_B T = 0.1\hbar\omega$, $\lambda = 1500.$, slices $n = 50$, MC-Steps $mc = 20000$
- 13 Elektronen: $k_B T = 0.01\hbar\omega$, $\lambda = 500.$, slices $n = 100$, MC-Steps $mc = 10000$

Die hohen Werte für Lambda wurden gewählt, um möglichst einer klassischen Konfiguration zu entsprechen. Die Ergebnisse sind in Abb. A.5 bis A.8 dargestellt. Für die Darstellung wurde jeweils ein auf der Achse liegendes Partikel gepinnt. Dabei wird die Dichtefunktion jeweils um einen kleinen Winkel verschoben dargestellt (von rechts nach links). Bei 5 Elektronen reicht die thermische Energie zum Rotieren dreier Elektronen aus, so dass sich ein Ring bildet. Der Übergang bei 12 zu 13 Teilchen (also der Anordnung eines Teilchens im Ursprung) konnte ebenfalls reproduziert werden. Für 13 Elektronen sind in Abb. A.9 exemplarisch die Teilchenzahldichte gegeben, anhand derer die Schalenkonfiguration konkret ablesbar ist. Alle genannten Konfigurationen entsprechen den oben genannten klassisch zu erwartenden Konfigurationen.

A.4.2 10 Elektronencluster (2D)

Zehn Elektronen im zweidimensionalen harmonischen Oszillator besitzen klassisch die in Abbildung A.10 (rechts) dargestellte Grundzustandskonfiguration. Das System wurde mit `PathSim` quantenmechanisch für die niedrige Temperatur $k_B T = 0.1 Ha$, 25000 MC-Schritten und der sehr starken Wechselwirkung $\lambda = 80$ gerechnet. Die Ortsraumkonfiguration ist in Abb. A.10(links) dargestellt und entspricht auch derjenigen, klassisch zu erwartenden: 2 Elektronen ordnen sich auf einer inneren Schale an, die restlichen 8 auf einer äußeren. Oben findet bereits ein leichtes Verschmimmen der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten statt. Es kann auch vorkommen, dass während der Simulation ein energetisch sehr nahe liegender Zustand eingenommen wird: 1 Partikel auf der inneren Schale, 9 auf der äußeren. Diese Endkonfiguration tritt jedoch wesentlich seltener auf.

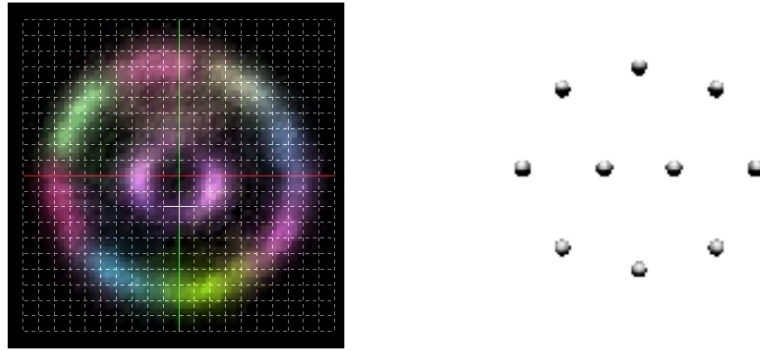


Abb. A.10: **10 Elektronencluster** Links: `PathSim`. Rechts: Referenz aus [Lud03]. Gerendert mit `DensityPlot`.

Abbildung A.11 zeigt die Teilchenzahldichte $n(r)$ und die Paarkorrelationsfunktion $g(r)$. Die oben beschriebene Schalenkonfiguration ist deutlich zu erkennen.

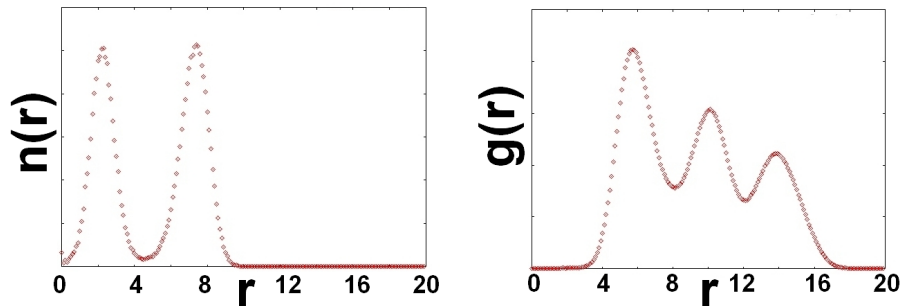


Abb. A.11: **10 Elektronencluster** Teilchenzahldichte $n(r)$, Paarkorrelationsfunktion $g(r)$.

Literaturverzeichnis

- [ABB⁺04] ARP, O., BLOCK, D., BONITZ, M., FEHSKE, H., GOLUBNYCHYI, V., KOSSE, S., LUDWIG, P., MELZER, A. und PIEL, A.: *3D Coulomb Balls: Experiment and Simulation*. Journal of Physics: Conference Series: Kinetic Theory of Nonideal Plasmas, 2004.
- [Ash96] ASHOORI, R.C. Nature (London) **379**, 413, (1996).
- [AWGD93] ANDREI, E.Y., WILLIAMS, F.J.B., GLATTLI, D.C. und DEVILLE, G.: *Experiments on Two-Dimensional Wigner Crystals*. In: "Physics of Low-Dimensional Semiconductor Structures", P.Butcher, M.P.Tosi (Hrsg.), Plenum Press, New York, S. 499 ff., 1993.
- [Bar02] BARBERÀ, LLORENÇ BRUALLA I: *Path integral Monte Carlo - Algorithms and applications to quantum fluids*. Dissertation, Department de Física i Enginyeria Nuclear, Barcelona, 2002.
- [BFF⁺05] BONITZ, M., FILINOV, V.S., FORTOV, V.E., LEVASHOV, P.R. und FEHSKE, H.: *Crystallization in Two-Component Coulomb Systems*. Physical Review Letters **95**, (2005).
- [BH02] BINDER, K. und HEERMANN, D.W.: *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics*. Springer-Verlag Berlin, 2002.
- [BP94] BEDANOV, V.M. und PEETERS, F.M. Phys. Rev. B **51**, 7700, (1994).
- [Bro05] BROZEL, M.R.: *Properties of Gallium Arsenide*. Institution of Electrical Engineers, (2005).
- [BSMM99] BRONSTEIN, I.N., SEMENDJAJEW, K.A., MUSIOL, G. und MÜHLIG, H.: *Taschenbuch der Mathematik*. Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 4. Auflage, 1999.

- [CD01] CHAICHIAN, M. und DEMICHEV, A.: *Path Integrals in Physics*. Institute of Physics Publishing, 2001.
- [Cep95] CEPERLEY, D.M.: *Path integrals in the theorie of condensed helium*. National Center for Supercomputer Applications, Dep. of Physics, University of Illinois, 1995.
- [Cor04] CORDS, H.: *Physikalisch basierte Gewebesimulation in Echtzeit*. Universität Rostock, Fachbereich Informatik, Diplomarbeit, 2004.
- [EHMG99] EGGER, R., HÄUSLER, W., MAK, C.H. und GRABERT, H.: *Crossover from Fermi Liquid to Wigner Molecule Behavior in Quantum Dots*. Physical Review Letters, **82**, 16, (1999).
- [FB06] FILINOV, A.V. und BONITZ, M.: *Classical and Quantum Monte Carlo*. aus *Introduction to Computational Methods in Many-Body Physics*, Bonitz, M.[ed], Rinton Press, Princeton, to be published, January 2006.
- [FBL00] FILINOV, A.V., BONITZ, M. und LOZOVIK, YU.E.: *Path integral simulation of crystallization of quantum confined electrons*. phys. stat. sol. (b) 221,231, (2000).
- [FBL01a] FILINOV, A.V., BONITZ, M. und LOZOVIK, YU.E.: *Wigner Crystallization in Mesoscopic 2D Electron Systems*. Physical Review Letter, **86**, 3815, (2001).
- [FBL01b] FILINOV, V.S., BONITZ, M. und LOZOVIK, YU.E. Contrib. Plasma Phys. , **41**, 357, (2001).
- [FBL03] FILINOV, A.V., BONITZ, M. und LOZOVIK, YU.E.: *Excitonic clusters in coupled quantum dots*. Journal of Physics A, **36**, 5899-5904, (2003).
- [Fey90] FEYNMAN, R.P.: *Statistical Mechanics, A Set of Lectures*. Addison-Wesley Publishing Company, 13. Auflage, 1990.
- [FH65] FEYNMAN, R.P. und HIBBS, A.R.: *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill Book Company, New York, 1965.
- [Fil05] FILINOV, A. Persönliche Mitteilung, (2005).
- [FLG⁺03] FILINOV, A.V., LUDWIG, P., GOLUBNYCHYI, V., BONITZ, M. und LOZOVIK, YU.E. phys. stat. sol. **0**, 1518-1522, (2003).

- [FVBL01] FILINOV, V.S., V.E. FORTOV, BONITZ, M. und LEVASHOV P.R. JETP Letters **74**, 384, (2001).
- [GA79] GRIMES, C.C. und ADAMS, G. Phys. Rev. Lett. **42**, 795, (1979).
- [HK90] HAUG, H. und KOCH, S.W.: *Quantum Theorie of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. World Scientific Publishing, Singapore, 1990.
- [Isi25] ISING, E. Zeitschrift f. Physik **31**, 253, 1925.
- [Kle95] KLEINERT, H.: *Pfadintegrale in Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik*. Wissenschaftsverlag, Mannheim, 1995.
- [Knu00] KNUTH, D.E.: *The art of computer programming, Vol.2 Semi-numerical algorithms*. Addison-Wesley, 2000.
- [LB97] LOZOVIK, YU.E. und BERMAN, O.L.: *Phase Transition in a system of spatially separated electrons and holes*. JETP Letters **84**, 1027, (1997).
- [LFBL03] LUDWIG, P., FILINOV, A.V., BONITZ, M. und LOZOVIK, YU.E.: *Equilibrium and dynamical properties of few particle systems in quantum dots and bilayers*. phys. stat. sol., 2003.
- [Lin10] LINDEMANN, F.A.: *The calculation of molecular vibration frequencies*. Physik Z., **11**, 609-612, (1910).
- [LJ97] LESTER JR., WILLIAM A.: *Recent advances in quantum Monte Carlo methods*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1997.
- [LKB05] LUDWIG, P., KOSSE, S. und BONITZ, M.: *Structure of mesoscopic Coulomb balls*. Phys. Rev. E **71**, 046403, (2005).
- [Loz87] LOZOVIK, YU.E. Sov. Phys. Usp. **30**, 912, (1987).
- [Lud03] LUDWIG, P.: *Mesoskopische Exzitoncluster in gekoppelten Quantenpunkten*. Diplomarbeit, Universität Rostock, Fachbereich Physik, 2003.
- [MCA⁺99] MARLOW, T.P., COOPER, L.J., ARNONE, D.D., PATEL, N.K., WHITTAKER, D.M., LINFIELD, E.H., RITCHIE, D.A. und PEPPER, M. Phys. Rev. Letter **82**, 2362, (1999).

- [Nol02] NOLTING, W.: *Statistische Physik, Grundkurs Theoretische Physik 6*, Springer Verlag, Berlin, 4. Auflage, 2002.
- [PTVF96] PRESS, W.H., TEUKOLSKY, S.A., VETTERLING, W.T. und FANNERY, B.R.: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 2. Auflage, 1996.
- [Ran02] RANDALL, E.: *Ising Model Results*. Acadia University, Canada, Thesis, 2002.
- [RCG04] RONTANI, MASSIMO, CAVAZZONI, CARLO und GOLDONI, GUIDO: *The Crossover between Liquid and Solid Electron Phases in Quantum Dots: A Large-Scale Configuration-Interaction Study*. Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia, Modena, Italy, 2004.
- [Reu03] REUSCH, BORIS: *Quantum Simulations for Semiconductor Quantum Dots: From Artificial, Atoms to Wigner Molecules*. Dissertation, Universität Düsseldorf, 2003.
- [Roe91] ROEPSTORFF, G.: *Path Integrals Approach to Quantum Physics - An Introduction*. Springer Verlag, Berlin, 1991.
- [RPV01] RIVA, C., PEETER, F.M. und VARGA, K. *Physical Rev. B* **63**, 115302, (2001).
- [SP95] SCHWEIGERT, V.A. und PEETERS, F.M. *Phys. Rev. B* **51**, 7700, (1995).
- [Stö99] STÖCKER, H.: *Taschenbuch der Physik*. Harri Deutsch, Frankfurt am Main, 1999.
- [WBM04] WACHTER, P., BUCHER, B. und MALAR, J. *Physical Rev. B* **69**, 094502, (2004).
- [Wig34] WIGNER, E. *Physical Review*, **46**, 1002, (1934).
- [YL99] YANNOULEAS, C. und LANDMAN, U. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5325, 1999.
- [ZKB02] ZHOU, Y., KARPLUI, M. und BALL, K.D.: *The distance fluctuation criterion for melting: Comparison of square-well and Morse potential models for clusters and homopolymers*. *Journal of Chemical Physics*, **116**, No. 5, (2002).

Erklärung

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Vorlage der angegebenen Literatur und Hilfsmittel angefertigt habe.

Hilko Cords
Rostock, 26.01.2006