

# Der Alte würfelt nicht - wir schon

## Fermionische Quanten-Monte-Carlo-Simulation entarteter Elektronen

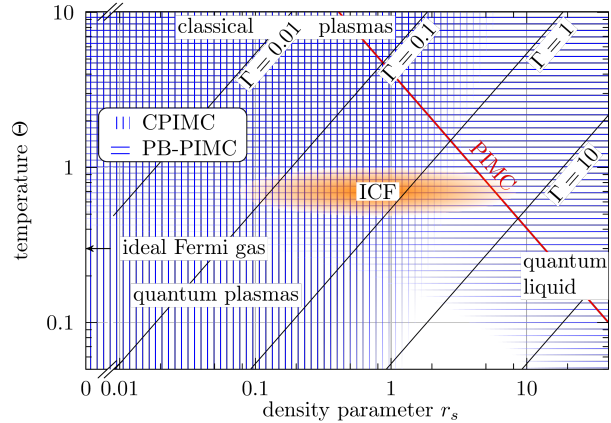
**T. Dornheim, S. Groth, T. Schoof und M. Bonitz,**  
*Institut für Theoretische Physik und Astrophysik,*  
*Christian-Albrechts-Universität zu Kiel*

### In Short

- Neuartige Experimente (z.B. NIF, Rochester, DE-SY) erfordern die theoretische Beschreibung entarteter Elektronen bei endlicher Temperatur
- Herkömmliche Quanten-Monte-Carlo-Verfahren wurden bisher durch das Fermionische Vorzeichenproblem stark eingeschränkt
- Unsere neu entwickelten Verfahren erlauben die Simulation von bisher unzugänglichen Bereichen

Seit einigen Jahren besteht ein gesteigertes Interesse an den thermodynamischen Eigenschaften entarteter Fermionen im quantenmechanischen Regime. Diese Ergebnisse sind von zentraler Bedeutung für die Beschreibung **warmer dichter Materie** ("warm dense matter"), beispielsweise Plasmen in Laserfusionsexperimenten und im Inneren von Sternen sowie Planetenkernen. Desweiteren sind exakte **Quanten-Monte-Carlo** (QMC) Ergebnisse für die Austauschkorrelationsenergie des homogenen Elektronengases unabdingbar für die Dichtefunktionaltheorie (DFT). Diese stellt eine weit verbreitete Methode zur Beschreibung von Molekülen und Festkörpern dar, wobei die Anwendung bisher weitestgehend auf den Grundzustand beschränkt geblieben ist. Da in den letzten Jahren physikalische Systeme mit stark angeregten Elektronen experimentell untersucht worden sind, ist eine erfolgreiche Erweiterung der DFT auf endliche Temperaturen wünschenswert, was wiederum eine exakte Berechnung der Austauschkorrelationsenergie erfordert, die über den Grundzustand hinausgeht.

Während die Pfad-Integral-Monte-Carlo-Methode (PIMC) ein mächtiges Werkzeug zur Simulation von bis zu  $N \sim 10^4$  Bosonen darstellt, wird die Anwendbarkeit auf Elektronen durch das **Fermionische Vorzeichenproblem** stark eingeschränkt. In der Tat wurde gezeigt, dass Quanten-Monte-Carlo Methoden mit wechselndem Vorzeichen ein NP-hartes Problem darstellen [1], sodass die Standardformulierung von PIMC ohne zusätzliche Verbesserungen nicht die gewünschten Ergebnisse liefern kann. Eine mögliche Erweiterung ist das *Restricted* PIMC (RPIMC) Verfahren. Um das fermionische Vorzeichenproblem zu vermeiden, werden die exakten Knotenflächen der Dichtematrix benötigt. Diese



**Abbildung 1:** Schematische Darstellung des Anwendungsbereiches verschiedener QMC-Methoden in der Temperatur-Dichteparameter-Ebene des spin-polarisierten homogenen Elektronengases. Der Anwendungsbereich von CPIMC (PB-PIMC) ist durch die vertikal (horizontal) schraffierte Fläche gekennzeichnet. Standard PIMC Simulationen sind lediglich oberhalb der roten Linie möglich, sodass der relevante Bereich für Laserfusionsexperimente (ICF [5], orange gefärbter Bereich) hiermit nicht erreicht werden kann.

sind a priori nicht bekannt, sodass in der Praxis Näherungen benutzt werden müssen, welche einen unkontrollierbaren systematischen Fehler einführen. Desweiteren ermöglicht RPIMC trotz der Umgehung des Vorzeichenproblems keinen Zugang zu beliebig stark entarteten Systemen [2]. Eine innovative neue Methode ist das von uns entwickelte Configuration PIMC (**CPIMC**) [3]. Diese erlaubt die Berechnung exakter Ergebnisse im stark entarteten Bereich, welcher bisher für kein anderes Verfahren zugänglich gewesen ist. Stattdessen manifestiert sich das Fermionische Vorzeichenproblem mit zunehmender Kopplungsstärke des Systems. Ein komplementäres Verhalten weist das ebenfalls von uns entwickelte *Permutation Blocking* PIMC (**PB-PIMC**) [4] auf. Dieses Verfahren ermöglicht Simulationen über den gesamten Kopplungsbereich, wobei deren relative Genauigkeit typischerweise auf  $\sim 10^{-3}$  beschränkt ist. Die einzigartige in Kiel vorhandene **Kombination zweier komplementärer state of the art Methoden** ermöglicht es uns insbesondere den physikalisch relevanten Bereich, in welchem Laser-Fusions-Experimente stattfinden, vollständig abzudecken. Dies ist schematisch in Abbildung 1 dargestellt.

Kürzlich konnten wir zeigen, dass die Kombination von CPIMC und PB-PIMC eine akkurate *ab initio* Beschreibung des Elektronengases ermöglicht [6], sodass wir ausführliche Untersuchungen für typische

Systemgrößen durchführen konnten [7,8]. Darüber hinaus ist es uns kürzlich gelungen eine hochakku- rate Extrapolation zum thermodynamischen Limes zu finden[9], sodass wir eine vollständige thermo- dynamische Beschreibung des homogenen Elek- tronengases mit einer zuvor unerreichten Genau- igkeit erzielen konnten [10]. Unter anderem konn- ten somit erstmals *ab initio* Ergebnisse für die Antwort-Funktion der Elektronendichte berechnet werden [11,12].

Nachdem wir die Untersuchung der statischen Eigenschaften des Elektronengases im Rahmen eines umfassenden Review Artikels abschließen konn- ten [13], liegt unser Fokus nun auf dynamischen Größen wie dem dynamischen Strukturfaktor.

## WWW

<http://www.theo-physik.uni-kiel.de/bonitz/>

## More Information

- [1] M. Troyer and U.J. Wiese, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 170201 (2005), doi:10.1103/PhysRevLett.94.170201
- [2] E.W. Brown, B.K. Clark, J.L. DuBois and D.M. Ceperley, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 146405 (2013), doi:10.1103/PhysRevLett.110.146405
- [3] T. Schoof, S. Groth, J. Vorberger and M. Bonitz, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 130402 (2015), doi: 10.1103/PhysRevLett.115.130402
- [4] T. Dornheim, S. Groth, A. Filinov and M. Bo- nitz *New J. Phys.* **17**, 073017 (2015), doi: 10.1088/1367-2630/17/7/073017
- [5] S.X. Hu, B. Militzer, V.N. Goncharov, and S. Skupsky, *Phys. Rev. B* **84**, 224109 (2011), doi:10.1103/PhysRevB.84.224109
- [6] T. Dornheim, T. Schoof, S. Groth, A. Filinov, and M. Bonitz, *J. Chem. Phys.* **143**, 204101 (2015), doi:10.1063/1.4936145
- [7] S. Groth, T. Schoof, T. Dornheim, and M. Bo- nitz, *Phys. Rev. B* **93**, 085102 (2016), doi: 10.1103/PhysRevB.93.085102
- [8] T. Dornheim, S. Groth, T. Schoof, C. Hann, and M. Bonitz, *Phys. Rev. B* **93**, 205134 (2016), doi:10.1103/PhysRevB.93.205134
- [9] T. Dornheim, S. Groth, T. Sjostrom, F. Malone, W. Foulkes, and M. Bonitz, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 156403 (2016), doi:10.1103/PhysRevLett.117.156403
- [10] S. Groth, T. Dornheim, T. Sjostrom, F. Malone, W. Foulkes, and M. Bonitz, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 135001 (2017),
- [11] T. Dornheim, S. Groth, J. Vorberger, and M. Bonitz, *Phys. Rev. E* **96**, 023203 (2017)
- [12] S. Groth, T. Dornheim, and M. Bonitz, *J. Chem. Phys.* **147**, 164108 (2017) doi: 10.1063/1.4999907
- [13] T. Dornheim, S. Groth, and M. Bo- nitz, *Phys. Rep.* **744**, 1-86 (2018) doi: 10.1016/j.physrep.2018.04.001

## Funding

DFG BO 1366/10-1.