

# Proseminar Computational Physics

SoSe 2022

## Ablauf

- Vorbesprechung: 5. April
- Einführungsvorlesung: 19. April (auch finale Vorlesung der Vortragsthemen)
- Fragestunden: 3. Mai, 17. Mai, 31. Mai
- Vorträge: ab 07. Juni
- Einreichung der Ausarbeitungen: 12. Juli

## Zu erbringende Leistungen:

Vorbereitung und Halten eines Vortrags, der sich aus 2-3 Einzelvorträgen zusammensetzt. Hierzu werden zu den u.g. Themen Zweier oder Dreiergruppen gebildet. Jede/r der Gruppe hält einen ca. 30-minütigen Einzelvortrag und reicht bis zum Semesterende (12.07.2022) eine 2-seitige Zusammenfassung über ihr/sein Vortragsthema in deutscher oder englischer Sprache ein.

## Genereller Ablauf:

An den Vortrag schließt sich eine ca. 15–30-minütige Diskussion an, in der Fragen zu den wissenschaftlichen Inhalten und konstruktive Kritik am Vortrag geübt werden sollen.

## Mögliche Vortragsthemen:

- Molekulardynamik (MD)
  - Integration klassischer Bewegungsgleichungen
  - MD in thermodynamischen Ensembles
  - Metadynamics / enhanced sampling MD/MC (Replica Exchange, Umbrella Sampling, Wang-Landau Sampling)
- Vielteilchenquantenmechanik
  - Exakte Diagonalisierung (Krylow-Unterraum-Verfahren inbes. Lanczos Methode, Davidson Algorithmus)
  - Hartree Fock Methode
  - Dichtefunktionaltheorie
- Monte Carlo (MC) Methoden
  - Importance Sampling & MC Integration
  - MC Methoden in der klassischen statistischen Physik: Ising Modell
  - MC Methoden in der Quantenmechanik: Pfadintegral QMC, Diffusion Monte Carlo

# Literatur

## Allgemein

Thijssen "Computational physics" (<https://kataloge.uni-hamburg.de/DB=1/XMLPRS=N/PPN?PPN=883414937>)

Izaac/Wang: „Computational quantum mechanics“ (<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-319-99930-2>)

E. Pavarini, E. Koch, and S. Zhang: "Lecture notes of the Autumn School on Correlated Electrons 2019: Many-Body Methods for Real Materials" (<https://www.cond-mat.de/events/correl19/manuscripts/correl19.pdf>)

## Speziell

K. Binder: "Applications of Monte Carlo methods to statistical physics", Rep. Prog. Phys. 60 (1997) 487–559, (<https://doi.org/10.1088/0034-4885/60/5/001>)

D. Landau & K. Binder: „A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics “ (Cambridge University Press)

R. Martin: "Electronic Structure; Basic Theory and Practical Methods" (<https://doi.org/10.1017/CBO9780511805769>)

Y. I. Yang, Q. Shao, J. Zhang, L. Yang, and Y. Q. Gao: "Enhanced Sampling in Molecular Dynamics", J. Chem. Phys. 151, 070902 (2019).

D. Frenkel, B. Smit: „Understanding molecular simulation : from algorithms to applications“ (<https://katalogplus.sub.uni-hamburg.de/vufind/Record/165846690X?rank=2>)