

# Mit dem Zufall rechnen – Atome zähmen leicht gemacht

**Mathias Gartner**

Institut für Theoretische Physik

Materialien in den drei Aggregatzuständen fest, flüssig und gasförmig dominieren unser tägliches Umfeld – wir atmen gasförmige Luft, trinken flüssiges Wasser und hantieren mit festen Objekten. Es gibt jedoch weitere, oft exotische Materiezustände. Aktuell besonders spannend ist die Forschung an Supraflüssigkeiten und „Bose-Einstein-Kondensaten“. Um diese erklären zu können, muss man sich jedoch in die Welt der Quantenphysik begeben. Das heißt, man betrachtet Atome, die sich nahe dem absoluten Nullpunkt von  $-273,15^\circ$  Celsius befinden.

Die reizvolle Herausforderung dabei ist, dass sich in diesen Systemen Zehntausende von Teilchen gegenseitig beeinflussen. *„Obwohl man die Eigenschaften einzelner Atome heute schon sehr genau kennt, verhindert ihre riesige Anzahl eine korrekte Vorhersage des komplexen Wechselspiels quantenmechanischer Teilchen“*, erläutert Mathias Gartner. *„Noch verwickelter und somit noch interessanter wird es, wenn sich die Kräfte zwischen den Teilchen laufend ändern, wodurch eine gewisse Unruhe unter ihnen herrscht.“*

In seiner Masterarbeit entwickelte Mathias einen „Monte-Carlo“ Computercode, mit dem man die Eigenschaften solcher Systeme vorher-sagen kann. Wie in den berühmten Spielhallen von Monte Carlo spielt auch in dieser Methode der Zufall eine entscheidende Rolle, denn die Anordnung der Atome wird sozusagen am Computer „erwürfelt“. *„Trotz der Verwendung zufälliger Konfigurationen sind die Resultate verblüffend genau“* freut sich Mathias. *„Würfelt man nämlich oft genug, kann man statistische Aussagen über das gemeinsame Verhalten aller Atome treffen.“*

Da die Monte-Carlo Rechnungen sehr zeit- und speicheraufwändig sind, hat Mathias sein Programm für die Supercomputer der JKU optimiert. Somit können hunderte Prozessoren gleichzeitig über Tage hinweg die Rechenaufgaben lösen. Langfristig unterstützt dies die Verwirklichung von Feynmans Traum eines Quantensimulators.