Übungen zur Vorlesung ,,Simulationsmethoden in der Physik 2”

PD Dr. Jörg Main **SS 2004**

Blatt 1

Variationelle Quanten-Monte-Carlo-Methode

Hinweise: Sie können Ihre Lösungen mit Kommentaren und/oder weiteren Fragen innerhalb von zwei Wochen nach Ausgabe der Aufgaben per Email an Ihren Übungsleiter schicken.

`Thomas Ihle: ihle@ica1.uni-stuttgart.de`

Aufgabe 1. *Lokale Energie*
Berechnen Sie (analytisch) die lokale Energie

$$E_L = \frac{\hat{H}|\Psi_T\rangle}{|\Psi_T\rangle}$$

für folgende Hamiltonoperatoren $\hat{H}$ und Testwellenfunktionen $|\Psi_T\rangle$ (mit $\hbar = m = 1$):

(a) Der harmonische Oszillator

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}x^2 \quad , \quad \Psi_T(x) = \mathrm{e}^{-\alpha x^2}$$

(b) Das Wasserstoffatom (mit $r = |\mathbf{r}|$)

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} \quad , \quad \Psi_T(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-\alpha r}$$

(c) Das Heliumatom (mit $r_1 = |\mathbf{r}_1|$, $r_2 = |\mathbf{r}_2|$, $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$)

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad , \quad \Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathrm{e}^{-\alpha(r_1+r_2)}$$

Eine um den Jastrow-Faktor erweiterte und verbesserte Testwellenfunktion für das Heliumatom lautet

$$\Psi_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathrm{e}^{-\alpha(r_1+r_2)}\, \mathrm{e}^{\frac{r_{12}}{2(1+\beta r_{12})}} \ .$$

Zeigen Sie *(freiwillig, für Wagemutige)*, dass dann für die lokale Energie gilt:

$$E_L = \frac{\alpha-2}{r_1} + \frac{\alpha-2}{r_2} - \alpha^2 + \frac{1}{r_{12}} - \frac{4 + r_{12} + 4\beta r_{12}}{4r_{12}(1+\beta r_{12})^4} + \frac{\alpha(r_1+r_2)[r_{12}^2 - (r_1-r_2)^2]}{4r_1 r_2 r_{12}(1+\beta r_{12})^2}$$

Aufgabe 2.
Implementieren Sie den variationellen Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus und bestimmen Sie für die Systeme aus Aufgabe 1 die variationelle Energie E_{VMC} als Minima bei Variation der Testwellenfunktionen. Zum Vergleich: Die Grundzustandsenergie des Heliumatoms beträgt $E_0 = -79.0$ eV $= -2.90$ atomic units.