Übungen zur Vorlesung „Simulationsmethoden in der Physik 2"

PD Dr. Jörg Main **SS 2004**

Blatt 2

Diffusions-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 3.
Der Zeitentwicklungsoperator der Schrödinger-Gleichung in imaginärer Zeit

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\Psi(\mathbf{x},\tau) = \left[\frac{1}{2}\Delta + E_T - V(\mathbf{x})\right]\Psi(\mathbf{x},\tau)$$

lautet

$$\hat{G} = \mathrm{e}^{\frac{\tau}{2}\Delta + [E_T - V(\mathbf{x})]\tau} = \mathrm{e}^{(\hat{A}+\hat{B})\tau}$$

mit den nicht kommutierenden Operatoren $\hat{A} = \frac{1}{2}\Delta$ und $\hat{B} = E_T - V(\mathbf{x})$. Zeigen Sie:
(a) Für kleine τ lässt sich $\hat{G}$ näherungsweise faktorisieren als

$$\hat{G} = \mathrm{e}^{(\hat{A}+\hat{B})\tau} \approx \mathrm{e}^{\hat{A}\tau}\,\mathrm{e}^{\hat{B}\tau} = \hat{G}_A\,\hat{G}_B$$

und es gilt

$$\hat{G} - \hat{G}_A\,\hat{G}_B = \frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]\tau^2 + \mathcal{O}(\tau^3)\ .$$

(b) $\hat{G}$ läßt sich darstellen als (Theorem von Trotter, 1959)

$$\hat{G} = \lim_{n\to\infty}\left[\mathrm{e}^{\hat{A}\frac{\tau}{n}}\,\mathrm{e}^{\hat{B}\frac{\tau}{n}}\right]^n\ .$$

Rechtfertigen Sie hiermit die Abfolge von Diffusions- und Verzweigungsschritten beim Diffusions-Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus.

Aufgabe 4.
Erweitern Sie Ihr Programm aus Aufgabe 2 und implementieren Sie den Diffusions-Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus wie in der Vorlesung besprochen. Zeigen Sie:
Für das Heliumatom (siehe Aufgabe 1) mit

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$$

und der Testwellenfunktion

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

lautet die Quantenkraft

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = \frac{\nabla\Psi_T}{\Psi_T} = \begin{pmatrix} -\alpha\frac{\mathbf{r}_1}{r_1} + \frac{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2}{2r_{12}(1+\beta r_{12})^2} \\ -\alpha\frac{\mathbf{r}_2}{r_2} - \frac{\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2}{2r_{12}(1+\beta r_{12})^2} \end{pmatrix}\ .$$

Bestimmen Sie den Grundzustand des Heliumatoms und vergleichen Sie mit dem exakten Wert $E_0 = -2.903724$ atomic units.