



Ein kleines Projekt

Sie sollen den Diffusions-Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus implementieren und anwenden.

- a. Implementieren Sie den *Diffusions-Quanten-Monte-Carlo-Algorithmus* und testen Sie ihn für den ein- und dreidimensionalen harmonischen Oszillator

$$V(\vec{x}) = \frac{\vec{x}^2}{2}$$

in „natürlichen Einheiten“ $\hbar = 1$, $m = 1$ (d.h. $D = 1/2$) und $\omega = 1$! Wählen Sie $N_0 = 1000$, als Zahl der Durchläufe 2000 und $\Delta\tau = 0.05$. Vergleichen Sie die Ergebnisse für $\Psi(\vec{x})$ mit der exakten Wellenfunktion

$$\Psi_0(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{-\vec{x}^2/2} \quad !$$

Hinweis: Für $d = 3$ erzeugen Sie sinnvollerweise ein Histogramm bezüglich des Abstandes $r = |\vec{x}|$ zum Ursprung für $0 \leq r \leq 5$ und vergleichen es dann mit $4\pi r^2 e^{-r^2/2} / (2\pi)^{3/2}$.

- b. Untersuchen Sie Grundzustandsenergie und -wellenfunktion für das dreidimensionale „Yukawa-Potential“ (effektives Potential zwischen Nukleonen im Kern)

$$V(\vec{x}) = -\frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (1)$$

mit $\alpha \geq 0$ (in „natürlichen Einheiten“ $\hbar = 1$, $m = 1$ und Elementarladung = 1) ! Vergleichen Sie insbesondere für $\alpha = 0$ mit den exakten Ergebnissen für das Wasserstoffatom und für $\alpha \leq 1$ mit den Ergebnissen eines Variationsansatzes

$$\Psi_{\text{Var.}}(\vec{x}) = e^{-\beta r} \quad ! \quad (2)$$

Bestimmen Sie für mehrere Durchläufe des Algorithmus (z.B. $n = 100$) jeweils den Wert der Grundzustandsenergie und anschließend den Mittelwert und statistischen Fehler ! Erzeugen Sie so ein Bild $E_0(\alpha)$ für $\alpha \in [0, 1]$ mit Fehlerbalken und den Ergebnissen der Variationsrechnung als Vergleich !

Hinweis: Die Variationsrechnung müssen Sie nicht selbst durchführen, sondern sie wird in Anhang A vorgerechnet.

- c. Implementieren Sie in dem Algorithmus aus Aufgabenteil a eine *Testwellenfunktion* $\Psi_T(\vec{x})$ und *Importance-Sampling* ! Testen Sie Ihr Programm für den eindimensionalen harmonischen Oszillator, wobei Sie als Testwellenfunktion

$$\Psi_T(x) = e^{-\lambda x^2}$$

verwenden ! Bestimmen Sie E_0 samt zugehörigem Fehler als Funktion von $\lambda \in [0, 1]$! Was fällt auf ?

- d. Untersuchen Sie das Yukawa-Potential aus Aufgabenteil b mit dem neuen Verfahren aus Aufgabenteil c ! Nehmen Sie als Testwellenfunktion

$$\Psi_T(\vec{x}) = e^{-\lambda r} \quad (3)$$

und wählen Sie λ so, das $E_L(\vec{x})$ möglichst „flach“ ist ! Fügen Sie die Ergebnisse für $E_0(\alpha)$ inklusive Fehlerbalken in das Bild aus Aufgabenteil b ein !

Hinweis: Auch hier wird Ihnen die analytische Rechnung in Anhang B abgenommen.

Anforderungen für einen Übungsschein

1. Vorlage des Quelltexts Ihrer Programme, wobei gilt:
 - (a) Eigenständige Programmierarbeit muß erkennbar sein.
 - (b) Die Programme sollen kommentiert sein und Sie müssen in der Lage sein, diese zu erläutern.
2. Ein Protokoll der durchgeführten Rechnungen mit Diskussion der Ergebnisse. Dazu gehören insbesondere
 - (a) jeweils ein Bild mit $\Psi_0(x)$ bzw. $\Psi_0(r)$ für den ein- bzw. dreidimensionalen harmonischen Oszillator mit der exakten Wellenfunktion zum Vergleich (Aufgabenteil a),
 - (b) ein Bild für die Rechnungen aus Aufgabenteil c (mit Fehlerbalken !), sowie
 - (c) mindestens ein Bild mit den Ergebnissen der Rechnungen aus Aufgabenteilen b und d.
3. Abgabetermin: 28. September 2007.

Anmerkungen:

1. Die Abgabe kann sowohl in elektronischer als auch Papier-Form erfolgen.
2. Rückfragen sind erlaubt, solange Anforderung 1(a) beachtet wird.

Anhang A: Variationsrechnung für das Yukawa-Potential

Zunächst müssen wir die Normierung der Variationswellenfunktion (2) bestimmen. In Kugelkoordinaten finden wir

$$C = \int_0^{\infty} dr 4\pi r^2 \Psi_{\text{Var.}}^2(r) = \frac{\pi}{\beta^3}.$$

Nun berechnen wir zunächst die kinetische Energie, wobei wir den Radial-Anteil des Laplace-Operators in Kugelkoordinaten verwenden

$$E_{\text{kin.}} = -\frac{1}{2C} \int_0^{\infty} dr 4\pi r^2 \Psi_{\text{Var.}}(r) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{\text{Var.}}(r) = \frac{\beta^2}{2}.$$

Der Erwartungswert des Yukawa-Potentials (1) ergibt schließlich die potentielle Energie (wieder in Kugelkoordinaten)

$$E_{\text{pot.}} = \frac{1}{C} \int_0^{\infty} dr 4\pi r^2 \Psi_{\text{Var.}}^2(r) V(r) = -\frac{4\beta^3}{(2\beta + \alpha)^2}.$$

Insgesamt haben wir

$$E_{\text{Var.}}(\alpha) = \frac{\beta^2}{2} - \frac{4\beta^3}{(2\beta + \alpha)^2}.$$

Minimierung führt nun auf die Bedingung $\frac{\partial}{\partial \beta} E_{\text{Var.}}(\alpha) = 0$. Die Lösungen dieser Gleichung kann man z.B. leicht mit einem Computeralgebra-System bestimmen und ferner prüfen, welche Lösung global die niedrigste Energie ergibt. Werte für das optimale $\beta_{\text{opt.}}$ und die zugehörige Schätzung der Grundzustandsenergie $E_{\text{opt.}}$ finden Sie für einige α in der Tabelle unten.

Man beachte, dass man für den Spezialfall des Coulomb-Potentials ($\alpha = 0$) die Lösung $\beta = 1$ hat und somit für diesen Fall sowohl die exakte Grundzustandswellenfunktion als auch -energie $E_0 = -1/2$ (in unseren Einheiten) reproduziert.

α	$\beta_{\text{opt.}}$	$E_{\text{opt.}}$	α	$\beta_{\text{opt.}}$	$E_{\text{opt.}}$
0	1	-0.5	0.55	0.8499385679	-0.1239845691
0.05	0.9982383666	-0.4518159416	0.6	0.8244354834	-0.1033542820
0.1	0.9933301502	-0.4070514438	0.65	0.7968477187	-0.0845465977
0.15	0.9857083736	-0.3654320875	0.7	0.7669744485	-0.0674982359
0.2	0.9756796892	-0.3267293654	0.75	0.7345173486	-0.0521547342
0.25	0.9634639455	-0.2907492835	0.8	0.6990270131	-0.0384713302
0.3	0.9492176496	-0.2573246584	0.85	0.6597979908	-0.0264150069
0.35	0.9330482066	-0.2263096693	0.9	0.6156375319	-0.0159689181
0.4	0.9150224084	-0.1975759419	0.95	0.5642531428	-0.0071425196
0.45	0.8951709529	-0.1710096541	1	0.5	0
0.5	0.8734898019	-0.1465093938			

Anhang B: Testwellenfunktion für das Yukawa-Potential

Wir setzen zunächst Kugelkoordinaten und anschließend die Testwellenfunktion (3) in die Definition der rücktreibenden Kraft ein. Damit finden wir

$$\vec{F}(\vec{x}) = \frac{2}{\Psi_T(r)} \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} \Psi_T(r) = -2\lambda \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|}.$$

Für die Bestimmung der lokalen Energie gehen wir analog vor. Wir finden damit

$$E_L(r) = V(r) - \frac{D}{\Psi_T(r)} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \Psi_T(r) = V(r) - D\lambda \left(-\frac{2}{r} + \lambda \right).$$