

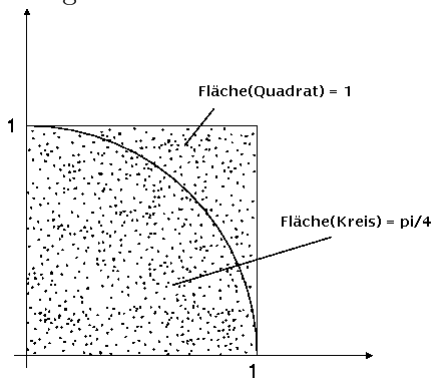
Guided Quantum Diffusion Monte Carlo for Calculating Zero Point Energies

Simon Neidhart

29. September 2021

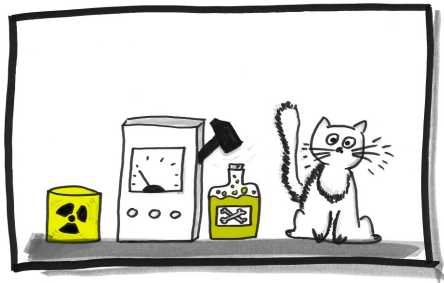
Was ist Monte Carlo?

Berechnung der Kreiszahl π mit Zufallszahlen.



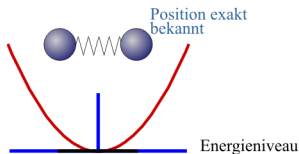
$$\frac{\pi}{4} = \frac{N_{\text{Kreis}}}{N_{\text{Quadrat}}}$$

Schrödingers Katze

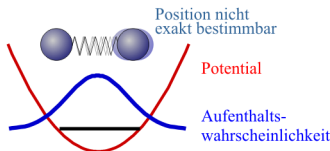


Heisenbergsche Unschärferelation

**klassischer
Oszillator:**



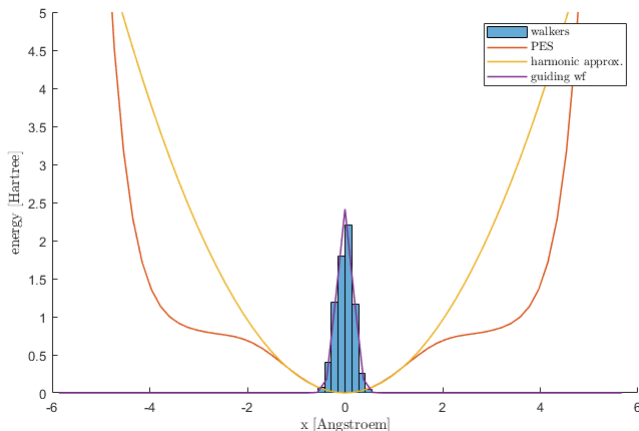
**quantenmechanischer
Oszillator:**



- ▶ Position und Impuls eines Teilchens können nicht gleichzeitig beliebig genau bestimmt sein.
- ▶ Ziel: Berechnen des Energieunterschiedes klassischer/quantenmechanischer Oszillator (zero point energy).

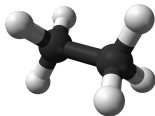
Der DQMC Algorithmus

- ▶ Lösen der Schrödinger Gleichung (hochdimensionale Differentialgleichung) mit Monte Carlo.
- ▶ Benutzen des harmonischen Oszillators zum berechnen einer "guiding" Wellenfunktion.

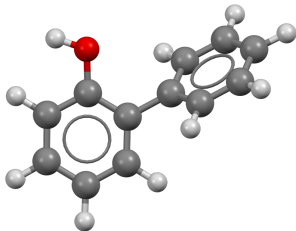


Untersuchte Systeme

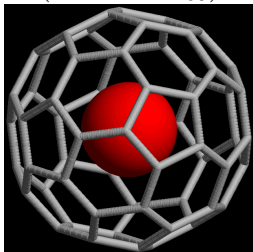
Ethan (C_2H_6)



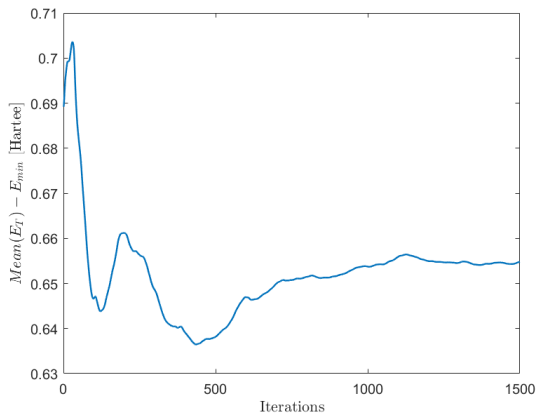
2-Phenylphenol ($\text{C}_{12}\text{H}_{10}\text{O}$)



Endohedrale Komplexe
(z.B. $\text{H}_2@\text{C}_{60}$)



Resultate



Konvergenz der zero point Energie von $H_2@C_{60}$.

Weitere Anwendungen von Monte Carlo

- ▶ Allgemein: Berechnung von hochdimensionalen Integralen
- ▶ Wettervorhersage/Klimasimulationen
- ▶ Vorhersagen bei der Produktion von Windenergie
- ▶ Umgebungserkennung von Robotern mit Kamera
- ▶ Bewertung von Investment-Projekten
- ▶ Vermutlich auch Stabilitätsanalysen von Stromnetzen.