

AGH UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

WYDZIAŁ FIZYKI I INFORMATYKI STOSOWANEJ
KIERUNEK STUDIÓW: FIZYKA TECHNICZNA



METODY MONTE CARLO

Laboratorium 14

kwantowa metoda wariacyjna (VQMC)

zrealizował
Przemysław Ryś

Kraków, 10 Czerwiec 2024

1 Opis zagadnienia

Na zajęciach rozwiążemy problem kwantowy polegający na poszukiwaniu stanu podstawowego i stanu wzbudzonego atomu wodoru. Rozważanie prowadzimy we współrzędnych sferycznych, w których hamiltonian jednoelektronowy po odseparowaniu zależności kątowej rozwiązania (harmoniki sferyczne) ma postać:

$$H = -\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{2}{r}$$

W wariacyjnej metodzie MC (QVMC) wykorzystujemy zależność na wartość oczekiwaną energii:

$$\langle \epsilon \rangle = \int_0^\infty p(r) \epsilon_{\text{loc}}(r) dr$$

gdzie $\Psi_T(r)$ to funkcja próbna, $p(r)$ jest funkcją gęstości prawdopodobieństwa, a $\epsilon_{\text{loc}}(r)$ jest energią lokalną.

1.1 Funkcja próbna

Funkcja próbna jest zdefiniowana jako:

$$\Psi_T(r) = (1 + cr)e^{-ar}$$

gdzie a i c są parametrami funkcji próbnej.

1.2 Energia lokalna

Energia lokalna jest dana wzorem:

$$\epsilon_{\text{loc}}(r) = \frac{H\Psi_T(r)}{\Psi_T(r)}$$

1.3 Całkowanie + algorytm Metropolis

W metodzie Monte Carlo, wartość całki dla ustalonych wartości a i c szacujemy za pomocą:

$$\langle \epsilon_m(a, c) \rangle \approx \epsilon_m(a, c) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon_{\text{loc}}(r_i; a, c)$$

gdzie położenie punktów r_i generujemy algorytmem Metropolis.

1.4 Wariancja jako miara dopasowania

Z mechaniki kwantowej wiemy, że energia lokalna jest równa energii własnej:

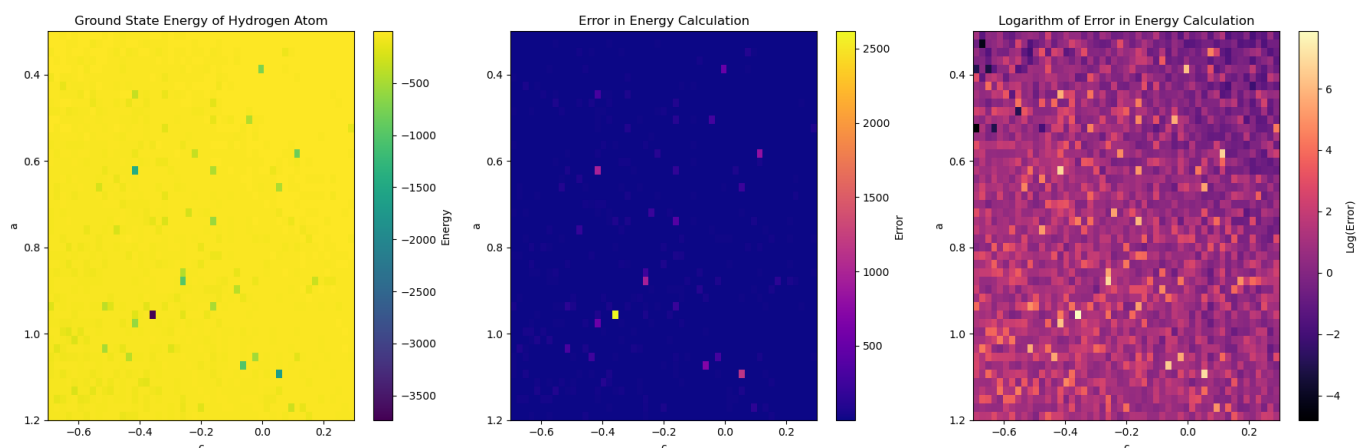
$$\epsilon_{\text{loc}} = \epsilon_n$$

Co oznacza, że w stanie własnym wariancja znika:

$$\text{var}(\epsilon) = \int_0^\infty p(r) [\epsilon(r) - \epsilon_n]^2 dr = \langle \epsilon^2 \rangle - \langle \epsilon \rangle^2 = 0$$

2 Wyniki

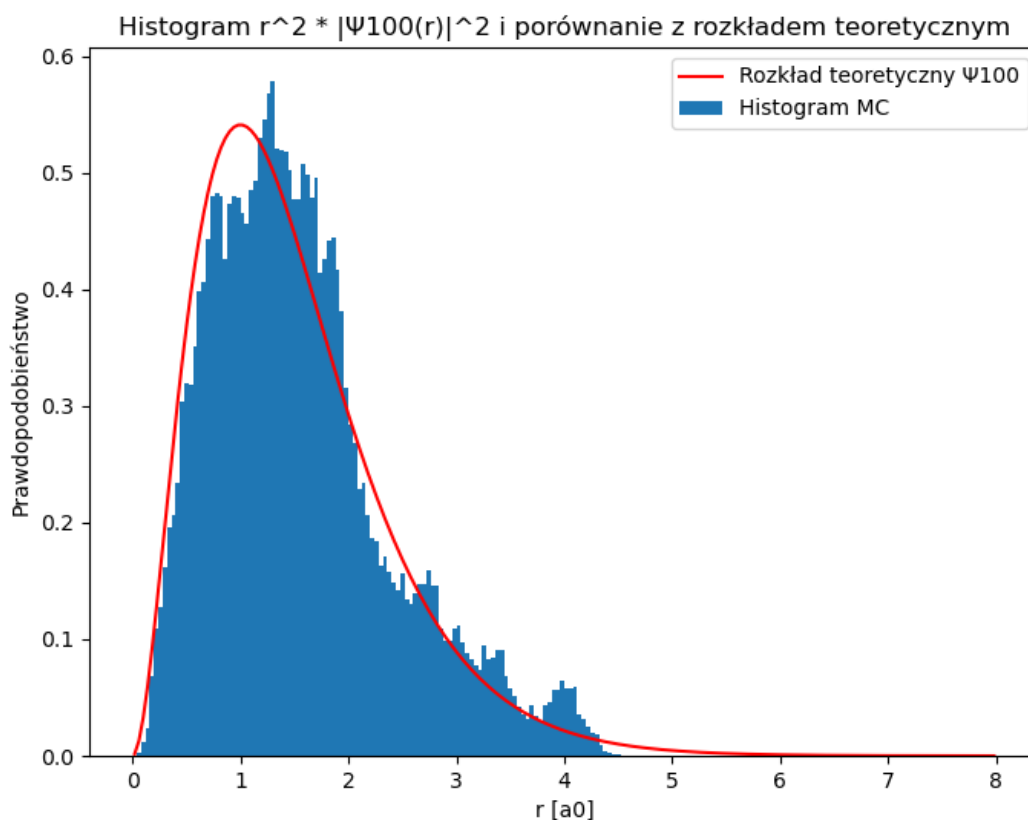
Energia



Rys. 1: Energia stanu podstawowego atomu wodoru (1), odchylenie standardowe energii (2) oraz jego logarytm (3).

Wykres 1 trzy obrazy. Pierwszy przedstawia energię stanu podstawowego atomu wodoru, drugi przedstawia odchylenie standardowe energii, trzeci natomiast przedstawia logarytm odchylenia standardowego energii. Wszystkie są w zależności od parametrów a i c .

Histogram Rozkładu Prawdopodobieństwa



Rys. 2: Histogram $r^2|\Psi_{100}(r)|^2$ i porównanie z rozkładem teoretycznym.

Wykres 2 przedstawia histogram rozkładu prawdopodobieństwa dla funkcji falowej $\psi_{100}(r)$ w porównaniu z teoretycznym rozkładem $r^2|\Psi_{100}(r)|^2$.

3 Podsumowanie

Wyniki symulacji potwierdzają zgodność z teoretycznym modelem atomu wodoru. Najmniejsze wartości odchylenia standardowego uzyskano dla specyficznych wartości parametrów a i c , co wskazuje na poprawność wybranej funkcji próbnej. Histogram rozkładu prawdopodobieństwa również dobrze zgadza się z teoretycznym rozkładem $r^2|\Psi_{100}(r)|^2$.