



Università degli Studi di Trento  
Fisica Computazionale

---

Corso di Laurea Triennale in Fisica

Relazione di laboratorio

## Progetto finale: Monte Carlo Variazionale per gocce di elio

July 23, 2024

Candidato:

Giorgio Micaglio, [giorgio.micaglio@studenti.unitn.it](mailto:giorgio.micaglio@studenti.unitn.it)

Matricola 227051

Docente:

Prof. Alessandro Roggero

Anno Accademico 2023-2024

# 1 Introduzione

L'obiettivo di questo progetto è calcolare l'energia dello stato fondamentale di un sistema di  $^4\text{He}$  in un potenziale esterno armonico con il metodo di Monte Carlo Variazionale. L'operatore hamiltoniano che descrive il sistema è dunque

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{i=1}^N r_i^2 + \sum_{i < j} V(r_{ij}) \quad \text{con} \quad V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

che è il potenziale di Lennard-Jones classico. Si studiano 4 sistemi, composti da  $N = 2, 4, 6, 8$  particelle. Per usare unità di Å per le lunghezze e K per le energie, nel caso dell'elio si hanno

$$\varepsilon = 10.22 \text{ K}, \quad \sigma = 2.556 \text{ Å}, \quad \frac{\hbar^2}{2m} = 6.0596 \text{ Å}^2 \text{ K}, \quad a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 5 \text{ Å},$$

dove  $a_0$  è la lunghezza caratteristica che definisce la trappola armonica. Sia  $\Psi_\alpha(\mathbf{R}) = \langle \mathbf{R} | \Psi_\alpha \rangle$  una funzione d'onda parametrica per il sistema, in cui  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  e  $\alpha$  è il set di parametri liberi. Il metodo variazionale permette di affermare che

$$\min_{\alpha} E_{\alpha} = \min_{\alpha} \frac{\langle \Psi_{\alpha} | H | \Psi_{\alpha} \rangle}{\langle \Psi_{\alpha} | \Psi_{\alpha} \rangle} \geq E_0$$

ed  $E_{\alpha}$  si può valutare con una simulazione Monte Carlo usando  $P(\mathbf{R}) = |\Psi_{\alpha}(\mathbf{R})|^2$ , mentre gli osservabili si calcoleranno con

$$O_{\alpha} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \frac{O \Psi_{\alpha}(\mathbf{R}_k)}{\Psi_{\alpha}(\mathbf{R}_k)}.$$

La scelta intrapresa per la funzione d'onda, con  $\alpha = (\alpha, \beta_1, \beta_2)$ , è

$$\Psi_{\alpha}(\mathbf{R}) = \exp \left( -\frac{1}{2\alpha} \sum_{i=1}^N r_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i < j} u_{\beta}(r_{ij}) \right) \quad \text{con} \quad u_{\beta}(r) = \left( \frac{\beta_1}{r} \right)^{\beta_2}.$$

## 1.1 Energia cinetica

Per la forma della funzione d'onda usata, conviene calcolare il contributo della particella  $i$ -esima all'energia cinetica nel seguente modo:

$$T_i = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_i^2 \log \Psi + (\nabla_i \log \Psi)^2),$$

che in funzione di  $u_{\beta}(r_{ij})$ , dove  $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ , e delle sue derivate prima e seconda diventa

$$T_i = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{3}{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} u''_{\beta}(r_{ij}) + \sum_{j \neq i} \frac{u'_{\beta}(r_{ij})}{r_{ij}} - \frac{1}{\alpha^2} r_i^2 - \frac{1}{\alpha} \sum_{j \neq i} u'_{\beta}(r_{ij}) \mathbf{r}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_{ij} - \frac{1}{4} \left( \sum_{j \neq i} u'_{\beta}(r_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij} \right)^2 \right].$$

## 1.2 Energia totale per 2 particelle

Nel caso in cui  $N = 2$ , i contributi all'energia cinetica sono esprimibili in modo semplice, e l'energia totale risulta

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{6}{\alpha} + u''_{\beta}(r_{12}) + 2 \frac{u'_{\beta}(r_{12})}{r_{12}} - \frac{1}{\alpha^2} (r_1^2 + r_2^2) - \frac{1}{\alpha} r_{12} u'_{\beta}(r_{12}) - \frac{1}{2} (u'_{\beta}(r_{12}))^2 \right] + \frac{1}{2} m \omega^2 (r_1^2 + r_2^2) + 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{12}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{12}} \right)^6 \right]. \quad (1)$$

Inoltre, si vuole che l'energia sia finita per  $r_{12} \rightarrow 0$ , e da questo si può fissare il parametro  $\beta_2$ . Ciò è dovuto dal fatto che le derivate di  $u_\beta(r)$  si comportano nel seguente modo:

$$u'_\beta(r) \propto \frac{1}{r^{1+\beta_2}}, \quad u''_\beta(r) \propto \frac{1}{r^{2+\beta_2}},$$

e quindi il termine dominante nell'hamiltoniano è quello che contiene  $(u'_\beta(r))^2 \propto 1/r^{2+2\beta_2}$ , che deve cancellare il termine dominante  $1/r^{12}$  nel potenziale di Lennard-Jones. Si ha quindi che  $\beta_2 = 5$ .

## 2 Simulazione senza interazione e correlazione a due corpi

Per prima cosa, si considerano i 4 sistemi senza interazione ( $V_{\text{LJ}} = 0$ ) e senza correlazione a due corpi ( $\beta_1 = 0$ ). In questo caso, la funzione d'onda si riduce a  $\Psi_\alpha(\mathbf{R}) = \exp\left(-\frac{1}{2\alpha} \sum_{i=1}^N r_i^2\right)$  e gli stimatori dell'energia cinetica media sono

$$\begin{aligned} \langle T \rangle_{\text{lap}} &= -\frac{\hbar^2}{4m} \sum_{i=1}^N \langle \nabla_i^2 \log \Psi \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{3N}{\alpha}, \\ \langle T \rangle_{\text{grad}} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \langle (\nabla_i \log \Psi)^2 \rangle = \left( \frac{1}{2} m \omega^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\alpha^2} \right) \sum_{i=1}^N r_i^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{a_0^2} - \frac{1}{\alpha^2} \right) \sum_{i=1}^N r_i^2. \end{aligned}$$