

Progetto Finale per Fisica Computazionale 1: Monte Carlo Variazionale per gocce di elio

In questo progetto proveremo a calcolare l'energia dello stato fondamentale per un sistema di ^4He a temperatura 0 intrappolato in un potenziale esterno armonico. Lo stato fondamentale é ottenuto trovando l'autostato con autovalore minore dell'hamiltoniana

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \omega^2 \sum_{i=1}^N r_i^2 + \sum_{i<j} V(r_{ij}) . \quad (1)$$

Per il potenziale a coppia $V(r)$ useremo il Lennard-Jones usato già per sistemi classici. Se usiamo unita di \AA per le distanze e K per le energie, per l'elio abbiamo $\epsilon = 10.22 K$, $\sigma = 2.556 \text{\AA}$ e $\hbar^2/2m = 6.0596 \text{\AA}^2 K$. Per la trappola armonica puoi usare la lunghezza di oscillazione $a_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 5 \text{\AA}$.

Un'approssimazione dello stato fondamentale può essere ottenuta ottimizzando una funzione d'onda parametrica $|\Psi(\vec{\alpha})\rangle$, dipendente da un set di parametri liberi $\vec{\alpha}$, e ottimizzando i parametri

$$\min_{\vec{\alpha}} \frac{\langle \Psi(\vec{\alpha}) | H | \Psi(\vec{\alpha}) \rangle}{\langle \Psi(\vec{\alpha}) | \Psi(\vec{\alpha}) \rangle} \geq E_0 . \quad (2)$$

L'uguaglianza c'è solo se esiste un set di parametri per cui $|\Psi(\vec{\alpha})\rangle = |\Psi_0\rangle$, la funzione d'onda dello stato fondamentale. Il Monte Carlo Variazionale permette di stimare l'energia per un dato valore dei parametri $\vec{\alpha}$. Se indichiamo il valore della funzione d'onda in un punto $R = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ come $\Psi_{\alpha}(R) = \langle R | \Psi(\vec{\alpha}) \rangle$ avremo

$$\begin{aligned} E_{\alpha} &= \frac{\langle \Psi(\vec{\alpha}) | H | \Psi(\vec{\alpha}) \rangle}{\langle \Psi(\vec{\alpha}) | \Psi(\vec{\alpha}) \rangle} = \frac{\int dR \Psi_{\alpha}^*(R) H \Psi_{\alpha}(R)}{\int dR |\Psi_{\alpha}(R)|^2} \\ &= \frac{\int dR |\Psi_{\alpha}(R)|^2 \frac{H \Psi_{\alpha}(R)}{\Psi_{\alpha}(R)}}{\int dR |\Psi_{\alpha}(R)|^2} . \end{aligned} \quad (3)$$

Possiamo quindi valutare E_{α} con una simulazione Monte Carlo usando $P(R) = |\Psi_{\alpha}(R)|^2$ come densità di probabilità. Con questa scelta, gli osservabili (non solo l'energia) vengono calcolati facendo la media su M campionamenti

$$O_{\alpha} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \frac{O \Psi_{\alpha}(R_k)}{\Psi_{\alpha}(R_k)} . \quad (4)$$

Ad esempio il valore di aspettazione del potenziale a due corpi sarà

$$V = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \frac{V(R_k) \Psi_\alpha(R_k)}{\Psi_\alpha(R_k)} = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M V(R_k) = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \sum_{i < j} V(r_{ij}^{(k)}) , \quad (5)$$

dove $r_{ij}^{(k)}$ é la distanza relative delle particelle i e j sulla configurazione R_k . Similmente l'energia cinetica sarà

$$K = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{M} \sum_{k=1}^N \sum_i \frac{\nabla_i^2 \Psi_\alpha(R_k)}{\Psi_\alpha(R_k)} . \quad (6)$$

Per un sistema di bosoni a temperatura zero in una trappola armonica una scelta ragionevole per la funzione d'onda é data da

$$\Psi_\alpha(R) = \prod_i e^{-\frac{r_i^2}{2\alpha}} \prod_{i < j} e^{-\frac{1}{2} u_\beta(r_{ij})} = \exp \left(-\frac{1}{2\alpha} \sum_i r_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i < j} u_\beta(r_{ij}) \right) , \quad (7)$$

mentre per le funzioni $u_\beta(r)$ useremo una forma con due parametri

$$u_\beta(r) = \left(\frac{\beta_1}{r} \right)^{\beta_2} . \quad (8)$$

Per questo tipo di funzioni conviene esprimere l'energia cinetica usando

$$\nabla_i^2 \log(\Psi) = \frac{\nabla_i^2 \Psi}{\Psi} - \left(\frac{\vec{\nabla}_i \Psi}{\Psi} \right)^2 = \frac{\nabla_i^2 \Psi}{\Psi} - \left(\vec{\nabla}_i \log(\Psi) \right)^2 , \quad (9)$$

per cui il contributo all'energia cinetica della particella i e' dato dalla differenza

$$K_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla_i^2 \log(\Psi) + \left(\vec{\nabla}_i \log(\Psi) \right)^2 \right) . \quad (10)$$

Usando il teorema di Green si può far vedere che le seguenti medie sono uguali

$$\langle K_i \rangle = -\frac{\hbar^2}{4m} \langle \nabla_i^2 \log(\Psi) \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \left(\vec{\nabla}_i \log(\Psi) \right)^2 \right\rangle , \quad (11)$$

anche se il valore sarà diverso per un campione unico.

1. ricava l'espressione esplicita per l'energia cinetica in termini della funzione $u_\beta(r)$ e le sue derivate (prima e seconda).
2. scrivi in modo esplicito l'espressione per l'energia totale in un sistema composto da solo due particelle. Usa il fatto che l'energia deve essere finita per $r_{12} \rightarrow 0$ per fissare il valore di β_2 .

3. considera un numero di particelle $N = 2, 4, 6, 8$ e per ora rimuovi il potenziale d'interazione e le correlazioni a due corpi (l'ultima é equivale a prendere $\beta_1 = 0$). Calcola l'energia, e la sua varianza, per i quattro sistemi in funzione del parametro α usando l'algoritmo di $M(RT)^2$ visto a lezione. Ottieni il risultato che ti saresti aspettato?
4. considera quindi l'Hamiltoniana intera, prova ad usare $\alpha = a_0$, $\beta_1 = 2.5$ e ottieni l'energia media per i quattro sistemi. Stai attento ad escludere i passi iniziali fino a quando il sistema raggiunge l'equilibrio. Per verificare la correttezza della simulazione puoi controllare che i vari stimatori dell'energia cinetica diano gli stessi valori medi (vedi Eq. (11)). Nota che le varianze potrebbero essere molto diverse, quale stimatore ha la varianza minore?
5. prova quindi a variare β_1 intorno al valore usato al punto precedente cercando di trovare il valore che minimizza l'energia. Puoi fare un grafico dell'energia in funzione del valore di α_1 e prendere il valore con l'energia minore. Fai anche un grafico con la varianza dell'energia in funzione di β_1 e cercane il minimo. Se la funzione d'onda fosse stata scelta per essere in grado di trovare esattamente lo stato fondamentale, come ti aspetti sarebbe stata la relazione fra questi due minimi?
6. [BONUS] calcola la densità a un corpo per i quattro sistemi usando la funzione d'onda migliore che hai trovato e confronta il risultato con quello che ottieni senza il potenziale di interazione. VariazionaleVariazionaleVariazionale