1 Introduzione

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

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

che è il potenziale di Lennard-Jones classico. Per usare unità di Å per le lunghezze e K per le energie, nel caso dell'elio si hanno

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

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

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

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

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

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

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

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:

$$T_i = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_i^2 \log\Psi + (\boldsymbol{\nabla}_i \log\Psi)^2\right),$$

che in funzione di $u_\beta(r)$ e delle sue derivate prima e seconda diventa

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