Vi skal i dette prosjektet sjå på kvantesystemer der vi brukar variational monte carlo metoder for å sleppe tunge og stygge integraler.
Metoda er brukbar til atomisk, molekyler, solid state, nano teknologisk, kvantekjemi og nukeler fysikk.

Vi har her Hamiltonianen:

$$\hat{H}(r_1, r_2) = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \tag{1}$$

Vi brukar her ein "trial wavefunction" som er gitt ved:

$$\psi_T(r_1, r_2) = exp(-\alpha(r_1 + r_2)exp\Big(\frac{r_{12}}{2(1+\beta r_{12})}\Big) \tag{2}$$

Vi såg først på "brute force" metoda for monte carlo. Vi må finne ein sannsyns funksjon:

$$P(R) = \frac{|\psi_T(R)|^2}{\int |\psi_T(R)|^2 dR} \tag{3}$$

I brute force metropolis begynder vi med en start posisjon, og hopper ein tilfeldig lengde. $R_p = R + r * step$
Vi reknar der ut $w = P(R_p)/P(R)$ og ved eit tilfeldig tall aksepterar eller ikkje hoppet.
For kvar posisjon reknar vi ut den lokale energien. Dette kan gjerast analytisk eller numerisk.

$$E_L(R) = \frac{1}{\psi_T(R)} H\psi_T(R) \tag{4}$$

Vi utvidar så programmet med inportance sampling.

Vi hoppar her meir intelegent enn brute force mc. For å finne ein ny posisjon brukar vi:

$$y = x + DF(x)\Delta t + \xi \tag{5}$$

Vi har Greens funskjon:

$$G(y, x, \Delta t) = \frac{1}{(4\pi D\Delta t)^{3N/2}} exp(-(y - x - D\Delta t F(x))^2/4D\Delta t) \tag{6}$$

Her er:

$$F = 2\frac{1}{\psi_T}\nabla\psi_T \tag{7}$$

Vi får her då ein ny funksjon vi skal samanlikne tilfeldige tall med:

$$q(y,x) = \frac{G(x,y,\Delta t)|\psi_T(y)|^2}{G(y,x,\Delta t)|\psi_T(x)|^2} \tag{8}$$

Vi kjører og får verdien -2.87108. for $\alpha = 2.0$ og $\beta = 1.2$ dette ligger godt over den ekspedimentelle verdien på -2.9037.