

Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

Operator Hamiltona w najprostszej wersji:
$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r})\Psi$$

$$n(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$$
 Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w chwili t i w punkcie \mathbf{r}

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right)$$

BTW: rozwiązanie równania dyfuzji

dla warunku początkowego $u(x, t) = \delta(x)$

rozwiązanie można interpretować, jako gęstość prawdopodobieństwa znalezienia w chwili t i w punkcie x cząstki, która w chwili $t=0$ była w początku układu współrzędnych

Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\mathbf{r})\Psi$$

$\tau = -it$ Wstawmy czas urojony (rotacja Wicka)

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tau}$$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - \underline{V(x)\Psi(x)}$$

równanie dyfuzji

ze źródłami (odpływami) cząstek
źródło nietypowe – bo zależne od rozwiązania Ψ
[dla dyfuzji ciepła, w najprostszej wersji wprowadza się źródła niezależne od rozwiązania – tj. temperatury]

Równanie Schroedingera zależne od czasu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

H jest liniowy, rozwiązanie można więc wskazać jako superpozycję stanów własnych

$$H\phi_n = E_n\phi_n$$

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar) \quad c_n \text{ nie zależy od czasu}$$

$$\tau = -it$$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - V(x)\Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-E_n \tau/\hbar) \leftarrow \begin{array}{l} \text{Składowe gasną tym szybciej im wyższa} \\ \text{jest ich energia, najwolniej gaśnie składowa } E_0 \end{array}$$

zmiana poziomu odniesienia dla energii $V(x) := V(x) - E_R$, $E_n := E_n - E_R$

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R)\Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-(E_n - E_R)\tau/\hbar) \leftarrow$$

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia, o losie symulacji decyduje ustawienie punktu odniesienia względem energii stanu podstawowego

- 1) Jeśli $E_0 < E_R$ Funkcja falowa eksploduje w funkcji τ
- 2) Jeśli $E_0 > E_R$ Funkcja falowa znika w funkcji τ
- 3) Jeśli $E_0 = E_R$ Funkcja falowa dąży do $c_0 \phi_0$ (funkcji falowej stanu podstawowego)

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

$$\Psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) \exp(-(E_n - E_R)\tau/\hbar)$$

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia

- 1) Jeśli $E_0 < E_R$ Funkcja falowa eksploduje w funkcji τ
- 2) Jeśli $E_0 > E_R$ Funkcja falowa znika w funkcji τ
- 3) Jeśli $E_0 = E_R$ Funkcja falowa dąży do $c_0 \phi_0$ (funkcji falowej stanu podstawowego)

Wniosek: dla odpowiednio dobranego poziomu odniesienia funkcja falowa w czasie urojonym dąży do funkcji falowej stanu podstawowego niezależnie od warunku początkowego [o ile tylko całka przekrywania $\langle \Psi(x,0) | \phi_0(x) \rangle = c_0$ nie znika].

Kwantowa dyfuzyjna metoda MC – do wyznaczenia funkcji falowej stanu podstawowego
Kluczowy = dobór E_R oraz opis generacji / zaniku wędrowców

Algorytm:

- 1) Umieścić N wędrowców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrowców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest $x := x + \sigma \rho_1$ gdzie wariancja

$$\sigma^2 = \frac{\hbar^2}{m} \Delta \tau$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- 3) Replikacja wędrowców

$$\sigma^2 = 2D\Delta t$$

3) Replikacja wędrówców

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

Dla zaniedbanej części dyfuzyjnej mamy w każdym punkcie x :

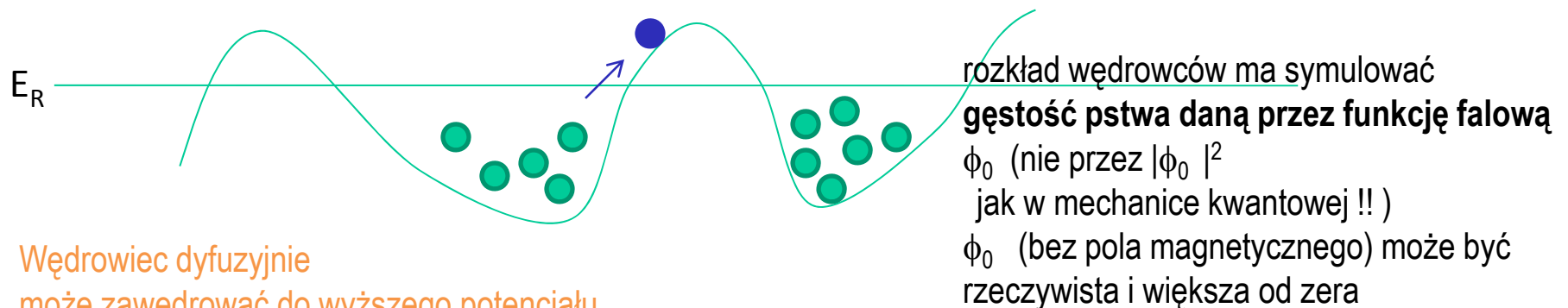
$$\Psi(x, \tau) = \Psi(x, \tau = 0) \exp [(E_R - V(x))\tau/\hbar]$$

$W(x)$

$$W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$$

W oryginalnej metodzie wędrowiec znajdujący się w punkcie x jest rozmnażany n razy, gdzie n jest liczbą całkowitą najbliższą $W(x)$

Co się będzie działo: wędrowiec ginie na wierzchołkach potencjału wznoszących się ponad poziom odniesienia, a mnoży się w dolinach.



Wędrowiec dyfuzyjnie może zawędrować do wyższego potencjału, Lecz gdy wyjdzie zbyt wysoko - zginie

3) Replikacja wędrowców

$$\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} - (V(x) - E_R) \Psi(x)$$

Dla zaniedbanej części dyfuzyjnej mamy w każdym punkcie x :

$$\Psi(x, \tau) = \Psi(x, \tau = 0) \exp \left[\frac{(E_R - V(x))\tau}{\hbar} \right]$$

$$W(x)$$

$$W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$$

W oryginalnej metodzie wędrowiec n znajdujący się w punkcie x jest rozmnażany m_n razy, gdzie m jest liczbą całkowitą najbliższą $W(x_n)$

-Takie grozi nagłą eksplozją liczby wędrowców, gdy jeden z nich wdepnie w głęboki dołek. Na początku symulacji, gdy oszacowanie E_R jest zgrubne może to prowadzić do niestabilności symulacji,

dlatego lepiej:

$m_n = \min\{\text{int}(W(x_n) + \text{rand}()), 3\}$, gdzie $\text{rand}()$ – liczba losowa z przedziału $[0, 1]$ (rozkład jednorodny)

gdy krok czasu urojonego $d\tau$ jest mały: wtedy W oscyluje wokół 1 i rzadko przekracza 2, wtedy ograniczenie m_n przez 3 generuje mały błąd

Jeśli m_n wyjdzie zero – likwidujemy wędrowca, jeśli m_n wyjdzie 3 – startujemy dwie nowe ścieżki błądzenia dyfuzyjnego od punktu x

Algorytm:

- 1) Umieścić N wędrówców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrówców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest $x := x + \sigma \rho_1$ gdzie wariancja
- 3) Replikacja wędrówców $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$ $m_n = \min\{\text{int}(W(x_n) + \text{rand}()), 3\}$
- 4) Adaptacja poziomu odniesienia E_R

Składowe gasną tym szybciej im wyższa jest ich energia

- 1) Jeśli $E_0 < E_R$ Funkcja falowa eksploduje w funkcji t
- 2) Jeśli $E_0 > E_R$ Funkcja falowa znika w funkcji t
- 3) Jeśli $E_0 = E_R$ Funkcja falowa dąży do $c_0 f_0$
(funkcji falowej stanu podstawowego)

Dobre E_R będzie oszacowaniem energii stanu podstawowego, ma być takie aby funkcja falowa się nie zmieniała

...

Chcemy więc aby liczba wędrówców się nie zmieniała, więc

Średnie W powinno być jeden $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$

Czyli:
$$E_R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i)$$

Algorytm:

- 1) Umieścić N wędrówców gdziekolwiek, np. wszystkich w początku układu współrzędnych
- 2) Każdy z wędrówców jest przesuwany, o losową wartość zgodną z równaniem dyfuzji, to jest $x := x + \sigma \rho_1$ gdzie wariancja
- 3) Replikacja wędrówców $W(x) \simeq 1 + \frac{E_R - V(x)}{\hbar} d\tau$ $m_n = \min\{\text{int}(W(x_n)) + \text{rand}(), 3\}$
- 4) Adaptacja poziomu odniesienia E_R

$$E_R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V(x_i)$$

Chcielibyśmy utrzymać stałą liczbę wędrówców w czasie symulacji.

Po replikacji mamy $N=N_i$ wędrówców, a chcemy ich liczbę utrzymać na poziomie N_0 empiryczna i skuteczna w tym celu modyfikacja poziomu odniesienia:

$$E'_R = E_R + \frac{\hbar}{\Delta\tau} \left(1 - \frac{N_i}{N_0}\right)$$

Uwaga! Pojawiają się dwa progi E_R

Energię stanu początkowego szacujemy na podstawie E_R

E'_R używane do wyliczenia W

Uwaga: E_R warto uśredniać nie tylko po obecnej iteracji, ale również po krokach poprzednich (z pominięciem pewnej liczby kroków początkowych)

Przykład: atom wodoru (3D)

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

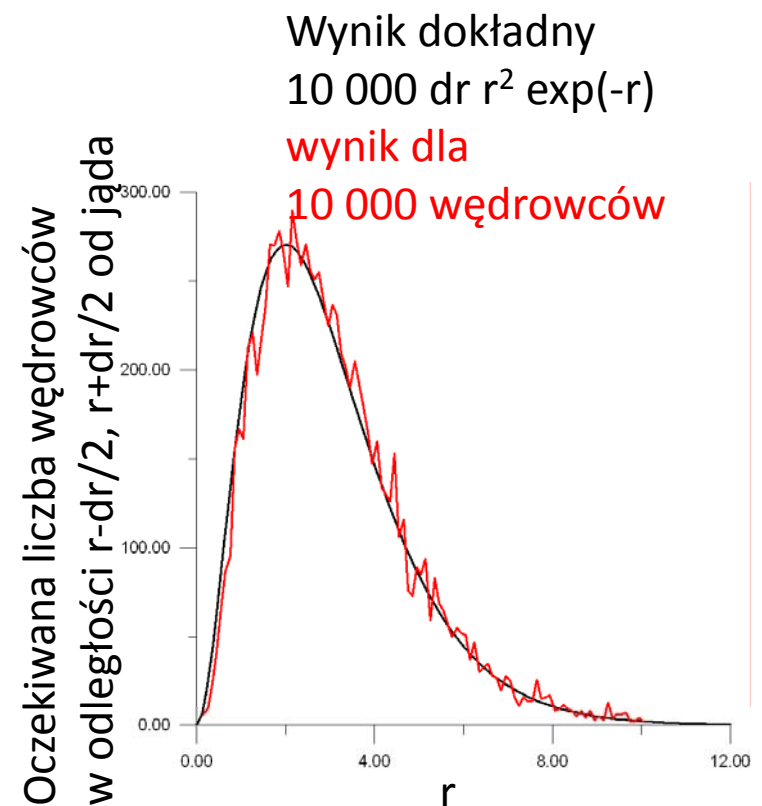
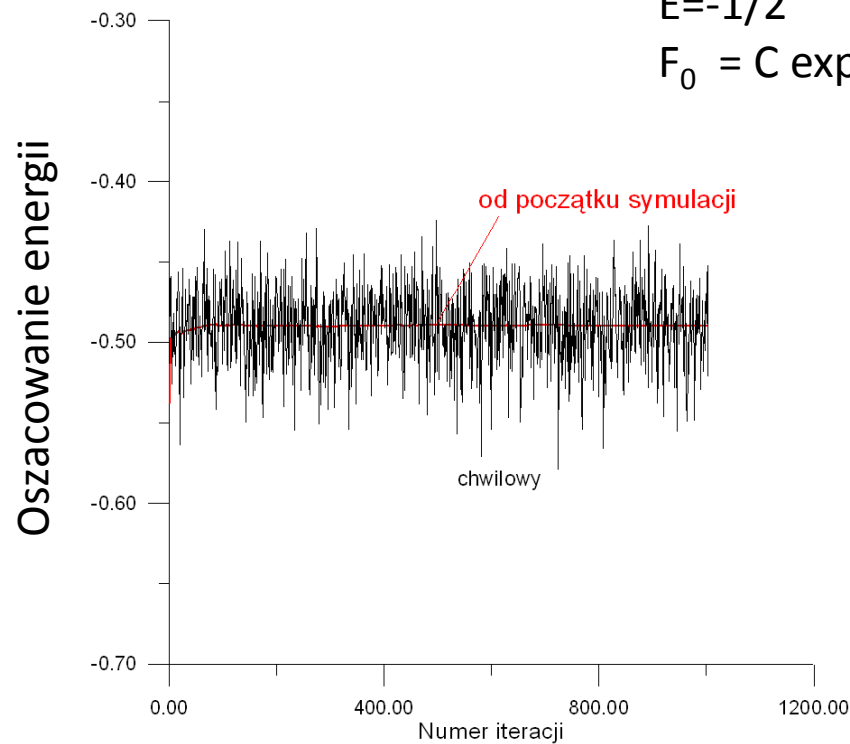
1000 wędrówców, ich położenia startują od $r=(1,1,1)$

krok czasu urojonego $d\tau=0.1$

$$\sigma^2 = d\tau$$

$$E = -1/2$$

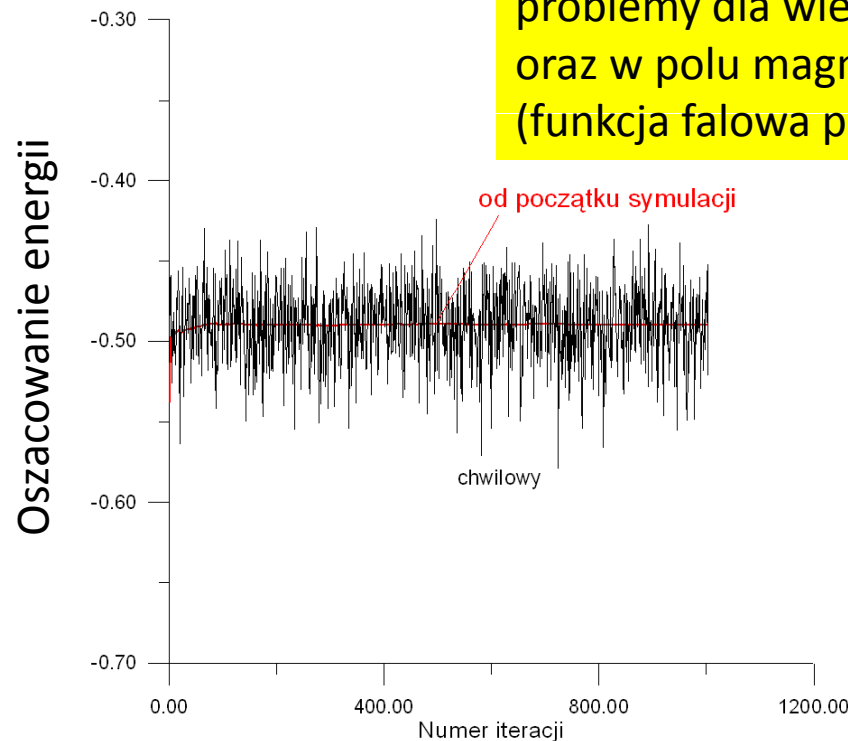
$$F_0 = C \exp(-r)$$



Przykład: atom wodo

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}$$

1000 wędrówców, ich p
krok czasu urojonego d
 $\sigma^2 = d\tau$

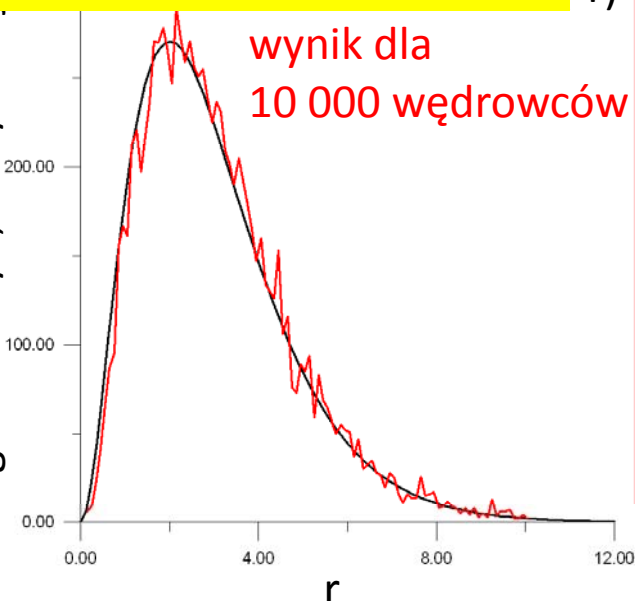


Uwaga: gęstość wędrówców jest proporcjonalna do funkcji falowej (rzeczywistej, dodatniej), a nie do gęstości prawdopodobieństwa (f.falowa²)

Kwantowa Metoda MC w tej formie: stosowana tylko dla stanu podstawowego nie więcej niż dwóch identycznych fermionów

Istnieją jednak warianty pozwalające rozwiązywać problemy dla wielu fermionów oraz w polu magnetycznym (funkcja falowa przestaje być rzeczywista)

Oczekiwana liczba wędrówców w odległości $r-dr/2, r+dr/2$ od



2 elektrony + dziura : 12 wymiarów

Po separacji ruchu środka masy: 9 wymiarów (możliwa dalsza redukcja do 6

Dla określonego momentu pędu)

Przykład dla trionu w studni kwantowej:

12 456

B. STĚBĚ *et al.*

56

$$\begin{aligned}
 H = & -\partial_{z_1}^2 - \partial_{z_2}^2 - \frac{2}{s^2 - t^2} (s\partial_s - t\partial_t) - \partial_u^2 - \frac{1}{u}\partial_u - \frac{2s(u^2 - t^2)}{u(s^2 - t^2)}\partial_{su} - \frac{2t(s^2 - u^2)}{u(s^2 - t^2)}\partial_{tu} - \frac{1}{2}(\partial_{z_1}^2 + \partial_{z_2}^2) - 2\sigma\left(\frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2}\partial_{s^2}\right. \\
 & \left. + \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2}\partial_{t^2} + \frac{s}{s^2 - t^2}\partial_s - \frac{t}{s^2 - t^2}\partial_t + \frac{1}{4}\partial_{z_h}^2\right) - \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{s+t}{2}\right)^2 + (z_1^2 - z_h^2)}} - \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{s-t}{2}\right)^2 + (z_2^2 - z_h^2)}} + \frac{1}{\sqrt{u^2 + (z_1^2 - z_2^2)}} \\
 & + V_w^e(z_1) + V_w^e(z_2) + V_w^h(z_h), \tag{12}
 \end{aligned}$$

$$\psi(s, t, u, z_1, z_2, z_h) = \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} \chi_{lmnpqr}, \quad \text{Wybór bazy wariacyjnej}$$

$$\theta_{pqr}(z_1, z_2, z_h) = f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_h) [a_p(z_1) a_q(z_2) + a_q(z_1) a_p(z_2)] b_r(z_h),$$

$$\chi_{lmnpqr} \equiv \phi_{lmn}(s, t, u) \theta_{pqr}(z_1, z_2, z_h).$$

$$\phi_{lmn}(s, t, u) = e^{-k(s/2)} s^l u^m t^n$$

$$f_e(z) = \begin{cases} A_e \cos(\sqrt{2E_e}z) & \text{if } |z| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp[-\sqrt{2(V_e - E_e)}|z|] & \text{if } |z| > \frac{L}{2}, \end{cases}$$

+ liczenie elementów macierzowych

QMC: i współczesna moc obliczeniowa – problem rozwiążemy przy pomocy programu nie dłuższego niż 100 linii

$$\begin{cases} \dots & \text{if } |z| \leq \frac{L}{2} \\ \dots & \text{if } |z| > \frac{L}{2}, \end{cases}$$

