



Gittertheoretische Behandlung verschiedener quantenmechanischer Systeme

von

Dominik Kaufhold

Bachelorarbeit

Vorgelegt dem Fachbereich Physik

Der Goethe-Universität,

Frankfurt am Main

Am 29. September 2015

1. Gutachter: Prof. Dr. Marc Wagner
2. Gutachter: Prof. Dr. Owe Philipsen

Eigenständigkeitserklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende schriftliche Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe. Die Stellen, die anderen Werken im Wortlaut oder dem Sinn nach entnommen sind, sind durch Quellenangaben im Text deutlich gemacht. Die Arbeit ist in gleicher oder ähnlicher Form noch in keinem anderen Studiengang als Prüfungsleistung eingereicht worden.

Frankfurt am Main , 29.9.2015

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Pfadintegrale	3
Einleitung.....	3
Phasenraumintegration.....	4
Markovketten	5
Metropolis Algorithmus.....	6
Energiewerte	7
Energiedifferenzen aus Korrelationsfunktionen	7
Wahl des Operators \hat{O}	8
Auswertungen und Ergebnisse	9
Harmonischer Oszillator in 1D.....	9
Theorie.....	9
Wahl des Operators \hat{O}	9
Aufenthaltswahrscheinlichkeit.....	11
Energieniveaus.....	12
Harmonischer Oszillator in 3D.....	13
Theorie.....	13
Wahl des Operators \hat{O}	13
Thermalisierung.....	13
Korrelationsfunktion.....	14
Wasserstoffatom	17
Theorie.....	17
Wahl des Operators \hat{O}	17
Thermalisierung.....	18
Pseudopotentiale.....	19
Korrelationsfunktion.....	20
Zusammenfassung	23

1. Einführung

In dieser Arbeit werden verschiedene quantenmechanische Systeme mit der Methode von Creutz und Freedman [1] untersucht. Alle meine untersuchten Systeme sind analytisch lösbar, was mir gestattet meine numerischen Ergebnisse mit den analytischen zu vergleichen.

Ich verwende in dieser Arbeit natürliche Einheiten:

$$m_e = 1, \quad \hbar = 1, \quad \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 1$$

Pfadintegrale

Einleitung

Bei einem Pfadintegral integriert man über alle möglichen Pfade, auf denen das Teilchen von A nach B gelangen könnte und gewichtet diese Pfade dabei mit der Exponentialfunktion des Wirkungsfunktionals. Man nennt das auch Summe aller Pfade.

$$Z(x_f, x_i) = \sum_{\text{Pfade}} e^{iS/\hbar} \quad (1)$$

Mit der Wirkung S:

$$S = \int_0^T dt \left[\frac{1}{2} m \left[\frac{dx}{dt} \right]^2 + V(x) \right]$$

Die Phase mit der Wirkung S wird stark variieren. Deswegen ist es sinnvoll die imaginäre Zeit $\tau := it$ zu betrachten. Dazu wird eine sogenannte Wick Rotation durchgeführt. Durch diese Rotation wird ein quantenmechanisches System in ein thermodynamisches überführt.

Schreibt man $\int \mathcal{D}x$ für eine Integration über alle Trajektorien, die die Randbedingungen erfüllen, so kann die Summe als Integral geschrieben werden:

$$\int \mathcal{D}x \exp(-S(x))$$

S ist hier ein Funktional der Trajektorie x. Der Integrand wird nur für Trajektorien nahe der minimalen Wirkung Beiträge liefern. Damit wird der Bereich des Phasenraums über den integriert werden muss stark verkleinert.

Um das Integral in der Simulation ausführen zu können wird eine diskretisierte Zeit eingeführt. Dazu wird unsere Zeitspanne zwischen x_i und x_f in T Zeitpunkte aufgeteilt. Dabei gilt:

$$x(t_j) = x_j$$

und

$$t_{j+1} - t_j = a$$

Das Integrationsmaß wird durch die Diskretisierung zu:

$$\int \mathcal{D}x \rightarrow \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k$$

Damit kann man (1) durch folgende Formel darstellen:

$$Z = \int \sum_{k=1}^{N-1} dx_k e^{-S[x_k]}$$

Die Wirkung für das diskrete Zeit Gitter wird zu:

$$S = \sum_{i=1}^N a \left[\frac{1}{2} m \frac{[x_{i+1} - x_i]^2}{a} + V(x_i) \right]$$

Der Erwartungswert eines beliebigen Operators schreibt sich:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int \mathcal{D}x A(x) \exp(-S(x))}{\int \mathcal{D}x \exp(-S(x))} \quad (2)$$

Integration über den Phasenraum

Zur Lösung der Integrale über den Phasenraum verwenden wir die Monte Carlo Methode. Wir approximieren ein Integral $\int f(x) \mathcal{D}x$ durch eine Summe mit einer endlichen Anzahl Summanden: $\sum_n f(x_n) \Delta x_n$.

Der Bereich der Weltlinien, die einen nennenswerten Betrag liefern, ist allerdings durch die exponentielle Gewichtung recht klein. Die Metropolis Monte Carlo Methode ermöglicht eine entsprechende Gewichtung der Weltlinien. Diese Methode beruht auf der Idee des „importance samplings“. Hierbei werden die Punkte x aus Gleichung (2) nicht komplett zufällig gewählt, sondern aus Wertebereichen die einen nennenswerten Beitrag zum Integral liefern. Die Wahrscheinlichkeit die Trajektorie $x^{(k)}$ zu erhalten, wird durch

$$p(x^{(k)}) = \frac{\exp(-S(x^{(k)}))}{\int \mathcal{D}x \exp(-S(x))}$$

gegeben. Werden M Weltlinien durch den Metropolis Algorithmus generiert, so ist der Erwartungswert \bar{A} für eine Größe $\langle A \rangle$ [[1], (3.7)]:

$$\bar{A} := \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M A(x^{(k)})$$

Markovketten

Die Realisierung des „importance sampling“ erfolgt durch einen Markowprozess, der aus einer Weltlinie die Nächste erzeugt. Eine Markovketten wird durch eine $N \times N$ Matrix W beschrieben. Für die Einträge gilt: $W > 0$ und $\sum_j W_{ij} = 1$. Diese Übergangsmatrix entspricht einer Wahrscheinlichkeitsdichte.

Somit kann man analog schreiben [[1], (3.9)]:

$$W(x^{(i)}, x^{(j)}) \geq 0$$
$$\int dx^j W(x^{(i)}, x^{(j)}) = 1$$

In einem zweischrittigen Prozess von x nach x' muss sich das System irgendwann im Zustand x_1 befinden. Die Wahrscheinlichkeit für einen Übergang in zwei Schritten ist gegeben durch:

$$W^{(2)}(x^{(i)}, x^{(k)}) = \int dx^{(j)} W(x^{(i)}, x^{(j)}) W(x^{(j)}, x^{(k)}).$$

Für n Schritte lässt sich folgende Rekursiv Formel konstruieren:

$$W^{(n)}(x^{(i)}, x^{(k)}) = \int dx^{(j)} W^{(n-1)} W(x^{(i)}, x^{(j)}) W(x^{(j)}, x^{(k)})$$

Metropolis Algorithmus

For $j \leftarrow 1, \dots, N$ do

$x'_j \leftarrow$ Zufallszahl $(-\infty, \infty)$

$\Delta S \leftarrow S(x_0, \dots, x_{j-1}, x'_j, x_{j+1}, \dots, x_N) - S(\{x_i\})$

If $\Delta S \leq 0$ then

$x_j \leftarrow x'_j$

else

$r \leftarrow$ Zufallszahl $(0,1)$

If $r < \exp(-\Delta S)$ then

$x_j \leftarrow x'_j$

end if

end if

end for

Algorithmus 1: Metropolis Algorithmus. Die Funktion Zufallszahl(a,b) erzeugt eine Zufallszahl im Intervall (a,b).

Es werden also neue Werte für x_j , nämlich x'_j , aus einer Verteilung gezogen. Ist die Änderung der Wirkung ΔS negative, so wird der neue Wert übernommen. Andernfalls wird der Wert mit der Wahrscheinlichkeit $\exp(-\Delta S)$ übernommen. Wenn der Unterschied zwischen x_j und x'_j groß ist, ist es unwahrscheinlich dass der neue Wert übernommen wird. Deshalb ist es effizienter x'_j nicht aus dem Intervall $(-\infty, \infty)$ zu ziehen sondern aus einer Breite Δ um x_j herum zu ziehen.

Zu Anfang wird ein Pfad mit zufälligen Werten für die x aus einem Intervall $()$ oder mit 0 initialisiert. Bevor man der Rechnung Werte entnimmt, durchläuft das System einige Monte Carlo-Iterationen zur Thermalisierung. Für beide Arten der Initialisierung werden nach der Thermalisierung gleichartige Zustände erreicht. Einzige Ausnahme hierbei sind Potentiale mit nicht definierten Stellen wie das $1/r$ Potential an der Stelle $r=0$. Die Thermalisierung gilt als erreicht wenn sich die Wirkung um einen engen Bereich bewegt.

Energiewerte

Energiedifferenzen aus Korrelationsfunktionen

Der Erwartungswert im Vakuumzustand wird in einer Dimension im allgemeinsten Fall folgendermaßen dargestellt:

$$\langle \Omega | \hat{T} \{ \hat{O}_j(t_j) \dots \hat{O}_1(t_1) \} | \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} Dx O_j(t_j) \dots O_1(t_1) e^{-S_E[x]}$$

Mit

$$Z = \int_{-\infty}^{\infty} Dx e^{-S_E[x]}$$

Hierbei ist T der Zeitordnungsoperator, der für ein in der Zeit von links nach rechts absteigendes Produkt sorgt. Die O können beliebige vom Ortsoperator x abhängige Operatoren sein.

Die 2 Punkt Funktion, eine besondere Form der Korrelationsfunktion, ermöglicht die Bestimmung von Differenzen von energiewerten zwischen einem angeregten Zustand und dem Grundzustand:

$$c(\tau) = \langle \Omega | \hat{O}(\tau) \hat{O}(0) | \Omega \rangle = \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} Dx O(\tau) O(0) e^{-S_E[x]}$$

Mit der euklidischen Zeitentwicklung

$$\hat{O}(t) = e^{\hat{H}t} \hat{O}(0) e^{-\hat{H}t}$$

ergibt sich daraus:

$$\begin{aligned} c(t) &= \langle \Omega | e^{\hat{H}t} \hat{O}(0) e^{-\hat{H}t} \hat{O}(0) | \Omega \rangle \\ &= \sum_n \langle \Omega | e^{\hat{H}t} \hat{O}(0) | n \rangle \langle n | e^{-\hat{H}t} \hat{O}(0) | \Omega \rangle \\ &= \sum_n e^{E_{\Omega}t} e^{-E_n t} \langle \Omega | \hat{O}(0) | n \rangle \langle n | \hat{O}(0) | \Omega \rangle \end{aligned}$$

$$= \sum_n e^{-(E_n - E_\Omega)t} |\langle \Omega | \hat{O}(0) | n \rangle|^2$$

Hierbei steht E_n für die Energie des n-ten Zustandes und E_Ω für die Energie des Grundzustandes. $C(t)$ wird in der Simulation durch Berechnung des Pfadintegrals bestimmt. Im Anschluss fittet man mit $A \exp(-\Delta E t)$ an. Als Fitparameter verwendet man A und $\Delta E = E_n - E_\Omega$.

Wahl von O

Für den Operator O muss man eine geeignete Wahl treffen. Man sucht einen Operator der Energieeigenzustände aus einem durch bestimmte Quantenzahlen ausgezeichneten Sektor anregt.

Eine genauere Betrachtung ist in der Einführung der jeweiligen Potentiale zu finden.

Auswertungen und Ergebnisse

Harmonischer Oszillator 1D

Theorie:

Der harmonische Oszillator wird durch das Potential

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

Beschrieben. Die dazugehörigen Energieeigenwerte sind gegeben durch:

$$E_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

mit n ganzzahlig positiv oder null.

Die Energiedifferenzen $E_n - E_0$ können mit den oben beschriebenen Methoden berechnet werden. Die Grundzustandsenergie E_0 wird über den Virialsatz bestimmt. Dieser lautet allgemein:

$$\langle \mathbf{F} \mathbf{r} \rangle + 2\langle T \rangle = 0$$

\mathbf{F} ist hierbei die auf das Teilchen wirkende Kraft, kann also als $-\Delta V$ geschrieben werden. In einer Dimension reduziert sich dies auf:

$$T = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle x V'(x) \rangle$$

Für das Potential des harmonischen Oszillators wird dies zu: $2\langle T \rangle = \mu^2 \langle x^2 \rangle$. Somit gilt für die Gesamtenergie:

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle = \frac{1}{2} \mu^2 \langle x^2 \rangle + \frac{1}{2} \mu^2 \langle x^2 \rangle = \mu^2 \langle x^2 \rangle$$

Wahl von \mathbf{O} für den harmonischen Oszillator:

Wir betrachten hierfür die Parität des harmonischen Oszillators. Eine Paritätstransformation ist allgemein ein Operator, der das Vorzeichen der Ortskoordinate umdreht,

$$\hat{P} |x\rangle = |-x\rangle.$$

Dieser Operator ist hermitesch und unitär. Ein ungerader Operator verhält sich unter Paritätstransformation wie folgt:

$$\hat{P} \hat{A} \hat{P}^\dagger = -\hat{A}$$

Der Ortsoperator x und der Impulsoperator p erfüllen diese Transformation:

$$\hat{P} \hat{x} \hat{P}^\dagger |x\rangle = \hat{P} \hat{x} \hat{P} |x\rangle = -x \hat{P} |-x\rangle = -x |x\rangle \equiv -\hat{x}|x\rangle$$

Da dies für alle $|x\rangle$ gilt, und da diese Zustände eine Orthonormalbasis bilden, gilt dies auch als Operatoridentität:

$$\hat{P} \hat{x} \hat{P}^\dagger = -\hat{x}$$

Für den Impulsoperator gilt:

$$\begin{aligned} \hat{P} \hat{p} \hat{P}^\dagger |x\rangle &= \hat{P} \int dx' |x'\rangle \langle x'| \int dp p |p\rangle \langle p| \hat{P} |x\rangle \\ &= \int dx' dp p |-x'\rangle \langle x'| p\rangle \langle p|-x\rangle = -\hat{p}|x\rangle \end{aligned}$$

Der Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators ist eine gerade Funktion der Operatoren x und p und ist deshalb invariant unter Paritätstransformationen. Daher vertauscht der Hamiltonoperator H auch mit dem Paritätsoperator P

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0$$

Somit besitzen beide Operatoren ein gemeinsames System von Eigenfunktionen. Da Die Parität als Eigenwerte nur ± 1 hat, kann man die Energieeigenwerte in gerade und ungerade Eigenwerte unterteilen. Will man nun ungerade Eigenwerte ansprechen braucht man einen ungeraden Operator und entsprechend einen geraden Operator für gerade Eigenwerte.

Der Grundzustand hat immer positive Parität $\hat{P}\{\hat{O}|\Omega\rangle\} = +1$. Dies hat zur Folge, dass

$$\langle \Omega | \hat{O} | n \rangle \begin{cases} = 0 & \text{falls } \hat{P}\{\hat{O}|n\rangle\} = -1 \\ \neq 0 & \text{falls } \hat{P}\{\hat{O}|n\rangle\} = +1 \end{cases}$$

da Zustände mit unterschiedlichen Paritäten orthogonal zueinander sind. Um das zu erreichen wählt man als Operatoren

$$O_i(x) = x^i$$

Für den ersten angeregten Zustand wählt man somit:

$$O_1(x) = x$$

Dieser erzeugt, angewendet auf Zustand einen Zustand mit negativer Parität. Damit ergibt sich für die Korrelationsfunktion:

$$\begin{aligned}
c_0^-(t) &= \sum_{n, \hat{P}\{|n\rangle\}} e^{-(E_n - E_\Omega)t} |\langle \Omega | \hat{x} | n \rangle|^2 \\
&\approx \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-(E_0^- - E_\Omega)t} |\langle \Omega | \hat{x} | 0^- \rangle|^2 \\
&\approx e^{-(E_0^- - E_\Omega)t} * \text{const}
\end{aligned}$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeit

In Abb.1 ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit dargestellt. Man erkennt sehr gut die erwartete Form der Aufenthaltswahrscheinlichkeit für den Grundzustand.

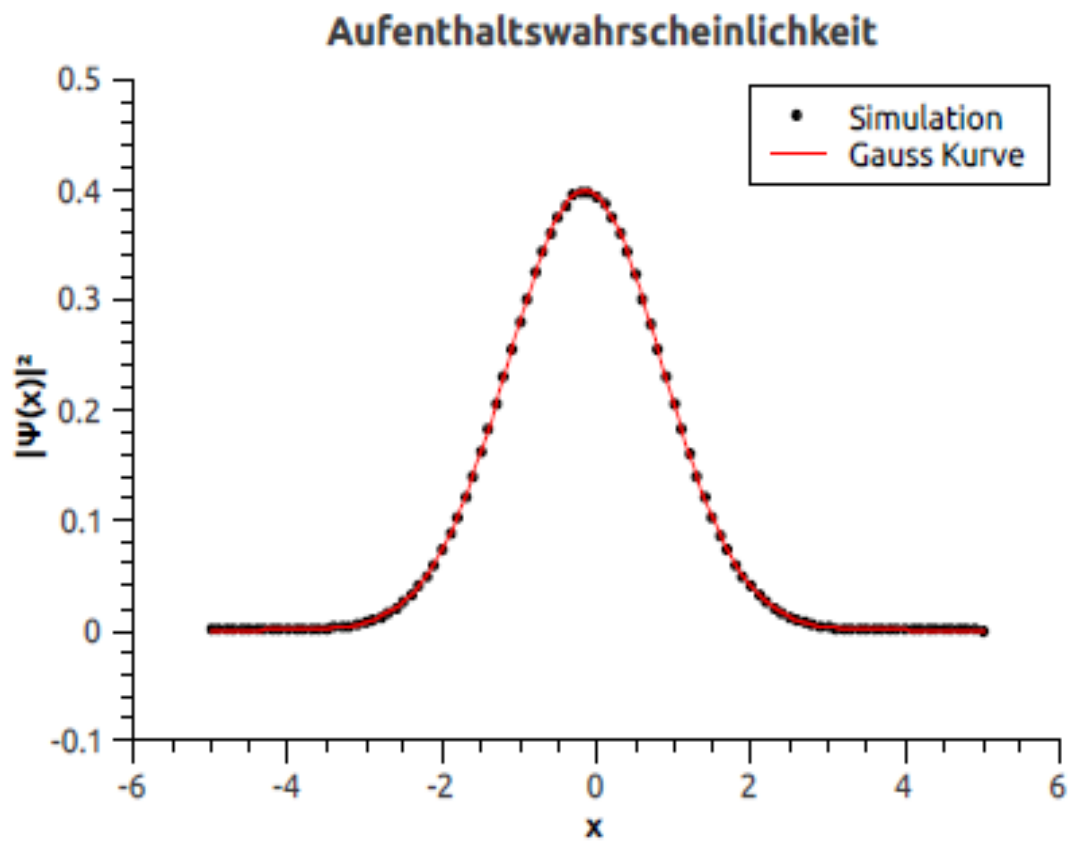
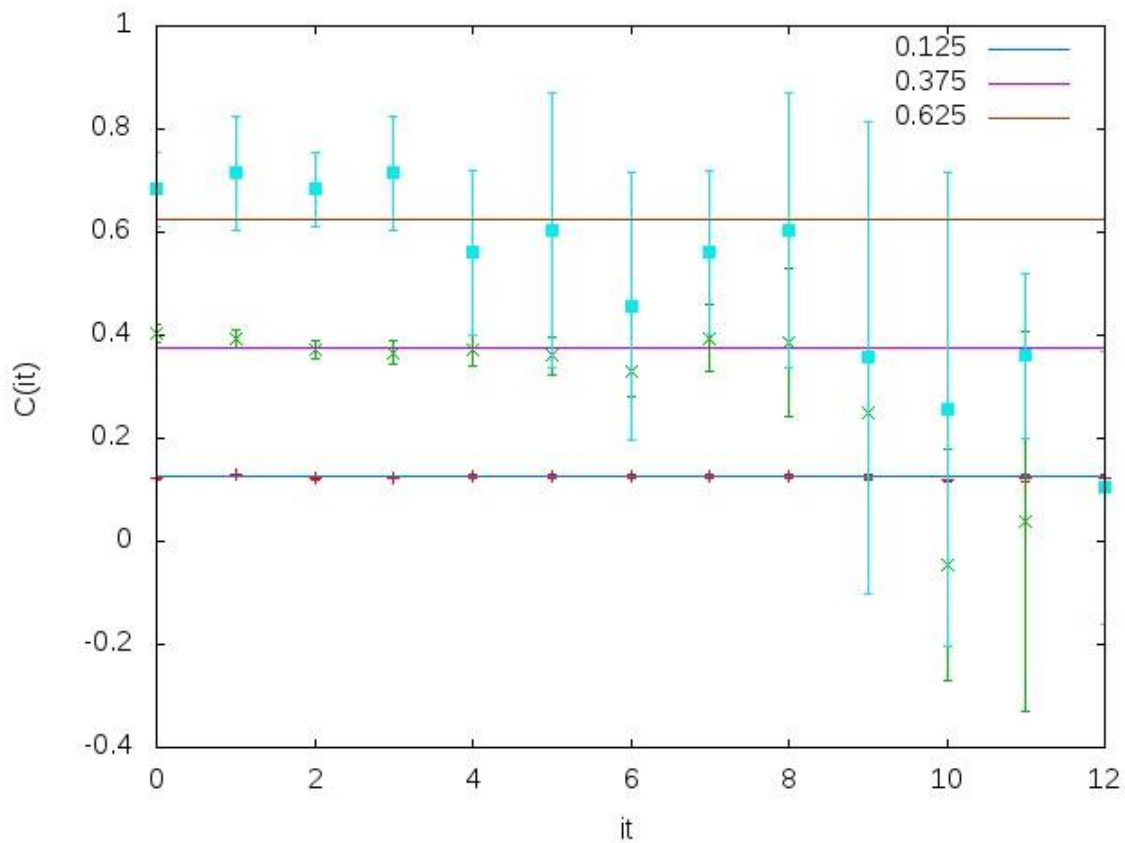


Figure 1: Aufenthaltswahrscheinlichkeit beim harmonischen Oszillator und Gauß Kurve

Energieniveaus

Die ersten beiden ungeraden Energiedifferenzen sind in Figure2 zu sehen. Berechnet wurden die Werte mit $\omega = 0.125$. Der Plot für gerade Energieniveaus ist analog. Beide Plots sind beim harmonischen Oszillator in 3D zu sehen.



Mit dem Virialsatz bestimme ich $E_0 = 0.492(91)$. Damit folgt für die Energieniveaus:

n	E_n
1	0.617(67)
2	0.737(23)
3	0.868(42)
4	0.976(11)
5	1.104(81)
6	1.198(34)
7	1.371(63)
8	1.356(93)

Harmonischer Oszillator in 3D

Theorie

Der dreidimensionale Oszillator hat das Potential:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2$$

Die Energieeigenwerte ergeben sich zu:

$$E_N = \left(N + \frac{3}{2} \right) \omega$$

Dabei sind die Energieniveaus entartet, da die Energie nur von N und nicht vom Drehimpuls l abhängt. Zu jeder Hauptquantenzahl N gibt es Eigenzustände mit Drehimpulsquantenzahlen $0=l=N, N-2, N-4, \dots$. Die Anzahl linear unabhängiger Eigenzustände ist:

$$\sum_{l=N, N-2, \dots} (2l + 1) = \frac{1}{2} (N + 1)(N + 2)$$

Alle diese Eigenzustände haben eine Parität von $(-1)^N$. Daher kann wie im eindimensionalen Fall der Operator x^i gewählt werden.

Werte der Simulation

In der hier betrachteten Simulation wurden $N=10000$ Pfade verwendet. Zwischen diesen Pfaden wurden je 100 Pfade ausgelassen. Zur Thermalisierung wurden $N_{Therm} = 1000$ Pfade verwendet.

Für die Zeitauflösung wurde $a = 1$ gewählt mit $T=1000$ Zeitpunkten.

Thermalisierung:

In der Simulation für den dreidimensionalen harmonischen Oszillator thermalisiert das System innerhalb weniger Iterationen. In dem gezeigten Plot wurde der Pfad zu Beginn mit $x^{(j)} = 0$ für alle j besetzt. Deshalb nähert sich die Wirkung von niedrigen Werten der Wirkung dem thermalisierten Zustand an.

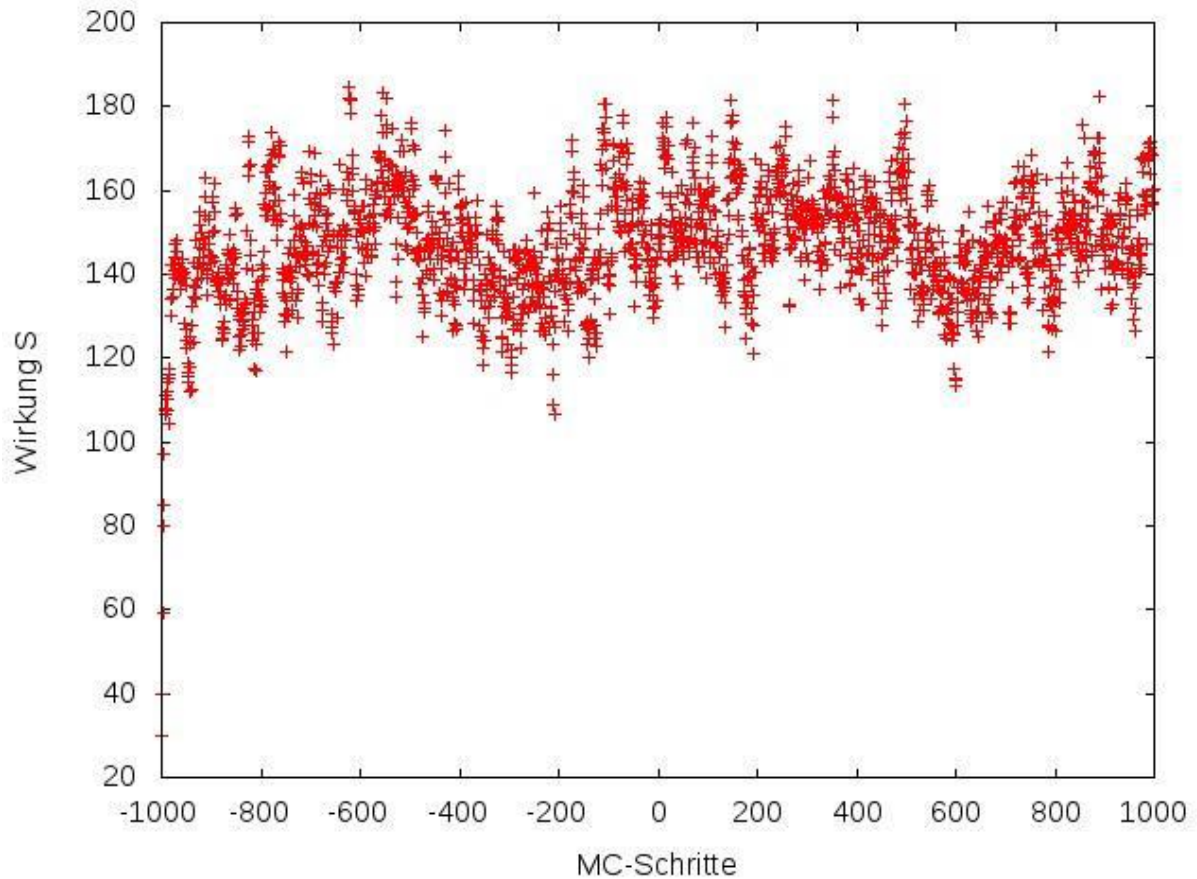


Figure 2: Thermalisierung des dreidimensionalen harmonischen Oszillators

Korrelationen:

In meinen Simulationen bekomme ich abhängig von der Anzahl der Iterationen gute Werte bis etwa x^6 , wie man in der untenstehenden Tabelle sehen kann.

Für gerade Eigenwerte (Figure3) erkennt man gut, dass die tiefen Eigenwerte sehr gut mit den erwarteten Werten übereinstimmen. Für $n=1$ erkennt man kaum eine Abweichung der Korrelationsfunktion von der Erwarteten. Allerdings wird diese Abweichung und auch der Fehler der Simulation für wachsendes n immer größer. Für große τ sind die Korrelationsfunktionen für größere n zu groß und nähern sich der Korrelationsfunktion des Grundzustandes. Für kleine τ passen die erhaltenen Energiewerte gut.

Für gerade Eigenwerte (Figure4) stimmen die Korrelationsfunktionen nicht so gut mit den Erwartungswerten überein. Nur für kleine τ erlangt man eine gute Übereinstimmung. Bei wachsenden τ entstehen schnell große Abweichungen

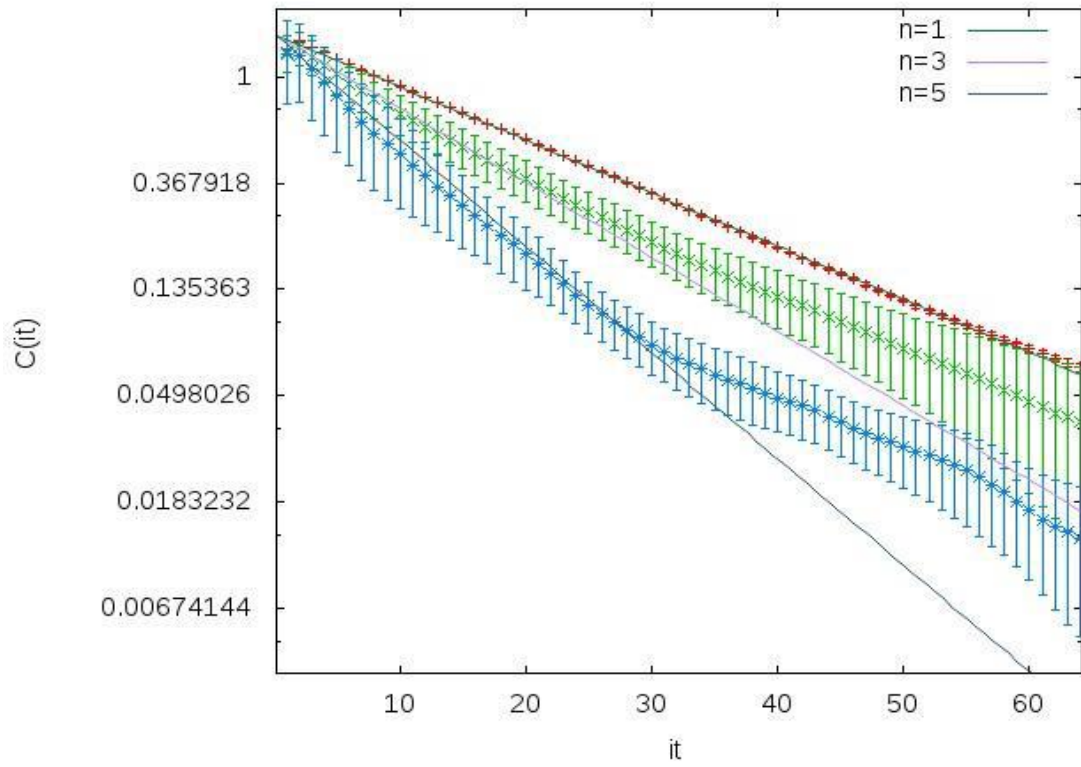


Figure 3: ungerade Energieeigenwerte des 3D harmonischen Oszillators

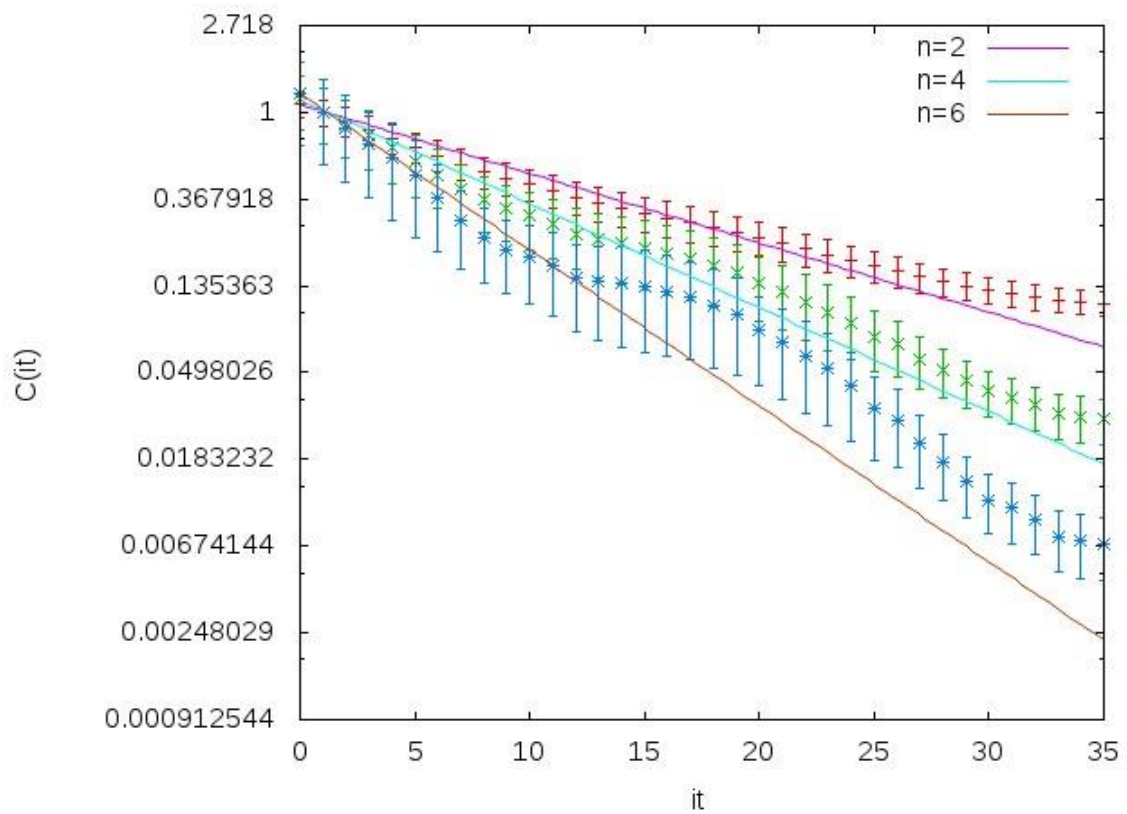


Figure 4: gerade Energieeigenwerte des 3D harmonischen Oszillators

Energieeigenwerte:

N	$E_n - E_0$ mit $\omega = 0.5$
1	0.4978(75)
2	0.913(20)
3	1.438(42)
4	1.815(84)
5	2.250(34)
6	2.84(16)
7	3.13(84)
8	3.27(52)

Wasserstoffatom

Theorie

Das Potential des Wasserstoffatoms ist das Coulombpotential:

$$V = -\frac{1}{r}$$

Dieses Problem lässt sich mit der Schrödingergleichung analytisch lösen. Man erhält für die Energieniveaus:

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}$$

Ich betrachte in dieser Arbeit nur $E_2 - E_1$. In Atomaren Einheiten, die ich hier verwende, hat diese Differenz einen Wert von $0.375E_h$.

Wahl von O

Der Grundzustand ($n=1$) des Wasserstoffatoms hat den Drehimpuls $l = 0$. Wir suchen nun einen Operator der l auf einen für den gesuchten Zustand passenden Wert erhöht. Der erste angeregte Zustand ($N=2$) kann für l die Werte ± 1 und 0 annehmen.

Somit benötigt man einen Operator der den Bereich ± 1 abdeckt. Das wird durch die Kugelflächenfunktionen erfüllt. Für $l=1$ wähle ich hierbei

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \exp(\pm i \varphi)$$

In kartesischen Koordinaten lässt sich diese Kugelflächenfunktion wie folgt darstellen

$$Y_{1,\pm 1} \approx x + iy$$

Deshalb wähle ich hier also Operator ebenfalls

$$\hat{O} = \hat{x}$$

Thermalisierung

Beim harmonischen Oszillator trat die Thermalisierung noch sehr schnell ein, beim Wasserstoffatom scheint sie allerdings gar nicht einzutreten. So länger die Thermalisierung läuft desto weniger neue Positionswerte werden übernommen. Dadurch entstehen im Thermalisierungsplot einige Plateaus an denen sich der Wert der Wirkung über viele Monte Carlo Schritte nicht ändert.

Dieses Verhalten wird durch die Unendlichkeit bei $r = 0$ bedingt. Das simulierte Teilchen „fällt“ solange, bis es innerhalb der vorgegebenen Schrittweite keine Wirkung mehr existiert die akzeptiert wird. Dies passiert, da das Teilchen irgendwann sehr tief im Potential sitzt und dadurch jede kleine Bewegung des Teilchens die Wirkung sehr stark ändert.

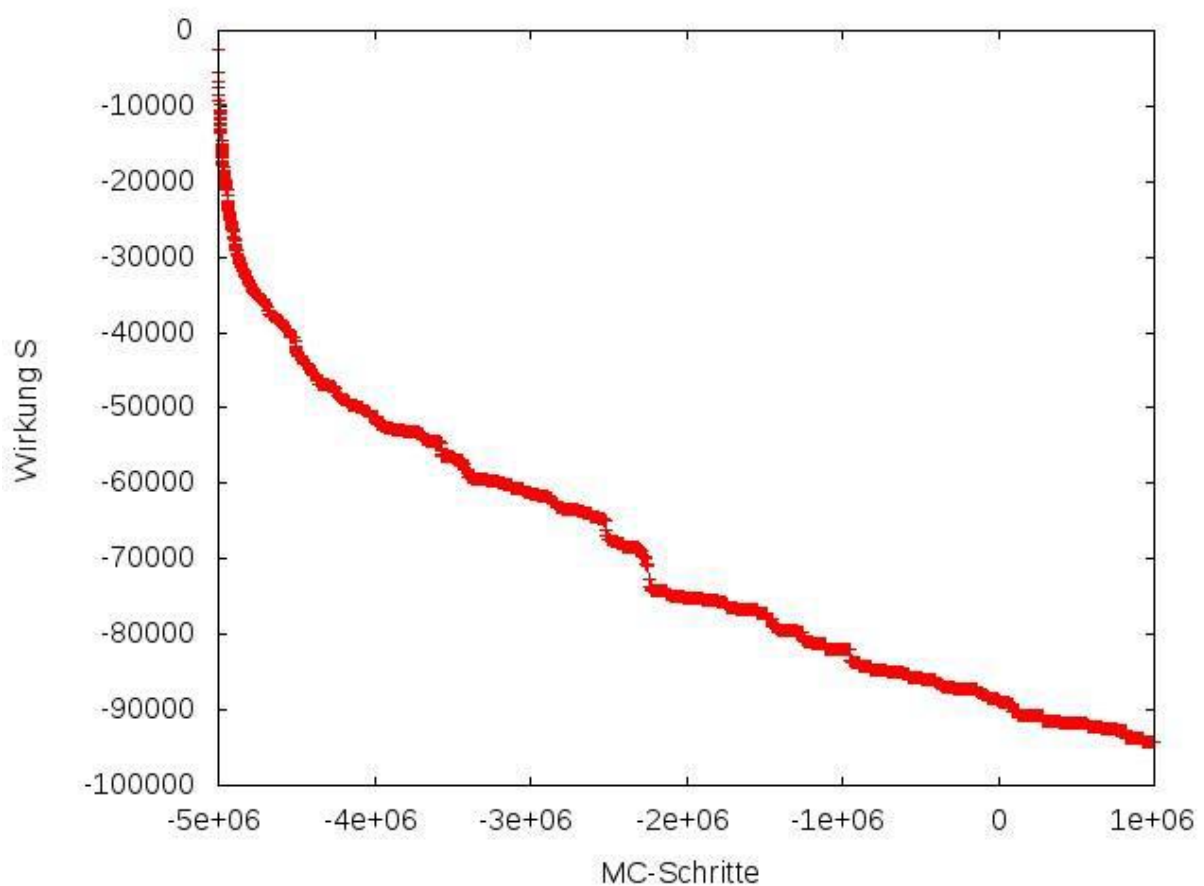


Figure 5: Thermalisierung für die Simulation des Wasserstoffatoms

Pseudopotentiale

Eine mögliche Lösung für dieses Problem ist die Einführung von Pseudo Potentialen. Mit diesen Pseudopotentialen wird dem Potential bei $r=0$ eine endliche Größe zugewiesen.

$$V_1 = -\frac{1}{r + \lambda}$$
$$V_2 = \begin{cases} -\frac{1}{r} \text{ für } r > r_{min} \\ -\left[1 - \frac{r^2}{r_{min}^2}\right] - \frac{1}{r_{min}} \text{ für } r \leq r_{min} \end{cases}$$

Das erste Potential setzt das Minimum der Funktion auf $-1/\lambda$. Für sehr kleine λ nähert sich die Funktion wieder dem $-1/r$ Potential an. Das zweite Potential ist für $r > r_{min}$ genau das $-1/r$ Potential an. Für Werte von r die kleiner als r_{min} sind ist das Potential das einer homogen geladenen Kugel.

Thermalisierung mit Pseudopotential

In Figure 6 erkennt man gut, dass die Thermalisierung schnell eintritt. Allerdings erkennt man hier dass es trotzdem mehr Iterationen benötigt um die Thermalisierung zu erreichen als beim harmonischen Oszillator. Der in Figure 6 abgebildete Plot ist für das Potential $V = \frac{1}{r+\lambda}$. Andere Pseudopotentiale ergeben ähnliche Plots.

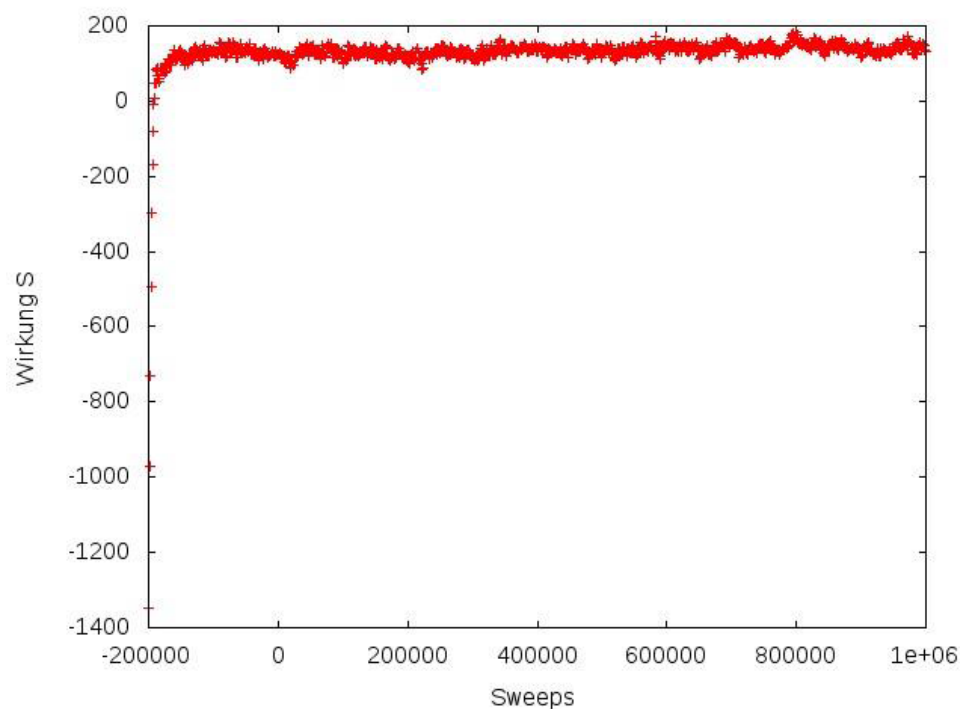


Figure 6: Thermalisierung des Pseudo Potentials

Korrelationsfunktion

Für die Simulation beim Wasserstoffatom betrachte ich $N=1000000$ Pfade. Hierbei wurden 1000 Pfade ausgelassen. Für die Thermalisierung wurden 100000 Pfade berechnet.

Für die Zeitauflösung wurde $a = 1$ gewählt mit $T=100$ Zeitpunkten.

Die Korrelationsfunktion ergibt den gesuchten exponentiellen Abfall. Dabei sieht man allerdings eine Abweichung der Anpassung von den Werten der Simulation.

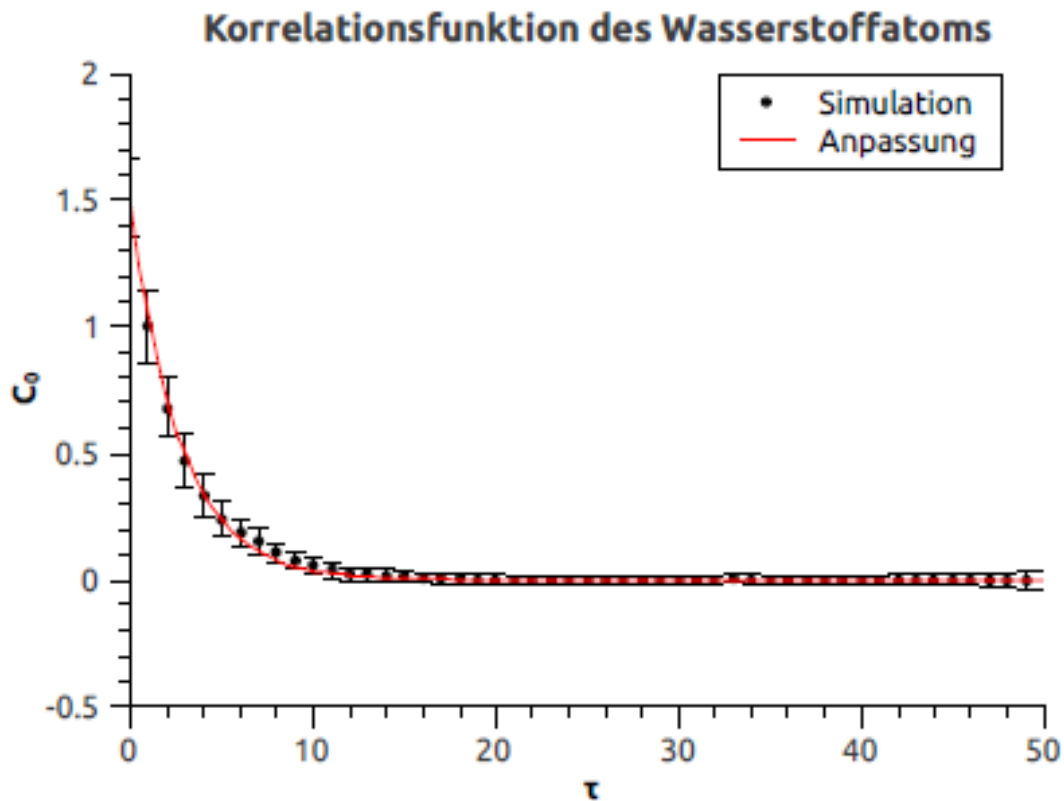


Figure 7: Korrelationsfunktion des Wasserstoffs

Für eine bessere Darstellung wird in Figure8 die effektive Masse dargestellt. Die effektive Masse entspricht der gesuchten Energiedifferenz:

$$\tilde{m}_{eff} = E_2 - E_1 \approx \ln\left(\frac{c_0(\tau)}{c_0(\tau + 1)}\right)$$

Wir erwarten eine effektive Masse von $\tilde{m}_{eff} = 0.375$

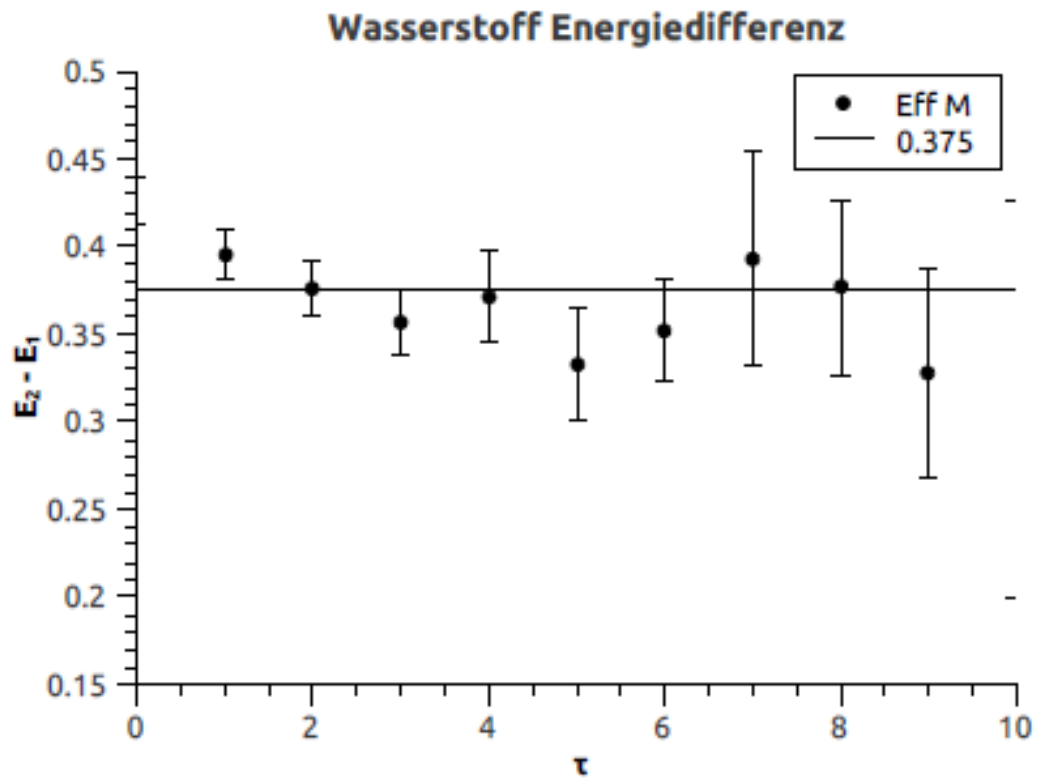


Figure 8: Wasserstoffatom, effektive Masse

Die Werte verteilen sich um den erwarteten Wert herum. Allerdings sind die Fehler groß und für größere τ streuen die Werte noch viel mehr um den erwarteten Wert herum.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit habe ich verschiedene quantenmechanische Systeme in der Pfadintegralformulierung untersucht. Dazu habe ich aus den mit dem Metropolis Algorithmus generierten Pfaden mit Hilfe der Korrelationen Energiedifferenzen bestimmt. Beim 1D harmonischen Oszillator habe ich zudem mit Hilfe des Virialsatzes die Energieniveaus bestimmt.

Die Energiewerte im 1D Fall ließen sich gut bestimmen. Ebenso die Energiedifferenzen beim 3D harmonischen Oszillator. Die ersten angeregten Zustände sind noch recht genau, höhere Zustände zeigen immer größere Fehler. Ebenso sieht man ein unterschied zwischen geraden und ungeraden Eigenwerte. Die Ungeraden ließen sich genauer bestimmen. Mit Mehr Iterationen könnte eine bessere Abschätzung der höher angeregten Zustände möglich sein.

Beim Wasserstoffatom stellen sich Probleme mit der Thermalisierung ein. Um diese zu umgehen habe ich Pseudopotentiale betrachtet. Bei diesen Potentialen wurde die Stelle $r=0$ jeweils auf einen endlichen Wert gesetzt. Damit trat die Thermalisierung wieder ein. Allerdings waren die erhaltenen Energieeigenwerte stark fehlerbehaftet.

Literaturverzeichnis

[1] M. Creutz, B. Freedman. „A Statistical Approach to Quantum Mechanics“ in Annals of Physics 132 (1981), S. 427-462 <http://www.itkp.uni-bonn.de/~urbach/bnd/cf.pdf>.

[2] M. Wagner: Simulationspraktikum <http://th.physik.uni-frankfurt.de/~mwagner/mcwagner.html#simu>

[2] C. Morningstar. “The Monte Carlo method in Quantum Mechanics” http://www.andrew.cmu.edu/user/cmorning/QM_MonteCarlo.pdf

[3] Franz Schwabl. Quantenmechanik 7.Auflage Berlin:Springer-Verlag 2007 ISBN: 978-3-540-73674-5

[4] M. Wagner, „Numerische Methoden der Physik“, Skript zur Vorlesung VNUMP (SS2014)

[5] Benoit Blossier u.a. On the generalized eigenvalue method for energies and matrix elements in lattice field theory. Feb. 2009. 2009. arXiv: 0902.1265 [hep-lat].

