

Green's function Monte Carlo

Consideriamo l'hamiltoniana totale

$$H\psi_i = E_i \psi_i \quad 1)$$

Consideriamo una funzione d'onda di prova che può essere espressa in termini di autostati dell'hamiltoniana

$$\psi_T = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \psi_i \quad 2)$$

Il limite per $t \rightarrow \infty$ di $e^{-(H-E_0)\tau} \psi_T$ proietta lo stato fondamentale

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-(H-E_0)\tau} \psi_T = \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-(H-E_0)\tau} \sum_{i=0}^{\infty} a_i \psi_i$$

$$= \sum_{i=0}^{\infty} \lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-(E_i-E_0)\tau} a_i \psi_i = a_0 \psi_0 \quad 3)$$

L'ultimo passaggio avviene perché per $E_i \neq E_0$ l'esponenziale annulla i termini $i \neq 0$. Nel caso $i=0$ l'esponenziale è $=1$ quindi $\tau \rightarrow \infty$ non ha influenza. Dividendo in piccoli intervalli di tempo si discretizza

$$\tau = n \Delta \tau$$

$$\psi(\tau) = \left[e^{-(H-E_0)\Delta\tau} \right]^n \psi_T \quad 4)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty}$$