Modulo MC
Biología Computacional

Diciembre 2020

El primer objetivo de este trabajo práctico es que se familiarice con el uso de un potente software llamado *Wolfram Mathematica*, el cual debiese ser útil en las diversas etapas de sus estudios doctorales.
Segundo, se familiarizará con el uso de funciones bases para expresar el Hamiltoniano independiente del tiempo en forma matricial, base de la implementación moderna de programas para la solución de Schrödinger.
Debe enviarme a más tardar el **Miércoles 23 de Diciembre** un archivo pdf con sus desarrollo y el código fuente que generó para obtenerlas al correo eduardo.berrios@uv.cl. Por favor, nombre los archivos como: apellido_nombre.pdf y apellido_nombre.nb.

1. Primero que todo debe obtener una licencia para *Wolfram Mathematica*. Ésta la otorga la Universidad de Valparaíso libre de costo para estudiantes. En mi caso he instalado *Wolfram Mathematica 12*.

2. El Hamiltoniano del oscilador armónico cuántico está dado por:

$$\mathrm{H}_0 = \frac{\mathrm{p}^2}{2\mathrm{m}} + \frac{1}{2}\mathrm{m}\omega^2\mathrm{x}^2 \tag{1}$$

   sin embargo, es más útil desde un punto de vista computacional trabajar con el Hamiltoniano en unidades tal que las energías son expresadas en unidad de $\hbar\omega$, el momento lineal en unidad de $\sqrt{\hbar m\omega}$ y la distancia en unidad de $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$:

$$H_0 = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^2\right) \tag{2}$$

Las funciones propias del Hamiltoniano están dadas por:

$$\varphi_j(q) = \left(2^j j! \sqrt{\pi}\right)^{-1/2} \mathrm{e}^{-q^2/2} \mathcal{H}_j(q) \tag{3}$$

donde $\mathcal{H}_j(q)$ corresponde a los polinomios de Hermite. Por tanto, tenemos:

$$H_0|j\rangle = \varepsilon_j^0|j\rangle, \text{ where } \varepsilon_j^0 = j + \frac{1}{2} \text{ and } j = 0, 1, 2, \ldots \tag{4}$$

donde ε_j^0 corresponde a la energía del estado j.

3. Demuestre que la matriz de solapamiento de funciones base corresponde a la **matriz unitaria**. Es decir, construya la matriz cuyo elemento ubicado en la fila i y columna j está dado por:

$$\langle i|j\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(q)\varphi_j(q)dq \tag{5}$$

se dice, que el conjunto de funciones $\varphi_j(q)$ forma un conjunto ortonormal de funciones base.

4. La matriz del Hamiltoniano H_0 en la base de funciones $\varphi_j(q)$ debe ser diagonal, es decir, tiene valores reales en su diagonal distintos de cero mientras que todas las entradas fuera de la diagonal deben cero. Construya la matriz cuyo elemento ubicado en la fila i y columna j está dado por:

$$\langle i\,|H_0|\,j\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(q) H_0 \varphi_j(q)dq \tag{6}$$

aquí debe evaluar primero lo que el operador Hamiltoniano, H_0, produce sobre la función $\varphi_j(q)$ reconociendo que:

$$H_0\varphi_j(q) = -\frac{1}{2}\frac{d^2\varphi_j(q)}{dq^2} + \frac{1}{2}q^2\varphi_j(q) \tag{7}$$

demuestre que los valores en la diagonal corresponden a las energías ε_j^0 construyendo una matriz para las primeras 10 energías.

5. La representación matricial de cualquier operador puede ser ahora construida de igual forma, de acuerdo a la ecuación 6. Por ejemplo, la representación matricial para otro operador A estaría dado por:

$$\langle i\,|A|\,j\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_i(q) A \varphi_j(q)dq \tag{8}$$

entonces construya una matriz de 10 por 10 para el operador q y $p = -i\frac{d}{dq}$.

6. Construya la matriz del hamiltoniano en la ecuación (2), reconociendo que la representación matricial de p^2 equivale al producto matricial $p.p$, por ejemplo. Qué observa producto de truncar la matriz en un número finito de funciones base?

7. De acuerdo a los puntos anteriores ahora podría encontrar con facilidad los valores propios para siguiente Hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2}\left(p^2 + q^4\right) \tag{9}$$

   (a) Grafique en conjunto la energía potencial de este Hamiltoniano y un oscilador armónico.

   (b) Grafique las 7 energías más bajas versus el inverso del número de funciones base.

   (c) Cuántas funciones base son necesarias para que las 7 energías más bajas tengan un error de 0.01% con respecto a las energías exactas:

$$\begin{aligned} &0.530181\\ &1.899837\\ &3.727849\\ &5.822373\\ &8.130913\\ &10.619186\\ &13.264236 \end{aligned} \tag{10}$$

   (d) Finalmente, grafique las 7 primeras funciones de onda del Hamiltoniano para el número de funciones base encontrado anteriormente. Para ello utilice:

$$\psi_n(q) = \sum_{\nu=0}^{N} c_\nu^{(n)} \varphi_\nu(q), \quad \varphi_j(q) = \left(2^j j! \sqrt{\pi}\right)^{-1/2} \mathrm{e}^{-q^2/2} \mathcal{H}_j(q) \tag{11}$$

   donde $c_\nu^{(n)}$ son los componentes del vector propio (eigenvector) que corresponde a cada una de las energías.