



Universidade Estadual de Campinas  
IFGW – Física Estatística Computacional

## Solução Lista 3

---

### Problema (3.4)

Utilizando o algoritmo *matrix\_square\_final.py*, para  $\beta$  tendendo a 0 implementamos a Decomposição de Trotter dada por;  $\rho(x, x', \beta) = e^{-V(x)\beta/2} \rho^{livre}(x, x', \beta) e^{-V(x')\beta/2}$ , onde  $\rho^{livre}(x, x', \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-(x-x')^2/2\beta}$  e  $V(x) = \frac{x^2}{2}$ , obtemos o gráfico de comparação entre a solução exata para a matriz densidade oscilador harmônico e a decomposição de Trotter.

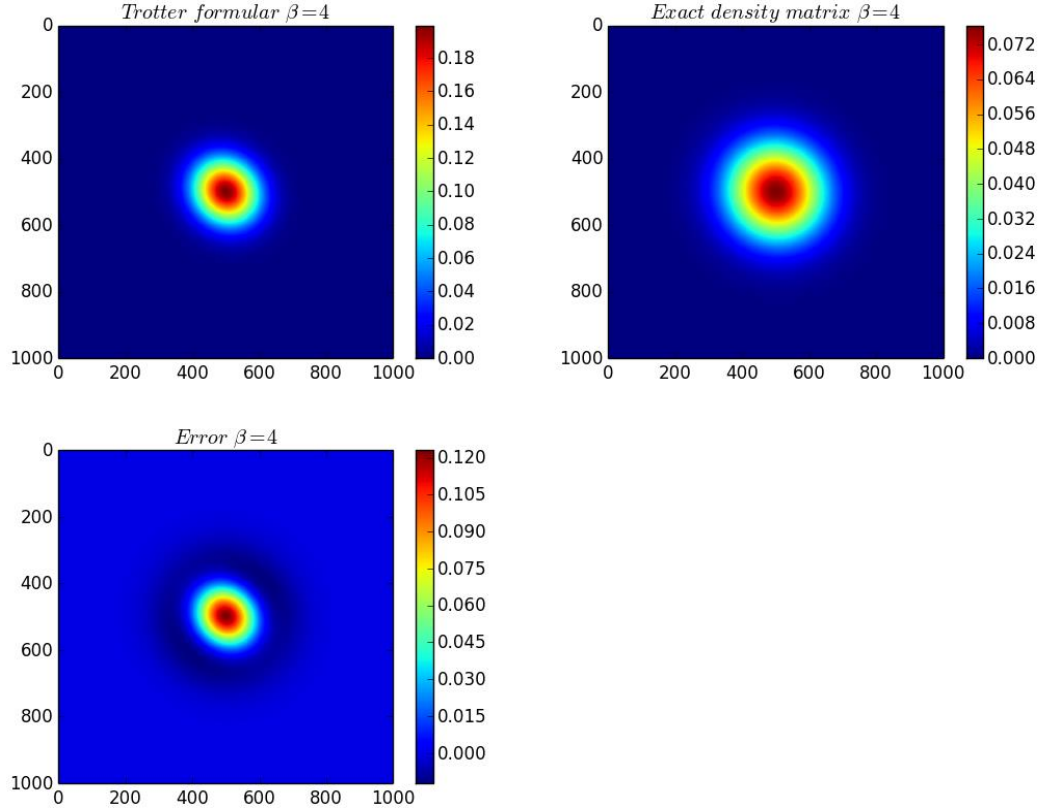


Figura 1

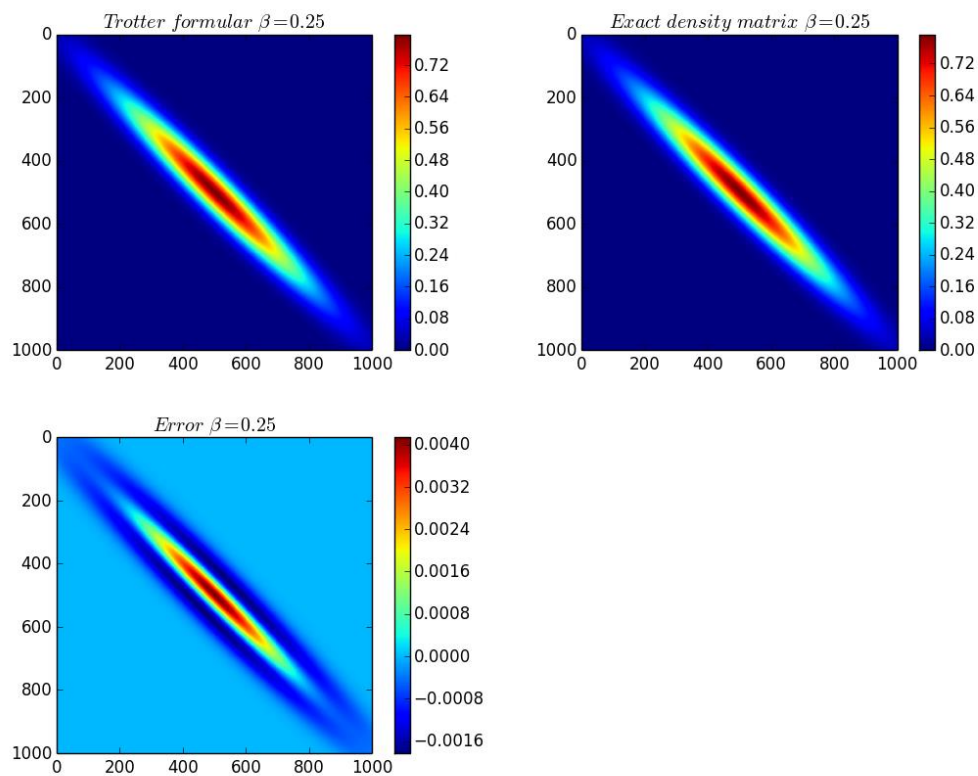


Figura 2

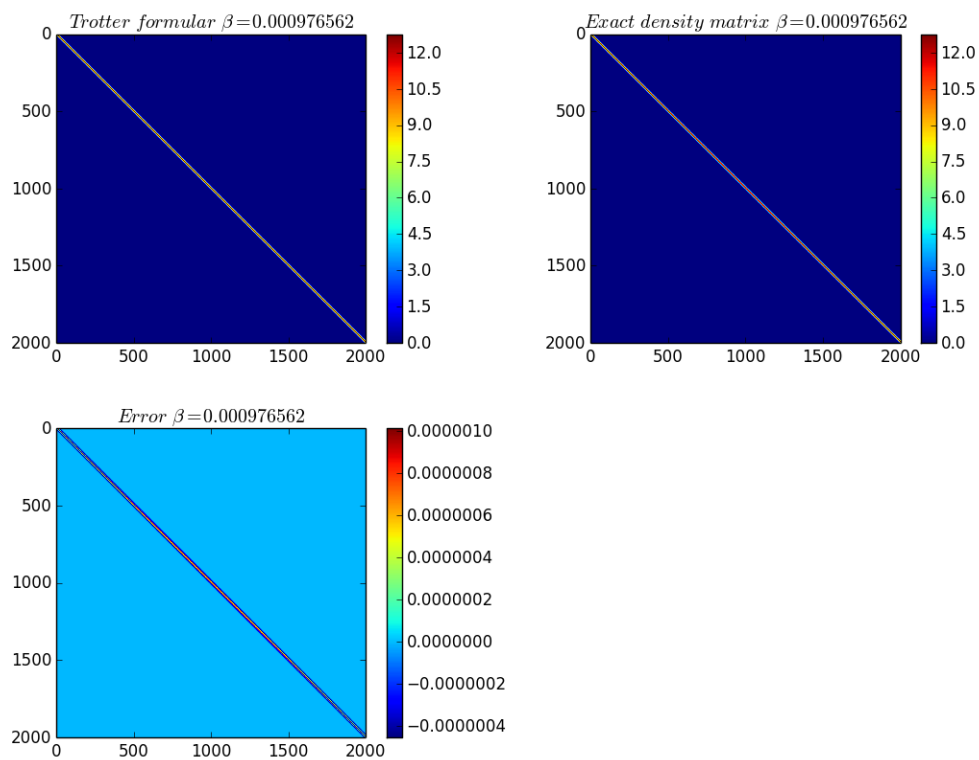


Figura 3

A partir das figuras 1, 2 e 3 podemos observar que conforme beta tende a zero nosso erro diminui e para beta grandes observamos o comportamento quântico onde possuímos elementos de matriz diferente de zero fora da diagonal.

### Problema (3.5)

Utilizando o *prochl\_teller\_final.py*, obtemos os gráficos abaixo para diferentes valores de  $\chi$  e  $\lambda$ .

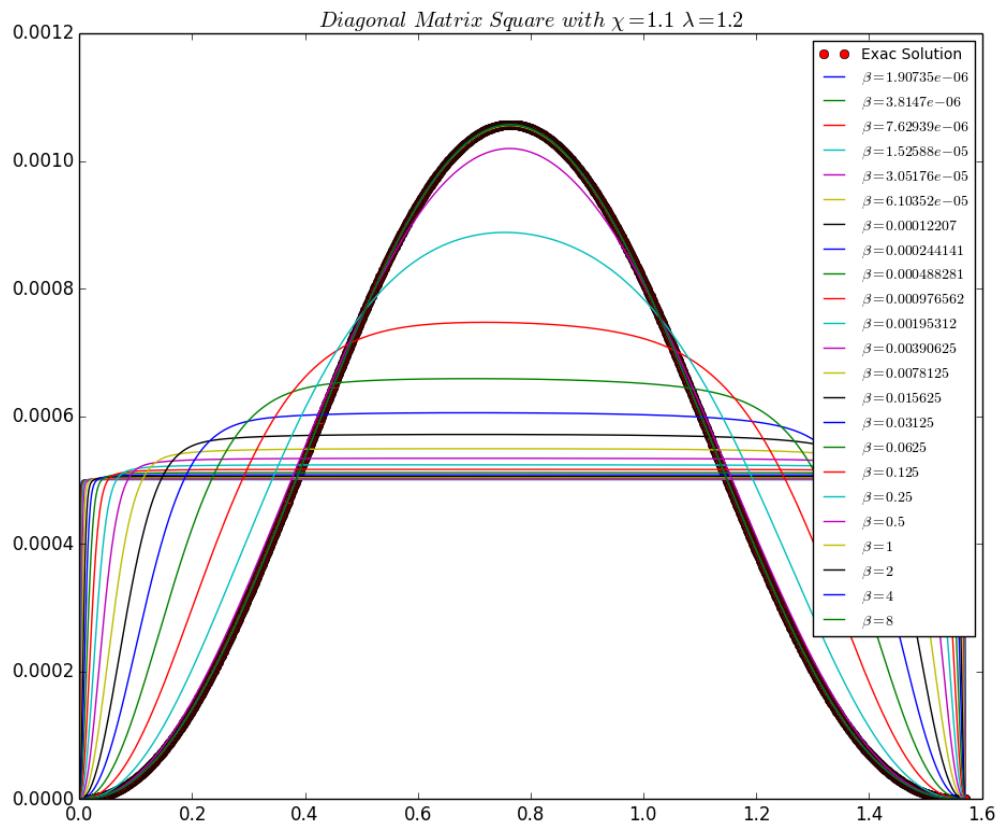
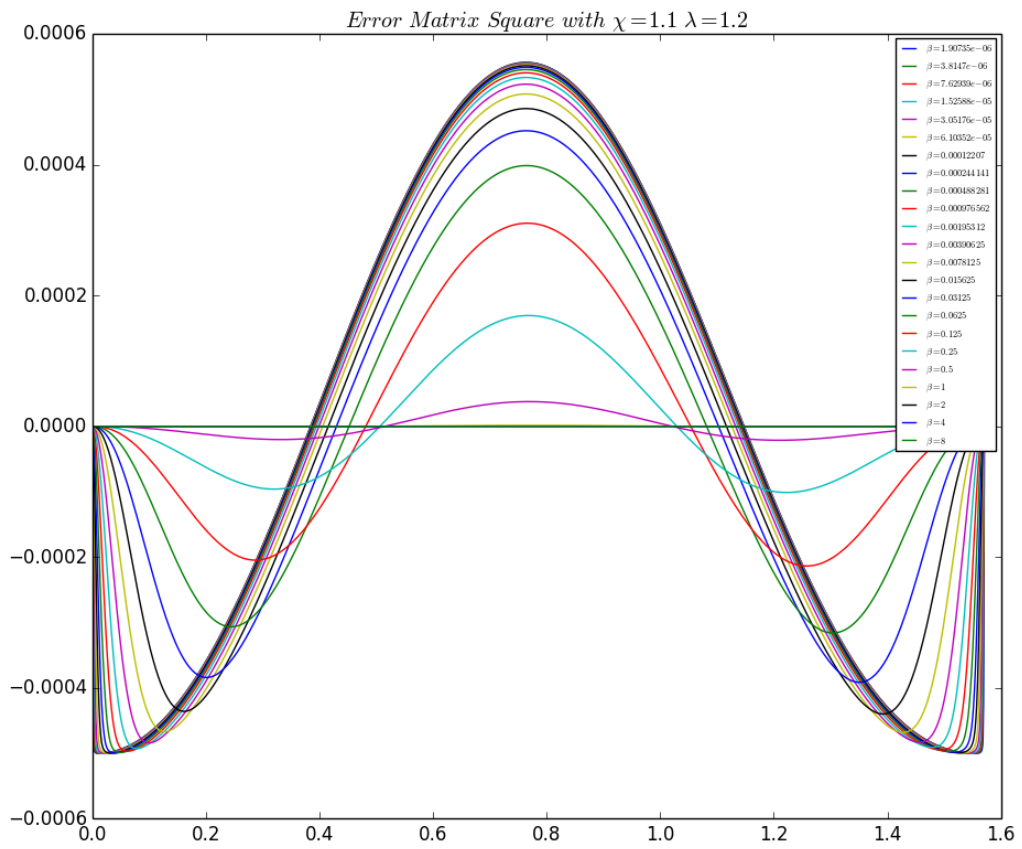
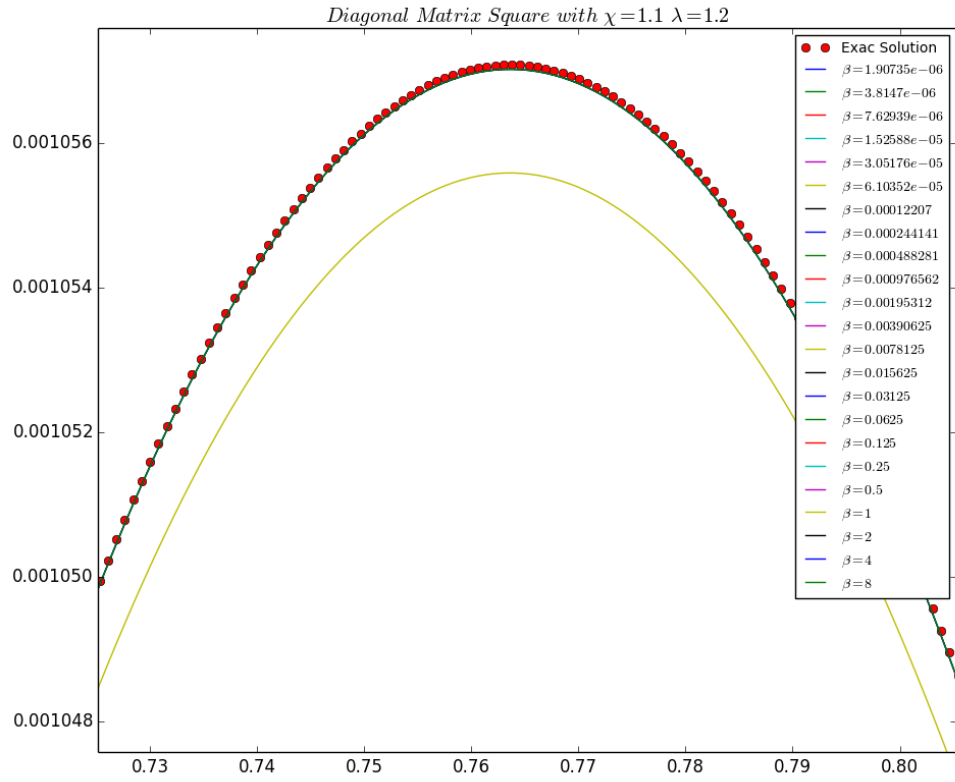


Figura 4



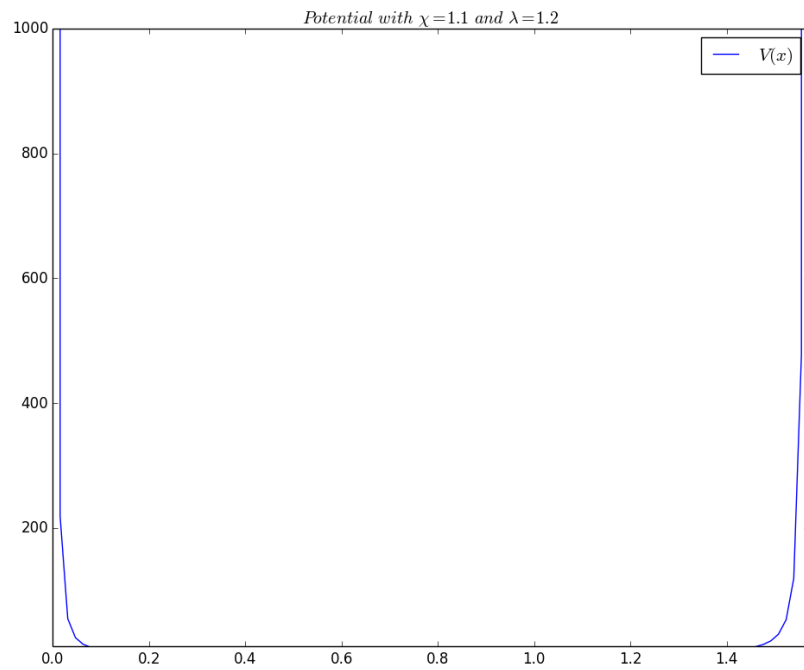


Figura 7

Tabela 1 - Valores de função de partição obtidos exatamente e por simulação em função de  $\beta$  para  $\chi = 1.1$  e  $\lambda = 1.2$

Z Simulação	Z Exato	$\beta$
453,22602	453,09817	1,91E-06
320,2793	320,19842	3,81E-06
226,27509	226,22409	7,63E-06
159,80647	159,77421	1,53E-05
112,80755	112,78705	3,05E-05
79,57518	79,56211	6,10E-05
56,0769	56,06853	1,22E-04
39,46144	39,45607	2,44E-04
27,71275	27,7093	4,88E-04
19,40532	19,4031	9,77E-04
13,53121	13,52978	0,00195
9,37773	9,37681	0,00391
6,441	6,4404	0,00781
4,36481	4,36443	0,01563
2,8975	2,89725	0,03125
1,86E+00	1,86E+00	0,0625
1,13E+00	1,13E+00	125
6,23E-01	6,23E-01	0,25
2,76E-01	2,76E-01	0,5
7,11E-02	7,11E-02	1
5,04E-03	5,04E-03	2
2,54E-05	2,54E-05	4
6,48E-10	6,46E-10	8

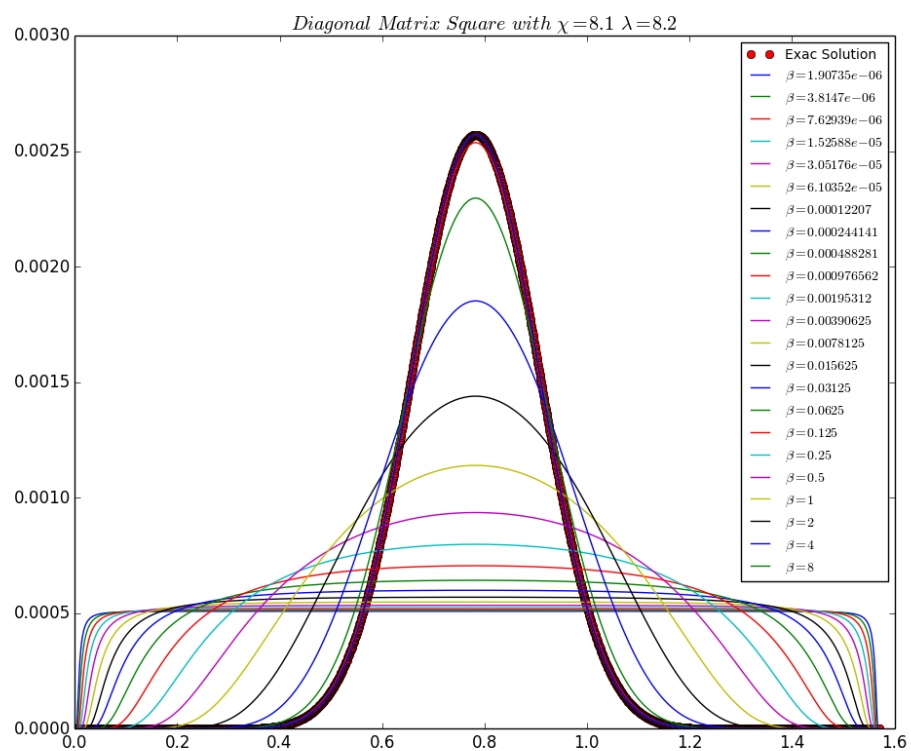


Figura 8

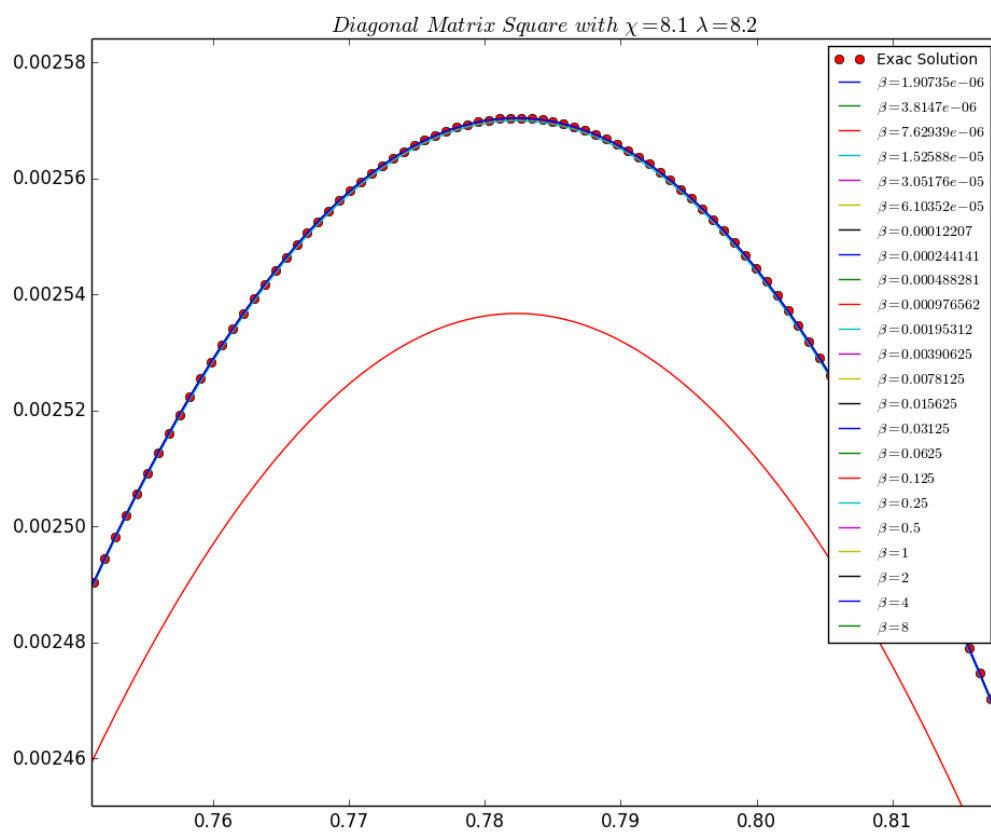


Figura 9

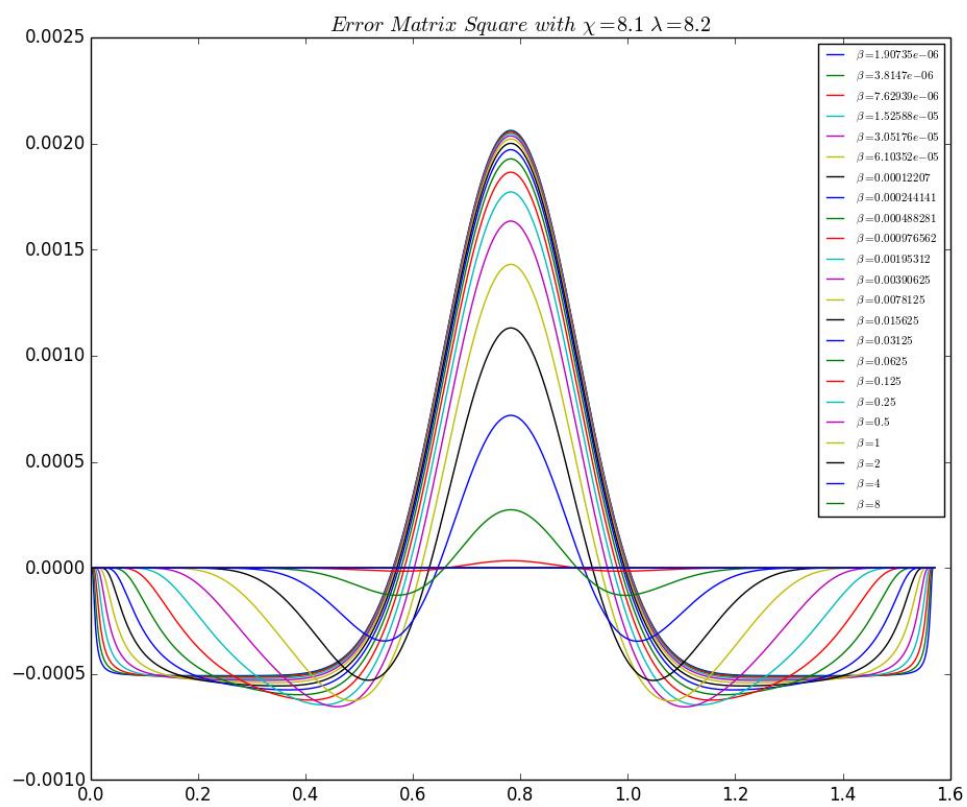


Figura 10

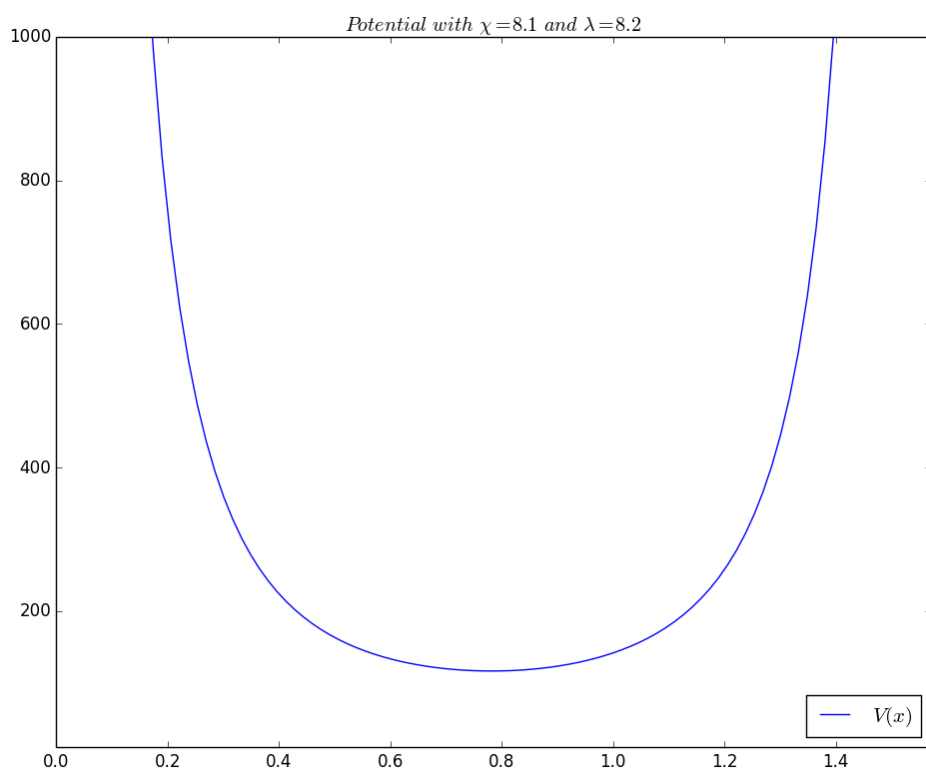


Figura 11



Tabela 2 - Valores de função de partição obtidos exatamente e por simulação em função de  $\theta$  para  $\chi = 8.1$  e  $\lambda = 8.2$

Z Simulação	Z Exato	$\beta$
446,10327	446,09874	1,91E-06
313,20065	313,19955	3,81E-06
219,22664	219,22636	7,63E-06
152,77881	152,77874	1,53E-05
105,79612	105,79611	3,05E-05
72,58021	72,58021	6,10E-05
49,10465	49,10465	1,22E-04
32,528	32,528	2,44E-04
20,85194	20,85194	4,88E-04
12,68366	12,68366	9,77E-04
7,07269	7,07269	0,00195
3,39529	3,39529	0,00391
1,2457	1,2457	0,00781
0,2766	0,2766	0,01563
0,02322	0,02322	0,03125
2,79E-04	2,79E-04	0,0625
6,22E-08	6,22E-08	125
3,77E-15	3,77E-15	0,25
1,42E-29	1,42E-29	0,5
2,02E-58	2,02E-58	1
4,10E-116	4,10E-116	2
1,68E-231	1,68E-231	4
0,00E+00	0,00E+00	8

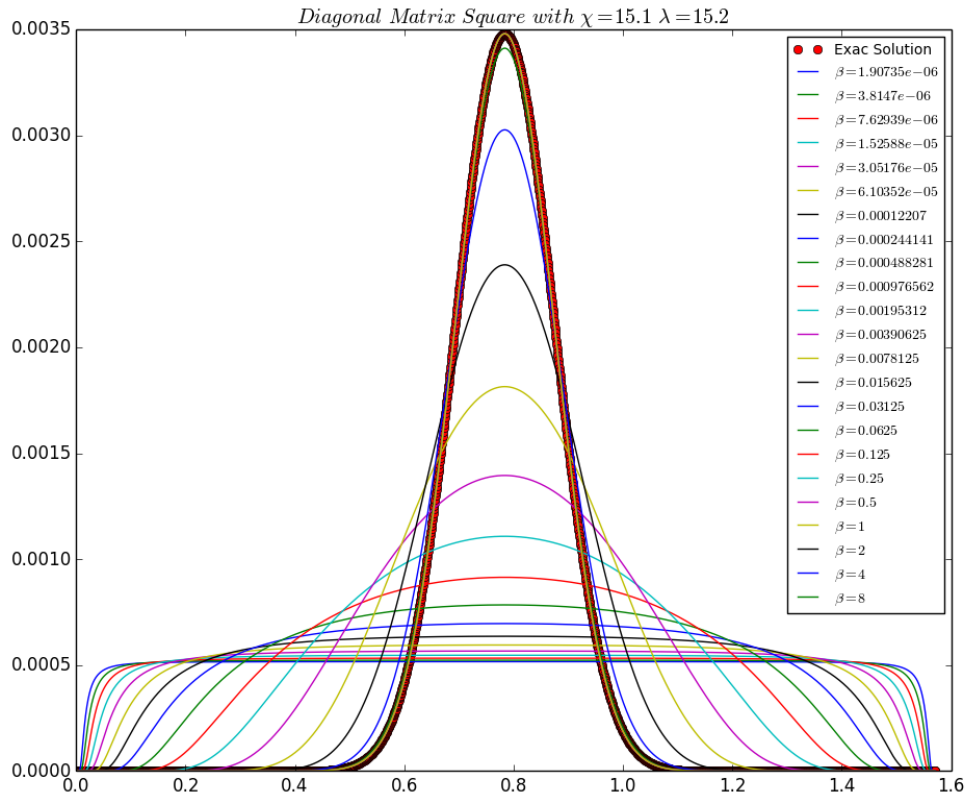


Figura 12

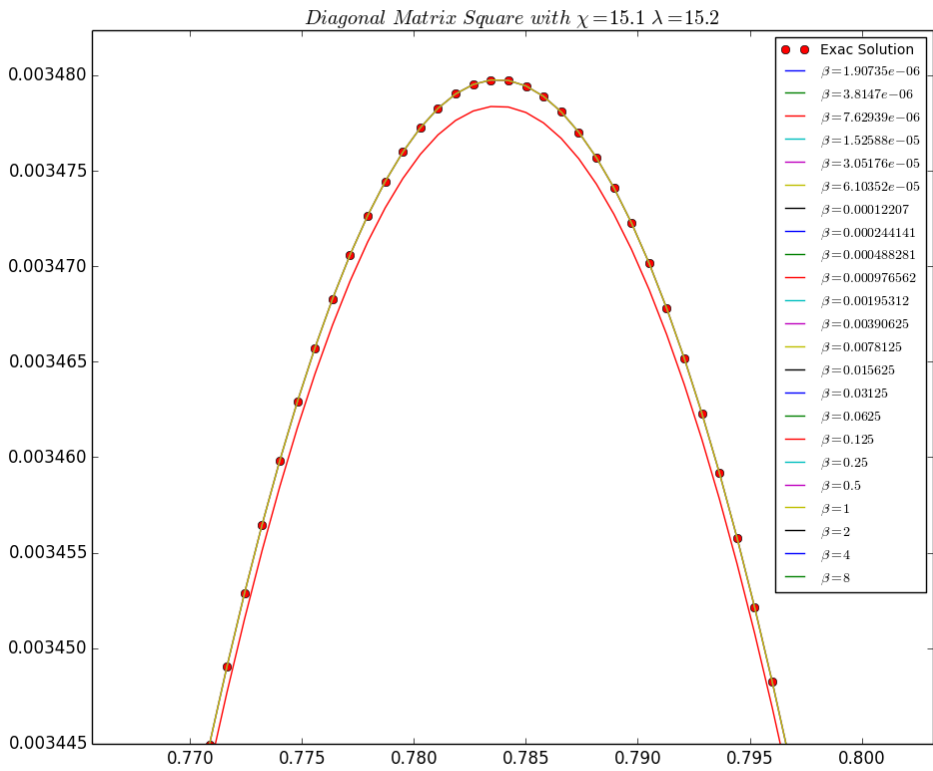


Figura 13

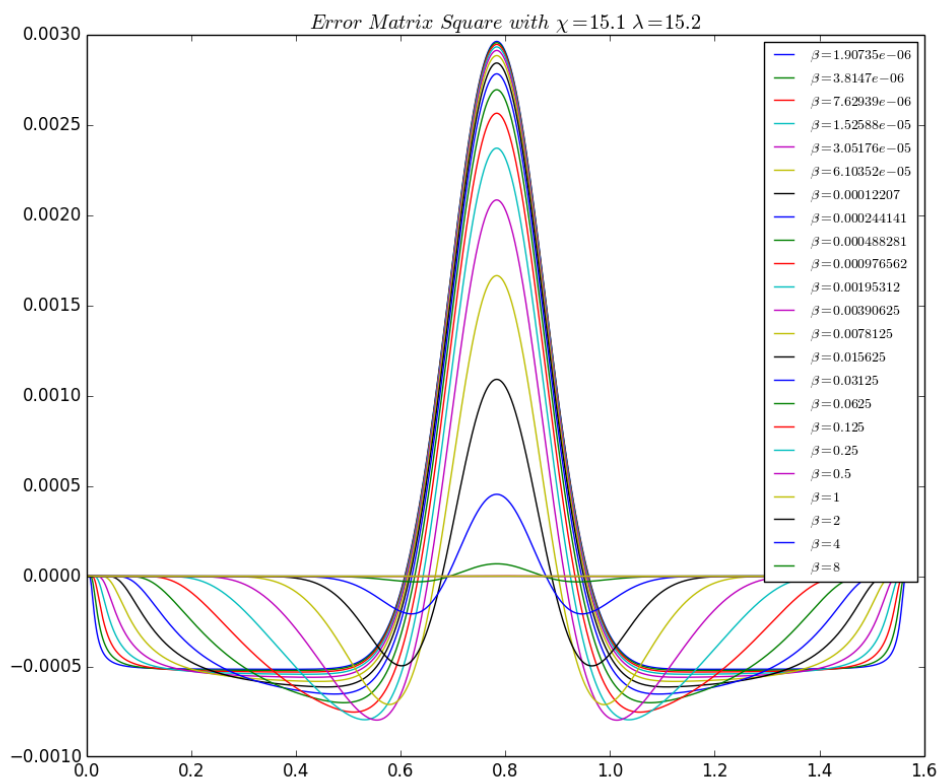


Figura 14

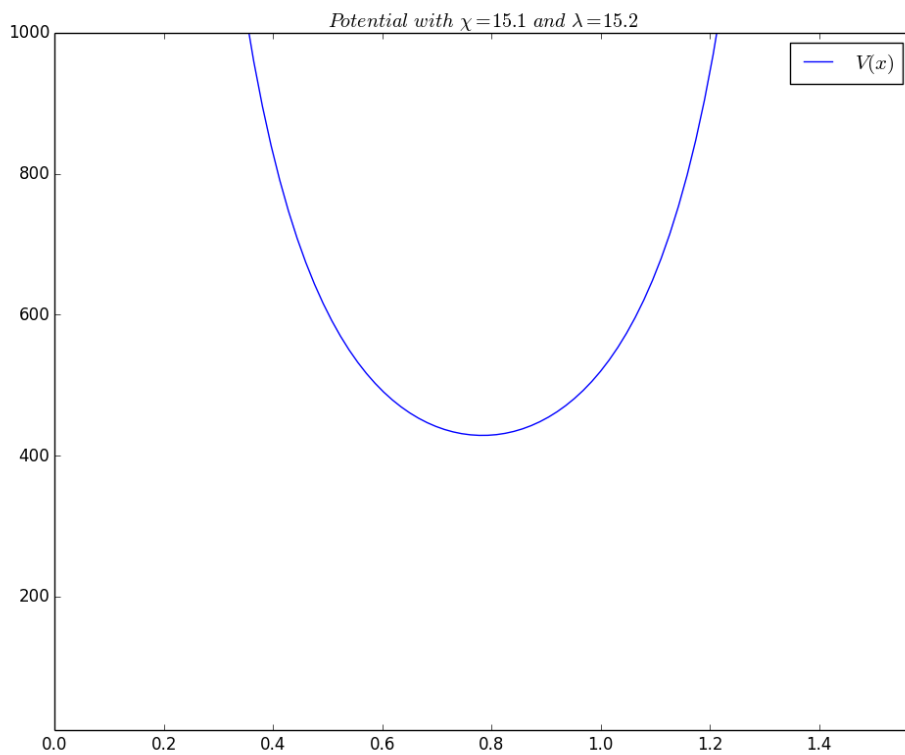


Figura 15

Tabela 3 - Valores de função de partição obtidos exatamente e por simulação em função de  $\beta$  para  $\chi = 15.1$  e  $\lambda = 15.2$

Z Simulação	Z Exato	$\beta$
439,10455	439,10217	1,91E-06
306,20695	306,2064	3,81E-06
212,24019	212,24005	7,63E-06
145,80613	145,80609	1,53E-05
98,8507	98,85069	3,05E-05
65,6889	65,6889	6,10E-05
42,32015	42,32015	1,22E-04
25,95157	25,95157	2,44E-04
14,67053	14,67053	4,88E-04
7,21479	7,21479	9,77E-04
2,76805	2,76805	0,00195
0,67063	0,67063	0,00391
0,06742	0,06742	0,00781
0,00121	0,00121	0,01563
6,84E-07	6,84E-07	0,03125
3,54E-13	3,54E-13	0,0625
1,20E-25	1,20E-25	125
1,44E-50	1,44E-50	0,25
2,09E-100	2,09E-100	0,5
4,36E-200	4,36E-200	1
0,00E+00	0,00E+00	2
0,00E+00	0,00E+00	4
0,00E+00	0,00E+00	8

A energia do estado fundamental pode ser calculada da seguinte forma  $E_0^{P-T} = - (1.0/\beta) \times \ln(Z^{P-T}(\beta))$ , onde a função de partição nada mais é que a integral de todos os elementos da diagonal da matriz de densidade, ao realizar esse procedimento obtemos os seguintes valores de energia para  $\chi = 1.1$  e  $\gamma = 1.2$ ,  $E_{\text{simulation}} = 2.64473527465$ , e  $E_{\text{exact}} = 2.645$ , que é um valor bem aceitável levando em conta que nossa rotina foi pequena. A partir das figuras 4, 5, 8, 9, 12 e 13 podemos ver a clara convergência da matriz densidade quando a temperatura é pequena ou seja beta grande. A partir dos dados das tabelas também podemos ver que nossa simulação fornece valores bem precisos para função de partição

### Problema (4.11)

Escolhemos a armadilha harmônica de modo que os níveis de energia em cada uma das três direções espaciais são  $E_n = n$ . Onde  $z_k$  é escrito da forma  $z_k = \left( \frac{1}{1-e^{-k\beta}} \right)^3$  e definimos uma temperatura reduzida como  $T_* = \frac{T}{N^{1/3}}$ . Então executamos o algoritmo *bosons\_harmonic\_trap.py* e obtemos os gráficos abaixo

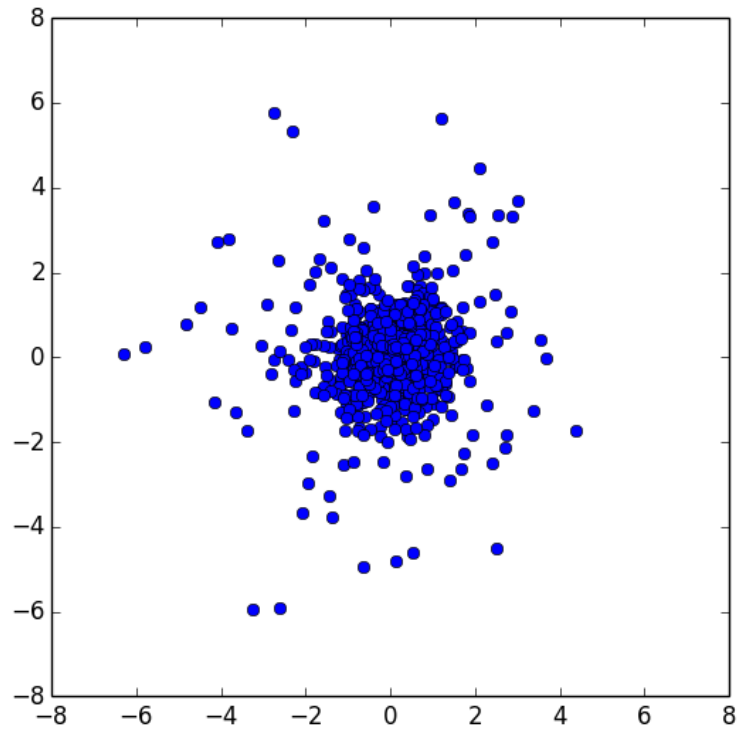


Figure 16 – Two-dimensional Snapshot of 733 ideal bosons in a three-dimensional harmonic trap with  $T_* = 0.5$

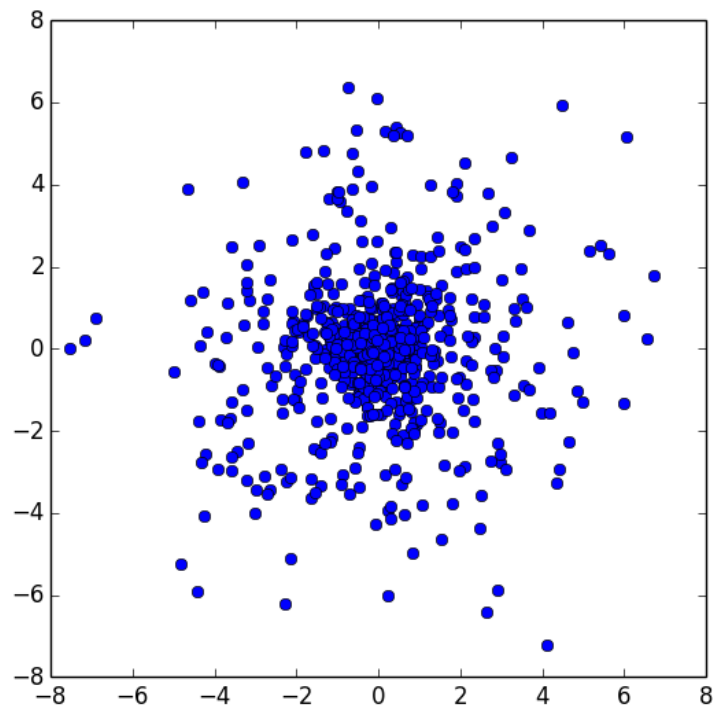


Figure 17 - Two-dimensional Snapshot of 1000 ideal bosons in a three-dimensional harmonic trap with  $T_* = 0.7$

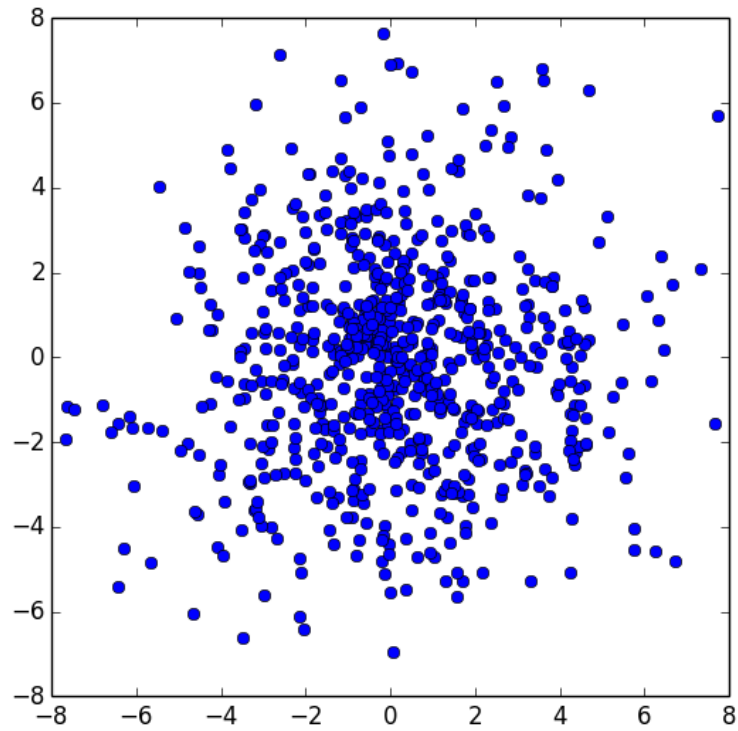


Figure 17 - Two-dimensional Snapshot of 1000 ideal bosons in a three-dimensional harmonic trap with  $T_* = 0.9$

Ao compararmos com a figura 4.23 do livro texto observamos um comportamento muito semelhante e o número máximo de partículas que conseguimos colocar antes de ocorrer a saturação é dado por  $\langle N \rangle = 1.202/\beta^3$ .