



- Métodos computacionales:  
Alejandro Segura
- Estadística
  - a) Incluir el código Notebook (.ipynb).
  - b) Guardar la información en una carpeta llamada **Semana15\_Nombre1\_Nombre2**
  - c) **Hacer una sola entrega por grupo.**

## Contents

<b>1 Estadística</b>	<b>3</b>
1.1 Metrópolis Hastings - Molécula de Hidrógeno ( $H_2$ *** Challenge)	4

## List of Figures

1	Nube electrónica encontrada con el algoritmo de Metropolis asociada al electrón en cada núcleo. . . . .	4
2	Valor esperado de la energía potencial eléctrica de la molécula de Hidrógeno. Note que existe un estado ligado que conocemos como enlace covalente, la energía del pozo de potencial está alrededor de $U_{min} \approx 2.0 \text{ eV}$ y se da a una separación nuclear de $d_{equilibrium} \approx 2.0a_0$ . . . .	5

# 1 Estadística

## 1.1 Metrópolis Hastings - Molécula de Hidrógeno ( $H_2$ \*\*\* Challenge)

1. La molécula de Hidrógeno está compuesta por dos núcleos separados una distancia  $L$ . En torno a cada núcleo existe un electrón que supondremos que está en el nivel más bajo de energía, en un orbital  $s$ . La función de onda que describe a cada electrón está dada por:

$$\psi(\vec{r}, \vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-|\vec{r} - \vec{R}|/a_0} \quad (1)$$

donde  $a_0 = 0.529 \text{ \AA}$  es el radio de Borh y  $\vec{R}$  es la posición del núcleo respecto al sistema de referencia. Adicionalmente, el operador de energía electrostática de la molécula (en electronvoltios), que incluye la interacción entre electrones y núcleos está dado por:

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2) = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \frac{1}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_1|} - \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_1|} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{R}_2|} - \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{R}_2|} \quad (2)$$

Usar un sistema de unidades donde  $a_0 = 1$  y poner los núcleos en las posiciones:  $\vec{R}_1 = [0, 0, L/2]$  y  $\vec{R}_2 = [0, 0, -L/2]$ . La idea es calcular el valor esperado de la energía potencial como función de la separación de los núcleos de la molécula. Este promedio está dado (sin considerar el espín electrónico) por:

$$\langle U \rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 |\psi(\vec{r}_1, \vec{R}_1)|^2 |\psi(\vec{r}_2, \vec{R}_2)|^2 U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{R}_1, \vec{R}_2) \quad (3)$$

- a) Note que esta integral se puede ver como el valor promedio de la energía potencial evaluada en el muestreo de la densidad de probabilidad de cada electrón. Usando el algoritmo de Metropolis en coordenadas cartesianas, hacer el muestreo del cuadrado de la función de onda fijando  $L = 2$  y  $10^5$  pasos en la cadena. La distribución de puntos de la nube electrónica asociada a cada electrón está dada por [1]:

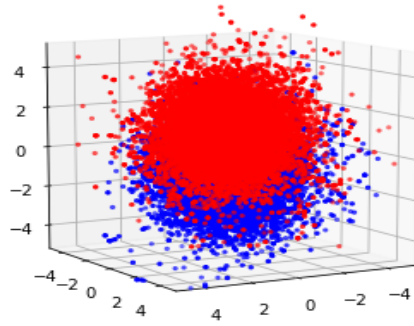


Figure 1: Nube electrónica encontrada con el algoritmo de Metropolis asociada al electrón en cada núcleo.

- b) Calcule el valor esperado de la energía potencial para el siguientes separaciones nucleares.  
`sep = np.linspace(1.0,5.0,5)`. Debería obtener algo similar a [2]:

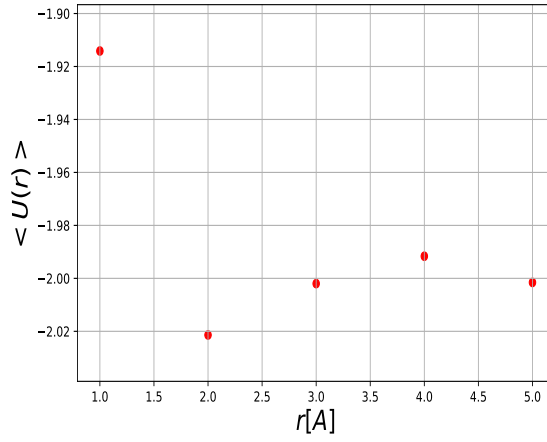


Figure 2: Valor esperado de la energía potencial eléctrica de la molécula de Hidrógeno. Note que existe un estado ligado que conocemos como enlace covalente, la energía del pozo de potencial está alrededor de  $U_{min} \approx 2.0 \text{ eV}$  y se da a una separación nuclear de  $d_{equilibrium} \approx 2.0a_0$ .

- c) Note que los valores están de acuerdo a los observados en la naturaleza: La distancia de separación de los protones es  $d_{equilibrium} = 2.4a_0$  y la energía de ligadura es  $2.8 \text{ eV}$ . Nice isn't it!