Tarea # 1. Quantum Monte Carlo. Partícula en potencial armónico

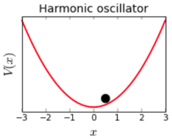
Johans Restrepo Cárdenas

Instituto de Física. Universidad de Antioquia.

25 de marzo de 2020

Partícula en un potencial armónico con $T \to 0$

Inicialmente considere una partícula en un potencial armónico $V(x) = x^2/2$ a muy baja temperatura, i.e., en el límite $T \to 0$.



- La probabilidad $\pi(x)$ de una **partícula clásica** en un potencial armónico a una temperatura $T = 1/\beta$ está dada por: $\pi(x) \sim \exp(-\beta x^2/2)$. Explique en una oración por qué esto implica que en $T \to 0$, dicha partícula está **localizada** e inmóvil en $x = 0$ correspondiendo a un mínimo de energía.
- La función de onda del estado base de una **partícula cuántica** en dicho potencial armónico es $\psi_0(x) = (1/\pi^{1/4}) \exp(-x^2/2)$ y su probabilidad asociada está dada por $\pi(x) = |\psi_0(x)|^2$. Modifique el programa a continuación (Markov-chain Monte Carlo Metropolis algorithm) para muestrear posiciones x con probabilidad $\pi(x)$. Defina una función para $|\psi_0(x)|^2$. Su programa debe dar como salida un histograma normalizado de las posiciones de la partícula (use pylab.hist() con "normed=True") y compárelo con la función $\pi(x) = |\psi_0(x)|^2$. Adjunte su programa. Note que a $T = 0$ se cumple que $\rho(x, x, \beta) = |\psi_0(x)|^2$.

Partícula en un potencial armónico con $T \to 0$

```python
import random, math

x = 0.0
delta = 0.5
for k in range(100000):
    x_new = x + random.uniform(-delta, delta)
    if random.uniform(0.0, 1.0) <  \
        math.exp (- x_new ** 2 / 2.0) / math.exp (- x ** 2 / 2.0):
        x = x_new
    print x
```

Figura: Markov-chain Monte Carlo Metropolis algorithm

Corra su programa y adjunte una gráfica que contenga tanto el histograma normalizado de las posiciones en x como la curva teórica $\pi(x) = |\psi_0(x)|^2$ en la misma figura. Aségurese que su gráfica contenga un título apropiado y etiquetas en los ejex x y y (use pylab.legend()). El histograma y la curva analítica deberían lucir similares.

Partícula en un potencial armónico a temperatura finita

En este caso, la probabilidad para dicha partícula cuántica de estar en un estado n y una posición x es:

$$\pi(n, x) \propto |\psi_n(x)|^2 \exp(-\beta E_n)$$

con $E_n = n + 1/2$ y las funciones de onda $\psi_n(x)$ se pueden obtener de manera recursiva con base en los polinomios de Hermite (ver retazo de programa a continuación):

```python
import math

n_states = 4
grid_x = [i * 0.2 for i in range(-25, 26)]
psi = {}
for x in grid_x:
    psi[x] = [math.exp(-x ** 2 / 2.0) / math.pi ** 0.25]  # ground state
    psi[x].append(math.sqrt(2.0) * x * psi[x][0])         # first excited state
    # other excited states (through recursion):
    for n in range(2, n_states):
        psi[x].append(math.sqrt(2.0 / n) * x * psi[x][n - 1] -
                      math.sqrt((n - 1.0) / n) * psi[x][n - 2])
for n in range(n_states):
    print 'level %i:' % n, [psi[x][n] for x in grid_x]
```

Partícula en un potencial armónico a temperatura finita

Modifique su programa para simular un oscilador armónico a temperatura finita $T = 1/\beta$. Para ello, debe considerar movidas primero desde (n, x) a (n, x') con una probabilidad de aceptación de Metropolis:

$$p(x \to x') = \text{mín}(1, (\psi_n(x')/\psi_n(x))^2)$$

Añada ahora movidas entre niveles de energía del tipo $n \to m = \pm 1$ manteniendo x fijo con probabilidad:

$$p(n \to m) = \text{mín}(1, |\psi_m(x)/\psi_n(x)|^2 \exp(-\beta \Delta E))$$

Movidas con $m < 0$ deben ser propuestas pero siempre rechazadas. Al escribir su programa debe alternar entre los dos tipos de movidas y usar la recursión de las funciones de onda armónicas para obtener el cuadrado de las mismas. Cuando esté listo:

- corra su programa, el cual debe adjuntar, para obtener los histogramas normalizados de las posiciones de la partícula a las temperaturas inversas $\beta = 0{,}2$, $\beta = 1$ y $\beta = 5$.

Partícula en un potencial armónico a temperatura finita

- compare con la distribución de probabilidad cuántica exacta $\pi_{quant}(x) = \rho(x, x, \beta)/Z$ dada por la expresión (la cual debe demostrar):

$$\pi_{quant}(x) = \sqrt{\tanh(\beta/2)/\pi} \exp[-x^2 \tanh(\beta/2)]$$

  Asegúrese de incluir esta misma función en la misma gráfica del histograma.

- Incluya también en la misma gráfica la **distribución de probabilidad clásica exacta** (la cual también debe demostrar):

$$\pi_{class}(x) = \sqrt{\beta/(2\pi)} \exp(-\beta x^2/2)$$

- Adjunte su programa y una gráfica con sus respectivas etiquetas y leyendas que contenga tanto el histograma como las distribuciones de probabilidad exactas cuántica y clásica.
- Haga un análisis de sus resultados para las tres temperaturas comentando sobre las diferencias encontradas.

Sobre el informe.

El informe en forma de artículo debe contener:

- Título.
- Nombre autor, afiliación.
- Resumen y palabras claves.
- Introducción breve
- Soluciones a las preguntas teóricas
- Resultados y discusión (incluya los programas y las gráficas solicitadas).
- Conclusiones
- Bibliografía
- Agradecimientos