

Densidades de Probabilidad de un Oscilador Armónico usando técnicas de Monte Carlo

Laura Catalina Arboleda Hernández*

*Instituto de Física, Universidad de Antioquia

Resumen

Se realizó un muestreo de Monte Carlo para reproducir la distribución de probabilidad de una partícula cuántica sometida a un potencial armónico. Se dudó la forma exacta de la distribución de probabilidad de los osciladores armónicos cuántico y clásico a altas y bajas temperaturas y se compararon estas distribuciones exactas con el muestreo obtenido con el algoritmo de Metropolis.

Palabras Clave

Matriz densidad, función partición, métodos de Monte Carlo, Cadenas de Markov.

Introducción

Los métodos de Monte Carlo son útiles para simular sistemas de naturaleza estocástica. En este trabajo, se usa un método de Monte Carlo, para muestrear la distribución de probabilidad para las posiciones de una partícula sometida a un potencial armónico. Usando un algoritmo de cadenas de Markov se reprodujo el camino seguido por un oscilador armónico cuántico. Para moverse de una posición a otra se eligió un número aleatorio que acepta o rechaza la movida tal que $x \rightarrow x' = x + \delta_x$. De esta forma se generaron un conjunto de movidas (posiciones) posibles para la partícula y con estas posiciones se contruyeron histogramas con la frecuencia de una cierta posición. Estos histogramas reproducen la distribución de probabilidad de que la partícula se encuentre en una cierta posición en el límite de muchas iteraciones. Finalmente se compararon los histogramas con las curvas teóricas obtenidas a partir de la expansión de Trotter. Esta expansión se utiliza sólo en el límite de altas temperaturas para obtener la forma del elemento de matriz densidad en este caso en la representación de coordenadas, $\rho(x, x', \beta)$. Una vez conocido este elemento se pueden obtener los elementos diagonales y por consiguiente la función partición. Conociendo esto, la propiedad de convolución de la matriz densidad permite hacer la convolución de dos matrices densidad a temperaturas $T = 1/\beta$ para producir una matriz densidad a temperatura dada por 2β , con ayuda de esta

matriz se conoce en detalle la forma del elemento $\rho(x, x', \beta)$. De esta forma se puede encontrar teóricamente la distribución de probabilidad para una partícula sometida a algún potencial de interacción.

1. Oscilador Armónico Clásico

El Hamiltoniano de una partícula (un oscilador) en una dimensión está dado por

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1)$$

El Hamiltoniano es la energía del sistema ($H = E$). En la colectividad canónica (la partícula en contacto con un baño térmico) la densidad de probabilidad para este sistema sería

$$\rho(x, p) = \frac{e^{-\beta H}}{\mathcal{Z}} \quad (2)$$

Donde $\beta = 1/(k_B T)$. $\rho(x, p)$ nos indica la probabilidad de encontrar la partícula con un momento en el intervalo $[p, p + dp]$ y una posición en el intervalo $[x, x + dx]$.

La función de partición canónica \mathcal{Z} puede estimarse como (Greiner et al. [2012])

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \frac{1}{h} \int \int e^{-\beta H} dx dp \\ &= \frac{1}{h} \int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} dp \int e^{-\beta \frac{m\omega^2}{2} x^2} dx \end{aligned} \quad (3)$$

De la forma de las integrales gaussianas

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (4)$$

se tiene que la ecuación 3 es

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \frac{1}{h} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta m \omega^2}} \\ \mathcal{Z} &= \frac{2\pi}{\beta h \omega} = \frac{2\pi}{h \omega} k_B T \end{aligned} \quad (5)$$

Usando unidades reducidas $\hbar = \omega = k_B = 1$, la función de partición es entonces $\mathcal{Z} = 2\pi/\beta$, con lo que la ecuación 2 se reescribe como

$$\begin{aligned}\rho(x, p) &= \frac{\beta}{2\pi} e^{-\beta H} \\ &= \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} e^{-\beta \frac{p^2}{2}} e^{-\beta \frac{x^2}{2}}\end{aligned}\quad (6)$$

Si se supone que la probabilidad de encontrar a la partícula con un momento en entre p y $p + dp$ es independiente de la probabilidad de encontrar a la partícula en una posición entre x y $x + dx$ (independencia estadística), la distribución de densidad en 6 se puede escribir como

$$\rho(x, p) = \Pi(p)\Pi(x) \quad (7)$$

Estamos interesados en ver el comportamiento de la distribución de probabilidad en el espacio de las posiciones, es decir, el comportamiento de $\Pi(x)$ cuando la temperatura cambia. Para ello veamos que la forma de $\Pi(x)$ es parecida a la función de distribución normal o gaussiana, cuya forma general es

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} \quad (8)$$

Donde σ^2 es la varianza y μ es el valor medio. Veamos cuál es la varianza de la energía (σ_E^2) para nuestro sistema de un oscilador unidimensional en contacto con un baño térmico:

$$\begin{aligned}\sigma_E^2 &= \frac{\partial^2 \ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta^2} \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{\mathcal{Z}} \right) \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta} \right) + \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial \beta^2} \right) \\ &= -\frac{1}{\mathcal{Z}^2} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta} \right)^2 + \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial \beta} \right) \\ &= -\frac{1}{\mathcal{Z}^2} \left(-\frac{2\pi}{\beta^2} \right)^2 + \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(\frac{4\pi}{\beta^3} \right) \\ &= -\frac{1}{\beta^2} + \frac{2}{\beta^2} = \frac{1}{\beta^2}\end{aligned}\quad (9)$$

Por lo tanto $\sigma_E = \sqrt{1/\beta} = T$. Así, podemos escribir $\Pi(x)$ como

$$\begin{aligned}\Pi(x) &= \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} e^{-\beta \frac{x^2}{2}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_E^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{1/\beta}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_E^2}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-0}{\sigma_E} \right)^2}\end{aligned}\quad (10)$$

De esta forma la probabilidad de encontrar la partícula en una posición en el intervalo $[x, x + dx]$ (ecuación 10) tiene

como valor medio la posición $x = 0$. En el límite cuando $T \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow \infty$ y por lo tanto la varianza $\sigma_E^2 \rightarrow 0$, lo que quiere decir que el ancho de la gaussiana tiene a cero, por lo que la distribución se convierte en una delta en $x = 0$. Así, la partícula clásica está inmóvil en un mínimo de energía cinética.

2. Oscilador Armónico Cuántico

Para el caso de una partícula cuántica sometida a un potencial armónico, usaremos la expansión de Trotter, en el límite altas temperaturas, para encontrar el elemento de matriz densidad en la base de posición: $\rho(x, x', \beta)$ y con él encontrar la probabilidad de encontrar la partícula en una posición dada o la probabilidad de transición de una posición x a una posición x' .

La expansión de Trotter es válida sólo a altas temperaturas ($\beta \rightarrow 0$) y está dada por (Krauth [2006])

$$\rho(x, x', \beta) = e^{-\beta \frac{V(x)}{2}} \rho(x, x', \beta)^{free} e^{-\beta \frac{V(x')}{2}} \quad (11)$$

donde $\rho(x, x', \beta)^{free}$ corresponde al elemento de matriz densidad en la base de posición de una partícula libre (sin término de interacción), el cuál está dado por

$$\rho(x, x', \beta)^{free} = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi_n^*(x) e^{-\beta E_n} \Psi_n(x') \quad (12)$$

Para una partícula libre, usando unidades reducidas $\hbar = m = \omega = 1$

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_n(x) \quad (13)$$

siendo la función de onda para el oscilador en una dimensión $\Psi_n(x) = (1/\sqrt{L}) e^{ik_x x}$, con condiciones de frontera periódicas y $k_x = 2\pi n_x/L$. La energía está dada entonces por

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = \frac{k_x^2}{2} \quad (14)$$

Sustituyendo esto en la ecuación 12, se obtiene

$$\begin{aligned}\rho(x, x', \beta)^{free} &= \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-ik_x x} e^{-\beta \frac{k_x^2}{2}} e^{ik_x x'} \\ &= \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-ik_x (x-x')} e^{-\beta \frac{k_x^2}{2}}\end{aligned}\quad (15)$$

Para longitudes grandes, la separación entre los números de onda k_x es muy pequeña, es decir que se puede hablar de un continuo:

$$\lim_{\Delta k \rightarrow \infty} \sum f(k) \Delta k \approx \int f(k) dk$$

Dado que los n_x son enteros, entonces $\Delta k = 2\pi/L$, por lo tanto la ecuación 15 se escribe como

$$\begin{aligned}\rho(x, x', \beta)^{free} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty e^{-ik_x(x-x')} e^{-\beta \frac{k_x^2}{2}} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty e^{-\left(ik(x-x') + \beta \frac{k^2}{2}\right)} dk\end{aligned}\quad (16)$$

para completar cuadrados en el exponente de la exponencial en la ecuación 16, vemos que

$$\left(\frac{i(x-x')}{\sqrt{2\beta}} + k_x \sqrt{\frac{\beta}{2}}\right)^2 = -\frac{(x-x')^2}{2\beta} + ik_x(x-x') + k_x^2 \frac{\beta}{2}$$

Luego, sumando y restando el término $\frac{(x-x')^2}{2\beta}$ en ese exponente (16), se obtiene

$$\rho(x, x', \beta)^{free} = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{(x-x')^2}{2\beta}} \int_0^\infty e^{-\left(\frac{i(x-x')}{\sqrt{2\beta}} + k_x \sqrt{\frac{\beta}{2}}\right)^2} dk \quad (17)$$

La integral en 17 es una integral gaussiana (ecuación 4), con lo que se obtiene finalmente el elemento de matriz densidad para una partícula libre en la base de posición

$$\rho(x, x', \beta)^{free} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\frac{(x-x')^2}{2\beta}} \quad (18)$$

Volviendo a la expansión de Trotter y reemplazando 18 en 11, para un potencial armónico $V(x) = x^2/2$, se tiene

$$\begin{aligned}\rho(x, x', \beta) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\beta \frac{x^2}{4}} e^{-\frac{(x-x')^2}{2\beta}} e^{-\beta \frac{x'^2}{4}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\left(\frac{(x-x')^2}{2\beta} + \frac{\beta}{4}(x^2+x'^2)\right)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\left(\frac{(x-x')^2}{2\beta} + \frac{\beta}{4} \frac{(x-x)^2 + (x+x')^2}{2}\right)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\left(\left[\frac{1}{\beta} + \frac{\beta}{4}\right] \frac{(x-x')^2}{2} + \frac{\beta}{4} \frac{(x+x')^2}{2}\right)}\end{aligned}\quad (19)$$

llamaremos

$$\begin{aligned}c(\beta) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \\ g(\beta) &= \frac{1}{\beta} + \frac{\beta}{4} \\ f(\beta) &= \frac{\beta}{4}\end{aligned}$$

así, reescribiendo 19 en términos de la funciones anteriores

$$\rho(x, x', \beta) = c(\beta) e^{-g(\beta) \frac{(x-x')^2}{2} - f(\beta) \frac{(x+x')^2}{2}} \quad (21)$$

Caso particular: oscilador armónico clásico ($T \rightarrow 0$)

En este punto, usando la ecuación 19 en el límite de bajas temperaturas podemos obtener la probabilidad $\Pi(x)_{clasica}$ de que una partícula clásica esté en la posición x

$$\begin{aligned}\Pi(x)_{clasica} &= \frac{\rho(x, x, \beta)}{\mathcal{Z}} \\ &= \frac{\rho(x, x, \beta)}{\int \rho(x, x, \beta) dx}\end{aligned}\quad (22)$$

El elemento de matriz $\rho(x, x, \beta)$ puede obtenerse de la ecuación 19 haciendo $x = x'$. Se obtiene

$$\rho(x, x, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} e^{-\beta \frac{x^2}{2}}$$

con este resultado, la función de partición es

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \int \rho(x, x, \beta) dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{x^2}{2}} dx \\ &= \frac{1}{\beta}\end{aligned}\quad (23)$$

Así, la probabilidad $\Pi(x)_{clasica}$ es

$$\Pi(x)_{clasica} = \sqrt{\frac{\beta}{2\pi}} e^{-\beta \frac{x^2}{2}}$$

Este resultado es idéntico al obtenido en la sección 2, en la ecuación 10.

Probabilidad Cuántica

Dada la propiedad de convolución de la matriz densidad:

$$\rho(x, x'', \beta_1 + \beta_2) = \int \rho(x, x', \beta_1) \rho(x', x'', \beta_2) dx' \quad (24)$$

Si $\beta_1 = \beta_2 = \beta$, y usando la ecuación 21, la ecuación 24 se convierte en

$$\begin{aligned}\rho(x, x'', 2\beta) &= c^2 \int e^{\left[g \frac{(x-x')^2}{2} - f \frac{(x+x')^2}{2} - g \frac{(x'-x'')^2}{2} - f \frac{(x'+x'')^2}{2}\right]} dx' \\ &= c^2 \int e^{-\frac{g}{2}[(x-x')^2 + (x'-x'')^2] - \frac{f}{2}[(x+x')^2 + (x'+x'')^2]} dx'\end{aligned}\quad (25)$$

Para el exponente de la exponencial en la ecuación anterior se tiene:

Así, como

$$f(\beta)g(\beta) = \frac{\beta}{4} \left(\frac{1}{\beta} + \frac{\beta}{4} \right) = \frac{1}{4} \quad (37)$$

entonces

$$f(\beta) = \frac{1}{4g(\beta)} = \frac{1}{2} \tanh(\beta/2) \quad (38)$$

$$c(2\beta) = \sqrt{\frac{1}{2\pi \sinh(2\beta)}} \quad (39)$$

De esta forma, conociendo $c(\beta)$, $g(\beta)$ y $f(\beta)$, podemos volver a la ecuación 21 y reescribirla,

$$\begin{aligned} \rho(x, x', \beta) &= c(\beta) e^{-g(\beta) \frac{(x-x')^2}{2}} - f(\beta) \frac{(x+x')^2}{2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi \sinh(\beta)}} e^{-\frac{(x-x')^2}{4} \coth(\frac{\beta}{2}) - \frac{(x+x')^2}{4} \tanh(\frac{\beta}{2})} \end{aligned} \quad (40)$$

Los elementos de la diagonal ($x = x'$) son

$$\rho(x, x, \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \sinh(\beta)}} e^{-x^2 \tanh(\beta/2)} \quad (41)$$

Con esto, la probabilidad de que la partícula cuántica se encuentre en la posición x está dada por

$$\begin{aligned} \Pi(x)_{cuantica} &= \frac{\rho(x, x, \beta)}{\mathcal{Z}} \\ &= \frac{\rho(x, x, \beta)}{\int \rho(x, x, \beta) dx} \\ &= \frac{e^{-x^2 \tanh(\beta/2)}}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2 \tanh(\beta/2)} dx} \\ &= \frac{e^{-x^2 \tanh(\beta/2)}}{\sqrt{\frac{\pi}{\tanh(\beta/2)}}} \\ &= \sqrt{\frac{\tanh(\beta/2)}{\pi}} e^{-x^2 \tanh(\beta/2)} \end{aligned} \quad (42)$$

Caso particular: oscilador armónico cuántico ($T \rightarrow 0$)

En el límite de bajas temperaturas ($\beta \rightarrow \infty$), la función $\tanh(\beta/2) \rightarrow 1$ y la ecuación 42 se convierte en

$$\Pi(x)_{cuantica} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (43)$$

Las funciones de onda para el oscilador armónico cuántico están dadas por

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{g}{2} [(x-x')^2 + (x'-x'')^2] - \frac{f}{2} [(x+x')^2 + (x'+x'')^2] \\ &= -\frac{g}{2} (x^2 + x''^2 + 2xx' - 2xx' - 2x'x'') \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} &\quad -\frac{f}{2} (x^2 + x''^2 + 2x'^2 + 2xx' + 2x'x'') \\ &= -\frac{g+f}{2} (x^2 + x''^2) - (g+f)x'^2 - (f-g)(x+x'')x' \end{aligned} \quad (27)$$

Luego, la ecuación 25 se convierte en

$$\rho(x, x'', 2\beta) = c^2 e^{-\frac{(g+f)}{2} (x^2 + x''^2)} \times \quad (28)$$

$$\int e^{-[(g+f)x'^2 + (f-g)(x+x'')x']} dx' \quad (29)$$

De nuevo completando cuadrados en el exponente de la función en el integrando y resolviendo la integral gaussiana, se obtiene

$$\rho(x, x'', 2\beta) = c^2 e^{-\frac{(g+f)}{2} (x^2 + x''^2)} e^{-\frac{(f-g)^2 (x+x'')^2}{4(g+f)}} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} &\int e^{-\left[\sqrt{(g+f)}x' + \frac{(f-g)(x+x'')}{2\sqrt{(g+f)}} \right]^2} dx' \\ &= c^2 e^{-\frac{(g+f)}{2} (x^2 + x''^2)} e^{-\frac{(f-g)^2 (x+x'')^2}{4(g+f)}} \end{aligned} \quad (31)$$

$$\sqrt{\frac{\pi}{g+f}} \quad (32)$$

Llamando

$$c(2\beta) = c^2 \sqrt{\frac{\pi}{g+f}}$$

entonces

$$\rho(x, x'', 2\beta) = c(2\beta) e^{-\frac{(x+x'')^2}{2} f(2\beta) - \frac{(x-x'')^2}{2} g(2\beta)} \quad (33)$$

en donde $f(2\beta)$ y $g(2\beta)$ se obtienen usando las relaciones en 20

$$\begin{aligned} f(2\beta) &= \left[\frac{f+g}{2} - \frac{(f-g)^2}{2(f+g)} \right] \\ g(2\beta) &= \frac{f+g}{2} \end{aligned} \quad (34)$$

Veamos que

$$g(2\beta) = \frac{f+g}{2} = \frac{\frac{1}{4g} + g}{2} \quad (35)$$

La función que satisface 35 es

$$g(\beta) = \frac{1}{2} \coth(\beta/2) = \frac{1}{2} \frac{1}{\tanh(\beta/2)} \quad (36)$$

Donde los $H_n(x)$ son los polinomios de Hermite. En el estado base

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}}} H_0(x) e^{-\frac{x^2}{2}} = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (45)$$

La probabilidad de encontrar la partícula en una posición dada es $|\Psi_0(x)|^2 = 1/\sqrt{\pi} e^{-x^2}$, que coincide justamente con la ecuación 43, encontrada a partir de la matriz densidad.

3. Muestreo de Monte Carlo

3.1. Bajas Temperaturas ($T \rightarrow 0$)

Como se demostró en la sección anterior, para una partícula cuántica en el estado base, la probabilidad de que esté en una posición x dada es

$$\Pi(x)_{cuantica} = |\psi_0(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (46)$$

Se muestrearon las posiciones x de un oscilador armónico cuántico en una dimensión, con probabilidad $\Pi(x)$, usando un método de Monte Carlo, en particular una cadena de Markov. Se desarrolló un código en Python para graficar el histograma de la distribución de probabilidad $\Pi(x)$ muestreada usando el algoritmo Metropolis y la curva teórica. El muestreo consiste en generar posiciones distintas a partir de un número aleatorio, es decir, se arranca en la posición $x = 0$, se genera un número aleatorio uniformemente distribuido dentro de cierto intervalo, en este caso $[-0.5, 0.5]$, y se le suma a la posición x , eso genera una nueva posición. Posteriormente se decide si dicha posición hará parte del muestreo o no. Esta decisión se toma generando un número aleatorio y viendo si satisface que el número sea menor que $|\Psi(x')|^2/|\Psi(x)|^2$. El código se muestra a continuación

```
#Distribución de probabilidad

def probability(x):
    return (1/np.sqrt(np.pi))*np.exp(-x**2)

#Muestreo usando algoritmo Metropolis

x_sample=[]

x= 0.0
delta = 0.5
niter = 100000

for k in range(niter):

    x_new = x + random.uniform(-delta,delta)

    Px_new = probability(x_new)
    Px = probability(x)
```

```
if random.uniform(0.0,1.0) < (Px_new / Px):
    x = x_new

    x_sample.append(x)
```

```
xs = np.arange(-3.0, 3.0, 0.0001)
```

```
fi = probability(xs)
```

```
#histograma
```

```
n_bins = int(np.sqrt(len(x_sample))/4)
```

```
plt.hist(x_sample)
```

```
#curva teórica
```

```
plt.plot(xs,fi)
```

Los resultados obtenidos con el código se muestran en la figura 1.

3.2. Temperatura Finita

3.2.1. Transición $x \rightarrow x'$

En este caso se muestreó la probabilidad de transición de la partícula cuántica desde una posición x a una posición x' independientemente del nivel de energía, usando el algoritmo de Metropolis, pero con un criterio de aceptación distinto. Está vez, se aceptó la movida si el número aleatorio generado entre 0 y 1 era menor al mínimo entre 1 y $|\Psi_n(x')|^2/|\Psi_n(x)|^2$. En el código que se describe a continuación se define la función de onda para el estado base, el primer estado excitado y para los estados excitados superiores a través de las funciones de onda con la relación de recurrencia

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{n}} x \Psi_{n-1}(x) - \sqrt{\frac{n-1}{n}} \Psi_{n-2}(x) \quad (47)$$

Este muestreo se hizo para cuatro niveles de energía: E_0 , E_1 , E_2 y E_3 .

```
#definición general de las funciones de onda
```

```
def WaveFunc(x,n):
```

```
    Psi = []
```

```
    #estado base
```

```
    Psi.append ( np.exp(-x**2/2.0) / np.pi** 0.25 )
```

```
    #primer estado excitado
```

```
    Psi.append ( np.sqrt(2.0) * x * Psi[0] )
```

```
    #estados excitados (recursión):
```

```
    for m in range (2, n+2):
```

```

Psi.append(np.sqrt(2/m) * x * \
Psi[m-1] - np.sqrt((m-1)/m) * Psi[m-2])
return (Psi[n])

#transición de x a x' independiente de n,
#para 4 niveles de energía

n_states = 4
xiter= 100000
x = 0.0
delta = 0.5

n_bins = int(np.sqrt(len(x_sample))/4)

xs = np.arange(-5.0, 5.0, 0.0001)

for n in range(n_states):
    x_sample = []

    for k in range(xiter):
        x_new = x + random.uniform(-delta,delta)

        Px      = WaveFunc(x, n)
        Px_new  = WaveFunc(x_new, n)

        if random.uniform(0.0,1.0) < \
            min(1, (Px_new/Px)**2):
            x = x_new
            x_sample.append(x)

    #graficas para cada n

    plt.hist(x_sample, bins=n_bins, normed=True)
    plt.plot(xs, WaveFunc(xs,n)**2)

```

Los histogramas obtenidos para cada nivel, comparados con las curvas teóricas se muestran en las figuras 3 y 4.

3.2.2. Transición $n \rightarrow m$

Ahora se considera también la probabilidad de transición entre niveles energéticos. Para ello consideramos la partícula en un estado inicial descrito por la posición $x = 0$ y el estado base $n = 0$. Primero se consideran movidas de transición de x a x' como se hizo en la sección anterior, con probabilidad de aceptación de Metropolis dada por $\min(1, |\Psi_n(x')|^2/|\Psi_n(x)|^2)$. Después, sea que la partícula transite a x' o que se quede en x , en la posición en la que esté, se considera una posible transición del nivel de energía n al m , pero esta vez, la probabilidad de aceptación de Metropolis está dada por $\min(1, \frac{|\Psi_m(x)|^2}{|\Psi_n(x)|^2} e^{-\beta \Delta E})$. Para la parte de la transición entre niveles de energía, se genera un número aleatorio entero, del intervalo $[-1, 1]$. Ese número será el cambio en la energía entre el nivel anterior y el próximo

nivel. Así, con $\hbar = \omega = 1$, se tiene que

$$\Delta E = E_m - E_n = \left(\frac{1}{2} + m\right) - \left(\frac{1}{2} + n\right) = m - n \quad (48)$$

$$m = n + \Delta E$$

Aquí, se tiene en cuenta que cuando $\Delta E < 0$ la transición siempre será aceptada, pues este caso representa una transición a un nivel de menor energía. El criterio de aceptación sólo se evalúa en el caso $\Delta E > 0$, pues allí se da una transición a un nivel de mayor energía que tiene una probabilidad de ocurrencia no nula.

Se desarrolló un código en Python en el que se estiman las posiciones y niveles muestreados con el algoritmo de Metropolis, que se muestra a continuación.

```

#definición general de las funciones de onda

def WaveFunc(x,n):
    Psi = []

    #estado base
    Psi.append ( np.exp(-x**2/2.0) / np.pi** 0.25 )

    #primer estado excitado
    Psi.append ( np.sqrt(2.0) * x * Psi[0] )

    #estados excitados (recursión):
    for m in range (2, n+2):
        Psi.append(np.sqrt(2/m) * x * \
        Psi[m-1] - np.sqrt((m-1)/m) * Psi[m-2])
    return (Psi[n])

#definición de probabilidades exactas

def quantum_probability(x,b):
    Pi_quantum = np.sqrt(np.tanh(b/2.0)/np.pi)\
        *np.exp(-(x**2)*(np.tanh(b/2.0)))
    return Pi_quantum

def classic_probability(x,b):
    Pi_classic = \
    np.sqrt(b/(2*np.pi))*np.exp(-(b*(x**2))/2.0)
    return Pi_classic

#transición de x a x'

def jump_x(x,n):
    x_new = x + random.uniform(-delta,delta)
    Phix   = WaveFunc(x, n)
    Phix_new = WaveFunc(x_new, n)
    if random.uniform(0.0,1.0) < \
        min(1, (Phix_new/Phix)**2):
        return x_new

```

```

else:
    return x

#probabilidad de que estando en x,
#transite de n a m

def jump_n(x,n,beta):
    deltaE = np.random.choice([-1,1])
    n_new = n + deltaE

    #no considere niveles negativos
    if n_new < 0:
        return n

    #la probabilidad de transición a
    #un estado de menor energía es 1:
    if deltaE < 0:
        return n_new

    #si es un nivel energético mayor
    #se evalua el criterio de aceptación
    Phin = WaveFunc(x, n)
    Phin_new = WaveFunc(x,n_new)

    if random.uniform(0.0,1.0) < \
min(1, ((Phin_new/Phin)**2)*\
np.exp(-beta*(deltaE))):
        return n_new
    else:
        return n

#transición de x->x' y n->m

#Estado inicial
x = 0.0
n = 0

xs_points = np.arange(-8, 8, 0.01)
Beta = [0.2,1,5]

Xs = [x]
Ns = [n]

n_bins = 100

k_iter = 100000

for b in Beta:
    print(r"$\beta = %0.2f$" % b)
    for k in range(k_iter):

        #evaluar posibilidad
        #de transición x a x'
        x = jump_x(x,n)

```

```

#sea que se quedó en x
#o que transitó a x', evaluar posibilidad
#de transición energética n a m
n = jump_n(x,n,b)

Xs.append(x)
Ns.append(n)

#grafica del camino aleatorio
plt.plot(Xs,Ns)

#histograma energías
plt.hist(Ns, bins=n_bins, normed=True)

#para graficar las funciones exactas:
y_quantum = quantum_probability(xs_points,b)

y_classic = classic_probability(xs_points,b)

#histograma posiciones
plt.hist(Xs, bins=n_bins, normed=True)

#funciones teóricas: cuántica y clásica
plt.plot(xs_points, y_quantum)
plt.plot(xs_points,y_classic)

```

Los resultados obtenidos con el código descrito se muestran en la sección 4.2.2.

4. Resultados y Discusión

4.1. Baja Temperatura ($T \rightarrow 0$)

La figura 1 muestra el histograma de posiciones generado con el algoritmo Metropolis. Se observa que la curva teórica para la distribución de probabilidad coincide muy bien con el muestreo. El pico en la distribución indica que es más probable encontrar la partícula en posiciones cercanas a $x = 0$ cuando se encuentra en el estado baje, que correspondería al mínimo de energía. Aunque la mecánica cuántica no nos da información sobre la temperatura del sistema, podemos hacer una relación con la distribución de probabilidad encontrada en el límite de bajas temperaturas en la sección 2, esa distribución coincide justamente con el módulo cuadrado de la función de onda de la partícula en el estado base: $\Pi(x) = |\Psi_0(x)|^2$.

4.2. Temperatura Finita

4.2.1. Transición $x \rightarrow x'$

En las figuras 3 y 4 se muestran los histogramas obtenidos para una partícula cuántica en un potencial armónico a temperatura finita, para el estado pase y para los demas estados excitados, respectivamente. El muestreo de Metropolis

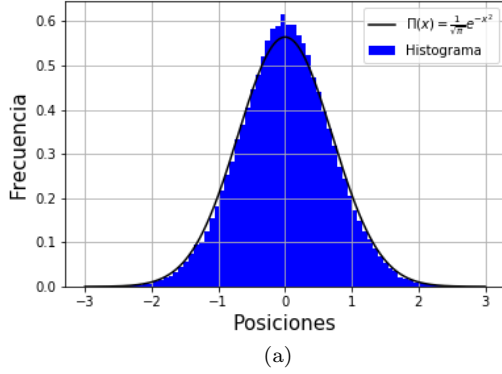


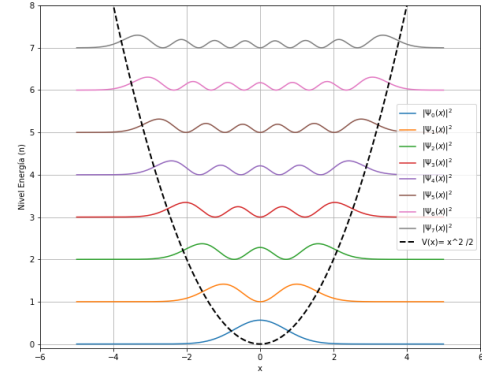
Figura 1: Oscilador armónico cuántico en el estado base: Muestreo de posiciones con el algoritmo Metropolis (histograma) y curva teórica

arroja resultados con buena precisión al compararse con las curvas teóricas. Se observa que cuando vamos hacia niveles excitados, la distribución de probabilidad ya presenta varios picos. La figura 4a corresponde al primer estado excitado $n = 1$ y se observa que la distribución tiene dos picos pero que para la probabilidad de encontrar la partícula en la posición $x = 0$ (o muy cerca) es casi nula. Esto es un efecto puramente cuántico sin análogo clásico y es un indicador de que a medida que aumenta la temperatura, es más difícil localizar la partícula. Para el estado excitado $n = 2$, la distribución tiene tres picos y se nota que ahora la probabilidad de encontrarla cerca a $x = 0$ tiene una probabilidad no nula, es decir aumentó respecto al nivel $n = 1$. Así, para niveles de excitación más altos empiezan a aparecer más picos, de modo que para energías altas la partícula no se puede localizar y se acerca al comportamiento de una partícula libre, el pico en los extremos es más mayor, es decir, allí siempre es un poco más probable encontrarla.. Este comportamiento se observa en la gráfica 2 en donde se han graficado las probabilidades teóricas $|\Psi_n(x)|^2$ del oscilador armónico, para ocho niveles de energía.

4.2.2. Transición $x \rightarrow x'$ y $n \rightarrow m$

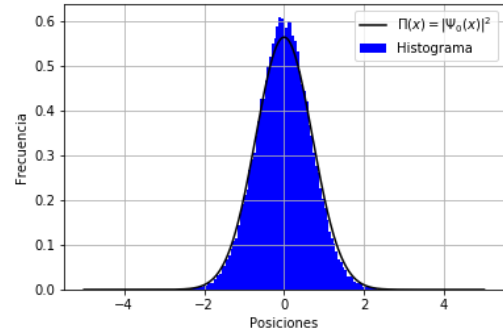
Con el código descrito en la sección 3.2.2 se realizaron histogramas y sobre ellos se graficaron las curvas teóricas para la probabilidad de que la partícula esté en la posición x en el caso clásico y el cuántico, $\Pi(x)_{clásica}$ (ecuación 2) y $\Pi(x)_{cuántica}$ (ecuación 42), respectivamente. Esto se hizo para distintas temperaturas inversas, determinadas por $\beta = 0,2, 1, 5$. El muestreo tiene buenos resultados para bajas temperaturas (β grande), sin embargo, a altas temperaturas el histograma se aleja mucho de la curva teórica cuántica. En la figura 8 se puede ver que para $\beta = 20$ el histograma y la curva coinciden más que en los demás casos.

La figura 5 muestra el caso $\beta = 0,2$, y se observa que las curvas teóricas en el caso clásico y cuántico coinciden (altas



(a)

Figura 2: Distribución de probabilidad para la partícula en ocho niveles de energía comparados con la curva del potencial armónico al que está sometida.



(a)

Figura 3: Distribución de probabilidad para el oscilador armónico cuántico con el algoritmo Metropolis (histograma) y curva teórica en el estado base ($n = 0$)

temperaturas), pero a medida que β aumenta (T disminuye), la curva clásica (en rojo) va tomando la forma de una delta de dirac, se va cerrando, indicando que a bajas temperaturas es mas probable localizar la partícula en $x = 0$. La curva cuántica (en negro) también se cierra pero menos pronunciadamente. En esa situación el histograma de energías muestra que los el nivel más probable es el estado base, pero a medida que aumenta la temperatura (β disminuye) la frecuencia de niveles excitados aumenta (5b) Es importante notar que los histogramas que represnetan la distribución de probabilidad muestreada a temperaturas altas (β pequeño), ahora no son distribuciones con varios picos como se observó en la sección anterior (4.2.1). Esto se debe a qué en este caso se considera también la probabilidad de transición entre niveles energéticos, quiere decir, la partícula que está en un baño térmico, ahora puede cambiar de nivel de energía dependiendo de la temperatura del baño. En la sección 4.2.1

se estimaba la probabilidad de estar en una posición dado un nivel de energía fijo.

En la figura 10 se muestra el camino aleatorio seguido por la partícula en el caso $\beta = 0,2$ y $\beta = 5$. Allí se observa que en el límite de muchas iteraciones, el muestreo de metropolis va reproduciendo la forma teórica del potencial armónico $V(x) = x^2/2$ solo cuándo el muestreo se hace para muchas iteraciones. En la figura 9 vemos que el muestreo con 100 iteraciones difícilmente reproduce el camino seguido la partícula a distintas temperaturas.

5. Conclusiones

Concluimos que los métodos de Monte Carlo, en particular el muestreo de Metropolis coincide con la curva teórica para la distribución de probabilidad $\Pi(x)$ que representa la probabilidad de encontrar la partícula en una posición dada x en el estado base y para un estado excitado dado, independientemente de la temperatura. El muestreo es adecuado sólo en el límite de muchas iteraciones. Concluimos que reproduce con buena precisión dicha distribución para un oscilador armónico cuántico a bajas temperaturas. El muestreo sólo se acerca a la curva teórica cuando β es muy grande, es decir que para altas temperaturas el muestreo empieza a distanciarse considerablemente del valor teórico esperado.

6. Agradecimientos

Agradezco especialmente a los profesores César Barrero y Johans Restrepo por sus lecciones de física estadística. A Johans Restrepo en particular por sus lecciones sobre las propiedades de la matriz densidad y el comportamiento de sistemas cuánticos bajo un potencial de interacción. A Santiago Quintero por su ayuda sobre herramientas en el lenguaje de programación Python.

Referencias

W. Greiner, L. Neise, and H. Stöcker. *Thermodynamics and statistical mechanics*. Springer Science & Business Media, 2012.

W. Krauth. *Statistical mechanics: algorithms and computations*, volume 13. OUP Oxford, 2006.

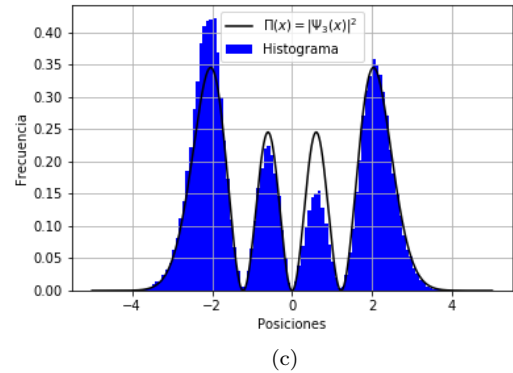
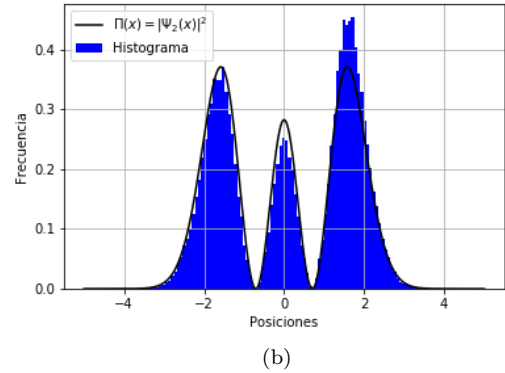
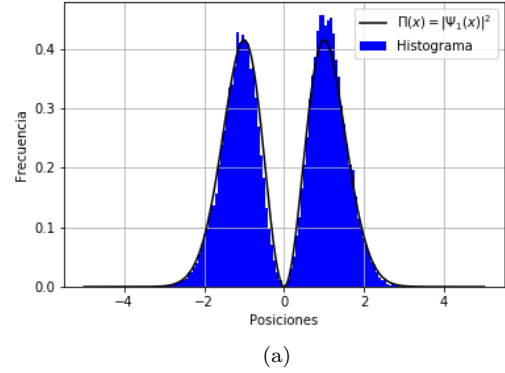
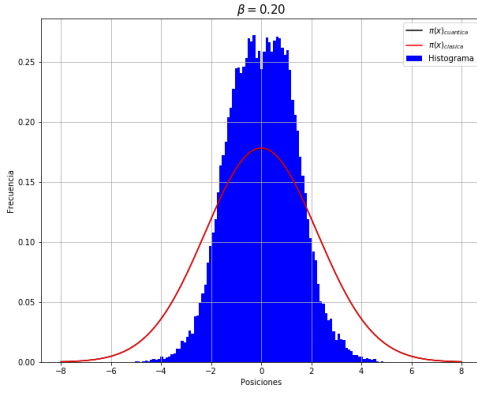
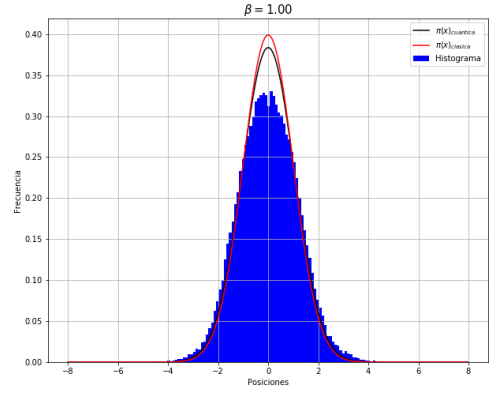


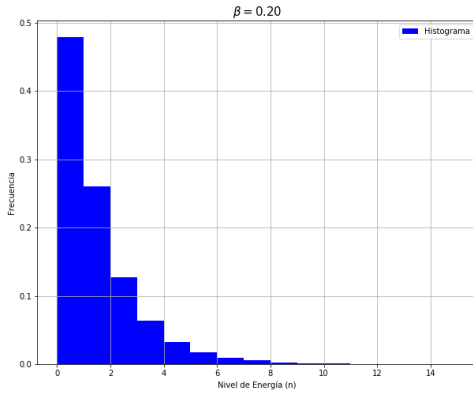
Figura 4: Distribución de probabilidad para el oscilador armónico cuántico con el algoritmo Metropolis (histograma) y curva teórica en los niveles excitados (b): $n = 1$, (c): $n = 2$ y (d): $n = 3$



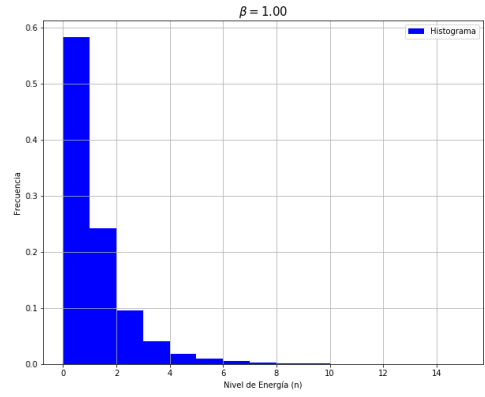
(a)



(a)



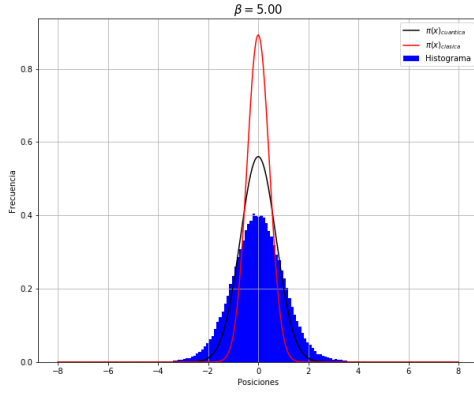
(b)



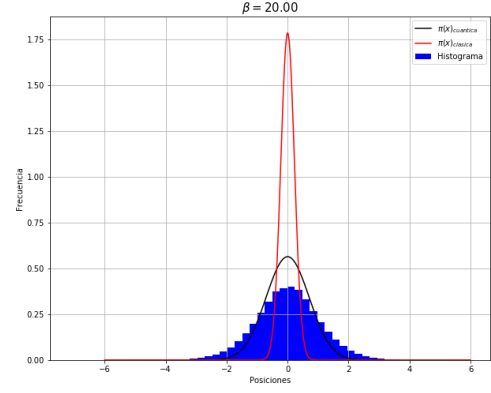
(b)

Figura 5: (a) Distribución de probabilidad de transición para el oscilador armónico cuántico con el algoritmo Metropolis (histograma) y curva teórica en los niveles excitados. (b) Histograma de niveles de energía.

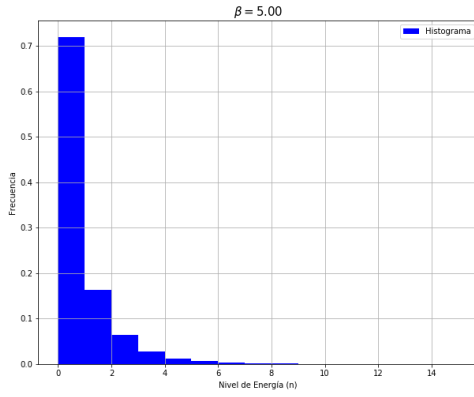
Figura 6: (a) Distribución de probabilidad de transición para el oscilador armónico cuántico con el algoritmo Metropolis (histograma) y curva teórica en los niveles excitados. (b) Histograma de niveles de energía.



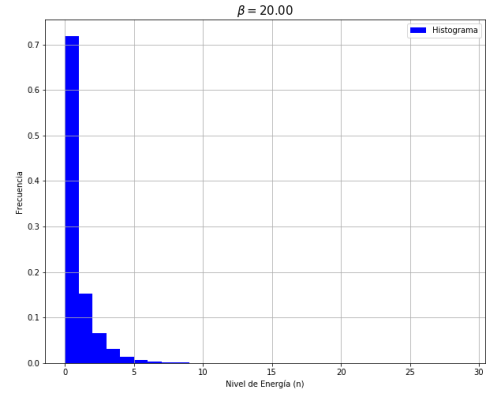
(a)



(a)



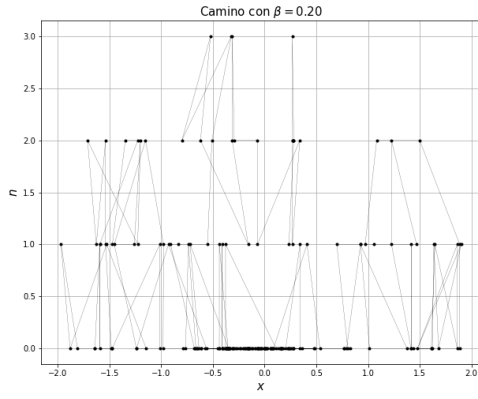
(b)



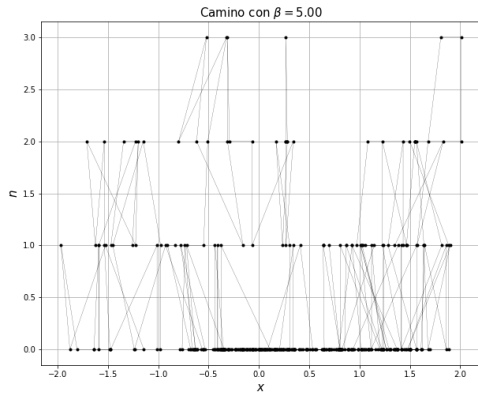
(b)

Figura 7: (a) Distribución de probabilidad de transición para el oscilador armónico cuántico con el algoritmo Metropolis (histograma) y curva teórica en los niveles excitados. (b) Histograma de niveles de energía.

Figura 8: (a) Distribución de probabilidad de transición para el oscilador armónico a muy bajas temperaturas, es decir, con $\beta = 20,0$ (b) Histograma de niveles de energía.

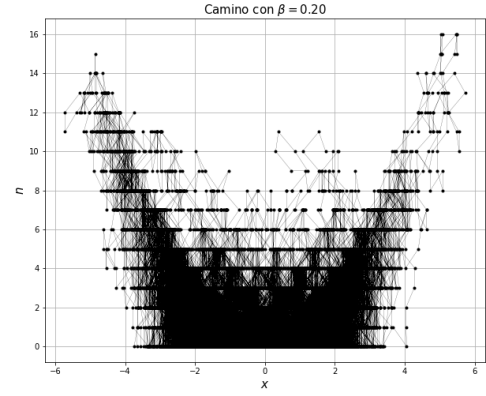


(a)

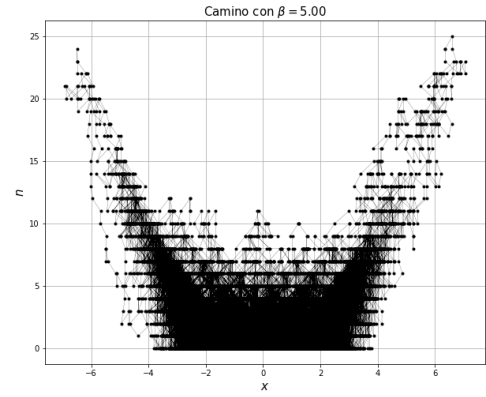


(b)

Figura 9: Grafica del camino aleatorio seguido por la partícula cuántica con temperatura dado por $T = 1/\beta$ con $\beta = 0,2$ usando el algoritmo de Metropolis para 100 iteraciones.



(a)



(b)

Figura 10: Grafica del camino aleatorio seguido por la partícula cuántica con temperatura dado por $T = 1/\beta$ con $\beta = 0,2$ usando el algoritmo de Metropolis para 100000 iteraciones.