Tarea #2. Quantum Monte Carlo. Partícula en un potencial armónico

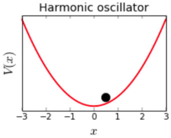
Johans Restrepo Cárdenas

Instituto de Física. Universidad de Antioquia.

9 de abril de 2025

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

Inicialmente considere una partícula en un potencial armónico $V(x) = x^2/2$ (con unidades reducidas) 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
import numpy as np

x = 0.0
delta = 0.5
n_steps = 100000
for k in range(n_steps):
    x_new = x + random.uniform(-delta,delta) #Markov procedure
    if random.uniform(0.0,1.0) < \
        np.abs(psi(x_new,n))**2/np.abs(psi(x,n))**2 #psi's must be defined
        x = x_new #must be appended to a list for the histogram
    print x
```

Figura: Markov-chain Monte Carlo Metropolis algorithm

Corra su programa, comente y explique cada sección del mismo, 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 donde 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 y explicar cada sección, 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.

Partícula en un potencial armónico a temperatura finita

Finalmente, defina dentro de su programa un diccionario o lista para obtener el histograma de las energías (diferente del histograma de las posiciones) para **tres** diferentes valores de $\beta > 0{,}1$, y responder las siguientes preguntas:

- Es posible definir una temperatura del baño que permita la sintonización del oscilador en un nivel de energía excitado dado con una mayor recurrencia?
- Cuál sería el ancho de la distribución de dicho histograma en cada caso, y cómo variaría dicho ancho (a la altura media FWHM) con la temperatura?
- Qué se puede concluir a partir de los histogramas obtenidos?
- **IMPORTANTE**: Modifique su programa para solucionar el problema de un pozo cuántico infinito de potencial con baño térmico, en lugar de un oscilador armónico.

Sobre el informe. Puede escribirse dentro de un notebook de jupyter (markdown)

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