

PATH-INTEGRAL E H.Q. STATISTICACONVENZIONI E RIASSUNTO H.Q.

$q, p$  = operatori posizione, impulso

autostati posizione:  $|x\rangle$  t.c.  $q|x\rangle = x|x\rangle$ ,  $\langle x|x'\rangle = \delta(x-x')$ , quindi  $\int dx |x\rangle \langle x| = 1$

autostati impulso:  $|k\rangle$  t.c.  $p|k\rangle = \hbar k|k\rangle$ ,  $\langle k|k'\rangle = \delta(k-k')$ , quindi  $\int dk |k\rangle \langle k| = 1$

$$\langle x|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad \langle k|k'\rangle = \int dx \langle k|x\rangle \langle x|k'\rangle = \int dx \frac{1}{2\pi} \cancel{\int dx e^{-ix(k-k')}} = \delta(k-k')$$

$$\text{e analogamente } \int dk \langle x|k\rangle \langle k|x'\rangle = \int dk \frac{1}{2\pi} e^{i(x-x')} = \delta(x-x') = \langle x|x'\rangle \text{ quindi } \int dk |k\rangle \langle k| = 1$$

Considereremo sempre Hamiltoniane indipendenti dal tempo, quindi  $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle$

e in rapp. di Heisenberg l'evoluzione degli operatori è  $O_H(t) = e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar}$  per fare in modo che  $\langle \psi(t)|O|\psi(t)\rangle = \langle \psi(0)|O_H(t)|\psi(0)\rangle$

$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \langle x_b | e^{-iH(t_b-t_a)/\hbar} | x_a \rangle$  = ampiata per passare dall'autostato  $x_a$  al tempo  $t_a$  all'autostato  $x_b$  al tempo  $t_b$  (spesso chiamata propagatore). È il punto di partenza standard per la riscrittura tramite path-integral in tempo reale ("Minkowsiano" nel caso delle teorie di campo), vedi ad es.

FEYNMAN, HIBBS "Quantum mechanics and path-integrals"

SCHULMAN "Techniques and applications of path-integration"

ZINN-JUSTIN "Path-integrals in quantum mechanics"

Noi introdurremo il path-integral direttamente in meccanica quantistica statistica, che è il contesto in cui il path-integral può essere stimato numericamente. Queste case si chiama di solito a tempi immaginari per motivi che si capiscono dopo ("Euclides" in Teoria di campo) e può anche essere trattato in modo molto più accurato dal punto di vista matematico, vedi ad es.

SIMON "Functional integration and quantum physics"

o qualunque riferenza di processi stocastici (path-integral euclides = misura di Wiener).

H.Q. STATISTICA E PATH-INTEGRAL

Si dichiara con  $|i\rangle$  un generico autostato dell'energia ( $H|i\rangle = E_i|i\rangle$ ) e con  $\beta$  la temperatura inversa  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , allora lo stato  $|i\rangle$  ha pess statistiche  $P_i = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta E_i}$ , dove

$$Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} \text{ è la funzione di partitione del sistema.}$$

Dato una generica osservabile  $O$  siamo interessati a calcolare  $\langle O \rangle$  e si ha

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\beta E_i} \langle i|O|i\rangle = \frac{1}{Z} \sum_i \langle i|O e^{-\beta H}|i\rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(O e^{-\beta H})$$

$$\text{e analogamente } Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_i \langle i|e^{-\beta H}|i\rangle = \text{Tr}(e^{-\beta H}).$$

Riscriviamo ora la funzione di partizione come path-integrale scrivendo la traccia nella base di autostati della posizione e inserendo delle relazioni di completezza:

$$\text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int d\mathbf{x} \langle \mathbf{x} | e^{-\beta H} | \mathbf{x} \rangle = \int d\mathbf{x} dx_1 \cdots dx_{N-1} \langle \mathbf{x} | e^{-H\bar{\delta}} | x_1 \rangle \langle x_1 | \cdots | x_{N-1} \rangle \langle x_{N-1} | e^{-H\bar{\delta}} | \mathbf{x} \rangle$$

dove  $\bar{\delta} = \beta/N$  e sono state usate  $N-1$  relazioni di completezza.

Supponiamo ora che la Hamiltoniana sia della forma  $H = K(p) + V(q)$ , con  $K(p) = \frac{1}{2m} p^2$ . Per  $\bar{\delta}$  "piccole" si può usare BCH:  $e^{-V\bar{\delta}} e^{-K\bar{\delta}} = e^{-(K+V)\bar{\delta}} + O(\bar{\delta}^2)$ , e quindi

$$\begin{aligned} \langle x_i | e^{-H\bar{\delta}} | x_{i+1} \rangle &\approx \langle x_i | e^{-V\bar{\delta}} e^{-K\bar{\delta}} | x_{i+1} \rangle = \int dy \underbrace{\langle x_i | e^{-V\bar{\delta}} | y \rangle}_{e^{-V(x_i)\bar{\delta}}} \underbrace{\langle y | e^{-K\bar{\delta}} | x_{i+1} \rangle}_{e^{-K(y-x_i)\bar{\delta}}} = \\ &= e^{-V(x_i)\bar{\delta}} \langle x_i | e^{-K\bar{\delta}} | x_{i+1} \rangle \end{aligned}$$

$$\langle y | e^{-K(p)\bar{\delta}} | z \rangle = \int dk_1 dk_2 \langle y | k_1 \rangle \langle k_1 | e^{-K(p)\bar{\delta}} | k_2 \rangle \langle k_2 | z \rangle =$$

$$\begin{aligned} &= \int dk_1 dk_2 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_1 y} e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\bar{\delta}} \delta(k_1 - k_2) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ik_2 z} = \int dk \frac{1}{2\pi} e^{ik(y-z)} e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\bar{\delta}} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{8\pi m}{\hbar^2 \bar{\delta}}} e^{-\frac{m}{2\hbar^2 \bar{\delta}}(y-z)^2} \quad \int e^{-\alpha t^2 + \beta t} dt = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \end{aligned}$$

quindi riunendo insieme i due passi abbiamo

$$\langle x_i | e^{-H\bar{\delta}} | x_{i+1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi \hbar^2 \bar{\delta}}} e^{-V(x_i)\bar{\delta}} - \frac{m}{2\hbar^2 \bar{\delta}} (x_{i+1} - x_i)^2$$

Abbiamo quindi, nel limite  $N \rightarrow \infty$  (che sottointenderemo), la rular.

$$\text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int d\mathbf{x} dx_1 \cdots dx_{N-1} \left( \frac{m}{2\pi \hbar^2 \bar{\delta}} \right)^{N/2} \exp \left\{ -\bar{\delta} \sum_{i=0}^{N-1} \left[ V(x_i) + \frac{m}{2\hbar^2 \bar{\delta}^2} (x_{i+1} - x_i)^2 \right] \right\}$$

ovvero si è introdotto la notazione  $x_0 = x_N = x$  nell'exp e ricordiamo che  $\beta = N\bar{\delta}$ .

Introducendo  $\bar{s} = \bar{\delta} \hbar = \frac{1}{N} \beta \hbar$  (che ha le dimensioni di un tempo) si ha

$$\text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int d\mathbf{x}_0 dx_1 \cdots dx_{N-1} \left( \frac{m}{2\pi \hbar \bar{s}} \right)^{N/2} \exp \left\{ -\bar{s} \sum_{i=0}^{N-1} \left[ V(x_i) + \frac{m}{2\bar{s}^2} (x_{i+1} - x_i)^2 \right] \right\}$$

$$\bar{s} \sum_{i=0}^{N-1} \left[ V(x_i) + \frac{m}{2\bar{s}^2} (x_{i+1} - x_i)^2 \right] \simeq \int_0^{\beta \hbar} (V(x(z)) + \frac{m}{2} \dot{x}^2(z)) dz \equiv S_E[x(z)]$$

e si scrive formalmente  $\text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int D[x(z)] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x(z)]}$ , dove la condizione di periodicità è in ricordo di  $T_z$ .

Si fosse partiti dall'evoluzione temporale si sarebbero ottenuti integrali Gaussiani complessi (integrali di Fresnel) e si sarebbe arrivati a un integrale di

$$\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^{t_0-t_a} \left( \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right) dt \right\} = \exp \left\{ + \frac{i}{\hbar} \int_0^{t_0} S[x(t)] \right\} \text{ con un integrale senza } L[x(t)]$$

condizioni periodiche ma con bordi fissati. Con la sostituz. semplice  $t \rightarrow -iz$  si ha

$$\left( \frac{dx}{dt} \right)^2 \rightarrow - \left( \frac{dx}{dz} \right)^2 \quad \text{e} \quad e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_0} S[x(t)]} \rightarrow e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x(z)]}$$

Ripetendo il procedimento precedente per qualunque  $f(q)$  si ottiene

$$\text{Tr}(e^{-\beta H} f(q)) = \int_{x(0)=x(\beta h)} D[x(z)] f(x(0)) e^{-\frac{1}{h} S_E[x(z)]}$$

in quanto  $\langle x | e^{-\beta H} f(q) | x \rangle = f(x) \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle$  e  $x$  divenuta  $x(0)$  nel path-integrale.

Più complicati sono i valori di aspettazione di quantità che dipendono dai momenti:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(e^{-\beta H} g(p)) &= \int dk \langle k | e^{-\beta H} g(p) | k \rangle = \int dk g(\hbar k) \langle k | e^{-\beta H} | k \rangle = \\ &= \int dk dx dy g(\hbar k) \langle k | x \rangle \langle x | e^{-\beta H} | y \rangle \langle y | k \rangle = \int dk dx dy \frac{1}{2\pi} e^{i(y-x)k} g(\hbar k) \langle x | e^{-\beta H} | y \rangle = \\ &= \int dx dy \langle x | e^{-\beta H} | y \rangle \tilde{g}(y-x) \stackrel{y=x+z}{=} \int dx dz \langle x | e^{-\beta H} | x+z \rangle \tilde{g}(z) \end{aligned}$$

Consideriamo il caso particolarmente importante  $g(p) = p^2$ , allora

$$\tilde{g}(z) = \frac{1}{2\pi} \int \hbar^2 k^2 e^{ikz} dk = -\hbar^2 \frac{d^2}{dz^2} \frac{1}{2\pi} \int e^{ikz} dk = -\hbar^2 \tilde{\delta}''(z)$$

e usando l'espressione path-integrale di  $\langle x | e^{-\beta H} | x+z \rangle$  si trova

$$\text{Tr}(e^{-\beta H} p^2) = -\hbar^2 \int dx dz \langle x | e^{-\beta H} | x+z \rangle \tilde{\delta}''(z) = -\hbar^2 \int dx dz \frac{d^2}{dz^2} (\langle x | e^{-\beta H} | x+z \rangle) \tilde{\delta}(z) =$$

$$= -\hbar^2 \int dx dz \frac{d}{dz} \left\{ \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left( \frac{m}{2\pi\hbar\tilde{\delta}} \right)^{N/2} \left( -\frac{m}{\hbar\tilde{\delta}} (x+z - x_{N-1}) \right) e^{-\frac{1}{h} S_E} \right\} \tilde{\delta}(z) =$$

$$= -\hbar^2 \int dx dz \int dx_1 \dots dx_{N-1} \left( \frac{m}{2\pi\hbar\tilde{\delta}} \right)^{N/2} \left( -\frac{m}{\hbar\tilde{\delta}} + \left( \frac{m}{\hbar\tilde{\delta}} \right)^2 (x+z - x_{N-1})^2 \right) e^{-\frac{1}{h} S_E} \tilde{\delta}(z) =$$

$$= \int dx dx_1 \dots dx_{N-1} \left( \frac{m}{2\pi\hbar\tilde{\delta}} \right)^{N/2} \left\{ \frac{m\hbar}{\tilde{\delta}} - m^2 \left( \frac{x-x_{N-1}}{\tilde{\delta}} \right)^2 \right\} e^{-\frac{1}{h} S_E}$$

$$x(0)=x(\hbar\beta)$$

$$\approx \int \left\{ \frac{m\hbar}{\tilde{\delta}} - m^2 \tilde{x}^2(\hbar\beta) \right\} e^{-\frac{1}{h} S_E} D[x(z)]$$

$$x(0)=x(\hbar\beta)$$

trascuro termini di ordine  $\tilde{\delta}$   
perché il primo termine diverge,  
quindi la scrittura seguente è solo formale,  
non si può fare il limite solo del  
secondo termine

Dal fatto che  $\text{Tr}(p^2 e^{-\beta H})$  esiste, segue che il path-integrale di  $\tilde{x}^2$  diverge, cosa che indica che i communi del path-integrale non sono  $C^1$ .

Per i valori medi si ha quindi (considerando osservabili dipendenti solo da  $q$  per semplicità)

$$\langle O(q) \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} O)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \frac{\int_{x(0)=x(\beta h)} O(x(0)) e^{-\frac{1}{h} S_E} D[x(z)]}{\int_{x(0)=x(\beta h)} e^{-\frac{S_E}{h}} D[x(z)]}$$

cosa interpretabile come il fatto che il commone  $x(z)$  ha prob.

che potrà essere campionata con un Monte-Carlo.

Considerando il limite per  $\beta \rightarrow \infty$  si ottengono i valori medi sulle state fondamentali

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle O \rangle = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} O)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\langle 0|0\rangle e^{-\beta E_0} + \langle 1|0\rangle e^{-\beta E_1} + \dots}{\langle 0|0\rangle e^{-\beta E_0} + \langle 1|0\rangle e^{-\beta E_1} + \dots} = \langle 0|0\rangle$$

dove si è supposto  $E_0 < E_1 < \dots$

$$\frac{e^{-\frac{1}{h} S_E[x(z)]}}{\int_{x(0)=x(\beta h)} e^{-\frac{S_E}{h}} D[x(z)]}$$

Nel limite  $\beta \rightarrow 0$  si deve invece ottenere la funzione di partizione classica.

Usando  $x_i = x + \lambda_B y_i$  con  $\lambda_B = \sqrt{\frac{\beta \hbar^2}{m}}$  per  $i=1, \dots, N-1$  si ha

$$\text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int dx dy_1 \dots dy_{N-1} \lambda_B^{N-1} \left( \frac{m}{2\pi\hbar\bar{s}} \right)^{N/2} \exp \left\{ -\frac{\bar{s}}{\hbar} [V(x) + \sum_{i=1}^{N-1} V(x + \lambda_B y_i)] + \frac{m}{2\pi\hbar\bar{s}} \lambda_B^2 \left( y_1^2 + \sum_{i=1}^{N-2} (y_{i+1} - y_i)^2 + y_{N-1}^2 \right) \right\}$$

Usando  $y_0 = 0$  per semplificare la nota.

$$\begin{aligned} e^{-\frac{\bar{s}}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} V(x + \lambda_B y_i)} &= e^{-\frac{\bar{s}}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} (V(x) + V'(x) \lambda_B y_i + \frac{1}{2} V''(x) \lambda_B^2 y_i^2 + \dots)} = \\ &= e^{-\frac{\bar{s}N}{\hbar} V(x)} \underbrace{\left( 1 - V'(x) \frac{\lambda_B \bar{s}}{\hbar} \sum_i y_i + \frac{1}{2} V'(x)^2 \frac{\bar{s}^2 \lambda_B^2}{\hbar^2} \left( \sum_i y_i \right)^2 - \frac{1}{2} V''(x) \frac{\bar{s}}{\hbar} \lambda_B^2 \sum_i y_i^2 + \dots \right)}_{\text{nell'int. funzionale si annulla per simetria}} \\ &= e^{-\beta V(x)} (1 + O(\hbar^2)) \text{ poiché } \frac{\bar{s}N}{\hbar} = \beta \end{aligned}$$

$$y_1^2 + \sum_{i=1}^{N-2} (y_{i+1} - y_i)^2 + y_{N-1}^2 = \vec{y}^T M \vec{y} \quad \text{con} \quad M = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \ddots & -1 \\ & & & & 2 \end{pmatrix}$$

Chiamiamo  $M_m$  la matrice  $m \times m$  si ha

$$\det M_m = \det \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_m \stackrel{\text{sviluppo}}{\downarrow} \text{taniga} = 2 \det \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_{m-1} + \det \underbrace{\begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}}_{m-1} \stackrel{\downarrow}{=} 2 \det M_{m-1} - \det M_{m-2}$$

Per induzione si vede allora semplicemente che  $\det M_m = m!$  e quindi (usando il fatto che  $M_m$  si diagonalizza con una matrice ortogonale)

$$\begin{aligned} \text{Tr}(e^{-\beta H}) &= \int dx e^{-\beta V(x)} \lambda_B^{N-1} \left( \frac{m}{2\pi\hbar\bar{s}} \right)^{N/2} \left( \frac{2\pi\hbar\bar{s}}{m} \right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\lambda_B^{N-1}} \frac{1}{\sqrt{N!}} (1 + O(\hbar^2)) \simeq \\ &\simeq \left( \frac{m}{2\pi\hbar\bar{s}N} \right)^{1/2} \int e^{-\beta V(x)} dx = \sqrt{\frac{m}{2\pi\beta}} \frac{1}{\hbar} \int e^{-\beta V(x)} dx = \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\beta V(x)} dx = \\ &= \int e^{-\beta \left( \frac{p^2}{2m} + V(x) \right)} \frac{dx dp}{2\pi\hbar} = Z_{\text{classica}} \end{aligned}$$

Tenuto anche le prime correzioni si ottiene lo sviluppo di Wigner-Kirkwood, ve li ad es.

SCHULMAN "Techniques and applications of path-integration" §2.6

ZINN-JUSTIN "Path-integrals in quantum mechanics" §2.10

## DISCRETIZZAZIONE e ALGORITMI

Tutto quello che si dirà è vero per potenziali generici, si usrà come esempio principale il caso dell'oscillatore armonico in modo da avere un controllo analitico dei risultati.

Per poter effettuare una simulazione serve avere un sistema con un numero finito di gradi di libertà ed il primo passo è discretizzazione il path-integrale

$$\int D[x(t)] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E[x(t)]}$$

con  $S_E[x(z)] = \int_0^{\beta/\hbar} \left( \frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x(z)) \right) dz$

In pratica questo è quello che ha già fatto nella costruzione del path-integrale, quindi possiamo usare direttamente il risultato che si era trovato (usione "a" invece di "b" per il lattice spacing, notazione più standard)

$$S_E \approx a \sum_{i=0}^{N-1} \left( V(x_i) + \frac{m}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{a} \right)^2 \right) \quad \text{dove le variabili di integrazione}$$

sono  $x_0, \dots, x_{N-1}$  mentre  $x_N = x_0$  a causa della periodicità. Dobbiamo quindi generare  $N$  numeri con distribut.  $\frac{e^{-S_E/\hbar}}{\int dx_i e^{-S_E/\hbar}}$ . Nota: in (quasi) tutti i programmi

i fattori di normalizzazione  $\frac{m}{2\pi\hbar\omega}$  sono resi irrilevanti in quanto si cancellano tra numeratore e denominatore.

È utile riscrivere tutto in termini di variabili adimensionali. Se consideriamo il caso di un oscillatore armonico abbiamo la scala di lunghe. caratteristica  $\ell = \sqrt{\hbar/m\omega}$ , quindi riscaliamo le posizioni introducendo  $y_i = \frac{1}{\ell} x_i$ , quindi

$$a \sum_i \left( \frac{1}{2} m \omega^2 x_i^2 + \frac{1}{2} m \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{a} \right)^2 \right) = a \ell^2 \sum_i \left( \frac{1}{2} m \omega^2 y_i^2 + \frac{m}{2a^2} (y_{i+1} - y_i)^2 \right) = \\ = \hbar \sum_i \left\{ \frac{1}{2} a \omega y_i^2 + \frac{1}{2a\omega} (y_{i+1} - y_i)^2 \right\}$$

"a" ha le dimensioni di un tempo e  $\hbar\omega$  è il tempo caratteristico dell'oscillatore armonico quindi si introduce la quantità adimensionale  $\eta = a\omega$ , tramite la quale si ha

$$\frac{S_E}{\hbar} \approx \sum_{i=0}^{N-1} \left\{ \frac{1}{2} \eta y_i^2 + \frac{1}{2\eta} (y_{i+1}^2 + y_i^2 - 2y_i y_{i+1}) \right\} = \sum_{i=0}^{N-1} \left\{ y_i^2 \left( \frac{m}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - \frac{1}{\eta} y_i y_{i+1} \right\}$$

poiché  $\sum y_i^2 = \sum y_{i+1}^2$  a causa della periodicità.

Fosse stato presente il termine anemonico  $g\dot{x}^4$  si sarebbe ottenuto il termine aggiuntivo  $\eta \frac{g\ell^4}{\hbar\omega} y_i^4$  con  $\frac{g\ell^4}{\hbar\omega}$  quantità adimensionale che parametrizza la anomonicità.

In generale la azione euclidea discretizzata diventa formalmente l'energia di un insieme di  $N$  punti collegati da molle con identica costante elastica e con una forma di richiamo che è il potenziale  $V(x)$  riscritto in forma adimensionale.

Per portare a termine un calcolo fisico serve quindi effettuare i seguenti passaggi:

1) si fissa la temperatura assegnando il valore di  $\beta \hbar \omega$  (estensione totale dell'integrazione nella variabile adimensionale  $x/\omega$ )

2) si fissa  $N$  (numero di punti della discretizzazione) e di conseguenza  $\eta$ :

$$\eta = \alpha \omega = \frac{\beta \hbar}{N} \omega$$

3) si effettua il calcolo dei valori medi di interesse tramite simulat. H.c.

4) si estende al limite continuo  $\eta \rightarrow 0$  ( $\propto N \rightarrow \infty$ ) a temperatura fissata.

L'ultimo passaggio è fondamentale per eliminare gli artefatti di reticolazione ed ottenere dei risultati validi nel continuo.

~~Quando si introduce il path-integral si usa solitamente l'intervalle di integrazione  $[0, \tau \beta]$ , ma si sarebbe anche potuto usare  $[-\beta \hbar, 0]$  (notare che a causa della periodicità non cambieranno i valori di  $x(\tau)$  ai bordi) e si passa da un caso all'altro invertendo il segno di  $\eta$ , quindi  $\langle Q \rangle_\eta$  doveva essere pari in  $\eta$  (almeno per  $Q$  invarianti per inversioni Temporali).~~

~~quindi~~  $\langle Q \rangle_\eta = \langle Q \rangle_{\text{cont}} (1 + C_2 \eta^2 + \dots)$  dove il parametro  $C_2$  permette di tenere dominante delle variazioni di limite continuo. Si potrebbe arrivare ad una espressione di questo tipo anche assumendo che  $y_i$  varia poco sulla scala  $\eta$  e sviluppando di Taylor, tuttavia i punti tipici non sono smooth, quindi questa manipolazione non ha senso.

Vedi dopo, sezione (x)

Vediamo ora come effettuare un update H.C. Per un update locale si può ad esempio selezionare casualmente  $i \in [0, N-1]$  oppure più semplicemente si può scorrere sequentialmente tutti i valori di "i" (non è più soddisfatto il bilancio dettagliato ma è soddisfatto il bilancio)

Fissato un valore di "i" si può procedere ad esempio con un metropolis: fissato  $\Delta > 0$  si può usare come valore di prova  $y_i^{(t)} = y_i + \Delta(1 - 2 \text{random})$ , dove "random" è distribuito uniformemente tra 0 e 1. Per calcolare la variazione di azione dovuta alla sostituzione  $y_i \rightarrow y_i^{(t)}$  è utile notare che  $\frac{\delta S}{\hbar}$  si può riscrivere come

$$\frac{S_E}{\hbar} = \dot{y}_i^2 \left( \frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - \frac{1}{\eta} (y_{i-1} + y_{i+1}) y_i + \text{term. indip. da } y_i$$

dove si usa sempre la periodicità:  $y_0 = y_N$  e  $y_{-1} = y_{N-1}$ . Si può quindi estrarre un numero casuale in  $[0, 1]$  e accettare l'update  $y_i \rightarrow y_i^{(t)}$  se il numero casuale è minore di  $e^{-\frac{S_E}{\hbar}}$  dove

$$\frac{\delta S_E}{\hbar} = (y_i^{(t)} - y_i)^2 \left( \frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - \frac{1}{\eta} (y_{i-1} + y_{i+1}) (y_i^{(t)} - y_i)$$

Poiché per  $\eta \rightarrow 0$  il termine dominante in  $S_E$  è quello corrispondente alla derivata discretizzata, in questo limite la fluttuazione tipica del percorso è  $\sqrt{\eta}$ , quindi puoi fare in modo che le prob. di accettare l'update rimanga costante per  $\eta \rightarrow 0$  e ragionevole usare  $\Delta = \text{const.} \sqrt{\eta}$  dove "const" è un numero  $O(1)$ . Da questo fatto si intuisce anche che sarà presente un critical slowing down  $\propto \sim \frac{1}{\eta^2}$ , come in un processo diffusivo.

Nel caso dell'oscillatore osonomico si può fare di meglio: poiché

$$\frac{S_E}{\hbar} = \alpha y_i^2 - \beta y_i + \text{indip. da } y_i \quad \text{con } \alpha = \frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta}, \beta = \frac{1}{\eta} (y_{i+1} + y_{i-1})$$

si può utilizzare uno schema di tipo heat bath:  $\alpha y_i^2 - \beta y_i = \alpha \left( y_i - \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2 - \left( \frac{\beta}{2\alpha} \right)^2$   
quindi  $y_i \rightarrow \frac{\beta}{2\alpha} + \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} N$  con  $N$  numero random gaussiano normale.

Si può anche effettuare un update microeconomico, usando la sostituzione

$$y_i \rightarrow 2 \frac{\beta}{2\alpha} - y_i$$

che è una trasformazione idempotente che lascia invariata  $S_E$ .

### APPLICAZIONE

L' applicazione più semplice consiste nel calcolo del valore medio  $\langle x^2 \rangle$  per l'oscillatore osonomico a temperatura fissata. Per fare ciò sarebbe sufficiente salvare i valori di  $x_0^2$ , tuttavia è più efficiente usare l'inversione per traslazioni e salvare  $\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} x_i^2$ .

Il valore analitico nel continuo si calcola come segue:

$$\langle m | x^2 | m \rangle = \| x | m \rangle \| ^2 = \frac{\ell^2}{2} \| (\alpha + \alpha^\dagger) | m \rangle \| ^2 = \frac{\ell^2}{2} \| \sqrt{m} | m-1 \rangle + \sqrt{m+1} | m+1 \rangle \| ^2 = \frac{\ell^2}{2} (2m+1)$$

$$\mathbb{E} \langle x^2 \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle m | x^2 | m \rangle e^{-\beta \hbar \omega (n + 1/2)} = \frac{\ell^2}{2} e^{-\alpha/2} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) e^{-\alpha n} = \frac{\ell^2}{2} e^{-\alpha/2} \left( 1 - 2 \frac{\alpha}{\alpha + 2} \right) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha n}$$

$$= \frac{\ell^2}{2} e^{-\alpha/2} \left( 1 - 2 \frac{\alpha}{\alpha + 2} \right) \frac{1}{(1 - e^{-\alpha})} = \frac{\ell^2}{2} e^{-\alpha/2} \left( \frac{1}{1 - e^{-\alpha}} + 2 \frac{e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2} \right) = \frac{\ell^2}{2} e^{-\alpha/2} \frac{1 + e^{-\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2}$$

insieme con la stessa notazione

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\alpha(n+1/2)} = e^{-\alpha/2} \frac{1}{1-e^{-\alpha}}$$

quindi  $\langle x^2 \rangle = \frac{\ell^2}{2} \frac{1+e^{-\alpha}}{1-e^{-\alpha}}$  e di conseguenza per la variabile adimensionale

$$y = x/\ell \quad \text{si ha} \quad \langle y^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{1+e^{-\alpha}}{1-e^{-\alpha}}, \quad \text{quindi ad es. } \alpha=3 \rightarrow \langle y^2 \rangle \approx 0.5533957 \dots \\ \alpha=5 \rightarrow \langle y^2 \rangle \approx 0.5067836 \dots$$

Un calcolo identico mostra che  $\langle H \rangle = \hbar \omega \frac{1}{2} \frac{1+e^{-\alpha}}{1-e^{-\alpha}}$ , tuttavia questo risultato è meno buono da ottenere numericamente: serve usare il fatto notato in precedenza che

$$\text{Tr}\left(\frac{p^2}{2m} e^{-\beta H}\right) = \int \left( \frac{\hbar}{2\alpha} - \frac{1}{2} m \dot{x}_0^2 \right) e^{-SE/\hbar} D[x(x)] \\ x(0) = x_0 (\hbar \beta)$$

quindi  $\langle \frac{p^2}{2m} \rangle = \frac{\hbar^2}{2\alpha} - \frac{1}{2} m \langle \frac{(x_1 - x_0)^2}{\alpha^2} \rangle$ . Per effettuare correttamente il calcolo

serve quindi calcolare  $\frac{1}{2} m \omega^2 \langle x_0^2 \rangle + \frac{\hbar^2}{2\alpha} - \frac{1}{2} m \langle \frac{(x_1 - x_0)^2}{\alpha^2} \rangle$  (o variabili equivalenti ottenute con l'invarianza per traslazioni), che in termini delle variabili adimensionali si riduce a  $\frac{1}{2} \langle y_0^2 \rangle + \frac{1}{2} \eta - \frac{1}{2} \langle \frac{(y_1 - y_0)^2}{\eta^2} \rangle$ .

Un modo diverso di vedere la presenza del termine additivo è partire dalla definizione termodinamica  $V = \langle H \rangle = - \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \text{Tr}(e^{-\beta H})$  e usare l'espressione path-integral

$$\text{Tr}(e^{-\beta H}) = \left( \frac{m}{2\pi\hbar\alpha} \right)^{N/2} \int dx_0 dx_1 \dots dx_{N-1} \exp \left\{ -\frac{\alpha}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} [V(x_i) + \frac{m}{2\alpha^2} (x_{i+1} - x_i)^2] \right\}, \text{ con}$$

$$\frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{\partial \alpha}{\partial \beta} \frac{\partial}{\partial \alpha} = \frac{\hbar}{N\alpha} \quad (\text{in quanto } \alpha = \frac{\beta\hbar}{N} \text{ e lavoriamo a } N \text{ fisso}). \quad \text{In questo caso i}$$

fattori moltiplicativi non si semplificano e si ha

$$\langle H \rangle = - \frac{\hbar}{N} \left\{ -\frac{N}{2\alpha} + \frac{\int dx_0 \dots dx_{N-1} \left[ -\frac{1}{\hbar} \sum_{i=0}^{N-1} V(x_i) + \frac{m}{2\hbar\alpha^2} \sum_{i=0}^{N-1} (x_{i+1} - x_i)^2 \right] e^{-SE/\hbar}}{\int dx_0 \dots dx_{N-1} e^{-SE/\hbar}} \right\} = \\ = \frac{\hbar}{2\alpha} + \langle V(x_0) \rangle - \frac{m}{2\alpha^2} \langle (x_1 - x_0)^2 \rangle \quad \text{consistente con quanto trovato prima.}$$

usando l'invarianza per traslazioni.

## Funzioni d'onda

×1

$$\langle \delta(q-y) \rangle = \frac{\text{Tr}(\delta(q-y)e^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \frac{\sum_i \langle i | \delta(q-y) | i \rangle e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}$$

$$\begin{aligned} \langle i | \delta(q-y) | i \rangle &= \int dx dz \langle i | x \rangle \langle x | \delta(q-y) | z \rangle \langle z | i \rangle = \\ &= \int dx dz \langle i | x \rangle \langle z | i \rangle \delta(z-y) \underbrace{\langle x | z \rangle}_{\delta(x-z)} = \\ &= \int dz \langle i | z \rangle \langle z | i \rangle \delta(z-y) = \langle i | y \rangle \langle y | i \rangle = |\psi_i(y)|^2 \end{aligned}$$

quindi  $\langle \delta(q-y) \rangle = \frac{\sum_i |\psi_i(y)|^2 e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}$  e nel limite  $\beta \rightarrow \infty$  si trova  $|\psi_0(y)|^2$

## Limite continuo

Formalmente potremmo usare

$$\begin{aligned} &\alpha \sum_i \left\{ V(x_i) + \frac{m}{2\alpha^2} (x_{i+1} - x_i)^2 \right\} \simeq \alpha \sum_i \left\{ V(x_i) + \frac{m}{2\alpha^2} (\alpha \dot{x}_i + \frac{1}{2} \alpha^2 \ddot{x}_i)^2 \right\} = \\ &= \alpha \sum_i \left\{ V(x_i) + \frac{m}{2} \dot{x}_i^2 + \frac{m}{2} \alpha \dot{x}_i \ddot{x}_i + \frac{m}{8} \alpha^2 \ddot{x}_i^2 \right\} \\ &\alpha \sum_i \frac{m}{2} \alpha \dot{x}_i \ddot{x}_i \simeq \alpha \int \frac{m}{2} \frac{d}{dt} \left( \frac{\dot{x}^2}{2} \right) dt = 0 \quad \text{per periodicità} \end{aligned}$$

Tuttavia si è visto che gli integrali di  $\dot{x}^2$  non sono ben definiti, quindi non è chiaro quanto questi passaggi siano leciti.

Un modo migliore è studiare gli errori di discretizzazioni introdotte. usiamo Campbell-Baker-Hausdorff: in genere  $e^{\delta X} e^{\delta Y} = e^{\delta(X+Y) + \frac{\delta^2}{2}[X,Y]} + O(\delta^3)$  e noi abbiamo

notato  $\text{Tr}(e^{A+B}) = \text{Tr}\left(\left[e^{\frac{A+B}{N}}\right]^N\right) \simeq \text{Tr}\left(\left[e^{A/N} e^{B/N}\right]^N\right)$  quindi sembrerebbe

avessi un errore  $\frac{1}{N}$ , in quanto  $e^{A/N} e^{B/N} \simeq e^{(A+B)/N + \frac{1}{2N}[A,B]} \simeq e^{(A+B)/N} \left(1 + O(\frac{1}{N^2})\right)$

e quindi  $\left(e^{A/N} e^{B/N}\right)^N \simeq e^{A+B} \left(1 + O(1/N)\right)$ , tuttavia usiamo la proprietà di ciclicità

si ha  $\text{Tr}\left(\left(e^{A/N} e^{B/N}\right)^N\right) = \text{Tr}\left(\left[e^{A/2N} e^{B/N} e^{A/2N}\right]^N\right)$  e è semplice verificare con

TBCH che  $e^{\frac{1}{2N}A} e^{\frac{1}{N}B} e^{\frac{1}{2N}A} = e^{\frac{1}{N}(A+B) + O(1/N^3)}$ , quindi  $\left(e^{A/2N} e^{B/N} e^{A/2N}\right)^N \simeq e^{A+B} + O(1/N^2)$

Per un esempio di uso in contesto non periodico vedi

SANKE, SAUER "Properties of higher-order Trotter formulas" Physics Letters A 165, 199 (1992)



## ASPECTI GENERALI

La rappresentazione di Heisenberg in tempo reale è definita da  $O(t) = e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar}$  e si vede che la meccanica quantistica statistica corrisponde alla continuazione analitica  $t = -i\gamma$ , quindi usiamo  $O(\gamma) = e^{H\gamma/\hbar} O e^{-H\gamma/\hbar}$ .

Consideriamo la rappresentazione tramite path-integral della funzione di correlazione temporale

$$\langle y | e^{-\beta H} g(z_2) g(z_1) | y \rangle, \text{ in cui assumiamo } z_2 > z_1 > 0. \text{ Si ha ovviamente}$$

$$\langle y | e^{-\beta H} g(z_2) g(z_1) | y \rangle = \langle y | e^{-(\beta - z_2/\hbar)H} g e^{-H(z_2 - z_1)/\hbar} g e^{-Hz_1/\hbar} | y \rangle$$

e inserendo relazioni di completezza come fatta nella costur. del path-integral per  $\mathcal{Z}$  si vede

$$\text{subito che } \langle y | e^{-\beta H} g(z_2) g(z_1) | y \rangle = \int D[x(z)] x(z_2) x(z_1) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_E[x(z)] \right\}$$

$$x(0) = x(\beta\hbar) = y$$

$$\text{e quindi in particolare } \langle g(z_2) g(z_1) \rangle = \frac{\int D[x(z)] x(z_2) x(z_1) e^{-\frac{1}{\hbar} S_E}}{\int D[x(z)] e^{-\frac{1}{\hbar} S_E}}$$

$$x(0) = x(\beta\hbar)$$

e per stimare numericamente questo correlatore basta usare  $\overline{x(z_2)x(z_1)}$  su traiettorie generate con il corretto peso MC.

NOTA: a causa delle condizioni periodiche al contorno (o della ciclicità della traccia) si ha

$$\langle g(z_2) g(z_1) \rangle = \langle g(z_2 - z_1) g(0) \rangle.$$

Questi risultati si generalizzano immediatamente al caso di operatori che dipendono solo dalla posiz. al tempo  $\gamma$ , che indicheremo genericamente con  $O(\gamma)$  (supponendo sempre  $O$  hermitiano)

$$\text{Tr}[e^{-\beta H} O_i(\gamma) O_j(0)] = \text{Tr}[e^{-\beta H} e^{H\gamma/\hbar} O_i e^{-H\gamma/\hbar} O_j] = \sum_m \langle m | e^{-(\beta - \gamma/\hbar)H} O_i e^{-H\gamma/\hbar} O_j | m \rangle =$$

$$= \sum_{m m} e^{-(\beta - \gamma/\hbar)E_m - \gamma/\hbar E_m} \langle m | O_i | m \rangle \langle m | O_j | m \rangle$$

$$\text{in particolare } \text{Tr}[e^{-\beta H} O(\gamma) O(0)] = \sum_{m m} e^{-(\beta - \gamma/\hbar)E_m - \gamma E_m/\hbar} |\langle m | O | m \rangle|^2$$

## ESEMPIO

Consideriamo il caso dell'oscillatore armonico con  $O = q$ : si ha

$$\langle m | q | m \rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} \langle m | (a + a^\dagger) | m \rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (\sqrt{m+1} \langle m | m+1 \rangle + \sqrt{m} \langle m | m-1 \rangle) = \frac{\ell}{\sqrt{2}} (\sqrt{m+1} \delta_{m,m+1} + \sqrt{m} \delta_{m,m-1})$$

$$|\langle m | q | m \rangle|^2 = \frac{\ell^2}{2} ((m+1) \delta_{m,m+1} + m \delta_{m,m-1})$$

$$\text{Tr}(e^{-\beta H} q(\gamma) q(0)) = \sum_{m m} \frac{\ell^2}{2} e^{-(\beta - \gamma/\hbar) \hbar \omega (m + \frac{1}{2}) - \gamma/\hbar \cdot \hbar \omega (m + \frac{1}{2})} |\langle m | q | m \rangle|^2 =$$

$$= \frac{\ell^2}{2} e^{-\beta \hbar \omega / 2} \sum_{m m} e^{-(\beta - \gamma/\hbar) \hbar \omega m - \gamma \omega m} |\langle m | q | m \rangle|^2 =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{\ell^2}{2} e^{-\beta \hbar \omega / 2} \left\{ \sum_m e^{-(\beta - \gamma/\hbar) \hbar \omega m} - e^{(\gamma - 1)\hbar \omega} m + \sum_m m e^{-(\beta - \gamma/\hbar) \hbar \omega (m-1) - \gamma \hbar \omega m} \right\} = \\
 &= \frac{\ell^2}{2} e^{-\beta \hbar \omega / 2} \left\{ e^{\gamma \hbar \omega} \sum_m m e^{-\beta \hbar \omega m} + e^{\beta \hbar \omega - \gamma \hbar \omega} \sum_m m e^{-\beta \hbar \omega m} \right\} = \\
 &= \frac{\ell^2}{2} e^{-\beta \hbar \omega / 2} (e^{\gamma \hbar \omega} + e^{(\beta - \gamma/\hbar) \hbar \omega}) \sum_m m e^{-\beta \hbar \omega m}
 \end{aligned}$$

$$\sum_m m e^{-\alpha m} = -\frac{d}{d\alpha} \frac{1}{1-e^{-\alpha}} = \frac{e^{-\alpha}}{(1-e^{-\alpha})^2}$$

$$\text{Tr}(e^{-\beta H} q(z) q(0)) = \frac{\ell^2}{2} e^{-\beta \hbar \omega / 2} \frac{e^{(\gamma/\hbar - \beta) \hbar \omega} + e^{-\gamma \hbar \omega}}{(1 - e^{-\beta \hbar \omega})^2} \quad \text{e usiamo } z = \frac{e^{-\beta \hbar \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \text{ si ha}$$

$$\text{quindi } \langle q(z) q(0) \rangle = \frac{\ell^2}{2} \frac{e^{(\gamma/\hbar - \beta) \hbar \omega} + e^{-\gamma \hbar \omega}}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} = \frac{\ell^2}{2} \frac{\cosh(\gamma/\hbar - \beta/\hbar)}{\sinh(\beta \hbar \omega / 2)}$$

$$\text{per } \gamma \text{ fisso e } \beta \rightarrow \infty \text{ si ha } \langle q(z) q(0) \rangle \approx \frac{\ell^2}{2} e^{-\gamma \hbar \omega} = |\langle 0 | q | 1 \rangle|^2 e^{-\gamma \hbar \omega} \quad \square$$

In generale tenendo  $\gamma$  fisso e monotonico  $\xrightarrow{\beta \rightarrow \infty}$  si ha ( $E_0 < E_1 < \dots$ )

$$\begin{aligned}
 \langle 0(z) 0(0) \rangle &\approx \frac{\sum_m e^{-\beta E_0 - \gamma/\hbar (E_m - E_0)} |\langle 0 | 0 | m \rangle|^2 + \dots}{e^{-\beta E_0} + \dots} \approx \sum_m e^{-\frac{\gamma}{\hbar} (E_m - E_0)} |\langle 0 | 0 | m \rangle|^2 = \\
 &= |\langle 0 | 0 | 0 \rangle|^2 + \sum_{m>0} e^{-\frac{\gamma}{\hbar} (E_m - E_0)} |\langle 0 | 0 | m \rangle|^2
 \end{aligned}$$

quindi studiando l'andamento di  $C(\gamma) = \langle 0(z) 0(0) \rangle - |\langle 0 | 0 \rangle|^2$  per  $0 < \gamma/\hbar \ll \beta$  si possono determinare i gap  $E_m - E_0$  degli stati per i quali  $\langle 0 | 0 | m \rangle \neq 0$ . In particolare se

$$\langle 0 | 0 | 1 \rangle \neq 0 \text{ si ha } E_1 - E_0 = \frac{\hbar \omega}{a} \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \frac{C(\gamma)}{C(\gamma + a)} \text{ dove "a" è il lattice spacing e il}$$

limite è sempre da considerare rispetto a  $\hbar \gamma \ll \beta$ . L'espressione a secondo membro è tipicamente chiamata massa efficace ed è più conveniente da calcolare di un fit esponenziale in quanto i dati a  $\gamma$  diversi sono correlati.

### DETERMINAZIONE DEI GAP

Consideriamo il caso di un potenziale  $V(x)$  pari, allora lo stato  $n$ -esimo ha parità  $(-1)^n$

quindi  $\langle 0 | q | 0 \rangle = 0$  e in generale  $\langle 0 | q | 1 \rangle \neq 0$ , quindi studiamo

$\langle q(t) q(0) \rangle$  si può estrarre  $E_1 - E_0$ . Nel caso dell'oscillatore armonico è particolarmente fortunato in quanto  $\langle 0 | q | n \rangle \propto \delta_{n1}$ . Se consideriamo l'operatore  $q^2$  si ha  $\langle 0 | q^2 | 0 \rangle \neq 0$

in genere e si ha  $\langle 0 | q^2 | 1 \rangle = 0$  e in genere  $\langle 0 | q^2 | 2 \rangle \neq 0$ , quindi studiamo il correlatore connesso  $\langle q^2(z) q^2(0) \rangle - |\langle q^2(0) \rangle|^2$  si può estrarre  $E_2 - E_0$ . Notiamo

l'osc. armonico funziona particolarmente bene poiché  $\langle 0 | q^2 | 2 \rangle$  è l'unico elemento non nullo di  $\langle 0 | q^2 | n \rangle$  con  $n > 0$ .

Nel caso di  $g^3$  le cose vanno diversamente: mentre  $\langle \sigma | g^3 | 3 \rangle = 0$ , in generale si ha  $\langle \sigma | g^3 | 1 \rangle \neq 0$  e  $\langle \sigma | g^3 | 3 \rangle \neq 0$ , quindi del comportamento ai tempi grandi di  $\langle g^3(\tau) g^3(0) \rangle$  si estrae  $E_1 - E_0$  e non  $E_3 - E_0$ .

In generale un operatore  $O_{\bar{m}} + c.$   $\langle \sigma | O_{\bar{m}} | m \rangle = 0$  se  $m < \bar{m}$  si chiama operatore interpolante per lo stato  $| \bar{m} \rangle$  e permette di estrarre  $E_{\bar{m}} - E_0$  quando usato nei correlatori. Per l'oscillatore armonico si può "curare" il problema di  $g^3$ : si ha infatti

$$(\sigma + \sigma^\dagger)^3 | 0 \rangle = (\sigma^\dagger \sigma \sigma^\dagger + \sigma \sigma^\dagger \sigma^\dagger + \sigma^\dagger \sigma \sigma^\dagger) | 0 \rangle = (1+2) | 1 \rangle + \sqrt{6} | 3 \rangle \quad \text{quindi}$$

$$g^3 | 0 \rangle = \frac{3\ell^3}{2\sqrt{2}} | 1 \rangle + \frac{\ell^3 \sqrt{6}}{3\sqrt{2}} | 3 \rangle \quad \text{mentre} \quad \sigma | 0 \rangle = \frac{\ell}{\sqrt{2}} | 1 \rangle, \quad \text{quindi} \quad \left( g^3 - \frac{3}{2}\ell^2 \sigma \right) | 0 \rangle \propto | 3 \rangle$$

quindi  $g^3 - \frac{3}{2}\ell^2 \sigma$  è un operatore interpolante per lo stato  $| 3 \rangle$ . Ovviamente in questo caso si è potuto identificare l'operatore in modo esatto data la semplicità del sistema, ma in generale ciò non è possibile: ad esempio se si vuole trovare un  $O_{\bar{m}} + c.$   $\langle \sigma | O_{\bar{m}} | k \rangle \propto \sum_m G_{mk}$

in polar delle coordinate si trova  $\int dx \Phi_0^*(x) O_{\bar{m}}(x) \Phi_k(x) \propto \sum_m G_{mk}$  quindi

si vede che si può usare  $O_{\bar{m}}(x) \propto \frac{\Phi_{\bar{m}}^*(x)}{\Phi_0^*(x)}$  ( $\Phi_0$  non ha nodi). Trovare un operatore interpolante "perfetto" è quindi equivalente a trovare le autoformazioni in generale non è possibile.

Per determinare stati eccitati non protetti da simmetrie che cancellano il mixing con gli stati più bassi serve una base di operatori  $O_i$ . Nel limite  $\beta \rightarrow \infty$  si ha

$$\begin{aligned} \langle O_i(\tau) O_j(0) \rangle - \langle \sigma | O_i | 0 \rangle \langle \sigma | O_j | 0 \rangle &\approx \sum_{m>0} e^{-\gamma/k_B(E_m - E_0)} \langle \sigma | O_i | m \rangle \langle m | O_j | 0 \rangle \\ &= \sum_{m>0} e^{-\gamma/k_B(E_m - E_0)} G_{im} G_{jm}^* \quad \text{dove} \quad G_{im} = \langle \sigma | O_i | m \rangle \end{aligned}$$

Supponendo di avere  $N$  operatori, si costruisce la matrice di correlatori complessi

$$C_{ij}(\tau) = \langle O_i(\tau) O_j(0) \rangle - \langle O_i \rangle \langle O_j \rangle \quad \text{e si può mostrare che gli autovalori } \lambda_\alpha(\tau) \text{ di } C_{ij}(\tau) \text{ soddisfano } \lambda_\alpha(\tau) \underset{\tau \rightarrow \infty}{\approx} C_\alpha e^{-\gamma/k_B(E_\alpha - E_0)} \text{ con } C_\alpha > 0 \text{ e } 0 < \alpha \leq N$$

(vedi LUSCHER, WOLFF "How to calculate the elastic scattering matrix in two-dimensional quantum field theory by numerical simulation" Nucl. Phys. B 339 322 (1990) )

Quindi si può diagonalizzare  $C_{ij}(\tau)$  e studiare l'andamento di  $\lambda_\alpha(\tau)$  ai grandi  $\tau$ .

Un modo numericamente più conveniente è il seguente: sia  $N(t) = e^{-\gamma/k_B(E_m - E_0)} \sum_{m,n} G_{mn}$  allora  $C_{ij}(\tau) \approx G_{im} \Lambda_{mn}^{(\tau)} G_{jn}^* = (G \Lambda G^+)^{ij}$

$$\text{quindi } C(\tau_0 + \tau) C^{-1}(\tau_0) = G \Lambda(\tau_0 + \tau) G^+ (G^\dagger)^{-1} \Lambda^{-1}(\tau_0) G^{-1} = \\ = G \Lambda(\tau_0 + \tau) \Lambda^{-1}(\tau_0) G^{-1}$$

quindi  $C(\tau_0 + \tau) C^{-1}(\tau_0)$  ha autovalori  $e^{-\frac{\tau}{\tau_0}(E_n - E_0)}$ , che si ottengono risolvendo il problema agli autovalori generalizzato (GEVP)

$$G(\tau_0 + \tau) \vec{v} = \lambda G(\tau_0) \vec{v}$$

per ulteriori dettagli vedi ad es.

B. BLOSSIER, M. DELLA MORTE, G. von HIPPEL, T. MENDEZ, R. SOMMER "On the generalized eigenvalue method for energies and matrix elements in lattice field theory"  
JHEP 04 (2009) 094 (arxiv 0902.1265).

### LIMITE CONTINUO E FENOMENI CRITICI

Si è visto che a bassa temperatura si ha, per  $\tau$  abbastanza grande

$$\langle O(\tau) O(0) \rangle - |\langle O \rangle|^2 \sim e^{-\frac{\tau}{\tau_0}(E_1 - E_0)}$$

che scrivendo il tempo  $\tau$  in unità di lattice spacing "a" diventa

$$\langle O(n) O(0) \rangle - |\langle O \rangle|^2 \sim e^{-n \frac{\alpha}{\tau_0}(E_1 - E_0)} = e^{-n/\xi}$$

dove  $\xi = \frac{\tau_0}{\alpha(E_1 - E_0)}$  è la lunghezza di correlazione (in unità di passi reticolari) del modello su reticolato. Ci sono quindi due punti di vista diversi sul limite continuo

- 1) in unità fisiche considera il limite  $\alpha \rightarrow 0$
- 2) in unità di reticolato considera il limite  $\xi \rightarrow \infty$

Quindi limite continuo = transizione del 2° ordine per il modello discritto.

Se caso 1) è un po' banale, in quanto corrisponde ad un modello unidimensionale classico di fisica statistica, in cui l'unica transizione è a  $T=0$  (non ci può essere rottura spontanea di simmetria in 1dim pur  $T>0$ , vedi LANDAU, LIFSHITZ "Statistical physics" §163).

Questo punto di vista è più importante in teoria quantistica dei campi, in cui ad una QFT D-dimensionale corrisponde un modello statistico  $(D+1)$ -dim, con rotture di simmetria, esponenti critici, etc.

## PARTICELLA SU UNA CIRCONFERENZA

Consideriamo una particella di massa  $m$  che si muove su una circonferenza di raggio  $R$ , la cui posizione è parametrizzata dall'angolo  $\phi$ . Della hamiltoniana libera  $\frac{1}{2m}\vec{p}^2$  con  $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$  consideriamo solo la componente lungo  $\phi$ , quindi  $H = -\frac{\hbar^2}{2mR^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$ . Assumiamo inoltre  $\psi(0) = \psi(2\pi)$ , che è la condizione al contorno più "naturale", anche se ce ne sono altre altrettanto legittime. (strettamente parlando non per un reticolo)

$$H\psi = E\psi, \quad \psi'' = -\frac{2mER^2}{\hbar^2} \psi = -k^2 \psi \quad \psi = A e^{ik\phi}, \quad k\pi = 2\pi m \text{ con } m \in \mathbb{Z}, \text{ quindi}$$

$$k_m = m, \quad \psi_m = A e^{im\phi}, \quad E_m = \frac{\hbar^2}{2mR^2} m^2, \quad \text{quindi per la funzione di partizione si ha}$$

$$Z = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-\beta E_m} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta \hbar^2}{2mR^2} m^2}$$

Con il path-integral si trova (NOTA: gli impulsi sono discritti, quindi le manipolazioni sono leggermente diverse, ma per piccole lattice spacing le somme si possono approssimare con integrali e funzioni tutto come nel caso su  $\mathbb{R}$ )

$$Z = \int D[\phi(z)] e^{-S_E/\hbar} \quad \text{con} \quad S_E[\phi(z)] = \int_0^{\beta\hbar} \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2(z) dz \quad \text{e} \quad \phi(z) \text{ parametrizza} \\ \phi(0) = \phi(\beta\hbar)$$

percorsi periodici di periodo  $\beta\hbar$  su un cilindro, che possono essere suddivisi in classi di omotopie caratterizzate dal numero di avvolgimenti  $Q = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \dot{\phi}(z) dz \in \mathbb{Z}$

(conica topologica in contesti più generici)



Si può quindi decomporre

$$Z = \int D[\phi(z)] e^{-S_E[\phi(z)]/\hbar} = \sum_{Q=-\infty}^{+\infty} \int D[\phi(z)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S_E \left[ \phi(z) + 2\pi Q \frac{z}{\beta\hbar} \right] \right\} \\ \phi(0) = \phi(\beta\hbar) \quad Q=0$$

dove si è riscritto il commine generico con numero di avvolgimenti  $Q$  come una deformazione topologicamente banale del commine "standard"  $2\pi Q \frac{z}{\beta\hbar}$

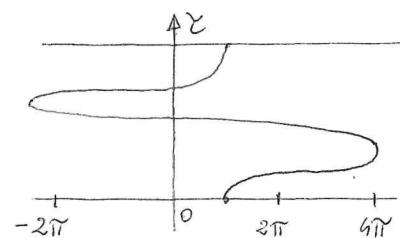
$$S_E \left[ \phi(z) + 2\pi Q \frac{z}{\beta\hbar} \right] = \frac{1}{2} m R^2 \int_0^{\beta\hbar} \left( \dot{\phi} + 2\pi Q \frac{1}{\beta\hbar} \right)^2 dz \stackrel{\int \dot{\phi} dz = 0}{=} \frac{1}{2} m R^2 \left\{ \int \dot{\phi}^2 dz + \frac{4\pi^2 Q^2}{\beta\hbar} m \right\} \\ = \frac{1}{2} m R^2 \int \dot{\phi}^2 dz + \frac{1}{2} m \frac{(2\pi Q R)^2}{\beta\hbar} \quad \text{quindi}$$

$$Z = \left\{ \int D[\phi(z)] e^{-\frac{1}{2} \frac{m R^2}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} \dot{\phi}^2 dz} \right\} \sum_{Q=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} \frac{(2\pi Q R)^2}{\beta\hbar^2} m}$$

$$\text{Inoltre si ha} \quad \int D[\phi(z)] = \int D[x(z)] \quad \text{con} \quad x \text{ su } \mathbb{R} \text{ e} \quad x_0 \in [0, 2\pi], \quad \text{infatti,}$$

i commini con  $Q=0$  possono essere mappati da  $S^1$  a  $\mathbb{R}$ :

Resta da calcolare il fattore  $Q$ -indipendente della funzione di partizione.



Introducendo per semplicità  $\alpha = \frac{1}{2} \frac{m R^2}{\hbar \omega}$  (con  $\omega = \frac{\beta \hbar}{N}$  passo di discretizzazione)

$$\text{si ha } \frac{1}{2} \frac{m R^2}{\hbar \omega} \int_0^{\beta \hbar} x^2 dx \approx \alpha \sum_{i=0}^{N-1} (x_{i+1} - x_i)^2 \text{ con } x_N = x_0. \quad \text{Introducendo } y_i = x_i - x_0$$

$$\text{per } i=1, \dots, N-1 \text{ si ha } \alpha \sum_{i=0}^{N-1} (x_{i+1} - x_i) = \alpha \left\{ y_1^2 + (y_2 - y_1)^2 + \dots + y_{N-1}^2 \right\} = \alpha \vec{y}^T H \vec{y} \text{ con}$$

$$H = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e l'integrale } \int D[x(x)] \text{ diventa } \int_0^{2\pi} dx_0 \left( \frac{m R^2}{2\pi \hbar \omega} \right)^{N/2} \sum_{i=-\infty}^{+\infty} dy_1 \dots \sum_{i=-\infty}^{+\infty} dy_{N-1}$$

La matrice  $H$  era già stata studiata in pag. B1.4 dove si era visto  $\det H = N$ , quindi

$$\begin{aligned} \int D[x(x)] e^{-\frac{\beta \hbar}{2} \int_0^{\beta \hbar} x^2 dx} &= 2\pi \left( \frac{m R^2}{2\pi \hbar \omega} \right)^{N/2} \left( \frac{\pi}{\alpha} \right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{N}} = \\ &= 2\pi \left( \frac{m R^2}{2\pi \hbar \omega} \right)^{N/2} \left( \frac{2\pi \hbar \omega}{m R^2} \right)^{\frac{N-1}{2}} \frac{1}{\sqrt{N}} = \left( \frac{2\pi m R^2}{\beta \hbar^2} \right)^{1/2} \end{aligned}$$

Siamo quindi infine arrivati a

$$Z = \left( \frac{2\pi m R^2}{\beta \hbar^2} \right)^{1/2} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} m \frac{(2\pi k R)^2}{\beta \hbar^2}}$$

Per dimostrare che le due espressioni sono equivalenti si può usare la formula di

$$\text{somma di Poisson: } \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(n) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y) e^{-2\pi i k y} dy$$

dim:  $g(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(x+n)$ . Chiaramente  $g(x+1) = g(x)$  quindi  $g$  ha periodo 1 e

può essere sviluppata sulla base  $e^{i 2\pi k x}$ :  $g(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} g_k e^{i 2\pi k x}$  con  $k \in \mathbb{Z}$  e

$$\begin{aligned} g_k &= \int_0^1 g(x) e^{-i 2\pi k x} dx = \int_0^1 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(x+n) e^{-i 2\pi k x} dx = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \int_0^1 f(x+n) e^{i 2\pi k x} dx = \\ &\stackrel{x+n=y}{=} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \int_m^{m+1} f(y) e^{-i 2\pi k y} dy = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} f(m) e^{-i 2\pi k m} \quad \text{quindi} \end{aligned}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(x+n) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i 2\pi k x} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} f(m) e^{-i 2\pi k m} \quad \text{e per } x=0 \text{ si ha Poisson}$$

Abbiamo quindi

$$Z = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} m \frac{(2\pi R)^2}{\beta \hbar^2}} \quad \text{sulla base degli autostati di } H, \text{ che risponde la formula}$$

$$\text{di somma di Poisson e } \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha m^2 + b m} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{b^2/4\alpha} \quad \text{dovuta}$$

$$Z = \left( \frac{2\pi m R^2}{\beta \hbar^2} \right)^{1/2} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} m \frac{(2\pi k R)^2}{\beta \hbar^2}} \quad \text{che è l'espressione ottenuta con il path-integral.}$$

CAMPO MAGNETICO E DIPENDENZA DA  $\theta$ 

Consideriamo ora il caso che la particella sia cosica e sia presente in campo magnetico con simmetria cilindrica. Tenendo in  $H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A})^2$  solo i termini con dipendenza da  $\phi$  abbiamo  $H = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{e}{c} A_\phi \right)^2$  mentre  $\nabla R A_\phi = \vec{B}_B$ , quindi:

$$H = \frac{1}{2mR^2} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{e}{c} \frac{\vec{B}_B}{2\pi} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \left( -i \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{e\vec{B}_B}{e2\pi\hbar} \right)^2 ; \quad \boxed{\frac{2\pi\hbar c}{e} = \Phi_0} = \text{flusso elementare}$$

quindi  $H = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \left( -i \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{\vec{B}_B}{\Phi_0} \right)^2$ . Da  $\psi(0) = \psi(2\pi)$  si ottiene  $\psi_m = A e^{im\phi}$ , quindi

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mR^2} \left( n - \frac{\vec{B}_B}{\Phi_0} \right)^2. \quad \text{In contesti di QFT esistono cose simili ed è}$$

conveniente introdurre la notazione  $\boxed{\frac{\theta}{2\pi} = \vec{B}_B/\Phi_0}$ ; si può restringere il valore di  $\theta \in [0, 2\pi)$  in quanto  $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$  corrisponde a  $n \rightarrow n+1$ .

Se si ridefinisce  $\psi(\phi) = \eta(\phi) e^{i\frac{\theta}{2\pi}\phi}$  allora la hamiltoniana per  $\eta$  ritorna  $H = \frac{1}{2mR^2} \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$  ma le condizioni al contorno diventano  $\eta(2\pi) = \eta(0) e^{-i\theta}$  da cui si vede nuovamente che  $\theta$  è una variabile angolare.

Abbiamo quindi  $Z_0 = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta\hbar^2}{2mR^2} (n - \theta/2\pi)^2}$ .

Nel formalismo lagrangiano  $L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \vec{\dot{x}}$ , che nel caso della circonferenza diventa  $L = \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 + \frac{e}{c} A_\phi R \dot{\phi} = \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 + \hbar \frac{\theta}{2\pi} \dot{\phi}$

Si vede che  $\theta$  entra in un termine (termine  $\theta$ ) che è una derivata totale e quindi non modifica le equazioni classiche del moto, tuttavia al livello quantistico ha effetti non banali a causa della topologia. Fenomeni analoghi esistono anche nei modelli  $C P^{N-1}$  2-dim e nelle teorie di gauge 4-dim.

Passando nell'euclideo  $t \rightarrow -i\tau$  fare in modo che  $e^{iS/\hbar} \rightarrow e^{-SE/\hbar}$  e si ottiene quindi

$$S_E = \int_0^{\beta\hbar} \left( \frac{1}{2} m R^2 \left( \frac{d\phi}{d\tau} \right)^2 - i\hbar \frac{\theta}{2\pi} \frac{d\phi}{d\tau} \right) d\tau = \int_0^{\beta\hbar} \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 d\tau - i\hbar \theta \dot{\phi}$$

da cui si vede che  $S_E$  non è reale per  $\theta \neq 0$  (quindi non si può usare H.c.!). Per vedere in un altro modo questa cosa si può ripercorrere la deduzione del path-integrale: un termine immaginario  $i$  genera dal fatto che in  $H$  c'è un termine lineare in  $\phi$ , quindi in integrali del tipo  $\int e^{-dk^2 + ik\beta + \gamma k} dk$  rimane qualcosa di non reale.

Riapplicando il calcolo con il path-integrale e usando la formula di Poisson si ottiene

$$Z_\theta = \left( \frac{2\pi m R^2}{\beta\hbar^2} \right)^{1/2} \sum_{Q=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2} m \frac{(2\pi Q R)^2}{\beta\hbar^2} + iQ\theta}$$

Ci sono alcune proprietà generali della dip. da  $\theta$  che possono essere dimostrate dalle formule esplicite ma anche con argomenti più generali legati alla forma del termine  $\theta$ :

$$\begin{aligned} 1) \quad Z_\theta = Z_{-\theta} : \quad Z(\theta) &= \int D[\phi(z)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \left( \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 - i \hbar \frac{\partial}{\partial \eta} \phi \right) dz \right\} \stackrel{\psi(z) = \phi(\beta \hbar z)}{=} \psi(z) = \phi(\beta \hbar - z) \\ &= \int D[\psi(z)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \left( \frac{1}{2} m R^2 \dot{\psi}^2 + i \hbar \frac{\partial}{\partial \eta} \psi \right) dz \right\} = Z(-\theta) \\ &\quad \psi(0) = \psi(\beta \hbar) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2) \quad Z_\theta \leq Z_{\theta=0} : \quad Z(\theta) &= \left| \int D[\phi(z)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \left( \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 - i \hbar \frac{\partial}{\partial \eta} \phi \right) dz \right\} \right| \leq \\ &\leq \left| \int D[\phi(z)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \left( \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 - i \hbar \frac{\partial}{\partial \eta} \phi \right) dz \right\} \right| = \int D[\phi(z)] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 dz \right\} \\ &\quad \phi(0) = \phi(\beta \hbar) \\ &= Z_{\theta=0} \quad \text{avendo usato } | \int f(x) dx | \leq \int |f(x)| dx \text{ e i.e fatto che il termine } \theta \text{ è un immaginario puro.} \end{aligned}$$

Entrambe queste proprietà sono vere anche per i modelli  $CP^{N-1}$  2-dim e le teorie di gauge 4-dim.

La proprietà 2) è legata in QCD al teorema di Vafa-Witten. Nel caso magnetico 2)  $\Rightarrow$  eletromagnetismo.

Sia ora  $F_\theta = -\frac{1}{\beta} \log Z_\theta$  l'energia libera. Per parametrizzazione la dipendenza da  $\theta$  dell'energia libera introduciamo la suscettività topologica  $\chi(\beta)$ , definita da

$$F_\theta(\beta) = F_{\theta=0}(\beta) + \frac{i}{2} \chi(\beta) \theta^2 + \dots$$

dove si è usato il fatto che  $Z_\theta$  (e quindi  $F_\theta$ ) è una funzione pari di  $\theta$  e da (2) segue che  $F_{\theta=0} \leq F_\theta$ , quindi  $\chi(\beta) \geq 0$ . (Vedendo  $\theta$  come effetto di bordo  $\chi$  assomiglia molto anche all' helicity-modulus introdotto nei modelli tipo XY).

$$\chi(\beta) = \frac{d^2 F_\theta}{d\theta^2} \Big|_{\theta=0} \quad ; \quad \frac{dF}{d\theta} = -\frac{1}{\beta Z_\theta} \int D[\phi(z)] i Q \ e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 dz + i \theta Q} = -\frac{1}{\beta} \langle i Q \rangle_\theta$$

$$\frac{d^2}{d\theta^2} F(\theta) = -\frac{1}{\beta} \langle -Q^2 \rangle_\theta + \frac{\langle i Q \rangle_\theta^2}{\beta} = \frac{1}{\beta} (\langle Q^2 \rangle_\theta - \langle Q \rangle_\theta^2). \quad \text{Per } \theta=0 \text{ si ha } \langle Q \rangle_{\theta=0}=0$$

$$\text{poiché } \langle Q \rangle_\theta \propto \frac{dF_\theta}{d\theta} \Big|_{\theta=0} \quad \text{e } F_\theta \text{ è una funzione pari di } \theta, \text{ quindi } \chi = \frac{1}{\beta} \langle Q^2 \rangle_{\theta=0}$$

Per il calcolo di  $\chi$  av basso temperatura è conveniente usare

$$Z_\theta = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\beta \hbar^2}{2mR^2} (n - \theta/2\pi)^2}$$

Infatti se  $\frac{\beta \hbar^2}{mR^2} \gg 1$  e  $\theta \approx 0$  domina  $n=0$  e si ha  $Z_\theta \approx e^{-\frac{\beta \hbar^2}{2mR^2} (\theta/2\pi)^2}$  quindi:

$$F_\theta \approx \frac{\hbar^2}{2mR^2(2\pi)^2} \theta^2 \quad \text{e quindi } \chi \approx \chi_{T=0} = \frac{\hbar^2}{m(2\pi R)^2}$$

Ad alte temperature è invece più conveniente usare

$$Z_\theta = \left( \frac{8\pi m R^2}{\beta \hbar^2} \right)^{1/2} \sum_{Q=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}m \frac{(2\pi Q R)^2}{\beta \hbar^2}} + i\theta Q$$

infatti se  $\frac{\beta \hbar^2}{m R^2} \ll 1$  dominano le conf. con  $Q=0$ , con correzioni dovute a  $Q=\pm 1$ , quindi

$$Z_\theta \approx \left( \frac{8\pi m R^2}{\beta \hbar^2} \right)^{1/2} \left\{ 1 + e^{-\frac{1}{2}m \frac{(2\pi R)^2}{\beta \hbar^2}} 2 \cos \theta \right\}$$

$$\text{da cui si ottiene } F_\theta \approx \text{indip.} - \frac{1}{\beta} e^{-\frac{1}{2}m \frac{(2\pi R)^2}{\beta \hbar^2}} (2 - \theta^2 + \dots) = F_{\theta=0} + \frac{1}{\beta} e^{-\frac{1}{2}m \frac{(2\pi R)^2}{\beta \hbar^2}} \theta^2 + \dots$$

$$\text{e quindi infine } X \approx \frac{1}{\beta} e^{-\frac{1}{2}m \frac{(2\pi R)^2}{\beta \hbar^2}} \ll \frac{1}{\beta}$$

Nel regime intermedio si può scrivere  $Z_\theta$  in funzione di  $\theta$ -functions di Jacobi, ma le espressioni non sono particolarmente illuminanti.

Riassumendo si ha

$$\langle Q^2 \rangle = \beta X = \begin{cases} \frac{1}{4\pi^2} \frac{\beta \hbar^2}{m R^2} & \text{se } \frac{\beta \hbar^2}{m R^2} \gg 1 \\ e^{-2\pi^2 \frac{m R^2}{\beta \hbar^2}} & \text{se } \frac{\beta \hbar^2}{m R^2} \ll 1 \end{cases}$$

### STUDIO NUMERICO

Usiamo  $\theta=0$  e abbiamo

$$S_E/\hbar = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \frac{1}{2} m R^2 \dot{\phi}^2 d\tilde{z}$$

ed è conveniente passare a variabili risalite adimensionali. Invece del tempo  $t$  passiamo alla coordinata adimensionale  $\tilde{z}$  definita da  $\tilde{z} = \frac{4\pi^2 m R^2}{\hbar} \hat{z}$ , inoltre al posto dell'angolo  $\phi$  introduciamo la variabile  $x$  tramite  $\phi = 2\pi x$ . Si ha allora

$$\frac{S_E}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \frac{1}{2} m R^2 \left( \frac{d\phi}{dz} \right)^2 dz = \frac{1}{\hbar} \int_0^{\frac{\beta \hbar^2}{4\pi^2 m R^2}} \frac{1}{2} m R^2 \frac{\hbar}{4\pi^2 m R^2} 4\pi^2 \left( \frac{dx}{d\tilde{z}} \right)^2 d\tilde{z} = \frac{1}{2} \int_0^{\frac{\beta \hbar^2}{4\pi^2 m R^2}} \left( \frac{dx}{d\tilde{z}} \right)^2 d\tilde{z}$$

Con questi cambi di variabili il numero di avvolgimenti si risolve come

$$Q = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\beta \hbar} \frac{d\phi}{dz} dz = \int_0^{\frac{\beta \hbar^2}{4\pi^2 m R^2}} \frac{dx}{d\tilde{z}} d\tilde{z} \quad \text{dove ovviamente } x(0) = x \left( \frac{\beta \hbar^2}{4\pi^2 m R^2} \right)$$

In una simulazione si può quindi fissare il valore adimensionale  $\frac{\beta \hbar^2}{4\pi^2 m R^2}$  e poi definire il lattice spacing adimensionale  $\eta = \frac{\beta \hbar^2}{4\pi^2 m R^2} \frac{1}{N}$ .

La disegridazione delle derivate è meno buona del caso dell'oscillatore armonico a causa della periodicità: se usassimo  $\frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2\eta}$  si avrebbe una variazione molto

grande se  $x_i \approx 0$  e  $x_{i+1} \approx 1$ , ma le 0 devono essere identificate a causa della periodicità

Questa discretizzazione non rispetta quindi la ciclicità del problema. Una scelta possibile è quella di usare al posto di  $(x_{i+1} - x_i)^2$  la distanza minima quadra tra i punti associati a  $x_i$  e  $x_{i+1}$  su un anello. Per la carica topologica servirà anche un analogo di  $x_{i+1} - x_i$ , quindi introduciamo una distanza minima orientata tramite

$$d(x, y) = \begin{cases} x-y & \text{se } |x-y| \leq 1/2 \\ x-y-1 & \text{se } x-y > 1/2 \\ x-y+1 & \text{se } x-y < -1/2 \end{cases}$$

Poiché  $\sum_{i=0}^{N-1} (x_{i+1} - x_i) = 0$  (con  $x_N = x_0$ ) si vede subito che  $\sum_{i=0}^{N-1} d(x_{i+1}, x_i) \in \mathbb{Z}$  è una valida discretizzazione di  $Q$ . In modo analogo la azione euclidea diventa

$$\frac{S_E}{\hbar} = \frac{1}{8\eta} \sum_{i=0}^{N-1} [d(x_{i+1}, x_i)]^2$$

Per campionare la distribuzione  $\frac{e^{-S_E/\hbar}}{Z}$  si può usare un algoritmo Metropolis con passo elementare  $x_i \rightarrow x_i + \Delta (1 - 2 \cdot \text{rand})$ , con  $\text{rand} \in [0, 1)$  e  $\Delta$  fissato. Ovviamente la variazione di azione dipende solo da  $x_{i+1}$ . Se si vuole mantenere la probabilità di accettare un update circa costante mentre ci si avvicina al limite continuo serve scorrere  $\Delta \propto \sqrt{\eta}$ , ma in pratica anche tenere  $\Delta$  costante funziona bene.

Se numero di avvolgimenti (e di conseguenza la suscettività topologica) ha tuttavia un critical slowing down molto violento, molto più rapido dello scaling  $\tau \sim \frac{1}{\sqrt{\eta}}$  tipico degli algoritmi locali, in pratica  $\tau \sim \exp(\frac{1}{\eta})$ , analogamente ad una transizione del primo ordine. Nel caso del primo ordine l'exp è tuttavia fisico (con una piccola rottura), mentre in questo di simmetria uno degli stati coesistenti ha prob. exp più grande dell'altro), mentre in questo caso il problema è puramente algoritmico:  $Q$  è un inviabile topologico e non viene quasi mai cambiato da un update locale. Affinché un update locale cambi il valore di  $Q$  serve un  $\Delta \propto 0,5$ , che ha una probabilità di essere accettato  $\sim \exp(-\frac{0,5^2}{8\eta})$ .

Altro fenomeno peculiare è l'ondate degli effetti di lattice spacing finite in  $\mathcal{L}^2$ : si passa rapidamente da un regime con effetti di lattice spacing finite grandi (in cui l'ondamentale  $O(\eta^2)$  non è necessariamente chiaro, essendo contaminato da correzioni ancora più grandi) ad un regime in cui la dipendenza da  $\eta$  è quasi trascurabile. Ovviamente, in parte, questo è dovuto al fatto che gli errori aumentano molto al diminuire di  $\eta$  a causa del critical slowing down esponenziale.

Per la partecipazione su una circonferenza un update che sostanzialmente elimina totalmente il critical slowing down topologico è stato introdotto in

BONATI, D'ELIA "Topological critical slowing down: Variations on a toy model"  
Phys. Rev. E 98 013308 (2018) set. IV.2

1) selezionare a caso  $i \in [0, \dots, N-1]$ , supponiamo nel seguito per semplicità di aver selezionato  $i=0$  (non cambia nulla a causa dell'invarianza per traslazioni)

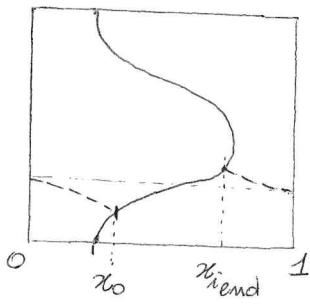
2) identificare (se esiste) il primo valore  $i_{\text{end}} > 0$  per il quale si ha

$$|d(x_{i_{\text{end}}}, x_0 + 0.5)| \leq \varepsilon \quad \text{dove } \varepsilon \text{ è un parametro fisico}$$

3) proporre l'update

$$x_i \rightarrow d(2x_0, x_i) \quad \text{per } i \in [1, \dots, i_{\text{end}}]$$

e accettare/rejectare con un test Metropolis.



In pratica si ricalca rispetto alla verticale un passo di trascrizione grande abbastanza da cambiare di soli  $\pm \frac{1}{2}$ .

Se cambia direzione i soli about! alla ottocattura finiscono  $i_{\text{end}}$  e tende a zero nel limite continuo, quindi l'algoritmo è molto efficiente. (in pratica è una sorta di algoritmo a cluster)

Tuttavia questo algoritmo è risultato di difficile generalizzazione per altri modelli, quindi può essere utile analizzare anche altre strade. Piuttosto il parallel tempering nel lattice Spacing, idea simile a quella usata per la prima volta in

VICARI "Monte Carlo simulation of lattice  $C\mathbb{P}^{N-1}$  models at large  $N$ " Phys. Lett. B 309 139 (1993)  
(vedi anche articolo precedente set. IV.5)

L'esempio tipo in cui si usa il parallel tempering è quello di un potenziale con molti minimi locali. Se la temperatura è alta si esplorano in modo efficace tutti i minimi, se la temperatura è bassa si rimane "intrappolati" a lungo in un minimo locale. Esempi di questo tipo sono frequenti in sistemi disordinati (e.g. Ising con accoppiamenti random).

Nel parallel tempering sistemi con diversi valori dei parametri (nel nostro caso  $\eta_j$ ) vengono considerati insieme: supponendo per semplicità di avere solo due parametri,  $\eta_1$  e  $\eta_2$ , con associate due configurazioni  $\{x\}$  e  $\{y\}$ , si vuole fare in modo che la probabilità conjunta della coppia  $\{x\}, \{y\}$  sia

$$\tilde{\mathcal{P}}(\{x\}, \{y\}) = \tilde{\mathcal{P}}_{\eta_1}(x) \tilde{\mathcal{P}}_{\eta_2}(y)$$

dai cui segue che  $\{x\}$  è distribuito con la prob.  $\tilde{\mathcal{P}}_{\eta_1}(x)$  e  $\{y\}$  con prob.  $\tilde{\mathcal{P}}_{\eta_2}(y)$ .

L'update  $\{x\}, \{y\} \rightarrow \{x'\}, \{y'\}$  deve quindi soddisfare il bilancio dettagliato rispetto a questa probabilità congiunta.

Se  $\{x\} \rightarrow \{x'\}$  è un update che soddisfa il bilancio dettagliato per  $\tilde{\pi}_{\eta_1}$ , allora evidentemente lo soddisfa anche per  $\{x\}, \{y\} \rightarrow \{x'\}, \{y\}$ : (sottointendiamo la  $\{y\}$  per semplicità) il bilancio dettagliato per  $\tilde{\pi}_{\eta_1}$  si scrive  $P_{xx'} \tilde{\pi}_{\eta_1}(x') = P_{x'x} \tilde{\pi}_{\eta_1}(x)$  e moltiplicando per  $\tilde{\pi}_{\eta_2}(y)$  si ha  $P_{x'x} \tilde{\pi}(x', y) = P_{x'x} \tilde{\pi}(x, y)$  quindi  $P_{xy, x'y} = P_{xx'} \tilde{\pi}$  soddisfa  $P_{xy, x'y} \tilde{\pi}(x', y) = P_{xy, xy} \tilde{\pi}(x, y)$ , che è il bilancio dettagliato per  $\tilde{\pi}$ . Quindi si può evolvere ogni copia del sistema con l'update standard a parametri fissi.

L'update tipico del parallel tempering è lo scambio delle configurazioni che corrispondono a parametri diversi, quindi  $\{x\}, \{y\} \rightarrow \{y\}, \{x\}$ . Tale update viene accettato con probabilità  $P_{xy, yx} = \min \left\{ 1, \frac{\pi(x, y)}{\pi(y, x)} \right\}$  (assumendo che lo scambio avvenga in modo simmetrico, in modo da non dover usare la correzione di Hastings).

Supponendo  $\frac{\pi(x, y)}{\pi(y, x)} < 1$  si ha infatti:

$$P_{xy, yx} \tilde{\pi}(y, x) = \underbrace{\frac{\pi(x, y)}{\pi(y, x)} \pi(y, x)}_{\pi(x, y)} = \pi(x, y) = \min \left\{ 1, \frac{\pi(y, x)}{\pi(x, y)} \right\} \pi(x, y) = P_{yx, xy} \tilde{\pi}(x, y)$$

che è il bilancio dettagliato. Nel caso  $\frac{\pi(x, y)}{\pi(y, x)} > 1$  la dimostrazione è analogia.

Supponendo di essere interessati a simulare  $\eta_1$ , introduciamo quindi  $N_R$  copie del sistema con parametri  $\eta_1 < \eta_2 < \dots < \eta_{N_R}$ . (ricordiamo che per  $N_R$  grande il sistema decorre bene). Evolviamo i  $N_R$  sistemi con update locali e ogni tanto provvediamo degli scambi di configurazione fra  $\eta_i$  diversi. In questo modo gli  $\eta_i$  "grandi" forniscono nuove configurazioni decorrelate ai sistemi con  $\eta_i$  piccoli. Se siamo interessati solo a  $\eta_1$  possiamo fare misure limitandoci a questo sistema. Si può mostrare che affinché la prob. di scambi  $\eta_i \leftrightarrow \eta_{i+1}$  non dipenda da "i" si deve avere  $\eta_{i+1} = k \eta_i$ , con  $k$  indipendente da "i" (per la particolarità sul coevo, non in generale!).

Poiché il parallel tempering usa  $N_R$  copie del sistema, ricordando che l'errore è  $\propto \frac{\tau_{int}}{\sqrt{N}}$ , affinché il parallel tempering risulti conveniente si deve avere

$$\frac{\tau_{int}}{\sqrt{N R}} > \frac{\tau^{PT}}{\sqrt{N}}$$
 dove  $\tau^{PT}$  è il tempo di autocorrelaz. integrato ottenuto con il parallel tempering, mentre il fattore  $N_R$  tiene conto del fatto che al posto di tempo massima  $N$  update parallel tempering corrispondono circa a  $NN_R$  update del sistema singolo.

PARTICELLE IDENTICHE

Considereremo un sistema di 2 particelle identiche nell'ensemble canonico, non interagenti tra loro. Quasi tutto si generalizza senza particolari difficoltà al caso di  $N$  bosoni non interagenti, mentre il caso fermionico è più complicato (già con 2 particelle).

Trascureremo sempre, per semplicità, i gradi di libertà di spin.

FUNZIONE DI PARTIZIONE

Chiamiamo con  $Z_1(\beta)$  la funzione di partizione di singola particella

$$Z_1(\beta) = \sum_m \langle m | e^{-\beta H} | m \rangle$$

consideriamo un sistema di due particelle non interagenti con Hamiltoniana  $H(q_1, p_1) + H(q_2, p_2)$ , che indicheremo semplicemente con  $H_1 + H_2$ . Se le particelle sono distinguibili allora gli stati del sistema sono  $|m_1 m_2\rangle$  e si ha

$$\begin{aligned} Z_2(\beta) &= \sum_{m_1 m_2} \langle m_1 m_2 | e^{-\beta H_1 - \beta H_2} | m_1 m_2 \rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_2 \rangle = \\ &= \left( \sum_{m_1} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \right) \left( \sum_{m_2} \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_2 \rangle \right) = Z_1(\beta)^2 \end{aligned}$$

Come nel caso classico. Nel caso in cui le particelle siano bosoni indistinguibili gli stati del sistema sono  $|m_1 m_1\rangle$  e  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|m_1 m_2\rangle + |m_2 m_1\rangle)$  per  $m_1 > m_2$ . La funzione di partizione del sistema è quindi:

$$\begin{aligned} Z_{2b}(\beta) &= \sum_{m_1} \langle m_1 m_1 | e^{-\beta H_1 - \beta H_2} | m_1 m_1 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{m_1 > m_2} (\langle m_1 m_2 | + \langle m_2 m_1 |) e^{-\beta H_1 - \beta H_2} (|m_1 m_2\rangle + |m_2 m_1\rangle) = \\ &= \sum_{m_1} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle + \frac{1}{2} \sum_{m_1 > m_2} \left\{ \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_2 \rangle + \langle m_2 | e^{-\beta H_1} | m_2 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_2 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle + \langle m_2 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_2} | m_2 \rangle \right\} = \end{aligned}$$

$$= \sum_{m_1} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle + \sum_{m_1 > m_2} \left\{ \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_2 \rangle + \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_2 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle \right\}$$

Si ha inoltre  $\sum_{m_1 > m_2} = \frac{1}{2} \sum_{m_1 \neq m_2}$  quindi

$$\begin{aligned} \sum_{m_1 > m_2} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_2 \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{m_1} \left\{ \sum_{m_2} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_2 \rangle - \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle \right\} \\ &= \frac{1}{2} Z_1(\beta)^2 - \frac{1}{2} \sum_{m_1} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{m_1 > m_2} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_2 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{m_1} \left\{ \sum_{m_2} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_2 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle - \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle \right\} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{m_1} \left\{ \langle m_1 | e^{-2\beta H_1} | m_1 \rangle - \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \right\} = \\ &= \frac{1}{2} Z_1(2\beta) - \frac{1}{2} \sum_{m_1} \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \quad \text{quindi infine} \end{aligned}$$

$$Z_{2b}(\beta) = \frac{1}{2} Z_1(\beta)^2 + \frac{1}{2} Z_1(2\beta)$$

Nel caso di due fermioni gli stati sono  $\frac{1}{\sqrt{2}} (|m_1 m_2\rangle - |m_2 m_1\rangle)$  con  $m_1 > m_2$

$$\begin{aligned} Z_{2f}(\beta) &= \frac{1}{2} \sum_{m_1 > m_2} (|m_1 m_2\rangle - |m_2 m_1\rangle) e^{-\beta H_1 - \beta H_2} (|m_1 m_2\rangle - |m_2 m_1\rangle) = \\ &= \sum_{m_1 > m_2} \left\{ \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_1 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_2 \rangle - \langle m_1 | e^{-\beta H_1} | m_2 \rangle \langle m_2 | e^{-\beta H_2} | m_1 \rangle \right\} \end{aligned}$$

e usando le stesse manipolazioni del caso bosonomico si arriva a

$$Z_{2f}(\beta) = \frac{1}{2} Z_1(\beta)^2 - \frac{1}{2} Z_1(2\beta)$$

La differenza tra il caso bosonomico e il caso fermionicco è quindi "solo" il segno del secondo termine, segno che avrà importanza fondamentale nel seguito.

Per il calcolo della funzione di partizione di  $N$  bosoni non interagenti vedi

KRAUTH "Statistical mechanics. Algorithms and computations" § 4.2.3

Nel caso in cui sia presente un potenziale armonico si ha

$$Z_1(\beta) = e^{-\hbar\omega\beta/2} \frac{1}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2 \sinh(\beta\hbar\omega/2)}$$

quindi  $Z_{2f}(\beta) = \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{4} \sinh^{-2}(\beta\hbar\omega/2) \pm \frac{1}{2} \sinh^{-1}(\beta\hbar\omega) \right\}$  dove il "+" si riferisce al caso bosonomico e il "-" al caso fermionicco.

### PATH-INTEGRAL E SIMULAZIONI

Consideriamo dapprima il caso bosonomico. Procedendo come fatto in precedenza ma usando la base delle coordinate arriviamo a

$$Z_{2b}(\beta) = \frac{1}{2} \left\{ \int dx dy \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \langle y | e^{-\beta H} | y \rangle + \int dx dy \langle x | e^{-\beta H} | y \rangle \langle y | e^{-\beta H} | x \rangle \right\}$$

Se ora scriviamo gli elementi di matrice con il path integral il primo diventa

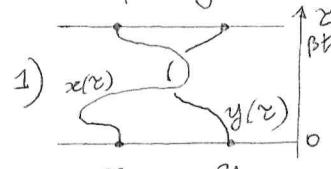
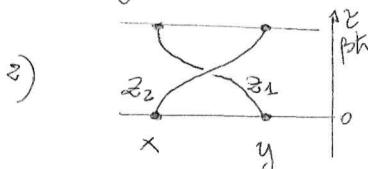
$$1) \quad \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \langle y | e^{-\beta H} | y \rangle = \int D[x(z)] e^{-S_E[x(z)]/\hbar} \int D[y(z)] e^{-S_E[y(z)]/\hbar} \quad \begin{array}{l} x(0)=x(\beta\hbar)=x \\ y(0)=y(\beta\hbar)=y \end{array}$$

che aggiungendo  $S_{\text{bdy}}$  diventa un path-integrale su due cammini periodici indipendenti.

Il secondo elemento di matrice è invece

$$2) \quad \langle x | e^{-\beta H} | y \rangle \langle y | e^{-\beta H} | x \rangle = \int D[z_1(z)] e^{-S_E[z_1]/\hbar} \int D[z_2(z)] e^{-S_E[z_2]/\hbar} \quad \begin{array}{l} z_1(0)=y \\ z_1(\beta\hbar)=x \\ z_2(0)=x \\ z_2(\beta\hbar)=y \end{array}$$

che integrando su  $x$  e  $y$  descrive il più generale cammino con un avvolgimento



L'espressione path-integrale di  $Z_{2b}(\beta)$  può quindi essere pensata come una somma su tutte le coppie di cammini  $z_1(z)$  e  $z_2(z)$  (ognuno pesato con la sua azione euclidea) che hanno condizioni al contorno o periodiche (quindi  $z_1(0) = z_1(\beta\hbar)$ ,  $z_2(0) = z_2(\beta\hbar)$ ) o cicliche ( $z_1(0) = z_2(\beta\hbar)$ ,  $z_1(\beta\hbar) = z_2(0)$ ).

Poiché inoltre c'è invarianza per traslazioni in  $z$  la somma è in realtà sulle coppie di cammini periodici indipendenti e sui cammini con un ciclo



Si vede facilmente, in modo analogo, che nel calcolo del valore medio  $A(z_1)B(z_2) + A(z_2)B(z_1)$  si ottiene l'espressione

$$\frac{1}{Z_{2b}(\beta)} \left\{ \int_{\text{period.}} D[z_1(z)] D[z_2(z)] e^{-S_E[z_1]/\hbar - S_E[z_2]/\hbar} (A(z_1(0))B(z_2(0)) + A(z_2(0))B(z_1(0))) + \right. \\ \left. + \int_{\text{ciclo}} D[z_1(z)] D[z_2(z)] e^{-S_E[z_1]/\hbar - S_E[z_2]/\hbar} (A(z_1(0))B(z_2(0)) + A(z_2(0))B(z_1(0))) \right).$$

espressione che può essere interpretata come la media statistica di  $A(z_1(0))B(z_2(0)) + A(z_2(0))B(z_1(0))$  con il peso  $\frac{e^{-S_E[z_1]/\hbar - S_E[z_2]/\hbar}}{Z_{2b}}$  e in cui l'ensemble dei cammini contiene sia le coppie di cammini periodici indipendenti sia i cicli.

Una simulazione MC può quindi essere condotta discretizzando  $S_E$  come già fatto ad esempio per l'oscillatore armonico, utilizzando due diversi tipi di update per garantire l'irriducibilità sull'ensemble dei cammini ammissibili

- 1) update "standard" in cui si aggiorna  $z_1$  o  $z_2$  fissa e vicinanza. Questo tipo di update può essere un heatbath / overrelaxation nel caso di un oscillatore armonico o un Metropolis  $z_1[n] \rightarrow z_1[n] + \Delta \cdot (1-2\text{rand})$  (con  $\Delta$  fissa e  $\text{rand} \in [0,1]$ ) in un caso più complicato.

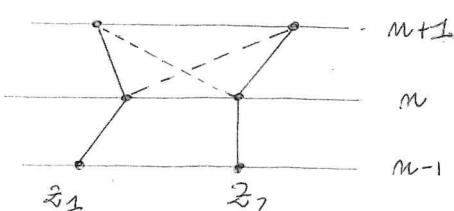
- 2) update che possono "annodare" o "tagliare" le due traiettorie. In pratica, assegnato un valore di  $M$  vogliamo modificare il collegamento

$$z_1(n) - z_1(n+1) \text{ in } z_1(n) - z_2(n+1)$$

e analogamente modificare il collegamento

$$z_2(n) - z_2(n+1) \text{ in } z_2(n) - z_1(n+1)$$

In questo cambia solo il termine cinetico della azione viene modificata, e solo al tempo  $n$ , quindi non



è difficile volutamente differenza di azione euclidea insomma che questo update e' accettato e rigettato con un test Metropolis.

Per fare in modo che questo update soddisfi il bilancio dettagliato e' sufficiente che la probabilità di scelta sia simmetrica. Due scelte notevoli sono

- scelta n casuale
- scelta n in modo tale che la trasformazione sia idempotente

Come caso (b) si puo scegliere n che minimizza  $|z_1(i) - z_2(i)|$ , in modo da massimizzare la probabilità di accettare lo scambio.

Possiamo ora ad analizzare il caso fermionico: esattamente come per la funzione di partizione, anche il valore medio di  $A(z_1)B(z_2) + A(z_2)B(z_1)$  si scrive come somma dei due termini identici a quelli del caso bosonico e quello che cambia è il segno; questo significa che i commutanti non ormai hanno probabilità  $\frac{e^{-S_E[z_1]/k} - e^{-S_E[z_2]/k}}{Z_{2f}}$ , mentre i commutanti con un ciclo hanno probabilità  $-e^{-S_E/k} - e^{-S_E/k}/Z_{2f} < 0$ .

Questo rende inapplicabile il metodo Monte-Carlo nella sua forma base ed è noto come "problema del segno". Nel caso in esame è semplice aggirare il problema:

Sia  $O(z_1, z_2)$  una generica osservabile, allora (sintetizzando le espressioni)

$$\begin{aligned} \langle O(z_1, z_2) \rangle &= \frac{\int_{\text{indip}} [D[z_1(x)] D[z_2(x)]] O(z_1, z_2) e^{-S_E[z_1]/k} - S_E[z_2]/k - \int_{\text{ciclo}} [D[z_1] D[z_2]] O(z_1, z_2) e^{-S_E/z_1/k} - S_E/z_2/k]}{Z_{2f}} = \\ &= \frac{\int_{\text{indip}} O(z_1, z_2) e^{-S_E/z_1/k} - S_E/z_2/k + \int_{\text{ciclo}} O(z_1, z_2) e^{-S_E/z_1/k} - S_E/z_2/k}{Z_{2f}} = \\ &= \frac{\int_{\text{indip}} e^{-S_E/z_1/k} - S_E/z_2/k + \int_{\text{ciclo}} e^{-S_E/z_1/k} - S_E/z_2/k}{Z_{2f}} = \\ &= \frac{\langle O(z_1, z_2) (-1)^{\text{ciclo}} \rangle_B}{\langle (-1)^{\text{ciclo}} \rangle_B} \quad \text{dove } \langle \rangle_B \text{ è il valore medio sull'ensemble bosonico.} \end{aligned}$$

Abbiamo quindi usato il ripesamento per aggirare il problema del segno. Questo non è tuttavia esente da inconvenienti: nel caso dell'oscillatore armonico

$$\langle (-1)^{\text{ciclo}} \rangle_B = \frac{z_1(\beta)^2 - z_1(2\beta)}{z_1(\beta)^2 + z_1(2\beta)} = \frac{\sinh^{-2}(\beta \hbar \omega/2) - 2 \sinh^{-1}(\beta \hbar \omega)}{\sinh^{-2}(\beta \hbar \omega/2) + 2 \sinh^{-1}(\beta \hbar \omega)} \quad \text{che è}$$

una funzione che vale 1 a  $\beta \hbar \omega \rightarrow 0$  e tende a zero exp per  $\beta \hbar \omega \rightarrow \infty$ , quindi nel limite di bassa temperatura il ripesamento ha problemi, in quanto

è molto difficile stimare accuratamente  $\langle (-1)^{\text{ciclo}} \rangle_B$ .

Una spiegazione intuitiva di questo fatto si ottiene notando che per  $\beta \hbar \omega \rightarrow \infty$  gli stati "importanti" per il path-integrale bosonico e fermionico sono diversi, quindi il ripescamento fallisce per un problema di piccoli overlap.

A  $\beta \hbar \omega \rightarrow \infty$  domina  $|0,0\rangle$  nel caso bosonico e  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|101\rangle + |110\rangle)$  nel caso fermionico.

### TEST NUMERICO

Un semplice test consiste nel riprodurre l'energia interna attesa:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{\cosh(\frac{\beta \hbar \omega}{2}) \sinh^3(\beta \hbar \omega) \pm 3 \cosh(\beta \hbar \omega) \sinh^3(\beta \hbar \omega/2)}{\sinh(\frac{\beta \hbar \omega}{2}) \sinh(\beta \hbar \omega) [\sinh(\beta \hbar \omega) \pm 3 \sinh^2(\frac{\beta \hbar \omega}{2})]}$$

col risondo il teorema del viriale si ha

$$U = \langle (z_1^2(0) + z_2^2(0)) \rangle = \frac{1}{N_t} \sum_{i=0}^{N_t-1} \langle (z_1^2(i) + z_2^2(i)) \rangle$$

Per dim th. del viriale: per ogni stato stazionario  $|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi_0\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\psi_0\rangle$  quindi

$$0 = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \vec{x} \cdot \vec{p} | \psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \psi(t) | [H, \vec{x} \cdot \vec{p}] | \psi(t) \rangle \quad \text{insieme}$$

$$[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x}), \vec{x} \cdot \vec{p}] = [\frac{\vec{p}^2}{2m}, \vec{x}] \cdot \vec{p} + \vec{x} \cdot [\vec{p}, V(\vec{x})] \quad , \quad [\vec{p}^2, x_i] = -2i\hbar p_i, [V(\vec{x}), p_i] = i\hbar \frac{\partial V}{\partial x_i}$$

quindi  $0 = 2 \langle \psi(t) | \frac{\vec{p}^2}{2m} | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \vec{x} \cdot \vec{\nabla} V | \psi(t) \rangle$ . Per l'oscillatore armonico

si ottiene  $\langle T \rangle = \langle \nabla \rangle$

Per la relazione tra cicli e condensazione vedi

KRAUTH "Statistical mechanics. Algorithms and computations" § 4.2.4

e per il caso gravitonomico

D'ALESSANDRO, D'ELIA, SHURYAK "Thermal monopole condensation and confinement in finite Temperature Yang-Mills theories" Phys. Rev. D 81 094501 (2010)  
 (arXiv 1002.4161)

Esempio applicazione "vera"

CETTERLEY "Path-integrals in the theory of condensed helium" Rev. Mod. Phys. 62, 249 (1995)

