

# Coppia di particelle identiche in un potenziale armonico unidimensionale.

Francesco Negro, Matteo Carrega

## 1 Introduzione

Scopo di questa tesina sarà quello di effettuare delle simulazioni, mediante l'uso di tecniche di tipo Monte Carlo dinamico, di una coppia di particelle in un potenziale armonico. In particolare studieremo particelle senza spin, volendo evidenziare le differenze tra bosoni, fermioni e particelle distinguibili. Scegliamo perciò alcune osservabili di particolare interesse e le andremo a valutare numericamente nei diversi casi, infine confronteremo le misure con le previsioni teoriche. La tecnica che utilizzeremo sarà quella vista durante il corso di metodi numerici in teoria dei campi ovvero gli integrali di cammino per lo studio di un sistema quantistico elementare. Punto di partenza sarà pertanto il risultato ottenuto per la discretizzazione dell'azione per una sola particella soggetta ad un potenziale di tipo armonico.

## 2 Azione discretizzata.

Riportiamo il risultato che si ottiene volendo discretizzare l'azione per una particella di massa  $m$  immersa in un potenziale armonico di frequenza  $\omega$

$$S_1 = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left( \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \quad (1)$$

Avendo già effettuato la rotazione di *Wick* per passare all'euclideo. La coordinata temporale  $\tau$  va intesa come compattificata con condizioni periodiche al contorno. La geometria del sistema è perciò quella di un cilindro: lungo l'asse del cilindro avremo la coordinata spaziale, mentre la coordinata temporale correrà lungo la circonferenza. La versione discretizzata è la seguente

$$S_1^D = \sum_{j=1}^n \left( \frac{\eta}{2} y_j^2 + \frac{1}{2\eta} (y_{j+1} - y_j)^2 \right) \quad (2)$$

dove abbiamo suddiviso l'intervallo temporale in  $n$  intervalli di lunghezza  $a = \frac{\beta\hbar}{n}$ , inoltre avendo identificato la lunghezza caratteristica del sistema con  $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$  abbiamo introdotto la coordinata adimensionale definita sul reticolo  $y_j = y(a_j) = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x(a_j)$ . Il parametro  $\eta = a\omega$  è uno dei parametri caratteristici in gioco e per soddisfare il limite continuo (in cui la lunghezza  $a$  del lattice spacing  $\rightarrow 0$ ) deve essere scelto sufficientemente piccolo. Osserviamo che si ottiene la relazione

$$n\eta = \beta\hbar\omega \quad (3)$$

pertanto volendo modificare la temperatura del sistema, ad  $\eta$  fisso, dovremo andare a modificare  $n$ . Un'ultima considerazione va fatta sulla realizzazione delle condizioni al contorno periodiche che vengono imposte mediante  $y_k = y_{n+k}$  per ogni  $k \in \mathbb{Z}$ .

Il nostro intento sarà quello di studiare un sistema costituito da due particelle identiche con coordinate  $(q_1, p_1)$  e  $(q_2, p_2)$ . Vogliamo considerare un sistema non interagente, perciò avremo che l'hamiltoniana totale é data da

$$H = H_1 + H_2 \quad (4)$$

con

$$H_i = \frac{p_i^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}q_i^2 \quad i = 1, 2 \quad (5)$$

Per iniziare consideriamo il caso di particelle identiche distinguibili e andiamo a valutare la funzione di partizione del sistema<sup>1</sup>

$$Z_2^d = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int dx_1 dx_2 \langle x_1 x_2 | e^{-\beta H} | x_1 x_2 \rangle \quad (6)$$

in questo caso, visto che stiamo pensando a particelle distinguibili, l'integrazione é ora banale e si ottiene

$$Z_2^d = (Z_1)^2 = \int Dx_1 e^{-S_1[y_1]} \cdot \int Dx_2 e^{-S_1[y_2]} \quad (7)$$

Quindi in questo caso il sistema può essere descritto da due cammini  $y_1$  e  $y_2$  totalmente indipendenti uno dall'altro. Per realizzare delle simulazioni numeriche ci possiamo quindi ricondurre al caso di una singola particella semplicemente raddoppiando, per esempio, il numero delle misure effettuate, oppure considerando una coppia di variabili e facendole evolvere in maniera indipendente. Se consideriamo il caso di particelle indistinguibili questo non é più vero e dobbiamo fare attenzione al tipo di particelle in gioco. Analizziamo prima il caso di due particelle identiche di tipo bosonico. Dovremo considerare come base per gli stati a posizione definita la combinazione totalmente simmetrica

$$|x_1 x_2\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|x_1 x_2\rangle + |x_2 x_1\rangle) \quad (8)$$

Possiamo quindi procedere a valutare la funzione di partizione anche in questo caso

$$Z_2^b = \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 \langle x_1 x_2 | e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} (|x_1 x_2\rangle + |x_2 x_1\rangle) = \quad (9)$$

$$= \frac{1}{2} \int dx_1 dx_2 [\langle x_1 x_2 | e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} | x_1 x_2 \rangle + \langle x_1 x_2 | e^{-\beta H_1} e^{-\beta H_2} | x_2 x_1 \rangle] = \quad (10)$$

$$= \frac{1}{2} (Z_1^2 + \int dx_1 dx_2 \langle x_1 | e^{-\beta H_1} | x_2 \rangle \langle x_2 | e^{-\beta H_2} | x_1 \rangle) = \quad (11)$$

$$= \frac{1}{2} (Z_1^2 + \int dx_1 \langle x_1 | e^{-2\beta H_1} | x_1 \rangle) = \quad (12)$$

---

<sup>1</sup> nel seguito indicheremo con  $d, b$ , e  $f$  rispettivamente i diversi casi di particelle distinguibili, bosoni e fermioni.

$$= \frac{1}{2}(Z_1^2(T) + Z_1(\frac{T}{2})) \quad (13)$$

Diversamente dal caso precedente abbiamo ora il contributo di due termini, il primo risulta analogo a (7), mentre il secondo tiene conto della correlazione di scambio. Per chiarire meglio il significato del secondo termine possiamo pensare di avere un cammino lungo il doppio dei precedenti, cioè  $2\beta\hbar$ , che si avvolge due volte intorno al cilindro di circonferenza  $\beta\hbar$ . Le condizioni al contorno saranno pertanto le seguenti

$$y_k = y_{k+2n} \quad (14)$$

questo può essere visualizzato graficamente perciò come un elastico che si avvolge due volte intorno al cilindro, incrociandosi una volta. Scriviamo perciò la funzione di partizione in termini di integrale funzionale

$$Z_2^b = \int Dy_1 Dy_2 e^{-S_1[y_1]} e^{-S_1[y_2]} + \int Dy e^{-S_2[y]} \quad (15)$$

dove abbiamo indicato con  $S_2$  un termine di azione (discretizzato) di una particella in un potenziale armonico, ma di “lunghezza” temporale doppia.

Se ora vogliamo considerare particelle identiche di statistica fermionica dobbiamo considerare la base per gli stati a posizione definita totalmente antisimmetrica

$$|x_1 x_2\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|x_1 x_2\rangle - |x_2 x_1\rangle) \quad (16)$$

questo comporta alcune modifiche ai calcoli svolti precedentemente che portano al risultato

$$Z_2^f = \frac{1}{2}(Z_1^2(T) - Z_1(\frac{T}{2})) \quad (17)$$

e in termini di integrale sui cammini

$$Z_2^f = \int Dy_1 Dy_2 e^{-S_1[y_1]} e^{-S_1[y_2]} - \int Dy e^{-S_2[y]} \quad (18)$$

Dobbiamo però fare attenzione, infatti il segno meno introdotto dalla statistica fermionica comporta alcuni problemi non banali. Diversamente dal caso bosonico i cammini che si incrociano una volta dovranno essere pesati con un segno negativo (17). Questo fatto è particolarmente spiacevole, perché non ci permette più di interpretare la funzione di partizione totale come una funzione di distribuzione di probabilità. Nel corso della nostra simulazione non potremo perciò impiegare la  $Z_2^f$  per campionare i cammini, in quanto non ben definita come funzione di distribuzione di probabilità. Per ovviare a questo problema possiamo utilizzare il metodo del ripesamento: campioniamo con la funzione di distribuzione di probabilità bosonica (13) e teniamo conto della distribuzione fermionica come se fosse un termine dell’osservabile che scegliamo di misurare.

$$\langle O \rangle_f = \frac{\langle O \cdot \text{sign} \rangle_b}{\langle \text{sign} \rangle_b} \quad (19)$$

Si vede subito che l’algoritmo può avere comunque dei problemi, in particolare quando il valor medio del “segno” si annulla.

### 3 Algoritmo.

Per effettuare delle simulazioni numeriche del sistema quantistico in esame vogliamo utilizzare una particolare classe di algoritmi Monte Carlo. Si tratta di algoritmi di tipo dinamico, ovvero algoritmi in cui la scelta dello stato successivo dipende in qualche modo dagli stati precedenti. Utilizzeremo, per le nostre simulazioni, un algoritmo costituito da due parti distinte, ognuna delle quali di tipo Metropolis. Descriveremo ora separatamente le due parti, senza però entrare nel dettaglio della teoria generale che daremo per nota. Ricordiamo solamente che il metodo Metropolis è particolarmente utile quando si vogliono estrarre stocasticamente delle quantità che seguano una data funzione di distribuzione di probabilità; il metodo utilizza un processo di tipo “catena di Markov” e devono essere rispettate certe condizioni date da una regola di *bilancio dettagliato*.

Per quanto riguarda un sistema di due particelle identiche ma distinguibili sarà sufficiente effettuare la prima parte dell'algoritmo, mentre per le particelle indistinguibili, che siano esse fermioni o bosoni, dovremo utilizzare anche la seconda parte dell'algoritmo. Questa scelta è gestita dall'utente tramite una variabile booleana all'inizio del programma.

Schematicamente riportiamo qui la struttura di un generico algoritmo di tipo Metropolis

- Si sceglie uno stato di prova  $x_p$  tramite una regola (simmetrica) a partire dallo stato iniziale  $x$ .
- Si calcola il rapporto  $w = \frac{P(x_p)}{P(x)}$
- Si estrae una variabile random  $r \in [0, 1]$ .
- Si sceglie come stato successivo  $x' = x_p$  se  $r < w$ , altrimenti  $x' = x$ .

Rifacendoci a questa struttura andiamo ora a descrivere le due parti del nostro algoritmo, per semplicità chiameremo la prima parte *update* e la seconda *scambio*. Per quanto riguarda l'*update* l'idea è quella di effettuare un test di accettazione di tipo metropolis dopo aver variato la coordinata  $i$  di un cammino di una piccola quantità. L'idea alla base è quella di utilizzare la formulazione in termini di integrale funzionale e considerare la quantità  $e^{-S[x_i]}$  come funzione di distribuzione di probabilità. Ad ogni passo dell'algoritmo viene modificata la coordinata  $x_i$  e viene effettuato il test di accettazione valutando il rapporto tra le probabilità date dall'esponentiale dell'azione valutata nella posizione considerata. Per questo abbiamo scritto in precedenza l'azione del nostro sistema in maniera discreta, introducendo i parametri adimensionali e le quantità proprie del sistema finito, come la spaziatura reticolare che abbiamo discusso nel paragrafo precedente. Ricordiamo che le simulazioni effettuate su un reticolo discreto potrebbero avere effetti non desiderati dovuti proprio al fatto di aver discretizzato il sistema, bisogna porre molta attenzione a questo fatto e andare a effettuare alcune prove preliminari per essere sicuri di raggiungere il limite continuo o comunque di eliminare eventuali effetti spuri ( nel nostro caso questo sarà fatto andando a modificare opportunamente il parametro  $\eta$  ).

L'algoritmo prevede una prima parte, detta di *termalizzazione*, dove vengono cambiate le condizioni iniziali e vengono effettuati un numero sufficiente di passi

di metropolis fino a raggiungere la funzione di distribuzione di equilibrio, che deve coincidere con la funzione di distribuzione di probabilità voluta.

Piú nel dettaglio nella parte di *update* possiamo distinguere le due coordinate  $x_i$  e  $y_i$  del nostro sistema quantistico di due particelle identiche e far evolvere separatamente i due “cammini” andando a valutare le azioni di singola particella. Abbiamo riscritto l’azione di singola particella discretizzata. Ricordando che per il test di accettazione Metropolis l’unico contributo rilevante é il rapporto tra le probabilità tra lo stato di prova e lo stato precedente, abbiamo riscritto questo rapporto in maniera locale. L’algoritmo effettua perciò ogni volta un passo di Metropolis per ognuna delle coordinate delle particelle. Riportiamo qui l’espressione per il rapporto tra i pesi statistici  $w_{update}$  per una delle due coordinate. L’equivalente si avrà mandando  $x \rightarrow y$ .

$$w_{update} = e^{-(x_p^2[j]-x^2[j])\cdot(\frac{\eta}{2}+\frac{1}{\eta})+\frac{1}{\eta}(x[j+1]+x[j-1])(x_p[j]-x[j])} \quad (20)$$

Bisogna prestare particolare attenzione alle condizioni al contorno perché questo termine di azione coinvolge anche i siti primi vicini al sito  $j$ . In particolare vogliamo rispettare le condizioni al bordo che avevamo discusso nel primo paragrafo e queste interverranno quando si andranno a modificare i siti  $j = 0$  e  $j = n - 1$ . Per quanto riguarda il caso di particelle distinguibili le condizioni al contorno saranno

$$x[-1] = x[n - 1] \quad x[n] = x[0] \quad (21)$$

$$y[-1] = y[n - 1] \quad y[n] = y[0] \quad (22)$$

Per quanto riguarda invece le particelle indistinguibili dovremo distinguere il caso in cui lo stato che stiamo provando a modificare é costituito da cammini *incrociati* oppure da cammini indipendenti. Per tenere conto di questa possibilità abbiamo dichiarato una variabile booleana *flip*. Se *flip* = true i cammini risultano incrociati quindi le condizioni al contorno vengono modificate

$$x[-1] = y[n - 1] \quad x[n] = y[0] \quad (23)$$

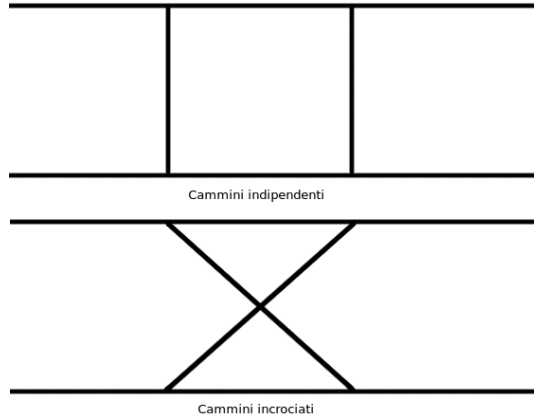
$$y[-1] = x[n - 1] \quad y[n] = x[0] \quad (24)$$

Altrimenti le condizioni ai bordi rimangono quelle del caso distinguibile.

Passiamo ora a descrivere la parte di algoritmo che gestisce la probabilità di *scambio*. L’idea é quella di considerare i due cammini e scegliere come stato di prova quello in cui, da un certo punto in avanti, questi risultino scambiati. A prima vista questo tipo di ragionamento sembra portare alla scrittura di un rapporto tra le probabilità che coinvolge interamente l’azione; in realtà dopo alcuni conti si riesce a esprimere  $w_{scambio}$  in modo locale. In particolare otteniamo un’espressione del tipo

$$w_{scambio} = e^{-\frac{1}{\eta}(x[j-1]-y[j-1])\cdot(x[j]-y[j])} \quad (25)$$

dove con  $j$  intendiamo il punto a partire dal quale effettuiamo lo scambio. Come nel caso precedente bisogna usare le corrette condizioni al contorno per  $x[j - 1]$  e  $y[j - 1]$ . La scelta del sito  $j$  può essere fatta in diversi modi. Un primo approccio é quello di estrarre a caso il valore del sito stesso; un’altra possibilità é quella di valutare quando i due cammini risultano il piú vicino possibile e di utilizzare questo come punto di scambio. Andrà poi verificato quale di queste scelte risulti la piú conveniente.



## 4 Le osservabili e le misure.

Procediamo ora andando a identificare le osservabili che scegliamo di studiare per il nostro sistema quantistico in esame. Di seguito andremo via via a effettuare il calcolo teorico per le quantità di interesse e poi esporremo i risultati delle simulazioni per i diversi casi di particelle di tipo  $d$ ,  $b$  o  $f$ .

### 4.1 Energia media in funzione della temperatura.

La prima quantità che vogliamo andare a misurare riguarda l'energia media dello stato fondamentale

$$\langle E \rangle = \langle T + V \rangle \rightarrow \langle x^2 + y^2 \rangle \quad (26)$$

nell'ultimo passaggio abbiamo utilizzato il teorema del viriale per esprimere l'energia cinetica in termini di quella potenziale e abbiamo espresso tutto in termini delle nostre quantità adimensionali. Procediamo ora mostrando i valori attesi per questa quantità nei diversi casi, da un punto di vista teorico. Punto di partenza comune é

$$\frac{\text{Tr}(H e^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \quad (27)$$

Al denominatore possiamo riconoscere l'espressione per la funzione di partizione del sistema  $Z$ . Dalla meccanica statistica sappiamo che possiamo riesprimere (27) come

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z) \quad (28)$$

Calcoliamo quindi l'espressione analitica per quanto riguarda la funzione di partizione per poter ricavare l'energia interna del sistema. Iniziamo con il caso di due particelle distinguibili

$$Z_2^d = Z_1^2 = \frac{1}{4} \sinh^{-2}\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right) \quad (29)$$

e quindi per l'energia interna

$$\langle E^d \rangle = \coth\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \quad (30)$$

Per quanto riguarda il calcolo della funzione di partizione nel caso delle altre due statistiche ci riferiamo alla formulazione che avevamo dato nel primo paragrafo (13) e (17), otteniamo

$$Z_2^{b/f} = \frac{1}{8} \left( \sinh^{-2}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \pm 2 \sinh^{-1}(\beta\hbar\omega) \right) \quad (31)$$

dove distinguiamo rispettivamente il caso bosonico e quello fermionico con il segno  $\pm$ . Questo porta all'energia

$$\langle E^{b/f} \rangle = \frac{\left( \cosh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \sinh^2(\beta\hbar\omega) \pm 2 \cosh(\beta\hbar\omega) \sinh^3\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \right)}{\left( \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \sinh(\beta\hbar\omega) \right) \cdot \left( \sinh(\beta\hbar\omega) \pm 2 \sinh^2\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) \right)} \quad (32)$$

A questo punto avendo ricavato l'andamento dell'energia media in funzione della temperatura nei diversi casi possiamo effettuare il limite a temperatura nulla e ottenere il valore atteso per l'energia media dello stato fondamentale

$$\langle E_{T=0}^d \rangle = \langle E_{T=0}^b \rangle = (\hbar\omega) \cdot 1 \quad \langle E_{T=0}^f \rangle = (\hbar\omega) \cdot 2 \quad (33)$$

Abbiamo qui fattorizzato il fattore  $\hbar\omega$  per semplicità, in quanto nelle nostre simulazioni otterremo quantità adimensionali, in questo caso  $\frac{E}{\hbar\omega}$ . Avendo adesso gli andamenti teorici possiamo andare a effettuare le simulazioni per poi infine confrontare i risultati. Per quanto riguarda il caso fermionico discuteremo a parte i problemi che sorgono a bassa temperatura. Vogliamo quindi ora ottenere il valor medio dell'energia in funzione della temperatura, che a partire dai nostri cammini campionati è dato da

$$\langle E(T) \rangle = \left\langle \sum_i \left( \frac{x^2[i] + y^2[i]}{n} \right) \right\rangle \quad (34)$$

dove con  $n$  si intende la lunghezza di ogni singolo cammino, che determina la "temperatura" del sistema (3). Dovremo quindi scegliere un valore fissato di  $\eta$  che soddisfi il limite continuo e andremo a variare il parametro  $n$  all'interno delle nostre simulazioni. Dopo diverse prove abbiamo scelto come valore  $\eta = 0.05$ . Riportiamo qui di seguito i valori di temperatura e le rispettive conversioni sui quali abbiamo poi effettuato le misure.

T	0.02	0.2	0.25	0.4	0.5	0.67	0.8	1.0	1.33	2.0
$\beta$	50	5	4	2.5	2	1.5	1.25	1	0.75	0.5
n	1000	100	80	50	40	30	25	20	15	10

Riportiamo qui di seguito i risultati ottenuti, con i confronti con le previsioni teoriche

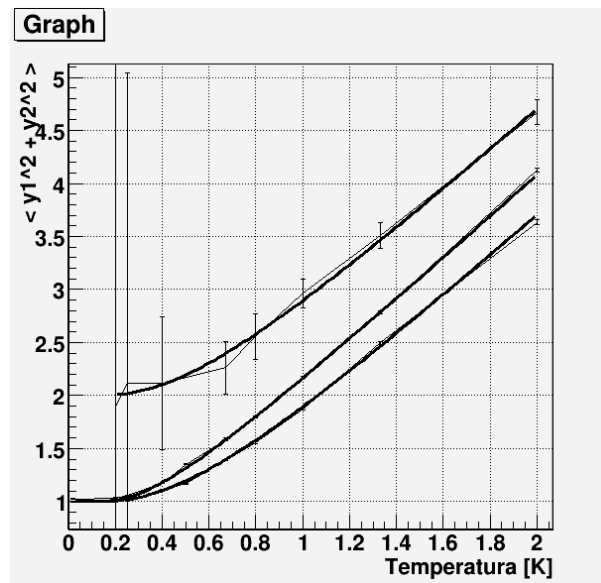
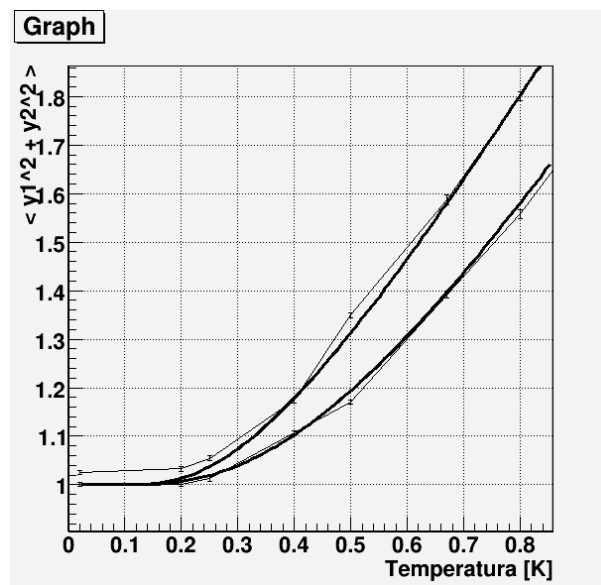


Figura 1: energia media

Riportiamo qui la stessa immagine in un range di temperature basse soltanto per quanto riguarda il caso di bosoni e di particelle distinguibili.



Possiamo osservare che l'andamento risulta in buon accordo con gli andamenti



previsti, soprattutto per quanto riguarda il caso bosonico e quello delle particelle distinguibili. Il caso fermionico, come detto in precedenza, presenta grosse fluttuazioni al diminuire della temperatura che discuteremo nella sezione successiva. Gli errori sono stati calcolati opportunamente, tenendo anche conto del tempo di correlazione proprio dei sistemi, che contribuisce all'errore per un fattore  $\sqrt{2\tau_{corr} + 1}$ . Il calcolo del tempo di correlazione veniva effettuato per ogni misura in una "subroutine" a parte.

## 4.2 Il problema del segno.

Vogliamo ora discutere meglio il cosiddetto problema del segno, per quanto riguarda il caso fermionico. Come abbiamo già detto nelle sezioni precedenti, formulando il problema in termini di integrale sui cammini nel caso di due fermioni otteniamo un segno meno volendo scrivere la funzione di partizione del sistema. Questo fatto è dovuto proprio alla natura fermionica delle particelle, perciò non possiamo interpretare le quantità come funzioni di distribuzione di probabilità (17). Abbiamo visto in precedenza un modo esplicito per poter ovviare a questo problema, cioè il metodo del ripesamento con un peso statistico di tipo bosonico, vedi (19). Facendo in questo modo però compare al denominatore la quantità

$$\langle sign \rangle_b \quad (35)$$

, cioè il valore medio del "segno" mediato su tutte le configurazioni. Abbiamo perciò ricondotto il problema di una funzione di distribuzione di probabilità non ben definita, a quello di avere delle quantità che in linea di principio possono divergere a seconda del valore della quantità in (35). In particolare notiamo come a temperatura nulla otterremmo un valore medio del segno nullo e quindi delle quantità divergenti, contrariamente a quanto atteso. Questo si rispecchia, nelle nostre simulazioni, con un'indeterminazione crescente al diminuire della temperatura, ad esempio sul valore medio dell'energia, come possiamo notare in (1). Il ripesamento effettuato in (19) permette di effettuare simulazioni Monte Carlo, tuttavia l'errore aumenta esponenzialmente con l'inverso della temperatura  $\beta$ . Per vedere questo consideriamo il valore medio del segno

$$\langle sign \rangle_b = \frac{Z^f}{Z^b} \quad (36)$$

essendo questo semplicemente il rapporto tra le funzioni di partizione, che sono l'esponenziale dell'energia libera del sistema, potremmo riscriverlo come l'esponenziale della differenza tra le energie libere.

$$\langle sign \rangle = e^{-\beta \Delta F} \quad (37)$$

Di conseguenza l'errore relativo  $\frac{\Delta sign}{\langle sign \rangle}$  aumenta esponenzialmente con l'inverso della temperatura, infatti

$$\frac{\Delta sign}{\langle sign \rangle} = \sqrt{\frac{(\langle sign^2 \rangle - \langle sign \rangle^2)}{m \langle sign \rangle^2}} = \frac{\sqrt{1 - \langle sign \rangle^2}}{\sqrt{m} \langle sign \rangle} \sim \frac{e^{\beta \Delta F}}{\sqrt{m}} \quad (38)$$

Il fatto che gli errori siano così pesantemente influenzati nelle nostre misure è dovuto al dover valutare in (19) delle quantità che sono il rapporto di due

grandezze affette da errore. Perciò la valutazione degli errori relativi a simili quantità é data da

$$\Delta\left(\frac{a}{b}\right) = \frac{a}{b} \left( \frac{\Delta a}{a} + \frac{\Delta b}{b} \right) \quad (39)$$

Vogliamo ora verificare questo tipo di andamento per le nostre misure. Questo può essere fatto semplicemente andando a realizzare misurando  $\frac{\Delta sign}{\langle sign \rangle}$  in funzione della temperatura.

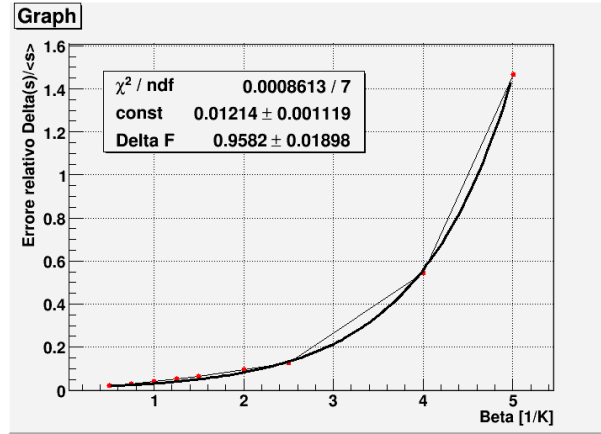


Figura 2: Andamento errore

Abbiamo potuto effettuare un confronto con il dato atteso per  $\Delta F = 1$  e ne abbiamo riscontrato un buon accordo in (2).

### 4.3 Densità di probabilità:

Nel caso fermionico é interessante andare a studiare la funzione di densità di probabilità del sistema nel limite di bassa temperatura. Ci aspettiamo che lo stato fondamentale, identificando con  $|i\rangle$  i livelli di un oscillatore armonico, sia

$$|\psi_0\rangle = a_1^\dagger a_2^\dagger |0\rangle \quad (40)$$

tenendo conto della statistica di tipo fermionico tramite l'opportuno determinante di *Slater*, ricordiamo che stiamo pensando ad un semplice caso di fermioni senza spin, possiamo giungere all'espressione

$$|\psi_0(x, y)|^2 = \frac{1}{\pi} \left( (x - y)^2 e^{-x^2 - y^2} \right) \quad (41)$$

Notiamo subito, come atteso dal principio di esclusione di *Pauli*, che lungo la retta  $x = y$  la densità di probabilità risulta nulla. Possiamo andare a studiare numericamente questa osservabile. Per far questo costruiamo un istogramma

le cui entrate saranno le coppie  $(x[i], y[i])$  per tutti i valori  $i$  dei cammini  $i = 0, 1, \dots, n-1$ . Ogni coppia verrà pesata con un segno positivo se i cammini in questione risulteranno indipendenti, e con un segno negativo altrimenti. Il valore di ogni bin dell'istogramma dovrà essere poi diviso per il valor medio del segno. Riportiamo qui alcune immagini in prospettiva che descrivono i risultati ottenuti

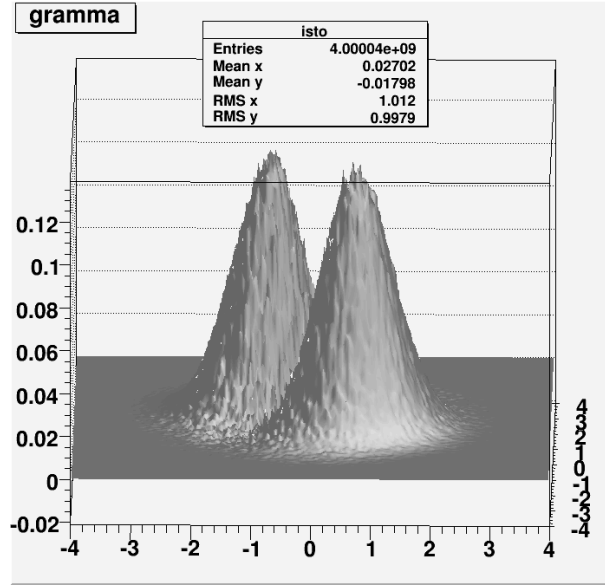


Figura 3: plot 3D

Per confrontare questa misura con l'andamento teorico in (41) abbiamo scelto per semplicità di selezionare un particolare taglio. Abbiamo preso i valori lungo la retta  $x = -y$  e li abbiamo confrontati con

$$|\psi_0(x, -x)|^2 = \frac{4x^2}{\pi} e^{-2x^2} \quad (42)$$

plottiamo di seguito il risultato

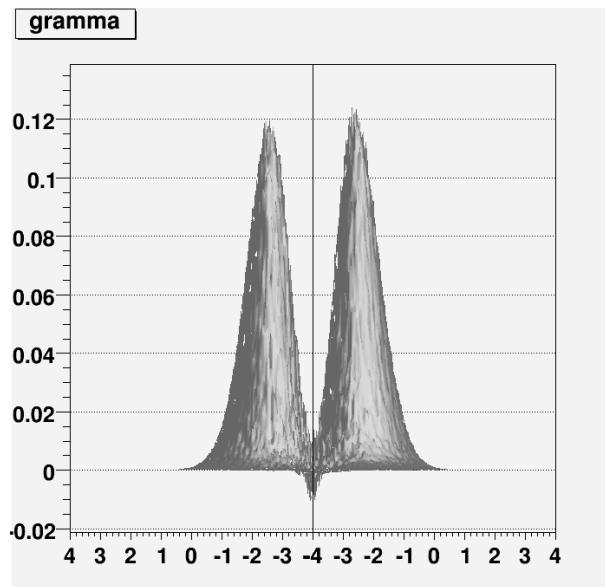


Figura 4: taglio 3D

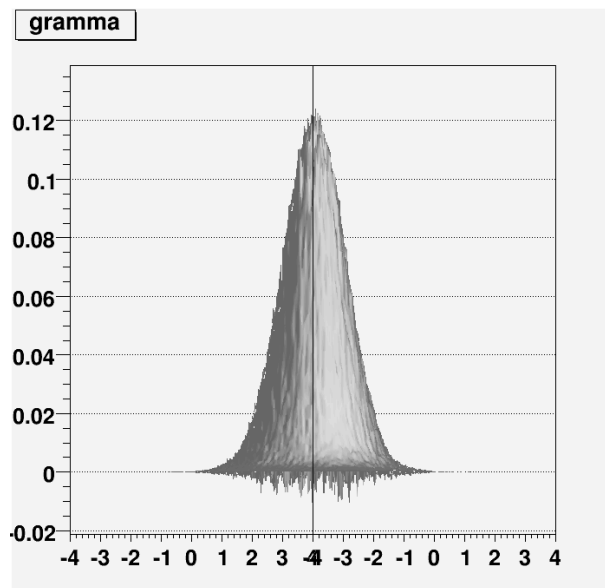


Figura 5: taglio 3D (2)

#### 4.4 Valor medio del segno.

Vogliamo infine discutere un ultimo aspetto al quale avevamo accennato in precedenza che riguarda la struttura dell'algoritmo. Nella parte di *scambio* doveva essere effettuata la scelta di un sito  $j$  a partire dal quale i cammini

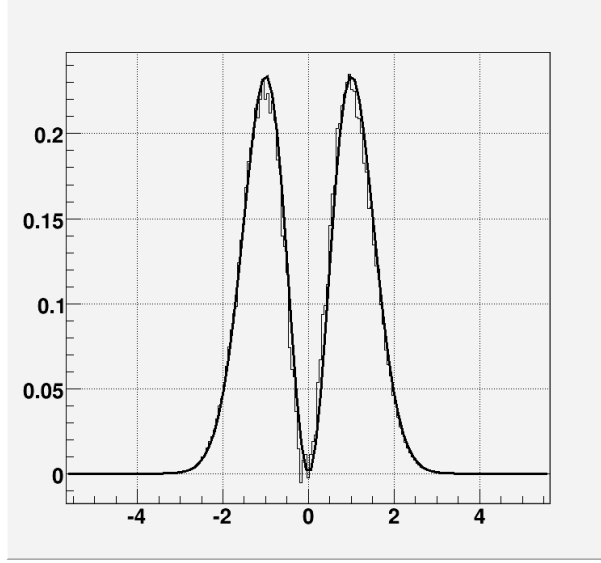


Figura 6: taglio

venivano incrociati / disincrociati. Avevamo accennato a due possibili modi per realizzare questa scelta. Nelle simulazioni precedenti le misure sono state effettuate scegliendo  $j$  tale che  $|x[j] - y[j]|$  fosse minimo. Questa scelta risulta accettabile per effettuare algoritmi di tipo Metropolis in quanto rispetta la richiesta di simmetria. Allo stesso modo potevamo scegliere di utilizzare come sito  $j$  uno qualunque estratto a caso. Per verificare che la nostra scelta fosse sufficientemente buona abbiamo pensato di misurare il valor medio del segno, che é strettamente connesso con il rapporto tra la probabilità che i cammini risultino indipendenti e quella in cui i cammini risultino incrociati. Infatti é questa la quantità che vogliamo che il nostro algoritmo riproduca fedelmente. Definiamo rispettivamente  $P_{||}$  e  $P_X$  le quantità precedenti e ricaviamo ora le seguenti relazioni. Sapendo che

$$P_{||} + P_X = 1 \quad (43)$$

abbiamo

$$\langle sign \rangle = \frac{P_{||} - P_X}{P_{||} + P_X} = P_{||} - P_X = \frac{Z_1^2(T) - Z_1(\frac{T}{2})}{Z_1^2(T) + Z_1(\frac{T}{2})} \quad (44)$$

Dalle due formule precedenti possiamo ricavare il legame tra  $\frac{P_{||}}{P_X}$  e  $\langle sign \rangle$  ottenendo

$$\frac{P_{||}}{P_X} = \frac{1 + \langle sign \rangle}{1 - \langle sign \rangle} = \frac{1 + z_1^2(T) - Z_1(\frac{T}{2})}{1 - Z_1^2(T) + z_1(\frac{T}{2})} \quad (45)$$

Riportiamo di seguito il confronto tra l'andamento teorico del valore atteso al variare della temperatura per il valor medio del segno e quello misurato.

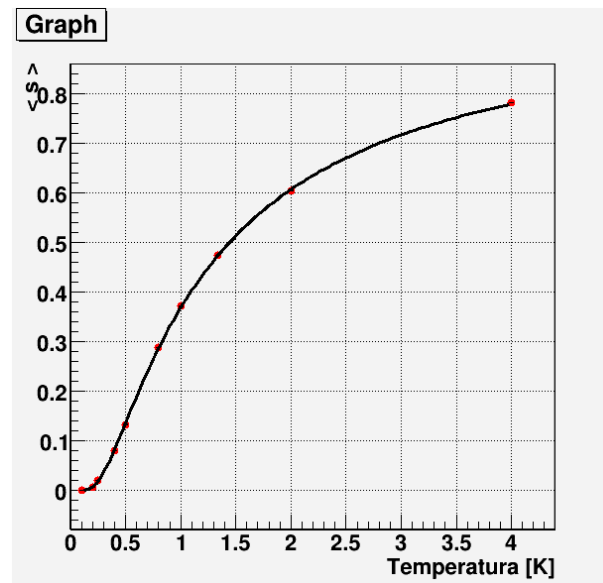


Figura 7: valor medio del signo

Visto il buon accordo di questa quantità abbiamo deciso che la nostra scelta é buona, un ulteriore possibile confronto potrebbe essere fatto andando a effettuare le misure con una diversa scelta per  $j$ .