

Appunti del Corso di Metodi Numerici della Fisica Teorica

Parte III - Applicazioni al calcolo del path-integral in meccanica quantistica

Massimo D'Elia - a.a 2016/2017

NOTA: questi appunti sono per ora da considerarsi in forma preliminare ed incompleti, coprendo solo una parte limitata degli argomenti trattati a lezione.

Contents

1	Il propagatore in termini di integrale sui cammini	2
1.1	Definizioni	2
1.2	Il propagatore	2
1.3	Integrale sui cammini	3
1.4	Propagatore ed integrale di azione	4
1.5	Integrale sui cammini e limite classico	5
1.6	Ampiezza con inserzione di operatori	6
2	Termodinamica ed integrale sui cammini	6
2.1	Valori medi termodinamici e valori medi sullo stato fondamentale	8
3	Simulazioni numerica dell'integrale sui cammini per l'oscillatore armonico	9
3.1	Schema di algoritmo Metropolis	10
4	Alcuni applicazioni	11
4.1	Energia media ed energia dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico	11
4.2	Gap energetico fra livello fondamentale e primo eccitato	12
4.3	Funzione d'onda dello stato fondamentale	13
5	Il limite al continuo come punto critico del sistema statistico corrispondente	13

1 Il propagatore in termini di integrale sui cammini

1.1 Definizioni

Consideriamo un sistema quantistico in una dimensione, definito in termini dell'operatore impulso p , dell'operatore posizione q e dell'operatore Hamiltoniano $H = H(q, p)$, che per semplicità assumiamo indipendente esplicitamente dal tempo. È definito un insieme completo di stati $|k\rangle$ dell'operatore impulso

$$p|k\rangle = k|k\rangle$$

$$\int \frac{dk}{2\pi\hbar} |k\rangle\langle k| = Id$$

ed un insieme completo di stati $|x\rangle$ dell'operatore coordinata.

$$q|x\rangle = x|x\rangle$$

$$\int dx |x\rangle\langle x| = Id$$

I due insiemi completi sono legati dalla relazione

$$\langle x|k\rangle = \exp(ikx/\hbar)$$

Data l'invarianza dell'hamiltoniano sotto traslazioni temporali, lo stato generico $|\psi(t)\rangle$ evolve nel tempo secondo l'equazione

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (1)$$

1.2 Il propagatore

L'oggetto da cui partiamo è l'ampiezza di probabilità che il sistema passi da un autostato della coordinata $|x_a\rangle$ al tempo t_a ad un altro autostato $|x_b\rangle$ al tempo t_b , definita da

$$K(x_b, x_a, t_b, t_a) \equiv \langle x_b | e^{-iH(t_b-t_a)/\hbar} | x_a \rangle \quad (2)$$

tale quantità è anche nota come propagatore dal punto x_a al punto x_b nel tempo t e la sua conoscenza di fatto risolve completamente la teoria, in quanto permette di scrivere la funzione d'onda di un generico stato al tempo t_b in termini della sua funzione d'onda al tempo t_a

$$\begin{aligned} \psi(x, t_b) \equiv \langle x | \psi(t_b) \rangle &= \langle x | e^{-iH(t_b-t_a)/\hbar} | \psi(t_a) \rangle \\ &= \int dx' \langle x | e^{-iH(t_b-t_a)/\hbar} | x' \rangle \langle x' | \psi(t_a) \rangle \\ &= \int dx' K(x_b, x_a, t_b, t_a) \psi(x', t_a) \end{aligned} \quad (3)$$

dove nella penultima uguaglianza abbiamo inserito un insieme completo di autostati della coordinata e nell'ultima abbiamo usato la definizione di propagatore, Eq. (2).

Il propagatore è calcolabile esattamente in alcuni casi particolari, come ad esempio nella teoria libera in cui $H = p^2/(2m)$. In tal caso infatti si ha:

$$\begin{aligned} K(x_b, x_a, t_b, t_a) &= \langle x_b | e^{-ip^2(t_b-t_a)/(2m\hbar)} | x_a \rangle \\ &= \int \frac{dk}{2\pi\hbar} \langle x_b | e^{-ip^2(t_b-t_a)/(2m\hbar)} | k \rangle \langle k | x_a \rangle \\ &= \int \frac{dk}{2\pi\hbar} e^{-ik^2(t_b-t_a)/(2m\hbar)} e^{ik(x_b-x_a)/\hbar} \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t_b - t_a)}} \exp\left(\frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)}\right) \end{aligned} \quad (4)$$

dove abbiamo inserito un insieme completo di autostati dell'impulso, abbiamo usato il fatto che tali stati per la particella libera sono autostati dell'Hamiltoniano, abbiamo sostituito la forma della funzione dell'onda piana ed infine completato un quadrato nella variabile k ad esponente in modo da poi effettuare l'integrale gaussiano nel piano complesso.

Il propagatore può essere calcolato esattamente in altri semplici casi particolari, come quello dell'oscillatore armonico, ma nel caso più generale ciò non è possibile.

1.3 Integrale sui cammini

Consideriamo un processo in cui la particella va prima dal punto x_a al punto x_1 nel tempo $(t_1 - t_a)$ e quindi dal punto x_1 al punto x_b nel tempo $(t_b - t_1)$. Tale processo è chiaramente descritto da un'ampiezza di probabilità che è il prodotto di due propagatori:

$$\langle x_b | e^{-iH(t_b-t_1)/\hbar} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-iH(t_1-t_a)/\hbar} | x_a \rangle$$

Possiamo risalire da tale ampiezza al propagatore iniziale da x_a ad x_b nel tempo $(t_b - t_a)$ se integriamo sulla posizione intermedia x_1 che non viene osservata

$$K(x_b, x_a, t_b, t_a) = \int dx_1 \langle x_b | e^{-iH(t_b-t_1)/\hbar} | x_1 \rangle \langle x_1 | e^{-iH(t_1-t_a)/\hbar} | x_a \rangle \quad (5)$$

ed infatti tale espressione può essere ricavata dalla Eq. (2) inserendo un insieme completo di stati $\int dx_1 |x_1\rangle \langle x_1|$.

Questo processo può essere iterato e possiamo quindi dividere il nostro intervallo di tempo $(t_b - t_a)$ in N intervalli di ampiezza $\delta \equiv (t_b - t_a)/N$. Scriveremo quindi l'ampiezza originaria in termini di prodotti su ampiezze in cui la particella è localizzata nel punto x_j al tempo $t_j = t_a + j\delta$, ed integreremo su tutte le possibili posizioni intermedie x_j :

$$\begin{aligned} K(x_b, x_a, t_b, t_a) &= \int dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} \langle x_b | e^{-iH(t_b-t_{N-1})/\hbar} | x_{N-1} \rangle \\ &\quad \langle x_{N-1} | e^{-iH(t_{N-1}-t_{N-2})/\hbar} | x_{N-2} \rangle \dots \langle x_1 | e^{-iH(t_1-t_a)/\hbar} | x_a \rangle \\ &= \int \left(\prod_{j=1}^N dx_j \right) \langle x_b | x_N \rangle \prod_{j=N}^1 \langle x_j | e^{-iH\delta/\hbar} | x_{j-1} \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

Nell'ultima espressione abbiamo usato la convenzione che $x_0 \equiv x_a$ e $x_N = x_b$, abbiamo esteso l'integrazione a x_N ma inserito allo stesso tempo il prodotto $\langle x_b | x_N \rangle = \delta(x_b - x_N)$ che elimina di fatto l'integrazione stessa.

Prima di procedere oltre con l'elaborazione matematica soffermiamoci su cosa abbiamo fatto: abbiamo espresso il propagatore come una somma su prodotti di ampiezze che descrivono il processo in cui la particella è nel punto x_1 al tempo t_1 , nel punto x_2 al tempo t_2 , e così via. Possiamo vedere la funzione $x_j \equiv x(t_j)$ come una spezzata che descrive una linea oraria, cioè un cammino, di una particella su un tempo discretizzato con spaziatura δ ; tale cammino ha il solo vincolo di dover portare dal punto iniziale x_a al punto finale x_b , ed è per il resto arbitrario. L'integrazione $\int (\prod_{j=1}^N dx_j)$ non è altro che una integrazione su tutti i possibili cammini. Ad ognuno dei cammini è associata una ampiezza di probabilità. Il propagatore iniziale è espresso come una somma delle ampiezze associate a tutti i possibili cammini.

Nell'elaborazione matematica che segue arriveremo a scrivere una forma di grande interesse fisico (che coinvolge l'azione classica della particella) per l'ampiezza di probabilità legata a ciascun cammino nel limite in cui il numero di intervalli diverge, $N \rightarrow \infty$, cioè la spaziatura $\delta \rightarrow 0$. In tale limite il numero di integrazioni intese nell'espressione $\int (\prod_{j=1}^N dx_j)$ diverge, i cammini diventano delle funzioni di variabile reale e l'integrale su tutti i possibili cammini diventa un integrale funzionale.

1.4 Propagatore ed integrale di azione

Da questo punto in poi restringeremo la classe di problemi trattati considerando il caso, comune a gran parte degli esempi noti, di un hamiltoniano somma di un termine cinetico quadratico nei momenti e di un termine potenziale funzione delle sole coordinate, cioè per il caso unidimensionale:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (7)$$

La quantità elementare che compare in Eq. (6) è l'ampiezza

$$\langle x_{j+1} | e^{-iH\delta/\hbar} | x_j \rangle = \langle x_{j+1} | e^{-i(K(p)+V(q))\delta/\hbar} | x_j \rangle \quad (8)$$

con $K(p) = p^2/(2m)$. La valutazione di un analogo elemento di matrice è stato effettuato nel caso libero inserendo un insieme completo di autostati dell'impulso, che sono autostati anche dell'hamiltoniano libero. In tal caso l'insieme di autostati di H non è noto a priori, sappiamo che gli stati $|x\rangle$ e $|k\rangle$ sono separatamente autostati di $V(q)$ e $K(p)$ rispettivamente, tuttavia siamo interessati all'elemento di matrice dell'esponenziale della somma di questi due termini, che non è semplicemente scrivibile come prodotto di esponenziali di $V(q)$ e $K(p)$ perché i due operatori non commutano. Tuttavia sono in realtà $V(q)\delta$ e $K(p)\delta$ a comparire all'esponente e il loro commutatore è un infinitesimo di ordine superiore (in particolare è $O(\delta^2)$) nel limite $\delta \rightarrow 0$. Questo ci suggerisce di sostituire l'operatore in Eq. (8) con uno più comodo che differisca dall'originale per termini trascurabili quando $\delta \rightarrow 0$. In particolare si dimostra facilmente che

$$e^{-iV(q)\delta/(2\hbar)} e^{-iK(p)\delta/\hbar} e^{-iV(q)\delta/(2\hbar)} = e^{-i(K(p)+V(q))\delta/\hbar} e^{O(\delta^3)} \quad (9)$$

e che l'espressione ottenuta sostituendo l'operatore a sinistra ad $\exp(-iH\delta/t)$ in Eq. (6) coincide con il propagatore originario nel limite $\delta \rightarrow 0$. Valutiamo dunque, in luogo dell'elemento in Eq. (8), l'elemento:

$$\begin{aligned} & \langle x_{j+1} | e^{-iV(q)\delta/(2\hbar)} e^{-iK(p)\delta/\hbar} e^{-iV(q)\delta/(2\hbar)} | x_j \rangle \\ &= \int \frac{dk}{2\pi\hbar} \langle x_{j+1} | e^{-iV(q)\delta/(2\hbar)} e^{-iK(p)\delta/\hbar} | k \rangle \langle k | e^{-iV(q)\delta/(2\hbar)} | x_j \rangle \\ &= e^{-i(V(x_{j+1})+V(x_j))\delta/(2\hbar)} \int \frac{dk}{2\pi\hbar} e^{ik(x_{j+1}-x_j)/\hbar} e^{-ik^2\delta/(2m\hbar)} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta} \right)^{1/2} e^{-\frac{i\delta}{2\hbar}(V(x_{j+1})+V(x_j))} e^{\frac{im(x_{j+1}-x_j)^2}{2\hbar\delta}} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta} \right)^{1/2} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2} \dot{x}_j^2 - \bar{V}_j \right) \delta \right) \end{aligned} \quad (10)$$

dove abbiamo inserito un insieme completo di autostati dell'impulso, fatto agire gli operatori sui rispettivi autostati, usato la forma esplicita delle funzioni d'onda autostati dell'impulso e quindi effettuato lo stesso integrale usato per calcolare il propagatore della particella libera in Eq. (4). Nell'ultima linea della precedente serie di equazioni abbiamo semplicemente definito la quantità $\dot{x}_j \equiv (x_{j+1} - x_j)/\delta$, che è il valor medio della velocità di una particella che si sposta dal punto x_j al punto x_{j+1} nel tempo δ , e la quantità $\bar{V}_j \equiv (V(x_{j+1}) + V(x_j))/2$, che è il valor medio del potenziale fra i punti x_j e x_{j+1} , per scrivere l'elemento di matrice, cioè il propagatore infinitesimo fra il punto x_j e il punto x_{j+1} nel tempo δ , in una forma che esprime già chiaramente quello che sarà il risultato finale: il propagatore è proporzionale all'esponenziale di i/\hbar volte l'integrale sul tempo infinitesimo δ della lagrangiana della teoria.

E' facile capire come si sia arrivati alla lagrangiana non per caso. Prima di effettuare l'integrale sugli impulsi avevamo l'esponenziale di $i\delta/\hbar$ volte $(k\dot{x}_j - \mathcal{H})$, dove abbiamo indicato con \mathcal{H} la funzione $k^2/(2m) + \bar{V}_j$, cioè l'hamiltoniano calcolato come funzione di k e del potenziale medio

sul tratto infinitesimo. L'integrale, come detto, è di tipo gaussiano: è facile verificare che in tal caso il risultato è equivalente, a meno di fattori costanti, a calcolare l'integrando sul valore di k per cui la fase è stazionaria, tale valore è soluzione di $\dot{x}_j = \partial\mathcal{H}/\partial k$, e quindi $k = m\dot{x}_j$. Ma calcolare la quantità $(k\dot{x}_j - \mathcal{H})$ su tale valore di k non è altro che effettuare la trasformata di Legendre dell'Hamiltoniana originale: niente di strano dunque che sia saltata fuori la Lagrangiana.

Ci siamo occupati per ora del solo propagatore infinitesimo, torniamo dunque al calcolo del propagatore finito in termini di integrale sui cammini. Sostituendo il risultato ottenuto nell'Eq. (6) otteniamo:

$$\begin{aligned} K(x_b, x_a, t_b, t_a) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta} \right)^{N/2} \int \left(\prod_{j=1}^N dx_j \right) \langle x_b | x_N \rangle \\ &\exp \left(\frac{i\delta m}{\hbar} \left[\frac{(x_1 - x_a)^2}{\delta^2} + \frac{(x_2 - x_1)^2}{\delta^2} + \dots + \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{\delta^2} \right] \right) \\ &\exp \left(\frac{i\delta}{\hbar} \left(\frac{V(x_a)}{2} + V(x_1) + \dots + V(x_{N-1}) + \frac{V(x_N)}{2} \right) \right) \\ &= \mathcal{N} \int_{x(t_a)=x_a; x(t_b)=x_b} \mathcal{D}x(t) \exp \left(\frac{iS[x(t)]}{\hbar} \right) \end{aligned} \quad (11)$$

dove $\mathcal{D}x(t)$ indica l'integrazione funzionale su tutti i possibili cammini aventi come estremi $x(t_a) = x_a$ e $x(t_b) = x_b$ e $S[x(t)]$ è il funzionale associato al cammino stesso e noto come integrale d'azione:

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} dt' \left(m \frac{\dot{x}^2(t')}{2} - V(x(t')) \right) = \int_{t_a}^{t_b} dt' \mathcal{L}(x(t'), \dot{x}(t')) \quad (12)$$

Infine \mathcal{N} è un fattore di normalizzazione divergente che è pari al $\lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta} \right)^{N/2}$, con $\delta = (t_b - t_a)/N$. Tale fattore può a volte essere incluso, per convenzione, nella misura funzionale $\mathcal{D}x(t)$.

La forma del propagatore a cui siamo arrivati in Eq. (11) è dunque quella di un integrale funzionale di un fattore di fase oscillante. Si noti che non è ben chiaro quanto sia matematicamente ben definito tale integrale: la misura di integrazione sui diversi cammini è divergente, mentre il fattore di fase oscillante porta a cancellazioni fra un cammino e l'altro. E' possibile provare che l'integrale è ben definito in alcuni casi semplici, come quello libero o il caso dell'oscillatore armonico (in entrambi i casi l'integrale è di tipo gaussiano, vedi anche i commenti nel paragrafo successivo). Come vedremo la misura sarà meglio definita nel caso dell'integrale funzionale usato per studiare la termodinamica di un sistema quantistico.

1.5 Integrale sui cammini e limite classico

La fase dell'integrando che compare nella formula finale dell'integrale di Feynman è $S[x(t)]/\hbar$. Per sistemi macroscopici, ben descrivibili dalla fisica classica, la scala tipica dell'integrale di azione S è sempre molto maggiore di \hbar : per questo anche le fluttuazioni della fase saranno molto grandi e la somma di fattori di fase fra loro incoerenti porterà a cancellazioni pressoché totali.

L'unica regione nello spazio di tutti i possibili cammini $x(t)$ in cui il fattore di fase si sommerà in modo coerente sarà quella intorno al cammino $x_c(t)$ per cui il funzionale $S[x(t)]$ è stazionario: infatti, per definizione, la variazione $\delta S[x(t)]$ del funzionale, quindi della fase, è nulla al primo ordine nella variazione del cammino $\delta x(t)$ intorno a $x_c(t)$. Ricordiamo dalla meccanica classica che tale cammino $x_c(t)$ coincide con la soluzione delle equazioni del moto classiche (equazioni di Eulero-Lagrange).

Per ricapitolare abbiamo mostrato come, nella formulazione dell'integrale di Feynman, il propagatore prenda contributo da tutti i possibili cammini ma anche come, nel limite $\hbar \rightarrow 0$ o equivalentemente per i fenomeni macroscopici, solo il cammino (o i cammini) soluzione delle equazioni del moto classiche dia un contributo significativo.

Notiamo, prima di concludere, che in alcuni casi particolari il propagatore è proporzionale al fattore di fase calcolato sul cammino classico indipendentemente dal fatto che \hbar possa essere considerato piccolo o meno. Questo è vero quando l'azione è scrivibile come una forma quadratica delle variabili $x(t)$ che descrivono il cammino: infatti è facilmente dimostrabile che un integrale a molte variabili di tipo gaussiano è sempre proporzionale al fattore di fase stesso valutato sul punto stazionario. Il caso libero è un esempio ed è facile verificare dalla forma esatta del propagatore libero data in Eq. (4) che questo è proporzionale ad $\exp(iS_{cl}/\hbar)$ dove S_{cl} è l'azione valutata sul cammino classico in cui la particella procede di moto rettilineo uniforme dal punto x_a al punto x_b nel tempo $(t_b - t_a)$. La stessa cosa è vera se aggiungiamo un termine di interazione quadratico nella coordinata, cioè per l'oscillatore armonico: anche in tal caso il propagatore quantistico risulta proporzionale al fattore di fase valutato su una traiettoria classica.

1.6 Ampiezza con inserzione di operatori

Nei paragrafi precedenti abbiamo trovato un formula integrale per l'elemento di matrice dell'operatore di evoluzione temporale fra due autostati della posizione. E' facile estendere tale risultato ad operatori simili. Consideriamo ad esempio l'inserzione aggiuntiva di due operatori coordinata a due tempi intermedi t_2 e t_1

$$\begin{aligned}\langle x_b | e^{-iHt/\hbar} | x_a \rangle &\rightarrow \langle x_b | e^{-iHt/\hbar} q(t_2) q(t_1) | x_a \rangle \\ &= \langle x_b | e^{-iH(t-t_2)/\hbar} q e^{-iH(t_2-t_1)/\hbar} q e^{-iHt_1/\hbar} | x_a \rangle\end{aligned}\quad (13)$$

dove abbiamo assunto che $t > t_2 > t_1$. La riscrittura di tale elemento di matrice in termini di integrale sui cammini procede in modo del tutto analogo al caso precedente, con l'inserzione di insieme completi di autostati della coordinata a tempi intermedi e la sola accortezza di scegliere due di questi tempi in coincidenza di t_1 e t_2 . Niente cambia nel calcolo a parte il fatto che sugli autostati della coordinata ai tempi t_1 e t_2 ora agirà l'operatore q portando fuori i rispettivi autovalori $x(t_1)$ e $x(t_2)$. Possiamo quindi scrivere:

$$\langle x_b | e^{-iHt/\hbar} q(t_2) q(t_1) | x_a \rangle = \mathcal{N} \int \mathcal{D}x(t) e^{\frac{iS[x(t)]}{\hbar}} x(t_2) x(t_1) \quad (14)$$

dove è sempre assunto che l'integrazione sia fatta sui cammini con estremi fissi $x(0) = x_a; x(t) = x_b$.

2 Termodinamica ed integrale sui cammini

Studieremo ora la termodinamica del nostro sistema quantistico, che per semplicità assumiamo sempre essere unidimensionale (la generalizzazione al caso a più dimensioni è banale). Sia $|n\rangle$ un insieme completo di autostati (ortonormali) dell'hamiltoniano:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle; \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = Id$$

Assumeremo per semplicità lo spettro discreto ma niente cambia in caso di spettro continuo o parzialmente continuo a patto di sostituire somme con integrali.

Se il sistema è all'equilibrio con un termostato a temperatura T , sappiamo che la perturbazione esterna dovuta al termostato porta il sistema in modo stocastico da un autostato all'altro dell'energia, in modo che la probabilità di essere in un particolare autostato sia data dalla distribuzione di Gibbs:

$$P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}; \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad (15)$$

dove $\beta = 1/(k_B T)$, k_B è la costante di Boltzmann e Z è la funzione di partizione. Il valor medio termodinamico di una qualsiasi osservabile fisica associata all'operatore O sarà infine dato da

$$\langle O \rangle = \sum_n P_n O_n = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} O_n; \quad O_n \equiv \langle n | O | n \rangle$$

Notando che $\exp(-\beta E_n)$ e $O_n \exp(-\beta E_n)$ sono gli elementi di matrice diagonali (sugli autostati dell'energia) rispettivamente di $\exp(-\beta H)$ e di $O \exp(-\beta H)$, possiamo riscrivere la funzione di partizione e il valor medio dell'osservabile generica O in termini di tracce prese sull'insieme di autostati $|n\rangle$. In particolare:

$$Z = \text{Tr} \left(e^{-\beta H} \right); \quad \langle O \rangle = \frac{\text{Tr} (O e^{-\beta H})}{\text{Tr} (e^{-\beta H})} \quad (16)$$

Sappiamo che, per cambi di base fra sistemi completi ortonormali, la traccia è un invariante. Possiamo quindi riscrivere in modo conveniente le stesse quantità su insieme diverso di autostati, ad esempio su quelli della posizione. Consideriamo per ora la sola funzione di partizione Z , che possiamo quindi riscrivere in questi termini:

$$Z = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \quad (17)$$

L'integrando presente nella precedente espressione assomiglia molto all'elemento di matrice corrispondente al propagatore, Eq. (2), anzi le due espressioni coincidono a patto di identificare $|x_a\rangle = |x_b\rangle = |x\rangle$ e sostituire $\beta = i(t_b - t_a)/\hbar$. Niente di strano quindi che anche di questo elemento di matrice possa essere data una rappresentazione in termini di integrale sui cammini. Questo può essere fatto ripercorrendo in modo sistematico i passi effettuati per il propagatore, cioè riscrivendo l'operatore $e^{-\beta H}$ come prodotto di N operatori $e^{-\beta H/N}$, inserendo un insieme completo di autostati $|x\rangle$ fra un operatore e l'altro ed effettuando il limite per $N \rightarrow \infty$: nessuna particolare differenza emerge, a parte la presenza di esponenziali complessi (non puramente immaginari) nel calcolo dell'analogo dell'elemento infinitesimo in Eq. (10), il che non comporta alcuna difficoltà aggiuntiva.

Di fatto, come si invita a verificare esplicitamente, il risultato a cui si giunge, è lo stesso che si ottiene direttamente dall'espressione finale di Eq. (11) facendo la sostituzione $dt' \rightarrow -id\tau'$ e cambiando gli estremi di integrazione da t_a a t_b in quelli da 0 a $\beta\hbar$. Possiamo quindi scrivere, dopo aver fatto le opportune sostituzioni:

$$\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \mathcal{N} \int_{x(0)=x(\beta\hbar)=x} \mathcal{D}x(\tau) \exp \left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar} \right) \quad (18)$$

dove

$$S_E[x(\tau)] \equiv \int_0^{\beta\hbar} d\tau' \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau'} \right)^2 + V(x(\tau')) \right) \equiv \int_0^{\beta\hbar} d\tau' \mathcal{L}_E \quad (19)$$

Nelle equazioni precedenti abbiamo introdotto il funzionale S_E , noto come azione "euclidea", e la corrispondente lagrangiana euclidea \mathcal{L}_E . Tale aggettivo deriva dal fatto che, nella teoria dei campi relativistica, la sostituzione $t \rightarrow -i\tau$, nota come rotazione di Wick, porta ad spazio-tempo in cui la metrica Minkowskiana è sostituita da una metrica di tipo Euclideo.

E' da notare come, per potenziali $V(q)$ definiti positivi o comunque limitati inferiormente (che è la condizione incontrata usualmente), l'azione euclidea S_E sia un funzionale definito positivo o limitato inferiormente. Questo rende l'espressione in Eq. (18) molto meglio definita che non l'analogia in Eq. (11): è possibile assegnare un vero e proprio peso ai vari cammini e l'integrando è soppresso esponenzialmente sui cammini dove l'azione S_E è grande.

Tornando alla funzione di partizione, dall'Eq. (17) leggiamo che essa è l'integrale $\int dx$ dell'espressione in Eq. (18) su tutte le possibili condizioni al contorno $x(0) = x(\beta\hbar) = x$. Questo è equivalente

calcolare l'integrale in Eq. (18) con le sole condizioni al contorno $x(0) = x(\beta\hbar)$, note anche come condizioni al contorno periodiche:

$$Z = \mathcal{N} \int_{x(0)=x(\beta\hbar)} \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) \quad (20)$$

I cammini su cui stiamo integrando sono tutti quelli che iniziano e tornano in uno stesso punto dopo un intervallo di “tempo euclideo” $\tau = \beta\hbar$. Se la coordinata x è definita su tutto l'asse reale, tali cammini possono essere efficacemente visualizzati come i percorsi chiusi compiuti sulla superficie di un cilindro illimitato e che si avvolgono una sola volta intorno al cilindro: la coordinata spaziale è quella longitudinale, mentre τ è la variabile “temporale” compatta che corre lungo la circonferenza del cilindro.

Abbiamo usato sempre gli apici parlando di tempo perché dovrebbe essere chiaro che, trattandosi di un sistema all'equilibrio termodinamico, non ha senso parlare di evoluzione temporale e quindi non abbiamo in gioco nessun tempo vero e proprio ma solo la variabile τ , che tuttavia, al solo livello di analogia, è come se fosse un tempo ruotato nel piano complesso ed è limitata ad un supporto compatto (fra 0 e $\beta\hbar$). In questa analogia, la temperatura del sistema quantistico è data dall'inverso dell'estensione temporale euclidea moltiplicato per \hbar/k_B .

2.1 Valori medi termodinamici e valori medi sullo stato fondamentale

Torniamo ora al valor medio del generico operatore in Eq. (16). Consideriamo ad esempio il valor medio di una funzione $f(q)$ della coordinata q (ad esempio $f(q) = q^2$):

$$\langle f(q) \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} f(q))}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \frac{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) f(x(0))}{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)} \quad (21)$$

si arriva all'espressione del numeratore esattamente allo stesso modo di come si è arrivati a quella del denominatore, con l'operatore $f(q)$ che, agendo sullo stato $|x\rangle$ nella traccia, porta fuori l'autovalore $f(x(0))$. Il fattore di normalizzazione \mathcal{N} si è cancellato fra numeratore e denominatore. In generale il valor medio termodinamico di una qualsiasi grandezza fisica sarà esprimibile come

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} O)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \frac{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) O[x(\tau)]}{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)} \quad (22)$$

dove $O[x(\tau)]$ è un opportuno funzionale del cammino $x(\tau)$. L'espressione precedente ha una interpretazione probabilistica che sarà il punto di partenza delle valutazioni numeriche: quello che abbiamo scritto è il valor medio di una funzione del cammino valutata su una distribuzione di probabilità per i cammini pari a

$$P[x(\tau)] \mathcal{D}x(\tau) = \frac{\exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) \mathcal{D}x(\tau)}{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)} \quad (23)$$

L'idea alla base delle applicazioni numeriche è proprio quella di estrarre in modo stocastico dei cammini $x(\tau)$ distribuiti secondo la $P[x(\tau)]$ e di valutare su questi il valor medio $\langle O \rangle$.

E' interessante notare che, nel limite $\beta \rightarrow \infty$, cioè nel limite di temperatura $T \rightarrow 0$, il valor medio $\langle O \rangle$ si riduce al valor medio preso sullo stato fondamentale $|0\rangle$. Infatti

$$\begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle O \rangle &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} O)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \\ &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{e^{-\beta E_0} \langle 0|O|0 \rangle + e^{-\beta E_1} \langle 1|O|1 \rangle + \dots}{e^{-\beta E_0} + e^{-\beta E_1} + \dots} = \langle 0|O|0 \rangle \end{aligned} \quad (24)$$

nell'ipotesi $E_1 > E_0$, cioè che lo stato fondamentale non sia degenere.

3 Simulazioni numerica dell'integrale sui cammini per l'oscillatore armonico

Consideriamo una particella di massa m in un potenziale armonico di costante elastica k . La quantità che compare ad esponente nella distribuzione sui cammini in Eq. (23) è

$$-\frac{1}{\hbar}S_E[x(\tau)] = -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + \frac{m\omega^2 x(\tau)^2}{2} \right] \quad (25)$$

dove $\omega = \sqrt{k/m}$.

Questa quantità è adimensionale (non potrebbe essere altrimenti essendo l'argomento di un esponenziale). Faremo ora un pò di operazioni prima di descrivere l'algoritmo di simulazione: discretizzeremo l'intervallo temporale e faremo opportuni cambi di variabili in modo da avere il cammino descritto da un insieme finito di variabili stocastiche adimensionali.

Prendiamo, in luogo dell'intervallo temporale $[0, \beta\hbar]$, un insieme discreto di N punti spazati di $a = \beta\hbar/N$. Numereremo tali punti da 0 ad $N-1$; le condizioni al bordo periodiche saranno realizzate dalla convenzione che il punto N -esimo coincida con il punto 0.

Il problema presenta una scala di lunghezza tipica che è data da $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$. Introduciamo dunque una variabile spaziale definita sui punti temporali discreti ed adimensionale:

$$y(n) \equiv \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)^{-1} x(na); \quad n = 0, 1, \dots, N-1$$

L'integrale si trasforma facilmente in una sommatoria

$$\int_0^{\beta\hbar} d\tau \rightarrow \sum_{n=0}^{N-1} a$$

Infine resta da discretizzare la derivata, questo può essere fatto in una varietà di modi tutti equivalenti nel limite $a \rightarrow 0$; noi sceglieremo uno dei più semplici, la derivata in avanti:

$$\frac{dx}{d\tau} \rightarrow \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)^{-1} \frac{y(n+1) - y(n)}{a}$$

Fatte queste sostituzioni l'espressione in Eq. (25) diventa

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\hbar}S_E[x(\tau)] &\rightarrow -\frac{m\hbar}{2\hbar m\omega} \sum_{n=0}^{N-1} a \left[\frac{(y(n+1) - y(n))^2}{a^2} + \omega^2 y(n)^2 \right] \\ &= -\sum_{n=0}^{N-1} \left[y(n)^2 \left(\frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - \frac{1}{\eta} y(n)y(n+1) \right] \equiv -S_D \end{aligned} \quad (26)$$

dove abbiamo introdotto la variabile adimensionale $\eta \equiv a\omega$ e abbiamo indicato con S_D l'azione discretizzata ed adimensionale.

Siamo pronti a questo punto per campionare i cammini: essi saranno descritti da N -uple di variabili adimensionali $y(0) - y(N_1)$ pesate con probabilità proporzionale ad $\exp(-S_D[y])$. Prima di procedere a descrivere l'algoritmo per campionare i cammini, soffermiamoci a fare alcune considerazioni. Ci sono solo due parametri, η ed N , che potremo variare nella nostra simulazione, è utile quindi ricordare come sono legate le varie quantità a tali parametri:

- $\eta = a\omega$ è il rapporto fra la spaziatura della nostra discretizzazione e la scala temporale tipica del problema, cioè $1/\omega$. Il limite continuo si otterrà quindi per $\eta \rightarrow 0$. Per questioni

pratiche non potremo mai realizzare esattamente questo limite, però dovremo preoccuparci di quali siano gli effetti sistematici nei risultati ottenuti ad η finito. Per studiare questi effetti dovremo considerare che: 1) essi saranno piccoli quando la scala temporale tipica del problema sarà grande rispetto alla spaziatura a , e quindi per $\eta \ll 1$; 2) tali effetti possono essere studiati ed eventualmente parametrizzati come correzioni a potenza in η effettuando due o più simulazioni a diversi valori (piccoli) di η (ad esempio $\eta = 0.2, 0.1, 0.05, 0.02, \dots$)

- La temperatura del nostro sistema è data da $T = (\beta k_B)^{-1} = \hbar/(Nak_B)$. Poiché esiste una scala tipica del problema che è $\hbar\omega$, è utile esprimere la temperatura in unità di tale scala, cioè usare in luogo della temperatura T la variabile adimensionale $\hat{T} \equiv k_B T/(\hbar\omega) = (N\eta)^{-1}$. Sappiamo bene che per questo sistema il regime di alta temperatura o bassa temperatura corrisponderà al regime $\hat{T} \gg 1$ o $\hat{T} \ll 1$, quindi rispettivamente $N\eta \ll 1$ oppure $N\eta \gg 1$.
- Variando le variabili N ed η possiamo dunque variare allo stesso tempo la spaziatura temporale a e la temperatura T . Se vogliamo studiare l'approccio al limite continuo mantenendo la temperatura costante dovremo effettuare simulazioni con η decrescenti ma variando al contempo N in modo che $N\eta$ sia costante: questo, unito alla comparsa di termini divergenti in S_D , è uno dei motivi per cui il limite $\eta \rightarrow 0$ non può essere realizzato in pratica, in quanto dovremmo allo stesso tempo portare $N \rightarrow \infty$. Se invece vogliamo studiare l'andamento con la temperatura a spaziatura temporale costante dovremo effettuare simulazioni ad η fisso variando N in modo in modo inversamente proporzionale alla temperatura.
- Se in particolare vogliamo studiare il limite $T = 0$, come nel caso in cui si vogliano determinare i valori medi sullo stato fondamentale (vedi Eq. (24), non potendo per questioni pratiche mandare $N \rightarrow \infty$, dovremo accontentarci di fare simulazioni per valori molto piccoli di \hat{T} e studiare, usando due o più diverse simulazioni, l'approccio $\hat{T} \rightarrow 0$.

3.1 Schema di algoritmo Metropolis

La prima cosa da fare è scegliere il punto di partenza della catena di cammini. Una possibile scelta è $y(n) = 0$ per ogni n . Diamo ora l'algoritmo per passare da un cammino y al successivo della catena y'

Secondo l'algoritmo Metropolis dobbiamo definire come scegliere il cammino di prova. Questo può essere fatto cambiando una o più delle N variabili stocastiche. La scelta che faremo sarà di cambiarne una alla volta, costruendo quello che si chiama Metropolis locale. Il motivo è che per effettuare il test di accettazione/rigetto del cammino di prova dovremo valutare la differenza di azione fra due cammini. L'azione S_D in Eq. (26) è un funzionale locale del cammino, nel senso che coinvolge al più il prodotto di due primi vicini: se modifichiamo il cammino nel punto n e ci chiediamo di quanto è cambiata l'azione, dovremo valutare solo 3 termini: $y(n)^2$, $y(n)y(n+1)$ e $y(n)y(n-1)$. Questo rende il calcolo molto veloce e giustifica la scelta di un algoritmo locale. Delineiamo dunque i passi di un possibile algoritmo:

- provo a modificare il punto n -esimo del cammino $y(n) \rightarrow y^p(n)$ scegliendo $y^p(n)$ a caso nell'intervallo $[y(n) - \delta, y(n) + \delta]$, dove δ è un parametro variabile dell'algoritmo. La simmetria dell'intervallo garantisce di avere una matrice di scelta $A(q, q^p)$ simmetrica, come richiesto dall'algoritmo Metropolis.
- valuto il rapporto fra la probabilità del cammino di prova e quello di partenza, che dalla forma di S_D leggiamo essere semplicemente:

$$\frac{e^{-S_D^p}}{e^{-S_D}} = e^{\left(-y^p(n)^2 - y(n)^2\right)\left(\frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta}\right) + \frac{1}{\eta}(y^p(n) - y(n))(y(n+1) + y(n-1))}$$

dato il rapporto di probabilità effettuo il test di accettazione/rigetto e decido quale sarà il nuovo punto $y(n)$ (vedi i dettagli nella descrizione generale dell'algoritmo Metropolis).

- Il procedimento viene iterato sequenzialmente per tutti i punti del cammino scegliendo $n = 0, 1, 2 \dots (N - 1)$ e ricominciando una volta terminata la spazzata. Varianti possibili possono essere di scegliere il punto n da cambiare ogni volta a caso fra 0 ed $(N - 1)$. Un'altra possibile variante (e consigliata) è di ripetere più volte di seguito (ad esempio 4-5 volte) l'aggiornamento sullo stesso sito n prima di passare al successivo (ogni volta usando come $y(n)$ di partenza quello deciso al passo immediatamente successivo).

Nel modo appena descritto possiamo generare una sequenza di cammini: ogni tanto, ad intervalli fissati, ne prenderemo uno da inserire nel nostro campione statistico e quindi sul quale valutare le quantità fisiche di interesse. Restano da chiarire alcuni punti:

- Come scegliamo il parametro δ ? Grandi valori possono portare a probabilità di rigetto molto grandi, piccoli valori possono far evolvere il cammino molto lentamente. Una scelta all'incirca ottimale si ottiene per probabilità di accettazione (di ogni singolo cambio) dell'ordine del 40-50%, ma ci si deve preoccupare di fatto solo se la probabilità di accettazione è di pochi % o molto vicina al 100%. Notare che il range ottimale di δ può variare a seconda degli altri parametri (ad esempio η) scelti.
- Ogni quanto prendiamo le misure? Inutile prenderle troppo spesso perché altrimenti le misure sarebbero altamente correlate fra di loro. Una spazzata completa di tutti i possibili siti n è il minimo, ma anche ogni 10-100 spazzate. Sarà comunque necessario valutare l'autocorrelazione delle misure prese per valutare correttamente l'errore.
- Da che punto in poi durante la simulazione iniziamo a prendere le misure? Sarà necessario scartare un primo pezzo della catena necessario per raggiungere l'equilibrio. Questo pezzo non è noto a priori. La cosa più conveniente è salvare le misure su un file durante la simulazione e fare l'analisi statistica a posteriori. In questo modo si può valutare se il risultato cambia entro errori scartando un insieme iniziale variabile di misure che potrebbero in teoria essere state prese fuori dall'equilibrio della catena di Markov.

4 Alcuni applicazioni

4.1 Energia media ed energia dello stato fondamentale dell'oscillatore armonico

Il valore medio dell'energia potenziale, che è una funzione delle sole coordinate, seguendo Eq. (21) può essere valutato semplicemente riscrivendo la funzione $V(x)$ in termini delle variabili stocastiche adimensionali e valutandone il valor medio sui cammini campionati. Notare che il valor della funzione può essere preso non solo al punto $\tau = 0$, come in Eq. (21), ma su tutti i punti del cammino. Quindi si può prendere la media su tutti i cammini della media su ogni cammino.

La valutazione del termine cinetico è più complessa e presenta insidie. Il modo migliore per affrontare la questione è di considerarla dal punto di vista termodinamico. In fondo l'energia dello stato fondamentale altro non è se non l'energia interna nel limite $T = 0$. Quindi basta calcolare

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z$$

e per fare questo basta notare che $\beta \hbar \omega = N \eta$ e che quindi la derivata rispetto a β si può riscrivere in termini di quella rispetto ad η (non esistono qui altre variabili, per cui non possono sorgere ambiguità nell'effettuare la derivata parziale, come invece avviene in teoria dei campi dove c'è di mezzo anche il volume). Fatto questo si ricava che

$$\frac{U}{\hbar \omega} = \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle - \frac{1}{2\eta^2} \langle \Delta y^2 \rangle$$

dove per Δy si intende la quantità $y_{j+1} - y_j$ calcolare per un qualsiasi j (c'è invarianza per traslazioni).

La prima quantità rende conto del contributo del termine potenziale e non presenta problemi. La seconda del termine cinetico: essa ha apparentemente un segno sbagliato, che si capisce facilmente essere dovuto alla rotazione di Wick, resta tuttavia il problema del fatto che sembra stranamente definita negativa. In realtà i problemi sono ben più seri e la quantità si rivela divergente nel limite continuo. Infatti guardando la distribuzione di probabilità ottenuta per le variabili y_j , è chiaro che la quantità Δy è distribuita praticamente come una variabile Gaussiana di varianza η , per cui quando $\eta \rightarrow 0$ il contributo all'energia interna del termine "cinetico" diverge come $1/\eta$. L'origine di questa divergenza è facilmente rintracciabile, nel fare la derivata di $\log Z$ abbiamo dimenticato che, nel riscrivere Z in termini di path integral, compare una costante di rinormalizzazione divergente, che è proporzionale ad $\eta^{N/2}$ e che, tenuta opportunamente in conto quando si calcola $\partial/\partial\eta$, porta a

$$\frac{U_r}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}\langle y^2 \rangle - \frac{1}{2\eta^2}\langle \Delta y^2 \rangle + \frac{\eta}{2}$$

dove con la quantità U_{ren} intendiamo l'energia interna correttamente "rinormalizzata".

È interessante notare che ora l'incremento dell'energia cinetica media all'aumentare della temperatura non è dovuta al fatto che i cammini risultano più "mossi" per cui $\langle \Delta y^2 \rangle$ cresce, ma esattamente al contrario, per quanto la cosa possa sembrare poco intuitiva (ma è bene sforzarsi di fare entrare la cosa nelle proprie "intuizioni" per avere una migliore visione del path integral). Quello che succede è la cosa seguente. Abbiamo detto che le variabili $\Delta y_j = y_{j+1} - y_j$ sono distribuite "quasi" come variabili gaussiane di varianza η : il quasi deriva dal fatto che c'è una condizione periodica al bordo, $y_{j+N} = y_j$, che fa sì che $\sum_j \Delta y_j = 0$, questo vincolo tende a fare fluttuare le Δy_j un po' meno di come farebbero se fossero veramente gaussiane, e di conseguenza uno ha che $\langle \Delta y^2 \rangle < \eta$ e quindi il termine cinetico opportunamente rinormalizzato risulta definito positivo. Man mano che T cresce, la dimensione temporale euclidea compattificata diventa sempre più corta e la condizione al bordo si fa sentire sempre di più: i cammini tipici diventano sempre più "dritti", conseguentemente $\langle \Delta y^2 \rangle$ decresce e l'energia cinetica media aumenta.

Questo processo che porta ad individuare esattamente l'origine delle divergenze e sottrarle analiticamente non è sempre possibile, specialmente in teorie dei campi interagenti, in tal caso la cosa che è possibile fare è, ad ogni fissato valore del lattice spacing, misurare l'energia interna anche per valori molto grandi di N , quindi praticamente nel limite $T \rightarrow 0$, e sottrarre il valore così misurato a quelli misurati a T finita per lo stesso lattice spacing. Il ragionamento alla base di questa procedura è che le quantità divergenti dipendono solo dal lattice spacing, che è il cutoff ultravioletto, e non dal numero di siti N in direzione temporale. In questo modo si rinuncia a dire quanto valga l'energia media sullo stato di vuoto, ma si può determinare correttamente il contributo termico, cioè $U(T) - U(0)$. (si vedano a questo proposito delle note aggiuntive riportate in questa stessa cartella del sito).

4.2 Gap energetico fra livello fondamentale e primo eccitato

Si consideri il valor medio su tutti i cammini della funzione $x(\tau)x(0)$, cioè del prodotto di due coordinate a tempi diversi. E' facile mostrare, ripercorrendo la costruzione dell'integrale sui cammini, che esso è il valor medio dell'operatore

$$e^{H\tau/\hbar} q e^{-H\tau/\hbar} q$$

Nel limite di temperatura zero otteniamo il valor medio sullo stato fondamentale dello stesso operatore, e cioè:

$$\begin{aligned}\langle 0|e^{H\tau/\hbar}qe^{-H\tau/\hbar}q|0\rangle &= \sum_m \langle 0|e^{H\tau/\hbar}q|m\rangle \langle m|q|0\rangle \\ &= \sum_m e^{-(E_m-E_0)\tau/\hbar} |\langle m|q|0\rangle|^2\end{aligned}\quad (27)$$

dove la somma è fatta su tutti i possibili stati energetici del sistema. Se sottraiamo alla correlazione la quantità $\langle x \rangle^2 = \langle 0|q|0\rangle^2$ (a $T = 0$) otteniamo nel limite di temperatura zero:

$$\langle x(\tau)x(0) \rangle - \langle x \rangle^2 = \sum_{m \neq 0} e^{-(E_m-E_0)\tau/\hbar} |\langle m|q|0\rangle|^2$$

dove la somma ora esclude lo stato fondamentale. La sottrazione del valor medio al quadrato è superflua per l'oscillatore armonico ma può essere necessaria per altri sistemi.

Nel limite di grande distanza τ nei termini della precedente sommatoria sopravvive solo quello relativo al primo eccitato. Per questo possiamo scrivere infine che

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} (\langle x(\tau)x(0) \rangle - \langle x \rangle^2) = \text{costante} \cdot e^{-(E_1-E_0)\tau/\hbar}$$

dunque da un fit esponenziale a grandi τ del correlatore possiamo ricavare $(E_1 - E_0)$. Per sapere quanto grande deve essere τ si può vedere quando il fit con l'esponenziale semplice va bene. Per l'oscillatore armonico di fatto $\langle m|q|0 \rangle \neq 0$ solo per $m = 1$ e quindi il singolo esponenziale va bene sempre. Sempre per l'oscillatore armonico se si usano correlatori di diversi operatori, come $\langle x^2(\tau)x^2(0) \rangle - \langle x^2 \rangle^2$, si può ottenere il valore di $E_2 - E_0$.

Notare che il correlatore $\langle 0|q(\tau)q(0)|0 \rangle$ non è altro che la continuazione analitica $t \rightarrow -i\tau$ dell'usuale funzione temporale a due punti $\langle 0|q(t)q(0)|0 \rangle$ con $t > 0$, che per esercizio si può provare a calcolare analiticamente confrontando il risultato dopo aver fatto appunto $t \rightarrow -i\tau$

4.3 Funzione d'onda dello stato fondamentale

Nel limite di temperatura zero, si faccia un istogramma della distribuzione della coordinata x (ad un tempo fissato o anche includendo i valori a tutti i tempi) durante la simulazione. A cosa corrisponde tale distribuzione?

E' facile convincersi che la probabilità di ottenere un valore della coordinata x all'interno di un intervallo $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ è proporzionale, nel limite $\epsilon \rightarrow 0$, al valor medio dell'operatore $\delta(q - x_0)$ dove δ è la delta di Dirac.

D'altra parte è facile convincersi che il valor medio su uno stato di $\delta(q - x_0)$ è proporzionale al modulo quadro della funzione d'onda di quello stato.

Dunque, per concludere, l'istogramma trovato, se correttamente normalizzato) riproduce il modulo quadro della funzione d'onda dello stato fondamentale. Verificare che questo è vero per l'oscillatore armonico.

5 Il limite al continuo come punto critico del sistema statistico corrispondente

Purtroppo ancora mancante ...