



# Simulazione MC dell'oscillatore armonico quantistico

A. Caliendo, D. Cafasso

Università di Pisa,  
Corso di metodi numerici,  
Modulo 3 : [Link al Repository](#)

23 luglio 2023

## Sommario

Nella presente relazione è descritto lo studio dell'oscillatore armonico quantistico mediante simulazione numerica. Adottando l'approccio di *Path Integral* e implementando il metodo Monte-Carlo, si studia l'energia interna del sistema al variare della temperatura, si determina la funzione d'onda dello stato fondamentale e si ricavano i valori dei gap energetici tra il ground state e i primi due livelli eccitati.

# Introduzione

Il formalismo del *Path-Integral* consiste in un approccio alternativo alla meccanica quantistica e, più in generale, alle teorie di campo quantistiche. Esso venne introdotto nel 1948 da R. Feynman e l'idea di base è che l'ampiezza di transizione tra uno stato iniziale e uno stato finale può essere calcolata sommando dei contributi provenienti da tutte le possibili traiettorie che li collegano. Queste traiettorie vengono ponderate con un fattore di fase complesso legato alla probabilità che la stessa si realizzi. Tale formalismo è impiegato anche nello studio delle proprietà statistiche dei sistemi quantistici tramite un prolungamento analitico, detto *rotazione di Wick*, che manda la coordinata temporale  $t$  in un tempo euclideo  $\tau$  per un fattore complesso come  $t := -i\tau$ , e - di conseguenza - l'operatore unitario di evoluzione temporale  $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$  nella matrice densità statistica  $e^{-\beta\hat{H}}$ , posto  $\beta := \tau/\hbar$ . Utilizzando questa analogia tra la teoria quantistica e quella statistica, è possibile ricavare un'espressione della funzione di partizione  $Z$  in rappresentazione di *Path-Integral* e studiare la termodinamica di sistemi quantistici con simulazioni numeriche. In particolare, si considera l'oscillatore armonico quantistico e si esamina l'andamento dell'energia interna al variare di alcuni parametri introdotti nell'implementazione numerica del modello. Inoltre, lo stesso approccio permette di costruire la funzione d'onda dello stato fondamentale e di ricavare i gap energetici tra il ground state e i primi livelli eccitati.

Nella prima sezione della relazione sono riportati alcuni aspetti teorici relativi al calcolo delle grandezze fisiche di interesse e al formalismo di *Path-Integral*; la seconda è dedicata alla descrizione delle procedure implementate per la simulazione; nella terza sezione sono illustrati i risultati ottenuti.

# 1 Teoria

## 1.1 Rappresentazione di Path Integral

Per studiare la termodinamica di un sistema quantistico si analizza il comportamento del valore medio di alcune osservabili di interesse a temperatura finita. Si consideri, ad esempio, un sistema a temperatura  $T$  e una sua generica osservabile  $\hat{O}$ . Il suo valor medio è dato da

$$\langle \hat{O} \rangle_T = \frac{1}{Z} \text{Tr}[\rho \hat{O}] = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \rho \hat{O} | n \rangle , \quad (1)$$

in cui

$$\rho = e^{-\hat{\mathcal{H}}/k_b T}, \quad Z = \sum_n \langle n | \rho | n \rangle \quad (2)$$

e il set  $\{|n\rangle\}_n$  è una generica base dello spazio di Hilbert del sistema in cui  $\hat{\mathcal{H}}$  non è necessariamente diagonale. A questa base corrisponde inoltre la risoluzione dell'identità

$$\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle \langle n| . \quad (3)$$

Nel caso in cui  $\{|n\rangle\}_n$  fosse la base in cui l'Hamiltoniana è diagonale, il problema si semplificherebbe notevolmente, ma non essendo questa base nota a priori è necessario trovare un'espressione alternativa per il caso generale.

Si procede di seguito alla riscrittura dell'equazione (1) partendo dall'espressione della funzione di partizione  $Z$ . Scrivendo l'operatore  $\rho$  come

$$\rho = e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} := e^{-\hat{\mathcal{H}}\tau/\hbar} \quad \text{in cui } \tau := \beta \hbar \text{ e } \beta = 1/k_b T , \quad (4)$$

esso può essere interpretato come l'operatore di evoluzione temporale  $e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}$  nel tempo euclideo  $\tau = it$ . Dividendo l'intervallo euclideo  $[0, \tau]$  in  $N$  intervalli di ampiezza pari a  $\Delta\tau = \tau/N$  e inserendo  $N - 1$  risoluzioni dell'identità, l'elemento di matrice  $\langle n | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | n \rangle$  può essere scritto come

$$\langle n | e^{-\hat{\mathcal{H}}\Delta\tau/\hbar} \otimes \sum_{n_{N-1}} |n_{N-1}\rangle \langle n_{N-1}| \otimes \dots \otimes \sum_{n_1} |n_1\rangle \langle n_1| \otimes e^{-\hat{\mathcal{H}}\Delta\tau/\hbar} |n\rangle . \quad (5)$$

Infine, tramite la posizione  $n = n_0 = n_N$ , si ottiene l'espressione

$$Z = \sum_n \langle n | e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} | n \rangle = \sum_{n_1} \dots \sum_{n_N} \prod_{i=0}^{N-1} \langle n_{i+1} | e^{-\hat{\mathcal{H}}\Delta\tau/\hbar} | n_i \rangle . \quad (6)$$

Si denoti con  $\hat{V}$  la parte dell'Hamiltoniana diagonale nella base considerata e con  $\hat{K}$  quella fuori diagonale, in modo che  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{K} + \hat{V}$ . Utilizzando la relazione BCH è possibile approssimare l'operatore di evoluzione temporale nel tempo euclideo come

$$e^{-\hat{\mathcal{H}}\Delta\tau/\hbar} = e^{-\frac{1}{2}\hat{V}\Delta\tau/\hbar} e^{-\hat{K}\Delta\tau/\hbar} e^{-\frac{1}{2}\hat{V}\Delta\tau/\hbar} + \mathcal{O}(\Delta\tau^3) , \quad (7)$$

ottenendo un'espressione approssimata della  $Z$  come

$$Z \simeq \sum_{n_1} \dots \sum_{n_N} \prod_{i=0}^{N-1} e^{-\frac{1}{2}(V(n_{i+1})+V(n_i))\Delta\tau/\hbar} \langle n_{i+1} | e^{-\hat{K}\Delta\tau/\hbar} | n_i \rangle . \quad (8)$$

Questa diventa un'uguaglianza nel limite per  $N$  che va a  $+\infty$ . L'azione della produttoria si distribuisce sui due termini dell'equazione precedente e nel primo viene assorbita nell'esponenziale come una somma, ottenendo

$$Z \simeq \sum_{n_1} \dots \sum_{n_N} e^{-\sum_{i=0}^{N-1} V(n_i)\Delta\tau/\hbar} \prod_{i=0}^{N-1} \langle n_{i+1} | e^{-\hat{K}\Delta\tau/\hbar} | n_i \rangle . \quad (9)$$

Introducendo una risoluzione dell'identità rispetto a cui l'operatore  $\hat{K}$  è diagonale,

$$\mathbb{1} = \sum_p |p\rangle\langle p| \quad \text{t.c.} \quad \hat{K} |p\rangle = K(p) |p\rangle , \quad (10)$$

l'espressione diventa

$$Z \simeq \sum_{n_1} \dots \sum_{n_N} e^{-\sum_{i=0}^{N-1} V(n_i)\Delta\tau/\hbar} \prod_{i=0}^{N-1} \sum_{p_i} e^{-K(p_i)\Delta\tau/\hbar} \langle n_{i+1} | |p_i\rangle\langle p_i| | n_i \rangle . \quad (11)$$

Si consideri ora il caso dell'oscillatore armonico. Se la base utilizzata è quella delle posizioni, le sommatorie nelle risoluzioni dell'identità diventano degli integrali su  $\mathbb{R}$ , i.e.

$$|n\rangle \mapsto |x\rangle , \quad \sum_n \mapsto \int dx \quad \text{e} \quad \sum_p \mapsto \int \frac{dp}{2\pi\hbar} ; \quad (12)$$

inoltre, gli operatori  $\hat{K}$  e  $\hat{V}$  corrispondono rispettivamente all'energia cinetica e potenziale,

$$K(p) := \frac{p^2}{2m} \quad \text{e} \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 , \quad (13)$$

e l'overlap tra gli stati può essere scritto come

$$\langle x | p \rangle = e^{ipx/\hbar} . \quad (14)$$

Il termine su cui agisce la produttoria nell'equazione (11) è un integrale Gaussiano del tipo

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} , \quad (15)$$

che valutato nel caso in oggetto diventa

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{p^2}{2m}\frac{\Delta\tau}{\hbar} + \frac{ip(x_{i+1}-x_i)}{\hbar}} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau}} e^{-\frac{1}{2}m\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{\Delta\tau}\right)^2 \frac{\Delta\tau}{\hbar}} . \quad (16)$$

Di nuovo, l'azione della produttoria viene assorbita nell'esponenziale come una somma, permettendo di riscrivere l'equazione (11) come

$$Z \simeq \oint \mathcal{D}\{x_i\} e^{-S_N[\{x_i\}]/\hbar} , \quad (17)$$

in cui l'esponente è scritto come

$$S_N[\{x_i\}] := \sum_{i=0}^{N-1} \frac{1}{2} m \left[ \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{\Delta\tau} \right)^2 + \omega^2 x_i^2 \right] \Delta\tau , \quad (18)$$

e la misura di integrazione è data da

$$\mathcal{D}\{x_i\} := \left( \frac{m}{2\pi\hbar\Delta\tau} \right)^{\frac{N}{2}} \prod_{i=0}^{N-1} dx_i . \quad (19)$$

Nel limite per  $N$  che va a  $+\infty$ , l'equazione (17) diventa l'espressione esatta della funzione di partizione  $Z$  in rappresentazione di Path-Integral. In particolare, si ottiene che

$$\{x_i\} \mapsto x(\tau) \quad , \quad \sum_{i=0}^{N-1} \Delta\tau \mapsto \int_0^{\beta\hbar} d\tau , \quad (20)$$

e che la quantità  $S_N$  diventa l'azione euclidea  $S_E$  come

$$S_N[\{x_i\}] \mapsto S_E[x(\tau)] = \frac{1}{2} m \dot{x}^2(\tau) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2(\tau) . \quad (21)$$

La procedura seguita per la funzione di partizione  $Z$  può essere facilmente generalizzata al numeratore del valore medio atteso di  $\hat{O}$  in equazione (1) quando questo è funzione dell'operatore posizione  $\hat{x}$ . Mettendo insieme le due espressioni si ottiene

$$\langle \hat{O} \rangle_T = \oint \mathcal{D}x(\tau) \Pr[x(\tau)] O[x(\tau)] , \quad (22)$$

in cui

$$\Pr[x(\tau)] = \frac{1}{Z} e^{-S_E[x(\tau)]/\hbar} \quad \text{e} \quad Z = \oint \mathcal{D}x(\tau) e^{-S_E[x(\tau)]/\hbar} . \quad (23)$$

Le traiettorie euclidee vengono quindi pesate in base alla distribuzione di probabilità  $\Pr[x(\tau)]$  ed è possibile effettuare la simulazione numerica del modello tramite metodo Monte Carlo.

## 1.2 Valori medi nello stato fondamentale

Si denoti con  $\{|n\rangle\}_n$  una base in cui l'Hamiltoniana è diagonale e si assuma che lo stato fondamentale sia non degenere. Nel limite di temperatura nulla, i.e.  $\beta \rightarrow +\infty$ , si osserva

$$\lim_{\beta \rightarrow +\infty} \langle \hat{O} \rangle_T = \lim_{\beta \rightarrow +\infty} \frac{\sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{O} | n \rangle}{\sum_k e^{-\beta E_k}} = \langle 0 | \hat{O} | 0 \rangle , \quad (24)$$

ossia il primo termine domina su tutti gli altri contributi della somma e il valor medio dell'osservabile si ricava valutando l'operatore solo sullo stato fondamentale. Questo risultato è rilevante nel calcolo delle funzioni di correlazione di un operatore a due tempi diversi. In particolare, considerando una funzione dell'operatore posizione  $O(\hat{x})$  e definendo la funzione di correlazione a due punti connessa come

$$C_O(\tau) := \langle O(\hat{x}(\tau)) O(\hat{x}(0)) \rangle - |\langle O(\hat{x}(0)) \rangle|^2 , \quad (25)$$

in cui

$$O(\hat{x}(\tau)) := e^{\hat{H}\tau/\hbar} O(\hat{x}) e^{-\hat{H}\tau/\hbar} , \quad (26)$$

questa può essere riscritta introducendo una risoluzione dell'identità tra i due operatori valutati a tempi diversi come

$$\begin{aligned} C_O(\tau) &= \sum_n \langle 0 | e^{\hat{H}\tau/\hbar} O(\hat{x}) e^{-\hat{H}\tau/\hbar} | n \rangle \langle n | O(\hat{x}(0)) | 0 \rangle - |\langle 0 | O(\hat{x}) | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_n e^{-(E_n - E_0)\tau/\hbar} |\langle n | O(\hat{x}) | 0 \rangle|^2 - |\langle 0 | O(\hat{x}) | 0 \rangle|^2 \\ &= \sum_{n \neq 0} e^{-(E_n - E_0)\tau/\hbar} |\langle n | O(\hat{x}) | 0 \rangle|^2 . \end{aligned} \quad (27)$$

Nel limite di temperatura nulla, il termine dominante è

$$C_O(\tau) \xrightarrow{\tau \rightarrow +\infty} e^{-(E_{min} - E_0)\tau} |\langle n_{min} | O(\hat{x}) | 0 \rangle|^2 , \quad (28)$$

in cui  $|n_{min}\rangle$  è lo stato a cui è associata l'energia  $E_{min}$  più vicina a quella dello stato fondamentale, in base alle regole di selezione dell'operatore  $O(\hat{x})$ .

In conclusione, calcolare le funzioni di correlazione a due punti di opportuni operatori, consente di ricavare i valori dei gap energetici tra lo stato fondamentale e i primi livelli eccitati. Nel caso dell'oscillatore armonico, considerando  $O(\hat{x}) = \hat{x}$  si ha che

$$\langle n | \hat{x} | 0 \rangle \propto \delta_{1n} \quad \implies \quad C_x(\tau) \rightarrow e^{-\omega\tau} |\langle 1 | \hat{x} | 0 \rangle|^2 , \quad (29)$$

ottenendo il gap tra il ground state ed il primo stato eccitato. Considerando invece la funzione a due punti per l'operatore  $O(\hat{x}) = \hat{x}^2$ , questa fornisce invece il gap con il secondo livello eccitato, dato che

$$\langle n | \hat{x}^2 | 0 \rangle \propto \delta_{2n} \quad \implies \quad C_{x^2}(\tau) \rightarrow e^{-2\omega\tau} |\langle 2 | \hat{x}^2 | 0 \rangle|^2 . \quad (30)$$

## 2 Procedure

Di seguito sono descritte le tecniche numeriche implementate per la simulazione dell'oscillatore armonico quantistico unidimensionale. A seguito dell'implementazione numerica del modello [2.1], si ricavano l'energia interna del sistema per diversi valori della temperatura, la funzione d'onda dello stato fondamentale e i gap energetici tra lo stato fondamentale e i primi due livelli eccitati, utilizzando il metodo Monte-Carlo [2.2]. Per campionare la distribuzione di probabilità si implementa l'algoritmo Metropolis [2.3], mentre l'errore associato alle grandezze ottenute viene stimato con il metodo del bootstrap con binning.

### 2.1 Implementazione del modello

L'azione euclidea rappresenta il peso di ogni traiettoria  $x(\tau)$  nel calcolo del valor medio (22). La sua espressione per una particella di massa  $m$  in un potenziale armonico con costante elastica  $k = m\omega^2$ , è

$$\frac{S_E[x(\tau)]}{\hbar} = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \frac{m}{2} \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 + \frac{m\omega^2 x(\tau)^2}{2}. \quad (31)$$

Per studiare numericamente il comportamento del sistema, non è possibile utilizzare delle traiettorie continue e bisogna quindi limitarsi allo studio del limite del continuo della quantità

$$\langle \hat{O} \rangle_{T,N} = \oint \mathcal{D}\{x_i\} \Pr[\{x_i\}] O[\{x_i\}], \quad (32)$$

con  $i = 0, \dots, N-1$  e  $x_N \equiv x_0$ . Si ricava quindi un'espressione discreta dell'azione che può essere utilizzata nell'algoritmo per calcolare la probabilità  $\Pr[\{x_i\}]$  associata ad un dato cammino. Per tale scopo, è possibile partire dall'espressione (18) o discretizzare direttamente l'azione (31) considerando un set di  $N$  punti equidistanti sull'intervallo  $[0, \beta\hbar]$  con una distanza  $a = \beta\hbar/N$ . Questi punti discreti sono indicati come  $x(na)$ , con  $n = 0, 1, \dots, N-1$ . Per calcolare le derivate si utilizza la derivata in avanti (forward derivative).

Da un punto di vista computazionale, è inoltre necessario introdurre delle variabili adimensionali dividendo per la scala di lunghezza caratteristica del sistema trattato, come

$$y_n := \left( \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)^{-1} x(na). \quad (33)$$

L'azione euclidea diventa quindi

$$\frac{S_N[\{y_n\}]}{\hbar} = \frac{1}{2\omega} \sum_{n=0}^{N-1} a \left( \frac{(y_{n+1} - y_n)^2}{a^2} + \omega^2 y_n^2 \right), \quad (34)$$

e introducendo il parametro adimensionale  $\eta := a\omega$ , l'azione diventa

$$\frac{S_N[\{y_n\}]}{\hbar} = \sum_{n=0}^{N-1} \left( y_n^2 \left( \frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - \frac{1}{\eta} y_n y_{n+1} \right). \quad (35)$$

Si è così ottenuta un'espressione dell'azione euclidea in termini di un set di variabili adimensionali  $y_n$  con  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , che dipende dai parametri  $N$  e  $\eta$  relativi alla discretizzazione dell'intervallo. In particolare, si osserva che il parametro  $\eta$  è definito come la spaziatura delle suddivisioni  $a$  in unità del tempo caratteristico del sistema ( $1/\omega$ ). Pertanto, nel limite in cui  $\eta$  tende a zero, si riproduce il limite del continuo.

Infine, ricordando che  $\beta\hbar = Na$ , è possibile esprimere anche la temperatura  $T$  in unità della scala caratteristica del sistema  $\hbar\omega$  definendo

$$\tilde{T} := \frac{k_b T}{\hbar\omega} = \frac{1}{Na\omega} = \frac{1}{N\eta} . \quad (36)$$

Da queste relazioni si deduce che variando opportunamente  $N$  ed  $\eta$  è possibile studiare il comportamento del sistema nel limite del continuo, per  $\eta \rightarrow 0$ , oppure al variare della temperatura, per  $\tilde{T} = 1/N\eta$ .

## 2.2 Monte-Carlo

Il valor medio di una grandezza  $f$  è definito dalla relazione

$$\langle f \rangle = \int Dx \, \rho(x) f(x) , \quad (37)$$

in cui  $x := \{x^1, \dots, x^k\}$  è un set di variabili stocastiche distribuite con probabilità  $\rho(x)$ . Il metodo Monte-Carlo prevede di stimare il valor medio dell'osservabile con il valore della media campionaria  $\bar{f}$ , calcolata su un sample di  $M$  set di variabili estratti secondo la distribuzione di interesse, come

$$\bar{f} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(x_i) . \quad (38)$$

Nel formalismo del *Path Integral*, le osservabili dell'oscillatore armonico vengono valutate su tutti i possibili cammini chiusi; pertanto, le variabili stocastiche sono funzioni periodiche  $x(\tau)$  del tempo euclideo  $\tau$ . La distribuzione di probabilità dei singoli cammini è data da

$$\mathcal{D}x(\tau) P[x(\tau)] = \frac{\mathcal{D}x(\tau) e^{-\frac{S_E[x(\tau)]}{\hbar}}}{\int \mathcal{D}x(\tau) e^{-\frac{S_E[x(\tau)]}{\hbar}}} , \quad (39)$$

e l'espressione della media campionaria diventa

$$\bar{f} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(x_i(\tau)) . \quad (40)$$

Nel caso discretizzato si ottiene banalmente

$$\bar{f} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M f(\{y_n\}_i) , \quad (41)$$

in cui  $\{y_n\}$  è il set di  $N$  posizioni che caratterizzano il cammino.



## 2.3 Metropolis

L'algoritmo Metropolis consente di campionare la distribuzione di probabilità di un cammino. In particolare, viene implementata una versione locale dell'algoritmo in cui viene modificata una singola variabile  $y_n$  del cammino  $\{y_n\}$  per generare un nuovo cammino di prova che può essere accettato o rigettato. Per determinare se accettare o rigettare il cammino di prova, l'algoritmo Metropolis calcola il rapporto di probabilità tra il cammino di prova e il cammino iniziale. Queste probabilità dipendono dall'azione euclidea discretizzata  $S_E[\{y_n\}]$ . Poiché  $S_E[\{y_n\}]$  è un funzionale locale del cammino, la modifica di  $y_n$  in un singolo punto  $n$  richiede di valutare solo la variazione dell'azione per i punti adiacenti al punto scelto. Lo step elementare del Metropolis, nel passare da un cammino iniziale ad un nuovo cammino consiste nel:

- sostituire l' $n$ -esimo punto del cammino  $y_n$  con un valore  $y_n^p$ , scelto in maniera random nell'intervallo  $[y_n - \delta, y_n + \delta]$  con  $\delta = 1.5\sqrt{\eta}$ ;
- calcolare il rapporto  $r = \frac{e^{-S_E^p}}{e^{-S_E}}$ , che grazie all'espressione locale dell'azione diventa

$$r = \exp \left( -(y_n^p - y_n)^2 \left( \frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) + \frac{1}{\eta} (y_n^p - y_n)(y_{n+1} + y_{n-1}) \right) ;$$

- con probabilità  $r$ , o 1 se  $r > 1$ , scegliere il nuovo cammino con  $y_n^p$  al posto di  $y_n$ , altrimenti il cammino finale è uguale a quello di partenza;
- ripetere la procedura pescando in maniera random l'indice del punto del cammino da modificare.

Si sottolinea che la scelta del parametro  $\delta$  nel primo punto può variare in base all'algoritmo. Nel caso in esame, il valore è tale da mantenere il rate di modifica tra il 40 e il 50 %.

### 3 Analisi dei risultati

Si è testato che il rate di accettazione di un nuovo cammino per il parametro  $\delta$  utilizzato nel Metropolis rimane tra il 40 e il 50 % al variare della temperatura  $N\eta$ , e della lunghezza del reticolo  $N$ . Successivamente, utilizzando condizioni al contorno periodiche, sono state eseguite 80000 misure delle osservabili di interesse ogni  $100 \cdot N$  step del Metropolis, a temperatura fissata e al variare di  $N$  tra 20 e 500 con step 40. Per ogni lato e temperatura sono stati eseguiti  $10000 \cdot N$  step del Metropolis prima di iniziare la raccolta dati, per permettere al sistema di termalizzare. Gli errori sulle misure così ottenute sono stati calcolati tramite il bootstrap con binning, utilizzando 150 fake sample di dimensione uguale a quella del campione originale e con lunghezza di correlazione pari a 512.

In particolare, le grandezze analizzate sono: l'energia interna rinormalizzata  $U_{ren}$  dello stato fondamentale e il suo andamento al variare della temperatura [3.1]; la funzione d'onda dello stato fondamentale [3.2]; il gap energetico tra i primi due livelli eccitati e lo stato fondamentale [3.3].

#### 3.1 Energia interna

L'espressione dell'energia interna di un sistema statistico si ottiene dalla relazione

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z) , \quad (42)$$

in cui la funzione di partizione  $Z$  è approssimata dall'espressione (17). Questa dipende dall'azione discretizzata  $S_N$ , che a sua volta è una funzione di  $\eta$  come in equazione (35); si può quindi riscrivere la derivata su in termini di  $\eta$  come

$$\frac{\partial}{\partial \beta} = \frac{\hbar\omega}{N} \frac{\partial}{\partial \eta} \quad \implies \quad \bar{U} := \frac{U}{\hbar\omega} = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \eta} \log(Z) . \quad (43)$$

Tralasciando la misura di integrazione si ottiene

$$\bar{U} = \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle_c - \frac{1}{2\eta^2} \langle \Delta y^2 \rangle_c , \quad (44)$$

in cui la media  $\langle \dots \rangle_c$  viene effettuata sul cammino e  $\Delta y = y_{i+1} - y_i$  per  $i = 0, \dots, N-1$ .

Il primo termine dell'espressione è il contributo di energia potenziale, mentre il secondo deriva dall'energia cinetica. Quest'ultimo manifesta alcune criticità: oltre a fornire un contributo negativo all'energia interna, esso diverge come  $-1/2\eta$  nel limite al continuo. Si osserva che per  $\eta \rightarrow 0$  il termine cinetico diventa dominante in  $S_N$  e la distribuzione di probabilità tende ad una gaussiana con varianza  $\eta$ . Queste criticità vengono risolte includendo nel calcolo dell'energia interna la derivata della misura di integrazione, che dipende da  $\eta$  come  $\eta^{-N/2}$ . In definitiva, si ottiene l'espressione dell'energia rinormalizzata come

$$\bar{U}_{ren} = \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle + \frac{1}{2\eta} - \frac{1}{2\eta^2} \langle \Delta y^2 \rangle , \quad (45)$$

dove il nuovo termine cinetico è definito positivo e non dà divergenze nel limite al continuo. La funzione di partizione dell'oscillatore armonico ha un'espressione analitica nota,

$$Z = \frac{e^{-\beta\hbar\omega/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} , \quad (46)$$

da cui l'energia interna può essere calcolata utilizzando la relazione (42), come

$$U = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right) . \quad (47)$$

Nel limite di temperatura nulla si ottiene quindi l'energia del sistema nello stato fondamentale come  $\bar{U}_0 = 1/2$ . Per confermare numericamente questo valore e l'andamento al variare della temperatura, sono state effettuate delle misure dell'energia interna rinormalizzata per diversi valori di  $N\eta$  ed  $N$ .

Fissata la temperatura con  $N\eta = 20$ , il valore dell'energia nel limite del continuo si ottiene effettuando un fit dei dati ottenuti al variare di  $\eta$  con la funzione  $\bar{U}_{ren}(\eta) = \bar{U}_{ren} + b\eta^2$ . Il risultato ottenuto è riportato in figura 1. Si osserva che, con la risoluzione ottenuta, per temperature così basse non è possibile apprezzare la differenza tra l'energia stimata e l'energia dello stato fondamentale.

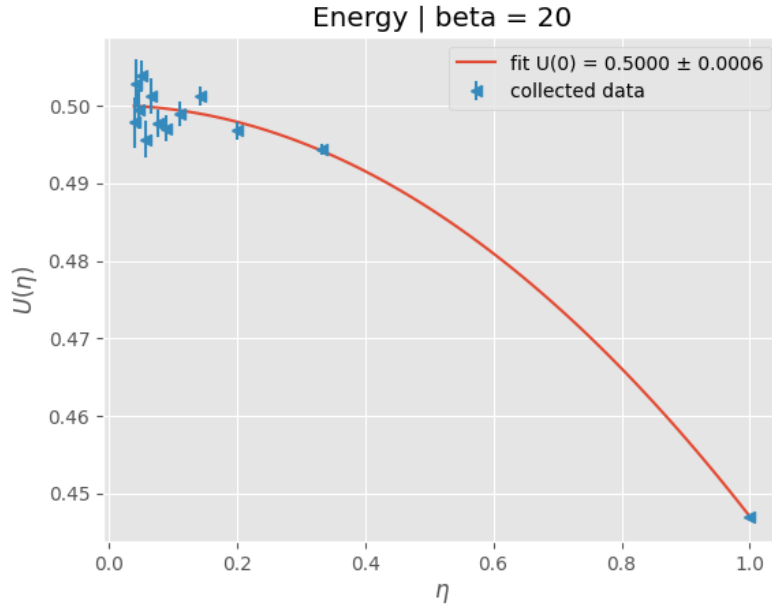


Figura 1: Energia interna rinormalizzata a temperatura fissata in funzione della distanza reticolare.

La procedura appena descritta viene ripetuta per valori crescenti della temperatura, ottenendo i valori nella tabella sottostante.

$N\eta$	$\bar{U}_{ren}$	$\chi^2_{rid}$
20	$0.5000 \pm 0.0006$	1.693
15	$0.4999 \pm 0.0007$	1.051
10	$0.5016 \pm 0.0012$	1.323
7	$0.5021 \pm 0.0014$	0.729
4	$0.5208 \pm 0.0024$	0.548
3	$0.5532 \pm 0.0050$	1.226
2	$0.6477 \pm 0.0089$	1.251
1	$1.062 \pm 0.029$	2.187

Eseguendo un fit con la funzione

$$\bar{U}_{ren}(N\eta) = \bar{U}_0 + \frac{a}{e^{N\eta} - 1}, \quad (48)$$

i valori dei parametri ottenuti sono:

$a$	$\bar{U}_0$	$\chi^2_{rid}$
$0.97 \pm 0.03$	$0.5003 \pm 0.0003$	0.730

Questi sono compatibili con l'energia di ground state teorizzata e con l'andamento previsto dall'equazione (47). Il plot dei punti e della funzione di fit è riportato in figura 2.

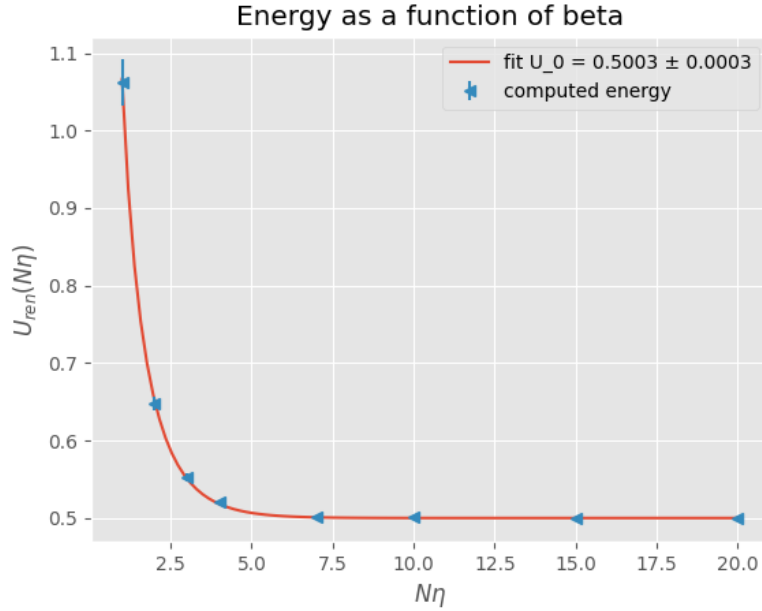


Figura 2: Energia interna rinormalizzata in funzione della temperatura.

### 3.2 Funzione d'onda del ground state

Si consideri l'operatore  $\hat{f}(x_a, x_b)$  definito come un proiettore sull'intervallo  $[x_a, x_b]$ . La media termodinamica di questo oggetto è data dall'espressione

$$\langle \hat{f} \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}} \hat{f})}{Z} = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | \hat{f} | n \rangle , \quad (49)$$

da cui, inserendo la risoluzione dell'identità nella base delle posizioni, si ottiene

$$\langle \hat{f} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \int_{-\infty}^{\infty} dx \langle n | \hat{f} | x \rangle \langle x | n \rangle = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \int_{x_a}^{x_b} dx |\psi_n(x)|^2 . \quad (50)$$

Fare la media statistica dell'operatore fornisce quindi la probabilità che la posizione ricada nell'intervallo  $[x_a, x_b]$ , per ogni autostato dell'hamiltoniana. In particolare, per  $T \rightarrow 0$  si ha

$$\langle \hat{f} \rangle \rightarrow \int_{x_a}^{x_b} dx |\psi_0(x)|^2 . \quad (51)$$

Costruire un istogramma che mostra la distribuzione di probabilità della coordinata  $x$  equivale a rappresentare la distribuzione dell'operatore  $\hat{f}$  e, nel limite di bassa temperatura, il modulo quadro della funzione d'onda dello stato fondamentale:

$$|\psi(y)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-y^2} . \quad (52)$$

In questo modo è stato ricavato numericamente il modulo quadro della funzione d'onda, raccogliendo  $N = 260$  posizioni per 25000 traiettorie con  $\beta \hbar \omega = N \eta = 50$ . Questo istogramma è stato confrontato in figura 3 con quello ottenuto campionando la distribuzione analitica.

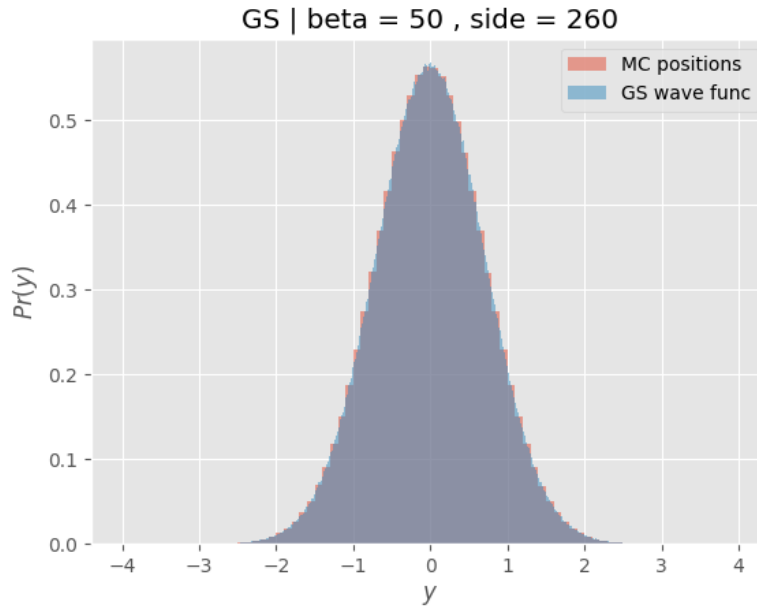


Figura 3: Istogramma della funzione d'onda dello stato fondamentale ottenuta tramite simulazione Monte-Carlo e tramite campionamento della distribuzione analitica. In grigio la zona di overlap.

### 3.3 Gap energetici

Come illustrato in sezione 1.2, il calcolo delle funzioni di correlazione a due tempi diversi fornisce informazioni sui gap energetici tra il ground state e i primi livelli eccitati. In particolare, ricordando le equazioni (29) e (30), nel limite di bassa temperatura si ha

$$C_x(\tau) \sim e^{-\Delta E_1 \tau} \quad e \quad C_{x^2}(\tau) \sim e^{-\Delta E_2 \tau} , \quad (53)$$

in cui

$$\Delta E_1 := E_0 - E_1 = \hbar\omega \quad e \quad \Delta E_2 := E_0 - E_2 = 2\hbar\omega . \quad (54)$$

Implementando l'espressione dei correlatori in termini delle variabili adimensionali  $\{y_i\}$  e ponendo  $\tau = ka$ , l'espressione precedente diventa

$$\begin{aligned} C_y(k) &= \langle y_{i+k} y_i \rangle_0 - \langle y_i \rangle_0^2 \sim e^{-\Delta E_1 a k} , \\ C_{y^2}(k) &= \langle y_{i+k}^2 y_i^2 \rangle_0 - \langle y_i^2 \rangle_0^2 \sim e^{-\Delta E_2 a k} . \end{aligned} \quad (55)$$

Entrambi i correlatori sono stati calcolati tramite metodo Monte-Carlo al variare di  $N$  e a temperatura fissata, con  $N\eta = 50$ . Si osserva che queste espressioni sono invarianti per traslazioni lungo un cammino, i.e. non dipendono dall'indice  $i$  considerato, ed è quindi possibile utilizzare il valore medio di queste quantità su una traiettoria invece che il valore per  $i = 0$ . I risultati ottenuti per  $C_y(k)$  e  $C_{y^2}(k)$  sono riportati in figure 4 e 5 rispettivamente.

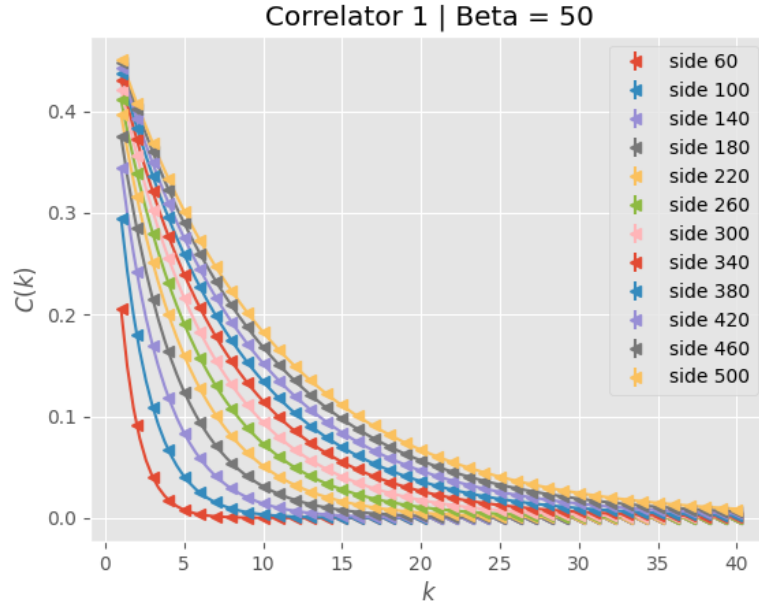


Figura 4: Correlatore  $C_y(k)$  al variare della dimensione del reticolo.

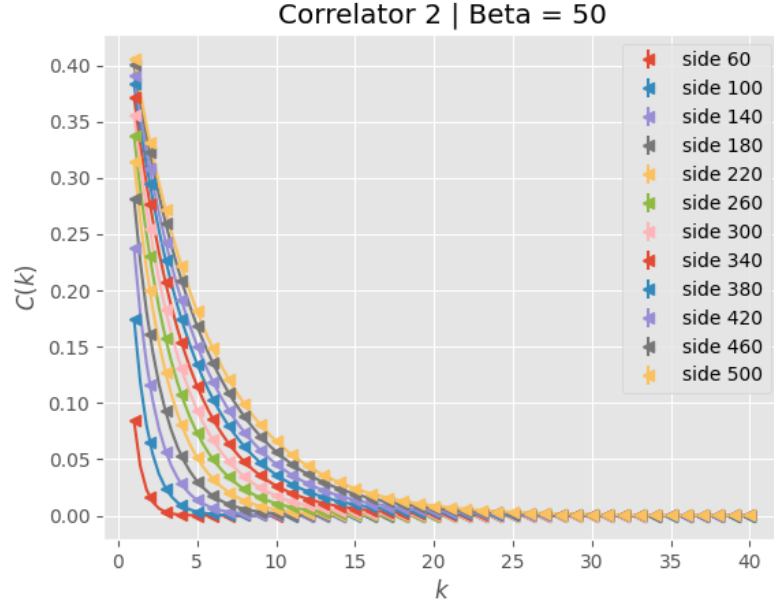


Figura 5: Correlatore  $C_{y^2}(k)$  al variare della dimensione del reticolo.

Eseguendo dei fit dei dati ottenuti con la funzione  $y = ae^{-bx}$ , si ottengono i valori dei gap  $\Delta E_1$  e  $\Delta E_2$  in funzione di  $\eta$ . Questi dati, come nel caso dell'energia interna, possono essere utilizzati per estrapolare il valore dei gap nel limite del continuo. Si effettua quindi un fit al variare di  $\eta$  con la funzione  $\Delta E_i(\eta) = \Delta E_i + b\eta^2$ . I risultati ottenuti per i due casi sono riportati in figure 6 e 7 rispettivamente.

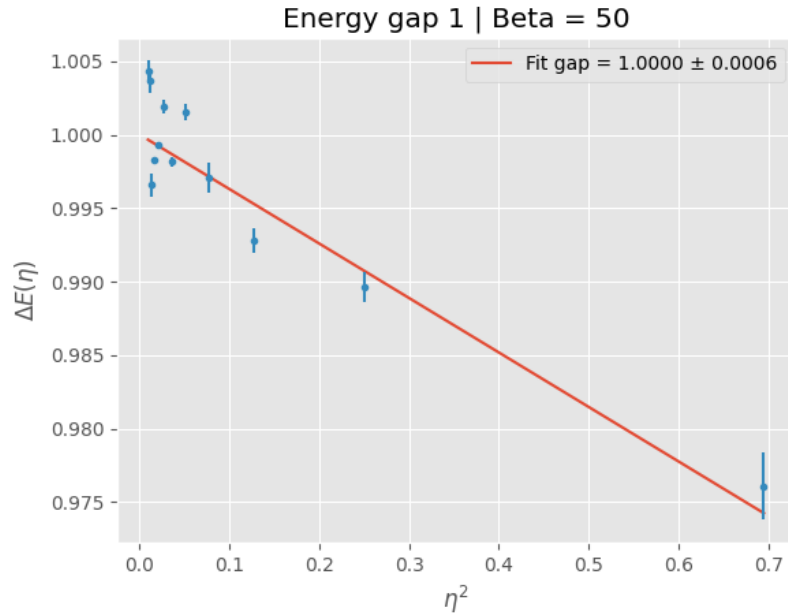


Figura 6: Valore del primo gap energetico nel limite del continuo.

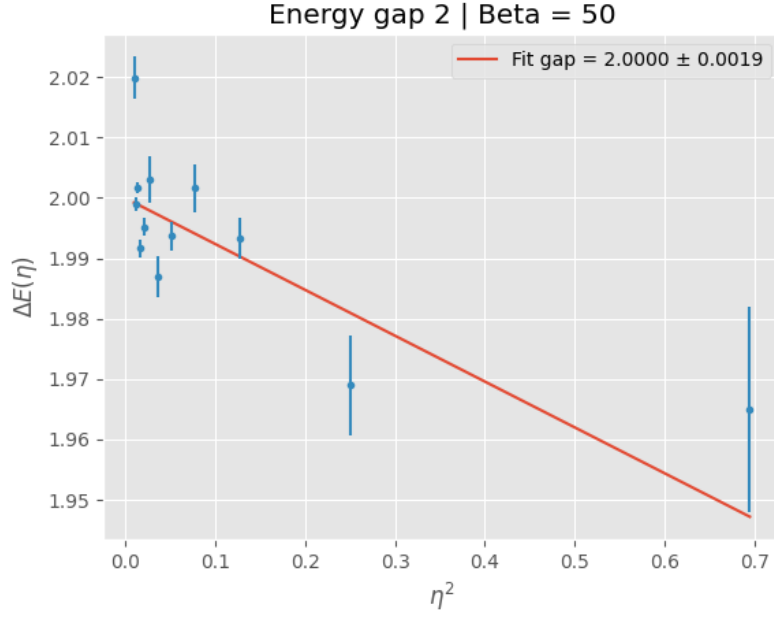


Figura 7: Valore del secondo gap energetico nel limite del continuo.

Confrontando i valori dei gap così ottenuti con quelli riportati in equazione (54), si osserva che questi sono in accordo con i valori attesi. Nonostante ciò, si osserva che il valore del chi quadro ridotto in entrambi i casi è dell'ordine di 10 a causa della correlazione tra i dati nei fit degli esponenziali. Per risolvere il problema e ottenere una stima corretta dell'errore sui gap si potrebbe utilizzare un fit che tiene conto della correlazione, implementare un bootstrap sui gap energetici, oppure simulare indipendentemente ogni valore  $C(k)$  - aumentando notevolmente lo sforzo numerico.