Estado Fundamental de un sistema cuántico 1D vía integrales de camino con Montecarlo

Kevin Cortés G.
Santiago Quintero C.

Universidad de Antioquia
Instituto de Física, FCEN
Física computacional II

Marzo de 2022

Propagador

$$\psi(x_b, t_b) = \int dx_a K(x_b, t_b; x_a, t_a)\psi(x_a, t_a) \tag{1}$$

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_n \psi^*(x_a)\psi(x_b)e^{-iE_n(t_b - t_a)} = \langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle \tag{2}$$

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{paths} e^{iS(a,b)/\hbar} \tag{3}$$

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \int dx_j \langle x_b, t_b | x_j, t_j \rangle \langle x_j, t_j | x_a, t_a \rangle \tag{4}$$

Propagador

$$\langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle = \int DX e^{iS(a,b)} \tag{5}$$

donde

$$DX = dx_1 dx_2 ... dx_{N-1}$$

$$S(a,b) = \sum_{j=1}^{N} S_j$$

y por definición

$$S_j \approx L_j \Delta t \approx \frac{1}{2}\Big[\frac{(x_{j+1} - xj)^2}{\Delta t}\Big] - \Big[\frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2}\Big] * \Delta t$$

Acción

cuando cambiamos $t \to -i\tau$, tenemos que

$$L(x,\dot{x}) = L\left(x_j, \frac{dx}{dt}\right) = \frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x)$$

$$L\left(x,\frac{dx}{dt}\right) \to L\left(x,\frac{dx}{-id\tau}\right) = -\frac{m}{2}\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - V(x) = -H\left(x,\frac{dx}{id\tau}\right) = -E$$

$$S_j = \int_{t_j}^{t_{j+1}} L(x,t)dt = -i\int_{\tau_j}^{\tau_{j+1}} H(x,\tau)$$

Acción

Luego, usando la ecuación (5)

$$\langle x_b, -i\tau | x_a, t_a = 0\rangle = \int DXe^{-\int_0^\tau H(\tau')d\tau'} \tag{6}$$

pero

$$\int_0^\tau H(\tau')d\tau' \approx \sum_j \epsilon E_j = \epsilon E(\{x_j\})$$

$$E_j \approx \frac{1}{2}\Big[\frac{(x_{j+1} - xj)^2}{\epsilon^2}\Big] + \Big[\frac{V(x_{j+1}) + V(x_j)}{2}\Big]$$

Por lo que cada posible transición queda determinada por

$$E(\{x_j\})$$

Acción

por lo que

$$\langle x_b, -i\tau | x_a, t_a = 0 \rangle = \int DX e^{-\epsilon E(\{x_j\})} \tag{7}$$

De esta manera todas las posible trayectorias particionan la energía, y el factor de boltzmann $e^{-\epsilon E(\{x_j\})}$ es el responsable de las transiciones mas probables.

Camino

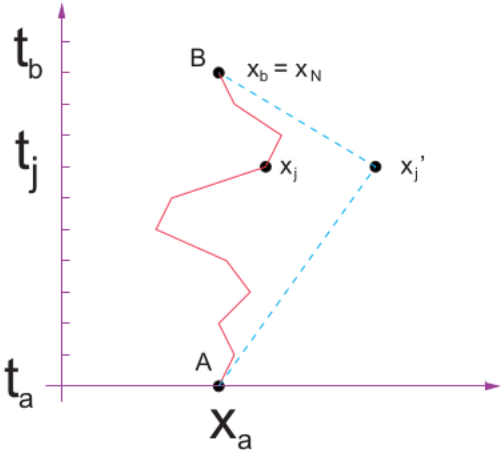

Figura: camino de A a B

Metrópolis

- Se toma la configuración inicial de tal forma que $x_j = 0$ para todo j
- se elige un x_i aleatoriamente
- se elige aleatoriamente un cambio dx_i tal que $x_i \to x_i + dx_i$
- si $E' - E_i <= 0$ aceptamos el cambio en x_i
- si $E' - E > 0$, entonces $e^{-\epsilon \Delta E}$ es la probabilidad de que ocurra la transición $x_i \to x_i + dx_i$

Para cada punto de la red asociado al espacio sumamos el numero de veces en el que se da una transición a ese punto o cerca a el, este método es el que nos permite construir el estado fundamental.

Oscilador Armónico - Átomo Muónico

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

con $\omega = 1{,}3 * 10^{22} s^{-1}$, $m = 207 m_e$, y con dominio $[3{,}5, -3{,}5] * 10^{-14} m$

Bibliografía

- , R. Laundau,C. Bordeianu M. Paez, A Survey of Computational Physics Introductory Computational Science, PRINCETON UNIVERSITY PRESS(2010).
- GP. Lepage, Lattice QCD for novices, World Scientific (1998)