

Studio dell'oscillatore armonico tramite path integral

Angela Conaci, Francesco Zeno Costanzo

25 aprile 2022

1 Introduzione

Lo scopo della simulazione è lo studio di un sistema quantistico, l'oscillatore armonico, calcolare l'energia interna e i primi livelli energetici.

1.1 Cenni teorici

Dato un operatore O il valor medio termodinamico di una qualsiasi osservabile fisica ad esso associato è:

$$\langle O \rangle = \sum_n P_n O_n$$

avendo definito:

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

Ma possiamo riscrivere tutto in termini di tracce su sugli autostati $|n\rangle$:

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

e usando l'invarianza della traccia per cambi di base fra sistemi completi ortonormali, utilizziamo gli autostati della posizione in modo da far vedere l'analogia con l'elemento di matrice del propagatore e quindi di poter utilizzare una rappresentazione in termini di integrale sui cammini.

$$Z = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \quad K(x_a, x_b, t_a, t_b) = \langle x_a | e^{-iH(t_b - t_a)/\hbar} | x_b \rangle$$

per cui possiamo scrivere quanto sopra come:

$$Z = \mathcal{N} \int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) \quad \langle O \rangle = \frac{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) O[x(\tau)]}{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)}$$

Dove $\tau = \beta\hbar$ è il tempo euclideo; il pedice 'E' di S sta proprio ad indicare questo dato che è stata fatta una rotazione di Wick: $t \rightarrow -i\tau$. L'espressione del valore medio di O ha una interpretazione probabilistica che sarà alla base della simulazione tramite tecniche Monte Carlo; si ha il valor medio di una funzione del cammino valutata su una distribuzione di probabilità per i cammini che è:

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

2 Algoritmo

Assumendo $\hbar = 1$ cominciamo con lo scrivere l'azione già discretizzata:

$$\sum_{j=1}^N a \left(\frac{m}{2a^2} (x_{j+1} - x_j)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x_j^2 \right)$$

dove a è la spaziatura del reticolo. Per effettuare la simulazione verrà utilizzato l'algoritmo Metropolis, per il quale dobbiamo definire come scegliere il cammino di prova. Questo verrà fatto cambiando una sola variabile del cammino avendo quindi un algoritmo locale. Questo perché per effettuare il test di accettazione va valutata la differenza di azione dei due cammini, la quale è una funzione locale del cammino; dovranno quindi essere valutati i contributi proporzionali a x_j^2 , $x_j x_{j+1}$ e $x_j x_{j-1}$ e ciò velocizza il calcolo. Definendo $y_j = \sqrt{m\omega} x_j$ che è adimensionale, si ha:

$$\Delta S = (y_j^p - y_j^2) \left(\frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - (y_j^p - y_j)(y_{j+1} + y_{j-1}) \frac{1}{\eta}$$

dove y^p è la variabile di prova estratta che verrà accettata con probabilità $\exp(-\Delta S)$.

3 Calcolo dell'energia

Per calcolare l'energia interna Utilizzando la funzione di partizione si ha:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln(Z) \quad Z \propto \eta^{-N/2} \prod_{j=1}^N dy_j e^{-S_E}$$

Se N è fisso si ha: $\partial/\partial \beta = (\omega/N)(\partial/\partial \eta)$ e si ottiene quindi la seguente espressione:

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

Dove $\langle y^2 \rangle$ è il valor medio di y^2 quindi termine potenziale dell'energia, mentre il termine $\langle \Delta y^2 \rangle$ è il valor medio di $(y_{j+1} - y_j)^2$ proporzionale al termine cinetico; Nel caso di un oscillatore armonico sappiamo che l'espressione per l'energia interna è:

$$U = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\beta\hbar\omega) - 1} \right)$$

3.1 Termine potenziale

Data un'estensione temporale $\beta\omega = 20 = N\eta$ fissata, e quindi temperatura fissata, si è eseguita una simulazione facendo variare N e η per eseguire il limite al continuo, cioè $\eta \rightarrow 0$ che per il termine cinetico sappiamo essere, per il viriale, paria a: $\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(20)-1} \simeq 0.5000$ in unità di $\hbar\omega$ si ottiene:

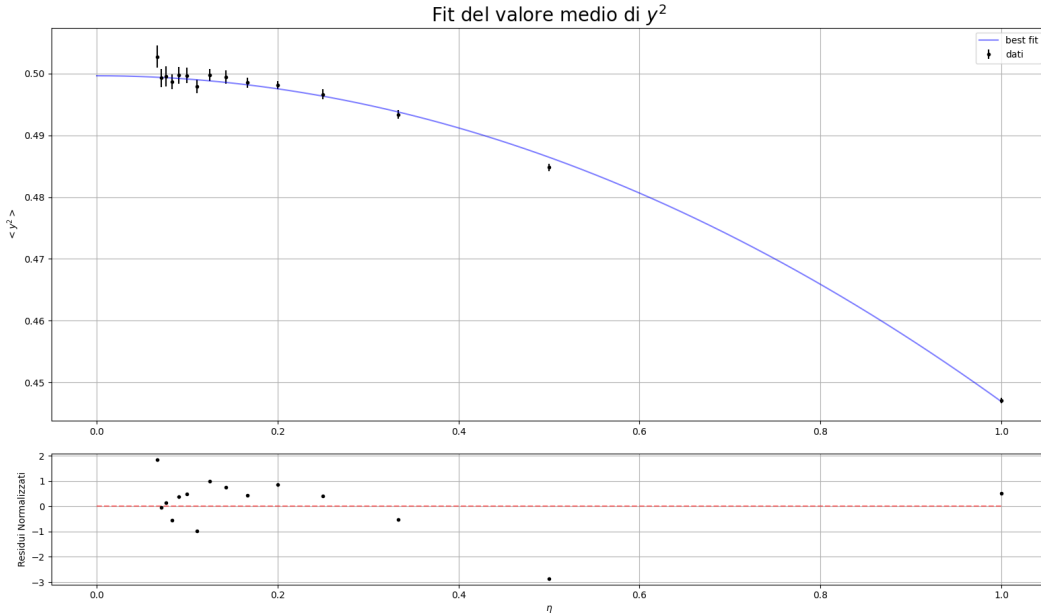


Figura 1: limite al continuo valor medio di y^2 ; modello: $a + bx^2$

- $a = 0.4997 \pm 0.0003$
- $b = -0.0528 \pm 0.0006$
- $\chi^2 / (DOF) = 16 / 16 (DOF)$
- $corr(a, b) = -0.60$

Per cui il risultato è compatibile con quanto atteso.

3.2 Termine cinetico

Per il termine cinetico è possibile vedere come se non si considerasse la costante \mathcal{N} davanti alla funzione di partizione che sappiamo essere divergente, in particolare $\mathcal{N} \propto \eta^{-N/2}$, il termine $-\frac{1}{2\eta^2} \langle \Delta y^2 \rangle$ diverga, infatti per piccoli η il termine cinetico dell'azione è dominante e quindi Δy è distribuito come una gaussiana e $\Delta y^2 \sim \sigma^2 \sim \eta$ per cui si ha una divergenza $1/\eta$ curata dalla costante \mathcal{N} che dà un contributo $1/2\eta$.

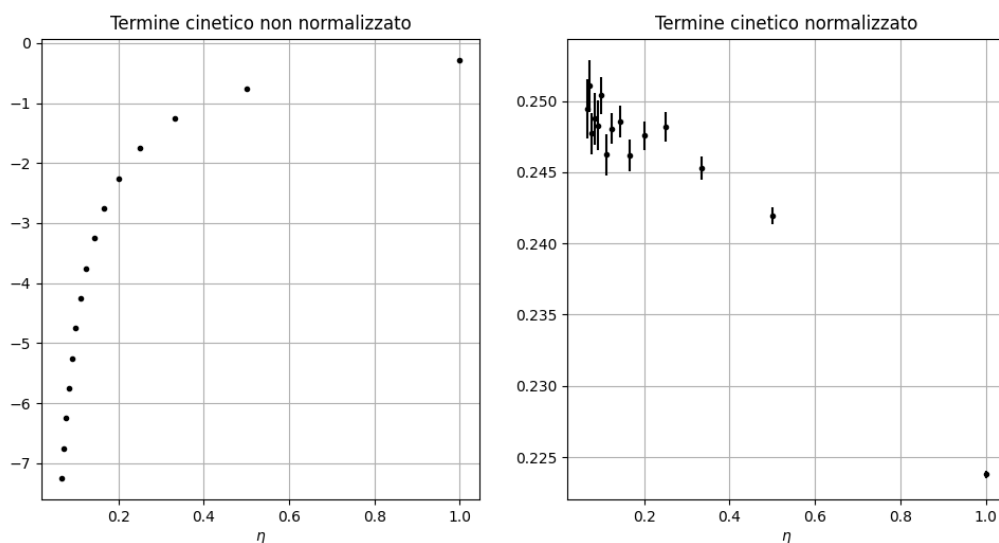


Figura 2: Termine cinetico

3.3 Andamento in funzione della temperatura

L'andamento dell'energia interna in funzione della temperatura può essere ricavato facendo simulazioni a temperatura diverse, nella fattispecie le simulazioni sono state eseguite fissando il valore di $\eta = 0.1$ per poi eseguire un fit e ricavare quindi il valore dell'energia a temperatura nulla. Anche qui i dati sono in unità di $\hbar\omega$

- $a = 0.4996 \pm 0.0004$
- $b = -0.996 \pm 0.008$
- $\chi^2 / (DOF) = 3 / 13 (DOF)$
- $corr(a, b) = -0.17$

Anche in questo caso si vede che i risultati sono compatibili con la teoria.

4 Funzione d'onda dello stato fondamentale

Per sapere la probabilità \mathcal{P} che la variabile x sia nell'intervallo $[x_a, x_b]$ si può utilizzare:

$$\mathcal{P} = \frac{Tr(e^{-\beta H} f(x, x_a, x_b))}{Tr(e^{-\beta H})} \quad \text{con} \quad f(x, x_a, x_b) = \begin{cases} 1 & \text{se } x_a < x < x_b \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

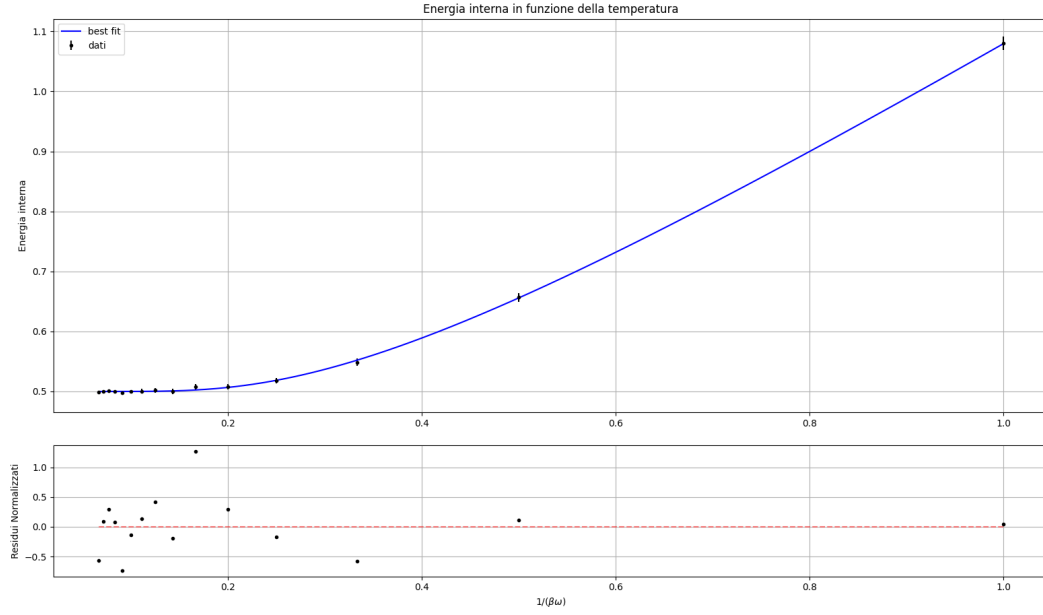


Figura 3: fit con modello: $a + \frac{b}{\exp(1/(\beta\omega)) - 1}$

$$\mathcal{P} = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | f(x, x_a, x_b) | n \rangle \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, x_a, x_b) \langle n | x \rangle \langle x | n \rangle dx = \int_{x_a}^{x_b} |\psi_n|^2 dx$$

che nel limite di temperatura nulla si riduce alla funzione d'onda del fondamentale. Un istogramma dei cammini sarà quindi la funzione d'onda cercata. I dati riportati corrispondono a due estensioni temporali diverse $\beta\omega = 3, 20$ e due valori diversi di $\eta = 1, 0.07$. Negli istogrammi sono presenti più cammini a "tempi di simulazione" diversi.

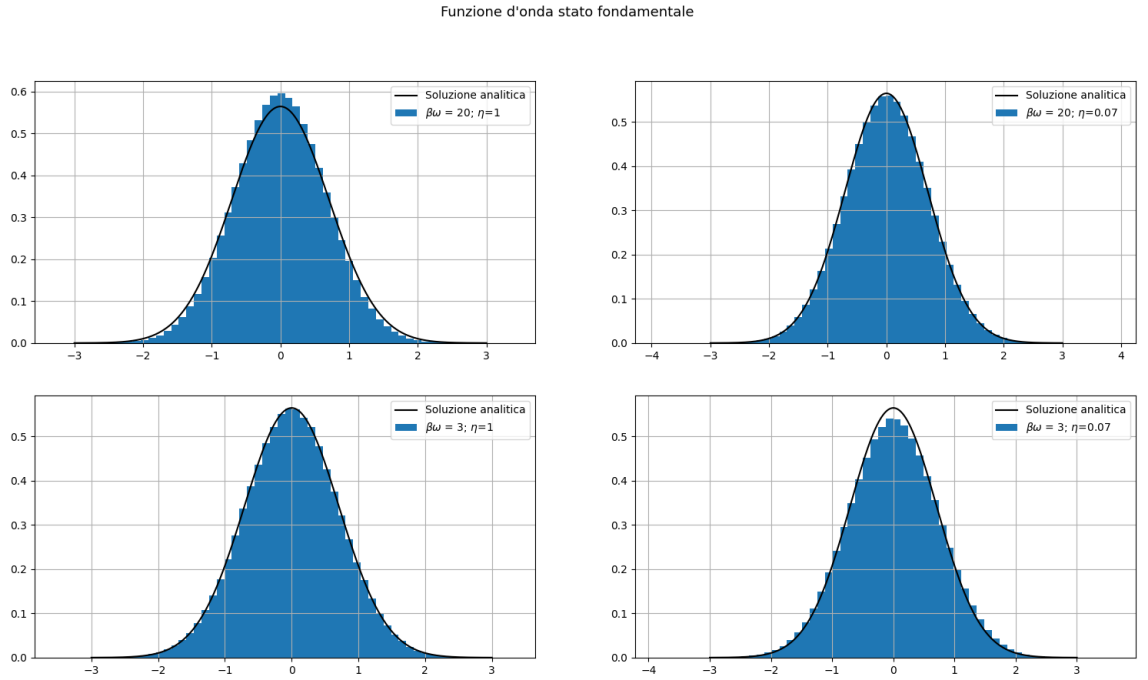


Figura 4: Funzione d'onda del fondamentale: $\frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2/2}$

5 Livelli energetici

Un modo per ottenere informazioni sui livelli energetici, o meglio sullo splitting degli stessi è tramite l'uso della funzione a due punti connessa; dato un operatore O la funzione a due punti connessa è definita come:

$$\langle O(\tau)O(0) \rangle_c = \langle O(\tau)O(0) \rangle - \langle O^2 \rangle$$

In termini di path integral possiamo riscrivere il primo termine come

$$\frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-(\beta-\tau)H} O(q) e^{-\tau H} O(q)) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \langle 0 | e^{\tau H} O(q) e^{-\beta H} O(q) | 0 \rangle$$

si può poi riscrivere come:

$$\langle 0 | e^{\tau H} O(q) e^{-\tau H} O(q) | 0 \rangle = \sum_n \langle 0 | e^{\tau H} O(q) e^{-\tau H} | n \rangle \langle n | O(q) | 0 \rangle = \sum_n e^{(E_n - E_0)\tau} |\langle n | O(q) | 0 \rangle|^2$$

Da cui sottraendo il termine $|\langle 0 | O(q) | 0 \rangle|^2$ si ha:

$$\langle O(\tau)O(0) \rangle_c = \sum_{n \neq 0} e^{(E_n - E_0)\tau} |\langle n | O(q) | 0 \rangle|^2 \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} e^{(E_{\bar{n}} - E_0)\tau} |\langle \bar{n} | O(q) | 0 \rangle|^2$$

per τ grandi il termine della sommatoria dominante è quello relativo allo stato \bar{n} che è quello con energia più bassa connesso al vuoto da O . Preso quindi $O = x, x^2$ è possibile calcolare rispettivamente la differenza tra primo eccitato e fondamentale e tra secondo eccitato e fondamentale.

5.1 Splitting $E_1 - E_0$

Scelta un'estensione $\beta\omega = 40$ e calcolate le curve della correlazione di x a vari eta si è ottenuto il valore dell'energia, di cui poi si è eseguito il limite al continuo, in unità di $\hbar\omega$ ci si aspetta che lo splitting tenda ad 1.

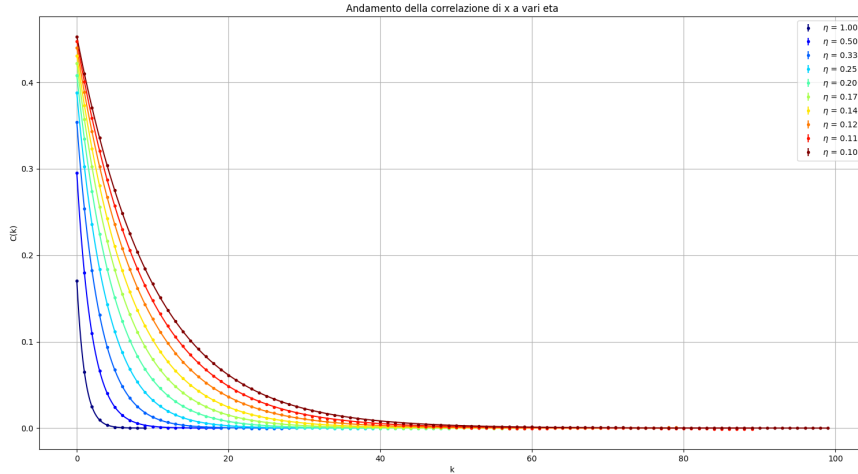


Figura 5: fit con modello: Ae^{-b*k}

Avendo fittato in funzione di k e non di τ per ottenere le energie bisogna dividere il coefficiente dell'esponenziale per il rispettivo eta; eseguendo poi un fit lineare in η^2 per avere il limite al continuo si ottiene:

- $m = -0.034 \pm 0.002$
- $q = 1.0005 \pm 0.0005$
- $\chi^2 / (DOF) = 10 / 5$ (DOF)
- $corr(a, b) = -0.34$

Si ha quindi che il limite al continuo dello splitting tra primo eccitato e fondamentale è compatibile con quanto previsto dalla teoria.

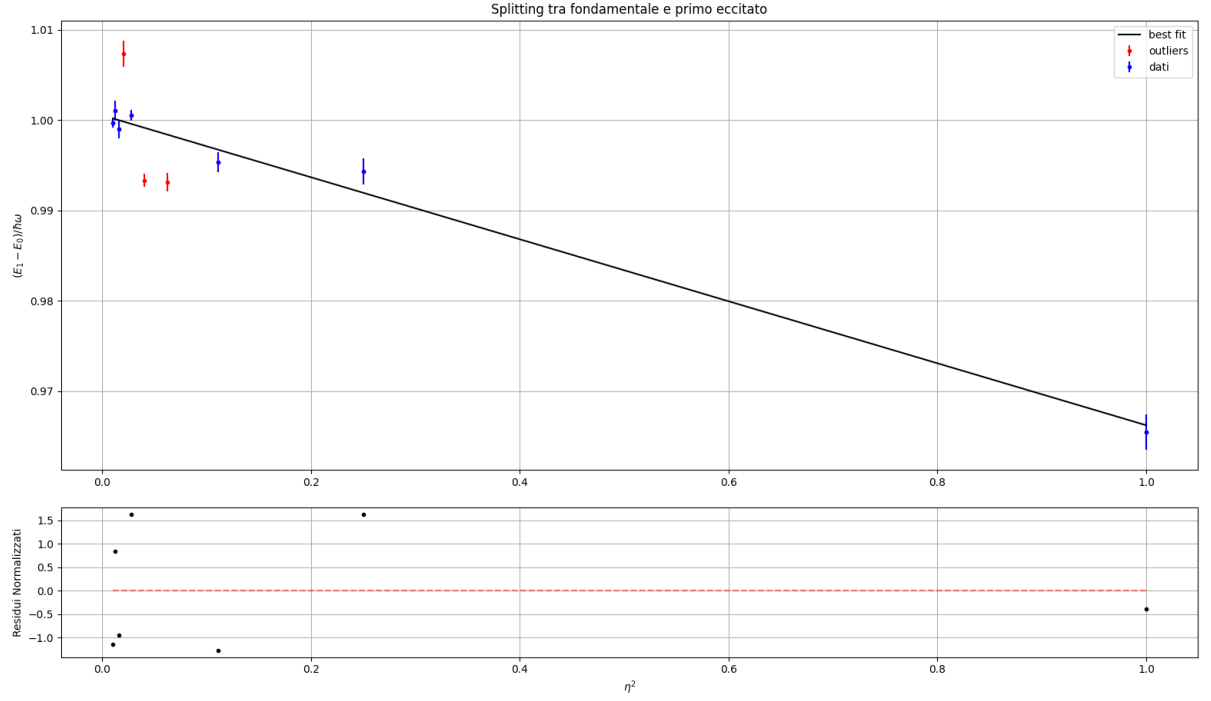


Figura 6: fit con modello: $q + mx$

5.2 Splitting $E_2 - E_0$

Anche in questo caso si è scelto un $\beta\omega = 20$ e come sopra si è eseguito il fit delle correlazioni con un modello esponenziale per poi ricavare il limite al continuo dello splitting che questa volta è atteso essere pari a 2.

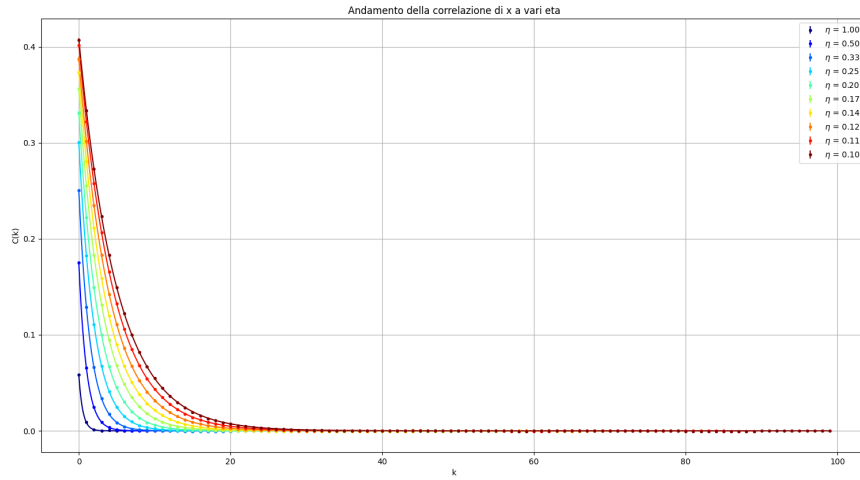


Figura 7: fit con modello: Ae^{-b*k}

Anche qui con un fit lineare in funzione di η^2 si ottiene:

- $m = -0.11 \pm 0.03$
- $q = 2.002 \pm 0.002$
- $\chi^2 / (DOF) = 21 / 7 (DOF)$
- $corr(a, b) = -0.64$

L'estrapolazione al continuo risulta quindi compatibile con la teoria.

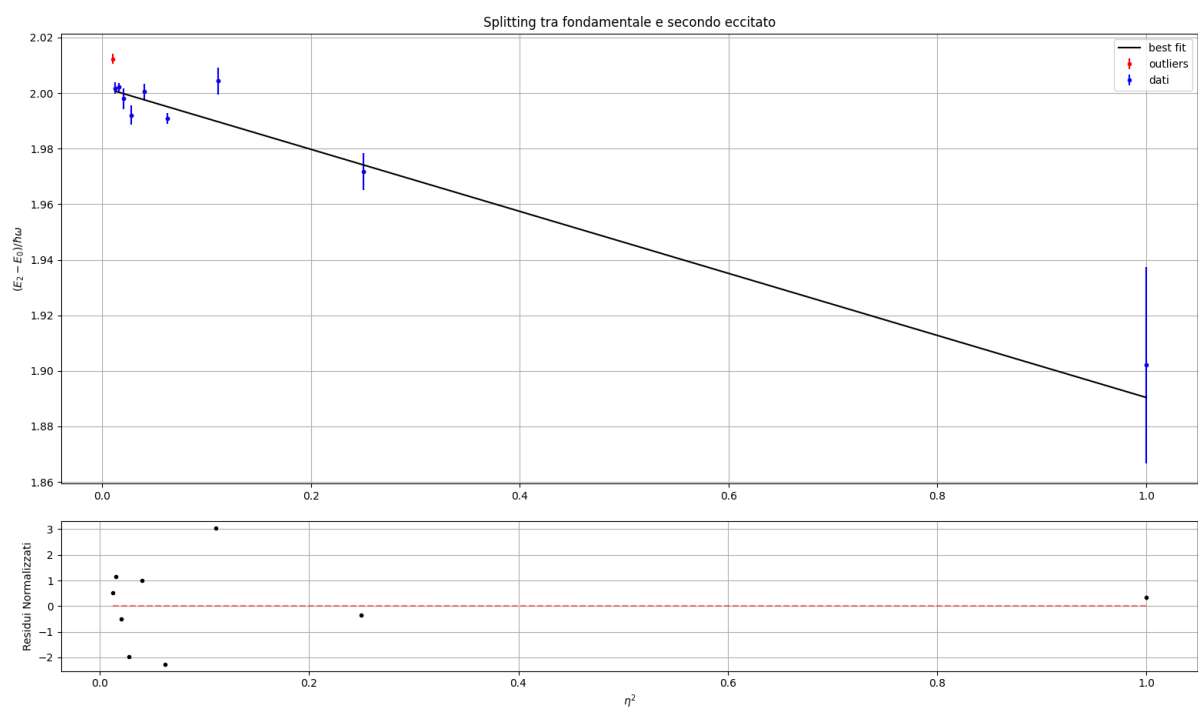


Figura 8: fit con modello: $q + mx$