

Analisi dell'oscillatore armonico

Ludovico Iannello

20 settembre 2023

1 Introduzione

Lo scopo di questo lavoro è quello di studiare e analizzare l'oscillatore armonico unidimensionale mediante l'uso del path-integral effettuando varie simulazioni Monte-Carlo con l'algoritmo Metropolis[1].

2 Path-Integral

Considerando un sistema all'equilibrio, si ha che la probabilità di essere in uno autostato dell'hamiltoniana ($H|n\rangle = E_n|n\rangle$) è data dalla distribuzione di Gibbs: $P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z}$ con Z funzione di partizione. Dunque il valor medio di un osservabile O sarà dato da :

$$\langle O \rangle = \sum_n P_n \langle n|O|n \rangle = \frac{\text{Tr}(Oe^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}$$

Riscrivendo in modo conveniente la funzione di partizione Z e introducendo l'integrale sui cammini vale:

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

dove è stata introdotta l'azione euclidea $S_E[x(\tau)] \equiv \int_0^{\beta\hbar} d\tau' \left(\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau'} \right)^2 + V(x(\tau')) \right)$ in cui è stata fatta la sostituzione $t \rightarrow -i\tau$ con τ tempo euclideo. Dunque ora si può scrivere $\langle O \rangle$ in termini dell'integrale sui cammini utile per l'interpretazione statistica che verrà utilizzata per effettuare le simulazioni:

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

Con le simulazioni numeriche quindi verranno estratti in modo stocastico un certo numero di cammini ($x(\tau)$) sui quali valutare poi $\langle O \rangle$. Inoltre un altro aspetto importante riguarda il limite di temperatura nulla ($\beta \rightarrow \infty$), si ha infatti $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle O \rangle = \langle 0|O|0 \rangle$. Dunque dal punto di vista termodinamico l'energia interna nel limite di temperature basse corrisponde all'energia dello stato fondamentale.

3 Oscillatore armonico

Considerando dunque il sistema quantistico dell'oscillatore armonico con potenziale $V(x) = \frac{m}{2}\omega^2 x^2$, l'azione euclidea è la seguente:

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

Si vuole ora riscrivere tutto in termini di variabili adimensionali e regolarizzare il problema per poter effettuare le simulazioni. Introducendo il passo a si discretizza dunque il sistema considerando N punti del cammino:

$$\begin{aligned} y(n) &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x(na), \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \\ \int d\tau &\rightarrow \sum a, \quad a = \beta\hbar/N \\ \frac{dx}{d\tau} &\rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{y(n+1) - y(n)}{a} \\ -\frac{1}{\hbar}S_E[(x(\tau))] &\rightarrow -S_D = -\sum_{n=0}^{N-1} \left[y(n)^2 \left(\frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - \frac{1}{\eta} y(n)y(n+1) \right] \end{aligned}$$

$\eta = \omega a$ è un parametro adimensionale che verrà utilizzato per le simulazioni Monte-Carlo. Esso rappresenta infatti il rapporto tra il passo della discretizzazione a e la scala temporale del problema. Per ottenere dunque il limite al continuo basterà considerare nelle simulazioni il limite $\eta \rightarrow 0$. Verranno inoltre considerati gli errori sistematici dovuti ad η finito a causa dell'impossibilità di raggiungere esattamente il limite nullo per η .

Dunque per quanto riguarda le simulazioni basterà campionare N (numero di passi del cammino) variabili y_j distribuite come $\prod_j dy_j e^{-S_D}$. Bisognerà tuttavia imporre le condizioni al bordo date dal problema ovvero il punto iniziale e il punto finale devono coincidere $y_N = y_0$.

Infine in termini delle nuove variabili introdotte (y), è possibile definire la variabile adimensionale che rappresenta la temperatura scala, data da $\hat{T} = \frac{1}{N\eta}$. Per effettuare il limite al continuo del problema dovrà dunque rimanere fissato il prodotto $N\eta$ in modo da considerare la temperatura costante. Infine per poter considerare il limite di alta o bassa temperatura basterà considerare rispettivamente il caso $\hat{T} \ll 1$ e $\hat{T} \gg 1$. D'ora in avanti se non meglio specificato si considererà $\hbar = 1$.

4 Descrizione delle simulazioni

Per prima cosa sono state eseguite simulazioni con $\beta\omega = 20$ al variare di 19 valori di η mantenendo il prodotto ηN costante. Successivamente sono state eseguite simulazioni variando $\beta\omega$ mantenendo costante $\eta = 0.1$ per analizzare le misure al variare della temperatura. Lo schema dell'algoritmo è il seguente:

1. si estrae uno stato di prova y_p distribuito in maniera uniforme nell'intervallo $[y_0 - \delta, y_0 + \delta]$ con y_0 stato iniziale,
2. si calcola $r \equiv \frac{e^{-S_D^p}}{e^{-S_D}}$

3. si estrae x in $(0, 1)$ e se $x < r$ il passo successivo della catena sarà $y = y_p$ altrimenti $y = y_0$ rimane invariato.

Per ogni simulazione è stato prima effettuato un test per determinare il miglior parametro δ dell'algoritmo Metropolis¹, il sistema è stato poi fatto termalizzare, infine sono state effettuate diverse misure:

- Il valor medio su tutti i cammini (100000 misure) della media $\langle y^2 \rangle$ per ogni cammino.
- Il valor medio su tutti i cammini (100000 misure) della media $\langle \Delta y^2 \rangle$ per ogni cammino, ovvero il valor medio sui cammini dello scarto quadratico $(y_{j+1} - y_j)^2$ mediato sul singolo cammino.

L'errore sulle osservabili misurate è stato calcolato utilizzando il metodo del bootstrap nel caso di dati correlati. Ulteriori misure effettuate verranno descritte successivamente nella sezione 7. Di seguito viene riportato un plot di 3 differenti cammini ottenuti dalla simulazione. In questo caso si è fissato $\beta\omega = 10$.

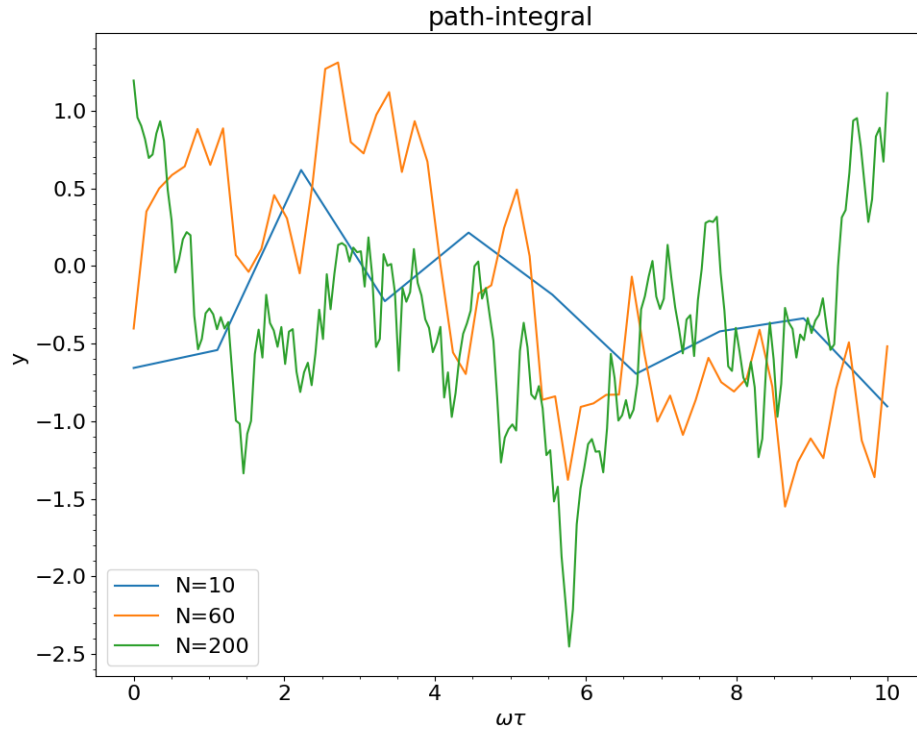


Figura 1: Diversi cammini al variare del numero di passi N ma tenendo fisso il prodotto $N\eta$

¹Il parametro δ rappresenta appunto la larghezza dell'intervallo in cui estrarre il punto di prova n -esimo del cammino prima di effettuare il test di accettazione.

5 Energia dell'oscillatore

Come anticipato in sezione 2 il modo migliore per studiare il problema è mediante un'interpretazione termodinamica. Per quanto riguarda l'energia interna bisogna dunque calcolare:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z, \quad Z \propto \prod_j dy_j e^{-S_D}$$

Utilizzando la relazione $\beta\omega = N\eta$ e indicando con $\hat{U} = \frac{U}{\hbar\omega}$ l'energia scala, si avrà:

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

Il primo termine rappresenta il contributo potenziale, mentre il secondo sembrerebbe essere il contributo cinetico anche se con un segno sbagliato. In realtà la questione del segno si risolve tenendo conto del fattore di normalizzazione $\mathcal{N} \propto \eta^{-N/2}$ che moltiplica Z , dunque l'energia sarà:

$$\hat{U} = \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle + \frac{1}{2\eta} \left(1 - \frac{\langle \Delta y^2 \rangle}{\eta} \right)$$

Per quanto riguarda l'oscillatore armonico, sapendo che $Z = \frac{e^{-\beta\omega/2}}{1-e^{-\beta\omega}}$, l'aspettativa teorica per l'energia interna è: $\hat{U} = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\omega}-1}$

5.1 Energia Potenziale

Per considerare il limite al continuo si prende in analisi il termine $\langle y^2 \rangle$ effettuando un fit delle misure ottenute al variare di η . Le correzioni attese sono di ordine η^2 dunque la funzione di fit scelta è la seguente $y = q + m \cdot \eta^2$, il parametro di best-fit q rappresenta proprio il limite al continuo per la misura di $\langle y^2 \rangle$. Per quanto riguarda le attese teoriche per il teorema del viriale vale $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ e dunque sapendo che $\frac{1}{2} \langle y^2 \rangle$ è il contributo potenziale il valore atteso per $\langle y^2 \rangle$ sarà pari a $\hat{U} = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta\omega}-1}$. Nel caso in analisi si è fissato il prodotto $\beta\omega = 20$, dunque $\hat{U} \approx 0.5000$ in unità di $\hbar\omega$.

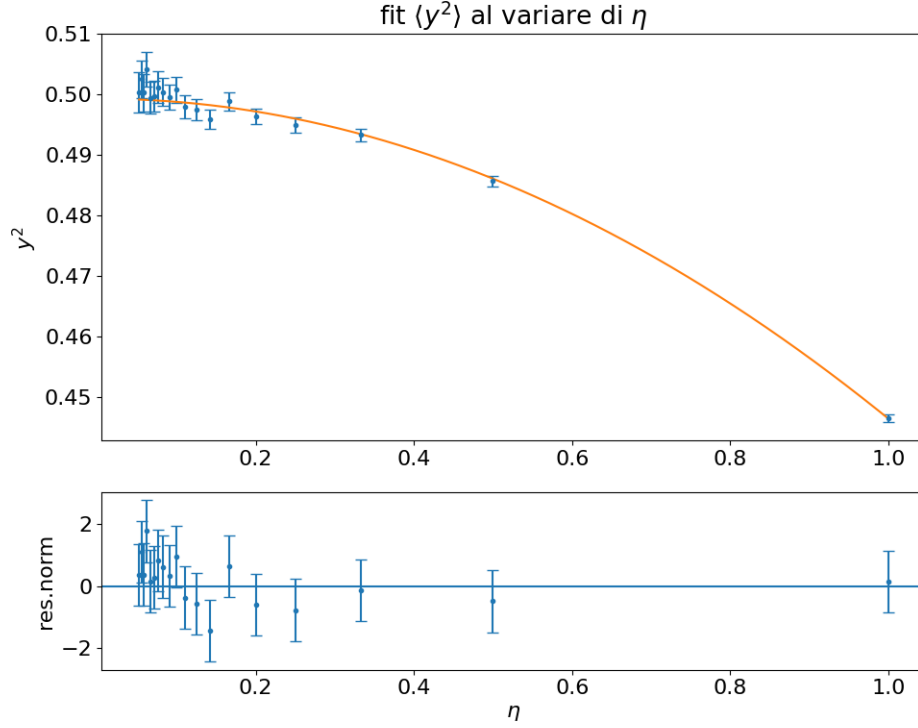


Figura 2: Grafico del valor medio di y^2 ottenuto al variare di η . La linea continua rappresenta la curva di fit ottenuta. In basso i residui normalizzati.

I dati ottenuti dal fit sono i seguenti:

$$\chi^2 = 12 \quad (17 \text{ DOF})$$

$$q = 0.4994 \pm 0.0004$$

$$m = -0.0530 \pm 0.0008$$

Il valore di $q = \langle y^2 \rangle$ è dunque compatibile con quello previsto dalla teoria.

5.2 Energia cinetica e teorema del viriale

Per quanto riguarda la parte dell'energia cinetica, si riporta in figura 3 il plot del termine non rinormalizzato e del termine rinormalizzato. Nel caso del termine non rinormalizzato si nota come appare una divergenza nel limite $\eta = 0$, infatti la distribuzione di probabilità è quasi-gaussiana in Δy_j con varianza η , dunque nel limite di piccole η il termine cinetico diverge come $1/\eta$. Considerando invece la corretta rinormalizzazione viene infine verificata la relazione tra energia cinetica e potenziale. Infatti per il teorema del viriale ci si aspetta che $\langle T \rangle = \langle V \rangle$. Per verificare le attese, si riporta il plot del termine cinetico e del termine potenziale in figura 3. Come si vede dal plot considerando l'errore statistico i punti sono sovrapposti.

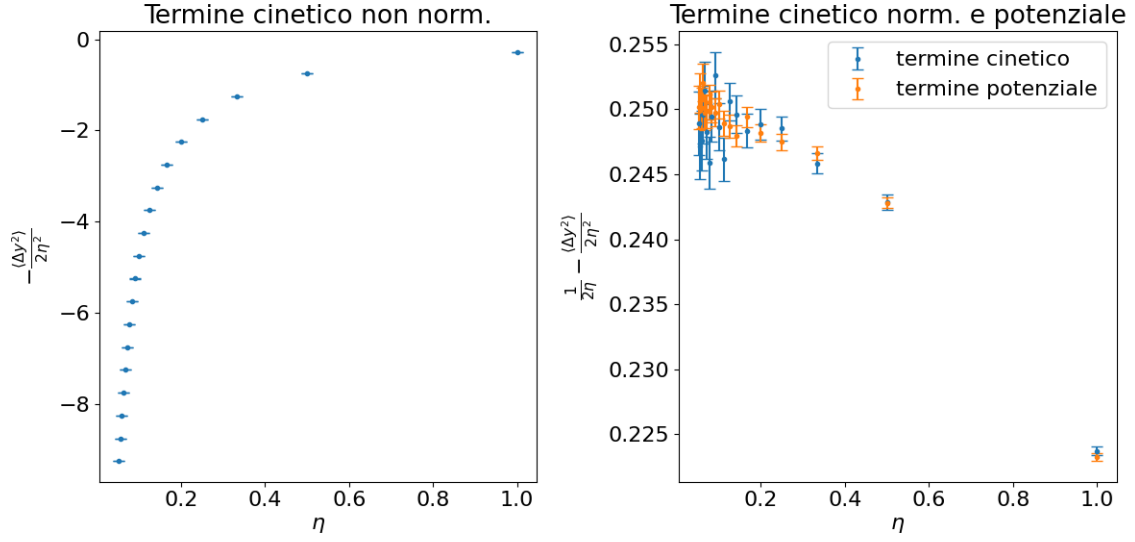


Figura 3: Grafico del termine cinetico senza il termine di normalizzazione (figura a sinistra), grafico del termine cinetico normalizzato e del termine potenziale (figura a destra)

6 Energia al variare della temperatura

Volendo verificare l'andamento dell'energia con la temperatura sono stati applicati 2 differenti metodi. Come prima analisi è stato effettuato un fit dell'energia media rinormalizzata in funzione di $\beta\omega$ usando come funzione di fit: $U = E_0 + \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1}$. Il plot ottenuto è riportato in figura 4.

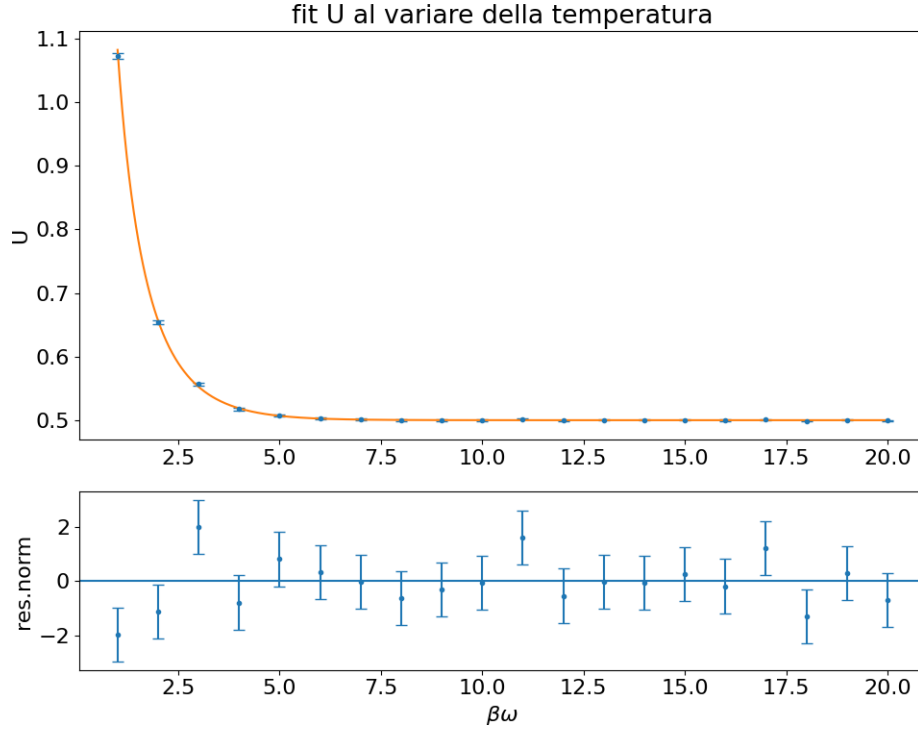


Figura 4: Grafico del valor medio dell'energia fissando $\eta = 0.1$ e variando il prodotto $\beta\omega$. La linea continua rappresenta la curva di fit ottenuta. In basso i residui normalizzati.

I dati ottenuti dal fit sono i seguenti:

$$\chi^2 = 18 \quad (19 \text{ DOF})$$

$$E_0 = 0.5002 \pm 0.0002$$

Il valore di E_0 è dunque compatibile con l'energia di vuoto prevista dalla teoria pari a $E_0 = \frac{1}{2}$. Il secondo approccio è più generale e può essere applicato anche in casi in cui non è possibile rimuovere le divergenze come fatto in sezione 5. Il metodo consiste nel misurare l'energia interna al variare della temperatura mantenendo fissa la spaziatura η considerando tuttavia la differenza delle misure fatte a temperatura finita con le misure fatte a temperatura $T = 0$ ($U[T, \eta] - U[0, \eta]$). In questo modo eventuali divergenze dovute alla spaziatura vengono eliminate. In questo caso viene dunque fatto un plot dell'energia media al variare di $\frac{1}{\beta\omega}$ e nello stesso grafico la previsione teorica $U[T, \eta] - U[0, \eta] = \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1}$. I dati sono in accordo con la previsione.

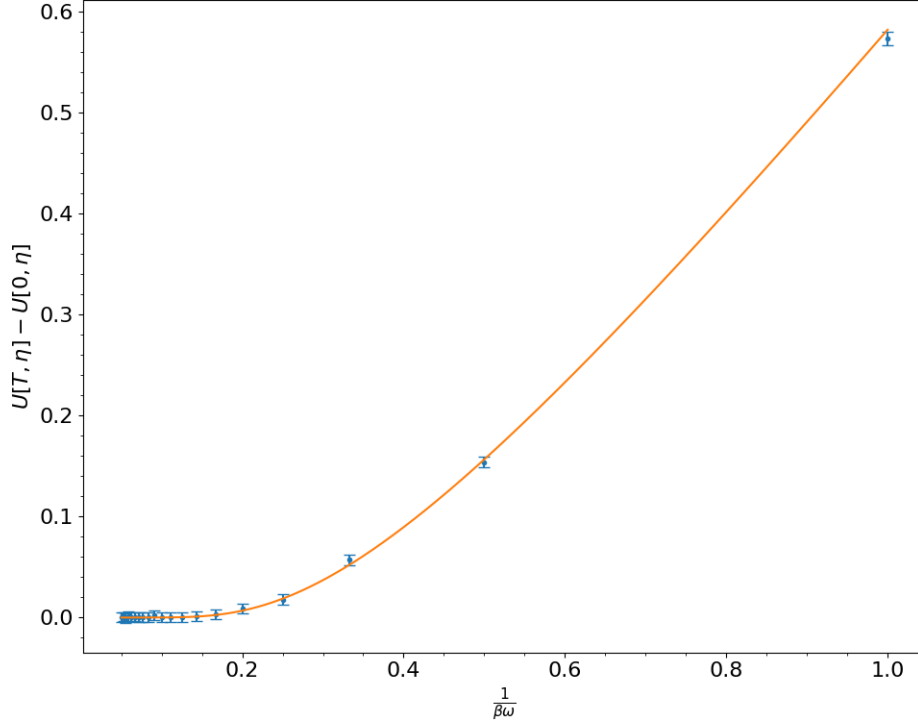


Figura 5: Grafico della differenza dell'energia $U[T, \eta] - U[0, \eta]$ fissando $\eta = 0.1$ in funzione del rapporto $\frac{1}{\beta\omega}$. La linea continua rappresenta la previsione teorica.

7 Correlatori temporali per la stima del gap energetico

Si considera ora il valor medio del prodotto a τ differenti della quantità $O[x(\tau)]$ ($\langle O[x(\tau)]O[x(0)] \rangle$) con $O[q]$ osservabile generica della posizione. Nel limite di temperatura nulla vale:

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

Sottraendo la quantità $\langle O[x] \rangle^2 = \langle 0|O[q]|0 \rangle^2$ a temperatura nulla, si ha

$$\langle O[x(\tau)]O[x(0)] \rangle - \langle O[x] \rangle^2 = \sum_{n \neq 0} e^{-(E_n - E_0)\tau} |\langle n|O[q]|0 \rangle|^2$$

Nel limite $\tau \rightarrow \infty$ vale:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \langle O[x(\tau)]O[x(0)] \rangle - \langle O[x] \rangle^2 \propto e^{-(E_{n_{min}} - E_0)\tau}$$

Considerando osservabili differenti come q o q^2 è dunque possibile mediante un fit esponenziale determinare il gap energetico tra il fondamentale e i primi eccitati. Per fare ciò nelle simulazioni effettuate vengono misurati i correlatori temporali connessi nel caso delle due osservabili considerato come in precedenza la media su tutti i cammini del valor medio sul singolo cammino di $\langle O[x(\tau)]O[x(0)] \rangle$ sottraendo infine il valore medio $\langle O[x] \rangle^2$ mediato su tutti i cammini. Le simulazioni sono state effettuate al variare di τ e al variare della spaziatura η mantenendo costante la temperatura.

7.1 Gap energetico fra il primo eccitato e il fondamentale

Nel caso dell'oscillatore armonico l'osservabile q accoppia un solo stato al fondamentale dunque è possibile eseguire un fit esponenziale per tutti i valori di τ ed ottenere dunque il gap energetico con il primo eccitato. La funzione di fit utilizzata è $C = A \cdot e^{-\Delta E \omega \tau}$, dunque ci si aspetta un valore teorico pari a $\Delta E = 1$. Inoltre dovendo in ogni caso considerare il limite al continuo il fit viene effettuato per varie simulazioni al variare di η , per poi effettuare un fit tenendo conto delle correzioni in η^2 . In questo caso le simulazioni sono state effettuate con $\beta\omega = 20$

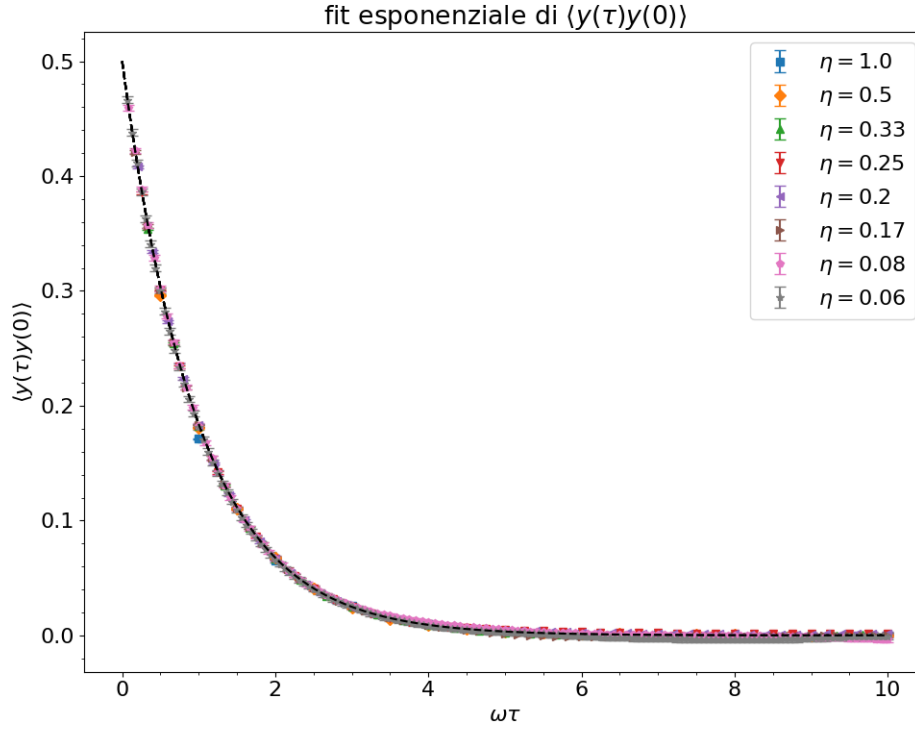


Figura 6: Grafico del correlatore connesso dell'osservabile y in funzione del prodotto $\omega\tau = \frac{\beta\omega j}{N}$ al variare del parametro η . La linea tratteggiata rappresenta la previsione teorica del correlatore.

Per il limite al continuo la funzione di fit utilizzata è una retta: $y = \Delta E + m\eta^2$.

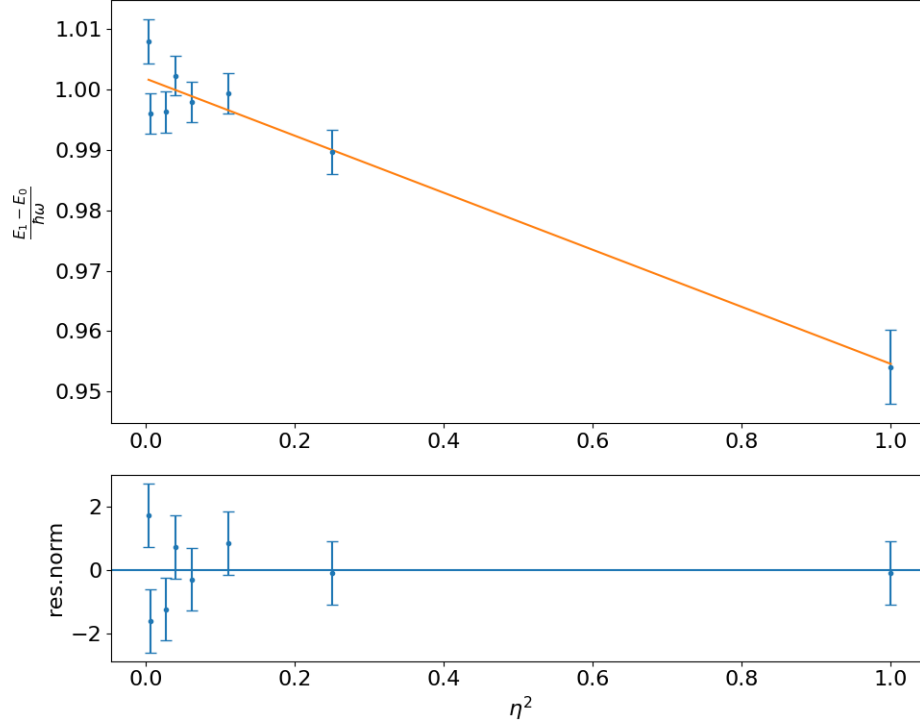


Figura 7: Grafico di Fit effettuato del gap energetico tra primo eccitato e fondamentale al variare del parametro η^2 . In basso i residui normalizzati.

I dati ottenuti dal fit sono i seguenti:

$$\chi^2 = 8 \quad (6 \text{ } DOF)$$

$$\Delta E = 1.002 \pm 0.002$$

$$m = -0.047 \pm 0.006$$

Il gap energetico ottenuto è in accordo con le aspettative teoriche.

7.2 Gap energetico fra il secondo eccitato e il fondamentale

Per quanto riguarda l'osservabile q^2 anche in questo caso si ha un solo stato accoppiato al fondamentale dunque è nuovamente possibile eseguire il fit esponenziale per tutti i valori di τ ed ottenere dunque il gap energetico con il secondo eccitato. La trattazione è dunque identica al caso precedente. In questo caso le simulazioni sono state effettuate con $\beta\omega = 10$

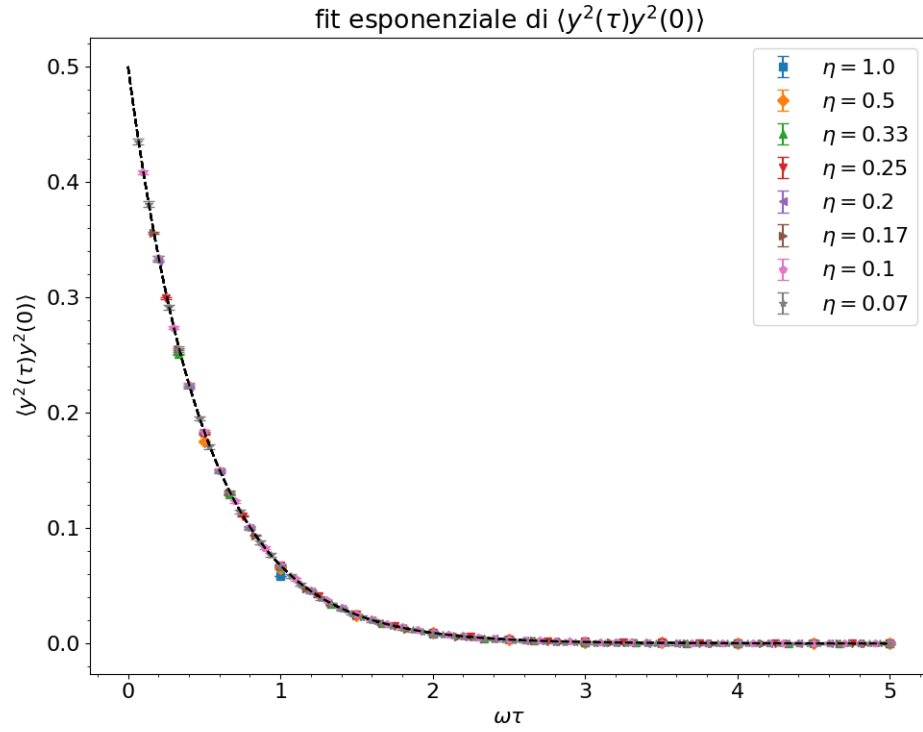


Figura 8: Grafico del correlatore connesso dell'osservabile y in funzione del prodotto $\omega\tau = \frac{\beta\omega j}{N}$ al variare del parametro η . La linea tratteggiata rappresenta la previsione teorica del correlatore.

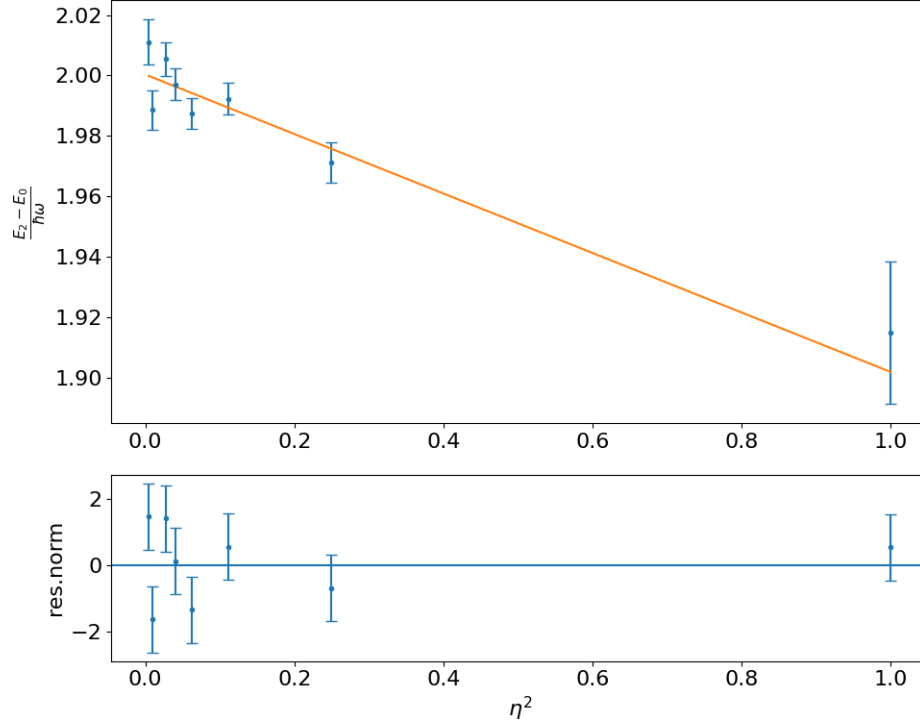


Figura 9: Grafico di Fit effettuato del gap energetico tra secondo eccitato e fondamentale al variare del parametro η^2 . In basso i residui normalizzati.

I dati ottenuti dal fit sono i seguenti:

$$\chi^2 = 9 \quad (6 \text{ DOF})$$

$$\Delta E = 2.000 \pm 0.003$$

$$m = -0.10 \pm 0.02$$

Il gap energetico ottenuto è in accordo con le aspettative teoriche di $\Delta E = 2$ in unità di $\hbar\omega$.

8 Funzione d'onda del fondamentale

La probabilità di ottenere un valore della coordinata y all'interno di un intervallo $[x_a, x_b]$ è dato nel limite di temperatura nulla dal valor medio dell'operatore $F(q, x_a, x_b)$ definito da:

$$F(q, x_a, x_b) |x\rangle = \begin{cases} |x\rangle & \text{se } x_a < x < x_b \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Si ha infatti nel caso limite di temperatura nulla:

$$\langle F \rangle_T = \langle 0 | F | 0 \rangle = \int_{x_a}^{x_b} dx |\psi_0(x)|^2$$

Considerando il caso limite di $x_b, x_a \rightarrow x_0$ ovvero il caso in cui $F(q, x_a, x_b) \rightarrow (\delta(q - x_0))$ allora si ottiene $\langle F \rangle_T = |\psi_0(x)|^2$, pertanto l'istogramma della variabile x (o y nella notazione usata) ottenuta campionando i cammini rappresenta proprio il modulo quadro della funzione d'onda.

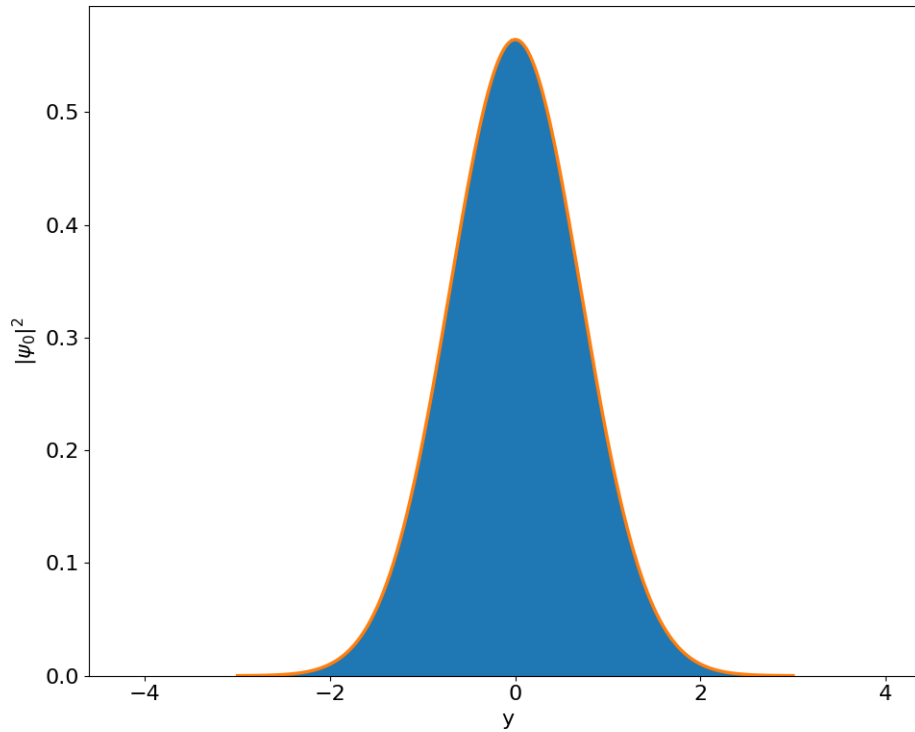


Figura 10: Modulo quadro della funzione d'onda dello stato fondamentale per $\beta\omega = 20$ e $\eta = 0.1$. In blu l'istogramma ottenuto per la variabile y , in arancione la previsione teorica.

Come si vede dal grafico l'istogramma rappresenta fedelmente il modulo quadro della funzione d'onda del fondamentale.

Riferimenti bibliografici

- [1] W. K. Hastings. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications. *Biometrika*, 57(1):97–109, 04 1970.