

Oscillatore armonico

Monica Cesario

29 marzo 2025

1 Introduzione

Viene effettuato uno studio numerico dell'oscillatore armonico quantistico calcolandone l'energia interna e lo *splitting* per primi due livelli energetici.

2 Cenni teorici

2.a Formulazione in termini di integrale sui cammini

Sia H l'Hamiltoniana di sistema quantistico e $|n\rangle$ un insieme completo di suoi autostati; il valor medio termodinamico di una generica osservabile \mathcal{O} può essere scritto come

$$\langle \mathcal{O} \rangle_T = \frac{\text{Tr}(\mathcal{O}e^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} = \sum_n P_n \mathcal{O}_n \quad (1)$$

con

$$P_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{Z} \quad Z = \sum_n e^{-\beta E_n} \quad \mathcal{O}_n \equiv \langle n | \mathcal{O} | n \rangle \quad (2)$$

In generale $|n\rangle$, E_n e \mathcal{O}_n non sono noti; occorre quindi passare alla degli autostati della posizione $|x\rangle$ essendo la traccia indipendente dalla base scelta, in questo modo è possibile vedere l'analogia tra la funzione di partizione con l'elemento di matrice del propagatore

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \int dx \langle x | e^{-\beta H} | x \rangle \quad K(x_a, x_b, t_a, t_b) = \langle x_a | e^{-iH(t_b - t_a)/\hbar} | x_b \rangle \quad (3)$$

è quindi possibile riscrivere la teoria in termini di integrale sui cammini nel tempo euclideo $\tau = \beta\hbar$

$$Z = \mathcal{N} \int_{x(0)=x(\beta\hbar)} \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(\frac{-S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) \quad (4)$$

con \mathcal{N} costante di normalizzazione divergente. Il valor medio di \mathcal{O} si scrive come

$$\langle \mathcal{O} \rangle_T = \frac{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(-\frac{S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right) \mathcal{O}[x(\tau)]}{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(-\frac{S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)} \quad (5)$$

che si interpreta come il valor medio di una certa funzione del cammino $x(\tau)$ valutata su una distribuzione di probabilità per i cammini

$$P[x(\tau)] = \frac{\exp\left(-\frac{S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)}{\int \mathcal{D}x(\tau) \exp\left(-\frac{S_E[x(\tau)]}{\hbar}\right)} \quad (6)$$

Quello che si farà nelle simulazioni numeriche sarà estrarre in modo stocastico dei cammini $x(\tau)$ distribuiti secondo la (6) e di valutare su questi il valor medio di $\langle \mathcal{O} \rangle_T$; è però prima necessario discretizzare il sistema e passare a variabili adimensionali.

2.b Discretizzazione

L'azione Euclidea per una particella di massa m in un potenziale armonico di costante elastica k è

$$-\frac{1}{\hbar}\mathcal{S}_E[x(\tau)] = -\frac{1}{\hbar}\int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx}{d\tau} \right)^2 + \frac{m\omega^2 x(\tau)^2}{2} \right] \quad (7)$$

con $\omega = \sqrt{k/m}$. Per discretizzare tale azione si divide l'intervallo temporale $[0, \beta\hbar]$ in N punti spazati di $a = \Delta\tau = \beta\hbar/N$, con condizioni al bordo periodiche. Si introduce una variabile adimensionale

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

Inoltre

$$\int_0^{\beta\hbar} d\tau \rightarrow \sum_{n=0}^{N-1} a \quad \frac{dx}{d\tau} \rightarrow \left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right)^{-1} \frac{y(n+1) - y(n)}{a}$$

Con queste sostituzioni Eq. (7) diventa

$$-\frac{1}{\hbar}\mathcal{S}_E[x(\tau)] \rightarrow -\sum_{n=0}^{N-1} \left[y(n)^2 \left(\frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta} \right) - \frac{1}{\eta} y(n)y(n+1) \right] \equiv -\mathcal{S}_D \quad (8)$$

dove $\eta \equiv na$ e con \mathcal{S}_D si indica l'azione discretizzata e adimensionale. Quindi i cammini sono rappresentati da N -uple $y(0) - y(N)$ "pesate" con probabilità proporzionale a $\exp(-\mathcal{S}_D[y])$. La temperatura del sistema in unità della scala tipica $\hbar\omega$ è data da $\hat{T} = k_B T / (\hbar\omega) = (N\eta)^{-1}$. Variando le variabili N ed η si può quindi agire allo stesso tempo sulla spaziatura temporale a e la temperatura T . In particolare il limite al continuo si ottiene per $\eta \rightarrow 0$ con $N\eta = \text{costante}$, mentre l'andamento con la temperatura a spaziatura reticolare costante si ottiene fissando η e facendo variare N in modo inversamente proporzionale alla temperatura.

3 Algoritmo Metropolis

L'azione in (8) è un funzionale locale del cammino, quindi se si modifica il cammino nel punto n , per valutare la differenza di azione per effettuare il test di accettazione si devono considerare solo termini del tipo $y(n)^2$, $y(n)y(n+1)$ e $y(n)y(n-1)$, per questo motivo si può utilizzare un algoritmo locale. Si inizializzano i cammini scegliendo $y(n)$ random tra -1 e 1

- si prova a modificare il punto n -esimo del cammino $y(n) \rightarrow y^p(n)$, scegliendo a caso $y^p(n)$ nell'intervallo simmetrico $[y(n) - \delta, y(n) + \delta]$ ¹
- si calcola il rapporto di probabilità tra in cammino di prova e quello di partenza

$$\frac{e^{-\mathcal{S}_D^p}}{e^{-\mathcal{S}_D}} = e^{-(y^p(n)^2 - y(n)^2)(\frac{\eta}{2} + \frac{1}{\eta}) + \frac{1}{\eta}(y^p(n) - y(n))(y(n+1) + y(n-1)))}$$

si effettua dunque il test di accettazione

- il procedimento viene iterato in ordine per tutti i punti del cammino ripetendo per 5 volte l'aggiornamento sullo stesso sito n prima di passare al successivo

¹ $\delta = 2\sqrt{\eta}$

4 Applicazioni

4.a Energia interna dell'oscillatore armonico

Conoscendo la funzione di partizione è possibile calcolare l'energia interna

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z) \quad \text{con} \quad Z \propto \eta^{-N/2} \prod_{n=0}^{N-1} dy(n) e^{-S_E} \quad (9)$$

notando che $\beta \hbar \omega = N\eta$, si può riscrivere la derivata rispetto a β , ad N fissato, come una derivata rispetto a η . Si ottiene

$$\frac{U}{\hbar \omega} = \frac{1}{2} \langle y^2 \rangle + \frac{1}{2\eta} - \frac{1}{2\eta^2} \langle \Delta y^2 \rangle \quad (10)$$

con $\Delta y^2 = (y(n+1) - y(n))^2$; il primo termine in (10) rappresenta il contributo all'energia interna del termine potenziale, mentre il secondo e il terzo termine quello dell'energia cinetica.

Nel caso dell'oscillatore armonico questo risultato va confrontato con:

$$\frac{U}{\hbar \omega} = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{N\eta} - 1} \quad (11)$$

4.b Termine potenziale

Dal teorema del viriale ci aspettiamo

$$\langle y^2 \rangle = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{N\eta} - 1} \right) \quad (12)$$

Si è fissata l'estensione temporale $N\eta = 20$, quindi a temperatura fissata si è eseguito il limite al continuo $\eta \rightarrow 0$. Il valore atteso è $\langle y^2 \rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{20}-1} \simeq 0.5000$

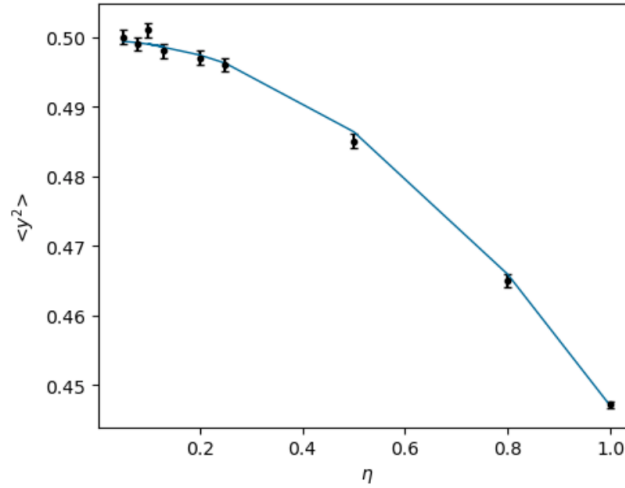


Figura 1: Funzione di fit: $\langle y^2 \rangle_\eta = c + a\eta^2$

$c = 0.4996 \pm 0.0004$
$a = -0.0525 \pm 0.0006$
$\chi^2/\text{dof} = 1.14$

4.c Termine cinetico

Il contributo cinetico all'energia interna proporzionale a Δy^2 , quello che si avrebbe trascurando la costante di normalizzazione \mathcal{N} davanti alla funzione di partizione, è divergente come $1/\eta$ (e negativo), la divergenza è dovuta alla riscrittura della teoria in termini di integrale sui cammini.²

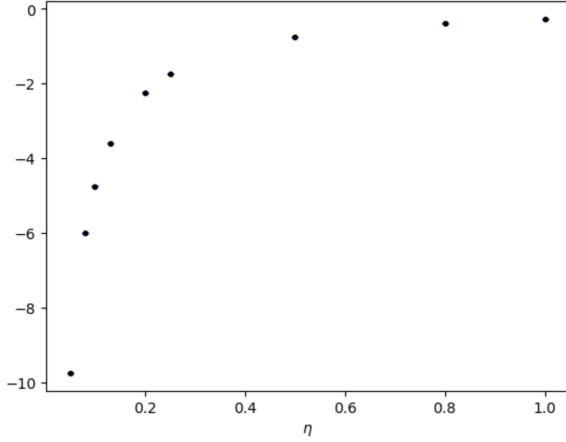


Figura 2: Termine cinetico non rinormalizzato

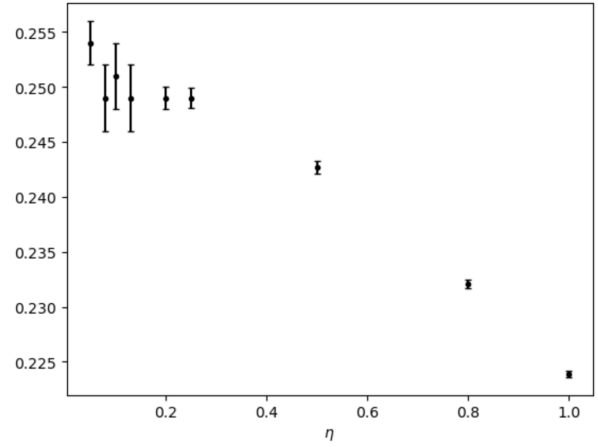


Figura 3: Termine cinetico rinormalizzato

4.d Andamento in funzione della temperatura

L'andamento dell'energia interna in funzione della temperatura è stato ricavato fissando $\eta = 0.1$ per poi eseguire un fit e ricavare il valore dell'energia a $T = 0$.

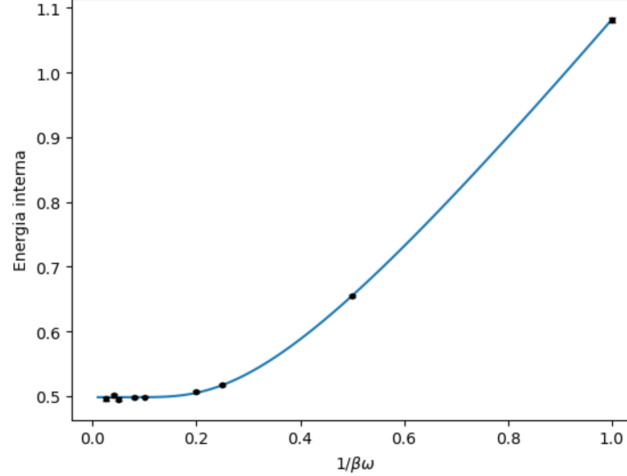


Figura 4: Funzione di fit: $a + \frac{b}{e^{1/(N\eta)} - 1}$

$a = 0.498 \pm 0.001$

$b = 1.002 \pm 0.003$

$\chi^2/\text{dof} = 1.4$

²Per piccoli η l'azione è dominata dal termine cinetico e Δy è distribuito "quasi" come una gaussiana con $\Delta y^2 \propto \sigma^2 \propto \eta$, questo porta ad una divergenza $1/\eta$ "curata" dalla costante \mathcal{N} che da un contributo $1/2\eta$. Il vincolo $\sum_0^{N-1} \Delta y(n) = 0$ fa sì che $\langle \Delta y^2 \rangle \propto \eta - O(1/N)$, questo garantisce $\frac{1}{2\eta} - \frac{\langle \Delta y^2 \rangle}{2\eta^2} \geq 0$

4.e Funzione d'onda dello stato fondamentale

La probabilità P che la variabile x si trovi in $[x_a, x_b]$ si può ottenere considerando

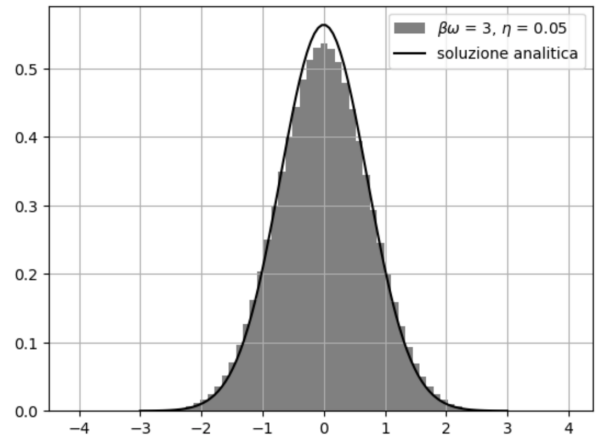
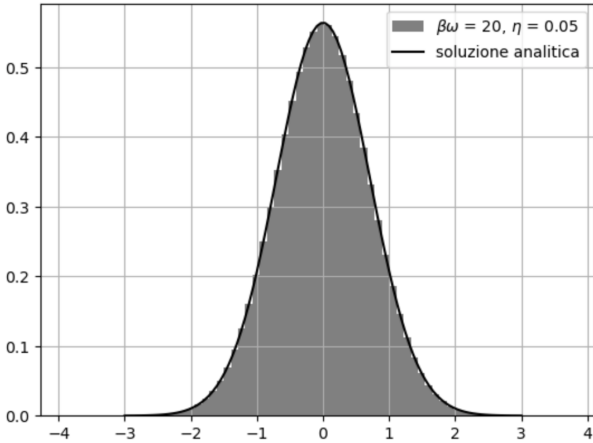
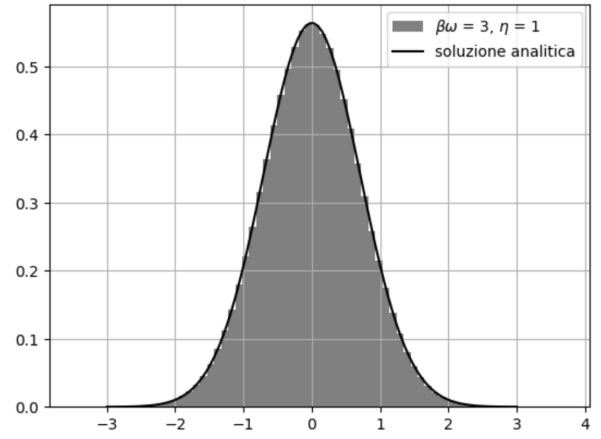
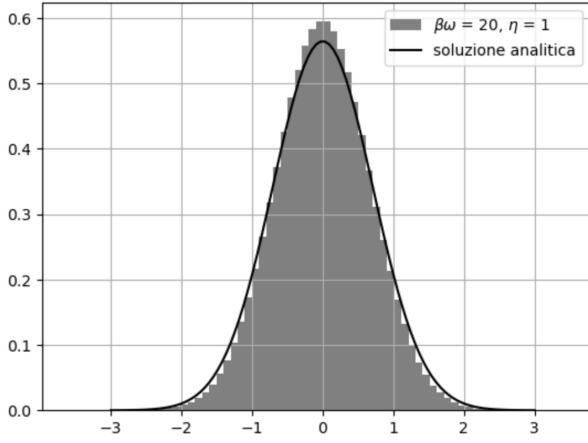
$$P = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} f(x, x_a, x_b))}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \quad \text{con} \quad f(x, x_a, x_b) = \begin{cases} 1 & \text{se } x_a < x < x_b \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (13)$$

$$P = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | f(x, x_a, x_b) | n \rangle \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, x_a, x_b) \langle n | x \rangle \langle x | n \rangle dx = \int_{x_a}^{x_b} |\psi_n(x)|^2 dx \quad (14)$$

che nel limite di temperatura nulla si riduce alla funzione d'onda del fondamentale che per l'oscillatore armonico vale

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp^{-x^2/2}$$

Per trovarla quindi si può fare un istogramma dei cammini. I grafici corrispondono a due estensioni temporali diverse $N\eta = 3, 20$ e due valori diversi di $\eta = 1, 0.05$. Negli istogrammi sono presenti più cammini a tempi di simulazione diversi.



4.f Livelli energetici

Per ottenere lo *splitting* tra i livelli energetici $E_1 - E_0$ ed $E_2 - E_0$ si considera la funzione a due punti connessa nel tempo euclideo, che per un operatore generico \mathcal{O} si scrive come

$$\langle \mathcal{O}(\tau) \mathcal{O}(0) \rangle_c = \langle \mathcal{O}(\tau) \mathcal{O}(0) \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2 \quad (15)$$

riscrivendo in termini di integrale sui cammini

$$\frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-(\beta - \frac{\tau}{\hbar})H} \mathcal{O}(q) e^{-\frac{\tau}{\hbar}H} \mathcal{O}(q)) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \langle 0 | e^{\frac{\tau}{\hbar}H} \mathcal{O}(q) e^{-\frac{\tau}{\hbar}H} \mathcal{O}(q) | 0 \rangle \quad (16)$$

inserendo $\mathbb{1} = \sum_n |n\rangle \langle n|$ si può scrivere

$$\langle 0 | e^{\frac{\tau}{\hbar}H} \mathcal{O}(q) e^{-\frac{\tau}{\hbar}H} \mathcal{O}(q) | 0 \rangle = \sum_n \langle 0 | e^{\frac{\tau}{\hbar}H} \mathcal{O}(q) e^{-\frac{\tau}{\hbar}H} | n \rangle \langle n | \mathcal{O}(q) | 0 \rangle = \sum_n e^{-\frac{(E_n - E_0)}{\hbar} \tau} |\langle n | \mathcal{O}(q) | 0 \rangle|^2 \quad (17)$$

quindi per il correlatore connesso

$$\langle \mathcal{O}(\tau) \mathcal{O}(0) \rangle_c = \sum_{n \neq 0} e^{-\frac{(E_n - E_0)}{\hbar} \tau} |\langle n | \mathcal{O}(q) | 0 \rangle|^2 \xrightarrow{\tau \rightarrow \infty} e^{-\frac{(E_{\bar{n}} - E_0)}{\hbar} \tau} |\langle \bar{n} | \mathcal{O}(q) | 0 \rangle|^2 \quad (18)$$

con \bar{n} lo stato di energia più bassa connesso al vuoto. Nel caso dell'oscillatore armonico il potenziale è pari ed inoltre $\hat{q} \propto \hat{a} + \hat{a}^+$, quindi per $\mathcal{O} = x, x^2$ gli unici stati connessi al vuoto, a tutti i tempi, sono rispettivamente il primo e il secondo eccitato.

Si è fissata un'estensione temporale $N\eta = 20$ ed eseguito un fit per i correlatori di x e x^2 per diversi valori di η con una funzione esponenziale per ottenere i valori dell'energia³, si è poi eseguito un fit lineare in funzione di η^2 per ottenere il valori di $E_1 - E_0$ e $E_2 - E_0$ nel limite al continuo che ci aspettiamo essere rispettivamente 1 e 2 in unità di $\hbar\omega$.

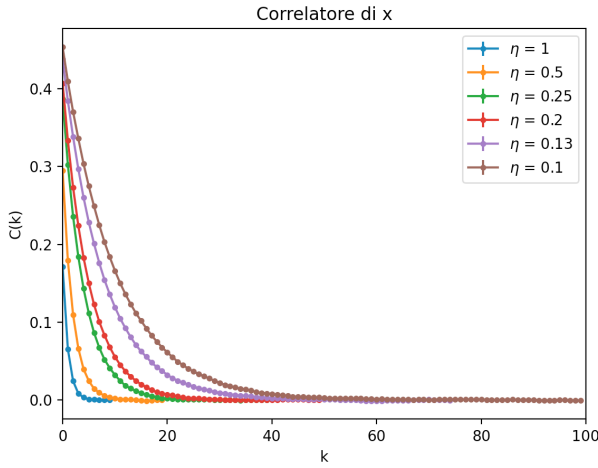


Figura 5: Funzione di fit: Ae^{-bk}

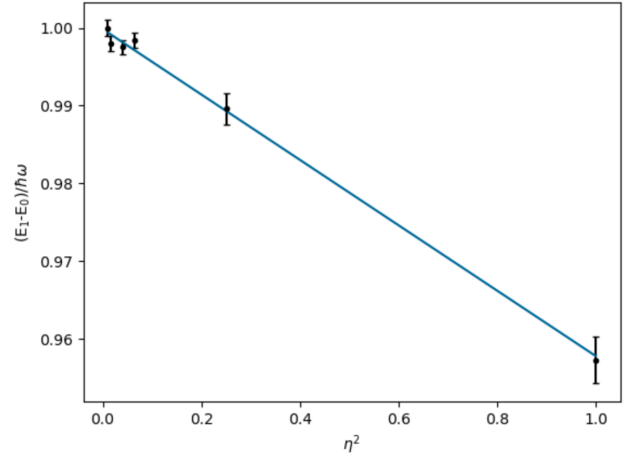


Figura 6: Funzione di fit: $mx + q$

$E_1 - E_0$
$m = -0.042 \pm 0.003$
$q = 0.9998 \pm 0.0005$
$\chi^2/\text{dof} = 1$

³Avendo eseguito i fit in funzione di k e non di τ è necessario dividere il coefficiente dell'esponenziale per il rispettivo valore di η

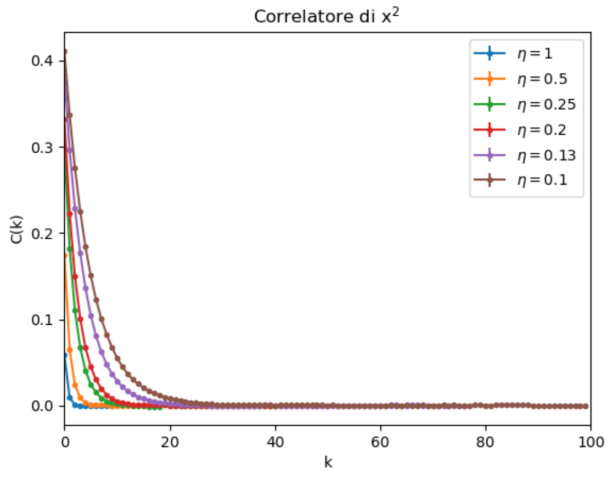


Figura 7: Funzione di fit: Ae^{-bk}

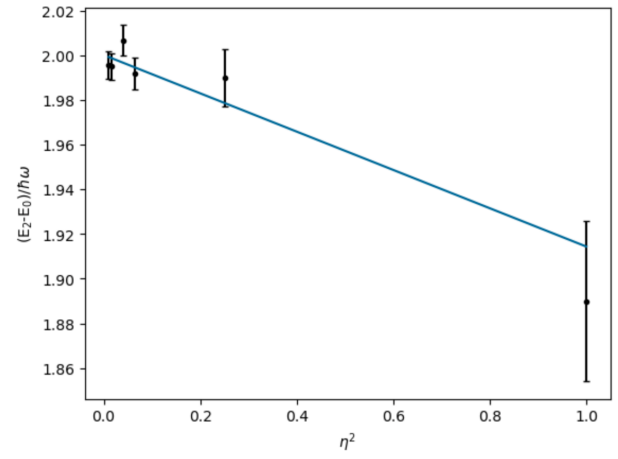


Figura 8: Funzione di fit: $mx + q$

$E_2 - E_0$
$m = -0.085 \pm 0.032$
$q = 2.0002 \pm 0.0035$
$\chi^2/\text{dof} = 1$