# 1 Valutare la probabilità di tunneling

L'Hamiltoniana sarà:

$$H(\hat{p},\hat{x}) = K(\hat{p}) + V(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V_0\left(\left(\frac{\hat{x}}{d}\right)^2 - 1\right)^2 \tag{1}$$

Paramentri importanti della simulazione sono:

$$\omega_0 = \frac{V_0}{\hbar} \qquad \omega_d = \sqrt{\frac{8V_0}{md^2}} \tag{2}$$

$$\lambda = \frac{\omega_0}{\omega_d} \qquad \bar{\beta} = \frac{V_0}{k_B T} = \beta\hbar\omega_0 \qquad \bar{t} = \omega_0 t \tag{3}$$

Si è usato $\omega_0$ come unità di misura temporale perchè siamo interessati a studiare i fenomeni di tunnelling, che interessano il livello energetico della barriera $V_0$. Si può notare che $\lambda$ è una misura di quanto sono "separate" le buche: esso può essere riscritto come $\frac{V_0}{\hbar\omega_d}$, ovvero approssimativamente quanti livelli di buca singola vi sono. I fenomeni a cui siamo interessati saranno dunque nella zona $\bar{\beta} > 1$ (affinchè le particelle siano intrappolate nelle buche), $\lambda > 1$ (perchè le buche abbiano stati approssimati di buca singola).

## 1.1 Half thermodinamics

Definendo il proiettore rigth:

$$\Theta(\hat{x}) \quad \text{t.c.} \quad \Theta(\hat{x})\left|x\right\rangle = \left|x\right\rangle \qquad x \geq 0 \tag{4}$$

$$\Theta(\hat{x})\left|x\right\rangle = 0 \qquad x < 0 \tag{5}$$

E l'Hamiltoniana di buca singola:

$$\tilde{H}(\hat{p},\hat{x}) = \Theta(\hat{x})H(\hat{p},\hat{x})\Theta(\hat{x}) \tag{6}$$

La matrice densità di un sistema termalizzato ma isolato in una buca sarà $\frac{1}{\tilde{Z}}e^{-\beta\tilde{H}}$. La probabilità di trovare il sistema nella buca left è $\mathrm{Tr}\left[\Theta(-\hat{x})\hat{\rho}\right]$. Possiamo quindi scrivere la probabilità di trovare la particella nella buca sinistra dopo un tempo $t$:

$$P(t,\beta,\lambda) = \frac{1}{\tilde{Z}}\,\mathrm{Tr}\left[\Theta(-\hat{x})e^{-i\frac{H}{\hbar}t}e^{-\beta\tilde{H}}e^{i\frac{H}{\hbar}t}\right] \tag{7}$$

Espandendo anche $\tilde{Z} = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\tilde{H}}\right]$:

$$P(t,\beta,\lambda) = \frac{\mathrm{Tr}\left[\Theta(-\hat{x})e^{-i\frac{H}{\hbar}t}e^{-\beta\tilde{H}}e^{i\frac{H}{\hbar}t}\right]}{\mathrm{Tr}\left[e^{-i\frac{H}{\hbar}t}e^{-\beta\tilde{H}}e^{i\frac{H}{\hbar}t}\right]} = \frac{\int_{x=0}^{+\infty}\mathrm{d}x f(x)}{\int_{x=-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x f(x)} \tag{8}$$

## 1.2 Path integrals

Possiamo riscrivere la $f$ in termini di integrali su cammini chiusi:

$$f(x) = \left\langle x\right| e^{-i\frac{H}{\hbar}t}e^{-\beta\tilde{H}}e^{i\frac{H}{\hbar}t}\left|x\right\rangle = \left\|N_t\right\|^2 N_E \oint \mathrm{d}x_i\mathrm{d}x'_i\mathrm{d}y_i e^{i\frac{S[x_i]-S[x'_i]}{\hbar} - \frac{1}{\hbar}S_E[y_i]} \tag{9}$$

Dove le condizioni sui cammini sono:

$$x_{N_t} = x'_{N_t} = x \tag{10}$$
$$x_0 = y_0 \quad x'_0 = y_{N_E} \tag{11}$$
$$y_i \geq 0 \tag{12}$$

e le lunghezze di $x, x', y$ sono rispettivamente $t, t, \beta\hbar$. Per ottenere una misura reale notiamo che per ogni cammino vi è quello percorso in senso opposto, il cui peso è il complesso coniugato. Quindi:

$$f(x) = \|N_t\|^2 N_E \oint \mathrm{d}x_i \mathrm{d}x'_i \mathrm{d}y_i \cos\left(\frac{S[x_i] - S[x'_i]}{\hbar}\right) e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[y_i]} \tag{13}$$
$$\equiv \|N_t\|^2 N_E \oint \mathrm{d}x_i \mathrm{d}x'_i \mathrm{d}y_i \,\mathrm{sign}\cos\left(\frac{S[x_i] - S[x'_i]}{\hbar}\right) D(x_i, x'_i, y_i) \tag{14}$$

Dove $D$ è definito positivo, può quindi essere usata come peso per estrarre i cammini.

## 1.3 Regolarizzare la misura

Tuttavia è ancora oscillante, ciò rende la convergenza di metropolis problematica. Possiamo trovare una misura approssimata:

$$\int \mathrm{d}x \cos(f(x))g(x) \approx \iint \mathrm{d}x\mathrm{d}y cos(f(x))e^{-\frac{1}{2}\alpha(x-y)^2}g(y)$$

dove l'approssimazione è valida se $\alpha \gg \omega_M^2$, essendo $\omega_M$ la massima frequenza ad apparire nella sequenza di fourier di $g$.

$$\int \mathrm{d}x cos(f(x))e^{-\frac{1}{2}\alpha(x-y)^2} \approx \int \mathrm{d}x cos\left(f(y) + \frac{\partial f}{\partial x}x\right) e^{-\frac{1}{2}\alpha(x-y)^2} = cos(f(y))e^{-\frac{1}{2\alpha}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2}$$

la condizione per l'applicabilità è ora che la serie di fourier si possa tagliare al primo termine, ovvero $\alpha \gg \left(\frac{\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}}{2\frac{\partial f}{\partial x}}\right)^2$. Il calcolo si può estendere a $N$ dimensioni sostituendo $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \to \sum_i \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}$ e $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^2 \to \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)^2$. La seconda condizione, sostituendo le espressioni per $S$ e approssimando $x_i \approx d$ e $N \gg 1$, si mostra essere equivalente a $\alpha \gg \frac{1}{4d^2}$, come ci si poteva aspettare da considerazioni dimensionali. Per la prima invece si può procedere così: $g = e^{-S_E}$, $S_E$ è sostanzialmente maggiore di 1 se $x$ è maggiore di $d$, quindi la distribuzione $g$ è limitata in uno spazio $2d$. La sua trasformata avrà quindi dimensioni caratteristiche $\frac{1}{2d}$, ridandoci lo stesso limite precedente, ovvero che i cammini siano limitati alla zona quanto-meccanica.
Definiamo quindi $\tilde{\alpha} \equiv 4\alpha d^2$, e riprendendo $f$:

$$f(x) = \|N_t\|^2 N_E \oint \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\mathrm{d}y \left(\cos\left(\frac{S[x] - S[x']}{\hbar}\right) e^{\frac{2d^2}{\hbar^2\tilde{\alpha}}\left[\left(\frac{\partial S[x]}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S[x']}{\partial x'}\right)^2\right]}\right) e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[y] - \frac{2d^2}{\hbar^2\tilde{\alpha}}\left[\left(\frac{\partial S[x]}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S[x']}{\partial x'}\right)^2\right]} \tag{15}$$

Abbiamo quindi una misura sui cammini positiva e non oscillante, che dovrebbe limitare il metropolis ai cammini importanti. Inoltre essa è esponenziale, permettendo di valutare i rapporti tra probabilità tramite semplici differenze, ed esse grazie alla differenziazione sono locali (appare solo il termine $x_{i-1}x_{i+1}$, che connette i secondi vicini).Ritornando al rapporto precedente:

$$P(t,\beta,\lambda) = \frac{\oint \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\mathrm{d}y \left( \Theta(-x_{N_T}) \cos\left(\frac{S[x]-S[x']}{\hbar}\right) e^{\frac{2d^2}{\hbar^2\tilde{\alpha}}\left[\left(\frac{\partial S[x]}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S[x']}{\partial x'}\right)^2\right]} \right) e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[y]-\frac{2d^2}{\hbar^2\tilde{\alpha}}\left[\left(\frac{\partial S[x]}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S[x']}{\partial x'}\right)^2\right]}}{\oint \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\mathrm{d}y \left( \cos\left(\frac{S[x]-S[x']}{\hbar}\right) e^{\frac{2d^2}{\hbar^2\tilde{\alpha}}\left[\left(\frac{\partial S[x]}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S[x']}{\partial x'}\right)^2\right]} \right) e^{-\frac{1}{\hbar}S_E[y]-\frac{2d^2}{\hbar^2\tilde{\alpha}}\left[\left(\frac{\partial S[x]}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial S[x']}{\partial x'}\right)^2\right]}} \tag{16}$$

Dove le uniche restrizioni sul cammino sono le lunghezze delle tre parti($t$, $t$ e $\beta\hbar$) e la positività degli $y_i$. Il parametro $\tilde{\alpha}$ è variabile: esso non influisce sul lungo termine il risultato, ma varia l'affidabilità della simulazione. $\tilde{\alpha}$ molto alto porta il metropolis ad esaminare percorsi $x_i$ molto improbabili, mentre un valore troppo basso gli impedirà di esaminare percorsi di gran importanza in un cammino finito.

# 2 WKB estimate

Si può usare una stima della probabilità di tunnelling WKB per capire per quali valori di $\bar{\beta}, \lambda$ e $\bar{t}$ la simulazione finirà in tempi ragionevoli. Dato che siamo interessati a tempi alti, limitiamo lo studio a livelli della buca singola, dai tempi caratteristici molto più lunghi. La probabilità di attraversare la barriera in WKB è:

$$p_{WKB}(\bar{E},\lambda) = e^{-2\int_{-ad}^{ad}\mathrm{d}x\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)}} = e^{-8\lambda\int_{-a}^{a}\mathrm{d}y\sqrt{(y^2-1)^2-\bar{E}}} \tag{17}$$

con $a = \sqrt{1-\sqrt{\bar{E}}}, E = \bar{E}V_0$, $E$ è l'energia della particella. Per stimare $P(\bar{t}, \bar{E}, \lambda)$ modellizziamo la particella come un sistema stocastico a due stati con una probabilità su unità di tempo $2\pi\omega_d p$ di cambiare stato:

$$P_{WKB}(t,\bar{E},\lambda) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}e^{-4\pi\omega_d p_{WKB} t} \tag{18}$$

Mediando infine sui livelli energetici:

$$P_{WKB}(t,\bar{\beta},\lambda) = \frac{1}{Z}\sum_{n=0}^{\infty} P_{WKB} e^{-\bar{\beta}\bar{E}} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2Z}\sum_{n=\frac{1}{2}}^{\infty} e^{-4\pi\omega_d p_{WKB} t - \bar{\beta}\frac{n}{\lambda}} \tag{19}$$

Dove abbiamo posto $p_{WKB} = 1$ per $\bar{E} > 1$. Qualche esempio di tunnelling si può vedere in figura 2.

## 2.1 Stima di P

Se eseguendo la simulazione otteniamo $D$ campioni, di cui $d$ hanno effettuato il tunnelling, la distribuzione di probabilità per $P$ è:

$$\frac{(D+1)!}{(D-d)!d!}(1-P)^{D-d}P^d \tag{20}$$

Con media $\langle P \rangle = \frac{d+1}{D+2} \approx \frac{d+1}{D}$ e deviazione quadratica $\sigma^2 = \frac{(D-(d-1))(d+1)}{(D+2)^2(D+3)} \approx \frac{d+1}{D^2}$. Se vogliamo osservare l'effetto con precisione $k$ la condizione da imporre è $\sigma^2 \leq k^2\langle P \rangle^2$, che espressa in termini di $d$ è:

$$d \geq \frac{D+1-k^2(D+3)}{1+k^2(D+3)} \approx \frac{1-k^2}{k^2}$$

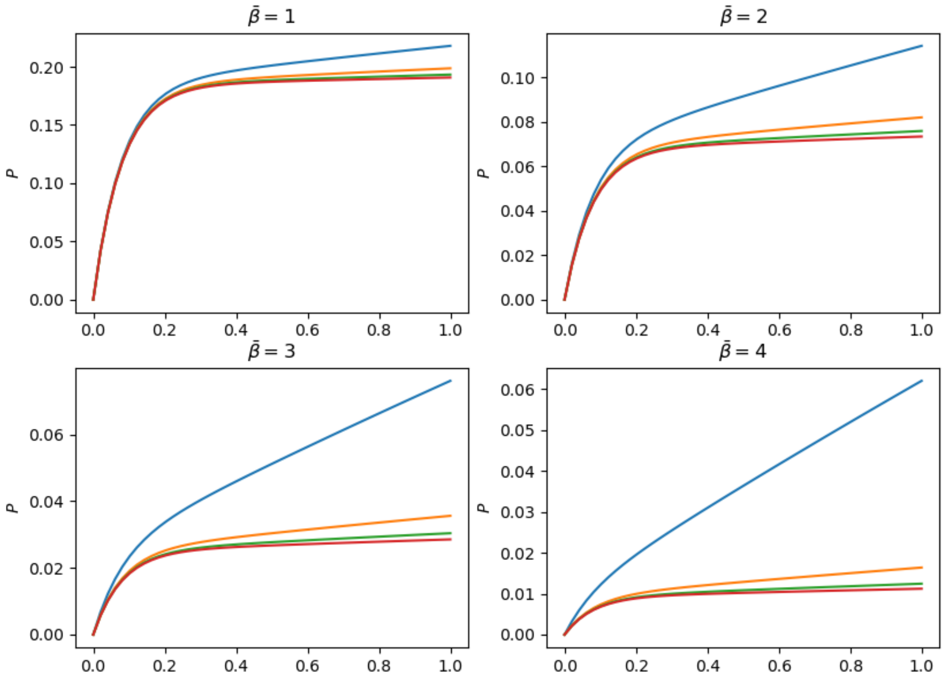


Figura 1: Esempi di tunnelling nell'approssimazione WKB, per $\lambda \in [1, 2, 3, 4]$

Possiamo esprimere la probabilità di fallimento come una somma cumulativa su tutti gli $d$ minori del limite:

$$P_f = \sum_{d=0}^{d_{max}} P(d) = \sum_{d=0}^{d_{max}} \binom{D}{d} (1-P)^{D-d} P^d \tag{21}$$

Per stimarlo passiamo nel limite di $P$ molto piccolo: $D \gg d$. Sostituiamo $\binom{D}{d} \approx \frac{\left(eP\left(\frac{D}{d}+\frac{1}{2}\right)\right)^d}{\sqrt{2\pi d}}$ e arriviamo a:

$$P_f = (1-P)^D \sum_{d=0}^{d_{max}} \frac{\left(eP\left(\frac{D}{d}+\frac{1}{2}\right)\right)^d}{\sqrt{2\pi d}} \tag{22}$$

Si può osservare il risultato in figura 2.1. Vi è un evidente effetto periodico in $\lambda$ causato dal passaggio di livelli energetici della doppia buca alla parte quartica del sistema. Ciò potrebbe essere molto accentuato dalle approssimazioni fatte in WKB, sarebbe interessante riosservarlo nelle simulazioni.

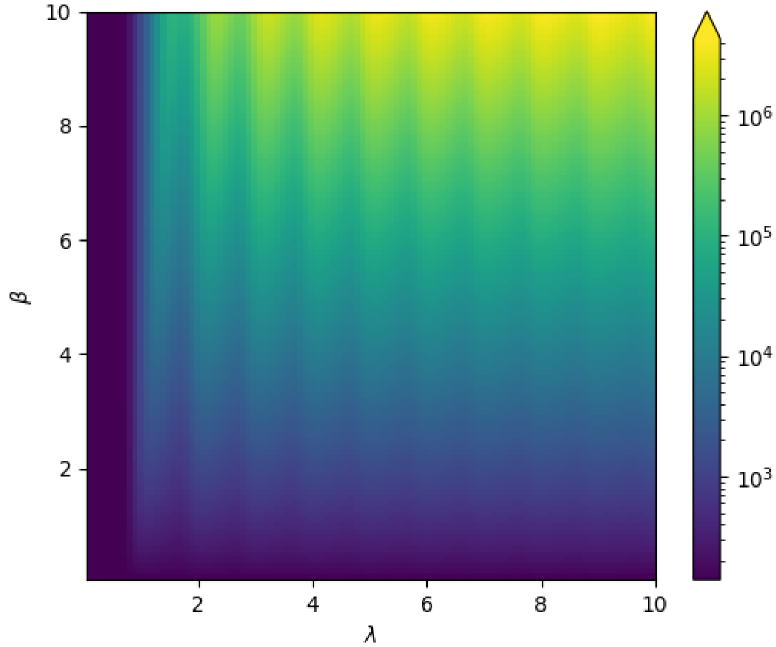


Figura 2: Numero di campioni necessari per avere $P_f < 0.02$ con $k = 0.1$, $\bar{t} = 1$ nell'approssimazione WKB

# 3 Discretizzazione

Avendo due tempi ($t$ e $\beta\hbar$) dobbiamo scegliere due passi temporali, rispettivamente $a$ e $b$. Definiamo quindi il numero di punti del sistema:

$$N = \frac{\beta\hbar}{a} \equiv \frac{\bar{\beta}}{\eta_a} \qquad\qquad M = \frac{t}{\beta} \equiv \frac{\bar{t}}{\eta_b}$$

Dato che siamo in $\lambda > 1$, $\omega_0$ è la scala temporale più stringente, quindi la simulazione è affidabile per $\eta_a, \eta_b \ll 1$. L'azione euclidea adimensionale discretizzata risulta essere:

$$\begin{aligned}
S_E &= \frac{1}{\hbar}\int \mathrm{d}\tau \frac{m}{2}\left(\frac{\partial y}{\partial \tau}\right)^2 + V(y) = \\
&= \frac{1}{\hbar}\sum_{i=0}^{N-1} a\left(\frac{m}{2}\left(\frac{y_{i+1}-y_i}{a}\right)^2 + V(y_i)\right) = \\
&= \sum_{i=0}^{N-1} \frac{md^2}{2a\hbar}\left(\frac{y_{i+1}-y_i}{d}\right)^2 + \frac{aV_0}{\hbar}\left(\left(\frac{y_i}{d}\right)^2 - 1\right)^2
\end{aligned}$$

$$S_E[\tilde{y}] = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{4\lambda^2}{\eta_a}\left(\tilde{y}_{i+1} - \tilde{y}_i\right)^2 + \eta_a\left(\tilde{y}_i^2 - 1\right)^2 \tag{23}$$

L'azione adimensionale diventa similarmente:

$$S[\tilde{x}] = \sum_{i=0}^{M-1} \frac{4\lambda^2}{\eta_b} \left(\tilde{x}_{i+1} - \tilde{x}_i\right)^2 - \eta_b \left(\tilde{x}_i^2 - 1\right)^2 \tag{24}$$

Siamo anche interessati al quadrato del suo gradiente:

$$d\frac{\partial S[\tilde{x}]}{\partial x_i} = \frac{\partial S[\tilde{x}]}{\partial \tilde{x}_i} = -4\eta_b \tilde{x}_i \left(\tilde{x}_i^2 - 1\right) + \frac{8\lambda^2}{\eta_b} \left(2\tilde{x}_i - \tilde{x}_{i-1} - \tilde{x}_{i+1}\right)$$

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{M-1} \left(\frac{\partial S[\tilde{x}]}{\partial \tilde{x}_i}\right)^2 = 16 \sum_{i=0}^{M-1} \eta_b^2 \tilde{x}_i^6 - 2\tilde{x}_i^4 \left(\eta_b^2 + 4\lambda^2\right) + 4\lambda^2 \tilde{x}_i^3 \left(\tilde{x}_{i+1} + \tilde{x}_{i-1}\right) + \\ \tilde{x}_i^2 \left(\frac{4\lambda^2}{\eta_b} + \eta_b\right)^2 - \tilde{x}_i \left(\tilde{x}_{i+1} + \tilde{x}_{i-1}\right) \left(4\lambda^2 + \left(\frac{4\lambda^2}{\eta_b}\right)^2\right) + \\ \frac{4\lambda^4 \tilde{x}_{i+1}^2}{\eta_b^2} + \frac{8\lambda^4 \tilde{x}_{i+1}\tilde{x}_{i-1}}{\eta_b^2} + \frac{4\lambda^4 \tilde{x}_{i-1}^2}{\eta_b^2}\end{aligned} \tag{25}$$

Dove bisogna mettere $x_{-1} = 0$. Restano da calcolare le differenze, necessarie per ottenere i rapporti di probabilità:

$$S_E[\tilde{y}]\big|_{y_i \to y_i'} - S_E[\tilde{y}] = \sum_{i=0}^{N-1} \frac{4\lambda^2}{\eta_a} \left(\tilde{y}_{i+1} - \tilde{y}_i\right)^2 + \eta_a \left(\tilde{y}_i^2 - 1\right)^2 \tag{26}$$