Come è noto dalla teoria delle bande di Bloch, una particella sottoposta a un potenziale periodico presenta uno spettro duplice: una parte continua, caratterizzata da energia maggiore di zero, e diverse bande formate da stati legati, ognuna centrata intorno ad un'autovalore dell'hamiltoniana di singola buca e con larghezza determinata dall'interazione tra stati centrati in buche vicine. Nel limite $T \to 0$ un'espansione al termine quadratico della densità di stati della banda più bassa ci mostra che la particella può essere considerata libera, ma con una massa effettiva diversa dall'originale.

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\left(\frac{\partial \hat{x}}{\partial t}\right)^2 - V(\hat{x}) \overset{T\to 0}{\approx} \frac{m_{\text{eff}}}{2}\left(\frac{\partial \hat{x}}{\partial t}\right)^2 - c \qquad V(x+l) = V(x) \tag{1}$$

Uno studio analitico di m_{eff} è impossibile se non nei casi più semplici. Buoni risultati si ottengono con approsimazioni di *tight binding* ma lasciando parametri da misurare.

1 Azione, adimensionalizzazione e discretizzazione

L'azione euclidea adimensionalizzata del sistema su un percorso $x(\tau)$, con $V(x)$ di periodo l è:

$$\mathcal{S}_E = \frac{1}{\hbar}\int_0^{\frac{\hbar}{k_B T}} \mathrm{d}\tau \frac{m}{2}\left(\frac{\partial x}{\partial \tau}\right)^2 + V(x) \tag{2}$$

Volendo studiare le dinamiche del reticolo adimensionalizziamo l'equazione tenendo le dimensioni di esso in conto. Usando V_0 come parametro di profondità delle buche e l come misura di lunghezza, possiamo fare le seguenti sostituzioni:

$$x = ly \qquad V(x) = V_0\tilde{V}\left(\frac{x}{l}\right) \qquad \omega_B = \sqrt{\frac{V_0}{ml^2}}$$

$$z = \omega_B \tau \qquad \tilde{\beta} = \frac{\hbar\omega_B}{k_B T} \qquad d = \frac{V_0 l^2 m}{\hbar^2}$$

L'azione ora è funzione solo dei parametri adimensionali $\tilde{\beta}$ e d (e del cammino $y(z)$).

$$\mathcal{S}_E = \sqrt{d}\int_0^{\tilde{\beta}} \mathrm{d}z \frac{1}{2}\left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)^2 + \tilde{V}(y) \tag{3}$$

Infine possiamo discretizzare l'integrale dividendolo in parti di lunghezza η, ponendo $N = \frac{\tilde{\beta}}{\eta}$.

$$\mathcal{S}_E \approx \sqrt{d}\sum_{n=0}^{N} \frac{y_n^2}{\eta} - \frac{y_n y_{n+1}}{\eta} + \eta\tilde{V}(y_n) \tag{4}$$

Per un cambio nel percorso $y_n \to y_n + \delta$ abbiamo un $\Delta\mathcal{S}_E$ di

$$\Delta\mathcal{S}_E = \sqrt{d}\sum_{n=0}^{N} \frac{2y_n\delta + \delta^2}{\eta} - \frac{y_{n-1} + y_{n+1}}{\eta}\delta + \eta\left(\tilde{V}(y_n+\delta) - \tilde{V}(y_n)\right) \tag{5}$$

2 Validità dei limiti

I limiti di bassa temperatura e continuo sono ora $\beta \to +\infty$ e $\eta\omega_B \to 0$

Il limite di bassa temperatura è raggiunto quando l'energia media della particella è situata nella parte quadratica della prima banda di Bloch. Essendo, come visto nell'approssimazione di *tight binding* le bande centrate sui livelli della singola buca, una stima grossolana può essere $k_B T \ll \hbar\omega_B$. Il vincolo da imporre è quindi $\tilde{\beta} \gg 1$. Comunque un'ulteriore controllo si può fare osservando i cammini: essi devono visitare molteplici buche.

η deve essere molto inferiore alla più piccola scala temporale presente, ovvero quella di buca singola. Essendo già η in unità di ω_B^{-1} il vincolo è $\eta \ll 1$.

3 Misurare m_{eff}

Nel tempo euclideo il meccanismo per cui m_{eff} emerge è chiaramente visibile: all'approfondirsi e/o allargarsi delle buche il cammino tipico è sempre più vincolato a restare in una sola di esse, e tende quindi a variare meno rispetto a quello di una particella libera. Effettivamente la distanza quadratica media percorsa dalla particella in un tempo τ può essere risolta esattamente nel caso di particella libera con massa m_{eff}:

$$\left\langle (x(\tau) - x(0))^2 \right\rangle = \frac{4}{m_{\text{eff}}\beta} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1 - \cos(\omega_n \tau)}{\omega_n^2} \qquad \omega_n = 2\pi \frac{n}{\beta\hbar} \tag{6}$$

Ci aspettiamo che per $\beta\hbar$ abbastanza grande (basse temperature) anche la particella soggetta a un potenziale periogico segua una distibuzione simile, composta però da un *random walk* di instantoni tra una buca e l'altra. Per le alte temperature invece la particella "non fa in tempo" a colpire le pareti della buca, apparendo effettivamente libera. Dato che l'espressione (**??**) dipende da m_{eff} solo per un fattore, eseguire un fit non è utile alla bontà della misura: possiamo quindi mediare su τ e sfruttare l'identità $\zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}$ per ottenere l'osservabile finale:

$$\left\langle \frac{1}{\beta\hbar} \int \mathrm{d}\tau \, (x(\tau) - x(0))^2 \right\rangle = \frac{4}{m_{\text{eff}}\beta} \left(\frac{\beta\hbar}{2\pi}\right)^2 \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\beta\hbar^2}{6 m_{\text{eff}}} \tag{7}$$

Usando le sostituzioni (**??**) possiamo adimensionalizzare:

$$\left\langle \frac{1}{\tilde{\beta}} \int \mathrm{d}z \, (y(z) - y(0))^2 \right\rangle = \frac{\tilde{\beta}}{6\sqrt{d}} \frac{m}{m_{\text{eff}}} \tag{8}$$

Infine la media su z va discretizzata. Possiamo rendere più esatta il calcolo per la particella libera: la discretizzazione ferma la somma alla frequenza di Nyquist $\omega_{\frac{N}{2}}$. Inserendo il fattore $f(N) = \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\frac{N}{2}} n^{-2}$ la stima finale è

$$\frac{m_{\text{eff}}}{m} = \frac{\eta N f(N)}{6\sqrt{d}} \left(\left\langle \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y_n - y_0)^2 \right\rangle \right)^{-1} \tag{9}$$

4 Test della simulazione

Il rapporto $\frac{m_{eff}}{m}$ dipende dalla funzione $\tilde{V}(y)$ e dal parametro di dimensione delle buche adimensionale $d = \frac{V_0 l^2 m}{\hbar^2}$ Il caso speciale di potenziale a onda quadra gode di una soluzione esatta per la funzione d'onda. Purtroppo non ho trovato una soluzione analitica della dipendenza di m_{eff} da d, ma è possibile uno studio numerico a partire dalla condizione per le bande di Bloch. Per $d < 100$, un'approssimazione quadratica è ottima e otteniamo:

$$\frac{m_{eff}}{m} = 1 + \left(0.00589 \pm 3.2 \times 10^{-8}\right) \left(\frac{V_0 l^2 m}{\hbar^2}\right)^2 \tag{10}$$

Voglio quindi confermare questo risultato, e trovare i coefficienti per diversi $\tilde{V}(y)$