Zadania (II-1) z mechaniki kwantowej dla doktorantów na środe , 3-go (i nastepne) marca 2010.

1. Całki funkcjonalne metodami Monte Carlo. Stosując metody omówione na wykładzie napisać program symulujący całke Feynmanowską dla oscylatora harmonicznego. W tym celu należy:

1. Użyć algorytmu Metropolisa do generacji zdyskretyzowanych trajektorii $\{x_a, x_1, x_2, ..., x_N, x_b\}$ według miary euklidesowej

$$K(x_b, T, x_a, 0) = \int \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right]\right) \quad (1)$$

   Uprościć problem obliczając *ślad* jadra

$$S(T) = \int dx K(x, T, x, 0) \quad (2)$$

   co oznacza dla algorytmu generowanie trajektorii periodycznych (petli) $\{x, x_1, x_2, ..., x_N, x\}$ i włączenie wspólnego punktu początkowego i końcowego, x, do procedury Metropolisa.

2. Sprawdzić zbieżność (stopień termalizacji) tak wygenerowanych trajektorii wykreślając zależność działania euklidesowego

$$S[\gamma] = \int_{t_a}^{t_b} dt \left[\frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2\right] \quad (3)$$

   dla kolejnych trajekrorii γ_i, $i = 1, ..., \mathcal{N}_{sample}$, od i.

3. Po uzyskaniu zbieżności w pkt.2 sporządzić histogram/rozkład punktu końcowego $h(x)$. Dla zwiekszenia statystyki można do tego celu użyć także wszystkich punktów pośrednich x_i generowanych trajektorii (dlaczego).

4. Wyniki zależą od czasu całkowitego T i od liczby punktów dyskretyzacji N. Wykreślić kilka histogramów skonstruowanych w pkt.3 dla ustalonego T i dla coraz mniejszych $\epsilon = T/N$. Zmienność tych wykresów z ϵ zdaje sprawe z efektów dyskretyzacji.

5. Wybrać dostatecznie małe ϵ, tak, żeby $h(x)$ już od niego nie zależało, i dla takiego ϵ^* wykreślić $h(x)$ dla kilku T. Jaka jest interpretacja $h(x)$ dla dużych T? Porównać otrzymane wyniki numeryczne z przewidywaniami teoretycznymi. Jak wygląda przewidywanie teoretyczne dla skończonych T ?

6. Wykorzystując trajektorie wygenerowane w pkt. 1,2 obliczyć *średnią* energie euklidesową. UWGA1. Po przedłużeniu analitycznym do urojonego czasu zwykła energia Minkowskiego przechodzi w

$$E_E[\gamma] = -\frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2 \tag{4}$$

UWAGA 2. Dla uzyskania zbieżności gdy $\epsilon \to 0$, konieczne jest zastosowanie przepisu 'point splitting' tj. zastąpienie $\dot{x}^2$ przez $(x_{i+1} - x_i)(x_i - x_{i-1})$ (zob. wykład).

7. Uzyskana w pkt.8 energia średnia zależy od T: $\bar{E}(T)$. Porównać tą zależność z przewidywaniem teoretycznym

$$\bar{E}(T) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\frac{T}{\hbar}E_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\frac{T}{\hbar}E_n}} \tag{5}$$

gdzie E_n są kwantowymi energiami oscylatora.

2. Całka funkcjonalna dla cząstki w nieskończonej studni potencjału.
Reprezentacja Feynmana dla tego problemu ma postać

$$K(x_b, t_b, x_a, t_a) = \int_0^L \mathcal{D}[x(t)] \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2}\dot{x}^2\right) \tag{6}$$

gdzie wszystkie trajektorie są ograniczone do obszaru $0 \leq x(t) \leq L$. Innymi słowy, po dyskteryzacji czasu $x(t_i) \to x_i$, $0 \leq x_i \leq L$, $i = 1, ..., N$. Powyższą całke można wyrazić przez całki bez ograniczeń (czyli przez jadra swobodne) uważnie analizując zbiór wszystkich torów, $\mathcal{P}_{conf}$, ograniczonych do wnetrza studni, zastepując go stopniowo (tj. rekursywnie) przez zbiór trajektorii nieograniczonych (czyli swobodnych) $\mathcal{P}_{free}$.

1. Zbiór torów ograniczonych jest różnicą zbioru torów nieograniczonych (swobodnych) i zbioru torów swobodnych, które co najmniej raz przecieły ściany studni

$$\mathcal{P}_{conf} = \mathcal{P}_{free} - \mathcal{P}_{boundaries} \tag{7}$$

2. $\mathcal{P}_{boundaries}$ można podzielić na trajektorie, które *ostatni raz*, przed dotarciem do x_b, przeciely lewą lub prawą ścianke studni

$$\mathcal{P}_{boundaries} = \mathcal{P}_{left} + \mathcal{P}_{right} \tag{8}$$

3. Tory z $\mathcal{P}_{left}$ można zapisać jako złożenie propagacji swobodnej do lewego brzegu i propagacji ograniczonej od lewego brzegu do punktu końcowego: $\gamma_{free}(x_a \to 0)\gamma_{confined}(0 \to x_b)$. Analogicznie rozkładamy tory z $\mathcal{P}_{right}$.

4. $\mathcal{P}_{left}$ zastepujemy zbiorem $\mathcal{P}'_{left}$, w którym trajektorie ograniczone $\gamma_{confined}(0 \to x_b)$ zamieniamy na trajektorie *odbitą* wzgledem ścianki, tj. w tym przypadku wzgledem $x = 0$, $\gamma_{confined}(0 \to -x_b)$. Ponieważ odtąd punkt końcowy bedzie na ogół inny od x_b należy to uwzglnić w naszej notacji. Mamy wiec

$$\mathcal{P}_{left}(x_b) = \mathcal{P}'_{left}(-x_b), \quad oraz \;\; \mathcal{P}_{right}(x_b) = \mathcal{P}''_{right}(2L - x_b) \tag{9}$$

gdzie $''$ oznacza odbicie wzgledem $x = L$.

5. Tory w $\mathcal{P}'_{left}$ i $\mathcal{P}''_{right}$ są złożone cześciowo z propagacji nieograniczonej a cześciowo z propagacji ograniczonej. Teraz rozpoczynamy procedure rekurencyjną: analogicznie do pkt.1 mamy

$$\mathcal{P}'_{left}(-x_b) = \mathcal{P}_{free}(-x_b) - \mathcal{P}_{2left}(-x_b) \tag{10}$$

gdzie $\mathcal{P}_{2left}(-x_b)$ jest zbiorem torów, które po raz ostatni, przed dotarciem do $-x_b$ przeciely *nową* ścianke pomocniczą w $x = -L$. Analogicznie

$$\mathcal{P}''_{right}(2L - x_b) = \mathcal{P}_{free}(2L - x_b) - \mathcal{P}_{2right}(2L - x_b) \tag{11}$$

Kontynuując rekurencje otrzymujemy

$$\begin{aligned}
K(x_b, t_b, x_a, t_a)_{conf} &= K(x_b, t_b, x_a, t_a)_{free} && (12)\\
&- K(-x_b, t_b, x_a, t_a)_{free} - K(2L - x_b, t_b, x_a, t_a)_{free} && (13)\\
&+ K(-2L + x_b, t_b, x_a, t_a)_{free} + K(2L + x_b, t_b, x_a, t_a)_{free} \ldots && (14)\\
&= \Sigma_{n=-\infty}^{+\infty} K(2nL + x_b, t_b, x_a, t_a)_{free} - K(2nL - x_b, t_b, x_a, t_a)_{free}
\end{aligned}$$

Należy teraz wstawić do powyższego wyrażenia jawną postać propagatora swobodnego, użyć wzoru sumacyjnego Poissona

$$\Sigma_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \Sigma_{k=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} ds f(s) e^{2\pi i k s} \tag{15}$$

i wykonać całki gaussowskie.
Wyprowadzić stąd reprezentacje spektralną propagatora

$$K(x_b, t_b, x_a, t_a)_{conf} = \Sigma_{n=1}^{\infty} \psi_n(x_b) \psi_n^*(x_a) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n (t_b - t_a)\right) \tag{16}$$

z dobrze znanymi energiami własnymi i funkcjami falowymi cząstki w pudle

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \tag{17}$$