

Línea de mundo numérica en mecánica cuántica: estimando la energía del estado base

María Anabel Trejo Espinosa

Facultad de Física y Matemáticas, UNACH

Contenido

Motivación

Formulación de la mecánica cuántica

Integrales de camino

Método línea de mundo numérica

Aplicación

Resultados

Conclusión

¿Cómo realmente está constituida la materia?

- ▶ Leucipo y Demócrito (Antigua Grecia, 460-370 a.C.): **átomos** (indivisibles)
 - ▶ Infinitos en número
 - ▶ No se crean
 - ▶ Eternos
 - ▶ Objeto depende del tipo de átomo
- ▶ 1700 , dos leyes de las reacciones químicas
 - ▶ Antoine Lavoisier y Marie Anne Paulze:**ley de conservación de la masa**
 - ▶ Joseph Louis Proust: **ley de las proporciones definidas**
- ▶ **Elementos:** Tabla periódica (Dmitri Mendeleev 1869 - 2016 International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC))

Legend:

- Atomic Number: 6
- Symbol: C
- Name: Carbon
- Average Atomic Mass: 12.011

Color coding:

- metals (pink)
- nonmetals (light blue)
- metalloids (green)

1																	2			
H																	He			
3	4																	10		
Li	Be																	Ne		
11	12																	18		
Na	Mg																	Ar		
19	20											28	29	30	31	32	33	34	35	36
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr			
37	38											46	47	48	49	50	51	52	53	54
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe			
55	56	*	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86		
Cs	Ba		Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
87	88	**	103	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118		
Fr	Ra		Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og		
*Lanthanide series																				
57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70							
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb							
**Actinide series																				
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	105	106	107		
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	Np							

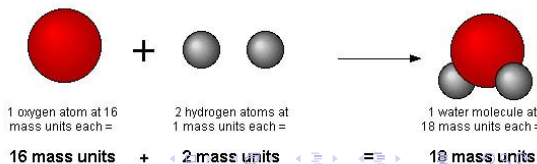
Modelo atómico de Dalton (1800)

- ▶ Elementos: formados por partículas muy pequeñas: **átomos**
- ▶ Los átomos de un elemento son idénticos en medida, masa y otras propiedades
- ▶ Los átomos no pueden ser subdivididos, creados o destruidos
- ▶ Los átomos de diferentes elementos se pueden combinar para formar **compuestos**
- ▶ En las reacciones químicas los átomos son combinados, separados o reacomodados.

Fallas

- ▶ No vio: algunos átomos existen como moléculas (O_2).
- ▶ Agua: HO , un átomo por cada elemento
- ▶ Oxígeno 5.5 (y después 7) veces más pesado que el hidrógeno.

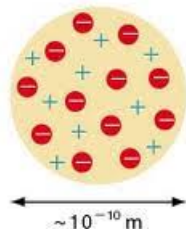
Dalton's Atomic Theory



Modelo de J.J. Thomson

- ▶ Amedeo Avogadro (1811): La masa de dos partículas gaseosas no afecta el volumen que ocupan (mismo volumen mismo número de moléculas)
- ▶ J.J. Thomson (1897) descubrió el **electrón**: rayos catódicos
 - ▶ Los rayos cátodicos están formados de partículas: "corpúsculos" de masa 1800 veces mayor que el hidrógeno.
 - ▶ Modelo del puding de ciruelas: electrones incrustados en una nube de carga positiva

Thomson's atomic model



Fallas

- ▶ Thomson: No reproduce las líneas espectrales de los elementos en ese entonces conocidos.

Líneas espectrales

- ▶ Emisión
- ▶ Absorción
- ▶ continuo

S01

Continuous vs Discrete



emission spectrum

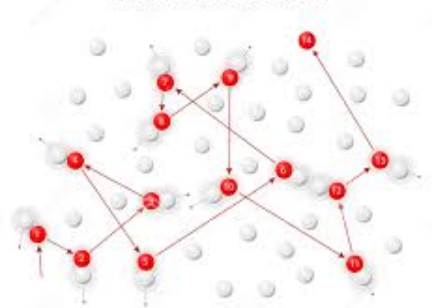


absorption spectrum

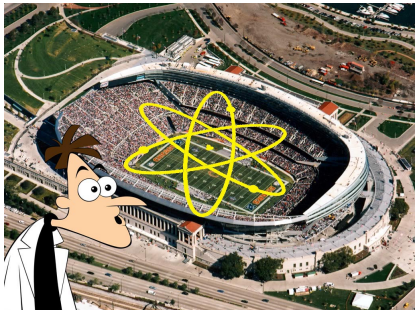
El átomo existe!!

- ▶ Robert Brown (1827): polen se mueve en el agua

Brownian motion



- ▶ Albert Einstein (1905): Las moléculas del agua golpean continuamente el polen (dio un modelo matemático)
- ▶ Jean Perrin (1908): Validación experimental.

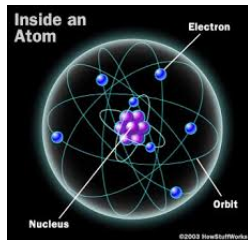
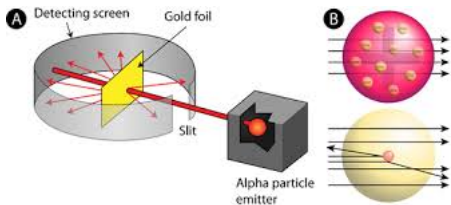


Modelo atómico de Rutherford

- ▶ Ernest Rutherford (1909): la mayoría de la masa y carga positiva está centrada en una fracción muy pequeña del volumen del átomo

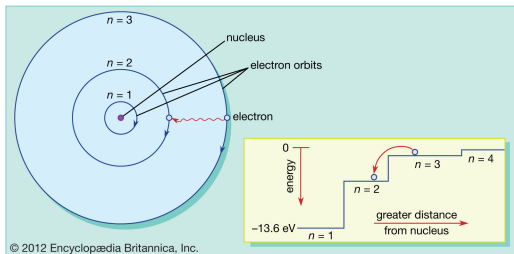
Fallas

- ▶ Electrones son partículas cargadas: girarán hacia el núcleo
- ▶ No puede explicar el espectro de emisión y absorción



Modelo de Bohr

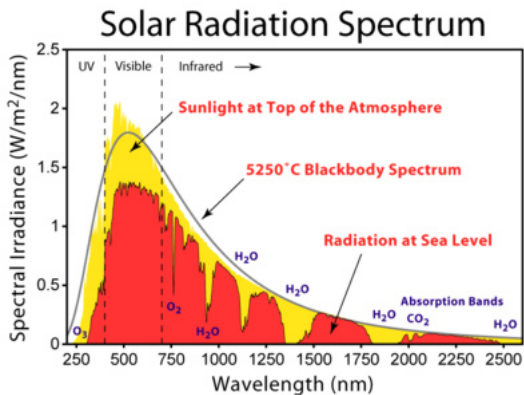
- ▶ Max Plank y Albert Einstein: energía de la luz es emitida y absorbida en cantidades discretas (quantum).
- ▶ Niels Bohr (1913): electrones solo pueden orbitar el núcleo en órbitas circulares discretas.
- ▶ Se tiene emisión y absorción de energía de forma discreta.



Falla

- ▶ Solo puede predecir las líneas espectrales del átomo de hidrógeno, pero no completamente.

Espectro de radiación del Sol



Ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}$$

- ▶ $\psi(x, t)$ función de onda de una partícula.
- ▶ $V(x, t)$ el potencial de interacción de la partícula con sus alrededores.
- ▶ \hbar constante de Planck (sobre 2π)
- ▶ m la masa de la partícula.

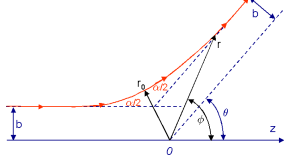
Si $V(x)$ (**independiente del tiempo**) $\rightarrow \psi(x, t) = \psi_0(x)e^{-iEt}$,
entonces: **ec. de Schrödinger independiente del tiempo**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_0(x)}{dx^2} + V(x) \psi_0(x) = E \psi_0(x)$$

$$H\psi_0(x) = E\psi_0(x), \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

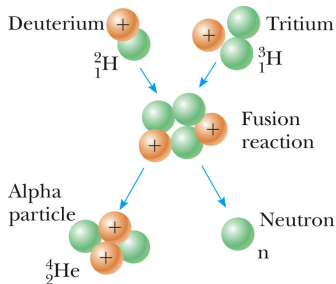
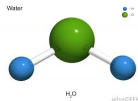
▶ Estados de dispersión

- ▶ Energía: intervalo continuo.
- ▶ Los sistemas relativistas pueden ser estudiados usando teoría de perturbaciones



▶ Estados ligados

- ▶ Energía: valores discretos de energía
- ▶ Se manifiestan como polos en la amplitud de dispersión del sistema (**no** teoría de perturbaciones)
- ▶ Relativistas: Bethe y Salpeter introdujeron una ec. para el estudio de sistemas con dos cuerpos, no es fácil de manejar (solo a primera aproximación).
- ▶ Formalismo línea de mundo: una alternativa para estudiar estos sistemas.



© Thomson Higher Education

Solución a la ec. de Schrödinger

Depende de la forma de $V(x)$, el potencial del sistema.

1. Resolver la ec. diferencial (**de forma exacta**) si es posible.
2. Aproximación analítica
 - 2.1 Teoría de perturbaciones
 - 2.2 Método variacional
 - 2.3 Aproximación de Born
 - 2.4 ...
3. Aproximación numérica
 - 3.1 Diferencias finitas
 - 3.2 Runge-Kutta

Formulaciones de la mecánica cuántica

En notación **bra-ket**

- ▶ **Formulación de Schrödinger:** Estados dependientes del tiempo

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle,$$

- ▶ **Formulación de Heisenberg:** Observables dependientes del tiempo

$$\frac{d}{dt} A(t) = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)] + \frac{\partial A(t)}{\partial t},$$

- ▶ **Formulación de Dirac:** Operadores y estados dependientes del tiempo

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H_{\text{int}}(t) |\psi(t)\rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} A(t) = [A(t), H_0],$$

con $H = H_0 + V$, $H_{\text{int}}(t) \equiv e^{(i/\hbar)tH_0} V e^{(-i/\hbar)tH_0}$

- ▶ **Integrales de camino (Feynman)**

Representación de Schrödinger: el propagador

(Con $\hbar = 1$)

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle,$$

Para V independiente del tiempo

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi(0)\rangle,$$

donde $|\psi(0)\rangle$ satisfase la ec. de Schrödinger independiente del tiempo

$$\hat{H}|\psi(0)\rangle = E|\psi(0)\rangle,$$

Descomposición espectral del vector $|\psi(0)\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n |\psi_n(0)\rangle \langle \psi_n(0)|\psi(0)\rangle + \int dE |\psi_E(0)\rangle \langle \psi_E(0)|\psi(0)\rangle.$$

Con lo que

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t} |\psi_n(0)\rangle \langle \psi_n(0)|\psi(0)\rangle + \int dE e^{-iEt} |\psi_E(0)\rangle \langle \psi_E(0)|\psi(0)\rangle.$$

En el espacio de posiciones esto se ve como

$$\begin{aligned}\langle x|\psi(t)\rangle &\equiv \psi(x, t) = \sum_n e^{-iE_n t} \langle x|\psi_n(0)\rangle \langle \psi_n(0)|\psi(0)\rangle + \int dE e^{-iEt} \langle x|\psi_E(0)\rangle \langle \psi_E(0)|\psi(0)\rangle \\ &= \sum_n e^{-iE_n t} \langle x|\psi_n(0)\rangle \int dy |y\rangle \langle y| \langle \psi_n(0)|\psi(0)\rangle + \int dE e^{-iEt} \langle x|\psi_E(0)\rangle \int dy |y\rangle \langle y| \langle \psi_E(0)|\psi(0)\rangle \\ &= \int dy \sum_n e^{-iE_n t} \langle x|\psi_n(0)\rangle \langle \psi_n(0)|y\rangle \langle y|\psi(0)\rangle + \int dy \int dE e^{-iEt} \langle x|\psi_E(0)\rangle \langle \psi_E(0)|y\rangle \langle y|\psi(0)\rangle \\ &= \int dy \left[\sum_n e^{-iE_n t} \psi_n(x) \psi_n^*(y) \psi(y) + \int dE e^{-iEt} \psi_E(x) \psi_E^*(y) \psi(y) \right] \\ \psi(x, t) &= \int dy \left[\sum_n e^{-iE_n t} \psi_n(x) \psi_n^*(y) + \int dE e^{-iEt} \psi_E(x) \psi_E^*(y) \right] \psi(y),\end{aligned}$$

con $\psi(y, 0) \equiv \psi(y)$.

El **propagador** en la representación de posiciones es

$$K_M(x, y; t) = \sum_n e^{-iE_n t} \psi_n(x) \psi_n^*(y) + \int dE e^{-iEt} \psi_E(x) \psi_E^*(y).$$

Integrales de camino

El propagador también corresponde al valor de expectación del operador de evolución $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$, con condiciones iniciales $\hat{U}(0) = 1$, es decir,

$$K_M(x, y; t) = \langle x | e^{-i\hat{H}t} | y \rangle.$$

Para introducir integrales de camino (Feynman en 1948), dividamos en N partes iguales al operador de evolución: $\epsilon := t/N$, e insertando $(N - 1)$ descomposiciones de la unidad en el espacio de posiciones, $\mathbf{1} = \int dx |x\rangle \langle x|$

$$\begin{aligned} K_M(x, y; t) &= \langle x | e^{-i\epsilon\hat{H}} e^{-i\epsilon\hat{H}} \dots e^{-i\epsilon\hat{H}} | y \rangle \\ &= \langle x | e^{-i\epsilon\hat{H}} \int dx_{N-1} |x_{N-1}\rangle \langle x_{N-1}| e^{-i\epsilon\hat{H}} \int dx_{N-2} |x_{N-2}\rangle \langle x_{N-2}| \dots \int dx_1 |x_1\rangle \langle x_1| e^{-i\epsilon\hat{H}} | y \rangle \\ &= \int \left(\prod_{i=1}^{N-1} dx_i \right) \langle x_N | e^{-i\epsilon\hat{H}} | x_{N-1} \rangle \left(\prod_{j=1}^{N-1} \langle x_j | e^{-i\epsilon\hat{H}} | x_{j-1} \rangle \right), \end{aligned}$$

donde se ha identificado $x_0 = y$ y $x_N = x$.

Con N descomposiciones de la unidad en el espacio de momentos, $\mathbf{1} = \int \frac{dp}{2\pi} |p\rangle\langle p|$

$$\begin{aligned}
 K_M(x, y; t) &= \int \left(\prod_{i=1}^{N-1} dx_i \right) \langle x_N | e^{-i\epsilon\hat{H}} \int \frac{dp_N}{2\pi} |p_N\rangle\langle p_N| x_{N-1} \rangle \left(\prod_{j=1}^{N-1} \langle x_j | e^{-i\epsilon\hat{H}} \int \frac{dp_j}{2\pi} |p_j\rangle\langle p_j| x_{j-1} \rangle \right), \\
 &= \int \left(\prod_{i=1}^{N-1} dx_i \right) \left(\prod_{k=1}^N \frac{dp_k}{2\pi} \right) \langle x_N | e^{-i\epsilon\hat{H}} |p_N\rangle\langle p_N| x_{N-1} \rangle \left(\prod_{j=1}^{N-1} \langle x_j | e^{-i\epsilon\hat{H}} |p_j\rangle\langle p_j| x_{j-1} \rangle \right).
 \end{aligned}$$

Para N suficientemente grande, asumiendo que $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$, podemos usar la fórmula de Trotter

$$e^{-i\epsilon\hat{H}} = e^{-i\epsilon\hat{V}} e^{-i\epsilon\hat{T}} + O(\epsilon^2) \approx e^{-i\epsilon\hat{V}} e^{-i\epsilon\hat{T}},$$

$$\begin{aligned}
 \langle x_j | e^{-i\epsilon\hat{H}} |p_j\rangle &= \left\langle x_j \left| 1 - i\epsilon\hat{H} + \frac{(i\epsilon\hat{H})^2}{2!} + \dots \right| p_j \right\rangle \approx \langle x_j | p_j \rangle - i\epsilon \langle x_j | \hat{H} | p_j \rangle + O(\epsilon^2) \\
 &= e^{ix_j p_j} \left(1 - i\epsilon H(x_j, p_j) + O(\epsilon^2) \right) = e^{ix_j p_j - i\epsilon H},
 \end{aligned}$$

donde usamos que

$$\begin{aligned}\langle x_j | \hat{H} | p_j \rangle &= \left\langle x_j \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right| p_j \right\rangle = \left[\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \right] \langle x_j | p_j \rangle = \left[\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \right] e^{ix_j p_j} \\ &= H(x_j, p_j) e^{ix_j p_j}\end{aligned}$$

y $\langle x_j | p_{j-1} \rangle = e^{ix_j p_{j-1}}$. Por lo tanto, el propagador se reduce a

$$K_M(x, y; t) = \int \left(\prod_{i=1}^{N-1} dx_i \right) \left(\prod_{k=1}^N \frac{dp_k}{2\pi} \right) \exp \left(i \sum_{j=1}^N \epsilon \left[p_j \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon} \right) - \frac{p_j^2}{2m} + V(x_j) \right] \right).$$

Integrando sobre los momentos

$$K_M(x, y; t) = \int \prod_{i=1}^{N-1} dx_i \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \exp \left(i \sum_{j=1}^N \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j) \right] \right).$$

La noción de **integrales de camino** viene al imaginar que los puntos x_i son conectados por líneas, generando un camino continuo a trozos que conecta y con x ; por lo que la suma en la exponencial puede ser interpretada como la **suma de Riemann de cierta integral a lo largo del camino**. Suponiendo un número infinito de puntos en el camino ($\epsilon \rightarrow 0$)

$$\sum_{j=1}^N \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\epsilon} \right)^2 - V(x_j) \right] \sim \int_0^t dt' \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dx(t')}{dt'} \right)^2 - V(x) \right] \equiv S[x(t)],$$

$$\prod_{i=1}^{N-1} dx_i \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{\frac{N}{2}} \sim \mathcal{D}x(t).$$

Finalmente

$$K_M(x, y; t) = \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x(t) e^{iS[x(t)]}.$$

Worldline numerics: espacio Euclidean

El propagador en el **espacio de Minkowski** ($\hbar = 1$)

$$K_M(x, y; t) = \left\langle x \left| e^{-iHt} \right| y \right\rangle = \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x e^{i \int_0^t dt' \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x) \right]}$$

Haciendo **rotación de Wick**

$$t' \rightarrow -it', \quad t \rightarrow -it \quad \Rightarrow \quad dt' \rightarrow -idt', \quad \dot{x}^2 \rightarrow -\dot{x}^2$$

La acción funcional

$$S[x(t)] \rightarrow i \int_0^t dt' \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) \right]$$

El propagador en el **espacio Euclidiano**

$$K(x, y; t) = \int_{x(0)=y}^{x(t)=x} \mathcal{D}x e^{- \int_0^t dt' \left[\frac{1}{2} m \dot{x}^2 + V(x) \right]},$$

La partícula libre es descrita por el movimiento Browniano.

Implementación numérica

Dividiendo el camino (línea recta + perturbación)

$$x(t') = y + (x - y) \frac{t'}{t} + \tilde{q}(t'), \quad \tilde{q}(0) = \tilde{q}(t) = 0 \text{ (Dirichlet),}$$

reescalando $t' = tu$

$$K(x, y; t) = e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \int_{\tilde{q}(0)=0}^{\tilde{q}(1)=0} \mathcal{D}\tilde{q} e^{-\frac{m}{2t} \int_0^1 du \dot{\tilde{q}}^2 - t \int_0^1 du V(x(\tau))}.$$

La introducción de **lazos unitarios** es de crucial importancia para la eficiencia numérica

$$\tilde{q}(tu) := \sqrt{\frac{t}{m}} q(tu)$$

El propagador Euclideo

$$K(x, y; t) = \left(\frac{m}{2\pi t}\right)^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{m}{2t}(x-y)^2} \left\langle e^{-t \int_0^1 du V(x(u))} \right\rangle,$$
$$x(u) = y + (x - y)u + \sqrt{\frac{t}{m}} q$$

$\langle(\dots)\rangle$ denota el valor de expectación con respecto a un ensamble de lazos unitarios $q(u)$ con distribución de velocidades Gaussianas,

$$\langle(\dots)\rangle = \frac{\int \mathcal{D}q(\dots) P[\{q(u)\}]}{\int \mathcal{D}q P[\{q(u)\}]}, \quad P[\{q(u)\}] = \exp\left(-\int_0^1 du \frac{\dot{q}^2}{2}\right)$$

- ▶ **Worldline numerics** (número finito de lazos, cada lazo tiene un número finito de puntos)

$$\langle (\dots) \rangle \rightarrow \frac{1}{N_l} \sum_{\{q\}} (\dots), \quad q(u) \rightarrow q_i \in \mathbb{R}^d, \quad i = 1, \dots, ppl,$$

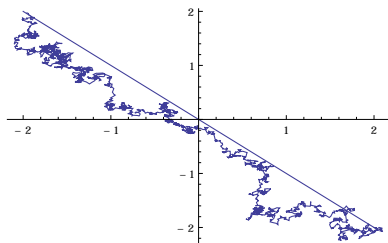
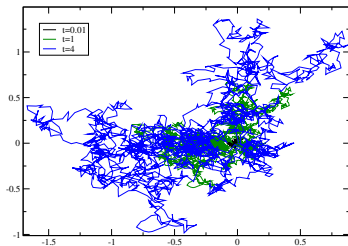
$$P[\{q(u)\}] \rightarrow \exp\left(-\frac{ppl}{2} \sum_{k=1}^{ppl} (q_k - q_{k-1})^2\right)$$

$$q(0) = q(1) = 0 \rightarrow q_0 = q_{ppl} = 0$$

- ▶ **Fuentes de error**

- ▶ número finito de lazos: error **estadístico**.
 - ▶ número finito de ppl: error **sistemático**.
- ▶ Los algoritmos que usamos para generar lazos Gaussianamente distribuidos y con condiciones de Dirichlet, están inspirados en los trabajos de H. Gies, K. Langfeld, P. Moyaerts y otros en el

Lazos y caminos



$$x(u) = y + (x - y)u + \sqrt{\frac{t}{m}}q(tu)$$

Aplicación: energía del estado base

- ▶ Descomposición espectral del propagador Euclidiano

$$K(x, y; t) = \sum_n e^{-E_n t} \psi_n(x) \psi_n^*(y) + \int dE e^{-Et} \psi_E(x) \psi_E^*(y).$$

- ▶ Límite asintótico para tiempos grandes

$$\lim_{t \rightarrow \infty} K(x, y; t) \approx e^{-tE_0} \psi_0^*(x) \psi_0(y)$$

- ▶ La energía del estado base

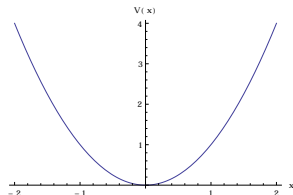
$$E_0 = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \ln(K(x, y; t))$$

- ▶ Sólo pocos potenciales tiene una forma cerrada para la expresión de su propagador K , por ejemplo, oscilador armónico.

Oscilador armónico en dimensión $d = 1$

El potencial

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2,$$

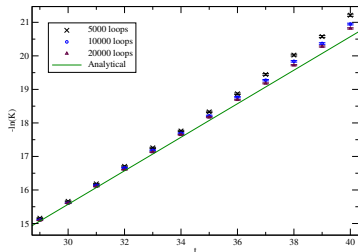
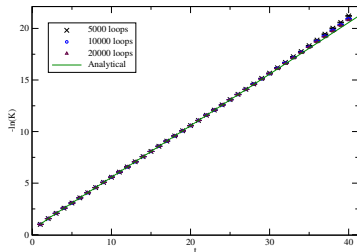


Expresión analítica del propagador

$$K(x, y; t) = \left(\frac{m\omega}{2\pi \sinh(\omega t)} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{m}{2} \frac{\omega}{\sinh(\omega t)} [(y^2 + x^2) \cosh(\omega t) - 2yx] \right).$$

Numéricamente

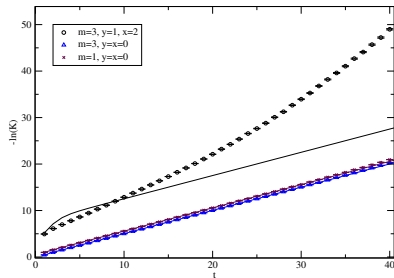
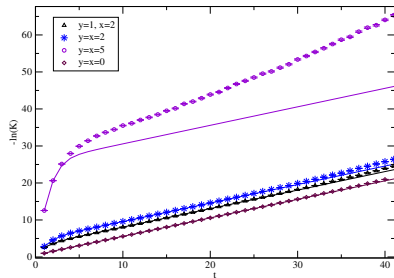
$$K(x, y; t) = \left(\frac{m}{2\pi t} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m}{2i}(x-y)^2} \left\langle e^{-t \frac{m\omega^2}{2} \int_0^1 du x^2} \right\rangle, \quad x(u) = y + (x-y)u + \sqrt{\frac{t}{m}} q(tu).$$

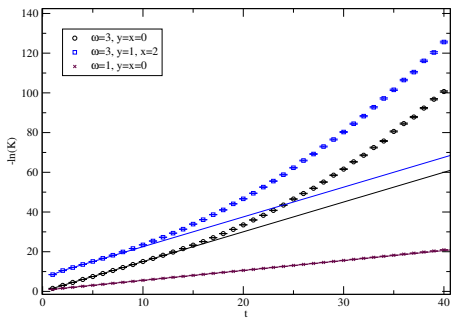


Diferentes números de lazos. Con $m = \omega = 1$ y $y = x = 0$.
 $E_0^{\text{Exacto}} = 0.5$.

$$E_0 = 0.50002(3), \quad t \in [5, 19],$$

Variando los parámetros





$$\omega = 3$$

$$E_0 = 1.5005(5), \quad t \in [3, 7]$$

$$E_0^{\text{Exacto}} = 1.5$$

Observaciones

- ▶ Para tiempos grandes los caminos se extiende tanto que no pueden muestrear correctamente el potencial: Movimiento Browniano.
- ▶ Aumentar $N_I \Rightarrow$ mayor intervalo de compatibilidad y crece la ventana para estimar la energía del estado base.
- ▶ Aumentar ppI no ayuda para extender la ventana.
- ▶ Para parámetros y y x alejados del foco del potencial, el problema para tiempos grandes es más notorio.
- ▶ Entre más grande es ω más corta se vuelve la ventana donde podemos estimar la energía del estado base.

Oscilador armónico en 2 y 3 dimensiones

$$V(\vec{x}) = \frac{m\omega^2}{2} |\vec{x}|^2, \text{ con } \vec{x} \in \mathbb{R}^d.$$

La representación analítica de propagador en el espacio Euclidiano se ve como

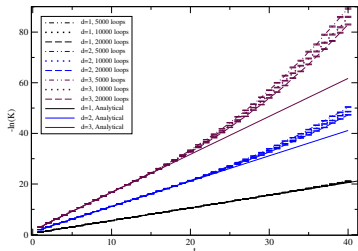
$$K(\vec{x}, \vec{y}; t) = \left(\frac{m\omega}{2\pi \sinh(\omega t)} \right)^{\frac{d}{2}} \exp \left(-\frac{m}{2} \frac{\omega}{\sinh(\omega t)} \left[(|\vec{y}|^2 + |\vec{x}|^2) \cosh(\omega t) - 2\vec{y} \cdot \vec{x} \right] \right),$$

con energías

$$E_n = \left(n + \frac{d}{2} \right) \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Cuya contraparte numérica es

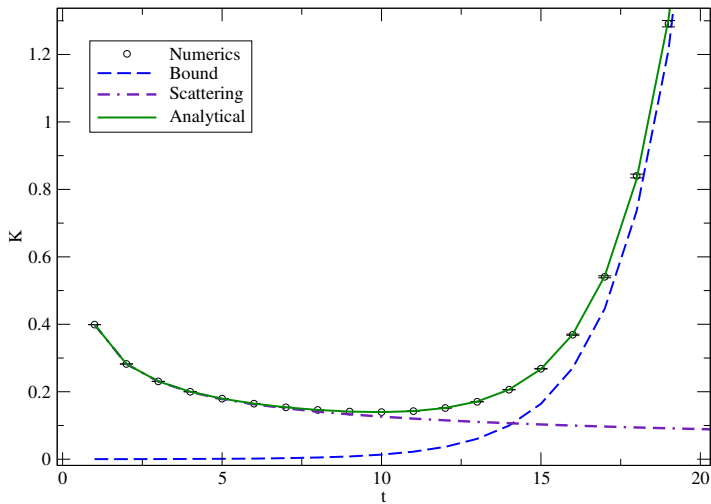
$$K(\vec{x}, \vec{y}; t) = \left(\frac{m}{2\pi t} \right)^{\frac{d}{2}} e^{-\frac{m}{2t} |\vec{x} - \vec{y}|^2} \left\langle e^{-t \frac{m\omega}{2} \int_0^1 du |\vec{x}|^2} \right\rangle, \quad \vec{x}(u) = \vec{y} + (\vec{x} - \vec{y})u + \sqrt{\frac{t}{m}} \vec{q}(tu).$$

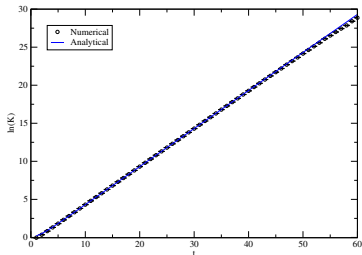


d	E_0	E_{num}	t (intervalo)
1	0.5	0.50002(3)	[5, 19]
2	1.0	1.0007(3)	[5, 19]
3	1.5	1.5003(4)	[5, 13]

El problema para tiempos grandes es más remarcado conforme aumenta la dimensión.

$\nu = 1$, un estado ligado





$$a = 1, m = 1,$$

$$\nu = 1, y = x = 0$$

$$E_0 = -0.4999(1), t \in [9, 20]$$

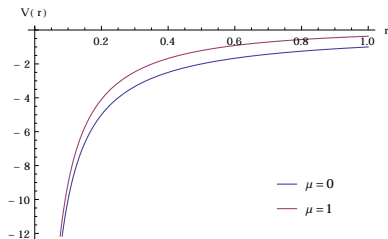
$$E_0^{\text{Exacto}} = -0.5$$

Potencial de Yukawa

- ▶ El potencial

$$V(r) = -\alpha \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad r = |\vec{x}|$$

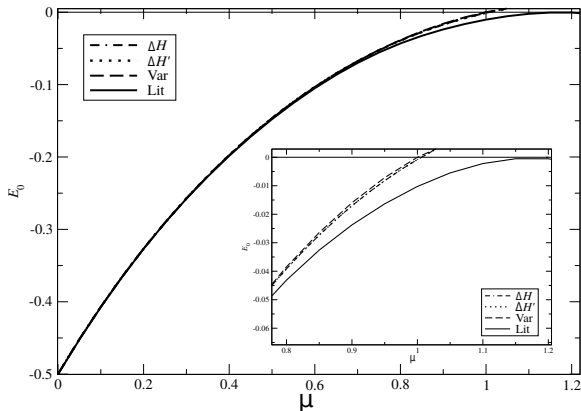
- ▶ Fuerza entre el neutrón y el protón (Yukawa).
- ▶ Electrólitos y coloides (Debye-Hückel).
- ▶ Part. cargada en mar de e^- (Thomas-Fermi).
 - ▶ Las energías del sistema no se conocen de forma exacta (excepto el caso $\mu = 0$).
 - ▶ Su ec. de Schrödinger no tiene solución analítica.



- ▶ $\mu = 0 \Rightarrow$ potencial de Coulomb.
- ▶ El número de estados ligados es finito o cero.
- ▶ Singularidad del potencial en $r = 0$.

Teoría de perturbaciones a quinto orden y método variacional

La energía del estado base como función de μ



Las curvas del método variacional y de la perturbación a quinto orden están de acuerdo cercanamente.

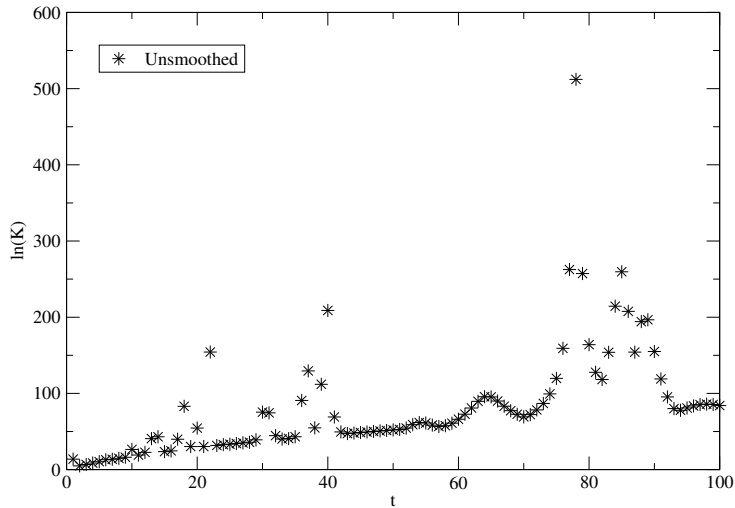
Estimación numérica

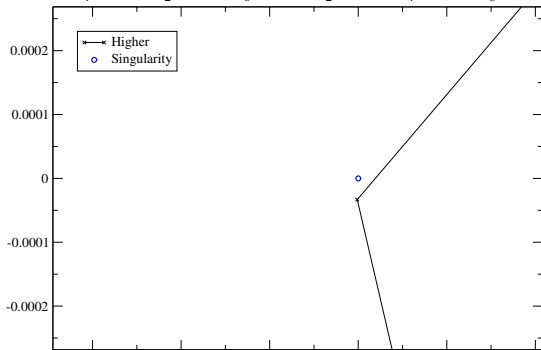
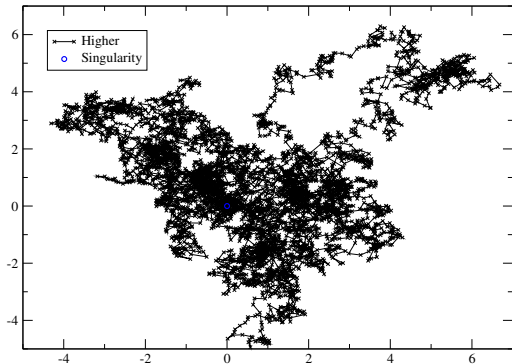
- ▶ El potencial de Yukawa es un potencial singular
- ▶ La representación numérica del propagador

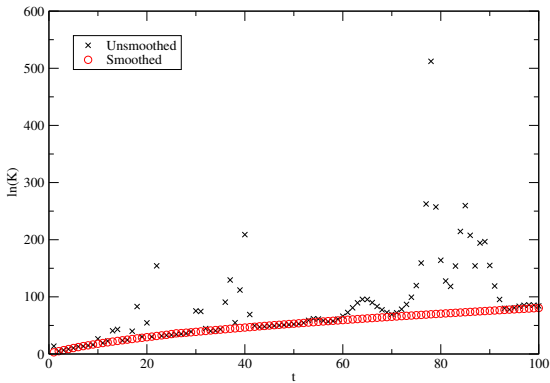
$$K(\vec{x}, \vec{y}; t) = \left(\frac{m}{2\pi t}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m}{2t}|\vec{x}-\vec{y}|^2} \left\langle e^{t\alpha \int_0^1 du \frac{e^{-\mu r}}{r}} \right\rangle, \quad r = |\vec{x}(u)| = \left| \vec{y} + (\vec{x} - \vec{y})u + \sqrt{\frac{t}{m}} \vec{q}(u) \right|.$$

- ▶ Tiene *skyscrapers*.
- ▶ Disipamos los *skyscrapers* aplicando *smoothing*.

Skyscrapers

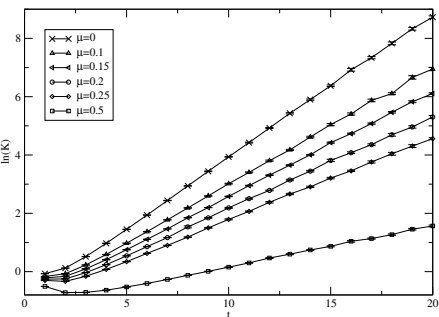






- ▶ *Smoothing* no cambia la física del sistema.
- ▶ Los Skyscrapers desaparecen.

Resultados numéricos



μ	E_0^{Pert}	E_0^{num}	E_0^{Lit}	Intervalo-t
0.0	-0.5	-0.502(2)	-0.5	[7, 15]
0.1	-0.407	-0.407(1)	-0.407	[7, 15]
0.15	-0.365	-0.367(2)	-	[7, 15]
0.2	-0.327	-0.328(2)	-0.327	[7, 15]
0.25	-0.291	-0.290(1)	-0.291	[7, 15]
0.5	-0.146	-0.146(2)	-0.148	[9, 15]

Aumentar el parámetro de apantallamiento, disminuye la ventana para estimar la energía del estado base.

Conclusiones

- ▶ Usando *worldline numerics* somos capaces de estimar el propagador, en principio, para cualquier sistemas que puede ser continuado analíticamente al espacio Euclidiano.
- ▶ Numéricamente, el intervalo para el cual el estado base domina es finito.
- ▶ Aumentar el número de caminos ayuda a incrementar ese intervalo.
- ▶ Como aplicación: fue posible encontrar una ventana en el tiempo para estimar, con buena precisión, la energía del estado base para diferentes sistemas.
- ▶ Es posible manejar la singularidad de potenciales singulares: *smoothing*.

Gracias