



# UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PADOVA

Dipartimento di Fisica e Astronomia “Galileo Galilei”

Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea

## Diffusione quantistica in reticoli unidimensionali

Relatore

Prof. Luca Dell’Anna

Laureando

Gioia Sacchi

Anno Accademico 2022/2023



## Abstract

Verrà presentato il vincolo di Lieb-Robinson. Si eseguirà uno studio della diffusione di una particella quantistica su un reticolo unidimensionale soggetta a diversi potenziali a corto raggio. Verrà studiata in particolare la propagazione della probabilità. Si sfrutterà la scrittura di programmi. Verrà esposto un metodo per stimare la regione causale in potenziali a lungo raggio in cui l'interazione varia con una potenza dell'inverso della distanza. Si eseguirà uno studio di tali potenziali tramite simulazione.

## Contents

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Velocità massima per potenziali a corto raggio</b>	<b>2</b>
2.1	Notazione . . . . .	2
2.2	Commutatori locali . . . . .	2
2.2.1	Dimostrazione . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Studio di potenziali</b>	<b>6</b>
3.1	Potenziale di hopping costante . . . . .	6
3.1.1	Risultati analitici preliminari . . . . .	6
3.1.2	Evoluzione temporale generale . . . . .	7
3.1.3	Coerenza con il modello teorico . . . . .	8
3.2	Potenziale con energie onsite dimerizzate . . . . .	9
3.2.1	Evoluzione temporale generale . . . . .	9
3.2.2	Dipendenza della velocità da $r$ . . . . .	10
3.2.3	Dipendenza dell'asimmetria da $r$ . . . . .	11
3.3	Potenziale di hopping dimerizzato . . . . .	12
3.3.1	Risultati teorici preliminari e confronto tra $D(s)$ e $D(-s)$ . . . . .	13
3.3.2	Caso particolare per $a = 0$ o $b = 0$ . . . . .	13
3.3.3	Evoluzione temporale generale . . . . .	14
3.3.4	Dipendenza della velocità da $s$ . . . . .	16
<b>4</b>	<b>Velocità massima per potenziale a lungo raggio</b>	<b>18</b>
4.1	Dimostrazione . . . . .	18
4.2	Interpretazione . . . . .	19
<b>5</b>	<b>Studio di potenziale a lungo raggio</b>	<b>20</b>
5.0.1	Evoluzione temporale generale . . . . .	20
5.0.2	Dipendenza della velocità da $k$ . . . . .	21
<b>6</b>	<b>Conclusioni</b>	<b>23</b>
<b>7</b>	<b>Appendice</b>	<b>24</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>27</b>



## 1 Introduzione

Abbiamo presentato innanzitutto una dimostrazione del vincolo di Lieb-Robinson, che dimostra come in un reticolo con interazione a corto raggio la velocità di trasmissione dell'informazione sia finita, creando un cosiddetto "cono luce". Tale fenomeno è di particolare interesse ed è stato osservato sperimentalmente in reticoli ottici.

Abbiamo poi studiato la diffusione di una particella quantistica in un reticolo unidimensionale soggetta a una serie di potenziali a corto raggio modellizzati tramite l'hamiltoniana  $H$ . Il sistema in rappresentazione di Schrodinger evolve in questo modo:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle \quad (1)$$

Se consideriamo un reticolo finito, cioè con  $N$  posizioni possibili della particella,  $H$  può essere descritta tramite una matrice  $N \times N$ , mentre  $|\psi(t)\rangle$  può essere rappresentata con un vettore  $N$ -dimensionale  $\vec{\psi}(t)$ .

Abbiamo selezionato alcuni potenziali particolarmente significativi e ne abbiamo studiato le proprietà, assumendo che la particella fosse inizialmente localizzata in una posizione  $x$ . In tal modo  $\vec{\psi}(0) = \vec{e}_x$ . Gran parte di questi studi sono stati eseguiti tramite programmi scritti appositamente in linguaggio Python. Essi si sono concentrati essenzialmente sull'analisi della velocità di propagazione della probabilità nel sistema.

Abbiamo poi esposto un'analisi teorica della velocità massima di propagazione dell'informazione in reticoli unidimensionali in cui l'interazione è del tipo  $\frac{1}{r^k}$ , in cui mostriamo come fino a certo valore di  $r$ , dipendente da  $k$ , il modello possa essere approssimato con un potenziale a corto raggio.

Abbiamo infine studiato un potenziale di questo genere in un reticolo unidimensionale finito tramite simulazione. Abbiamo sfruttato anche in questo caso una posizione iniziale  $x$  della particella e considerato l'evoluzione data dall'equazione (1).

## 2 Velocità massima per potenziali a corto raggio

### 2.1 Notazione

Consideriamo un sistema quantistico ristretto a un reticolo  $n$ -dimensionale  $\mathbb{Z}^n$ . Studieremo la velocità massima di propagazione dell'informazione in tale sistema. Associamo ad ogni punto  $\vec{x}$  in  $\mathbb{Z}^n$  uno spazio di Hilbert  $M$ -dimensionale  $\mathcal{H}_{\vec{x}}$  e a ogni insieme finito  $\Lambda \subset \mathbb{Z}^n$   $\mathcal{H}_{\Lambda} = \prod_{\vec{x} \in \Lambda}^{\otimes} \mathcal{H}_{\vec{x}}$ , in cui con  $\otimes$  intendiamo il prodotto tensoriale fra gli spazi di Hilbert. Chiamiamo  $\mathcal{A}_{\Lambda}$  l'algebra delle matrici che agiscono su  $\Lambda$ , cioè l'algebra delle osservabili strettamente locali su  $\Lambda$ . Se  $\Lambda_1 \subset \Lambda_2$  possiamo identificare  $\mathcal{A}_{\Lambda_1}$  che agisce su  $\mathcal{H}_{\Lambda_1}$  con  $\mathcal{A}_{\Lambda_1} \otimes \mathbf{1}_{\Lambda_2 \setminus \Lambda_1}$  che agisce su  $\mathcal{H}_{\Lambda_2}$  (dove con  $\mathbf{1}_{\Lambda_2 \setminus \Lambda_1}$  intendiamo l'operatore identità su  $\mathcal{H}_{\Lambda_2 \setminus \Lambda_1}$ , cioè lo spazio di Hilbert su  $\mathcal{H}_{\Lambda_2}$  complementare a  $\mathcal{H}_{\Lambda_1}$ ). Possiamo dunque dire  $\mathcal{A}_{\Lambda_1} \subset \mathcal{A}_{\Lambda_2}$ . Tramite questa relazione  $\mathcal{A} = \bigcup_{\Lambda \subset \mathbb{Z}^n} \mathcal{A}_{\Lambda}$  è una \*-algebra normata.  $\mathcal{A}$  costituisce nel suo complesso l'algebra delle osservabili semi-locali del sistema.

Definiamo dunque il gruppo delle traslazioni  $\mathbb{T}^n$ . Denoteremo l'azione di questo gruppo tramite  $A \in \mathcal{A}_{\Lambda} \rightarrow \tau_{\vec{x}} A \in \mathcal{A}_{\Lambda + \vec{x}}$  per  $\vec{x} \in \mathbb{Z}^n$ .

Introduciamo l'interazione  $\Phi$ , funzione da insiemi finiti  $X \subset \mathbb{Z}^n$  a elementi  $\Phi(X) \subset \mathcal{A}_X$ . Da tale interazione richiediamo che:

- $\Phi(X)$  è hermitiano per  $X \subset \mathbb{Z}^n$ , cioè  $\Phi(X)$  corrisponde a un'osservabile fisica;
- $\Phi(X + a) = \tau_a \Phi(X)$  per  $X \subset \mathbb{Z}^n$  e  $a \in \mathbb{Z}^n$ ;
- l'unione  $R_{\Phi}$  di tutti gli  $X$  tali che  $X \ni 0$  e  $\Phi(X) \neq 0$  è un sottoinsieme finito di  $\mathbb{Z}^n$

Quest'ultima condizione corrisponde al caso di potenziale a corto raggio, a cui ci restringiamo. Fisicamente significa che solo particelle situate in posizione  $\vec{x} \in R_{\Phi}$  hanno un'interazione diversa da 0 con una particella situata nell'origine. Tali particelle sono dunque in numero finito.

L'hamiltoniana di un sistema limitato  $\Lambda$  con interazione  $\Phi$  è definito dalla relazione  $H_{\Phi}(\Lambda) = \sum_{X \subset \Lambda} \Phi(X)$ . Abbiamo quindi che, in un sistema illimitato, esiste in gruppo di automorfismi a un parametro  $\tau_t^{\Phi}$  su  $\mathcal{A}$ , tale che per ogni  $A \in \mathcal{A}$  e  $t \in \mathbb{R}$  esiste un elemento  $\tau_t^{\Phi}(A) \in \mathcal{A}$  che rispetta le seguenti proprietà:

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \left\| \tau_t^{\Phi}(A) - e^{itH_{\Phi}(\Lambda)} A e^{-itH_{\Phi}(\Lambda)} \right\| = 0 \quad (2)$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \left\| \tau_t^{\Phi}(A) - A \right\| = 0$$

Da ciò segue naturalmente che:

$$\tau_t^{\Phi}(AB) = \tau_t^{\Phi}(A) \tau_t^{\Phi}(B) \quad (3)$$

La funzione  $t \rightarrow \tau_t^{\Phi}(A)$  con  $A \in \mathcal{A}_{\Lambda}$  è analitica per  $t \in \mathbb{R}$ , per cui:

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \left\| \frac{d}{dt} \tau_t^{\Phi}(A) - \frac{d}{dt} (e^{itH_{\Phi}(\Lambda)} A e^{-itH_{\Phi}(\Lambda)}) \right\| = 0 \quad (4)$$

### 2.2 Commutatori locali

Vogliamo studiare, per  $A, B \in \mathcal{A}_{\Lambda}$  (cioè  $A$  e  $B$  strettamente locali) il comportamento del commutatore:

$$C_{A,B}(x, t) = [\tau_t^{\Phi} \tau_{\vec{x}}(A), B] \quad (5)$$

In particolare vogliamo analizzare tale commutatore per  $|\vec{x}| \rightarrow \infty$  e  $|t| \rightarrow \infty$  e da ciò dedurre che l'informazione si propaga con una velocità di gruppo finita  $V_{\Phi}$ . In particolare dimostreremo la seguente proprietà:

Per ogni interazione a corto raggio  $\Phi$  esiste una velocità  $V_{\Phi}$  e una funzione crescente strettamente positiva  $\mu$  tale che per  $|\vec{v}| > V_{\Phi}$ :

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty, |\vec{x}| \rightarrow |\vec{v}|t} e^{\mu(|\vec{v}|)|t|} \left\| [\tau_t^{\Phi} \tau_{\vec{x}}(A), B] \right\| = 0 \quad (6)$$

per ogni  $A$  e  $B$  strettamente locali.

Ci limiteremo a studiare il caso in cui  $A, B \in \mathcal{A}_{\{0\}}$ . Ciò ci è sufficiente perché, per  $A, B \in \mathcal{A}_\Lambda$ , possiamo riscrivere  $A$  e  $B$  come un polinomio di elementi  $\mathcal{A}_{\{\vec{x}\}}$  con  $\vec{x} \in \Lambda$ .  $\|C_{A,B}(\vec{x}, t)\|$  è limitato dalla somma finita del modulo di commutatori fra  $A \in \mathcal{A}_{\{\vec{x}\}}$  e  $B \in \mathcal{A}_{\{\vec{y}\}}$  con  $\vec{x}, \vec{y} \in \Lambda$ . Per invarianza per traslazioni possiamo porre ogni singolo commutatore come commutatore fra  $A, B \in \mathcal{A}_{\{0\}}$ . Inoltre per la seguente dimostrazione considereremo  $t > 0$ . Il caso per cui  $t < 0$  si può dedurre facilmente notando che  $\tau_{-t}^\Phi = \tau_t^{-\Phi}$ . Come vedremo la dimostrazione che seguirà è indipendente dal segno dell'interazione  $\Phi$ .

### 2.2.1 Dimostrazione

Sappiamo che  $\mathcal{H}_{\{0\}}$  ha dimensione finita  $M$ . Possiamo dunque scegliere una base  $a_1, \dots, a_{M^2}$  di  $\mathcal{A}_{\{0\}}$  chiusa per commutazione tale che  $\|a_i\| = 1$ . Possiamo dunque riscrivere ogni osservabile  $A \in \mathcal{A}_{\{0\}}$  tramite:

$$A = \sum_{i=1}^{M^2} P_i(A) a_i \quad (7)$$

con  $P_i(A) \in \mathbb{C}$ . Tale decomposizione è unica e può essere estesa anche per  $A \in \mathcal{A}_{\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_L\}}$  tramite la relazione:

$$A = \sum_{i_1=1}^{M^2} \cdots \sum_{i_L=1}^{M^2} e(i_1, \dots, i_L; A) \prod_{j=1}^L \tau_{x_j}(a_{i_j}) \quad (8)$$

Con  $e \in \mathbb{C}$ .

Consideriamo, per  $B \in \mathcal{A}_{\{0\}}$  fissato:

$$C_j(\vec{x}, t) = [\tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}}(a_j), B] \quad (9)$$

$$F_j(\vec{x}, t) = \|C_j(\vec{x}, t)\|$$

Tramite le relazioni descritte nella sezione precedente possiamo ottenere la seguente equazione:

$$\frac{d}{dt} C_j(\vec{x}, t) = i \sum_{X \ni 0} [\tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}}([\Phi(X), a_j]), B] \quad (10)$$

Per ogni insieme  $X$  nella somma il corrispondente  $\Phi(X)$  può essere riscritto come polinomio di elementi  $\tau_{\vec{y}}(a_j)$ ,  $\vec{y} \in X$ ,  $j = 1, \dots, M^2$  (come qualsiasi altra matrice  $A \in \mathcal{A}_X$ ). Abbiamo dunque che il singolo commutatore  $D_j(X) = [\Phi(X), a_j]$  è dunque un polinomio dello stesso tipo, poiché  $a_j$  commuta con tutti i  $\tau_{\vec{y}}(a_k)$  per  $\vec{y} \neq \vec{0}$  e  $[a_k, a_j]$  è ancora elemento della base  $a_1, \dots, a_{M^2}$ . Ogni singolo monomio  $S$  in  $D_j(X)$  è quindi della forma:

$$S = \prod_{\vec{y} \in X} \tau_{\vec{y}}(a_{j(\vec{y})}) \quad (11)$$

Abbiamo dunque:

$$\tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}}(S) = \prod_{\vec{y} \in X} \tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}+\vec{y}}(a_{j(\vec{y})}) \quad (12)$$

Il commutatore  $[\tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}}(S), B]$  sarà quindi somma di  $N(X)$  termini ( $N(X)$  è il numero di punti appartenenti a  $X$ ). Ciascun termine è composto  $[\tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}+\vec{y}}(a_{j(\vec{y})}), B]$ , con gli altri elementi  $\tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}+\vec{z}}(a_{i(\vec{z})})$  (con  $\vec{z} \neq \vec{y}$  e  $\vec{z} \in X$ ) lasciati come coefficienti. Tali coefficienti hanno norma uno (poiché i singoli  $a_j$  hanno norma uno e automorfismi preservano la norma). Di conseguenza:

$$\|[\tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}}(S), B]\| \leq \sum_{y \in X} \|[\tau_t^\Phi \tau_{\vec{x}+\vec{y}}(a_{j(\vec{y})}), B]\| \quad (13)$$

e

$$\left\| \frac{dC_i(\vec{x}, t)}{dt} \right\| \leq \sum_{\vec{y} \in R^\Phi} \sum_{j=1}^{M^2} d_{j,i}(\Phi, \vec{y}) F_j(\vec{x} + \vec{y}, t) \leq \sum_{\vec{y} \in R^\Phi} \sum_{j=1}^{M^2} d_{i,j}(\Phi) F_j(\vec{x} + \vec{y}, t) =: \quad (14)$$

$$=: (\mathcal{L}F)_i(\vec{x}, t)$$

dove  $d_{j,i}(\Phi, \vec{y})$  è un coefficiente non negativo che dipende dall'interazione  $\Phi$  e dal punto  $\vec{y}$ . Abbiamo definito inoltre  $d_{j,i}(\Phi) = \max_{\vec{y} \in R_\Phi} d_{j,i}(\Phi, \vec{y})$ . Ci è possibile definire tale massimo in virtù del fatto che l'interazione sia a corto raggio e che dunque  $R_\Phi$  sia finito.

Inoltre, definita  $\mathcal{D}_t$  la derivata superiore in  $t$ , per disuguaglianza triangolare abbiamo:

$$\left\| \frac{dC_i(\vec{x}, t)}{dt} \right\| \geq \mathcal{D}_t F_i(\vec{x}, t) \quad (15)$$

Troviamo quindi la disuguaglianza:

$$\mathcal{D}_t F_i(\vec{x}, t) \leq (\mathcal{L}F)_i(\vec{x}, t) \quad (16)$$

Abbiamo inoltre condizione iniziale:

$$F_i(\vec{x}, 0) = \omega_i \delta_{\vec{x}, \vec{0}} \quad (17)$$

dove  $\delta_{\vec{x}, \vec{0}}$  è la delta di Kronecker e  $\omega_i = \|[a_i, B]\|$ .

Difiniamo ora la funzione di Green  $G_i^k(\vec{x}, t)$  tramite le equazioni:

$$\frac{\partial G_i^k(\vec{x}, t)}{\partial t} = (\overline{\mathcal{L}}G^k)_i(\vec{x}, t) \quad (18)$$

$$G_j^k(\vec{x}, 0) = \delta_{\vec{x}, \vec{0}} \delta_{j,k}$$

dove  $\overline{\mathcal{L}}$  è l'aggiunto di  $\mathcal{L}$ .

Detta  $\mathbf{G}(\vec{x}, t)$  la matrice il cui elemento  $i, j$  è  $G_j^i(\vec{x}, t)$  e  $\mathbf{D}$  la matrice il cui elemento  $i, j$  è  $d_{i,j}$ , le equazioni appena presentate ci portano alla seguente espressione esplicita:

$$\mathbf{G}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \dots \int_0^{2\pi} d\theta_n e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{x}} e^{t\alpha(\vec{\theta}) \mathbf{D}} \quad (19)$$

Dove  $\alpha(\theta) = \sum_{\vec{y} \in R_\Phi} e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{y}}$ . Da tale formula segue l'analiticità di  $G_j^i(\vec{x}, t)$ . Possiamo invece dedurre dalle equazione (18) che  $G_j^i(\vec{x}, t) \geq 0$ . Da esse deriva infatti:

$$G_j^i(\vec{x}, 0) \geq 0, \quad \frac{dG_j^i}{dt} \geq 0, \quad \frac{d^2 G_j^i}{dt^2} \geq 0, \dots \quad (20)$$

Ora notiamo che per ogni  $\vec{y} \in \mathbb{Z}^n$  abbiamo  $\vec{\gamma}$  tale che:

$$|\alpha(\vec{\theta} + i\vec{\gamma})| \leq \alpha(i\vec{\gamma}) = \sum_{\vec{y} \in R_\Phi} e^{-\vec{\gamma} \cdot \vec{y}} \quad (21)$$

Inoltre è facile notare che  $\mathbf{G}(\vec{x}, t)$  può essere riscritto tramite:

$$\mathbf{G}(\vec{x}, t) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \dots \int_0^{2\pi} d\theta_n e^{i(\vec{\theta} + i\vec{\gamma}) \cdot \vec{x}} e^{t\alpha(\vec{\theta} + i\vec{\gamma}) \mathbf{D}} \quad (22)$$

Tale equazione soddisfa infatti la condizione al contorno e l'equazione differenziale (18). Otteniamo quindi:

$$\|\mathbf{G}(\vec{v}t, t)\| \leq e^{-\vec{\gamma} \cdot \vec{v}t} \frac{1}{(2\pi)^n} \left| \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \dots \int_0^{2\pi} d\theta_n e^{i\vec{\theta} \cdot \vec{x}} e^{t\alpha(i\vec{\gamma}) \|\mathbf{D}\|} \right| = e^{(-\vec{\gamma} \cdot \vec{v} + \alpha(i\vec{\gamma}) \|\mathbf{D}\|)t} \quad (23)$$

Di conseguenza per  $|\vec{v}|$  sufficientemente grande c'è sicuramente  $\vec{\gamma}$  tale che:

$$\|\mathbf{D}\| \alpha(i\vec{\gamma}) - \vec{\gamma} \cdot \vec{v} \leq 0 \quad (24)$$



Da tale relazione troviamo che esiste  $V_\Phi > 0$  e una funzione crescente  $\mu(|\vec{v}|) > 0$  tale che, per  $|\vec{v}| > V_\Phi$ :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} e^{\mu(|\vec{v}|)t} G_j^i(\vec{x}, t) = 0 \quad (25)$$

Ora, recuperando l'equazione (17) e la non negatività di  $G_i^k(\vec{x}, t)$  possiamo impostare la seguente uguaglianza:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{M^2} \sum_{\vec{x} \in \mathbb{Z}^n} \int_0^{t'} dt G_i^k(\vec{y} - \vec{x}, t' - t) (\mathcal{L}F)_i(\vec{x}, t) &\geq \sum_{i=1}^{M^2} \sum_{\vec{x} \in \mathbb{Z}^n} \int_0^{t'} dt G_i^k(\vec{y} - \vec{x}, t' - t) (\mathcal{D}_t F)_i(\vec{x}, t) = \\ &= \sum_{i=1}^{M^2} \sum_{\vec{x} \in \mathbb{Z}^n} [G_i^k(\vec{y} - \vec{x}, t' - t) F_i(\vec{x}, t)]_{t=0}^{t=t'} - \sum_{i=1}^{M^2} \sum_{\vec{x} \in \mathbb{Z}^n} \int_0^{t'} dt (\mathcal{D}_t G_i^k)(\vec{y} - \vec{x}, t' - t) F_i(\vec{x}, t) = \\ &= F_k(\vec{y}, t) - \sum_{i=1}^{M^2} G_i^k(\vec{y}, t) \omega_i + \sum_{i=1}^{M^2} \sum_{\vec{x} \in \mathbb{Z}^n} \int_0^{t'} dt G_i^k(\vec{y} - \vec{x}, t' - t) (\mathcal{L}F)_i(\vec{x}, t) \end{aligned} \quad (26)$$

Dove abbiamo integrato per parti e sfruttato le condizioni al contorno precedentemente presentate. Da ciò deduciamo:

$$0 \leq F_k(\vec{x}, t) \leq \sum_{i=1}^{M^2} G_i^k(\vec{x}, t) \omega_i \quad (27)$$

Ciò, date le proprietà già presentate di  $G_i^k(\vec{x}, t)$ , conclude la dimostrazione.

### 3 Studio di potenziali

#### 3.1 Potenziale di hopping costante

Affrontiamo ora lo studio di un potenziale di hopping costante, cioè la cui hamiltoniana è descritta da una matrice  $H(s)$  ( $s \in \mathbb{R}$  costante caratteristica del sistema) in cui  $H(s)_{i,j} = s \cdot (\delta_{i,j-1} + \delta_{i,j+1})$ . Abbiamo dunque:

$$H(s) = \begin{pmatrix} 0 & s & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ s & 0 & s & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & s & 0 & s & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & s & 0 \end{pmatrix}$$

Detta  $T$  la matrice definita tramite  $T_{i,j} = \delta_{i,j-1} + \delta_{i,j+1}$  risulta evidente che  $|\psi_s(t)\rangle = e^{-iH(s)t}|\psi(0)\rangle = e^{-iT \cdot st}|\psi(0)\rangle$ . Otteniamo dunque che  $|\psi_s(t)\rangle = |\psi_1(ts)\rangle$ . Ci è quindi sufficiente studiare il caso in cui  $s = 1$  e  $H(s) = T$ . Tutte le altre configurazioni deriveranno da questa tramite un riscaldamento dei tempi.

Troviamo autovettori ortonormali  $\vec{v}_n$  e autovalori  $\lambda_n$  della matrice  $T$ . Ci è possibile scomporre  $\vec{\psi}(0) = \vec{e}_x$  nella base composta dagli autovettori normalizzati tramite la relazione  $\vec{e}_x = \sum_{n=1}^N v_n(x)\vec{v}_n$  (in cui con  $v_n(x)$  abbiamo indicato la componente x-esima dell'n-esimo autovettore). Abbiamo dunque  $\vec{\psi}(t) = \sum_{n=1}^N e^{-i\lambda_n t} v_n(x)\vec{v}_n$ . La probabilità di trovare la particella in posizione  $y$  al tempo  $t$  è  $P(y, t) = |\psi(y, t)|^2$ .

##### 3.1.1 Risultati analitici preliminari

Detto  $P_n(x)$  il polinomio caratteristico della matrice  $T$  di dimensione  $n \times n$ , abbiamo le seguenti relazioni:

- $P_1(x) = -x$
- $P_2(x) = x^2 - 1$
- $P_n(x) = -xP_{n-1}(x) - P_{n-2}$

Grazie a queste equazioni ci è possibile scrivere il polinomio caratteristico tramite una formula analitica (dimostrabile facilmente tramite induzione):

$$P_n(x) = \sum_{r=0}^n \frac{(1 + (-1)^r)}{2} (-1)^{\frac{r}{2} + [n]_2} \binom{n - \frac{r}{2}}{\frac{r}{2}} x^{n-r}$$

In cui con  $[n]_2$  intendiamo il modulo di  $n$  in base 2. Detti  $\lambda_j$  con  $1 \leq j \leq n$  gli autovalori della matrice ci è possibile trovare i corrispondenti autovettori (ancora non normalizzati) tramite le seguenti relazioni:

- $v_i(2) = \lambda_i v_i(1)$
- $v_i(j) = \lambda_i v_i(j-1) - v_i(j-2)$
- $v_i(n-1) = \lambda_i v_i(n)$

Supponiamo che  $v_i(j) = A \sin(j\theta_i) + B \cos(j\theta_i)$ . Imponendo la relazione appena esposta tra le componenti degli autovettori abbiamo:

$$\begin{aligned} \lambda_i v_i(j) &= \lambda_i (A \sin(j\theta_i) + B \cos(j\theta_i)) = \\ &= A \sin((j-1)\theta_i) + B \cos((j-1)\theta_i) + A \sin((j+1)\theta_i) + B \cos((j+1)\theta_i) = \\ &= A(2 \sin(j\theta_i) \cos(\theta_i)) + B(2 \cos(\theta_i) \cos(j\theta_i)) = 2 \cos(\theta_i) v_i(j) \end{aligned} \tag{28}$$

Troviamo dunque che  $\lambda_i = 2\cos(\theta_i)$ . Sfruttando le condizioni al contorno nelle relazioni fra componenti troviamo:

$$\begin{cases} A\sin(2\theta_i) + B\cos(2\theta_i) = 2\cos(\theta_i)(A\sin(\theta_i) + B\cos(\theta_i)) \\ A\sin((n-1)\theta_i) + B\cos((n-1)\theta_i) = 2\cos(\theta_i)(A\sin(n\theta_i) + B\cos(n\theta_i)) \end{cases} \quad (29)$$

$$\begin{cases} A(\sin(2\theta_i) - 2\cos(\theta_i)\sin(\theta_i)) + B(\cos(2\theta_i) - 2\cos^2(\theta_i)) = 0 \\ A(\sin((n-1)\theta_i) - 2\cos(\theta_i)\sin(n\theta_i)) + B(\cos((n-1)\theta_i) - 2\cos(\theta_i)\cos(n\theta_i)) = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} B(-\sin^2(\theta_i) - \cos^2(\theta_i)) = 0 \\ A(-\sin(n\theta_i)\cos(\theta_i) - \sin(\theta_i)\cos(n\theta_i)) + B(\cos((n-1)\theta_i) - 2\cos(\theta_i)\cos(n\theta_i)) = 0 \end{cases}$$

Troviamo quindi  $B = 0$ . Di conseguenza  $0 = -\sin(n\theta_j)\cos(\theta_j) - \sin(\theta_j)\cos(n\theta_j) = -\sin((n+1)\theta_j)$ , che ha soluzioni  $\theta_j = \frac{j\pi}{n+1}$ . Gli autovalori sono dunque  $\lambda_j = 2\cos(\frac{j\pi}{n+1})$ . Nel caso in cui  $s \neq 1$  troviamo quindi  $\lambda_j(s) = 2s\cos(\frac{j\pi}{n+1})$ . Gli autovettori sono invece indipendenti da  $s$  e possono essere ricavati tramite la formula ricorsiva presentata.

### 3.1.2 Evoluzione temporale generale

Abbiamo eseguito queste operazioni per diversi tempi tramite programma, considerando un reticolo con  $N=101$  e  $x=51$ , e ottenuto il seguente grafico (in cui a colori più scuri corrispondono probabilità più alte):

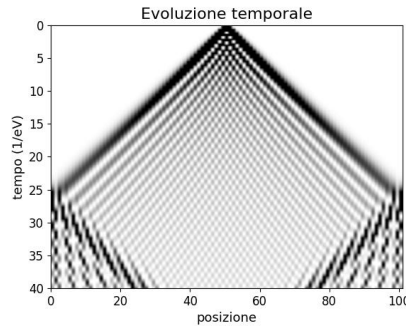


Figura 1: Evoluzione temporale della distribuzione di probabilità con hopping costante

Risulta graficamente che il fronte d'onda principale si muove a velocità costante. Per dimostrare più rigorosamente questo risultato definiamo "tempo di raggiungimento" per una data posizione il tempo per cui in tale posizione abbiamo probabilità massima nell'intervallo di tempi selezionato. Grafichiamo il tempo di raggiungimento per le diverse posizioni, sfruttando come intervallo di tempi  $(0 - 30)\frac{1}{eV}$  ed escludendo le ultime 5 posizioni per evitare che tale tempo non si riferisca al fronte d'onda diretto ma alla sua riflessione sulle pareti.

L'incertezza sul tempo di raggiungimento è stata stimata come  $\frac{t^+ - t^-}{2}$ , in cui  $t^+$  è il primo tempo successivo al tempo di raggiungimento in cui la probabilità è inferiore al 60% di quella massima, mentre  $t^-$  è l'ultimo tempo precedente al tempo di raggiungimento in cui la probabilità è inferiore al 60% di quella massima. Tale stima è stata applicata anche nei casi successivi ed è stata scelta come approssimazione di una deviazione standard nel caso di un fronte d'onda di forma gaussiana. Infatti il fronte d'onda tende ad allargarsi nell'evoluzione ed è difficile considerare con esattezza il suo centro. Di seguito il grafico dei risultati, in cui poniamo come 1 la posizione immediatamente successiva a  $x$ :

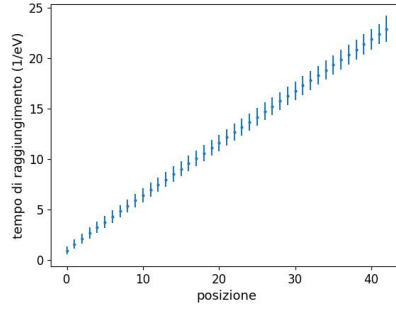


Figura 2: Tempo di raggiungimento della probabilità di soglia

Tale distribuzione ha indice di Pearson  $p = 0,999992$  (ove  $p(x, y) = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_x \sigma_y}$ ), abbondantemente compatibile con una velocità costante del fronte d'onda. Operando un'interpolazione lineare otteniamo  $t = mx + q$ , con  $m = (0,52 \pm 0,05) \frac{1}{eV}$  e  $q = (0,5 \pm 0,7) \frac{1}{eV}$ . Notiamo innanzitutto che l'ordinata all'origine è compatibile con 0, come ci aspettavamo. Inoltre da questi dati possiamo trovare la velocità  $v = (1,9 \pm 0,2)eV$ . Tale valore è compatibile con  $v = 2$ , che ci aspetteremmo per considerazioni teoriche. Infatti la velocità massima di gruppo corrisponde a  $\max(\frac{dE}{dk}) = \max(\frac{d\lambda_j}{d(\frac{j\pi}{n+1})}) = 2$ .

### 3.1.3 Coerenza con il modello teorico

Verifichiamo rapidamente che il nostro programma confermi  $|\psi_s(t)\rangle = |\psi_1(ts)\rangle$ . Ripercorriamo la diagonalizzazione di  $H(s)$  e, facendo variare  $s$ , consideriamo il tempo di raggiungimento  $t$  della posizione  $N - 10$ . Per scegliere l'intervallo di tempo in cui considerare il tempo di raggiungimento abbiamo precedentemente operato una stima approssimativa in cui abbiamo graficato il tempo  $t^r$  in cui, in posizione  $N - 10$ , si raggiunge una probabilità del 3% e successivamente considerato un intervallo  $[0, \frac{1}{10}t^r]$ .

In base a tali tempi calcoliamo la velocità  $v(s) = \frac{N-10}{t}$  di diffusione al variare di  $s$  tra 0,1 eV e 5 eV. Ci aspettiamo che i tempi siano inversamente proporzionali a  $s$ , mentre le velocità direttamente proporzionali. Grafichiamo inoltre la velocità teorica:

$$v_t(s) = \max(\lambda_{j+1}(s) - \lambda_j(s)) \frac{N+1}{\pi} \quad (30)$$

in cui gli autovalori  $\lambda_j(s)$  sono ordinati in ordine crescente. Questa forma è un'approssimazione discretizzata della normale formula della velocità di gruppo  $v_g = \frac{dE}{dk}$ , in cui consideriamo la velocità massima. Di seguito i risultati:

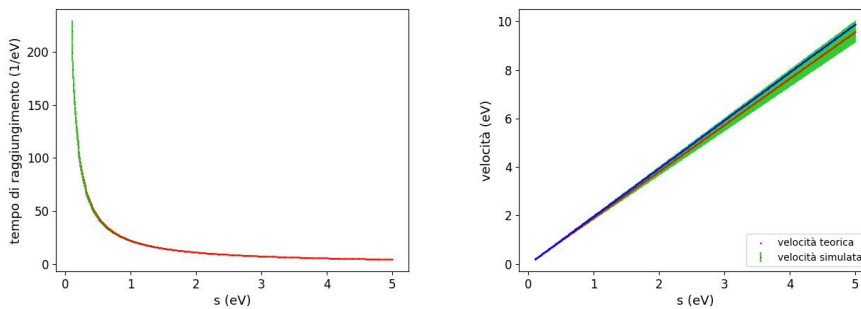


Figure 3 e 4: Tempi di raggiungimento e velocità al variare di  $s$

Vediamo che non ci sono particolari discrepanze con il modello lineare. In particolare l'indice di Pearson per la seconda distribuzione è  $p = 0.999996$ . Tramite interpolazione lineare troviamo che la velocità è  $v(s) = m \cdot s + q$ , con  $m = 1,9 \pm 0,2$  e  $q = (0,0 \pm 0,3) eV$ .

Tale stima è coerente con la precedente. Inoltre, come ci aspettavamo, l'ordinata all'origine è abbondantemente compatibile con 0.

L'accordo con il modello teorico è piuttosto buono: anche se si nota una certa deviazione, essa è comunque all'interno dell'incertezza

### 3.2 Potenziale con energie onsite dimerizzate

Passiamo al potenziale con energie onsite dimerizzate, descritto tramite la relazione:

$$H(s, a, b)_{i,j} = s \cdot (\delta_{i,j-1} + \delta_{i,j+1}) + \delta_{i,j} \frac{1}{2} [(1 + (-1)^i)b - (-1 + (-1)^i)a] \quad (a, b, s \in \mathbb{R}).$$

$$H(s, a, b) = \begin{pmatrix} a & s & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ s & b & s & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & s & a & s & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & s & b & s & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & b & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & b & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & b & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} + s \cdot \begin{pmatrix} \frac{a-b}{s} & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & \frac{a-b}{s} & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} =$$

$$= b \cdot \mathbf{1} + s \cdot K\left(\frac{a-b}{s}\right)$$

Definiamo  $r = \frac{a-b}{s}$ . Detti  $\vec{v}_{r,n}$  gli autovettori ortonormali di  $K(r)$  e  $\lambda_n(r)$  i rispettivi autovalori, abbiamo che  $\vec{\psi}_{b,s,r}(0) = \sum_{n=1}^N v_{r,n}(x) \vec{v}_{r,n}$ . Otteniamo  $\vec{\psi}_{b,s,r}(t) = \sum_{n=1}^N e^{-i(b\mathbf{1} + s \cdot K(r))t} v_{r,n}(x) \vec{v}_{r,n} = \sum_{n=1}^N e^{-i(bt + st\lambda_n(r))} v_{r,n}(x) \vec{v}_{r,n}$ . Abbiamo quindi che  $\vec{\psi}_{b,s,r}(t) = e^{-ibt} \vec{\psi}_{0,1,r}(st)$ . Poiché noi siamo interessati non alla funzione d'onda in quanto tale ma alla probabilità, abbiamo che  $P_{b,s,r}(y, t) = P_{0,s,r}(y, t) =: P_{s,r}(y, t) = P_{1,r}(y, st)$ . Notiamo che  $r$  è quindi l'unico parametro significativo nello studio della diffusione della particella, mentre  $b$  non ha effetto nell'evoluzione della probabilità e  $s$  ha un effetto equivalente a quello che aveva  $s$  nel caso dell'hopping costante.

Di seguito, a titolo esemplificativo, mostriamo la simulazione dell'evoluzione del sistema per diverso valore di  $b$  e uguale valore di  $r$ :

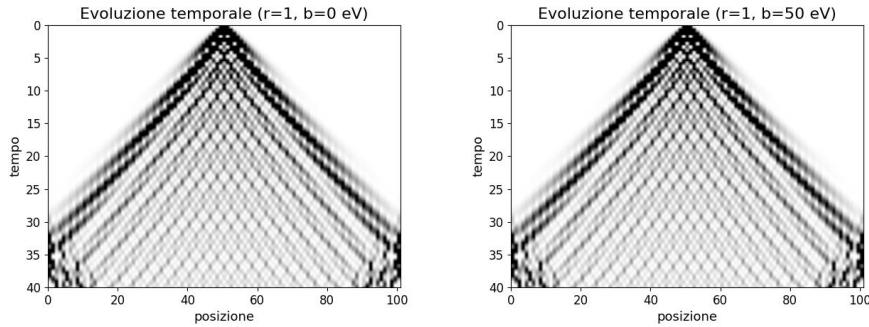
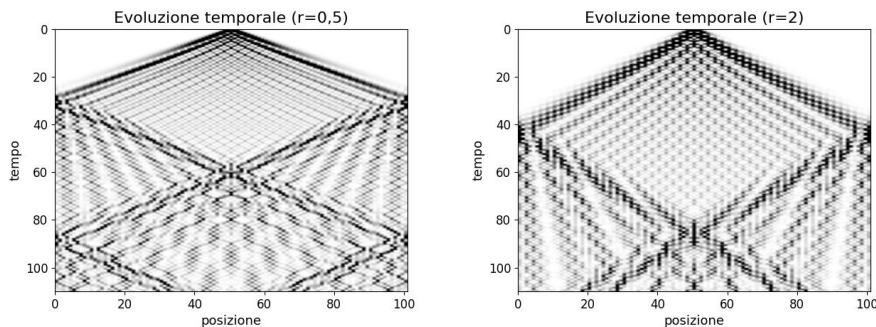


Figure 5 e 6: Confronto di evoluzione temporale per  $b = 0$  eV e  $b = 50$  eV

Come ci aspettavamo i due sistemi evolvono nello stesso modo. La successiva analisi sarà dunque compiuta in funzione di  $r$ .

#### 3.2.1 Evoluzione temporale generale

Proviamo a vedere l'evoluzione temporale per alcuni valori di  $r$  in modo da inquadrare la situazione, imponendo  $N = 101$  e  $x = 51$ . Per semplicità consideriamo  $r \geq 0$  (per  $r \leq 0$  è sufficiente definire  $K'(r') = \frac{H(s,a,b)-a\mathbf{1}}{s}$  con  $r' = \frac{b-a}{s}$ , il che implicherebbe solo un'inversione di parità nel sistema e lievi effetti di bordo):



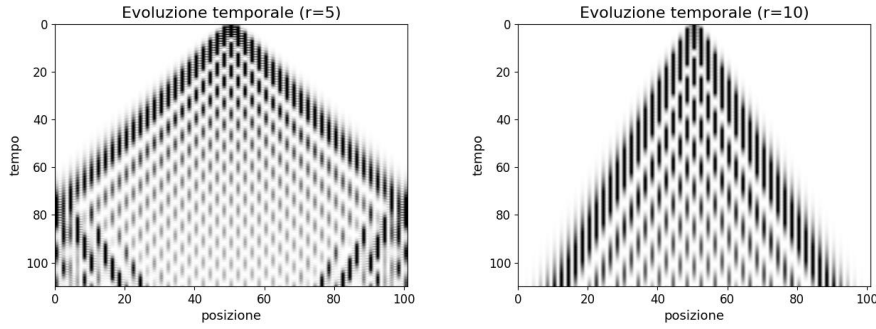


Figure 7, 8, 9 e 10: Evoluzione temporale della distribuzione di probabilità con  $r = 0, 5, r = 2, r = 5$  e  $r = 10$

Notiamo che in questo caso il fronte d'onda principale è composizione di fronti d'onda secondari ravvicinati, più densi e corti al crescere di  $r$ . In ciascun caso la velocità può ancora essere considerata costante, ma, specie per valori di  $r$  bassi, ci aspettiamo risultati meno puliti rispetto al caso analogo precedente (3.1.2). Notiamo inoltre che, al crescere di  $r$ , diventa sempre meno probabile trovarsi in una posizione  $y$  tale per cui  $[x - y]_2 = 1$ .

Grafichiamo dunque di nuovo i tempi di raggiungimento  $t$  al variare della posizione per diversi valori di  $r$ , seguendo il procedimento già descritto:

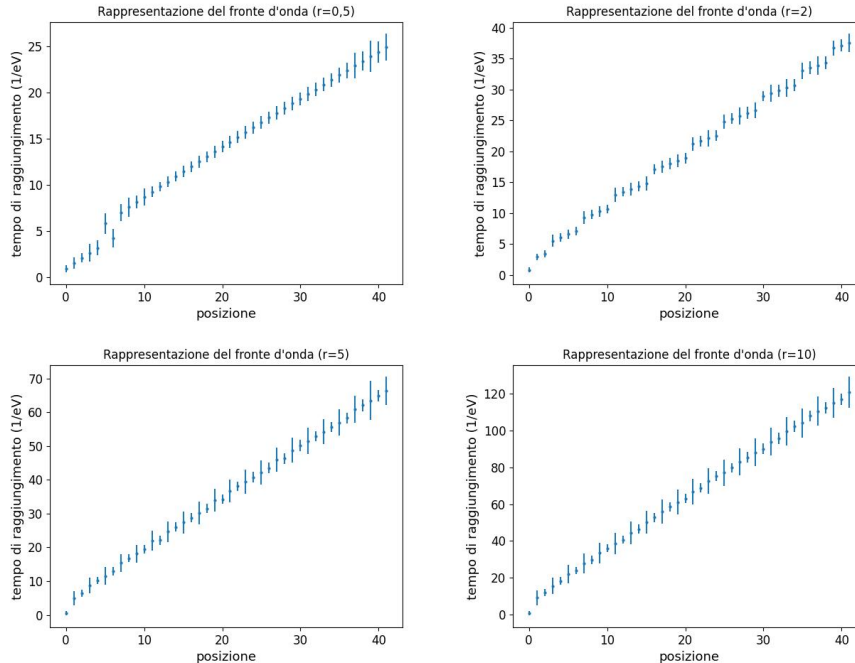


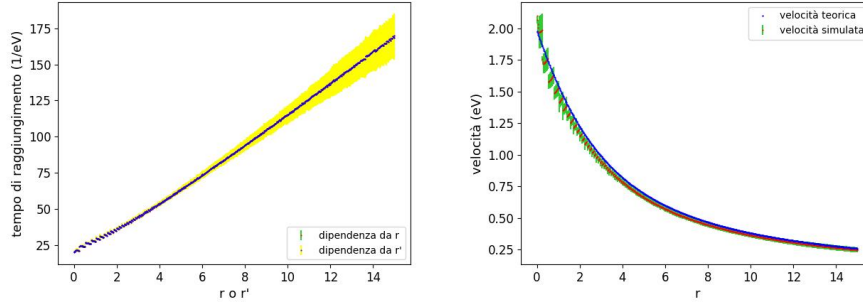
Figure 11, 12, 13 e 14: Tempo di raggiungimento con  $r = 0, 5, r = 2, r = 5$  e  $r = 10$

Come ci aspettavamo si notano diversi fronti d'onda ravvicinati. Vediamo anche che al crescere di  $r$  il tempo di raggiungimento  $t$  ha incertezze notevolmente più ampie per posizioni con la stessa parità di  $x$ . Ciò è dovuto all'asimmetria già descritta, per cui il fronte d'onda si riduce sia in intensità che in ampiezza in posizioni con parità opposta ad  $x$ .

L'indice di Pearson, anche se meno alto che nel caso dell'hopping costante, è comunque compreso tra  $p = 0,997$  e  $p = 0,9996$ . Possiamo dunque lavorare nell'approssimazione di un singolo fronte d'onda che si muove a velocità costante. Tale velocità è chiaramente decrescente al crescere di  $r$ .

### 3.2.2 Dipendenza della velocità da $r$

Grafichiamo, al variare di  $r$ , il tempo di raggiungimento  $t(r)$  in posizione  $N - 11$  per  $0 \leq r \leq 15$ . A tale grafico sovrapponiamo quello equivalente di  $t(r')$  con dipendenza da  $r'$  e evoluzione data da  $K'(r')$ . Grafichiamo inoltre la velocità  $v(r) = \frac{N-11-x}{t(r)}$ , comparata con il valore teorico  $v_t(r)$  (eq. (30)). Di seguito i risultati:

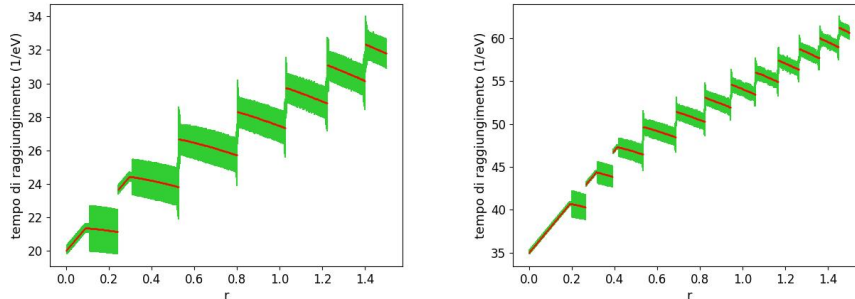
Figure 15 e 16: Tempi di raggiungimento e velocità al variare di  $r$ 

Come ci aspettavamo non ci sono significative deviazioni tra l'evoluzione data da  $K(r)$  e quella data da  $K'(r')$ , né con il modello teorico. Notiamo che il tempo di raggiungimento  $t(r)$  ha un andamento lineare, che viene leggermente distorto per valori molto bassi di  $r$ .

Cerchiamo di comprendere se questa distorsione sia intrinseca del sistema o un risultato dato dalla limitata capacità di calcolo del computer e dalla scelta arbitraria della dimensione del reticolo.

Operando un'interpolazione lineare per  $r$  compreso tra 5 e 20 otteniamo  $t = r \cdot (10 \pm 1) \frac{1}{eV} + (11,4 \pm 0,1) \frac{1}{eV}$  e una conseguente  $v(r) = \frac{N-11-x}{t}$ . Imponendo  $r = 0$  dovremmo riottenere la velocità stimata nel caso di hopping costante. Invece otteniamo  $v(0) = 3,51 \pm 0,03$  eV.

Il tempo di raggiungimento per  $r = 0$  è invece  $t^{r=0} = 20,0 \pm 0,1 \frac{1}{eV}$ , con conseguente velocità  $v(0) = 2,00 \pm 0,01$  eV, che è compatibile con il risultato per hopping costante. Giungiamo quindi alla conclusione che l'andamento per  $r$  bassi sia genuinamente non lineare. Di seguito un ingrandimento del tempo di raggiungimento per  $r$  bassi con  $N = 101$ ,  $x = 51$  e  $N = 201$ ,  $x = 101$ . Decidiamo di avere un dettaglio anche per una catena di lunghezza maggiore per rendere l'andamento più visibile, dato che la lunghezza di un fronte d'onda secondario è meno significativa rispetto alla lunghezza del sistema. Di seguito i risultati:

Figure 17 e 18: Tempi di raggiungimento per  $0 \leq r \leq 1,5$  con  $N = 101$  e  $N = 201$ 

Notiamo un effettivo discostamento dal modello lineare.

Ci chiediamo quindi se l'andamento, esclusi gli  $r$  piccoli, sia veramente lineare. Proviamo a operare un'altra interpolazione lineare, ponendo  $r$  compreso fra 140 e 150. troviamo  $t = r \cdot (11 \pm 1) \frac{1}{eV} + (11,6 \pm 0,2) \frac{1}{eV}$ , una retta compatibile con quella trovata per i valori di  $r$  tra 5 e 20. Ciò ci porta a pensare che, esclusi valori di  $r$  molto bassi, l'andamento temporale sia genuinamente lineare.

### 3.2.3 Dipendenza dell'asimmetria da $r$

Imponiamo ora  $N = 100$  e  $x = 50$ . Chiamiamo  $t_i = 5000 + 5000 \frac{i}{250}$  con  $1 \leq i \leq 250$ . Definiamo  $P_i^+ = \sum_{y|[y-x]_2=0} P(y, t_i)$ ,  $P_i^- = \sum_{y|[y-x]_2=1} P(y, t_i)$ . Abbiamo quindi  $P^+ = \langle P_i^+ \rangle$ , con incertezza  $\delta(P^+) = \frac{\sigma(P_i^+)}{\sqrt{250}}$  e  $P^- = \langle P_i^- \rangle$ , con incertezza  $\delta(P^-) = \frac{\sigma(P_i^-)}{\sqrt{250}}$ . L'indice di asimmetria fra posizioni a parità uguale a  $x$  e posizioni a parità oposta è definito  $A = P^+ - P^-$ , con incertezza  $\delta(A)$  stimata tramite propagazione degli errori. Eseguiamo questa analisi sia sfruttando l'evoluzione data da  $K(r)$  sia quella data da  $K'(r')$ . Analizziamo inoltre una proposta di linearizzazione, ponendo sull'asse delle ascisse  $f(A) = \sqrt{\frac{A}{1-A}}$  (anche qui incertezza stimata tramite propagazione degli errori). Di seguito i

risultati:

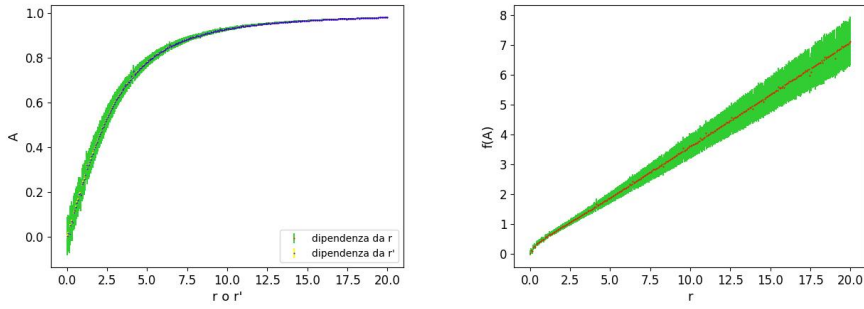


Figure 19 e 20: Dipendenza di  $A$  e di  $f(a)$  da  $r$  e  $r'$

Notiamo innanzitutto che, come ci aspettavamo, non ci sono differenze significative fra l'evoluzione data da  $K(r)$  e quella data da  $K'(r')$ . La linearizzazione ha un buon comportamento, con indice di Pearson  $p = 0,99997$ , da cui però tende a discostarsi per  $r \rightarrow 0$ . Concentriamoci su questa zona e confrontiamola con una nel regime lineare, per comprendere se sia una caratteristica fondante del sistema o un problema di calcolo della simulazione:

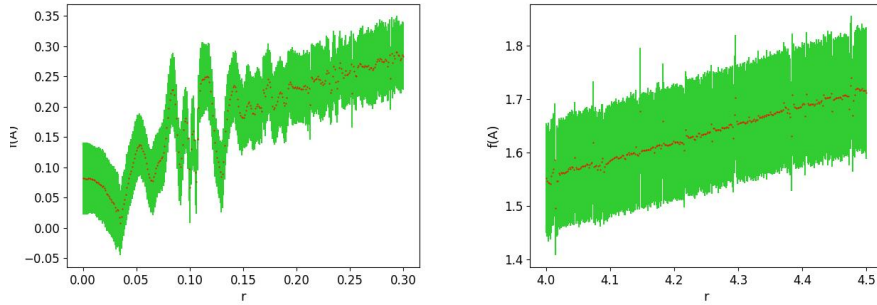


Figure 21 e 22: Tentativo di linearizzazione per  $0 \leq r \leq 0,3$  e per  $4 \leq r \leq 4,5$

Notiamo come il risultato netto della linearizzazione per  $r \rightarrow 0$  non dia risultati soddisfacenti a prescindere dalla risoluzione, mentre per  $r$  sufficientemente grande il comportamento generale sia lineare, anche se non particolarmente pulito. Ci limitiamo dunque a considerare i valori di  $r \geq 1$ . Tramite interpolazione lineare troviamo che  $f(A) = mr + q$ , con  $m = 0,3 \pm 0,1$  e  $q = 0,22 \pm 0,02$ . Notiamo che l'ordinata all'origine è significativamente diversa da 0. Ciò conferma ancora che la nostra approssimazione lineare non si applica per  $r \rightarrow 0$ . Per  $r \gtrsim 1$  abbiamo infine  $A = \frac{(mx+q)^2}{(mx+q)^2+1}$

### 3.3 Potenziale di hopping dimerizzato

Passiamo ora al potenziale di hopping dimerizzato, cioè descritto tramite la relazione:  $H(a,b)_{i,j} = \frac{\delta_{i,j+1}}{2}[(1 - (-1)^i)a + (1 + (-1)^i)b] + \frac{\delta_{i,j-1}}{2}[(1 + (-1)^i)a + (1 - (-1)^i)b]$  ( $a, b \in \mathbb{R}$ ).

$$H = \begin{pmatrix} 0 & a & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ a & 0 & b & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & b & 0 & a & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & a & 0 & b & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} 0 & \frac{a}{b} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \frac{a}{b} & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \frac{a}{b} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{a}{b} & 0 & 1 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = b \cdot D(s) = a \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \frac{b}{a} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{b}{a} & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \frac{b}{a} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ = a \cdot D'(s')$$

Dove  $s = \frac{a}{b}$  e  $s' = \frac{b}{a}$ . A seconda che sfruttiamo  $D(s)$  o  $D'(s')$  nell'analisi il ruolo rispettivamente di  $b$  o di  $a$  avrà il risultato di un riscaldamento nei tempi. Ci aspettiamo che le varie proprietà di  $D(s)$  varino al variare di  $s$  come quelle di  $D'(s')$  al variare di  $s'$ , a meno di lievi effetti di bordo. Man mano porteremo conferma a questa ipotesi.



### 3.3.1 Risultati teorici preliminari e confronto tra $D(s)$ e $D(-s)$

Consideriamo l'evoluzione data da  $D(s)$ . Su quella data da  $D'(s')$  si possono applicare considerazioni simili. Detto  $P_n(x)$  il polinomio caratteristico della matrice  $D(s)$  di dimensione  $n \times n$ . Abbiamo i seguenti risultati:

- $P_1(x) = -x$
- $P_2(x) = x^2 - 1$
- $P_n = -xP_{n-1} - s^2P_{n-2}$  per  $n$  dispari
- $P_n = -xP_{n-1} - P_{n-2}$  per  $n$  pari

Notiamo che il polinomio caratteristico è una funzione pari ( $n$  pari) o dispari ( $n$  dispari). Dunque se  $\lambda_j$  è autovalore di  $D(s)$  anche  $-\lambda_j$  lo è. Inoltre, poiché  $P_n$  dipende solo da potenze pari di  $s$ ,  $D(s)$  ha gli stessi autovalori di  $D(-s)$ .

Consideriamo l'autovettore  $\vec{v}_j$  corrispondente all'autovalore  $\lambda_j$ . Possiamo costruirlo, a meno di normalizzazione, tramite il seguente procedimento:

- $v_j(1) = 1$
- $v_j(2) = \lambda_j$
- $v_j(i) = \frac{\lambda_j v_j(i-1) - v_j(i-2)}{s}$  per  $i$  dispari
- $v_j(i) = \lambda_j v_j(i-1) - s v_j(i-2)$  per  $i$  dispari
- $\lambda_j v_j(n) = v_j(n-1)$  per  $n$  pari
- $\lambda_j v_j(n) = s v_j(n-1)$  per  $n$  dispari

Si dimostra facilmente per induzione che, detto  $\vec{v}_{-j}$  l'autovettore corrispondente all'autovalore  $-\lambda_j$ ,  $v_j(i) = v_{-j}(i)$  per  $i$  pari e  $v_j(i) = -v_{-j}(i)$  per  $i$  dispari.

Allo stesso modo si dimostra per induzione che, detto  $\vec{v}_j^-$  l'autovettore corrispondente all'autovalore  $\lambda_j$  nella matrice  $D(-s)$ ,  $v_j^-(i) = v_j(i)$  per  $[i]_4 = 1, 2$  e  $v_j^-(i) = -v_j(i)$  per  $[i]_4 = 3, 4$ . Queste relazioni ci permettono di dimostrare che è indifferente considerare  $D(s)$  o  $D(-s)$ , poiché il contributo complessivo alla probabilità dato da  $\vec{v}_j$  e  $\vec{v}_{-j}$  è equivalente a quello dato da  $\vec{v}_j^-$  e  $\vec{v}_{-j}^-$ . D'ora in avanti quindi ci concentreremo su  $s \geq 0$ . Per verificare questa relazione grafichiamo il tempo di raggiungimento per  $N = 101$ ,  $x = 50$  per la posizione  $N - 10$  (che verrà analizzato meglio in seguito):

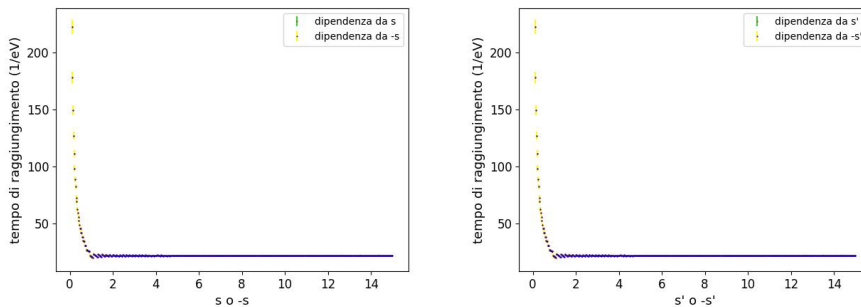


Figure 23 e 24: Confronto dei tempi di raggiungimento tra  $s$  e  $-s$  e tra  $s'$  a  $-s'$

### 3.3.2 Caso particolare per $a = 0$ o $b = 0$

Nel caso in cui  $a = 0$  ci è possibile sfruttare esclusivamente la riparametrizzazione  $H = b \cdot D(0)$ , mentre nel caso  $b = 0$  abbiamo solo  $H = a \cdot D'(0)$ . Studiamo la diffusione teoricamente in questi casi particolari.

Per  $a = 0$   $D(0)$  ha autovettori  $\vec{v}_1 = \vec{e}_1$  con autovalore  $\lambda_1 = 0$ ,  $\vec{v}_i^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_{2i} + \vec{e}_{2i+1})$  con autovalori  $\lambda_i^+ = 1$ ,  $\vec{v}_i^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_{2i} - \vec{e}_{2i+1})$  con autovalori  $\lambda_i^- = -1$  ( $1 \leq i \leq \frac{N-1}{2}$  per  $N$  dispari e  $1 \leq i \leq \frac{N-2}{2}$  per

$N$  pari) e, per  $N$  pari,  $\vec{v}_N = \vec{e}_N$  con autovalore  $\lambda_N = 0$ . Per una particella che a  $t = 0$  si trova in  $x$  con probabilità 1 troviamo:

- se  $x = 0$  o, per  $N$  pari,  $x = N$ , il caso è banale:  $\vec{e}_x$  è autovettore di  $D(0)$  e la particella rimane ferma;
- negli altri casi per  $x$  pari  $\vec{e}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{v}_i^+ + \vec{v}_i^-)$ . Abbiamo dunque  $\vec{\psi}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-it}\vec{v}_i^+ + e^{it}\vec{v}_i^-) = (\cos(t)\vec{e}_x + i\sin(t)\vec{e}_{x+1})$ ;
- per  $x$  dispari troviamo invece  $\vec{e}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{v}_i^+ - \vec{v}_i^-)$ . Abbiamo dunque  $\vec{\psi}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-it}\vec{v}_i^+ - e^{it}\vec{v}_i^-) = (\cos(t)\vec{e}_x + i\sin(t)\vec{e}_{x-1})$ .

Per  $b = 0$   $D'(0)$  ha autovettori  $\vec{v}_i^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_{2i-1} + \vec{e}_{2i})$  con autovalori  $\lambda_i^+ = 1$ ,  $\vec{v}_i^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{e}_{2i-1} - \vec{e}_{2i})$  con autovalori  $\lambda_i^- = -1$  ( $1 \leq i \leq \frac{N-1}{2}$  per  $N$  dispari e  $1 \leq i \leq \frac{N}{2}$  per  $N$  pari) e, per  $N$  dispari,  $\vec{v}_N = \vec{e}_N$  con autovalore  $\lambda_N = 0$ . Per una particella che a  $t = 0$  si trova in  $x$  con probabilità 1 troviamo:

- per  $x = N$  e  $N$  dispari  $\vec{e}_x$  è autovettore di  $D'(0)$  e la particella rimane ferma;
- negli altri casi per  $x$  pari  $\vec{e}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{v}_i^+ - \vec{v}_i^-)$ . Abbiamo dunque  $\vec{\psi}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-it}\vec{v}_i^+ - e^{it}\vec{v}_i^-) = (\cos(t)\vec{e}_x + i\sin(t)\vec{e}_{x-1})$ ;
- per  $x$  dispari troviamo invece  $\vec{e}_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{v}_i^+ + \vec{v}_i^-)$ . Abbiamo dunque  $\vec{\psi}(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-it}\vec{v}_i^+ + e^{it}\vec{v}_i^-) = (\cos(t)\vec{e}_x + i\sin(t)\vec{e}_{x+1})$ .

Troviamo che, nel complesso, se  $a = 0$  o  $b = 0$  la particella o rimane ferma ai limiti della catena, oppure il suo moto è limitato tra la posizione iniziale e quella immediatamente precedente o successiva, a seconda della parità. Ciò non ci sorprende, se pensiamo che in questi casi  $D(0)$  e  $D'(0)$ , esclusi al più i limiti della catena, possono essere riscritti come prodotto tensoriale fra la matrice identità e  $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ . Di seguito i risultati ottenuti tramite simulazione:

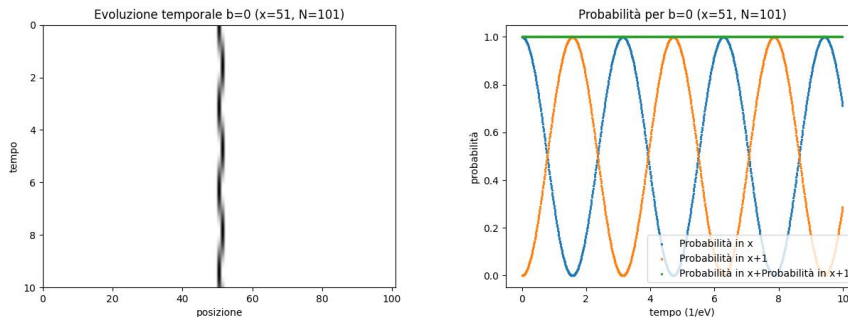


Figure 25 e 26: Evoluzione temporale generale e probaabilità all'origine e nella posizione successiva al variare del tempo per  $b = 0$

Abbiamo dunque dimostrato che la velocità di propagazione per  $s = 0$  o per  $s' = 0$  è uguale a 0. Questo risultato ci sarà utile in seguito.

### 3.3.3 Evoluzione temporale generale

Poniamo  $N = 101$  e  $x = 51$  e visualizziamo l'evoluzione dell'onda data da  $D(s)$  al variare di  $s$ . Di seguito i risultati:

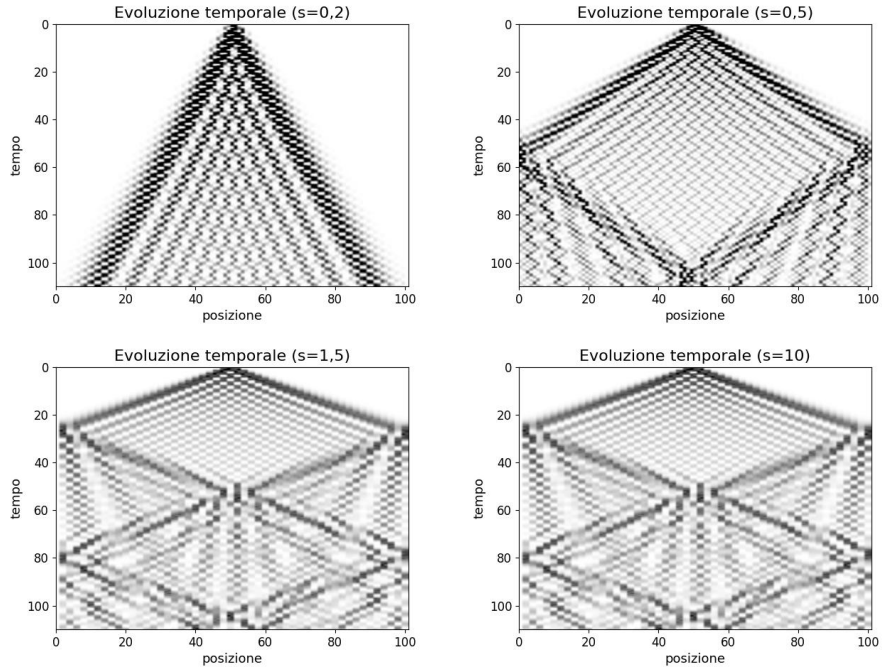


Figure 27, 28, 29 e 30: Evoluzione temporale della distribuzione di probabilità con  $s = 0, 2$ ,  $s = 0, 5$ ,  $s = 2$  e  $s = 5$

Come nel caso del potenziale dimerizzato vediamo che il fronte d'onda principale è composto da fronti d'onda secondari. Notiamo inoltre che la velocità del fronte d'onda principale appare aumentare molto velocemente per valori bassi di  $s$ , per poi crescere molto più lentamente, se non stabilizzarsi. Secondo il metodo già presentato, visualizziamo i fronti d'onda graficando i tempi di raggiungimento  $t$  al variare della posizione:

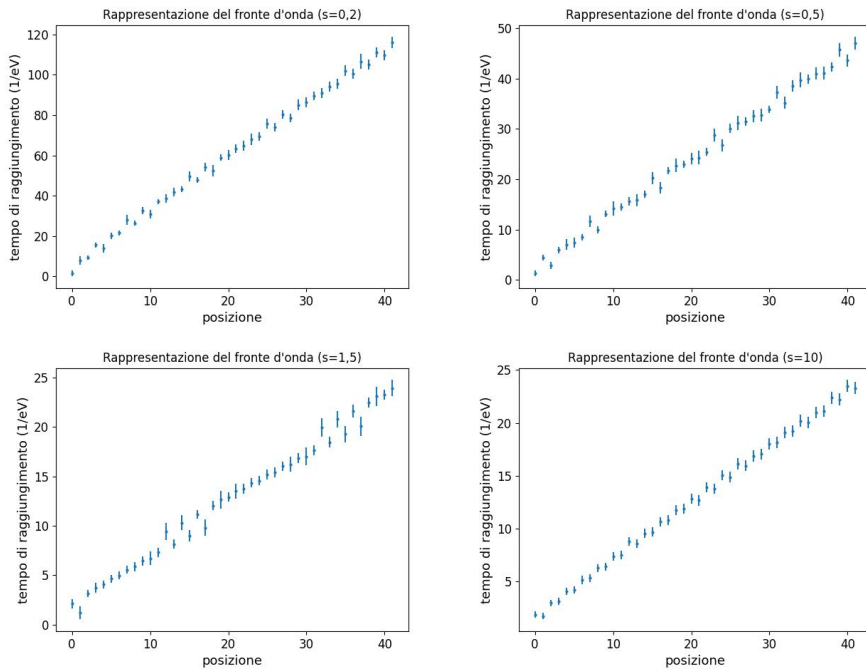


Figure 31, 32, 33 e 34: Tempo di raggiungimento con  $s = 0, 2$ ,  $s = 0, 5$ ,  $s = 1, 5$  e  $s = 10$

Vediamo chiaramente i fronti d'onda secondari per  $s$  prossimo a 1. In ogni caso troviamo un indice di pearson compreso fra  $p = 0,999$  e  $p = 0,997$ . Procediamo dunque l'analisi nell'approssimazione di un singolo fronte d'onda che si muove a velocità costante.

### 3.3.4 Dipendenza della velocità da $s$

Studiamo ora la velocità di propagazione al variare di  $s$  e  $s'$ . Poniamo  $x = 51$  e grafichiamo il tempo di raggiungimento  $t$  per cui la probabilità alla posizione  $N - 10$  è massima, sia al variare di  $s$  sfruttando  $D(s)$  sia la variare di  $s'$  sfruttando  $D'(s')$ . In base a questi dati grafichiamo anche la velocità  $v(s) = \frac{N-10-x}{t}$ , comparata con il valore teorico  $v_t(s)$  (eq. (30)). Di seguito i risultati:

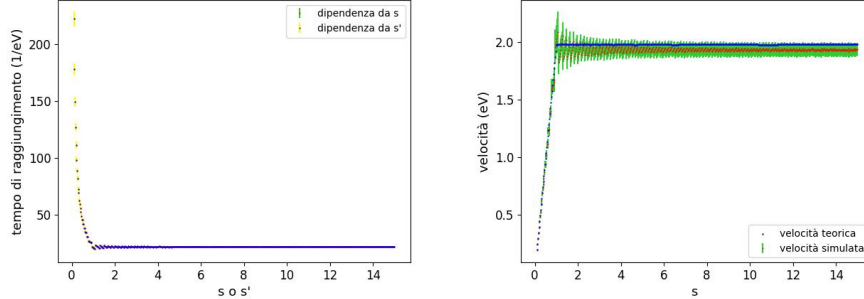


Figure 35 e 36: Tempi di raggiungimento e velocità al variare di  $s$  e  $s'$

Non sono presenti particolari incongruenze con il modello teorico, né fra l'evoluzione data da  $D(s)$  e quella data da  $D'(s')$ . Sappiamo inoltre che (esclusi i casi in cui  $a = 0$  o  $b = 0$ , già analizzati)  $D(s) = sD'(\frac{1}{s})$ . Di conseguenza, poiché possiamo considerare indipendentemente  $D(s)$  o  $D'(s')$ ,  $v(s) = sv(\frac{1}{s})$ . Studiamo dunque il comportamento del tempo di raggiungimento e velocità per  $0, 1 \leq s \leq 1$ . Di seguito i risultati:

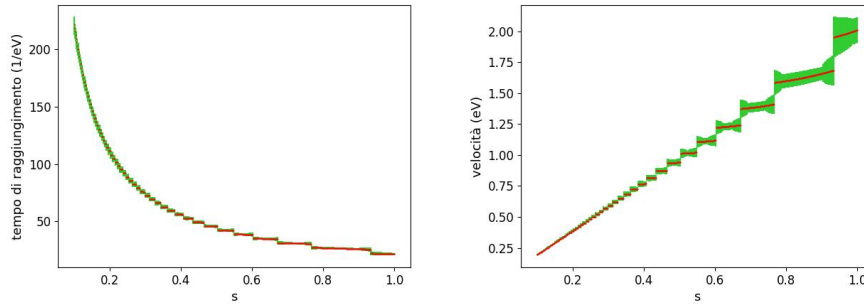


Figure 37 e 38: Tempi di raggiungimento e velocità per  $0, 1 \leq s \leq 1$

L'andamento della velocità risulta lineare al variare di  $s$ , con un indice di Person  $p = 0,998$ . Abbiamo quindi che  $v(s) = ms + q$ , con  $m = (1,9 \pm 0,5)eV$  e  $q = (0,00 \pm 0,03)eV$ . Il valore dell'ordinata all'origine è compatibile con 0, valore che abbiamo anche dimostrato teoricamente. Possiamo dunque porlo a 0 nella nostra analisi. Abbiamo quindi  $v(s) = ms$  per  $0 \leq s \leq 1$  e  $v(s) = sv(\frac{1}{s}) = s \cdot m\frac{1}{s} = m$  per  $s \geq 1$ . Abbiamo quindi che la velocità è costante per  $s \geq 1$ , con un valore compatibile con quello trovato per l'hopping costante (che è equivalente al caso ora in analisi per  $s = 1$ ). Proviamo a confermare questa ipotesi analizzando tempo di raggiungimento e velocità per  $1 \leq s \leq 50$ . Di seguito i risultati:

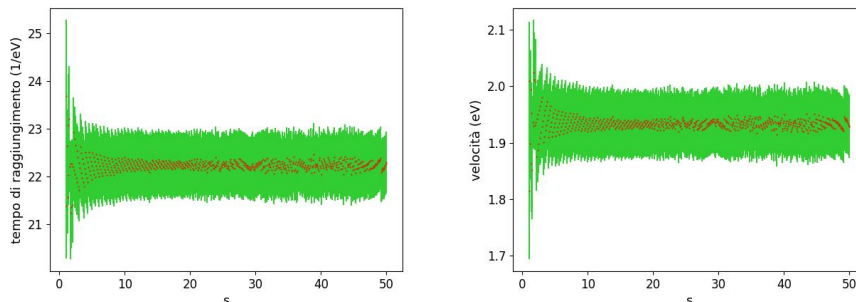


Figure 39 e 40: Tempo di raggiungimento e velocità per  $1 \leq s \leq 50$  e  $1 \leq s' \leq 50$

Abbiamo un indice di Pearson  $p = 0,9992$ , quindi anche in questo caso una buona dipendenza lineare. Operando un'interpolazione lineare troviamo  $v(s) = m's + q'$  con  $m' = (-0,1 \pm 0,2)eV$  e  $q' = (1,9 \pm 0,4)eV$ . Il valore di  $m'$  è compatibile con 0 e quello di  $q'$  è compatibile con quello di  $m$ . I nostri risultati sono quindi coerenti con una velocità costante  $v(s) = m$  per  $s \geq 1$ .

## 4 Velocità massima per potenziale a lungo raggio

Studieremo un reticolo unidimensionale in cui l'interazione fra due elementi del sistema scala come  $\frac{1}{r^\alpha}$ , dove  $\alpha > 1$  e, detta  $x$  la posizione del primo elemento e  $y$  la posizione del secondo elemento,  $r = |x - y|$ .

In particolare ci concentreremo sulla quantità definita come:

$$Q_r(t) = \frac{1}{2} \left| \langle \psi | U^\dagger A_r(t) U | \psi \rangle - \langle \psi | A_r(t) | \psi \rangle \right| \quad (31)$$

Dove  $|\psi\rangle$  è lo stato iniziale, scelto in maniera arbitraria,  $U$  è un operatore unitario che perturba una singola posizione a tempo  $t^* = 0$  e  $A_r(t)$  un'osservabile che agisce a una distanza  $r$  rispetto alla posizione della perturbazione e a un tempo  $t$  successivo a  $t^*$ . Per comodità poniamo  $-1 \leq \langle \phi | A_r(t) | \phi \rangle \leq 1$  per ogni  $|\phi\rangle$ . Abbiamo quindi che  $0 \leq Q_r(t) \leq 1$ .  $Q_r(t)$  quantifica la capacità del sistema di trasmettere informazione a una distanza  $r$  in un tempo  $t$ .

Considereremo un sistema la cui hamiltoniana è espressa tramite l'espressione  $\sum_{i < j} J_{ij} h_{ij}$ . In questa impostazione  $h_{ij}$  è un operatore che agisce sulle posizioni  $i$  e  $j$  e il cui valore di aspettazione è compreso fra -1 e 1, mentre  $J_{ij} = \frac{1}{r_{ij}^\alpha}$  per  $i \neq j$  (dove  $r_{ij} = |i - j|$ ) e  $J_{ii} = 1$  (quest'ultima richiesta è posta per questioni di convenienza). In particolare dimostreremo che:

$$Q_r(t) \leq c_1 (e^{v_1 t} - 1) e^{-\mu r} + c_2 \frac{e^{v_2 t} - 1}{[(1 - \mu)r]^\alpha} \quad (32)$$

In cui  $c_1, c_2, v_1$  e  $v_2$  sono finiti per ogni  $\alpha > 1$  e indipendenti da  $r$  e  $t$ .  $\mu$  è invece un parametro tale che  $0 < \mu < 1$  che possiamo ottimizzare a seconda della caratteristica studiata nel sistema.

### 4.1 Dimostrazione

Sfrutteremo il risultato noto:

$$Q_r(t) \leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2\lambda t)^n}{n!} \mathcal{J}_n(i, j) \quad (33)$$

Dove  $\mathcal{J}_n(i, j) := \sum_{k_1, \dots, k_{n-1}} J_{ik_1} J_{k_1 k_2} \dots J_{k_{n-1} j}$  e  $\lambda = \sum_k J_{ik}$ .  $\mathcal{J}_n(i, j)$  rappresenta il contributo di processi che partono da  $i$  e terminano in  $j$  composti da  $n$  fenomeni di hopping.

Abbiamo quindi:

$$\begin{aligned} \sum_k J_{ik} J_{kj} &= \sum_{r_{ik} \leq 1} J_{ik} J_{kj} + \sum_{r_{ik} \geq 2} J_{ik} J_{kj} \leq \\ &\leq \sum_{r_{ik} \leq 1} J_{ik} J_{kj} + 2 \cdot 2^\alpha J_{ij} \sum_{r_{ik} \geq 2} J_{ik} \leq 2(2 \sum_{r_{ik} \leq 1} J_{ik} J_{kj} + 2^\alpha J_{ij} \sum_{r_{ik} \geq 2} J_{ik}) \end{aligned} \quad (34)$$

Dove la prima disuguaglianza può essere spiegata pensando che se  $k$  è più vicino a  $i$  che a  $j$   $r_{kj} \geq \frac{r_{ij}}{2}$ , dunque  $J_{kj} \leq 2^\alpha J_{ij}$ . Il fattore 2 è invece dovuto ai termini nella somma in cui  $k$  è più vicino a  $j$  che a  $i$ .

Poiché il termine  $\sum_{r_{ik} \geq 2} J_{ik}$  non contiene termini di hopping al primo successivo possiamo impostare le seguenti disequazioni:

$$\sum_{r_{ik} \geq 2} J_{ik} \leq 2 \sum_{[r_{ik}]_2=0} r_{ik}^{-\alpha} = 2 \sum_{r_{ik} \geq 1} (2r_{ik})^{-\alpha} = 2^{-\alpha+1} (\lambda - 1) \quad (35)$$

Sfruttando infine  $J_{ij} \leq \sum_{r_{ik} \leq 1} J_{kj} = \sum_{r_{ik} \leq 1} J_{ik} J_{kj}$  troviamo che:

$$\sum_k J_{ik} J_{kj} \leq 4\lambda \sum_{r_{ik} \leq 1} J_{ik} J_{kj} \quad (36)$$

Ripetendo il medesimo procedimento iterativamente otteniamo che:

$$\mathcal{J}_n(i, j) \leq (4\lambda)^{n-1} \sum_{r_{ik_1} \leq 1, \dots, r_{k_{n-2} k_{n-1}} \leq 1} J_{ik_1} \dots J_{k_{n-1} j} \quad (37)$$

Il valore massimo per ogni addendo nella sommatoria è  $(r - n + 1)^{-\alpha}$ , corrispondente  $n - 1$  passaggi consecutivi di lunghezza 1 da  $j$  in direzione di  $i$  e un ultimo salto di lunghezza  $r - n + 1$ . Inoltre, poiché per ogni  $k$  ci sono tre posizioni con distanza massima 1, cioè  $k - 1$ ,  $k$  e  $k + 1$ , il numero totale di addendi nella sommatoria è  $3^{n-1}$ . Troviamo quindi la disuguaglianza  $\mathcal{J}_n \leq (12\lambda)^{n-1} (r - n + 1)^{-\alpha}$ . Tuttavia questa maggiorazione non ci è utile all'avvicinarsi di  $n$  a  $r$  e, in particolare, per  $n > r$ . Scegliamo quindi un parametro  $\mu \in ]0, 1[$  e sfruttiamo la disuguaglianza ottenuta per valori  $n < \lceil \mu r \rceil$  (dove con  $\lceil \mu r \rceil$  intendiamo la parte intera di  $\mu r$  approssimata per eccesso, dunque  $n$  varia fra 1 e il più grande intero minore di  $\mu r$ ). Considerando solo questi valori di  $n$ , troviamo che:

$$\sum_{n=1}^{\lceil \mu r \rceil - 1} \frac{(2\lambda t)^n}{n!} \mathcal{J}_n \leq c_2 \frac{e^{v_2 t} - 1}{[(1 - \mu)r]^\alpha} \quad (38)$$

dove  $c_2 = \frac{1}{12\lambda}$  e  $v_2 = 24\lambda^2$ .

Consideriamo ora la sommatoria per  $n \geq \lceil \mu r \rceil$ . Essa è dominata dal fattore con  $\lceil \mu r \rceil$  salti, ciascuno di lunghezza  $\frac{1}{\mu}$ . Sfruttiamo la disuguaglianza  $\mathcal{J}_n \leq \lambda^{n-1}$  e il fatto che  $e^{\mu r - n} \leq 1$  per ottenere:

$$\sum_{n=\lceil \mu r \rceil}^{\infty} \frac{(2\lambda t)^n}{n!} \mathcal{J}_n(i, j) \leq \sum_{n=\lceil \mu r \rceil}^{\infty} \frac{(2\lambda^2 t)^n}{n! \lambda e^{\mu r - n}} \leq c_1 \frac{e^{v_1 t} - 1}{e^{\mu r}} \quad (39)$$

dove  $v_1 = 2\lambda^2 e$  e  $c_1 = \lambda^{-1}$ . In tal modo otteniamo un decadimento esponenziale a lunghezza caratteristica  $\frac{1}{\mu}$ , come ci aspettavamo. Ricomponendo l'intera sommatoria troviamo l'equazione (31). Come richiesto,  $c_1$ ,  $c_2$ ,  $v_1$  e  $v_2$  sono indipendenti da  $t$  e  $r$  e non divergono con  $\alpha$ .

## 4.2 Interpretazione

Abbiamo dimostrato che:

$$Q_r(t) \leq c_1 (e^{v_1 t} - 1) e^{-\mu r} + c_2 \frac{e^{v_2 t} - 1}{[(1 - \mu)r]^\alpha} \quad (40)$$

Possiamo definire una zona causale come la zona nel piano  $r - t$  in cui il termine destro della disuguaglianza è maggiore di un certo valore. Il primo addendo di tale termine, da solo, darebbe approssimativamente un limite alla regione causale paragonabile a un potenziale a corto raggio, definita tramite la relazione  $v_1 t \gtrsim r$ . Quindi un cono luce lineare con velocità di propagazione dell'informazione  $\frac{dr}{dt} \simeq v_1$  finita.

Il secondo termine da solo invece ci dà una regione causale definita tramite  $v_2 t \gtrsim \alpha \log(r)$ . Questo termine è quello tipico del lungo raggio e ci dà una velocità di propagazione dell'informazione  $\frac{dr}{dt} \simeq \frac{v_2}{\alpha} e^{\frac{v_2}{\alpha} t}$  che diverge esponenzialmente col tempo.

La somma dei due dà invece una regione causale di tipo misto, il cui comportamento passa da lineare e logaritmico a una distanza critica  $r_c$  tale che  $r_c \simeq \alpha \log(r_c)$ . Di seguito la rappresentazione della regione causale e del suo limite al variare di  $\alpha$ :

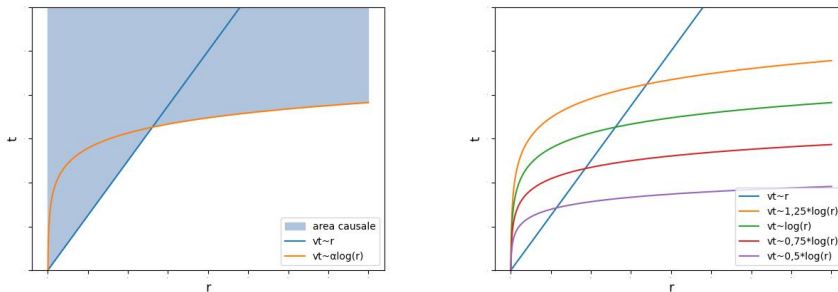


Figure 41 e 42: A sinistra: forma generale della regione causale. A destra: variazione dei confini della regione causale al variare di  $\alpha$

Notiamo come, per  $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $r_c \rightarrow \infty$ . Questo risultato è molto soddisfacente, perché per  $\alpha \rightarrow \infty$  il potenziale diventa a corto raggio e recuperiamo quindi il cono luce a velocità costante descritto nella seconda sezione.

## 5 Studio di potenziale a lungo raggio

Studiamo ora il potenziale a lungo raggio, definito dall'hamiltoniana  $H(k)$  tale che  $H(k)_{i,j} = \frac{1}{|i-j|^k}$  per  $i \neq j$  e  $H(k)_{i,i} = 0$  ( $k \in \mathbb{R}^+$ ), cioè:

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & 1^k & \frac{1}{2}^k & \frac{1}{3}^k & \frac{1}{4}^k & \frac{1}{5}^k & \dots \\ 1^k & 0 & 1^k & \frac{1}{2}^k & \frac{1}{3}^k & \frac{1}{4}^k & \dots \\ \frac{1}{2}^k & 1^k & 0 & 1^k & \frac{1}{2}^k & \frac{1}{3}^k & \dots \\ \frac{1}{3}^k & \frac{1}{2}^k & 1^k & 0 & 1^k & \frac{1}{2}^k & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Tale hamiltoniana ha autovalori  $\lambda_j = -2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(n \cdot \frac{2\pi r_j}{N})}{n^k}$  con  $r_j = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$

### 5.0.1 Evoluzione temporale generale

Poniamo  $N = 101$  e  $x = 51$  e visualizziamo l'evoluzione dell'onda al variare di  $k$ . Di seguito i risultati:

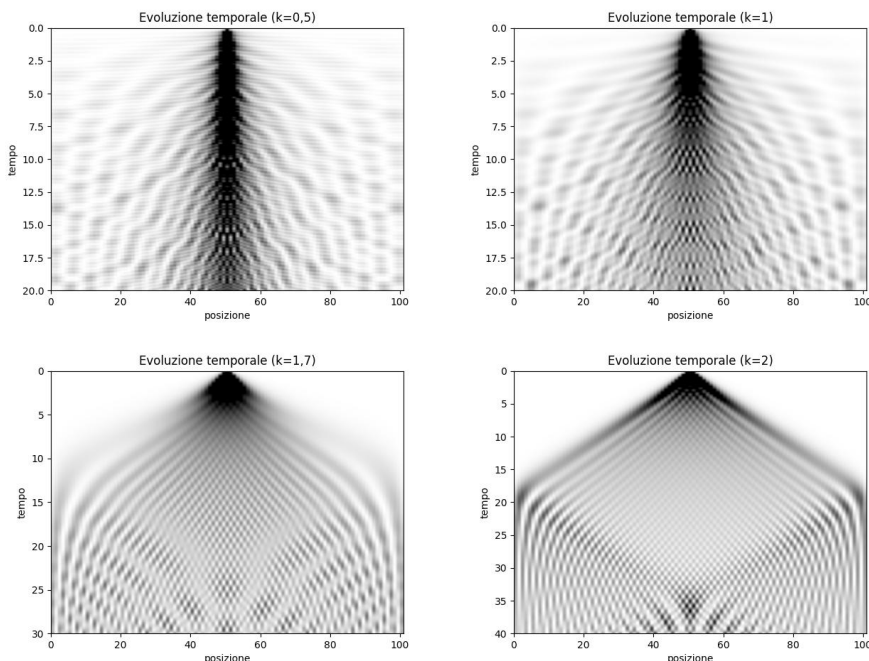


Figure 43, 44, 45 e 46: Evoluzione temporale della distribuzione di probabilità con  $k = 0,5$ ,  $k = 1$ ,  $k = 1,7$  e  $k = 2$

Notiamo innanzitutto che il fronte d'onda, specie per  $k$  prossimo a 0, non può più essere considerato lineare. La velocità di propagazione dell'onda è, dove ben visibile, decrescente al crescere di  $k$ , anche se in genere non costante. Inoltre si nota la tendenza a una concentrazione di probabilità vicino all'origine assente nei casi precedentemente analizzati, tanto più accentuata quanto più prossimo a 0 è  $k$ .

Proviamo a dare un abbozzo di fronte d'onda. Dato che esso è poco definito e subito seguito da successivi fronte d'onda, non possiamo sfruttare la definizione finora sfruttata di tempo di raggiungimento. Definiamo quindi  $t^-(y)$  il primo tempo tale per cui  $P(y, t^-) \geq 0,5\%$ ,  $t^+$  il primo tempo tale che  $t^+ \geq t^-$  e  $P(y, t^+) \leq 0,5\%$ . Il nuovo tempo di raggiungimento sarà  $t = \frac{t^+ + t^-}{2}$ , con incertezza data da distribuzione uniforme  $\delta(t) = \frac{t^+ - t^-}{2\sqrt{12}}$ . La scelta di porre come probabilità di soglia il 0,5% è in parte arbitraria ed è stata scelta perché corrisponde approssimativamente a metà della probabilità che troveremmo in una distribuzione uniforme per l'intera catena. Di seguito i risultati:



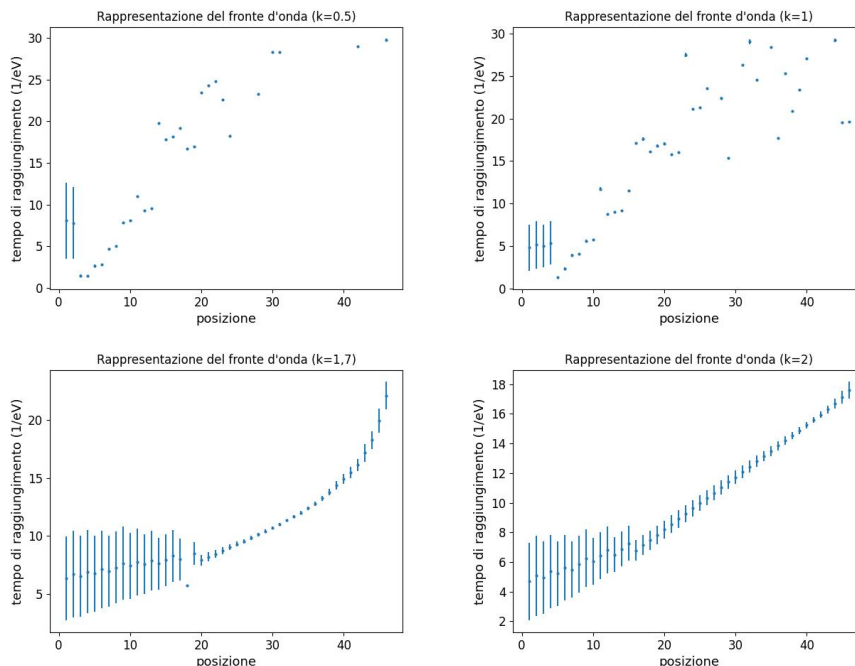


Figure 47, 48, 49 e 50: Tempo di raggiungimento con  $k = 0,5$ ,  $k = 1$ ,  $k = 1,7$  e  $k = 2$

Vediamo che al crescere di  $k$  il fronte d'onda diventa più continuo e, specie all'inizio dell'evoluzione, più approssimabile a un modello a velocità costante (già per  $k = 1,7$  l'indice di Person è  $p = 0,98$ , quindi siamo prossimi alla zona in cui potremo sfruttare un'approssimazione lineare).

### 5.0.2 Dipendenza della velocità da $k$

Per farci un'idea più precisa del valore di  $k$  da cui possiamo considerare un regime di fronte d'onda a velocità costante, grafichiamo il tempo di raggiungimento  $t(k)$  alla posizione  $y = x + 25$  (secondo la definizione data nel paragrafo precedente). Tale scelta di  $y$  è stata presa perché, come abbiamo già detto, tale approssimazione è più facilmente applicabile lontano dai limiti della catena.

Grafichiamo inoltre la velocità stimata tramite  $v(k) = \frac{25}{t(k)}$  comparata con la velocità teorica  $v_t(k)$  stimato nel metodo già esposto. Tale valore teorico potrebbe non avere più riscontri nella simulazione, poiché tale formula è valida nel regime a corto raggio. Di seguito il risultato per  $0,1 \leq k \leq 10$ :

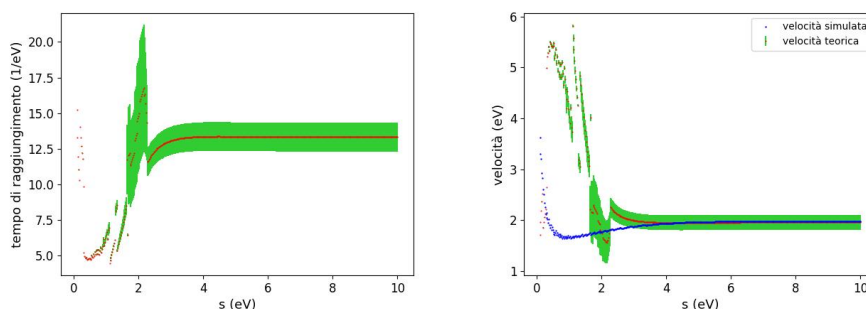


Figure 51 e 52: Tempo di raggiungimento e velocità al variare di  $k$

Notiamo che, per  $k \rightarrow 0$ , i tempi tendono a divergere, a causa della forte concentrazione all'origine, che rende difficile raggiungere la probabilità di soglia dello 0,5%. Segue un'area in cui la funzione è piuttosto discontinua, dimostrazione che la forma del fronte d'onda per questo regime non è ben definita. Ci è comunque possibile notare come la velocità cresca notevolmente al decrescere di  $k$ . Per  $k \gtrsim 2,3$  la funzione diventa continua. Concentriamoci dunque su quest'ultima area e grafichiamo anche la velocità di fronte d'onda associata:

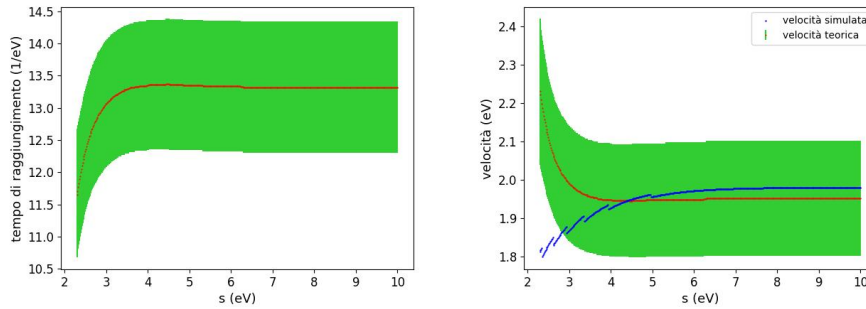


Figure 53 e 54: Tempo di raggiungimento e velocità al variare di  $k$  per  $2, 3 \leq k \leq 10$

Vediamo che la velocità decresce velocemente per poi stabilizzarsi. Operando un'interpolazione lineare per  $5 \leq k \leq 10$  otteniamo che, in questo tratto,  $v(k) = mk + q$  con  $m = 0,01 \pm 0,02$  e  $q = 1,9 \pm 0,1$ . La velocità diventa quindi approssimativamente costante, con la relazione  $v(k) = q$ . Tale velocità è compatibile con quella trovata nel caso dell'hopping costante. Ci aspettavamo tale comportamento, poiché  $\lim_{k \rightarrow \infty} H(k) = T$ .

Notiamo infine che il valore teorico della velocità  $v_t(k)$  si discosta notevolmente dalle nostre stime fino a valori di  $k \simeq 3$ . Ciò non è dovuto solo ai problemi di definizione della velocità già esposti, ma anche dal fatto che i valori teorici valgono solo per potenziali a corto raggio (situazione che può essere approssimata per valori crescenti di  $k$ , da cui il maggior accordo per  $k \geq 3$ ).

## 6 Conclusioni

Abbiamo dimostrato analiticamente nel caso di potenziale a corto raggio in un reticolo unidimensionale la presenza di un cono luce dato da una velocità massima costante di propagazione dell'informazione. Abbiamo studiato i casi di potenziale di hopping costante, potenziale con energie onsite dimerizzate e potenziale di hopping dimerizzato. In tutti questi casi, coerentemente con le aspettative, ci è stato possibile definire una velocità massima di propagazione, che abbiamo studiato sia a livello teorico che tramite simulazioni. I due approcci hanno dato risultati compatibili. Inoltre, nei casi in cui un potenziale poteva essere ricondotto a uno più semplice (in genere quello di hopping costante), sono stati ottenuti dati coerenti con le aspettative.

Abbiamo studiato teoricamente un particolare caso di potenziale a lungo raggio, in cui l'interazione scala come  $\frac{1}{r^\alpha}$  (in cui  $r$  è la distanza fra due siti del reticolo). Abbiamo dimostrato come, al di sopra di una certa distanza critica  $r_c$  dipendente da  $\alpha$ , non abbiamo più un regime con velocità costante di propagazione dell'informazione. La velocità di propagazione per  $r_c < r \rightarrow \infty$  tende a divergere. È importante notare che, per  $\alpha \rightarrow \infty$ ,  $r_c \rightarrow \infty$ , quindi in tal caso il potenziale si comporta come se fosse a corto raggio (coerentemente con il modello). Abbiamo poi simulato tale reticolo e verificato come, per bassi valori di  $\alpha$ , sia difficile definire un fronte d'onda che si muove linearmente e abbiamo verificato che, per  $\alpha \gtrsim 3$  e per lunghezza  $N = 101$ , il comportamento del sistema è assimilabile a uno a corto raggio, in particolare a quello dato da un potenziale di hopping costante.

## 7 Appendice

Riportiamo a titolo esemplificativo i programmi sfruttati per l'analisi nel caso di hopping costante (per gli altri casi varia solo la definizione della matrice e, nel caso a lungo raggio, quella del tempo di raggiungimento). Per ragioni di compattezza non includiamo i comandi sfruttati per definire i grafici, per cui è stata sfruttata la libreria `matplotlib.pyplot`.

Programma 1: evoluzione temporale generale e visualizzazione dei fronti d'onda:

```

import numpy as np
import math
import matplotlib
from scipy import linalg as la
import matplotlib.pyplot as plt
N=input("Lunghezza catena ")
N=int(N)
x=input("Posizione iniziale ")
x=int(x)
s=input("Valore s ")
s=float(s)
t=input("Tempo trascorso ")
t=float(t)

v0=np.zeros(N)                                definizione matrice
v0[1]=s
mat=[v0]
j=(-1)**(0.5)
i=0
while i<=N-3:
    v=np.zeros(N)
    v[i]=s
    v[i+2]=s
    mat.append(v)
    i=i+1
    vN=np.zeros(N)
vN[N-2]=s
mat.append(vN)
M=1000
val, vec = la.eigh(mat)                        autovalori e autovettori
ev=np.zeros((M,N))
time=[]
for i in range(M):
    time.append(t/(M)*(i))
for i in range(M):                             evoluzione dello stato
    for r in range(N):
        m=0
        for g in range(N):
            m=m+np.exp(-j*time[i]*val[g])*vec[g][x]*vec[g][r]
        ev[i][r]=abs(m)**2

tempo=[]
base=[]
sigma=np.zeros(N-5-x)
for i in range(int(N-5-x)):
    temp=[]

```

```

for l in range(M):
    temp.append(ev[l][x+1+i])
centroid=np.max(temp)                                probabilità massima in posizione x+i+1
base.append(i)
posizio=np.argmax(temp)
tempo.append(time[posizio])                          tempo di raggiungimento in posizione x+i+1
for l in range(M-1):
    if (ev[l][x+1+i]<=(0.6*centroid) and ev[l+1][x+1+i]>=(0.6*centroid)):
        sigma[i]=sigma[i]-time[l]                    t- in posizione x+i+1
    if (ev[l][x+1+i]>=(centroid*0.6) and ev[l+1][x+1+i]<=(centroid*0.6)):
        sigma[i]=sigma[i]+time[l]                    t+ in posizione x+i+1
sigma[i]=abs(sigma[i]/2)                             incertezze sul tempo di raggiungimento

```

Programma 2: tempo di raggiungimento in posizione N-10 e velocità al variare di s per x=51 e N=101:

```

import numpy as np
import math
from scipy import linalg as la
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy import stats

a=input(" Valore s massimo ")
a=float(a)

amen=input(" Valore s minimo ")
amen=float(amen)

j=(-1)**(0.5)
N=101
x=50
s=1

tempi=[]
var=[]
M=1000

P=500
err=np.zeros(P)

for i in range(P):
    var.append(amen+(a-amen)/(P-1)*i)
for i in range(P):
    print(i)

    v0=np.zeros(N)                                definizione matrice con s=var[i]
    v0[1]=var[i]
    mat=[v0]
    for k in range(N-2):
        v=np.zeros(N)
        v[k]=var[i]
        v[k+2]=var[i]
    mat.append(v)
    vN=np.zeros(N)
    vN[N-2]=var[i]

```

```

mat.append(vN)
val, vec = la.eigh(mat)
time=[]
for g in range(M):
    intervallo variabile in cui cercare il tempo di raggiungimento
    time.append(g/1.75/var[i]*(N-x-10)/M)
temp=[]
for g in range(M):
    m=0
    for r in range(N):
        evoluzione dello stato in posizione N-10
        m=m+np.exp(-j*val[r]*time[g])*vec[x][r]*vec[N-10][r]
    prob=(abs(m)**2)
    temp.append(prob)
centroid=np.max(temp)
    probabilità massima in posizione N-10
posizio=np.argmax(temp)
tempi.append(time[posizio])
    tempo di raggiungimento in posizione N-10
for g in range(M-1):
    if temp[g]<=(0.6*centroid) and temp[g+1]>=(0.6*centroid):
        t- in posizione N-10
        err[i]=err[i]-time[g]
    if temp[g]>=(0.6*centroid) and temp[g+1]<=(0.6*centroid):
        t+ in posizione N-10
        err[i]=err[i]+time[g]
err[i]=err[i]/2
    incertezza sul tempo di raggiungimento
vel=[]
for r in range(P):
    velocità al variare di s
    vel.append((N-10-x)/(tempi[r]))
errv=[]
for r in range(P):
    incertezza della velocità al variare di s
    errv.append(err[r]*(N-10-x)/(tempi[r])**2)

```

## References

- [1] E. H. Lieb and D. W. Robinson *The finite group velocity of quantum spin systems*. 1972. <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01645779>
- [2] Zhe-Xuan Gong, Michael Foss-Feig, Spyridon Michalakis, Alexey V. Gorshkov *Persistence of locality in systems with power-law interactions*. 2014. <https://arxiv.org/abs/1401.6174>
- [3] M. Cheneau, P. Barmettler, D. Poletti, M. Endres, P. Schauß, T. Fukuhara, C. Gross, I. Bloch, C. Kollath, and S. Kuhr *Light- cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system*. 2012. <https://www.nature.com/articles/nature10748>