



Univerzitet
u Beogradu



Fizički
fakultet

Danica Stojiljković

Metod efikasnog računanja energetskog spektra u funkcionalnom formalizmu

diplomski rad

Mentor: dr Aleksandar Bogojević
Beograd, novembar 2005. godine

Želela bih da se zahvalim svom mentoru dr Aleksandru Bogojeviću, koji me je zainteresovao i vodio kroz upoznavanje sa ovom oblasti fizike, na pomoći i podršci, neiscrpnom entuzijazmu i brojnim diskusijama koje su veoma doprinele konačnom izgledu ovog rada.

Posebnu zahvalnost dugujem mr Antunu Balažu koji me je uputio u tehnike Monte Karlo simulacija i imao presudan uticaj na izbor oblasti fizike kojom ću se baviti u svom daljem radu. Zahvaljujem se i Aleksandru Beliću i Branimiru Ackoviću na pruženoj podršci i tehničkoj pomoći. Takođe se zahvaljujem celokupnom timu Laboratorije za primenu računara u nauci na Institutu za fiziku u Zemunu na saradnji, pomoći i ustupljenim računarskim resursima, bez čega bi ovo istraživanje bilo nemoguće izvršiti.

Zahvaljujem se i Istraživačkoj stanici Petnica koja me je navela na put istraživača, kao i Fizičkom fakultetu na kom sam stekla potrebna znanja da taj put nastavim. Volela bih da se zahvalim i kolegi Ivanu Staniću bez čijih uredno vođenih beleški sa predavanja bi mi proces spremanja ispita bio znatno teži.

I naravno, veliku zahvalnost dugujem svojoj porodici koja mi je u nizu godina pružala neophodnu podršku, kao i svojim prijateljima koji će se, iako na žalost ne mogu sve da ih pomenem, prepoznati. Veliko hvala i mojoj cimerki, Milki Nikolić, koja je pokazala veliko razumevanje za svaki moj hir tokom niza godina zajedničkog života.

Beograd, 09. novembar 2005. godine

Danica Stojiljković

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Funkcionalni formalizam	5
2.1	Kanonska kvantizacija	5
2.2	Određivanje energetskeg spektra	6
2.3	Particiona funkcija u funkcionalnom formalizmu	7
3	Numeričko izračunavanje energetskeg spektra	11
3.1	Osnovni energetski nivo	11
3.2	Pobuđeni nivoi	14
3.3	Ubrzanje	15
4	Zaključak	21
A	Monte Karlo integracija	23
	Literatura	25

1

Uvod

U klasičnoj mehanici zadatak opisivanja nekog fizičkog sistema je da se predvidi njegova evolucija u budućnosti ukoliko su nam poznati početni uslovi. Princip najmanjeg dejstva nam je dao matematički ekvivalentan opis dinamike, ali baziran na drugačijem zadatku: na osnovu zadanog početnog i krajnjeg položaja sistema se određuje trajektorija koja minimalizuje dejstvo. Na prvi pogled ovakav pristup je zbunjujuć jer nameće ideju da sistem unapred zna kojim putem treba da se kreće, no, kao što je dobro poznato, lako se pokazuje da su ova dva pristupa ekvivalentna. U oba slučaja sistem u svakom trenutku ima dobro definisane vrednosti fizički merljivih veličina.

Po ovome se klasična mehanika suštinski razlikuje od kvantne mehanike, pogotovo od njene originalne Kopenhagenske interpretacije. U kvantnoj mehanici izraz ‘*vremenska evolucija*’ dobija drugačiji smisao nego u klasičnoj teoriji. Između početnog i krajnjeg stanja (merenja) ne propagiraju direktno merljive veličine, već operatori. Za razliku od operatorskog formalizma kvantne mehanike, koji je generalisao opis klasične mehanike preko jednačina kretanja, Fajnman je 1942. godine uveo drugu, ekvivalentnu formulaciju kvantne teorije koja za centralni objekt uzima dejstvo. Iz ovog razloga ovaj formalizam ne polazi od vremenske evolucije¹. Kao što ćemo videti, u funkcionalnom formalizmu se kvantno-mehaničke amplitude (amplitude verovatnoće prelaza iz početnog u neko od mogućih krajnjih stanja) dobijaju sabiranjem doprinosa svih mogućih trajektorija saglasnih sa

¹Ovakva razmatranja nisu bila ono što je originalno nagnalo Fajnmana da razvije novi formalizam, već se pokazalo da su posledica njegovih ideja. Međutim, način razmišljanja koji ovde prezentujemo je vrlo blizak originalnoj Dirakovoj ideji koja je inspirisala Fajnmanov rad.

zadatim graničnim uslovima, pri čemu je doprinos svake pojedinačne trajektorije jednostavna funkcija dejstva te trajektorije. Funkcionalni formalizam nudi intuitivno blisku i bogatu sliku onoga šta se dešava između merenja. Na primer, on osvetljava pravu prirodu semiklasičnog limesa, tj. prelaska kvantne u klasičnu teoriju. Lako se pokazuje (semiklasični razvoj) da dominantan doprinos amplitudama daju trajektorije u neposrednoj okolini klasične trajektorije (tj. trajektorije koja ima minimalno dejstvo). Širina relevantne oblasti oko klasične trajektorije je to veća što je Plankova konstanta \hbar veća od karakterističnog dejstva sistema. U semiklasičnom limesu ($\hbar \rightarrow 0$) se relevantna oblast sužava samo na klasično rešenje i tada je klasična mehanika dobra aproksimacija prave dinamike. Sa druge strane, u ultra-kvantnom limesu ($\hbar \gg S$) oblast relevantnih trajektorija se širi – zapravo sve trajektorije postaju jednako važne, a ne samo one u blizini klasičnog rešenja.

Ovim je ilustrovan samo jedan primer u kome je funkcionalni formalizam doveo do razvoja jedne nove fizičke intuicije. Funkcionalni formalizam se pokazao kao krucijalan za dalji razvoj teorijske fizike, prvenstveno zato što je olakšao uopštenje procesa kvantizacije (od kvantne mehanike, do nerelativističke i relativističke teorije polja, pa sve do teorija struna i polja u krivom prostor-vremenu), no i zato što je u jedinstveni formalizam obuhvatio dva osnovna pravca teorijske fizike – fiziku visokih energija (tj. fiziku elementarnih čestica) i fiziku kondenzovanog stanja, omogućivši time razmenu niza osnovnih ideja između ove dve oblasti (npr. narušenje simetrije i fazni prelazi, renormalizacija, solitoni i instantoni).

U operatorskom formalizmu rešiti neki model znači pronaći svojstvene vrednosti hamiltonijana (energetski spektar) i odgovarajuća svojstvena stanja. U funkcionalnom formalizmu nalaženje amplituda verovatnoće prelaza iz stanja $|q_i, t_i\rangle$ u stanje $|q_f, t_f\rangle$ predstavlja rešenje teorije jer ukoliko poznamo vrednosti ovih amplituda moguće je izračunati vrednosti svih opservabli. U bilo kom formalizmu da smo, broj egzaktno rešivih teorija je mali. U ovome je operatorski formalizam često i u prednosti u odnosu na funkcionalni. Naime, funkcionalni integrali su izuzetno složeni matematički objekti za koje ne postoji razvijena opšta teorija slična, na primer, Rimanovoj teoriji određenih integrala. U funkcionalnom formalizmu, u ovom trenutku, nemamo mnogo više od same definicije formule funkcionalnog integrala kao beskonačnog limesa višestrukih integrala.

Nešto širi krug teorija se može proučavati aproksimativno, i u izvođenju raznih aproksimativnih šema je funkcionalni formalizam bio od posebne koristi. Ipak, najveći broj teorija

od interesa možemo rešavati isključivo numerički. Ovde se vidi dodatna velika prednost funkcionalnog formalizma, pošto je definicija funkcionalnih integrala kao limesa diskretnih izraza izuzetno pogodna za numerički rad.²

Da bismo amplitude prelaza računali numerički u funkcionalnom formalizmu, potrebno je računati višestruke integrale, a Monte Karlo metod dominira nad drugim numeričkim metodima baš u tom slučaju. Detaljniji pregled dat je u dodatku A.

Centralna tema ovog rada je dobijanje energetskog spektra teorije na osnovu računatih amplituda prelaza. Amplitude se računaju numerički na osnovu formula izvedenih u funkcionalnom formalizmu. U radu ćemo pokazati vezu između particione funkcije i amplituda prelaza koja predstavlja most između kvantne i statističke mehanike. Biće predstavljen standardni metod računanja energetskog spektra teorije na osnovu poznavanja particione funkcije. U ovom radu ćemo opštu proceduru ilustrovati na primeru anharmonijskog oscilatora sa kvartičnom interakcijom. Važno je, međutim, naglasiti da se prezentovani numerički metod jednako lako može koristiti za dobijanje spektra bilo kog kvantnomehaničkog modela, te da se jednako može primeniti i na složenije kvantne sisteme kao što je kvantna teorija polja.

U seriji radova [4], [5], [6] i [7] analitički je opisan tok opšte kvantne teorije od jedne njene diskretizacije do druge, pa sve do kontinualne teorije. Direktne posledice ovoga su analitičke relacije kao, na primer, izvedena generalizacija Ojlerove sumacione formule na funkcionalne integrale [5]. Na nivou numeričkih simulacija ovaj novi analitički input dovodi do ubrzanja računanja amplituda prelaza opšte kvantne teorije za osam redova veličine. Na samom kraju ovog rada ćemo analizirati poboljšanja do kojih dovodi ova procedura pri proračunu energetskog spektra neke teorije.

²Treba napomenuti, međutim, da su numeričke simulacije za računanje funkcionalnih integrala izuzetno računarski zahtevne. Dublje razumevanje analitičkih svojstava funkcionalnih integrala se u numerici direktno pretače na stvaranje novih suštinski efikasnijih algoritama.

2

Funkcionalni formalizam

Arhetipski problem kvantne mehanike je opis kretanja jedne čestice u jednoj dimenziji. Razmatraćemo ovaj model upravo zbog njegove jednostavnosti, no treba naglasiti da se u funkcionalnom formalizmu uopštenje na višedimenzione i komplikovanije sisteme vrši relativno pravolinijski. Jedna od prednosti funkcionalnog formalizma u odnosu na druge formulacije kvantne mehanike, posebno sa numeričke tačke gledišta, je upravo u tome što sve teorije tretira na isti način.

2.1 Kanonska kvantizacija

Kretanje čestice je u klasičnoj mehanici opisano hamiltonijanom koji u opštem slučaju ima oblik $H(p, q) = f_{ab}p^a q^b$, gde podrazumevamo sumiranje po ponovljenim indeksima. Kanonsku kvantizaciju vršimo zamenom promenljivih p i q operatorima \hat{p} i \hat{q} tako da oni zadovoljavaju komutacionu relaciju $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$. Na ovaj način kvantni hamiltonijan nije jednoznačno definisan jer prelazimo sa komutirajućih na nekomutirajuće objekte. Na primer, izrazu pq možemo pridružiti izraz $a\hat{p}\hat{q} + (1-a)\hat{q}\hat{p}$ sa potpunom slobodom izbora vrednosti a , a svi ti izrazi se međusobno razlikuju. Nejednoznačnost otklanjamo izborom konkretne preskripcije uređenja. Najjednostavnije preskripcije su leva i desna (označavćemo ih indeksima (L) i (D)), u kojima operator impulsa uvek pišemo sa leve, odnosno desne strane respektivno. U ovim preskripcijama hamiltonijan ima oblike

$$\hat{H}_L = f_{ab}\hat{p}^a\hat{q}^b, \quad \text{odnosno} \quad \hat{H}_D = f_{ab}\hat{q}^b\hat{p}^a.$$

Primetimo, međutim, da ove preskripcije, mada jednostavne ne pridružuju hamiltonijanu hermitski operator. Da bi preskripcija bila dobra ona mora svakoj fizički merljivoj veličini (opservabli) da pridružuje hermitski operator. Najjednostavnija i najčešće korišćena je simetrična ili Vajlova preskripcija. Formalna definicija Vajlovog uređenja implicitno je data preko izraza

$$(\alpha \hat{p} + \beta \hat{q})^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \alpha^k \beta^{n-k} (\hat{p}^k \hat{q}^{n-k})_W.$$

EksPLICITNO zapisan proizvod operatora će u Vajlovoj preskripciji biti simetričan (pa time i hermitski) tako da dobijamo

$$\begin{aligned} pq &\rightarrow (\hat{p}\hat{q})_W = \frac{1}{2}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}) \\ p^2q &\rightarrow (\hat{p}^2\hat{q})_W = \frac{1}{3}(\hat{p}^2\hat{q} + \hat{p}\hat{q}\hat{p} + \hat{q}\hat{p}^2) \quad \text{itd.} \end{aligned}$$

2.2 Određivanje energetskeg spektra

Cilj ovog rada je određivanje energetskeg spektra teorije. Opisacemo standardni metod za određivanje spektra na osnovu izračunatih vrednosti particione funkcije. Broj teorija za koje možemo analitički izračunati particionu funkciju je veoma mali, pa stoga koristimo razne aproksimativne metode za njeno izračunavanje. Numeričko računanje Z je u funkcionalnom formalizmu vrlo jednostavno i prirodno, što ćemo i pokazati. Opisana procedura može se lako uopštiti na bilo koji drugi fizički sistem.

Objasnićemo najpre kako se iz particione funkcije računaju energetske nivoi. U operatorskom formalizmu kvantne mehanike particiona funkcija data je u obliku $Z[\beta] = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}}$. Kao i u klasičnoj teoriji na osnovu poznate particione funkcije možemo izračunati razne termodinamičke potencijale. Za slobodna energiju, na primer, važi:

$$F[\beta] = -\frac{1}{\beta} \ln Z[\beta]. \quad (2.1)$$

Vrednost particione funkcije se u operatorskom formalizmu kvantne mehanike izračunava eksplicitnim eksponenciranjem datog hamiltonijana i računanjem traga dobijene matrice. Označimo vrednosti svojstvene energije hamiltonijana sa E_n tako da važi $E_n < E_{n+1}$ i $n = 0, 1, 2, \dots$. Uz pretpostavku da energije nisu degenerisane particiona funkcija će biti zadata relacijom

$$Z[\beta] = \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (2.2)$$

Ova veza između vrednosti svojstvenih energija hamiltonijana i particione funkcije je jednoznačna. Jasno je da ako poznamo vrednosti energija možemo direktno izračunati particionu funkciju. Međutim, naš zadatak je da uradimo obrnuto: u funkcionalnom formalizmu lako računamo vrednosti particione funkcije (što ćemo pokazati nešto kasnije), a na osnovu njih treba izračunati spektar teorije. Ovaj problem je u matematičkom smislu jednostavno rešiti ako nam je funkcija $Z[\beta]$ u potpunosti poznata. Ako izraz (2.2) uvrstimo u jednačinu za slobodnu energiju primećujemo da u limesu $\beta \rightarrow \infty$ vrednost slobodne energije teži energiji najnižeg nivoa E_0 , tako da nalaženjem ovog limesa nalazimo i vrednost energije E_0 . Ako sada definišemo novu funkciju $Z^*[\beta] = Z[\beta] - \exp\{-\beta E_0\}$, ona će formalno predstavljati particionu funkciju sistema čije su svojstvene energije E_n , gde indeks n uzima vrednosti $n = 1, 2, \dots$. Iterativnim ponavljanjem opisanog postupka za novi sistem možemo odrediti i sve ostale energetske nivoe.

Međutim, u praksi se suočavamo sa brojnim problemima prilikom izračunavanja spektra, jer ne poznamo vrednost Z u svakoj tački. Numerički se ne može izračunati $F[\infty]$, što je tačna vrednost energije osnovnog nivoa. U svetu fizičara beskonačno znači dovoljno veliko. Numerika nas ograničava i u računanju Z za proizvoljno veliko β . Sa porastom β vrednost Z teži nuli, tako da će zbog konačne tačnosti računarskih simulacija Z postati nula i za neku konačnu vrednost β . Takođe, veličina greške u određivanju Z raste sa porastom β . Ovaj problem se može rešiti na račun vremena trajanja simulacije.

2.3 Particiona funkcija u funkcionalnom formalizmu

Da bismo izveli formulu za računanje Z primetimo najpre vezu između particione funkcije i evolucionog operatora. Kod konzervativnih sistema operator koji opisuje evoluciju od trenutka t_i do trenutka $t_f = t_i + T$ je

$$\hat{U}(T) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} T \hat{H} \right\}.$$

Uočimo da će particiona funkcija biti jednaka tragu evolucionog operatora ako uzmemo da je njen argument $\beta = \frac{i}{\hbar} T$. U koordinatnoj reprezentaciji taj izraz će imati oblik

$$Z\left[\frac{i}{\hbar} T\right] = \int_{-\infty}^{\infty} dq \langle q | \hat{U}(T) | q \rangle.$$

Sledeći korak je izračunavanje matričnih elemenata evolucionog operatora $\langle q_\beta | \hat{U}(T) | q_\alpha \rangle$ i ovo je mesto gde uvodimo funkcionalni integral.

Podelićemo vremenski interval evolucije sistema na N jednakih podintervala. Podeone tačke označićemo sa $t_n = t_i + n\epsilon$, gde je $\epsilon = (t_f - t_i)/N$, tj. $t_0 = t_i$ i $t_N = t_f$. Takođe uvedimo oznake $q_0 = q_i$ i $q_N = q_f$. Ako sad u izraz za matični element ubacimo $N - 1$ razlaganja jedinice u koordinatnoj reprezentaciji, izraz za matični element postaje

$$\int dq_1 \dots dq_{N-1} \langle q_N | \hat{U}(\epsilon) | q_{N-1} \rangle \langle q_{N-1} | \hat{U}(\epsilon) | q_{N-2} \rangle \dots \langle q_1 | \hat{U}(\epsilon) | q_0 \rangle. \quad (2.3)$$

Kao što ćemo videti najpogodnije je da uzmemo veliki broj podeonih tačaka N . U tom slučaju lako možemo računati amplitude prelaza za vremenski interval ϵ u gornjem izrazu. To ćemo uraditi u levoj preskripciji u kojoj hamiltonijan ima oblik $\hat{H}_L = f_{ab} \hat{p}^a \hat{q}^b$. Ukoliko je interval ϵ dovoljno mali možemo $\hat{U}(\epsilon)$ da napišemo kao $\hat{U}(\epsilon) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L$. Umetanjem još jednog razlaganja jedinice (ovog puta u impulsnoj reprezentaciji) dobija se

$$\begin{aligned} \langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_L &\approx \langle q_{n+1} | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \langle q_{n+1} | p_n \rangle \langle p_n | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon \hat{H}_L | q_n \rangle = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar} p_n q_{n+1}\right\}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle p_n | \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \epsilon f_{ab} \hat{p}^a \hat{q}^b | q_n \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \frac{\exp\left\{\frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n)\right\}}{2\pi\hbar} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon H(p_n, q_n)\right) \\ &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_n)\right]\right\}, \end{aligned}$$

gde smo iskoristili poznatu vrednost skalarnog proizvoda $\langle q | p \rangle = \langle p | q \rangle^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} pq}$. U limesu $N \rightarrow \infty$ približne jednakosti u gornjem izrazu, koje važe do na linearne članove po ϵ , postaju egzaktno. Na sličan način se trivijalno pokazuje da bismo za desnu preskripciju dobili:

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_R \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H(p_n, q_{n+1})\right]\right\}.$$

Može se pokazati da se za Vajlovu simetričnu preskripciju dobija:

$$\langle q_{n+1} | \hat{U}(\epsilon) | q_n \rangle_W \approx \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H\left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2}\right)\right]\right\}.$$

Primetimo da se ove tri preskripcije razlikuju samo po izboru tačke u intervalu $[q_n, q_{n+1}]$ u kojoj se računa hamiltonijan. Ovo su zapravo različite Darbuove sume jedne teorije. U opštem slučaju nekomutiranje \hat{p} i \hat{q} u operatorskom formalizmu se svodi na neekvivalentnost različitih Darbuovih suma u funkcionalnom formalizmu. Ubuduće ćemo koristiti isključivo

Vajlovu preskripciju tako da indeks W nećemo pisati. Ako ovaj rezultat uvrstimo u izraz (2.3) i pustimo da N teži beskonačnosti, dobijamo

$$\begin{aligned} \langle q_0 | \hat{U}(T) | q_N \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dq_1 \dots dq_{N-1} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} \cdot \\ &\cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - H \left(p_n, \frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Desna strana gornjeg izraza predstavlja definiciju funkcionalnog integrala u faznom prostoru. Kraći formalni zapis je

$$\int [dqdp] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} (p\dot{q} - H) dt \right\}. \quad (2.5)$$

Važno je naglasiti da iako je svaki pojedinačni integral u definiciji Rimanov, funkcionalni integral u limesu $N \rightarrow \infty$ nema to svojstvo. Kao što smo već napomenuli, vrednost limesa u izrazu (2.4) u opštem slučaju zavisi od izbora preskripcije koja direktno utiče na izbor Darbuove sume za integral u eksponentu. Upravo u ovoj osobini funkcionalnog integrala leži zapis nekomutativnosti teorije, a to je i jedan od osnovnih razloga zašto još nije razvijena opšta teorija funkcionalnih integrala

Fajnman je originalno dao amplitude preko funkcionalnog integrala u konfiguracionom prostoru. Time je zapravo završio projekat koji je započeo Dirak, a čiji je cilj bio da se kvantna mehanika da preko lagranžijana, odnosno dejstva. Izraz (2.4) nam daje jasan put kako treba da dođemo do ovakvog funkcionalnog integrala: treba izvršiti integraciju po svim impulsima. Nažalost to u opštem slučaju nije moguće uraditi. Međutim, to ne predstavlja praktičan problem jer je skoro u svim fizičkim teorijama hamiltonijan kvadratičan po p . Tada su svi integrali Gausovi, pa ih možemo rešiti. U ovom radu ograničićemo se na klasu hamiltonijana oblika $H = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$. Gotovo svi modeli koji nas interesuju u fizici upadaju u ovu klasu hamiltonijana. Primetimo da hamiltonijan iz ove klase ima isti oblik u svim preskripcijama jer ne sadrži članove tipa $\hat{p}\hat{q}$. Sada ćemo izvršiti integraciju po impulsima

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi\hbar} \dots \frac{dp_{N-1}}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[p_n \frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} - \frac{1}{2}p_n^2 - V \left(\frac{q_n + q_{n+1}}{2} \right) \right] \right\}.$$

Kako je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{2\hbar} p_n^2 + \frac{i}{\hbar} p_n (q_{n+1} - q_n) \right\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar i\epsilon}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{2\hbar} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 \right\},$$

dobijamo

$$\langle q_f | \hat{U}(t_f - t_i) | q_i \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dq_1 \dots dq_{N-1}}{(2\pi\hbar i\epsilon)^{N/2}}.$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right] \right\} \quad (2.6) \\
& = \int [dq] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L} dt \right\}.^1
\end{aligned}$$

Integral u eksponentu prepoznajemo kao diskretizovan oblik izraza za klasično dejstvo teorije $S[q(t)] = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L} dt$. Matrični elementi evolucionog operatora $\langle q_f | \hat{U}(T) | q_i \rangle$ predstavljaju amplitudu verovatnoće prelaza iz stanja $|q_i\rangle$ u stanje $|q_f\rangle$ za vreme T . Konačno, izraz (2.6) predstavlja integral po svim trajektorijama $q(t)$ saglasnim sa navedenim graničnim uslovima, tako da svaka trajektorija daje doprinos od $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S[q(t)]\right)$ ukupnoj amplitudi prelaza. Fajnman je prilikom formulisanja funkcionalnog formalizma ovo uzeo za postulat. Mi smo ovde pokazali kako se Fajnmanova formulacija može izvesti iz operatorskog formalizma, tj. da su ove dve formulacije ekvivalentne.

Prelaskom na imaginarno vreme $t \rightarrow \tau = it$, takozvanom Vikovom rotacijom, dobijamo vezu sa statističkom mehanikom. Transformacija izraza u eksponentu jednačine (2.6) ima oblik

$$iS = i \int_0^T dt \mathcal{L}(q(t)) \longrightarrow - \int_0^{iT} d\tau \mathcal{L}(q(\tau)).$$

Ako sada pređemo u sistem prirodnih jedinica u kom je $\hbar = 1$ i uvedemo smenu $\beta = iT$, izraz za partionu funkciju u funkcionalnom formalizmu se svodi na

$$Z = \int [dq] \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau \mathcal{L}(q(\tau)) \right\}. \quad (2.7)$$

Primetimo da funkcionalna mera $[dq]$ u izrazu za partionu funkciju ima jedno dq više u odnosu na meru za amplitudu prelaza (upravo ova dodatna integracija nam daje trag), a integracije se vrše po svim mogućim putanjama koje zadovoljavaju uslov periodičnosti $q(0) = q(\beta)$.

¹Mera $[dq]$ u funkcionalnom integralu u konfiguracionom prostoru sadrži netrivialan član koji zavisi od ϵ . Za klasu hamiltonijana oblika $H = \frac{1}{2}G(q)p^2 + V(q)$ mera sadrži i članove zavisne od $G(q)$. U ovom smislu Dirak-Fajnmanov program svođenja kvantizacije na Lagranžev formalizam nije sasvim doveden do kraja, jer moramo koristiti Hamiltonov formalizam da bi definisali meru.

3

Numeričko izračunavanje energetskeg spektra

Da bismo vrednost funkcionalnog integrala računali numeričkom simulacijom preko definicione formule moramo preći na realne promenljive što postizemo Vikovom rotacijom. Tako za partionu funkciju u prirodnom sistemu jedinica ($\hbar = 1$) dobijamo definicionu formulu:

$$Z[\beta] = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_0 dq_1 \cdots dq_{N-1}}{(2\pi\hbar i \epsilon)^{N/2}} \cdot \exp \left\{ - \sum_{n=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{1}{2} \left(\frac{q_{n+1} - q_n}{\epsilon} \right)^2 + V \left(\frac{q_{n+1} + q_n}{2} \right) \right] \right\}, \quad (3.1)$$

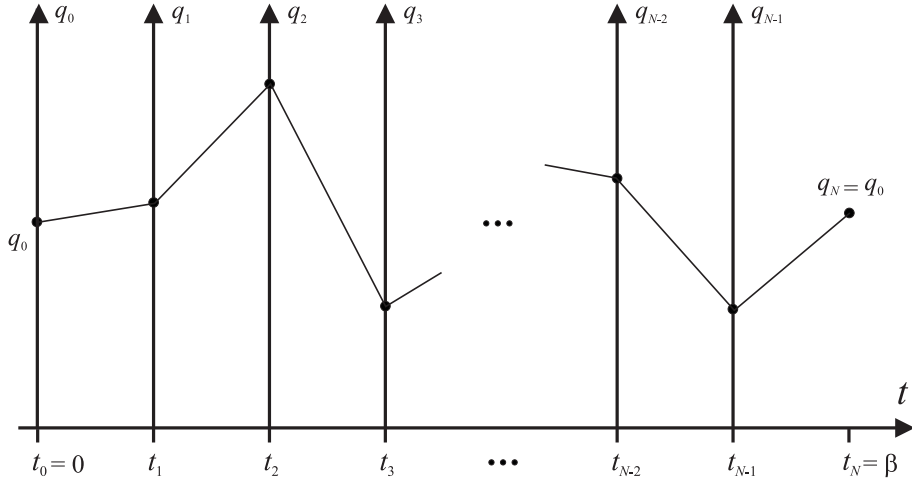
uz oznaku $q_N = q_0$. Za konačnu vrednost N gornju sumu računamo Monte Karlo simulacijom na sledeći način. Skup svih zatvorenih trajektorija od trenutka $\tau = 0$ do $\tau = \beta$ aproksimiramo skupom istih takvih izlomljenih trajektorija koje se sastoje od N duži. Poneke tačke su promenljive i mogu da se nađu na proizvoljnom mestu na odgovarajućoj pravoj (Slika 3.1), što odgovara integraciji po promenljivim q_0, q_1, \dots, q_{N-1} u definiciji funkcionalnog integrala.

3.1 Osnovni energetske nivo

U daljem radu ćemo opšti metod računanja spektra ilustrovati na primeru anharmonijskog oscilatora sa kvartičnim anharmonicitetom. Takav model ima potencijal oblika

$$V(q) = \frac{1}{2}q^2 + \frac{g}{4!}q^4.^1$$

¹Radi jednostavnosti smo uzeli da je $\omega^2 = 1$.



Slika 3.1: Ilustracija definicije (3.1) particione funkcije u konfiguracionom prostoru

Specifičnost u numeričkom rešavanju funkcionalnih integrala u odnosu na rešavanje običnih višestrukih integrala je postojanje limesa $N \rightarrow \infty$ u definiciji (2.6). To znači da ako za svaku vrednost broja podeonih tačaka N izračunamo vrednosti funkcionalnog integrala Z_N , iz dobijenih vrednosti možemo ekstrahovati ocenu prave vrednosti funkcionalnog integrala Z fitovanjem odgovarajuće funkcije. Lako se vidi da je u pitanju polinomijalna zavisnost po $1/N$,

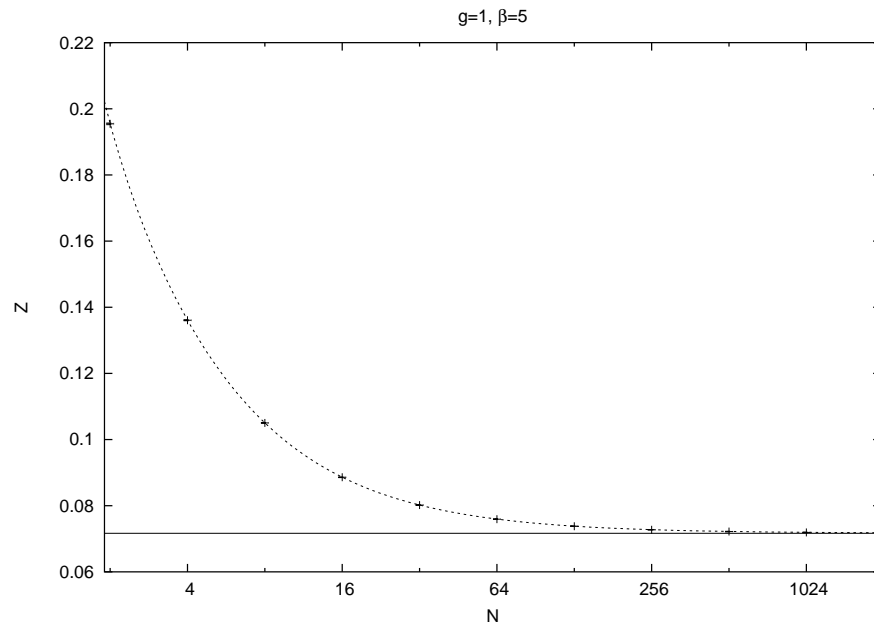
$$Z_N = Z + \frac{A}{N} + \frac{B}{N^2} + \dots, \quad (3.2)$$

a parametri ove zavisnosti se mogu odrediti metodom najmanjih kvadata. Slobodni član gornjeg polinoma je tražena vrednost funkcionalnog integrala, a metod najmanjih kvadrata nam daje i ocenu greške ΔZ dobijene vrednosti Z . Tipična zavisnost vrednosti Z_N , kao i fit funkcijom (3.2) prikazana je na slici 3.1.

Računali smo vrednost particione funkcije u zavisnosti od β Monte Karlo metodom za razne vrednosti interakcione konstante g . Na osnovu dobijenih vrednosti za Z izračunali smo vrednosti slobodne energije. Jednačinu za slobodnu energiju (2.1) za veliko β možemo aproksimirati izrazom

$$F \approx E_0 + \frac{1}{\beta} e^{-\beta C}.$$

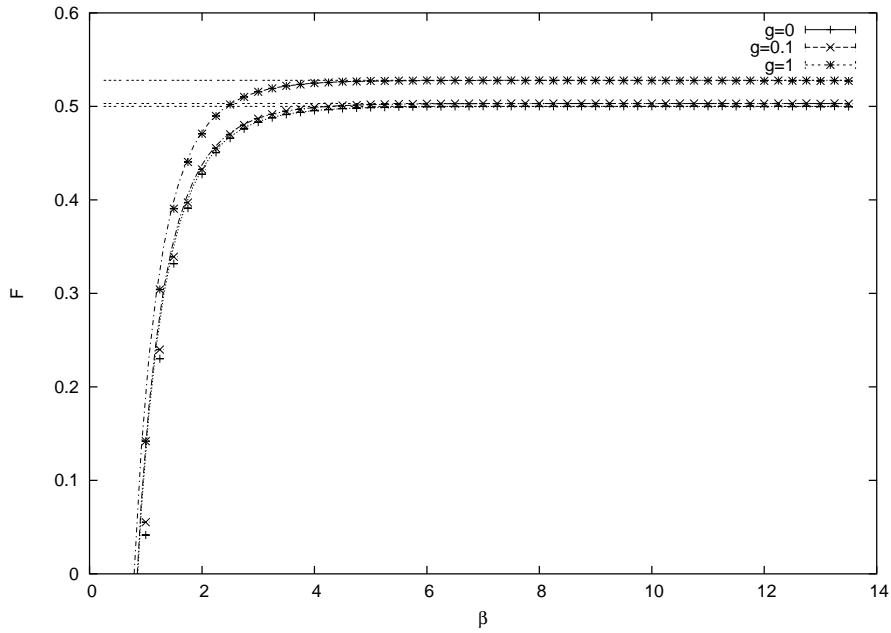
Iz eksperimentalno dobijenih vrednosti slobodne energije metodom najmanjeg kvadrata nalazimo vrednosti parametara E_0 i C kao i odgovarajuće greške. Zavisnosti slobodne energije od β za vrednosti interakcione konstante $g = 0, 0.1$ i 1 prikazani su na slici 3.3. Prilikom fita odbacujemo prvih nekoliko tačaka za koje β nije dovoljno veliko da bismo mogli



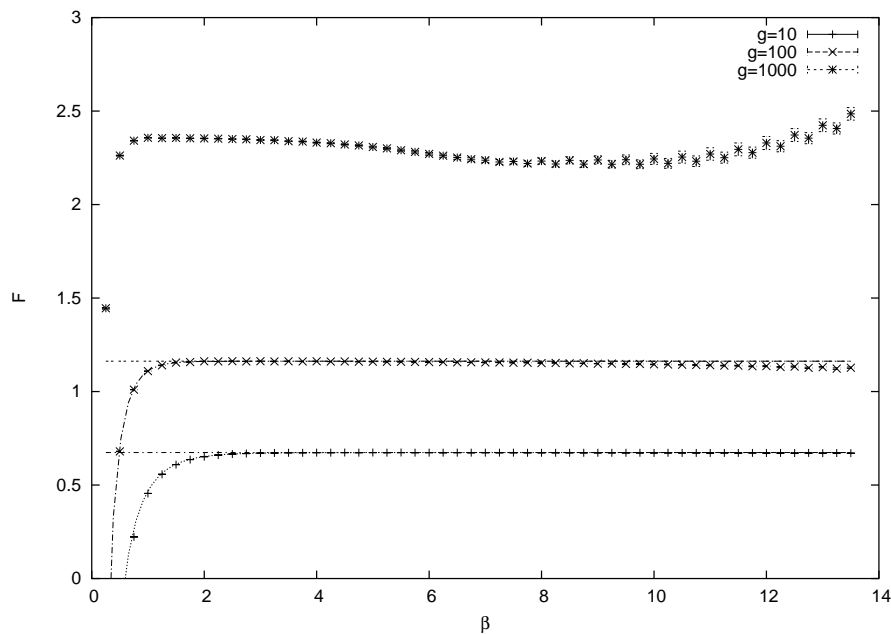
Slika 3.2: Vrednosti diskretizovane particione funkcije Z_N u zavisnosti od vrednosti broja podeonih tačaka N za $\beta = 5$ i $g = 1$. Prikazana je i vrednost limesa za $N \rightarrow \infty$ dobijena fitom.

primeniti aproksimaciju. Takođe je primećeno da za veće vrednosti promenljive β vrednost F počinje da opada, što je artefakt numeričke procedure zadate tačnosti; te vrednosti odbacujemo prilikom fita.

Ovakvo ponašanje možemo pripisati činjenici da za veliko β interval $\epsilon = \beta/N$ između podeonih tačaka nije dovoljno mali za vrednosti N do kojih smo išli u našim simulacijama. Otklanjanje ovih artefakata bilo bi praćeno povećanjem vremena potrebnog za izvršavanje simulacije. Efekat je naročito izražen kod modela kod kojih je anharmonijski član potencijala dominantan. Reskaliranjem teorije $q \rightarrow \lambda q$, gde je $g^2 \lambda = 1$, prelazimo na teoriju u kojoj je $g = 1$ a \hbar prelazi u $g\hbar$. Na taj način za $g > 1$ kao da povećavamo vrednost \hbar , a to utiče na povećanje oblasti u kojoj se nalaze trajektorije koje daju dominantan doprinos amplitudi. Povećanje oblasti integracije bi nas takođe koštalo u kompjuterskim resursima i povećanju vremena trajanja simulacije. Na slici 3.4 ilustrovano je opisano ponašanje, i primećuje se da za vrednost $g = 1000$ slobodna energija počinje da opada već pri malim vrednostima β tako da iz ovog grafika uopšte ne možemo očitati vrednost energije osnovnog nivoa. U ovom slučaju je dakle neophodno koristiti simulacije sa većim vrednostima za N .



Slika 3.3: Vrednosti slobodne energije F u zavisnosti od β za vrednosti parametara $g = 0, 0.1$ i 1 . Prikazane su i vrednosti limesa E_0 dobijene fitovanjem.



Slika 3.4: Vrednosti slobodne energije F u zavisnosti od β za vrednosti parametara $g = 10, 100$ i 1000 . Prikazane su i vrednosti energije osnovnog nivoa E_0 dobijene fitovanjem. Za vrednost $g = 1000$ ne možemo očitati vrednost energije osnovnog nivoa

3.2 Pobuđeni nivoi

U odeljku 2.2 objasnili smo metod kojim računamo energetski nivo E_n ako su nam poznati svi niži nivoi. U praksi je broj nivoa koji možemo odrediti konačan usled ograničenja koje

nam nameće numerika. Broj eksperimentalnih tačaka iz kojih računamo energetske nivoe se smanjuje sa povećanjem nivoa, a greška se nagomilava. Stoga nam broj energetskih nivoa koje možemo računati zavisi od broja eksperimentalnih podataka, kao i od preciznosti numeričkih simulacija koja direktno zavisi od broja Monte Carlo uzoraka i broja podeonih tačaka. Rezultati dobijenih vrednosti energetskog spektra dati su u tabeli 3.1.

g	E_0	E_1	E_2	E_3
0	0.49992 (2)	1.504 (6)	2.45 (7)	3.5 (7)
0.1	0.50298 (2)	1.522 (7)	2.45 (7)	3.4 (7)
1	0.52756 (2)	1.642 (5)	2.68 (6)	
10	0.67333 (4)	2.26 (1)		
100	1.1618 (1)	4.12 (3)		

Tabela 3.1: Energetski spektar anharmonijskog oscilatora za različite vrednosti parametra interakcije

3.3 Ubrzanje

Do sad smo u više navrata pominjali da svako poboljšanje u smislu preciznosti rezultata ili dobijanja viših energetskih nivoa plaćamo vremenom trajanja simulacije. Stoga je potrebno razviti metode za ubrzanje numeričkih simulacija. Da bismo značajno ubrzali numeričke procedure za izračunavanje funkcionalnih integrala neophodno je implementirati nova analitička znanja. U seriji radova [4], [5], [6] i [7] izvršeno je sistematsko istraživanje odnosa između različitih diskretizacija date teorije. Istraživanja su rezultovala procedurom za konstruisanje serije efektivnih dejstava $S^{(p)}$ koja imaju isti kontinuum limes kao i početno dejstvo S , ali koja teže tom limesu kao $1/N^p$. Problem je što sa povećanjem nivoa tačnosti p složenost izraza za $S^{(p)}$ eksponencijalno raste, a greška opada stepeno tako da se primena novog efektivnog dejstva isplati samo do neke vrednosti p , ali te vrednosti su visoke. Za sad je analitički izračunato $S^{(p)}$ do vrednosti $p = 10$.

Mi smo primenili ubrzanje sa nivoom tačnost $p = 5$ i vrednosti izračunatih energetskih nivoa prikazani su u tabeli 3.2. Pri tom smo koristili iste parametre numeričke simulacije i istu vrednost maksimalnog N kao i u računu bez ubrzanja. Primenom ubrzanja vrednost

Z_N znatno brže konvergira ka pravoj vrednosti, dobar rezultat dobijamo i za relativno mali broj podeonih tačaka N (samim tim za mnogo kraće vreme izračunavanja), a primećujemo da nam ovo ubrzanje daje rezultate i u nekim slučajevima za koje metod bez ubrzanja to nije činio.

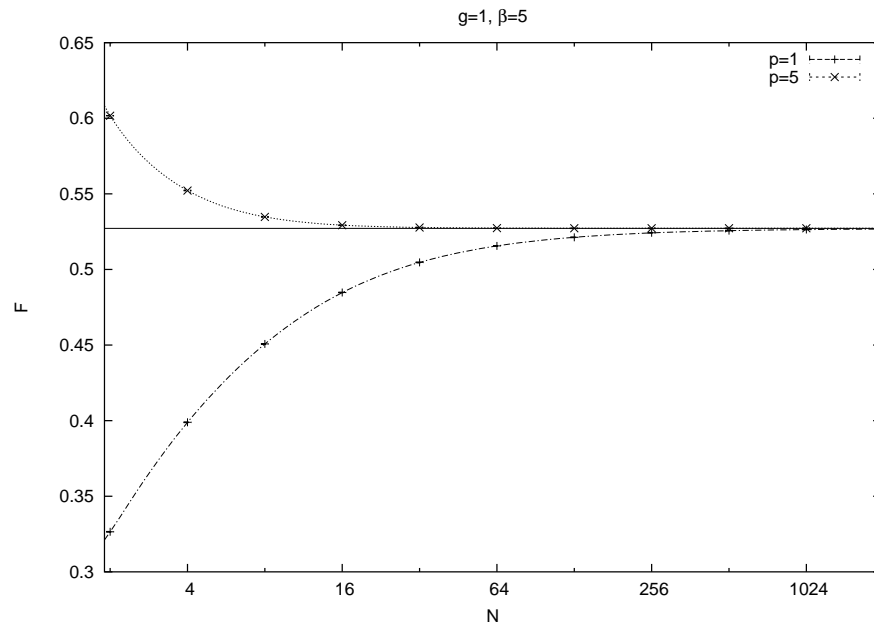
g	E_0	E_1	E_2	E_3
0	0.50028 (4)	1.51 (1)	2.5 (1)	3.2 (5)
0.1	0.50354 (7)	1.498 (9)	2.6 (1)	4.1 (4)
1	0.52825 (4)	1.616 (7)	2.8 (1)	
10	0.67402 (5)	2.22 (1)	4.1 (4)	
100	1.1614 (4)	4.16 (8)		
1000	2.3613 (7)			

Tabela 3.2: Energetski spektar anharmonijskog oscilatora za različite vrednosti parametra interakcije računane korišćenjem ubrzanja $p=5$

Na slici 3.5 upoređene su zavisnosti F_N od N za $p = 1$ (nepopravljeno dejstvo) i $p = 5$ (dejstvo popravljeno do petog nivoa tačnosti). Vidimo da za $p = 5$ vrednost F_N postaje jednaka pravoj vrednosti (do na grešku) već za $N \approx 32$. Dolazimo da zaključka da već za $N = 32$ možemo koristiti vrednosti funkcije F_N za dobijanje energetskih nivoa i te vrednosti su date u tabeli 3.3.

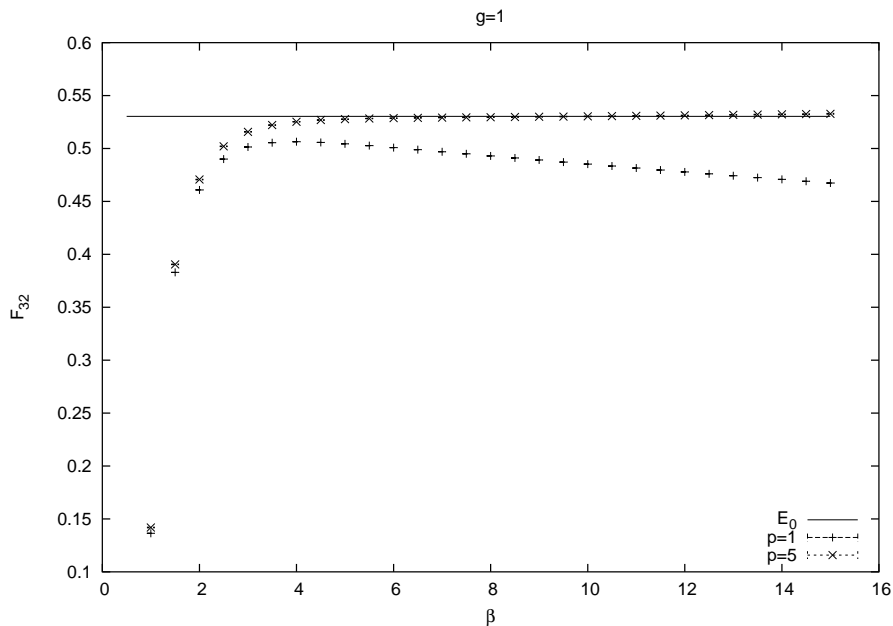
g	E_0	E_1	E_2
0	0.50229 (6)	1.46 (1)	2.5 (1)
0.1	0.50554 (6)	1.47 (2)	2.7 (2)
1	0.53041 (4)		
10	0.6769 (1)		
100	1.1663 (3)		
1000	2.3613 (7)		

Tabela 3.3: Energetski spektar anharmonijskog oscilatora za različite vrednosti parametra interakcije računane korišćenjem ubrzanja $p = 5$ i $N = 32$

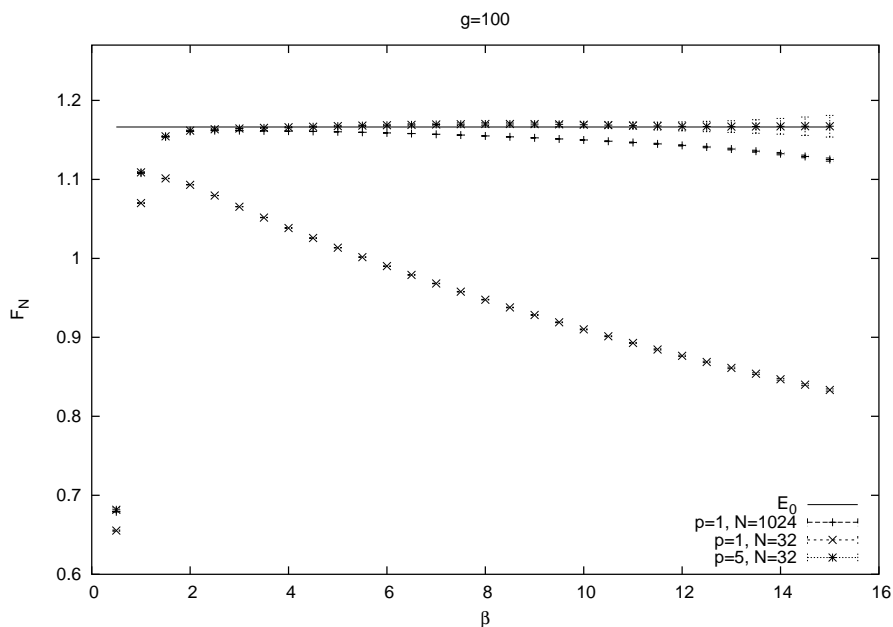


Slika 3.5: Vrednosti diskretizovane slobodne energije F_N u zavisnosti od N za $\beta = 5$ za simulacije bez ubrzanja ($p = 1$) i sa ubrzanjem ($p = 5$) pri vrednosti $g = 1$. Prikazana je i vrednost limesa za $N \rightarrow \infty$ dobijena fitom.

Na slici 3.6 upoređeni su rezultati za slobodnu energiju dobijeni za vrednosti $N = 32$. Vidimo da u tom slučaju F počinje da opada već pri malim vrednostima pre nego što dostigne vrednost osnovne energije, dok za $p = 5$ ostaje blisko graničnoj vrednosti i za velike vrednosti β . Na slici 3.7 prikazana je slobodna energija računata za vrednost konstante interakcije $g = 100$. Vidimo da se korišćenjem ubrzanja čak pri vrednosti $N = 32$ dobijaju bolji rezultati nego u simulacijama bez ubrzanja pri vrednosti $N = 1024$. U ovom konkretnom slučaju dobijamo znatno bolje rezultate za tridesetak puta kraće vreme izvršavanja simulacije.

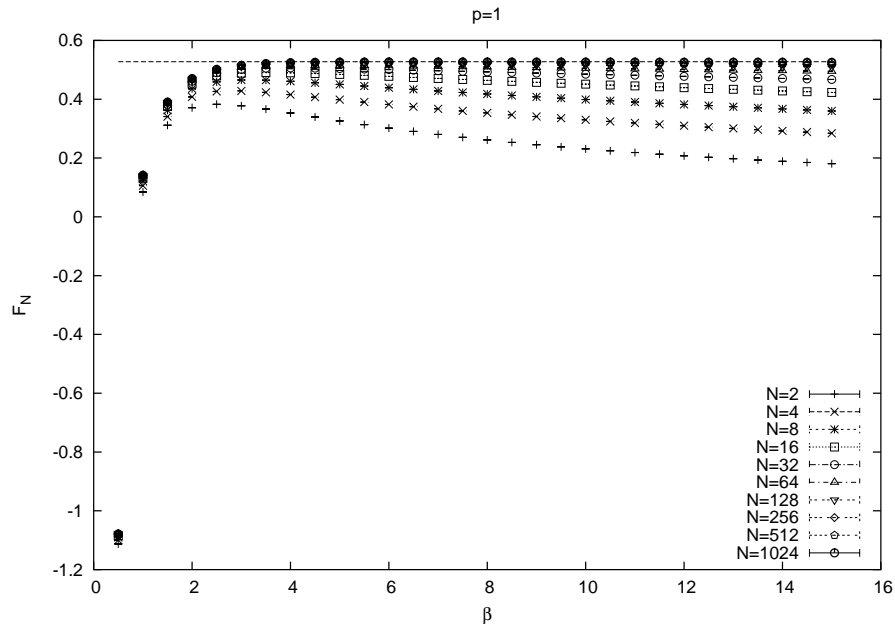


Slika 3.6: Vrednosti diskretizovane slobodne energije F_{32} u zavisnosti od β za simulacije bez ubrzanja ($p = 1$) i sa ubrzanjem ($p = 5$) pri vrednosti $g = 1$. Prikazana je i vrednost energije osnovnog nivoa dobijena fitom.

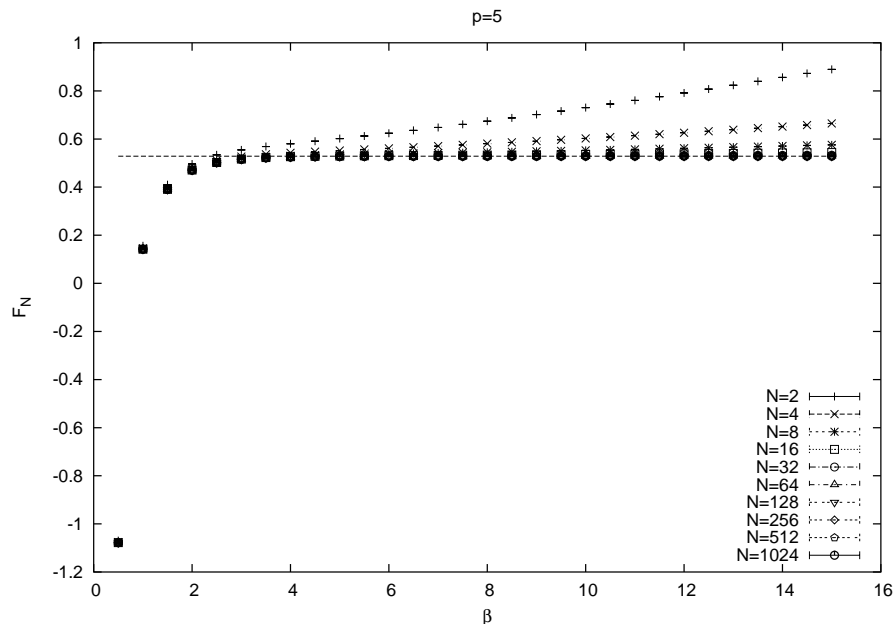


Slika 3.7: Vrednosti diskretizovane slobodne energije F_{32} u zavisnosti od β za simulacije bez ubrzanja ($p=1$) i sa ubrzanjem ($p=5$) pri vrednost $g = 100$. Za vrednosti dobijene ubrzanjem ($p = 5$) prikazana je i vrednost energije osnovnog nivoa dobijena fitom.

Slike 3.8 i 3.9 ilustruju brzinu konvergencije vrednosti F_N njihovom kontinuum limesu sa povećanjem vrednosti N . Očigledno je da korišćenjem ubrzanja diskretizovane vrednosti slobodne energije za dosta manje vrednosti N teže svom kontinuum limesu, a kako je vreme izvršavanja simulacije proporcionalno sa N do rezultata dolazimo u znatno kraćem roku.



Slika 3.8: Vrednosti diskretizovane slobodne energije F_N u zavisnosti od β za simulacije bez ubrzanja ($p = 1$) pri vrednost $g = 1$ za razne vrednosti N . Prikazana je i vrednost energije osnovnog nivoa.



Slika 3.9: Vrednosti diskretizovane slobodne energije F_N u zavisnosti od β za simulacije sa ubrzanjem ($p = 5$) pri vrednost $g = 1$ za razne vrednosti N . Prikazana je i vrednost energije osnovnog nivoa.

4

Zaključak

U ovom radu je prezentovan funkcionalni metod za rešavanje teorije sa posebnim osvrtom na računanje particione funkcije i dobijanje energetskog spektra na osnovu nje. Računat je funkcionalni integral za particionu funkciju numerički Monte Karlo metodom (čije su osnove datu dodatku A). Za ova izračunavanja korišćen je kod za računanje amplituda prelaza [12] koji smo prilagodili potrebama računanja particione funkcije. Metod računanja spektra ilustrovan je na primeru anharmonijskog oscilatora. Pokazano je kako se novi metod efikasnog računanja funkcionalnog integrala (tzv. (p) -ubrzanja), razvijen nedavno u *Laboratoriji za primenu računara u nauci* na Institutu za fiziku, može koristiti za efikasniji proračun spektra.

U budućem radu analiziraćemo teorije koje pored diskretnog poseduju i kontinualan spektar. Takođe, u planu je analiza teorija koje poseduju tuneliranje (potencijali sa dva vakuuma, ili sa lažnim vakuumom). Razvijeni metod, pogotovo (p) -ubrzanja, primenićemo na neke relevantne modele u fizici kondenzovanog stanja za koje do sada nije postojao efikasan način računanja spektra.

Dodatak A

Monte Karlo integracija

Da bismo izračunali funkcionalni integral potrebno je računati višestruke određene integrale, a u tom cilju najpogodnije je koristiti Monte Karlo (MC) metod. Uopšteno rečeno Monte Karlo je metod koji koristi slučajne brojeve i teoriju verovatnoće i statistike za rešavanje numeričkih problema. Klasični numerički metodi “kvadrature formule” sastoje se u podeli domena integracije na N delova i aproksimiranju integrala sumom

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx = \sum_{n=1}^N f(x_n)\Delta x_n,$$

gde je Δx_n širina n -tog dela u datoj podeli domena integracije definisanoj podeonim tačkama x_n . Ako u gornjoj formuli umesto vrednosti $f(x_n)$ koristimo pogodnije izabrane vrednosti možemo postići da greška ΔI bude proporcionalna sa $1/N^a$, gde je a mali prirodan broj čije su vrednosti tipično od 2 do 5. Ovo važi i za jednostruke i za višestruke integrale. Vreme izvršavanja algoritma T za D -tostruki integral proporcionalno je sa N^D , pa dobijamo da je $\Delta I \sim 1/T^{a/D}$. Sa druge strane, koristeći centralnu graničnu teoremu može se pokazati da kod Monte Karlo metoda uvek važi $\Delta I \sim 1/\sqrt{N_{MC}} \sim 1/\sqrt{T}$, gde je N_{MC} broj MC uzoraka, pa je jasno da kod računanja višestrukih integrala Monte Karlo metod dominira. Opisaćemo ukratko u čemu se sastoji ovaj metod. Jednostavni identitet

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{f(x)}{p(x)}p(x)dx \tag{A.1}$$

predstavlja osnovu za MC izračunavanje integrala tipa $I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx$. Ukoliko za funkciju p u gornjem izrazu odaberemo nenegativnu funkciju čiji je integral na intervalu $[\alpha, \beta]$ jednak jedan, onda ovu funkciju možemo da interpretiramo kao raspodelu neke slučajne promenljive i gornji izraz možemo da prepisemo u obliku $I = \langle f/p \rangle_p$, gde smo sa $\langle f/p \rangle_p$ označili srednju

vrednost funkcije f/p u odnosu na raspodelu p . Suštinu Monte Karlo metoda možemo da opišemo u četiri koraka:

1. generiše se N_{MC} slučajnih brojeva $(x_1, \dots, x_{N_{MC}})$ čija je raspodela data funkcijom p ,
2. izračunaju se vrednosti $f_i/p_i = f(x_i)/p(x_i)$ za $i \in \{1, \dots, N_{MC}\}$,
3. vrednost integrala I se oceni sa

$$I_{MC} = \frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} \frac{f_i}{p_i}, \quad (\text{A.2})$$

4. greška ΔI_{MC} gornje ocene vrednosti integrala se na osnovu centralne granične teoreme oceni sa

$$\Delta I_{MC} = \sqrt{\frac{1}{N_{MC} - 1} \left[\frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} \left(\frac{f_i}{p_i} \right)^2 - \left(\frac{1}{N_{MC}} \sum_{i=1}^{N_{MC}} \frac{f_i}{p_i} \right)^2 \right]}. \quad (\text{A.3})$$

Rezultate MC metoda citiramo u obliku $I = I_{MC} \pm \Delta I_{MC}$, uz interpretaciju greške na standardan način, kao širine odgovarajuće Gausove raspodele.

Za primenu MC metoda u ovom radu korišćen je sledeći način generisanja trajektorija: početnu tačku trajektorije (koja je jednaka krajnjoj) birali smo iz raspodele

$$p(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \tanh \beta}} \exp\left\{-\frac{q^2}{2 \tanh \beta}\right\}.$$

Izabrana je ova raspodela jer Monte Karlo metod daje najmanju grešku ako je funkcija f/p približno konstantna, a gornji izraz je do na konstantu jednak analitičkom rešenju za dijagonalne elemente amplitude za linearni harmonijski oscilator [9]. Unutrašnje podeone tačke zatim biramo bisekcionim metodom, detaljno opisanim u radu [13], koji je optimalan za računanje amplituda prelaza. Karakteristično za bisekcioni metod je da je broj podintervala na koji se deli vreme propagacije uvek jednak nekom stepenu broja dva.

Literatura

- [1] Feynman R. P. , Hibbs A. R. , *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [2] Feynman R. P. , Ph. D. Thesis: *The Principle of Least Action in Quantum Mechanics*, Princeton University, 1942.
- [3] Kalos M. H. , Whitlock P. A. , *Monte Carlo methods*, Vol.1: Basics, John Wiley and Sons, New York, 1986.
- [4] Bogojević A. , Balaž A. , Belić, Phys. Rev. Lett. **94**, 180403 (2005)
- [5] Bogojević A. , Balaž A. , Belić, Phys. Lett. A **344**, 84 (2005)
- [6] Bogojević A. , Balaž A. , Belić, Phys. Rev. B **72**, 064302 (2005)
- [7] Bogojević A. , Balaž A. , Belić, Phys. Rev. E **72**, 036128 (2005)
- [8] Balaž A. , Magistarski rad: *Nova rekurzivna formula za funkcionalni integral u kvantnoj mehanici: analitičke i numeričke osobine*, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, 2004.
- [9] Balaž A. , Diplomski rad: *Formulacija kvantne mehanike pomoću funkcionalnog integrala*, Fizički fakultet, Univerzitet u Beogradu, 1997.
- [10] Messiah A. , *Quantum Mechanics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1961.
- [11] Press W. H. , Teukolsky S. A. , Vetterling W. T. , Flannery B. P. , *Numerical Recipes in Fortran*, The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press, 1995.
- [12] <http://scl.phy.bg.ac.yu/speedup/>
- [13] Ceperly D. M. , Rev. Mod. Phys. **67**, 279 (1995.)