

Tesi di laurea

Perdita di ergodicità nello studio su lattice di sistemi topologici

Candidato: Lorenzo Pettinari
Relatore: prof. Massimo D'Elia

Università di Pisa

Facoltà di scienze matematiche, fisiche e naturali
Corso di laurea triennale in fisica

Anno accademico 2020-2021

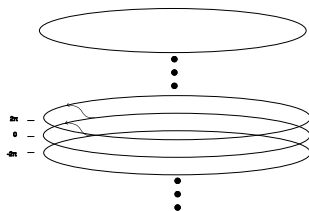
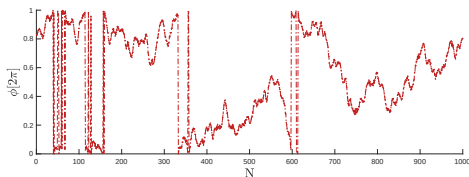


UNIVERSITÀ DI PISA

Un caso specifico di un problema generale

Consideriamo una particella vincolata su una circonferenza:

Esistono infiniti cammini non deformabili l'uno nell'altro, che si distinguono per numero di avvolgimenti Q (con segno)



$$\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$$

$$Z = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\beta \frac{\hbar^2 n^2}{2mR^2}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\beta\hbar\chi}} \sum_{Q=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{Q^2}{2\beta\hbar\chi}\right)$$

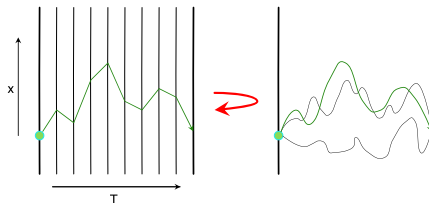
$\beta\hbar\chi = \frac{N\hbar^2}{4\pi^2 mR^2} \rightarrow \infty$ tutti i valori della carica topologica Q
sono rilevanti: $\langle Q^2 \rangle = \beta\hbar\chi \sim$ distribuzione gaussiana



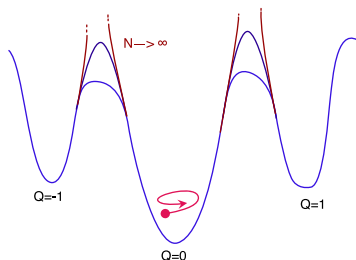
Topological freezing

Si utilizzano catene di Markov per far evolvere le traiettorie tracciate dalla particella. Il *Path integral* deve essere calcolato su un lattice

Nel discreto si perdono le classi di omotopia. Grandi barriere di potenziale (causate da una grande variazione dell'azione) separano i diversi valori della carica.



$$P_{\phi \rightarrow \tilde{\phi}} \propto \exp \left(\frac{N}{2\pi^2 \beta \hbar \chi} \sum_n \left[\sin \left(\frac{\Delta \phi(n)}{2} \right)^2 - \sin \left(\frac{\Delta \tilde{\phi}(n)}{2} \right)^2 \right] + K(p) - K(\tilde{p}) \right)$$



- Nel limite del continuo si recupera la divisione in settori. Il path integral ha misura nulla per cammini discontinui: perdita di ergodicità (*Topological freezing*)

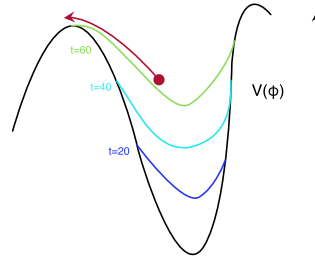


La Metadinamica...

Occorre forzare il sistema fuori dai minimi del potenziale:

- Si introducono delle **C.V. (collective variables)**;
- Viene introdotto un potenziale fittizio, che riempie i minimi visitati (e.g. $V(Q(t)) \sim \sum \exp\left(\frac{(Q(t)-Q_k)^2}{\delta q^2}\right)$);
- Il sistema evolve con una forza aggiuntiva, **proporzionale alla variazione della carica**.
- Un potenziale confinante vincola l'esplorazione in una regione di interesse.

$Q \rightarrow Q(t)$, con t lo step dell'algoritmo



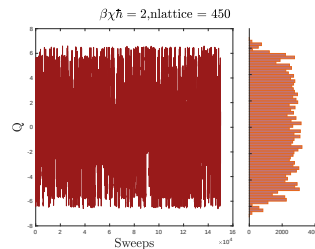
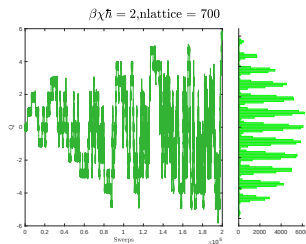
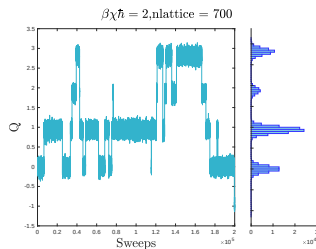
$$F = F_0 - \frac{V_{i+1} - V_i}{\delta q} \nabla Q(\phi)$$

$$V_{\text{ext}} = k \cdot (|Q| - Q_{\text{threshold}})^2$$

$$\text{per } |Q| > Q_{\text{threshold}}$$



...Risolve il problema



Il potenziale riempie i minimi e la distribuzione della carica tende a diventare uniforme.

Per effettuare le medie delle osservabili si pesa la distribuzione con $e^{-F(Q)} = Z(Q)$:

$$\langle O \rangle = \frac{\sum e^{-F(Q_i)} O_i}{\sum e^{-F(Q_i)}}$$



Applicazioni e risultati

Il potenziale riempie le buche:

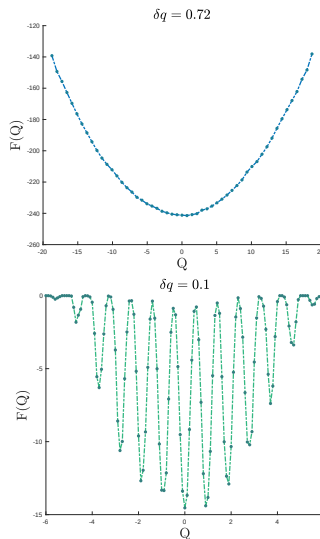
– $V(Q(t)) \sim F(Q)$ l'energia libera può essere ricostruita.

Si dimostra che:

$$\frac{1}{t - t_{\text{eq}}} \int_{t_{\text{eq}}}^t V(Q(t')) dt' = -F(Q)$$

Potenziale triangolare di larghezza

δq : si ricostruiscono con precisione
profili su una scala $\geq \delta q$



L'algoritmo trova applicazione in teoria di campo, ma anche in chimica e biologia. Possibili CV: numeri di coordinazione, angoli tra atomi, distanza tra atomi ecc.



Bibliografia

- [1] A. Laio, M. Parinello, "Escaping Free Energy Minima", "Proceedings of the National Academy of Science of the United States of America", **2002**, 99, n.20, pp.12562-12566. <https://doi.org/10.1073/pnas.202427399>
- [2] G. Bussi, A. Laio, M. Parinello, "Equilibrium Free Energies from Non Equilibrium Metadynamics", "Phys. Rev. Lett.", **2006**, 96, Iss. 9. 090601. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.090601>
- [3] V. Babin et al., "The free energy landscape of small peptides as obtained from metadynamics with umbrella sampling corrections", "J.Chem.Phys.", **2006**, 125, 204909. <https://doi.org/10.1063/1.2393236>
- [4] A. Laio, F. L. Gervasio "Metadynamics: a method to simulate rare events and reconstruct the free energy in biophysics, chemistry and material science", "Rep.Prog.Phys", **2008**, 71, n.12, 126601. doi:10.1088/0034-4885/71/12/126601
- [5] A. Laio, G. Martinelli, F. Sanfilippo, "Metadynamics Surfing on Topology Barriers: The CP^{N-1} Case", in: "J. of High Energ. Phys.", **2016**, 89. [https://doi.org/10.1007/JHEP07\(2016\)089](https://doi.org/10.1007/JHEP07(2016)089)
- [6] C. Bonati, M. D'Elia, "Topological critical slowing down: Variations on a toy model", "Phys.Rev.E" **2018**, 98, Iss. 1, 013308. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.98.013308>

