

Métodos de Simulación Computacional para Sistemas Cuánticos

Tema Selecto: Créditos: 12

Materia: Teórica y Práctica,

Duración: Semestral, Horas por semana: 6, Horas por semestre: 48 Teóricas, 48 prácticas

Objetivo general:

El alumno aprenderá los elementos básicos de los métodos para simulación computacional de sistemas cuánticos y sistemas análogos, así como técnicas de análisis que pueden ser usadas en una variedad de problemas científicos y de ingeniería.

La materia no tiene pre-requisitos de un lenguaje de programación.

Objetivos específicos:

Familiarizar a los alumnos con los modelos típicos, algoritmos y metodología existentes para la simulación de sistemas cuánticos, así como sus limitaciones y posibles extensiones.

Índice Temático:

Unidad	Tema	Horas Teóricas	Horas Prácticas
1	Sistemas y algebra lineales	2	1
2	Interpolaciones y ajustes	2	2
3	Sistemas típicos de materia cuántica y su representación	3	1
4	Diagonalización exacta de sistemas cuánticos y operadores	6	5
5	Métodos aproximados de materia cuántica (DMRG, DFT)	6	6
6	Solución de ecuaciones y sistemas	4	6
7	Solución de teorías auto-consistentes y aproximaciones de campo medio	3	3
8	Transformada de Fourier y métodos pseudo-espectrales para ecuaciones de campo	4	6
9	Integración numérica	2	1
10	Métodos Monte-Carlo	5	6
11	Sistemas de ecuaciones diferenciales, condiciones a la Frontera, funciones propias y sistemas integrodiferenciales	5	5
12	Tópicos en métodos para Sistemas Cuánticos y Sistemas Abiertos	6	6
	Total	48	48

Estrategias didácticas: Exposición, trabajo en equipo, lecturas, trabajo e Investigación, aprendizaje por proyectos, aprendizaje basado en problemas.

Evaluación del aprendizaje: Trabajos y tareas, presentación de temas y proyectos, participación en clase, asistencia.

Unidad	
1	Sistemas y algebra lineal [3 horas/2-1] -Sistemas de ecuaciones determinados y Gauss-Jordan -Determinantes, Eigenvalores y Eigen-descomposición. -Descomposición LU -Funciones de Matrices -Descomposición en valores principales
2	Interpolaciones y ajustes [4 horas/ 2-2] -Polinomio de interpolación -Splines -Ajuste por mínimos cuadrados -Transformación de datos
3	Sistemas típicos de materia cuántica y su representación [4 horas/ 3-1] -Representación en segunda cuantización y muchas partículas -Modelos sin interacción -Modelos con interacción (Tipo Hubbard, Espines, Hibridación, Kondo, Luz-Materia) -Aplicaciones (Electrones en sólidos, átomos ultrafríos, sistemas en cavidades, opto-mecánica, información cuántica) -Limites (continuo y enlace fuerte) -Espacios de Hilbert
4	Diagonalización exacta de sistemas cuánticos y operadores [11 horas/6-5] -Ejemplo típico: Modelo de Bose Hubbard -Base y representación -Construcción de operadores -Propiedades del modelo y matriz de densidad reducida de un cuerpo -Implementación y optimización -Relación con otros modelos
5	Métodos aproximados de materia cuántica (DMRG, DFT) [12 horas/ 6-6] a)DMRG (Grupo de Renormalización de Matriz de Densidad) -Ideas del grupo de renormalización -Modelos de espines -Descripción del método -Implementación del algoritmo infinito en cadenas de espines -Limitantes, consideraciones para simulación con el método y códigos útiles b)DFT (Teoría del Funcional de la Densidad) -Formulación del método para sistemas atómicos (Ec. Schrödinger de Muchas Partículas) -Derivación de potenciales efectivos -Esquema general y Teorema de Kohn-Sham. -Thomas-Fermi y correlaciones electrónicas. -Implementación variacional para el átomo de Helio y uso del teorema variacional.
6	Solución de ecuaciones y sistemas [10 horas/ 4-6] -Minimización en física y ecuaciones efectivas -Métodos de solución de ecuaciones no-lineales de una variable (Bisección, Secante, Newton, Ridders). -Solución de sistemas de ecuaciones multi-dimensionales -Ejemplo: cruce BEC-BCS
7	Solución de teorías auto-consistentes y aproximaciones de campo medio [6 horas/ 3-3] -Re-visitando el modelo de Bose-Hubbard y teoría de desacoplamiento. -Teoría de perturbaciones y funcional de Landau -Ecuaciones efectivas e implementación -Interpretación del diagrama de fase y observables

8	Transformada de Fourier y métodos pseudo-espectrales para ecuaciones de campo [10 horas/ 4-6] -Derivación de la Ec. de Gross-Pitaevskii -Métodos de solución aproximada y límites (Thomas Fermi) -Algoritmo de propagación en el tiempo pseudo-espectral (Split-Step) -Evolución en tiempo imaginario -Uso y propiedades de la FFT (Transformada Rápida de Fourier) -Implementación y simulación del caso típico de atrapamiento armónico. -Extensiones y uso general del método.
9	Integración numérica [3 horas/ 2-1] -Cuadraturas, discretización y condiciones de frontera, regla de Simpson y otras reglas. -Integrales indefinidas y transformaciones de integrandos.
10	Métodos Monte-Carlo [11 horas/ 5-6] -Integración Monte-Carlo -Observables y mecánica estadística -Muestreo de Metrópolis y teorema de Bayes -Modelo de Ising Clásico en 2D -Solución Monte-Carlo del modelo -Cadena cuántica de Ising y su relación con el modelo clásico en 2D.
11	Sistemas de ecuaciones diferenciales, condiciones a la Frontera, funciones propias y sistemas integrodiferenciales [10 horas/ 5-5] -Método general de solución para ec. diferenciales ordinarias -Sistemas de ecuaciones diferenciales con ejemplos de modelos semi-clásicos de la óptica cuántica. -Sistemas de ecuaciones diferenciales con ejemplos de modelos efectivos de materia ultrafría. -Problemas de valores a la frontera y su solución. Método de lanzamiento y relajación. -Método de Numerov y Ec. Schrödinger: Ejemplo revisitando al Helio. -Cuadraturas gaussianas y sistemas integro-diferenciales -Combinación de Métodos, ejemplo: DFT del Helio.
12	Tópicos en métodos para Sistemas Cuánticos y Sistemas Abiertos [12 horas/ 6-6] -Método de Trayectorias Cuánticas y aplicaciones -Ecuaciones diferenciales estocásticas

Bibliografía Básica:

- H. Anton, C. Rorres, Elementary Linear Algebra: Applications Version (Wiley, 11th Edition, 2013)
- W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing (Cambridge University Press, 2007)
- B. A. Stickler, E. Schachinger, Basic Concepts in Computational Physics (Springer, 2nd Edition, 2016)
- A. Avella, F. Mancini, Strongly Correlated Systems-Numerical Methods (Springer-Verlag, 2013)
- H. Wiseman, G. Milburn, Quantum Measurement and Control (Cambridge University Press, 2010)

Bibliografía Complementaria:

- J. Izaac, J. Wang, Computational Quantum Mechanics (Springer, 2008).
- J. Thijssen, Computational Physics (Cambridge, 2nd Edition, 2007).
- M. El-Batanouny, Advanced Quantum Condensed Matter Physics, Cambridge University Press (2020).
- H. T. C. Stoof, K. B. Gubbels and D. B.M. Dickerscheid, Ultracold Quantum Fields, Springer (2009).