

TÍTULO: Métodos numéricos en mecánica cuántica avanzada			
AÑO: 2020	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 30 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

El uso de herramientas numéricas desarrolladas por grupos completos ha simplificado, hasta cierto punto, la realización de experimentos numéricos sin necesidad de desarrollar dicha herramienta desde cero. Esto permite obtener resultados más rápidamente pero, al mismo tiempo, reduce la comprensión que se tiene sobre cómo la fenomenología física o los primeros principios están representados en el algoritmo numérico. También implica que la "entrada" del programa se vuelve más y más sofisticada ya que de dicha entrada depende la "sintonización" precisa del algoritmo a usar. Para acostumbrarse a estimar los recursos necesarios y el tiempo requerido es necesario comenzar a usar estas herramientas y ésta es la finalidad del curso propuesto.

OBJETIVOS

Habituar al estudiante al manejo de paquetes numéricos de uso público para estudiar problemas físicos novedosos, lo que le permitirá adquirir suficiencia a la hora de entender y diseñar experimentos numéricos basados en la fenomenología del problema de interés. También se busca que el estudiante se acostumbre al desarrollo de tests que comprueben el correcto funcionamiento de la herramienta numérica y, hasta cierto punto, le den una idea de la precisión de los resultados.

PROGRAMA

Unidad I: Ecuación de Schrödinger unidimensional

El oscilador armónico, unidades, solución exacta, comparación con la densidad de probabilidad clásica. Mecánica Cuántica y códigos numéricos, cuantización, comportamientos asintóticos patológicos. El método de Numerov. Códigos: harmonic0, harmonic1

Unidad II: Ecuación de Schrödinger para potenciales centrales

Separación de variables, ecuación radial. Potencial de Coulomb

Unidad III: Scattering a partir de un potencial

Recordatorio de la teoría de Scattering. Scattering de átomos de H en gases raros, derivación de la interacción de Van der Waals. Códigos: Crossection

Unidad IV: El método variacional

El Principio Variacional, demostración del principio, demostración alternativa, energía del estado fundamental. Problema secular, expansión en una base de funciones ortonormales. La base de ondas planas. Códigos: pwell

Unidad V: Bases no-ortonormales

Bases no-ortonormales, funciones Gaussianas, exponenciales. Códigos: hydrogen-gauss

Unidad VI: Campo auto-consistente

La aproximación de Hartree. Ecuaciones de Hartree. Potencial autoconsistente. Códigos: helium-hf-radial

Unidad VII: La aproximación de Hartree

La aproximación de Hartree-Fock, potenciales de Coulomb y de intercambio, energía de correlación, el átomo de Helio. Códigos: helium-hf-gauss.

Unidad VIII: Electrones en potenciales periódicos

Sólidos cristalinos, condiciones de contorno periódicas, teorema de Bloch, el potencial vacío, soluciones, base de ondas planas. Códigos: periodicwell.

Unidad IX: Seudopotenciales

Cristales tridimensionales. Ondas planas, core states, Seudopotenciales. Códigos: cohemborgstresser

Unidad X: Teoría de la funcional densidad

Teorema de Hohenberg-Kohn. Ecuaciones de Kohn-Sham. Funcionales aproximadas. Estructura de un código DFT, elementos de matriz del potencial, transformada de Fourier rápida (FFT) y grillas para FFT, cálculo de la densidad de carga, cálculo del potencial.

Unidad XI: Módulo: Cálculos de estructura electrónica en sistemas nanoestructurados

Átomos y moléculas depositados en superficies nanoestructuradas o embebidos en nanoestructuras. Cálculos DFT empleando Quantum Espresso. Densidad de estados y estructura de bandas: Información de los efectos en el átomo o la molécula adsorbida o embebida. Modelos para el estudio de los átomos o moléculas aisladas. Bases localizadas: Wannier empleando Wannier90. Hamiltonianos efectivos con ayuda de cálculos DFT y datos experimentales.

Unidad XII: Módulo: Introducción a la dinámica cuántica.

Funciones de autocorrelación y espectro. Diagonalización por filtro. Representaciones en variable discreta (DVR). Principios variacionales y Hartree dependiente del tiempo (TDH). TDH Multiconfiguracional (MCTDH), ecuaciones de movimiento. Código: MCTDH-Heidelberg.

Unidad XIII: Introducción al transporte cuántico en python

Hamiltonianos tight-binding. Funciones de Green. Matrices de scattering. Bombeo cuántico. Fuerzas inducidas por corrientes. Código: Kwant.

PRÁCTICAS

Los alumnos tienen que entregar informes sobre los resultados obtenidos usando los distintos códigos numéricos. El primer acercamiento a cada código es en clase y, posteriormente, se continúa con consultas. Cada informe es evaluado.

BIBLIOGRAFÍA

COMPUTATIONAL PHYSICS, Snd Edition, Jos Thijssen, Cambridge University Press 2007

Lecture notes "Numerical Methods in Quantum Mechanics", Corso di Laurea Magistrale in Fisica, Interateneo Trieste-Udine, Anno accademico 2015/2016, Paolo Giannozzi, University of Udine.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Regularidad: aprobación de cuatro informes. Aprobar el curso: aprobación de 9 informes y examen final.
--

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos de mecánica cuántica a nivel de la Licenciatura en Física. Conocimientos de análisis numérico de grado.
