

Вычислительные методы в квантовой физике

Программа дисциплины

Объем: 32 часа

Кафедра исполнитель: кафедра Физики твердого тела

Авторы программы: В.А. Кашурников, А.В. Красавин

Для групп: Е5-01, 02, 04, 05

Аннотация

Изучаются основные численные методы моделирования квантовых физических систем: метод точной диагонализации гамильтоновой матрицы и квантовый и классический методы Монте-Карло. Исследуются проблемы численного анализа температурных и термодинамических характеристик различных систем; проводится знакомство с современными моделями физики коррелированных состояний: различными моделями Хаббарда, Бозе – Хаббарда, спиновыми моделями; представлен достаточно полный обзор современных численных квантовых методов Монте-Карло, подробно рассматриваются детали многих квантовых алгоритмов.

Учебная задача

Целью настоящего курса является ознакомление студентов с современными методами компьютерного моделирования реальных квантовых систем, интенсивно изучаемых в физике конденсированного состояния: высокотемпературных сверхпроводников, сверхтекучего гелия и бозе-газа в оптико-магнитных ловушках, различных наноструктур (квантовых ям и точек), спиновых кластеров как элементов квантовых компьютеров, двумерных электронов в условиях квантового эффекта Холла и т.д.

Структура курса

Осенний семестр: лекции – 2 часа в неделю, практические занятия – 4 часа каждые 2 недели; весенний семестр: лекции – 2 часа в неделю, практические занятия – 3 часа в неделю.

Формы контроля: промежуточный – домашнее задание, итоговый – зачет.

Входные и выходные компетенции

Входные компетенции: численные методы, уравнения математической физики, квантовая механика, теория вероятностей, статистическая физика, термодинамика.

По окончании курса студент должен **знать**: матричную формулировку квантовой механики, формализм вторичного квантования, модели сильнокоррелированных систем, методы точной диагонализации больших матриц, термодинамику систем многих частиц, методы Монте-Карло для физических систем, теорию быстрого преобразования Фурье; **уметь**: численно решать задачи о поведении частицы в потенциале произвольной формы, численно моделировать базис для систем многих частиц и строить матрицы физических операторов в этом базисе, проводить эффективную процедуру поиска базисных состояний, рассчитывать различные корреляционные функции для моделей сильнокоррелированных систем, применять алгоритм Ланцоша для диагонализации больших матриц, рассчитывать термодинамические характеристики для моделей сильнокоррелированных систем, получать случайные распределения с заданной функцией распределения, реализовывать алгоритмы Монте-Карло для исследования моделей сильнокоррелированных систем; **владеть**: языком программирования Matlab, методами вторичного квантования, методами работы с большими и разреженными матрицами, методами численного расчета характеристик сильнокоррелированных систем, методами Монте-Карло для расчета определенных интегралов, методами Монте-Карло для исследования физических систем.

Содержание курса

Осенний семестр

1 неделя. Матричная формулировка квантовой механики.

Волновая функция. Принцип суперпозиции состояний в квантовой механике. Эрмитовы операторы. Спектральная задача Штурма – Лиувилля. Уравнение Шредингера. Гамильтониан. Стационарное решение уравнения Шредингера. Связь стационарного и нестационарного решений. Собственно энергетическое представление. Секулярное уравнение. Базис гамильтониана в собственно энергетическом представлении. Степени свободы системы. Свойства собственных функций и собственных значений. Ортогональность собственных функций, отвечающих разным собственным значениям. Общая система собственных функций у коммутирующих операторов. Блочно-диагональный вид матрицы оператора, коммутирующего с гамильтонианом. Вырожденные собственные значения. Характеристическое уравнение матрицы. Инварианты матриц: след матрицы, определитель матрицы, корни характеристического уравнения. Оценка минимального или максимального собственного значения матрицы.

2 неделя. Матричная формулировка квантовой механики.

Проблемы поиска и сортировки при численном моделировании квантовых задач. Базис системы. Упорядоченный базис. Различимые и неразличимые частицы. Матрица оператора в выбранном базисе. Сортировка состояний. Алгоритм сортировки вставками. Алгоритм сортировки выбором. Алгоритм сортировки обменов. Алгоритм оптимизированной сортировки. Временные затраты различных способов сортировки. Сравнение эффективности различных способов сортировки. Алгоритмы поиска состояний в упорядоченном базисе.

3 неделя. Квантовые одночастичные задачи. Потенциальная яма.

Стационарное уравнение Шредингера для частицы в потенциальном поле. Спектр системы: дискретный спектр, непрерывный спектр, вырожденные состояния. Общее решение уравнения Шредингера в виде суперпозиции собственных функций. Задача о частице в бесконечной потенциальной яме. Безразмерная система единиц. Ортонормированный координатный базис. Гамильтонова матрица в координатном базисе. Диагонализация гамильтоновой матрицы – переход в собственный базис. Разложение собственных функций по исходному базису. Свойства собственных функций. Осцилляторная теорема. Задача о частице в конечной потенциальной яме. Поведение волновых функций частицы в яме и вне ямы. Самосогласованный выбор области поиска решения. Диагонализация матрицы гамильтониана. Разделение полученных решений на связанные состояния и состояния непрерывного спектра. Число обусловленности матрицы. Метод уменьшения числа обусловленности. Влияние разбиения области решения на значения энергий связанных состояний и состояний непрерывного спектра.

4 неделя. Дискретное преобразование Фурье.

Обратное пространство в физике конденсированного состояния. Граничные условия Борна – Кармана. Первая зона Бриллюэна. Связь обратного и прямого пространств. Обратное пространство для различных кристаллических структур. Определение Фурье-преобразования. Фурье-разложение периодической функции. Коэффициенты Фурье. Скалярное произведение двух функций на дискретной сетке. Временные затраты при расчете коэффициентов Фурье. Ортонормированная система функций. Быстрое преобразование Фурье. Сравнение эффективности обычного и быстрого преобразования Фурье. Алгоритм быстрого преобразования Фурье для двоичного разбиения.

5 неделя. Потенциальная яма в импульсном представлении.

Выбор базиса в импульсном представлении. Кинетическая энергия частицы в импульсном представлении. Потенциальная энергия частицы в импульсном представлении, расчет матричных элементов. Диагонализация гамильтоновой матрицы. Спектр системы. Сравнение полученного спектра с точным аналитическим решением и решением задачи в координатном представлении. Собственные функции системы в импульсном представлении. Распределение по импульсам. Возврат в координатное представление из импульсного представления. Четные и нечетные уровни.

6 неделя. Квантовые многочастичные задачи.

Уравнение Шредингера для одномерного гармонического осциллятора. Обобщенные операторы координаты и импульса. Операторы рождения и уничтожения. Коммутационные соотношения для этих операторов. Действие операторов рождения и уничтожения на собственные волновые функции. Собственные функции и спектр одномерного гармонического осциллятора. Поле смещений в струне. Дискретная модель. Волновое уравнение. Линейная плотность, модуль упругости, скорость звука. Гамильтониан системы. Зависимость от времени фурье-компонент смещений.

Обобщенные координаты и импульсы. Операторы рождения и уничтожения. Гамильтониан системы в обобщенных координатах.

7 неделя. Вторичное квантование.

Тождественность частиц. Симметричность и антисимметричность волновой функции. Детерминант Слэтера. Схема Юнга. Аппарат вторичного квантования. Вакуумная волновая функция. Одночастичные состояния. Бра- и кет-векторы. Базис плоских волн. Полевые операторы. Многочастичный базис. Неразличимые частицы. Коммутационные соотношения операторов рождения и уничтожения. Бозоны и фермионы. Принцип Паули. Связь между коммутацией операторов рождения и перестановкой частиц. Нормированная волновая функция состояния с несколькими бозонами. Базис в представлении чисел заполнения. Ортонормированность узельных многочастичных функций. Действие операторов на волновые функции фоковского базиса в случае статистики Ферми. Оператор числа частиц. Учет спина частиц. Размерность фоковского базиса. Одночастичные операторы в формализме вторичного квантования. Диаграммы Фейнмана. Примеры одночастичных операторов. Двухчастичные операторы. Примеры двухчастичных операторов. Полевые операторы и вторичное квантование.

8 неделя. Ферми-системы. Модель сильной связи.

Функции Ванье. Хорошее квантовое число в приближении сильной связи. Гамильтониан в приближении сильной связи. Кинетическая и потенциальная энергии. Амплитуда перескока. Размерность узельного базиса для ферми-системы. Алгоритм формирования упорядоченного узельного базиса. Матричные элементы кинетической и потенциальной энергии. Учет антисимметрии фермионной волновой функции. Модель сильной связи без взаимодействия. Разложение узельных операторов по базису плоских волн. Одночастичный спектр. Полная энергия системы. Инвариантность спектра относительно знака амплитуды перескока. Спектр для простой кубической решетки в приближении ближайших соседей. Закон дисперсии. Зона проводимости. Уровень Ферми. Разрешенные импульсы в системе. Вырождение одночастичных уровней энергии.

9 неделя. Ферми-системы. Модель Хаббарда.

Гамильтониан модели Хаббарда. Обратное фурье-преобразование, переход к координатному представлению. Приближение ближайших соседей. Инвариантность спектра относительно знака амплитуды перескока. Экспериментальные оценки параметров модели Хаббарда. Применение модели Хаббарда в физике. Построение гамильтоновой матрицы модели Хаббарда. Приближение среднего поля. Преобразование задачи в эффективную одночастичную. Инварианты в модели Хаббарда. Оператор числа частиц. Оператор полной проекции спина на ось z . Блочно-диагональный вид гамильтоновой матрицы. Учет поперечного поля. Расчет квантово-механических средних. Операторы, диагональные в собственном энергетическом представлении. Операторы, недиагональные в собственном энергетическом представлении. Проблема вырожденных состояний. Расчет средних в вырожденных состояниях.

10 неделя. Статистика Бозе. Модель Бозе – Хаббарда.

Статистика Бозе – Эйнштейна. Примеры бозе-систем. Алгоритм формирования упорядоченного базиса для бозе-системы. Размерность базиса бозе-системы. Коммутационные соотношения для операторов рождения и уничтожения бозе-частиц. Правила действия операторов на узельные волновые функции. Бозевские факторы. Модель Бозе – Хаббарда. Применение модели Бозе – Хаббарда в физике. Гамильтониан бозонной модели Хаббарда. Инвариантность спектра относительно знака амплитуды перескока. Ограничение чисел заполнения на узлах при численном моделировании модели Бозе – Хаббарда. Hard-core-модель. Редуцированная модель. Гамильтонова матрица для модели Бозе – Хаббарда. Модель Бозе – Хаббарда без взаимодействия. Аналитическое решение. Спектр системы в случае простой кубической решетки. Закон дисперсии. Эффективная масса частиц. Энергия основного состояния. Вырождение состояний. Влияние ограничения на заполнение узлов на спектр системы. Инварианты в модели Бозе – Хаббарда. Учет внешнего поля.

11 неделя. Статистика Бозе. Градиентно-инвариантная фаза.

Многочастичная задача Шредингера с учетом векторного потенциала. Граничные условия. Магнитный поток. Квант потока. Плотность тока. Парамагнитный и диамагнитный вклады в выражение для плотности тока. Эффект Мейсснера – Оксенфельда. Модель Бозе – Хаббарда во внешнем поле. Градиентная перенормировка волновой функции. Оператор тока в узельном представлении. Зависимость энергии системы свободных частиц на решетке от введенного магнитного потока. Спектр системы. Фазовый сдвиг. Периодичность характеристик системы. Переход к термодинамическому пределу. Квантование магнитного потока. Магнитная восприимчивость. Связь между приложенной фазой и симметрией волновой функции в одномерной ситуации. Квантовая статистика в одномерной ситуации.

12 неделя. Спиновые системы. Квантовые спиновые модели

Примеры спиновых систем. Современное состояние эксперимента. Оператор спина. Свойства оператора спина. Коммутационные соотношения для оператора спина. Общая система собственных функций для оператора спина и оператора квадрата спина. Повышающие и понижающие операторы. Собственные числа оператора квадрата спина. Возможные значения собственных чисел оператора квадрата спина и оператора проекции спина на ось z . Базис спиновых операторов в представлении чисел заполнения. Матрицы Паули. Обменное взаимодействие. Ферро- и антиферромагнитное упорядочение. Модель Гейзенберга. Ось легкого намагничивания и плоскость легкого намагничивания. XY-модель. XX-модель. Модель Изинга. Изотропная модель Гейзенберга. Спиновая модель для описания магнитного нанокластера. Гамильтонова матрица для спиновых моделей. Фиктивные бозоны. Инварианты в спиновых моделях. Блочно-диагональный вид гамильтоновой матрицы. Учет внешнего поля.

13 неделя. Спиновые системы. Модель Гейзенберга

Инвариантность спектра системы относительно смены знака у поперечной компоненты гамильтониана XX -модели Гейзенберга. Энергия основного состояния в отсутствие внешнего поля в случае ферро- и антиферромагнетика. Неелевское состояние. Нулевые колебания элементарных возбуждений в антиферромагнетике. Магноны в ферромагнетике. Спектр магнонов. Эффективная масса магнонов. Спиновые волны в антиферромагнетике. Скорость спиновых волн. Свойства основного состояния и низших возбуждений. Фазовые состояния спиновых систем. Связь между бозонной и спиновыми моделями. Преобразование Холстейна – Примакова. Соответствие между моделью Хаббарда и спиновыми моделями. Эффективный гамильтониан. t - J -модель. Случай половинного заполнения.

14 неделя. Конечные кластеры и трансляционная инвариантность

Периодические граничные условия. Понижение размерности фоковского базиса системы за счет учета симметрии кластера. Вектор трансляции. Базисные векторы решетки. Решетка Бравэ. Оператор трансляции. Задача Шредингера на периодической решетке. Общая система собственных функций для гамильтониана и оператора трансляций. Обратная решетка. Базисные векторы обратной решетки. Разрешенные волновые векторы в периодическом потенциале. Теорема Блоха. Блоховский волновой вектор. Граничные условия Борна – Кармана. Блоховские векторы для простой кубической решетки. Разбиение гамильтоновой матрицы на блоки, соответствующие трансляциям. Классы базисных функций. Собственный базис оператора трансляции. Производящие функции. Блочно-диагональный вид гамильтоновой матрицы. Численный спектральный анализ. Метод трансляционной инвариантности и калибровочно-инвариантная фаза. Сведение спектральной задачи для эрмитовой комплексной матрицы к задаче для действительной симметричной матрицы.

15 неделя. Диагонализация больших матриц

Постановки задач при решении квантовых многочастичных задач. Евклидово пространство. Скалярное произведение. Линейная оболочка. Образующее множество. Инвариантные подпространства. Сужения. Собственные пары. Процедура Рэлея – Ритца для получения наилучших приближений собственных пар. Матрица Рэлея. Значения Ритца. Подпространство Крылова. Матрица невязки. Формулировка алгоритма Ланцоша. Контроль сходимости. Погрешности, возникающие при практической реализации алгоритма Ланцоша. Модификации алгоритма Ланцоша.

16 неделя. Расчет функций линейного отклика и плотности состояний

Отклик узельной системы на внешнее поле. Оператор тока в представлении чисел заполнения для системы решеточных фермионов или бозонов во внешнем магнитном поле. Векторный потенциал. Соотношение Кубо. Обобщенная восприимчивость. Выражение для проводимости в терминах узельных операторов. Коррелятор "ток-ток".

Предел низких температур. Плотность состояний для системы фермионов со спинами. Спектральная плотность системы. Щель в спектре возбуждений.

Литература

Основная

№	
1	Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 3. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1989, 768 с.
2	Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1979, в 2-х тт.
3	Елесин В.Ф., Кашурников В.А. Физика фазовых переходов. М.: МИФИ, 1997, 178 с.
4	Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978, 792 с.
5	Маделунг О. Физика твердого тела. Локализованные состояния. М.: Наука, 1985, 184 с.
6	Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том 5. Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976, 584 с.
7	Браут Р. Фазовые переходы. М.: Мир, 1967, 288 с.
8	Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Теоретическая физика. Том 9. Статистическая физика. Часть 2. М.: Наука, 1978, 448 с.
9	Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1966.
10	Биндер К., Хеерман Д.В. Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике. М.: Наука, 1995, 144 с.

Дополнительная

№	
1	Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990, 132 с.