

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: Е6-01, 02

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

Весенний семестр

1 неделя. Термодинамика

Физическая система в термодинамическом равновесии. Статистическая сумма. Среднее значение физической величины. Матрица плотности. Статистический оператор. Диагональные элементы матрицы плотности. Уравнение временной эволюции матрицы плотности. Квантовый аналог теоремы Лиувилля. Статистическая матрица в собственном-энергетическом представлении. Микроканонический ансамбль. Микроканоническое распределение по энергии. Канонический ансамбль. Статистический вес макроскопического состояния системы. Энтропия. Второй закон термодинамики. Температура. Распределение системы по энергиям. Распределение Гиббса. Большой канонический ансамбль. Химический потенциал системы. Расчет термодинамических средних. Теплоемкость. Обобщенная восприимчивость. Теорема Нернста. Совокупность магнитных моментов: статистическая сумма, энергия и суммарный магнитный момент. Закон Кюри. Модели сильной связи. Расчет статистической суммы. Расчет физических величин. Зависимость числа частиц в системе от химического потенциала при различной температуре.

2 неделя. Термодинамика классических, ферми- и бозе-систем

Идеальный разреженный газ. Полная энергия системы невзаимодействующих частиц. Распределение Больцмана. Разреженный газ из частиц с ферми-статистикой. Распределение Ферми – Дирака. Разреженный идеальный газ с бозе-статистикой. Распределение Бозе – Эйнштейна. Энтропия ферми- и бозе-газа. Метод неопределенных множителей Лагранжа. Плотность одночастичных состояний. Зависимость плотности одночастичных состояний от размерности системы. Система уравнений для расчета

физических величин. Термодинамика идеального ферми-газа. Энергия Ферми. Сфера Ферми. Вырожденный электронный газ. Импульс Ферми. Уравнение состояния ферми-газа при нулевой температуре. Температура вырождения. Система уравнений для численного анализа трехмерного ферми-газа. Предельные случаи. Постоянная Зоммерфельда. Термодинамика идеального бозе-газа. Температура бозе-конденсации. Система уравнений для численного анализа трехмерного бозе-газа. Предельные случаи.

3 неделя. Случайные распределения

Генераторы случайных чисел. Функция распределения и плотность распределения случайной величины. Получение случайных распределений. Метод обратной функции и метод фон Неймана. Экспоненциальное распределение. Распределение Пуассона. Алгоритм получения случайных величин, распределенных по закону Пуассона. Нормальное распределение. Роль нормального распределения в физике. Алгоритм получения случайных величин, распределенных по нормальному закону. Математическое ожидание и дисперсия случайной величины. Центральная предельная теорема. Почти линейная плотность распределения. Алгоритм получения случайных величин с почти линейной плотностью распределения. Двумерные распределения. Системы случайных величин. Геометрическая интерпретация. Плотность распределения системы двух случайных величин. Функция распределения системы случайных величин.

4 неделя. Марковские цепи. Принцип детального равновесия

Понятие марковского процесса и марковской цепи. Цепь последовательных состояний. Абсолютная вероятность реализации последовательности состояний. Инвариантное распределение состояний системы. Инвариантное распределение для канонического ансамбля. Стационарное распределение вероятностей. Неприводимая марковская цепь. Стохастическая матрица. Периодические и аperiodические марковские цепи. Устойчивые состояния. Среднее возвратное время. Эргодическая марковская цепь. Эргодические состояния. Принцип детального равновесия. Условия, необходимые для эргодичности схемы алгоритма, моделирующего марковскую цепь событий. Плотность вероятности перехода. Уравнение баланса. Условие детального равновесия. Алгоритм Метрополиса. Алгоритм тепловой ванны.

5 неделя. Расчет интегралов методом Монте-Карло

Понятие о методе Монте-Карло. Вычисление площади сложной плоской фигуры. Задача о перколяции. Стягивающий кластер. Вероятность появления стягивающего кластера. Задача расчета определенного интеграла методом Монте-Карло. Закон больших чисел и усиленный закон больших чисел. Неравенство Коши – Буняковского. Существенная выборка. Оптимальный расчет интеграла с минимальной погрешностью. Зависимость эффективности алгоритма от выбора функции распределения. Конструктивная размерность. Трудоемкость алгоритма. Вероятная ошибка расчета.

6 неделя. Метод Монте-Карло для модели Изинга

Формулировка модели. Аналитические результаты для модели Изинга. Температура Кюри и температура Нееля. Переход в парамагнитное состояние. Приближение среднего поля. Самосогласованное уравнение для среднего магнитного момента в приближении среднего поля. Температура фазового перехода «ферромагнетик – парамагнетик». Предельные случаи. Закон Кюри. Точное решение модели Изинга в одномерном случае. Уравнение для температуры фазового перехода в двумерном случае. Метод Монте-Карло для модели Изинга. Вероятность принятия новой конфигурации. Уравнение детального баланса. Схема алгоритма Монте-Карло для модели Изинга. Расчет энергии, теплоемкости, восприимчивости.

7 неделя. Метод Монте-Карло для решеточного газа

Формулировка модели. Потенциал Леннарда – Джонса. Безразмерная плотность частиц. Модельный гамильтониан системы. Термодинамические соотношения. Решение модели в приближении среднего поля. Фазовый переход первого рода "жидкость – газ". Трикритическая точка. Реализация алгоритма Монте-Карло. Типы подпроцессов. Прямые и обратные подпроцессы. Подпроцессы движения. Уравнение детального баланса для подпроцессов движения. Процедуры рождения и уничтожения частиц. Выбор вероятностей перехода. Схема алгоритма Монте-Карло для расчета модели решеточного газа. Расчет изотерм и фазовой диаграммы "жидкость – газ". Результаты расчетов. Зародыш жидкой фазы.

8 неделя. Метод Монте-Карло для сверхпроводящей ВТСП-пластины

Формулировка модели. Вихревое состояние. Вихри Абрикосова. Кривые намагничивания сверхпроводника второго рода. Сверхпроводящая корреляционная длина. Глубина проникновения магнитного поля. Решетка Абрикосова. Высокотемпературные сверхпроводники. Фазовый переход «3D – 2D». Собственная энергия вихревой нити. Энергия взаимодействия двух вихревых нитей. Энергия взаимодействия уединенного вихря с плоской границей сверхпроводника. Взаимодействие вихря с дефектами. Пиннинг. Замороженный поток. Взаимодействие вихрей с мейсснеровским током на границе и транспортным током. Гамильтониан системы вихрей в плоском сверхпроводящем слое ВТСП. Метод Монте-Карло для сверхпроводящей ВТСП-пластины. Постановка задачи. Элементарные шаги Монте-Карло. Подпроцессы. Движение вихря. Рождение вихря. Уничтожение вихря. Аннигиляция вихрь-антивихрь. Рождение пары вихрь-антивихрь. Схема алгоритма Монте-Карло. Результаты моделирования для ВТСП-пластины. Процессы перемещения. Петли намагниченности. Волны аннигиляции.

9 неделя. Расчет термодинамических средних и оценка погрешности

Термализация системы. Оценка погрешности. Несмещенная оценка. Оценка корреляций. Динамическое уравнение Колмогорова. Эквивалентность усреднения по времени усреднению с гиббсовскими весами по полному ансамблю состояний системы. Корреляционная функция двух физических величин. Среднее по ансамблю. Автокорреляционная функция физической величины. Принцип ослабления корреляций. Автокорреляционное время физической величины. Метод разбиений. Метод "1/2 файла". Оценка автокорреляционного времени. Эффективность алгоритмов. Критическое замедление алгоритма.

10 неделя. Диаграммные методы и высокотемпературное разложение

Высокотемпературное разложение. Применение к модели Изинга. Выражение для статистической суммы. Коррелированные пары. Диаграммы. Состояния узлов и состояния связей. Спин-спиновая корреляционная функция для модели Изинга. Алгоритм червя. Конфигурации с замкнутым и разомкнутым червем. Расчет физических величин. Подпроцессы. Учет внешнего поля. Подпроцессы алгоритма, учитывающие внешнее поле. Вид оператора энергии в новом представлении. Оператор энергии с учетом внешнего поля и обменного взаимодействия. Выражения для теплоемкости, магнитного момента и восприимчивости системы в новом представлении.

11 неделя. Квантовые алгоритмы Монте-Карло

Недостатки методов точной диагонализации. Роль квантовых методов Монте-Карло в современной физике. Оператор эволюции. Разбиение Сузуки – Троттера. Траекторный квантовый алгоритм Монте-Карло. Основная идея алгоритма. Зависимость времени расчета от числа узлов в системе для траекторных алгоритмов. Алгоритм шахматной доски. Разбиение Сузуки – Троттера для гамильтониана Хаббарда. Разбиение на различные типы связей. Матричные элементы оператора эволюции по двухчастичным состояниям. Представление шахматной доски. Учет спина у фермионов. Обновления траекторий мировых линий частиц в траекторном алгоритме. Уравнение детального баланса. Расчет средних величин. Диагональные корреляционные функции. Нелокальные корреляторы: матрицу плотности, мацубаровская функция Грина, парная корреляционная функция. Расчет величин, локально сохраняющих число частиц. Расчет величин, не сохраняющих локально число частиц. Разрывы траекторий. Дополнительные временные срезы.

12 неделя. Квантовые алгоритмы Монте-Карло. Проблема знака

Статистические веса в квантовом алгоритме Монте-Карло. Проблема знака. Два типа проблемы знака. Фермионная проблема знака. Модели, свободные от проблемы знака. Быстрый расчет и коррекция энергии основного состояния. Особенности статистики Бозе. Особенности при расчете спиновых систем. Проблема знака в бозонных и спиновых моделях. Winding numbers. Связь winding numbers с глобальными характеристиками системы. Связь фермионного знака и winding numbers в траекторных методах. Связь

фермионного знака с топологией мировых линий. Конфигурации без разрывов. Конфигурации с двумя разрывами. Конфигурации с несколькими разрывами.

13 неделя. Траекторный алгоритм Монте-Карло для конкретных задач

t-J-модель. Разбиение гамильтониана. Фазовое пространство модели. Расчет матричных элементов оператора эволюции. Выбор элементарных изменений траекторий. Расчет средних. Проблема знака. Моделирование сверхпроводящих плоскостей в высокотемпературных сверхпроводниках. Многозонная двумерная модель Эмери. Гамильтониан двумерной многозонной модели Эмери в дырочном представлении. Учет перескоков между атомами кислорода в пределах одной ячейки. Траекторные алгоритмы МК для плоскости CuO_2 . Разбиение плоскости CuO_2 на трехузельные ячейки. Выражения для расчета физических величин. Сравнение результатов, полученных методом точной диагонализации и Монте-Карло для модели Эмери. Разбиение плоскости CuO_2 на пятиузельные ячейки.

14-16 недели. Квантовые алгоритмы Монте-Карло в непрерывном времени

Недостатки дискретных квантовых методов Монте-Карло. Систематическая погрешность разложения Сузуки – Троттера. Редкие обновления траекторий. Представление взаимодействия при конечных температурах. Мацубаровский оператор эволюции. Операторы полей частиц в представлении взаимодействия. Статистическая сумма системы и мацубаровская функция Грина в представлении взаимодействия. Ряд теории возмущений для статистической суммы. Общая формулировка CTWL-алгоритма. Формулы для баланса. Кинки и их параметры. Алгоритм работы со списком имен. Задание мгновенной фазовой конфигурации. CTWL-алгоритм для дискретного базиса. Учет совокупности конфигураций. Ассоциативные соседи. Процедура *kink-antikink*. Фиктивные слагаемые в гамильтониане. Разрывы траекторий. Worms. Главные процессы обновления траекторий, формирующие статистику. Пара процессов *creation-annihilation*. Процессы *jump-antijump*. Процессы *reconnection-antireconnection*. Процедура сдвига хвоста по времени *shift*. Уравнения баланса и выражения для вероятностей для каждой из процедур. Схема CTWL-алгоритма. Учет парного взаимодействия. Диагональные кинки. Расчет средних. Кинетическая энергия. Диагональные средние. Расчет недиагональных средних. Квазиконденсация. Связь winding numbers с градиентно-инвариантной фазой. Модификации метода CTWL. Проблема полярона Фрелиха. Проблема экситона.

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	Изюмов Ю.А., Скрябин Ю.Н. Статистическая механика магнитоупорядоченных систем. М.: Наука, 1987, 264 с.
2	Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрябин Ю.Н. Магнетизм коллективизированных электронов. М.: ФМЛ, 1994, 366 с.
3	Жен П. Сверхпроводимость металлов и сплавов. М.: Мир, 1968, 280 с.
4	Шмидт В.В. Введение в физику сверхпроводников. М.: МЦНМО, 2000, 397 с.
5	Соболь И.М. Метод Монте-Карло. М.: Наука, 1985, 80 с.
6	Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М.: Наука, 1990, 132 с.