



Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF
Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP - UNC 40875/2019

RES CD 217/2019

PROGRAMA DE ASIGNATURA	
ASIGNATURA: Métodos Numéricos en Mecánica Cuántica.	AÑO: 2019
CARACTER: Especialidad	UBICACIÓN EN LA CARRERA: 4° año 2° cuatrimestre
CARRERA: Licenciatura en Física	
REGIMEN: Cuatrimestral	CARGA HORARIA: 120 horas

FUNDAMENTACIÓN Y OBJETIVOS

La motivación para dictar la Especialidad es doble, por un lado el de consolidar los contenidos dictados en las Materias de Cuántica de la Licenciatura y por el otro el de presentar a los alumnos algunos de los métodos con los que se estudian sistemas un poco menos académicos utilizando

algoritmos numéricos. Esto amplía el número de ejemplos pasibles de ser analizados más allá de los ejemplos exactamente solubles o que pueden estudiarse usando Teoría de perturbaciones. Los algoritmos a ser utilizados, y que los alumnos tendrán que adaptar y modi car, son públicos y han sido desarrollados como parte de la bibliografía a utilizar.

Entre los objetivos de la Especialidad se pueden mencionar: familiarizar al estudiante con métodos de cálculo adecuados de acuerdo al tipo de estado cuántico a estudiar, estados ligados o pertenecientes a un continuo, o de acuerdo a la dimensión del espacio de Hilbert al cual pertenecen los observables del sistema. También se pretende que el estudiante se familiarice con la vasta colección de programas de código abierto (open source software) disponible para atacar las situaciones de cálculo más diversas.

CONTENIDO

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

Ecuación de Schrödinger para potenciales centrales

Separación de Variables, ecuación radial. Potencial de Coulomb, niveles de energía, funciones de onda radiales. Códigos: hydrogen-radial

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

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

Bases no-ortonormales

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

Campo auto-consistente

[Handwritten signature]



Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF
Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP - UNC 40875/2019

RES CD 217/2019

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

La aproximación de Hartree.

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

Moléculas

La aproximación de Born-Oppenheimer. Super cie de energía potencial.
Moléculas diatómicas. Códigos:h2-hf-gauss.

Electrones en potenciales periódicos.

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

Seudopotenciales

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

Diagonalización exacta de modelos de spins cuánticos

El modelo de Heisenberg.
Espacio de Hilbert en sistemas de spins. Diagonalización iterativa. Código:
heisenberg-exacta

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.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

COMPUTATIONAL PHYSICS, Second 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

Los codigos a ser utilizados pueden encontrarse en : www.cambridge.org/9780521833462
y en <http://www.fisica.uniud.it/~giannozz/Didattica/MQ/mq.html>

EVALUACIÓN

FORMAS DE EVALUACIÓN

La Especialidad tiene previstos 12 Trabajos de Laboratorio Numérico, uno por cada Unidad. Cada
uno de estos es una instancia de Evaluación. La aprobación de cada uno esta sujeta a la
implementación del algoritmo(s) correspondiente(s) y a la obtención de resultados para los
distintos modelos involucrados. Para aprobar cada Trabajo de Laboratorio se debe presentar un
informe resumiendo los resultados encontrados y las modificaciones realizadas a los códigos.
El examen final sera escrito.

REGULARIDAD



Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF
Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP - UNC 40875/2019

RES CD 217/2019

1. cumplir un mínimo de 70% de asistencia a clases teóricas, prácticas, o de laboratorio.
2. aprobar al menos el 60% de los Trabajos Prácticos o de Laboratorio. En el presente caso esto da un total de 7 Trabajos.

CORRELATIVIDADES

Para Cursar: (regularizada)
Mecánica Cuántica I

Para Rendir: (aprobada)
Mecánica Cuántica I