



Simulación en Sistemas Cuánticos Desordenados

GRUPO MATDES

CIOyN

Miguel Ortuño, Andrés Somoza

Manuel Pino, Pablo Serna

Javier Prior, Manuel Caravaca





Sistemas Cuánticos Desordenados

- Semiconductores dopados.
- Metales granulares.
- Superconductores de alta temperatura.
- Polímeros conductores.

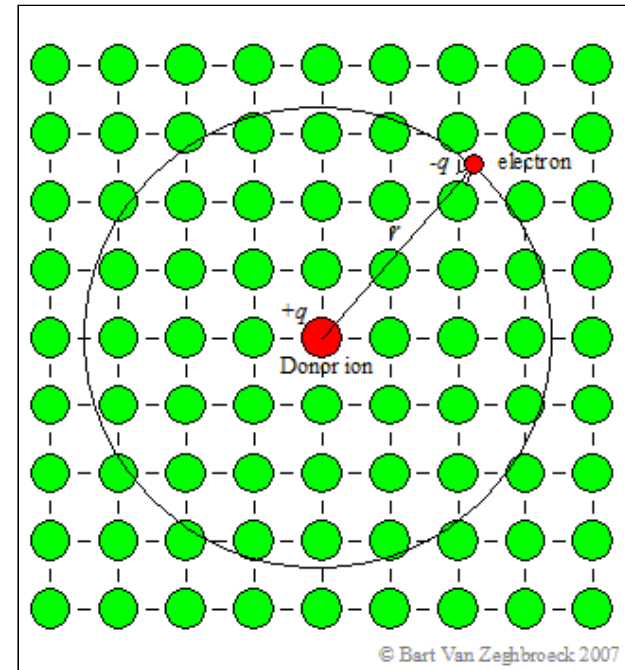


Semiconductores Dopados

Banda de Conducción



Banda de Valencia



- Desorden.
- Interacciones.
- Efectos cuánticos:
 - Efecto tunel.
 - Interferencia cuántica.



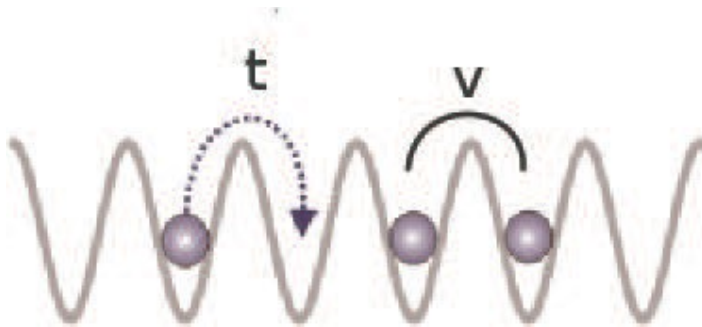
Modelo Teórico

$$H = \sum_i \phi_i n_i + \sum_{i < j} n_i n_j V(r_{ij}) + t \sum_{i,j} c_i^\dagger c_j$$

Desorden

Interacción

Efectos cuánticos





Desorden + interacciones

- Propiedades vitreas:
 - Relajación lenta.
 - Envejecimiento.
- Conducción en régimen aislante.



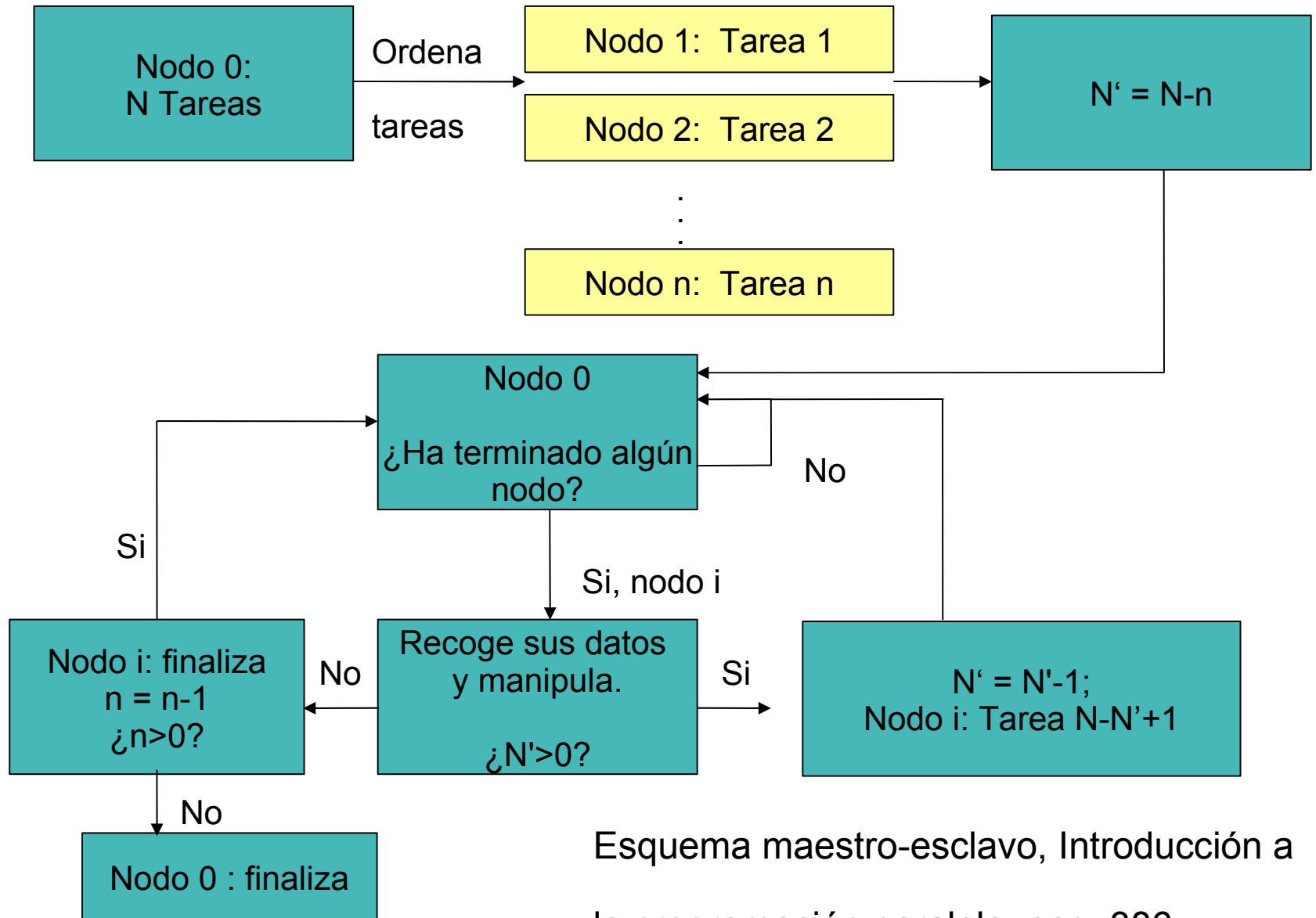
Desorden+Efectos Cuánticos

- Transición metal-aislante.
 - Longitud de localización.
 - Conductividad a $T=0$.
- Se necesita calcular el mismo problema muchas veces para promediar respecto del desorden.
- Fácil paralelización:
 - Esquema maestro-esclavo,

Introducción a la programación paralela, pag. 386



Algoritmo paralelo



Esquema maestro-esclavo, Introducción a la programación paralela, pag. 386



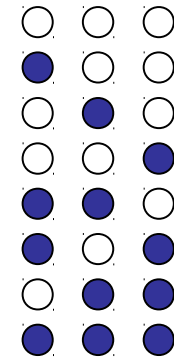
Cálculo completo

$n=3$, $N=8$

- Cualquier configuración del sistema es posible.
- Requiere diagonalizar una matriz.
- Rango de la matriz: $N=2^n$

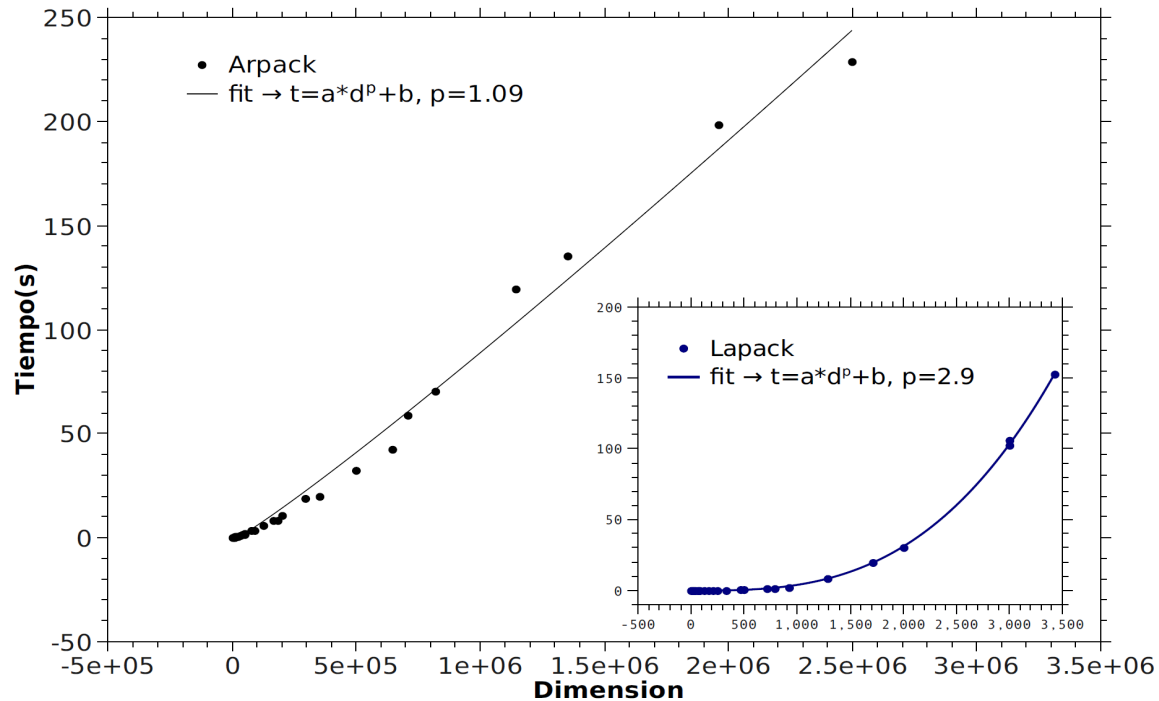
- $n = 16 \Rightarrow N = 65536$
- $n = 20 \Rightarrow N = 1048576$
- $n = 26 \Rightarrow N = 67108864$

- La matriz contiene muchos ceros (sparse).
- Si solo se necesita unos pocos estados, se puede utilizar el paquete ARPACK.





ARPACK



- Es un paquete publico y gratuito.
- No requiere guardar la matriz.
- Solo exige programar el producto de un vector por la matriz.
- Se obtienen los estados de energía mas bajos mediante un proceso iterativo.

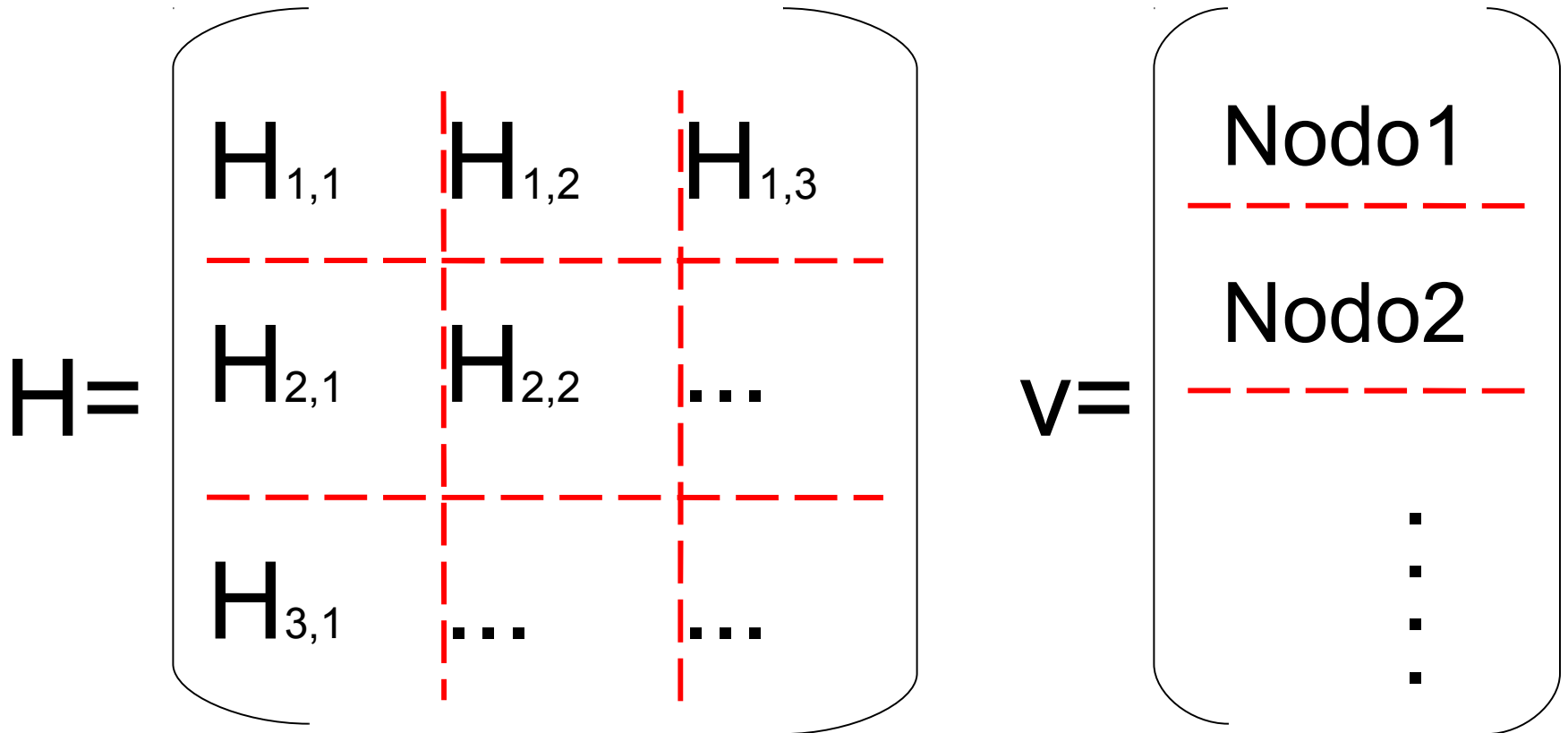


Parallel ARPACK

- Cada nodo guarda solo un trozo del vector de entrada y proporciona solo un trozo del vector de salida.
- Ahorra memoria y paraleliza el proceso.
- Requiere intercambiar información entre los nodos. Este intercambio puede llegar a hacer no eficiente el algoritmo.



Parallel ARPACK



- Nodo i -esimo manda $H_{j,i}$ ha nodo j -esimo y recibe $H_{i,k}$ del nodo k -esimo.
- Algoritmo eficiente cuando $H_{j,i}=0$ para casi todo i distinto de j
- PARPACK ideal para matrices tridiagonales.



Conclusiones

- La paralelización de ciertos códigos ha permitido multiplicar la capacidad de cálculo y realizar estudios científicos muy competitivos inalcanzables de otro modo.
- Paralelización maestro esclavo en problemas que requieran un mismo cálculo repetido muchas veces.
- En ciertos casos la paralelización de un sólo proceso permite llegar a tratar sistemas enormes.
- LAPACK, ARPACK y PARPACK son paquetes públicos, que nos han permitido simular sistemas grandes y permitir valorar con precisión el efecto de tamaño finito.