Fisica Computacional 2022

Guía de TP N° 5: PDEs

noviembre , 2022

1. Se quiere resolver numéricamente la ecuación del calor para el siguiente caso de distribucion de temperatura de una barra lineal de aluminio de 1m de longitud, suijeta a las condiciones de contorno:
   $T(x = 0, t) = T(x = L, t) = 0K, T(x, t = 0) = 100K$
   la conductividad termica, calor especifica y densidad de Al son:

   $K = 237W/(mK), C = 900J/(kgK), = 2700kg/m3.$

   Encontrar la distribucion de temperaturas en la barra para este sistema.
   Cuanto tiempo tarda el sistema en llegar al equilibrio?
   Como estima dicho tiempo ?

2. Considerar la ecuacion de Poisson en dimension 2 para un potencial electrostatico en una zona rectangular de anchos L_x y L_y. Implementar un programa que resuelve esta ecuacion mediante el metodo de relajacion. Testear el programa para las siguientes condiciones de contorno :

   (a) $\rho(x, y) = 0$, $\phi(0, y) = \phi(L_x, y) = \phi(x, 0) = 0$, $\phi(x, L_y) = 1V$
   (b) $\rho(x, y) = 1V/m^2$, $\phi(0, y) = \phi(L_x, y) = \phi(x, 0) = \phi(x, L_y) = 1V = 0$, $L_x = L_y = 1m$

3. La ecuacion que describe la propagación de la señal electrica en una célula nerviosa en dimensión 2 con el modelo FHN tiene la forma de una ecuación reacción difusión:

$$\frac{\partial v(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 v(x,t)}{\partial x^2} + v(a-v)(v-1) - w + I_a \qquad (1)$$

$$\frac{dw}{dt} = bv - \gamma w \qquad (2)$$

   (a) Encontrar las soluciones de propagación de señal para este sistema y obtener la velocidad de la solución tipo onda.
   (b) Se pueden crear ondas tipo espirales para este sistema, las cuales estan relacionadas con un mal funcionamiento de la neurona ya que produce propagación en un periodo que no coincide con el periodo de generación de impulso producido normalmente. Para crearlas basta generar una excitacion en el tejido justo despues que paso el frente de una onda esferica. Obtener dichas ondas y observar su comportamiento dinámico. Valores propuestos de los parámetros:
   $\gamma = 210^{-3}$, $a = 0.25$, $D = 0.2$

4. En el problema del doble pozo, supongamos un modelo de Quantum Dot. Supongamos el electron inicialmente en el estado fundamental. Se aplica un campo electrico para controlar el estado del sistema y poder transferir el electron entre el estado fundamental y el primer excitado :

En principio, aplicamos un campo electrico dado por $V(t) = -ex\Omega(t)\cos wt$. Entonces lo que hacemos es considerar el estado de Schrodinger como una combinacion lineal de los autoestados del Doble Dot,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle$$

La ecuación de Schrodinger en esta base entonces pasa a ser un conjunto de ecuaciones acopladas para los $c_n(t)$.

$$\sum_p i\hbar \frac{dc_p}{dt} e^{-iE_p t/\hbar}|p\rangle + E_p c_p e^{-iE_p t/\hbar}|p\rangle = \sum_m E_m c_m e^{-iE_m)t/\hbar}|m\rangle + V(t) c_m e^{-iE_m)t/\hbar}|m\rangle \tag{3}$$

haciendo el bracket en ambos miembros con $|n\rangle$(autoestados del Doble Dot sin campo) tenemos, considerando que $\langle n|p\rangle = \delta_{np}$ y lo mismo con $|m\rangle$

$$\frac{dc_n}{dt} = \frac{-i}{\hbar}\sum_m \langle n|V(t)|m\rangle e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} c_m \tag{4}$$

La probabilidad de que el electron este en un estado n del sistema viene dado por $P_n(t) = |\langle n|\Psi(t)\rangle|^2 = |c_n(t)|^2$

Para poder calcular la evolucion necesitamos los elementos de matriz del potencial $V(t)$ en la base de autoestados del Doble Dot. Tenemos en cuenta entonces que teniamos en nuestro ejercicio anterior de los autovectores expresados en la base del oscilador $|i\rangle$ centrado en el origen de coordenadas $|n\rangle = \sum_i \alpha_i^n |i\rangle$:

$$\langle n|V(t)|m\rangle = f(t)\sum_{i,j}^{N_b} (\alpha_i^n)^* \beta_j^m \langle i|x|j\rangle \tag{5}$$

$$f(t) = -e\Omega(t)\cos(wt) \tag{6}$$

Donde x_{ij} es la matriz de x que ya calculamos en el ejercicio anterior para el caso del un campo electrico estático.

entonces es interesante estudiar en funcion de la frecuencia aplicada, cual es la respuesta del sistema en terminos de la siguiente dinamica. Sea el estado incial del sistema en el estado fundamental $|\Psi(0)\rangle = |0\rangle$, es decir $c_0(0) = 1$ y $c_n = 0$ para $n = 1, 2, ...N_b$.

Nos preguntamos a un cierto tiempo la probabilidad de que el estado a dicho tiempo t sea el primer excitado, en funcion de la frecuencia.

En principio, o que esperamos es que si la frecuencia es cercana a la diferencia de energia entre el primer exitado y el fundamental habra transferencia exitosa para cierto tiempo asociado a $T = 2\pi/\Omega$, donde $w_{01} = (E_1 - E_0)/\hbar$.

En este caso la transferencia a estados exictados por encima del primer excitado es baja. Sin embargo variando la frecuencia se puede encontrar que el electron puede tener cierto peso con el segundo excitado impar, produciendo lo que se llama un *leakage*, un filtrado de probabilidad hacia estados que no ser 'ian parte del Qubit. Mostrar que si la frecuencia pega la transicion $w = w_{03} = (E_3 - E_i)/\hbar$ en ese caso la transicion entre los estados 0 y 1 del qubit se ven afectadas por un leakage hacia el tercer excitado.

Tambien es posible realizar una transicion indirecta, para lo que cual hay que aplicar un campo con una combinacion de pulsos con la dependencia temporal $\Omega_a(t)\cos(w_a t) + \Omega_b(t)\cos(w_b t) + \Omega_c(t)\cos(w_c t)$, para producir las transiciones $0 \to 2$ $2 \to 3$ y finalmente $3 \to 1$. con este control sumado el control directo basicamente podriamos usar la perdida por leakage para generar el control deseado corrigiendo el leakage. En el caso de la transferencia directa Ω puede ser constante, mientras que en combinada podemos hacer transferencias sucesivas, con los cual cada $\Omega(t)$ tiene valor en un cierto intervalo de tiempo y luego decae a cero.

en cuanto a la solucion numerica, el sistema se puede hacer o bien conssiderando solo los primeros cuatro estados del qubit, o bien considerando N_b estados. En ambos casos se podria por ejemplo aplicar el metodo de RK4 al sistema de ecuaciones ordinarias :

$$\frac{dc_n}{dt} = f_n(c_m, t) \tag{7}$$

$$f_n(c_m, t) = \frac{-i}{\hbar} \sum_m \langle n|V(t)|m\rangle e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} c_m \tag{8}$$