



Física Computacional en el Grupo de Teoría de la Materia Condensada de Bariloche

Pablo S. Cornaglia

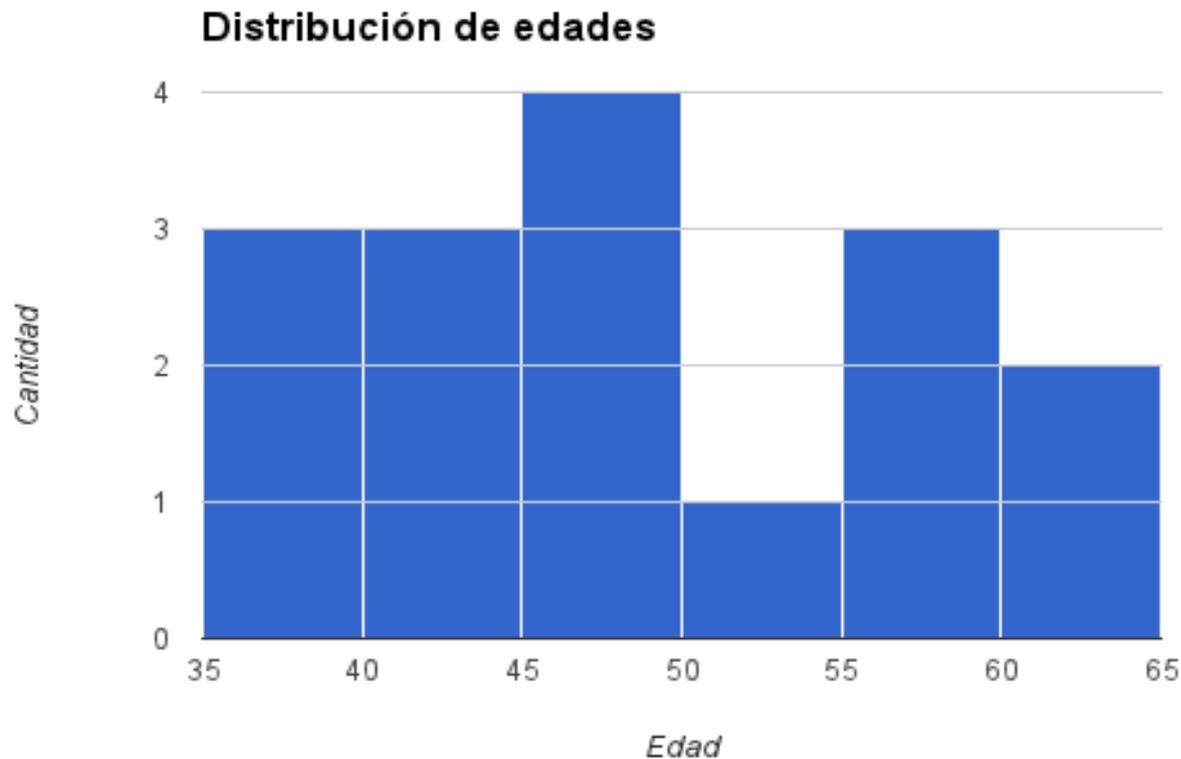
Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro,
Comisión Nacional de Energía Atómica, Bariloche, Argentina
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

Un poco de historia

- (años 70) Primeras publicaciones en el grupo de Blas Alascio y Arturo López Dávalos. Tesis doctoral de Horacio Wio, Carlos Balseiro
- (ppios. de los años 80) cálculos numéricos usando la VAX. Tesis doctoral de Armando Aligia.
- (mediados de los 80) Comienza la física computacional en el grupo con los cálculos de Lanczos de Eduardo Gagliano. Se compra una MicroVAX.
- Tesis de Daniel Dominguez → Dinámica de juntas → Simulaciones
- Tesis de Karen Hallberg → Grupo de renormalización
- En los últimos 15 años, crecimiento sostenido del cluster y expansión de las dos líneas de trabajo numérico: electrones correlacionados y física estadística.
- Más recientemente:
 - Cálculos de DFT: Alexander Hernández
 - Problemas de una partícula (grafeno): Gonzalo Usaj
 - Dinámica temporal (Floquet): Daniel Domínguez, Majo Sánchez
 - Desarrollo de códigos para GPU: Alejandro Kolton

El grupo

16 Investigadores permanentes



Edad promedio: ~ 49 años

El grupo

- 1 postdoctorando
- 14 estudiantes graduados (3 maestría, 11 doctorado)
 - 6 argentinos
 - 3 cubanos
 - 3 colombianos
 - 1 venezolano
 - 1 peruano

Hacemos llamados regulares para recibir estudiantes graduados.
Flujo bajo de estudiantes de la carrera de grado del Instituto Balseiro

Algunas estadísticas

- Más de 40 tesis de doctorado realizadas en el grupo.
- Más de 50 tesis de maestría.
- ~35 publicaciones por año.
- ...

Líneas de trabajo

- Sistema electrónicos nano-estructurados
 - Qubits superconductores
 - Grafeno
 - Transporte de carga y espín
 - Transistores moleculares
- Física estadística en materia condensada
 - Paredes de dominio
 - Sistemas vidriosos
 - Terremotos y fricción

Líneas de trabajo

- Dispositivos y aplicaciones
 - Memorias resistivas no-volátiles
 - Dispositivos semiconductores
- Modelado realista de materiales
 - Estructura magnética y electrónica de sistemas fuertemente correlacionados
 - Efectos de desorden
 - Calculos basados en la Teoría de Funcional Densidad
 - Diseño de funcionales de intercambio y correlación

Métodos numéricos

- Electrones correlacionados
 - Diagonalización exacta
 - Grupo de Renormalización Numérica (NRG).
 - Renormalización numérica de matriz densidad (DMRG)
 - Campo medio dinámico
 - Monte Carlo cuántico
- Correlaciones débiles
 - Polinomios de Chebyshev
 - Hartree-Fock
- Métodos basados en DFT
- Física estadística
 - Monte Carlo clásico
 - Dinámica molecular

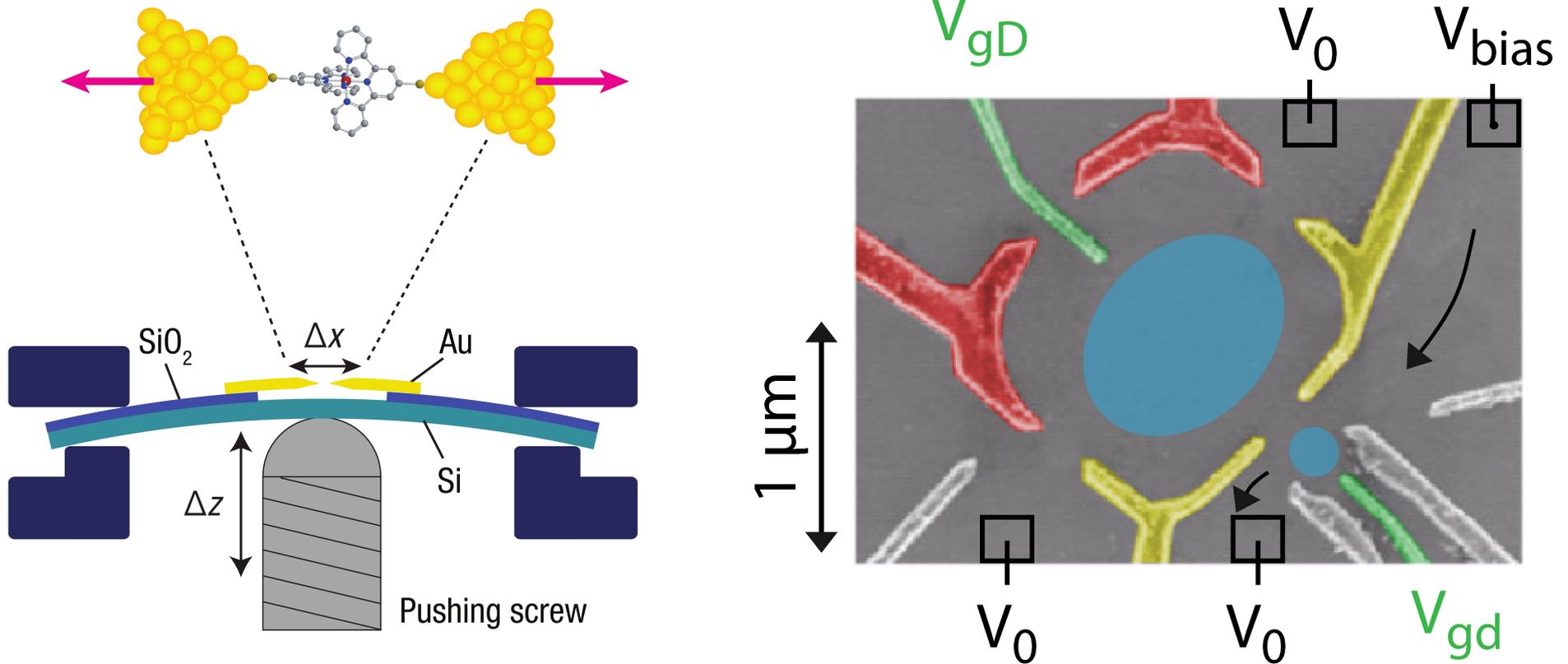
Recursos computacionales

- Grupo de Materia Condensada
 - 29 hosts
 - 300 cores
- Gerencia de Física del Centro Atómico Bariloche
 - 4 clusters
 - 84 hosts
 - 550 cores
- Proximamente: Fondos del *Sistema Nacional de Computación de Alto Desempeño (SNCAD)*
 - Nuevos servidores
 - Nuevos nodos
 - InfiniBand
- Cluster de GPU
 - 12 placas (varias regaladas por NVIDIA)
 - Instituto Balseiro → CUDA Teaching Center

Colaboraciones

- Varias colaboraciones con grupos en Francia, Suiza y Alemania, dos proyectos ECOS vigentes.
- Laboratorio de Bajas temperaturas.
 - nuevo crióstato.
- Laboratorio de resonancias magnéticas.
- Varias colaboraciones activas con grupos en Argentina: CAC, San Luis, etc.

Transporte electrónico a través de dispositivos nanoscópicos

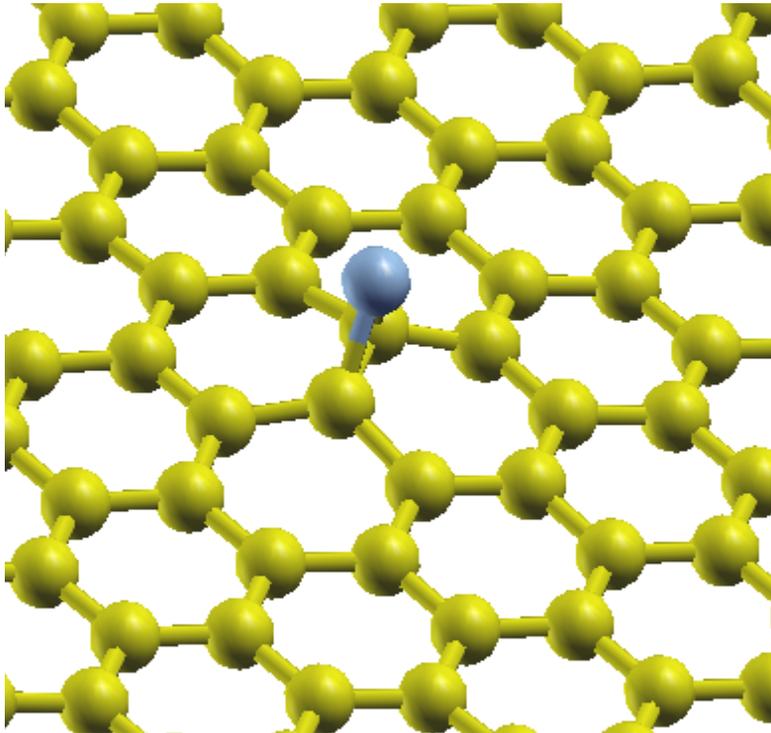


J. J. Parks *et al.*, Science **328** 1370 (2010)

David Y. Baines *et al.*, Phys. Rev. B **85** 195117 (2012)

Armando Aligia, Carlos Balseiro, Pablo Roura-Bas (CAC)

Impurezas sobre grafeno

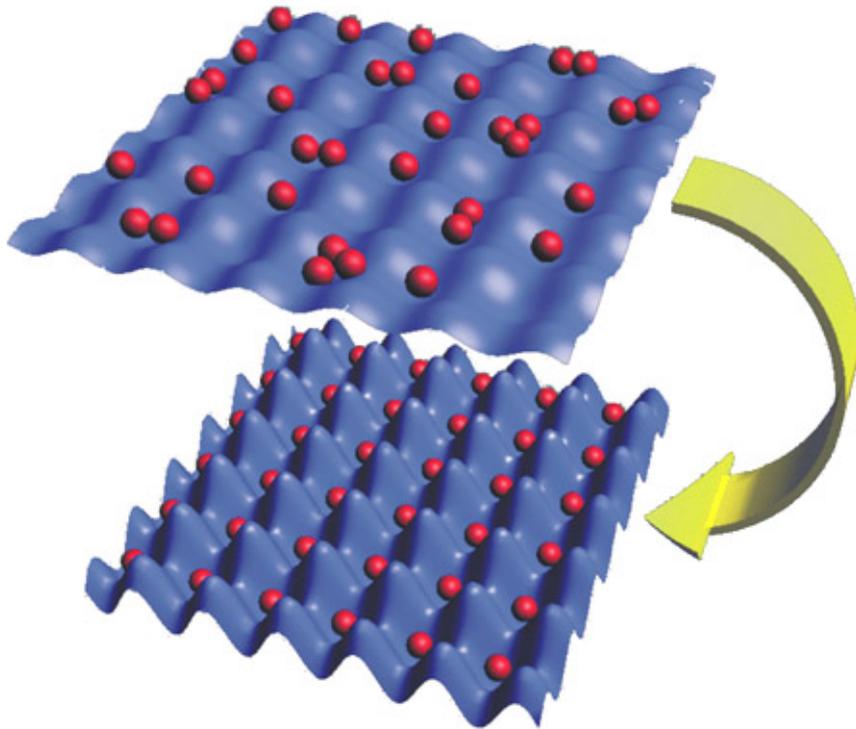


Funcionalizar grafeno agregando impurezas atómicas (pueden ser magnéticas).

- DFT
 - Jorge Sofo (Penn State)
 - Alexander Hernández
- Modelos simplificados, desorden
 - Carlos Balseiro
 - Gonzalo Usaj

Grafeno irradiado: Gonzalo y Carlos con Luis Foa Torres (FaMAF)

Átomos ultrafríos en redes ópticas



Fermiones o bosones en una red óptica

Se puede controlar el potencial externo, la masa de las partículas, la interacción, etc.

Laboratorio para el estudio de fenómenos de muchos cuerpos

Colaboraciones puntuales con Massimo Capone (Sapienza) y el grupo de Antoine Georges (París)

Materiales fuertemente correlacionados

- Estudio de modelos simplificados
- Cálculos a partir de primeros principios
 - Colaboración con el grupo de bajas temperaturas de Bariloche: propiedades de compuestos magnéticos, fermiones pesados, etc.

Armando Aligia, Matías Núñez (Materiales Nucleares), Manolo Núñez Regueiro (Grenoble).

Karen Hallberg, Daniel García Y Gabriel Kotliar (Rutgers)

Verónica Vildosola, Daniel García y Víctor Correa (Bajas temperaturas)

Métodos

- Sistemas nanoscópicos → problemas de impureza cuántica:
 - Impureza interactuante acoplada a un mar de Fermi.
 - Métodos: Grupo de renormalización. Bosones esclavos. Non-crossing approximation, Monte-Carlo, etc.
- Materiales correlacionados
 - Campo medio dinámico → Problema de impureza cuántica acoplada a un mar de Fermi con un espectro que se determina de manera autoconsistente.

Perspectivas

- Dinámica temporal en sistemas correlacionados
 - Qubits acoplados a baños bosónicos
 - Propiedades ópticas de sistemas nanoestructurados
- Estudio realista de sistemas fuertemente correlacionados
 - Desarrollo de nuevas técnicas para resolver problemas de impureza cuántica y usarlas en el contexto de la teoría de campo medio dinámico.

A scenic landscape photograph featuring a large, calm lake in the center. The water is a deep blue, reflecting the clear sky and the surrounding green mountains. In the foreground on the left, a large, gnarled tree branch with some green needles extends into the frame. The bottom of the image shows a rocky shoreline with a small, dark object, possibly a log or rock, resting on the pebbles. The overall atmosphere is peaceful and serene.

¡Gracias!