Resumen

La célebre ecuación de Schrödinger es la clave para entender la dinámica de partículas cuánticas y viene en una variedad de formas. Su solución numérica conlleva numerosos desafíos, algunos de los cuales son tratados en esta tesis.

Posiblemente, el problema más importante en mecánica cuántica es el oscilador armónico debido a su uso en aproximar potenciales atractivos. En capítulo 2, se introduce una técnica de correspondencia algebraica entre mecánica clásica y cuántica y es aplicada para construir eficientes algoritmos de escisión (llamados *splittings*), solamente basados en transformadas rápidas de Fourier, que resuelven potenciales cuadráticos exactamente para dimensiones arbitrarias - incluyendo el caso importante de partículas rotantes y potenciales armónicos no autónomos tras la promediación con un desarrollo de Magnus. Los resultados se muestran fácilmente transferibles a la ecuación de Gross-Pitaevskii en capítulo 3. Adicionalmente, la noción de potenciales modificados no lineales es introducida y se su cálculo eficiente mediante transformadas de Fourier es demostrado.

En el límite semiclásico, el operador de evolución se vuelve altamente oscilatorio y métodos estándar de escisión sufren de un crecimiento exponencial en complejidad al incrementar el orden del método. Se han encontrado algoritmos con dependencia del coste respecto al orden solamente cuadrática mediante el algoritmo de Zassenhaus. A diferencia de métodos de escisión clásicos, se permite la apariencia de conmutadores especiales en los exponentes. Su construcción implica un rápido decrecimiento en magnitud con el parametro semiclásico de los conmutadores con la finalidad de poder exponenciarse con unas pocas iteraciones de Lanczos. Por completitud, una técnica alternativa basada en paquetes de onda Hagedorn es revisada e interpretada en términos del desarrollo de Magnus y se proponen algunas mejoras. Con la presencia de dependencias temporales explícitas en el hamiltoniano semiclásico, el algoritmo de Zassenhaus requiere una modificación del paso inicial. Distinguiendo los casos de frecuencias suaves y rápidas, se muestra cómo adaptar el mecanismo para obtener descomposiciones eficientemente calculables de un hamiltoniano efectivo que se ha obtenido tras un desarrollo de Magnus sin tener que resolver las oscilaciones con un paso temporal prohibitivamente pequeño.

En capítulo 5, se considera el problema de autovalores de Schrödinger que se puede formular como problema de valor inicial tras (Wick-)rotar la ecuación de Schrödinger al tiempo imaginario. El carácter elíptico del operador de evolución restringe los métodos de escisión a órdenes bajos, $p < 3$, debido a la apariencia de pasos fraccionales temporales negativos que corresponden a un problema mal condicionado: La integración atrás en el tiempo. La inclusión de potenciales modificados permite aumentar el orden hasta $p < 5$. Ambas restricciones se pueden sobrepasar mediante el uso de pasos fraccionales complejos cuya parte real es positiva y se presentan métodos de orden seis para hamiltonianos casi integrables.

Conclusiones e indicadores para futuros estudios se detallan en capítulo 6, especialmente enfocando el área de control óptimo cuántico.