Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca

UNIÓ EUROPEA
Fons Social Europeu

Memòria justificativa de recerca de les beques predoctorals per a la formació de personal investigador (FI)

La memòria justificativa consta de les dues parts que venen a continuació:
1.- Dades bàsiques i resums
2.- Memòria del treball (informe científic)

Tots els camps són obligatoris

1.- Dades bàsiques i resums

Títol del projecte ha de sintetitzar la temàtica científica del vostre document.
Dinàmica de sistemes mesoscòpics amb correlacions quàntiques mitjançant la formulació de de Broglie-Bohm

Dades de l'investigador (benficiari de l'ajut)

Nom: Albert
Cognoms: Benseny Cases
Correu electrònic: albert.benseny@gmail.com

Dades del director del projecte

Nom: **Jordi**
Cognoms: Mompart Penina
Correu electrònic: **jordi.mompart@uab.cat**

Dades de la universitat / centre al que s'està vinculat
Universitat Autònoma de Barcelona

Número d'expedient
2009FIB-13

Paraules clau: cal que esmenteu cinc conceptes que defineixin el contingut de la vostra memòria.
dinàmica quàntica, trajectòries quàntiques, òptica atòmica, fotoionització, òptica quàntica

Data de presentació de la justificació
23/07/2009

Generalitat de Catalunya
Departament d'Innovació, Universitats i Empresa

Resum en la llengua del projecte (màxim 300 paraules)

Per a determinar la dinàmica espai-temporal completa d'un sistema quàntic tridimensional de N partícules cal integrar l'equació d'Schrödinger en 3N dimensions. La capacitat dels ordinadors actuals permet fer-ho com a molt en 3 dimensions. Amb l'objectiu de disminuir el temps de càlcul necessari per a integrar l'equació d'Schrödinger multidimensional, es realitzen usualment una sèrie d'aproximacions, com l'aproximació de Born–Oppenheimer o la de camp mig. En general, el preu que es paga en realitzar aquestes aproximacions és la pèrdua de les correlacions quàntiques (o entrellaçament). Per tant, és necessari desenvolupar mètodes numèrics que permetin integrar i estudiar la dinàmica de sistemes mesoscòpics (sistemes d'entre tres i unes deu partícules) i en els que es tinguin en compte, encara que sigui de forma aproximada, les correlacions quàntiques entre partícules.

Recentment, en el context de la propagació d'electrons per efecte túnel en materials semiconductors, X. Oriols ha desenvolupat un nou mètode [Phys. Rev. Lett. 98, 066803 (2007)] per al tractament de les correlacions quàntiques en sistemes mesoscòpics. Aquesta nova proposta es fonamenta en la formulació de la mecànica quàntica de de Broglie–Bohm. Així, volem fer notar que l'enfoc del problema que realitza X. Oriols i que pretenem aquí seguir no es realitza a fi de comptar amb una eina interpretativa, sinó per a obtenir una eina de càlcul numèric amb la que integrar de manera més eficient l'equació d'Schrödinger corresponent a sistemes quàntics de poques partícules.

L'algorisme de X. Oriols permet obtenir les trajectòries quàntiques de l'evolució d'un sistema integrant un conjunt acoblat de pseudo-equacions d'Schrödinger unidimensionals. Les trajectòries quàntiques que produeixen aquestes pseudo-equacions són idèntiques a les produïdes per la integració directa de l'equació d'Schrödinger multidimensional i, per tant, ens permeten estudiar el comportament exacte del sistema complet. És important remarcar que aquestes pseudo-equacions d'Schrödinger mantenen, de forma aproximada, les correlacions quàntiques entre les partícules, però, al ser equacions unidimensionals, el càlcul resulta molt més ràpid.

En el marc del present projecte de tesi doctoral es pretén estendre els algorismes desenvolupats per X. Oriols a sistemes quàntics constituïts tant per fermions com per bosons, i aplicar aquests algorismes a diferents sistemes quàntics mesoscòpics on les correlacions quàntiques juguen un paper important. De forma específica, els problemes a estudiar són els següents:

(i) Fotoionització de l'àtom d'heli i de l'àtom de liti mitjançant un làser intens.
(ii) Estudi de la relació entre la formulació de X. Oriols amb la aproximació de Born–Oppenheimer.
(iii) Estudi de les correlacions quàntiques en sistemes bi- i tripartits en l'espai de configuració de les partícules mitjançant la formulació de de Broglie–Bohm.

Resum en anglès(màxim 300 paraules)
To obtain the complete spatio-temporal dynamics of a quantum 3D system of N particles it is necessary to integrate the Schrödinger equation in 3N dimensions. The capability of computers nowadays allow for, at most, 3 dimensions. With the aim of reducing the calculation time, a series of approximations are used, such as the Born-Oppenheimer approximation or the mean field approximation. Usually, the price one must pay to apply this approximations is the loss of quantum correlations (or entanglement). Therefore, it is necessary to develop numerical methods to study the dynamics of mesoscopic systems (systems from three to ten particles) in which quantum correlations are taken into account.

Recently, in the context of tunneling of electrons in semiconducting materials, X. Oriols has developed a new method [Phys. Rev. Lett. 98, 066803 (2007)] for the treatment of quantum correlations in mesoscopic systems. This new proposal is based on the de Broglie-Bohm formulation of quantum mechanics. We want to stress that the approach that X. Oriols takes on the problem and we want to follow here it is not done to obtain an interpretative tool, but to obtain a numeric tool to integrate more efficiently the Schrïodinger equation for few particle systems.

X. Oriols' algorithm allows to obtain the quantum trajectories of the evolution of a system by integrating a set of coupled unidimensional pseudo Schrödinger equations. The quantum trajectories obtained this way are identical to the ones produced by the direct integration of the multidimensional Schrödinger equation and, therefore, enable the study of the complete system. We want to stress the fact that these pseudo Schrödinger equations maintain, approximately, the quantum correlations between the particles, but since the equations are unidimensional, the calculations are much faster.

The aim of this PhD thesis project is to extend X. Oriols' algorithms to fermionic and bosonic quantum sytems and apply them to various mesoscopic systems in which quantum correlations may play an important role. Specifically, the problems we want to study are the following:

(i) Photoionization of the helium and lithium atoms in a strong laser field.
(ii) Study of the relation between X. Oriols' formulation and the Born–Oppenheimer approximation.
(iii) Study of the quantum correlations in bi-and tripartite systems in the configuration space by means of the de Broglie-Bohm formalism.

Agència
de Gestió d'Ajuts
Universitaris
i de Recerca

UNIÓ EUROPEA
Fons Social Europeu

Generalitat de Catalunya
Departament d'Innovació,
Universitats i Empresa

2.- Memòria del treball (informe científic sense limitació de paraules). Pot incloure altres fitxers de qualsevol mena, no més grans de 10 MB cadascun d'ells.

Introducció

Per a determinar la dinàmica espai-temporal completa d'un sistema quàntic tridimensional de N partícules cal integrar l'equació d'Schrödinger en 3N dimensions. La capacitat dels ordinadors actuals, en termes de memòria i de temps, permet fer-ho com a molt en 3 dimensions, ja que el temps d'integració escala exponencialment amb el nombre de dimensions a integrar.

Amb l'objectiu de disminuir el temps de càlcul necessari per a integrar l'equació d'Schrödinger multidimensional, es realitzen usualment una sèrie d'aproximacions més o menys rigoroses depenent del problema sota estudi. Alguns exemples en són l'aproximació de Born–Oppenheimer o la de camp mig. En general, el preu que es paga en realitzar aquestes aproximacions és la pèrdua de les correlacions quàntiques, i.e. s'ignora la propietat quàntica de l'entrellaçament en la dinàmica de les partícules [2,3].

Per tant, és necessari desenvolupar mètodes numèrics que permetin integrar i estudiar la dinàmica de sistemes mesoscòpics (sistemes d'entre tres i unes deu partícules) i en els que es tinguin en compte, encara que sigui de forma aproximada, les correlacions quàntiques entre partícules. Així, el principal objectiu del present tesi doctoral serà el desenvolupament d'una eina numèrica per a integrar l'equació d'Schrödinger basada en les trajectòries quàntiques associades al formalisme de de Broglie–Bohm [4-5] i la seva posterior aplicació a diversos problemes en els que s'ha de resoldre la dinàmica de sistemes quàntics d'entre tres i deu partícules.

Recentment, en el context de la propagació d'electrons per efecte túnel en materials semiconductors, X. Oriols [6] ha desenvolupat un nou mètode per al tractament de les correlacions quàntiques en sistemes mesoscòpics. Aquesta nova proposta es fonamenta en la formulació de la mecànica quàntica de de Broglie–Bohm [4-5]. Així, volem fer notar que l'enfoc del problema que realitza X. Oriols i que pretenem aquí seguir no es realitza a fi de comptar amb una eina interpretativa, sinó per a obtenir una eina de càlcul numèric amb la que integrar de manera més eficient l'equació d'Schrödinger corresponent a sistemes quàntics de poques partícules.

Per a resoldre la dinàmica espai-temporal d'un sistema quàntic de varies partícules, que usualment s'obté integrant la corresponent equació d'Schrödinger multidimensional ab initio, X. Oriols ha desenvolupat un algorisme en el que tan sols cal integrar un conjunt acoblat de pseudo-equacions d'Schrödinger unidimensionals. Les trajectòries quàntiques que produeixen aquestes pseudo-equacions són idèntiques a les produïdes per la integració directa de l'equació d'Schrödinger multidimensional i, per tant, ens permeten estudiar el comportament exacte del sistema complet. És important remarcar que aquestes pseudo-equacions d'Schrödinger mantenen, de forma aproximada, les correlacions quàntiques entre les partícules, però, al ser equacions unidimensionals, el càlcul resulta molt més ràpid.

En el marc del present projecte de tesi doctoral es pretén estendre els algorismes desenvolupats per X. Oriols [6] a sistemes quàntics constituïts tant per fermions com per bosons, i aplicar aquests algorismes a diferents sistemes quàntics mesoscòpics on les correlacions quàntiques juguen un paper important. De forma específica, els problemes a estudiar són els següents:

(i) Fotoionització de l'àtom d'heli i de l'àtom de liti mitjançant un làser intens [7,8]. Estudiarem el paper de les correlacions quàntiques, i.e. l'entrellaçament, en la fotoionització dels àtoms d'heli de liti.

(ii) Estudi de la relació entre la formulació de X. Oriols amb la aproximació de Born–Oppenheimer. Analitzarem la dinàmica del sistema quàntic de tres partícules que

constitueix la molècula de H2+. Resoldrem la dinàmica en 1D ab initio i amb trajectòries quàntiques mitjançant la tècnica de X. Oriols.

(iii) Volem, tanmateix, realitzar l'estudi de les correlacions quàntiques en sistemes bi- i tripartits en l'espai de configuració de les partícules mitjançant la formulació de de Broglie–Bohm.

Pla de treball

Per a poder comprovar la validesa de l'algoritme de X.Oriols [6], cal primer comparar els resultats obtinguts en sistemes ja estudiats així que el primer pas en el desenvolupament del projecte de recerca ha sigut en l'estudi de la fotoionització de l'àtom d'hidrogen.

A partir de la integració *ab initio* de l'equació d'Schrödinger en tres dimensions hem calculat les trajectòries quàntiques de l'evolució de l'àtom d'hidrogen interaccionant amb polsos de llum ultracurts.

L'equació d'Schrödinger per a la funció d'ona, $\Psi = \Psi(\vec{r},t)$, de l'electró en l'àtom d'hidrogen interaccionant amb un pols de llum és (en el gauge de velocitats):

$$i\hbar\partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{\nabla} - q\vec{A}\right)^2 \Psi + V\Psi \qquad (1)$$

On q i m són, respectivament, la càrrega i la massa de l'electró, $\vec{A}$ és el potencial vector del camp electromagnètic de la llum i V és el potencial de Coulomb del nucli de l'àtom. L'evolució de la funció d'ona s'ha fet a través de l'algoritme de Crank–Nicolson i a partir d'aquesta s'ha trobat la distribució de velocitats de les trajectòries quàntiques segons:

$$\vec{v} = \frac{\hbar\left[\mathrm{Im}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi\right) - q\vec{A}\right]}{m|\Psi|^2} \qquad (2)$$

Distribuint inicialment unes 500 trajectòries seguint la distribució de probabilitat $|\Psi_{1s}|^2$, corresponent a l'estat fonamental de l'electró, i fent servir l'equació (2) trobem l'evolució de totes les trajectòries.

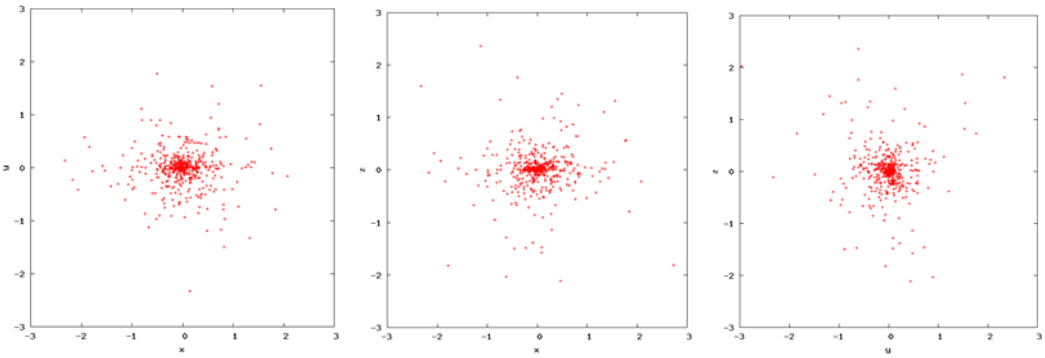

Figura 1: distribució inicial de les trajectòries quàntiques en els plans xy, xz i yz.

El pols ultracurt que interacciona amb l'electró té la forma:

$$\vec{A} = A_0 \sin^2\left(k_{env}(x-ct)\right)\mathrm{Re}\left(\vec{u}_p e^{ik_L(x-ct)}\right) \qquad (3)$$

Sent $A_0 = 3\cdot 10^4$ u.a. l'amplitud del pols de freqüència $\omega_L = 1$u.a., $k_L = \omega_L / c$, c és la velocitat de la llum, $k_{env} = k_L / 6$ és el nombre d'ones de l'ona envolvent (donant un pols de tres cicles) i $\vec{u}_p$ és el vector unitari que dóna la polarització al pols: $\vec{u}_p = \vec{u}_y$ en el cas de

polarització lineal i $\vec{u}_p = \left(\vec{u}_x - i\,\vec{u}_y\right)/\sqrt{2}$ per la polarització circular. És clar de l'equació (3) que l'ona es propaga al llarg de l'eix x.

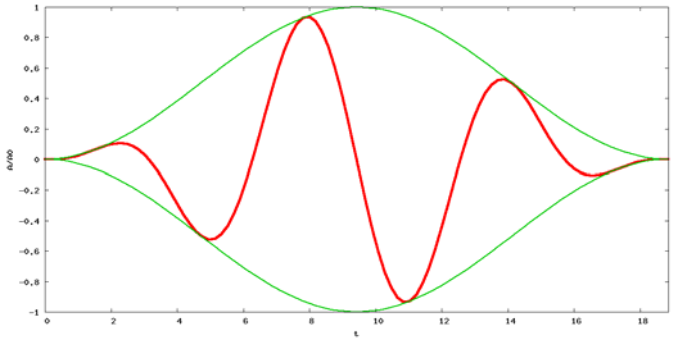

Figura 2: Perfil temporal de l'amplitud del pols electromagnètic en vermell.
En verd es pot veure el perfil de l'envolvent.

A continuació es mostren figures corresponents a les projeccions sobre els diferents plans xy, xz i yz de l'evolució temporal de les trajectòries de la figura 1 interaccionant amb un pols amb el perfil mostrat a la figura 2 amb polarització lineal (figura 3) i polarització circular (figura 4).

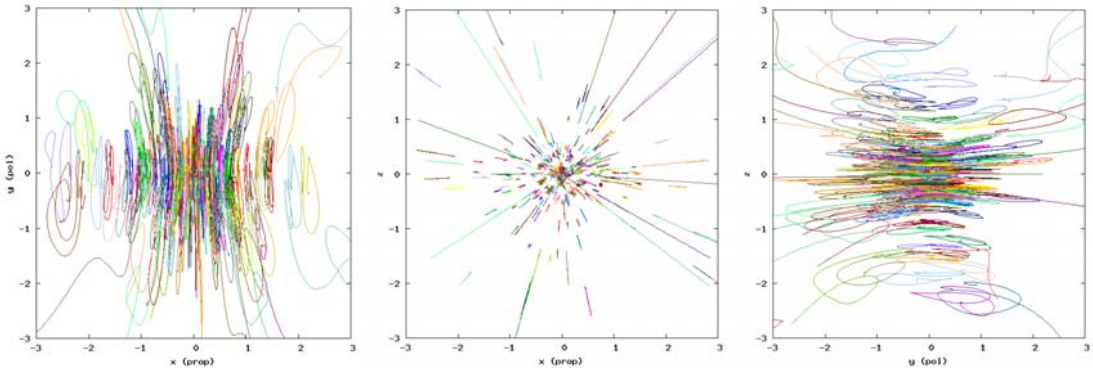

Figura 3: trajectòries quàntiques degudes a la interacció d'un electró
amb un pols de tres cicles amb polarització lineal en els plans xy, xz i yz.

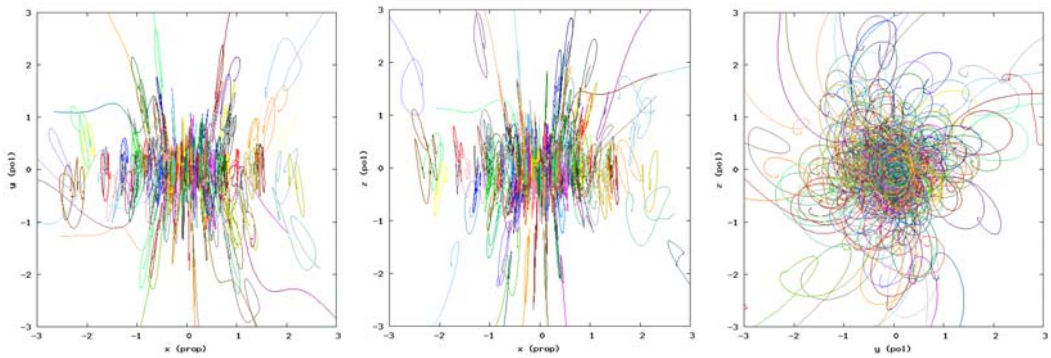

Figura 4: trajectòries quàntiques degudes a la interacció d'un electró
amb un pols de tres cicles amb polarització lineal en els plans xy, xz i yz.

En el cas amb polarització lineal (figura 2) es pot veure com les trajectòries segueixen la polarització de la llum (en l'eix y) i com el potencial Coulombià fa desviar les trajectòries de la dinàmica en aquest eix. En el cas amb polarització circular podem veure com el pols arrossega les trajectòries en el pla yz (perpendicular a la propagació).

Conclusions

S'ha desenvolupat els codis numèrics per a obtenir les trajectòries quàntiques de l'evolució de l'equació d'Schrödinger tridimensional. S'han aplicat aquests programes a estudiar la interacció d'un àtom d'hidrogen amb polsos ultracurts. A partir d'aquests tipus de simulacions es podrien calcular les fraccions de ionització i comparar-les amb els mètodes convencionals [7,8]. El següent pas serà aplicar l'algorisme de X. Oriols [6] a les mateixes simulacions i comprovar que els resultats concorden amb els obtinguts fins ara. Això permetrà validar el mètode i estudiar àtoms més complexes com el d'heli o el de liti.

Referències

[1] M. Born, R. Oppenheimer, Annalen der Physik, vol. 84, pp. 457-484 (1927)
[2] A. Einstein et al., Phys. Rev. 47, 777 (1935)
[3] J.S. Bell, Physics 1, 195 (1964)
[4] D. Bohm, Phys. Rev. 85, 166 (1952).
[5] P. R. Holland, The Quantum Theory of Motion (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1993).
[6] X. Oriols, Phys. Rev. Lett. 98, 066803 (2007)
[7] C. Ruiz, L. Plaja, L. Roso, Phys. Rev. Lett. 94, 063002 (2005)
[8] C. Ruiz, L. Plaja, J. R. Vázquez de Aldana, L. Roso, Phys. Rev. A 68, 023409 (2003)