

# "Breathers" cuánticos

Faustino Palmero Acebedo. Grupo de Física No Lineal  
Departamento de Física Aplicada I. Universidad de Sevilla  
`palmero@us.es`

<http://www.pdipas.us.es/p/palmero/>

# Resumen

- Introducción
- "Breathers" cuánticos. QDNLS.
  - Problema principal. Determinación del espectro de un operador.
  - Método del número de estados. Simetrías adicionales.
  - Problemas de cómputo. Mecánica cuántica en Maple.
  - Principales problemas computacionales.
- Cluster HPC.

# Introducción

## "Breathers" en sistemas "clásicos"

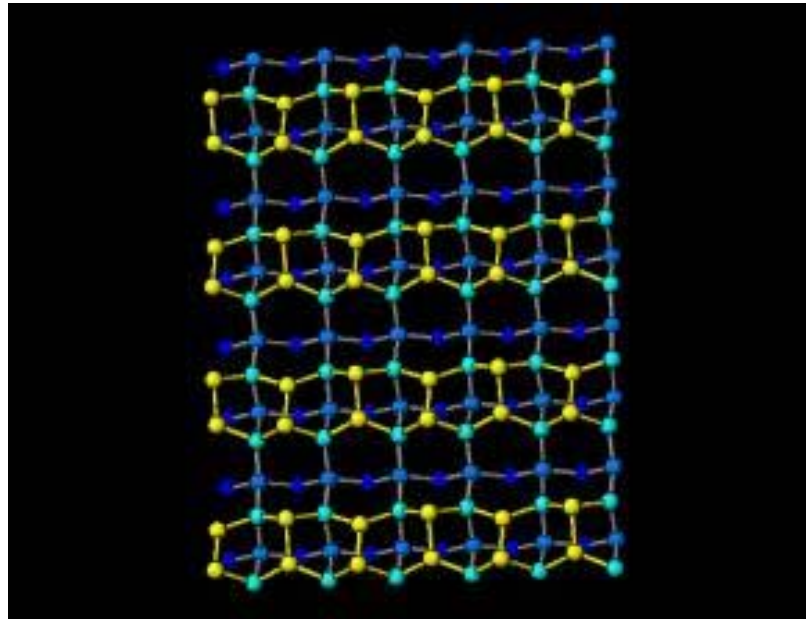
- Sistemas de osciladores acoplados no lineales:

$$H = \sum_{\vec{n}} \left( \frac{1}{2} m_n \dot{\vec{u}}_{\vec{n}}^2 + V_{\vec{n}}(\vec{u}_{\vec{n}}) + C \sum_{\vec{m}} W_{\vec{n},\vec{m}}(\vec{u}_{\vec{n}}, \vec{u}_{\vec{n}+\vec{m}}) \right)$$

- Localización espacial debida a efectos no lineales. Existencia y estabilidad bajo condiciones muy generales.
- Resultados analíticos.
- "Breathers" estáticos y móviles.
- Evidencias experimentales.

# "Breathers" cuánticos

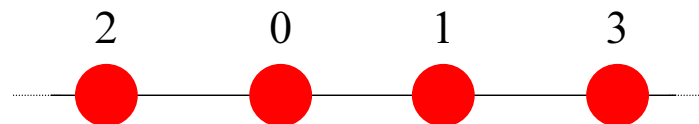
- Equivalente cuántico de un "breather" clásico. Problema sin resolver.
- Sistema discreto. "Objetos cuánticos" en la red: electrones, huecos, excitaciones .... Descripción probabilística.



# Mecánica cuántica

Cadena de 4 nodos: Estado general dado por funciones de onda. Espacio vectorial. Ejemplo:  $|\psi\rangle = [2, 0, 1, 3]$ .

- Operador creación  $b_j^\dagger$ . Ejemplo:  $b_2^\dagger[2, 0, 1, 3] = [2, 1, 1, 3]$ .
- Operador destrucción  $b_j$ . Ejemplo:  $b_3[2, 0, 1, 3] = [2, 0, 0, 3]$ .
- Términos de "hopping"  $b_2^\dagger b_3[2, 0, 1, 3] = [2, 1, 0, 3]$ .
- Términos anarmónicos  $b_4^\dagger b_4^\dagger b_4 b_4$ . "Localizan" cuantos.
- Descripción probabilística  $|\Psi_n\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle$ . Probabilidades  $|a_n|^2$ .
- Breather cuántico. Deslocalización espacial.



# Sistemas QDNLS

- Modelos de Hubbard (QDNLS). Hamiltoniano (energía) dado por un operador de la forma.

$$\hat{H} = - \sum_{j=1}^{f^D} \frac{\gamma_j}{2} b_j^\dagger b_j^\dagger b_j b_j - \sum_{j=1}^{f^D} \sum_p \epsilon_{jp} b_j^\dagger b_{j+p}.$$

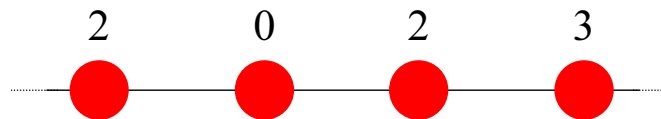
Índices  $j$  y  $p$  indican los nodos de una red ( $D$  dimensiones).  $\hat{H}$  actúa en un espacio vectorial (espacio de las funciones de onda) y  $b_j^\dagger$  y  $b_j$  se denominan operadores de creación/destrucción.

- $\hat{H}$  conserva el número de "cuantos".  $\hat{N} = \sum_{j=1}^{f^D} b_j^\dagger b_j.$

# Método del "Número de estados"

- Problema: Espectro (total o parcial) del operador Hamiltoniano. Diagonalización parcial para un número dado de "cuantos"  $N$ .
- Actuación de los operadores  $b_j$  y  $b_j^\dagger$  en una base  $|\psi_n\rangle = [n_1, n_2, \dots, n_f]$ ,  $N = \sum n_i$ .
- Función de onda:  $|\Psi_n\rangle = \sum_n a_n |\psi_n\rangle$ . Simetrías adicionales reducen el problema

Ejemplo: problema en una dimensión (cadena): Red de 4 nodos y 7 bosones: [2,0,2,3].



# Mecánica cuántica en Maple

Cálculo, mediante programas de manipulación simbólica (Maple), de la acción del Hamiltoniano sobre un vector de la base.

- Para un número dado de cuantos, el conjunto de vectores de la base se representa por una lista, donde cada elemento de la lista es un vector (en el ejemplo anterior  $[2,0,2,3]$ ).
- Se puede definir la acción de un operador creación/destrucción sobre un elemento de la lista  $v$ . Por ejemplo  $b_j^\dagger$  se definiría de la forma

```
bd := proc (v, j::nonnegint)
    nj := op (j, v) ;
    RETURN (sqrt (nj+1) * subsop (j=nj+1, v) ;
end;
```



# Mecánica cuántica en Maple

- Se puede definir de la misma forma el operador destrucción, y el hamiltoniano sería, para el caso de un sistema en una dimensión, homogéneo, con condiciones de contorno periódicas y en aproximación de interacción únicamente entre los primeros vecinos de la forma

$$H := \text{sum}(' \text{gamma}' * \text{bd}(\text{bd}(\text{b}(\text{b}(\text{v}, i), i), i), i) + \text{bd}(\text{b}(\text{v}, \text{cyc}(i+1)), i) + \text{bd}(\text{b}(\text{v}, \text{cyc}(i-1)), i) ', ' i' = 1..f),$$

donde *cyc* indica que las condiciones de contorno son periódicas.

- Ejemplo de cálculo.

# Algunos resultados

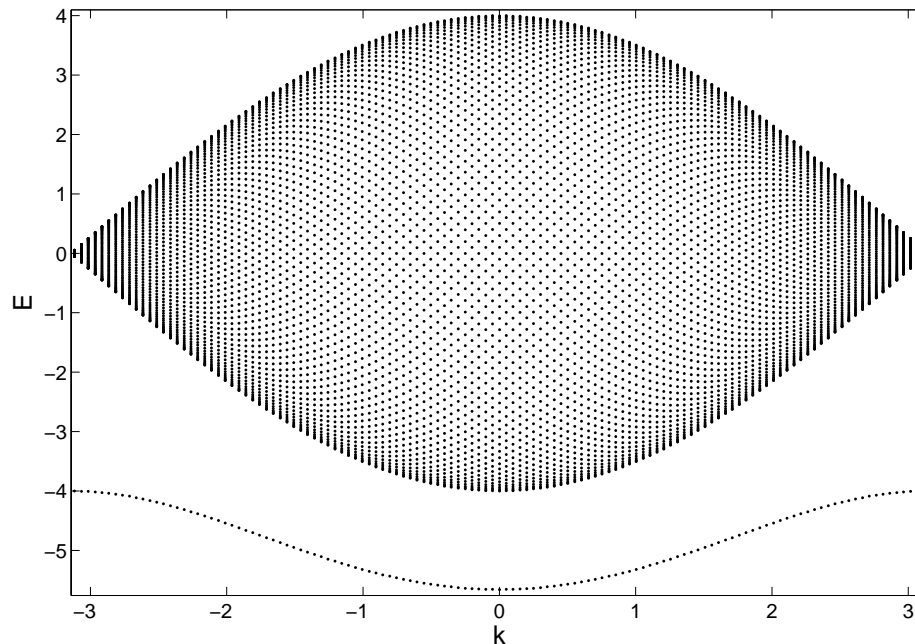
Sistemas invariantes bajo traslaciones (cristales perfectos). Momento definido (número de ondas  $\vec{k}$ ).

- Algunos resultados analíticos
- En general, si el parámetro  $\gamma$  (no linealidad) es suficientemente grande, aparece una estructura de bandas, y una banda aislada correspondiente a estados localizados, en los que existe una alta probabilidad de que los "cuantos" estén localizados en el mismo nodo de la red, pero con igual probabilidad en cualquier punto de la red.

Sistemas no invariantes bajo traslaciones (cristales con impurezas, inhomogeneidades, ...). Localización espacial.

# Espectro

Ejemplo: Autovalores de la energía  $E(k)$  como función del momento  $k$ . QDNLS, red de bosones en una dimensión,  $f = 125$  y  $n = 2$ .



Estado fundamental para  $k = 0$  (no normalizado):

$$|\Psi\rangle = [20 \dots 0] + [020 \dots 0] + \dots + [0 \dots 02] + O(\gamma^{-1})..$$

# Problemas de cómputo

- Para un número dado de "cuantos", determinar la representación matricial del operador Hamiltoniano. Problema: Número de vectores de la base crece rápidamente con  $n$  y  $f$ .  
**Ejemplo:** Cadena (monodimensional) de  $f$  nodos con  $n$  bosones. El número de vectores de la base  $p$  es

$$p = \frac{(n + f - 1)!}{(f - 1)!n!}.$$

- Cálculo de autovectores y autovalores de una matriz (hermítica) de dimensión  $p \times p$ .
- En sistemas con simetrías adicionales (traslación, rotación,...) el problema se simplifica.

# Computación en paralelo

## Computación en paralelo. HPC cluster

- Maple en sistemas paralelo.
- Programas de manipulación simbólica en paralelo GNU.
- Cálculo de autovalores y autovectores de matrices hermíticas (esparcidas o no) muy grandes.
- Gracias al proyecto FIS2004-01183, financiado por el Ministerio de Ciencia y Tecnología, se han podido comprar una serie de máquinas para empezar a montar un cluster HPC.

HPC cluster aleph.eii.us.es (acrónimo de "anharmonic localization of energy phenomenom").

- Actualmente tres estaciones de trabajo Sun Fire X4100 M2 x64 Server: 2x AMD. Localizado en el Centro de Cálculo de la Escuela Técnica Superior de Ingeniería Informática (¡Gracias!).
- Sistema operativo Linux.



# Trabajo pendiente

- Instalación software de cluster.
- Instalación de librerías en paralelo.
- Instalación de librerías matemáticas.
- Benchmark.
- Paralelización de programas (Fortran).
- Futuras ampliaciones.
- ...

¡Se buscan alumnos interesados!

# Algunas referencias

## General:

- A. C. Scott, J. C. Eilbeck and H. Gilhøj, *Physica D* **78**, 194 (1994).
- J. Dornigac, J.C. Eilbeck, M. Salerno, and A. C. Scott, *Phys. Rev. Letts.* **93** 025504, (2004).
- V. Fleurov, *Chaos* **13**, 676 (2003); R. S. MacKay, *Physica A* **288**, 174 (2000).

## Sistemas no invariantes bajo traslaciones/rotaciones:

- JC Eilbeck and F Palmero. Quantum breathers in an attractive fermionic Hubbard model. *Nonlinear Waves: Classical and Quantum Aspects*, (eds. F. Kh. Abdullaev and V. V. Konotop), Kluwer: Amsterdam, 399-412(2004).
- JC Eilbeck and F Palmero. Trapping in quantum chains. *Phys. Lett. A*, **331**(3-4):201-208(2004).
- FR Romero, JFR Archilla, F Palmero, B Sánchez-Rey, A Alvarez, J Cuevas and JM Romero. Classical and quantum nonlinear localized excitations in discrete systems. Invited review chapter. *Recent Research Developments in Physics*, Transworld Research Network, India (2005)