

**Załącznik nr.3 (autoreferat w j. polskim)**

Przemysław Kościk  
Instytut Fizyki, Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach

**AUTOREFERAT**

**1. CV**

- 1.1 Dane personalne
- 1.2 Stopnie naukowe
- 1.3 Informacje o zatrudnieniu

**2. Osiągnięcie naukowo-badawcze**

- 2.1 Tytuł osiągnięcia naukowego
- 2.2 Publikacje składające się na osiągnięcie naukowe
- 2.3 Omówienie celu naukowego i wyników prac
- 2.4 Podsumowanie

**3. Inne osiągnięcia naukowe**

- 3.1 Lista publikacji niewliczonych do osiągnięcia naukowego
- 3.2 Streszczenie pozostałych osiągnięć

**4. Literatura**

## 1. CV

### 1.1 Dane personalne

Przemysław Kościk

### 1.2 Wykształcenie

2009 – Stopień doktora nauk fizycznych, Uniwersytet Humanistyczno-Przyrodniczy (obecnie Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach) (fizyka)

2003 – Magister fizyki, Akademia Świętokrzyska (obecnie Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach) (fizyka)

2000 – Licencjat, Wyższa Szkoła Pedagogiczna (obecnie Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach) (matematyka)

### 1.3. Informacje o zatrudnieniu

01.05.2009 – Adiunkt, Instytut Fizyki, Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach

01.10.2003 – 30.04.2009 – Asystent, Instytut Fizyki, Uniwersytet Humanistyczno-Przyrodniczy (obecnie Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach)

## 2. Osiągnięcie naukowo-badawcze

### 2.1. Tytuł osiągnięcia naukowego

Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595 ze zm.):

**“Korelacje kwantowe w układach oddziałujących cząstek”**

### 2.2 Publikacje składające się na osiągnięcie naukowe

H1. P. Kościk, *Two-electron entanglement in a two-dimensional isotropic harmonic trap: Radial correlation effects in the low density limit*, [Physics Letters A 375 \(2011\) 458](#)

H2. P. Kościk, *Entanglement in S states of two-electron quantum dots with Coulomb impurities at the center*, [Physics Letters A 377 \(2013\) 2393](#)

H3. P. Kościk, A. Okopińska, *Two-electron entanglement in elliptically deformed quantum dots*, [Physics Letters A 374 \(2010\) 3841](#)

H4. P. Kościk, A. Okopińska, *Entanglement Entropies in the Ground States of Helium-Like Atoms*, [Few-Body Systems 55 \(2014\) 1151](#)

H5. P. Kościk, A. Okopińska, *Ground-state correlation properties of charged bosons trapped in strongly anisotropic harmonic potentials*, [European Physical Journal B 85 \(2012\) 93](#)

- H6. P. Kościak, *Quantum correlations of a few bosons within a harmonic trap*, *Few-Body Systems* 52 (2012) 49
- H7. P. Kościak, A. Okopińska, *Correlation effects in the N-particle Moshinsky model*, *Few-Body Systems* 54 (2013) 1637
- H8. P. Kościak, T. Sowiński, *Exactly solvable model of two trapped quantum particles interacting via finite-range soft-core interactions*, *Scientific Reports* 8 (2018) 48
- H9. P. Kościak, *The von Neumann entanglement entropy for Wigner-crystal states in one dimensional N-particle systems*, *Physics Letters A* 379 (2015) 293, Corrigendum: *Physics Letters A* 381 (2017) 823
- H10. P. Kościak, *Quantum Entanglement of Two Harmonically Trapped Dipolar Particles*, *Few-Body Systems* 56 (2015) 107
- H11. P. Kościak, *Quantum correlations in one-dimensional Wigner molecules*, *European Physical Journal D* 71 (2017) 286
- H12. P. Kościak, *Optimized Configuration Interaction Approach for Trapped Multiparticle Systems Interacting Via Contact Forces*, *Physics Letters A* 382 (2018) 2561

### 2.3 Omówienie celu naukowego i wyników prac

#### 1. Wstęp

Wkrótce po narodzinach mechaniki kwantowej, badanie korelacji kwantowych zaczęło przyciągać uwagę badaczy. Rozwój technik eksperymentalnych, jaki nastąpił w ostatnich dekadach, spowodował istotny wzrost zainteresowania własnościami kwantowych układów złożonych z oddziałujących cząstek. Wzrost ten nastąpił, w związku z ich możliwym zastosowaniem w różnych gałęziach informatyki kwantowej [1]. Doświadczalnie możliwe są różne realizacje takich układów. Istotną zaletą układów wytwarzanych w laboratoriach jest możliwość kontrolowania ich własności takich jak liczba cząstek, oddziaływania między nimi oraz kształt pułapki wiążącej. Oprócz ultra-zimnych gazów atomowych, wykazujących krótko zasięgowe oddziaływania, również układy z długo zasięgowymi potencjałami oddziaływania są realizowane eksperymentalnie. Przykładami ich są układy z kulombowskim potencjałem oddziaływania takie jak np. kropki kwantowe (sztuczne atomy) [2] oraz układy jonów w pułapkach elektromagnetycznych [3]. Układy te wykazują szeroki wachlarz stanów skorelowanych w tym stan *krystalizacji* Wignera, charakteryzujący się wyraźną lokalizacją cząstek. Stan ten zaobserwowano w wielu eksperymentach [3, 4, 5, 6]. Ostatnio na pierwszy plan wysuwają się badania nad własnościami układów z oddziaływaniem dipolowym (*dipole-dipole interaction* (DDI)) [7-15]. Motywowane jest to postępowaniem technologicznym, który umożliwił osiąganie oddziaływań DDI w eksperymentach z cząsteczkami polarnymi [16-22]. Zaproponowane zostały także nowatorskie schematy obliczeń kwantowych, z zastosowaniem takich układów [23, 24]. Należy również odnotować istotny postęp eksperymentalny w wyznaczaniu charakterystyk korelacji [25-28] oraz miar splątania kwantowego [29]. Dostarcza to silnej motywacji do badania własności układów wielocząstkowych, jak i do opracowywania efektywnych narzędzi teoretycznych pod tym kątem.



Wiele publikacji naukowych zostało poświęconych układom złożonym z oddziałujących cząstek w kontekście badania własności ich stanów splątanych. Dostępne wyniki badań obejmują m. in. takie układy jak układy z oddziaływaniem typu kontaktowego (*delta Diraca*) [30-33], układy z oddziaływaniem kulombowskim [34-37], atom helu i atomy helo-podobne [38-43] oraz modele złożone z  $N$  cząstek w pułapce harmoniczej z oddziaływaniem harmonicznym [44-53] i oddziaływaniem  $r^{-2}$  (model Calogero) [54, 55]. Wyczerpujący przegląd dotyczący teoretycznych i eksperymentalnych aspektów badania splątania w układach kwantowych znajduje się w pracy [56].

Publikacje włączone do osiągnięcia naukowego, obejmują badania własności układów złożonych z kilku oddziałujących cząstek. Ich celem było głębsze zrozumienie zjawisk korelacyjnych zachodzących w takich układach, jak i rozwijanie metod teoretycznych do ich opisu.

Poniżej przedstawiam omówienie wyników prac, włączonych do osiągnięcia naukowego. Szczegóły dotyczące metod, teoretycznych i obliczeniowych, metodyki badań oraz otrzymanych rezultatów znajdują się w odpowiednich publikacjach. Skrócony opis został podzielony na trzy części. W pierwszej części omówione zostaną publikacje obejmujące badania splątania i korelacji w różnych układach złożonych z oddziałujących cząstek, w tym takich jak kropki kwantowe, ultra-zimne gazy atomowe oraz atom helu i atomy helo-podobne. Kolejna część poświęcona jest serii publikacji o zastosowaniu przybliżenia harmonicznego do badania własności stanów *krystalizacji* uformowanych przez cząstki uwięzione w pułapce harmoniczej z potencjałem oddziaływania typu  $r^{-d}$  ( $d > 0$ ) (*inverse power-law (IPL) interaction potential*). Trzecia część poświęcona jest zastosowaniu optymalizowanej metody ED (*exact-diagonalization*) do układów z oddziaływaniem *delta Diraca*.

## 2. Badania własności stanów splątanych

Prace [H1 - H3] dotyczą własności dwu-elektronowych kropek kwantowych z potencjałem uwięzienia modelowanym pułapką harmoniczną:

$$V(\vec{r}) = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2). \quad (1)$$

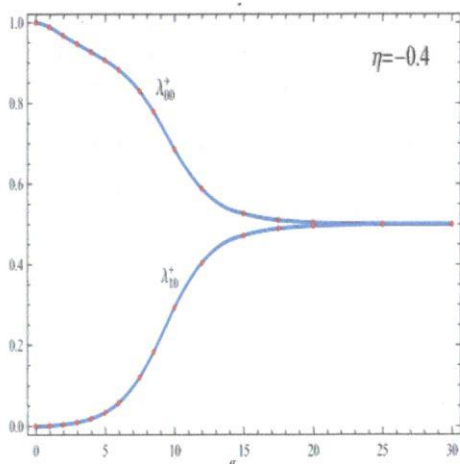
Praca [H1] rozważa dwuwymiarową kropkę z pułapką izotropową  $\omega_x, \omega_y = \omega, \omega_z \rightarrow \infty$  [57-60]. Zostało wyprowadzone w niej rozwinięcie *Slatera* [61] funkcji falowej stanu singletowego we współrzędnych biegunowych o rzeczywistych jednocząstkowych orbitalach. Został zbadany stan podstawowy pod kątem jego własności splątania w szerokim zakresie wartości bezwymiarowego parametru  $g = e^2 / \epsilon_* \sqrt{m / \omega \hbar^3}$ . W szczególności pokazano, że przestrzenna funkcja falowa stanu podstawowego przyjmuje w granicy dużych rozmiarów kropki, tj. w granicy  $g \rightarrow \infty$ , postać :

$$\psi^{g \rightarrow \infty}(r_1, r_2, \theta) = \frac{A^{(\infty)}(r_1, r_2) \delta(\theta - \pi)}{\sqrt{r_1 r_2}}, \quad (2)$$

gdzie  $\theta = \phi_2 - \phi_1$  a  $\phi_1, \phi_2$  są współrzędnymi kątowymi elektronów, natomiast  $\delta$  jest *deltą Diraca*.

W granicy tej dochodzi więc do separacji korelacji radialnych od kątowych, przy czym elektrony lokalizują się dokładnie po przeciwnych stronach centrum pułapki. Ponadto okazało się, że czynnik radialny  $A^{(\infty)}(r_1, r_2)$  można z dobrym przybliżeniem przedstawić, jako iloczyn dwóch identycznych orbitali, co z kolei świadczy o znikomych przestrzennych korelacjach radialnych w granicy krystalizacji.

Publikacja [H2] rozważa trójwymiarową, sferycznie symetryczną kropkę z potencjałem uwięzienia  $v(r) = \omega^2 m r^2 / 2$  i tzw. *zanieczyszczeniem* kulombowskim w jej centrum tj.  $v_\eta(r) = \eta / \epsilon_* r$  [62, 63]. Wyprowadzono rozwinięcia *Slatera* singletowych i trypletowych funkcji falowych stanów S we współrzędnych sferycznych. Zbadano także wpływ *zanieczyszczenia* na własności splątania



**Rysunek 1.** Zachowanie dwóch najniższych wartości własnych macierzy gęstości singletowego stanu podstawowego w funkcji  $g$  dla przykładowej wartości  $\eta$  większej od  $\eta \approx -0.911$ .

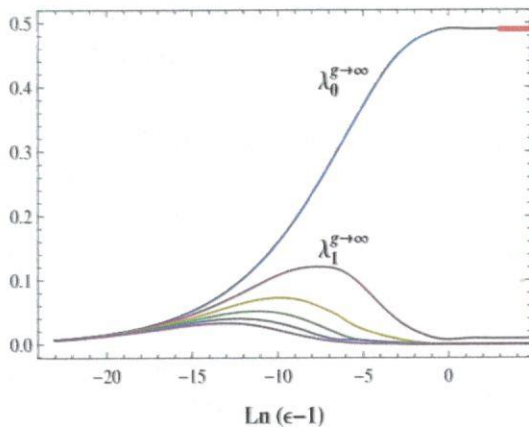
leżą jedynie od współrzędnej radialnej (rysunek 1), co świadczy o znikomych korelacjach kątowych. W przypadku dodatnio (ujemnie) naładowanego *zanieczyszczenia*, stopień splątania stanów kropki jest większy (mniejszy) od odpowiedników w przypadku braku *zanieczyszczenia*.

W pracy [H3] zbadane zostały własności dwu-wymiarowej kropki z uwięzieniem modelowanym anizotropową pułapką:  $\omega_x \neq \omega_y, \omega_z \rightarrow \infty$ . Zbadano własności stanu podstawowego i stanów trypletowych o najniższej energii w zależności od bezwymiarowego parametru  $g = e^2 / \epsilon_* \sqrt{m / \omega_y \hbar^3}$  i współczynnika anizotropii pułapki  $\epsilon = \omega_y : \omega_x$ . W ramach przybliżenia harmonicznego wyprowadzono równania całkowe, wyznaczające rozwinięcia *Slatera* dla funkcji falowych stanów *krystalizacji* Wignera, tj. w granicy  $g \rightarrow \infty$ . Wykazano, że w tej granicy ruch w kierunku poprzecznym jest niezależny od ruchu w kierunku podłużnym tzn. funkcje falowe stanów *krystalizacji* są iloczynami funkcji o współrzędnych  $x_1, x_2$  oraz  $y_1, y_2$ . Wynika z tego, że brak jest korelacji pomiędzy ruchami w obu kierunkach. Rysunek 2 prezentuje sześć najniższych wartości własnych macierzy gęstości otrzymanych dla stanów *krystalizacji* o najniższej energii, w funkcji anizotropii pułapki  $\epsilon$ . Jak można zauważyć z rysunku, własności splątania stanu *krystalizacji* silnie zależą od

stanu podstawowego i stanów trypletowych o najniższej energii w zależności od  $g = e^2 / \epsilon_* \sqrt{m / \omega \hbar^3}$ . Pokazano, że obecność *zanieczyszczenia* istotnie modyfikuje własności korelacyjne stanów kropki. W przypadku ujemnie naładowanego *zanieczyszczenia* entropie von Neumanna stanów kropki, wykazują niemonotoniczne zachowanie w funkcji  $g$ , dążąc w granicy  $g \rightarrow \infty$  do granic właściwych. W pozostałych przypadkach są one monotonicznymi funkcjami  $g$  i dążą w granicy  $g \rightarrow \infty$  do nieskończoności, odzwierciedlając fakt, że rośnie jednocześnie liczba jednocząstkowych stanów obsadzonych przez elektrony. W przypadku singletowego stanu podstawowego, nietrywialne korelacje pojawiają się dla ujemnych wartości  $\eta$  większych od  $\eta \approx -0.911$ . W takich przypadkach w granicy dużych wartości  $g$  dominują głównie dwie wartości własne macierzy gęstości o funkcjach własnych, które za-



$\varepsilon$  jedynie w zakresie  $1 < \varepsilon < \varepsilon_{cr}$ ,  $\varepsilon_{cr} \approx 1.4$ , podczas gdy zakres  $\varepsilon > \varepsilon_{cr}$  odpowiada w zasadzie granicy ściśle jednowymiarowej  $\varepsilon \rightarrow \infty$ . Pokazano, że w tej granicy jedynie dwa najniższe orbitale naturalne są dominujące. W konsekwencji funkcję trypletowego stanu *krystalizacji*  $s_z = \pm 1$  uformowanego w pułapce o współczynniku anizotropii  $\varepsilon$  większym od  $\varepsilon_{cr}$  można z dobrym przybliżeniem przedstawić, jako jeden wyznacznik *Slatera*, co z kolei świadczy o tym, że jest to stan słabo splątany. Natomiast odpowiednie singletowe i trypletowe funkcje falowe stanów *krystalizacji* Wignera  $s_z = 0$  można z dobrym przybliżeniem przedstawić, jako kombinacje liniowe dwóch wyznaczników *Slatera*. Okazało się, że im mniejszy współczynnik anizotropii pułapki  $\varepsilon$ , tym większy stopień splątania odpowiadającego mu stanu *krystalizacji*.



**Rysunek 2.** Sześć najniższych obsadzeń odpowiadających stanowi podstawowemu i stanom trypletowym o najniższej energii w granicy *krystalizacji*  $g \rightarrow \infty$  w funkcji współczynnika anizotropii  $\varepsilon = \omega_y : \omega_x$  (w tej granicy wszystkie obsadzenia są podwójnie zdegenerowane). Czerwona pozioma linia odpowiada wartości najniższego obsadzenia otrzymanego w granicy ściśle jednowymiarowej  $\varepsilon \rightarrow \infty$ ,  $\lambda_0^{g \rightarrow \infty} \approx 0.4907$ .

Głównym celem publikacji [H4] było zbadanie stanów związanych atomu helu i atomów helopodobnych pod kątem ich stopnia splątania. Dodatkową motywacją do podjęcia tych badań były istotne różnice w wartościach entropii *von Neumanna* stanu podstawowego atomu helu, które dostępne były w ówczesnej literaturze. W pracy [H4] wyznaczono wartość entropii *von Neumanna* ze znacznie lepszą dokładnością niż we wcześniejszych obliczeniach wykonanych innymi metodami przez innych autorów [38-43] (tabela 1). Poprawność naszego wyniku została także potwierdzona w pracy [64]. Ponadto wyznaczono, po raz pierwszy, entropię *von Neumanna* dla stanów podstawowych atomów helopodobnych.

	L	S
[H4]	0.0159157	<b>0.0848999</b>
Dehesa et al. [38]	0.015914	
Benetti et al. [39]	0.01606	0.0785
Y.C Lin et al. [40]	0.015943	
C.H Lin et al. [41]	0.0159156	
Y.C Lin et al. [42]	0.015943	0.085022
Huang et al. [43]		0.0675

**Tabela 1** Porównanie wyników pracy [H4], entropia liniowa i entropia *von Neumanna*, z wynikami literaturowymi.

Prace [H5, H6] poświęcone są kwazi-jednowymiarowym układom bozonowym.

W pracy [H5] zostały zbadane własności układu złożonego z kilku bozonów w pułapce harmoniczej, z kulombowskim potencjałem oddziaływania. Układ ten stanowi np. model dla jonów uwięzionych w pułapce Pauliego [65]. Obliczenia zostały przeprowadzone w granicy silnej anizotropii pułapki  $\varepsilon = \omega : \omega_x \gg 1$ ,  $\omega_y = \omega_z = \omega$  w przybliżeniu jedno-modowym (*single-mode approximation* (SMA)). W ramach tego przybliżenia oddziaływanie pomiędzy cząstkami przyjmuje postać

$$U_{1D}(x_1, x_2) = \sqrt{\frac{\varepsilon\pi}{2}} e^{-\frac{\varepsilon(x_2-x_1)^2}{2}} (1 - \operatorname{erf}[\sqrt{\frac{\varepsilon}{2}}|x_2-x_1|]). \quad (3)$$

Dla stanu podstawowego wyznaczono liniową entropię, w zależności od współczynnika anizotropii pułapki  $\varepsilon$  oraz bezwymiarowego parametru  $g = e^2 / \varepsilon_* \sqrt{m\omega_x \hbar^3}$  i liczby cząstek  $N$ . Pokazano, że entropia silnie zależy od  $\varepsilon$  w zakresie małych wartości parametru  $g$ . Natomiast jej zależność od  $\varepsilon$  zanika w granicy *krystalizacji* Wignera tj. gdy  $g \rightarrow \infty$ . Wartość entropii jest największa w granicy jednowymiarowej  $\varepsilon \rightarrow \infty$ . W granicy tej dochodzi do tzw. *fermionizacji*, tzn. funkcje falowe bozonów  $\psi_B$  nabierają własności:  $\psi_B = 0$  gdy  $x_i = x_j$  bez względu na wartość parametru  $g$  ( $g \neq 0$ ). Pokazano, że stan bozonowy *fermionizuje* z dobrym przybliżeniem przy mniejszych wartościach  $g$  im większa jest wartość  $\varepsilon$ . Wartość krytyczna  $g_{cr}$  przy której dochodzi do *krystalizacji* słabo zależy od wartości  $N$ , co najmniej w zakresie niedużych wartości  $N$ . Wykazano, że przy ustalonych wartościach parametrów  $\varepsilon$  i  $g$  ( $g \neq 0$ ) stopień splątania pomiędzy podukładem złożonym z jednej cząstki oraz podukładem złożonym z pozostałych  $N-1$  cząstek rośnie wraz ze wzrostem  $N$ .

W pracy [H6] porównane zostały własności stanu podstawowego kwazi-jednowymiarowego układu złożonego z bozonów oddziałujących efektywnym potencjałem kulombowskim, z własnościami odpowiednika z potencjałem oddziaływania *delta Diraca*. W szczególności porównano silnie *skorelowane* granice obu układów pod kątem różnic w ich spektrach obsadzeń i splątania tj. odpowiednio granicę *krystalizacji* z granicą gazu TG (*Tonks-Girardeau gas*) [66].



W pracy [H7] rozważony został w jednym wymiarze dokładnie rozwiązywalny model złożony z  $N$  cząstek w pułapce harmoniczej  $x^2/2$  z harmonicznym potencjałem oddziaływania  $U = g(x_i - x_j)^2$  [44-52]. Otrzymano dla stanu podstawowego dokładne wyrażenia na miary entropowe (entropie *von Neumanna*  $S^{(p)}$  i liniową entropię  $L^{(p)}$ ), wyznaczające stopień splątania pomiędzy podukładem złożonym z  $p$  cząstek i podukładem złożonym z pozostałych  $N-p$  cząstek:

$$S^{(p)} = -\operatorname{Tr}[\rho^{(p)} \log_2 \rho^{(p)}] = \frac{1}{2} \log_2 [(t+1)^{t+1} (t-1)^{1-t}] - 1, \quad (4)$$

i

$$L^{(p)} = 1 - \operatorname{Tr}[(\rho^{(p)})^2] = 1 - \frac{1}{t}, \quad (5)$$

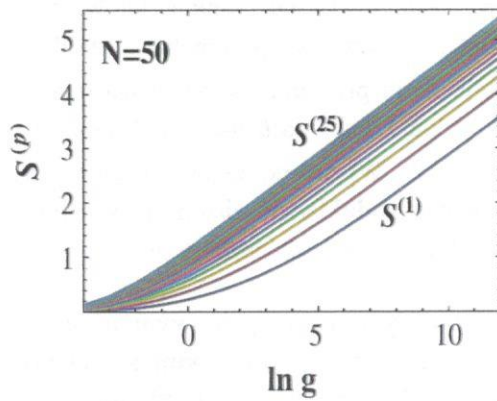
gdzie

$$t = \frac{1}{N} \sqrt{N^2 - 2Ng + 2p^2 + \frac{2p(Ng+1)(N-p)}{\sqrt{1+2Ng}}}, \quad (6)$$

gdzie  $\rho^{(p)}$  to zredukowana macierz gęstości rzędu  $p$ ,  $p$ -RDM,  $\rho^{(p)} = \text{Tr}_{r_{p+1}, \dots, r_N} [|\psi\rangle\langle\psi|]$ . Ponadto otrzymano analityczną postać tzw. współczynnika *Kutzelnigga* [67]-statystycznej miary korelacji,

$$\tau = \frac{\sqrt{1+2Ng}-1}{\sqrt{1+2Ng+N-1}}. \quad (7)$$

Rysunek 3 prezentuje zachowanie entropii splątania  $S^{(p)}$  dla  $N=50$  i wszystkich możliwych podziałów układu na dwie części ( $p=1, \dots, 25$ ), w zależności od  $g$ . W pracy przedyskutowano również zachowanie entropii  $S^{(p)}$ , współczynnika *Kutzelnigga*, jak i względnej energii korelacji w zależności od liczby cząstek  $N$  oraz wartości  $g$  i  $p$ .



**Rysunek 3** Entropia von Neumanna dla  $N=50$  w funkcji  $\ln g$  dla wszystkich możliwych podziałów układu na dwie części  $p=1, \dots, 25$ . Rysunek pochodzi z pracy [H7].

W pracy [H8] został poddany analizie jednowymiarowy układ złożony z dwóch identycznych cząstek w pułapce harmoniczej z oddziaływaniem modelowanym potencjałem prostokątnym, tj.  $v_{\text{int}}(x) = V$  dla  $|x| < a$  oraz  $v_{\text{int}}(x) = 0$  dla  $|x| \geq a$ . Otrzymano *analityczne* rozwiązania równania Schrödingera zarówno dla stanów bozonowych i fermionowych. Funkcje falowe ruchu względnego o współrzędnej  $x = x_2 - x_1$ , parzyste (+) oraz nieparzyste (-) mają postać:

$$\Phi_i^{(\pm)}(x) = \begin{cases} A^{(\pm)} \phi_v^{(\pm)}(x), & |x| < a \\ \phi_u^{(\pm)}(x), & |x| \geq a \end{cases}, \quad (8)$$

gdzie

$$\phi_u^{(+)}(x) = e^{-\frac{x^2}{4}} {}_1F_1\left(\frac{u+1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{x^2}{2}\right), \quad \phi_u^{(-)}(x) = xe^{-\frac{x^2}{4}} {}_1F_1\left(\frac{u+2}{2}; \frac{3}{2}; \frac{x^2}{2}\right), \quad (9)$$

i



$$\varphi_u^{(+)}(x) = e^{-\frac{x^2}{4}} U\left(\frac{u+1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{x^2}{2}\right), \quad \varphi_u^{(-)}(x) = x e^{-\frac{x^2}{4}} U\left(\frac{u+2}{2}; \frac{3}{2}; \frac{x^2}{2}\right), \quad (10)$$

oraz  $v = -E_i + V - 1/2$ ,  $u = -E_i - 1/2$ , przy czym poziomy energetyczne  $E_i$  są wyznaczone przez następujące równania

$$\varphi_u^{(\pm)}(a) \frac{d\varphi_v^{(\pm)}(x)}{dx} \Big|_{x=a} - \varphi_v^{(\pm)}(a) \frac{d\varphi_u^{(\pm)}(x)}{dx} \Big|_{x=a} = 0. \quad (11)$$

Ponadto zbadano własności stanów układu w szerokim zakresie wartości parametrów kontrolnych  $a$  i  $V$ . W szczególności porównano je z własnościami odpowiednika z oddziaływaniem kontaktowym pomiędzy cząstkami  $v_{dd}(x) = g\delta(x)$ , który jest odtwarzany przez rozważany prostokątny potencjał oddziaływania przy  $V = g/2a$  w granicy  $a \rightarrow 0$ . Pokazano, że w przeciwieństwie do układu z oddziaływaniem kontaktowym, układ z oddziaływaniem prostokątnym wykazuje stany *krystalizacji*. Stan podstawowy *krystalizuje* w granicy *fermionizacji*  $g \rightarrow \infty$  począwszy od wartości  $a$  większej od  $a \approx 2$ . Dokładne energie i ich funkcje falowe otrzymane w tej pracy, mogą być użyteczne m. in. do testowania metod przybliżonych teorii wielu ciał. Mogą one również stanowić punkt wyjścia do konstrukcji przybliżonej wariacyjnej funkcji falowej dla odpowiadającego problemu  $N$ -ciał (Jastrow-like ansatz).

### 3. Krystalizacja: przybliżenie harmoniczne

Prace [H4, H9, H10, H11] zostały poświęcone zastosowaniu przybliżenia harmonicznego do badania własności stanów *krystalizacji*, uformowanych przez cząstki uwięzione w jednowymiarowej pułapce harmonicznej, z potencjałem oddziaływania typu  $|x|^{-d}$  ( $d > 0$ ) (*inverse power-law (IPL) interaction potential*). Układy takie opisane są Hamiltonianem:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + V^g(x_1, x_2, \dots, x_N), \quad (12)$$

gdzie

$$V^g(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} x_i^2 + \sum_{i < j} \frac{g}{|x_i - x_j|^d}, \quad d > 0. \quad (13)$$

Hamiltonian ten stanowi popularną platformę do symulacji niskowymiarowych układów kwantowych. W granicy *krystalizacji*  $g \rightarrow \infty$  kwantowe cząstki lokalizują się w otoczeniu minimum energii potencjalnej tzn.  $\vec{r}_{\min} = [x_1^c, x_2^c, \dots, x_N^c]$ ,  $x_i^c = \beta_i^c g^{1/(2+d)}$ , gdzie wartości parametrów  $\beta_i^c$  są wyznaczone przez następujący układ równań:

$$\partial_{\beta_k} V^{g=1}(\beta_1, \dots, \beta_N), \quad k = 1, \dots, N. \quad (14)$$

W ramach przybliżenia harmonicznego problem redukuje się do Hamiltonianu  $N$  niesprzężonych oscylatorów harmoniczych [68]:

$$H^{HA} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{1}{2} \frac{d^2}{d\xi_i^2} + \frac{\omega_i^2 \xi_i^2}{2} \right], \quad (15)$$

gdzie  $\omega_i^2$  są wartościami własnymi macierzy Hessego  $B = [V_{x_n x_m}^g |_{\vec{r}_{\min}}]_{N \times N}$ . Macierz ta zależy jedynie od współczynników  $\beta_i^c$ . Tak zwane współrzędne normalne  $\xi_i$  dane są przez

$\vec{\xi} = [\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N]^T = U \vec{Z}$ ,  $\vec{Z} = [z_1, z_2, \dots, z_N]^T$ ,  $z_i = x_i - x_i^c$ , gdzie  $U$  jest macierzą wektorów własnych macierzy  $B$ .

Odtąd współrzędne cząstek w klasycznym stanie równowagi trwałej  $\{x_i^c\}$  numerujemy w kolejności rosnącej, tj.  $x_1^c < x_2^c < \dots < x_N^c$ ,  $x_i^c = -x_{N-i+1}^c$ , gdzie w przypadku nieparzystej liczby cząstek:  $x_{(N+1)/2}^c = 0$ . Stany własne Hamiltonianu (12) są dokładnie odtwarzane przez przybliżenie harmoniczne w granicy  $g \rightarrow \infty$  [68]. W granicy tej poziomy energetyczne stają się podwójnie zdegenerowane. Odpowiadają im przestrzenie symetryczne (+) i antysymetryczne (-) funkcje falowe o postaci

$$\psi_{g \rightarrow \infty}^{(\pm)}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_A \text{sgn}(A) \phi_n(x_{p(1)} - x_1^c, x_{p(2)} - x_2^c, \dots, x_{p(N)} - x_N^c), \quad (16)$$

gdzie  $\phi_n$  jest funkcją własną Hamiltonianu (15), a suma przebiega przez wszystkie permutacje współrzędnych cząstek, przy czym  $\text{sgn}(A)$  jest równe 1 dla bozonów. Natomiast dla fermionów  $\text{sgn}(A)$  jest równe 1 i  $-1$ , odpowiednio dla parzystych i nieparzystych permutacji. Zredukowana macierz gęstości pierwszego rzędu ( $p=1$ ) obliczona z funkcji (16) ma postać [H9, P17, P18]:

$$\rho^{g \rightarrow \infty}(x, y) = \sum_{i=1}^N \rho_i(x, y), \quad (17)$$

gdzie

$$\rho_i(x, y) = \frac{1}{N} \int_{R^{N-1}} \phi_n(\eta_1, \dots, \eta_{i-1}, x - x_i^c, \eta_{i+1}, \dots, \eta_N) \phi_n(\eta_1, \dots, \eta_{i-1}, y - x_i^c, \eta_{i+1}, \dots, \eta_N) \left( \prod_{k \neq i} d\eta_k \right). \quad (18)$$

W ogólności rozwinięcie *Schmidta* funkcji  $\rho^{g \rightarrow \infty}$  (17) ma postać [H9]:

$$\rho^{g \rightarrow \infty}(x, y) = \sum_{i=1}^N \sum_{l=0}^{\infty} \lambda_l^{(i)} v_l^{(i)}(x - x_i^c) v_l^{(i)}(y - y_i^c), \quad (19)$$

gdzie  $\{\lambda_l^{(i)}\}$  i  $\{v_l^{(i)}\}$  są wyznaczone przez następujący układ niezależnych równań całkowych:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_i(x + x_i^c, y + y_i^c) v_l^{(i)}(x) dx = \lambda_l^{(i)} v_l^{(i)}(y), \quad i=1, \dots, N. \quad (20)$$

Jak wyjaśniono w pracy [H9] w przypadku parzystej liczby cząstek, asymptotyczne obsadzenia  $\{\lambda_l^{(i)}\}$  są podwójnie zdegenerowane  $\lambda_l^{(i)} = \lambda_l^{(N-i+1)}$ ,  $v_l^{(i)}(x) = v_l^{(N-i+1)}(x)$ . Natomiast w przypadku nieparzystej liczby cząstek spektrum zawiera obsadzenia niezdegenerowane  $\lambda_l^{((N+1)/2)}$  oraz podwójnie zdegenerowane. Z powodu wspomnianych degeneracji, postać rozwinięcia *Schmidta* zredukowanej macierzy gęstości jest niejednoznaczna. Inna postać niż (19) jest odpowiednio w przypadku parzystej i nieparzystej liczby cząstek następująca [H9]:

$$\rho^{g \rightarrow \infty}(x, y) = \sum_{i=1}^{N/2} \sum_{l=0}^{\infty} \lambda_l^{(i)} [\eta_l^{(i)}(x) \eta_l^{(i)}(y) + \tau_l^{(i)}(x) \tau_l^{(i)}(y)], \quad (21)$$

i

$$\rho^{g \rightarrow \infty}(x, y) = \sum_{i=\frac{N+1}{2}}^{\infty} \lambda_l^{((N+1)/2)} v_l^{((N+1)/2)}(x) v_l^{((N+1)/2)}(y) + \sum_{i=1}^{(N-1)/2} \sum_{l=0}^{\infty} \lambda_l^{(i)} [\eta_l^{(i)}(x) \eta_l^{(i)}(y) + \tau_l^{(i)}(x) \tau_l^{(i)}(y)], \quad (22)$$

gdzie

$$\eta_l^{(i)}(x) = \frac{v_l^{(i)}(x - x_i^c) + v_l^{(N-i+1)}(x - x_{N-i+1}^c)}{\sqrt{2}}, \quad (23)$$

oraz

$$\tau_l^{(i)}(x) = \frac{v_l^{(i)}(x - x_i^c) - v_l^{(N-i+1)}(x - x_{N-i+1}^c)}{\sqrt{2}}. \quad (24)$$

W przypadku stanu *krystalizacji* o najniższej energii, odpowiadająca mu funkcja własna Hamiltonianu (15) ma postać

$$\phi_0(z_1, z_2, \dots, z_N) = \prod_{i=1}^N \left( \frac{\omega_i}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\omega_i \xi_i^2(z_1, z_2, \dots, z_N)}{2}}, \quad (25)$$

przy czym wyniki całek (18) są następujące [H9]:

$$\rho_i(x, y) = A_i e^{-a_i[(x-x_i^c)^2 + (y-x_i^c)^2] + b_i(x-x_i^c)(y-x_i^c)}. \quad (26)$$

W granicy  $g \rightarrow \infty$  otrzymano, w ogólnym przypadku  $N$  cząstek, *analityczne* wyrażenia na naturalne orbitale  $\{v_l^{(i)}\}$ , ich obsadzenia  $\{\lambda_l^{(i)}\}$  oraz na entropię *von Neumanna* [H9]. Naturalne orbitale okazały się być funkcjami falowymi oscylatora harmonicznego wycelowanymi na położeniach klasycznych cząstek w stanie równowagi trwałej  $\{x_i^c\}$ , tj.:



$$v_l^{(i)}(x-x_i^c) = \frac{w_i^{\frac{1}{4}}}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^l l!}} e^{-\frac{1}{2} w_i (x-x_i^c)^2} H[l; \sqrt{w_i}(x-x_i^c)], \quad (27)$$

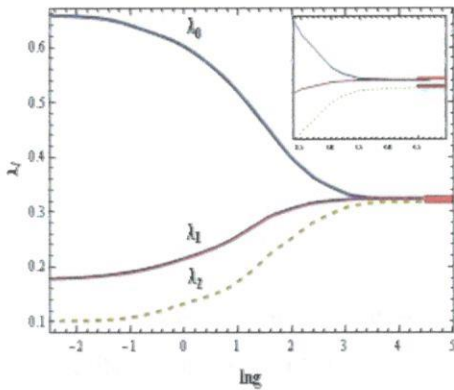
o obsadzeniach

$$\lambda_l^{(i)} = A_i \sqrt{\frac{\pi(1-y_i^2)}{w_i}} y_i^l, \quad (28)$$

gdzie  $w_i = \sqrt{4a_i^2 - b_i^2}$ ,  $y_i = (2b_i)^{-1}(\sqrt{2a_i + b_i} - \sqrt{2a_i - b_i})^2$ , a  $H[l; \dots]$  są wielomianami Hermite'a. Jednakże współrzędne klasycznych cząstek w stanie równowagi trwałej  $\{x_i^c\}$ , i tym samym wartości parametrów  $w_i, A_i, y_i$ , udało się znaleźć w postaci analitycznej jedynie w przypadkach  $N=2$  i  $N=3$ . Dla większych  $N$  trzeba je wyznaczać metodami numerycznymi. Niemniej jednak koszt takich obliczeń jest nieporównywalnie mniejszy od kosztu poniesionego w przypadku numerycznego wyznaczania funkcji falowych, orbitali naturalnych i ich obsadzeń.

Rozwinięcia *Schmidta* i *Slatera* asymptotycznych dwucząstkowych funkcji falowych zdegenerowanego stanu podstawowego, odpowiednio symetrycznej i antysymetrycznej, można otrzymać w postaci analitycznej dla dowolnego  $d(d>0)$ .

W praktyce przybliżenie harmoniczne, i tym samym wzory przedstawione w tym podrozdziale, obowiązują, począwszy od odpowiednio dużej wartości parametru  $g$ , przy której dochodzi do wyraźnego rozdzielania przestrzennego cząstek. Dla przykładu: rysunek 4 demonstruje, jak trzy najniższe obsadzenia wyznaczone metodami numerycznymi dla układu bozonowego z oddziaływaniem kulombowskim zbiegają wraz ze wzrostem  $g$  do wartości otrzymanych, w ramach przybliżenia harmonicznego w granicy  $g \rightarrow \infty$  (wzór (28)).



**Rysunek 4.** Trzy najniższe obsadzenia wyznaczone numerycznie dla bozonowego stanu podstawowego układu (12) o parametrach  $N=3$  i  $d=1$  w funkcji  $\ln g$ . Poziome czerwone linie odpowiadają wartościom otrzymanym w granicy  $g \rightarrow \infty$ .

### 3.1 Zastosowania: oddziaływanie DDI

Rezultaty powyższego podrozdziału mogą znaleźć szerokie zastosowanie w badaniu własności korelacyjnych różnych silnie skorelowanych układów kwantowych. Dla przykładu, zademonstruje ich

użyteczność w badaniu własności stanów *krystalizacji*, uformowanych przez identyczne cząstki oddziałujące potencjałem DDI :

$$U_{dd}(\vec{r}) = \frac{d^2}{|\vec{r}|^3} (1 - 3 \frac{(\vec{r} \cdot \vec{d})^2}{rd^2}), \quad (29)$$

które są uwięzione w silnie anizotropowej pułapce harmoniczej,

$$V(\vec{r}) = \frac{m}{2} (\omega^2 x^2 + \omega_\rho^2 \rho^2), \quad (30)$$

$\varepsilon = \omega_\rho / \omega \gg 1$ , gdzie zakładamy, że dipole zorientowane są w płaszczyźnie  $x-z$ . Badania własności układów z oddziaływaniem DDI są obecnie jednym z najbardziej aktywnych obszarów działań fizyki doświadczalnej i teoretycznej [7-15]. Przeskalowanie równania Schrödingera zgodnie z  $\vec{r}_i \rightarrow \sqrt{\hbar/m\omega} \vec{r}_i$ ;  $E \rightarrow E/\hbar\omega$  i zastosowanie przybliżenia jednomodowego (SMA) prowadzi do Hamiltonianu [8-9]:

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2} x_i^2 \right] + g \sum_{i>j} U(x_i - x_j) + N\varepsilon, \quad (31)$$

z efektywnym potencjałem oddziaływania:

$$U(x) = \varepsilon^2 \left[ -2\sqrt{\varepsilon}|x| + e^{\frac{\varepsilon x^2}{2}} \sqrt{2\pi} (1 + \varepsilon x^2) \operatorname{erfc} \left( \sqrt{\frac{\varepsilon}{2}} |x| \right) \right] - \frac{8}{3} \varepsilon \delta(x). \quad (32)$$

Bezwymiarowy parametr  $g$  związany jest z parametrami kontrolnymi układu w następujący sposób:  $g = -d^2 \sqrt{\omega} m^{3/2} (1 + 3 \cos 2\theta) / 8 \hbar^{5/2}$ , gdzie  $\theta$  jest kątem pomiędzy  $x$  i  $\vec{d}$ . Parametr  $g$  przyjmuje wartości dodatnie (oddziaływanie odpychające) dla kątów  $\theta$  z przedziału  $\arccos(1/\sqrt{3}) < \theta \leq \pi/2$ . Człon *delta Diraca* w oddziaływaniu (32), niewidoczny dla fermionów, staje się w granicy  $g \rightarrow \infty$  nieodczuwalny również dla bozonów, co wynika z ich przestrzennego rozseparowania w tej granicy (w granicy tej dochodzi do *fermionizacji*). Rozwinięcia Taylora funkcji

$$U'(x) = \varepsilon^2 \left[ -2\sqrt{\varepsilon}|x| + e^{\frac{\varepsilon x^2}{2}} \sqrt{2\pi} (1 + \varepsilon x^2) \operatorname{erfc} \left( \sqrt{\frac{\varepsilon}{2}} |x| \right) \right], \quad (33)$$

wokół  $\varepsilon = \infty$  oraz wokół  $|x| = \infty$  mają taką samą postać, mianowicie:

$$U'(x) = \frac{4}{|x|^3} - \sum_{n=2}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{(n-1)!} 2^{2-n} \frac{1}{\varepsilon^{n-1} |x|^{2n+1}}. \quad (34)$$

Można pokazać, że człon wiodący w rozwinięciu (34), tj.  $4|x|^{-3}$  jest asymptotycznie równoważny funkcji (33) w obu granicach  $|x| \rightarrow \infty$  i  $\varepsilon \rightarrow \infty$ ,

$$U'(x) \sim \frac{4}{|x|^3}. \quad (35)$$

Jak wspomniano powyżej, człon *delta Diraca* w oddziaływaniu (32) staje się, w granicy  $g \rightarrow \infty$ , nieistotny. Stąd oraz z faktu, że odległości pomiędzy każdą parą cząstek dążą w tej granicy do nieskończoności ( $|x_i - x_j| \rightarrow \infty$ ) wnioskujemy, że stany *krystalizacji* układu (31) można równoważnie opisać jedynie za pomocą potencjału oddziaływania (35).

W pracy [H10] rozważono układ dwóch cząstek oddziałujących potencjałem DDI. Dla układu z potencjałem oddziaływania (35) wyznaczono w granicy  $g \rightarrow \infty$  rozwinięcia *Schmidta* (bozony) i *Slatera* (fermiony) funkcji falowych zdegenerowanego stanu podstawowego w postaci analitycznej:

$$\psi_{B/F}^{g \rightarrow \infty}(x, y) = \sum_l k_l [L_l(x_1)R_l(x_2) + /- L_l(x_2)R_l(x_1)], \quad (36)$$

gdzie

$$k_l = \sqrt{(1-z^2)/2z^l}, \quad z = (5^{\frac{1}{4}} - 1)/(5^{\frac{1}{4}} + 1), \quad (37)$$

oraz

$$L_l(x) = C_l e^{-\frac{1}{2}w(x+2^{-\frac{\varepsilon}{5}(3g)^{\frac{1}{5}}})^2} H[l; \sqrt{w}(x+2^{-\frac{2}{5}(3g)^{\frac{1}{5}}})], \quad (38)$$

i

$$R_l(x) = C_l e^{-\frac{1}{2}w(x-2^{-\frac{2}{5}(3g)^{\frac{1}{5}}})^2} H[l; \sqrt{w}(x-2^{-\frac{2}{5}(3g)^{\frac{1}{5}}})], \quad (39)$$

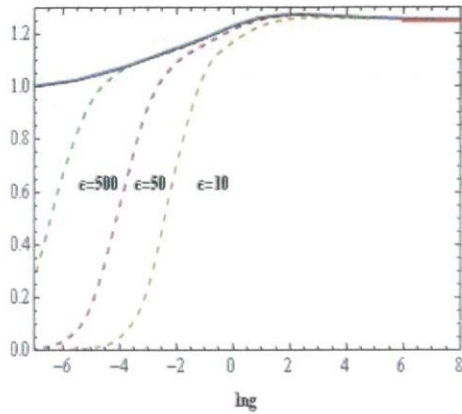
$C_l = w^{\frac{1}{4}}/\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{2^l l!}$ ,  $w = 5^{\frac{1}{4}}$ ,  $\langle L_l | L_k \rangle = \langle R_l | R_k \rangle = \delta_{lk}$ ,  $\langle L_l | R_k \rangle \xrightarrow{g \rightarrow \infty} 0$ ,  $2 \sum_l k_l^2 = 1$ . Entropia *von Neumanna* bozonowego stanu podstawowego otrzymana analitycznie w pracy [H10] ma postać:

$$S_B^{g \rightarrow \infty} = \frac{z^2}{z^2 - 1} \log_2 z^2 - \log_2(1 - z^2) + 1 \approx 1.24939, \quad (40)$$

gdzie  $z$  dane jest wzorem (37).

Rysunek 5 przedstawia zachowania entropii *von Neumanna* otrzymane numerycznie dla układu z oddziaływaniem (32) w funkcji  $g$  dla kilku przykładowych wartości  $\varepsilon$ , gdzie pozioma czerwona linia odpowiada wartości entropii *von Neumanna* w granicy  $g \rightarrow \infty$  (wzór (40)). Jak widać, zgodnie z przewidywaniami, entropia *von Neumanna* dąży, ze wzrostem wartości  $g$ , do wartości przewidzianej przez przybliżenie harmoniczne, niezależnie od wartości współczynnika anizotropii  $\varepsilon$ . Wynik ten potwierdza rozważania zawarte na początku tego podrozdziału, jak również poprawność wyprowadzonych w nim wzorów. Konkluzje dotyczące wpływu anizotropii pułapki na splątanie stanu podstawowego, jednakże w przypadku pominięcia członu *delta Diraca* w potencjale (32), znajdują się w pracy [H10].

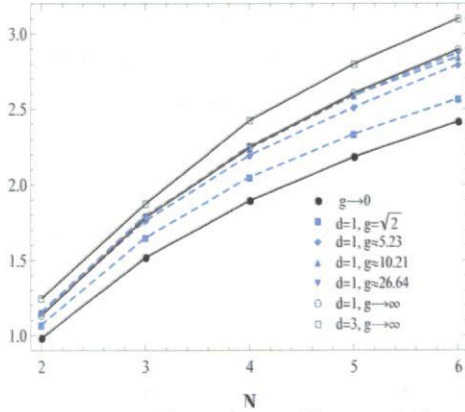




**Rysunek 5.** Entropia von Neumanna bozonowego stanu podstawowego dla  $\varepsilon = 10, 50, 500$  (linie przerywane) oraz dla układu bozonów oddziałujących potencjałem  $4g|x|^{-3}$  (35) (linia ciągła) w funkcji  $\ln g$ .

### 3.2. Własności jednowymiarowych układów z IPL

W pracy [H9] zostały zbadane także własności stanów *krystalizacji* układu (12), w zależności od rodzaju oddziaływania (w zależności od  $d$ ). Rysunek 6 przedstawia wartości entropii von Neumanna otrzymane w ramach przybliżenia harmonicznego w granicy  $g \rightarrow \infty$  dla układów z  $d = 1, 3$



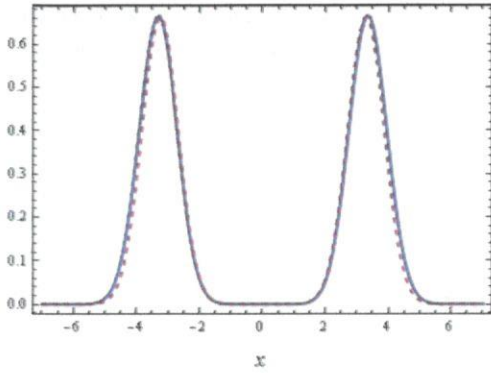
**Rysunek 6.** Entropia von Neumanna bozonowego stanu podstawowego krystalizacji w zależności od  $N$  dla układów z oddziaływaniem  $d = 1$  i  $d = 3$ . Podano przedstawione są także wyniki otrzymane dla kilku wartości  $g$ . Wyniki pochodzą z pracy [H9].

(oddziaływanie kulombowskie i dipolowe), w funkcji  $N$ . Ponadto celem jakościowego ustalenia, jak własności układu ewoluują w funkcji  $g$  pokazane są rezultaty otrzymane numerycznie dla kilku przykładowych wartości  $g$ . Jak widać entropia von Neumanna rośnie monotonicznie ze wzrostem liczby cząstek  $N$ . Z jednej strony oznacza to, że stopień splątania pomiędzy podukładem złożonym z jednej cząstki i podukładem złożonym z pozostałych  $N - 1$  cząstek rośnie ze wzrostem  $N$ , z drugiej zaś strony wskazuje, że rośnie jednocześnie liczba jednocząstkowych stanów obsadzonych przez cząstki. Stopień skorelowania stanów *krystalizacji* rośnie ze wzrostem wartości parametru  $d$ . Wyniki sugerują, że wartość krytyczna  $g_{cr}$  przy której stan układu krystalizuje rośnie z liczbą cząstek  $N$ . Ponadto wyniki pokazały, że istnieją stany *krystalizacji* Wignera o własności  $\sum_{i=1}^N \lambda_0^{(i)} \approx 1$ . Innymi słowy zredukowane macierze gęstości takich stanów można z dobrym

przybliżeniem przedstawić w postaci:

$$\rho^{g \rightarrow \infty}(x, y) \approx \sum_{i=1}^N \lambda_0^{(i)} v_0^{(i)}(x - x_i^c) v_0^{(i)}(y - x_i^c). \quad (41)$$

Na przykład, ważność przybliżenia (41) w przypadku układu dwóch cząstek oddziałujących potencjałem DDI, dyskutowanym w podrozdziale 3.1, uzasadnia rysunek 7, gdzie obliczenia zostały wykonane dla przykładowej odpowiednio dużej wartości  $g$ :  $g = 500$ , tak aby zapewnić stosowność przybliżenia harmonicznego.



**Rysunek 7.** Porównanie jednocząstkowych gęstości obliczonych dla  $g=500$  : linia ciągła-dokładnie numeryczny wynik; linia przerywana - wynik przybliżony otrzymany zgodnie z (41) ( $\lambda_0^{(1,2)} \approx 0.48$ ).

W pracy [H11] omówiono szczegółowo własności stanów podstawowych *krystalizacji* Wignera, w granicznych przypadkach  $d \rightarrow 0$  oraz  $d \rightarrow \infty$  w zależności od liczby cząstek  $N$ . Opracowano metodę wyznaczania charakterystyk korelacji w granicy  $d \rightarrow 0$ , opierając się na asymptotycznej reprezentacji potencjału IPL w tej granicy:  $|x|^{-d} \sim 1 - d \ln x$ . Pokazano, że w granicy  $d \rightarrow \infty$  wszystkie obsadzenia dążą asymptotycznie do zera, znaczy to, że ma miejsce nieskończona degeneracja.

W szczególności w przypadku  $N=2$  udało się uzyskać asymptotyczne wyrażenie na obsadzenia  $\lambda_i^{(1,2)}$  w granicy  $d \rightarrow \infty$ , mianowicie  $\lambda_i^{(1,2)} \sim 2(1/d)^{1/4}$ . W granicy tej piki jednocząstkowej gęstości stanu *krystalizacji* nabierają takich samych kształtów. Ich postać otrzymano w postaci analitycznej dla dowolnego  $N$ ,

$$\rho_i(x, x) = \frac{1}{\sqrt{\pi N}} e^{-N(x-x_i^c)^2}. \quad (42)$$

Również, uściślone zostały wyniki pracy [H9], mianowicie ustalono, że stan *krystalizacji* ma z dobrym przybliżeniem własność (41) w przypadku, gdy odpowiadający mu błąd względny  $\delta K = (K^{g \rightarrow \infty} - N)/N$  nie przekracza wartości 0.2, gdzie  $K^{g \rightarrow \infty}$  jest współczynnikiem korelacji wyznaczającym w przybliżeniu ilość istotnych orbitali w rozwinięciu ((21)-(22)).

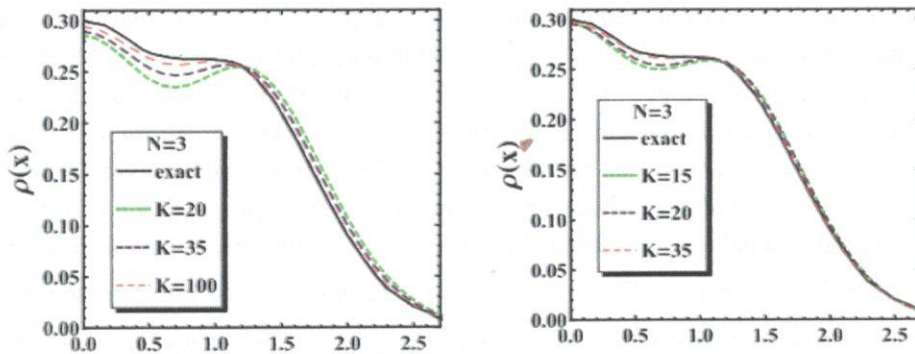
#### 4. Optymalizowana metoda ED

W pracy [H12] przestudiowano optymalizowaną metodę ED (exact-diagonalization), z bazą funkcji własnych oscylatora harmonicznego

$$\phi_n(x) = \frac{\Omega^{\frac{1}{4}}}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{1}{2}\Omega x^2} H[n; x\sqrt{\Omega}]. \quad (43)$$

Zbadano jej efektywność w wyznaczaniu stanów układów z oddziaływaniem *delta Diraca*,  $V_{\text{int}} = g\delta(x_i - x_j)$ . Prace dostępne w literaturze dotyczące układów z pułapką harmoniczną zwykle wykorzystują metodę ED z bazą (43) z parametrem  $\Omega=1$ , która w praktyce jest wolno zbieżna.

W pracy [H12] zastosowano strategię polegającą na minimalizowaniu pożądaných wartości własnych macierzy Hamiltonianu względem  $\Omega$ . Pokazano, że w ramach optymalizowanej metody ED, zbieżne wyniki uzyskuje się przy istotnie mniejszych wymiarach macierzy Hamiltonianu niż w przypadku braku optymalizacji ( $\Omega=1$ ). Dla przykładu, w przypadku stanu podstawowego trzech cząstek (bozonów) i silnego oddziaływania  $g=10$ , zbieżne wyniki uzyskano przy stopniu  $D$  macierzy Hamiltonianu dwudziestokrotnie mniejszym, niż w przypadku obliczeń standardową metodą ED z  $\Omega=1$ ,  $K=35$  ( $D=762$ ) vs.  $K=100$  ( $D=14739$ ) (rysunek 8). Dodatkowo wykazano efektywność takiego schematu obliczeniowego, w przypadku układów z potencjałami o bardziej złożonych kształtach niż pułapka harmoniczna.



**Rysunek 8.** Profile jednocząstkowych gęstości otrzymane dla stanu podstawowego trzech bozonów i parametru oddziaływania  $g=10$ , w funkcji liczby orbitali jednocząstkowych  $K$  użytych w obliczeniach. Lewy rysunek- wyniki otrzymane standardową metodą ED z  $\Omega=1$ . Prawy rysunek wyniki uzyskane przy optymalizacji  $\Omega$ .

## 2. 4 Podsumowanie.

Prace włączone do osiągnięcia, dotyczą badań nad własnościami układów złożonych z kilku cząstek. Ich celem było głębsze zrozumienie zjawisk korelacyjnych zachodzących w takich układach, jak i rozwijanie metod teoretycznych do opisu ich własności. Zbadano własności dwuelektronowych kropek kwantowych z pułapką harmoniczną, pod kątem stopnia splątania ich stanów własnych [H1-H3]. W szczególności dużo uwagi poświęcono stanom *krystalizacji*. Zbadano ich własności w zależności od wymiaru pułapki, jej anizotropowości i siły oddziaływania pomiędzy elektronami. Dodatkowo w pracy [H2] zbadane zostały własności splątania stanów kropki w obecności tzw. *zanieczyszczenia* kulombowskiego. W pracy [H4] wyznaczano z wysoką dokładnością miary splątania dla stanu podstawowego atomu helu, poprawiając tym samym dotychczasowe wyniki dostępne w literaturze. W pracy [H5] zostały zbadane własności kwazi-jednowymiarowych układów złożonych z kilku bozonów oddziałujących potencjałem kulombowskim. W pracy [H6] porównano silnie *skorelowane* granice kwazi-jednowymiarowych układów, z oddziaływaniem kulombowskim i oddziaływaniem *delta Diraca* pod kątem różnic w ich spektrach obsadzeń i splątania. W pracy [H7] zbadano własności stanu podstawowego układu złożonego z cząstek w pułapce harmonicznej z harmonicznym potencjałem oddziaływania. Uzyskano w niej analityczne wyrażenia na miary splątania pomiędzy podukładem złożonym z  $p$  cząstek i podukładem



dem złożonym z pozostałych  $N-p$  cząstek. Praca [H8] rozważa układ dwóch cząstek oddziałujących potencjałem prostokątnym. Otrzymano w niej *analityczne* rozwiązania równania Schrödingera, jak i zbadano własności stanów własnych układu, w tym pod kątem ich stopnia splątania. W szczególności przedyskutowano różnice z granicznym przypadkiem oddziaływania *delta Diraca*. W pracy [H9] opracowano kompletną metodę opartą na przybliżeniu harmonicznym służącą badaniu stanów *krystalizacji* uformowanych przez cząstki uwięzione w jednowymiarowej pułapce harmoniczej z potencjałem oddziaływania  $|x|^{-d}$ . Wyprowadzono całkową reprezentację asymptotycznej zredukowanej macierzy gęstości rzędu pierwszego w ogólnym przypadku  $N$  cząstek. Ponadto wyjaśniono naturę degeneracji pojawiających się w jej spektrum. Co więcej dla stanu podstawowego otrzymano analityczne wyrażenia na asymptotyczne orbitale naturalne, ich obsadzenia oraz entropię *von Neumanna*. Opracowana metoda umożliwiła badanie niewielkim kosztem własności stanów *krystalizacji* w szerokim zakresie liczby cząstek  $N$ . Z pomocą tej metody, ujawniono, że istnieją stany *krystalizacji* o liczbach istotnych orbitali naturalnych, zgodnych z liczbami ich cząstek. Rezultaty otrzymane w pracy [H9] mogą być użyteczne m. in. w badaniu własności stanów *krystalizacji* Wignera takich eksperymentalnie realizowanych układów, jak np. układy jonów w pułapkach elektromagnetycznych [3], czy układy z oddziaływaniem dipolowym. Ostatnio zostały one wykorzystane np. w badaniu własności molekuł Wignera w przypadku  $d=2$  (model Calogero) [54, 55]. Przedmiotem dalszych badań będzie rozwijanie przybliżenia harmonicznego na macierze gęstości wyższych rzędów,  $\rho^{(p)} = \text{Tr}_{r_{p+1}, \dots, r_N} [|\psi\rangle\langle\psi|]$ . Zainteresowanie tym tematem motywowane jest postępowaniem eksperymentalnym, jaki nastąpił w ostatnich latach w wyznaczaniu charakterystyk korelacji wyższych rzędów [25-28]. Punktem wyjścia będzie wyprowadzenie całkowitej asymptotycznej reprezentacji  $\rho^{(p)}$  w ogólnym przypadku  $N$  cząstek, jak również wyprowadzenie równań całkowitych wyznaczających jej wartości własne ( $p$ -obsadzenia) i funkcje własne ( $p$ -naturalne orbitale). W publikacji [H10] zbadane zostały własności splątania dwu-cząstkowego układu z oddziaływaniem dipolowym w granicy kwazi-jednowymiarowej. W pracy [H11] przedyskutowano własności stanów *krystalizacji* z oddziaływaniem *IPL* w granicznych przypadkach  $d \rightarrow 0$  oraz  $d \rightarrow \infty$ . W pracy [H12] przetestowana została efektywność optymalizowanej metody ED, do wyznaczania stanów własnych układów z oddziaływaniem kontaktowym (*delta Diraca*).

### 3. Inne osiągnięcia naukowe

#### 3. 1. Lista publikacji nie wliczonych do osiągnięcia naukowego

- P1. P. Kościuk, A. Okopińska, *Application of the Fröbenius method to the Schrödinger equation for a spherically symmetric potential: anharmonic oscillator*, *J. Phys. A: Math. Gen.* 38 (2005) 7743
- P2. P. Kościuk, A. Okopińska, *Quasi-exact solutions for two interacting electrons in two-dimensional anisotropic dots*, *J. Phys. A: Math. Theor.* 40 (2007) 1045
- P3. P. Kościuk, A. Okopińska, *The optimized Rayleigh-Ritz scheme for determining the quantum-mechanical spectrum*, *J. Phys. A: Math. Theor.* 40 (2007) 10851
- P4. P. Kościuk, A. Okopińska, *Particle correlations in anisotropic traps*, *J. Opt. Adv. Mat.* 10 (2008) 1732
- P5. A. Okopińska, P. Kościuk, *Two-boson correlations in various one-dimensional traps*, *Few-Body Systems* 45 (2009) 223

- P6. A. Okopińska, P. Kościak, *Correlation and entanglement in elliptically deformed quantum dots*, *Few-Body Systems* 50 (2011) 413
- P7. A. Okopińska, P. Kościak, *Entanglement of Two Charged Bosons in Strongly Anisotropic Traps*, *Few-Body Systems* 54 (2013) 629
- P8. A. Kuroś, P. Kościak, A. Okopińska, *Determination of quantum mechanical resonances by the optimized spectral approach*, *J.Phys. A.* 46 (2013) 085 303
- P9. P. Kościak, H. Hassanabadi, *Entanglement in Hooke's law atoms: an effect of the dimensionality of the space*, *Few-Body Systems* 52 (2012) 189
- P10. H. Hassanabadi, B. H. Yazarloo, P. Kościak, *Rosen-Morse potentials for relativistic spineless particles; approximate solutions*. *Phys. Part. Nucl. Lett.* 10 (6) (2013) 539
- P11. P. Kościak, *Bipartite correlations in quantum resonance states*, *Physics Letters A* 380 (2016) 1256
- P12. P. Kościak, J. K. Saha, *Ground-State Entanglement Properties of Helium Atom in a Finite Spherical Cavity*, *Few-Body Systems* 56 (2015) 645
- P13. P. Kościak, J. K. Saha, *Entanglement in helium atom confined in an impenetrable cavity*, *European Physical Journal D* 69 (2015) 250
- P14. A. Kuroś, P. Kościak, J. K. Saha, *Doubly excited resonance states of helium atom: complex entropies* *Few-Body Systems* 57 (2016) 1147
- P15. P. Kościak, *Comment on „Entanglement of two interacting bosons in a two-dimensional isotropic harmonic trap”*, *Physics Letters A* 374 (2010) 2999
- P16. P. Kościak, *Fermionized Dipolar Bosons Trapped in a Harmonic Trap*, *Few-Body Systems* 58 (2017) 59
- P17. P. Kościak, *Three strongly correlated charged bosons in a one-dimensional harmonic trap: natural orbital occupancies*, *European Physical Journal B* 85 (2012) 173
- P18. P. Kościak, R. Maj, *Note on the Harmonic Approximation in the Treatment of Entanglement: N Cold Trapped Ions*, *Few-Body Systems* 55 (2014) 1253
- P19. P. Kościak, M. Płodzień, T. Sowiński, *Variational approach for interacting ultra-cold atoms in arbitrary one-dimensional confinement*, [arXiv:1804.06342](https://arxiv.org/abs/1804.06342) (2018)

### 3.2. Streszczenie pozostałych osiągnięć

W pracy magisterskiej zajmowałem się badaniem zjawisk tunelowania kwantowego. W 2003 roku zostałem zatrudniony na Akademii Świętokrzyskiej (obecnie UJK w Kielcach) na stanowisku asystenta. Od tego czasu moje zainteresowania naukowe skoncentrowane są na przybliżonych metodach rozwiązywania równania Schrödingera, kwazi-dokładnie rozwiązywalnych układach oraz na badaniu własności kwantowych układów wielocząstkowych. Mój doktorat opierał się głównie na rezultatach prac [P1-P5]. Między innymi opracowano efektywną metodę do



numerycznego wyznaczania stanów własnych jednocząstkowego równania Schrödingera, dla pewnych typów sferycznie symetrycznych potencjałów [P1]. Otrzymano również pewną klasę dokładnych rozwiązań równania Schrödingera, dla modelu dwóch identycznych cząstek oddziałujących potencjałem kulombowskim, uwięzionych w anizotropowej pułapce harmoniczej (*quasi-exact solutions*) [P2]. Dokładne energie i funkcje falowe uzyskane w tej pracy mogą być użyteczne m. in. do testowania metod przybliżonych teorii wielu ciał. Po uzyskaniu stopnia doktora kontynuowałem pracę na Uniwersytecie Humanistyczno-Przyrodniczym (obecnie UJK w Kielcach) jako adiunkt. Kontynuowałem również współpracę z prof. A. Okopińską, która zaowocowała publikacjami [H3, H4, H5, H7, P6, P7, P8] z czego cztery prace włączone są do osiągnięcia naukowego. W 2010 roku rozpocząłem współpracę z prof. H. Hassanabadi. Wynikiem tej współpracy są publikacje [P9, P10]. W 2013 roku brałem udział wraz z prof. A. Okopińską i jej doktorantem A. Kurosiem w przygotowaniu publikacji [P8], która dotyczyła zastosowania optymalizowanej metody Ritza do wyznaczania stanów rezonansowych układów jednocząstkowych. W artykule [P11] wprowadzono diagonalną reprezentację zredukowanej macierzy gęstości dla stanów rezonansowych (w ramach metody obrotu zespolonego współrzędnych (*complex scaling method* CSM)). Ponadto artykuł ten zawiera uogólnienie funkcji falowych gazu TG (Tonks-Girardeau gas), oryginalnie wyprowadzonych dla stanów związanych [66], na układy wykazujące zarówno stany związane, jak i rezonansowe. W 2015 rozpocząłem współpracę z dr J. K. Saha dotyczącą wpływu potencjałów zewnętrznych na własności splątania atomu helu, czego wynikiem są dwie prace [P12, P13]. Wynikiem współpracy z doktorantem A. Kurosiem i dr J. K. Saha jest publikacja [P14] poświęcona badaniu własności stanów rezonansowych atomu helu. Wyniki tej pracy stanowią część pracy doktorskiej dr A. Kurosia. Praca [P16] dotyczy własności jednowymiarowych układów złożonych z cząstek oddziałujących potencjałem dipolowym. Prace [P17, P18] dotyczą własności splątania stanów *krystalizacji* Wignera uformowanych przez cząstki uwięzione w jednowymiarowej pułapce harmoniczej z kulombowskim potencjałem oddziaływania. W ostatniej pracy [P19], zrealizowanej przy współpracy, wprowadzono efektywny „ansatz” wariacyjny dla układów z oddziaływaniem czysto kontaktowym. W latach 2009-2010 byłem promotorem pracy magisterskiej p.t. „Analiza własności stanów bozonowych w jednowymiarowych pułapkach kwantowych”. Praca dotyczyła własności gazu TG (Tonks-Girardeau gas) w podwójnej studni potencjału. Jestem współautorem 31 prac i samodzielnym autorem 11 prac [H1, H2, H6, H9, H10, H11, H12, P11, P15, P16, P17].

#### 4. Literatura

- [1] N. Nielsen, I. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [2] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, *Quantum Dots*. Springer-Verlag, Berlin (1977).
- [3] D. J. Wineland, et al., *Phys. Rev. Lett.* 59, 2935 (1987).
- [4] S. Kalliakos, et al., *Nat. Phys.* 4, 467 (2008).
- [5] C. Ellenberger, et al. *Phys. Rev. Lett.* 96, 126 806 (2006).
- [6] A. Singha, et al., *Phys. Rev. Lett.* 104, 246 802 (2010).
- [7] M. A. Baranov, *Chem. Rev.* 112 (9), 5012 (2012).
- [8] S. Sinha, L. Santos, *Phys. Rev. Lett.* 99, 140 406 (2007).
- [9] F. Deuretzbacher, J. C. Cremon, S. M. Reimann, *Phys. Rev. A* 81, 063 616 (2010); Erratum *Phys. Rev. A* 81, 063 616 (2010).
- [10] S. Zöllner, et al., *Phys. Rev. Lett.* 107, 035 301 (2011).
- [11] S. Zöllner, *Phys. Rev. A* 84, 063 619 (2011).



- [12] B. Chatterjee, et al., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 46, 085 304 (2013).
- [13] N. Bartolo, et al., *Phys. Rev. A* 88, 023603 (2013).
- [14] M. A. Baranov, et al., *Chem. Rev.* 112,5012-506 (2012).
- [15] L. Dell'Anna, et al., *Phys. Rev. A* 87, 053 620 (2013).
- [16] D. Wang, et al., *Phys. Rev. Lett.* 93, 243 005 (2004).
- [17] A. Griesmaier et al., *Phys. Rev. Lett.* 94, 160 401 (2005).
- [18] T. Lahaye, et al., *Nature* 448, 672 (2007).
- [19] T. Koch, et al., *Nat. Phys.* 4, 218 (2008).
- [20] K.-K. Ni, et al., *Nature* 464, 1324 (2010).
- [21] C.-H. Wu, et al., *Phys. Rev. Lett.* 109, 085 301 (2012).
- [22] K. Aikawa, et al., *Phys. Rev. Lett.* 108, 210 401 (2012).
- [23] D. DeMille, *Phys. Rev. Lett.* 88, 067 901 (2002).
- [24] S. F. Yelin et al., *Phys. Rev. A* 74, 050 301(R) (2006).
- [25] E. A. Burt, et al., *Phys. Rev. Lett.* 79, 337 (1997).
- [26] S. Fölling, et al., *Nature* 434, 481(2005).
- [27] S. Ritter, et al., *Phys. Rev. Lett.* 98, 090 402 (2007).
- [28] L. E. Sadler, et al., *Phys. Rev. Lett.* 98, 110 401 (2007).
- [29] R. Islam, et al., *Nature* 528,77-83 (2015).
- [30] D. S. Murphy, et al., *Phys. Rev. A* 76, 053 616 (2007).
- [31] B. Sun, D. L. Zhou, L. You, *Phys. Rev. A* 73, 012 336 (2006).
- [32] T. Sowiński, et al., *Phys. Rev. A* 82, 053 631 (2010).
- [33] J. Wang, C. K. Law, M.-C Chu, *Phys. Rev. A* 72, 022 346 (2005).
- [34] R. Nazmitdinov, et al., *J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys.* 20 550 345 (2012).
- [35] R. Nazmitdinov, et al., *J. Phys. Conf. Ser.* 393 012 009 (2012).
- [36] J. Coe, A. Sudbery, I. D'Amico, *Phys. Rev. B* 77 205 122 (2008).
- [37] D. Manzano, et al., *J. Phys. A, Math. Theor.* 43 275 301 (2010).
- [38] J. S. Dehesa et al., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 45, 015 504 (2012).
- [39] G. Benenti, S. Siccaldi, G. Strini, *Eur. Phys. J. D* 67, 83 (2013).
- [40] Y. C. Lin, C. Y. Lin, Y. K. Ho, *Phys. Rev. A* 87, 022 316 (2013).
- [41] C. H. Lin, C. Y. Lin, Y. K. Ho, *Few-Body Systems* 54, 2147 (2013).
- [42] Y. C. Lin, Y. K. Ho, *Canadian Journal of Physics*, 93(6), 646-653 (2015).
- [43] Z. Huang, H. Wang, S. Kais, *Journal of Modern Optics* 53, 2543 (2006).
- [44] S. Pruski, J. Maćkowiak, O. Missuno, *Rep. Math. Phys.* 3, 241-246 (1972).
- [45] M. Gajda, M. A. Załuska-Kotur, J. Mostowski, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 33, 4003 (2000).
- [46] A. Majtey, A. R. Plastino, J. Dehesa, *J. Phys. A, Math. Theor.* 45 115 309 (2012).
- [47] C. L. Benavides-Riveros, I. V. Toranzo, J. S. Dehesa, *J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys.* 47 195 503 (2014).
- [48] R. Yañez, A. R. Plastino, J. Dehesa, *Eur. Phys. J. D* 56 141 (2010).
- [49] P. Bouvrie, et al., *Eur. Phys. J. D* 66 (15) (2012).
- [50] M. Glasser, I. Nagy, *Phys. Lett. A* 377 2317 (2013).
- [51] C. Amovilli, N. March, *Phys. Rev. A* 69, 054 302 (2004).
- [52] I. Nagy, I. Aldazabal, *Phys. Rev. A* 85, 034 501 (2012).
- [53] A. J. I. Coleman, V. Yukalov, *Reduced Density Matrices*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, (2000).
- [54] O. Osenda, et al., *J. Phys. A: Math. Theor.* 48, 485 301 (2015).
- [55] M. Garagiola, et al., *Phys. Rev. A* 94, 042 115 (2016).
- [56] M. Tichy, F. Mintert, A. Buchleitner, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 44, 192 001 (2011).
- [57] M. Taut, *J. Phys. A: Math. Gen.* 27, 1045 (1994).
- [58] C. Yannouleas, U. Landman, *Phys. Rev. Lett.* 85, 1726 (2000).
- [59] A. Matulis, F. Peeters, *Solid State Commun.* 117, 655 (2001).
- [60] A. Puente, L. Serra, R. Nazmitindov, *Phys. Rev. B* 69, 125 315 (2004).
- [61] R. Paskauskas, L. You, *Phys. Rev. A* 64, 042 310 (2001).
- [62] C. M. Lee, C. C. Lam, S. W. Gu, *Phys. Rev. B* 61,10376 (2000).
- [63] R. Pandey, et al., *J. Phys.: Condens. Matter* 16,1769 (2004).
- [64] C. H. Lin, Y. K. Ho, *Few-Body Systems* 55, 1141 (2014).
- [65] M. G. Raizen et al., *Phys. Rev. A* 45, 6493 (1992).
- [66] M. Girardeau, *J. Math. Phys.* 1, 516 (1960).

- [67] W. Kutzelnigg, G. del Re, G. Bertier, Phys. Rev. 172, 49 (1968).  
[68] D. F. V. James, Appl. Phys. B 66, 181 (1998).

Πνευματικό Κέντρο