Dinámica cuántica acoplada de molécula-campo en una cavidad (Cavity-QED): explorando la superradiancia.

Martin Mendez† y Federico M. Pont‡

Grupo de Teoría de la Materia Condensada (GTMC). Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG-CONICET).
Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FAMAF). Universidad Nacional de Córdoba (UNC).

(†) martinmendez@unc.edu.ar
(‡) pont.federico@unc.edu.ar

Reunión Regional Anual de Física, Tecnología y Aplicaciones (RRAFTA I 2025)

Motivación y objetivo

El control de reacciones químicas mediante luz confinada en cavidades cuánticas (Cavity-QED) es un campo emergente con aplicaciones en química cuántica teórica, computación cuántica y óptica cuántica molecular [1,2]. En particular, el concepto de superradiancia [3,4], propuesto por Dicke en 1954, donde un conjunto de moléculas cooperan colectivamente para emitir radiación de forma coherente, es un fenómeno fascinante presente en múltiples escenarios, desde agujeros negros hasta sistemas de comunicación cuántica y dispositivos biomiméticos. Sin embargo, su estudio en sistemas moleculares simples en regímenes de acoplamiento ultra fuerte (USC) y acoplamiento fuerte-profundo (DSC) sigue siendo un desafío teórico [2]. Este trabajo busca entender cómo la interacción entre un campo fotónico cuantizado y la dinámica nuclear afecta propiedades moleculares y fotónicas, explorando señales de esta transición de fase cuántica para distintos factores de acoplamiento luz-materia.

Modelo

$$\hat{V}_{\text{conf}} = \sum_i \frac{m_i(\omega_i)^2}{2}\left[(x_i)^2+(y_i)^2\right]$$

Transversal harmonic Confinement

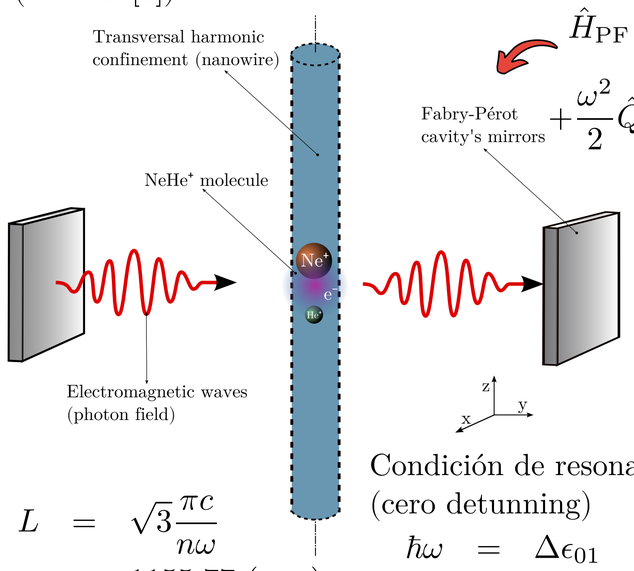
$$\hat{V}_{\text{int}} = \sum_{i,j\wedge i\neq j} \frac{q_i q_j \exp(-\alpha_{ij}|\hat{\mathbf{r}}_j-\hat{\mathbf{r}}_i|)}{|\hat{\mathbf{r}}_j-\hat{\mathbf{r}}_i|}$$

Yukawa interaction potential

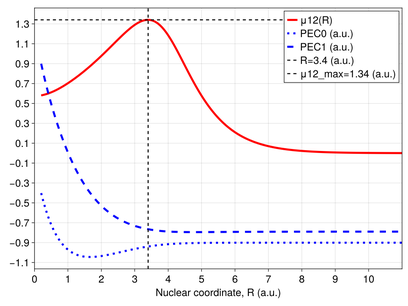
$$V_{\text{eff}}^{(ij)}(|z_{ij}|) = \frac{\pi^{3/2}q_iq_j}{2\left(\sqrt{2}l_c\right)}\exp\left[\left(\frac{|z_{ij}|}{\sqrt{2}l_c}\right)^2+\left(\frac{\sqrt{2}l_c}{2l_{\alpha_{ij}}}\right)^2\right]\text{erfc}\left(\frac{|z_{ij}|}{\sqrt{2}l_c}+\frac{\sqrt{2}l_c}{2l_{\alpha_{ij}}}\right)$$

(ver Ref.[5])

$$\hat{H}_{\text{PF}} = -\frac{\hbar^2}{2m_N}(\nabla_{\vec{R}})^2+\frac{\Delta\epsilon_{12}(\vec{R})}{2}\hat{\sigma}_z-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial Q^2}+\frac{\omega^2}{2}\hat{Q}^2-\frac{\omega^2}{g^2}[\vec{\epsilon}\cdot\vec{\mu}_{12}(\vec{r};\vec{R})]\hat{Q}(\hat{\sigma}_-+\hat{\sigma}_+)\equiv\hat{H}_{\text{Rabi}}$$



Hamiltoniano de Pauli-Fierz(ver Ref.[1])

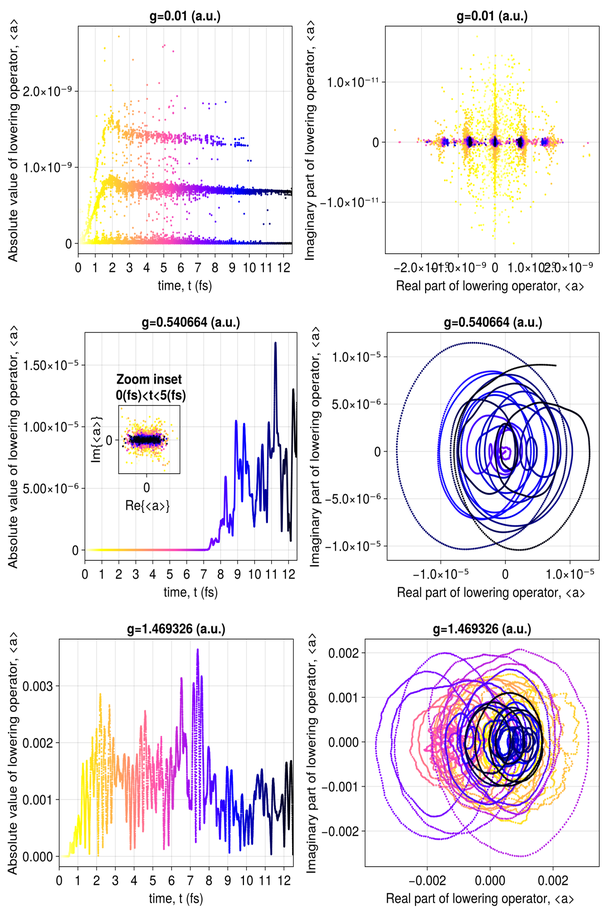


$$L = \sqrt{3}\frac{\pi c}{n\omega} \approx 1155.77 \text{ (a.u.)} \equiv 61 \text{ (nm)}$$

Condición de resonancia (cero detunning)

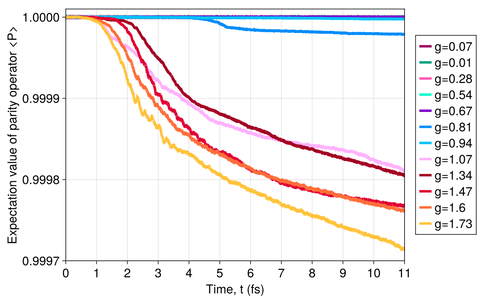
$$\hbar\omega = \Delta\epsilon_{01} \approx 0.645 \text{ (a.u.)} \equiv 17.55 \text{ (eV)}$$

$$g=\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\lambda;\ \lambda=\frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 L^3}}$$



Un valor no nulo del parámetro de orden indica una ocupación macroscópica de un único modo fotónico, es decir, emisión coherente.

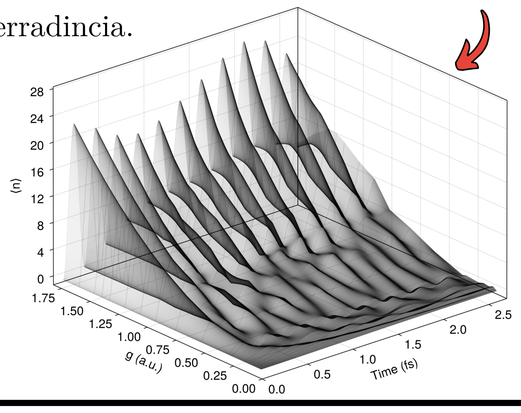
$$\hat{\mathcal{P}} = (-1)^{\hat{N}_{\text{ex}}};\ \hat{N}_{\text{ex}} = \hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{\sigma}_z$$



Rotura de simetría, detección de estados superposición (Schrödinger cat states) de estados de Fock pares e impares.

MCTDH · CCAD · FEMTISE julia

Valor de expectación del operador número de fotónes: medida de la "brillantes" de la superradincia.

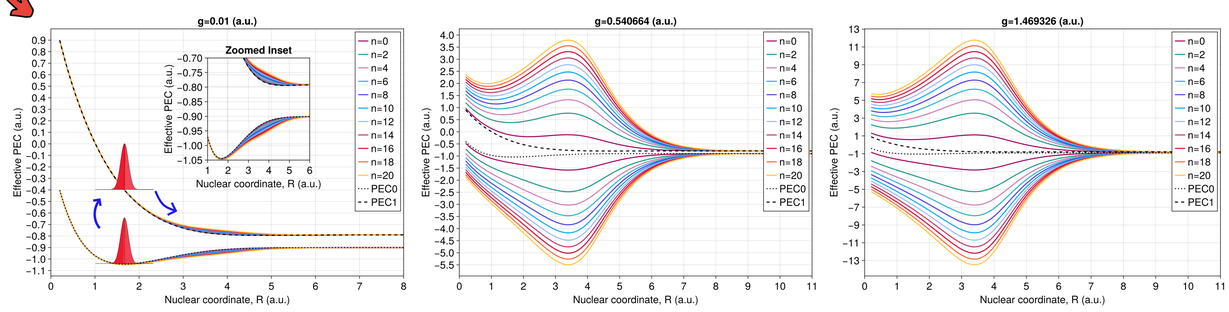


Métodos

$$\hat{H}_{\text{NeHe}^+}(R)\Phi_n(z_e;R)=\epsilon_n(R)\Phi_n(z_e;R)$$

Curvas de energía potencial (PECs) originales y efectivas.

$$\epsilon_{0,1}^{\text{eff}}(R)=\frac{1}{2}\left[-[\epsilon_0(R)+\epsilon_1(R)]\pm\sqrt{[\epsilon_0(R)-\epsilon_1(R)]^2-\left[\frac{\hbar g\mu_{12}(R)}{m_c\omega_c}\right]^2(2n+1)}\right]$$



Densidad de probabilidad

$$\rho(R,t) = \int|\psi(R,Q,t)|^2 d_Q$$

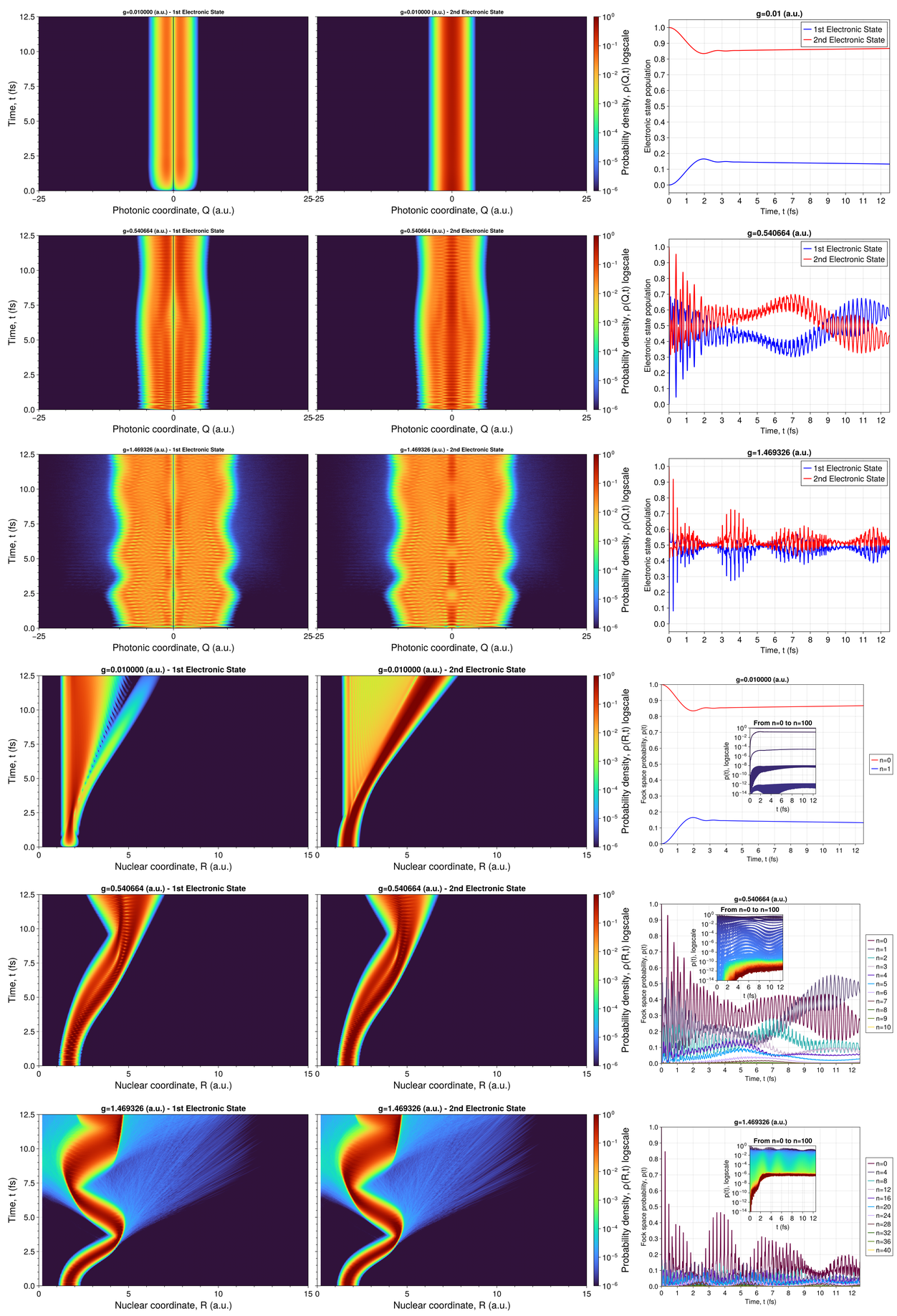
$$\rho(Q,t) = \int|\psi(R,Q,t)|^2 dR$$

Potenciales de absorción complejos (CAP)

$$\hat{W}_\pm^{(N)} = i\eta(R\mp R_{\text{CAP}})^2\Theta(R\mp R_{\text{CAP}})$$

$$i\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi;\ \psi_0=\phi_{0,\text{QHO}}^{\text{PEC1}}(Q)\chi_{0,\text{NeHe}^+}^{\text{PEC1}}(R)$$

$$\psi(Q,R,t) = \sum_{j_1,j_2}A_{j_1,j_2}(t)\varphi_{j_1}^{(N)}(R,t)\varphi_{j_2}^{(Q)}(Q,t)$$



Conclusiones

Este trabajo presenta el estudio de la interacción luz-materia en diferentes regímenes de acoplamiento, revelando dos comportamientos opuestos en la molécula: confinamiento o disociación. El análisis del operador paridad y del número de fotónes muestra correlaciones con la aparición de un estado superradiante, caracterizado por una ruptura de simetría, un aumento significativo de fotones en la cavidad y la formación de estados coherentes. Estos resultados vinculan las propiedades cuánticas del campo fotónico con los cambios estructurales moleculares, proporcionando nuevos insights en el área de cavity-QED y superradiancia.

Referencias

[1] Ruggenthaler, M., Sidler, D., & Rubio, A. (2023). Understanding polaritonic chemistry from ab initio quantum electrodynamics. Chemical Reviews, 123(19), 11191-11229.
[2] Mandal, A., Taylor, M. A., Weight, B. M., Koessler, E. R., Li, X., & Huo, P. (2023). Theoretical advances in polariton chemistry and molecular cavity quantum electrodynamics. Chemical Reviews, 123(16), 9786-9879.
[3] Roses, M. M., & Dalla Torre, E. G. (2020). Dicke model. Plos one, 15(9), e0235197.
[4] Zhu, C., Boehme, S. C., Feld, L. G., Moskalenko, A., Dirin, D. N., Mahrt, R. F., ... & Rainò, G. (2024). Single-photon superradiance in individual caesium lead halide quantum dots. Nature, 626(7999), 535-541.
[5] Mendez, M., & Pont, F. M. (2025). Dynamics of correlations and entanglement generation in electron-molecule inelastic scattering. Physical Review A, 111(5), 052411.
[6] M. Mendez, Julia package to resolve the time-independent Schrödinger (TISE) equation by the finite element method (FEM). See https://github.com/mendzmartin/FEMTISE.jl (2024).
[7] Meyer, H. D., Manthe, U., \& Cederbaum, L. S. (1990). The multi-configurational time-dependent Hartree approach. Chemical Physics Letters, 165(1), 73-78.