

# Controllability properties of open quantum dynamical systems

Claudio Altafini

The lecture deals with a control-theoretic analysis of the behavior of a finite dimensional open quantum system driven by coherent control fields. In the Markovian approximation, the irreversibility introduced by the dissipation continues to hold also in presence of arbitrary unitary control authority. Various notions from geometric control theory can be used to characterize the behavior of the system in detail and to describe the structure of the set of reachable states.

# Fast rotating Bose-Einstein condensates and Bargmann transform

Xavier Blanc

Abstract : We study a fast rotating Bose-Einstein condensate (BEC). In such a situation, the condensate nucleates vortices. Experiments show that these vortices become periodically arranged as the rotational velocity reaches some critical value beyond which the system is no more stable. Using Bargmann transform and an analogy with semi-classical analysis in second quantization, we prove that the system necessarily have an infinite number of vortices and provide an ansatz for the solution. In addition, we prove that among all lattices, the one with lowest energy is the hexagonal one, as is indicated by numerics and experiments. This is a joint work with A. Aftalion (LJLL, Univ. Paris 6), J. Dalibard (LKB, Ecole Normale Suprieure) and F. Nier (IRMAR, Univ. Rennes I)

Chimie Quantique : brefs rappels, équations de base, limitations et perspectives

J.P. Daudey  
Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques  
IRSAMC  
Université Paul Sabatier  
Toulouse  
j-p.daudey@irsamc.ups-tlse.fr

Le but de cet exposé est de montrer les étapes principales qui mènent à la solution numérique de l'équation de Schrödinger dans le cas des atomes et/ou des molécules complexes. Après un bref rappel du point de départ (équation non relativiste, états stationnaires, approximation de Born-Oppenheimer), les différentes approximations possibles seront examinées :

1) Approximations de l'hamiltonien, conduisant à divers types de méthode semi-empiriques,

2) Approximations de la fonction d'onde :

a) le principe de la méthode Hartree Fock sera exposé, avec les conditions pratiques de résolution dans un cas moléculaire. On montrera comment l'approximation de combinaison linéaire d'orbitales atomiques conduit à une croissance en  $L^4$  du temps de calcul où  $L$ , dimension de la base d'orbitales est reliée au nombre  $N$  d'électrons.

b) les méthodes post-Hartree Fock, ainsi que leur dépendance par rapport à  $N$  et à  $L$  seront rapidement décrites.

# stochastic differential equations and partial differential equations

Benjamin Jourdain

In this lecture, after recalling the strong law of large numbers and the central limit theorem, we introduce the Brownian motion. Then we construct It's stochastic integral and derive It's formula. Last, we introduce stochastic differential equations and conclude with probabilistic interpretation of parabolic partial differential equations.

# Optimization of molecular orientation with a train of short laser pulses

Arne Keller

Abstract: We show how to define target states corresponding to the extremum of the orientation of a linear molecule for zero and non zero temperature. The strategy which consists in applying a series of short pulses at times when the orientation reaches its extremum is shown to converge to these target states. The robustness of the method with respect to experimentally relevant parameters is also examined.

## ”QMC for Condensed Matter Systems at Finite Temperature”

B. Militzer

An introduction to Feynman’s path integrals in imaginary time will be given to study quantum systems at finite temperature. The numerical implementation in form of path integral Monte Carlo (PIMC) simulations will be discussed, and path integrals simulations for bosons, fermions, distinguishable particles are introduced. Then the application of PIMC to study hot, dense hydrogen and helium is discussed, and the results are related to the properties of giant planets such as Jupiter and Saturn. Finally the computed equations of state are used to compare with shock wave experiments.

# Stabilisation par feedback des systèmes quantiques

Mazyar Mirrahimi

Janvier 2006

La différence entre le contrôle par feedback au sens classique et au sens quantique provient du fait qu'un système quantique est perturbé dès qu'on l'observe. L'approche la plus commune pour prendre en compte ces perturbations est d'ouvrir le système aux fluctuations induites par l'environnement. Les sauts quantiques provoqués par ces fluctuations ont une nature stochastique et peuvent être approchés par des mouvements Browniens. Le système est alors modélisé par une équation stochastique d'Ito dans la formulation de Heisenberg. Cette équation ne prend pas en compte le fait que l'on dispose de mesures, ne serait-ce que partielles. Ces mesures peuvent être intégrées pour rendre notre connaissance du système plus précise. C'est pour cela que nous introduisons l'équation du filtre quantique. Finalement, la stabilisation globale de cette équation autour des états propres de l'opérateur de la mesure sera aussi étudiée.

## (Non)equilibrium computation of equilibrium properties

G. Stoltz

After briefly recalling some facts on sampling techniques in molecular dynamics (in order to compute static or dynamic macroscopic equilibrium properties of physical systems), I focus on the computation of free energy differences, with special attention to recent nonequilibrium techniques, and some of their extensions.”



## La méthode PAW en calculs de structure électronique

Marc Torrent

Lorsque l'on exprime les fonctions d'ondes des électrons indépendants dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT - formalisme de Kohn-Sham), on choisit généralement parmi l'une des deux représentations suivantes: 1-développer les fonctions d'ondes de tous les électrons sur une base d'orbitales localisées, de petite taille mais peu transférable. 2-utiliser une base délocalisée (ondes planes) pour développer les fonctions d'ondes des électrons de valence et "geler" les électrons de coeur autour des noyaux atomiques en les représentant par un "pseudopotentiel". Il n'est alors possible d'accéder alors qu'aux "pseudo" fonctions d'ondes. La méthode PAW (Projected Augmented Wave) utilise une transformation linéaire judicieusement choisie qui permet de relier les "vraies" fonctions d'ondes, oscillantes, des fonctions d'ondes auxiliaires et douces, peu coûteuses développer sur une base. Elle unifie donc les représentations "tous électrons" et "pseudopotentiel" dans un formalisme unique, profitant ainsi de leurs avantages combinés.

### Projected Augmented Wave Method (PAW) in electronic structure calculations

When you express the wave functions of the independent electrons within the Density Functional Theory formalism (DFT - Kohn-Sham formalism) you generally choose between the two following representations:

1-develop the wave functions of all the electrons on a localized orbitals basis with a small size and a poor transferability.

2-use a delocalized basis (plane waves) to develop the wave functions of only the valence electrons and "freeze" the core electrons with the atomic nucleus representing them by a "pseudopotential". In that case you only have access to "pseudo" wave functions.

The PAW method (Projected Augmented Wave) uses a judiciously selected linear transformation connecting the "true" oscillating wave functions with "soft" auxiliary wave functions, easy to develop on a basis. It unifies the "all electrons" and "pseudopotential" approaches in an unique formalism, combining their advantages.

”Modified differential equations for pairs of integration methods”  
Gilles Vilmart (INRIA Rennes et Univ. Genève)

Modified differential equations are introduced for pairs of integration methods. This combines two topics: the modified equation of backward error analysis (used for the study of the long-time behaviour in geometric numerical integration), and so-called preprocessed vector field integrators. As an example, new highly accurate integrators for the motion of the free rigid body are discussed. This talk is based on work done in collaboration with P. Chartier and E. Hairer.