



TRABAJO FIN DE GRADO

DOBLE GRADO EN FÍSICA Y MATEMÁTICAS

**Estudio de transiciones de fase cuánticas en el
modelo de Rabi**

**Study of quantum phase transitions in the Rabi
model**

Alumno: Eduardo Román Lemos

Tutores:

Dr. José Miguel Arias Carrasco

Dr. Pedro Pérez Fernández

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Sevilla, junio de 2019

Índice general

Resumen	1
1. Introducción	3
1.1. Transiciones de fase	4
1.1.1. Transiciones de fase clásicas	5
1.1.2. Transiciones de fase cuánticas	6
1.2. El modelo de Rabi	7
2. Transición de fase del estado fundamental	11
2.1. Estudio cuántico exacto	11
2.1.1. La forma matricial y la paridad de los estados	12
2.1.2. La energía del estado fundamental. Variación según el valor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$.	14
2.2. Estudio analítico	16
2.3. El límite clásico	19
2.4. Comparación	20
2.5. Parámetros de orden. El orden de la transición	22
3. Transición de fase de los estados excitados	29
3.1. Estudio cuántico exacto	31
3.2. Estudio analítico	34
3.2.1. La divergencia en la densidad de estados	40
3.3. Comparación	42
3.4. El valor esperado de σ_z en los estados excitados	45
4. Conclusiones	47
Bibliografía	49
Apéndice. Códigos de Matlab	51

Resumen

El objetivo de este trabajo es realizar un estudio sobre las transiciones de fase cuánticas que se presentan en el modelo de Rabi, un modelo de interacción radiación-materia entre un átomo de dos niveles y un campo bosónico. Presentaremos y analizaremos su hamiltoniano para, a partir del mismo, caracterizar las transiciones de fase cuánticas que afectan tanto al estado fundamental como a los estados excitados del sistema. Primero analizaremos la transición en el estado fundamental, realizando el estudio cuántico mediante cálculos numéricos y luego haciendo un estudio analítico dentro de una aproximación semiclásica. Ello nos permitirá comparar los resultados y comprobar la validez de esta aproximación. Después, analizaremos la transición en los estados excitados, comparando de nuevo el estudio analítico con los cálculos numéricos, exactos.

Veremos que la transición de fase en el estado fundamental se debe al cambio del potencial que observa el sistema, causando la rotura de la simetría de dicho estado. Por otro lado, comprobaremos que la transición en los estados excitados solo puede ocurrir cuando ya se ha dado la transición en el estado fundamental, y veremos que se caracteriza por la degeneración en niveles de energía inferiores a cierto valor crítico. En todos los casos, comprobaremos que los cálculos semiclásicos y los exactos coinciden cuando el cociente entre las energías que caracterizan al átomo y al campo bosónico tiene un valor grande comparado con 1.

Para conseguirlo, hemos desarrollado desde cero diversos códigos MATLAB con el objetivo de poder realizar los cálculos necesarios para caracterizar las transiciones. En concreto, para estudiar la transición de fase en el estado fundamental, hemos desarrollado un código que permite obtener la energía del estado fundamental del sistema y otro que permite calcular, para dicho estado, el valor esperado del número de fotones y de σ_z , observables que se discutirán en el texto. También hemos creado un código que muestra la forma del potencial que afecta al sistema en su estado fundamental.

Del mismo modo, al estudiar la transición en los estados excitados, hemos creado un código que obtiene todos los niveles de energía del sistema, con el objetivo de calcular numéricamente la densidad de estados. Otro código permite comparar este cálculo con la expresión analítica que obtendremos de la densidad de estados, y otro último calcula el valor de σ_z en todos los estados del sistema. Por último, dos códigos nos permitirán crear imágenes que sirvan para ilustrar lo que sucede en las transiciones; el primero de ellos representa la forma del potencial que afecta al sistema en diversas situaciones; el segundo estudia la variación de los diez primeros niveles energéticos del sistema. Todo esto se desarrolla en el trabajo. Los códigos pueden consultarse en el apéndice.

Abstract

In this work, we carry out a study of the quantum phase transitions present in the Rabi model, a radiation-matter interaction model between a two-level atom and a bosonic field. We will present and analyze its Hamiltonian in order to, from it, characterize the quantum phase transitions that affect both the ground state and the excited states of the system. First we will analyze the transition in the ground state, performing the quantum study by means of numerical calculations and then making an analytical study within a semiclassical approach. This will allow us to compare the results and check the validity of this approach. Next, we will analyze the transition in the excited states, comparing again the analytical study with the numerical, exact calculations.

We will see that the phase transition in the ground state is due to the change in the potential that the system observes, causing the symmetry of that state to break. On the other hand, we will verify that the transition in the excited states can only occur when the transition in the ground state has already taken place, and we will see that it is characterized by the degeneration in energy levels lower than a certain critical value. In all cases, we will verify that the semiclassical results and the exact calculations coincide when the quotient between the energies that characterize the atom and the bosonic field has a large value compared to 1.

To perform this task, we have developed from scratch various MATLAB codes in order to perform the necessary calculations to characterize the transitions. Specifically, to study the phase transition in the ground state, we have developed a code that allows us to obtain the energy of the ground state of the system and another that allows us to calculate, for this state, the expected value of the number of photons and σ_z , observables that will be discussed in the text. We have also created a code that shows the shape of the potential that affects the system in its ground state.

In the same way, when studying the transition in the excited states, we have created a code that obtains all the energy levels of the system, with the objective of numerically calculating the density of states. Another code allows comparing this calculation with the analytical expression that we will obtain from the density of states, and another last one calculates the value of σ_z in all the states of the system. Finally, two codes will allow us to create images that serve to illustrate what happens in transitions; the first one represents the form of the potential that affects the system in different situations; the second one studies the variation of the first ten energy levels of the system. All this will be addressed in the work. The codes can be found in the appendix.

Capítulo 1

Introducción

El modelo de Rabi [1] (Quantum Rabi Model, QRM) es uno de los modelos más importantes en óptica cuántica y se usa para describir los procesos de interacción entre la radiación y la materia. De hecho, Isidor Isaac Rabi recibió el premio Nobel de Física en 1944 por el descubrimiento de la resonancia magnética nuclear en los haces atómicos y moleculares. La sencillez del modelo, que describe el acoplamiento entre un átomo, que puede estar en dos niveles diferentes de energía, y un campo electromagnético externo, hace que modelos matemáticos más sofisticados usados para describir otros fenómenos físicos se basen en el QRM [2]. Sin embargo, a pesar de su simplicidad, los primeros intentos por resolver analíticamente el QRM se redujeron a un estrecho régimen, el régimen de acoplamiento débil (weak coupling, WC), donde el parámetro de interacción entre el campo bosónico y el campo de materia es pequeño comparado con la frecuencia asociada al campo bosónico. Así, es posible usar una aproximación de onda rotante sobre el modelo de Rabi, es decir, despreciar aquellos términos del hamiltoniano que oscilan rápidamente, llamados contratérminos (lo que se traduce en dejar solo los términos de interacción correspondientes a emisión espontánea y absorción), dando lugar a otro de los modelos importantes en óptica cuántica, el modelo de Jaynes-Cummings [3]. No obstante, cuando la interacción aumenta y se llega al régimen fuerte (strong coupling, SC), ultra fuerte (ultra strong coupling, USC) y fuerte profundo (deep strong coupling, DSC), el modelo de Jaynes-Cummings deja de ser válido. La posibilidad de alcanzar experimentalmente los regímenes señalados en plataformas de electrodinámica cuántica de circuitos [4, 5] y en simulaciones cuánticas en iones atrapados [6] hizo necesario conocer más detalladamente el espectro y la dinámica del QRM más allá del WC. No fue hasta 2011 cuando Braak [7] propuso la primera solución analítica para resolver completamente el espectro del modelo cuántico de Rabi.

Así pues, podemos decir que la dinámica del QRM ha sido bien estudiada en los regímenes WC, SC, USC y DSC ([8]). Pero también se han estudiado algunas extensiones

del modelo de Rabi, como, por ejemplo, el aumento del número de qubits (el sistema de dos niveles energéticos) [9, 10, 11, 12] o de campos externos [13, 14, 15], o la inclusión de algún término extra en el modelo [16, 17].

Durante las últimas décadas, el estudio de las transiciones de fase a temperatura 0 K ha sido objeto de numerosos trabajos experimentales y teóricos [18]. Este tipo de transición, la transición de fase cuántica (QPT, por sus siglas en inglés) describe un cambio brusco y no-analítico de las propiedades del estado fundamental cuando se varía el parámetro de control del hamiltoniano del sistema. El valor del parámetro de control donde ocurre la transición se denomina punto crítico. Este divide la fase normal de la que presenta ruptura de simetría. Existe, además, otro tipo de transición de fase cuántica que aparece en el espectro de energías más altas, la llamada transición de fase cuántica de los estados excitados (ESQPT), para distinguirla de la QPT que ocurre en el estado fundamental. La ESQPT describe un cambio abrupto en la naturaleza de los autoestados y del espectro de energía a cierta energía crítica. En particular, la energía crítica divide el espectro de energía en dos partes: (1) por debajo de la energía crítica todos los autoestados degenerados surgen de la ruptura espontánea de simetría y (2) por encima de la energía crítica, los autoestados son no-degenerados y recuperan la simetría del hamiltoniano a la de la fase normal. Además, un rasgo destacado de la ESQPT es que presenta una singularidad en la densidad de estados a la energía crítica.

El trabajo se organiza como sigue. En este capítulo se presentan brevemente los conceptos que definen las transiciones de fase clásicas y cuánticas y se introduce el hamiltoniano que rige el modelo de Rabi. En el capítulo 2 se aborda el estudio numérico y la aproximación semiclásica de la transición de fase del estado fundamental en el modelo de Rabi, verificando la QPT de segundo orden predicha. En el capítulo 3, siguiendo con la comparativa entre el cálculo numérico exacto y la aproximación semiclásica se analiza la ESQPT y se obtienen las expresiones para la densidad de estados. Esta muestra una divergencia logarítmica a la energía crítica. En todos los análisis, la comparación entre los cálculos numéricos y semiclásicos muestra un excelente acuerdo, sostenido porque la relación entre las frecuencias de los campos de materia y de radiación es bastante grande. Finalmente, en el capítulo 4 presentamos las conclusiones de nuestro estudio.

1.1. Transiciones de fase

Nuestro trabajo consiste en el estudio de dos transiciones de fases cuánticas. Por tanto, creemos conveniente recordar qué son las transiciones de fase clásicas, para pasar luego a introducir las transiciones cuánticas.

1.1.1. Transiciones de fase clásicas

Podemos definir como fase de un sistema aquella en la cual el mismo posee unas características físicas uniformes. Cuando las condiciones que rodean al sistema cambian, se pueden modificar algunas de estas propiedades, causando que el sistema pase a una fase distinta, decimos entonces que ha tenido lugar una transición de fase. Las transiciones se caracterizan también por la existencia de un parámetro de orden, una medida del orden del sistema que, por lo general, es cero en una fase y distinto en otra. Por ejemplo, la diferencia entre densidades funciona como parámetro de orden en una transición de fase líquida a gaseosa. Así, el parámetro nos permite distinguir entre ambas fases.

Las transiciones de fase clásicas son aquellas que ocurren entre dos estados termodinámicos del sistema, y están gobernadas por la competición entre la energía del sistema y la entropía asociada a las fluctuaciones térmicas. La primera clasificación de estas transiciones de fase la dio Paul Ehrenfest [19], que definió el orden de la transición a partir de la derivada de menor orden de la energía libre del sistema que presenta una discontinuidad en la transición. Así, una transición de primer orden presenta una discontinuidad en la primera derivada de la energía libre de Gibbs G del sistema. Por ejemplo, las transiciones entre las fases sólida, líquida y gaseosa se caracterizan por un cambio discontinuo en la densidad de las distintas fases. Como la densidad es proporcional a la inversa de la primera derivada de la energía libre respecto a la presión, concluimos que estas transiciones son de primer orden. De forma más concreta, tenemos que la entropía S y la capacidad calorífica a presión constante C_p se pueden poner como derivadas de la energía libre de Gibbs respecto a la temperatura, manteniendo constante la presión:

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p, \quad C_p = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_p.$$

Por tanto, según la clasificación de Ehrenfest, la entropía, al ser una primera derivada, experimenta una discontinuidad en las transiciones de primer orden, mientras que se mantienen constante en las de orden segundo y mayor. Por el contrario, la capacidad calorífica es una derivada segunda, luego en las transiciones de primer orden experimenta una divergencia (ya que la primera derivada es discontinua) y en las de segundo orden, una discontinuidad, permaneciendo continua en las de orden superior. El parámetro de orden de una transición se comporta del mismo modo que las primeras derivadas de G , es decir, presenta una discontinuidad si la transición es de primer orden, siendo al contrario si el orden es superior. Todo esto se puede ver en la Figura 1.1.

Una clasificación más moderna distingue entre transiciones de fase continuas y discontinuas. Las transiciones discontinuas, como su propio nombre indica, experimentan una

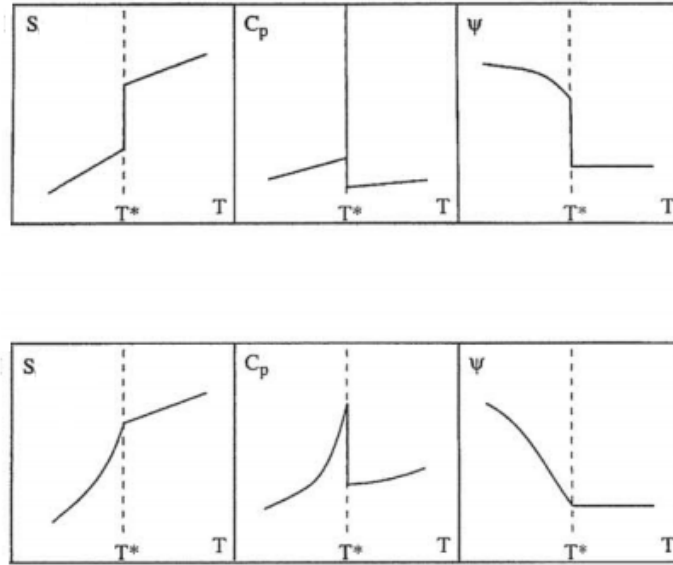


Figura 1.1: Variación de la entropía, la capacidad calorífica a presión constante y el parámetro de orden con la temperatura en una transición de primer orden (arriba) y en una de segundo orden (abajo). La temperatura crítica, a la que se da la transición, está marcada como $T = T^*$. El comportamiento del parámetro de orden en la transición coincide con el de la primera derivada de G , la entropía. Obsérvese que el parámetro de orden es nulo tras la transición de fase (ver Ref. [20]).

discontinuidad en la entropía del sistema al tener lugar la transición, mientras la temperatura se mantiene fija. Estas transiciones llevan asociado un calor latente $L = T\Delta S$. Las transiciones continuas no tienen discontinuidades en la entropía, luego no existe calor latente. Como dijimos antes, la entropía se puede poner como la primera derivada de la energía libre del sistema respecto a la temperatura a presión constante, cambiada de signo, así que las transiciones discontinuas son de primer orden y las continuas, de segundo orden o superior. Esta clasificación moderna se utiliza actualmente de forma más habitual que la clasificación de Ehrenfest; sin embargo, veremos que la idea en la que se basa esta última nos servirá para clasificar la primera de las transiciones cuánticas que estudiaremos.

Habiendo recordado las transiciones de fase clásicas, pasamos a introducir las cuánticas.

1.1.2. Transiciones de fase cuánticas

Lo que diferencia a las transiciones de fase cuánticas de las clásicas es que las transiciones cuánticas ocurren en el cero absoluto de temperatura. A temperatura 0 K, el sistema siempre se encuentra en el estado de menor energía. Por tanto, las fluctuaciones térmicas no pueden explicar la transición. Esta se debe, pues, a fluctuaciones cuánticas:

un cambio en el sistema que produce que las simetrías que presenta el hamiltoniano se alteren, cambiando también las propiedades del sistema.

Esto se puede entender de forma más simple si escribimos el hamiltoniano total como una combinación de los hamiltonianos que rigen las distintas fases:

$$H = (1 - \alpha)H_1 + \alpha H_2.$$

La variable α , que toma valores de 0 a 1, es un parámetro de control que rige el peso que tienen las simetrías de los hamiltonianos 1 y 2 en el sistema. Así, cuando $\alpha = 0$, el sistema se encuentra en la fase 1, el hamiltoniano total coincide con H_1 y predominan sus propias simetrías. Cuando $\alpha = 1$, el sistema se encuentra en la fase 2, predominando ahora las simetrías del hamiltoniano H_2 . Al cambiar el parámetro α , tiene lugar la transición entre las dos fases, y algunas simetrías pierden importancia frente a otras. Estudiando el comportamiento de las derivadas de la energía frente a α , podemos asignar un orden a la transición del mismo modo que hace la clasificación de Ehrenfest con las transiciones clásicas.

Como las transiciones cuánticas se producen a temperatura 0 K, conceptos como la entropía o el calor latente no son aplicables. Además, el parámetro α que rige la transición tampoco puede ser la temperatura y debe ser otra variable, como, por ejemplo, la presión o el campo magnético aplicado. De hecho, veremos que la primera de las transiciones que estudiaremos se produce por el cambio de la constante de acoplo que rige la intensidad de interacción entre la radiación y la materia en nuestro sistema.

En definitiva, las transiciones clásicas y cuánticas se diferencian en que estas últimas se producen en el cero absoluto de temperatura y, por tanto, no nos sirve la termodinámica clásica para explicarlas (como ocurre con las transiciones clásicas) y debemos recurrir a la mecánica cuántica. En nuestro estudio vamos a caracterizar las transiciones que encontremos, observando algún parámetro de orden que nos permita distinguir entre una fase y otra.

1.2. El modelo de Rabi

El modelo de Rabi es el modelo más simple de interacción radiación-materia. El modelo describe, de manera muy esquemática, la interacción entre un átomo, que puede ocupar dos niveles de energía, y un campo de radiación, modelado mediante un baño bosónico de un único modo. Se puede observar en la Figura 1.2.

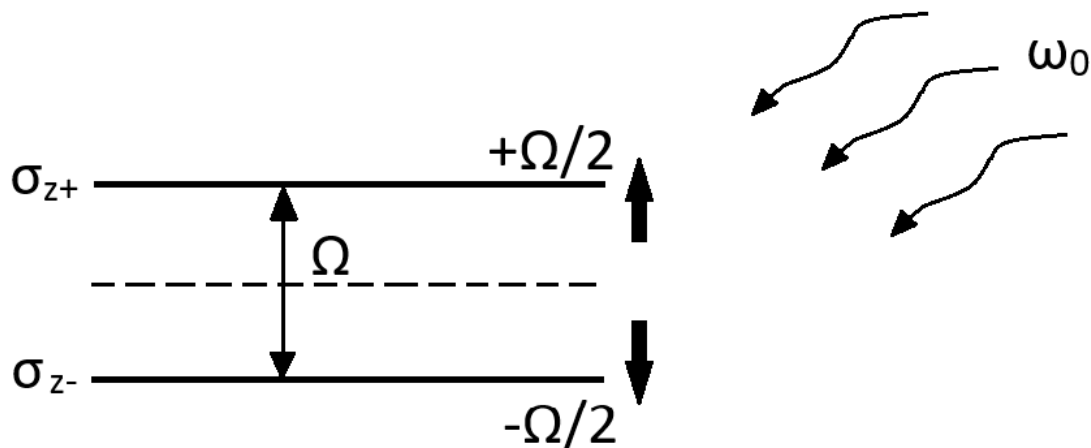


Figura 1.2: Representación esquemática del modelo de Rabi de interacción radiación-materia. Un átomo con dos niveles de energía, separados por Ω , interactúa con un campo bosónico con un único modo de energía ω_0 .

Para describir los dos niveles del átomo, podemos tratarlos como las dos proyecciones que caracterizan el espín de un electrón cuando se aplica un campo magnético en dirección z ; así, podemos definir los operadores σ_x , σ_y y σ_z , que actúan sobre los dos niveles del mismo modo que sobre las proyecciones de espín. Es decir, los dos niveles del átomo vendrían dados como autoestados de σ_z .

Por otro lado, el campo bosónico puede describirse como un oscilador armónico, haciendo uso de los operadores de creación y destrucción de bosones, a^\dagger y a , de tal manera que a^\dagger crea un bosón, a lo destruye y $a^\dagger a$ nos da el número total. A partir de ahora, nos referiremos de manera general a este campo como un campo de fotones, mientras que nos seguiremos refiriendo al sistema de dos niveles como un átomo.

Teniendo en cuenta todo lo anterior, y trabajando en el sistema natural de unidades ($\hbar = 1$), el hamiltoniano del modelo de Rabi viene dado por:

$$H = \omega_0 a^\dagger a + \frac{\Omega}{2} \sigma_z - \lambda (a + a^\dagger) \sigma_x. \quad (1.1)$$

El primer término del hamiltoniano cuenta el número de fotones y el segundo nos indica en cuál de los dos estados está el átomo (basta ver que el término $\frac{\Omega}{2} \sigma_z$ es idéntico al hamiltoniano del espín de un electrón en el seno de un campo magnético actuando en dirección z , como dijimos antes). El tercer término es el que modela la interacción propiamente dicha, y conviene desarrollarlo para facilitar su comprensión: σ_x hace que el estado del átomo cambie del superior al inferior, y viceversa, y se puede poner en función de los operadores escalera σ_+ y σ_- , de la forma:

$$\sigma_x = \frac{\sigma_+ + \sigma_-}{\sqrt{2}}.$$

Así, el tercer término puede escribirse de la forma

$$\frac{\lambda}{\sqrt{2}}(a\sigma_+ + a^\dagger\sigma_- + a\sigma_- + a^\dagger\sigma_+)$$

Los dos primeros términos de la expresión anterior representan los procesos de absorción y emisión espontánea. En el primer caso, si el estado en que se encuentra el átomo es el inferior, absorbe un fotón y se excita al estado superior, lo cual significa que actúa σ_+ . La absorción del fotón implica que desaparece del campo fotónico, es decir, el operador a actúa destruyendo un fotón. Por el contrario, si el átomo ya está en el estado superior, se desexcita emitiendo un fotón y cae al nivel inferior, mediante la acción de σ_- . La creación de este nuevo fotón se modela mediante el operador a^\dagger . Los dos últimos términos son los conjugados hermíticos de los primeros y representan otros procesos que son posibles en el sistema. El coeficiente λ , denominado constante de acoplo, da cuenta de la intensidad de la interacción.

Como hemos tomado $\hbar = 1$, ω_0 , Ω y λ vienen dados en unidades de energía. Sin embargo, como veremos en las siguientes secciones, lo que va a determinar las transiciones son las relaciones entre las tres variables, no sus valores por separado. Por tanto, las unidades específicas que usemos son irrelevantes. Hemos decidido, pues, asignar unidades arbitrarias a estos parámetros y a partir de ahora, cada vez que aparezcan, no los acompañaremos de ninguna unidad.

Capítulo 2

Transición de fase del estado fundamental

El estado fundamental del sistema sufre una transición de fase producida por el cambio de la constante de acoplo λ que caracteriza la intensidad de la interacción entre la radiación y la materia. En concreto, vamos a observar que, para cierto valor del parámetro, el potencial que observa el sistema pasa de ser un pozo propio del oscilador armónico a un conjunto simétrico de dos pozos. Esto hace que se rompa la simetría del estado fundamental, causando la transición.

2.1. Estudio cuántico exacto

Empezaremos estudiando la transición desde el punto de vista cuántico, es decir, vamos a tratar de resolver el hamiltoniano del sistema. Para ello, debemos trabajar en la base de estados formada por los dos espacios del sistema, el espacio del átomo, con sus dos posibles estados, y el espacio del campo de radiación de fotones. Es decir, trabajamos en la base $|n\rangle \otimes |s\rangle = |n, s\rangle$, donde $|s\rangle$ denota a los estados del átomo, que, por analogía con los autoestados de σ_z del operador de espín electrónico, denotaremos como $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$, y $|n\rangle$ son los autoestados del operador número de fotones, es decir, n denota el número de fotones del campo de radiación que estemos considerando. Si recordamos la expresión del hamiltoniano de Rabi de la ecuación 1.1

$$H = \omega_0 a^\dagger a + \frac{\Omega}{2} \sigma_z - \lambda(a + a^\dagger) \sigma_x,$$

observamos que, como $a^\dagger a$ no conmuta ni con a ni con a^\dagger , ni con la suma de ambos, el operador número de bosones no conmuta con el hamiltoniano. Por tanto, en nuestro sistema, el número de fotones no se conserva, así que, estrictamente, debemos considerar una base completa desde $n = 0$ hasta $n = \infty$ para poder resolver correctamente el siste-

ma. Sin embargo, es imposible resolver numéricamente si la base no está acotada, así que nosotros llegaremos hasta un n suficientemente alto, pero no infinito, que nos asegure la convergencia del cálculo para los niveles más bajos de energía.

2.1.1. La forma matricial y la paridad de los estados

Ya seleccionada la base, nuestro objetivo es expresar el hamiltoniano en forma matricial a partir de los estados del sistema. Como queremos estudiar el estado fundamental, a continuación debemos obtener los autovalores del hamiltoniano y quedarnos con el más bajo.

La forma matricial del hamiltoniano no es más que poner en una matriz los elementos $\langle n, s | H | n', s' \rangle$. Sin embargo, nuestro sistema cumple una propiedad que permite organizar los elementos de la matriz de una manera muy conveniente: la conservación de la paridad.

El operador paridad se define como $\Pi = e^{i\pi(a^\dagger a + \frac{1}{2}(1+\sigma_z))}$. Los estados $|n, s\rangle$ son autoestados de Π al serlo de su exponente. De hecho, usando que $a^\dagger a |n\rangle = n|n\rangle$, $\sigma_z | \uparrow \rangle = | \uparrow \rangle$ y $\sigma_z | \downarrow \rangle = -| \downarrow \rangle$, tenemos que:

$$e^{i\pi(a^\dagger a + \frac{1}{2}(1+\sigma_z))} |n, \uparrow\rangle = e^{i\pi(n+1)} |n, \uparrow\rangle = (-1)^{n+1} |n, \uparrow\rangle, \quad (2.1)$$

$$e^{i\pi(a^\dagger a + \frac{1}{2}(1+\sigma_z))} |n, \downarrow\rangle = e^{i\pi n} |n, \downarrow\rangle = (-1)^n |n, \downarrow\rangle, \quad (2.2)$$

donde hemos usado que $e^{ix} = \cos(x) + i \operatorname{sen}(x)$. Ahora, es claro que los dos primeros términos del hamiltoniano de Rabi conmutan con el operador paridad, pues básicamente se trata de los operadores $a^\dagger a$ y σ_z . Podemos ver que el tercer término también conmuta con Π , para ello hacemos actuar uno y después otro sobre el estado, y comparamos. Debemos recordar que $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$, $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ y $\sigma_x | \uparrow \rangle = | \downarrow \rangle$, $\sigma_x | \downarrow \rangle = | \uparrow \rangle$, luego tenemos en primer lugar:

$$(a + a^\dagger) \sigma_x |n, \uparrow\rangle = \sqrt{n} |n-1, \downarrow\rangle + \sqrt{n+1} |n+1, \downarrow\rangle, \quad (2.3)$$

$$(a + a^\dagger) \sigma_x |n, \downarrow\rangle = \sqrt{n} |n-1, \uparrow\rangle + \sqrt{n+1} |n+1, \uparrow\rangle. \quad (2.4)$$

Por tanto:

$$\begin{aligned} \Pi(a + a^\dagger) \sigma_x |n, \uparrow\rangle &= \Pi \sqrt{n} |n-1, \downarrow\rangle + \Pi \sqrt{n+1} |n+1, \downarrow\rangle \\ &= \sqrt{n} (-1)^{n-1} |n-1, \downarrow\rangle + (-1)^{n+1} \sqrt{n+1} |n+1, \downarrow\rangle, \end{aligned} \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned}
(a + a^\dagger)\sigma_x\Pi|n, \uparrow\rangle &= (a + a^\dagger)\sigma_x(-1)^{n+1}|n, \uparrow\rangle \\
&= \sqrt{n}(-1)^{n+1}|n-1, \downarrow\rangle + (-1)^{n+1}\sqrt{n+1}|n+1, \downarrow\rangle.
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Como $(-1)^{n-1} = (-1)^{n+1}$, ambos términos son iguales. El mismo cálculo se puede repetir fácilmente para el estado $|n, \downarrow\rangle$, con lo cual hemos demostrado que el hamiltoniano de Rabi conmuta con el operador paridad [7, 21].

Pero, ¿qué implica esto? El operador paridad nos permite clasificar los estados de la base $|n, s\rangle$. Así, a partir de las ecuaciones (2.1) y (2.2), tenemos que los estados de tipo $(s = \uparrow, n \text{ par})$ y $(s = \downarrow, n \text{ impar})$ son autoestados de Π con autovalor -1. Del mismo modo, los estados con $(s = \uparrow, n \text{ impar})$ y $(s = \downarrow, n \text{ par})$ son autoestados con autovalor 1. Así, llamando a ese autovalor “paridad”, podemos clasificar los estados de la base en dos tipos, pares (autovalor 1) e impares (autovalor -1). Y, más importante, como el hamiltoniano conmuta con la paridad, esta última se mantiene constante en el sistema, lo cual quiere decir que el hamiltoniano de Rabi solo conecta estados con la misma paridad. Es decir, en nuestra representación matricial, los elementos $\langle s, n|H|s', n'\rangle$ son 0 si los estados $|n, s\rangle$ y $|n', s'\rangle$ no tienen la misma paridad. Esto nos permite dividir la matriz del hamiltoniano en dos cajas, una con estados pares y otra con estados impares, sabiendo que no conectan entre ellos.

Ya sabiendo esto, vamos a calcular la forma de los elementos $\langle n, s|H|n', s'\rangle$:

$$H|n, \uparrow\rangle = \left(\omega_0 n + \frac{\Omega}{2}\right)|n, \uparrow\rangle - \lambda[\sqrt{n}|n-1, \downarrow\rangle + \sqrt{n+1}|n+1, \downarrow\rangle], \tag{2.7}$$

$$H|n, \downarrow\rangle = \left(\omega_0 n - \frac{\Omega}{2}\right)|n, \downarrow\rangle - \lambda[\sqrt{n}|n-1, \uparrow\rangle + \sqrt{n+1}|n+1, \uparrow\rangle]. \tag{2.8}$$

Usando las relaciones de ortonormalidad, $\langle n', s'|n, s\rangle = \delta_{nn'}\delta_{ss'}$, tenemos finalmente:

$$\langle n, \uparrow|H|n, \uparrow\rangle = \omega_0 n + \frac{\Omega}{2}, \tag{2.9}$$

$$\langle n, \downarrow|H|n, \downarrow\rangle = \omega_0 n - \frac{\Omega}{2}, \tag{2.10}$$

$$\langle n-1, \uparrow|H|n, \downarrow\rangle = \langle n-1, \downarrow|H|n, \uparrow\rangle = -\lambda\sqrt{n}, \tag{2.11}$$

$$\langle n+1, \uparrow|H|n, \downarrow\rangle = \langle n+1, \downarrow|H|n, \uparrow\rangle = -\lambda\sqrt{n+1}. \tag{2.12}$$

Y el resto de elementos son nulos. Podemos ver como, efectivamente, los elementos no nulos están conectando estados de la misma paridad. Para terminar esta sección, vamos a mostrar un ejemplo de como sería la matriz del sistema si solo consideráramos hasta dos

fotones en el campo de radiación, es decir, $n = 0, 1, 2$:

$$H = \left(\begin{array}{ccc|ccc} \frac{\Omega}{2} & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda & \omega_0 - \frac{\Omega}{2} & -\lambda\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda\sqrt{2} & 2\omega_0 + \frac{\Omega}{2} & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & -\frac{\Omega}{2} & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda & \omega_0 + \frac{\Omega}{2} & -\lambda\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda\sqrt{2} & 2\omega_0 - \frac{\Omega}{2} \end{array} \right).$$

Como vemos, la matriz es diagonal por cajas, estando claramente diferenciadas las dos cajas. La primera caja, superior, corresponde a los estados impares $|0, \uparrow\rangle$, $|1, \downarrow\rangle$ y $|2, \uparrow\rangle$, mientras que la segunda, inferior, a los estados pares $|0, \downarrow\rangle$, $|1, \uparrow\rangle$ y $|2, \downarrow\rangle$. Como los niveles de energía del sistema corresponden a los autovalores del hamiltoniano, esta factorización es muy útil pues nos permite obtenerlos por cajas en lugar de trabajar con la matriz completa. En particular, como veremos en la siguiente sección, es especialmente útil para calcular la energía del estado fundamental.

2.1.2. La energía del estado fundamental. Variación según el valor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$

En esta sección, vamos a obtener la energía del estado fundamental, que corresponde al autovalor más bajo de la matriz del hamiltoniano, calculada en la sección anterior, y observaremos cómo cambia su valor en función de la constante de acoplo λ . Empecemos con un cálculo simple: si no permitimos interacción en el sistema, es decir, hacemos $\lambda = 0$, todos los elementos no diagonales de la matriz son nulos, de acuerdo con las ecuaciones (2.9)-(2.12). Por tanto, el primer autovalor es simplemente el elemento diagonal más bajo, que corresponde a $-\frac{\Omega}{2}$, primer elemento de la caja par asociado al estado $|0, \downarrow\rangle$. En cuanto permitimos interacción, las dos cajas de la matriz se ven afectadas de la misma manera, pues, como vimos en las ecuaciones (2.11) y (2.12), los elementos no diagonales de la matriz no dependen de la paridad de los estados que conecten. Es decir, si el autovalor más bajo pertenece a la caja par cuando $\lambda = 0$, sigue siendo así cuando aumentamos λ . Vemos así la tremenda ventaja de la paridad de los estados: para calcular la energía del estado fundamental, podemos trabajar solo con la caja par, olvidándonos de la mitad de la base.

Nuestro siguiente paso es pues calcular el autovalor más bajo de la caja par de la matriz. Como comentamos al principio de la sección, necesitaríamos tomar hasta $n = \infty$ para obtener el valor exacto. Sin embargo, como solo estamos tratando el estado de menor energía, un número suficientemente grande de fotones nos garantiza una buena conver-

gencia de nuestros resultados al valor real. Nosotros hemos tomado $n = 500$.

En la matriz del hamiltoniano, podemos ver que los elementos diagonales dependen de Ω y ω_0 , es decir, nuestro primer autovalor también va a depender de los valores de estas energías. Por tanto, además de observar la dependencia de la energía fundamental con λ , es conveniente comprobar si los valores de Ω y ω_0 influyen o no en su valor. Con este fin, hemos calculado la variación del primer autovalor respecto a λ para tres valores distintos del cociente $\frac{\Omega}{\omega_0}$: 0.01, 1 y 100. Además, en todos los casos hemos escalado la energía, dividiendo por su valor para $\lambda = 0$ (es decir, por $-\frac{\Omega}{2}$), para facilitar la comparación. Los resultados obtenidos se muestran en las Figura 2.1.

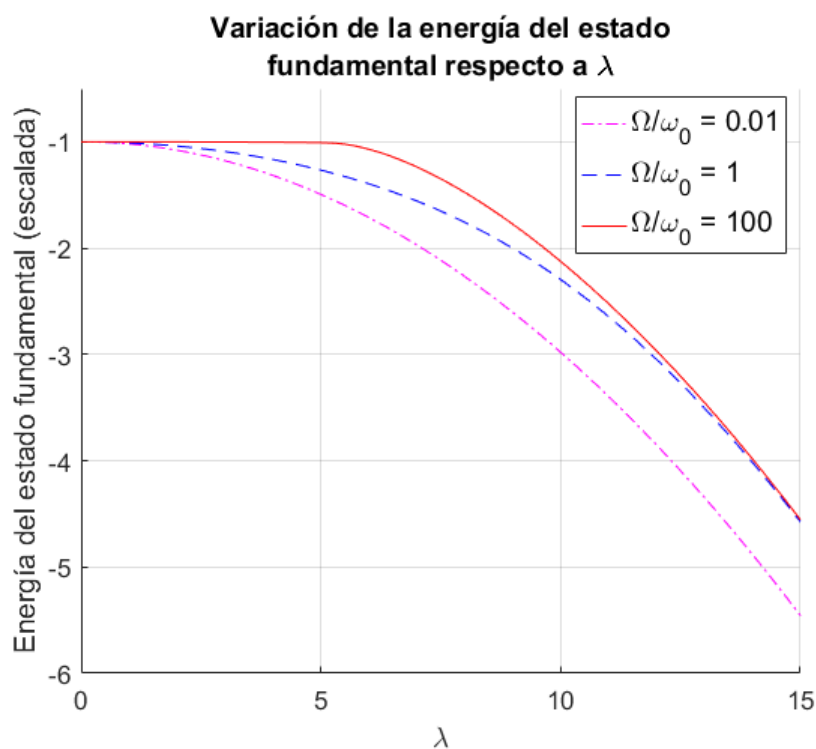


Figura 2.1: Variación de la energía del estado fundamental (dividida por $-\frac{\Omega}{2}$) respecto a λ para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 0.01$ (tomando $\Omega = 1$ y $\omega_0 = 100$), $\frac{\Omega}{\omega_0} = 1$ ($\Omega = \omega_0 = 10$) y $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$ ($\Omega = 100$ y $\omega_0 = 1$). La energía del estado fundamental no presenta ningún cambio brusco para ningún λ en los casos $\frac{\Omega}{\omega_0} = 0.01$ y $\frac{\Omega}{\omega_0} = 1$, lo que parece indicar que no ocurre ninguna transición. Para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$, aproximadamente en el valor $\lambda = 5$, sí se observa un cambio brusco en el valor de la energía escalada del estado fundamental: antes de ese valor se mantiene constante e igual a -1, para luego comenzar a decaer. El comportamiento tan diferente entre antes y después de $\lambda = 5$ parece indicar que ha ocurrido una transición de fase.

En las figura, puede observarse que, en los casos $\frac{\Omega}{\omega_0} = 0.01$ y $\frac{\Omega}{\omega_0} = 1$, no se da ningún cambio brusco en la energía del estado fundamental para ningún valor de λ . Por tanto, no parece que podamos concluir que haya ocurrido una transición de fase. Solo en el caso $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$, el mayor de los cocientes escogidos, parece que de verdad ha ocurrido una transición

de fase que afecte al comportamiento de la energía del estado fundamental, la cual pasa de tener un valor constante a decrecer alrededor del valor $\lambda = 5$. Este cambio claro del valor de la energía sí parece indicar una transición ¿Significa esto que la transición solo ocurre para ciertos valores de $\frac{\Omega}{\omega_0}$? Para tratar de encontrar la respuesta, vamos a cambiar nuestro planteamiento: en lugar de resolver el hamiltoniano de forma numérica, vamos a buscar una expresión analítica que nos indique de forma clara si se produce transición o no. Es lo que veremos en la siguiente sección.

2.2. Estudio analítico

Vamos a intentar obtener una forma analítica del potencial del sistema, que nos permita entender exactamente qué ha ocurrido en los cálculos numéricos. Para ello, podemos aplicar una aproximación semiclásica, reemplazando los operadores del campo de radiación, a y a^\dagger , por los operadores de posición y momento, x y p :

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a), \quad (2.13)$$

$$p = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a). \quad (2.14)$$

Despejando, tenemos que:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + ip), \quad (2.15)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - ip). \quad (2.16)$$

Sustituyendo en el hamiltoniano de Rabi (1.1)

$$H = \omega_0 a^\dagger a + \frac{\Omega}{2} \sigma_z - \lambda(a + a^\dagger) \sigma_x,$$

podemos obtener la expresión del hamiltoniano del sistema en función de la posición y el momento:

$$H = \frac{\omega_0}{2}(x^2 + p^2) + \frac{\Omega}{2} \sigma_z - \sqrt{2} \lambda x \sigma_x. \quad (2.17)$$

Ahora, podemos obtener una expresión matricial del hamiltoniano a partir de los autoestados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ de σ_z , que representan los dos posibles niveles de nuestro átomo:

$$H = \begin{pmatrix} \langle \uparrow | H | \uparrow \rangle & \langle \uparrow | H | \downarrow \rangle \\ \langle \downarrow | H | \uparrow \rangle & \langle \downarrow | H | \downarrow \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\omega_0}{2}(x^2 + p^2) + \frac{\Omega}{2} & -\sqrt{2} \lambda x \\ -\sqrt{2} \lambda x & \frac{\omega_0}{2}(x^2 + p^2) - \frac{\Omega}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Los valores de la energía se obtienen pues como los autovalores de la matriz anterior:

$$|H - E I| = 0,$$

siendo I la matriz identidad. Obtenemos los valores:

$$E_1 = \frac{\omega_0}{2}(x^2 + p^2) + \frac{\sqrt{8\lambda^2 x^2 + \Omega^2}}{2}, \quad (2.19)$$

$$E_0 = \frac{\omega_0}{2}(x^2 + p^2) - \frac{\sqrt{8\lambda^2 x^2 + \Omega^2}}{2}. \quad (2.20)$$

Como estamos interesados en el estado fundamental, nos quedamos con el que corresponde al de menor energía, E_0 . Así, el hamiltoniano semiclásico correspondiente al estado fundamental sería $H = E_0$. El término $\frac{\omega_0}{2}p^2$ representa la energía cinética del sistema, que en el estado fundamental, desde el punto de vista semiclásico, es nula. El resto de la expresión corresponde a la energía potencial. Por tanto, llegamos finalmente a que la expresión del potencial en el estado fundamental es:

$$V_0 = \frac{\omega_0}{2}x^2 - \frac{\sqrt{8\lambda^2 x^2 + \Omega^2}}{2}. \quad (2.21)$$

Observemos que se trata de un potencial simétrico respecto a la posición x . La forma de este potencial cambia según el valor de λ , pasando de ser un pozo típico de un oscilador armónico a tener la forma de dos pozos. Para analizar este cambio, podemos buscar cuáles son los mínimos del potencial, igualando a 0 la derivada de la expresión obtenida:

$$0 = \frac{dV_0}{dx} = x \left(\omega_0 - \frac{4\lambda^2}{\sqrt{8\lambda^2 x^2 + \Omega^2}} \right). \quad (2.22)$$

Se trata de un producto de dos factores; las soluciones vendrán dadas entonces por los puntos donde se anulan. Así, el punto $x = 0$ es siempre un máximo local o un mínimo de potencial. En cuanto al otro factor:

$$\omega_0 - \frac{4\lambda^2}{\sqrt{8\lambda^2 x^2 + \Omega^2}} = 0 \rightarrow x = \pm \sqrt{\frac{2\lambda^2}{\omega_0^2} - \frac{\Omega^2}{8\lambda^2}}. \quad (2.23)$$

Así, si el radicando es mayor que 0, tendremos dos nuevos puntos extremales, mientras que en caso contrario el único punto extremal del potencial será $x = 0$. Es decir, tendremos dos nuevos puntos si:

$$\frac{2\lambda^2}{\omega_0^2} - \frac{\Omega^2}{8\lambda^2} > 0 \rightarrow \lambda > \frac{\sqrt{\omega_0 \Omega}}{2}. \quad (2.24)$$

El valor $\lambda = \frac{\sqrt{\omega_0 \Omega}}{2}$ constituye pues un punto crítico, λ_c ; por debajo de él nuestro potencial solo tiene un mínimo en $x = 0$, mientras que por encima ese mínimo se vuelve un

máximo local y aparecen dos nuevos mínimos en $x = \pm \sqrt{\frac{2\lambda^2}{\omega_0^2} - \frac{\Omega^2}{8\lambda^2}}$.

El valor del potencial es siempre el mismo para $x = 0$:

$$V_0(0) = -\frac{\Omega}{2}. \quad (2.25)$$

Sin embargo, una vez superado el valor de λ_c , el valor del potencial en los nuevos mínimos ya no es un valor fijo, sino que depende de λ :

$$\begin{aligned} V_0\left(\pm \sqrt{\frac{2\lambda^2}{\omega_0^2} - \frac{\Omega^2}{8\lambda^2}}\right) &= \frac{\omega_0}{2} \left(\frac{2\lambda^2}{\omega_0^2} - \frac{\Omega^2}{8\lambda^2}\right) - \frac{\sqrt{8\lambda^2\left(\frac{2\lambda^2}{\omega_0^2} - \frac{\Omega^2}{8\lambda^2}\right) + \Omega^2}}{2} \\ &= -\left(\frac{\omega_0\Omega^2}{16\lambda^2} + \frac{\lambda^2}{\omega_0}\right) \end{aligned} \quad (2.26)$$

Téngase en cuenta que el valor del potencial es el mismo para ambos mínimos pues el potencial es simétrico.

Para resumir todo esto, mostramos una imagen con la forma del potencial para distintos valores de λ . Esto es lo que se recoge en la Figura 2.2.

Podemos ver, efectivamente, cómo la forma del potencial es la de un pozo armónico hasta que $\lambda = \lambda_c$, para luego tomar la forma de dos pozos, simétricos respecto a $x = 0$. Como ya comentamos, cuando el potencial es solo un pozo, tiene su mínimo en dicho punto, y además su valor es siempre el mismo, incluso cuando el potencial cambia a la forma de dos pozos ($\lambda > \lambda_c$), convirtiéndose en ese caso en un máximo local. Por el contrario, podemos ver que el valor en los mínimos del pozo doble depende del valor de λ (se puede ver en la figura claramente como ni la posición de los mínimos ni su valor es el mismo en las dos líneas inferiores). Es decir, cuando tenemos un solo pozo, la energía mínima, la del estado fundamental, está fija por su valor en $x = 0$, sin embargo, en cuanto el potencial cambia de forma, la energía del estado fundamental deja de ser una constante.

En resumen, la transición de fase tiene lugar cuando la constante de acoplo adquiere el valor crítico $\lambda_c = \frac{\sqrt{\omega_0\Omega}}{2}$, pasando el potencial de tener la forma de un solo pozo a la de dos pozos. Por tanto, según nuestra aproximación semiclásica, la transición siempre tiene lugar una vez λ alcanza el valor adecuado. Sin embargo, en nuestro estudio numérico, solo parecía tener lugar para el caso $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$. Y no se trata de que en los otros casos la variación de λ no fuera suficientemente grande como para que no se alcanzara el valor λ_c (tanto para $\Omega = \omega_0 = 10$ como para $\Omega = 100$ y $\omega_0 = 1$, o viceversa, el valor $\lambda_c = \frac{\sqrt{\omega_0\Omega}}{2}$ es 5, que estaba dentro del rango de nuestras gráficas). Por tanto, debe existir una razón

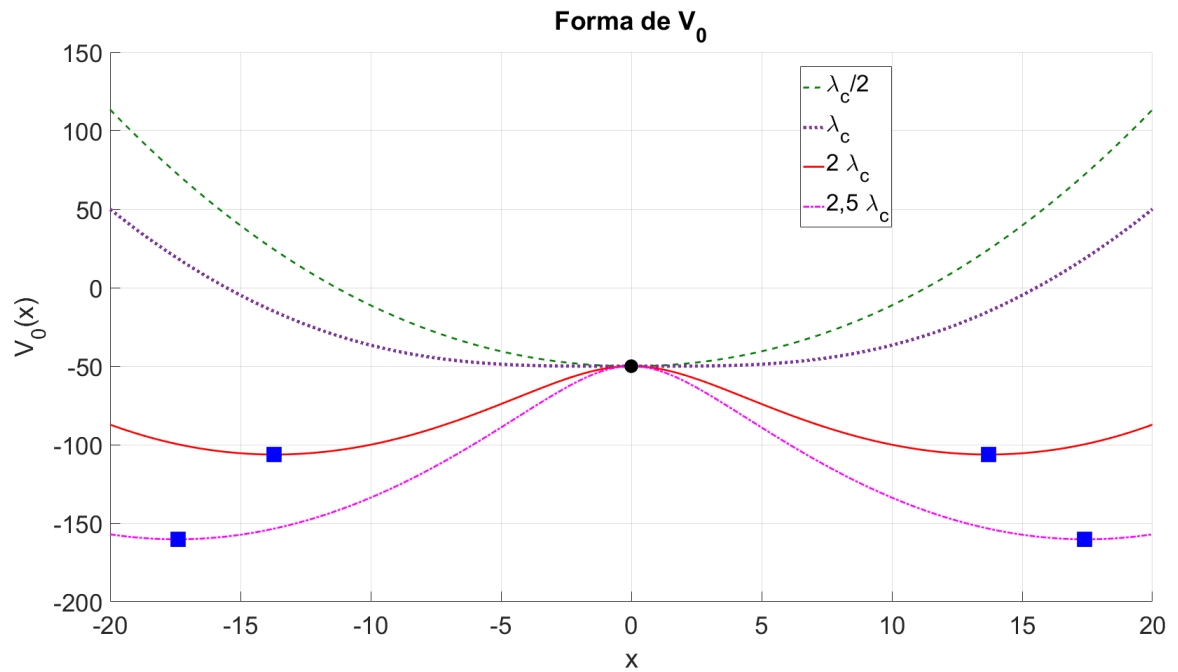


Figura 2.2: Forma del potencial para distintos valores de λ : un valor por debajo de λ_c , el propio λ_c , y dos valores por encima. Se ha tomado $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$. Para las curvas $\lambda \leq \lambda_c$, el potencial tiene la forma de un único pozo, con un mínimo en $x = 0$, marcado con un punto negro. Para las curvas $\lambda > \lambda_c$, el potencial adopta la forma de dos pozos. En estos casos, el punto $x = 0$ pasa a ser un máximo local. Los nuevos mínimos del potencial están marcados con cuadrados azules. El valor de los mínimos cuando el potencial tiene la forma de dos pozos depende de λ , por eso su valor no coincide para las dos últimas curvas.

que impida que el resultado exacto coincida con el clásico para los valores pequeños de $\frac{\Omega}{\omega_0}$. La discutiremos en la siguiente sección.

2.3. El límite clásico

La respuesta a por qué solo parece existir concordancia entre los cálculos exactos y las expresiones analíticas para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$ la encontramos en el principio de correspondencia[22], postulado por Niels Bohr en 1923: los resultados cuánticos deben tender a los clásicos cuando los números cuánticos involucrados en el sistema son grandes. Que los números cuánticos sean grandes puede referirse a diversos regímenes según el sistema que estemos considerando. Por ejemplo, puede referirse al límite en el que el sistema está formado por muchas partículas, o aquél en el que solo consideramos valores altos de la energía. El límite en el que los resultados cuánticos coinciden con los clásicos recibe el nombre de límite clásico.

En nuestro caso, el límite clásico viene determinando por aquél en el que la acción del sistema es mucho mayor que la del ambiente. Dicho de otro modo, como la acción

es energía por tiempo, considerando que nuestro sistema es el átomo con dos niveles y el ambiente es el campo fotónico, el principio de correspondencia en nuestro caso implica que los resultados exactos coincidirán con los clásicos solo cuando la energía Ω de separación entre los niveles del átomo sea mucho mayor que la energía ω_0 que lleva el campo fotónico. Por tanto, el límite clásico de nuestro sistema es aquel en el que $\frac{\Omega}{\omega} \gg 1$.

Esto es lo que ha ocurrido cuando hemos hecho los cálculos numéricos, en la Figura 2.1. Solo en el caso $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$ puede apreciarse claramente la transición de fase en el valor $\lambda_c = 5$ que habíamos deducido en el estudio semiclásico, pues es el único caso en el que el cociente entre frecuencias es suficientemente grande. De hecho, al aumentar el valor del cociente, es de esperar un mayor acuerdo entre los resultados exactos y clásicos. Para comprobarlo, en la siguiente sección, compararemos los resultados obtenidos para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100, 500$ y 1000 .

A partir de ahora, nos centraremos en el límite clásico para estudiar hasta qué punto coinciden nuestros resultados obtenidos mediante los cálculos exactos y semiclásicos.

2.4. Comparación

Explicada ya la razón por la que solo se observa la transición para $\frac{\Omega}{\omega_0} \gg 1$, lo que vamos a hacer en esta sección es comparar los resultados exactos obtenidos en ese límite con las expresiones analíticas de la aproximación semiclásica, para comprobar si la aproximación es correcta o, por el contrario, aunque ponga de manifiesto la transición, ofrece resultados muy distintos de los que se obtienen al resolver el hamiltoniano.

Para ello, vamos a aprovechar la Figura 2.1 para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$, que nos daba el valor numérico de la energía en el estado fundamental, y vamos a compararla con el valor analítico que habíamos obtenido del mismo, el cual, según las ecuaciones (2.25) y (2.26), sería:

$$E_0 = -\frac{\Omega}{2}, \quad 0 \leq \lambda \leq \lambda_c; \quad (2.27)$$

$$E_0 = -\left(\frac{\omega_0 \Omega^2}{16\lambda^2} + \frac{\lambda^2}{\omega_0}\right), \quad \lambda > \lambda_c. \quad (2.28)$$

Representamos pues esta curva sobre el valor exacto de la Figura 2.1 y obtenemos la Figura 2.3. Las curvas están completamente solapadas, lo cual nos indica que los resultados de ambas técnicas son muy similares. Este es un resultado importante: a la hora de hacer el estudio analítico, realizamos una aproximación semiclásica para poder obtener un poten-

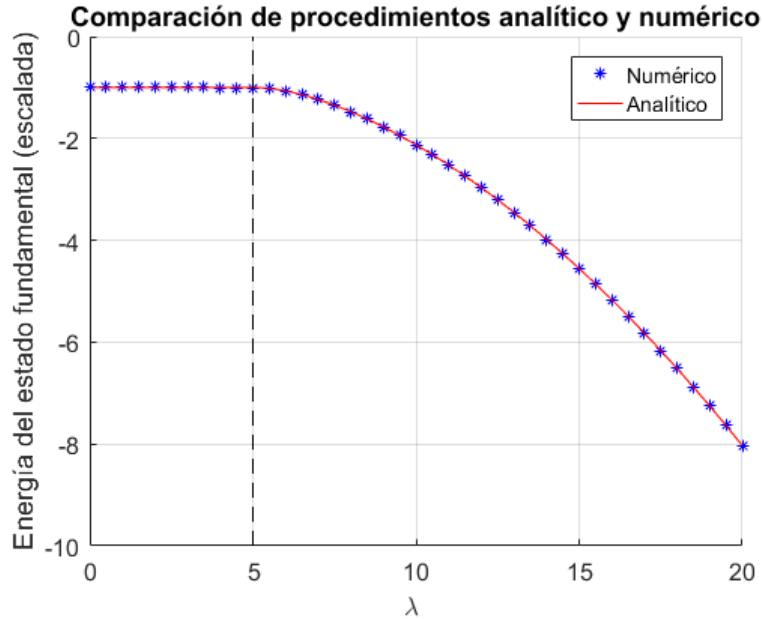


Figura 2.3: Variación de la energía del estado fundamental frente a λ , obtenida mediante las expresiones analíticas de la dependencia de dicha energía con λ (ecuaciones (2.27) y (2.28)), alcanzadas mediante la aproximación semiclásica (curva naranja); y mediante la resolución exacta, con cálculo numérico, del hamiltoniano del sistema (curva azul), para $\Omega = 100$ y $\omega_0 = 1$. Las curvas aparecen prácticamente solapadas, indicando que ambos procedimientos nos llevan a resultados similares. La línea discontinua indica el valor crítico $\lambda_c = 5$. Se observa que la energía del estado fundamental permanece constante hasta ese valor, para luego comenzar a decrecer.

cial en función de la posición. Acabamos de comprobar, por tanto, que esta aproximación es válida, pues no lleva a diferencias significativas con lo que se obtiene si resolvemos directamente el hamiltoniano de forma numérica. Además, que los resultados numéricos, que son exactos, realmente reflejen el comportamiento clásico del sistema cuando estamos en el límite clásico, es una muestra de la validez de nuestros cálculos numéricos. Por tanto, queda claro que ambos procedimientos permiten estudiar y caracterizar la transición de fase cuántica que sufre el estado fundamental del sistema.

De todas formas, en la Figura 2.4 hemos representado la diferencia entre ambas expresiones (es decir, a la expresión analítica de E_0 le hemos restado el valor exacto de la Figura 2.1), y vemos que sí existe una pequeña diferencia entre los distintos resultados, especialmente alrededor del valor crítico $\lambda_c = 5$. La diferencia se debe al tamaño finito del sistema: hemos tomado un valor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$ grande, pero no infinito, pues necesitamos valores reales para hacer cálculos. Sin embargo, la diferencia es de un orden pequeño, y no impide que las conclusiones extraídas de ambos procedimientos coincidan. Es más, podemos comprobar que la diferencia se reduce al aumentar más el valor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$, pues nos acercamos en mayor medida al límite clásico. Para ello, hemos calculado también la diferencia con los valores $\frac{\Omega}{\omega_0} = 500$ ($\Omega = \sqrt{500000}$ y $\omega_0 = \sqrt{\frac{1}{5}}$) y 1000 ($\Omega = \sqrt{1000000}$ y $\omega_0 = \sqrt{\frac{1}{10}}$); hemos

tomado estos valores para obtener en todos los casos $\lambda_c = 5$ y facilitar la comparación). Esto muestra definitivamente que la aproximación semiclásica es válida y que los cálculos numéricos dan resultados correctos. Todo esto lo podemos observar en la Figura 2.4.

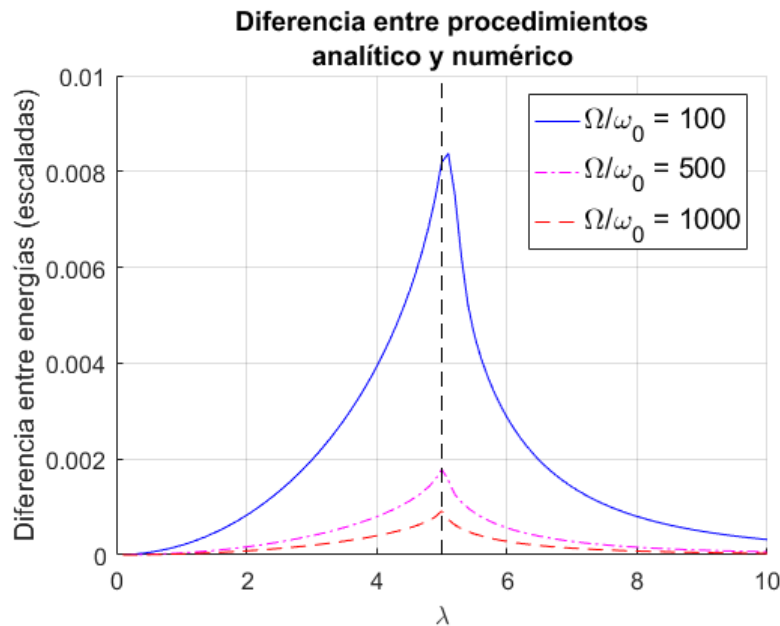


Figura 2.4: Diferencia entre las energías del estado fundamental obtenidas de forma analítica, mediante aproximación semiclásica, y mediante cálculo exacto, para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100, 500$ y 1000 . Hemos ajustado en todos los casos los valores de Ω y ω_0 para que el valor crítico λ_c permanezca igual a 5 , marcado con una línea discontinua vertical. La diferencia se reduce para mayores valores de $\frac{\Omega}{\omega_0}$, pues nos acercamos más al límite clásico; de todas formas, la diferencia sigue siendo pequeña incluso para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100$. Concluimos pues que los procedimientos presentan un alto grado de acuerdo.

2.5. Parámetros de orden. El orden de la transición

Para terminar el estudio de la transición del estado fundamental, en esta sección vamos a presentar dos parámetros de orden que permiten caracterizarla, y luego daremos el orden de la transición comprobando cuál es la derivada de menor orden de la energía que presenta una discontinuidad. Ya que ha quedado claro que tanto las expresiones analíticas, aproximadas, como el cálculo numérico, exacto, dan buenos resultados, haremos uso de ambas técnicas: calcularemos los parámetros de orden numéricamente y hallaremos el orden de la transición a partir de la expresión analítica de la energía.

Los dos parámetros de orden que aquí introducimos, y que nos permiten identificar las dos fases, son los valores esperados de σ_z y $a^\dagger a$ (esto último es el valor esperado del número de fotones) en el estado fundamental. La forma de obtenerlos es simple: una vez hemos

calculado numéricamente el autovalor más pequeño del hamiltoniano, también podemos obtener el autovector correspondiente. Teniendo en cuenta que estamos trabajando en la base $|n, s\rangle$, y que hemos tomado hasta 500 fotones, $n = 0, 1, \dots, 500$, como solo estamos trabajando con los estados pares, la forma general del autovector que define el estado fundamental será:

$$|e_0\rangle = a_0|0, \downarrow\rangle + a_1|1, \uparrow\rangle + \dots + a_{499}|499, \uparrow\rangle + a_{500}|500, \downarrow\rangle. \quad (2.29)$$

Los valores esperados serán por tanto $\langle e_0|a^\dagger a|e_0\rangle$ y $\langle e_0|\sigma_z|e_0\rangle$. Teniendo en cuenta la ortonormalidad de los estados de la base y que los operadores actúan como $a^\dagger a|n, s\rangle = n|n, s\rangle$ y $\sigma_z|n, \uparrow\rangle = |n, \uparrow\rangle$, $\sigma_z|n, \downarrow\rangle = -|n, \downarrow\rangle$, llegamos finalmente a que:

$$\langle e_0|a^\dagger a|e_0\rangle = \sum_{i=0}^{500} |a_i|^2 i, \quad (2.30)$$

$$\langle e_0|\sigma_z|e_0\rangle = \sum_{i=0}^{500} |a_i|^2 (-1)^{i+1}. \quad (2.31)$$

A continuación, mostramos en las Figuras 2.5 y 2.6 cómo varía el valor esperado de ambos operadores para los tres casos de la sección anterior: $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100, 500$ y 1000 .

Vemos claramente como, al igual que ocurría con la energía, estos valores se mantienen prácticamente constantes hasta que se supera el valor $\lambda_c = 5$, para luego sufrir un cambio brusco. Aunque el cambio en el valor esperado de σ_z es muy similar para los tres valores de $\frac{\Omega}{\omega_0}$, el cambio en el valor esperado del número de fotones es más pronunciado cuando aumentamos el valor del cociente, indicando de manera más evidente que se ha producido la transición de fase, como cabía esperar pues nos aproximamos en mayor medida al límite clásico.

La interpretación de la forma de las figuras es sencilla: si recordamos, cuando no permitíamos interacción ($\lambda = 0$), el estado fundamental correspondía al estado $|0, \downarrow\rangle$. Lo que nos indican estas gráficas es que el estado fundamental sigue siendo ese mismo incluso cuando permitimos interacción, hasta que llegamos a λ_c , pues hasta ese punto el valor de $a^\dagger a$ se mantiene en 0 y el de σ_z en -1. Sin embargo, una vez tiene lugar la transición, el cambio de potencial produce una reorganización en los estados que provoca que el estado fundamental ya no esté formado por un único estado de la base, de ahí que los valores esperados ya no sean constantes. De hecho, observamos que ambos valores esperados llegan a saturar una vez se encuentran en la fase en la que el potencial ha cambiado de forma. El valor esperado del número de fotones parece ajustarse a $n = 500$ (recordemos que en la gráfica, este valor está normalizado, dividido entre n , por eso se acerca a 1) y el de σ_z

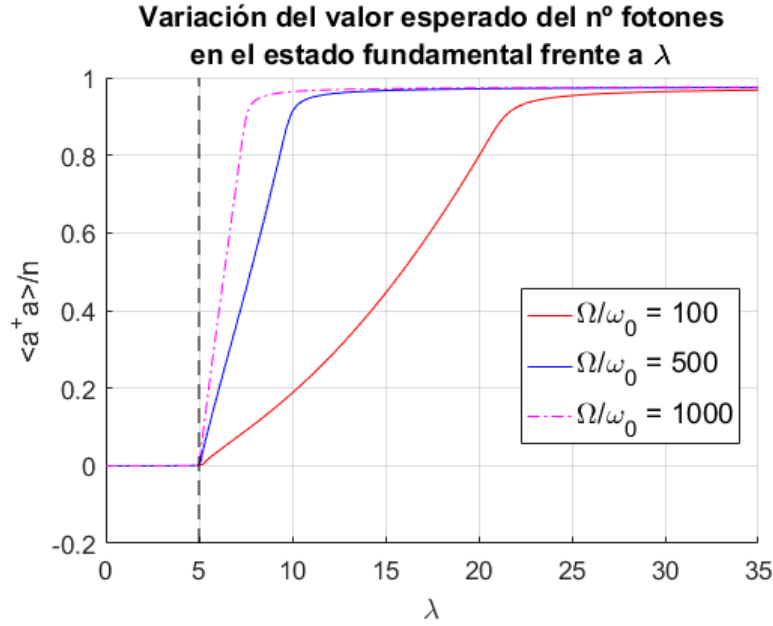


Figura 2.5: Variación del valor esperado del número de fotones para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100, 500$ y 1000 en el estado fundamental. Hemos normalizado dividiendo por el número total $n = 500$. La línea discontinua indica el valor crítico λ_c . Puede observarse que el valor permanece constante e igual a 0 para los valores $\lambda < \lambda_c$, indicándonos que el estado fundamental está formado únicamente por el estado $|0, \downarrow\rangle$. El cambio brusco en el valor $\lambda_c = 5$ es indicativo de que tiene lugar la transición de fase; a partir de ese momento el estado fundamental pasa a estar compuesto por varios estados de la base. El cambio es más brusco conforme aumentamos $\frac{\Omega}{\omega_0}$, como cabe esperar al acercarnos más al límite clásico.

a 0. Este valor esperado de σ_z puede entenderse teniendo en cuenta que, para valores λ grandes, el término dominante en el hamiltoniano de Rabi (ecuación (1.1)),

$$H = \omega_0 a^\dagger a + \frac{\Omega}{2} \sigma_z - \lambda (a + a^\dagger) \sigma_x,$$

es el de interacción, es decir, el primer autovector sería autoestado de un hamiltoniano de la forma $(a + a^\dagger) \sigma_x$. Por tanto, la parte correspondiente a los dos niveles del átomo debe comportarse como un autoestado de σ_x . Como estos autoestados son combinaciones de los dos estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$, con sus coeficientes asociados de la misma magnitud, el valor esperado de σ_z en los mismos es nulo. Esto es lo que se observa en la Figura 2.4 para los valores más altos de λ . Para el valor esperado del número de fotones, la explicación es parecida, solo que ahora hay que tener en cuenta todos los estados $|n\rangle$, y no solo dos como en el caso del átomo. Lo que realmente debemos tener en cuenta de estas figuras es que, antes de la transición, el estado del sistema está perfectamente determinado como $|0, \downarrow\rangle$, pero una vez cambia la forma del potencial, son varios estados de la base los que definen el estado fundamental.

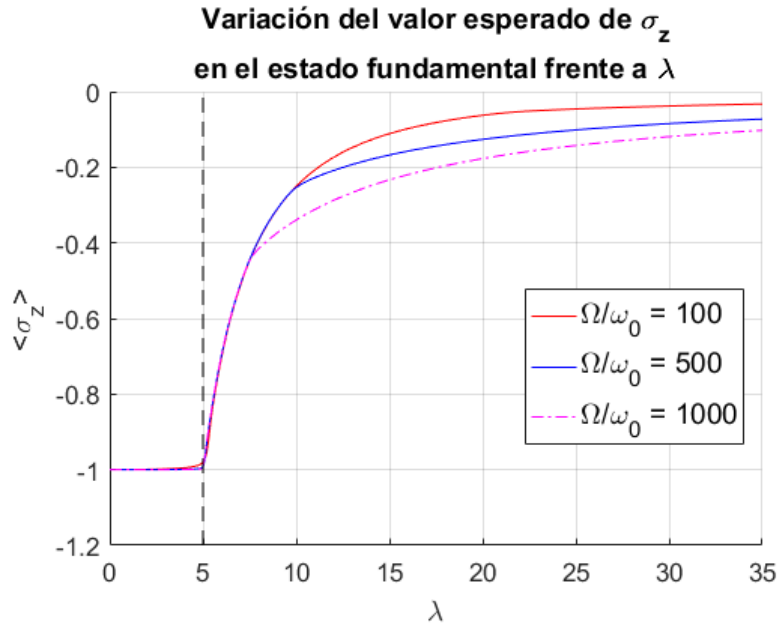


Figura 2.6: Variación del valor esperado de σ_z para $\frac{\Omega}{\omega_0} = 100, 500$ y 1000 en el estado fundamental. La línea discontinua indica el valor crítico λ_c . Al igual que el valor esperado del número de fotones (Figura 2.7), se observa un valor constante e igual a -1 para luego experimentar un cambio brusco en el valor λ_c , indicándonos que ha tenido lugar la transición de fase. El valor constante -1 se debe a que el estado fundamental del sistema antes de la transición viene dado por el estado $|0, \downarrow\rangle$. Tras la transición, el estado fundamental pasa a estar formado por varios estados de la base. La forma de la gráfica es muy similar para los tres valores de $\frac{\Omega}{\omega_0}$.

En definitiva, los valores esperados de $a^\dagger a$ y σ_z presentan un valor claramente definido en una fase, mientras que cambian a valores distintos en la otra, comportándose como buenos parámetros de orden que permiten identificar esta transición cuántica. Además, podemos ver que el cambio que experimentan los parámetros es continuo. Si recordamos, al introducir las transiciones de fase clásicas, comentamos que el comportamiento del parámetro de orden en la transición era el mismo que la primera derivada de la energía libre del sistema. Por tanto, podemos intuir que nuestra transición de fase es de segundo orden o superior.

Para terminar finalmente el estudio de esta transición vamos entonces a dar su orden; para ello, vamos a aprovechar que tenemos la forma analítica de la energía para representar su primera y segunda derivadas respecto a λ , en las Figuras 2.7 y 2.8, respectivamente.

Obsérvese que, mientras que la primera derivada es continua al pasar por el punto crítico λ_c , la segunda sufre una discontinuidad. Esto nos permite concluir que se trata de una transición de fase de segundo orden.

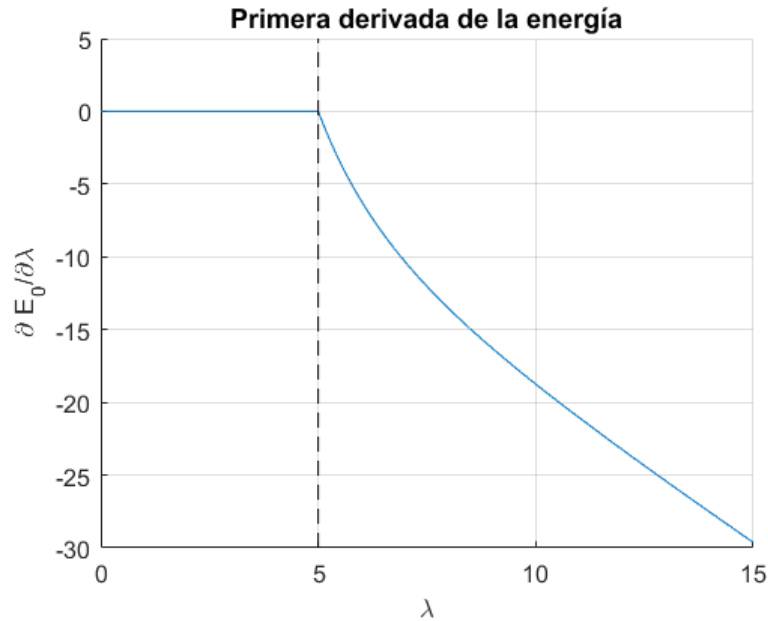


Figura 2.7: Primera derivada de la expresión analítica de E_0 frente a λ , para $\Omega = 100$ y $\omega_0 = 1$. La línea discontinua indica el valor crítico λ_c . No se presenta ninguna discontinuidad.

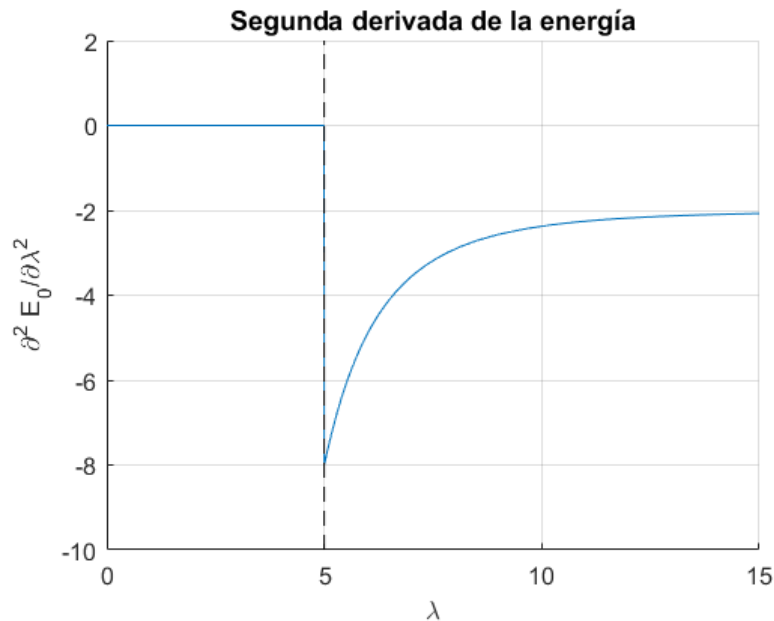


Figura 2.8: Segunda derivada de la expresión analítica de E_0 frente a λ , para $\Omega = 100$ y $\omega_0 = 1$. La línea discontinua indica el valor crítico λ_c . En este caso, se observa una discontinuidad en el valor crítico de la transición, indicándonos que la transición es de segundo orden.

Con esto, hemos terminado el tratamiento completo de la transición del estado fundamental: la hemos caracterizado, la hemos tratado desde un punto de vista analítico y numérico y hemos dado su orden. Podemos resumir los resultados más importantes como sigue: el modelo de Rabi presenta una transición de fase de segundo orden en su estado fundamental, causada por el cambio del potencial cuando el valor de la constante de aco-

plo toma el valor crítico $\lambda_c = \frac{\sqrt{\Omega\omega_0}}{2}$. La concordancia entre el cálculo numérico exacto y las aproximaciones semiclásicas se da en el límite $\frac{\Omega}{\omega_0} \gg 1$; para valores menores de este cociente no se aprecia una transición en los resultados numéricos. Por último, los valores esperados de σ_z y $a^\dagger a$ sirven como parámetros de orden de esta transición, presentando un valor constante para valores $\lambda < \lambda_c$, para luego variar su valor en la fase en la que la simetría del estado fundamental se ha roto.

Capítulo 3

Transición de fase de los estados excitados

Además de la transición del estado fundamental, el hamiltoniano de Rabi también presenta una transición de fase cuántica que afecta a los estados excitados, y que aparece acompañando a la primera transición.

Cuando ha tenido lugar la transición del estado fundamental, el potencial adopta la forma de dos pozos. Esto significa que el estado fundamental pierde la simetría del sistema: cuando solo existe un pozo, el estado puede recorrer todo el espacio en x , desde un límite hasta el otro. Sin embargo, cuando hay dos pozos, el estado se encuentra encerrado en uno de ellos, lo cual le impide recorrer todo el espacio de la posición x . Por eso hablamos de la rotura de simetría en el estado fundamental.

Al igual que este estado de mínima energía, los estados con energías que no superen el máximo que separa ambos pozos (es decir, el valor del potencial en $x = 0$, que recordemos que era $-\frac{\Omega}{2}$) estarán confinados en uno de los dos pozos. Los autoestados de un hamiltoniano de un sistema sometido a un potencial simétrico deben tener una simetría definida, ya sea par o impar [22]. Por tanto, los estados de un pozo deben combinarse con los del pozo opuesto para formar un autoestado válido del sistema. Por esta razón, estos dos estados pueden combinarse de dos formas: creando un autoestado con simetría par o uno con simetría impar. Dicho de otro modo, los niveles de energía por debajo de $-\frac{\Omega}{2}$ presentan degeneración doble: a la misma energía, encontramos dos autoestados posibles, uno par y otro impar. Una vez superado el nivel de $-\frac{\Omega}{2}$, la degeneración se rompe, pues los estados tienen acceso a todo el espacio de fases y, por tanto, presentarán por sí mismos una de las dos simetrías que impone el sistema.

Por tanto, la transición de fase ahora consiste en el cambio en la degeneración de los

niveles de energía de los estados excitados: en el valor de la energía crítica, dado por $-\frac{\Omega}{2}$, los niveles energéticos pasan de presentar degeneración a no tenerla. Cuando nos aproximamos por debajo a la energía crítica, los estados comienzan a acumularse, no solo por la degeneración, sino porque, al estar cerca del nivel de separación de los pozos, la barrera de potencial que deben superar los estados confinados en los pozos para combinarse tiene menor altura. Por tanto, el sistema favorece que aparezcan más estados cerca de dicho nivel, pues hay mayor posibilidad de que los estados puedan combinarse.

El cambio en la degeneración de los niveles y la acumulación de estados cerca del nivel crítico $-\frac{\Omega}{2}$ producen un cambio en la densidad de estados, concretamente veremos que se da una singularidad en dicho nivel porque el número de estados comienza a crecer sin estar acotado. Nuestro enfoque para identificar esta transición será, pues, hallar la densidad de estados de forma tanto analítica (volviendo a aplicar la aproximación semiclásica) como numérica (resolviendo el hamiltoniano completo del sistema), para comprobar que efectivamente en el punto crítico existe una divergencia en la densidad de estados. En la Figura 3.1 mostramos un breve resumen de lo expuesto hasta ahora.

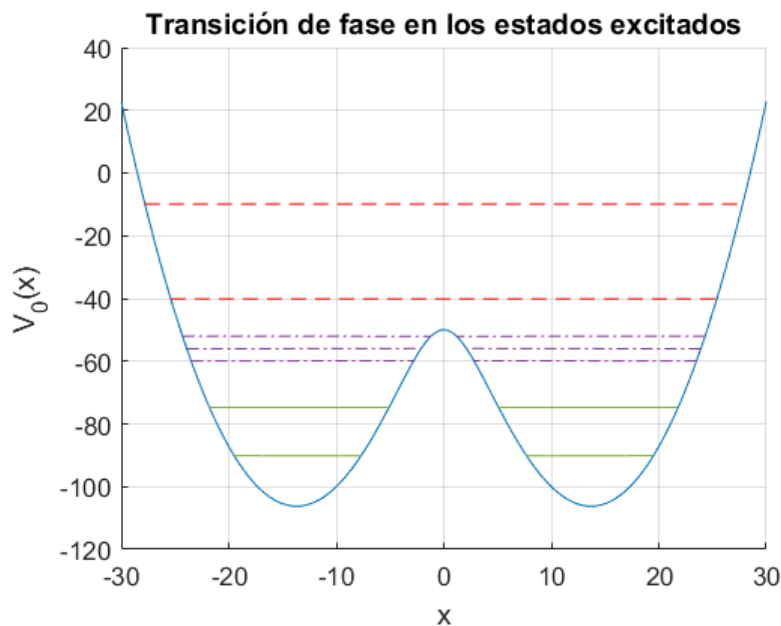


Figura 3.1: Transición de fase en los estados excitados. Las líneas horizontales representan distintos niveles de energía. Los estados con energía por debajo del nivel que separa ambos pozos, $-\frac{\Omega}{2}$ (líneas verdes continuas y líneas moradas de puntos y guiones), deben combinarse para crear un autoestado con la simetría del sistema; la posibilidad de una combinación par o impar implica que estos niveles de energía están doblemente degenerados. Los estados con un nivel de energía cercano a $-\frac{\Omega}{2}$, pero inferior (líneas moradas), se acumulan debido a que deben atravesar una barrera de potencial de una altura menor para combinarse. Los estados con energía superior a $-\frac{\Omega}{2}$ (líneas rojas discontinuas) ya son autoestados completos del sistema, presentando por sí mismos la simetría requerida, luego no presentan degeneración.

La acumulación de los estados también puede entenderse desde un punto de vista clásico, que es el que precisamente nos ha permitido obtener el potencial del sistema. Los niveles con una energía total cercana pero inferior al nivel de separación de los pozos tardan más tiempo en recorrer su órbita que los niveles inferiores. Esto es así porque, al tener mayor energía, presentan más energía cinética en el fondo del pozo en el que están confinados que los niveles inferiores, es decir, pueden transformar una mayor cantidad de energía cinética en potencial, lo que se traduce en que alcanzan una mayor altura en el pozo, tardando más en completar el recorrido. Idealmente, el nivel cuya energía coincida exactamente con la del punto de separación tardará un tiempo infinito en terminar su recorrido, pues su energía le permite alcanzar dicho punto, en $x = 0$, que se trata de un punto de equilibrio (inestable) y quedarse sin energía cinética, permaneciendo ahí salvo que se vea afectado por una perturbación. Por tanto, haciendo una analogía entre el número de estados con cierta energía y el tiempo que tarda el sistema clásico en recorrer su órbita con dicha energía, puede entenderse la acumulación de estados que experimenta el sistema conforme nos acercamos a la energía de separación entre los pozos.

Así queda introducida esta transición de fase. Pasemos ahora a calcular la densidad de estados.

3.1. Estudio cuántico exacto

La densidad de estados nos da el número de estados con energía comprendida entre E y $E + \Delta E$, para cada valor E de la energía. Por tanto, para calcularla, necesitamos alguna manera de contar los niveles de energía del sistema. Estos niveles de energía corresponden a los autovalores del hamiltoniano. Así, podemos partir de la forma matricial del hamiltoniano que ya habíamos obtenido al tratar la transición en el estado fundamental, en la base $|n, s\rangle$, y obtener numéricamente sus autovalores para conocer los niveles de energía. A continuación, podemos realizar un cálculo aproximado de la densidad de estados dividiendo nuestro rango de energías en pequeños intervalos y contando el número de autovalores que caen dentro de cada uno. El intervalo debe ser suficientemente pequeño para no perder información, pero no demasiado como para deteriorar la forma de la densidad obtenida (un intervalo muy pequeño implicaría muy pocos niveles de energía por intervalo, impidiendo obtener la forma correcta de la densidad de estados).

Al contrario que en el tratamiento del estado fundamental, en este caso debemos tomar la matriz completa del hamiltoniano, no solo la caja par, pues estamos considerando todos los niveles de energía. Para que la concordancia entre resultados clásicos y cuánticos sea

razonable, de acuerdo con el límite clásico, debemos considerar un valor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$ grande. Y como estamos estudiando todos los niveles de energía, no solo el fundamental, debemos considerar un valor mayor que el considerado en la transición del estado fundamental. Por tanto, hemos decidido tomar $\Omega = 1089$, $\omega_0 = 1$ (tomamos 1089 para que el valor $\lambda_c = \frac{\sqrt{\omega_0 \Omega}}{2}$ dé un valor exacto, 16.5). Además, para asegurar una mayor exactitud en el cálculo de los niveles de energía, hemos aumentado considerablemente el número de fotones, de 500 a 3000.

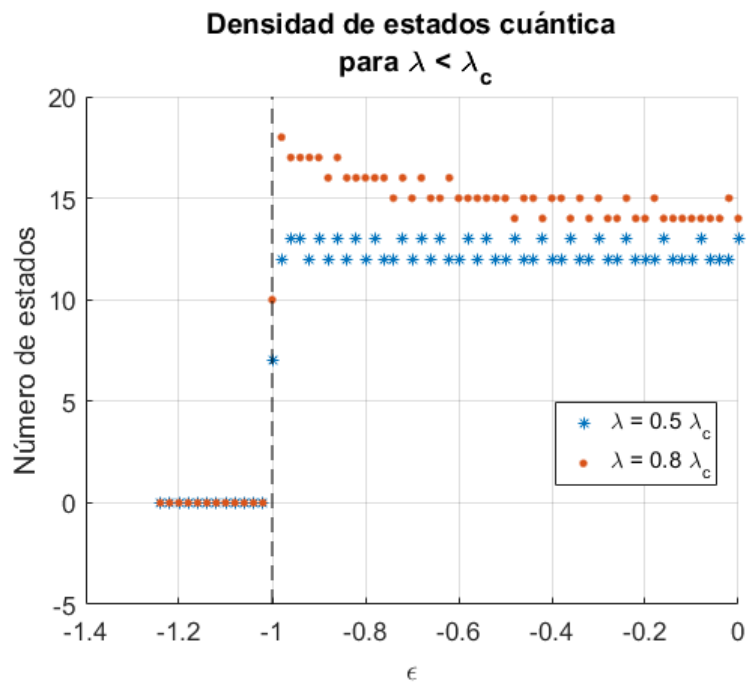


Figura 3.2: Densidad de estados obtenida mediante simulación numérica para $\lambda = 0.5 \lambda_c$ y $\lambda = 0.8 \lambda_c$. Se ha tomado $\Omega = 1089$ J, $\omega_0 = 1$ J y $n = 3000$ fotones. El valor de la energía crítica $\epsilon = -1$ está marcado con una línea discontinua. Como los valores λ son menores que λ_c , no se ha dado la transición de fase en el estado fundamental, así que tampoco puede darse la transición en los estados excitados. Por eso, se observa en ambos casos que no se produce una divergencia en la densidad de estados al acercarnos al nivel $\epsilon = -1$, sino que el número de estados se mantiene aproximadamente constante a uno y otro lado.

Para facilitar la interpretación, hemos decidido escalar los valores de energía, dividiendo por el valor absoluto de la energía del pico que separa los pozos, $|E_c| = \frac{\Omega}{2}$. Así, si llamamos ϵ a los valores escalados de energía, la divergencia debe darse en el valor $\epsilon = -1$.

En las Figuras 3.2 y 3.3, hemos representado los resultados obtenidos para cuatro valores distintos de λ , dos inferiores a λ_c y dos superiores. Hemos considerado el rango desde $\epsilon = -1,25$ hasta $\epsilon = 0$. Los intervalos de recuento los hemos tomado con una anchura $\Delta\epsilon = 0.02$. Para un valor λ inferior a λ_c , todavía no ha tenido lugar la rotura de simetría

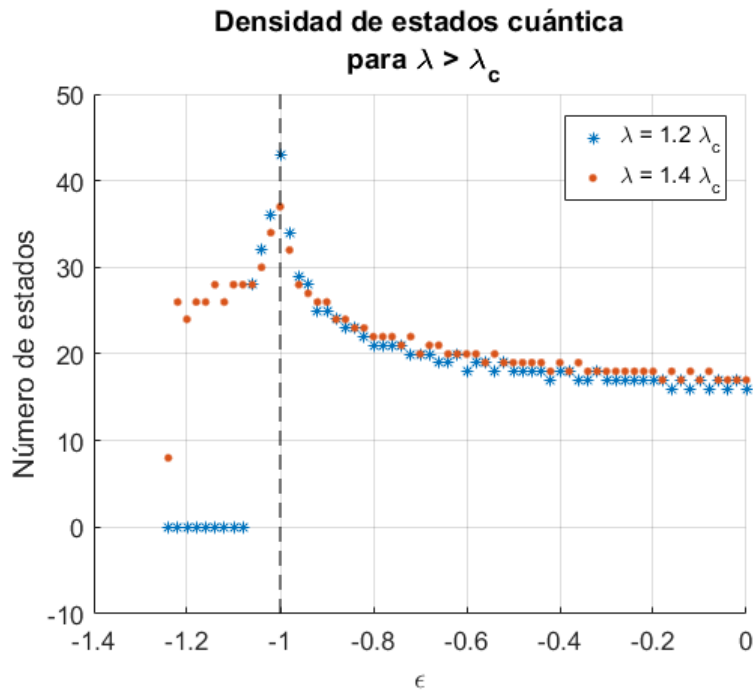


Figura 3.3: Densidad de estados obtenida mediante simulación numérica para $\lambda = 1.2 \lambda_c$ y $\lambda = 1.4 \lambda_c$. Se ha tomado $\Omega = 1089$ J, $\omega_0 = 1$ J y $n = 1000$ fotones. El valor de la energía crítica $\epsilon = -1$ está marcado con una línea discontinua. Se observa como ambas curvas presentan un aumento en el número de estados al acercarse al nivel crítico $\epsilon = -1$, siendo especialmente claro en el caso $\lambda = 1.2 \lambda_c$, lo que parece indicarnos que ha tenido lugar la transición de fase.

del estado fundamental, así que tampoco puede ocurrir la transición de fase de los estados excitados. Los resultados concuerdan, pues vemos en la Figura 3.2 como el número de estados no presenta ninguna divergencia ni acumulación cerca del valor $\epsilon = -1$, sino que prácticamente tiene un valor constante a cada lado de dicho valor en el rango considerado. Además, otro indicio de que todavía el potencial del sistema es un pozo es el hecho de que la densidad de estados, en ambos casos, cae a 0 justo cuando la energía es inferior a $\epsilon = -1$, pues ese es el valor del mínimo del pozo (téngase en cuenta que para $\epsilon < -1$, las curvas están solapadas).

Por el contrario, para las curvas con $\lambda > \lambda_c$, en la Figura 3.3, se observa el aumento del número de estados en el valor $\epsilon = -1$, indicándonos que ha tenido lugar la transición de fase en los estados excitados, en concordancia con lo que hemos explicado. Los niveles de energía inferiores a $\epsilon = -1$ presentan degeneración y se acumulan al acercarse al nivel crítico, presentando una divergencia en dicho valor; para los niveles con una energía superior al nivel crítico, la degeneración se rompe y el número de estados comienza a decrecer. Al contrario que lo que ocurre en la Figura 3.2, para energías inferiores a $\epsilon = -1$, el número de estados decae a 0 para valores distintos de ϵ en cada curva. Esto se debe a que el potencial tiene la forma de dos pozos, y recordemos que los mínimos del pozo ahora sí dependían

del valor de λ considerado. Así, para $\lambda = 1.2 \lambda_c$, vemos que la densidad de estados cae a 0 aproximadamente en $\epsilon = -1.05$, mientras que para $\lambda = 1.4 \lambda_c$ no llega a hacerse nula en el rango considerado.

Terminamos esta sección mostrando el espectro de los diez primeros niveles de energía del sistema calculados numéricamente, pero variando λ en lugar de tener un valor fijo, en las Figuras 3.4 y 3.5. Este cálculo no sirve para obtener la densidad de estados, pues solo estamos considerando los diez primeros niveles de energía, pero sí es muy útil para poner de manifiesto todo lo dicho hasta ahora. Así, en la Figura 3.4 vemos que, hasta que no se ha alcanzado el valor $\lambda_c = 16.5$, la energía de los niveles no disminuye por debajo de $\epsilon = -1$ (en verdad disminuye un poco ya que no estamos haciendo un cálculo estrictamente exacto, pues hemos tomado solo 3000 fotones, no infinitos), ya que todavía el potencial no ha cambiado de forma (no ha tenido lugar la rotura de simetría en el estado fundamental). Una vez alcanzado el valor λ_c , el potencial adquiere la forma de dos pozos, cuyo valor mínimo pasa a depender del valor de λ considerado, lo cual se pone de manifiesto en la gráfica, pues los niveles más bajos dejan de tener un valor constante de energía. Así, esta primera figura refleja lo que estudiamos en la transición del estado fundamental.

Una vez superado ese valor crítico, cuando los niveles decaen por debajo de $\epsilon = -1$, presentan degeneración y se acumulan cuando están cercanos a dicha energía crítica. En la Figura 3.5, vemos cómo, efectivamente, cuando nos situamos a una energía menor que $\epsilon = -1$, los niveles energéticos están degenerados (observemos que para $\epsilon < -1$, pasamos de tener diez a cinco líneas) y cerca del valor crítico se produce su acumulación. De nuevo, la acumulación y la rotura de degeneración no se producen en el valor exacto $\epsilon = -1$, sino un poco menor (aproximadamente en $\epsilon = -1.001$), ya que no podemos resolver nuestro hamiltoniano completo de forma exacta, al contar solo con 3000 fotones; sin embargo, queda claro que los cálculos numéricos reflejan perfectamente todas las características de esta transición de fase.

3.2. Estudio analítico

Para un sistema con f grados de libertad y hamiltoniano $H(\vec{x}, \vec{p})$, la densidad de estados viene dada por [23]:

$$\nu(E) = \frac{1}{(2\pi)^f} \int d\vec{x} d\vec{p} \delta [E - H(\vec{x}, \vec{p})], \quad (3.1)$$

donde δ es la función delta de Dirac. En nuestro caso, para obtener una expresión analítica de la densidad de estados, podemos realizar una aproximación semiclásica usando de nuevo

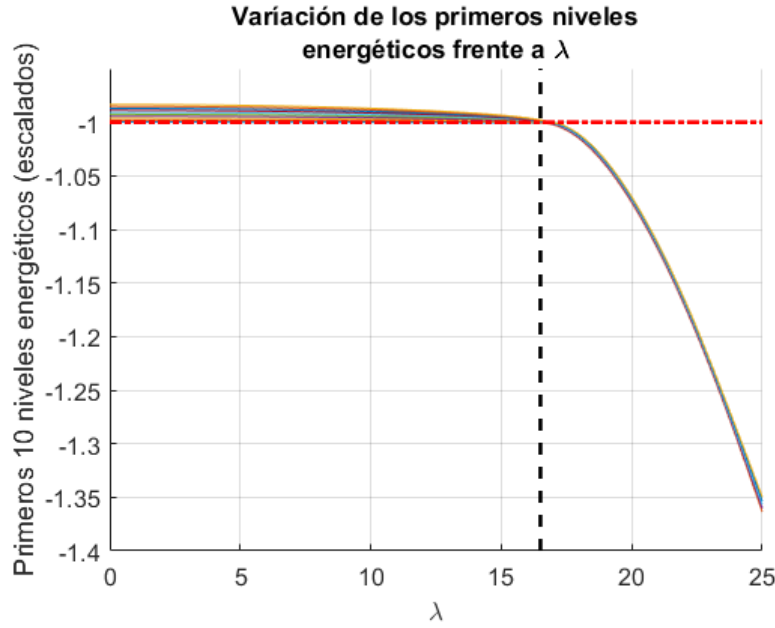


Figura 3.4: Evolución de los diez primeros niveles energéticos frente a λ , calculados de forma numérica. Se ha tomado $\Omega = 1089$, $\omega_0 = 1$ y $n = 3000$ fotones. Para $\lambda < \lambda_c = 16.5$ (marcado con una línea negra discontinua), ningún nivel presenta un valor de energía menor que $\epsilon = -1$ (línea roja de puntos y guiones) pues el potencial del sistema todavía es un pozo armónico; una vez alcanzado el valor λ_c , la energía de los niveles varía con λ pues el mínimo de los dos pozos del valor de dicho parámetro.

el hamiltoniano semiclásico al que habíamos llegado en la ecuación (2.20) para la energía en el estado fundamental:

$$H = \frac{\omega_0}{2}(x^2 + p^2) - \frac{\sqrt{8\lambda^2 x^2 + \Omega^2}}{2}.$$

Este hamiltoniano tiene un solo grado de libertad, luego $f = 1$:

$$\nu(E, \lambda) = \frac{1}{2\pi} \int dx dp \delta \left[E - \frac{\omega_0}{2}(x^2 + p^2) + \frac{\sqrt{8\lambda^2 x^2 + \Omega^2}}{2} \right], \quad (3.2)$$

donde hemos considerado ahora que la densidad de estados depende también de la constante de acoplo λ , al formar parte del hamiltoniano.

Para facilitar cálculos, podemos cambiar λ por un parámetro adimensional. Recordemos que el valor λ_c en el cual cambiaba la forma del potencial era $\frac{\sqrt{\Omega\omega_0}}{2}$. Introduciendo el término $g = \frac{\lambda}{\lambda_c} = \frac{2\lambda}{\sqrt{\Omega\omega_0}}$ podemos poner λ como $\frac{g\sqrt{\Omega\omega_0}}{2}$. De esta manera, tenemos la densidad de estados en función de g como

$$\nu(E, g) = \frac{1}{2\pi} \int dx dp \delta \left[E - \frac{\omega_0}{2}(x^2 + p^2) + \frac{\sqrt{2g^2\Omega\omega_0 x^2 + \Omega^2}}{2} \right]. \quad (3.3)$$

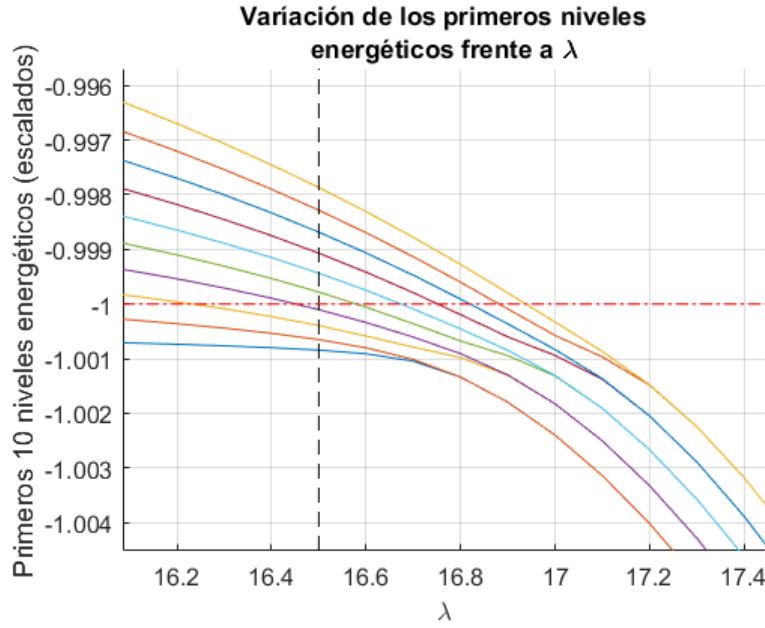


Figura 3.5: Ampliación de la Figura 3.4 en las cercanías de los valores críticos $\lambda_c = 16,5$ y $\epsilon = -1$, marcados con una línea discontinua negra y otra roja, respectivamente. Una vez superado el valor λ_c , se produce la transición de fase de los estados excitados y podemos observar, efectivamente, como los niveles energéticos por debajo del nivel crítico $\epsilon = -1$ se acumulan cerca de dicho valor y presentan degeneración.

A continuación, realizamos el cambio de escala

$$x' = \sqrt{\frac{\omega_0}{\Omega}}x \rightarrow dx = \sqrt{\frac{\Omega}{\omega_0}}dx', \quad (3.4)$$

$$p' = \sqrt{\frac{\omega_0}{\Omega}}p \rightarrow dp = \sqrt{\frac{\Omega}{\omega_0}}dp', \quad (3.5)$$

que deja la integral de la forma

$$\nu(E, g) = \frac{\Omega}{2\pi\omega_0} \int dx' dp' \delta \left[E - \frac{\Omega}{2}(x'^2 + p'^2) + \frac{\sqrt{2g^2\Omega^2x'^2 + \Omega^2}}{2} \right]. \quad (3.6)$$

Sea ahora E_c el valor del hamiltoniano para $x = p = 0$, $E_c = -\frac{\Omega}{2}$, y consideremos el parámetro adimensional $\epsilon = \frac{E}{|E_c|} = \frac{2E}{\Omega}$. Con ϵ , el argumento de la función δ queda

$$\frac{\Omega}{2}[\epsilon - (x'^2 + p'^2) + \sqrt{2g^2x'^2 + 1}].$$

Usando ahora la propiedad de la función δ [24]

$$\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|},$$

tenemos finalmente

$$\nu(\epsilon, g) = \frac{1}{\omega_0 \pi} \int dx' dp' \delta[\epsilon - x'^2 - p'^2 + \sqrt{2g^2 x'^2 + 1}]. \quad (3.7)$$

Hemos llegado así a una expresión de la densidad de estados en función de los parámetros adimensionales g y ϵ . Para continuar, usamos otra propiedad de la función δ [24]: si $f(x)$ es una función que se anula en un conjunto de puntos x_n pero su derivada es no nula en esos puntos, $f'(x_n) \neq 0$, entonces

$$\delta(f(x)) = \sum_{x_n} \frac{\delta(x - x_n)}{|f'(x)|}.$$

Aplicando esta propiedad en nuestro caso, podemos considerar el argumento de la función δ como una función de p' , $f(p') = \epsilon - x'^2 - p'^2 + \sqrt{2g^2 x'^2 + 1}$, que se anula en los puntos $p'_\pm = \pm \sqrt{\epsilon - x'^2 + \sqrt{2g^2 x'^2 + 1}}$. La derivada de la función sería simplemente $f'(p') = -2p'$, así que

$$\begin{aligned} \nu(\epsilon, g) &= \frac{1}{\omega_0 \pi} \int dx' dp' \left(\frac{\delta(p' - p'_+)}{|-2p'_+|} + \frac{\delta(p' - p'_-)}{|-2p'_-|} \right) \\ &= \frac{1}{\omega_0 \pi} \int dx' dp' \frac{\delta(p' - p'_+) + \delta(p' - p'_-)}{2\sqrt{\epsilon - x'^2 + \sqrt{2g^2 x'^2 + 1}}}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

De esta manera, el denominador ya no depende de p' . Hacemos primero la integral sobre esta variable: sabiendo que $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) = 1$ [24] y que estamos integrando en todo el espacio de fases, llegamos a que

$$\nu(\epsilon, g) = \frac{1}{\omega_0 \pi} \int dx' \frac{1}{\sqrt{\epsilon - x'^2 + \sqrt{2g^2 x'^2 + 1}}}. \quad (3.9)$$

Los límites de integración de x' vendrán dados por los puntos de retorno del sistema, aquellos puntos donde la energía E iguala al potencial V_0 dado por la ecuación (2.21),

$$V_0 = \frac{\omega_0}{2} x^2 - \frac{\sqrt{8\lambda^2 x^2 + \Omega^2}}{2}.$$

Teniendo en cuenta las transformaciones realizadas, la igualdad $E = V_0$ se puede expresar como $\epsilon = x'^2 - \sqrt{2g^2 x'^2 + 1}$. Esta ecuación arroja dos puntos de retorno si $g \leq 1$ o si $\epsilon \geq -1$,

$$x'_1 = \sqrt{\epsilon + g^2 + \sqrt{g^4 + 2\epsilon g^2 + 1}}, \quad (3.10)$$

$$x'_2 = -\sqrt{\epsilon + g^2 + \sqrt{g^4 + 2\epsilon g^2 + 1}}, \quad (3.11)$$

mientras que, si $g > 1$ y $\epsilon < -1$, obtenemos cuatro puntos, los dos anteriores y dos más:

$$x'_3 = \sqrt{\epsilon + g^2 - \sqrt{g^4 + 2\epsilon g^2 + 1}}, \quad (3.12)$$

$$x'_4 = -\sqrt{\epsilon + g^2 - \sqrt{g^4 + 2\epsilon g^2 + 1}}. \quad (3.13)$$

La existencia de dos o cuatro puntos se debe a la forma de potencial y el valor de la energía considerado: si $g \leq 1$, es decir, $\lambda \leq \lambda_c$, el potencial es solo un pozo, así que solo hay dos puntos de retorno, mientras que si $g > 1$, el potencial adopta la forma de dos pozos. En este caso, habrá dos puntos de retorno si la energía supera el valor $V_0(x=0) = E_c$ (es decir, $\epsilon \geq -1$) que separa ambos pozos, o cuatro si la energía es inferior ($\epsilon < -1$), pues en ese caso debemos considerar dos puntos por cada pozo. Todo esto se observa mejor en la Figura 3.6.

Aprovechando que la simetría del potencial hace que los puntos de retorno sean simétricos respecto a $x' = 0$ ($x'_2 = -x'_1$ y $x'_4 = -x'_3$) y que el integrando de la expresión (3.9) también lo es, podemos llegar finalmente a

$$\nu(\epsilon, g) = \frac{2}{\omega_0 \pi} \int_{x'_{inf}}^{x'_{sup}} dx' \frac{1}{\sqrt{\epsilon - x'^2 + \sqrt{2g^2 x'^2 + 1}}}, \quad (3.14)$$

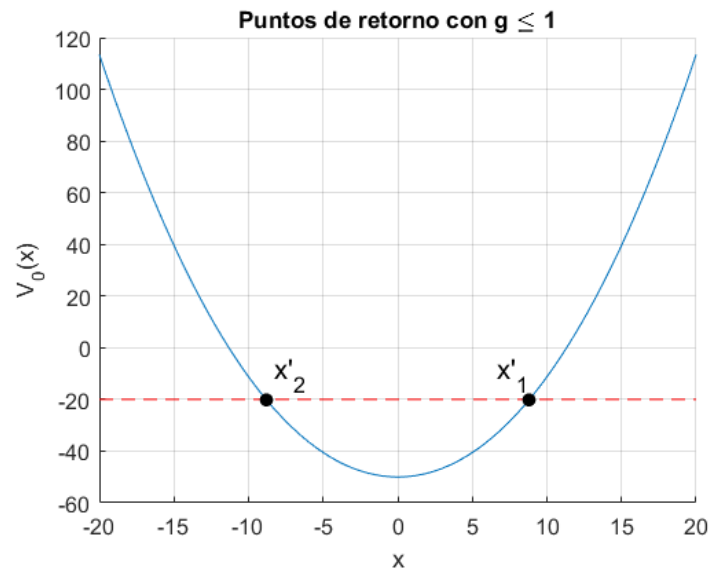
donde

$$x'_{inf} = \begin{cases} x'_3 & \text{si } \epsilon < -1 \\ 0 & \text{si } \epsilon \geq -1, \end{cases} \quad (3.15)$$

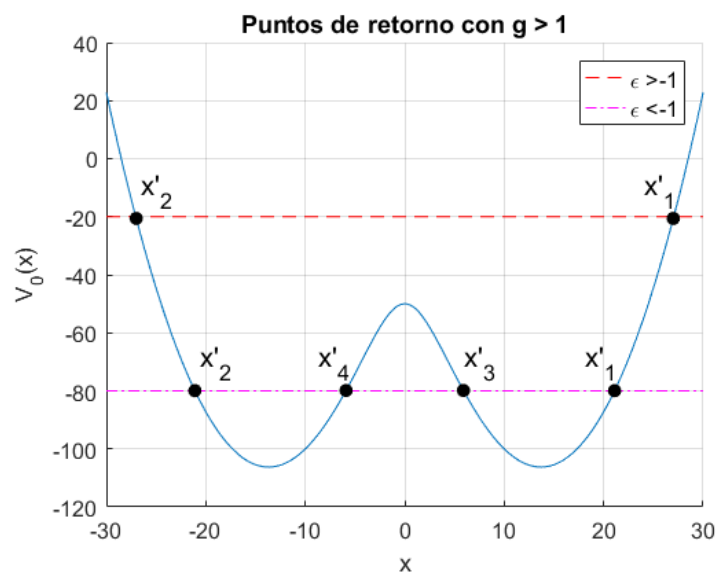
$$x'_{sup} = x'_1. \quad (3.16)$$

La expresión (3.14) es la que usamos finalmente para calcular la densidad de estados. Se trata de una integral sin solución analítica, pero que se puede resolver numéricamente. Sin embargo, si intentamos calcular la integral con un valor $g > 1$ (es decir, cuando efectivamente se da la transición de fase en los estados excitados), el cálculo falla para los puntos más cercanos a $\epsilon = -1$, pues el propio programa nos avisa de que existe una divergencia, y los resultados se van a infinito. Se trata del proceso de acumulación de estados que ya habíamos observado en los cálculos numéricos.

Nuestro siguiente paso será comparar la densidad de estados que nos ofrece (3.14) con la obtenida numéricamente, para comprobar si la aproximación semiclásica que hicimos en el estudio de la transición del estado fundamental sigue siendo válida al tratar la transición en los estados excitados. Sin embargo, para terminar el estudio analítico, antes de pasar a la comparación, vamos a obtener también la forma en la que se produce la divergencia



(a) Potencial con 1 pozo



(b) Potencial con 2 pozos

Figura 3.6: Puntos de retorno del sistema, marcados con puntos negros. Las líneas horizontales representan valores fijos de energía. Cuando el potencial es solo un pozo ($g \leq 1$, a), solo hay dos puntos de retorno, x'_1 y x'_2 , dados por (3.10) y (3.11), sin importar el valor de la energía. Si el potencial tiene dos pozos ($g > 1$, b), hay cuatro puntos si la energía es inferior al valor que tiene en el pico en $x = 0$ ($\epsilon < -1$), x'_1, x'_2, x'_3 y x'_4 , dados por (3.10 - 3.13), y solo dos, x'_1 y x'_2 , en caso contrario ($\epsilon \geq -1$).

en la expresión analítica de la densidad de estados.

3.2.1. La divergencia en la densidad de estados

En este apartado, vamos a calcular la forma en la que diverge la densidad de estados cuando nos acercamos al valor crítico $\epsilon = -1$. Para ello, vamos a aproximarnos a dicho valor partiendo de un nivel de energía inferior pero muy cercano, es decir, de la forma $\epsilon = -1 - \delta\epsilon$, con $0 < \delta\epsilon \ll 1$. Recordando las expresiones (3.10), (3.12) y (3.14), como estamos en un valor $\epsilon < 1$, tenemos:

$$\nu(\epsilon, g) = \frac{2}{\omega_0\pi} \int_{x'_3}^{x'_1} dx' \frac{1}{\sqrt{\epsilon - x'^2 + \sqrt{2g^2x'^2 + 1}}},$$

con

$$\begin{aligned} x'_1 &= \sqrt{\epsilon + g^2 + \sqrt{g^4 + 2\epsilon g^2 + 1}}, \\ x'_3 &= \sqrt{\epsilon + g^2 - \sqrt{g^4 + 2\epsilon g^2 + 1}}. \end{aligned}$$

Para poder realizar la integral, vamos a utilizar desarrollos de Taylor de las distintas expresiones que aparecen en la misma. Empezamos por los límites, x'_1 y x'_3 . Para ello, sustituimos ϵ por $-1 - \delta\epsilon$ y desarrollamos en $\delta\epsilon$ los radicandos de ambos límites:

$$x'_1 \rightarrow 1 - \delta\epsilon + g^2 + \sqrt{g^4 - 2g^2 - 2\delta\epsilon g^2 + 1} = 2(g^2 - 1) + \mathcal{O}(\delta\epsilon), \quad (3.17)$$

donde simplemente hemos desarrollado hasta el orden más bajo; despreciando el resto, tenemos finalmente:

$$x'_1 \approx \sqrt{2(g^2 - 1)}. \quad (3.18)$$

En cuanto al límite inferior:

$$\begin{aligned} x'_3 &\rightarrow 1 - \delta\epsilon + g^2 - \sqrt{g^4 - 2g^2 - 2\delta\epsilon g^2 + 1} \\ &= \left(-1 + \frac{g^2}{(g^2 - 1)}\right)\delta\epsilon + \mathcal{O}((\delta\epsilon)^2) = \frac{\delta\epsilon}{g^2 - 1} + \mathcal{O}((\delta\epsilon)^2), \end{aligned} \quad (3.19)$$

donde ahora debemos desarrollar hasta el primer orden pues el orden cero arroja un valor nulo. De nuevo, despreciando los órdenes superiores, tenemos

$$x'_3 \approx \sqrt{\frac{\delta\epsilon}{g^2 - 1}}. \quad (3.20)$$

A continuación, vamos a aproximar también la expresión dentro de la integral, pero esta vez desarrollamos en x' , no en $\delta\epsilon$. El integrando consiste en la inversa de una raíz

cuadrada, siendo su radicando

$$\epsilon - x'^2 + \sqrt{2g^2x'^2 + 1} = -1 - \delta\epsilon - x'^2 + \sqrt{2g^2x'^2 + 1}, \quad (3.21)$$

y desarrollamos la parte final de la expresión en potencias de x'^2 :

$$-x'^2 + \sqrt{2g^2x'^2 + 1} = 1 + (g^2 - 1)x'^2 + \mathcal{O}(x'^4). \quad (3.22)$$

Despreciando el orden en x'^4 y superiores, llegamos finalmente a

$$\nu(\epsilon, g) \approx \frac{2}{\omega_0\pi} \int_{x'_3}^{x'_1} dx' \frac{1}{\sqrt{2(g^2 - 1)x'^2 - \delta\epsilon}}.$$

Esta integral sí es resoluble, obteniendo como solución

$$\nu(\epsilon, g) \approx \frac{2}{\omega_0\pi} \frac{\ln \left(\frac{2\sqrt{2(g^2 - 1)^2x'^2 - \delta\epsilon} + 2x'\sqrt{g^2 - 1}}{\sqrt{g^2 - 1}} \right) \Big|_{x'_3}^{x'_1}}{\sqrt{g^2 - 1}}. \quad (3.23)$$

Sustituyendo finalmente los valores de x'_1 y x'_3 aproximados (expresiones (3.18) y (3.20)), llegamos a

$$\nu(\epsilon, g) \approx \frac{2}{\omega_0\pi\sqrt{g^2 - 1}} \left(\ln \left(2\sqrt{2(g^2 - 1)^2 - \delta\epsilon} + 2\sqrt{2(g^2 - 1)} \right) - \ln \left(2\sqrt{\delta\epsilon} \right) \right). \quad (3.24)$$

Por último, despreciamos la diferencia en energías $\delta\epsilon$ en el primer logaritmo:

$$\begin{aligned} \nu(\epsilon, g) &\approx \frac{2}{\omega_0\pi\sqrt{g^2 - 1}} \left(\ln \left(4\sqrt{2(g^2 - 1)^2} \right) - \ln \left(2\sqrt{\delta\epsilon} \right) \right) \\ &= \frac{1}{\omega_0\pi\sqrt{g^2 - 1}} \left(\ln \left(8(g^2 - 1)^2 \right) - \ln \left(\delta\epsilon \right) \right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Por tanto, teniendo en cuenta que $\delta\epsilon = -1 - \epsilon$, la densidad de estados diverge de forma logarítmica, según

$$\nu(\epsilon, g) \sim -\frac{\ln(-1 - \epsilon)}{\omega_0\pi\sqrt{g^2 - 1}}, \quad \text{para } (-1 - \epsilon) \ll 1. \quad (3.26)$$

Cuando nos aproximamos a $\epsilon = -1$ con una energía superior, la densidad diverge también de la misma forma logarítmica, pero en este caso la deducción de la expresión (3.26) es más compleja [25].

3.3. Comparación

En esta sección, comparamos el cálculo de la densidad de estados obtenido a partir de las expresiones desarrolladas con la aproximación semiclásica con los resultados de recuento de estados que habíamos obtenido en el cálculo numérico exacto. Para ello, vamos a realizar dos comparaciones. En primer lugar, comparamos la densidad de estados que se obtiene con (3.14)

$$\nu(\epsilon, g) = \frac{2}{\omega_0 \pi} \int_{x'_{inf}}^{x'_{sup}} dx' \frac{1}{\sqrt{\epsilon - x'^2 + \sqrt{2g^2 x'^2 + 1}}},$$

con la obtenida en el apartado numérico, para los mismos valores de λ tomados en ese apartado, en todo el rango de energías que se consideró en los cálculos numéricos ($-1.25 \leq \epsilon \leq 0$). En segundo lugar, para uno de los valores de $g > 1$, comparamos la densidad de estados numérica con la expresión de la divergencia obtenida en (3.26), en un entrono de la energía crítica $\epsilon = -1$.

En los cálculos numéricos, tuvimos la necesidad de tomar un intervalo entre los puntos de cálculo. Por el contrario, la expresión analítica de la densidad de estados alcanzada con la aproximación semiclásica nos permite tomar los puntos de cálculo tan cercanos como queramos. Dicho de otro modo, en los cálculos numéricos, cada punto esta teniendo en cuenta los diversos niveles que caen dentro del intervalo considerado, así que el número de estados obtenido es mayor que el calculado de forma analítica. Por eso, para poder comparar de forma adecuada ambas técnicas en una misma gráfica, hemos aplicado una transformación de escala a las densidades calculadas en el apartado del estudio numérico, ajustándolas al rango de los resultados analíticos. La comparación entre la densidad de estados obtenida por la aproximación semiclásica y la calculada numéricamente, en todo el rango de energías, puede verse en las Figuras 3.7 y 3.8, y la comparación en un entorno de la divergencia, en la Figura 3.9.

Puede observarse que los dos procedimientos llevados a cabo no dan lugar a resultados tan idénticos como ocurría en la transición del estado fundamental (en ese caso, las curvas estaban prácticamente solapadas), pero sí puede apreciarse que la tendencia que siguen es la misma. En particular, cuando todavía no se ha producido el cambio del potencial ($g < 1$, Figura 3.7), vemos que tanto los cálculos numéricos como los analíticos indican que la densidad de estados no sufre ninguna divergencia, sino que toma un valor aproximadamente constante a ambos lados del valor crítico $\epsilon = -1$. Por tanto, tanto los cálculos numéricos como los analíticos nos indican que ente caso no ha tenido lugar la transición de fase.

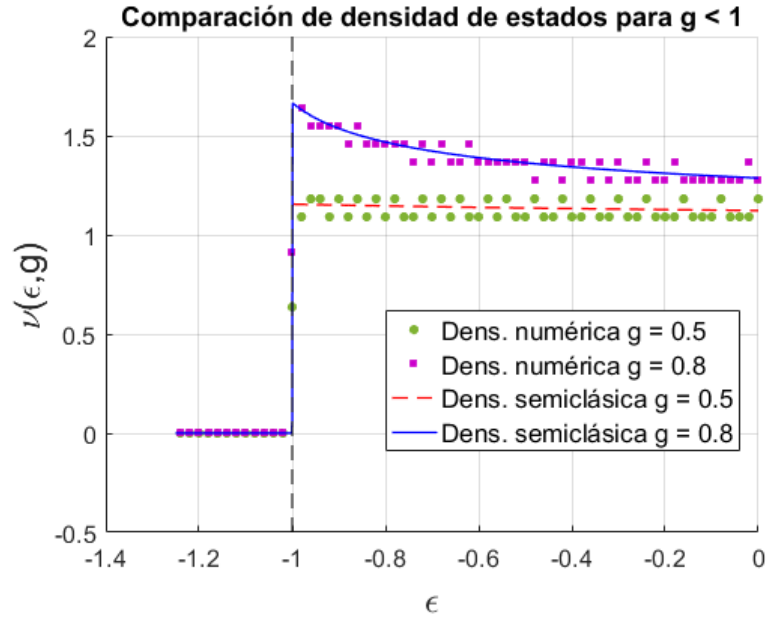


Figura 3.7: Comparación entre las densidades de estados obtenidas mediante la aproximación semiclásica (líneas) y las densidades de estados obtenidas numéricamente (símbolos), transformadas para facilitar la comparación, para los valores $g < 1$. Se ha tomado $\Omega = 1089$, $\omega_0 = 1$ y $n = 3000$ fotones. El valor de la energía crítica $\epsilon = -1$ está marcado con una línea discontinua. Se observa que tanto los resultados analíticos como los numéricos muestran que la densidad de estados no sufre ninguna singularidad. Concluimos pues que ambos métodos nos permiten confirmar que la transición de fase de los estados excitados solo ocurre una vez ha cambiado la forma del potencial ($g > 1$).

Por el contrario, cuando el potencial ha cambiado de forma ($g > 1$, Figura 3.8), los cálculos analíticos, al igual que los numéricos, muestran un aumento en la densidad de estados en torno al valor crítico $\epsilon = -1$. Podemos concluir que ambos procedimientos permiten detectar y caracterizar la transición de fase de los estados excitados.

Estamos de nuevo ante otro caso cercano al límite clásico, ya que hemos tomado un valor grande de $\frac{\Omega}{\omega_0}$. Por eso los resultados cuánticos y clásicos resultan similares en todos los casos y nos permiten extraer las mismas conclusiones; además, la tendencia de los cálculos numéricos a los clásicos es una muestra de su validez. La causa de la diferencia que existe entre los resultados cuánticos y clásicos se debe al tamaño finito del sistema que hemos tomado: los cálculos numéricos nunca pueden ser totalmente exactos si tomamos un número finito de fotones y, además, el límite clásico solo se alcanza estrictamente cuando también $\frac{\Omega}{\omega_0}$ se hace infinito, aunque nosotros lo hemos tomado como 1089. La necesidad de hacer cálculos nos obliga a exigir valores finitos en nuestro sistema; sin embargo, aunque los resultados no sean completamente iguales, sí nos permiten extraer las mismas conclusiones.

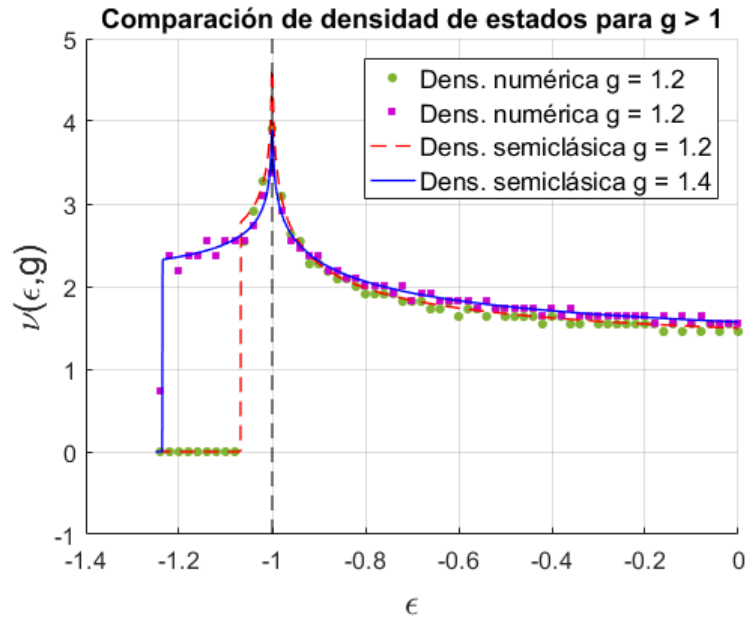


Figura 3.8: Comparación entre las densidades de estados obtenidas mediante aproximación semiclásica (líneas) y las densidades de estados obtenidas numéricamente (símbolos), transformadas para facilitar la comparación, para los valores $g > 1$. Se ha tomado $\Omega = 1089$, $\omega_0 = 1$ y $n = 3000$ fotones. El valor de la energía crítica $\epsilon = -1$ está marcado con una línea discontinua. Tanto la densidad calculada de forma analítica como la obtenida numéricamente presentan un aumento al acercarse al valor $\epsilon = -1$. Esto nos permite concluir que ambos métodos dan cuenta correctamente de la transición de fase que afecta a los estados excitados.

En definitiva, tanto la densidad obtenida de forma analítica a partir del hamiltoniano semiclásico como la densidad exacta obtenida resolviendo numéricamente el hamiltoniano, dan cuenta de una transición de fase en los estados excitados que ocurre una vez ha tenido lugar la transición en el estado fundamental (es decir, tras cambiar la forma del potencial), caracterizada por la aparición de degeneración en los niveles energéticos inferiores a $\epsilon = -1$, y acompañada de una acumulación de estados alrededor de dicho nivel crítico.

En cuanto a la divergencia en la densidad de estados, la comparación entre los cálculos numéricos y la expresión (3.26) la hemos representado, para $g = 1.4$, en la Figura 3.9, donde además de $\frac{\Omega}{\omega_0} = 1089$, hemos tomado también los valores 5000 y 10000, realizando los cálculos en todos los casos con 3000 fotones. La expresión analítica nos indica que la divergencia es de tipo logarítmica. En cuanto al cálculo exacto, aunque no podemos tomar muchos puntos para el cálculo numérico (recordemos que tomar los puntos muy juntos impedía obtener la forma correcta de la densidad de estados), se observa que, aunque los resultados numéricos no se ajustan completamente a los analíticos, como en las Figuras 3.7

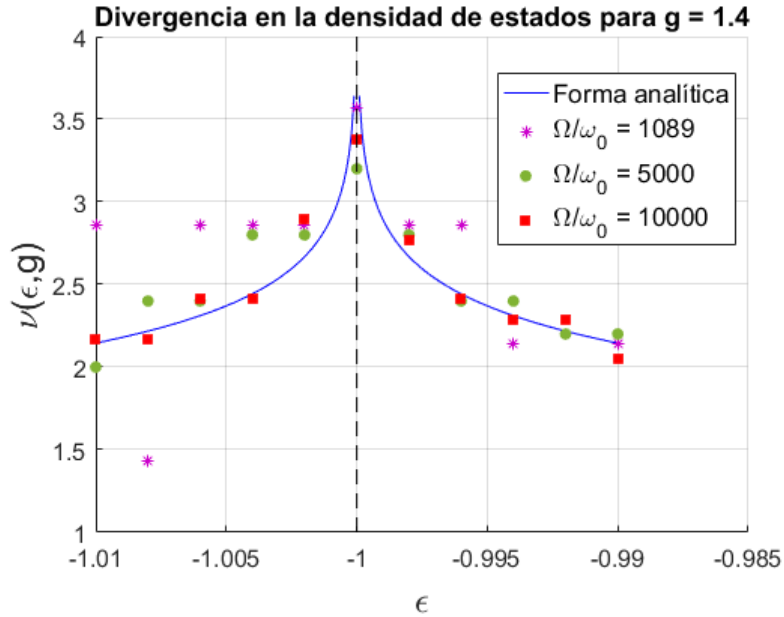


Figura 3.9: Comparación, para el valor $g = 1.4$, entre la expresión analítica de la divergencia en la densidad de estados, de tipo logarítmica (línea continua), y las densidades de estados obtenidas numéricamente (símbolos), transformadas para facilitar la comparación, para los valores $\frac{\Omega}{\omega_0} = 1089, 5000$ y 10000 , en un entorno del valor de la energía crítica $\epsilon = -1$, marcado con una línea discontinua. La tendencia de los cálculos numéricos se aproxima a la expresión analítica en todos los casos, pero la concordancia mejora al aumentar el valor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$.

y 3.8, la tendencia es la misma, y la concordancia mejora al aumentar el valor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$, ya que nos acercamos en mayor medida al límite clásico.

3.4. El valor esperado de σ_z en los estados excitados

Terminamos el estudio de la transición de fase en los estados excitados representando cómo varía el valor esperado de σ_z con la energía escalada de los estados excitados ϵ . Se trata de un cálculo numérico similar al que aplicamos para estudiar la variación del valor esperado de σ_z en el estado fundamental respecto a λ , solo que ahora debemos considerar todos los estados del sistema y representamos los valores obtenidos frente a ϵ , no λ . De acuerdo con las secciones anteriores, el cálculo se ha realizado con $\Omega = 1089$, $\omega_0 = 1$ y $n = 3000$ fotones, y hemos considerado el rango de ϵ desde -1.25 hasta 0 . Al igual que la divergencia logarítmica, el cálculo se ha realizado con $g = 1.4$. La representación obtenida puede verse en la Figura 3.10.

Observamos que el valor esperado de σ_z también experimenta una divergencia al aproximarse al valor crítico de la energía $\epsilon = -1$. Por tanto, este parámetro nos sirve como una suerte de parámetro de orden: no lo es estrictamente pues no tiene un valor nulo o

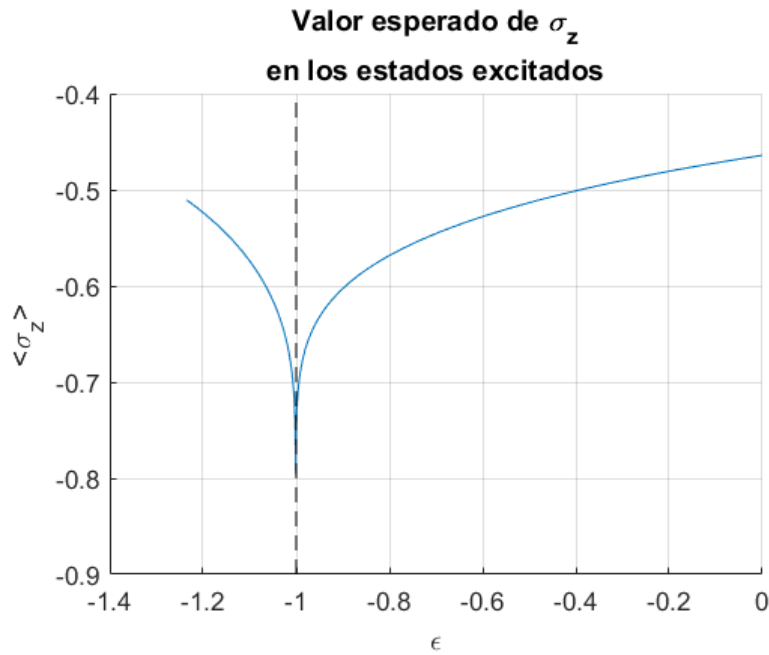


Figura 3.10: Valor esperado de σ_z frente a ϵ , calculado para $\Omega = 1089$, $\omega_0 = 1$, $n = 3000$ fotones y $g = 1.4$. El valor de la energía crítica $\epsilon = -1$ está marcado con una línea discontinua. Puede observarse que el valor esperado de σ_z sufre una divergencia en $\epsilon = -1$. Así, este parámetro también resulta útil para identificar la transición de fase en los estados excitados.

constante en ninguna de las dos fases, pero la divergencia que sufre en $\epsilon = -1$ ayuda a identificar que se ha producido la transición de fase.

Con este resultado, terminamos el estudio de la transición de fase en los estados excitados. Los resultados más importantes que debemos destacar son los siguientes: una vez ha tenido lugar la transición de fase en el estado fundamental, el modelo de Rabi presenta otra transición de fase que afecta a los estados excitados del sistema. La transición se produce porque los niveles de energía inferiores al valor crítico $\epsilon = -1$ presentan degeneración doble, además de que los estados se acumulan en el entorno del valor crítico. La transición se pone de manifiesto causando una divergencia en la densidad de estados, en el valor crítico $\epsilon = -1$. Esta divergencia se observa tanto en el cálculo cuántico exacto de la densidad de estados como en la expresión analítica obtenida por la aproximación semiclassical, siendo mayor el acuerdo entre los resultados al aumentar el valor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$, al acercarnos al límite clásico. La divergencia que se produce es de tipo logarítmica. Por último, el valor esperado de σ_z en los distintos estados del sistema también puede usarse para caracterizar esta transición de fase.

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo, hemos estudiado el modelo de Rabi de interacción radiación-materia, centrándonos en las dos transiciones de fase cuánticas que experimenta el sistema. Para ello, hemos empezado obteniendo resultados puramente cuánticos mediante cálculos numéricos y luego hemos realizado una aproximación semiclásica para llegar a expresiones analíticas de los fenómenos que queríamos estudiar, comparando los resultados obtenidos por ambos métodos a la hora de explicar las dos transiciones. Hemos comprobado como ambas técnicas nos llevan a resultados consistentes.

Para estudiar la transición de fase que experimenta el estado fundamental del sistema, hemos empezado haciendo un cálculo cuántico exacto, construyendo la matriz del hamiltoniano en la base del espacio total $|n, s\rangle$, donde n denota el número de fotones y s el estado del átomo ($|\uparrow\rangle$ o $|\downarrow\rangle$) y luego nos hemos centrado en la caja par, para obtener su autovalor más pequeño, que corresponde a la energía del estado fundamental, y estudiar su variación respecto a la constante de acoplo λ . Luego hemos realizado una aproximación semiclásica, sustituyendo los operadores del campo fotónico a^\dagger y a por las variables clásicas x y p , obteniendo la expresión analítica del potencial del sistema. Hemos comprobado, cuando la constante de acoplo λ alcanza un valor crítico $\lambda_c = \frac{\sqrt{\Omega\omega_0}}{2}$, el potencial cambia de un pozo armónico a dos pozos, causando que la energía del estado fundamental deje de tener un valor fijo y tome un valor menor. Para finalizar el estudio de esta transición, también hemos estudiado la forma de dos parámetros de orden, el valor esperado del número de fotones y de σ_z en el estado fundamental, y de las dos primeras derivadas de la energía con respecto a λ , lo que nos ha permitido concluir que la transición de fase es de segundo orden.

Por otro lado, los estados excitados del sistema también experimentan una transición de fase, debido a que, una vez el potencial ha cambiado de forma, los estados con una energía menor que el punto que separa ambos pozos pierden su simetría. Para poder recu-

perar la simetría que requiere el sistema, los estados encerrados en pozos distintos deben combinarse entre sí; la posibilidad de crear una combinación simétrica o antisimétrica hace que estos niveles energéticos presenten degeneración doble, mientras que los niveles que superan la energía de separación de los pozos carecen de ella. Además, los estados comienzan a acumularse cerca de dicho nivel crítico de energía, pues observan una barrera de potencial menor, lo que posibilita más su combinación. Esta transición la hemos estudiado calculando la densidad de estados del sistema, comprobando que, en dicha energía crítica, tiene lugar una divergencia. El cálculo cuántico exacto lo hemos llevado a cabo haciendo un recuento de los autovalores de la matriz completa del hamiltoniano del sistema. Por su parte, la aproximación semiclásica que obtuvimos en el estudio de la transición de fase del estado fundamental, también nos ha permitido obtener una expresión analítica de la densidad de estados del sistema, y de la forma en la que esta diverge, permitiéndonos concluir que se trata de una divergencia logarítmica. Los dos procedimientos nos han permitido concluir que la transición solo tiene lugar una vez que $\lambda > \lambda_c$, pues es necesario que primero haya cambiado la forma del potencial del sistema. Por último, hemos estudiado aquí también la variación del valor esperado de σ_z , pero esta vez en todos los estados del sistema, comprobando que también experimenta una divergencia en el valor crítico de energía $\epsilon = -1$, lo que permite identificar esta transición.

En el estudio de las dos transiciones, ha estado presente el concepto del límite clásico del sistema: hemos podido comprobar que los resultados cuánticos tienden a los clásicos al aumentar el valor del cociente $\frac{\Omega}{\omega_0}$. Esto nos ha permitido extraer dos conclusiones: la aproximación semiclásica llevada a cabo es válida, y los cálculos cuánticos son correctos, pues dan cuenta del comportamiento clásico del sistema cuanto más nos acercamos al límite clásico. La manifestación del límite clásico ha sido especialmente clara cuando hemos comprobado que era necesario que el cociente considerado en la segunda transición fuera mayor que en la primera para que los resultados cuánticos y clásicos concordaran: pasamos de estudiar solo el estado fundamental a tener en cuenta todos los estados del sistema. Por tanto, la convergencia de los resultados en el segundo caso requiere un valor mayor de $\frac{\Omega}{\omega_0}$, que aumentamos de 100 a 1089.

Nos gustaría terminar recalcando que todo este estudio lo hemos podido realizar a partir de un hamiltoniano especialmente simple, el hamiltoniano de Rabi, que, básicamente, introduce tan solo un término de interacción entre los hamiltonianos propios de un oscilador armónico y un sistema de dos niveles. Y es que, a pesar de ser un modelo con más de 80 años, su simplicidad permite que se siga utilizando hoy en día, tanto en el desarrollo de modelos matemáticos como en campos de la física moderna; por ejemplo, el avance en circuitos superconductores. Esperamos que este trabajo haya servido para dar una pequeña muestra de las posibilidades que encierra el modelo de Rabi.

Bibliografía

- [1] Rabi, I. I., «On the process of space quantization», *Phys. Rev.*, **49**, 324–328 (1936)
- [2] Casanova, J., Puebla, R., Moya-Cessa, H., and Plenio, M. R., «Connecting n th order generalised quantum Rabi models: Emergence of nonlinear spin-boson coupling via spin rotations», *npj Quantum Information*, **4:47**, 1–7 (2018)
- [3] Jaynes, E. T., and Cummings, F. W., «Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser», *Proc. IEEE*, **51**, 89–109 (1963)
- [4] Forn-Díaz, P., Lisenfeld, J., Marcos, D., García-Ripoll, J. J., Solano, E., Harmans, C. J. P. M., and Mooji, J. E., «Observation of the Bloch-Siegert shift in a qubit-oscillator system in the ultrastrong coupling regime», *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 237001 (2010)
- [5] Niemczyk, T., Deppe, F., Huebl, H., Menzel, E. P., Hocke F., Schwarz, M. J., García-Ripoll, J. J., Zueco, D., Hümmer, T., Solano, E., Marx, A., and Gross, R., «Circuit quantum electrodynamics in the ultrastrong-coupling regime», *Nat. Phys.*, **6**, 772–776 (2010)
- [6] Pedernales, J. S., Lizuain, I., Felicetti, S., Romero, G., Lamata, L., and Solano, E., «Quantum Rabi model with trapped ions», *Sci. Rep.*, **5**, 15472 (2015)
- [7] Braak, D., «Integrability of the Rabi model», *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 100401 (2011)
- [8] Braak, D., Chen, Q.-H., Batchelor, M. T., and Solano, E., «Semi-classical and quantum Rabi models: in celebration of 80 years», *J. Phys. A: Math. Theor.*, **49**, 300301 (2016)
- [9] Chilingaryan, S. A., and Rodríguez-Lara, B. M., «The quantum Rabi model for two qubits», *J. Phys. A: Math. Theor.*, **46**, 335301 (2013)
- [10] Peng, J., Ren, Z., Braak, D., Guo, G., Ju, G., Zhang, X., and Guo, X., «Solution of the two-qubit quantum Rabi model and its exceptional eigenstates», *J. Phys. A: Math. Theor.*, **47**, 265303 (2014)

- [11] Wang, H., He, S., Duan, L., Zhao, Y., and Chen, Q.-H., «Solutions of the quantum Rabi model with two equivalent qubits», *Europhys. Lett.*, **106**, 54001 (2014)
- [12] Duan, L., He, S., and Chen, Q.-H., «Concise analytic solutions to the quantum Rabi model with two arbitrary qubits», *Ann. Phys.*, **355**, 121–129 (2015)
- [13] Zhang, Y.-Z., «On the solvability of the quantum Rabi model and its 2-photon and two-mode generalizations», *J. Math. Phys.*, **54**, 102104 (2013)
- [14] Chilingaryan, S. A., and Rodríguez-Lara, B. M., «Exceptional solutions in two-mode quantum Rabi models», *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **48**, 245501 (2015)
- [15] Duan, L., He, S., Braak, D., and Chen, Q.-H., «Solution of the two-mode quantum Rabi model using extended squeezed states», *Europhys. Lett.*, **112**, 34003 (2015)
- [16] Maciejewski, A. J., Przybylska, M., and Stachowiak, T., «Analytical method of spectra calculations in the Bargmann representation», *Phys. Lett. A*, **378**, 3445–3451 (2014)
- [17] Grimsmo, A. L., and Parkins, S., «Cavity-QED simulation of qubit-oscillator dynamics in the ultrastrong-coupling regime», *Phys. Rev. A*, **87**, 033814 (2013)
- [18] Fox, M., *Quantum Optics: An Introduction*, Oxford University Press (2006)
- [19] Aguilar, J., *Curso de termodinámica*, Editorial Alhambra (1990)
- [20] [http://mipd.snu.ac.kr/upload/board2013_2_1/soft_matter_1\(13\).pdf](http://mipd.snu.ac.kr/upload/board2013_2_1/soft_matter_1(13).pdf)
- [21] Hwang, M.-J. and Choi, M.-S., «Variational study of a two-level system coupled to a harmonic oscillator in an ultrastrong-coupling regime», *Phys. Rev. A*, **82**, 025802 (2010)
- [22] Eisberg, R. and Resnick, R., *Física Cuántica. Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos y Partículas*, Editorial Limusa (1978)
- [23] Stránský, P., Macek, M., and Cejnar, P., «Excited-state quantum phase transitions in systems with two degrees of freedom: Level density, level dynamics, thermal properties», *Ann. Phys.*, **345**, 73–97 (2014)
- [24] Arfken, G. B., and Weber, H. J., *Mathematical Methods for Physicists*, 6th Edition, Elsevier (2005)
- [25] Puebla, R., Hwang, M.-J., and Plenio, M. B., «Excited-state quantum phase transition in the Rabi model», *Phys. Rev. A*, **94**, 023835 (2016)

Apéndice. Códigos Matlab

Presentamos aquí los diversos códigos Matlab que hemos usado para obtener las distintas figuras que aparecen en el trabajo. En cursiva escribimos comentarios para facilitar la comprensión de los códigos, mientras que el texto normal se reserva a los comandos.

Códigos para el estudio de la transición de fase del estado fundamental

Código 1. La energía del estado fundamental frente a λ

El siguiente código permite obtener la energía del estado fundamental del sistema en función de la constante de acoplo, la cual que hemos denotado como λ en estos códigos.

`clear,clc` *Borramos las variables guardadas anteriormente y limpiamos la ventana de comandos.*

Definimos la energía de separación del átomo, denotada por w , y la energía del campo fotónico, que hemos llamado w_0 . En este caso, tomamos los valores $w = 100$ y $w_0 = 1$, valores que usamos de forma habitual en el texto para estudiar la transición de fase del estado fundamental, aunque si el usuario lo desea, pueden definirse otros valores.

`w=100; w0=1;`

`lamax=15;` *Definimos el valor máximo a considerar para la constante de % acoplo; nosotros consideremos el rango de 0 a 15.*

`n=501;` *Número de fotones, más uno, a considerar para los cálculos numéricos. En este caso, hacemos los cálculos con 500 fotones. Debemos sumar uno para considerar también los elementos de matriz con $n = 0$.*

Nuestro siguiente paso es construir la matriz del hamiltoniano que debemos resolver.

Recordemos que, al centrarnos solo en el estado fundamental, basta considerar la caja par de la matriz total del hamiltoniano.

De acuerdo a las ecuaciones (2.9-2.12), la matriz de la caja par solo tiene elementos no nulos en la diagonal principal, la primera diagonal superior y la primera inferior. Empecemos construyendo la diagonal principal. La llamamos "d" y definimos sus elementos con un bucle for según las ecuaciones (2.9) y (2.10).

```
for i=1:n
    d(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i)*w/2;
end
```

Por su parte, las primeras diagonales superior e inferior eran iguales, basta con crear una. Si recordamos las expresiones de (2.11) y (2.12), los elementos de estas diagonales eran raíces cuadradas multiplicadas por la constante de acoplo, lam. De momento, creamos el vector "dl", que consiste en la diagonal sin considerar lam.

```
for i = 1:n-1
    dl(i)=-sqrt(i);
end
```

Y ahora creamos la caja par de la matriz, tomando lam como una variable y definiendo la caja, B, como una función de lam. Primero, definimos una matriz diagonal que solo contenga la diagonal principal.

```
Bd = diag(d);
```

Y luego, dos matrices, B1 y B2, cada una contiene el vector d1; B1 es nula salvo en la diagonal superior, donde colocamos d1, y B2 es análoga con la diagonal inferior.

```
B1 = diag(dl,1);
```

```
B2 = diag(dl,-1);
```

Por último, creamos la caja completa, como una función de lam, de tal manera que

lam aparezca multiplicando en las diagonales superior e inferior. `@(lam)` nos permite crear una función que dependa de *lam*:

```
B = @(lam) Bd+lam*B1+lam*B2;
```

Ya terminada la caja, nuestro objetivo es estudiar la variación de la energía fundamental con *lam*. Para ello, obtenemos los autovalores de la caja para distintos valores de *lam*, nos quedamos con el más pequeño y los representamos.

Hemos usado un bucle `for` para obtener los autovalores de *B* en función de *lam*, tomando desde *lam* = 0 a *lam* = *lamax* = 15, de 0.1 en 0.1. Primero, definimos el vector de valores de *lam* a utilizar.

```
lam0 = 0:0.1:lamax;
```

Y ahora usamos un bucle `for` para obtener la energía del estado fundamental como el menor autovalor de *B* para cada valor del vector *lam0*.

```
for k = 1:(length (lam0))
```

`[P,D]=eig(B(lam0(k)))`; *eig* nos ofrece en una matriz diagonal *D* los autovalores de la matriz *B*, y en otra matriz *P* los autovectores columna asociados. En este caso, solo debemos preocuparnos de *D*.

`[d,ind] = sort(diag(D))`; con `sort(diag(D))`, ordenamos los elementos de la diagonal de *D* para asegurarnos que el menor autovalor es el primer elemento de la diagonal. El vector creado *ind* nos permite ordenar los autovalores.

```
Ds = D(ind,ind);
```

matriz con los autovalores ordenados.

`D0=diag(Ds)`; finalmente, tomamos solo la diagonal de *Ds*, que son los propios autovalores, y la llamamos *D0*. *D0(1)*, su primer elemento, es el valor de la energía del estado fundamental.

`E0(k)=D0(1)/(w/2)`; creamos el vector *E0* que contiene la energía del estado fundamental escalada, dividiendo por el valor absoluto de su valor con *lam* = 0, *w/2*

```
end
```

Cada componente de $E0$ nos da la energía del estado fundamental para la correspondiente componente de λ . Lo único que queda es representar ambos vectores en una misma gráfica.

`figure(1)` Creamos el entorno de la gráfica.

`hold on` *Hold on* nos permite representat disntistos elementos en la misma gráfica hasta que escribamos el comando `hold off`. A partir de ese momento, cualquier representación que hagamos eleimina las anteriores.

`grid on` Añadimos una cuadrícula

`title({'Variación de la energía del estado'; 'fundamental respecto a λ '})` Título

`xlabel('\lambda')` Etiqueta del eje x

`ylabel('Energía del estado fundamental (escalada)')` Etiqueta del eje y

`ylim([-5,-0.5])` Límites gráficos para la representación en el eje y

`plot(lam0,E0);` Este comando representa los vectores $E0$ frente a λ . Si no añadimos más opciones, une los puntos representados con segmentos rectos. Como los puntos que hemos tomado están muy juntos, la curva representada tiene un perfil suave.

`set(gca,'FontSize',13)` `set(gca, 'FontSize', n)`, con n un número, permite establecer un tamaño general de fuente a los elementos de la gráfica: ejes, etiquetas, leyendas y título.

`hold off` Dejamos de representar objetos en la figura.

Código 2. La energía del estado fundamental frente a λ para distintos valores de $\frac{\Omega}{\omega_0}$

Este código es idéntico al anterior, pero dibuja en una misma gráfica la variación de la energía del estado fundamental respecto a λ para tres cocientes de w/w_0 : 0.01, 1 y 100. Es decir, permite obtener la Figura 2.1

Simplemente debemos retocar el código anterior, creando un bucle `for` con tres iteraciones, donde cada iteración corresponde a una valor de w/w_0 . En cada interacción, se calculan los mismos elementos que en el caso anterior: la matriz B de la caja par y su

menor autovalor para distintos valores de lam.

```

clear,clc
w=[1,10,100];
w0=[100,10,1];
lamax=15;
n=501;
lam0 = 0:0.1:lamax;

for j = 1:3

for i=1:n

d(i)= w0(j)*(i-1) + (-1)^(i)*w(j)/2;

end

for i = 1:n-1

dl(i)=-sqrt(i);

end

Bd = diag(d);
B1 = diag(dl,1);
B2 = diag(dl,-1);
B = @(lam) Bd+lam*B1+lam*B2;

for k = 1:(length(lam0))

[P,D]=eig(B(lam0(k)));

[d,ind] = sort(diag(D));
Ds = D(ind,ind);
D0=diag(Ds);
E0(j,k)=D0(1)/(w(j)/2); En este caso, en vez de crear un vector, creamos una matriz,
donde cada fila j, desde 1 hasta 3, corresponde a un valor del cociente w/w0 y contiene la
energía del estado fundamental para los distintas componentes de l0 para ese cociente.

```

```

end

end

figure(1)
hold on
grid on
title('Variación de la energía del estado'; 'fundamental respecto a \lambda')
xlabel('\lambda')
ylabel('Energía del estado fundamental (escalada)')
ylim([-6,-0.5])

```

En este caso, como tenemos distintas representaciones, llamamos a cada una de un modo para poder referenciarlas en la leyenda.

```

p1=plot(lam0,E0(1,:), 'm-');
p2=plot(lam0,E0(2,:), 'b-');
p3=plot(lam0,E0(3,:), 'r');

```

Y creamos la correspondiente leyenda.

```

legend([p1,p2,p3],{'\Omega/\omega_0 = 0.01', '\Omega/\omega_0 = 1', '\Omega/\omega_0 = 100'}, 'FontSize', 14)

```

Si definimos un tamaño de fuente en la leyenda, permanecerá incluso aunque después definamos otro con `set(gca)`

Es importante resaltar que, una vez el programa nos devuelve la gráfica, podemos clicar sobre la leyenda y arrastrarla para colocarla en otra posición, en aquellos casos donde la posición en la que se sitúa por defecto, en la esquina superior derecha, no sea la más conveniente.

```

set(gca, 'FontSize', 13)
hold off

```

Código 3. El valor esperado del número de fotones y de σ_z en el estado fundamental

Los dos códigos siguientes son similares a los dos primeros; en este caso, en vez de calcular la energía del estado fundamental, calcula el valor esperado del número de fo-

tones y del operador σ_z en dicho estado. La construcción de la matriz de la caja par es exactamente la misma, el único cambio que hay respecto a los dos primeros códigos es que ahora debemos trabajar con el autovector asociado al primer autovalor, en lugar de con el autovalor directamente.

Como antes, presentamos primero un código para un valor concreto del cociente w/w_0 , y luego otro código que permite la comparación entre tres valores del cociente.

```
clear,clc
w=100;
w0=1;
lamc=sqrt(w*w0)/2;
lamax=35;  Esta vez permitimos un rango mayor de lam, de 0 a 35
n=501;
```

```
for i=1:n
```

```
    d(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i)*w/2;
```

```
end
```

```
for i = 1:n-1
```

```
    dl(i)=-sqrt(i);
```

```
end
```

```
Bd = diag(d);
```

```
B1 = diag(dl,1);
```

```
B2 = diag(dl,-1);
```

```
B = @(lam) Bd+lam*B1+lam*B2;
```

```
lam0 = 0:0.1:35;  Tomamos de nuevo los valores de lam de 0.1 en 0.1.
```

A continuación, debemos obtener los valores esperados que buscamos, tal como se dan en las expresiones (2.30) y (2.31). Podemos poner estos sumatorios en forma de productos escalares, si simplemente ponemos:

$$\langle a^\dagger a \rangle = (a_0^2, a_1^2, \dots, a_{500}^2) \cdot fot,$$

$$\langle \sigma_z \rangle = (a_0^2, a_1^2, \dots, a_{500}^2) \cdot z,$$

con los vectores $fot = (0, 1, 2, \dots, 500)$ y $z = (-1, 1, -1, \dots)$

Necesitamos pues crear los vectores los vectores fot y z , el primero es directo pues no es más que crear la sucesión $1, 2, \dots, 500$:

```
fot=0:1:n-1;
```

mientras que z lo creamos con un bucle `for`

```
z=[];
for i = 1:n
z(i)=(-1)^i;
end
```

Ahora, realizamos el bucle `for` para obtener, en este caso, el primer autovector de B para cada componente de $lam0$, y hacemos los productos escalares necesarios.

```
for k = 1: length(lam0)

[P,D]=eig(B(lam0(k)));

[d,ind] = sort(diag(D));
```

$P_s = P(:,ind)$; En este caso, creamos una matriz con los autovectores ordenados asegurándonos que el primer autovector es efectivamente el que corresponde al estado fundamental.

```
P0=Ps(:,1); Primer autovector
```

```
P02=P0.^2; Vector de las componentes al cuadrado
```

$dot(A,B)$ devuelve el producto escalar de A y B .

$n_0(k) = \text{dot}(P02, \text{fot}) / (n-1);$ Hemos escalado el valor esperado del número de fotones dividiendo por el número total, $n-1$

$z_0(k) = \text{dot}(P02, z);$

end

figure(1)

hold on

grid on

title('Variación del valor esperado del n° fotones', 'en el estado fundamental frente a λ ')

xlabel(' λ ')

ylabel('< $a^{\dagger} + a$ > / n')

plot(lam0, n0)

plot([lamc, lamc], [-0.2, 1], 'k- -'), Marcamos con una línea discontinua donde se da el valor crítico $lamc$

set(gca, 'FontSize', 13)

hold off

figure(2)

hold on

grid on

title({'Variación del valor esperado de σ_z ', 'en el estado fundamental frente a λ '})

xlabel(' λ ')

ylim=([-1.2, 0]);

ylabel('< σ_z >')

plot([lamc, lamc], [-1.2, 0], 'k- -')

plot(lam0, z0);

set(gca, 'FontSize', 13)

hold off

Código 4. El valor esperado del número de fotones y de σ_z en el estado fundamental para distintos valores de $\frac{\Omega}{\omega_0}$

Este es el mismo código anterior pero realizado para tres valores del cociente w/w_0 : 100, 500 y 1000. Hemos seleccionado los valores de w y w_0 de tal manera que, además de obtener los cocientes deseados, tengamos en todos los casos el mismo valor de $\text{lamc} = 5$, facilitando la comparación. Este código obtiene las Figuras 2.5 y 2.6.

```
clear,clc
w=[100,sqrt(50000),sqrt(100000)];
w0=[1,sqrt(1/5),sqrt(1/10)];
lamax=35;
n=501;
lamc = sqrt(w.*w0)/2;    vector con los lamc de cada cociente, para comprobar que efectivamente todos son 5.
```

```
    lam0 = 0:0.1:lamax;
```

```
    fot=0:1:n-1;
```

```
    z=[];
```

```
    for i = 1:n
```

```
        z(i)=(-1)^i;
```

```
    end
```

```
        for j=1:3
```

```
            for i=1:n
```

```
                d(i)= w0(j)^(i-1) + (-1)^i*w(j)/2;
```

```
            end
```

```
        for i = 1:n-1
```

```
            dl(i)=-sqrt(i);
```

```
        end
```

```
        Bd = diag(d);
```

```
        B1 = diag(dl,1);
```

```
        B2 = diag(dl,-1);
```

```
        B = @(lam) Bd+lam*B1+lam*B2;
```

```
        for k = 1: length(lam0)
```



```

[P,D]=eig(B(lam0(k)));

[d,ind] = sort(diag(D));

Ps = P(:,ind);
P0=Ps(:,1);
P02=P0.^2;
n0(j,k)=dot(P02,fot)/(n-1);
z0(j,k)=dot(P02,z);

end

end

figure(1)
hold on
grid on
title({'Variación del valor esperado del n° fotones', 'en el estado fundamental frente a
\lambda'})
xlabel('\lambda')
ylabel('< a^ + a >/n')
p1=plot(lam0,n0(1,:), 'r');
p2=plot(lam0,n0(2,:), 'b- -');
p3=plot(lam0,n0(3,:), 'm- .');
legend([p1,p2,p3],{'\Omega/\omega_0 = 100', '\Omega/\omega_0 = 500', '\Omega/\omega_0
= 1000'}, 'FontSize', 14) plot([lamc(1),lamc(1)],[-0.2,1], 'k-'),
set(gca, 'FontSize', 13)
hold off

figure(2)
hold on
grid on
title({'Variación del valor esperado de \sigma_z', 'en el estado fundamental frente a
\lambda'})
xlabel('\lambda')
ylim=([-1.2,0]);
ylabel('< \sigma_z >')
p1=plot(lam0,z0(1,:), 'r');

```

```

p2=plot(lam0,z0(2,:), 'b- -');
p3=plot(lam0,z0(3,:), 'm- .');
legend([p1,p2,p3],{'\Omega/\omega_0 = 100', '\Omega/\omega_0 = 500', '\Omega/\omega_0
= 1000'}, 'FontSize', 14)
plot([lamc(1), lamc(1)], [-1.2, 0], 'k- -');
set(gca, 'FontSize', 13)
hold off

```

Código 5. La forma del potencial

Este código crea la figura 2.2; se trata simplemente de representar la expresión del potencial del sistema en el estado fundamental, V_0 , para distintos valores de λ . Lo haremos con un bucle for.

```

clear,clc
w=100;
w0=1;
lamc=sqrt(w*w0)/2;

```

Definido el valor crítico de λ donde se da la transición, representamos el potencial frente a cuatro valores de λ : $0.5\lambda_c, \lambda_c, 2*\lambda_c, 2.5*\lambda_c$. es decir, cuatro valores de g .*

```

g = [0.5, 1, 2, 2.5];

```

Definimos el vector de posiciones x que vamos a considerar

```

x = -20:0.1:20;

```

Y creamos, con un bucle for, una matriz de cuatro filas, cada una de ellas contiene los valores de $V_0(\lambda, x)$, para cada uno de los valores de λ considerados, en los distintos puntos del vector x .

```

for i = 1:4
for j = 1:length(x)
V0(i,j)=w0/2*x(j)^2-sqrt(8*(g(i)*lamc*x(j))^2+w^2)/2;
end
end

```

Obtenemos también los mínimos del potencial para los casos $g > 1$ para marcarlos en la representación.

`[min1,i1]=min(V0(3,:));` *min1* es el mínimo en sí, e *i1* nos indica qué componente del vector $V0(3,:)$ corresponde a ese mínimo. Por tanto, $x(i1)$ es la posición del mínimo y, aprovechando la simetría, sabemos que el otro mínimo, de igual valor, se da en $-x(i1)$.

`[min2,i2]=min(V0(4,:));`

Representamos todo

```
figure(1)
hold on
grid on
```

Para esta representación, vamos a usar los colores verde y morado, que no vienen por defecto en las opciones de plot. Debemos especificarlas con 'Color' y a través de vectores de 3 componentes.

```
ver = [0,0.5,0];
mor = [0.49,0.2,0.6];
```

```
plot(x,V0(1,:),'- -','Color',ver,'Linewidth',2)
plot(x,V0(2,:),':','Color',mor,'LineWidth',3.5)
plot(x,V0(3,:), 'r','LineWidth',2)
plot(x,V0(4,:), 'm-.','LineWidth',2)
```

```
plot(0,-50,'k.','MarkerSize',50)    Marcamos también el valor del potencial % en x =
0; dicho valor es -w/2 = -50.
```

```
plot([x(i1),-x(i1)],[min1,min1], 'bs','MarkerFaceColor','b','MarkerSize',20)
plot([x(i2),-x(i2)],[min2,min2], 'bs','MarkerFaceColor','b','MarkerSize',20)
legend({'\lambda_c/2','\lambda_c', '2 \lambda_c','2.5 \lambda_c'},'FontSize',25)
title('Forma de V_0','FontSize',20)
xlabel('x','FontSize',18)
ylabel('V_0(x)','FontSize',18)
set(gca,'FontSize',26)
```

Código 6. Representación de resultados analíticos y numéricos en una misma gráfica

Este código simplemente pone en la misma gráfica la energía del estado fundamental obtenido numéricamente y la dada por las expresiones (2.27) y (2.28), para obtener la Figura 2.3.

Obtenemos la energía del estado fundamental como vimos en el primer código.

```

clear,clc
w=100;
w0=1;
lamc=sqrt(w*w0)/2;
lamax=20;
lam0=0:0.5:lamax;   Vector con los valores de lam para el cálculo numérico.
n=501;

for i=1:n
d(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i)*w/2;
end
for i = 1:n-1
dl(i)=-sqrt(i);
end

Bd = diag(d);
B1 = diag(dl,1);
B2 = diag(dl,-1);
B = @(lam) Bd+lam*B1+lam*B2;

for k = 1:(length(lam0))

[P,D]=eig(B(lam0(k)));

[d,ind] = sort(diag(D));
Ds = D(ind,ind);
D0=diag(Ds);
E0(k)=D0(1)/(w/2);

end

```

Y creamos una función que nos da la energía del estado fundamental en función de λ , a partir de su expresión analítica.

```
Efund=@(lam) -(w/2).*(lam<lamc)-[(w0*w^2)./(16*lam.^2)...
+((lam.^2)/w0)].*(lam>=lamc);
```

lamt = 0:0.1:lamax; *Vector con los valores de λ para el cálculo analítico.*

```
figure (1)
hold on
grid on
title(['Comparación de procedimientos analítico y numérico'])
xlabel('\lambda ')
ylabel('Energía del estado fundamental (escalada)')
plot(lam0,E0,'b*');
plot(lamt,Efund(lamt)/(w/2),'r') Dividimos entre w/2 para representar la energía del
estado fundamental escalada.

plot([lamc,lamc],[-10,0],'k-')
legend('Numérico','Analítico')
set(gca,'FontSize',12)
hold off
```

Código 7. Diferencia entre procedimientos analítico y numérico

El siguiente código permite obtener la Figura 2.4, donde se representa la diferencia entre los resultados analíticos y numéricos para tres valores del cociente w/w_0 : 100, 500 y 1000. Los valores de w y w_0 son los mismos que utilizamos al tratar el valor esperado del número de fotones y de σ_z en el estado fundamental, es decir, en todos los casos $\lambda_{mc} = 5$.

```
clear,clc
w=[100,sqrt(50000),sqrt(100000)];
w0=[1,sqrt(1/5),sqrt(1/10)];
lamc=sqrt(w.*w0)/2;
lamax=10;
lam0=0:0.1:lamax;
n=1501;
```

```

for j = 1:3

    for i=1:n
d(i)= w0(j)*(i-1) + (-1)^(i)*w(j)/2;
end
for i = 1:n-1
dl(i)=-sqrt(i);
end

    Bd = diag(d);
    B1 = diag(dl,1);
    B2 = diag(dl,-1);
    B = @(lam) Bd+lam*B1+lam*B2;

    for k = 1:(length(lam0))

        [P,D]=eig(B(lam0(k)));

        [d,ind] = sort(diag(D));
        Ds = D(ind,ind);
        D0=diag(Ds);
        E0(j,k)=D0(1)/(w(j)/2);

    end

    Efund=@(lam) -(w(j)/2).*(lam<lamc(1))- [(w0(j)*w(j)^2)./(16*lam.^2)...
+(lam.^2)/w0(j)].*(lam>=lamc(1));

    Ea(j,:) = Efund(lam0)/(w(j)/2);    Matriz de 3 filas, cada fila contiene el vector de
valores de la energía fundamental en función de lam, escalada, para cada uno de los co-
cientes w/w0 considerados.

end

    dif=Ea-E0;    Matriz donde cada fila contiene la diferencia entre los cálculos analíticos
y numéricos para cada uno de los cocientes.

figure(1)

```

```

hold on
grid on
title({'Diferencia entre procedimientos','analítico y numérico'})
xlabel('\lambda')
ylabel('Diferencia entre energías (escaladas)')
p1=plot(lam0,dif(1,:), 'b');
p2=plot(lam0,dif(2,:), 'm-');
p3=plot(lam0,dif(3,:), 'r-');
legend([p1,p2,p3],{'\Omega/\omega_0 = 100', '\Omega/\omega_0 = 500', '\Omega/\omega_0
= 1000'}, 'FontSize', 14)
plot([lamc(1), lamc(1)], [0, 0.01], 'k-')
set(gca, 'FontSize', 12)

```

Códigos para el estudio de la transición de fase de los estados excitados

Código 8. Densidad de estados numérica

*Este código calcula la densidad de estados numérica del sistema para $\lambda = 1.2 * \lambda_c$ y $\lambda = 1.4 * \lambda_c$, permitiendo obtener la Figura 3.3. Para obtener la Figura 3.2, simplemente habría que cambiar los valores que acompañan a λ_c por 0.5 y 0.8, como se indica más abajo.*

```
clear,clc
```

Esta vez, aumentamos el cociente de w/w_0 a 1089 y el número de fotones a 3000.

```

w=1089;
w0=1;
lamc=sqrt(w*w0)/2;
n=3001;

```

Para obtener la densidad de estados, debemos obtener primero los niveles de energía, es decir, los autovalores de la matriz del hamiltoniano del sistema. En este caso, debemos trabajar con la matriz completa, no solo con la caja par.

Primero, creamos la diagonal de la caja impar, id:

```

for i=1:n
id(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i+1)*w/2;
end

```

Luego, la de la caja par, pd:

```

for i=1:n
pd(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i)*w/2;
end

```

`d=[id,pd];` *Diagonal principal completa*

Por último, creamos la diagonal superior e inferior, que al igual que con la caja par, son iguales en la matriz completa. Además, las diagonales dentro de una caja son iguales a la de la otra caja. Por tanto para crear la diagonal completa, basta copiar la que teníamos en la caja par y concatenarla con ella misma (introduciendo un 0 ya que existe un elemento nulo entre la diagonal superior (o inferior) de una caja y la siguiente). Hacemos lo mismo que en estudio del caso fundamental: ponemos las raíces cuadradas e incorporamos lam después como una variable.

```

for i = 1:n-1
dl(i)=-sqrt(i);
end

```

`dl=[dl,0,dl];`

Construimos la matriz completa A del mismo modo que en el caso del estado fundamental

```

Ad = diag(d);
A1 = diag(dl,1);
A2 = diag(dl,-1);
A = @(lam) Ad+lam*A1+lam*A2;

```

`c=[1.2,1.4];` *Estos son los coeficientes que multiplican a lamc, podemos cambiarlos por 0.5 y 0.8 para obtener la Figura 3.2 o por aquellos valores que deseemos.*

```

for i=1:2

```


[P,D]=eig(A(c(i)*lamc)); *En este caso solo debemos obtener los autovalores para dos valores de lam.*

```
[d,ind] = sort(diag(D));
Ds = D(ind,ind);
D0=diag(Ds);
```

E0(i,:)=D0/(w/2); *Al contrario que en el caso del estado fundamental, no nos quedamos solo con D0(1), el primer autovalor, sino con todo el vector de autovalores, D0 completo. E0 es una matriz de 2 filas, en la primera guarda los autovalores, escalados, para 1.2 * lamc, y en la segunda, para 1.4 * lamc.*

```
end
```

Tenemos pues los valores de energía escalados, ϵ . Ahora vamos a contar estos valores en intervalos de 0.02 en 0.02, desde -1.25 hasta 0.01. Para cada intervalo, tomaremos como punto para la representación el punto medio del intervalo, es decir, -1.24, -1.22, ..., 0.

Primero creamos el vector de los intervalos, int.

```
int = -1.25:0.02:0.01;
```

Luego contamos, para cada componente k de int, los niveles de energía entre int(k) e int(k+1).

```
for k=1:(length(int)-1)

    de1(k)=sum((E0(1,:)>=int(k)) & (E0(1,:)<(int(k+1))));
    de2(k)=sum((E0(2,:)>=int(k)) & (E0(2,:)<(int(k+1))));
```

Tenemos pues dos vectores con los niveles de energía contados por intervalos. Queda representarlos.

```
end
```

```
eo=-1.24:0.02:0; Vector de puntos medios de los intervalos
figure(1)
hold on
grid on
plot(eo,de1,'*')
```

```
plot(eo,de2,',' , 'MarkerSize',12)
plot([-1,-1],[-5,20], 'k- -')   Maracamos el valor crítico  $\epsilon = -1$ .
```

```
    legend({'\lambda = 1.2 \lambda_c', '\lambda = 1.4 \lambda_c'})
title({'Densidad de estados cuántica', ' para \lambda > \lambda_c'})
xlabel('\epsilon')
ylabel('Número de estados')
set(gca, 'FontSize',13)
```

Código 9. Variación de los diez primeros niveles energéticos frente a λ

Este código estudia la variación de los 10 primeros niveles de energía frente a λ , para obtener la Figura 3.4 y, haciendo zoom sobre la gráfica que devuelve el código, la Figura 3.5. El código en sí no es más que una variación del usado para estudiar la variación con λ de la energía del estado fundamental, simplemente cambia el valor del cociente w/w_0 y que ahora debemos considerar la matriz completa del hamiltoniano.

```
clear,clc
w=1089;
w0=1;
lamc=sqrt(w*w0)/2;
lamax=25;
lam0 = 0:0.1:25;
n=3001;

for i=1:n
id(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i)*w/2;
end

for i=1:n
pd(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i+1)*w/2;
end

d=[id,pd];
for i = 1:n-1
dl(i)=-sqrt(i);
end
```

```
dl=[dl,0,dl];
```

```
Ad = diag(d);
```

```
A1 = diag(dl,1);
```

```
A2 = diag(dl,-1);
```

```
A = @(lam) Ad+lam*A1+lam*A2;
```

```
for k = 1:length(lam0)
```

```
[P,D]=eig(A(lam0(k)));
```

```
[d,ind] = sort(diag(D));
```

```
Ds = D(ind,ind);
```

```
D0=diag(Ds);
```

$E0(:,k)=D0(1:10)/(w/2)$; *Ahora nos quedamos con $D0(1:10)$, los diez primeros niveles de energía, y los escalamos. $E0$ es, en este caso, una matriz de diez filas, donde cada fila contiene la variación de un autovalor*

```
end
```

```
figure(1)
```

```
hold on
```

```
grid on
```

```
title({'Variación de los primeros niveles', 'energéticos frente a \lambda'})
```

```
xlabel('\lambda')
```

```
ylabel('Primeros 10 niveles energéticos (escalados)')
```

```
plot(lam0,E0);
```

```
plot([lamc,lamc],[-1.4,-0.95], 'k- -') Valor crítico de  $\lambda$ 
```

```
plot([0,25],[-1,-1], 'r-.' ) Nivel crítico  $\epsilon = -1$ 
```

```
set(gca, 'FontSize', 12)
```

```
hold off
```

Código 10. Comparación entre las densidades de estado analítica y numérica

El código siguiente pinta en una misma gráfica la densidad de estados numérica, calculada como en el código 8, y la densidad de estados analítica, obtenida en las expresiones (3.14-3.16). Aquí lo hacemos para los valores $\text{lam} = 1.2 * \text{lamc}$ y $1.4 * \text{lamc}$, obteniendo la Figura 3.8; de nuevo puede modificarse el código para considerar otros valores de lam .

```
clear,clc
w=1089;
w0=1;
e0=-1.25:0.001:0;   Vector de puntos donde realizamos el cálculo analítico.
```

$g=[1.2,1.4]$; Los dos valores de $g = \text{lam}/\text{lamc}$ considerados.

Hacemos un bucle for para obtener la matriz de dos filas ds , cada una contiene, para cada valor de g , los valores de la densidad de estados analítica, calculada en los puntos de $e0$.

```
for i = 1:2
```

Creamos la integral f y los límites de integración $x1$ y $x2$ según las expresiones (3.14-3.16), como funciones de la energía escalada ϵ .

```
f=@(e,x) 2/(w0*pi)*1./sqrt(e-x.^2+sqrt(1+2*g(i)^2*x.^2));
x1=@(e) sqrt(e+g(i)^2-sqrt(g(i)^4+2*e*g(i)^2+1))*(e_i-1);
x2=@(e) sqrt(e+g(i)^2+sqrt(g(i)^4+2*e*g(i)^2+1));
```

```
for k=1:length(e0)
ds(i,k)=integral(@(x) f(e0(k),x),x1(e0(k)),x2(e0(k)));
end
end
```

El cálculo numérico es idéntico al del código 8.

```
lamc=sqrt(w*w0)/2;
n=3001;

for i=1:n
```

```

id(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i+1)*w/2;
end

    for i=1:n
pd(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i)*w/2;
end

    d=[id,pd];

    for i = 1:n-1
dl(i)=-sqrt(i);
end

    dl=[dl,0,dl];

    Ad = diag(d);
A1 = diag(dl,1);
A2 = diag(dl,-1);
A = @(lam) Ad+lam*A1+lam*A2;

    int=-1.25:0.02:0.01;
eo=-1.24:0.02:0;;

    for i = 1:2

[P,D]=eig(A(g(i)*lamc));

[d,ind] = sort(diag(D));
Ds = D(ind,ind);
D0=diag(Ds);
E0=D0/(w/2);

    for k=1:(length(int)-1)
de(i,k)=sum((E0>=int(k)) & (E0<int(k+1)));
end

end

```

El programa nos avisa de que el cálculo analítico no puede realizarse en los puntos

más cercanos a $e = -1$, pues tenemos una divergencia.

Tenemos ya la matriz ds con los cálculos analíticos, y la matriz de con los numéricos. Queda representarlos en la misma gráfica.

```
figure(1)
hold on
grid on
```

Los valores numéricos y analíticos no están en la misma escala; hemos encontrado que escalando los resultados numéricos, dividiéndolos por 11, permite poner todos los resultados en la misma escala.

```
verc=[0.5, 0.7, 0.2];    Colores verde claro y púrpura.
pur=[0.8,0,0.8];
```

```
p1=plot(eo,(de(1,:))/11,'o','Color',verc,'MarkerSize',4,'MarkerFaceColor',verc);
p2=plot(eo,(de(2,:))/11,'s','Color',pur,'MarkerSize',4,'MarkerFaceColor',pur);
```

```
p3=plot(e0,ds(1,:),'r-','LineWidth',1);
p4=plot(e0,ds(2,:),'b','LineWidth',1);
plot([-1,-1],[-1,5],'k-')
legend([p1,p2,p3,p4],{'Dens. numérica g = 1.2', 'Dens. numérica g = 1.2', 'Dens. semiclási-
ca g = 1.2', 'Dens. semiclásica g = 1.4'},'FontSize',13)
title('Comparación de densidad de estados para g > 1')
set(gca,'FontSize',12)
xlabel('\epsilon','FontSize',18)
ylabel('\nu(\epsilon,g)','FontSize',18)
```

Código 11. La divergencia en la densidad de estados

Este código nos da la Figura 3.9, comparando la expresión analítica de la divergencia en la densidad de estados, (3.26), con la densidad calculada de forma numérica, en el entorno $(-1.01, 0.99)$ de la divergencia en el valor $\epsilon = -1$, para tres valores distintos de $\frac{\Omega}{\omega_0}$. Utilizamos únicamente el valor de $g = 1.4$.

```
clear,clc
w=[1089,5000,10000];
```

```
w0=1;
n=3001;
g=1.4;
```

$e0=-1.01:0.0001:-0.99;$ *Puntos para el cálculo de la expresión analítica de la divergencia.*

Creamos, con un bucle for, el vector dv que contiene, en cada componente de e0, el valor analítico de la divergencia.

```
for k=1:length(e0)
dv(k)=(log(8*(g^2-1)^2)-log(abs(-1-e0(k))))/(w0*pi*sqrt(g^2-1));
end
```

El cálculo numérico de los densidad de estados es el mismo que se vio en el código 8, solo que ahora debemos hacer un bucle for para considerar los 3 valores de w.

```
lamc=sqrt(w.*w0)/2;
int=-1.011:0.002:-0.989;
eo=-1.01:0.002:-0.99;

for j = 1:3

for i=1:n
id(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i+1)*w(j)/2;
end

for i=1:n
pd(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i)*w(j)/2;
end

d=[id,pd];

dl=[];
for i = 1:n-1
dl(i)=-sqrt(i);
end

dl=[dl,0,dl];
```

```

Ad = diag(d);
A1 = diag(dl,1);
A2 = diag(dl,-1);
A = @(lam) Ad+lam*A1+lam*A2;

```

```

[P,D]=eig(A(g*lamc(j)));

```

```

[d,ind] = sort(diag(D));
Ds = D(ind,ind);
D0=diag(Ds);
E0=D0/(w(j)/2);
for k=1:(length(int)-1)
de(j,k)=sum((E0>=int(k)) & (E0<int(k+1)));
end

```

```

end

```

```

figure(1)
hold on
grid on
p1=plot(e0,dv,'b');
verc=[0.5, 0.7, 0.2];
pur=[0.8,0,0.8];
p2=plot(eo,(de(1,:))/1.4,'*', 'MarkerSize',6.5,'Color',pur);
p3=plot(eo,(de(2,:))/5,'.', 'MarkerSize',20,'Color',verc);
p4=plot(eo,(de(3,:))/8.3,'rs', 'MarkerFaceColor','r');
plot([-1,-1],[1,4], 'k- -');

```

```

legend([p1,p2,p3,p4],{'Forma analítica', '\Omega/\omega_0 = 1089', '\Omega/\omega_0
= 5000', '\Omega/\omega_0 = 10000'}, 'FontSize',13)
title('Divergencia en la densidad de estados para g = 1.4')
set(gca, 'FontSize',12)
xlabel('\epsilon', 'FontSize',18)
ylabel('\nu(\epsilon,g)', 'FontSize',18)

```


Código 12. El valor esperado de σ_z en los estados excitados

El siguiente código calcula el valor esperado de σ_z para todo los estados del sistema con energía escalada entre -1.25 y 0. Es similar al código 3, que nos daba el valor esperado en el estado fundamental, la diferencia es que ahora debemos considerar la matriz completa del hamiltoniano.

```

clear,clc
w=1089;
w0=1;
lamc=sqrt(w*w0)/2;
n=3001;

for i=1:n
id(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i+1)*w/2;
end

for i=1:n
pd(i)= w0*(i-1) + (-1)^(i)*w/2;
end

d=[id,pd];

for i = 1:n-1
dl(i)=-sqrt(i);
end

dl=[dl,0,dl];

Ad = diag(d);
A1 = diag(dl,1);
A2 = diag(dl,-1);
A = @(lam) Ad+lam*A1+lam*A2;

```

Construimos el vector z que usamos para calcular el producto escalar que nos da el valor esperado de σ_z , tal como en el estado fundamental.

```

z=[];
for i = 1:n

```

```
z(i)=(-1)^(i+1);
z(i+n)=(-1)^i;
end
```

```
[P,D]=eig(A(1.4*lamc));
```

```
[d,ind] = sort(diag(D));
```

```
Ds = D(ind,ind); Ordenamos los autovalores y autovectores correspondientes
```

```
Ps = P(:,ind);
```

```
D0=diag(Ds);
```

```
E=D0/(w/2);
```

```
P2=Ps.^2; Matriz con las componentes de los autovectores al cuadrado
```

```
Sz=P2*z; Vector de valores esperados, se trata de los productos escalares de cada columna de P2 con z
```

Acorde a las otras representaciones, representamos solo para los valores de energía escalada menores o iguales que 0. Seleccionamos estos valores.

```
ind= (E<=0);
```

Y los representamos

```
figure(1)
```

```
hold on
```

```
grid on
```

```
plot(E(ind),Sz(ind))
```

```
plot([-1,-1],[-0.9,-0.4], 'k-')
```

```
title({'Valor esperado de \sigma.z', 'en los estados excitados'})
```

```
xlabel('\epsilon')
```

```
ylabel('<\sigma.z>')
```

```
set(gca,'FontSize',13)
```

Código 13. Diversas representaciones del potencial

Este último código lo hemos usado para realizar las Figuras 3.1 y 3.6, representaciones del potencial del sistema en distintas situaciones que hemos necesitado para ilustrar las explicaciones desarrolladas en el texto.

Empezamos representando la expresión analítica del potencial para dos valores de lam

distintos, uno menor que lamc y otro mayor, y marcamos también los puntos de retorno del sistema.

```
clear,clc
w=100;
w0=1;
lamc=sqrt(w*w0)/2;
```

La expresión analítica del potencial viene dada por:

$$V0=@(lam,x) w0/2*x.^2-sqrt(8*(lam*x).^2+w^2)/2;$$

*Empezamos con el potencial con un solo pozo, lam = 0.5 * lamc*

```
x01=-20:0.1:20;
V01=V0(0.5*lamc,x01);
```

Y para un nivel de energía -20, buscamos los puntos de retorno. Aquellos donde se da la igualdad entre V0 y -20. Como no podemos asegurar que nuestro vector V01 contenga el valor -20, buscamos el elemento más cercano en valor absoluto.

```
vc1=abs(-20-V01);
```

[val1,i1]=min(vc1); Nos da el valor del mínimo y la componente en la que se da. x(i1) es por tanto la posición del mínimo. Como el potencial es simétrico, el otro mínimo está en -x(i1).

Representamos todo.

```
figure(1)
hold on
grid on
plot(x01,V01)
plot([-20,20],[-20,-20], 'r- -')
plot(x01(i1),V01(i1), 'k.', 'MarkerSize',25)
plot(-x01(i1),V01(i1), 'k.', 'MarkerSize',25)
text(x01(i1)+0.5,V01(i1)+10, 'x" _2', 'FontSize',15)
text(-x01(i1)-2.2,V01(i1)+10, 'x" _1', 'FontSize',15)
title('Puntos de retorno con g \leq 1')
```

Le damos también un nombre a los puntos en la gráfica.

```
xlabel('x','FontSize',13)
ylabel('V_0(x)','FontSize',13)
set(gca,'FontSize',12)
```

Ahora hacemos lo mismo para un potencial de dos pozos, con $\text{lam} = 2\text{lamc}$.*

```
x02=-30:0.1:30;
V02=V0(2*lamc,x02);
```

Ahora tomaremos dos niveles de energía, uno a -20 y otro a -80. El nivel -20 se trata igual que en el caso anterior, pues está por encima del punto que separa los pozos.

```
vc21=abs(-20-V02);

[val21,i21]=min(vc21);
```

Pero el nivel -80 tiene cuatro puntos de retorno, es decir, tenemos que calcular dos puntos de retorno dentro de un mismo pozo. Por tanto, debemos dividir nuestro V02 en dos trozos, uno para el borde exterior del pozo y otro para el interior, y calcular con cada uno el mínimo correspondiente.

```
ind22a=x02<-20;
vc22a=abs(-80-V02(ind22a));

[val22a,i22a]=min(vc22a);
```

```
ind22b=(-20<x02) & (x02<0);
vc22b=abs(-80-V02(ind22b));
```

[val22b,i22b]=min(vc22b); A la posición de este mínimo debemos sumar los elementos que no hemos considerado del vector de posiciones; basta sumarle al índice el número de la primera componente considerada menos uno.

```
desp=find(ind22b);
i22b = i22b + desp(1) -1;
```

Y representamos

```
figure(2)
hold on
```

```

grid on
plot(x02,V02)
p1=plot([-30,30],[-20,-20],'r-');
plot(x02(i21),V02(i21),'k.','MarkerSize',25)
plot(-x02(i21),V02(i21),'k.','MarkerSize',25)
p2=plot([-30,30],[-80,-80],'m-');
plot(x02(i22a),V02(i22a),'k.','MarkerSize',25)
plot(-x02(i22a),V02(i22a),'k.','MarkerSize',25)
plot(x02(i22b),V02(i22b),'k.','MarkerSize',25)
plot(-x02(i22b),V02(i22b),'k.','MarkerSize',25)
text(x02(i22a)+0.5,V02(i22a)+10,'x" _2', 'FontSize',15)
text(-x02(i22a)-3,V02(i22a)+10,'x" _1', 'FontSize',15)
text(x02(i22b)-2.8,V02(i22b)+10,'x" _4', 'FontSize',15)
text(-x02(i22b),V02(i22b)+10,'x" _3', 'FontSize',15)
legend([p1,p2],{'\epsilon >-1','\epsilon <-1'}, 'FontSize',12)
title('Puntos de retorno con g > 1', 'FontSize',15)
xlabel('x', 'FontSize',13)
ylabel('V_0(x)', 'FontSize',13)
set(gca, 'FontSize',12)

```

Por último, la figura 3.1 se obtiene igual que la figura anterior, solo que esta vez no marcamos los puntos de retorno, sino que usamos su posición para representar solo los trozos de las líneas horizontales entre los puntos de retorno, dejando sin representar la parte que se sale del pozo.

Tomamos los siguientes niveles de energía: -10, -40, -52, -56, -60, -75 y -90.

```

v1=abs(-10-V02);

[m1,ps1]=min(v1);

v2=abs(-40-V02);

[m2,ps2]=min(v2);

```

Los puntos de retorno para los niveles de energía encerrados los calculamos ahora con un for.

```

ia=x02<-15;

```

```

ib=(-15<x02) & (x02<0);
desp=find(ib);
e=[-52,-56,-60,-75,-90];

    for i = 1:length(e)
va=abs(e(i)-V02(ia));

        [ma(i),psa(i)]=min(va);

vb=abs(e(i)-V02(ib));

        [mb(i),psb(i)]=min(vb);

psb(i)=psb(i)+desp(1)-1;

    end

figure(3)
hold on
grid on
plot(x02,V02)
plot([x02(psa1),-x02(psa1)],[V02(psa1),V02(psa1)'],'r- -')
plot([x02(psa2),-x02(psa2)],[V02(psa2),V02(psa2)'],'r- -')
mor = [0.5,0.2,0.6];
verc=[0.5, 0.7, 0.2]
plot([x02(psa(1)),x02(psb(1))],[V02(psa(1)),V02(psb(1))'],'-','Color',mor)
plot([-x02(psa(1)),-x02(psb(1))],[V02(psa(1)),V02(psb(1))'],'-','Color',mor)
plot([x02(psa(2)),x02(psb(2))],[V02(psa(2)),V02(psb(2))'],'-','Color',mor)
plot([-x02(psa(2)),-x02(psb(2))],[V02(psa(2)),V02(psb(2))'],'-','Color',mor)
plot([x02(psa(3)),x02(psb(3))],[V02(psa(3)),V02(psb(3))'],'-','Color',mor)
plot([-x02(psa(3)),-x02(psb(3))],[V02(psa(3)),V02(psb(3))'],'-','Color',mor)
plot([x02(psa(4)),x02(psb(4))],[V02(psa(4)),V02(psb(4))'],'Color',verc)
plot([-x02(psa(4)),-x02(psb(4))],[V02(psa(4)),V02(psb(4))'],'Color',verc)
plot([x02(psa(5)),x02(psb(5))],[V02(psa(5)),V02(psb(5))'],'Color',verc)
plot([-x02(psa(5)),-x02(psb(5))],[V02(psa(5)),V02(psb(5))'],'Color',verc)

title('Transición de fase en los estados excitados')
xlabel('x')
ylabel('V_0(x)')

```

```
set(gca,'FontSize',13)
```