

Caracterización de transiciones de fase cuánticas en modelos algebraicos de sistemas de muchos cuerpos

Tesis presentada por

Ramón del Real Núñez

al programa de doctorado de Física y Matemáticas (“FisyMat”)

para la obtención del grado de doctor en Ciencias Físicas

UNIVERSIDAD DE GRANADA

Granada, 13 de noviembre de 2012



ugr

Universidad
de **Granada**

Editor: Editorial de la Universidad de Granada
Autor: Ramón del Real Núñez
D.L.: GR 1056-2013
ISBN: 978-84-9028-491-9

ELVIRA ROMERA GUTIÉRREZ, Profesora Titular del Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear y MANUEL CALIXTO MOLINA, Profesor Titular del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Granada

HACEN CONSTAR:

Que el trabajo de investigación recogido en la presente memoria titulada “Caracterización de transiciones de fase cuánticas en modelos algebraicos de sistemas de muchos cuerpos” y presentada por Don Ramón del Real Núñez para optar al grado de Doctor por la Universidad de Granada, ha sido realizada en su totalidad bajo nuestra dirección en la Universidad de Granada.

Y para que así conste, en cumplimiento de la legislación vigente, presentamos ante la Comisión de Doctorado de la Universidad de Granada la referida Tesis.

Granada 13 de noviembre de 2012.

Fdo. Elvira Romera Gutiérrez

Fdo. Manuel Calixto Molina

Fdo. Ramón del Real Núñez

Contenido

1. Introducción: Modelo de Dicke y modelo Vibrón	11
1.1. El modelo de Dicke	11
1.1.1. El Hamiltoniano de Dicke	12
1.1.2. El límite termodinámico	14
1.1.2.1. Fase normal	15
1.1.2.2. Fase superradiante	16
1.1.2.3. Transición de fase	17
1.1.2.4. Función de onda del estado fundamental	17
1.1.3. Funciones de onda para j finito	18
1.1.4. Resolución numérica	20
1.1.5. Realizaciones experimentales	21
1.2. Modelo vibrón	22
1.2.1. Modelo algebraico $U(3)$	23
1.2.2. Simetrías dinámicas	25
1.2.2.1. Cadena del oscilador cilíndrico (Cadena I)	26
1.2.2.2. Cadena del oscilador desplazado (Cadena II)	26
1.2.2.3. El hamiltoniano de dos cuerpos	29
1.3. Aproximación variacional en el modelo de Dicke	31
1.3.1. Representación de Holstein-Primakoff y pseudospin grande	31
1.3.2. Estados coherentes adaptados a la simetría de paridad	33
1.4. Aproximación variacional en el modelo vibrón	37
2. Relaciones de incertidumbre entrópicas y QPT	45
2.1. Introduction	45

2.2.	Relaciones de incertidumbre entrópicas en el modelo de Dicke	48
2.2.1.	Modelo de Dicke	48
2.2.2.	Relaciones de incertidumbre variacionales del modelo de Dicke	52
2.3.	Relaciones de incertidumbre entrópicas en el modelo vibrón $U(3)$	57
2.3.1.	Modelo vibrón	57
2.3.2.	Entropía de Rényi y varianzas numéricas	58
2.3.3.	Entropía de Rényi y varianzas variacionales	59
3.	Distribución de Husimi en el modelo de Dicke	75
3.1.	Introducción	75
3.2.	Modelo de Dicke	76
3.3.	Distribución de Husimi con la aproximación de Holstein-Primakoff	77
3.3.1.	Estados coherentes y distribución de Husimi	77
3.3.2.	Momentos, entropía de Rényi-Wehrl y marginales de Husimi	78
3.3.3.	Resultados numéricos	79
3.3.4.	Aproximación variacional de la distribución de Husimi	80
3.3.4.1.	SACS y distribución de Husimi	82
3.3.4.2.	Momentos y entropía de Rényi-Wehrl de Husimi	83
3.3.4.3.	Marginales de la distribución de Husimi	85
3.3.4.4.	Ceros de la distribución de Husimi y QPT	86
3.4.	Distribución de Husimi sin la aproximación de Holstein-Primakoff	87
3.4.1.	Estados coherentes y distribución de Husimi	89
3.4.2.	CSs adaptados a la simetría de paridad y distribución de Husimi	90
3.4.3.	Entropía de Wehrl y distribución de Husimi variacional	91
3.4.4.	Resultados numéricos y variacionales	94
3.4.5.	Ceros de la distribución de Husimi variacional	94
4.	Distribución de Husimi en el modelo vibrón	99
4.1.	Introducción	99
4.2.	Estados coherentes de $SU(3)$ y distribución de Husimi	100
4.2.1.	Estados coherentes de $SU(3)$	100
4.2.2.	Distribución de Husimi	101

4.2.3.	Momentos y entropía de Rényi-Wehrl de Husimi	102
4.2.4.	Resultados numéricos	104
4.3.	Distribución de Husimi variacional	104
4.3.1.	SACS y su distribución de Husimi	106
4.3.2.	Momentos de la distribución de Husimi	109
4.3.3.	Conjetura de Wehrl-Lieb	111
4.3.4.	Ceros de la distribución de Husimi variacional	111
5.	Medidas de entrelazamiento rovibracional en el modelo vibrón	113
5.1.	Introducción	113
5.2.	Modelo vibrón y estados coherentes simetrizados variacionales	115
5.2.1.	Entrelazamiento rovibracional y medidas de deslocalización	117
6.	Conclusiones	125

Resumen

El conocimiento de las transiciones de fase cuánticas es un hecho relevante en los problemas cuánticos de muchos cuerpos. La existencia de transiciones de fase cuánticas está íntimamente ligada con la variación de las fluctuaciones cuánticas y, por lo tanto, las relaciones de incertidumbre juegan un papel central en su análisis. Del mismo modo, resulta muy clarificador el análisis de este fenómeno en el espacio de las fases. Existen multitud de situaciones en física en las que las fluctuaciones cuánticas juegan un papel importante. En este trabajo se han considerado dos modelos paradigmáticos: un modelo de interacción fermión-bosón como es el denominado modelo de Dicke (modelo de gran importancia en óptica cuántica y física mesoscópica) y un modelo de interacción bosón-bosón, el conocido como modelo vibrón $U(3)$ (utilizado en la descripción de transiciones de fase en sistemas bosónicos de muchos cuerpos en física nuclear y molecular).

El primer objetivo de esta tesis ha sido la cuantificación de las transiciones de fase cuánticas mediante relaciones de incertidumbre entrópicas (haciendo uso de las entropías de Rényi). Este estudio se ha llevado a cabo en el capítulo 2 en los modelos de Dicke y vibrón $U(3)$, de forma exacta y mediante aproximaciones variacionales.

En segundo lugar, se ha propuesto el análisis de las transiciones de fase cuánticas en el espacio de las fases. La mecánica cuántica ofrece diferentes distribuciones para este análisis. En los capítulos 3 y 4 se presenta el análisis de estas transiciones de fase mediante la distribución de Husimi (tanto de forma exacta como mediante aproximaciones analíticas variacionales) poniéndose de manifiesto su utilidad mediante el análisis de las razones de participación inversa o la entropía de Wehrl. Asimismo se ha obtenido una caracterización de las distintas fases mediante los ceros de la distribución de Husimi en un contexto variacional para el modelo de Dicke (capítulo 3) y para el modelo vibrón $U(3)$ (capítulo 4).

En el capítulo 5, se ha estudiado el entrelazamiento y la deslocalización en el estado fundamental en el modelo vibrón en dos dimensiones para moléculas de tamaño N finito. Uno de los resultados más interesantes ha sido la manifestación de entrelazamiento rovibracional en la fase “plegada” del modelo vibrón, resultado puesto de manifiesto por primera vez en la literatura y estudiado mediante los cuantificadores usuales: entropía lineal, entropía de von Neumann y la razón de participación inversa. Se ha señalado la importancia de la simetría de paridad para una adecuada descripción del entrelazamiento y deslocalización en el sistema en la aproximación variacional.

Finalmente, en el capítulo 6 se han expuesto las conclusiones de los estudios realizados en esta tesis.

Los resultados obtenidos en este trabajo han sido publicados en las siguientes revistas:

- E. Romera, **R. del Real** and M. Calixto: *Husimi distribution and phase-space analysis of a Dicke-model quantum phase transition*, Phys. Rev. A **85**, 05831 (2012).
- M. Calixto, **R. del Real** and E. Romera: *Husimi distribution and phase-space analysis of a vibron-model quantum phase transition*, Phys. Rev. A **86**, 032508 (2012).
- M. Calixto, E. Romera and **R. del Real**: *Parity-symmetry-adapted coherent states and entanglement in quantum phase transitions of vibron models*, Journal of Physics A **45**, 365301 (2012).
- **R. del Real**, M. Calixto and E. Romera: *Husimi distribution, Wehrl entropy and superradiant phase in spin-boson interactions*, Physica Scripta, in press (2012).
- E. Romera, **R. del Real**, M. Calixto, S. Nagy and A. Nagy: *Rényi entropy of the $U(3)$ vibron model*, Journal of Math. Chem. doi:10.1007/s10910-012-0106-7 (2012).

Capítulo 1

Introducción: Modelo de Dicke y modelo Vibrón

Las transiciones de fase cuánticas (QPTs, Quantum Phase Transitions en inglés) son un hecho relevante en sistemas cuánticos de muchos cuerpos [Sac2000]. Las QPTs generalmente ocurren en sistemas descritos por un hamiltoniano de la forma $H = H_0 + \lambda H_1$, con H_0 resoluble de forma exacta y H_1 un término de interacción, siendo λ el correspondiente parámetro de control de la intensidad de la interacción. Las QPTs ocurren cuando λ alcanza un valor crítico λ_c donde las simetrías (y por tanto las propiedades) del sistema cambian drásticamente. A continuación introduciremos dos modelos paradigmáticos en el estudio de las QPTs. El primero es el modelo de interacción fermión-bosón, el denominado modelo de Dicke. Este modelo fue introducido por Dicke en el año 1954 [Dic1954] y ha sido extensamente utilizado en Óptica Cuántica y más recientemente como modelo en sistemas mesoscópicos (véase el trabajo de T. Brandes [Bra2005] y las referencias en él). El segundo modelo es el modelo vibrón $U(3)$, que es un modelo de interacción bosón-bosón y que tiene utilidad en el estudio de sistemas nucleares y moleculares [Cej2009, Iac1987, Iac1995, Iac1993].

1.1. El modelo de Dicke

El modelo de Dicke [Dic1954] describe un sistema de N átomos de dos niveles interaccionando con un campo de radiación. Una de sus propiedades características

es la transición de fase cuántica a temperatura cero que presenta en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$): para un valor crítico de la constante de acoplamiento entre los átomos y el campo de radiación, el sistema experimenta un cambio de fase desde una fase normal a una fase superradiante. Esta transición es un ejemplo de comportamiento colectivo [And1993, Ben1996a]. La esencia de este comportamiento colectivo es la interacción coherente de los dipolos atómicos con el campo eléctrico, $\vec{D} \cdot \vec{E}$. En los últimos años, el modelo de Dicke ha despertado un renovado interés en el estudio de las transiciones de fase cuánticas, ya que en este sistema se ponen de manifiesto interesantes propiedades como el entrelazamiento en sistemas de muchos cuerpos, el caos en Mecánica Cuántica, y aplicaciones en Óptica Cuántica y Física de la Materia Condensada [Lam2004, Lam2005, Bra2005].

1.1.1. El Hamiltoniano de Dicke

La interacción entre N átomos idénticos, pero distinguibles de dos niveles (con una separación entre niveles de ω_0) y un campo con M modos de radiación de frecuencias $\{\omega_\alpha\}$, a través de las constantes de acoplamiento $\{\lambda_\alpha\}$, puede describirse por un hamiltoniano de la forma (con $\hbar=1$)

$$H = \omega_0 \sum_{i=1}^N s_z^{(i)} + \sum_{\alpha=1}^M \omega_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha + \sum_{\alpha=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_\alpha}{\sqrt{N}} (a_\alpha^\dagger + a_\alpha) (s_+^{(i)} + a_-^{(i)}) \quad (1.1.1)$$

donde el átomo i -ésimo es descrito por los operadores de spin-1/2 $\{s_k^{(i)}; k = z, \pm\}$ que cumplen las reglas de conmutación $[s_z, s_\pm] = \pm s_\pm$; $[s_+, s_-] = 2s_z$, y los modos bosónicos son descritos por los operadores de creación y destrucción $\{a_\alpha^\dagger\}$ y $\{a_\alpha\}$.

Nuestro hamiltoniano se simplifica si introducimos los operadores de momento angular total,

$$J_z \equiv \sum_{i=1}^N s_z^{(i)} \quad J_\pm \equiv \sum_{i=1}^N s_\pm^{(i)}, \quad (1.1.2)$$

que cumplen las reglas de conmutación usuales,

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \quad [J_+, J_-] = 2J_z \quad (1.1.3)$$

El espacio de Hilbert soporte de esta álgebra es expandido por los estados de la base $\{|j, m\rangle; m = -j, -j+1, \dots, j-1, j\}$, que son conocidos como los estados de Dicke,

y son autofunciones de J^2 y J_z : $J_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle$ y $J^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle$. Los operadores de subida y bajada actúan sobre estos estados de la siguiente forma $J_{\pm}|j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}|j, m \pm 1\rangle$. El operador J_z da cuenta del número de átomos en el estado excitado, y los operadores J_+ y J_- excitan y desexcitan un átomo, respectivamente. Nótese que j corresponde al “número de cooperación” de Dicke que toma los valores $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, N/2$ para N impar y $0, 1, \dots, N/2$ para N par. En este trabajo, fijaremos j en su valor máximo ($j = N/2$), ya que el momento angular del sistema es una cantidad conservada ($[J^2, H] = 0$). Entonces, el sistema formado por el conjunto de N átomos de dos niveles es descrito por un sistema de $(N+1)$ niveles, que es visualizado como un vector de pseudospin de longitud $j = N/2$. En general, el conjunto de configuraciones atómicas para $N > 2$ no es trivial [Arr1972] y, en términos de las configuraciones atómicas individuales, los estados no son separables y contienen entrelazamiento [Wan2002]. Cuando consideramos un campo con un único modo, obtenemos el hamiltoniano de Dicke en función de los operadores de momento angular total,

$$H = \omega_0 J_z + \omega a^\dagger a + \frac{\lambda}{\sqrt{2j}} (a^\dagger + a) (J_+ + J_-). \quad (1.1.4)$$

La condición de resonancia es $\omega = \omega_0$. Hay otras aproximaciones bien conocidas de este modelo. La aproximación de onda rotante (RWA, Rotating-Wave Approximation en inglés) desprecia los términos $a_\alpha^\dagger J_+^{(i)}$ y $a_\alpha J_-^{(i)}$ que representan interacciones más allá del intercambio energético entre los átomos no perturbados y el campo. Con esta aproximación el modelo se denomina modelo de Tavis-Cummings [Tav1968]. Si consideramos el caso más sencillo, un solo átomo ($N = 1, j = 1/2$) interaccionando con un único modo de radiación, tenemos el modelo de Jaynes-Cummings [Hay1963].

Asociado con el hamiltoniano de Dicke hay una paridad conservada Π , tal que $[H, \Pi] = 0$, que es dada por

$$\Pi = \exp\{i\pi \hat{N}\}, \hat{N} = a^\dagger a + J_z + j, \quad (1.1.5)$$

donde \hat{N} es el operador “número de excitación” y da cuenta del número total de excitaciones del sistema. Π posee dos autovalores ± 1 , dependiendo de si el número total de excitaciones es par o impar y, por tanto, el espacio de Hilbert del sistema total se puede escribir como suma directa de los subespacios de paridad par e impar.

El espacio de Hilbert del sistema total viene descrito en términos de la base $\{|n\rangle \otimes |j, m\rangle\}$, donde $|n\rangle$ son los estados número del campo, $a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle$, y $|j, m\rangle$ son los estados de Dicke. El hamiltoniano de Dicke con su paridad definida puede visualizarse como un retículo, donde cada punto (n, m) representa un vector de base. Nótese que el retículo es finito en la dirección m , pero infinito en la dirección n , indicando la dimensionalidad del espacio de Hilbert. Como hemos observado anteriormente, la interacción conserva la paridad Π , por tanto, los estados con un número de excitación total $n + m + j$ par interaccionan sólomente con otros estados pares, y los estados impares solo interaccionan con estados impares. Entonces, podemos dividir el retículo total en dos subretículos entrelazados que corresponde a los sectores de paridad distintos.

1.1.2. El límite termodinámico

En el límite termodinámico, el número de átomos considerados en el hamiltoniano de Dicke tiende a infinito, $N \gg 1$, y por tanto, $j \gg 1$. En este límite, el hamiltoniano de Dicke experimenta una transición de fase cuántica para un valor crítico de la constante de acoplamiento $\lambda_c = \sqrt{\omega\omega_0}/2$, produciéndose una rotura de la simetría asociada con el operador paridad Π de la ecuación (1.1.5). Por debajo de λ_c , el sistema está en una fase normal, con el estado fundamental en gran parte desexcitado, y por encima de λ_c el sistema está en la fase superradiante, donde el estado fundamental posee una excitación macroscópica. A continuación, se va a mostrar una aproximación cuadrática al hamiltoniano de Dicke que es interesante en el límite termodinámico, es decir, para $N \gg 1$. Esta aproximación ha sido derivada por Emary y Brandes en [Ema2003a].

Aquí se hace uso de la técnica de bosonización basada en la representación de Holstein-Primakoff de los operadores de momento angular en términos de un modo bosónico único de la siguiente forma [Hol1940, Res1975]

$$J_+ = b^\dagger \sqrt{2j - b^\dagger b}, \quad J_- = \sqrt{2j - b^\dagger b} b, \quad J_z = (b^\dagger b - j), \quad (1.1.6)$$

donde los operadores de Bose introducidos obedecen la regla de conmutación $[b, b^\dagger] = 1$. Realizando estas sustituciones en el hamiltoniano de la ec. (1.1.4), se obtiene el hamiltoniano bosónico de dos modos

$$H = \omega_0(b^\dagger b - j) + \omega a^\dagger a + \lambda(a^\dagger + a) \left(b^\dagger \sqrt{1 - \frac{b^\dagger b}{2j}} + \sqrt{1 - \frac{b^\dagger b}{2j}} b \right) \quad (1.1.7)$$

En esta representación, el operador paridad Π se expresa como

$$\Pi = \exp\{i\pi[a^\dagger a + b^\dagger b]\}, \quad (1.1.8)$$

resultando aparente la semejanza con el operador paridad de un sistema armónico bidimensional [Bis1994].

1.1.2.1. Fase normal

El hamiltoniano efectivo para el sistema en la fase normal $H^{(1)}$ se obtiene simplemente despreciando los términos con j en el denominador del hamiltoniano completo de la ec. (1.1.7),

$$H^{(1)} = \omega_0(b^\dagger b) + \omega a^\dagger a + \lambda(a^\dagger + a)(b^\dagger + b) - j\omega_0, \quad (1.1.9)$$

que es bilineal en los operadores bosónicos, a y b , y entonces puede diagonalizarse fácilmente. Introduciendo los operadores usuales de posiciones y momentos para estos dos modos bosónicos

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(a^\dagger + a); & p_x &= i\sqrt{\frac{\omega}{2}}(a^\dagger - a), \\ y &= \frac{1}{\sqrt{2\omega_0}}(b^\dagger + b); & p_y &= i\sqrt{\frac{\omega_0}{2}}(b^\dagger - b), \end{aligned} \quad (1.1.10)$$

facilitamos el proceso de diagonalización. Y redefiniendo dos nuevos modos bosónicos $\{c_1, c_2\}$ en función de los anteriores, llegamos a la forma diagonal final [Ema2003a]

$$H^{(1)} = \varepsilon_-^{(1)} c_1^\dagger c_1 + \varepsilon_+^{(1)} c_2^\dagger c_2 + \frac{1}{2}(\varepsilon_+^{(1)} + \varepsilon_-^{(1)} - \omega - \omega_0) - j\omega_0. \quad (1.1.11)$$

Los operadores bosónicos $\{c_1, c_1^\dagger, c_2, c_2^\dagger\}$, en función de los cuales $H^{(1)}$ es diagonal, son combinaciones lineales de los operadores originales $\{a, a^\dagger, b, b^\dagger\}$ y describen las excitaciones colectivas campo-átomo. Las energías de éstos dos modos de oscilador independientes $\varepsilon_\pm^{(1)}$ vienen dadas por

$$\varepsilon_\pm^{(1)} = \frac{1}{2}\{\omega^2 + \omega_0^2 \pm \sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 16\lambda^2\omega\omega_0}\}. \quad (1.1.12)$$

Podemos notar que la energía de excitación $\varepsilon_-^{(1)}$ es sólo real cuando $\omega^2 + \omega_0^2 \geq \sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 16\lambda^2\omega\omega_0}$, o de forma equivalente, cuando $\lambda \leq \sqrt{\omega\omega_0}/2 = \lambda_c$. Entonces,

observamos que $H^{(1)}$ es válido cuando $\lambda \leq \lambda_c$, es decir, en la fase normal. En esta fase, la energía del estado fundamental viene dada por $E_G^{(1)} = -j\omega_0$, que es de orden $O(j)$, mientras que las energías de excitación $\varepsilon_{\pm}^{(1)}$ son de $O(1)$. Esto significa que escalando nuestras energías con j , el espectro de excitación por arriba del estado fundamental se convierte en cuasi-continuo en el límite $j \rightarrow \infty$, o lo que es lo mismo, que las energías de excitación difieren en una cantidad infinitesimal entre sí desde E_G .

También podemos comprobar que el hamiltoniano $H^{(1)}$ conmuta con el operador paridad Π , entonces, las autofunciones de $H^{(1)}$ tienen una paridad definida, con el estado fundamental con paridad positiva.

1.1.2.2. Fase superradiante

El hamiltoniano del sistema por encima de la transición de fase, en términos de dos nuevos modos, $e_{\pm}^{(2)}$, correspondientes a dos osciladores rotados desacoplados nos da la forma diagonal [Ema2003a]

$$H^{(2)} = \varepsilon_-^{(2)} e_1^\dagger e_1 + \varepsilon_+^{(2)} e_2^\dagger e_2 - j \left\{ \frac{2\lambda^2}{\omega} + \frac{\omega_0^2 \omega}{8\lambda^2} \right\} + \frac{1}{2} (\varepsilon_+^{(2)} + \varepsilon_-^{(2)} - \frac{\omega_0}{2\mu} (1 + \mu) - \omega - \frac{2\lambda^2}{\omega} (1 - \mu)), \quad (1.1.13)$$

donde las energías del oscilador vienen dadas por

$$2\varepsilon_{\pm}^{(2)2} = \frac{\omega_0^2}{\mu^2} + \omega^2 \pm \sqrt{\left[\frac{\omega_0^2}{\mu^2} - \omega^2 \right]^2 + 4\omega^2 \omega_0^2}. \quad (1.1.14)$$

La energía de excitación $\varepsilon_-^{(2)}$, y por tanto, $H^{(2)}$ son reales con tal que $\frac{\omega_0^2}{\mu^2} + \omega^2 \geq \sqrt{\left[\frac{\omega_0^2}{\mu^2} - \omega^2 \right]^2 + 4\omega^2 \omega_0^2}$, o de forma equivalente, $\lambda \geq \sqrt{\omega\omega_0}/2 = \lambda_c$. Entonces, $H^{(2)}$ describe el sistema en la fase superradiante, $\lambda \geq \lambda_c$, en la cual la energía del estado fundamental escalada viene dada por $E_G^{(2)}/j = -\left\{ \frac{2\lambda^2}{\omega} + \frac{\omega_0^2 \omega}{8\lambda^2} \right\}$. Todos y cada uno de los niveles del espectro total están doblemente degenerados por encima de la transición de fase. Lo que ha ocurrido es que la simetría del estado fundamental, definida por el operador Π , se ha roto espontáneamente en λ_c . El hamiltoniano $H^{(2)}$ no conmuta con Π , y por lo tanto sus autofunciones no poseen una buena simetría de paridad.

Aunque la simetría total Π se ha roto en la transición de fase, aparecen dos nuevas simetrías locales, correspondientes al operador

$$\Pi^{(2)} \equiv \{i\pi[c^\dagger c + d^\dagger d]\}, \quad (1.1.15)$$

para cada elección de los desplazamientos de campo medio. Este operador conmuta con el hamiltoniano superradiante, $[H^{(2)}, \Pi^{(2)}] = 0$.

1.1.2.3. Transición de fase

En los apartados anteriores hemos derivado los dos hamiltonianos efectivos que describen el sistema para cualquier valor de λ en el límite $j \rightarrow \infty$. Las excitaciones fundamentales del sistema vienen dadas por las energías ε_{\pm} , que describen los modos colectivos. Cuando el acoplamiento λ se aproxima al punto crítico λ_c , la energía de excitación del modo fotónico desaparece, $\varepsilon_- \rightarrow 0$, indicando la existencia de una QPT. En cambio, ε_+ tiende hacia un valor de $\sqrt{\omega_0^2 + \omega^2}$ cuando $\lambda \rightarrow \lambda_c$. En el límite asintótico de $\lambda \rightarrow \infty$, $\varepsilon_- \rightarrow \omega$, mientras $\varepsilon_+ \rightarrow 4\lambda^2/\omega$. El exponente crítico de esta QPT se obtiene a partir del comportamiento

$$\varepsilon_-(\lambda \rightarrow \lambda_c) \sim \sqrt{\frac{32\lambda_c^3\omega^2}{16\lambda_c^4 + \omega^4}} |\lambda_c - \lambda|^{1/2}. \quad (1.1.16)$$

La anulación de ε_- en λ_c revela que la QPT es de segundo orden. Podemos definir la escala de la longitud característica del sistema en función de esta energía como

$$l_- = 1/\sqrt{\varepsilon_-} \quad (1.1.17)$$

Entonces, esta longitud diverge como $|\lambda - \lambda_c|^{-\nu}$ con el exponente $\nu = 2$. La segunda derivada de la energía del estado fundamental respecto de λ es discontinua en λ_c . La naturaleza de la transición de fase se puede visualizar estudiando la inversión atómica $\langle J_z \rangle/j$ y el número medio de fotones $\langle n_a \rangle \equiv \langle a^\dagger a \rangle/j$. En la fase normal, el sistema sólo está excitado microscópicamente, mientras que por encima de λ_c el conjunto de átomos y el campo adquieren excitaciones macroscópicas.

1.1.2.4. Función de onda del estado fundamental

Después de la diagonalización, los dos hamiltonianos efectivos tienen la forma de un par de osciladores armónicos desacoplados. Entonces, en la representación en la que los hamiltonianos son diagonales, sus funciones de onda del estado fundamental serán simplemente el producto de las funciones propias del oscilador armónico, es decir, funciones gaussianas con una anchura determinada por la energía del oscilador. Por

tanto, la función de onda del estado fundamental del hamiltoniano $H^{(1)}$ es el producto de dos gaussianas ortogonales en la representación $x - y$,

$$\Psi_G^{(1)} = G_-^{(1)}(x\cos\gamma^{(1)} - y\sin\gamma^{(1)})G_+^{(1)}(x\sin\gamma^{(1)} + y\cos\gamma^{(1)}), \quad (1.1.18)$$

donde $\gamma^{(1)}$ viene dado por $\tan(2\gamma^{(1)}) = \frac{4\lambda\sqrt{\omega\omega_0}}{\omega_0^2 - \omega^2}$.

Cuando aumenta el acoplamiento, el paquete de ondas se estira en una dirección determinada por el ángulo $\gamma^{(1)}$, que en resonancia ($\omega = \omega_0$) es simplemente igual a $\pi/4$. Este estiramiento aumenta hasta λ_c , donde la función de onda diverge. Ya hemos señalado que el operador paridad en la representación de Holstein-Primakoff tiene la forma $\Pi = \exp\{i\pi[a^\dagger a + b^\dagger b]\}$. De nuestro conocimiento del oscilador armónico, sabemos que la acción de Π en la representación $x - y$ es la inversión de coordenadas, $x \rightarrow -x$ y $y \rightarrow -y$. Entonces, la operación de Π es equivalente a una rotación de π sobre el origen de coordenadas y, en la fase normal, donde Π es un buen número cuántico, las funciones de onda serán invariantes bajo esta rotación. De forma análoga, se puede obtener una expresión para la función de onda del estado fundamental $\Psi_G^{(2)}(x, y)$ del hamiltoniano $H^{(2)}$ [Ema2003a]. Justo por encima de la transición de fase, la función de onda del estado fundamental se encuentra en un estado altamente deformado. A medida que el acoplamiento aumenta más allá de λ_c , la función de onda del estado fundamental $\psi(x, y)$ se divide en dos paquetes de onda gaussianos, centrados alrededor de un punto que podemos denominar $(+x_0, -y_0)$, y su antípoda $(-x_0, +y_0)$ en el cuadrante inferior derecho y cuadrante superior izquierdo del plano $x - y$, respectivamente.

Veremos en la Sección 1.3 otra forma de visualizar la transición de fase usando una aproximación semiclásica basada en estados coherentes (CS, Coherent States en inglés).

1.1.3. Funciones de onda para j finito

A diferencia de la sección anterior, ahora consideraremos las funciones de onda del hamiltoniano de Dicke para un j finito. Para ello consideramos el hamiltoniano (1.1.4) y la representación de posiciones y momentos de la ec. (1.1.10) usada previamente en la discusión de las funciones de onda en el límite termodinámico. Consideremos las autofunciones obtenidas por diagonalización numérica, las cuales son de la forma

[Ema2003a]

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^{+j} c_{nm}^{(j)} |n\rangle |j, m\rangle, \quad (1.1.19)$$

donde n_c es un número de corte del espacio de Fock suficientemente grande de tal forma que se garantice la convergencia de la energía de la solución y $c_{nm}^{(j)}$ son los coeficientes calculados por diagonalización numérica de los elementos de matriz de (1.1.4). Los estados número del campo $|n\rangle$ en representación de posiciones son simplemente las autofunciones del oscilador armónico

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{2^n n!} \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} e^{-(1/2)\omega x^2} H_n(\sqrt{\omega}x) \quad (1.1.20)$$

donde H_n son los polinomios de Hermite de grado n . Para los vectores de la base de la parte atómica consideraremos la representación de Holstein-Primakoff de los operador de momento angular $J_z \rightarrow b^\dagger b - j$, entonces, los estados de Dicke son autofunciones de $b^\dagger b$ con autovalor $(j + m)$: $b^\dagger b |j, m\rangle = (j + m) |j, m\rangle$, $-j \leq m \leq j$. En consecuencia, podemos representar los estados de Dicke de la misma forma que los estados de Fock, permitiéndonos escribir la función de onda total en representación de posiciones bidimensional como [Ema2003a]

$$\psi(x, y) = \sqrt{\omega\omega_0} e^{-\frac{1}{2}(\omega x^2 + \omega_0 y^2)} \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j c_{nm}^{(j)} \times \frac{H_n(\sqrt{\omega}x) H_{j+m}(\sqrt{\omega_0}y)}{2^{(n+m+j)/2} \sqrt{n!(j+m)!}}, \quad (1.1.21)$$

y análogamente en el espacio de momentos,

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p_x, p_y) &= \frac{1}{\sqrt{\omega\omega_0}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{p_x^2}{\omega} + \frac{p_y^2}{\omega_0})} \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j (-i)^{n+m+j} c_{nm}^{(j)} \\ &\times \frac{H_n(p_x/\sqrt{\omega}) H_{j+m}(p_y/\sqrt{\omega_0})}{2^{(n+m+j)/2} \sqrt{n!(j+m)!}}. \end{aligned} \quad (1.1.22)$$

Esta representación es muy útil para estudiar el hamiltoniano de Dicke. Sin embargo, presenta el inconveniente de que, mientras que el conjunto de funciones propias del oscilador (1.1.20) forman un conjunto ortonormal en la dirección x , no es el caso en la dirección y , ya que sólo mantenemos hasta la autofunción $2j$ -ésima en esta dirección. Es decir, no disponemos de un conjunto completo de funciones en esta dirección. Sin embargo, si conocemos el valor de j y sólo consideramos autofunciones que puedan ser representadas por éstas, la representación es única.

Nótese que la función de onda siempre es invariante bajo una rotación de π respecto al origen de coordenadas como exige la simetría de paridad Π . Para un valor de la constante de acoplamiento bajo, la función de onda está formada por un paquete de ondas centrado en el origen. Cuando la constante de acoplamiento se incrementa por encima de λ_c , los dos modos del sistema comienzan a mezclarse, y la función de onda $\psi(x, y)$ se divide en dos paquetes sobre cuadrantes opuestos en el plano $x - y$ que se alejan entre sí a medida que aumenta λ a razón de \sqrt{j} .

Por tanto, alrededor de $\lambda \approx \lambda_c$, la función de onda del sistema se vuelve deslocalizada y la extensión de esta deslocalización es proporcional a \sqrt{j} . Como esto es una cantidad macroscópica, vemos que por encima de λ_c , el sistema para j finito desarrolla una coherencia macroscópica en su función de onda. Estos dos paquetes de ondas distinguibles macroscópicos del estado fundamental son una reminiscencia de los dos estados tipo “gato de Schrödinger”, como veremos en el siguiente capítulo.

1.1.4. Resolución numérica

El modelo de Dicke se puede resolver de forma exacta sólo en dos casos límites, cuando la constante de acoplamiento es nula o infinita. Se han encontrado soluciones analíticas, que son exactas en el límite termodinámico, para la fase normal [Ema2003a] y para la fase superradiante [Cas2011a]. En general, para un número N finito no existen soluciones exactas, por lo que es necesario la búsqueda de soluciones numéricas, dado el interés que este modelo despierta en diferentes campos de la Óptica Cuántica y la Física de la Materia Condensada.

Cuando no existe interacción ($\lambda = 0$), las autofunciones del hamiltoniano de Dicke son el producto tensorial entre los estados de Fock para el modo de radiación y las autofunciones de momento angular para la parte atómica, $|n\rangle|j, m\rangle$, con $j = N/2$. En este caso, el espectro energético es

$$E = \omega n + \frac{1}{2}m\omega_0. \quad (1.1.23)$$

Para valores finitos de λ , el término de interacción mezcla estados con diferente número de fotones n y diferente número de ocupación de los átomos de dos niveles

$j + m$. Los elementos de matriz del hamiltoniano (1.1.4) son simplemente

$$\begin{aligned} \langle n'; j', m' | H | n; j, m \rangle &= (n\omega + m\omega_0)\delta_{n',n}\delta_{m',m} \\ &+ \frac{\lambda}{\sqrt{2j}}(\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1}) \\ &\times (\sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\delta_{m',m+1} \\ &+ \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\delta_{m',m-1}). \end{aligned} \quad (1.1.24)$$

Para diagonalizar numéricamente el hamiltoniano es necesario truncar el número de fotones del campo, considerando un número suficiente (n_{max} para el estado fundamental) para garantizar la convergencia de la energía de la solución. La dimensión de la matriz del hamiltoniano a diagonalizar es $\dim = ((n_{max} + 1)(2j + 1))^2$. A medida que aumenta j , también se incrementa el número de fotones necesarios para garantizar la convergencia de la solución, lo que da lugar a un problema de autovalores exigente desde un punto de vista computacional.

El hamiltoniano de Dicke tiene una simetría dinámica asociada con los proyectores de la representación simétrica y antisimétrica del grupo cíclico \mathbb{Z}_2 , dados por

$$\begin{aligned} P_S &= \frac{1}{2}(1 + e^{i\pi\hat{\Lambda}}) \\ P_A &= \frac{1}{2}(1 - e^{i\pi\hat{\Lambda}}) \end{aligned} \quad (1.1.25)$$

Esta simetría permite clasificar las autofunciones en función de la paridad de los autovalores $\lambda = j + m + n$ del operador número de excitación

$$\hat{\Lambda} = \hat{J}_z + a^\dagger a + j. \quad (1.1.26)$$

Bajo la transformación unitaria $\hat{\Pi} = e^{i\pi\hat{\Lambda}}$

$$\hat{\Pi}a\hat{\Pi}^\dagger = ae^{-i\pi} = -a, \quad \hat{\Pi}J_+\hat{\Pi}^\dagger = J_+e^{i\pi} = -J_+, \quad \hat{\Pi}J_z\hat{\Pi}^\dagger = J_z \quad (1.1.27)$$

con las correspondientes expresiones conjugadas hermíticas. Entonces, las autofunciones del hamiltoniano deben ser simultáneamente autofunciones de los operadores paridad P_S o P_A .

1.1.5. Realizaciones experimentales

El sencillo modelo de Dicke no es fácil de llevar a la práctica. Se puede implementar experimentalmente mediante un micromaser, un experimento consistente en una cavi-

dad de microondas de alta calidad que interacciona con una secuencia de átomos de Rydberg. Estas cavidades son relativamente grandes (10^{-2}m), lo que permite acomodar un gran número de átomos en su interior, y son casi cerradas, reduciendo el acceso del entorno exterior. Esta realización ha puesto de manifiesto el comportamiento colectivo entre los átomos y el campo de la cavidad. La mejora tecnológica de las cavidades permitió reducir su volumen alcanzando así regímenes de acoplamiento fuerte en el dominio óptico. La división de Rabi de campo vacío, o división de modo normal, fue observada en una cavidad óptica como un efecto cooperativo [Rai1989, Tho1992]. Además la transición de fase cuántica del modelo de Dicke ha sido observada experimentalmente en un gas cuántico frío [Bau2010].

Los dos experimentos anteriores no controlaban el número de átomos en el interior de la cavidad. Ésto se soluciona con el desarrollo de un sistema de cavidad combinado con trampa iónica. Sin embargo, la cavidad resultante no era completamente cerrada, lo que provocaba la emisión espontánea de los iones. Recientemente se ha solventado este problema desajustando el campo de la cavidad para el estado excitado [Kel2004]. También recientemente se han desarrollado circuitos de Electrodinámica Cuántica (QED) donde el modo de la cavidad es reemplazado por un modo de guía de onda resonante a frecuencias de microondas y los átomos son reemplazado por qubits superconductores [Wal2004, Sch2009b, Gir2009].

1.2. Modelo vibrón

En esta sección describiremos brevemente el modelo algebraico $U(3)$ denominado modelo vibrón bidimensional (2D) ([Iac1996, Iac2003, Per2008]), usado en el estudio de los espectros rotacional y vibracional de moléculas diatómicas y poliatómicas. Nos centraremos en detalle en la transición de fase del modelo vibrón bidimensional con $d = 2$ grados de libertad de tipo dipolo, restringido a un movimiento planar [Iac1996, Iac2003], descrito por el álgebra de Lie de $U(3)$. Nuestro estudio será, por ejemplo, aplicable a moléculas triatómicas que experimentan una transición desde una forma lineal a una forma plegada. Este modelo, al igual que el modelo de Dicke, presenta una transición de fase. En la sección siguiente 1.4 calcularemos el funcional de la energía del estado fundamental haciendo uso de estados coherentes bosónicos.

El modelo vibrón fue introducido por Iachello [Iac1981] en los años 80 a través de un enfoque algebraico, basado en el concepto de “álgebra generadora de espectro”. En los últimos años, los modelos algebraicos basados en la realización bosónica del algebra de Lie de $U(n)$ han proporcionado una buena descripción de los espectros de rotación y de vibración en Física Nuclear y Molecular [Iac1987, Iac1995]. Estos modelos muestran distintas fases relacionadas con configuraciones específicas del estado fundamental, que surgen de las simetrías dinámicas del modelo [Iac1993, Iac1994, Iac2006]. A su vez, se han desarrollado métodos para estudiar las transiciones de fase del estado fundamental en el marco de modelos algebraicos [Gil1979, Fen1981]. Estas transiciones de fase son función de un parámetro de control ξ que aparece en el hamiltoniano, escrito como una combinación convexa $H(\xi) = (1 - \xi)H_1 + \xi H_2$, y se trata de transiciones de fase a temperatura cero. Cuando $\xi = 0$, el sistema está en la fase I, caracterizado por una simetría dinámica G_1 de H_1 , y cuando $\xi = 1$ el sistema está en la fase II, caracterizado por una simetría dinámica G_2 de H_2 . Como las diferentes fases corresponden a diferentes configuraciones geométricas del estado fundamental, a esta transición de fase también se le denomina transición de fase de “forma” (ver por ejemplo [Per2008]). El límite clásico, termodinámico o de campo medio de estos modelos se estudia usando un algoritmo introducido por Gilmore [Gil1979] que hace uso de estados coherentes (condensados bosónicos) semiclásicos.

1.2.1. Modelo algebraico $U(3)$

En esta sección revisaremos el esquema algebraico $U(3)$ para sistemas bidimensionales (2D) del tipo vibrón (se pueden encontrar más detalles en [Iac1996, Iac2003, Per2008]). Los modelos vibrón 2D describen un sistema con un grado de libertad del tipo dipolo restringido a un movimiento planar.

Podemos construir el algebra de Lie de $U(3)$ a partir de los operadores bosónicos de creación y destrucción cartesianos $\{\tau_x^\dagger, \tau_y^\dagger, \tau_x, \tau_y\}$ y un bosón escalar $\{\sigma^\dagger, \sigma\}$. Las relaciones de conmutación entre los operadores de creación y destrucción son

$$[\sigma, \sigma^\dagger] = 1, \quad [\tau_i, \tau_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\tau_i, \sigma^\dagger] = 0; \quad i, j = x, y. \quad (1.2.1)$$

Los restantes conmutadores son cero. Resulta conveniente introducir los bosones circu-

lares

$$\tau_{\pm}^{\dagger} = \mp \frac{\tau_x^{\dagger} \mp i\tau_y^{\dagger}}{\sqrt{2}} \quad (1.2.2a)$$

$$\tau_{\pm} = \mp \frac{\tau_x \mp i\tau_y}{\sqrt{2}} \quad (1.2.2b)$$

Redefiniendo nuestros operadores para que transformen como operadores tensoriales esféricos, los nueve generadores del algebra de $U(3)$ son productos bilineales de los operadores de creación y destrucción [Per2008], en particular,

$$\begin{aligned} \hat{n} &= \tau_+^{\dagger}\tau_+ + \tau_-^{\dagger}\tau_-, \quad \hat{n}_s = \sigma^{\dagger}\sigma, \\ \hat{l} &= \tau_+^{\dagger}\tau_+ - \tau_-^{\dagger}\tau_-, \\ \hat{D}_+ &= \sqrt{2}(\tau_+^{\dagger}\sigma - \sigma^{\dagger}\tau_-), \quad \hat{D}_- = \sqrt{2}(-\tau_-^{\dagger}\sigma + \sigma^{\dagger}\tau_+), \\ \hat{Q}_+ &= \sqrt{2}\tau_+^{\dagger}\tau_-, \quad \hat{Q}_- = \sqrt{2}\tau_-^{\dagger} + \tau_+, \\ \hat{R}_+ &= \sqrt{2}(\tau_+^{\dagger}\sigma + \sigma^{\dagger}\tau_-), \quad \hat{R}_- = \sqrt{2}(\tau_-^{\dagger}\sigma + \sigma^{\dagger}\tau_+), \end{aligned} \quad (1.2.3)$$

Los operadores en (1.2.3) tienen un significado físico. El operador vectorial \hat{n} y escalar \hat{n}_s denotan los operadores número bosónicos. El operador \hat{D}_{\pm} representa el operador dipolar. El operador \hat{l} es el momento angular en 2D.

Existen dos posibles cadenas subalgebraicas que partiendo de $U(3)$ finalizan en $SO(2)$ (es decir, que conservan el momento angular en 2D),

$$U(3) \supset U(2) \supset SO(2) \quad \text{Cadena (I)} \quad (1.2.4a)$$

$$U(3) \supset SO(3) \supset SO(2) \quad \text{Cadena (II)} \quad (1.2.4b)$$

Las correspondientes subalgebras están compuestas por los siguientes elementos

$$\begin{aligned} U(2) & \quad \{\hat{n}, \hat{l}, \hat{Q}_+, \hat{Q}_-\} \\ SO(3) & \quad \{\hat{l}, \hat{D}_+, \hat{D}_-\} \\ SO(2) & \quad \{\hat{l}\} \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

donde los elementos de $SO(3)$ satisfacen las usuales relaciones de conmutación del momento angular. Debido a un automorfismo del algebra de Lie de $U(3)$ construida con τ_{\pm} , σ , hay una subalgebra alternativa $\overline{SO(3)}$ de $U(3)$, denominada $\overline{SO(3)}$ con los siguientes elementos

$$\overline{SO(3)} \quad \{\hat{l}, \hat{R}_+, \hat{R}_-\}. \quad (1.2.6)$$

Otro componente del enfoque algebraico son los operadores (o invariantes) de Casimir asociados a cada cadena subalgebraica [Iac1993, Iac1994, Iac2006]. Los operadores de Casimir de primer y segundo orden para las subalgebra de las ecuaciones (1.2.5) y (1.2.6) son

$$\begin{aligned}\hat{C}_1[\text{U}(2)] &= \hat{n}, & \hat{C}_2[\text{U}(2)] &= \hat{n}(\hat{n} + 1), \\ \hat{C}_2[\text{SO}(3)] &= \hat{W}^2 = (\hat{D}_+\hat{D}_- + \hat{D}_-\hat{D}_+)/2 + \hat{l}^2, \\ \hat{C}_1[\text{SO}(2)] &= \hat{l}, & \hat{C}_2[\text{SO}(2)] &= \hat{l}^2,\end{aligned}\tag{1.2.7}$$

y

$$\hat{C}_2[\overline{\text{SO}(3)}] = (\hat{R}_+\hat{R}_- + \hat{R}_-\hat{R}_+)/2 + \hat{l}^2.\tag{1.2.8}$$

El hamiltoniano más general de uno o dos cuerpos invariante por paridad y rotación puede ser escrito como una combinación lineal de los invariantes de primer y segundo orden de las cadenas (1.2.4a) y (1.2.4b)

$$\hat{H} = E_0 + \epsilon\hat{C}_1[\text{U}(2)] + \alpha\hat{C}_2[\text{U}(2)] + \beta\hat{C}_2[\text{SO}(2)] + A\hat{C}_2[\text{SO}(3)].\tag{1.2.9}$$

Este hamiltoniano puede ser reescrito sustituyendo el operador de Casimir de $\text{SO}(3)$ \hat{W}^2 por el operador de emparejamiento

$$\hat{P} = N(N + 1) - \hat{W}^2,\tag{1.2.10}$$

donde hemos sustituido el operador número total de bosones $\hat{N} = \hat{n} + \hat{n}_s$ por su valor N , ya que consideramos sistemas con un número fijo de bosones, donde \hat{N} es una cantidad conservada. Además, el momento angular en 2D, \hat{l} , también se conserva. Entonces, el hamiltoniano puede ser escrito como

$$\hat{H} = E'_0 + \epsilon\hat{n} + \alpha\hat{n}(\hat{n} + 1) + \beta\hat{l}^2 + A'\hat{P},\tag{1.2.11}$$

donde $E'_0 = E_0 + N(N + 1)$ y $A' = -A$.

1.2.2. Simetrías dinámicas

Las dos cadenas algebraicas de las ecuaciones (1.2.4a) y (1.2.4b) implican la existencia de dos simetrías dinámicas, $G_1 = \text{U}(2)$ y $G_2 = \text{SO}(3)$ del hamiltoniano: la denominada cadena del oscilador “cilíndrico” y la “desplazada”. Un hamiltoniano general del modelo vibrón $\text{U}(3)$ con solamente interacciones de uno o dos cuerpos se

puede expresar en función de los operadores de Casimir lineales y cuadráticos de todas las subálgebras contenidas en la cadenas algebraicas de simetría dinámica.

1.2.2.1. Cadena del oscilador cilíndrico (Cadena I)

Los estados de cadena I del oscilador cilíndrico, vienen caracterizados por los números cuánticos

$$\left| \begin{array}{ccc} \text{U}(3) \supset & \text{U}(2) \supset & \text{SO}(2) \\ [N] & n & l \end{array} \right\rangle \quad (1.2.12)$$

y representamos el estado por $|N; n, l\rangle$. El número cuántico N caracteriza la representación totalmente simétrica de $\text{U}(3)$, $[N]$, y esto está relacionado con el número total de estados ligados del sistema; n es el número cuántico vibracional, y l es el momento angular en 2D. Las reglas de ramificación son

$$n = N, N - 1, N - 2, \dots, 0, \quad (1.2.13)$$

$$l = \pm n, \pm(n - 2), \dots, \pm 1 \quad \text{ó} \quad 0 \quad (n = \text{impar ó par}). \quad (1.2.14)$$

El hamiltoniano es

$$\hat{H} = E_0 + \epsilon \hat{C}_1[\text{U}(2)] + \alpha \hat{C}_2[\text{U}(2)] + \beta \hat{C}_2[\text{SO}(2)], \quad (1.2.15)$$

y los autovalores

$$E(n, l) = E_0 + \epsilon n + \alpha n(n + 1) + \beta l^2. \quad (1.2.16)$$

Los autovalores de (1.2.15) son los de un oscilador anarmónico bidimensional truncado, ya que $n \leq N$. Esta cadena, cuando se aplica a vibraciones moleculares, describe las vibraciones de “doble” de las moléculas lineales rígidas.

1.2.2.2. Cadena del oscilador desplazado (Cadena II)

Los estados de la cadena II del oscilador cilíndrico, vienen caracterizados por los números cuánticos

$$\left| \begin{array}{ccc} \text{U}(3) \supset & \text{SO}(3) \supset & \text{SO}(2) \\ [N] & \omega & l \end{array} \right\rangle \quad (1.2.17)$$

y representamos el estado por $|[N]; w, l\rangle$. Las reglas de ramificación son

$$\begin{aligned}\omega &= N, N-2, N-4, \dots, 1 \text{ ó } 0 \quad (N = \text{impar ó par}), \\ l &= \pm\omega, \pm(\omega-1), \dots, 0.\end{aligned}\tag{1.2.18}$$

En este caso, resulta conveniente introducir un número cuántico vibracional, v , que puede ser identificado con el número de cuantos de excitación en el oscilador desplazado,

$$v = \frac{N-\omega}{2}.\tag{1.2.19}$$

Las reglas de ramificación son

$$\begin{aligned}v &= 0, 1, \dots, \frac{N-1}{2} \text{ ó } \frac{N}{2} \quad (N = \text{impar ó par}), \\ l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(N-2v).\end{aligned}\tag{1.2.20}$$

El hamiltoniano es

$$\hat{H}^{(II)} = E_0 + \beta \hat{C}_2[\text{SO}(2)] + A \hat{C}_2[\text{SO}(3)],\tag{1.2.21}$$

y los autovalores

$$\begin{aligned}E^{(II)}(\omega, l) &= E_0 + \beta l^2 + A\omega(\omega+1) = \\ &= E'_0 + \beta l^2 - 4A[(N+1/2)v - v^2].\end{aligned}\tag{1.2.22}$$

El espectro corresponde a un oscilador bidimensional anarmónico desplazado.

La expresión de los estados de la base en función de los operadores creación y destrucción de la cadena I correspondiente al oscilador cilíndrico es bastante simple

$$|[N]; n, l\rangle = \mathcal{N}_{nl}^N (\sigma^\dagger)^{N-n} (\tau_+^\dagger)^{(n+l)/2} (\tau_-^\dagger)^{(n-l)/2} |0\rangle,\tag{1.2.23}$$

con una constante de normalización

$$\mathcal{N}_{nl}^N = \frac{1}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}}.\tag{1.2.24}$$

Para poder calcular los correspondientes elementos de matriz resulta conveniente expresar los autovalores de la cadena II del oscilador desplazado en función de los autovalores de la cadena I, lo cual se consigue mediante la siguiente transformación [Per2008]

$$\begin{aligned}\langle [N]; n, l | [N]; \omega, l \rangle &= (-1)^{N-\omega-l+\text{mod}(l,2)/2} 2^{n/2-\omega} \sqrt{\frac{(2\omega+1)(\omega-l)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! (N-n)!}{(N-\omega)! (N+\omega+1)! \left(\frac{n-l}{2}\right)! (\omega+l)!}} \\ &\times \sum_{m=0}^{\omega-l/2} \frac{(-1)^m (2\omega-2m)! \left(\frac{N-\omega+2m}{2}\right)!}{(\omega-m)! m! (\omega-2m-l)! \left(\frac{N-\omega-n+l+2m}{2}\right)!}.\end{aligned}\tag{1.2.25}$$

A continuación proporcionamos las expresiones analíticas para los elementos matriciales de los generadores del algebra $U(3)$ asociada con la simetría dinámica correspondiente a la cadena I del oscilador cilíndrico (1.2.4a). Los elementos matriciales de los operadores bosónicos σ^\dagger y τ_\pm^\dagger pueden evaluarse fácilmente para los estados de la base (1.2.23) [Per2008],

$$\langle [N+1]; n, l | \sigma^\dagger | [N]; n, l \rangle = \sqrt{N-n+1}, \quad (1.2.26a)$$

$$\langle [N+1]; n+1, l \pm 1 | \tau_\pm^\dagger | [N]; n, l \rangle = \sqrt{\frac{n \pm l + 2}{2}}. \quad (1.2.26b)$$

De estas relaciones, podemos obtener cualquier elemento matricial de alguna combinación de operadores bosónicos de creación y destrucción. Los elementos matriciales de los generadores del algebra son

$$\langle [N]; n, l | \hat{n}_s | [N]; n, l \rangle = N - n, \quad (1.2.27a)$$

$$\langle [N]; n, l | \hat{n} | [N]; n, l \rangle = n, \quad (1.2.27b)$$

$$\langle [N]; n, l | \hat{l} | [N]; n, l \rangle = l, \quad (1.2.27c)$$

$$\langle [N]; n+1, l \pm 1 | \hat{D}_\pm | [N]; n, l \rangle = \pm \sqrt{(N-n)(n \pm l + 2)}, \quad (1.2.27d)$$

$$\langle [N]; n+1, l \pm 1 | \hat{R}_\pm | [N]; n, l \rangle = \sqrt{(N-n)(n \pm l + 2)}, \quad (1.2.27e)$$

$$\langle [N]; n, l \pm 2 | \hat{Q}_\pm | [N]; n, l \rangle = \sqrt{(N \mp l)(n \pm l + 2)}. \quad (1.2.27f)$$

Los elementos de matriz de los operadores bosónicos en la base II se pueden derivar a partir de las expresiones de los autovalores del oscilador desplazado en función de los operadores creación y destrucción. Por ejemplo, los elementos de matriz de σ^\dagger vienen dados por [Per2008]

$$\begin{aligned} \langle [N+1]; \omega_2, l | \sigma^\dagger | [N]; \omega_1, l \rangle = \\ \left(\frac{(N + \omega_1 + 3)(\omega_1 - l + 1)(\omega_1 + l + 1)}{(2\omega_1 + 1)(2\omega_1 + 3)} \right)^{1/2} \delta_{\omega_2, \omega_1 + 1} \\ - \left(\frac{(N - \omega_1 + 2)(\omega_1 - l)(\omega_1 + l)}{(2\omega_1 + 1)(2\omega_1 - 1)} \right) \delta_{\omega_2, \omega_1 - 1} \end{aligned} \quad (1.2.28)$$

Los elementos de matriz para el operador de aniquilación σ se pueden calcular tomando el conjugado hermítico de la expresión anterior. De igual forma se pueden deducir los elementos de matriz para los operadores $\hat{n}_s = \sigma^\dagger \sigma$

$$\begin{aligned} \langle [N]; \omega_2, l | \hat{n}_s | [N]; \omega_1, l \rangle = \\ A_0(N, \omega_1, l) \delta_{\omega_2, \omega_1} - B_0(N, \omega_1, l) \delta_{\omega_2 + 2, \omega_1} - B_1(N, \omega_1, l) \delta_{\omega_2 - 2, \omega_1} \end{aligned} \quad (1.2.29)$$

donde los factores $A_0(N, \omega_1, l)$, $B_0(N, \omega_1, l)$ y $B_1(N, \omega_1, l)$ son funciones tanto de N como de l , los cuales son dos buenos números cuánticos de la cadena $\text{SO}(3)$ [Per2008]. De forma similar, se pueden obtener los elementos de matriz de τ_{\pm}^{\dagger} , τ_{\pm} , y de $\hat{n}_{\pm} = \tau_{\pm}^{\dagger}\tau_{\pm}$. Los elementos de matriz de \hat{n}_s están relacionados con \hat{n} través de la expresión $\hat{n} = \hat{N} - \hat{n}_s$. Una vez conocidos los elementos de matriz de los bosones circulares τ_{\pm}^{\dagger} y escalar σ^{\dagger} , podemos calcular los elementos de matriz de los generadores.

1.2.2.3. El hamiltoniano de dos cuerpos

El hamiltoniano de dos cuerpos más general, respetando la conservación de l , puede expresarse en función de los operadores \hat{n} , \hat{n}^2 , \hat{l}^2 y \hat{P} . Tendremos en consideración que tanto N como l son unos buenos números cuánticos, y las álgebras asociadas con las simetrías dinámicas. Usando las expresiones de la sección anterior, podemos calcular los elementos de matriz del hamiltoniano en la base del oscilador cilíndrico. Los operadores \hat{n} , $\hat{n}(\hat{n} + 1)$, y \hat{l}^2 pertenecen a esta cadena (1.2.4a), y entonces son diagonales:

$$\begin{aligned} \langle [N]; n_2, l | \hat{n} | [N]; n_1, l \rangle &= n_1 \delta_{n_2, n_1}, \\ \langle [N]; n_2, l | \hat{n}(\hat{n} + 1) | [N]; n_1, l \rangle &= n_1(n_1 + 1) \delta_{n_2, n_1}, \\ \langle [N]; n_2, l | \hat{l}^2 | [N]; n_1, l \rangle &= l^2 \delta_{n_2, n_1}. \end{aligned} \quad (1.2.30)$$

El único operador de Casimir de $\text{SO}(3)$ que no es diagonal es el operador \hat{W}^2 . Sus elementos de matriz pueden derivarse a partir de las ecs. (1.2.27),

$$\begin{aligned} \langle N; n_2, l | \hat{W}^2 | N; n_1, l \rangle &= \\ &((N - n_1)(n_1 + 2) + (N - n_1 + 1)n_1 + l^2) \delta_{n_2, n_1} \\ &- ((N - n_1 + 2)(N - n_1 + 1)(n_1 + l)(n_1 - l))^{\frac{1}{2}} \delta_{n_2, n_1 - 2} \\ &- ((N - n_1)(N - n_1 - 1)(n_1 + l + 2)(n_1 - l + 2))^{\frac{1}{2}} \delta_{n_2, n_1 + 2}. \end{aligned}$$

A menudo, en lugar del operador \hat{W}^2 se usa el operador de emparejamiento \hat{P} (1.2.10). Sus elementos de matriz pueden obtenerse trivialmente a partir de la ec. (1.2.31) porque la contribución $N(N + 1)$ es diagonal.

Los restantes operadores de dos cuerpos como, por ejemplo, el operador de Casimir cuadrático del álgebra $\overline{\text{SO}(3)}$ generada por \hat{R}_{\pm} , \hat{l} y la interacción cuadrupolar $\hat{Q} \cdot \hat{Q}$, pueden escribirse en función de los cuatro elementos anteriores.

Las transiciones de fase en los modelos algebraicos pueden estudiarse considerando el hamiltoniano general (1.2.9), función de los operadores de Casimir de todas las cadenas [Gil1979, Fen1981, Gil1978]. Sin embargo, ya que el álgebra $SO(2)$ es un subálgebra común de ambas cadenas, no resulta relevante para el estudio de las transiciones de fase. Además, el operador cuadrático de Casimir de $U(2)$, $\hat{C}_2[U(2)]$, puede escribirse como $\hat{C}_1[U(2)]^2 + \hat{C}_1[U(2)]$ y sus autofunciones son las mismas que de $\hat{C}_1[U(2)]$. Entonces, para el estudio de la transición de fase desde la fase G_1 (lineal) a la fase G_2 (plegada) es suficiente considerar una combinación convexa de los operadores de Casimir lineal $C_1(U(2)) = \hat{n}$ y cuadrático $C_2(SO(3)) = \hat{W}^2 = (\hat{D}_+\hat{D}_- + \hat{D}_-\hat{D}_+)/2 + \hat{l}^2$ de las correspondientes simetrías dinámicas. Por tanto, podemos considerar un hamiltoniano “esencial” [Per2008]

$$\hat{H} = \epsilon \hat{C}_1[U(2)] + A \hat{C}_2[SO(3)] \quad (1.2.31)$$

Este hamiltoniano se puede escribir, salvo un factor constante, en una forma más conveniente como

$$\hat{H} = (1 - \xi)\hat{n} + \xi \frac{N(N+1) - \hat{W}^2}{N-1}, \quad (1.2.32)$$

donde el número cuántico (constante) N es el número de estados ligados que etiquetan totalmente la representación $(N+1)(N+2)/2$ dimensional simétrica $[N]$ de $U(3)$.

En el hamiltoniano anterior hemos introducido el parámetro de control adimensional $\xi \in [0, 1]$. Cuando $\xi = 0$, el sistema está en la fase I, es decir, los autovalores y autofunciones de \hat{H} son aquellos de la simetría dinámica I, mientras cuando $\xi = 1$, el sistema está en la fase II, es decir, los autovalores y autofunciones son aquellos de la simetría II. Se introduce el factor $\frac{1}{N-1}$ para tener en cuenta el hecho de que \hat{P} es un operador a dos cuerpos, mientras \hat{n} es un operador a un cuerpo. Los operadores a un cuerpo escalan como N mientras que los operadores a dos cuerpos escalan como $N(N-1)$.

El espacio de Hilbert es expandido por los vectores de la base ortonormal

$$|N; n, l\rangle = \frac{(\sigma^\dagger)^{N-n} (\tau_+^\dagger)^{\frac{n+l}{2}} (\tau_-^\dagger)^{\frac{n-l}{2}}}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}} |0\rangle, \quad (1.2.33)$$

donde el número cuántico de “doble” $n = N, N-1, N-2, \dots, 0$ y el momento angular $l = \pm n, \pm(n-2), \dots, \pm 1$ o 0 ($n = \text{impar}$ o par) son los autovalores de \hat{n} y \hat{l} , respectivamente.

A partir de los elementos de matriz del hamiltoniano (1.2.32), es fácil ver que la evolución temporal preserva la paridad $e^{i\pi n}$ de un estado dado $|N; n, l\rangle$. Es decir, el operador de paridad $\hat{\Pi} = e^{i\pi \hat{n}}$ conmuta con \hat{H} y ambos operadores pueden ser diagonalizados conjuntamente. La simetría de paridad en el modelo vibrón ha sido considerada, por ejemplo, en Ref. [Lev1988b]. Sin embargo, esta simetría pasa desapercibida cuando se propone un estado prueba variacional para aproximar la energía del estado fundamental en términos de CSs “proyectivos” (no simétrizados) [Per2008] (or ‘Hartree axial’ [Dus2005])

1.3. Aproximación variacional en el modelo de Dicke

En esta sección estudiaremos algunas propiedades del sistema descrito por el modelo de Dicke [Lam2004, Lam2005, Bra2005] mediante una aproximación variacional, caracterizando la función de onda del sistema por un estado prueba en términos de estados coherentes adaptados a la simetría de paridad (SACS, Symmetry-Adapted Coherent States en inglés). Estos estados, introducidos por Castañón y col. [Cas2011a] en este contexto, son una excelente aproximación a la solución exacta del estado fundamental (de paridad par) y primer estado excitado (de paridad impar) de nuestro modelo.

1.3.1. Representación de Holstein-Primakoff y pseudospin grande

Como se ha descrito previamente en la Sección 1.1, el hamiltoniano del modelo de Dicke de un único modo viene dado por

$$H = \omega_0 J_z + \omega a^\dagger a + \frac{\lambda}{\sqrt{2j}} (a^\dagger + a)(J_+ + J_-), \quad (1.3.1)$$

describiendo la interacción de un conjunto de $N = 2j$ átomos de dos niveles energéticos y un campo de radiación de único modo. Se produce una QPT, cuando el parámetro de acoplamiento λ alcanza el valor crítico $\lambda_c = \sqrt{\omega\omega_0}/2$, de una fase normal a una fase superradiante.

Un hecho importante que tendremos en cuenta en esta sección es la conservación de la paridad asociada a 1.3.1, es decir, la evolución temporal preserva la paridad $e^{i\pi(n+m+j)}$ de un determinado estado $|n; j, m\rangle$. En particular, el estado fundamental debe ser par (véase la ec. (1.3.10)).

Las autofunciones de nuestro sistema ψ se pueden expresar como un desarrollo en términos de los vectores de la base $\{|n; j, m\rangle \equiv |n\rangle \otimes |j, m\rangle\}$ del espacio de Hilbert, con $\{|n\rangle\}_{n=0}^{\infty}$ el estado número del campo y $\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j$ los estados de Dicke del sector atómico, como

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j c_{nm}^{(j)} |n; j, m\rangle \quad (1.3.2)$$

donde los coeficientes $c_{nm}^{(j)}$, dependientes del parámetro de control λ , son calculados por diagonalización numérica de (1.3.1).

Haciendo uso de la representación, ya mencionada en (1.1.6), de Holstein-Primakoff [Hol1940] de los operadores de momento angular J_{\pm}, J_z en términos de los operadores bosónicos, $[b, b^{\dagger}] = 1$, y considerando valores altos de j (fijando $b^{\dagger}b$), podemos aproximar $J_+ \simeq \sqrt{2j} b^{\dagger}$ y $J_- \simeq \sqrt{2j} b$. Por tanto, el sector atómico puede ser descrito prácticamente como un oscilador armónico, al igual que el campo. Introduciendo los operadores de posiciones y momentos para estos dos modos bosónicos, podemos escribir la función de onda en representación de posiciones como [Ema2003a]

$$\begin{aligned} \psi(x, y) &= \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j c_{nm}^{(j)} \langle x, y | n; j, m \rangle = \\ &= \sqrt{\omega\omega_0} e^{-\frac{1}{2}(\omega x^2 + \omega_0 y^2)} \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j c_{nm}^{(j)} \frac{H_n(\sqrt{\omega}x) H_{j+m}(\sqrt{\omega_0}y)}{2^{(n+m+j)/2} \sqrt{n!(j+m)!}} \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

donde H_n son los polinomios de Hermite de grado n , y $c_{nm}^{(j)}$ son los coeficientes obtenidos por diagonalización numérica de (1.3.1).

De forma análoga, se puede derivar una expresión en representación de momentos.

1.3.2. Estados coherentes adaptados a la simetría de paridad

A continuación describimos el estado de nuestro sistema en términos de estados coherentes: un CS estándar (canónico o de Glauber) para el campo fotónico,

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (1.3.4)$$

y un CS de spin j para el sector atómico,

$$\begin{aligned} |z\rangle &= (1 + |z|^2)^{-j} e^{zJ_+} |j, -j\rangle = \\ &= (1 + |z|^2)^{-j} \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m}^{1/2} z^{j+m} |j, m\rangle, \end{aligned} \quad (1.3.5)$$

donde $\alpha, z \in \mathbb{C}$. Los CSs fotónicos, $|\alpha\rangle$, y de spin j , $|z\rangle$ forman un conjunto sobrecompleto del correspondiente espacio de Hilbert y cumplen las respectivas relaciones de clausura y de resolución de la identidad

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha, \\ 1 &= \frac{2j+1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |z\rangle \langle z| \frac{d^2z}{(1 + |z|^2)^2}, \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

con $d^2w \equiv d\text{Re}(w)d\text{Im}(w)$ (o $d^2w = r dr d\theta$ en coordenadas polares $w = r e^{i\theta}$) la medida de Lebesgue en \mathbb{C} . Los parámetros complejos α y z están relacionados con el número medio de fotones, como $\langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = |\alpha|^2$, y con la fracción media de átomos excitados, como $\langle z | J_z + j | z \rangle = N|z|^2/(1 + |z|^2)$, respectivamente. Se puede comprobar fácilmente que la amplitud de probabilidad de detectar n fotones y $j + m$ átomos excitados en $|\alpha, z\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |z\rangle$ viene dada por

$$\varphi_{n,m}^{(j)}(\alpha, z) = \langle n | \alpha \rangle \langle j, m | z \rangle = \frac{e^{-|\alpha|^2/2} \alpha^n}{\sqrt{n!}} \frac{\sqrt{\binom{2j}{j+m}} z^{j+m}}{(1 + |z|^2)^j}. \quad (1.3.7)$$

Nuestro sistema se puede caracterizar por un estado prueba variacional producto directo de los CS ordinarios fotónico y de spin j (1.3.4) y (1.3.5), $|\alpha, z\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |z\rangle$. Estos estados prueba constituyen una buena aproximación para determinadas propiedades del estado fundamental, como la energía promedio

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\alpha, z) &= \langle \alpha, z | H | \alpha, z \rangle \\ &= \omega |\alpha|^2 + j\omega_0 \frac{|z|^2 - 1}{|z|^2 + 1} + \lambda \sqrt{2j} (\alpha + \bar{\alpha}) \frac{\bar{z} + z}{|z|^2 + 1} \\ &= \frac{\omega}{2} (q^2 + p^2) - \omega_0 j \cos \theta + \sqrt{4j} \lambda q \sin \theta \sin \phi, \end{aligned} \quad (1.3.8)$$

que define una “superficie de energía” de cuatro dimensiones; donde hemos usado las cuadraturas $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$ y las coordenadas de la “proyección estereográfica” $z = \tan(\frac{\theta}{2})e^{i\phi}$ en la última igualdad por conveniencia. Minimizando con respecto a estas cuatro coordenadas obtenemos los puntos críticos

$$\begin{aligned} \alpha = \alpha_0 &= \begin{cases} 0, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ -\sqrt{2j} \sqrt{\frac{\omega_0}{\omega}} \frac{\lambda}{\lambda_c} \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda}{\lambda_c}\right)^{-4}}, & \text{si } \lambda \geq \lambda_c \end{cases} \\ z = z_0 &= \begin{cases} 0, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ \sqrt{\frac{\frac{\lambda}{\lambda_c} - \left(\frac{\lambda}{\lambda_c}\right)^{-1}}{\frac{\lambda}{\lambda_c} + \left(\frac{\lambda}{\lambda_c}\right)^{-1}}}, & \text{si } \lambda \geq \lambda_c \end{cases} \end{aligned} \quad (1.3.9)$$

Nótese que α_0 y β_0 son reales, por tanto $p_0 = 0 = \phi_0$. Reproducimos aquí el valor crítico $\lambda_c = \sqrt{\omega\omega_0}/2$ obtenido en la Sección 1.1 pero por otro procedimiento.

Aunque el producto directo $|\alpha, z\rangle$ constituye una buena aproximación para determinadas propiedades del estado fundamental, como la energía media en el límite termodinámico $j \rightarrow \infty$, éstos no son adecuados para describir otras propiedades sensibles a la simetría de paridad intrínseca del hamiltoniano (1.3.1), como las medidas de incertidumbre y la entropía [Rom2012b, Cal2012c]. Por este motivo, introducimos un nuevo estado prueba en términos de CSs adaptados a la simetría de paridad.

En realidad, los estados coherentes de paridad definida par (impar) nos permiten una mejor descripción variacional del estado fundamental (primer estado excitado) que aquellos estados sin paridad definida. Nuestro nuevo estado

$$|\alpha, z, \pm\rangle = \frac{|\alpha\rangle \otimes |z\rangle \pm |-\alpha\rangle \otimes | -z\rangle}{\mathcal{N}_{\pm}(\alpha, z)}, \quad (1.3.10)$$

se obtiene mediante la aplicación de los proyectores de paridad par e impar $\hat{\mathcal{P}}_{\pm} = (1 \pm \hat{\Pi})$ sobre el producto directo $|\alpha\rangle \otimes |z\rangle$. El factor $\mathcal{N}_{\pm}(\alpha, z)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{\pm}(\alpha, z) &= \sqrt{2} \left(1 \pm e^{-2|\alpha|^2} \left(\frac{1-|z|^2}{1+|z|^2} \right)^{2j} \right)^{1/2} \\ &= \sqrt{2} \left(1 \pm e^{-(p^2+q^2)} (\cos \theta)^{2j} \right)^{1/2}, \end{aligned} \quad (1.3.11)$$

es un factor de normalización. Estos estados coherentes pares e impares son estados de “tipo gato de Schrödinger”, en el sentido que son una superposición cuántica de estados cuasi-clásicos distinguibles macroscópicamente. Ahora, la nueva superficie de

energía es

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\pm}(\alpha, z) &= \langle \alpha, z, \pm | H | \alpha, z, \pm \rangle \\ &= \frac{\mathcal{H}(\alpha, z) \pm \langle \alpha, z | H | -\alpha, -z \rangle}{\mathcal{N}_{\pm}(\alpha, z)^2/2},\end{aligned}\quad (1.3.12)$$

con los elementos no diagonales

$$\begin{aligned}\langle \alpha, z | H | -\alpha, -z \rangle &= e^{-2|\alpha|^2} \left(\frac{1-|z|^2}{1+|z|^2} \right)^{2j} \times \\ &\left(\omega|\alpha|^2 - j\omega_0 \frac{1+|z|^2}{1-|z|^2} + \lambda\sqrt{2j}(\alpha - \bar{\alpha}) \frac{z-\bar{z}}{1-|z|^2} \right) \\ &= e^{-(p^2+q^2)} (\cos \theta)^{2j} \times \\ &\left(\frac{\omega}{2}(q^2 + p^2) - \omega j (\cos \theta)^{2j-1} - \sqrt{4j} \lambda p \sin \theta \cos \phi \right).\end{aligned}\quad (1.3.13)$$

La mayor complejidad de la estructura de $\mathcal{H}_{\pm}(\alpha, z)$ dificulta la obtención de los nuevos puntos críticos $\alpha_0^{(\pm)}, z_0^{(\pm)}$ a través de un proceso de minimización de la correspondiente superficie de energía. En lugar de llevar a cabo un cálculo numérico de $\alpha_0^{(\pm)}, z_0^{(\pm)}$ para diferentes valores de j y λ , usaremos la siguiente aproximación $\alpha_0^{(\pm)} \approx \alpha_0, z_0^{(\pm)} \approx z_0$, que es bastante buena excepto en la proximidad de λ_c , mejorando cuando el número de partículas $N = 2j$ aumenta (ver Figura 1.1 para el caso simétrico y referencia [Cas2011b]). Con esta aproximación, esperamos un mejor acuerdo entre nuestros resultados numéricos y variacionales, excepto tal vez en la cercanía de λ_c .

Con el fin de calcular las funciones que describen las propiedades de nuestro sistema, tanto en representación de posiciones como de momentos, usamos la representación de Holstein-Primakoff (1.1.6) del momento angular. Redefiniendo

$$\beta \equiv \sqrt{2j} z, \quad (1.3.14)$$

en (1.3.5), podemos ver (véase [Rad1971, Per1986]) que los estados coherentes de spin j $|z\rangle$ se convierten en estados coherentes ordinarios $|\beta\rangle \equiv e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta b^\dagger} |0\rangle$ para $j \gg 1$ (cuando identificamos $|j, -j\rangle \equiv |0\rangle$ y $|j, m\rangle \equiv |m + j\rangle$). Entonces, asumimos la aproximación

$$|z\rangle \simeq |\beta\rangle, \quad (1.3.15)$$

como una buena estimación, incluso para valores relativamente pequeños de j , para $|z|$ en la vecindad del valor de equilibrio $|z_0| < 1$ en (1.3.9). Entonces, introduciendo

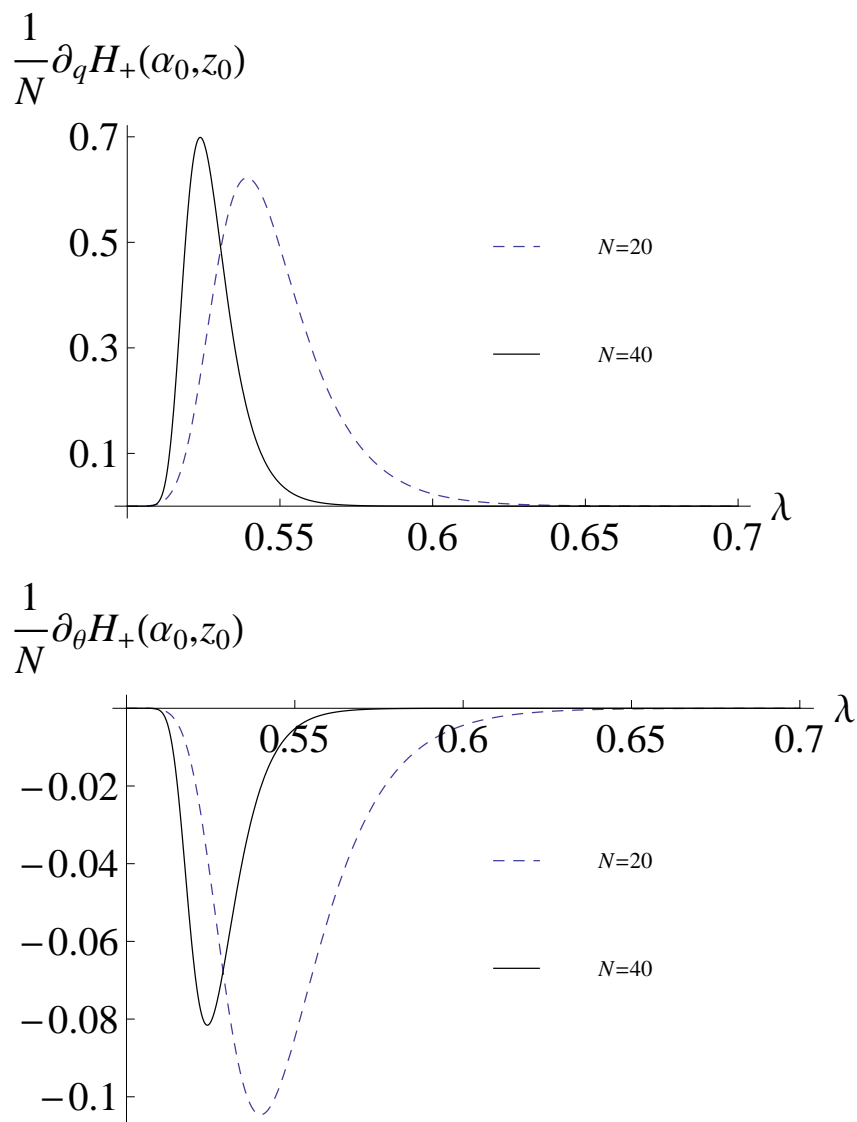


Figura 1.1: Derivada de la energía media $\mathcal{H}_+(\alpha, z)$ por partícula respecto a $q = \sqrt{2} \operatorname{Re}(\alpha)$ y $\theta = 2 \arctan(|z|)$, evaluada en los puntos críticos (1.3.9), como una función de λ para $N = 20$ (línea discontinua) y $N = 40$ (línea continua) partículas y $\omega_0 = \omega = 1$. (Todos los valores están en unidades atómicas.)

los operadores de posición y de momento para los dos modos bosónicos y teniendo en cuenta la representación en posiciones y momentos de un estado coherente ordinario (canónico) ($\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$) [Per1986],

$$\begin{aligned}\langle x|\alpha\rangle &= \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{1/4} e^{i\sqrt{2\omega}\alpha_2 x} e^{-(\sqrt{\omega}x - \sqrt{2}\alpha_1)^2/2}, \\ \langle p|\alpha\rangle &= \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^{1/4} e^{i\sqrt{\frac{2}{\omega}}\alpha_1 p} e^{-(\frac{p}{\sqrt{\omega}} - \sqrt{2}\alpha_2)^2/2},\end{aligned}\quad (1.3.16)$$

se puede obtener fácilmente la expresión explícita de la función de onda del estado fundamental $|\alpha_0, \beta_0, +\rangle$ en representación de posiciones ($\psi(x, y) = \langle x, y|\alpha_0, \beta_0, +\rangle$) y de momentos ($\phi(p_x, p_y) = \langle p_x, p_y|\alpha_0, \beta_0, +\rangle$) como

$$\begin{aligned}\psi(x, y) &= \frac{\sqrt{\omega_0\omega}}{\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)} \left(e^{-\frac{1}{2}(\sqrt{\omega}x - \sqrt{2}\alpha_0)^2 - \frac{1}{2}(\sqrt{\omega_0}y - \sqrt{2}\beta_0)^2} \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{1}{2}(\sqrt{\omega}x + \sqrt{2}\alpha_0)^2 - \frac{1}{2}(\sqrt{\omega_0}y + \sqrt{2}\beta_0)^2} \right), \\ \phi(p_x, p_y) &= \frac{2/\sqrt{\omega_0\omega}}{\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)} e^{-\frac{p_x^2}{2\omega} - \frac{p_y^2}{2\omega_0}} \cos\left(\sqrt{2}\left(\frac{p_x}{\sqrt{\omega}}\alpha_0 + \frac{p_y}{\sqrt{\omega_0}}\beta_0\right)\right),\end{aligned}\quad (1.3.17)$$

donde, ahora $\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0) = \left(2\pi(1 + e^{-2\alpha_0^2 - 2\beta_0^2})\right)^{1/2}$ es un nuevo factor de normalización. Nótese que ψ y ϕ dependen de j y λ a través de α_0 y β_0 . Además, nótese que para $\lambda > \lambda_c$ la función densidad del estado fundamental $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$ se divide en dos paquetes gaussianos centrados en puntos antipodales $\sqrt{2}(\alpha_0, \beta_0)$ y $-\sqrt{2}(\alpha_0, \beta_0)$ en el plano $x - y$. Los paquetes se alejan entre sí a medida que se incrementa el valor de j por encima del punto crítico $\lambda > \lambda_c$. En el espacio de momentos, $\gamma(p_x, p_y) = |\phi(p_x, p_y)|^2$ es una gaussiana modulada por una función coseno que oscila rápidamente para valores altos de j y $\lambda > \lambda_c$. Este comportamiento también aparece reflejado en las soluciones numéricas como se muestra en la Figura 2.2.

1.4. Aproximación variacional en el modelo vibrón

En esta sección, al igual que hicimos en la Sección 1.3 anterior para el modelo de Dicke, estudiaremos algunas propiedades del sistema descrito por el modelo vibrón mediante una aproximación variacional, caracterizando la función de onda del sistema por un estado prueba en términos de estados coherentes adaptados a la simetría de paridad. Estos estados, también denominados “estados gato de Schrödinger” o simplemente “estados gato”, han sido introducidos en este contexto en [Cal2012b], y constituyen una

buena aproximación a la solución cuántica exacta (numérica) del estado fundamental del modelo vibrón.

Partimos del hamiltoniano esencial del modelo vibrón derivado en la Sección 1.2

$$\hat{H} = (1 - \xi)\hat{n} + \xi \frac{N(N+1) - \hat{W}^2}{N-1}, \quad (1.4.1)$$

donde \hat{n} representa el operador número del bosón vectorial y \hat{W}^2 es el operador de Casimir cuadrático $C_2(\text{SO}(3)) = \hat{W}^2 = (\hat{D}_+\hat{D}_- + \hat{D}_-\hat{D}_+)/2 + \hat{l}^2$, siendo \hat{D}_\pm el operador dipolar y \hat{l} el operador momento angular en 2D. El número cuántico N (constante) representa el número total de estados ligados y caracteriza la representación totalmente simétrica $[N]$ de $\text{U}(3)$.

El espacio de Hilbert es expandido por los vectores de la base ortonormal

$$|N; n, l\rangle = \frac{(\sigma^\dagger)^{N-n} (\tau_+^\dagger)^{\frac{n+l}{2}} (\tau_-^\dagger)^{\frac{n-l}{2}}}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}} |0\rangle, \quad (1.4.2)$$

donde el número cuántico de “doblez” $n = N, N-1, N-2, \dots, 0$ y el momento angular $l = \pm n, \pm(n-2), \dots, \pm 1$ ó 0 ($n = \text{impar}$ o par) son los autovalores de \hat{n} y \hat{l} , respectivamente. Se pueden derivar fácilmente los elementos de matriz de \hat{W}^2 (ver por ej. [Per2008]):

$$\begin{aligned} \langle N; n', l | \hat{W}^2 | N; n, l \rangle = & \\ & ((N-n)(n+2) + (N-n+1)n + l^2) \delta_{n',n} \\ & - ((N-n+2)(N-n+1)(n+l)(n-l))^{\frac{1}{2}} \delta_{n',n-2} \\ & - ((N-n)(N-n-1)(n+l+2)(n-l+2))^{\frac{1}{2}} \delta_{n',n+2}. \end{aligned} \quad (1.4.3)$$

A partir de estos elementos de matriz, es fácil ver que la evolución temporal preserva la paridad $e^{i\pi n}$ de un determinado estado $|N; n, l\rangle$. Es decir, el operador de paridad $\hat{\Pi} = e^{i\pi \hat{n}}$ conmuta con \hat{H} y ambos operadores puede ser diagonalizados conjuntamente. La simetría de paridad en el modelo vibrón ha sido considerada, por ejemplo, en [Lev1988b]. Sin embargo, esta simetría pasa desapercibida cuando se propone un estado prueba para aproximar la energía del estado fundamental en términos de CSs “proyectivos” (no simétricos) [Per2008] (o “Hartree axial” [Dus2005])

$$|N; r\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} (b_c^\dagger)^N |0\rangle, \quad b_c^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+r^2}} (\sigma^\dagger + r\tau_x^\dagger), \quad (1.4.4)$$

con $r \geq 0$ un parámetro variacional libre y b_c^\dagger el condensado bosón. Se pueden considerar otras posibilidades rotacionalmente equivalentes [Lev1988a]; además, también se pueden construir las excitaciones intrínsecas reemplazando el bosón intrínseco b_c por bosones de excitación ortogonal, definiendo entonces CSs multiespecies (ver por ej. [Kuy1998, Cap2005]).

A continuación, expresamos nuestro estado prueba(1.4.4) en términos de los vectores de la base (1.4.2) obteniendo de forma explícita los coeficientes de la expansión, que vienen dados por

$$\begin{aligned} |N; r\rangle &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n c_{n,m}^{(N)}(r) |N; n, n-2m\rangle, \\ c_{n,m}^{(N)}(r) &= \sqrt{\binom{N}{n} \binom{n}{m}} \frac{(-r/\sqrt{2})^n (-1)^m}{(1+r^2)^{N/2}}. \end{aligned} \quad (1.4.5)$$

El parámetro variacional r es determinado minimizando el funcional de la energía del estado fundamental “por partícula” [Per2008]:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\xi(r) &= \frac{\langle \hat{H} \rangle}{N} = (1-\xi) \frac{\langle \hat{n} \rangle}{N} + \xi \frac{N(N+1) - \langle \hat{W}^2 \rangle}{N(N-1)} \\ &= (1-\xi) \frac{r^2}{1+r^2} + \xi \left(\frac{1-r^2}{1+r^2} \right)^2, \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

donde hemos usado $\langle \cdot \rangle$ como una abreviatura para designar el valor esperado sobre $|N; r\rangle$. De $\partial \mathcal{E}_\xi(r)/\partial r = 0$ podemos obtener el “radio de equilibrio” r_e y la energía del estado fundamental \mathcal{E}_ξ en función del parámetro de control ξ :

$$\begin{aligned} r_e(\xi) &= \begin{cases} 0, & \xi \leq \xi_c = 1/5 \\ \sqrt{\frac{5\xi-1}{3\xi+1}}, & \xi > \xi_c = 1/5 \end{cases} \\ \mathcal{E}_\xi(r_e(\xi)) &= \begin{cases} \xi, & \xi \leq \xi_c = 1/5 \\ \frac{-9\xi^2+10\xi-1}{16\xi}, & \xi > \xi_c = 1/5. \end{cases} \end{aligned} \quad (1.4.7)$$

Encontramos que $d^2 \mathcal{E}_\xi(r_e(\xi))/d\xi^2$ es discontinua en $\xi_c = 1/5$, entonces se dice que la transición de fase es de segundo orden. Para moléculas triatómicas, la coodenada variacional algebraica (adimensional) r se ha relacionado con un desplazamiento angular [Iac2003, Per2008, Lar2011] (o “ángulo de doblez”) $\theta \sim r/a$, siendo a la longitud de enlace de equilibrio, que refleja el grado de distorsión de la estructura molecular

respecto a la linealidad ($r = 0$). Este desplazamiento r también está relacionado con las coordenadas de los potenciales de Pöschl-Teller (para el oscilador cilíndrico) y de Morse (para el oscilador cilíndrico desplazado). En la (1.4.6) también vemos que r da una medida del número cuántico vibracional promedio $\langle \hat{n} \rangle$ y del número cuántico del momento angular cuadrático $\langle \hat{W}^2 \rangle$.

Aunque $|N; r_e(\xi)\rangle$ describe correctamente la densidad de energía del estado fundamental en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, mostraremos en el capítulo 5 que este estado no capta el comportamiento correcto para otras propiedades sensibles a la simetría de paridad $\hat{\Pi}$ del estado fundamental del hamiltoniano como, por ejemplo, el entrelazamiento rovibracional y las medidas de deslocalización. Este es el motivo por el que introducimos los CSs adaptados a la simetría de paridad.

En efecto, una mejor descripción variacional del estado fundamental (primer estado excitado) viene dada en términos de estados coherentes “projectivos” de paridad par (impar), como

$$|N; r, \pm\rangle \equiv \frac{(1 \pm \hat{\Pi})|N; r\rangle}{\mathcal{N}_{\pm}(r)} = \frac{|N; r\rangle \pm |N; -r\rangle}{\mathcal{N}_{\pm}(r)}, \quad (1.4.8)$$

donde $\mathcal{N}_{\pm}(r) = \sqrt{2}(1 \pm \langle N; -r|N; r\rangle)^{1/2}$ es una constante de normalización, con

$$\langle N; -r|N; r\rangle = ((1 - r^2)/(1 + r^2))^N, \quad (1.4.9)$$

y hemos usado que $\hat{n}^k(\tau_x^\dagger)^n|0\rangle = n^k(\tau_x^\dagger)^n|0\rangle$, y por tanto $\hat{\Pi}(\tau_x^\dagger)^n|0\rangle = (-\tau_x^\dagger)^n|0\rangle$. Nótese que el solapamiento $\langle N; -r|N; r\rangle$ es despreciable para valores altos de N (límite termodinámico) y $r > 0$; por tanto, en este límite, los estados (1.4.8) son una superposición de dos paquetes de onda (coherentes) cuasi-clásicos (distinguidos) no solapados (ver la sección anterior 1.3, y [Cas2011a, Cas2011b] y [Rom2012b, Cal2012c, Rom2012c] para un comportamiento similar en el modelo de Dicke). Esto justifica, para estos estados, el término “estado gato de Schrödinger”. A continuación sólo discutiremos el caso de un estado prueba del estado fundamental con simetría par. Expandiendo $|N; r, +\rangle$ en la base (1.4.2), como hemos hecho en (1.4.5) para CSs no simetrizados, obtenemos los nuevos coeficientes

$$c_{n,m}^{(N,+)}(r) = \frac{c_{n,m}^{(N)}(r) + c_{n,m}^{(N)}(-r)}{\mathcal{N}_+(r)}. \quad (1.4.10)$$

Nótese que ahora $c_{n,m}^{(N,+)}(r) = 0$ para n =impar. El parámetro variacional r es de nuevo calculado minimizando el funcional de la energía “por partícula” $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r) = \langle \hat{H} \rangle_+ / N$ como en (1.4.6), pero ahora para una configuración simétrica $|N; r, +\rangle$, dada en términos de los nuevos valores:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \hat{n} \rangle_+}{N} &= \frac{r^2((1+r^2)^{N-1} - (1-r^2)^{N-1})}{(1+r^2)^N + (1-r^2)^N} \\ \frac{\langle \hat{W}^2 \rangle_+}{N} &= 2 \frac{(1+r^2)^N + (1-r^2)^{N-2}(1+2Nr^2+r^4)}{(1+r^2)^N + (1-r^2)^N}. \end{aligned} \quad (1.4.11)$$

A diferencia de $\mathcal{E}_\xi(r)$, el nuevo funcional de la energía $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r)$ depende de N . De $\partial \mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r) / \partial r = 0$ podemos obtener un nuevo radio de equilibrio $r_e^{(N)}(\xi)$. Por ejemplo, para $N = 2$ y $N = 3$ encontramos explícitamente expresiones analíticas para el radio de equilibrio y la energía del estado fundamental por partícula como una función del parámetro de control ξ :

$$\begin{aligned} r_e^{(2)}(\xi) &= \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{2\xi} + \frac{\sqrt{1-2\xi+5\xi^2}}{2\xi}}, \\ \mathcal{E}_{\xi,+}^{(2)}(r_e^{(2)}(\xi)) &= \frac{1}{2} \left(1 + \xi - \sqrt{1 + \xi(-2 + 5\xi)} \right), \\ r_e^{(3)}(\xi) &= \sqrt{\frac{2}{3} - \frac{1}{3\xi} + \frac{\sqrt{1-4\xi+7\xi^2}}{3\xi}}, \\ \mathcal{E}_{\xi,+}^{(3)}(r_e^{(3)}(\xi)) &= \frac{1}{3} \left(1 + \xi - \sqrt{1 + \xi(-4 + 7\xi)} \right). \end{aligned} \quad (1.4.12)$$

Para valores más altos de N podemos calcular $r_e^{(N)}(\xi)$ numéricamente. La Figura 1.2 compara $r_e(\xi)$ en (1.4.7) con $r_e^{(N)}(\xi)$ para $N = 2, 3, 8, 32$. Observamos que el radio de equilibrio $r_e^{(N)}(\xi)$ de los estados gato par $|N; r, +\rangle$ se aproxima al radio de equilibrio $r_e(\xi)$ del CS $|N; r\rangle$ en el límite termodinámico, esto es, $r_e^{(N)}(\xi) \rightarrow r_e(\xi)$ para $N \rightarrow \infty$. Además, también podemos ver en la Figura 1.3 que la densidad de energía $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r_e^{(N)}(\xi))$ de los estados gato par es una función creciente de N y que también se aproxima a la densidad de energía $\mathcal{E}_\xi(r_e(\xi))$ del CS en el límite termodinámico, es decir, $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r_e^{(N)}(\xi)) \rightarrow \mathcal{E}_\xi(r_e(\xi))$ para $N \rightarrow \infty$. Este comportamiento que se muestra en la Figura 1.3 también es compartido por la densidad de energía exacta obtenida numéricamente. Por tanto, los estados gato par proporcionan una buena descripción del estado fundamental en el régimen de tamaño finito ($N < \infty$).

Para un uso futuro, finalizamos nuestra descripción de los estados variacionales, proporcionando expresiones explícitas de las funciones de onda de la base (1.4.2) en

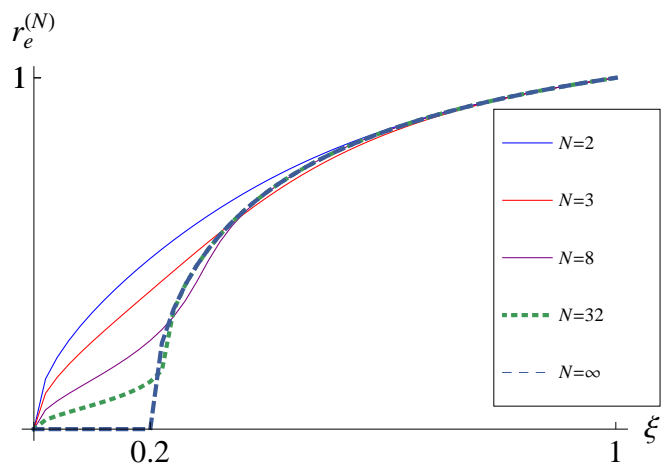


Figura 1.2: Radio de equilibrio $r_e^{(N)}(\xi)$ de estados gato par para $N = 2, 3, 8, 32, \infty$, donde identificamos $r_e^{(\infty)}(\xi) = r_e(\xi)$.

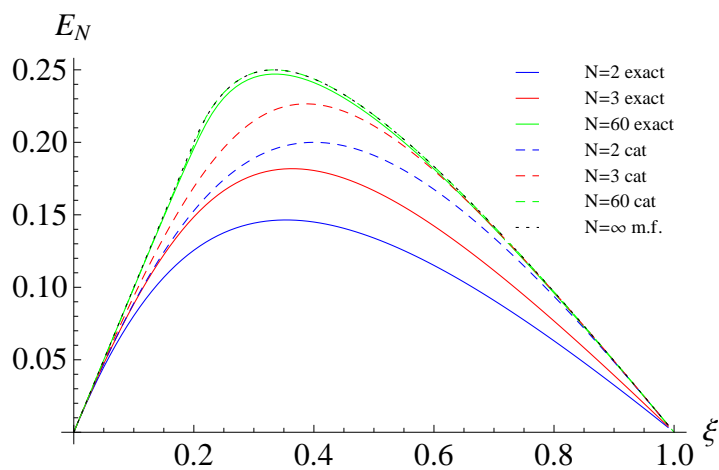


Figura 1.3: Energía media exacta del estado fundamental (línea continua) frente a la energía media “por partícula” del estado “gato” $E_N^+(\xi) \equiv \mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r_e^{(N)}(\xi))$ (línea discontinua) para $N = 2, N = 3$ y $N = 60$. Identificamos $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(\infty)}(r_e^{(\infty)}(\xi)) = \mathcal{E}_{\xi}(r_e(\xi))$ (línea punteada), con la energía media “por partícula” de la aproximación de campo medio. E_N aumenta con N .

representación de “posiciones” $q_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_i^\dagger + a_i)$, con $(a_0, a_1, a_2) \equiv (\sigma, \tau_+, \tau_-)$ nuestros tres operadores de oscilador, en términos de los polinomios de Hermite $H_k(q)$:

$$\langle q | N; n, l \rangle = \frac{2^{-N/2} \pi^{-3/4} e^{-(q_0^2 + q_1^2 + q_2^2)/2}}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}} H_{N-n}(q_0) H_{\frac{n+l}{2}}(q_1) H_{\frac{n-l}{2}}(q_2). \quad (1.4.13)$$

Capítulo 2

Relaciones de incertidumbre entrópicas y QPT

2.1. Introduction

Las relaciones de incertidumbre desempeñan un papel fundamental en Física Cuántica. El principio de incertidumbre de Heisenberg se expresa generalmente como una relación de incertidumbre en términos de varianzas. De forma alternativa, este principio de incertidumbre se puede formular mediante una relación de incertidumbre entrópica [Hir1957, Bia1975, Bec1975] que se ha mostrado de gran utilidad en varias situaciones [Hir1957, Bia1975, Bir1984, Maa1988, San1998, Bia2006, Rom2007, Sch2009a, Bec1975, Gad1984, Gad1985].

Como ya hemos dicho, las transiciones de fase cuánticas son un hecho relevante en problemas cuánticos de muchos cuerpos. Las QPTs son el resultado de la variación de las fluctuaciones cuánticas a temperatura cero. Las QPTs ocurren generalmente en sistemas descritos por un hamiltoniano de la forma $H = H_0 + \lambda H_1$, con H_0 resoluble de forma exacta y H_1 un término de interacción, siendo λ el correspondiente parámetro de control de la intensidad de la interacción. Las QPTs ocurren cuando λ alcanza un valor crítico λ_c donde las simetrías (y por tanto las propiedades) del sistema cambian drásticamente. Esta situación la comparten tanto el modelo de Dicke, que describe un conjunto de átomos interaccionando con un campo de radiación, como el modelo vibrón, utilizado en el estudio de los espectros rotacional y vibracional de moléculas

diatómicas y poliatómicas, como hemos visto en el capítulo 1.

En este capítulo mostraremos que las relaciones de incertidumbre de Rényi, al igual que ya se ha demostrado recientemente con la complejidad relativa y el producto de información Fisher-Rényi [Rom2008a], son importantes en el estudio de las transiciones de fase cuánticas, dadas las particularidades que presenta el punto de transición [Rom2011, Rom2012a, Rom2012b, Nag2012, Ren1961, Rom2012d]. Mostraremos que la suma de entropía de Rényi experimenta un cambio abrupto en el punto de transición, aunque se mantiene aproximadamente constante en ambas fases, a diferencia del producto habitual de varianzas, el cual diverge con λ y el número de partículas N .

La entropía de Rényi [Ren1961] de orden μ para una función densidad de probabilidad de dimensión D , $f(r_1, \dots, r_D)$ normalizada a la unidad viene dada por

$$R_f^\mu \equiv \frac{1}{1-\mu} \ln \int f^\mu(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad \text{for } 0 < \mu < \infty, \quad \mu \neq 1, \quad (2.1.1)$$

donde $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_D)$. La entropía de Rényi puede considerarse como una extensión de la entropía de Shannon con un parámetro [Sha1948], ya que la entropía de Rényi tiende a la entropía de Shannon

$$S_f = - \int f(\mathbf{r}) \ln f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.1.2)$$

cuando $\mu \rightarrow 1$.

La entropía de Rényi se ha aplicado en varios campos de la Física Cuántica, como el entrelazamiento cuántico [Guh2004], los protocolos de comunicación cuántica [Ren2005], las correlaciones cuánticas [Lev2005], las medidas de localización [Arb2003], el resurgimiento cuántico [Rom2008c] y en Física Atómica [Rom2008b, Rom2008a, Nag2009a, Nag2009b]. Estas medidas de información algunas veces dan una mejor descripción de la QPT que las varianzas usuales

$$(\Delta q)^2 = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2 = \int q^2 \varrho(q) dq - \left(\int q \varrho(q) dq \right)^2, \quad (2.1.3)$$

las cuales escalan con el número de “partículas” y por tanto divergen en el límite termodinámico (ver por ej. [Rom2012b, Cal2012c] para el caso del modelo de Dicke).

Supongamos que la distribución de probabilidad $\rho(\mathbf{r})$ se puede asociar con una función de onda $\psi(\mathbf{r})$ como $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$. En el espacio de momentos, la distribución

de probabilidad $\gamma(\mathbf{p})$ viene dada por la función de onda $\phi(\mathbf{p})$ (la transformada de Fourier de la función de onda $\psi(\mathbf{r})$), como $\gamma(\mathbf{p}) = |\phi(\mathbf{p})|^2$. Se puede encontrar en la literatura una relación de incertidumbre para la suma de las entropías de Rényi basada en la desigualdad de Hausdorff-Young [Maa1988, Dem1997, Bia2006]:

$$R_\rho^\mu + R_\gamma^\nu \geq g(\mu, \nu), \quad \frac{1}{\mu} + \frac{1}{\nu} = 2 \quad (2.1.4)$$

$$g(\mu, \nu) = \frac{D}{2} \left[\frac{1}{\mu-1} \ln \left(\frac{\mu}{\pi} \right) + \frac{1}{\nu-1} \ln \left(\frac{\nu}{\pi} \right) \right], \quad (2.1.5)$$

donde D es la dimensión. Esta relación de incertidumbre se aproxima a la relación de incertidumbre de la entropía de Shannon [Bec1975, Hir1957, Bia1975]

$$S_\rho + S_\gamma \geq D \ln(e\pi). \quad (2.1.6)$$

en el límite $\mu \rightarrow 1$. La ec. (2.1.4) se satura para funciones de distribución gaussianas, por tanto, la relación de incertidumbre de Rényi es “fuerte”.

La entropía de Rényi es un funcional de la densidad de probabilidad. Cuando cambia la simetría de la función de onda del estado fundamental, esperamos un cambio en la densidad de probabilidad tanto en el espacio de posiciones como en el de momentos. Por lo tanto, también debe haber un cambio brusco en la suma de las entropías de Rényi. La relación de incertidumbre entrópica proporciona (ver por ejemplo [Hal1993] y sus referencias asociadas) una versión refinada de la relación de incertidumbre de Heisenberg

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \exp[S_\rho + S_\gamma - 1 - \ln \pi] \geq \frac{1}{2}. \quad (2.1.7)$$

Esto representa una ligadura más fuerte para el producto de varianzas que el valor estándar $\frac{1}{2}$. Es decir, la relación con la suma entrópica de Shannon proporciona una forma más útil de la relación de incertidumbre que la relación conteniendo el producto de varianzas. Por tanto, la descripción de la transición de fase cuántica, en términos de la relación de incertidumbre entrópica es más adecuada que mediante la relación de incertidumbre estándar en términos varianzas [Rom2012b]. Recientemente, se ha señalado la importancia de la medida de incertidumbre entrópica para fluctuaciones cuánticas [Maj2004].

Mencionaremos brevemente que la suma de entropías de Rényi es la suma obtenida a partir de las distribuciones marginales del espacio de fases. Se pueden encontrar otras desigualdades interesantes en [Hor2012].

2.2. Relaciones de incertidumbre entrópicas en el modelo de Dicke

En esta sección vamos a mostrar que la relación de incertidumbre para la suma entrópica de Rényi da una nueva perspectiva sobre las fluctuaciones cuánticas. Para ello, elegimos el modelo de Dicke utilizado con gran éxito en el estudio de propiedades de Óptica Cuántica [Dic1954, Hep1973, Wan1973, Car1973, Ema2003a], caóticas [Ema2003a, Ema2003b] y de enredo [Lam2004]. Existen realizaciones experimentales del modelo como ya hemos indicado en la introducción. Como sabemos del capítulo anterior, hay una QPT en el límite $N \rightarrow \infty$. Señalemos que se ha mostrado recientemente un cambio brusco de la entropía Rényi en el punto de transición [Rom2011] y que la transición está caracterizada por una medida de complejidad relativa [Rom2012a].

2.2.1. Modelo de Dicke

Como mencionamos en la Sección 1.1, la interacción de N átomos de dos niveles con un campo de radiación de un único modo de frecuencia ω viene descrito por el hamiltoniano de Dicke

$$H = \omega_0 J_z + \omega a^\dagger a + \frac{\lambda}{\sqrt{2j}} (a^\dagger + a)(J_+ + J_-). \quad (2.2.1)$$

Este modelo presenta una QPT en el límite termodinámico, cuando la constante de λ alcanza un valor crítico λ_c , produciéndose una transición desde una fase normal a una fase superradiante. Como ya hicimos en la Sección 1.1.4, el modelo puede ser resuelto numéricamente diagonalizando la matriz asociada. En nuestra discusión, es importante señalar que la evolución temporal preserva la paridad $e^{i\pi(n+m+j)}$ de un determinado estado $|n, j, m\rangle$ del espacio de Hilbert. En concreto, el estado fundamental debe ser par.

En nuestro análisis hacemos uso de la representación de Holstein-Primakoff [Hol1940] de los operadores de momento angular, J_{\pm}, J_z en función de los operadores bosónicos, $[b, b^{\dagger}] = 1$, dados por

$$\begin{aligned} J_+ &= b^{\dagger} \sqrt{2j - b^{\dagger} b}, & J_- &= \sqrt{2j - b^{\dagger} b} b \\ J_z &= (b^{\dagger} b - j). \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Para valores altos de j (manteniendo constante $b^{\dagger} b$), podemos aproximar $J_+ \simeq \sqrt{2j} b^{\dagger}$ y $J_- \simeq \sqrt{2j} b$, de manera que el sector atómico puede ser descrito prácticamente por un oscilador armónico, al igual el sector de campo. Definiendo los operadores de posición y momento para ambos modos bosónicos podemos expresar la función de onda en representación de posiciones

$$\begin{aligned} \psi(x, y) &= \frac{\sqrt{\omega\omega_0}}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\omega x^2 + \omega_0 y^2)} \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j c_{nm}^{(j)} \\ &\times \frac{H_n(\sqrt{\omega}x) H_{j+m}(\sqrt{\omega_0}y)}{2^{(n+m+j)/2} \sqrt{n!(j+m)!}}, \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

en función de los polinomios de Hermite de grado n , $H_n(x)$. Los coeficientes $c_{nm}^{(j)}$ provienen de la diagonalización numérica de la matriz del hamiltoniano. Se trata de un representación de gran utilidad y usada previamente en la ref. [Ema2003a]. De la misma forma, la función de onda en representación de momentos puede ser escrita como

$$\begin{aligned} \phi(p_x, p_y) &= \frac{1}{\sqrt{\omega\omega_0\pi}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{p_x^2}{\omega} + \frac{p_y^2}{\omega_0})} \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j (-i)^{n+m+j} c_{nm}^{(j)} \\ &\times \frac{H_n(p_x/\sqrt{\omega}) H_{j+m}(p_y/\sqrt{\omega_0})}{2^{(n+m+j)/2} \sqrt{n!(j+m)!}}, \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

donde hemos tenido en cuenta que la transformada de Fourier de $e^{-a^2 x^2/2} H_n(ax)$ viene dada por $(-i)^n e^{-p^2/(2a^2)} H_n(p/a)$. La densidad de probabilidad en posiciones y momentos vienen dadas por $|\psi(x, y)|^2$ y $|\phi(p_x, p_y)|^2$, con las funciones de onda (2.2.3) y (2.2.4). Las entropías de Rényi son calculadas numéricamente.

Las figs. 2.1(a) y (b) representan la suma de incertidumbre de Rényi $R_{\rho}^{\mu} + R_{\gamma}^{\nu}$ para valores del parámetro $\lambda \in [0, 1]$ y para (μ, ν) igual a $(2, 2/3)$ y $(2/3, 2)$, respectivamente. En la fase normal $\lambda < \lambda_c$, la relación de incertidumbre (2.1.4) está saturada con $R_{\rho}^2 +$

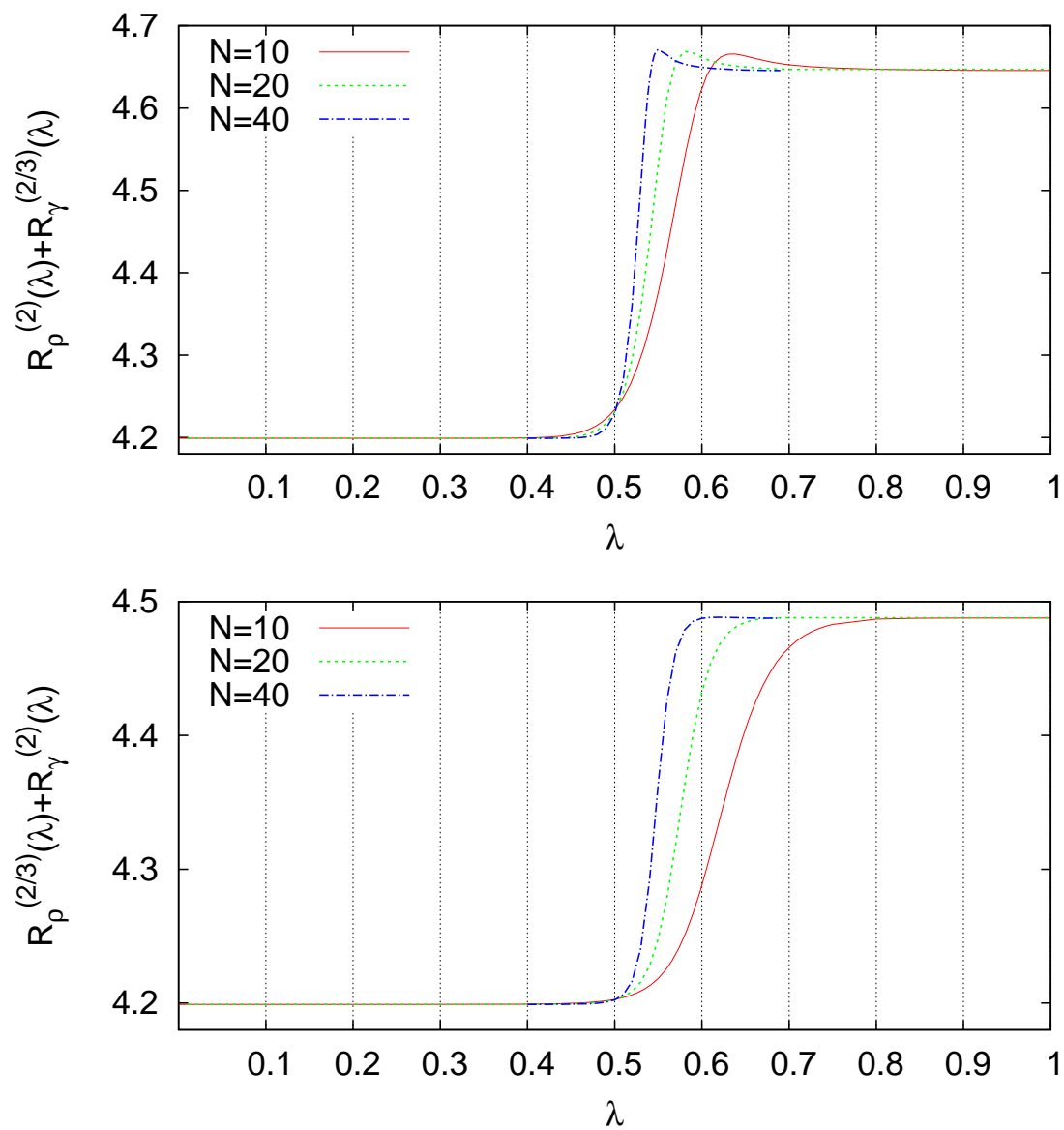


Figura 2.1: Resultados numéricos de la suma entrópica de incertidumbre de Rényi $R_\rho^\mu + R_\gamma^\nu$ para el estado fundamental para $N = 10, 20, 40$ y $\omega_0 = \omega = 1$ ($\lambda_c = 0.5$) y para (μ, ν) igual a $(2, 2/3)$ (superior) y $(2/3, 2)$ (inferior). (Todos los valores están en unidades atómicas).

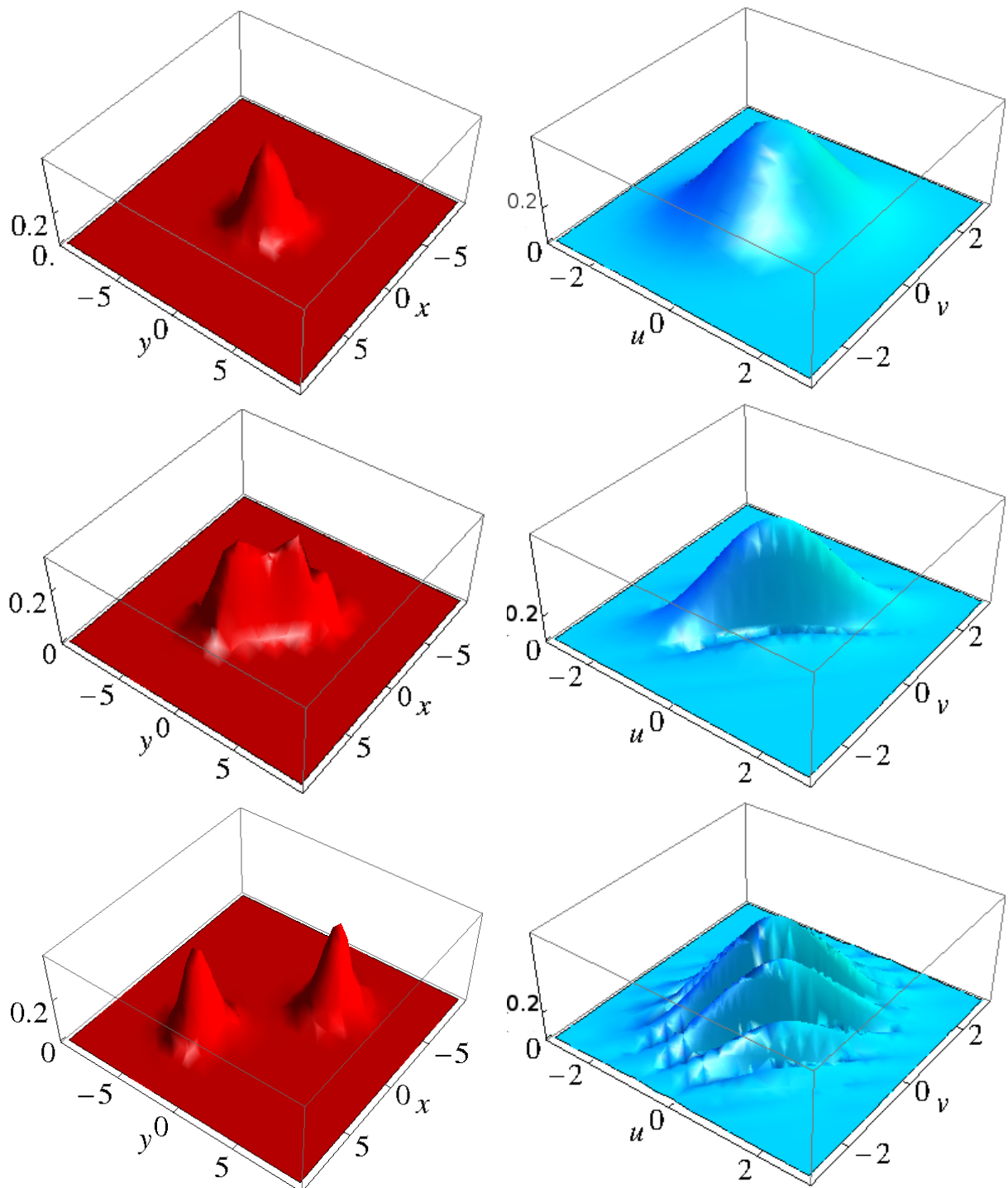


Figura 2.2: Función de densidad del estado fundamental en el espacio de posiciones (izquierda) y en el espacio de momentos (derecha) para diferentes valores de λ (de arriba a abajo $\lambda = 0.3$, $\lambda = 0.55$ y $\lambda = 0.7$) para $\omega_0 = \omega = 1$ y $N = 20$. (Todos los valores están en unidades atómicas)

$R_\gamma^{2/3} \simeq 4.199 \approx g(2, 2/3) = \ln(3^3 \pi^2 / 2^2)$, alcanzando su valor mínimo. En esta fase, la función densidad de posiciones (momentos) es como un paquete gaussiano centrado en el origen, como podemos ver en el panel superior izquierdo (derecho) de la Figura 2.2. En la fase superradiante, $\lambda > \lambda_c$, la suma de incertidumbre de Rényi alcanza el valor constante $R_\rho^2 + R_\gamma^{2/3} \simeq 4.64 \approx \ln(54\sqrt{\pi}\Gamma(7/6)^3/\Gamma(5/3)^3)$ para valores de $\lambda > \lambda_N \geq \lambda_c$, donde $\lambda_N \rightarrow \lambda_c$ cuando $N \rightarrow \infty$ (ver ecuaciones (2.2.7) y (2.2.8) para valores generales de μ, ν). Esta situación corresponde a una función de densidad en posiciones compuesta por dos subpaquetes alejándose uno del otro (para λ creciente) en diferentes cuadrantes en el plano, y en espacio de momentos la función densidad corresponde a un paquete de tipo “gaussiano” modulado, como podemos ver en el panel inferior de la Figura 2.2, respectivamente. La transición desde la primera situación a la segunda es alrededor de $\lambda = \lambda_c$ y el cambio es mas repentino cuanto mayor es el número de partículas (ver Figura 2.1).

Los productos de varianzas $\Delta x \Delta p_x$ y $\Delta y \Delta p_y$ fueron calculados en [Rom2012b] para $\omega_0 = \omega = 1$, es decir, $\lambda_c = 0.5$. Se obtiene, para valores de $\lambda < \lambda_c$, que las relaciones de incertidumbre alcanzan un valor de $1/2$ (es decir, la relación de incertidumbre se satura (2.1.7)) aumentando cuando λ se incrementa desde λ_c y cuando N aumenta, de tal forma que las relaciones de incertidumbre divergen para $\lambda \geq \lambda_c$ cuando N diverge.

La conclusión más importante de este análisis es que la relación de incertidumbre de Rényi tiene en cuenta las fluctuaciones cuánticas o incertidumbre del paquete de ondas (como hace la incertidumbre entrópica [Rom2012b]) mientras que la incertidumbre de varianzas no sólo tiene en cuenta las fluctuaciones cuánticas sino también la posición relativa de los paquetes de onda.

2.2.2. Relaciones de incertidumbre variacionales del modelo de Dicke

Para obtener expresiones analíticas explícitas de las relaciones de incertidumbre haremos uso de estados prueba en términos de estados coherentes adaptados a la simetría de paridad. Estos estados son una excelente aproximación de la solución exacta del estado fundamental (de paridad par) y primer estado excitado (de paridad impar) como indicamos en la Sección 1.3 donde se analizó la aproximación variacional del modelo

de Dicke. Por este motivo los volveremos a usar para abordar el cálculo de entropías y varianzas.

Nuestro sistema se puede caracterizar por un estado prueba variacional producto directo de los CS ordinarios fotónico y de spin j , $|\alpha, z\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |z\rangle$, sin embargo, éstos no son adecuados para describir aquellas propiedades sensibles a la simetría de paridad intrínseca del hamiltoniano (2.2.1), como las medidas de incertidumbre y la entropía [Rom2012b, Cal2012c]. Por tanto, consideramos un nuevo estado prueba en términos de CSs adaptados a la simetría de paridad

$$|\alpha, z, \pm\rangle = \frac{|\alpha\rangle \otimes |z\rangle \pm |-\alpha\rangle \otimes | -z\rangle}{\mathcal{N}_{\pm}(\alpha, z)}, \quad (2.2.5)$$

Estos estados coherentes pares e impares son estados de ‘tipo gato de Schrödinger’, en el sentido que son una superposición cuántica de estados cuasi-clásicos distinguibles macroscópicamente. Al igual que el caso anterior, los parámetros libres de este nuevo estado (SACS) se obtienen minimizando el nuevo funcional de energía $\mathcal{H}_{\pm}(\alpha, z) = \langle \alpha, z, \pm | H | \alpha, z, \pm \rangle$. Sin embargo, dada la complejidad de la función a minimizar, optamos por una aproximación $\alpha_0^{(\pm)} \approx \alpha_0, z_0^{(\pm)} \approx z_0$, que es bastante buena excepto en la proximidad de λ_c , como se indicó en la Sección 1.3.

Con el fin de calcular las relaciones de incertidumbre entrópicas, en representación de posiciones y momentos, haremos uso de la representación de Holstein-Primakoff (2.2.2). Podemos aproximar los CS de spin j , $|z\rangle$ por un CS ordinario $|\beta\rangle \equiv e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta b^\dagger} |0\rangle$ para $j \gg 1$ (cuando identificamos $|j, -j\rangle \equiv |0\rangle$, ver por ej.[Rad1971, Per1986]). Entonces, asumimos la aproximación $|z\rangle \simeq |\beta\rangle$, que resulta ser una aproximación bastante buena incluso para valores relativamente pequeños de j . Ahora, introduciendo los operadores de posición y momentos para estos dos modos bosónicos y teniendo en cuenta la representación en posiciones y momentos de un CS ordinario (canónico), con $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$ podemos expresar la función de ondas del estado fundamental $|\alpha_0, \beta_0, +\rangle$ en representación de posiciones [$\psi(x, y) = \langle x, y | \alpha_0, \beta_0, + \rangle$] y de momentos [$\phi(p_x, p_y) = \langle p_x, p_y | \alpha_0, \beta_0, + \rangle$] como

$$\begin{aligned} \psi(x, y) &= \frac{\sqrt{\omega_0 \bar{\omega}}}{\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)} \left(e^{-\frac{1}{2}(\sqrt{\omega} x - \sqrt{2} \alpha_0)^2 - \frac{1}{2}(\sqrt{\omega_0} y - \sqrt{2} \beta_0)^2} \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{1}{2}(\sqrt{\omega} x + \sqrt{2} \alpha_0)^2 - \frac{1}{2}(\sqrt{\omega_0} y + \sqrt{2} \beta_0)^2} \right), \quad (2.2.6) \\ \phi(p_x, p_y) &= \frac{2/\sqrt{\omega_0 \bar{\omega}}}{\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)} e^{-\frac{p_x^2}{2\omega} - \frac{p_y^2}{2\omega_0}} \cos \left(\sqrt{2} \left(\frac{p_x}{\sqrt{\omega}} \alpha_0 + \frac{p_y}{\sqrt{\omega_0}} \beta_0 \right) \right), \end{aligned}$$

donde $\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0) = \left(2\pi(1 + e^{-2\alpha_0^2 - 2\beta_0^2})\right)^{1/2}$ es un nuevo factor de normalización. Como se comentó en la Sección 1.1.2.4, la función densidad del estado fundamental $\rho(x, y) = |\psi(x, y)|^2$ se divide en dos paquetes gaussianos centrados que se alejan entre sí a medida que se incrementa el valor de j por encima del punto crítico $\lambda > \lambda_c$. En el espacio de momentos, $\gamma(p_x, p_y) = |\phi(p_x, p_y)|^2$ es una gaussiana modulada por una función coseno, que oscila rápidamente para valores altos de j y $\lambda > \lambda_c$. Este comportamiento también aparece reflejado en las soluciones numéricas como se muestra en la Figura 2.2.

Esta estructura particular de la función de onda del estado fundamental da lugar a una función escalón de Heaviside para la entropía de Rényi en representación de posiciones

$$R_\rho^\mu = \begin{cases} \ln\left(\mu^{\frac{1}{\mu-1}}\pi\right), & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ \ln\left(2\mu^{\frac{1}{\mu-1}}\pi\right), & \text{si } \lambda \geq \lambda_c \end{cases} \quad (2.2.7)$$

y de momentos

$$R_\gamma^\nu = \begin{cases} \ln\left(\nu^{\frac{1}{\nu-1}}\pi\right), & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ \ln\left(\left(\frac{\Gamma(2\nu+1)}{\Gamma^2(\nu+1)2^\nu}\right)^{\frac{1}{1-\nu}}\pi\right), & \text{si } \lambda \geq \lambda_c \end{cases} \quad (2.2.8)$$

en el límite termodinámico ($j \rightarrow \infty$). Este comportamiento puede deducirse de la Figura 2.3. En la fase normal, la desigualdad (2.1.4) satura (es decir, la entropía total es exactamente $g(\mu, \nu)$) porque la función de onda del estado fundamental (2.2.6) es una gaussiana centrada en el origen en representación tanto de posiciones como de momentos. Por encima del punto crítico λ_c , el paquete de ondas gaussiano original se divide en dos subpaquetes con apenas solapamiento, lo que da como resultado un aumento repentino de la entropía total de Rényi. En el límite $\mu, \nu \rightarrow 1$, recuperamos la expresión de la entropía de Shannon dada en [Rom2012b]

$$S_\rho + S_\gamma = \begin{cases} S^{\text{normal}} = \ln(e\pi)^2 \simeq 4.29, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ S^{\text{super}} = \ln((2\pi)^2 e) \simeq 4.68, & \text{si } \lambda \geq \lambda_c \end{cases} \quad (2.2.9)$$

Para cualquier combinación de valores (μ, ν) , podemos calcular la diferencia de incertidumbre

$$\Delta U(\mu, \nu) \equiv (R_\rho^\mu + R_\gamma^\nu)_{\text{super}} - (R_\rho^\mu + R_\gamma^\nu)_{\text{normal}}$$

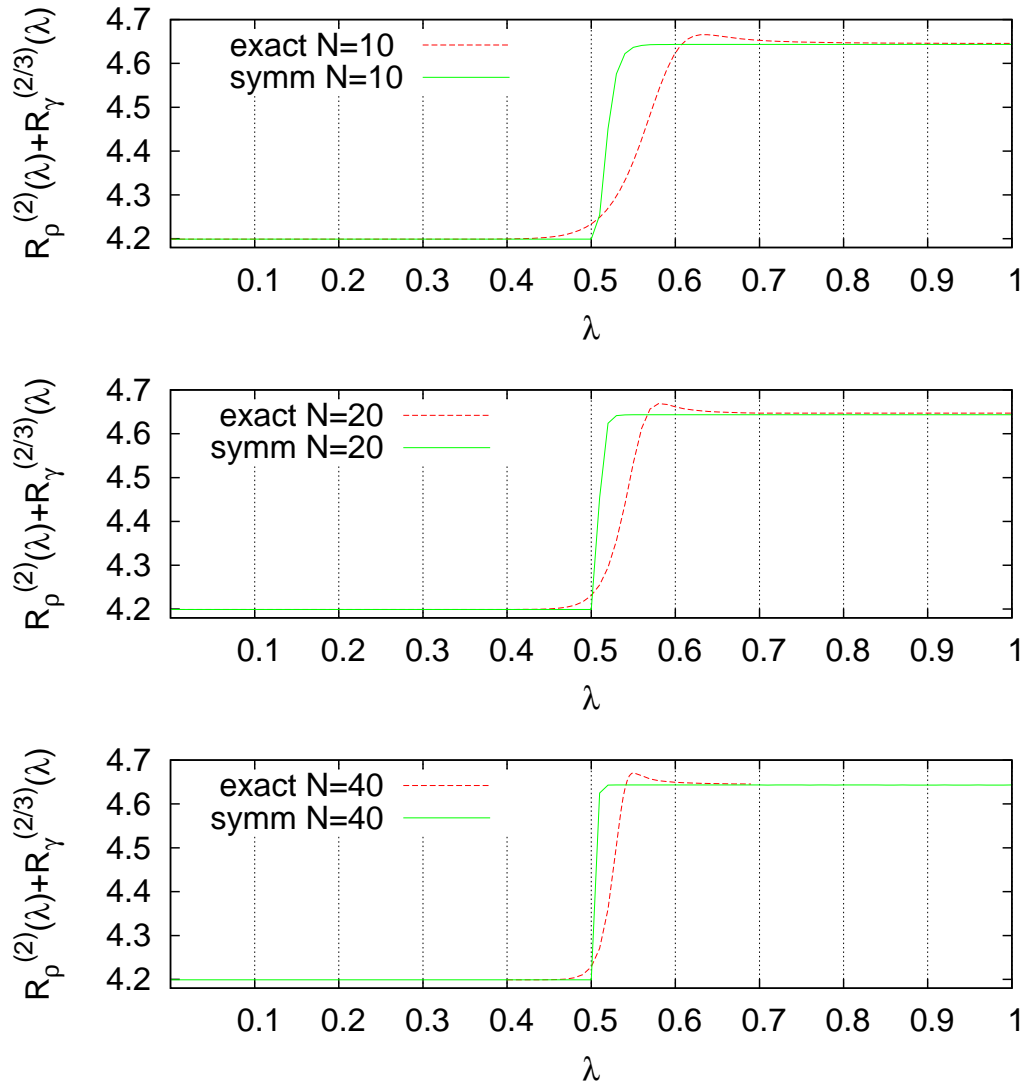


Figura 2.3: Resultados de la aproximación analítica y numérica (exacta) para la suma entrópica de la incertidumbre de Rényi del estado fundamental $R_p^\mu + R_\gamma^\nu$ para $N = 10$ (panel superior), 20 (panel medio) y 40 (panel inferior) y $\omega_0 = \omega = 1$. (Todos los valores están en unidades atómicas).

en el límite termodinámico, como

$$\Delta U(\mu, \nu) = \frac{1}{1-\nu} \ln \left(\frac{2\Gamma(\nu+1/2)}{\Gamma(\nu+1)\sqrt{\pi}} \right) \quad \text{con } \nu \in [1/2, \infty) \quad (2.2.10)$$

Esta diferencia es una función decreciente de ν , por lo que la mayor diferencia $\Delta U(\mu, \nu) = \ln \left(\frac{2^4}{\pi^2} \right)$ se alcanzará cuando $(\mu, \nu) = (\infty, 1/2)$. Entonces, esta combinación de coeficientes (μ, ν) , que dan la medida de incertidumbre $R_\rho^\infty + R_\gamma^{1/2}$ con

$$R_\rho^\infty = \lim_{\mu \rightarrow \infty} R_\rho^\mu = -\ln(\text{máx } \rho(\mathbf{r})), \quad (2.2.11)$$

es la más adecuada para detectar la transición de fase en este modelo. Es importante indicar que la mejor combinación (μ, ν) depende del modelo.

También debemos señalar que el comportamiento de $R_\rho^\mu + R_\gamma^\nu$ como una función escalón de Heaviside, también aparecerá en otros sistemas cuánticos donde un paquete de ondas se divide en varios subpaquetes tras un valor crítico λ_c de algún parámetro λ de la teoría. En particular, para M subpaquetes idénticos con un solapamiento despreciable entre ellos, la entropía de Rényi en representación de posiciones R_ρ^μ aumenta en una cantidad $\ln(M)$.

Para completar, calculamos las expresiones explícitas de los valores esperados

$$\begin{aligned} \langle a \rangle_+ &= \langle b \rangle_+ = \langle a^\dagger \rangle_+ = \langle b^\dagger \rangle_+ = 0, \\ \langle a^\dagger a \rangle_+ &= -\alpha_0^2 (1 - 4\pi/\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)^2), \\ \langle b^\dagger b \rangle_+ &= -\beta_0^2 (1 - 4\pi/\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)^2), \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

y sus fluctuaciones

$$\begin{aligned} \Delta x &= \sqrt{\frac{\frac{1}{2} + \frac{4\pi\alpha_0^2}{\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)^2}}{\omega}}, & \frac{\Delta p_x}{\sqrt{\omega}} &= \sqrt{2\alpha_0^2 \left(\frac{2\pi}{\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)^2} - 1 \right) + \frac{1}{2}}, \\ \Delta y &= \sqrt{\frac{\frac{1}{2} + \frac{4\pi\beta_0^2}{\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)^2}}{\omega_0}}, & \frac{\Delta p_y}{\sqrt{\omega_0}} &= \sqrt{2\beta_0^2 \left(\frac{2\pi}{\mathcal{N}_+(\alpha_0, \beta_0)^2} - 1 \right) + \frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

Otras cantidades físicas de interés son la “inversión atómica”

$$\langle J_3 \rangle_+ / j = \langle b^\dagger b \rangle_+ / j - 1 \xrightarrow{j \rightarrow \infty} 2 \frac{\frac{\lambda}{\lambda_c} - \left(\frac{\lambda}{\lambda_c} \right)^{-1}}{\frac{\lambda}{\lambda_c} + \left(\frac{\lambda}{\lambda_c} \right)^{-1}} - 1,$$

y el número medio de fotones

$$\langle a^\dagger a \rangle_+ / j \xrightarrow{j \rightarrow \infty} 2 \frac{\omega_0}{\omega} \left(\frac{\lambda}{\lambda_c} \right)^2 \left(1 - \left(\frac{\lambda}{\lambda_c} \right)^{-4} \right)$$

para $\lambda > \lambda_c$ en el límite termodinámico.

2.3. Relaciones de incertidumbre entrópicas en el modelo vibrón $U(3)$

En esta sección estudiaremos la entropía de Rényi y las varianzas, como medidas de deslocalización, para el modelo vibrón [Iac1995, Iac1981, Iac1996], al igual que hicimos en la Sección 2.2 para el modelo de Dicke. Estas cantidades nos permiten caracterizar la QPT de una fase lineal a una fase “plegada“ a través de un valor crítico ξ_c de un parámetro de control ξ . Los resultados numéricos serán comparados con los resultados obtenidos mediante una aproximación variacional en términos de estados coherentes adaptados a la simetría de paridad [Cal2012b](también denominados “estados gato de Schödinger”), los cuales constituyen una buena aproximación para describir la deslocalización del estado fundamental de modelo vibrón a través del punto crítico para moléculas de “tamaño” N .

2.3.1. Modelo vibrón

Los modelos vibrón en 2D, como se indicó en la Sección 1.2, describen un sistema con un grado de libertad del tipo dipolo restringido a un movimiento planar. Como ya hemos visto, asumiendo que el número total de bosones $\hat{N} = \hat{n} + \hat{n}_\sigma$ (siendo $\hat{n} = \tau_+^\dagger \tau_+ + \tau_-^\dagger \tau_-$ y $\hat{n}_\sigma = \sigma^\dagger \sigma$) y el momento angular en 2D, \hat{l} , se conservan, tan sólo hay dos límites de simetría dinámica, $G_1 = U(2)$ y $G_2 = SO(3)$, asociados con dos cadenas algebraicas que parten de $U(3)$ y finalizan en $SO(2)$: las denominadas cadena del oscilador “cilíndrico” y la cadena del oscilador “desplazado”. Para el estudio de la transición de fase cuántica, podemos considerar un hamiltoniano esencial del modelo vibrón $U(3)$ como combinación convexa de los operadores de Casimir lineal $C_1(U(2)) = \hat{n}$, y cuadrático $C_2(SO(3)) = \hat{W}^2 = (\hat{D}_+ \hat{D}_- + \hat{D}_- \hat{D}_+)/2 + \hat{l}^2$ (con \hat{D}_\pm el operador dipolar) de las correspondientes simetrías dinámicas [Per2008]

$$\hat{H} = (1 - \xi)\hat{n} + \xi \frac{N(N+1) - \hat{W}^2}{N-1}, \quad (2.3.1)$$

donde el número cuántico (constante) N es el número total de estados ligados que caracteriza la representación totalmente simétrica $[N]$ of $U(3)$ de dimensión $(N+1)(N+2)/2$. Este modelo presenta una QPT “de forma” en $\xi_c = 0.2$ [Per2008] desde la fase

G_1 (lineal) a la fase G_2 (plegada).

El espacio de Hilbert es expandido por los vectores de la base ortonormal

$$|N; n, l\rangle = \frac{(\sigma^\dagger)^{N-n} (\tau_+^\dagger)^{\frac{n+l}{2}} (\tau_-^\dagger)^{\frac{n-l}{2}}}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}} |0\rangle, \quad (2.3.2)$$

donde el número cuántico de “doblez” $n = N, N-1, N-2, \dots, 0$ y el momento angular $l = \pm n, \pm(n-2), \dots, \pm 1$ ó 0 (n =impar o par) son los autovalores de \hat{n} y \hat{l} , respectivamente. Los elementos de matriz de \hat{W}^2 pueden derivarse fácilmente (ver por ej. [Per2008]) Se puede comprobar que la evolución temporal preserva la paridad $e^{i\pi n}$ de un determinado estado $|N; n, l\rangle$. Teniendo en cuenta este hecho, consideraremos en nuestro análisis estados prueba adaptados a la simetría de paridad, como hicimos en el estudio del modelo de Dicke.

Con el fin de calcular las medidas de información, escribiremos las funciones de la base (2.3.2) en representación de “posiciones” $q_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_i^\dagger + a_i)$, considerando $(a_0, a_1, a_2) \equiv (\sigma, \tau_+, \tau_-)$ nuestros tres operadores de oscilador, que pueden ser escritos en términos de los polinomios de Hermite $H_k(x)$ como

$$\begin{aligned} \langle q | N; n, l \rangle &= \frac{2^{-N/2} \pi^{-3/4} e^{-(q_0^2 + q_1^2 + q_2^2)/2}}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}} \\ &\times H_{N-n}(q_0) H_{\frac{n+l}{2}}(q_1) H_{\frac{n-l}{2}}(q_2). \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

2.3.2. Entropía de Rényi y varianzas numéricas

Consideramos

$$|\psi_\xi^{(N)}\rangle = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n c_{n,m}^{(N)}(\xi) |N; n, l = n - 2m\rangle \quad (2.3.4)$$

el estado fundamental exacto de nuestro sistema, obtenido por diagonalización del hamiltoniano (2.3.1) en función de los vectores de la base (2.3.2) con coeficientes $c_{n,m}^{(N)}(\xi)$ (que tienen que ser calculados numéricamente). Denotamos por $\psi_\xi^{(N)}(q) = \langle q | \psi_\xi^{(N)} \rangle$ la correspondiente función de onda en representación de posiciones $q = (q_0, q_1, q_2)$ y por $\rho_\xi^{(N)}(q) = |\psi_\xi^{(N)}(q)|^2$ la distribución de densidad del estado fundamental, para el cual la entropía de Rényi

$$R_N^\alpha(\xi) = \frac{1}{1-\alpha} \ln \int_{\mathbb{R}^3} (\rho_\xi^{(N)}(q))^\alpha d^3q, \quad (2.3.5)$$

con $\alpha > 0$, es una función del parámetro de control ξ para cada N .

En la Fig. 2.4 representamos las entropías de Rényi (y Shannon) del estado fundamental del modelo vibrón en representación de posiciones para unos pocos valores seleccionados de $\alpha = 1, 2, 3/4$ y $N = 8, 16, 20$, como una función de ξ . Podemos ver que las entropías de Rényi experimentan un aumento repentino a través del punto crítico de transición de fase $\xi_c \simeq 0.2$, indicándonos una deslocalización del paquete de onda del estado fundamental en la segunda fase (plegada), $\xi > 0.2$. Además, en la Fig. 2.4 podemos ver que $R_N^\alpha(\xi)$ es una función creciente con N y ξ y decreciente con α .

Podemos verificar para este modelo, que la función de onda del estado fundamental en el espacio de momentos $\tilde{\psi}_\xi^{(N)}(p) = \langle p | \psi_\xi^{(N)} \rangle$ (es decir, la transformada de Fourier de $\psi_\xi^{(N)}(q)$) tiene la misma forma funcional como $\psi_\xi^{(N)}(q)$. Entonces, nos restringiremos exclusivamente al espacio de posiciones. Además, los valores medios

$$\langle q_i \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} q_i \rho_\xi^{(N)}(q) d^3q = 0, \quad i = 0, 1, 2, \quad (2.3.6)$$

son cero, por lo que los productos de las varianzas de incertidumbre estándar vendrán dados por los cuadrados medios

$$(\Delta q_i)^2 = \langle q_i^2 \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} q_i^2 \rho_\xi^{(N)}(q) d^3q, \quad i = 0, 1, 2. \quad (2.3.7)$$

La simetría rotacional implica que $\langle q_1^2 \rangle = \langle q_2^2 \rangle$. En la Fig. 2.5 vemos que la incertidumbre de q_0 decrece, mientras la incertidumbre de $q_{1,2}$ se incrementa, a través de la transición de fase, y ambas cantidades escalan con N (el tamaño del sistema). Además, la varianza total

$$\langle q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 \rangle = \frac{3}{2} + N \quad (2.3.8)$$

es constante (independiente de ξ), lo que está relacionado con la conservación del número total de bosones $\hat{N} = a_0^\dagger a_0 + a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2$.

2.3.3. Entropía de Rényi y varianzas variacionales

Como hemos visto, el límite clásico, de campo medio o termodinámico $N \rightarrow \infty$, de este modelo se estudia usando un algoritmo introducido por Gilmore [Gil1979] que hace uso de CSs (condensado bosónico) semiclásico (ver por ej. [Per1986, Kla1985, Ali2000])

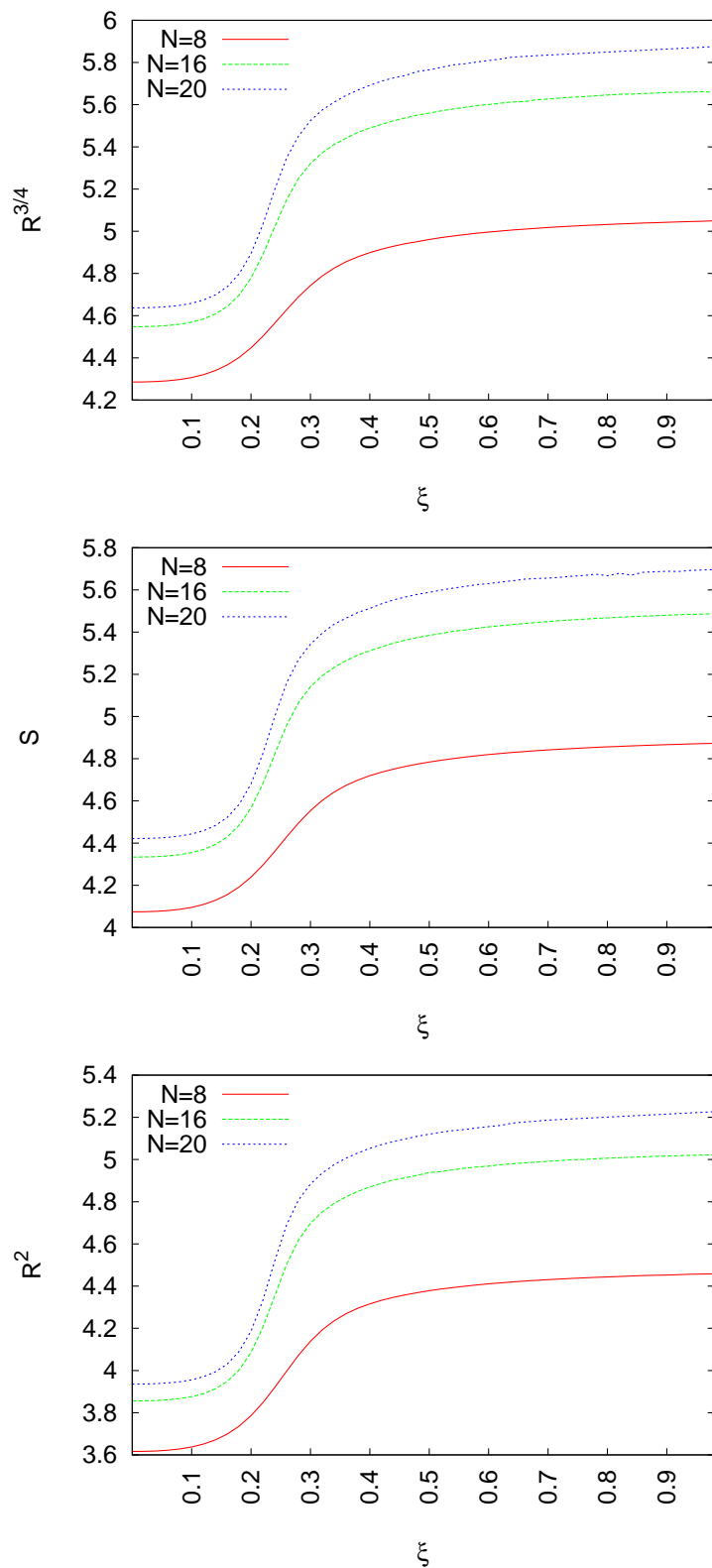


Figura 2.4: Entropías de Rényi $R_N^\alpha(\xi)$ para el estado fundamental exacto (numérico) del modelo vibrón model como una función de ξ para $\alpha = 3/4$ (panel superior), $\alpha = 1$ (panel medio) y $\alpha = 2$ (panel inferior) para $N = 8, 16$ y 20 .

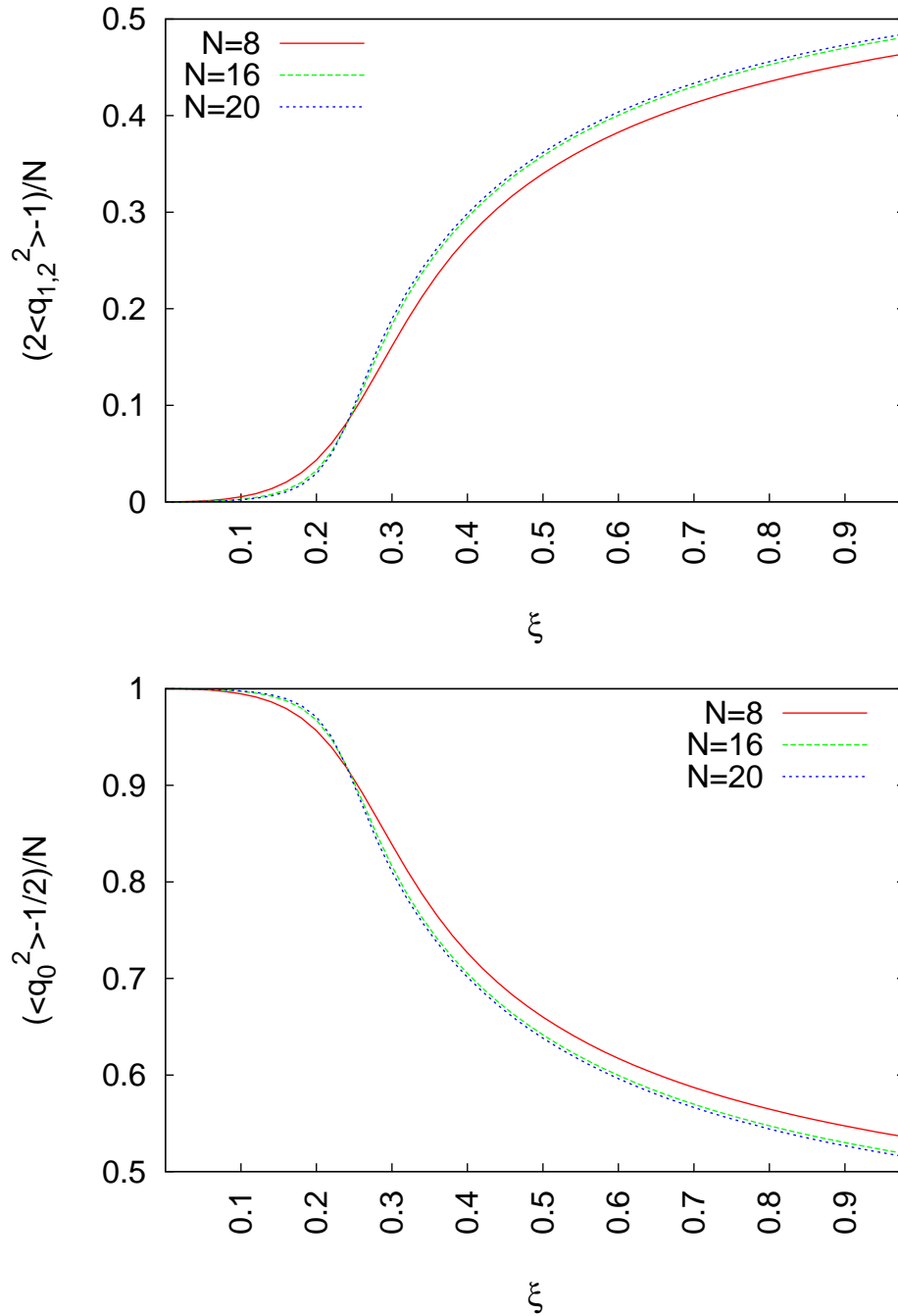


Figura 2.5: Varianzas escaladas $(2\langle q_{1,2}^2 \rangle - 1)/N$ (panel superior) y $(\langle q_0^2 \rangle - 1/2)/N$ (panel inferior) para el estado fundamental exacto (numérico) del modelo vibrón como una función de ξ para $N = 8, 16$ y 20 .

como referencias básicas sobre CSs), como estados prueba variacionales que aproximan la energía del estado fundamental, en particular, los CSs “proyectivos” [Per2008]

$$|N; r\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} (b_c^\dagger)^N |0\rangle, \quad b_c^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+r^2}} (\sigma^\dagger + r\tau_x^\dagger), \quad (2.3.9)$$

con $r \geq 0$ un parámetro libre variacional y b_c^\dagger el condensado bosónico. También se pueden considerar otras posibilidades rotacionalmente equivalentes [Lev1988a]; además, las excitaciones intrínsecas también pueden ser construidas reemplazando el bosón intrínseco b_c por bosones de excitación ortogonal, definiendo entonces “CS múltiples” (ver por ej. [Kuy1998, Cap2005]). En esta sección nos limitaremos al estado prueba fundamental que, en representación de posiciones, puede ser escrito como

$$\begin{aligned} \psi_r^{(N)}(q) &= \langle q | N; r \rangle \\ &= \frac{e^{-\frac{1}{2}(q_0^2 + q_1^2 + q_2^2)} H_N \left(\frac{q_0 - \frac{r}{\sqrt{2}}(q_1 - q_2)}{\sqrt{1+r^2}} \right)}{2^{N/2} \pi^{3/4} \sqrt{N!}}, \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

donde hemos usado (2.3.3) en algunos pasos.

Como se comentó en la Sección 1.4 del capítulo anterior, el parámetro variacional r se determina minimizando el funcional de energía por “partícula” del estado fundamental [Per2008],

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_\xi(r) &= \frac{\langle \hat{H} \rangle}{N} = (1 - \xi) \frac{\langle \hat{n} \rangle}{N} + \xi \frac{N(N+1) - \langle \hat{W}^2 \rangle}{N(N-1)} \\ &= (1 - \xi) \frac{r^2}{1+r^2} + \xi \left(\frac{1-r^2}{1+r^2} \right)^2 \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ representa el valor esperado sobre $|N; r\rangle$. A partir de $\partial \mathcal{E}_\xi(r) / \partial r = 0$ obtenemos el “radio de equilibrio” r_e y la energía el estado fundamental \mathcal{E}_ξ como una función del parámetro de control ξ :

$$\begin{aligned} r_e(\xi) &= \begin{cases} 0, & \xi \leq \xi_c = 1/5 \\ \sqrt{\frac{5\xi-1}{3\xi+1}}, & \xi > \xi_c = 1/5 \end{cases} \\ \mathcal{E}_\xi(r_e(\xi)) &= \begin{cases} \xi, & \xi \leq \xi_c = 1/5 \\ \frac{-9\xi^2 + 10\xi - 1}{16\xi}, & \xi > \xi_c = 1/5. \end{cases} \end{aligned} \quad (2.3.12)$$

Como $d^2 \mathcal{E}_\xi(r_e(\xi)) / d\xi^2$ es discontinua en $\xi_c = 1/5$, se dice que la transición de fase es de segundo orden.

Aunque $|N; r_e(\xi)\rangle$ describe correctamente algunas propiedades de campo medio, como la energía media, y el comportamiento del estado fundamental en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, hemos mostrado recientemente en [Cal2012b] que éste no caracteriza correctamente el comportamiento de otras propiedades del estado fundamental sensibles a la simetría de paridad $\hat{\Pi}$ del hamiltoniano, como por ejemplo, el entrelazamiento rovibracional, que se describe en el capítulo 5. Por tanto, disponemos de una mejor descripción variacional del estado fundamental en términos de CSs adaptados a la simetría de paridad [Cal2012b]

$$\psi_{r,+}^{(N)}(q) \equiv \frac{\psi_r^{(N)}(q) + \psi_{-r}^{(N)}(q)}{\sqrt{2 \left(1 + \left(\frac{1-r^2}{1+r^2}\right)^N\right)}}. \quad (2.3.13)$$

En [Cal2012b] proponemos que (2.3.13) es una superposición de dos paquetes de onda (coherentes) cuasi-clásicos no solapados (distinguidos), lo que justifica la denominación de estos estados como “estados gato de Schrödinger”. Este tipo de estados prueba en términos de CS adaptados por simetría, ya fueron propuestos en [Cas2011a, Cas2011b] para estudiar la QPT del modelo de Dicke, y son los que hemos usado en la Sección 2.2.2 para calcular las relaciones de incertidumbre entrópicas y varianzas en el modelo de Dicke.

El parámetro variacional r en (2.3.13) se calcula de nuevo minimizando el funcional de energía por “partícula” del estado fundamental $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r) = \langle \hat{H} \rangle_+ / N$ como en (2.3.11), pero para una configuración simétrica (2.3.13). A diferencia de $\mathcal{E}_{\xi}(r)$, el nuevo funcional de energía $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r)$ depende de N . A partir de $\partial \mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r) / \partial r = 0$ podemos obtener el nuevo “radio de equilibrio” $r_e^{(N)}(\xi)$. La Figura 2.6 compara $r_e(\xi)$ en (2.3.12) con $r_e^{(N)}(\xi)$ para $N = 8, 16, 60$. Observamos que, en el límite termodinámico, $r_e^{(\infty)}(\xi) = r_e(\xi)$. La Figura 2.7 también compara la densidad de energía exacta del estado fundamental (como una función de ξ) con la energía media “por partícula” del estado “gato” (2.3.13) $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r_e^{(N)}(\xi))$ y del estado “de campo medio” (2.3.10) $\mathcal{E}_{\xi}(r_e(\xi))$. Vemos que el estado “gato” (2.3.13) proporciona una energía más baja que el estado de “campo medio” (2.3.10) pero tiende a ésta en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, al igual que la densidad de energía exacta del estado fundamental. Hemos representado los dos casos más desfavorables, $N = 2$ y 3 . Para $N > 60$, los valores de la densidad de energía del estado exacto, del estado “gato” y de “campo medio” son bastante similares.

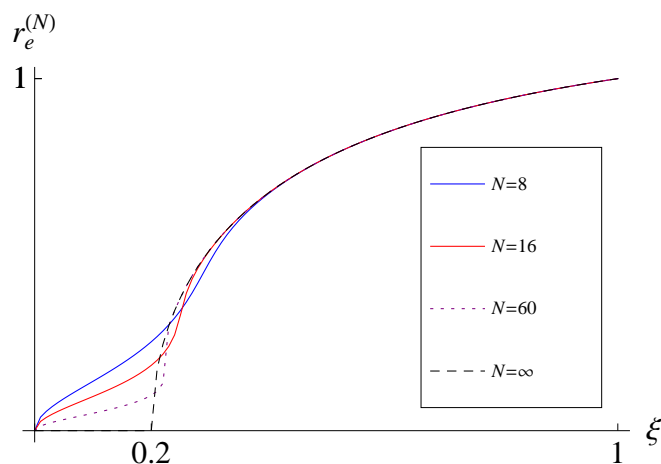


Figura 2.6: Radio de equilibrio $r_e^{(N)}(\xi)$ de la aproximación gato para $N = 8, 16$ y 60 . Estamos identificando $r_e^{(\infty)}(\xi) = r_e(\xi)$ (línea discontinua), como el radio de equilibrio de la aproximación de campo medio.

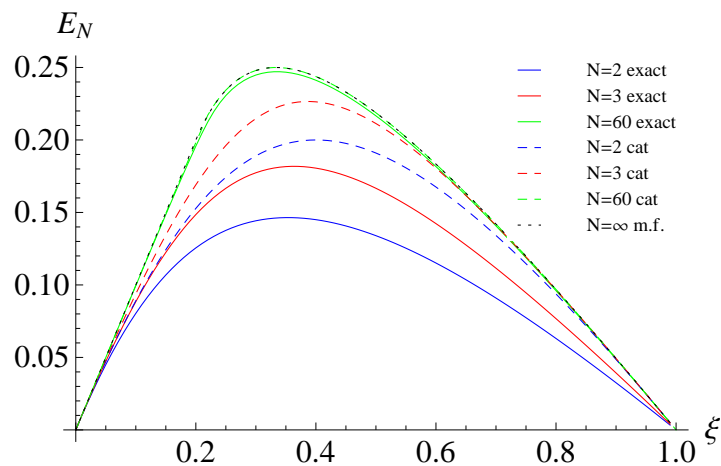


Figura 2.7: Densidad de energía exacta del estado fundamental (línea continua) frente a la energía media “por partícula” del estado “gato” $E_N^+(\xi) \equiv \mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r_e^{(N)}(\xi))$ (línea discontinua) para $N = 2, N = 3$ y $N = 60$. Identificamos $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(\infty)}(r_e^{(\infty)}(\xi)) = \mathcal{E}_{\xi}(r_e(\xi))$ (línea punteada), con la energía media “por partícula” de la aproximación de campo medio. E_N aumenta con N .

Denotamos por

$$\rho_\xi^{(N)}(q)_{\text{m.f.}} = |\psi_{r_e(\xi)}^{(N)}(q)|^2, \quad (2.3.14)$$

$$\rho_\xi^{(N)}(q)_{\text{cat}} = |\psi_{r_e^{(N)}(\xi,+)}^{(N)}(q)|^2, \quad (2.3.15)$$

la densidad de probabilidad del estado fundamental variacional para la configuración de campo medio (2.3.10) y la configuración gato (2.3.13). La Figura 2.8 representa las entropías de Rényi $R_N^\alpha(\xi)$ para el estado fundamental variacional, y las configuraciones de “campo medio” y “gato” como una función de ξ para diferentes valores de α y N . Vemos que, mientras que la entropía de Rényi de la configuración de campo medio permanece constante con el parámetro de control ξ , la configuración “gato” capta la QPT en el punto crítico $\xi_c = 0.2$, mostrando un exceso de entropía de $\Delta R_N^\alpha(\xi) \simeq 0.5$ entre las dos fases, lo que explica la deslocalización repentina que experimenta el estado fundamental a través de la transición de fase.

Los valores de $R_N^\alpha(\xi)$ para el estado variacional gato coinciden exactamente con los valores exactos (numéricos) en la fase lineal rígida $\xi \simeq 0$, aunque difieren en la fase plegada rígida $\xi \simeq 1$. Podemos ver en la Figura 2.9 de forma conjunta la entropías exactas (línea continua), gato (discontinua) y de campo medio (línea constante) para $R_{20}^\alpha(\xi)$ con $\alpha = 3/4, 1$ y 2 (de arriba a abajo). En la Figura 2.9, tanto la entropía numérica como la entropía gato captan la deslocalización del estado fundamental, mientras que la entropía de campo medio permanece constante. Es fácil darse cuenta de por qué las entropías de Rényi(2.3.5) son constantes para la densidad de probabilidad de campo medio (2.3.14).

En realidad, el cambio de variables $q' = q\mathcal{R}(r)$, con $q = (q_0, q_1, q_2)$ y

$$\mathcal{R}(r) = \frac{1}{\sqrt{1+r^2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & r \\ -\frac{r}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{1+r^2}}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{r}{\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{1+r^2}}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.3.16)$$

una matriz ortogonal (no única) ($\mathcal{R}\mathcal{R}^T = 1$), nos permite escribir la función de onda del campo medio (2.3.10) simplemente como

$$\psi_r^{(N)}(q) = \frac{e^{-\frac{1}{2}q'^2} H_N(q'_0)}{2^{N/2} \pi^{3/4} \sqrt{N!}}, \quad (2.3.17)$$

donde hemos usado que $q^2 = q'^2$ (transformación ortogonal). Teniendo en cuenta que la medida de Lebesgue d^3q en (2.3.5) es invariante bajo rotaciones ($d^3q = d^3q'$), y que la

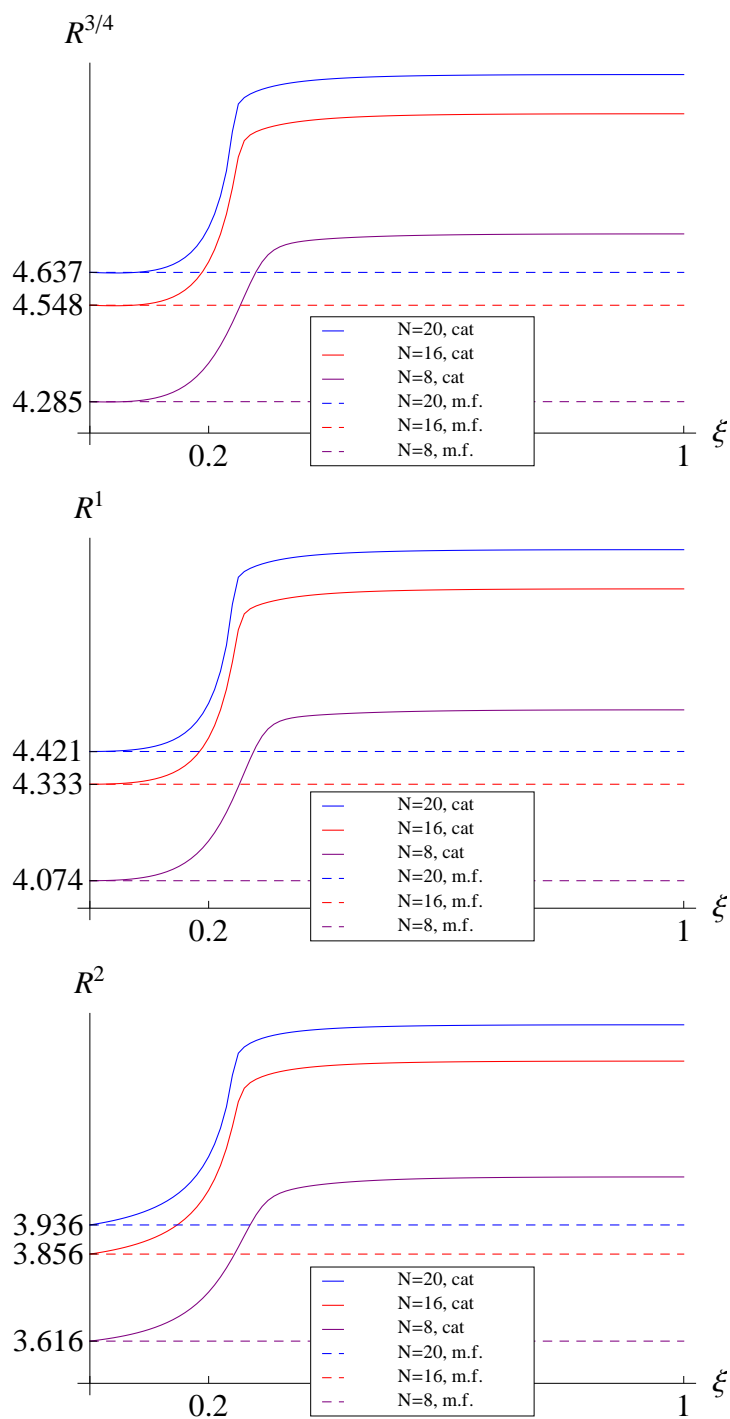


Figura 2.8: Entropías de Rényi $R_N^\alpha(\xi)$ para las configuraciones de “campo medio” (línea discontinua constante) y “gato” del estado fundamental variacional, como una función de ξ para $\alpha = 3/4$ (panel superior), $\alpha = 1$ (panel medio) y $\alpha = 2$ (panel inferior) para $N = 8, 16$ y 20 .

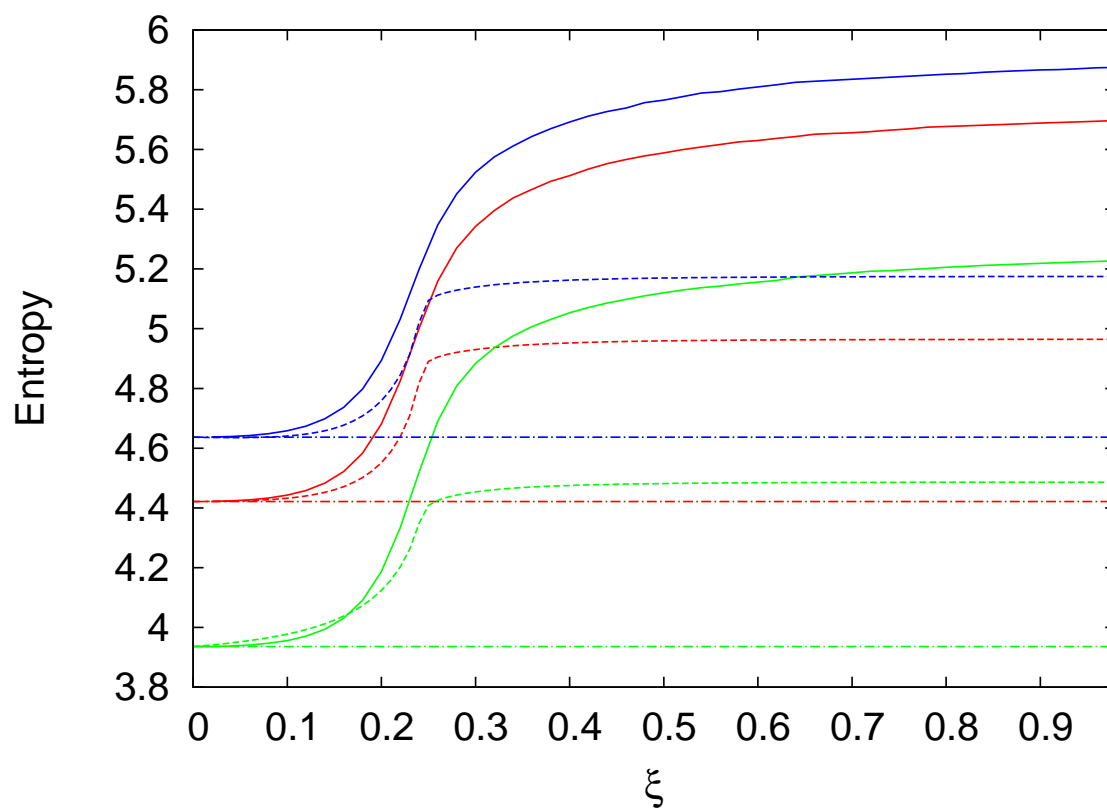


Figura 2.9: Entropías de Rényi $R_N^\alpha(\xi)$ para (de arriba a abajo) $\alpha = 3/4, 1$ y 2 , numérica (línea continua), y las aproximaciones variacionales “gato” (línea punteada) y “campo medio” (línea constante) como una función de ξ para $N = 20$.

dependencia explícita de $\psi_r^{(N)}(q)$ en r desaparece cuando la escribimos en función de q' , obtenemos finalmente que R_N^α es independiente de ξ para la densidad de probabilidad de campo medio (2.3.14) (a través de la dependencia de $r = r_e(\xi)$).

En este punto hay que subrayar que la aproximación gato da una buena descripción cuantitativa de la fase lineal rígida, pero tiene un valor diferente en la fase plegada rígida, aunque cualitativamente captura el comportamiento correcto. Queremos hacer hincapié en que hay que esperar algunas diferencias debido a que la minimización del hamiltoniano con este tipo de estados variacionales nos proporcionan una aproximación de la energía exacta del estado fundamental en un orden $1/N$ (ver por ej. Figura 2.7 y [Per2011, Dus2005] para un estudio más profundo de este asunto).

Las integrales se calculan numéricamente para valores específicos de α, N y ξ . Sin embargo, todavía podemos proporcionar un valor asintótico $N \gg 1$ de $R_N^\alpha(0)$ para algunos valores de α . De hecho, teniendo en cuenta que $r_e^{(N)}(0) = 0, \forall N$, el estado gato (2.3.13) cuando $\xi = 0$ factoriza como

$$\psi_{0,+}^{(N)}(q) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(q_0^2+q_1^2+q_2^2)} H_N(q_0)}{2^{N/2} \pi^{3/4} \sqrt{N!}}. \quad (2.3.18)$$

Entonces, podemos definir la densidad en $\xi = 0$ como el producto de una contribución “rotacional” por otra “vibracional”

$$\rho^{(N)}(q) = |\psi_{0,+}^{(N)}(q)|^2 = \rho_R^{(N)}(q_0) \rho_V^{(N)}(q_1, q_2) \quad (2.3.19)$$

con

$$\rho_R^{(N)}(q_1, q_2) = \frac{e^{-(q_1^2+q_2^2)}}{\pi}, \quad (2.3.20)$$

$$\rho_V^{(N)}(q_0) = \frac{e^{-q_0^2} H_N^2(q_0)}{2^N \sqrt{\pi N!}}. \quad (2.3.21)$$

La entropía de Rényi cuando $\xi = 0$ puede ser escrita como la suma de dos contribuciones (rotacional más vibracional)

$$R_N^\alpha(0) = \tilde{R}_N^\alpha + V_N^\alpha \quad (2.3.22)$$

con

$$\tilde{R}_N^\alpha = \ln \pi - \frac{\ln \alpha}{1 - \alpha} \quad (2.3.23)$$

$$V_N^\alpha = \frac{1}{1 - \alpha} \ln \left(\int \rho_V^{(N)}(q_0) dq_0 \right). \quad (2.3.24)$$

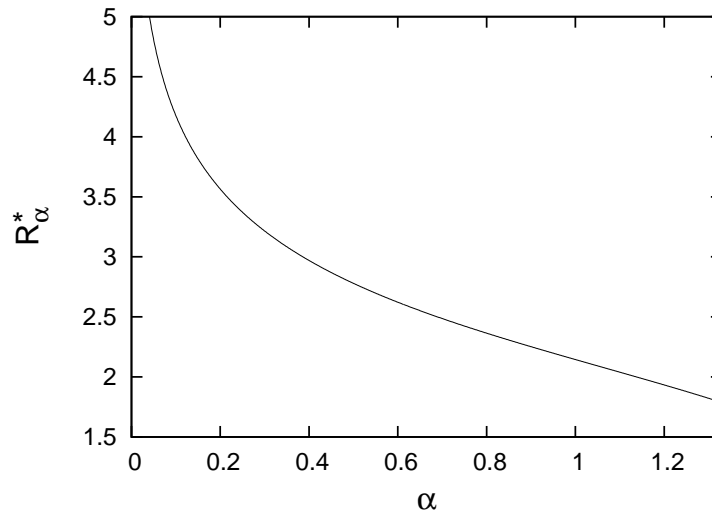


Figura 2.10: Parte dependiente de α de la entropía de Rényi, R_α^* , para $\xi = 0$.

La entropía de Rényi vibracional adopta la forma

$$V^\alpha = \frac{1}{1 - \alpha} \left[\ln \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha q_0^2} H_N^{2\alpha}(q_0) dq_0 \right) - \alpha \ln (2^N \sqrt{\pi} N!) \right]. \quad (2.3.25)$$

En el límite $\alpha \rightarrow 1$, obtenemos la entropía de Shannon vibracional (que ya ha sido determinado por Assche y col. [Van1995]):

$$V_N^1 = \ln(\sqrt{\pi} 2^N N!) + N + \frac{1}{2} + \frac{1}{2^N \sqrt{\pi} N!} S(H_N), \quad (2.3.26)$$

donde

$$S(H_N) = - \int e^{-q_0^2} H_N^2(q_0) \ln (H_N(q_0))^2 dq_0 \quad (2.3.27)$$

es la entropía de Shannon vibracional de los polinómios de Hermite H_N . Parece ser que esto último no ha sido determinado todavía. Sin embargo, para valores grandes de N , la integral de la ec. (2.3.27) puede aproximarse por [San2010, Apt1996, Apt1995, Deh1994, Deh1997]:

$$S(H_N) \approx N + \frac{3}{2} - \ln \pi - \ln \sqrt{2N}, \quad N \gg 1, \quad (2.3.28)$$

y la entropía de Shannon tiene el valor asintótico

$$V_N^1 \approx \ln \frac{\pi\sqrt{2N}}{e}, \quad N \gg 1. \quad (2.3.29)$$

No se han encontrado expresiones analíticas de V_N^α para un determinado valor de α . Sin embargo, debemos mencionar que existen resultados analíticos para el caso asintótico $N \gg 1$ para $\alpha \in (0, 4/3]$ [San2010, Apt2010]:

$$V_N^\alpha \simeq \frac{1}{2} \ln(2N + 1) + \frac{1}{1 - \alpha} \left[\alpha \ln \left(\frac{2}{\pi} \right) + \ln \left(\frac{\Gamma(\alpha + 1/2)\Gamma(1 - \alpha/2)}{\Gamma(\alpha + 1)\Gamma((3 - \alpha)/2)} \right) \right]. \quad (2.3.30)$$

La entropía de Shannon calculada con esta expresión asintótica es $S = R^1 = 4.13$ para $N = 20$, mientras los resultados varacionales y numéricos dan 4.42 (ver Fig. 2.8). La expresión asintótica para $R_{20}^{3/4}(0)$ da 4.42 mientras los valores variacionales y numéricos son 4.37. Para hacerse una idea de la dependencia de la entropía de Rényi con α debemos notar en primer lugar que en este caso ($\xi = 0$), podemos separar en la entropía total su dependencia con N y α , como

$$R_N^\alpha(0) = V_N^1 + R_\alpha^*. \quad (2.3.31)$$

V_N^1 es el valor asintótico para la entropía de Shannon variacional dada por la ec.(2.3.29) y

$$R_\alpha^* \simeq \frac{1}{1 - \alpha} \ln \left[\frac{1}{\alpha} \left(\frac{2}{\pi} \right)^\alpha \frac{\Gamma(\alpha + 1/2)\Gamma(1 - \alpha/2)}{\Gamma(\alpha + 1)\Gamma((3 - \alpha)/2)} \right] + 1 \quad (2.3.32)$$

incluye la dependencia con α . La Fig. 2.10 presenta R_α^* para $(0, 4/3]$. Podemos ver que V_N^1 y R_α^* son aproximadamente del mismo orden de magnitud para $N = 20$. Como V_N^1 contiene el logaritmo de N , éste aumenta con N más bien lentamente y R_α^* puede ser despreciable sólo para valores muy grandes de N (por ejemplo, para $N = 10^{23}$ obtenemos $V_N^1 = 26.97$). La entropía de Rényi se comporta como $\frac{1}{2} \ln N$ cuando N es grande en el intervalo $\alpha \in (0, 4/3]$. Estamos inclinados a conjeturar el mismo comportamiento para otros valores de α y un comportamiento similar para otros valores de ξ .

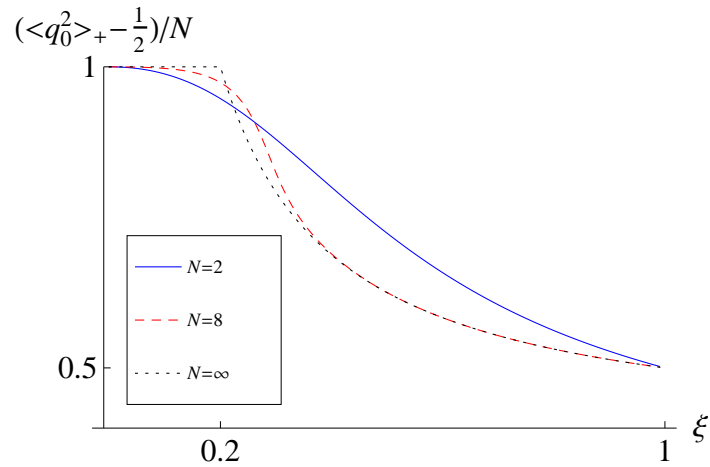


Figura 2.11: Varianza normalizada para la componente ‘escalar’ q_0 en las aproximaciones gato ($N = 2$ y 8) y campo medio ($N = \infty$).

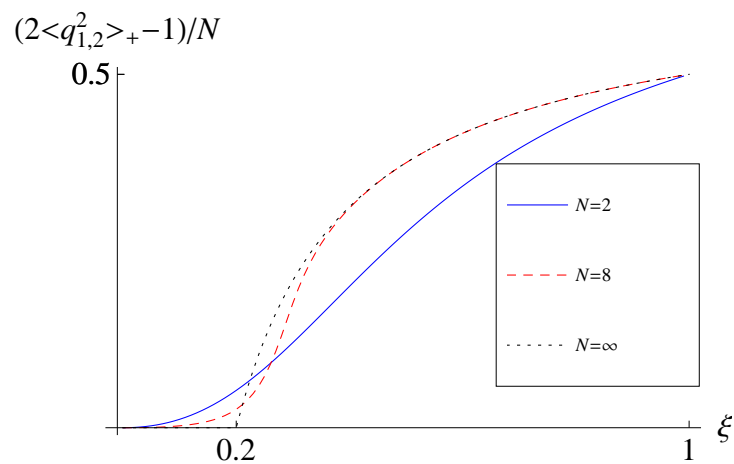


Figura 2.12: Varianza normalizada para las componentes “vectoriales” $\vec{q} = (q_1, q_2)$ en las aproximaciones gato ($N = 2$ y 8) y campo medio ($N = \infty$).

Finalmente, comparamos las varianzas para la configuración simetrizada (“gato”) y la de “campo medio” no simetrizada. Consideremos

$$\langle q_i^2 \rangle_+(\xi) = \int_{\mathbb{R}^3} q_i^2 \rho_\xi^{(N)}(q) \text{cat} d^3 q, \quad i = 0, 1, 2, \quad (2.3.33)$$

el valor esperado de la posición cuadrática para la configuración simétrica (y $\langle q_i^2 \rangle$ para la configuración no simétrica). Es fácil darse cuenta que $\langle q_i \rangle_+ = 0 = \langle q_i \rangle, \forall i$. Entonces, las fluctuaciones vienen dadas por los cuadrados medios

$$\begin{aligned} \langle q_0^2 \rangle(r^2) &= \frac{1}{2} + N \frac{1}{1+r^2}, \\ \langle q_{1,2}^2 \rangle(r^2) &= \frac{1}{2} + \frac{N}{2} \frac{r^2}{1+r^2}, \end{aligned} \quad (2.3.34)$$

para la configuración no simétrica y por

$$\begin{aligned} \langle q_0^2 \rangle_+(r^2) &= \frac{(1+r^2)^N \langle q_0^2 \rangle(r^2) + (1-r^2)^N \langle q_0^2 \rangle(-r^2)}{(1+r^2)^N + (1-r^2)^N}, \\ \langle q_{1,2}^2 \rangle_+(r^2) &= \frac{(1+r^2)^N \langle q_{1,2}^2 \rangle(r^2) + (1-r^2)^N \langle q_{1,2}^2 \rangle(-r^2)}{(1+r^2)^N + (1-r^2)^N}, \end{aligned} \quad (2.3.35)$$

para la configuración simétrica, siendo r una abreviatura para el radio de equilibrio, $r_e(\xi)$ y $r_e^{(N)}(\xi)$ en las ecuaciones (2.3.34) y (2.3.35), respectivamente. Por tanto las fluctuaciones dependen de N y del parámetro de control ξ . La simetría rotacional implica que $\langle q_1^2 \rangle = \langle q_2^2 \rangle$ en ambos casos. Tengamos en cuenta de nuevo que, en ambos casos, la varianza total

$$\langle q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 \rangle = \frac{3}{2} + N = \langle q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 \rangle_+ \quad (2.3.36)$$

es independiente de ξ . Las figuras 2.11 y 2.12 comparan las fluctuaciones para las aproximaciones variacionales del estado fundamental simétrico ($N = 2$ y $N = 8$) y no simétrico ($N = \infty$) (compárese con los valores numéricos exactos de la Fig. 2.5).

Estas figuras muestran que las varianzas normalizadas para la configuración simétrica son aproximaciones de tamaño finito ($N < \infty$) de la varianza para la configuración no simétrica ($N = \infty$) y tienden a ésta en el límite termodinámico. Por lo tanto, mientras que la incertidumbre de Rényi es muy sensible a la simetría de paridad, las varianzas no lo son. Por último, en la Figura 2.13 incluimos una comparación entre las varianzas numérica, gato y de campo medio para el caso $N = 20$ para apreciar las diferencias entre ellas.

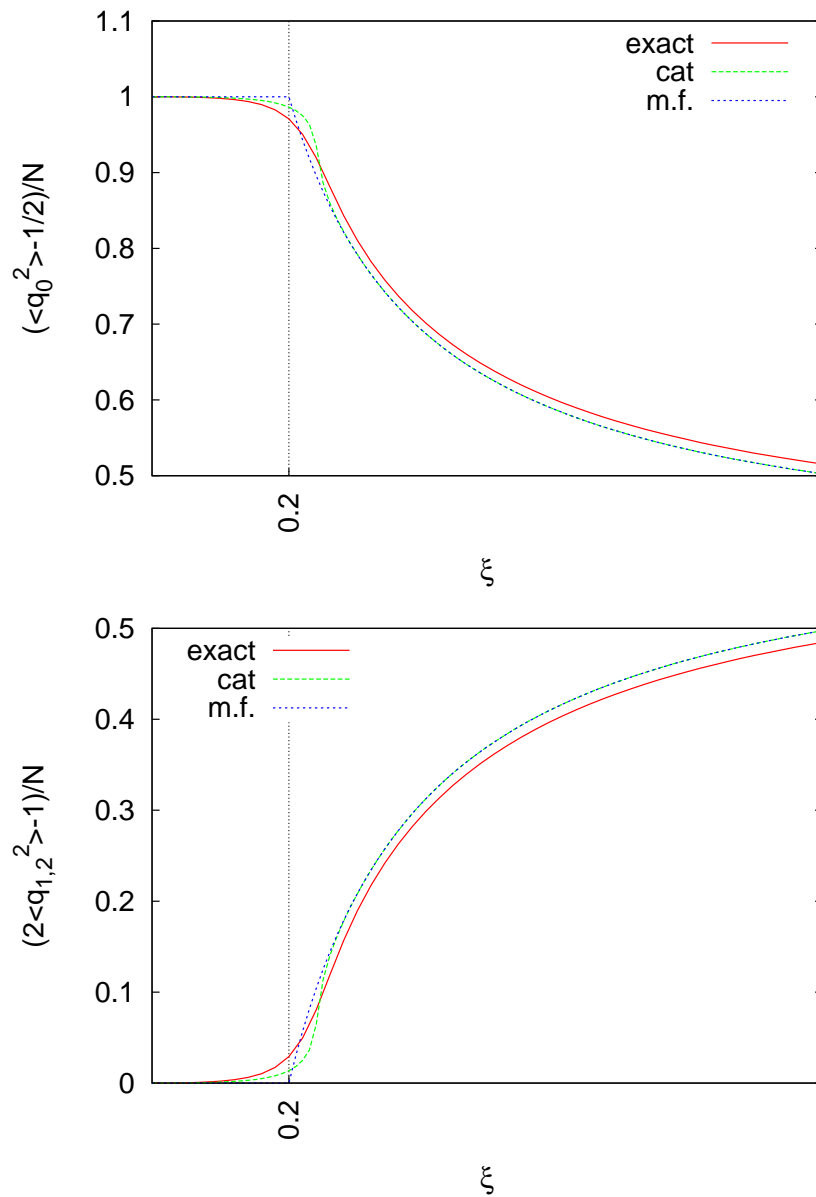


Figura 2.13: Varianzas normalizadas numérica, gato y de campo medio para la componente “escalar” q_0 y las componentes “vectoriales” $\vec{q} = (q_1, q_2)$ para $N = 20$.

Capítulo 3

Distribución de Husimi en el modelo de Dicke

3.1. Introducción

En este capítulo analizaremos las propiedades en el espacio de fases de la transición de fase cuántica que presenta el modelo Dicke, que describe interacciones espín-bosón (ver por ej. [Lam2004, Lam2005, Ema2003a, Bra2005]).

La Mecánica Cuántica ofrece diferentes distribuciones para caracterizar las propiedades del espacio de las fases [Ger2005]. Una es la función de Wigner, que se ha usado ampliamente en Óptica Cuántica. Otra es la distribución de Husimi, que viene dada por la superposición de un estado (coherente) de mínima incertidumbre y la función de onda. Esta función es más conveniente porque, a diferencia de la distribución de Wigner, es no negativa. La distribución de Husimi ha resultado útil en la visualización del espacio de las fases en la transición metal-aislante [Aul2004], para analizar el caos cuántico en Física Atómica [Dan1974] o para analizar modelos en Física de Materia Condensada [Wei1999].

La distribución de Husimi tiene una gran cantidad de información y puede ser de utilidad en medidas de información como las razones de participación inversa (IPR, Participation Inverse Ratio en inglés) y la entropía de Wehrl [Min2004]. Además, el conocimiento de los ceros de la distribución de Husimi reúne información esencial, en particular, el estado cuántico puede ser descrito por su distribución de ceros [Kor1997].

Estos son simplemente los puntos de menor probabilidad en el espacio de las fases y han sido considerados como un indicador del caos clásico y cuántico [Leb1990, Dan1974].

En este capítulo, además realizaremos una descripción de la transición cuántica del modelo de Dicke en términos de las razones de participación inversa (y momentos más altos) y la entropía de Wehrl de la distribución de Husimi y sus funciones marginales, para ello haremos dos descripciones: una numérica y otra variacional en términos de estados coherentes adaptados a la simetría de paridad. Además visualizaremos la QPT del modelo de Dicke a través de los ceros de la distribución de Husimi.

3.2. Modelo de Dicke

Como sabemos, el hamiltoniano de Dicke viene dado por

$$H = \omega_0 J_z + \omega a^\dagger a + \frac{\lambda}{\sqrt{2j}} (a^\dagger + a)(J_+ + J_-), \quad (3.2.1)$$

el cual describe la interacción de un conjunto de N átomos de dos niveles (con separación energética ω_0) con un campo de radiación monocromática de frecuencia ω . Este modelo presenta una transición de fase cuando el parámetro de acoplamiento es $\lambda = \lambda_c = \frac{\sqrt{\omega\omega_0}}{2}$, experimentando un cambio de la fase normal ($\lambda < \lambda_c$) a la fase superradiante ($\lambda > \lambda_c$).

Consideremos el conjunto base $\{|n; j, m\rangle \equiv |n\rangle \otimes |j, m\rangle\}$ del espacio de Hilbert, con $\{|n\rangle\}_{n=0}^\infty$ el estado número del campo y $\{|j, m\rangle\}_{m=-j}^j$ los estados de Dicke del sector atómico. Recordemos que las autofunciones de nuestro sistema ψ se puede expresar como un desarrollo en términos de los vectores de la base $|n; j, m\rangle$, como

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j c_{nm}^{(j)} |n; j, m\rangle \quad (3.2.2)$$

donde los coeficientes $c_{nm}^{(j)}$ son calculados por diagonalización numérica de (3.2.1) con un valor de corte n_c , tal que se garantice la convergencia de la solución numérica del problema de autovalores [Bas2011]. La simetría de paridad implica que $c_{n,m}^{(j)} = 0$ si $n + m + j$ es impar para el estado fundamental.

3.3. Distribución de Husimi con la aproximación de Holstein-Primakoff

En esta sección analizaremos las funciones marginales de la distribución de Husimi y sus propiedades, para ello introduciremos una aproximación importante que simplificará nuestro modelo y por tanto, el cálculo.

3.3.1. Estados coherentes y distribución de Husimi

Los estados de nuestro sistema pueden ser descritos en términos de estados coherentes (CSs). Consideremos

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \\ |z\rangle &= (1 + |z|^2)^{-j} e^{zJ_+} |j, -j\rangle = \\ &= (1 + |z|^2)^{-j} \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m}^{1/2} z^{j+m} |j, m\rangle, \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

(con $\alpha, z \in \mathbb{C}$) los estados coherentes ordinarios (canónicos o de Glauber) y los CSs de spin j para el sector fotónico y el atómico, respectivamente. Es bien conocido (ver [Per1986]) que los estados coherentes forman un conjunto sobrecompleto del correspondiente espacio de Hilbert y cumplen la relación de clausura o de resolución de la identidad.

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha, \\ 1 &= \frac{2j+1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |z\rangle \langle z| \frac{d^2z}{(1 + |z|^2)^2}, \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

con $d^2w = d\text{Re}(w) \cdot d\text{Im}(w)$ la medida de Lebesgue en \mathbb{R}^2 o \mathbb{C} . Además, redefiniendo

$$\beta \equiv \sqrt{2j} z, \quad (3.3.3)$$

en (3.3.1), podemos ver (véase [Rad1971, Per1986]) que los estados coherentes de spin j , $|z\rangle$, se convierten en estados coherentes ordinarios $|\beta\rangle \equiv e^{-|\beta|^2/2} e^{\beta b^\dagger} |0\rangle$ para $j \gg 1$ (cuando identificamos $|j, -j\rangle \equiv |0\rangle$ y $|j, m\rangle \equiv |m + j\rangle$). Entonces, asumimos la aproximación

$$|z\rangle \simeq |\beta\rangle, \quad (3.3.4)$$

como una buena estimación de $|z\rangle$, incluso para valores relativamente pequeños de j . Con esta aproximación, la distribución de Husimi de la función de onda del estado fundamental ψ viene dada por

$$\begin{aligned}\Phi(\alpha, \beta) &= |\langle \alpha, \beta | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_{n, n'=0}^{n_c} \sum_{m, m'=-j}^j c_{nm}^{(j)} \bar{c}_{n'm'}^{(j)} \phi_{n,m}^{(j)}(\alpha, \beta) \phi_{n',m'}^{(j)}(\bar{\alpha}, \bar{\beta}),\end{aligned}\tag{3.3.5}$$

donde

$$\phi_{n,m}^{(j)}(\alpha, \beta) = \langle n | \alpha \rangle \langle j + m | \beta \rangle = \frac{e^{-|\alpha|^2/2} \alpha^n e^{-|\beta|^2/2} \beta^{m+j}}{\sqrt{n!} \sqrt{(m+j)!}}\tag{3.3.6}$$

y normalizada, de acuerdo a

$$\int_{\mathbb{R}^4} \Phi(\alpha, \beta) \frac{d^2\alpha d^2\beta}{\pi^2} = 1.\tag{3.3.7}$$

3.3.2. Momentos, entropía de Rényi-Wehrl y marginales de la distribución de Husimi

Los momentos ν -ésimos de la distribución de Husimi (3.3.5) son cantidades de gran importancia para visualizar la QPT en el modelo de Dicke a través del punto crítico λ_c

$$M_{j,\nu}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^2\alpha d^2\beta}{\pi^2} (\Phi(\alpha, \beta))^\nu.\tag{3.3.8}$$

Nótese que $M_{j,1} = 1$, ya que Φ está normalizada (3.3.7). De entre todos los momentos, sólo consideraremos la llamada “razón de participación inversa”, $P_j(\lambda) = M_{j,2}(\lambda)$, que de alguna manera mide la deslocalización de Φ a través de la transición de fase. La definición de los momentos $M_{j,\nu}$ no está restringida a valores enteros de ν . Una vez que se conoce $M_{j,\nu}$ para cualquier entero ν , hay una única extensión analítica para ν complejo (y por tanto real). La entropía “clasical” de Rényi-Wehrl (frente a la entropía cuántica de von Neumann) se define como

$$W_{j,\nu}(\lambda) = \frac{1}{1-\nu} \ln(M_{j,\nu}(\lambda)),\tag{3.3.9}$$

que tiende a la entropía de Wehrl

$$W_j(\lambda) = - \int_{\mathbb{R}^4} \frac{d^2\alpha d^2\beta}{\pi^2} \Phi(\alpha, \beta) \ln \Phi(\alpha, \beta)\tag{3.3.10}$$

cuando $\nu \rightarrow 1$.

Para diferenciar el comportamiento entre posiciones y momentos, estudiaremos las funciones marginales de la distribución de Husimi en cada espacio

$$\begin{aligned}\Phi_1(\alpha_1, \beta_1) &= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d\alpha_2 d\beta_2}{\pi} \Phi(\alpha_1 + i\alpha_2, \beta_1 + i\beta_2) \\ \Phi_2(\alpha_2, \beta_2) &= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d\alpha_1 d\beta_1}{\pi} \Phi(\alpha_1 + i\alpha_2; \beta_1 + i\beta_2),\end{aligned}\quad (3.3.11)$$

donde $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$, $\beta = \beta_1 + i\beta_2$ es la descomposición de α , β en “posiciones” y “momentos”. Por tanto

$$\int_{\mathbb{R}^2} \frac{d\alpha_\kappa d\beta_\kappa}{\pi} \Phi_\kappa(\alpha_\kappa, \beta_\kappa) = 1, \quad \kappa = 1, 2. \quad (3.3.12)$$

Además, estamos interesados en los momentos de las distribuciones marginales

$$M_{j,\nu}^{(\kappa)}(\lambda) = \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d\alpha_\kappa d\beta_\kappa}{\pi} (\Phi_\kappa(\alpha_\kappa, \beta_\kappa))^\nu, \quad \kappa = 1, 2, \quad (3.3.13)$$

especialmente las razones de participación inversa $P_j^{(\kappa)}(\lambda) = M_{j,2}^{(\kappa)}$ y la entropía marginal de Wehrl

$$W_j^{(\kappa)}(\lambda) = - \int_{\mathbb{R}^2} \frac{d\alpha_\kappa d\beta_\kappa}{\pi} \Phi_\kappa(\alpha_\kappa, \beta_\kappa) \ln \Phi_\kappa(\alpha_\kappa, \beta_\kappa) \quad (3.3.14)$$

en el espacio de posiciones ($\kappa = 1$) y de momentos ($\kappa = 2$) como una función del parámetro de control λ . En general, $P_j(\lambda) \neq P_j^{(1)}(\lambda)P_j^{(2)}(\lambda)$ y $W_j(\lambda) \neq W_j^{(1)}(\lambda) + W_j^{(2)}(\lambda)$, pero estas cantidades son aproximadamente iguales para valores grandes de j , excepto en la proximidad de λ_c [Aul2004].

3.3.3. Resultados numéricos

En primer lugar calculamos la razón de participación $P_j(\lambda)$ y la entropía de Wehrl $W_j(\lambda)$ para diferentes valores de λ . los resultados calculados aparecen en la Fig. 3.1 donde presentamos $P_j(\lambda)$ y $W_j(\lambda)$ para $j = 2, 5, 10$ y para $\omega = \omega_0 = 1$ (es decir, $\lambda_c = 0.5$). Nótese que la razón de participación inversa (panel superior) es de alrededor 1/4 en la fase normal decreciendo cerca del punto crítico hasta alcanzar el valor 1/8 en la fase superradiante. Observamos que el cambio de la razón de participación es más repentino a medida que se incrementa j . La entropía de Wehrl (panel inferior) es

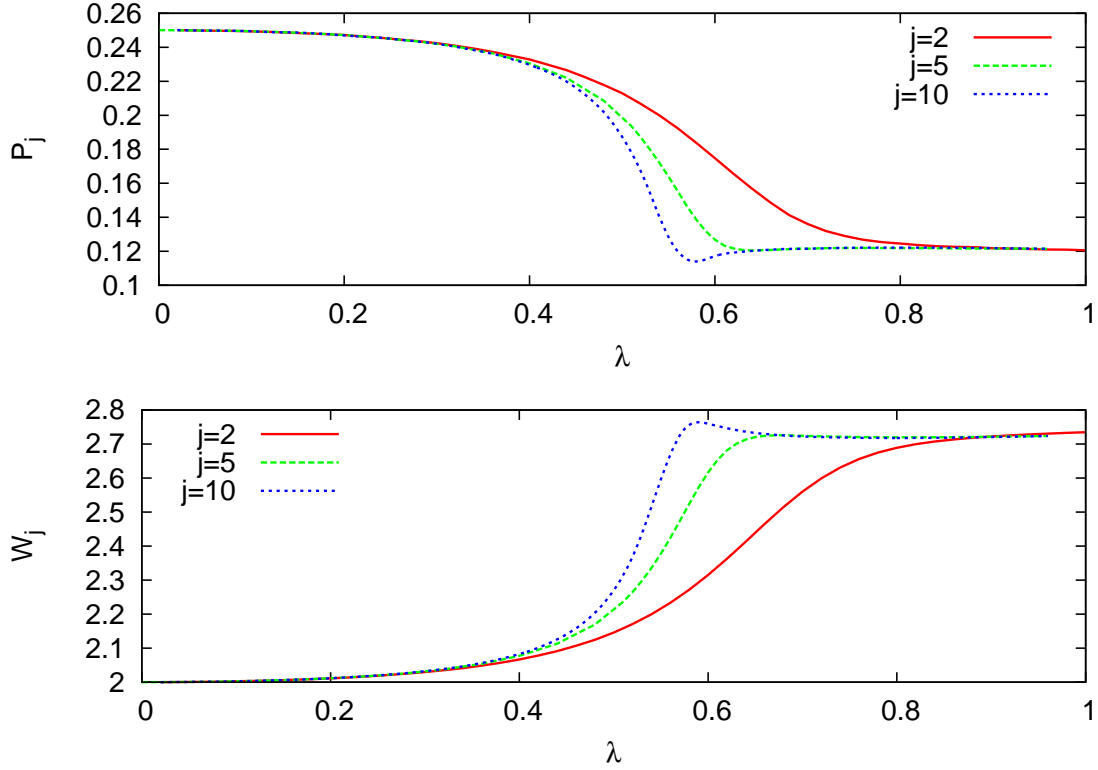


Figura 3.1: Razón de participación inversa $P_j(\lambda)$ y entropía en el espacio de las fases $W_j(\lambda)$ para $j = 5$ y $j = 10$ y $\omega_0 = \omega = 1$ como una función de λ . Todos los valores están en unidades atómicas.

aproximadamente 2 en la fase normal y alrededor de $2 + \ln 2$ en la fase superradiante, experimentando un cambio más pronunciado cuando se incrementa j , entorno al punto crítico. Para completar representamos las funciones marginales calculadas numéricamente en la Figura 3.2.

3.3.4. Aproximación variacional de la distribución de Husimi

En esta sección presentamos expresiones analíticas para la distribución de Husimi, sus funciones marginales, momentos y entropías utilizando estados prueba en términos de CSs adaptados a la simetría de paridad, introducidos recientemente por Castaños y col. [Cas2011a, Cas2011b], que son una excelente aproximación a la solución cuántica exacta del estado fundamental (de paridad par) y primer estado excitado (de paridad

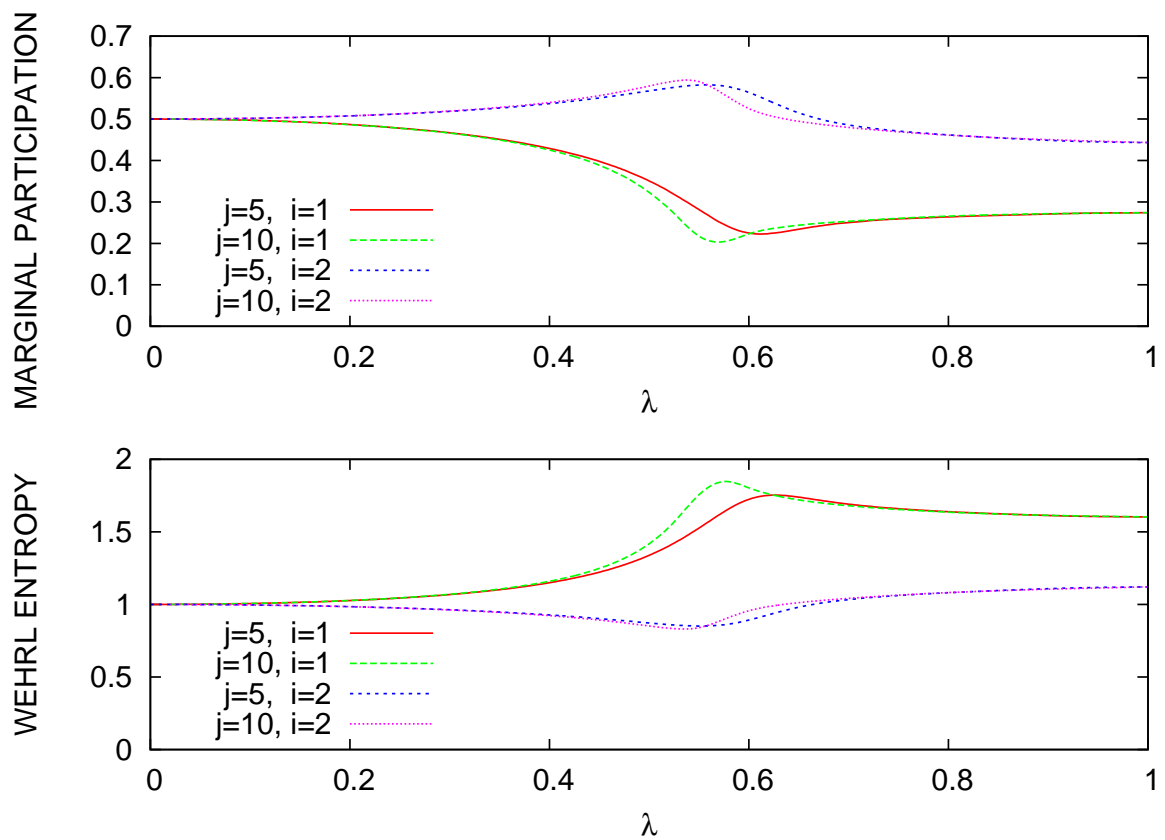


Figura 3.2: Razón marginal de participación inversa $P_j^{(i)}(\lambda)$ y entropía en espacio de las fases $W_j^{(i)}(\lambda)$ para $j = 5$ y $j = 10$, $i = 1, 2$ y $\omega_0 = \omega = 1 \lambda$. Todos los valores están en unidades atómicas.

impar) del modelo de Dicke.

3.3.4.1. CSs adaptados a la simetría de paridad y distribución de Husimi

Asumiendo la aproximación (3.3.4), los estados de nuestro sistema pueden ser caracterizados por estados prueba producto directo de CS ordinarios, $|\alpha, \beta\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$. Como se mencionó en la Sección 1.3, donde se estudió la aproximación variacional del modelo de Dicke, estos estados prueba variacionales constituyen una excelente aproximación para determinadas propiedades del estado fundamental de nuestro sistema, en particular, la energía media en el límite termodinámico $j \rightarrow \infty$. Los parámetros del estado prueba se determinan a través de un proceso de minimización del funcional de la energía $\mathcal{H}(\alpha, \beta) = \langle \alpha, \beta | H | \alpha, \beta \rangle$ que define una “superficie de energía” tetra-dimensional. Minimizando respecto a estas cuatro coordenadas obtenemos los puntos críticos, α_0 y β_0 (véase ec (1.3.9)). Aunque el producto directo $|\alpha, \beta\rangle$ da una buena aproximación variacional a la energía media del estado fundamental en el límite termodinámico $j \rightarrow \infty$, éste no capta el comportamiento correcto para otras propiedades del estado fundamental sensibles a la simetría de paridad $\hat{\Pi}$ del hamiltoniano (3.2.1) como, por ejemplo, las medidas de incertidumbre y entropía. Este es el motivo por el que introducimos estados coherentes adaptados a la simetría de paridad (SACS)

$$|\phi_{\pm}\rangle = |\alpha, \beta, \pm\rangle = \frac{|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle \pm |-\alpha\rangle \otimes |-\beta\rangle}{\mathcal{N}_{\pm}(\alpha, \beta)}, \quad (3.3.15)$$

obtenido mediante la aplicación de los proyectores de paridad par e impar $\hat{\mathcal{P}}_{\pm} = (1 \pm \hat{\Pi})$ sobre producto directo $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$. El factor

$$\mathcal{N}_{\pm}(\alpha_0, \beta_0) = \left(2(1 + e^{-2\alpha_0^2 - 2\beta_0^2})\right)^{-1/2} \quad (3.3.16)$$

es un factor de normalización. Estos estados coherentes pares e impares son “estados de tipo gato de Schrödinger” en el sentido que son una superposición cuántica de estados cuasi-clásicos distinguibles macroscópicamente. Ahora, la nueva superficie de energía, $\mathcal{H}_{\pm}(\alpha, \beta)$ es más compleja, haciendo más difícil la obtención de los nuevos puntos críticos, α_0^{\pm} y β_0^{\pm} . En lugar de realizar un cálculo numérico de α_0^{\pm} y β_0^{\pm} para diferentes valores de j y λ , usaremos la aproximación $\alpha_0^{(\pm)} \approx \alpha_0, \beta_0^{(\pm)} \approx \beta_0$, que resulta ser bastante buena excepto en el entorno de λ_c , la cual se reduce cuando aumenta el número

de partículas ($N = 2j$) (ver ref.[Cas2011b]). Teniendo en cuenta el solapamiento del estado coherente

$$\langle \alpha | \pm \alpha_0 \rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha| - \frac{1}{2}\alpha_0^2 \pm \bar{\alpha}\alpha_0}, \quad (3.3.17)$$

la distribución de Husimi para el estado prueba variacional $|\alpha_0, \beta_0, \pm\rangle$, puede ser escrita como

$$\Phi_{\pm}(\alpha, \beta) = \frac{|\langle \alpha, \beta | \alpha_0, \beta_0 \rangle \pm \langle \alpha, \beta | -\alpha_0, -\beta_0 \rangle|^2}{\mathcal{N}_{\pm}^2(\alpha_0, \beta_0)}. \quad (3.3.18)$$

Por tanto, haciendo uso de la representación Holstein-Primakoff (3.3.3,3.3.4), calcularemos los ceros, momentos y entropías de $\Phi_{\pm}(\alpha, \beta)$, y compararemos con los resultados numéricos de la sección previa. Con esta aproximación, la distribución de Husimi se puede expresar en la forma

$$\Phi_{\pm}(\alpha, \beta) = \frac{e^{-|\alpha|^2 - |\beta|^2 - \alpha_0^2 - \beta_0^2} |e^{\bar{\alpha}\alpha_0 + \bar{\beta}\beta_0} \pm e^{-\bar{\alpha}\alpha_0 - \bar{\beta}\beta_0}|^2}{2(1 \pm e^{-2\alpha_0^2 - 2\beta_0^2})}, \quad (3.3.19)$$

A partir de ahora nos limitaremos al caso de simetría par, por lo que simplificamos tanto la notación de la función de onda $\psi = \psi_+$ como de la distribución de Husimi del estado fundamental variacional $\Phi = \Phi_+$.

3.3.4.2. Momentos y entropía de Rényi-Wehrl de la distribución de Husimi

Las cantidades más importantes para visualizar la QPT en el modelo de Dicke a través del punto crítico λ_c serán los momentos ν -ésimo de la distribución de Husimi (3.3.8). En particular, la razón de participación inversa viene dada por

$$P_j(\lambda) = M_{j,2}(\lambda) = \frac{1 + \operatorname{sech}^2(\alpha_0^2 + \beta_0^2)}{8}. \quad (3.3.20)$$

Como se muestra en la Figura 3.3, $P_j(\lambda)$ tiende a una función escalón de tipo Heaviside

$$P_{\infty}(\lambda) = \begin{cases} 1/4, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ 1/8, & \text{si } \lambda \geq \lambda_c, \end{cases} \quad (3.3.21)$$

que experimenta un repentino decrecimiento de 1/4 desde la fase normal a la fase superradiante, indicándonos una deslocalización de Φ por encima del punto crítico λ_c .

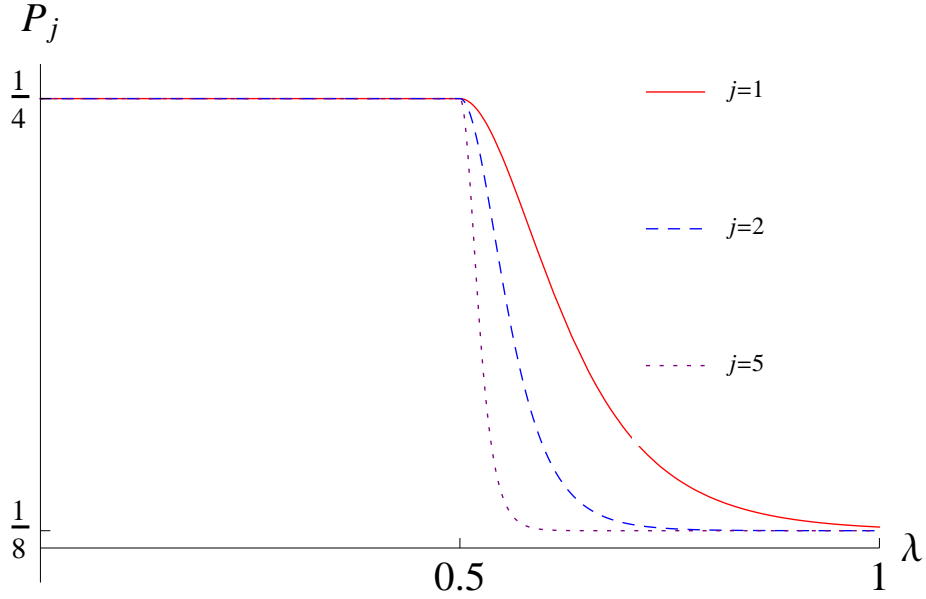


Figura 3.3: Razón de participación inversa de la distribución de Husimi como una función de λ para diferentes valores de j y $\lambda_c = 0.5$. Todos los valores están en unidades atómicas.

También aparece un comportamiento similar para momentos más altos en el límite termodinámico

$$M_{j,\nu}(\lambda) \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \begin{cases} \nu^{-2}, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ 2^{1-\nu} \nu^{-2}, & \text{si } \lambda \geq \lambda_c. \end{cases} \quad (3.3.22)$$

La definición de los momentos $M_{j,\nu}$ no está limitada a valores enteros de ν . Una vez que se conoce $M_{j,\nu}$ para todos los valores enteros ν , existe una extensión analítica única para $\nu > 0$ reales (en la mitad derecha del plano complejo). Esta extensión analítica es posible debido a la particular expresión de Φ en términos de “campanas” de Gauss. Usando (3.3.22), podemos calcular las entropías de Rényi-Wehrl (3.3.9) y, en el límite $\nu \rightarrow 1$, la entropía de Wehrl (3.3.10) en el límite termodinámico

$$W_j(\lambda) \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \begin{cases} 2, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ 2 + \ln(2), & \text{si } \lambda \geq \lambda_c. \end{cases} \quad (3.3.23)$$

Estos resultados están de acuerdo con la conjetura (aún no probada) de Lieb . En efecto, como fue conjeturado por Wehrl [Weh2002] y probado por Lieb [Lie1978], un estado coherente de Glauber $|\alpha\rangle$ tiene una entropía de Wehrl mínima de 1. En la

misma publicación de Lieb [Lie1978], también fue conjeturado que la extensión de la definición de la entropía de Wehrl para estados coherentes de spin j daría lugar a una entropía mínima de $2j/(2j+1)$. Para el sistema conjunto formado por radiación más un conjunto de átomos tendremos $W_j(\lambda) = 1 + 2j/(2j+1)$ en la fase normal ($\lambda < \lambda_c$), y por tanto, $W_j \rightarrow 2$ en el límite termodinámico, de acuerdo con nuestro resultado.

3.3.4.3. Marginales de la distribución de Husimi

La expresión explícita de las funciones marginales de la distribución de Husimi (3.3.11) para nuestro estado variacional ϕ son

$$\begin{aligned}\Phi_1(\alpha_1, \beta_1) &= \frac{1 + e^{\alpha_0^2 + \beta_0^2} \cosh(2(\alpha_1 \alpha_0 + \beta_1 \beta_0))}{e^{\alpha_1^2 + \beta_1^2} (1 + e^{2\alpha_0^2 + 2\beta_0^2})}, \\ \Phi_2(\alpha_2, \beta_2) &= \frac{1 + e^{-\alpha_0^2 - \beta_0^2} \cos(2(\alpha_2 \alpha_0 + \beta_2 \beta_0))}{e^{\alpha_2^2 + \beta_2^2} (1 + e^{-2\alpha_0^2 - 2\beta_0^2})}.\end{aligned}\quad (3.3.24)$$

Usando la definición (3.3.13), podemos calcular las razones de participación inversa para las distribuciones marginales como una función de $\zeta_j(\lambda) \equiv e^{\alpha_0^2 + \beta_0^2}$:

$$\begin{aligned}P_j^{(1)}(\lambda) &= \frac{2 + 4\zeta_j^{3/2}(\lambda) + \zeta_j^2(\lambda) + \zeta_j^4(\lambda)}{4(1 + \zeta_j^2(\lambda))^2}, \\ P_j^{(2)}(\lambda) &= \frac{1 + \zeta_j^2(\lambda) + 4\zeta_j^{5/2}(\lambda) + 2\zeta_j^4(\lambda)}{4(1 + \zeta_j^2(\lambda))^2}.\end{aligned}\quad (3.3.25)$$

La Figura 3.4 muestra $P_j^{(\kappa)}(\lambda)$ para $j = 10$, indicando que $P_j^{(1)}(\lambda)$ experimenta una disminución pronunciada desde $1/2$ a $1/4$ a través de la transición de fase, donde $P_j^{(2)}(\lambda)$ permanece constante (quizás el pequeño pico entorno a $\lambda_c = 0.5$ es un artefacto debido al carácter aproximado de α_0, β_0 en la cercanía de λ_c). En general, momentos más altos de las distribuciones marginales en el límite termodinámico vienen dados por

$$\begin{aligned}M_{j,\nu}^{(1)}(\lambda) &\xrightarrow{j \rightarrow \infty} \begin{cases} \nu^{-1}, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ 2^{1-\nu} \nu^{-1}, & \text{si } \lambda \geq \lambda_c. \end{cases}, \\ M_{j,\nu}^{(2)}(\lambda) &\xrightarrow{j \rightarrow \infty} \nu^{-1}, \quad \forall \lambda,\end{aligned}\quad (3.3.26)$$

por tanto, en este límite, tenemos $M_{j,\nu}(\lambda) = M_{j,\nu}^{(1)}(\lambda)M_{j,\nu}^{(2)}(\lambda)$. En general, esta igualdad no es cierta para valores finitos de j y $\lambda > \lambda_c$, como puede ser comprobado directamente para $\nu = 2$ desde (3.3.20) y (3.3.25). Ahora, podemos ver que el exceso de entropía de

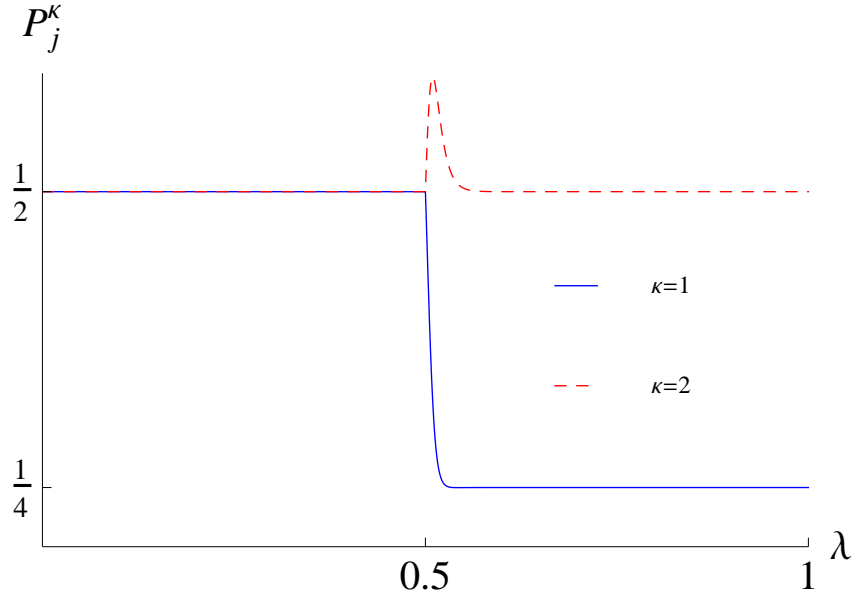


Figura 3.4: Razones de participación inversa marginales $P_j^{(\kappa)}$, $\kappa = 1, 2$ (posiciones y momentos, respectivamente) de la distribución de Husimi distribution as a function of λ para $j = 10$ y $\lambda_c = 0.5$. Todos los valores están en unidades atómicas.

$\ln(2)$ corresponde a la contribución de posiciones, ya que la entropía de Wehrl en el espacio de momentos permanece constante

$$W_j^{(1)}(\lambda) \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \begin{cases} 1, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ 1 + \ln(2), & \text{si } \lambda \geq \lambda_c. \end{cases} \quad (3.3.27)$$

$$W_j^{(2)}(\lambda) \xrightarrow{j \rightarrow \infty} 1 \quad (3.3.28)$$

3.3.4.4. Ceros de la distribución de Husimi y QPT

Como es conocido, la densidad de Husimi está determinada por sus ceros a través de la factorización de Weierstrass-Hadamard. También se ha observado que la distribución de ceros es diferente para sistemas regulares clásicos que para caóticos, y se puede considerar como un indicador cuántico del caos clásico (ver por ej. [Kor1997, Dan1974, Leb1990]). En nuestro trabajo hemos estudiado la distribución de los ceros de la densidad de Husimi como un indicador característico de la QPT en

el modelo de Dicke. A partir de (3.4.12) obtenemos

$$\Psi(\alpha, z) = 0 \Rightarrow 2\bar{\alpha}\alpha_0 + 2j \ln \frac{1 + \bar{z}z_0}{1 - \bar{z}z_0} = i\pi(2l + 1), \quad l \in \mathbb{Z}. \quad (3.3.29)$$

En lugar de esta condición, utilizaremos la aproximación (3.3.4) y de (3.3.19) obtenemos

$$\Phi(\alpha, \beta) = 0 \Rightarrow 2\bar{\alpha}\alpha_0 + 2\bar{\beta}\beta_0 = i\pi(2l + 1), \quad l \in \mathbb{Z}, \quad (3.3.30)$$

que es equivalente a

$$\alpha_1 = -\frac{\beta_0}{\alpha_0}\beta_1, \quad (3.3.31)$$

$$\alpha_2 = -\frac{\beta_0}{\alpha_0}\beta_2 - \frac{\pi}{2\alpha_0}(2l + 1). \quad (3.3.32)$$

Se ve que, en la fase normal ($\alpha_0 = 0 = \beta_0$), la distribución de Husimi $\Phi(\alpha, \beta)$ no tiene ceros. En la fase superradiante ($\lambda > \lambda_c$), los ceros de la distribución se localizan a lo largo de líneas rectas (“franjas oscuras”) en el plano $\alpha_1\beta_1$ (posiciones) y en el plano $\alpha_2\beta_2$ (momentos). En el plano de momentos, el número de franjas oscuras por intervalo $\alpha_2, \beta_2 \in [-1, 1]$ crece con λ y j , como se representa en la Figura 3.5. En el límite termodinámico $j \rightarrow \infty$, los ceros llenan densamente el plano de momentos $\alpha_2\beta_2$.

3.4. Distribución de Husimi sin la aproximación de Holstein-Primakoff

En la sección anterior 3.3 (véase [Rom2012c]) hemos utilizado la aproximación de Holstein-Primakoff [Hol1940] (espín j grande) para aproximar el sector atómico del modelo de Dicke por un oscilador armónico para un número $N = 2j$ de átomos grande. En esta sección presentaremos la distribución de Husimi y la entropía de Wehrl sin hacer uso de esta aproximación, por tanto, trabajaremos de forma exacta con N finito. En nuestro estudio comparamos los resultados numéricos (exactos) con los resultados variacionales, obtenidos a partir de estados prueba en términos de estados coherentes adaptados por simetría de paridad. Mostraremos el cambio drástico que experimenta la simetría de la función de onda del estado fundamental mediante la entropía de Wehrl y la representación gráfica de la distribución de Husimi, proporcionándonos un indicador de la QPT para un número finito de partículas. Para finalizar, calculamos y

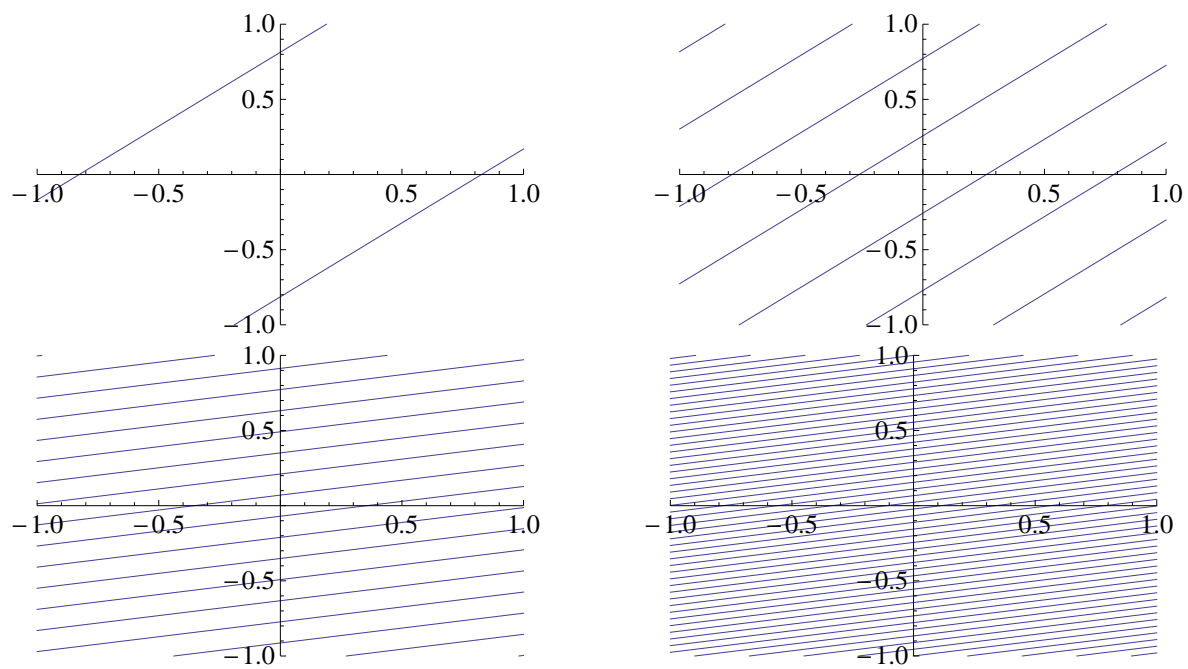


Figura 3.5: Ceros de la distribución de Husimi $\Phi(\alpha, \beta)$ en el intervalo $\alpha_2, \beta_2 \in [-1, 1]$ del plano de momentos para $\lambda = 0.6, j = 10$ (superior-izquierda), $\lambda = 0.6, j = 100$ (superior-derecho), $\lambda = 10, j = 10$ (inferior-izquierdo) y $\lambda = 10, j = 100$ (inferior-derecho) para $\lambda_c = 0.5$. Todos los valores están en unidades atómicas.

representamos los ceros de la distribución de Husimi (variacional) para caracterizar la QPT.

3.4.1. Estados coherentes y distribución de Husimi

A diferencia de la sección anterior 3.3, aquí consideramos

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \\ |z\rangle &= (1 + |z|^2)^{-j} e^{zJ_+} |j, -j\rangle = \\ &= (1 + |z|^2)^{-j} \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m}^{1/2} z^{j+m} |j, m\rangle, \end{aligned} \quad (3.4.1)$$

(con $\alpha, z \in \mathbb{C}$) los estados coherentes (CS) ordinarios y de spin j para el sector fotónico y el atómico, respectivamente. En aquella ocasión, el CS de spin pudo ser aproximado por un estado coherente ordinario $|z\rangle \simeq |\beta\rangle$ (3.3.4), teniendo en cuenta la representación de Holstein-Primakoff para pseudospin j grande. Ahora, no realizaremos ninguna aproximación, considerando el CS de spin j según (3.4.1). Los CSs fotónicos, $|\alpha\rangle$, y de spin j , $|z\rangle$ forman un conjunto sobrecompleto del correspondiente espacio de Hilbert y cumplen las relaciones de clausura o de resolución de la identidad

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha, \\ 1 &= \frac{2j+1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} |z\rangle \langle z| \frac{d^2z}{(1 + |z|^2)^2}, \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

con $d^2w \equiv d\text{Re}(w)d\text{Im}(w)$ (o $d^2w = r dr d\theta$ en coordenadas polares $w = re^{i\theta}$) la medida de Lebesgue en \mathbb{C} . Los parámetros complejos α y z están relacionados con el número medio de fotones, como $\langle \alpha | a^\dagger a | \alpha \rangle = |\alpha|^2$, y con la fracción media de átomos excitados, como $\langle z | J_z + j | z \rangle = N|z|^2/(1 + |z|^2)$, respectivamente. Se puede comprobar fácilmente que la amplitud de probabilidad de detectar n fotones y $j + m$ átomos excitados en $|\alpha, z\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |z\rangle$ viene dada por

$$\varphi_{n,m}^{(j)}(\alpha, z) = \langle n | \alpha \rangle \langle j, m | z \rangle = \frac{e^{-|\alpha|^2/2} \alpha^n \sqrt{\binom{2j}{j+m}} z^{j+m}}{\sqrt{n!} (1 + |z|^2)^j}. \quad (3.4.3)$$

La función de onda del estado fundamental ψ viene dada por la expresión

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{m=-j}^j c_{nm}^{(j)} |n; j, m\rangle \quad (3.4.4)$$

donde los coeficientes $c_{nm}^{(j)}$, dependientes del parámetro de control λ , son calculados por diagonalización numérica de los elementos de matriz del (3.2.1), con un valor de corte n_c , tal que garantice la convergencia de la solución numérica del problema de autovalores [Bas2011]. Por definición, la distribución de Husimi viene dada por

$$\begin{aligned}\Psi(\alpha, z) &= |\langle \alpha, z | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_{n, n'=0}^{n_c} \sum_{m, m'=-j}^j c_{nm}^{(j)} \bar{c}_{n'm'}^{(j)} \varphi_{n,m}^{(j)}(\alpha, z) \varphi_{n',m'}^{(j)}(\bar{\alpha}, \bar{z})\end{aligned}\quad (3.4.5)$$

y normalizada de acuerdo con

$$\int_{\mathbb{R}^4} \Psi(\alpha, z) d\mu(\alpha, z) = 1, \quad (3.4.6)$$

con una medida de integración

$$d\mu(\alpha, z) = \frac{2j+1}{\pi^2} \frac{d^2\alpha d^2z}{(1+|z|^2)^2}. \quad (3.4.7)$$

Además consideraremos la entropía de Wehrl, que es una función importante para visualizar la QPT en el modelo de Dicke a través del punto crítico λ_c ,

$$W_j(\lambda) = - \int_{\mathbb{R}^4} \Psi(\alpha, z) \ln(\Psi(\alpha, z)) d\mu(\alpha, z), \quad (3.4.8)$$

donde la dependencia de W_j con λ viene de la dependencia de $c_{nm}^{(j)}$ con λ .

3.4.2. CSs adaptados a la simetría de paridad y distribución de Husimi

Consideramos que nuestro sistema se puede caracterizar por un estado prueba variacional producto directo de los CS ordinarios (sector fotónico) y de spin j (3.4.1), $|\alpha, z\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |z\rangle$. Al igual que mencionamos en la Sección 3.3.4.1, estos estados prueba constituyen una buena aproximación para determinadas propiedades del estado fundamental, sin embargo, éstos no son adecuados para describir otras propiedades sensibles a la simetría de paridad intrínseca del hamiltoniano (3.2.1), como las medidas de incertidumbre y la entropía [Rom2012b, Cal2012c]. Por este motivo, introducimos un nuevo estado prueba en términos de CSs adaptados a la simetría de paridad,

$$|\psi_{\pm}\rangle = |\alpha, z, \pm\rangle = \frac{|\alpha\rangle \otimes |z\rangle \pm |-\alpha\rangle \otimes | -z\rangle}{\mathcal{N}_{\pm}(\alpha, z)}, \quad (3.4.9)$$

obtenido por la aplicación de los proyectores de paridad par e impar $\hat{\mathcal{P}}_{\pm} = (1 \pm \hat{\Pi})$ sobre el producto directo $|\alpha\rangle \otimes |z\rangle$. siendo $\mathcal{N}_{\pm}(\alpha, z)$ el factor de normalización

$$\mathcal{N}_{\pm}(\alpha, z) = \sqrt{2} \left(1 \pm e^{-2|\alpha|^2} \left(\frac{1 - |z|^2}{1 + |z|^2} \right)^{2j} \right)^{1/2}. \quad (3.4.10)$$

Estos estados coherentes pares e impares son “estados gato de Schrödinger” en el sentido que son una superposición cuántica de estados cuasi-clásicos, macroscópicamente distinguibles. Siguiendo el procedimiento descrito en la Sección 1.3, los parámetros libres de todo estado prueba variacional se determinan minimizando la energía media correspondiente. Así, obtenemos los puntos críticos, α_0 y z_0 , para la superficie energética $\mathcal{H}(\alpha, z) = \langle \alpha, z, |H|\alpha, z, \rangle$ de un estado prueba $|\psi\rangle = |\alpha, z\rangle$, y α_0^{\pm} y z_0^{\pm} para la superficie energética $\mathcal{H}_{\pm}(\alpha, z) = \langle \alpha, z, \pm |H|\alpha, z, \pm \rangle$ de un estado prueba simetrizado $|\psi_{\pm}\rangle = |\alpha, z, \pm\rangle$ (3.4.9). En lugar de calcular numéricamente α_0^{\pm} y z_0^{\pm} para diferentes valores de j y λ , usaremos la aproximación $\alpha_0^{(\pm)} \approx \alpha_0$, $z_0^{(\pm)} \approx z_0$, que es bastante buena excepto en un entorno de λ_c (véase la Fig. 3.7).

Teniendo en cuenta el solapamiento de los estados coherentes

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \pm \alpha_0 \rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha| - \frac{1}{2}\alpha_0^2 \pm \bar{\alpha}\alpha_0}, \\ \langle z | \pm z_0 \rangle &= \frac{(1 \pm \bar{z}z_0)^{2j}}{(1 + |z|^2)^j (1 + |z_0|^2)^j}, \end{aligned} \quad (3.4.11)$$

la distribución de Husimi para los estados variacionales $|\alpha_0, z_0, \pm\rangle$ puede ser escrita como

$$\Psi_{\pm}(\alpha, z) = \frac{|\langle \alpha, z | \alpha_0, z_0 \rangle \pm \langle \alpha, z | -\alpha_0, -z_0 \rangle|^2}{\mathcal{N}_{\pm}^2(\alpha_0, z_0)}. \quad (3.4.12)$$

3.4.3. Entropía de Wehrl y distribución de Husimi variacional

A partir de ahora nos limitaremos al estado fundamental, por tanto, tan sólo consideraremos el estado con simetría par. Designamos por $\Psi = \Psi_+$ la distribución de Husimi del estado fundamental variacional. La Figura 3.8 muestran las líneas de contorno de la distribución de Husimi variacional. Nótese que, en el espacio de posiciones, ésta reproduce la división del paquete a través del punto crítico representado en la Fig. 3.6, con dos paquetes diferenciados localizados alrededor del punto de equilibrio (α_0, z_0) y su antípoda $(-\alpha_0, -z_0)$ en la fase superradiante. En el espacio de momentos, se pone de manifiesto una deslocalización y una modulación cuando aumenta λ .

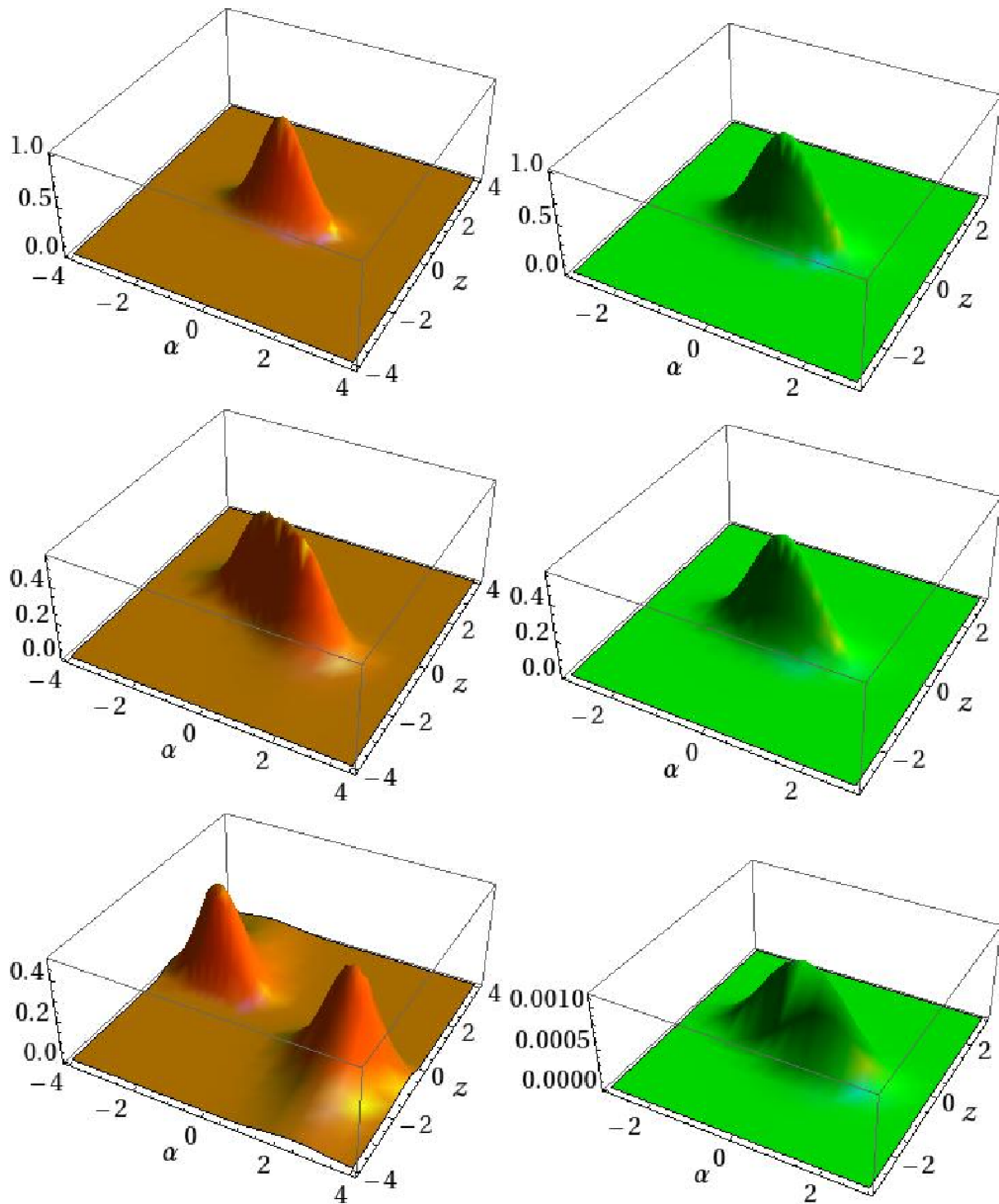


Figura 3.6: Gráfica en 3D de la distribución de Husimi exacta en el espacio de “posiciones” (parte izquierda) (α y z real), y en el espacio de “momentos” (parte derecha) (α y z imaginario) para diferentes valores de λ (de arriba a abajo: $\lambda = 0$, $\lambda = 0.6$ y $\lambda = 1$) para $j = 3$ y $\omega = \omega_0 = 1 \Rightarrow \lambda_c = 0.5$. Todos los valores están en unidades atómicas.

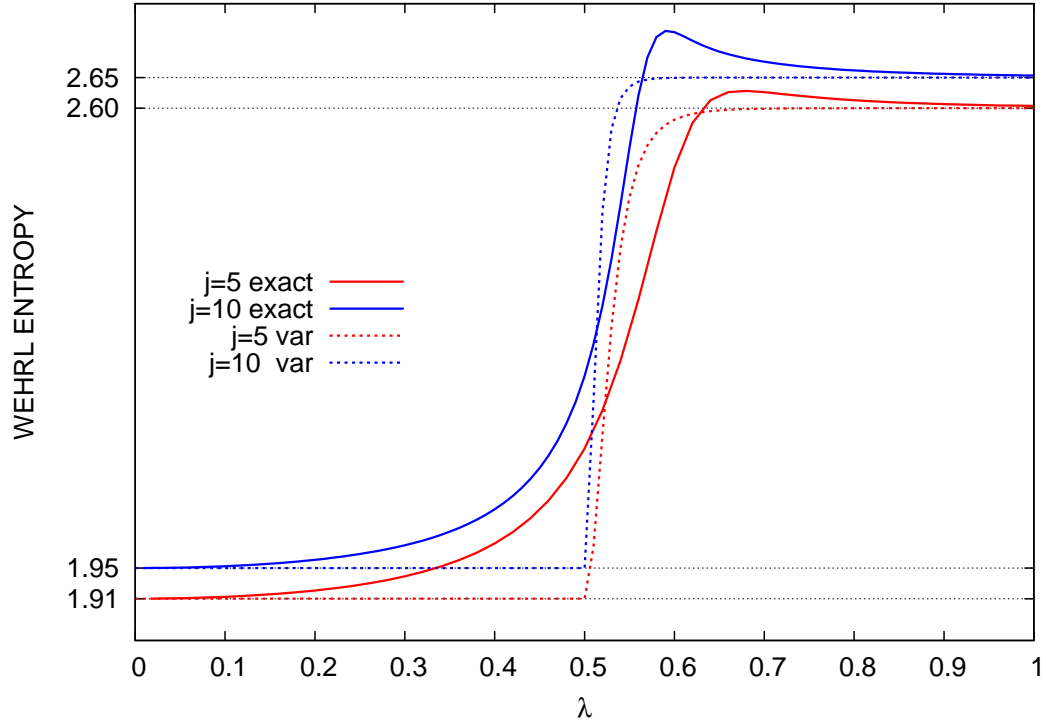


Figura 3.7: Entropías de Wehrl exacta (línea continua) y variacional (línea discontinua) $W_j(\lambda)$ para $j = 5$ y $j = 10$ ($\omega_0 = \omega = 1 \Rightarrow \lambda_c = 0.5$) como una función de λ . La entropía de Wehrl $W_j(\lambda)$ aumenta con el número de átomos $N = 2j$ y el parámetro de control λ , alcanzando los valores límite $W_j(0) = 1 + 2j/(2j + 1) \xrightarrow{j \rightarrow \infty} 2$ y $W_\infty(\infty) = 2 + \ln(2)$ en el límite termodinámico.

Podemos calcular fácilmente la entropía de Wehrl de (3.4.12), que da

$$W_j(\lambda) = \begin{cases} 1 + \frac{2j}{2j+1}, & \text{si } \lambda < \lambda_c \\ 1 + \frac{2j}{2j+1} + \ln 2, & \text{si } \lambda \gg \lambda_c. \end{cases} \quad (3.4.13)$$

que denota un exceso de entropía de $\ln(2)$ en la fase superradiante. En la fase normal, tenemos $W_j(\lambda) = 1 + 2j/(2j + 1)$, como corresponde a un estado coherente de acuerdo con la conjetura (aún no probada) de Lieb.

De nuevo, obtenemos el resultado conjeturado por Wehrl [Weh2002] y probado por Lieb [Lie1978]. La entropía de Wehrl para un estado coherente de spin j , $|z\rangle$, daría un entropía mínima de $2j/(2j + 1)$. Entonces, para nuestro sistema conjunto, tendremos $W_j(\lambda) = 1 + 2j/(2j + 1)$ en la fase normal ($\lambda < \lambda_c$), y por tanto, $W_j \rightarrow 2$ en el límite

termodinámico $j \rightarrow \infty$, de acuerdo con nuestro resultado.

3.4.4. Resultados numéricos y variacionales

En la Figura 3.6 representamos la distribución exacta de Husimi del estado fundamental $\Psi(\alpha, z)$ en 3D en el espacio de “posiciones” (α y z real) y en el espacio de “momentos” (α y z imaginarios). Observamos que la distribución de de Husimi en el espacio de posiciones está centrada entorno a $\alpha = 0 = z$ en la fase normal $\lambda < \lambda_c$ (sin fotones ni átomos excitados) pero se divide en dos paquetes diferentes en la fase super-radiante $\lambda > \lambda_c$. En el espacio de momentos, la distribución de Husimi se vuelve más y más deslocalizada con la aparición de múltiples modulaciones por encima del punto crítico λ_c (véase también la Figura 3.8 representativa del contorno de la distribución para el caso variacional).

La entropía de Wehrl $W_j(\lambda)$, como una función de λ para diferentes valores de j , caracteriza la deslocalización de la distribución exacta de Husimi. Los resultados se muestran en la Fig. 3.7, donde presentamos $W_j(\lambda)$ para $j = 5$ y $j = 10$ (líneas continuas) y para $\omega = \omega_0 = 1$ (para el cual $\lambda_c = 0.5$), junto con los resultados variacionales. La entropía de Wehrl tiende a 2 (para j alto) en la fase normal, y a $2 + \ln 2$ en la fase superradiante, con un cambio brusco (más abrupto a media que j se incrementa) entorno al punto crítico.

Los valores exactos de $W_j(\lambda)$ para $\lambda \ll \lambda_c$ y $\lambda \gg \lambda_c$ son reproducidos correctamente por nuestros estados prueba expresados en términos de CS adaptados a la simetría de paridad [Cas2011a, Cas2011b], que constituyen una excelente aproximación a la solución cuántica exacta de los estados fundamental (con paridad par) y primer estado excitado (paridad impar) del modelo de Dicke.

3.4.5. Ceros de la distribución de Husimi variacional

Para finalizar, comentaremos que los ceros de la distribución de Husimi nos permiten caracterizar la QPT (para más información ver [Rom2012c]).

De (3.4.12) obtenemos

$$\Psi(\alpha, z) = 0 \Rightarrow 2\alpha\alpha_0 + 2j \ln \frac{1 + zz_0}{1 - zz_0} = i\pi(2l + 1), \quad l \in \mathbb{Z}, \quad (3.4.14)$$

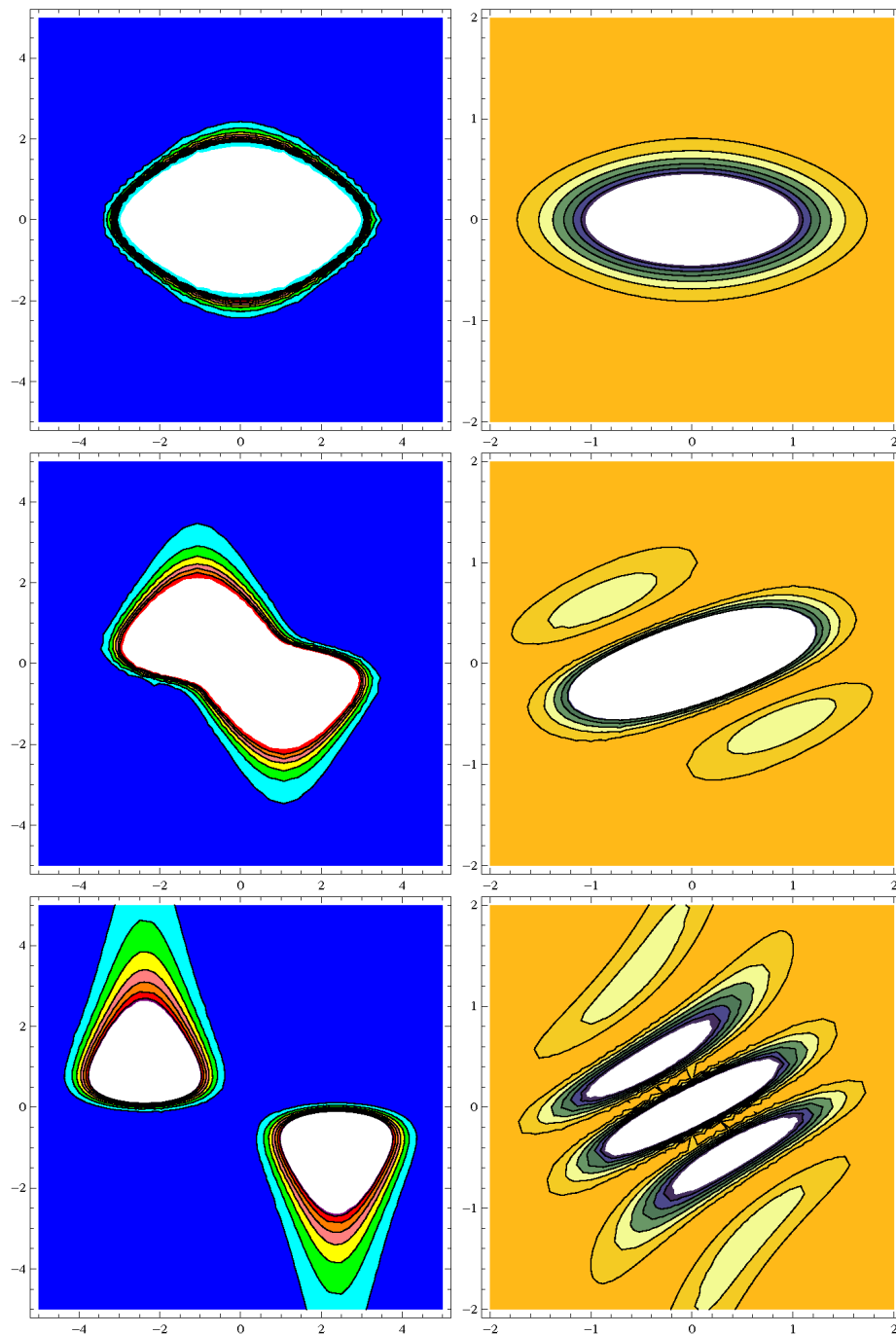


Figura 3.8: Líneas de contorno de la distribución de Husimi variacional $\Psi_+(\alpha, z)$ en el “espacio de posiciones” (α y z real; panel izquierdo) y “espacio de momentos” (α y z imaginario; panel derecho) para diferentes valores de λ (de arriba a abajo: $\lambda = 0$, $\lambda = 0.6$ y $\lambda = 1$) para $j = 3$ y $\omega = \omega_0 = 1 \Rightarrow \lambda_c = 0.5$. Todos los valores están en unidades atómicas.

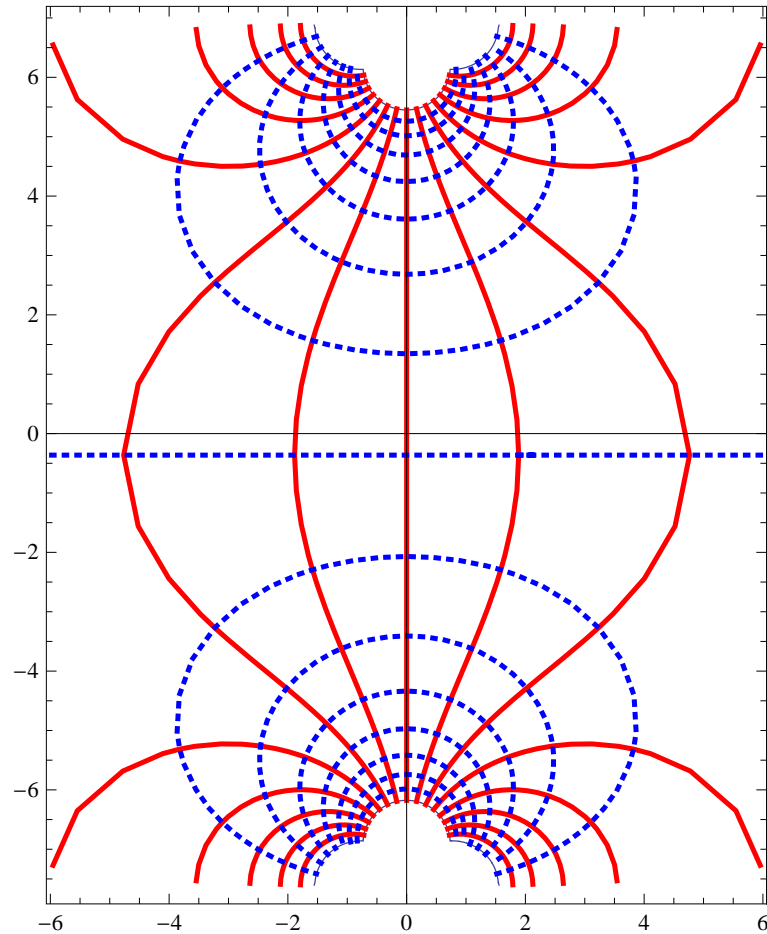


Figura 3.9: Superficie de ceros $\alpha = f_j^{(l)}(z, \lambda)$ de la distribución de Husimi variacional $\Psi_+(\alpha, z)$ para $\lambda = 1, j = 10$ y $l = 0$ ($\lambda_c = 0.5$) visto como un mapa conforme de una retícula regular en el plano z .

que define una superficie bidimensional (para cada valor de l) en un espacio tetradiimensional con las siguientes ecuaciones paramétricas

$$\alpha = f_j^{(l)}(z, \lambda) = \frac{j}{\alpha_0} \ln \frac{1 - zz_0}{1 + zz_0} + \frac{i\pi}{2\alpha_0} (2l + 1). \quad (3.4.15)$$

En particular, esta expresión da “el número de fotones medio menos probable $|\alpha|^2$ para cada fracción media de átomos $|z|^2/(1 + |z|^2)$ ” en el espacio de fases. En la Figura 3.9 representamos la superficie como una aplicación conforme de un retículo en el plano z . Es decir, para $z = z_1 + iz_2$, representamos la imagen de las líneas verticales $z_1 = \text{constante}$ (curvas en rojo continuo) y líneas horizontales $z_2 = \text{constante}$ (curvas en azul punteado).

Vemos de (3.4.14) que, en la fase normal ($\alpha_0 = 0 = z_0$) la distribución de Husimi $\Psi(\alpha, z)$ no tiene ceros. En la fase superradiante ($\lambda > \lambda_c$) hay más y más ceros a medida que j y λ se incrementan. Para estudiar el límite de j alto, redefinimos $\beta \equiv \sqrt{2j} z$, que simplifica la expresión de

$$2j \ln \frac{1 + zz_0}{1 - zz_0} \simeq 2\beta\beta_0, \quad \text{for } j \gg 1, \quad (3.4.16)$$

donde hemos hecho uso de la definición del número de Euler en cada paso. Por tanto, la ecuación (3.4.15) se convierte en

$$\alpha_1 = -\frac{\beta_0}{\alpha_0} \beta_1, \quad \alpha_2 = -\frac{\beta_0}{\alpha_0} \beta_2 + \frac{\pi}{2\alpha_0} (2l + 1). \quad (3.4.17)$$

para $\alpha = \alpha_1 + i\alpha_2$ y $\beta = \beta_1 + i\beta_2$. Conectando con la Sección 3.3.4.4, en el límite de j alto, y en la fase superradiante ($\lambda > \lambda_c$), los ceros están localizados a lo largo de líneas rectas (“franjas oscuras”) en el plano de $\alpha_1\beta_1$ (posiciones) y $\alpha_2\beta_2$ (momentos). En el plano de momentos, el número de franjas oscuras aumenta con λ y j . En el límite termodinámico $j \rightarrow \infty$, los ceros llenan densamente el plano de momentos $\alpha_2\beta_2$ (ver [Rom2012c] para una representación gráfica en el límite de j alto).

Capítulo 4

Distribución de Husimi en el modelo vibrón

4.1. Introducción

Al igual que hicimos en el capítulo anterior, analizaremos las propiedades en el espacio de fases de la transición de fase cuántica que presenta el modelo vibrón, utilizado en el estudio de los espectros rotacional y vibracional de moléculas diatómicas y poliatómicas. Emplearemos la distribución de Husimi, dada por la superposición de un estado (coherente) de mínima incertidumbre y la función de onda, en lugar de la distribución de Wigner [Aul2004, Dan1974, Wei1999]. Además, exploraremos los ceros de la distribución de Husimi, directamente relacionados con el estado cuántico [Kor1997], y con la existencia de caos clásico o cuántico [Leb1990, Dan1974].

La distribución de Husimi es de utilidad en medidas de información como las razones de participación inversa y la entropía de Wehrl [Min2004]. En este capítulo realizaremos una descripción de información de la transición de fase cuántica del modelo vibrón en términos de las razones de participación inversa (y momentos más altos) y la entropía de Wehrl de la distribución de Husimi. Los resultados numéricos se compararan con los resultados obtenidos a través de un enfoque variacional usando estados coherentes de $U(3)$ adaptados a la simetría de paridad.

4.2. Estados coherentes de SU(3) y distribución de Husimi

4.2.1. Estados coherentes de SU(3)

Los modelos de vibrón en 2D describen un sistema con un grado de libertad del tipo dipolo restringido a un movimiento plano. El hamiltoniano esencial viene descrito por [Per2008]

$$\hat{H} = (1 - \xi)\hat{n} + \xi \frac{N(N+1) - \hat{W}^2}{N-1}, \quad (4.2.1)$$

donde el número cuántico (constante) N es el número total de estados ligados que caracteriza la representación totalmente simétrica $[N]$ of $U(3)$. Como se comentó en la Sección 1.2, este modelo presenta una QPT “de forma” en $\xi_c = 0.2$, relacionada con un cambio de simetría dinámica asociado con dos cadenas algebraicas que parten de $U(3)$ y finalizan en $SO(2)$: las denominadas cadena del oscilador “cilíndrico” y la cadena del oscilador “desplazado”.

El espacio de Hilbert es expandido por los vectores de la base ortonormal

$$|N; n, l\rangle = \frac{(\sigma^\dagger)^{N-n} (\tau_+^\dagger)^{\frac{n+l}{2}} (\tau_-^\dagger)^{\frac{n-l}{2}}}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}} |0\rangle, \quad (4.2.2)$$

donde el número cuántico de doblez $n = N, N-1, N-2, \dots, 0$ y el momento angular $l = \pm n, \pm(n-2), \dots, \pm 1$ ó 0 (n =impar o par) son los autovalores de \hat{n} y \hat{l} , respectivamente. [Per2008] Como podemos comprobar fácilmente, la evolución temporal preserva la paridad $e^{i\pi n}$ de un determinado estado $|N; n, l\rangle$. Teniendo en cuenta este hecho, consideraremos en nuestro análisis estados prueba adaptados a la simetría de paridad, como veremos en la Sección 4.3.1.

Usaremos la siguiente notación $(a_0, a_1, a_2) \equiv (\sigma, \tau_+, \tau_-)$ para nuestros tres operadores de oscilador. Los estados coherentes proyectivos de $SU(3)$ se definen (para un N dado) como

$$\begin{aligned} |z_1, z_2\rangle &\equiv \frac{(a_0^\dagger + z_1 a_1^\dagger + z_2 a_2^\dagger)^N |0\rangle}{N!(1 + |z_1|^2 + |z_2|^2)^{N/2}} \\ &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n \varphi_{n,m}^{(N)}(z_1, z_2) |N; n, l = n - 2m\rangle, \end{aligned} \quad (4.2.3)$$

con $z_1, z_2 \in \mathbb{C}$ y

$$\varphi_{n,m}^{(N)}(z_1, z_2) \equiv \frac{(N!/((N-n)!(n-m)!m!))^{1/2}}{(1+|z_1|^2+|z_2|^2)^{N/2}} z_1^{n-m} z_2^m. \quad (4.2.4)$$

Éstos pueden ser vistos como una generalización de los estados coherentes de spin j de SU(2)

$$|z\rangle = (1+|z|^2)^{-j} \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m}^{1/2} z^{j+m} |j, m\rangle, \quad (4.2.5)$$

en términos de los estados de Dicke o de momento angular $|j, m\rangle$.

Aunque los CSs proyectivo de SU(3) no forman un conjunto ortonormal ya que

$$\langle z'_1, z'_2 | z_1, z_2 \rangle = \frac{(1 + \bar{z}'_1 z_1 + \bar{z}'_2 z_2)^N}{(1 + |z'_1|^2 + |z'_2|^2)^{N/2} (1 + |z_1|^2 + |z_2|^2)^{N/2}}, \quad (4.2.6)$$

éstos constituyen un conjunto sobrecompleto del correspondiente espacio de Hilbert y cumplen la relación de clausura o de resolución de la identidad (ver por ej. [Per1986]):

$$1 = \int_{\mathbb{R}^4} |z_1, z_2\rangle \langle z_1, z_2| d\mu(z_1, z_2), \quad (4.2.7)$$

siendo

$$d\mu(z_1, z_2) = \frac{(N+1)(N+2)}{\pi^2} \frac{d^2 z_1 d^2 z_2}{(1+|z_1|^2+|z_2|^2)^3} \quad (4.2.8)$$

la medida sobre el espacio complejo (cociente) proyectivo $\mathbb{C}P^2 = U(3)/U(1)^3$ y $d^2 z_{1,2} \equiv d\text{Re}(z_{1,2}) d\text{Im}(z_{1,2})$ la medida de Lebesgue usual en \mathbb{R}^2 o \mathbb{C} .

4.2.2. Distribución de Husimi

En general, el vector del estado fundamental ψ viene dado por la expansión

$$|\psi_\xi^{(N)}\rangle = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n c_{nm}^{(N)}(\xi) |N; n, l = n - 2m\rangle, \quad (4.2.9)$$

donde los coeficientes $c_{nm}^{(N)}(\xi)$ son calculados por diagonalización numérica de (4.2.1). Podemos observar que el estado fundamental $|\psi_\xi^{(N)}\rangle$ tiene paridad par ya que, por ejemplo, $c_{nm}^{(N)}(\xi) = 0$ para n impar.

La distribución de Husimi de $\Psi_\xi^{(N)}(z_1, z_2)$ de $\psi_\xi^{(N)}$ es, por definición, el módulo cuadrado del solapamiento de $\psi_\xi^{(N)}$ y un estado coherente arbitrario $|z_1, z_2\rangle$, es decir,

$$\begin{aligned}\Psi_\xi^{(N)}(z_1, z_2) &= |\langle z_1, z_2 | \psi_\xi^{(N)} \rangle|^2 \\ &= \sum_{n, n'=0}^N \sum_{m, m'=0}^n c_{nm}^{(N)}(\xi) \bar{c}_{n'm'}^{(N)}(\xi) \\ &\quad \times \varphi_{n,m}^{(N)}(z_1, z_2) \varphi_{n',m'}^{(N)}(\bar{z}_1, \bar{z}_2)\end{aligned}\tag{4.2.10}$$

y normalizada de acuerdo a

$$\int_{\mathbb{R}^4} \Psi_\xi^{(N)}(z_1, z_2) d\mu(z_1, z_2) = 1.\tag{4.2.11}$$

Ésto se puede ver como una representación (estado coherente) alternativa a la representación usual en posiciones q y momentos p , dadas por $\psi(q) = \langle q | \psi \rangle$ y $\tilde{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle$, respectivamente (ver Sección 1.4 para expresiones de $|\psi_\xi^{(N)}\rangle$ en representación de posiciones en términos de los polinómios de Hermite).

4.2.3. Momentos y entropía de Rényi-Wehrl de la distribución de Husimi

Los momentos ν -ésimos $M_{N,\nu}$, de la distribución de Husimi (4.2.10) nos permitirán visualizar la QPT en el modelo vibrón a través del punto crítico ξ_c

$$M_{N,\nu}(\xi) = \int_{\mathbb{R}^4} (\Psi_\xi^{(N)}(z_1, z_2))^\nu d\mu(z_1, z_2).\tag{4.2.12}$$

Nótese que $M_{N,1} = 1$ ya que $\Psi_\xi^{(N)}$ está normalizada (4.2.11). De entre todos los momentos consideraremos la denominada “razón de participación inversa”, $P_N(\xi) = M_{N,2}(\xi)$, que de alguna manera mide la localización o deslocalización de Ψ a través de la transición de fase. La entropía “clásica” de Rényi-Wehrl (frente a la entropía cuántica de von Neumann) se define como

$$W_{N,\nu}(\xi) = \frac{1}{1-\nu} \ln(M_{N,\nu}(\xi)),\tag{4.2.13}$$

para $\nu \neq 1$. Para $\nu = 1$ tenemos la entropía de Wehrl usual

$$W_N(\xi) = - \int_{\mathbb{R}^4} \Psi_\xi^{(N)}(z_1, z_2) \ln(\Psi_\xi^{(N)}(z_1, z_2)) d\mu(z_1, z_2).\tag{4.2.14}$$

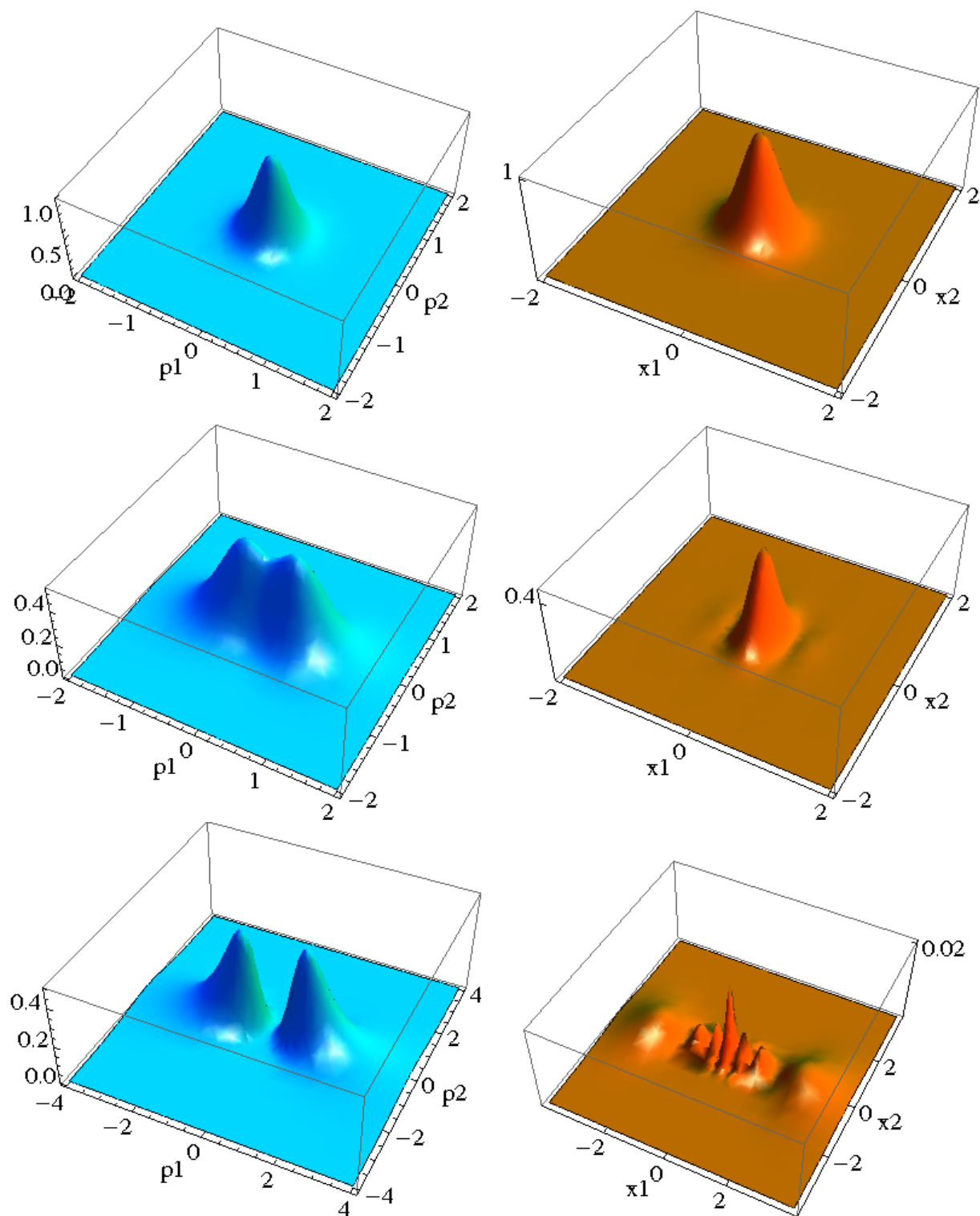


Figura 4.1: Distribución exacta de Husimi $\Psi_{\xi}^{(N)}(z_1, z_2)$ de $z_{1,2} = x_{1,2} + ip_{1,2}$ en el “espacio de momentos” ($z_{1,2}$ imaginario; parte izquierda) y en el “espacio de posiciones” ($z_{1,2}$ real; parte derecha) para diferentes valores de ξ (de arriba a abajo: $\xi = 0$, $\xi = 0.3$ y $\xi = 0.98$) para $N = 8$. Unidades adimensionales.

4.2.4. Resultados numéricos

La resolución numérica del modelo vibrón consiste en el cálculo numérico de los coeficientes $c_{nm}^{(N)}(\xi)$ por diagonalización numérica de (4.2.1). Consideremos las coordenadas en el espacio de “posiciones” $x_{1,2} = \text{Re}(z_{1,2})$ y las coordenadas en el espacio de “momentos” $p_{1,2} = \text{Im}(z_{1,2})$. En la Figura 4.1 representamos secciones transversales de la distribución de Husimi en posiciones ($p_{1,2} = 0$) y momentos ($x_{1,2} = 0$). Observamos que $\Psi_\xi^{(N)}(ip_1, ip_2)$ se divide en dos paquetes para $\xi \geq \xi_c = 0.2$, mientras $\Psi_\xi^{(N)}(x_1, x_2)$ adquiere una modulación por encima del punto crítico ξ_c . Veremos más adelante como la entropía de Wehrl y los momentos de la distribución de Husimi caracterizan esta “deslocalización” del estado fundamental.

Además hemos calculado el segundo momento $M_{N,2}$ (también denominado “razón de participación inversa”, P_N) y la entropía de Wehrl, W_N , en función de ξ . Los resultados calculados se muestran en la Fig. 4.2 (junto con los resultados variacionales de la sección 4.3), donde presentamos $P_N(\xi)$ y $W_N(\xi)$ para $N = 4, 8, 16$. Nótese que la razón de participación inversa (panel superior) es mayor en la fase lineal, $\xi < 0.2$, que en la fase plegada, $\xi > 0.2$, entonces esta cantidad capta la deslocalización de la distribución de Husimi del estado fundamental a través del punto crítico $\xi_c = 0.2$, como se muestra en la Figura 4.1. También debemos notar que P_N decrece con N , alcanzando los valores límites de la ec. (4.3.10) para $\nu = 2$. La entropía de Wehrl (panel inferior) muestra un exceso de entropía de $0.69 \simeq \ln(2)$ [véase ec. (4.3.11)], entonces, esta cantidad da cuenta de la división de la distribución de Husimi en dos paquetes no solapados en la segunda fase (plegada). El cambio de $P_N(\xi)$ y $W_N(\xi)$ a través de ξ_c es más repentino cuando aumenta N . La Figura 4.2 también muestra un buen acuerdo entre los resultados numéricos y los resultados de la aproximación variacional obtenidos considerando estados coherentes adaptados a la simetría de paridad introducidos en [Cal2012b] y discutidos en la siguiente Sección 4.3.

4.3. Distribución de Husimi variacional

En esta sección calcularemos expresiones analíticas explícitas para la distribución de Husimi, momentos y entropía de Wehrl en función de N, ν y ξ usando estados prueba

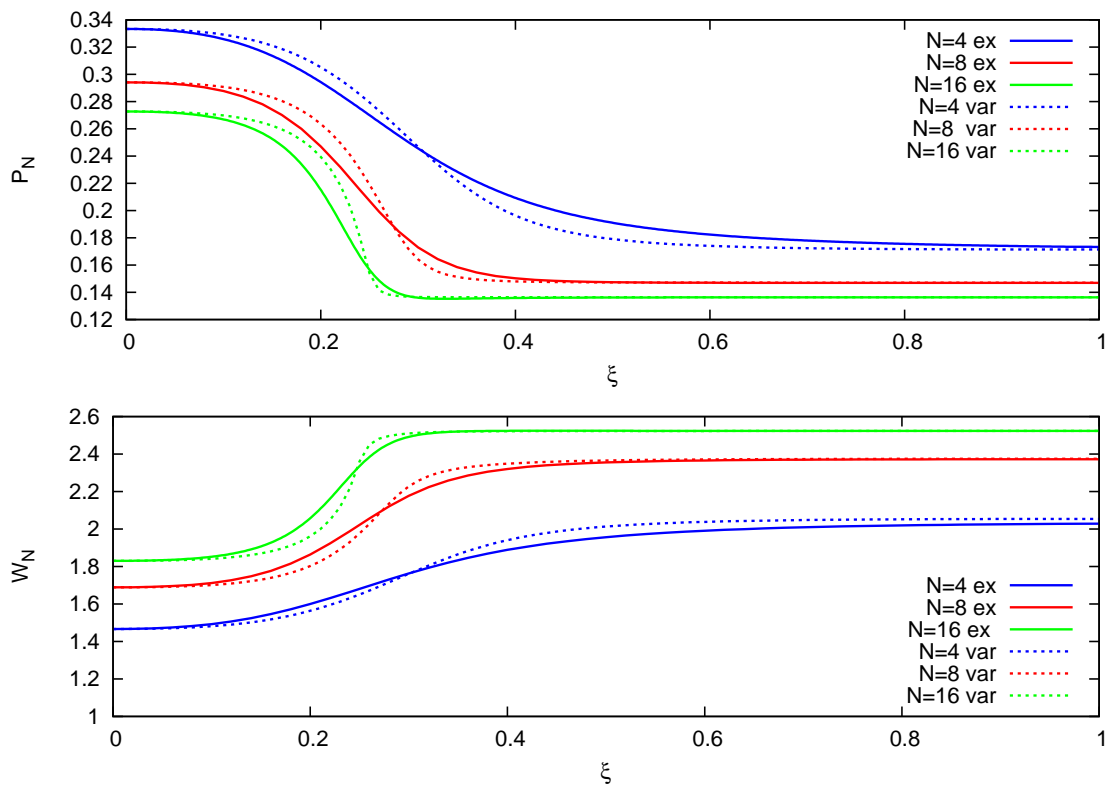


Figura 4.2: Razón de participación inversa $P_N(\xi)$ y entropía de Wehrl $W_N(\xi)$ numérica exacta (línea continua) y variacional (línea discontinua) para $N = 4, 8$ y $N = 16$ como una función de ξ . (P_N decrece y W_N aumenta con N).

en términos de estados coherentes adaptados a la simetría de paridad, ya utilizados en la Sección 1.4, y se discutirá el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$.

Estos estados prueba constituyen una buena aproximación a la solución numérica exacta del estado fundamental del modelo vibrón. En particular, se ha demostrado en [Cal2012b] que este CS simetrizado capta el comportamiento correcto de las propiedades del estado fundamental sensibles a la simetría de la paridad del hamiltoniano como es el entrelazamiento rovibracional y las medidas de deslocalización.

4.3.1. CS adaptados a la simetría de paridad y su distribución de Husimi

Existe una fuerte evidencia de que el estado fundamental exacto (4.2.9) puede ser aproximado correctamente por un CS de SU(3) (4.2.3) adaptándolo convenientemente a la simetría de paridad (ver ref. [Cal2012b] para más detalles). De hecho, el estado variacional de dos parámetros (condensado bosónico)

$$|N; r, \theta\rangle \equiv |z_1 = -\frac{r}{\sqrt{2}}e^{-i\theta}, z_2 = \frac{r}{\sqrt{2}}e^{i\theta}\rangle \quad (4.3.1)$$

(con las coordenadas polares r, θ representando los parámetros variacionales) ya ha sido considerado como un estado prueba variacional en [Per2008], para reproducir la energía del estado fundamental en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$. Nótese que z_1 y z_2 no son aquí números complejos arbitrarios como en (4.2.3) sino que están restringidos a $z_1 = -\bar{z}_2$. Como un comentario diremos que las excitaciones intrínsecas también se pueden construir de esta forma, definiendo entonces “CSs multiespecies” (ver por ej. [Kuy1998, Cap2005]).

Como se menciona en la Sección 1.4, donde se estudió la aproximación variacional del modelo vibrón, el parámetro variacional r se fija al minimizar el funcional de la energía “por partícula” del estado fundamental, $\mathcal{E}_\xi(r)$ (ver por ej. [Per2008]). A partir $\partial\mathcal{E}_\xi(r)/\partial r = 0$ obtenemos el “radio de equilibrio” r_e y la energía del estado fundamental

\mathcal{E}_ξ como una función del parámetro de control ξ :

$$\begin{aligned} r_e(\xi) &= \begin{cases} 0, & \xi \leq \xi_c = 1/5 \\ \sqrt{\frac{5\xi-1}{3\xi+1}}, & \xi > \xi_c = 1/5 \end{cases} \\ \mathcal{E}_\xi(r_e(\xi)) &= \begin{cases} \xi, & \xi \leq \xi_c = 1/5 \\ \frac{-9\xi^2+10\xi-1}{16\xi}, & \xi > \xi_c = 1/5. \end{cases} \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

Como $d^2\mathcal{E}_\xi(r_e(\xi))/d\xi^2$ es discontinua en $\xi_c = 1/5$, se dice que la transición de fase es de segundo orden.

Aunque el CS $|N; r_e(\xi)\rangle$ ((4.3.1)) describe correctamente la energía media en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, recientemente se ha puesto de manifiesto en [Cal2012b] que éste no capta el correcto comportamiento para otras propiedades del estado fundamental sensibles a la simetría de paridad $\hat{\Pi}$ del hamiltoniano como, por ejemplo, el enredo rovibracional. En nuestro estudio veremos que la distribución de Husimi $\Phi_\xi^{(N)}(z_1, z_2) \equiv |\langle z_1, z_2 | \phi_\xi^{(N)} \rangle|$ de $|\phi_\xi^{(N)}\rangle = |N; r_e(\xi)\rangle$ no capta la deslocalización del estado fundamental a través de la transición de fase mostrada en la Figura 4.1 y cuantificada por la entropía de Wehrl en la Figura 4.2, ya que el CS $|\phi_\xi^{(N)}\rangle = |N; r_e(\xi)\rangle$ no tiene una paridad definida como tiene el estado fundamental exacto (4.2.9). La expresión explícita de la distribución de Husimi de $|\phi_\xi^{(N)}\rangle = |N; r_e(\xi)\rangle$ puede ser calculada, como una función de (z_1, z_2) , mediante el solapamiento con el CS (4.2.6) como

$$\begin{aligned} \Phi_\xi^{(N)}(z_1, z_2) &= |\langle z_1, z_2 | \phi_\xi^{(N)} \rangle|^2 = |\langle z_1, z_2 | z'_1, z'_2 \rangle|^2 \\ &= \frac{|1 - \bar{z}_1 \frac{r_e(\xi)}{\sqrt{2}} + \bar{z}_2 \frac{r_e(\xi)}{\sqrt{2}}|^{2N}}{(1 + |z_1|^2 + |z_2|^2)^N (1 + r_e^2(\xi))^N}, \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

donde hemos sustituido $z'_1 = -r_e(\xi)/\sqrt{2}$, $z'_2 = r_e(\xi)/\sqrt{2}$, como en la ec. (4.3.1) para $\theta = 0$ y $r = r_e(\xi)$. Esta distribución $\Phi_\xi^{(N)}(z_1, z_2)$ tiene un único máximo en $(z_1^{(0)}, z_2^{(0)}) = (-r_e(\xi)/\sqrt{2}, r_e(\xi)/\sqrt{2})$ y por lo tanto no reproduce la estructura de doble paquete de la distribución exacta $\Psi_\xi^{(N)}(z_1, z_2)$ por encima de ξ_c como se muestra en la Figura 4.1. Como veremos después en la Sección 4.3.2, $\Phi_\xi^{(N)}(z_1, z_2)$ tiene una entropía de Wehrl constante, $W_N(\xi) = N(3 + 2N)/((N + 1)(N + 2))$, y por tanto, no caracteriza la QPT en $\xi_c = 0.2$, donde la entropía de Wehrl exacta experimenta un brusco incremento como se muestra en la Fig. 4.2.

El problema se debe a la falta de simetría de paridad que presenta el CS variacional $|\phi_\xi^{(N)}\rangle = |N; r_e(\xi)\rangle$, a diferencia del estado fundamental exacto $|\psi_\xi^{(N)}\rangle$, que tiene paridad

par. Por tanto, una mejor descripción variacional del estado fundamental vendría dada en términos de CSs con simetría de paridad par (ver [Cal2012b] para más detalles)

$$|N; r, +\rangle \equiv \frac{(1 + \hat{\Pi})|N; r\rangle}{\mathcal{N}_+(r)} = \frac{|N; r\rangle + |N; -r\rangle}{\mathcal{N}_+(r)}, \quad (4.3.4)$$

donde $\mathcal{N}_+(r) = \sqrt{2}(1 + \langle N; -r|N; r\rangle)^{1/2}$ es una constante de normalización. Teniendo en cuenta el solapamiento entre estados coherentes (ec. (4.2.6))

$$\langle N; -r|N; r\rangle = ((1 - r^2)/(1 + r^2))^N. \quad (4.3.5)$$

Se tiene que $\langle N; -r|N; r\rangle \rightarrow 0$ cuando $N \rightarrow \infty$, de manera que el estado de paridad par (4.3.4) es una superposición de dos paquetes de onda (coherentes) cuasi-clásicos (distinguidos) con apenas solapamiento entre ellos, lo que justifica la denominación de estados de “tipo gato de Schrödinger”. Este tipo de estados adaptados a la simetría de paridad ya se han propuesto en [Cas2011a, Cas2011b] y han sido usados por nosotros en [Rom2012b, Cal2012c, Rom2012c] para el estudio de la QPT del modelo de Dicke. Al igual que hicimos en el capítulo 3, donde empleamos dichos estados para el estudio de la distribución de Husimi variacional del estado fundamental en el modelo de Dicke [Rom2012c], aquí los volveremos a usar para el estudio de las propiedades del modelo vibrón, el cual comparte algunas características comunes con el modelo de Dicke.

El parámetro variacional r en (4.3.4) se calcula de nuevo minimizando el funcional de energía “por partícula” del estado fundamental $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r) = \langle \hat{H} \rangle_+ / N$, pero ahora considerando una configuración simétrica (4.3.4). A diferencia de $\mathcal{E}_\xi(r)$, el nuevo funcional de energía $\mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r)$ depende de N (ver Sección 1.4). A partir de $\partial \mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r) / \partial r = 0$ podemos obtener el nuevo radio de equilibrio $r_e^{(N)}(\xi)$. Aunque no disponemos de una expresión analítica explícita de $r_e^{(N)}(\xi)$ (a diferencia de $r_e(\xi)$ en la ec. (4.3.2) para un N y ξ arbitrarios, siempre podemos recurrir a un cálculo numérico de la expresión $\partial \mathcal{E}_{\xi,+}^{(N)}(r) / \partial r = 0$. En la Figura 4.3 comparamos $r_e(\xi)$ según la ec. (4.3.2) con $r_e^{(N)}(\xi)$ para $N = 8, 16$ y $N = 60$. Observamos que, en el límite termodinámico, $r_e^{(\infty)}(\xi) = r_e(\xi)$.

Entonces, la distribución de Husimi para estado gato (de paridad par) $|\phi_{\xi,+}^{(N)}\rangle \equiv$

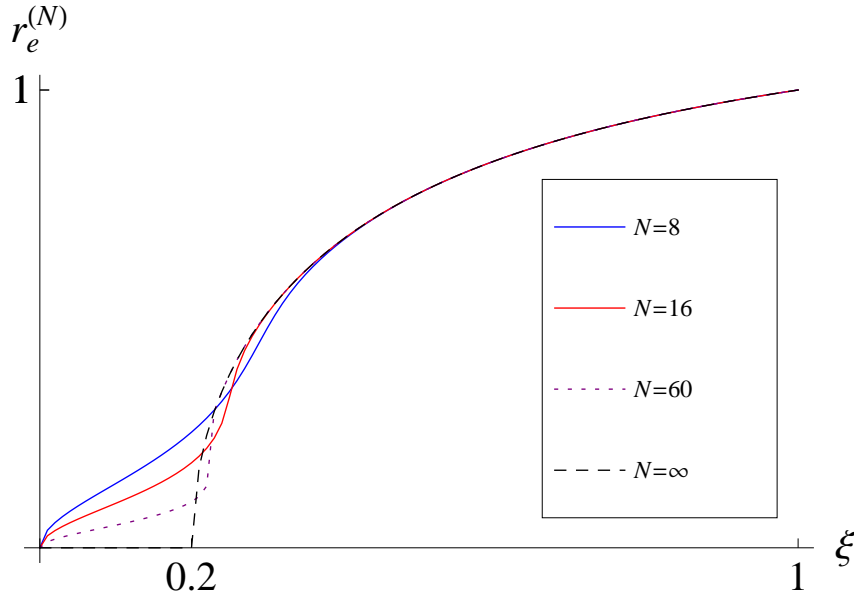


Figura 4.3: Radio de equilibrio $r_e^{(N)}(\xi)$ para $N = 8, 60, \infty$.

$|N; r_e^{(N)}(\xi), +\rangle$ en (4.3.4) es

$$\begin{aligned} \Phi_{\xi,+}^{(N)}(z_1, z_2) &= |\langle z_1, z_2 | \phi_{\xi,+}^{(N)} \rangle|^2 \\ &= \frac{|\langle z_1, z_2 | N; r \rangle + \langle z_1, z_2 | N; -r \rangle|^2}{\mathcal{N}_+^2(r)}, \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

con

$$\langle z_1, z_2 | N; \pm r \rangle = \frac{(1 \mp \frac{r}{\sqrt{2}} \bar{z}_1 \pm \frac{r}{\sqrt{2}} \bar{z}_2)^N}{(1 + |z_1|^2 + |z_2|^2)^{N/2} (1 + r^2)^{N/2}}, \quad (4.3.7)$$

donde debemos entender que $r = r_e^{(N)}(\xi)$. Ya que $|\langle z_1, z_2 | N; \pm r \rangle|$ es máximo para $(z_{1,\pm}^{(0)}, z_{2,\pm}^{(0)}) = (\mp \frac{r}{\sqrt{2}}, \pm \frac{r}{\sqrt{2}})$, la distribución de Husimi variacional (4.3.6) capta la estructura exacta mostrada en la Figura 4.1, aunque rotada $\pi/4$. Los momentos y la entropía de Wehrl son insensibles a esta rotación global, por tanto, consideramos este estado variacional ya que nos permitirá simplificar los cálculos y la obtención de expresiones analíticas explícitas.

4.3.2. Momentos de la distribución de Husimi

Se pueden obtener fácilmente expresiones analíticas explícitas los momentos ν -ésimos $M_{N,\nu}^+$ de la distribución de Husimi variacional (4.3.6) para la fase lineal rígida

$\xi = 0$ ($r = r_e^{(N)}(0) = 0$):

$$\begin{aligned} M_{N,\nu}^+(0) &= \int_{\mathbb{R}^4} (\Phi_{0,+}^{(N)}(z_1, z_2))^\nu d\mu(z_1, z_2) \\ &= \frac{(N+1)(N+2)}{(1+\nu N)(2+\nu N)}, \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

lo cual está en completo acuerdo con los cálculos numéricos exactos, como se muestra en la Fig. 4.2 para el caso particular de $\nu = 2$. Lo mismo sucede para la entropía de Wehrl para $\xi = 0$ que puede ser obtenida como

$$W_N^+(0) = \lim_{\nu \rightarrow 1} \frac{1}{1-\nu} \ln M_{N,\nu}^+(0) = \frac{N(3+2N)}{(N+1)(N+2)}. \quad (4.3.9)$$

Para otros valores de ξ , las integrales siempre pueden resolverse numéricamente (ver por ej. la Figura 4.2 para $M_{N,2}(\xi)$ y $W_N(\xi)$ como una función de ξ para $N = 4, 8, 16$). En la fase rígidamente plegada ($\xi = 1$), somos capaces de obtener el comportamiento asintótico para $N \rightarrow \infty$, en particular

$$M_{N,\nu}^+(\xi) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \begin{cases} \nu^{-2}, & \text{si } \xi = 0 \\ 2^{1-\nu} \nu^{-2}, & \text{si } \xi = 1, \end{cases} \quad (4.3.10)$$

y

$$W_N^+(\xi) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \begin{cases} 2, & \text{si } \xi = 0 \\ 2 + \ln(2), & \text{si } \xi = 1. \end{cases} \quad (4.3.11)$$

En realidad, las expresiones (4.3.10) y (4.3.11) también dan una buena aproximación para $N \gg 1$ en la región “flexible” $0 < \xi < 1$ ya que los cambios en los momentos y en la entropía de Wehrl son más y más escarpados a medida que aumenta N , siendo aproximadamente constante en cada una de las fases como se muestra en la Fig. 4.2.

En este momento, nos podemos preguntar hasta qué punto los resultados obtenidos para el CS adaptado por simetría de paridad (4.3.4) difieren respecto al estado prueba en términos de un CS ordinario (4.3.1). Debemos decir que la entropía de Wehrl para la distribución de Husimi $\Phi_\xi^{(N)}$ de un CS ordinario (4.3.1) es contante, $W_N(\xi) = N(3+2N)/[(N+1)(N+2)]$, es decir, es una función independiente del parametro de control ξ (a través de su dependencia con $r = r_e(\xi)$), y por tanto, ésta no capta la deslocalización del estado fundamental a través de la transición de fase como se muestra en la Fig. 4.1 y cuantificada por la IPR y la entropía de Wehrl en la fig 4.2. Por el contrario,

la distribución de Husimi $\Psi_{\xi,+}^{(N)}$ en la ec. 4.3.6 capta muy bien esta deslocalización, exhibiendo un exceso de entropía de $\ln(2)$ de la fase lineal a la fase plegada, de acuerdo con los resultados numéricos exactos.

El comportamiento que pone de manifiesto las ecs. (4.3.10) y (4.3.11) también se ha encontrado para el modelo de Dicke que describe la interacción entre materia-campo en el límite termodinámico $N = 2j \rightarrow \infty$ (el número de átomos), que también exhibe una QPT desde una fase normal a una fase superradiante (ver ref. [Rom2012c]).

4.3.3. Conjetura de Wehrl-Lieb

En esta sección comentaremos la conjetura (aún no demostrada) de Lieb. Fue conjeturado por Wehrl [Weh2002] y probado por Lieb [Lie1978] que cualquier estado coherente de Glauber (de un oscilador armónico) $|\alpha\rangle$ tiene una entropía de Wehrl mínima de 1. En esta misma referencia de Lieb [Lie1978], también se conjeturó que la extensión de la definición de entropía de Wehrl para estados coherentes de spin j (4.2.5) da lugar a una entropía mínima de $2j/(2j+1)$. Aquí proponemos que la extensión (4.2.14) de la definición de Lieb de entropía dará lugar a una entropía mínima de $N(3+2N)/((N+1)(N+2))$ para un CS proyectivo de $SU(3)$ (4.2.3). Hemos visto que el estado fundamental del modelo vibrón en la fase lineal rígida ($\xi = 0$) es en sí mismo un CS de $SU(3)$ y su entropía de Wehrl alcanza este mínimo. El mismo valor se obtiene para la entropía de Wehrl de cualquier otro CS de $SU(3)$ como (4.2.3). En la fase plegada rígida ($\xi = 1$), el estado fundamental no es un CS de $SU(3)$, sino que tiene una estructura de “tipo gato” (es decir, una combinación lineal de CSs) dando un exceso de la entropía de Wehrl de $\ln(2)$.

4.3.4. Ceros de la distribución de Husimi variacional

Como se conoce, la densidad de Husimi está determinada por sus ceros a través de la factorización de Weierstrass-Hadamard. También se ha observado que la distribución de los ceros difiere para sistemas regulares clásicos o sistemas caóticos y se puede considerar como un indicador del caos clásico (ver por ej. [Kor1997, Dan1974, Leb1990]). Además, nosotros hemos caracterizado la QPT del modelo de Dicke por medio de los ceros de la distribución de Husimi mediante un enfoque variacional [Rom2012c], véase

la Sección 3.3.4.4 donde se analiza la distribución de ceros de la distribución de Husimi para el modelo de Dicke.

En esta sección estudiamos la distribución de ceros de la densidad de Husimi como indicador de la QPT en el modelo vibrón, al igual que hicimos para el modelo de Dicke en el capítulo anterior. De (4.3.6) obtenemos

$$\Phi_{\xi,+}^{(N)}(z_1, z_2) = 0 \Rightarrow z_2 - z_1 = \frac{i\sqrt{2}}{r_e^{(N)}(\xi)} \tan\left(\frac{(2l+1)\pi}{2N}\right) \quad (4.3.12)$$

con $l = -[N/2], \dots, [N/2] - 1$ y $[N/2] = \text{Floor}(N/2)$. Si separamos parte real e imaginaria como $z_{1,2} = x_{1,2} + ip_{1,2}$, la última condición se puede escribir como

$$x_1 = x_2, \quad (4.3.13)$$

$$p_2 = p_1 + \frac{\sqrt{2}}{r_e^{(N)}(\xi)} \tan\left(\frac{(2l+1)\pi}{2N}\right). \quad (4.3.14)$$

Para $r_e^{(N)}(\xi) = 0$ la distribución de Husimi $\Phi_{\xi,+}^{(N)}(z_1, z_2)$ no tiene ceros. Para un N finito, el valor $r_e^{(N)}(\xi) = 0$ sólo se alcanza en la fase lineal rígida $\xi = 0$ (ver Fig. 4.3). En el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, tenemos que $r_e^{(\infty)}(\xi) = 0, \forall \xi < \xi_c = 0.2$ (ver fig 4.3 y expresión (4.3.2)) por tanto $\Phi_{\xi,+}^{(\infty)}(z_1, z_2)$ no tiene ceros en la fase lineal. Para $r_e^{(N)}(\xi) \neq 0$ los ceros están localizados a lo largo de líneas rectas (“franjas oscuras”) en el plano de posiciones x_1x_2 y en el plano de momentos p_1p_2 . En el plano de momentos, la densidad de ceros crece con N y ξ (a saber, con $r_e^{(N)}(\xi)$). En el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, hay un incremento repentino de ceros para $\xi > \xi_c = 0.2$ que se acumulan en las proximidades de $p_2 = p_1$ en el plano de momentos p_1p_2 , al igual que en el modelo de Dicke [Rom2012c], como se vio en la Sección 3.3.4.4.

Capítulo 5

Medidas de entrelazamiento rovibracional en el modelo vibrón

5.1. Introducción

En los capítulos anteriores hemos estudiado las QPTs mediante medidas de información, como la entropía de Rényi en el modelo de Dicke y vibrón, la función de Husimi, las funciones marginales de la distribución de Husimi y en particular, la razón de participación inversa [Rom2011, Nag2012, Rom2012a]. En este capítulo vamos a estudiar otras medidas de deslocalización, como el entrelazamiento, que nos permiten caracterizar las QPTs en estos sistemas críticos que presentan grandes correlaciones y comportamientos colectivos.

Las propiedades del entrelazamiento se ha estudiado en [Lam2004, Lam2005] para el modelo de Dicke y en [Per2010] para un condensado de Bose-Einstein de dos modos). En este capítulo recordaremos brevemente el modelo vibrón $U(3)$ (bidimensional) [Iac1981], centrándonos en el estudio de las propiedades de entrelazamiento. Recordaremos también brevemente el límite clásico, termodinámico o de campo medio de este modelo utilizando el algoritmo introducido por Gilmore [Gil1979] que hace uso de estados coherentes semiclásicos como estados variacionales para aproximar la energía del estado fundamental. Como sabemos, estos estados prueba, como tales, no presentan la simetría de paridad intrínseca presente en el hamiltoniano, ya que no tienen paridad definida. El importante papel que desempeña la paridad se ha puesto también de ma-

nifiesto recientemente por [Cas2011a, Cas2011b] en el estudio de la QPT del modelo de Dicke.

Entonces, veremos cómo los CSs adaptados a la simetría de paridad del hamiltoniano (estados de tipo “gato de Schrödinger”) describen mejor las propiedades de entrelazamiento cuántico del estado fundamental que la aproximación de campo medio. En efecto, veremos que los estados de tipo gato de tamaño N finito constituyen una aproximación a algunas cantidades con $N = \infty$. Los estados gato par captan cuantitativa y cualitativamente el entrelazamiento y medidas de deslocalización del estado fundamental exacto para N finito.

Aquí no haremos uso de expansiones $1/N$ entorno a $N = \infty$, ya que estamos trabajando con N finito. Los resultados numéricos (exactos) de la energía del estado fundamental, entrelazamiento y medida de deslocalización son reproducidos por los estados de tipo gato para N finito. Hay que decir que los efectos de tamaño finito ya han sido discutidos en el modelo de Dicke, tanto a nivel numérico [Res2005] como analíticamente [Vid2006], para cantidades termodinámicas y en [Vid2007] para la entropía de entrelazamiento, aunque el papel de la paridad no aparece de forma explícita en estos estudios. Las correcciones de tamaño finito en [Vid2006] y en [Dus2005] (para sistemas bosónicos de dos niveles) usan una expansión $1/N$ dada de forma natural por la representación de Holstein-Primakoff del momento angular [Hol1940].

En este capítulo calculamos una medida del entrelazamiento rovibracional como son la “pureza”, la entropía lineal y de von Neumann, en función del número vibrón N (relacionado con el número total de estados ligados de la molécula) y el parámetro de control ξ , revelando un aumento repentino del entrelazamiento desde la fase lineal a la fase plegada en el punto crítico ξ_c . El cálculo numérico se complementa con los resultados obtenidos mediante dos aproximaciones variacionales (con y sin simetría de paridad). Por último, se calcula la razón de participación inversa, como una medida de la deslocalización del paquete de onda del estado fundamental a través de la transición de fase, viendo que la dispersión producida es captada por los CSs adaptados a la simetría de paridad (estados de tipo gato par), lo que revela la importancia de la simetría de paridad en el estudio de la deslocalización de nuestro sistema. Se proporcionan también expresiones analíticas explícitas de la IPR en términos de funciones

hipergeométricas.

5.2. Modelo vibrón y estados coherentes simetrizados variacionales

Como se comentó en la Sección 1.2 del capítulo 1, el modelo algebraico $U(3)$ denominado modelo vibrón bidimensional (2D) ([Iac1996, Iac2003, Per2008]) describe un sistema con un grado de libertad del tipo dipolo restringido a un movimiento planar. Este modelo se usa en el estudio de los espectros rotacional y vibracional de moléculas diatómicas y poliatómicas. Este modelo presenta una transición de fase cuántica (QPT) correspondiente a la transición entre diferentes fases (de forma) conectadas a configuraciones geométricas específicas del estado fundamental y relacionadas con distintas simetrías (dinámicas) del hamiltoniano [Per2008]. La QPT ocurre como una función de un parámetro de control ξ que aparece en hamiltoniano esencial del modelo \hat{H} expresado en forma de combinación convexa $\hat{H}(\xi) = (1 - \xi)H_1 + \xi H_2$

$$\hat{H} = (1 - \xi)\hat{n} + \xi \frac{N(N+1) - \hat{W}^2}{N-1}, \quad (5.2.1)$$

donde, como ya sabemos, \hat{n} representa el operador número del bosón vectorial y \hat{W}^2 es el operador de Casimir cuadrático $C_2(SO(3)) = (\hat{D}_+\hat{D}_- + \hat{D}_-\hat{D}_+)/2 + \hat{l}^2$, siendo \hat{D}_\pm el operador dipolar y \hat{l} el operador momento angular en 2D. N es un número cuántico (constante) que representa el número total de estados ligados que caracteriza la representación totalmente simétrica $[N]$ de $U(3)$.

Ya vimos en el Capítulo 1 que este modelo presenta una QPT (de forma) en $\xi_c = 0.2$. Cuando $\xi = 0$ el sistema está en la fase I, caracterizado por una simetría dinámica $G_1 = U(2)$ (oscilador cilíndrico) de H_1 , y cuando $\xi = 1$ el sistema está en la fase II, caracterizado por una simetría dinámica $G_2 = SO(3)$ (oscilador 'desplazado') de H_2 .

El espacio de Hilbert es expandido por los vectores de la base ortonormal

$$|N; n, l\rangle = \frac{(\sigma^\dagger)^{N-n} (\tau_+^\dagger)^{\frac{n+l}{2}} (\tau_-^\dagger)^{\frac{n-l}{2}}}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}} |0\rangle, \quad (5.2.2)$$

donde el número cuántico de "doblez" $n = N, N-1, N-2, \dots, 0$ y el momento angular $l = \pm n, \pm(n-2), \dots, \pm 1$ ó 0 ($n = \text{impar}$ o par) son los autovalores de \hat{n} y \hat{l} ,

respectivamente. Los elementos de matriz de \hat{W}^2 vienen dados en la ecuación (1.4.3). A partir de estos elementos de matriz, se ve fácilmente que la evolución temporal preserva la paridad $e^{i\pi n}$ de un determinado estado $|N; n, l\rangle$. Es decir, el operador paridad $\hat{\Pi} = e^{i\pi \hat{n}}$ conmuta con \hat{H} y ambos operadores pueden ser diagonalizados conjuntamente. El estado tipo gato lo construimos a partir del CS no simetrizado

$$|N; r\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} (b_c^\dagger)^N |0\rangle, \quad b_c^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+r^2}} (\sigma^\dagger + r\tau_x^\dagger), \quad (5.2.3)$$

con $r \geq 0$ un parámetro variacional libre, que se determina minimizando el funcional de la energía del estado fundamental “por partícula”. Este estado (5.2.3) se escribía de forma explícita en función de los vectores de la base (5.2.2) como

$$\begin{aligned} |N; r\rangle &= \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n c_{n,m}^{(N)}(r) |N; n, n-2m\rangle, \\ c_{n,m}^{(N)}(r) &= \sqrt{\binom{N}{n} \binom{n}{m}} \frac{(-r/\sqrt{2})^n (-1)^m}{(1+r^2)^{N/2}}. \end{aligned} \quad (5.2.4)$$

Aunque $|N; r_e(\xi)\rangle$, con $r_e(\xi)$ el radio de equilibrio, describe correctamente la densidad de energía del estado fundamental en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, mostraremos que éste no capta el comportamiento correcto del entrelazamiento rovibracional. Este es otro motivo por el cual introducimos los CSs adaptados a la simetría de paridad:

$$|N; r, \pm\rangle \equiv \frac{(1 \pm \hat{\Pi})|N; r\rangle}{\mathcal{N}_\pm(r)} = \frac{|N; r\rangle \pm |N; -r\rangle}{\mathcal{N}_\pm(r)}, \quad (5.2.5)$$

donde recordamos que $\mathcal{N}_\pm(r) = \sqrt{2}(1 \pm \langle N; -r|N; r\rangle)^{1/2}$ es una constante de normalización, con

$$\langle N; -r|N; r\rangle = ((1-r^2)/(1+r^2))^N. \quad (5.2.6)$$

A continuación discutiremos el caso del estado prueba del estado fundamental de simetría par. Expandiendo $|N; r, +\rangle$ en la base (5.2.2), como en (5.2.4) para CSs no simetrizados, obteníamos los nuevos coeficientes

$$c_{n,m}^{(N,+)}(r) = \frac{c_{n,m}^{(N)}(r) + c_{n,m}^{(N)}(-r)}{\mathcal{N}_+(r)}. \quad (5.2.7)$$

Nótese que ahora $c_{n,m}^{(N,+)}(r) = 0$ para n =impar. El parámetro variacional r es de nuevo calculado minimizando el funcional de la energía del estado fundamental “por partícula”, de esta forma obtenemos un nuevo “radio de equilibrio”, $r_e^{(N)}(\xi)$.

En la siguiente sección analizaremos el entrelazamiento rovibracional y otras medidas de deslocalización. Los resultados numéricos (exactos) se comparan con los resultados obtenidos a partir de dos aproximaciones variacionales, una de ellas considerando estados prueba en términos de CS simetrizados y otra con CSs ordinarios.

5.2.1. Entrelazamiento rovibracional y medidas de deslocalización

En esta sección calculamos medidas de entrelazamiento rovibracional como son: la ‘pureza’, la entropía lineal y de von Neumann, como una función del número vibrón N (relacionado con el número total de estados ligados de la molécula) y el parámetro de control ξ , revelando un repentino incremento del entrelazamiento desde la fase lineal a la fase plegada en el punto crítico ξ_c . El cálculo se realiza numéricamente y se complementa y compara con dos aproximaciones variacionales (simétrica por paridad y no simétrica). Finalmente, calculamos la razón de participación inversa (IPR), como una medida de deslocalización del paquete de onda del estado fundamental a través de la transición de fase, y vemos que la dispersión presente es captada por los nuevos CSs (gato par) adaptados a la simetría, revelando la importancia de la simetría de paridad.

Recordemos que las funciones de onda de la base (5.2.2) en representación de ‘posiciones’ $q_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_i^\dagger + a_i)$, con $(a_0, a_1, a_2) \equiv (\sigma, \tau_+, \tau_-)$ nuestros tres operadores del oscilador, se pueden expresar en función de los polinomios de Hermite $H_k(q)$,

$$\langle q | N; n, l \rangle = \frac{2^{-N/2} \pi^{-3/4} e^{-(q_0^2 + q_1^2 + q_2^2)/2}}{\sqrt{(N-n)! \left(\frac{n+l}{2}\right)! \left(\frac{n-l}{2}\right)!}} H_{N-n}(q_0) H_{\frac{n+l}{2}}(q_1) H_{\frac{n-l}{2}}(q_2). \quad (5.2.8)$$

Podemos obtener la función de onda del estado fundamental de nuestro sistema por diagonalización numérica del Hamiltoniano (5.2.1) en función de los vectores de la base (5.2.2)

$$|\psi_\xi^{(N)}\rangle = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n c_{n,m}^{(N)}(\xi) |N; n, l = n - 2m\rangle \quad (5.2.9)$$

donde $c_{n,m}^{(N)}(\xi)$ son los coeficientes y $\psi_\xi^{(N)}(q) = \langle q | N; n, l \rangle$ es la correspondiente función de onda en representación de posiciones $q = (q_0, q_1, q_2)$, escrita en función de los polinomios de Hermite (5.2.8).

Considerando el sistema bipartito dado por los grados de libertad vibracional (q_0) y rotacional en 2D $\vec{q} = (q_1, q_2)$, podemos calcular matriz densidad reducida (RDM) para los modos vibracionales integrando sobre los grados de libertad rotacionales

$$\rho_\xi^{(N)}(q_0, q'_0) = \int \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{q} \psi_\xi^{(N)}(q_0, \vec{q}) \bar{\psi}_\xi^{(N)}(q'_0, \vec{q}). \quad (5.2.10)$$

La ‘pureza’ de $\rho_\xi^{(N)}$ viene dada por

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\rho_\xi^{(N)} \right)^2 &= \int \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 dq'_0 \rho_\xi^{(N)}(q_0, q'_0) \rho_\xi^{(N)}(q'_0, q_0) \\ &= \sum_{n=0}^N \left(\sum_{m=0}^n (c_{n,m}^{(N)}(\xi))^2 \right)^2, \end{aligned} \quad (5.2.11)$$

donde hemos usado las propiedades de ortogonalidad de los vectores de la base (5.2.2) y los coeficientes de la expansión (5.2.9). En realidad, la RDM $\rho_\xi^{(N)}$ es una matriz diagonal $(N+1) \times (N+1)$

$$\left(\rho_\xi^{(N)} \right)_{n,n'} = \lambda_n^{(N)}(\xi) \delta_{n,n'} \quad (5.2.12)$$

con autovalores

$$\lambda_n^{(N)}(\xi) \equiv \sum_{m=0}^n (c_{n,m}^{(N)}(\xi))^2, \quad (5.2.13)$$

y el número cuántico vibracional n varía desde 0 a N .

Teniendo en cuenta los coeficientes (5.2.4) y (5.2.7), podemos calcular explícitamente los autovalores $\lambda_n^{(N)}(\xi)$ para el CS no simetrizado (estado de campo medio) y el CS simetrizado par (estado de tipo gato, “cat”), respectivamente

$$\lambda_n^{(N)}(\xi)_{\text{CS}} = \binom{N}{n} \frac{r_e(\xi)^{2n}}{(1 + r_e(\xi)^2)^N}, \quad (5.2.14)$$

$$\lambda_n^{(N)}(\xi)_{\text{cat}} = \binom{N}{n} \frac{(1 + (-1)^n) r_e^{(N)}(\xi)^{2n}}{(1 + r_e^{(N)}(\xi)^2)^N + (1 - r_e^{(N)}(\xi)^2)^N}.$$

La pureza se puede expresar en función de las funciones hipergeométricas como

$$\text{Tr} \left(\rho_\xi^{(N)} \right)_{\text{CS}}^2 = \frac{{}_2F_1(-N, -N; 1; r_e(\xi)^4)}{(1 + r_e(\xi)^2)^{2N}}, \quad (5.2.15)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left(\rho_\xi^{(N)} \right)_{\text{cat}}^2 &= 2 \left((1 + r_e^{(N)}(\xi)^2)^N + (1 - r_e^{(N)}(\xi)^2)^N \right)^{-2} \\ &\quad \times \left({}_2F_1(-N, -N; 1; r_e^{(N)}(\xi)^4) \right. \\ &\quad \left. + {}_2F_1(-N, -N; 1; -r_e^{(N)}(\xi)^4) \right). \end{aligned} \quad (5.2.16)$$

En lugar de $\text{Tr}(\rho_\xi^{(N)})^2$, usaremos la entropía lineal

$$L^{(N)}(\xi) \equiv 1 - \text{Tr} \left(\rho_\xi^{(N)} \right)^2, \quad (5.2.17)$$

como una medida de entrelazamiento. Ya que la dimensión de $\rho_\xi^{(N)}$ es $N + 1$, la entropía lineal $L^{(N)}(\xi)$ varía entre 0 (estado puro) y $N/(N + 1)$ (estado completamente mezclado). La Figura 5.1 compara la entropía lineal exacta (obtenida numéricamente) con la obtenida con los CSs no simetrizado (campo medio) y de simetría par (“cat”) (5.2.4) y (5.2.5), respectivamente.

Podemos observar que la entropía lineal para la configuración de campo medio da peores resultados en ambas fases. En la segunda fase (plegada), tenemos un máximo cuando $\xi = 1$ de

$$L_{\text{CS}}^{(N)}(1) = 1 - 4^{1-N} \binom{2N}{N}, \quad (5.2.18)$$

que puede ser calculado teniendo en cuenta que $r_e(1) = 1$. Se alcanza un mejor acuerdo (mayor para N más altos) para la configuración de estado gato par, con una entropía lineal en $\xi = 1$ de

$$L_{\text{cat}}^{(N)}(1) \simeq 1 - 2^{1-2N} \binom{2N}{N}, \quad (5.2.19)$$

donde hemos usado que $r_e^{(N)}(1) = 1, \forall N$. Aquí hemos hecho uso de la aproximación

$$\sum_{\nu=0}^{[N/2]} \binom{N}{2\nu}^2 \simeq \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N \binom{N}{n}^2 = \frac{1}{2} \binom{2N}{N}, \quad (5.2.20)$$

con $[N/2]$ = Valor entero($N/2$) por abajo, que es exacta incluso para valores relativamente pequeños de N . Entonces, tenemos que la pureza de la RDM para los estados pares de tipo gato es esencialmente la mitad de la pureza del CS no simetrizado cuando $\xi = 1$; una simple corrección con importantes consecuencias que hace (5.2.19) una buena estimación para la entropía lineal de entrelazamiento como una función de N en la fase rígidamente plegada [Iac2003]. Además, $L_{\text{cat}}^{(N)}(\xi) \rightarrow 1$ (entrelazamiento máximo) para la fase rígidamente plegada ($\xi = 1$) en el límite termodinámico $N = \infty$.

Con el fin de evaluar mejor el grado de pureza de nuestra RDM para los estados de tipo gato, particularmente para valores altos de N y moléculas rígidamente

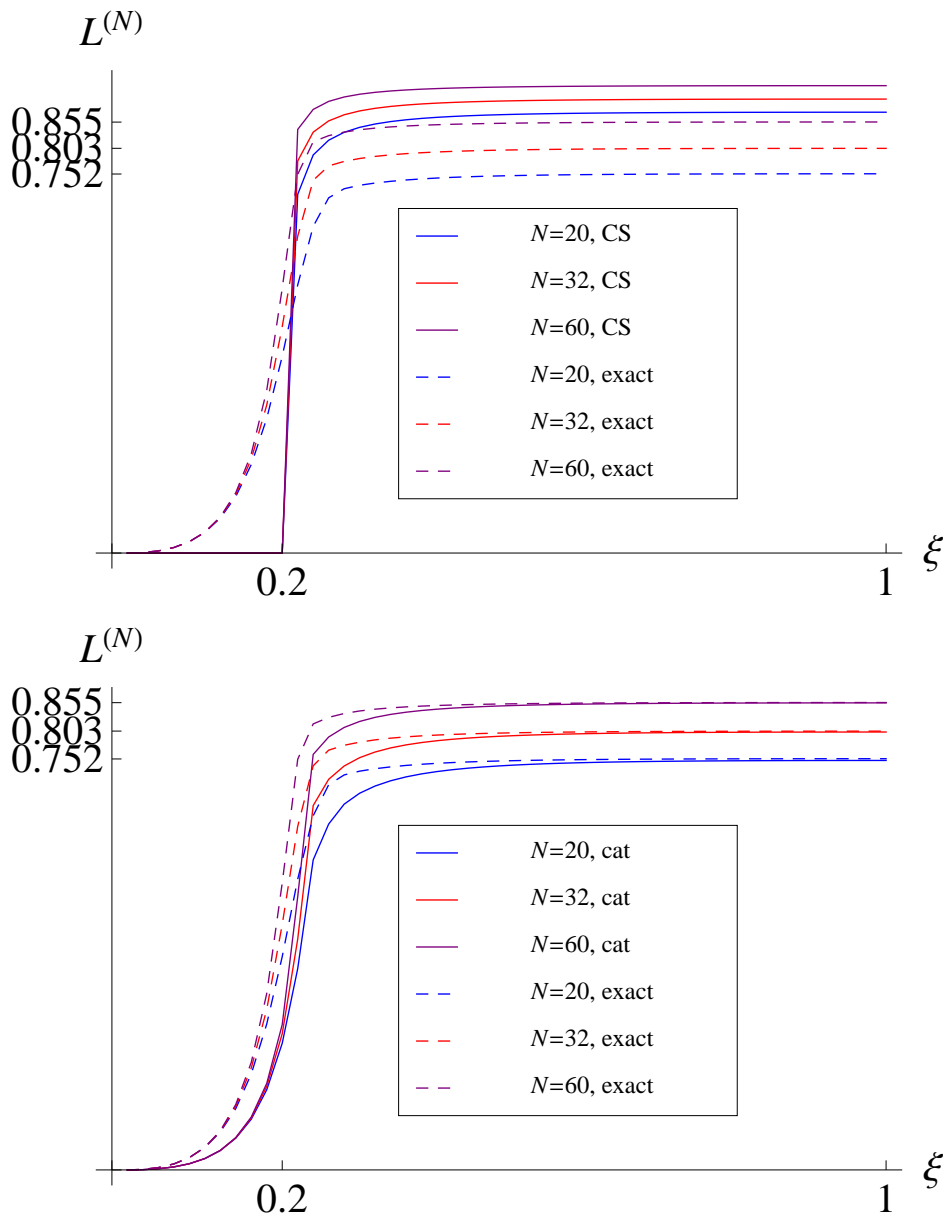


Figura 5.1: Comparación de la entropía lineal exacta $L^{(N)}$ y las aproximaciones variacionales del estado coherente de campo medio (arriba) y del estado gato par (abajo) en función de ξ para $N = 8, 20, 32$.

plegadas, $\xi = 1$, podemos utilizar la aproximación de Stirling

$$\text{Tr} \left(\rho_{\xi}^{(N)} \right)_{\text{cat}}^2 \simeq 2^{1-2N} \binom{2N}{N} \simeq \frac{2}{\sqrt{\pi N}}, \quad \text{for } N \gg 1, \quad (5.2.21)$$

que establece que los modos vibracional y rotacional del estado fundamental exacto (y en la aproximación variacional del estado de tipo gato) están enredados pero no al máximo en la fase plegada para N finito, ya que la pureza para un estado enredado al máximo es $\text{Tr} \left(\rho_{\xi}^{(N)} \right)_{\text{min.}}^2 = \frac{1}{N+1}$. En la región ‘flexible’ [Iac2003], $0 < \xi < \xi_c$, la entropía lineal parece converger a un valor distinto de cero en el límite termodinámico. Para moléculas lineales rígidas [Iac2003], $\xi = 0$, la entropía lineal de entrelazamiento rovibracional es cero.

Para completar, ofrecemos en la Figura 5.2 una comparativa de la entropía de von Neumann

$$\begin{aligned} S^{(N)}(\xi) &= -\text{Tr} \left(\rho_{\xi}^{(N)} \log_2(\rho_{\xi}^{(N)}) \right) \\ &= -\sum_{n=0}^N \lambda_n^{(N)}(\xi) \log_2(\lambda_n^{(N)}(\xi)). \end{aligned} \quad (5.2.22)$$

El comportamiento cualitativo de $S^{(N)}(\xi)$ es similar al de $L^{(N)}(\xi)$.

En realidad, de nuevo se puede ver que la entropía de von Neumann para la configuración de campo medio (no simétrico) no da resultados correctos en ambas fases. En particular, la entropía de von Neumann, para valores grandes de N y para moléculas rígidamente plegadas, $\xi = 1$, se comporta como

$$S_{\text{cat}}^{(N)}(1) \simeq \frac{1}{2} \log_2(N+1), \quad S_{\text{CS}}^{(N)}(1) \simeq 1 + \frac{1}{2} \log_2(N+1), \quad (5.2.23)$$

denotando un exceso de la entropía de von Neumann de 1 del CS respecto a la configuración del estado gato y la configuración exacta. En este punto uno podría pensar que la aproximación CS, aunque no es exacta para valores finitos de N , todavía captura la esencia del crecimiento de entrelazamiento. Por lo tanto, uno podría preguntarse si la paridad es realmente esencial para describir correctamente el estado fundamental de modelos vibrón en el límite termodinámico o no. Ya vimos en los Capítulos 2 y 3 la importancia de la paridad a la hora de describir correctamente la deslocalización del

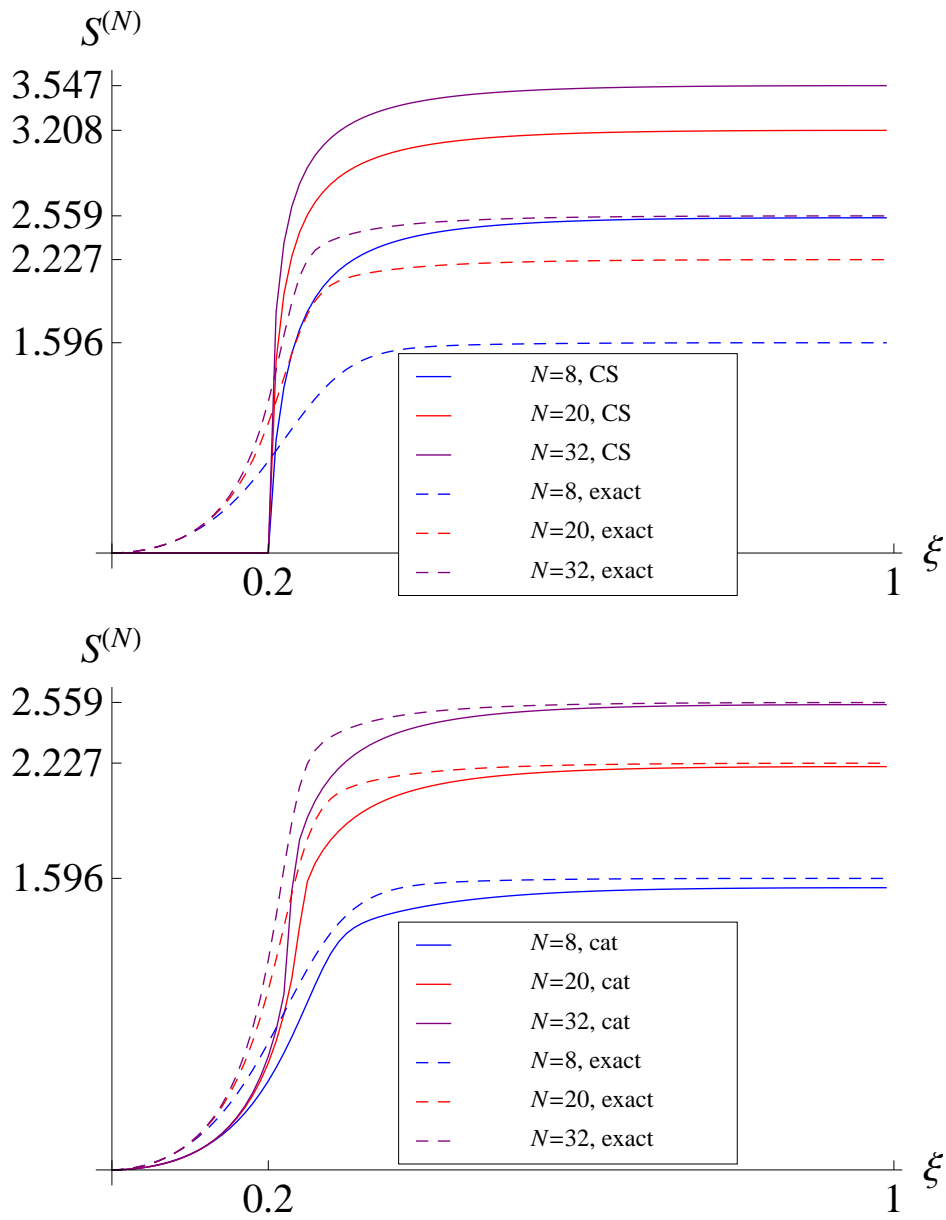


Figura 5.2: Comparación de la entropía exacta de von Neumann $S^{(N)}$ y las aproximaciones variacionales del estado coherente (arriba) y del estado gato de simetría par (abajo) como una función de ξ para $N = 8, 20, 32$.

paquete de ondas del estado fundamental en la aproximación variacional con medidas de entropía de Rényi y Wehrl. Otra posibilidad es la razón de participaci'ón inversa:

$$P^{(N)}(\xi) = \int \int \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 dq_1 dq_2 |\psi_{\xi}^{(N)}(q_0, q_1, q_2)|^4. \quad (5.2.24)$$

Podemos interpretar la IPR como una medida de la dispersión o la deslocalización de una función de onda ψ sobre una base particular (por ejemplo, las autofunciones de posición $|q\rangle$) de la misma forma que la entropía de von Neumann entropía es una medida de la dispersión de una matriz densidad ρ sobre su base diagonal. De la Figura 5.3 vemos que la función de onda exacta (numérica) del estado fundamental exhibe una brusca deslocalización a través de la transición de fase, una dispersión que también es caracterizada por los estados gato par (5.2.5) pero que pasa desapercibida por los estado de prueba del CS(5.2.3,5.2.4), para los cuales la IPR se mantiene constante con el parámetro de control ξ . Este tipo de comportamiento también es compartido por el estado fundamental del modelo de Dicke[Dic1954], donde el paquete de ondas en la fase normal se divide en dos subpaquetes de solapamiento casi nulo en la fase de superradiante (Véase Capítulo 2 y Referencias [Cas2011a, Cas2011b] y [Rom2012b, Cal2012c, Rom2012c]). Además, la superposición (5.2.6) tiende a cero por $\xi > \xi_c$ ($r > 0$) en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$, de modo que la función de onda del estado fundamental (5.2.5) es una superposición lineal de dos subpaquetes de solapamiento casi nulo en la fase plegada.

Para completar, proporcionamos la IPR

$$\tilde{P}^{(N)}(\xi) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n (c_{n,m}^{(N)}(\xi))^4, \quad (5.2.25)$$

sobre la base (5.2.2) para los estados prueba gato y CS en términos de funciones hipergeométricas

$$\tilde{P}_{\text{CS}}^{(N)}(\xi) = \frac{{}_3F_2(\frac{1}{2}, -N, -N; 1, 1; r_e(\xi)^4)}{(1 + r_e(\xi)^2)^{2N}}, \quad (5.2.26)$$

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{\text{cat}}^{(N)}(\xi) &= 2((1 + r_e^{(N)}(\xi)^2)^N + (1 - r_e^{(N)}(\xi)^2)^N)^{-2} \\ &\times \left({}_3F_2(\frac{1}{2}, -N, -N; 1, 1; r_e^{(N)}(\xi)^4) \right. \\ &\left. + {}_3F_2(\frac{1}{2}, -N, -N; 1, 1; -r_e^{(N)}(\xi)^4) \right). \end{aligned} \quad (5.2.27)$$

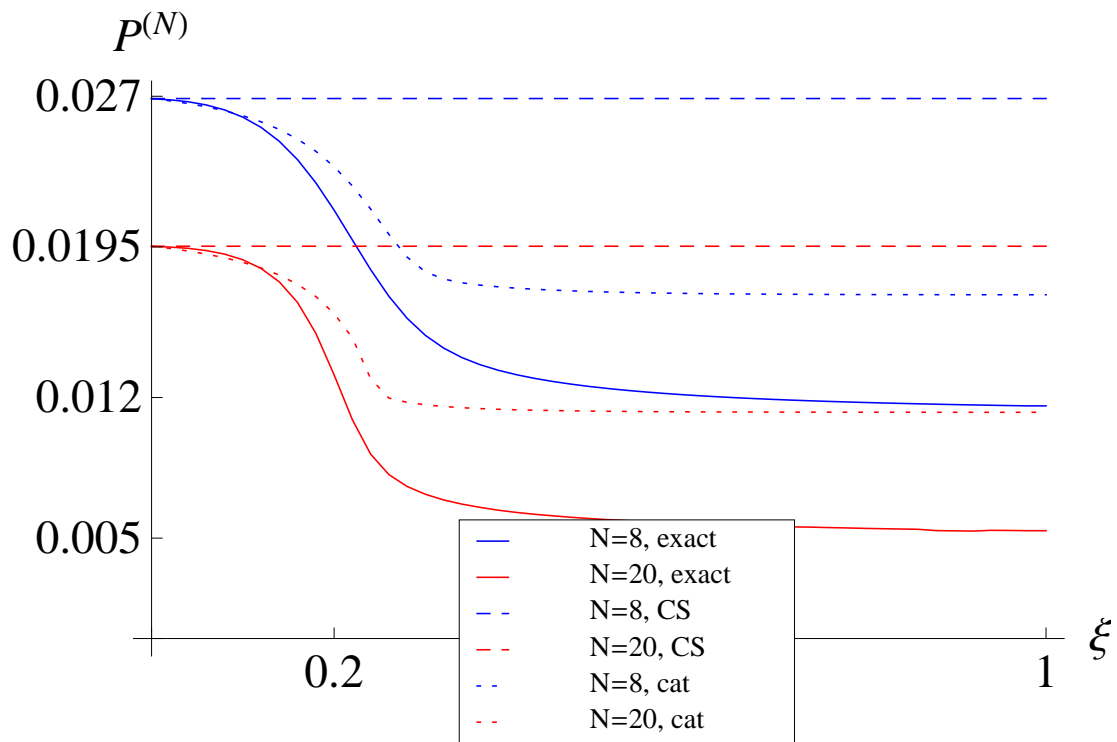


Figura 5.3: Comparación de la razón de participación inversa exacta $P^{(N)}$ con la aproximación variacional del estado gato par (línea punteada) y del estado coherente (línea constante discontinua) como una función de ξ para $N = 8$ y $N = 20$.

Capítulo 6

Conclusiones

Este trabajo constituye una contribución al estudio de las transiciones de fase cuánticas en modelos algebraicos, como son el modelo de Dicke y el modelo vibrón. Estos dos modelos presentan una transición de fase cuántica a temperatura cero, cuando se alcanza un valor crítico de un parámetro de control, lo que implica un cambio de configuración (y por tanto, de propiedades) del sistema. Nuestro objetivo ha sido caracterizar esta transición mediante relaciones de incertidumbre entrópicas (haciendo uso de las entropías de Rényi), la distribución de Husimi en el espacio de fases, y medidas de entrelazamiento cuántico. Exponemos a continuación a las conclusiones que hemos llegado en nuestro estudio:

- Hemos estudiado las entropías de Rényi como un indicador de la transición de fase cuántica en el modelo de Dicke y el modelo vibrón (Capítulo 2). Un cálculo numérico exacto del hamiltoniano, a través de un proceso de diagonalización, muestra que las entropías de Rényi experimentan un incremento repentino a través del punto crítico. Además hemos presentado un análisis variacional usando estados prueba en términos de estados coherentes adaptados y no adaptados a la simetría de paridad característica del hamiltoniano. La incorporación de estos nuevos estados adaptados a la simetría de paridad enriquece nuestro análisis y nos ha permitido llegar a unas conclusiones muy interesantes. Para el modelo de Dicke, la suma entrópica de Rényi puede ser considerada como una medida de las fluctuaciones del sistema. En este estudio, hemos demostrado que ésta permanece constante incluso en la fase superradiante, en cambio, el producto de varianzas

diverge en esta fase. Por tanto, la relación de incertidumbre para la suma entrópica de Rényi proporciona una mejor descripción de la QPT. En particular, se ha demostrado que existe un cambio brusco de la entropía de Rényi [Rom2011]. En el caso del modelo vibrón $U(3)$ las entropías de Rényi permanecen constantes con el parámetro de control ξ con la configuración no simetrizada o de campo medio, para la configuración simetrizada o configuración “gato”, las entropías de Rényi dan cuenta de la QPT en el punto crítico ξ_c . También hemos calculado las varianzas con las aproximaciones variacionales tanto para la configuración no simétrica (o de campo medio) y simétrica (“gato”). Las varianzas de los estados gato coinciden con los resultados numéricos exactos y ambos tienden a la varianza del campo medio en el límite termodinámico, cuando $N \rightarrow \infty$. Las varianzas son menos sensibles a la simetría de paridad que las entropías de Rényi y varían con N (por tanto, divergiendo en el límite termodinámico), aunque también proporcionan una buena descripción de la QPT. Las entropías de Rényi son más sensibles en este modelo particular, lo cual no significa que esto pueda ser extrapolado a otros sistemas físicos, así tenemos que hacer hincapié, por supuesto, que las varianzas siguen siendo un buen indicador de la presencia de una transición de fase cuántica.

- En el capítulo 3 hemos estudiado la distribución de Husimi en el modelo de Dicke. Encontramos que las razones de participación inversa y las entropías de Rényi-Wehrl de la distribución de Husimi proporcionan un claro indicador de la transición de fase cuántica en este modelo. Estas medidas de incertidumbre detectan una deslocalización de la distribución de Husimi a través del punto crítico λ_c y podemos emplearlas para cuantificar la dispersión de los estados en el espacio de las fases. La ventaja de trabajar en el espacio de las fases es que podemos analizar las contribuciones en el espacio de posiciones o de momentos de forma conjunta o por separado. Las funciones marginales en espacio de posiciones son más adecuadas para caracterizar la QPT que dichas funciones en espacio de momentos, donde estas cantidades son casi constantes. Sin embargo, los ceros de la distribución de Husimi muestran una estructura más rica en el espacio de momentos que en el de posiciones.

Los cálculos se han realizado numéricamente y mediante una aproximación variacional. En los cálculos numéricos se han empleado expresiones explícitas que se han obtenido mediante una aproximación de la representación de Holstein-Primakoff de los operadores de momento angular. El enfoque variacional, en términos de los estados coherentes simetrizados, nos ha permitido proporcionar expresiones analíticas explícitas para las razones de participación inversa y las entropías de Rényi-Wehrl que coinciden extraordinariamente con los resultados numéricos, especialmente en el límite termodinámico.

En la fase superradiante, la entropía de Wehrl muestra un exceso de entropía (o “subentropía” [Joz1994]) de $\ln(2)$. Este hecho implica que la distribución Husimi se divide en dos subpaquetes idénticos con una superposición despreciable al pasar de la fase normal a fase superradiante. En general, para s subpaquetes idénticos con solapamiento insignificante, se espera un exceso de entropía de $\ln(s)$. La subentropía de Wehrl (o exceso de la entropía de Wehrl) también se ha utilizado en [Min2004] como una medida del grado de mezcla para estados monopartitos o del grado de entrelazamiento para estados puros de sistemas bipartitos. Se sabe que el modelo de Dicke también presenta entrelazamiento entre los átomos y el campo [Lam2004, Lam2005], por tanto, sería interesante una caracterización de la misma en términos de exceso de entropía. También hemos caracterizado la QPT del modelo de Dicke explorando la distribución de los ceros de la densidad de Husimi variacional dentro de la aproximación analítica. Hemos encontrado que los ceros caracterizan la QPT en este modelo. Por otra parte, los ceros llenan densamente el plano de momentos en la fase superradiante para la aproximación variacional del estado fundamental en el límite termodinámico. Por el momento, hemos detectado un crecimiento repentino de ceros por encima del punto crítico λ_c en la aproximación de Holstein-Primakoff.

Además, nos gustaría destacar algunos puntos relativos al comportamiento caótico en el modelo de Dicke. En la referencia [Ema2003a] se demostró que el hamiltoniano de Dicke es exactamente integrable en el límite termodinámico. Sin embargo, no es el caso para j finito, permaneciendo la posibilidad de caos cuántico. La medida del caos cuántico utilizado en [Ema2003a] para investigar esta

posibilidad era el carácter del espectro energético. Como ya se ha dicho, la diferente estructura de ceros de la distribución de Husimi que presentan los sistemas regulares clásicos respecto a los sistemas caóticos se puede utilizar como un indicador del caos clásico (véase, por ej. [Kor1997, Dan1974, Leb1990]). Por ejemplo, en [Leb1990] se muestra que, en regiones integrables, los ceros se encuentran en curvas de una dimensión, mientras que en regiones caóticas la distribución es bidimensional y los ceros llenan el espacio de las fases. En nuestro estudio nos hemos limitado al análisis del estado fundamental en el espacio de fases. Uno podría pensar que el crecimiento repentino de ceros por encima del punto crítico λ_c (en la aproximación de Holstein-Primakoff) es un signo de caos. Sin embargo, creemos que la presencia de caos en el modelo de Dicke a nivel cuántico debe analizarse a partir de la distribución de Husimi de estados excitados.

- Además hemos estudiado la distribución de Husimi en el modelo de Dicke sin hacer uso de la aproximación de Holstein-Primakoff. Hemos encontrado que la entropía de Wehrl de la distribución de Husimi proporciona un claro indicador de la transición de fase cuántica en el modelo de Dicke para un j finito. De nuevo hemos visto que esta medida de incertidumbre detecta una deslocalización de la distribución de Husimi a través del punto crítico λ_c y hemos empleado esto, junto con representaciones gráficas tridimensionales y de líneas de contorno de la distribución de Husimi para cuantificar y visualizar la dispersión del estado fundamental. Los cálculos se han realizado numéricamente y mediante una aproximación variacional. En el análisis variacional hemos considerado estados prueba en términos de estados coherentes adaptados a la simetría de paridad lo que enriquece nuestro estudio al permitirnos obtener expresiones analíticas para la distribución de Husimi y las entropías de Wehrl. Así, hemos podido comprobar que los resultados variacionales coinciden notablemente con los resultados numéricos exactos, especialmente en el límite termodinámico y alejados de $\lambda = \lambda_c$. Un cálculo más exacto puede realizarse quizás usando los puntos de equilibrio “verdaderos” de la referencia [Cas2012], aunque pensamos que nuestro enfoque variacional todavía caracteriza el comportamiento cualitativo cerca de λ_c y los valores cuantitativos exactos lejos de λ_c (véase de nuevo la Figura 3.7).

En la fase superradiante, la entropía de Wehrl experimenta un exceso de entropía de $\ln(2)$. Este hecho implica que la distribución se divide en dos subpaquetes idénticos con apenas solapamiento entre ellos cuando se pasa de la fase normal a la fase superradiante. En general, para s subpaquetes idénticos con solapamiento despreciable, uno espera un exceso de entropía de $\ln(s)$.

Los signos indicativos de la QPT en el modelo de Dicke también se han analizado explorando la distribución de ceros de la densidad de Husimi dentro de la aproximación variacional analítica y sin la aproximación de Holstein-Primakoff. En el Capítulo 3 hemos corroborado que los ceros de la distribución de Husimi evidencia la QPT sin la necesidad de asumir la aproximación de Holstein-Primakoff, encontrando de nuevo que no hay ceros en la fase normal y un gran número de ceros cuando j y λ aumentan en la fase superradiante. Este interesante resultado pone de manifiesto que la aparición de ceros de la distribución de Husimi puede ser un indicador de las QPTs [Rom2012c, Cal2012a].

- En el Capítulo 4 hemos estudiado la distribución de Husimi en el modelo vibrón $U(3)$. Hemos encontrado que los momentos y las entropías de Wehrl de la distribución Husimi nos indican la transición de fase cuántica del modelo. Detectan una deslocalización de la distribución de Husimi a través del punto crítico ξ_c y estas cantidades nos permiten cuantificar la dispersión del estado fundamental en el espacio de las fases.

Los cálculos se han realizado numéricamente y por medio de una aproximación variacional. La distribución de Husimi presenta una forma diferente en cada fase. También se demuestra que tanto la razón de participación inversa como la entropía de Wehrl, son buenos indicadores de la QPT. El enfoque variacional, en términos de los estados coherentes adaptados a la simetría de paridad (estados de tipo gato de Schrödinger), complementa y enriquece nuestro análisis proporcionando expresiones analíticas explícitas tanto de los momentos como de las entropías de Wehrl que coinciden notablemente con los resultados numéricos, especialmente en las fases lineales y plegada rígidas (fuera de la región flexible $\xi \approx \xi_c$) y en el límite termodinámico. En la fase lineal rígida, la entropía de Wehrl alcanza su valor mínimo $\frac{N(3+2N)}{(N+1)(N+2)}$, de acuerdo conjetura de Wehrl-Lieb genera-

lizada, lo que indica que el estado fundamental para $\xi = 0$ es un CS proyectivo de $SU(3)$. En la fase plegada, la entropía Wehrl experimenta un exceso de entropía (o subentropía [Joz1994]) de $\ln(2)$. Este hecho implica que la distribución de Husimi se divide en dos subpaquetes idénticos sin apenas superposición, cuando se pasa de la fase lineal a la fase plegada. En general, para s subpaquetes idénticos sin apenas solapamiento, esperamos un exceso de entropía de $\ln(s)$.

También se ha explorado los signos indicativos de la QPT en el modelo vibrón mediante el estudio de la distribución de los ceros de la densidad de Husimi en su aproximación analítica variacional. Hemos encontrado que hay un incremento repentino de ceros por encima del punto crítico ξ_c , especialmente en el límite termodinámico. Los ceros de la distribución de Husimi exhiben una estructura más rica en el espacio de momentos que en el de posiciones. Este comportamiento también es compartido por el modelo de Dicke (Capítulo 3).

Nuestro estudio se ha limitado al análisis del espacio de fases del estado fundamental en el modelo vibrón. Este modelo es un sistema no caótico, de modo que podemos afirmar que el aumento repentino de los ceros por encima del punto crítico ξ_c proviene de una QPT y no de una situación caótica.

- Finalmente hemos obtenido en el Capítulo 5 que el entrelazamiento y la deslocalización parecen ser características comunes de las transiciones de fase cuánticas, y resultan ser claros indicadores en el punto crítico de la QPT “de forma” del modelo vibrón. Hemos obtenido resultados numéricos (exactos) del entrelazamiento y deslocalización del estado fundamental del modelo vibrón en 2D para moléculas de tamaño N finito. Estos resultados se han comparado con los resultados derivados de dos aproximaciones variacionales (usando estados simetrizados por paridad y no simetrizados). La configuración de paridad par (“gato”) nos proporcionan una buena descripción variacional de las medidas de entrelazamiento (entropías lineales y de von Neumann), reproduciendo cuantitativamente los valores exactos para la entropía de entrelazamiento en las fases completamente rígidas (lineal y plegada) y cualitativamente captando el comportamiento de la entropía de entrelazamiento en la region intermedia “flexible”. Los resultados revelan la aparición de entrelazamiento rovibracional en la fase plegada del modelo

vibrón, donde los modos rotacionales y vibracionales están entrelazados, pero no totalmente. A diferencia de otros estados prueba de la literatura, estos estados gato de Schrödinger captan una deslocalización de la función de onda del estado fundamental mediante la razón de participación inversa $P^{(N)}(\xi)$ a través de la transición de fase, lo que demuestra la importancia de la simetría de paridad para una adecuada descripción del estado fundamental en los modelos vibrón.

Además sabemos que el entrelazamiento es un recurso fundamental para el procesamiento de la información, que constituye el núcleo de los protocolos de comunicación cuántica y de los algoritmos de computación cuántica. Aunque el trabajo que aquí hemos presentado es teórico, no descartamos una posible realización experimental del entrelazamiento rovibracional obtenido para el procesamiento de información cuántica. Sabemos que la dispersión y la emisión y absorción de fonones-rotones, se ha estudiado ampliamente en el helio superfluido y creemos que vale la pena explorar esta nueva posibilidad en las moléculas.

Bibliografía

- [Ali2000] S.T. Ali, J-P.Antoine, J.P. Gazeau, *Coherent States, Wavelets and Their Generalizations*, Springer, (2000).
- [And1993] A.V.Andreev, V. J. Emelâyanov, y Yu. A. Ilâinskii, *Cooperative Effects in Optics*, IOP Publishing, Bristol, (1993).
- [Apt1995] A.I. Aptekarev, V. S. Buyarov y J.S. Dehesa, Russian Acad. Sci. Sb. Math. **82**, 373 (1995).
- [Apt1996] A.I. Aptekarev, V. S. Buyarov, W. Van Assche y J. S. Dehesa, Doklady Math. **53**, 47 (1996).
- [Apt2010] A.I. Aptekarev, J. S. Dehesa, A. Martinez-Finkelstein, J. Comp. Appl. Math. **233**, 1335 (2010).
- [Arb2003] D.G. Arbo, C. O. Reinhold, J. Burgdörfer, A. K. Pattanayak, C.L. Stokely, W. Zhao, J.C. Lancaster y F.B. Dunning, Phys. Rev. A **67**, 63401 (2003).
- [Arr1972] F.T. Arrechi, E. Courtens, R. Gilmore, y H. Thomas, Phys. Rev. A **6**, 2211 (1972).
- [Aul2004] C. Aulbach, A. Wobst, G.-L. Ingold, P. Hanggi y I. Varga, New J. of Physics **6**, 70 (2004).
- [Bas2011] M.A. Bastarrachea-Magnani, J.G. Hirsch *Numerical solutions of the Dicke Hamiltonian*, arxiv:1108.0703 (2011).
- [Bau2010] K. Baumann, C. Guerlin, F. Brennecke y T. Esslinger, Nature **464**, 1301 (2010).

- [Bau2011] K. Baumann, R. Mottl, F. Brennecke, T. Esslinger, Phys. Rev. Lett. **107**, 140402 (2011).
- [Bec1975] W. Beckner, Ann. Math. **102**, 159, (1975).
- [Ben1996a] M.G. Benedict et al., *Super-Radiance*, IOP Publishing, Bristol, (1996).
- [Ben1996b] C.H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, y W. K. Wootters, Phys. Rev. A **54**, 3824 (1996).
- [Bia1975] I. Bialynicki-Birula y J. Mycielski, Commun. Math. Phys. **44**, 129 (1975).
- [Bia1979] I. Bialynicki-Birula y K. Rzazewski, Phys. Rev. A **19**, 301 (1979).
- [Bia2006] I. Bialynicki-Birula, Phys. Rev. A **74**, 52101 (2006).
- [Bir1984] I. Bialynicki-Birula, Phys. Lett. A **103**, 253 (1984).
- [Bis1986] R.F. Bishop y A. Vourdas, J. Phys. A: Math. Gen. **19**, 2525 (1986).
- [Bis1994] R.F. Bishop, A. Vourdas, Phys. Rev. A **50**, 4488 (1994).
- [Bra2005] T. Brandes, Phys. Rep. **408**, 315 (2005).
- [Cal2012a] M. Calixto, R. del Real, E. Romera, Phys. Rev. A **86**, 032508 (2012).
- [Cal2012b] M. Calixto, E. Romera y R. del Real, J. Phys. A **45**, 365301 (2012).
- [Cal2012c] M. Calixto, Á. Nagy, I. Paraleda y E. Romera, Phys. Rev. A **85**, 53813 (2012).
- [Cap2005] M.A. Caprio, J. Phys. A **38**, 6385 (2005).
- [Car1973] H.J. Carmichael, C. W. Gardiner, y D. F. Walls, Phys. Lett. A **46**, 47 (1973).
- [Cas2011a] O. Castaños, E. Nahmad-Achar, R. López-Peña y J.G. Hirsch, Phys. Rev. A **83**, 51601 (2011).
- [Cas2011b] O. Castaños, E. Nahmad-Achar, R. López-Peña y J.G. Hirsch, Phys. Rev. A, **84** 13819 (2011).

- [Cej2007] P. Cejnar y F. Iachello, *J. Phys. A* **40**, 581 (2007).
- [Cej2009] P. Cejnar, J. Jolie, *Progress in Part. and Nuclear Phys.* **62**, 210 (2009).
- [Cej2010] P. Cejnar, J. Jolie, R. F. Casten, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2155 (2010).
- [Chi1998] M.S. Child, *J. Phys. A* **31**, 657 (1998).
- [Cor1974] G. Cromer Duncan, *Phys. Rev. A* **9**, 418 (1974).
- [Dan1974] P.A. Dando, y T. S. Monteiro, *J. Phys. B* **27**, 2681 (1994).
- [Deh1994] J.S. Dehesa, W. Van Assche y R. J. Yáñez, *Phys. Rev. A* **50**, 3065 (1994).
- [Deh1997] J.S. Dehesa, W. Van Assche y R. J. Yáñez, *J. Appl. Anal.* **4**, 91 (1997).
- [Dem1997] A. Dembo, T. M. Cover y J. A. Thomas, *IEEE Trans. Inf. Theory* **37**, 1501 (1991).
- [Dic1954] R.H. Dicke, *Phys. Rev.* **93**, 99 (1954).
- [Dim2007] F. Dimer, B. Estienne, A. S. Parkins, y H. J. Carmichael, *Phys. Rev. A* **75**, 13804 (2007).
- [Dus2005] S. Dusuel, J. Vidal, J. M. Arias, J. Dukelsky y J. E. García-Ramos, *Phys. Rev. C* **72**, 64332 (2005).
- [Eas2001] P.R. Eastham y P. B. Littlewood, *Phys. Rev. B* **64**, 235101 (2001).
- [Edw1972] J.T. Edwards y D. J. Thouless, *J. Phys. C: Solid State Phys* **5**, 8 (1972).
- [Ema2003a] C. Emary y T. Brandes, *Phys. Rev. E* **67**, 66203 (2003).
- [Ema2003b] C. Emary y T. Brandes, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 44101 (2003).
- [Fen1981] D.H. Feng, R. Gilmore, y S. R. Deans, *Phys. Rev. C* **23**, 1254 (1981).
- [Guh2004] O. Gühne y M. Lewenstein, *Phys. Rev. A* **70**, 22316 (2004).
- [Gad1984] S.R. Gadre, *Phys. Rev. A* **30**, 620 (1984).

- [Gad1985] S.R. Gadre, S. B. Sears, S. J. Chakrovarty y R. D. Bendale Phys. Rev. A **32**, 2602 (1985).
- [Gar2011] B.M. Garraway, Phil. Trans. R. Soc. A **369**, 1137 (2011).
- [Ger2005] C.C Gerry y P. L. Knight, *Introductory Quantum Optics*, Cambridge University Press, (2005).
- [Gil1978] R. Gilmore y D. Feng, Nucl. Phys. A **301**, 189 (1978).
- [Gil1979] R. Gilmore, J. Math. Phys. **20**, 891 (1979).
- [Gir2009] S.M. Girvin, M. H. Devoret, R.J. Schoelkopf, Phys. Scr. 2009 14012 doi:10.1088/0031-8949/2009/T137/014012
- [Gla1963] R. Glauber, Phys. Rev. **131**, 2766 (1963).
- [Hal1993] J. J. Halliwell, Phys. Rev. D **48**, 2739 (1993).
- [Hep1973] K. Hepp y E. H. Lieb, Phys. Rev. A **8**, 2517 (1973).
- [Cas2012] J.G. Hirsch, O. Castaños, E. Nahmad-Achar y R. López-Peña, *Phase transitions with finite atom number in the Dicke Model*, arXiv:1208.2679, Conference Proceedings of CEWQO-2012. To be published as a Topical Issue of the journal Physica Scripta.
- [Hir1957] I.I. Hirschmann, Am. J. Math. **79**, 152 (1957).
- [Hol1940] T. Holstein y H. Primakoff, Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).
- [Hor2012] I. Hornyák y Á. Nagy, Int. J. Quantum Chem. **112**, 1285 (2012).
- [Iac1981] F. Iachello, J. Chem. Phys. **78**, 581 (1981).
- [Iac1987] F. Iachello y A. Arima, *The Interacting Boson Model*, Cambridge University Press, Cambridge, (1987).
- [Iac1993] F. Iachello, Rev. Mod. Phys. **65**, 569 (1993).

- [Iac1994] F. Iachello, *Contemporary Mathematics* (American Mathematical Society, Providence, RI, 1994), Vol. 160, pp. 151â171.
- [Iac1995] F. Iachello, R.D. Levine, *Algebraic Theory of Molecules*, Oxford University Press, Oxford, (1995)
- [Iac1996] F. Iachello, S. Oss, *J. Chem. Phys.* **104**, 6956 (1996).
- [Iac2003] F. Iachello, F. Pérez-Bernal, P.H. Vaccaro, *Chem. Phys. Lett.* **375**, 309 (2003).
- [Iac2006] F. Iachello, *Lie Algebras and Applications*, Lecture Notes in Physics Vol. **708**, Springer, Berlin, (2006).
- [Hay1963] E.T. Jaynes y F. W. Cummings. *Proc. IEEE* **51**, 89 (1963).
- [Joz1994] R. Jozsa, D. Robb y W.K. Wootters, *Phys. Rev. A* **49**, 668 (1994).
- [Kel2004] M. Keller et al. *Nature* **431**, 1075-1078 (doi:10.1038/nature02961)
- [Kla1985] J.R. Klauder, y Bo-Sture Skagerstam, *Coherent States: Applications in Physics and Mathematical Physics*, World Scientific, Singapore, (1985).
- [Kor1997] H.J. Korsch, C. Müller y H. Wiescher, *J. Phys. A* **30**, L677 (1997).
- [Kuy1998] S. Kuyucak y M. K. Roberts, *Phys. Rev A* **57**, 3381 (1998).
- [Lev2005] P. Lévy, S. Nagy y J. Pipek, *Phys. Rev. A* **72**, 22302 (2005).
- [Lam2004] N. Lambert, C. Emary, y T. Brandes, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 73602 (2004).
- [Lam2005] N. Lambert, C. Emary, y T. Brandes, *Phys. Rev.A* **71**, 53804 (2005).
- [Lar2011] D. Larese y F. Iachello, *J. Mol. Struct.* **1006**, 611 (2011)
- [Leb1990] P. Leboeuf y A. Voros, *J. Phys. A* **23**, 1765 (1990).
- [Lev1988a] A. Leviatan, M.W. Kirson, *Ann. Phys. NY* **188**, 142 (1988)
- [Lev1988b] A. Leviatan, *J. Chem. Phys.* **91**, 1706 (1989)

- [Lie1978] E.H. Lieb, *Commun. Math. Phys.* **62**, 35 (1978)
- [Maa1988] H. Maassen y J. B. M. Uffink, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1103 (1988).
- [Maj2004] E. Majerníková, V. Majerník y S. Shpyrko, *Eur. Phys. J. B* **38**, 25 (2004).
- [Min2004] F. Mintert y K. Zyczkowski, *Phys. Rev. A* **69**, 22317 (2004).
- [Nag2009a] Á. Nagy y E. Romera, *Phys. Lett. A* **373** 844 (2009).
- [Nag2009b] Á. Nagy y E. Romera, *Int. J. Quantum Chem.* **109** 2490 (2009).
- [Nag2012] Á. Nagy y E. Romera, *Physica A* **391**, 3650 (2012).
- [Nat2010] P. Nataf y C. Ciuti, *Nature Commun.* **1**, 1 (2010).
- [Our2006] A. Ourjoumtsev, R. Tualle-Brouri, J. Laurat, P. Grangier, *Science* **312**, 83 (2006)
- [Per1986] A. Perelomov, *Generalized Coherent States and Their Applications*, Springer-Verlag, (1986).
- [Per2008] F. Pérez-Bernal, F. Iachello, *Phys. Rev. A* **77**, 32115 (2008).
- [Per2010] C. Pérez-Campos, J.R. González-Alonso, O. Castaños y R. López-Peña, *Ann. Phys.* **325**, 325-344 (2010).
- [Per2011] P. Pérez-Fernández, J.M. Arias, J.E. García-Ramos, F. Pérez-Bernal, *Phys. Rev. A* **83**, 62125 (2011).
- [Ren1961] A. Rényi, *Proceedings of the 4th Berkeley Symposium on Mathematical Statistics y Probability*, Volume 01:00 Contributions to the Theory of Statistics -1961 547
- [Rad1971] J.M. Radcliffe, *J. Phys. A* **4**, 313 (1971).
- [Rai1989] M.G. Raizen y col. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 240-243 (doi:10.1103/PhysRevLett.63.240)
- [Ren2005] R. Renner, N. Gisin y B. Kraus, *Phys. Rev. A* **72** 12332 (2005).

- [Res2005] J. Reslen, L. Quiroga y N.F. Johnson, *Europhys. Lett.* **69**, 8 (2005).
- [Res1975] E. Ressayre y A. Tallet, *Phys. Rev. A* **11**, 981 (1975).
- [Rom2007] E. Romera, y F. de los Santos *Phys. Rev. Lett.* **99**, 263601 (2007).
- [Rom2008a] E. Romera y Á. Nagy, *Phys. Lett. A* **372**, 6823 (2008).
- [Rom2008b] E. Romera y Á. Nagy, *Phys. Lett. A* **372** 4918 (2008).
- [Rom2008c] E. Romera y F. de los Santos, *Phys. Rev. A* **78**, 13837 (2008).
- [Rom2011] E. Romera y Á. Nagy, *Phys. Lett. A* **375** 3066 (2011).
- [Rom2012a] E. Romera, K. Sen y Á. Nagy, *J. Stat. Mech.* P09016 (2012).
doi:10.1088/1742-5468/2011/09/P09016
- [Rom2012b] E. Romera, M. Calixto y Á. Nagy, *Europhys. Lett.* **97**, 20011 (2012).
- [Rom2012c] E. Romera, R. del Real y M. Calixto, *Phys. Rev. A* **85**, 53831, (2012).
- [Rom2012d] E. Romera, R. del Real, M. Calixto, S. Nagy y Á. Nagy, *J. Math. Chem.*
doi: 10.1007/s10910-012-0106-7, (2012).
- [Rza1975] K. Rzazewski, K. Wodkiewicz y W. Zakowicz, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 432 (1975).
- [Rza1991] K. Rzazewski y K. Wodkiewicz, *Phys. Rev. A* **43**, 593 (1991).
- [Rza2006] K. Rzazewski y K. Wodkiewicz, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 89301 (2006).
- [San2010] P. Sánchez-Moreno, J. S. Dehesa, D. Manzano y R. J. Yáñez, *J. Comp. Appl. Math.* **233**, 2136 (2010).
- [San1998] J. Sánchez-Ruiz, *Phys. Lett. A* **244**, 189 (1998)
- [Sac2000] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press, (2000).
- [Sai1999] H. Saiko y M. Ueda, *Phys. Rev. A* **59**, 3959 (1999).

- [Sch2009a] T. Schürmann y I. Hoffmann Found Phys **39**, 958 (2009).
- [Sch2009b] R.J. Schoelkopf, S.M. Girvin, Nature **451**, 664-669 doi:10.1038/451664a
(doi:10.1038/451664a)
- [Sch1993] B. Schumacher, Phys. Rev. A **51**, 2738 (1993).
- [Sco2004] A.J. Scott, Phys. Rev. A **69**, 52330 (2004).
- [Sha1948] C.E. Shannon, *A mathematical theory of communication*, Bell. Sys. Tech. J. **27** -1948 379 ibid. -1948 623
- [Tav1968] M. Tavis y F. W. Cummings. Phys. Rev. **170**, 379 (1968).
- [Tho1992] R.J.Thompson et. al. Phys. Rev. Lett. **68**, 1132-1135
(doi:10.1103/PhysRevLett.68.1132)
- [Van1995] W. Van Assche, R. J. Yáñez y J. S. Dehesa, J. Math. Phys. **36**, 4106 (1995).
- [Vid2006] J. Vidal y S. Dusuel, Europhys. Lett. **74**, 817 (2006) .
- [Vid2007] J. Vidal, S. Dusuel y T. Barthel, J. Stat. Mech. P01015 (2007).
- [Vie2011] O. Viehmann, J. von Delft, y F. Marquardt, Phys. Rev.Lett. **107**, 113602
(2011).
- [Vou2006] A. Vourdas, J. Phys. A: Math. Gen. **39** R65-R141 (2006)
- [Wal2004] A. Wallraff et al. Nature **431** 162 167 doi:10.1038/nature02851
(doi:10.1038/nature02851)
- [Wal1981] D.F. Walls y P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **47**, 709 (1981).
- [Wal1995] D. Walls y G.J. Milburn, *Quantum Optics*, Springer, (1995).
- [Wan1973] Y.K. Wang y F. T. Hioe, Phys. Rev. A **7**, 831, (1973).
- [Wan2002] X. Wang y K. Molmner, Eur. Phys. J. D **18**, 385-391 (2002).
- [Weh2002] A. Wehrl, Rep. Math. Phys. **16**, 353 (1979)

- [Wei1999] D. Weinmann, S. Kohler, G-L. Ingold y P. Hänggi, *Ann. Phys. (Lpz)* 8 SI277 (1999).