

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

Máster en Física Teórica



TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

Dinámica y termodinámica en sistemas cuánticos colectivos

Dynamics and thermodynamics in collective quantum systems

Daniel Michel Pino González

Director

Armando Relaño Pérez

Curso académico 2021–22

Dinámica y termodinámica en sistemas cuánticos colectivos

Presentamos las propiedades más relevantes de las transiciones de fase cuánticas de estados excitados en una versión del modelo de Dicke, basada en la interacción de un campo electromagnético con un conjunto de sistemas atómicos de tres niveles. En este sentido, ponemos a prueba algunos de los indicadores estadísticos más comunes para la identificación de este tipo de transiciones. Sin embargo, el elevado número de grados de libertad semiclásicos de este modelo añade gran complejidad a su estudio, haciendo de estos estadísticos menos relevantes y dificultando cualquier análisis cuantitativo a través de ellos. Por ello, nos centramos en una cantidad dinámica conjeturada recientemente y comprobada en sistemas más simples, cuyos precursores de tamaño finito nos permiten distinguir y analizar de manera precisa la energía crítica de la transición.

I. INTRODUCCIÓN

Las transiciones de fase cuánticas de estados excitados (ESQPT) son un fenómeno crítico que se ha observado recientemente en ciertos modelos de muchos cuerpos, y ha comenzado a ser el foco de una intensa investigación durante los últimos años [1]. Esta nueva clase de transiciones supone una interesante generalización de las transiciones de fase cuánticas estándares a todo el espectro de excitación, ya que éstas se restringen a la evolución singular del estado fundamental de los sistemas que las presentan.

Asimismo, son responsables de una gran variedad de consecuencias dinámicas, como regímenes de alta decoherencia [2], singularidades en protocolos de *quench*¹ cuántico [3], dispersión reversible de información cuántica [4], etc. Estas signatures han sido observadas teórica y experimentalmente en diversos sistemas físicos y, si bien se ha estudiado su posible conexión con los exponentes de Lyapunov cuánticos [5], no se ha podido identificar en ellas todavía características propias de las transiciones de fase estándares.

En este estudio, analizaremos las propiedades de la ESQPT que presenta una versión del modelo de Dicke de interacción radiación-átomo de tres niveles, que da lugar a un modelo semiclásico con un número elevado de grados de libertad. Por otro lado, revelaremos el papel de una función dinámica como identificador de esta transición, vinculándola con algunas clases de transiciones de fase dinámicas.

En la sec. II introduciremos los aspectos más relevantes de las transiciones de fase cuánticas de estados excitados. Asimismo, trataremos los diferentes indicadores estadísticos utilizados en la caracterización de la energía crítica de la transición. Continuaremos en la sec. III con la enunciación de una importante conjetura que pone en valor el papel de una función dinámica como parámetro

de orden. Este operador será aplicado en un estudio detallado del modelo ya comentado (sec. IV) mediante simulaciones numéricas (sec. V).

II. TRANSICIONES DE FASE CUÁNTICAS DE ESTADOS EXCITADOS

Las transiciones de fase cuánticas estándares (QPT) representan una evolución irregular del estado fundamental de un sistema aislado en función de un único parámetro de control. Una generalización de este comportamiento crítico hacia un amplio rango del espectro de energía de algunos de estos sistemas conforma la teoría de transiciones de fase cuánticas de estados excitados [1].

Este tipo de transiciones involucran variaciones irregulares en la estructura del espectro excitado, en función, no sólo del parámetro de control g , sino también de la energía E . Así, en el plano $g \times E$ pueden definirse curvas críticas $E = E_c(g)$ donde se puede apreciar un comportamiento no analítico en la densidad y flujo de niveles, acompañado de cambios anómalos en la forma promedio de los autoestados del hamiltoniano del sistema (véase sec. II A y II B).

Estas curvas críticas dividen el espectro para un g dado en numerosas fases cuánticas excitadas, de tal forma que algunas características de los autoestados correspondientes fallan en continuar suavemente a lo largo de dichos límites. En el punto $g = g_c$, la energía crítica $E_c(g_c)$ alcanza eventualmente la energía del estado fundamental, convirtiéndose en un punto crítico de QPT. Este motivo hace natural la generalización que hemos realizado, si bien las ESQPT pueden ser observadas también en modelos sin QPT en su conjunto de parámetros.

En este sentido, las ESQPT extienden los diagramas de fase del estado fundamental al dominio excitado $g \times E$, de forma similar a las transiciones de fase térmicas (TPT), que lo extienden al plano $g \times T$, donde T denota la temperatura. Sin embargo, cabe destacar un claro contraste de las ESQPT con las TPT. Mientras que éstas afectan a estados excitados pero con una energía difuminada por las fluctuaciones térmicas, las ESQPT, por el contrario, influyen en estados excitados con un valor preciso de su

¹ Si bien no existe una traducción literal del concepto *quench*, podría resumirse como cambio súbito. En efecto, este tipo de protocolos se basan en la preparación de un estado cuántico para un valor g_0 de un parámetro de control del hamiltoniano y, de forma repentina, cambiar su magnitud a otro valor g_1 , observando la posterior evolución temporal del estado.

energía.

Al igual que otros tipos de comportamientos críticos, las ESQPT presentan no analiticidad estrictamente para un número infinito de partículas, $N \rightarrow \infty$. A pesar de ello, los precursores de tamaño finito de estas singularidades suelen ser significativos incluso para tamaños muy moderados del sistema, por lo que permiten realizar estudios concluyentes mediante un análisis de *finite-size scaling*. La característica definitoria de la transición en sistemas finitos no será, por tanto, la presencia de una singularidad verdadera sino un comportamiento de escalado bien definido de dichas cantidades hacia su límite singular.

Las singularidades espectrales que caracterizan las ESQPT son relevantes en numerosos modelos cuánticos simples, así como en diversos sistemas de muchos cuerpos en materia condensada. Algunos ejemplos son los qubits con interacciones de largo alcance, sistemas de acoplamiento átomo-campo, bosones interactuantes que modelizan movimientos colectivos de moléculas, núcleos atómicos y átomos fríos, y sistemas de Bose-Fermi con interacción.

A continuación, presentaremos algunos indicadores estadísticos que caracterizan a las ESQPT, y que utilizaremos para abordar nuestro posterior estudio.

A. Densidad de niveles

Las QPT están caracterizadas por ciertas propiedades relacionadas entre sí. Cuando el hamiltoniano alcanza el valor crítico $g = g_c$ del parámetro de control, (i) la energía del estado fundamental E_0 es no analítica respecto a dicho parámetro y (ii) las propiedades de la función de onda del estado fundamental, expresadas mediante parámetros de orden –p. e. valores esperados de ciertos observables–, tampoco son analíticas en dicho punto. Estas dos propiedades no son independientes entre sí, ya que la evolución de la energía del estado fundamental y la de ciertos parámetros de orden están directamente relacionadas; por ejemplo, el teorema de Feynman-Hellmann [6] vincula de manera precisa la derivada de la energía y el valor esperado de la derivada del hamiltoniano con respecto al mismo parámetro de control. Asimismo, (iii) el gap de energía Δ entre el estado fundamental y el primer estado excitado desaparece en g_c .

Sin embargo, cuando $g > g_c$, no se aprecia ninguna singularidad en el estado fundamental; en particular, no se cierra ningún gap de energía [7]. Al contrario, este fenómeno crítico se traslada a un cierto nivel de energía excitado, produciendo un mayor agrupamiento de niveles en torno a dicho nivel y dando lugar, de este modo, a una ESQPT. Esta divergencia local de la densidad de estados se propagará a mayores energías de excitación según incremente el parámetro de control.

Este comportamiento singular de la densidad de esta-

dos ocurre de forma simultánea al resto de singularidades en otras propiedades de los estados y supone, además, un nuevo ejemplo de la continuación natural de las QPT a estados excitados.

B. Estructura de autoestados

Inverse participation ratio (IPR). Recientemente, una cantidad denominada ratio de participación inversa (IPR, *inverse participation ratio*), similar a la entropía de Shannon, ha sido utilizada para cuantificar el grado de localización de los estados cuánticos en una base concreta [8].

Dado un autoestado $|E_n\rangle$ del hamiltoniano de un sistema ($H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$), definimos su IPR como

$$\text{IPR}(n) = \frac{1}{\sum_{i=1}^D |\langle i | E_n \rangle|^4}, \quad (1)$$

donde el conjunto de estados $\{|i\rangle\}_{i=1}^D$ forma una base específica del sistema, cuya dimensión es D .

Por un lado, si el autoestado está totalmente localizado en un único vector $|k\rangle$ de la base, entonces $\langle i | E_n \rangle = 0 \forall i \neq k$, y su IPR alcanzará un valor mínimo, $\text{IPR} = 1$. Si, por el contrario, el autoestado está igualmente distribuido sobre todos los vectores de la base, entonces, por condición de normalización, $|\langle i | E_n \rangle|^2 = 1/D \forall i$, y su IPR será máximo, $\text{IPR} = D$.

Se ha demostrado que el IPR permite revelar la posición de la energía crítica de las ESQPT que presentan algunos sistemas [9], debido a la mayor localización de los autoestados con energías cercanas a la energía crítica.

Cabe destacar que, si bien el IPR es una medida difícil de universalizar, puesto que depende de la elección de la base del sistema, su eficacia como indicador de transiciones de fase y cambios en la integrabilidad de la dinámica de muchos sistemas hacen de este estadístico una buena herramienta de análisis.

Peres lattices. Las denominadas *Peres lattices* [10] conforman una serie de estadísticos a partir del valor esperado de un observable \hat{O} sobre los autoestados $|E_n\rangle$ del hamiltoniano de un sistema.

Representados en función de las autoenergías de su espectro, estos valores $O_n = \langle E_n | \hat{O} | E_n \rangle$ dan lugar a dos posibles comportamientos diferentes: (i) un conjunto ordenado de puntos en el plano (E_n, O_n) –también, *lattice* o red– indica una dinámica regular del sistema, mientras que (ii) un conjunto desordenado de puntos viene asociado a una dinámica irregular, en general, caótica.

Las *Peres lattices* son una herramienta típicamente utilizada para distinguir comportamientos integrables y caóticos en el espectro de energía. Sin embargo, la relación entre el caos cuántico y la presencia de ESQPT [11]

hacen de estos estadísticos un buen método de identificación de este tipo de transiciones.

Presentaremos en la siguiente sección una cantidad íntimamente relacionada con las *Peres lattices*, que comporta el núcleo principal de nuestro estudio.

III. CONSTANTE DE MOVIMIENTO

Recientemente, se ha presentado una cantidad que ha sido probada en algunos modelos físicos que presentan ESQPT, postulándose como una característica clave en el estudio de estas transiciones.

Esta cantidad es un operador cuántico que divide el espectro de energía en dos diferentes fases cuánticas de estados excitados, siendo una constante del movimiento únicamente en una de ellas (en general, por debajo de la energía crítica). Así, este operador puede distinguir la fase a la que pertenece un estado cuántico dado, asignándole un número cuántico con importantes consecuencias termodinámicas.

Para introducir dicho operador, partimos del hamiltoniano de un sistema cuántico $H(\mathbf{x})$ en su límite clásico, donde $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{2\nu}$ son las coordenadas canónicas relevantes del sistema y $\nu \in \mathbb{N}$ el número de grados de libertad clásicos. Así, las ESQPT aparecen en puntos fijos \mathbf{x}_c del flujo del hamiltoniano clásico tales que $\nabla H(\mathbf{x}_c) = 0$ a una energía crítica $E_c = H(\mathbf{x}_c)$. A. L. Corps y A. Relano (2021) propusieron bajo una serie de premisas la siguiente conjetura [12].

Supongamos que existe una función dinámica $f(\mathbf{x})$ que satisface las siguientes dos propiedades:

- I) $f(\mathbf{x}_c) = 0$.
- II) *En un lado de la transición ($E < E_c$), toda trayectoria satisface $f(t) = f(\mathbf{x}[t]) < 0$ ó $f(t) > 0 \forall t$, dependiendo de las condiciones iniciales, pero esto no se cumple en el otro lado.*

Entonces, existe un operador cuántico, $\hat{C} = \text{sgn}[\hat{f}(\hat{\mathbf{x}})]$, que es una constante del movimiento sólo en la primera de estas dos fases, $E < E_c$.

En dicho trabajo, apoyándose en el estudio de las superficies de energía del espacio de fases semiclásico de los modelos de Rabi y Dicke de dos niveles, los autores propusieron $f(\mathbf{x}) = q$ como función dinámica, donde (q, p) denotan las coordenadas canónicas del sistema, y cuyo operador cuántico se puede expresar como

$$\hat{f} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger). \quad (2)$$

En el presente estudio, analizaremos este mismo operador como posible indicador de ESQPT para un modelo mucho más complejo (véase sec. VB).

Nótese que podemos definir el signo de un operador \hat{f} cualquiera como

$$\text{sgn}(\hat{f}) = D \text{sgn}(F) D^{-1} = D \text{diag}[\text{sgn}(\{f_i\})] D^{-1}, \quad (3)$$

donde D es una matriz de cambio de base cuyas columnas son los autovectores de \hat{f} , expresado mediante la matriz diagonal F cuyos elementos son sus respectivos autovalores $\{f_i\}$.

Así, el operador \hat{C} posee únicamente dos autovalores, $c_\pm = \pm 1$, y, por lo tanto, representa una simetría \mathbb{Z}_2 en la fase donde es una constante del movimiento. Sin embargo, no está relacionado con ninguna simetría discreta exacta de un modelo dado, por lo que su comportamiento no está ligado a la ruptura espontánea de simetría observada en transiciones de fase comunes.

Como definición alternativa, escribimos el hamiltoniano cuántico como $\hat{\mathcal{H}} = \sum_n E_n \hat{P}_n$, donde \hat{P}_n es el proyector sobre el subespacio propio del sistema con energía E_n . Entonces, tenemos $[\hat{C}, \hat{P}_n] = 0 \forall n/E_n < E_c$ y $[\hat{C}, \hat{P}_n] \neq 0 \forall n/E_n > E_c$. Esto implica que $\langle \hat{C} \rangle$ se conserva en cualquier evolución temporal que satisfaga que $\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle = E < E_c$, mientras que para $E > E_c$ no se conservará. Existe, por tanto, una fase en la que el valor esperado de este observable describe la termodinámica del sistema, y otra que estará caracterizada por una termodinámica estándar.

Algunos ejemplos que satisfacen esta conjetura incluyen el modelo de Lipkin–Meshkov–Glick [13], los modelos de dos niveles de Rabi y Dicke [14], condensados de Bose–Einstein espinoriales [15] y el modelo de Lipkin de dos fluidos [16].

En contraste a estos sistemas más simples, como ya hemos adelantado, aplicaremos en el presente estudio los desarrollos anteriormente presentados a una versión de tres niveles del modelo de Dicke. Este complejo sistema posee tres grados de libertad y, por tanto, no puede realizarse un análisis sencillo de su espacio de fases, de seis dimensiones [1].

IV. EL MODELO

El hamiltoniano que consideramos en el presente estudio corresponde a una versión de tres niveles del modelo de Dicke [17] que incluye un término diamagnético.

Este modelo está formado por N sistemas atómicos de tres niveles, cuyos estados individuales son $\{|0_k\rangle, |1_k\rangle, |2_k\rangle\}$ ($k = 1, \dots, N$) y sus energías $\hbar\omega_0 < \hbar\omega_1 < \hbar\omega_2$. Los átomos se asumen como independientes entre sí e interactúan idénticamente con un campo fotónico monocromático de frecuencia ω_f .

El hamiltoniano de radiación–materia que describe el

modelo es ($\hbar = 1$)

$$\mathcal{H} = \omega_f \hat{a}^\dagger \hat{a} + \sum_{i=0}^2 \omega_i \hat{\Sigma}_{ii} + D(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 + \sum_{i,j=0; i \neq j}^2 \frac{\Omega_{ij}}{\sqrt{N}} (\hat{\Sigma}_{ij} + \hat{\Sigma}_{ji})(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad (4)$$

donde \hat{a}^\dagger (\hat{a}) son los operadores de creación (destrucción) típicamente bosónicos que caracterizan el campo radiativo. Por otro lado, los operadores colectivos $\hat{\Sigma}_{ij} = \sum_{k=0}^2 |i_k\rangle \langle j_k|$ actúan sobre los estados atómicos $|n_0, n_1, n_2\rangle$, donde n_i indica el número de partículas en el nivel $i = 0, 1, 2$ ($N = n_0 + n_1 + n_2$). Estos operadores poseen las siguientes propiedades,

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}_{ii} |n_0, n_1, n_2\rangle &= n_i |n_0, n_1, n_2\rangle \\ \hat{\Sigma}_{i \neq j} |n_0, n_1, n_2\rangle &= \sqrt{(n_i + 1) n_j} |n_i + 1, n_j - 1, n_k\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

y todas sus relaciones de conmutación son nulas excepto

$$[\hat{\Sigma}_{ij}, \hat{\Sigma}_{jk}] = \hat{\Sigma}_{ik} - \delta_{ik} \Sigma_{jj}. \quad (6)$$

El término diamagnético, cuya amplitud viene dada por el parámetro D , es proporcional al cuadrado del potencial vector presente en el régimen no relativista de sistemas de interacción radiación-materia en acoplo mínimo. Si bien este término suele ser omitido para transiciones eléctricas dipolares, en el caso de átomos reales es crucial su aparición.

Finalmente, el acoplo entre el campo electromagnético y los sistemas atómicos induce transiciones entre sus niveles electrónicos ($i \rightarrow j$) caracterizadas por las frecuencias de Rabi colectivas Ω_{ij} , cuyo valor está ligado a la amplitud del término diamagnético,

$$\Omega_{ij} = \sqrt{(\omega_j - \omega_i) f_{ij} D} \quad (i > j), \quad (7)$$

donde $f_{ij} = \{f_{10}, f_{20}, f_{21}\}$ son fuerzas de oscilador tomadas como parámetro positivos que tomaremos como libres², si bien, de ellas dependen las posibles simetrías discretas que posee el modelo (véase sec. VB).

V. ANÁLISIS DE RESULTADOS

Una vez presentado el modelo que vamos a estudiar, procederemos a realizar una serie de análisis numéricos

cuyo objetivo es detectar y caracterizar las transiciones de fase cuánticas de estados excitados que pueda presentar. Si bien los métodos presentados han sido validados para sistemas mucho más simples, mostraremos cómo pueden ser aplicados de igual manera sobre un modelo con un número de grados de libertad semiclásicos sensiblemente mayor.

En el siguiente desarrollo, partimos de un dato teórico de la energía crítica de la ESQPT igual a $E_c/N = 1.1$, el cual ha sido proporcionado previamente por el tutor del trabajo y se ha extraído mediante un análisis de la aproximación semiclásica del modelo.

Nota: todas las simulaciones se han realizado con el siguiente conjunto de parámetros: $\omega_f = 1$, $\omega_n = \{1, 1.1, 2.1\}$, $D = 3$, $f_{ij} = \{12, 12, 12\}$, salvo que se indique expresamente lo contrario. Asimismo, se ha truncado el cálculo a $n_{ph} = 150$ fotones, y se ha comprobado que los niveles de energía convergen apropiadamente.

A. Indicadores estadísticos

Como hemos visto en la sec. II, existen diferentes estadísticos que advierten de la existencia de ESQPT en un sistema cuántico. Sin embargo, al aumentar el número de grados de libertad semiclásicos, d_f , estas propiedades estáticas suelen perder relevancia. Esto se debe a que las singularidades logarítmicas que presenta un sistema alrededor de E_c aparecen, generalmente, en la $(d_f - 1)$ derivada de su densidad de niveles y otras magnitudes extensivas. Por tanto, para el modelo de Dicke de tres niveles, cabe esperar una divergencia en la segunda derivada de estas cantidades [1].

Densidad de niveles. En la fig. 1 se muestra la densidad de estados que contiene el modelo en diferentes ventanas de su espectro de energía. En torno a la energía crítica teórica de la ESQPT, se puede apreciar un cambio en esta cantidad: su tendencia pasa de ser convexa a cóncava. Sin embargo, no es suficiente con este resultado para afirmar que existe una singularidad en dicho punto. Esto pone de manifiesto el hecho de que el gran número de grados de libertad del modelo provoca que la densidad de niveles deje de comportarse como un indicador relevante de la presencia de una ESQPT.

IPR. Observamos (véase fig. 2) en el ratio de participación de los autoestados del modelo un cambio de tendencia alrededor de E_c . Asimismo, en energías cercanas a la transición de fase, el valor del IPR parece minimizarse, indicando un mayor grado de localización de estos autoestados en la base escogida (de estados de Fock).

Peres lattices. Otro buen indicador de la presencia de una ESQPT es el estudio del valor esperado de ciertos observables sobre los autoestados del sistema. En la fig. 3 se presentan algunos de estos observables, mostrando todos ellos un cambio significativo en su comportamiento

² Para una interacción electromagnética real, existe un conjunto de restricciones impuestas por la regla de suma de Thomas-Reich-Kulm. Sin embargo, éstas no se aplican en realizaciones experimentales alternativas de modelos semejantes [18].

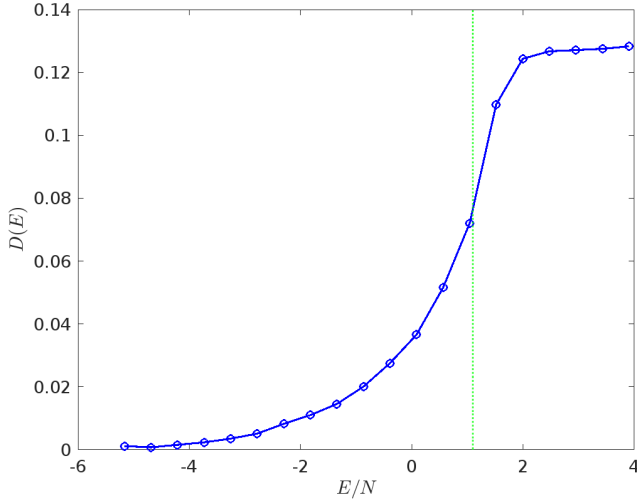


Figura 1. (Azul) Densidad de niveles en función de la energía por átomo (E/N) para $N = 16$. (Verde) Energía crítica $E_c/N = 1.1$ de la transición de fase.

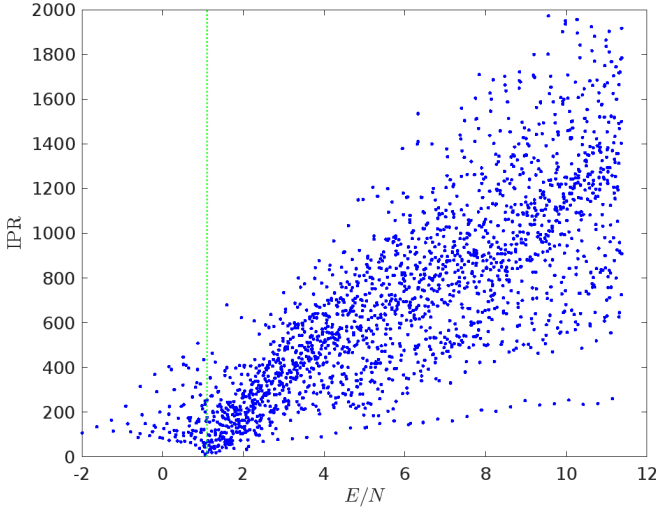


Figura 2. (Azul) *Inverse participation ratio* (IPR) en función de la energía por átomo (E/N) para $N = 10$. (Verde) Energía crítica $E_c/N = 1.1$ de la transición de fase.

al cruzar la energía crítica teórica de la transición.

Por un lado, cuando $E < E_c$, se puede apreciar que las *Peres lattices* constituyen patrones ordenados de curvas definidas, mientras que por encima de esta energía su disposición es notablemente más irregular. Por tanto, los resultados que arrojan las *Peres lattices* son compatibles con la existencia de una ESQPT en el modelo.

Si bien se aleja del objeto del presente estudio, cabe añadir que la formación de diferentes patrones en la red de estos estadísticos indican también una posible evolución desde una dinámica integrable –por debajo de la energía crítica– hacia el caos –por encima de ésta. En la interfase, podrían darse pequeñas perturbaciones de la integrabilidad del sistema, produciendo distorsiones

en la red regular que, cuando destruyen su estructura completamente, dan lugar a un comportamiento caótico [19, 20]. Es por esto que las *Peres lattices* son una alternativa viable en el estudio del caos cuántico frente a otros estadísticos espectrales tradicionales [21]. Esto mismo ocurre con el IPR, cuyo valor suele aumentar a medida que la dinámica del sistema se vuelve caótica.

Finalmente, los resultados mostrados en la fig. 3 contienen una valiosa información adicional sobre el operador $\hat{C} = \text{sgn}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, que analizaremos en la sección VB, junto con las simetrías que presenta el modelo en función de los parámetros característicos de su hamiltoniano.

B. Simetrías

Como ya adelantamos en la descripción del modelo, según los posibles valores que pueden tomar las fuerzas de oscilador, encontramos tres posibles escenarios: con dos, una o ninguna de ellas nula. Para cada uno de estos casos, el modelo poseerá diferentes simetrías.

Cuando dos fuerzas de oscilador son nulas, el sistema se reduce al modelo de Dicke convencional de dos niveles, con un tercer nivel desconectado del resto. En segundo lugar, si solamente una de ellas es cero, el sistema posee una simetría discreta de paridad representada por el operador

$$\hat{\Pi} = \exp[i\pi(\hat{a}^\dagger \hat{a} + n_k)] \quad , \quad f_{ij} = 0 \quad (k \neq i, j) \quad , \quad (8)$$

donde n_k es el número de átomos que permanecen en el nivel $k = 0, 1, 2$.

En este caso, podemos observar (véase fig. 4a) cómo la energía crítica de la ESQPT divide el espectro en dos regiones: (i) una zona ($E < E_c$) en la que el valor esperado del operador $\hat{f} = \hat{a} + \hat{a}^\dagger$ (nótese que en todos los cálculos hemos omitido el factor $1/\sqrt{2}$ por simplicidad) se divide en dos ramas³ (positiva y negativa); y (ii) otra región donde $\langle \hat{f} \rangle = 0 \quad \forall E > E_c$, debido a la presencia de la simetría de paridad $\hat{\Pi}$. Por tanto, cabe notar que, a pesar de que el modelo posee tres grados de libertad semiclásicos, el observable \hat{f} se comporta como un buen parámetro de orden para estudiar la transición de fase.

Finalmente, si todas las fuerzas de oscilador son no nulas, no existe una simetría de paridad que conmute

³ En esta región, los niveles de energía están degenerados por pares, en función de su paridad. Si incluimos en el hamiltoniano un término de ruptura de simetría $\frac{\epsilon}{\sqrt{N}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$, se romperá la degeneración de niveles, perteneciendo el estado fundamental a una sola rama. Este término se ha incluido para los resultados de la fig. 4a; sin embargo, cuando todas las fuerzas de oscilador son no nulas, no existe degeneración de niveles, por lo que elegiremos para el resto de casos $\epsilon = 0$.

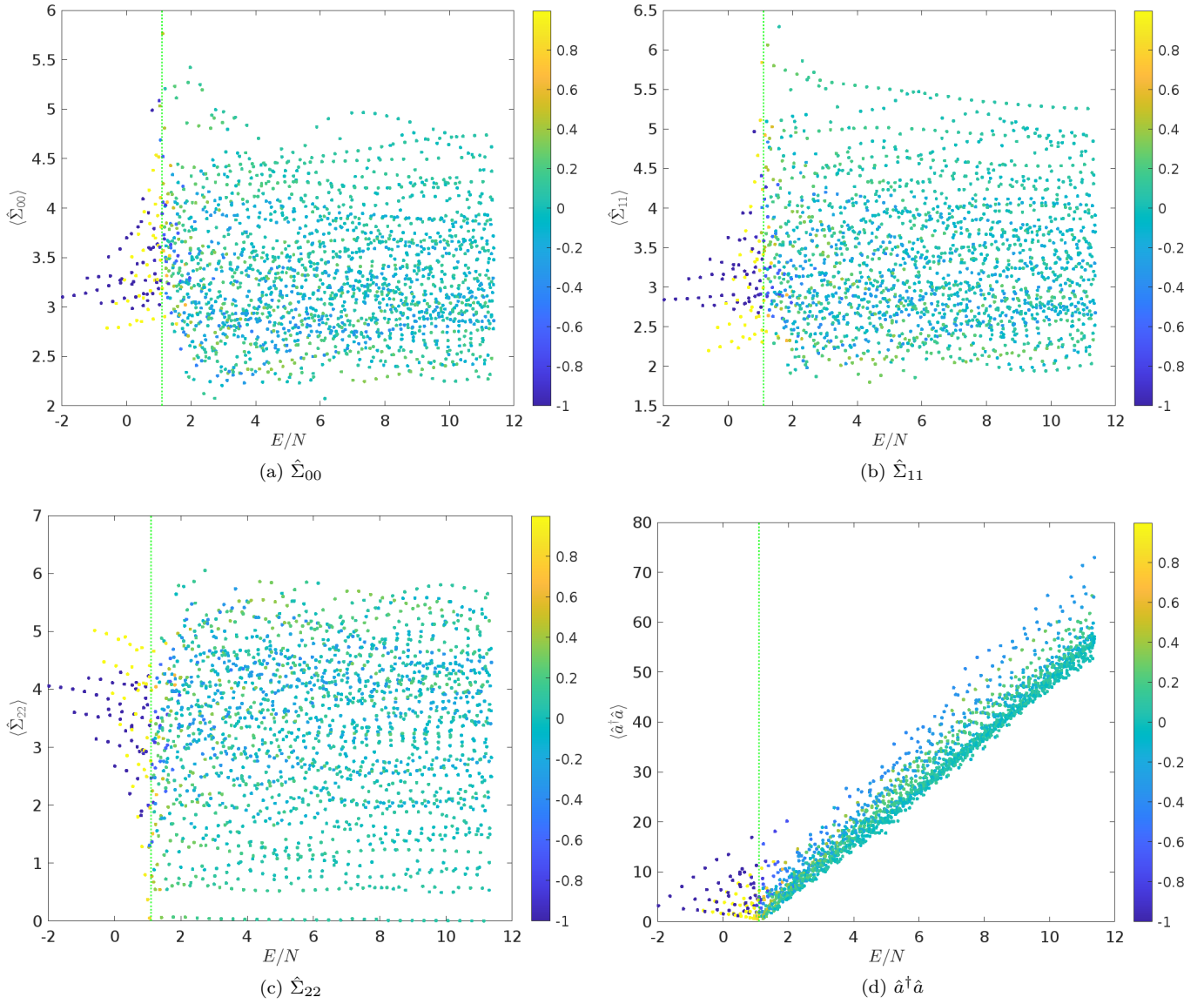


Figura 3. *Peres lattices* para diferentes observables en función de la energía por átomo (E/N) para $N = 10$. El mapa de densidades muestra el valor esperado del operador \hat{C} para cada autoestado. (Verde) Energía crítica teórica $E_c/N = 1.1$ de la transición de fase.

con el hamiltoniano. Sin embargo, el operador \hat{f} sigue actuando como un buen parámetro de orden, aunque con importantes diferencias. En primer lugar, los niveles de energía no están degenerados y las dos ramas de la región $E < E_c$ no son simétricas (véase fig. 4b). Asimismo, el valor esperado $\langle \hat{f} \rangle$ no es exactamente cero cuando $E > E_c$, debido a que los estados no poseen una paridad bien definida en esta fase tampoco.

Los resultados obtenidos en este escenario sugieren por tanto la existencia de dos ESQPT diferentes. La primera se da cuando la rama positiva aparece: bajo dicha energía crítica, E_{c1} , todos los autoestados satisfacen $\langle \hat{f} \rangle < 0$, mientras que cuando $E > E_{c1}$ pueden estar tanto en la rama negativa como en la positiva. En la segunda transi-

ción, el valor esperado de \hat{f} tiende a cero, al igual que en los casos anteriores, aun sin existencia de una simetría de paridad.

Cabe notar que para los dos primeros casos la ESQPT se produce por una ruptura de simetría, de forma similar a lo que ocurre en las transiciones de fase térmicas. Por el contrario, en este último caso la transición no se da por este fenómeno, por lo que, si bien comparten al operador \hat{f} como parámetro de orden, su naturaleza es totalmente diferente.

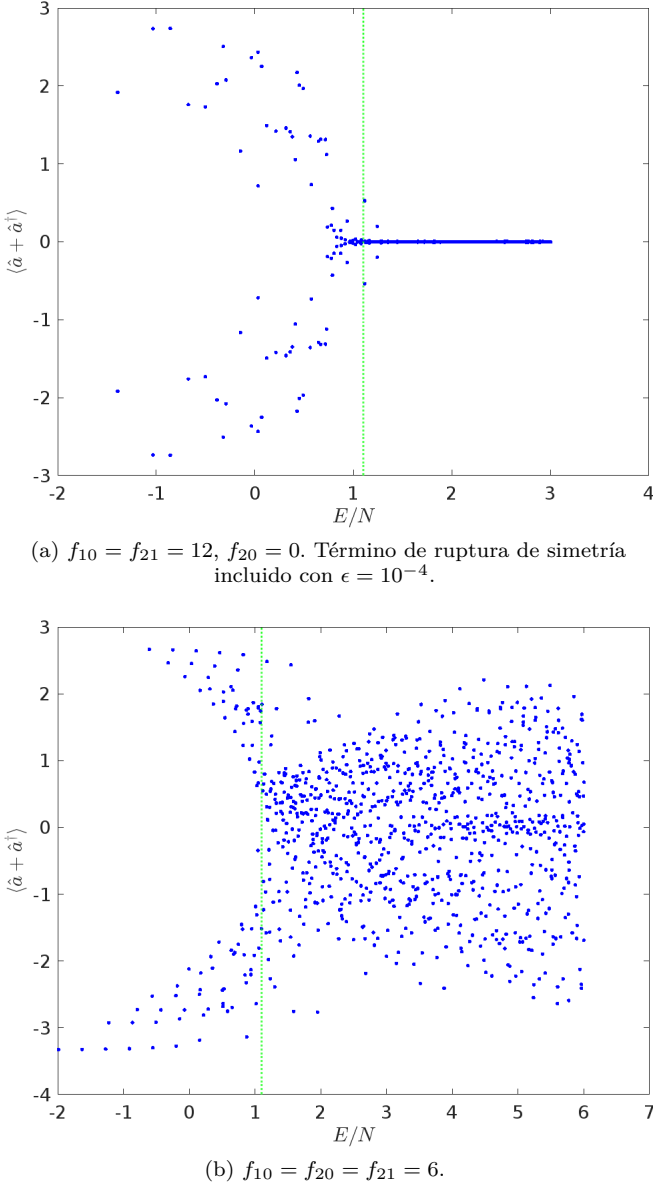


Figura 4. (Azul) Valor esperado de \hat{f} en función de la energía por átomo (E/N) para $N = 10$ y distintos valores de las fuerzas de oscilador. (Verde) Energía crítica teórica $E_c/N = 1.1$ de la transición de fase.

C. Constante de movimiento

Aunque hasta ahora los resultados sugieren que el operador $\hat{f} = \hat{a} + \hat{a}^\dagger$ es un buen parámetro de orden de la transición de fase, los resultados que arroja en el caso en que el modelo no posee ninguna simetría ($f_{ij} \neq 0 \forall i > j$) son muy sutiles. Esto nos lleva a la necesidad de servirnos del operador $\hat{C} = \text{sgn}(\hat{f})$ para el estudio de esta situación, mejorando notablemente nuestra capacidad de análisis cuantitativo del modelo.

Apriorísticamente, advertimos a partir de la fig. 4b que \hat{f} parece satisfacer las premisas de la conjetura presen-

tada en la sec. III: cuando $E < E_c$ su valor esperado es positivo o negativo con total fiabilidad, mientras que, por encima de la transición, no se puede afirmar tal cosa. Esta apreciación preliminar apoya de manera firme nuestro propósito de estudio.

De hecho, los resultados son del todo concluyentes cuando representamos el valor esperado del operador \hat{C} sobre los autoestados del hamiltoniano (véase fig. 5). Aquí podemos observar cómo claramente $\langle \hat{C} \rangle = \pm 1$ cuando $E < E_c$ (de hecho, la rama positiva comienza a partir de E_{c1}), por lo que en esta región dicho operador es un observable compatible con el hamiltoniano y, por tanto, es una cantidad conservada del modelo. En efecto, en ausencia de degeneración los autoestados del hamiltoniano son únicos; entonces, que el valor esperado de \hat{C} sobre ellos sea igual a sus autovalores ($c_\pm = \pm 1$), pone de manifiesto que dicho operador está bien definido en esta región del espectro. Por el contrario, este hecho deja de satisfacerse tras la transición de fase, indicando que la cantidad deja de conservarse para energías $E > E_c$.

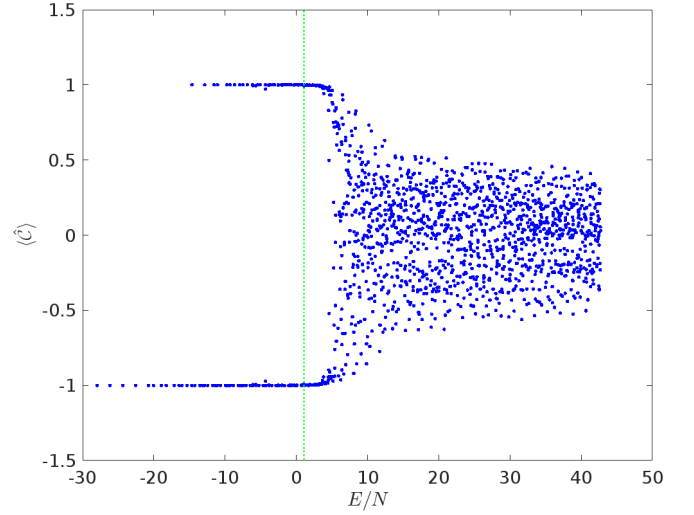


Figura 5. (Azul) Valor esperado de \hat{C} en función de la energía por átomo (E/N) para $N = 10$. (Verde) Energía crítica teórica $E_c/N = 1.1$ de la transición de fase.

La clara diferencia de este operador que separa ambas fases del espectro del modelo nos permite calcular numéricamente la energía crítica de la ESQPT. Puesto que esta transición sólo es exacta en el límite de tamaño infinito del sistema ($N \rightarrow \infty$), es necesario realizar un análisis de *finite size scaling* para distintos valores del número total de átomos.

Con ello, podemos observar cómo el comportamiento singular del modelo en la energía crítica emerge cuando nos acercamos a dicho límite, siguiendo una ley de potencias

$$|\varepsilon_N - \varepsilon_c| \propto N^{-\beta} \quad (9)$$

caracterizada por el exponente crítico β . Aquí, $\varepsilon_N = E/N$ es la energía –por unidad de átomo– de transición

aparente para cada simulación cuyo número de átomos se ha truncado a un valor finito N .

Esta energía numérica se ha obtenido imponiendo sobre los datos del valor esperado de \hat{C} una tolerancia $|\langle\hat{C}\rangle_N - c_{\pm}| = 0.05$ con respecto a su valor teórico en la región donde la cantidad es conservada ($c_{\pm} = \pm 1$). Así, encontramos el último nivel que respeta esta tolerancia, $(\varepsilon_a, \langle E_a | \hat{C} | E_a \rangle)$, y el primero que la incumple, $(\varepsilon_b, \langle E_b | \hat{C} | E_b \rangle)$. Tras esto, aplicamos entre ambos puntos una regresión lineal y determinamos ε_N como aquel valor de la energía para el cual $|\langle\hat{C}\rangle_N| = 0.95$, es decir,

$$\begin{aligned} |\langle\hat{C}\rangle_N| &= m \cdot \varepsilon + n \\ m &= \frac{|\langle\hat{C}\rangle_a| - |\langle\hat{C}\rangle_b|}{\varepsilon_a - \varepsilon_b}, \quad n = |\langle\hat{C}\rangle_a| - m \cdot \varepsilon_a \\ \varepsilon_N &= \frac{0.95 - n}{m}. \end{aligned} \quad (10)$$

Nótese que, puesto que el valor de la cantidad conservada puede ser ± 1 según las condiciones iniciales, hemos realizado todas estas operaciones con su valor absoluto. Asimismo, la finalidad de la regresión lineal utilizada en la obtención de ε_N no es sino minimizar las fluctuaciones estadísticas debidas a las simulaciones numéricas.

En la fig. 6 se muestra un ajuste lineal del logaritmo de estas cantidades,

$$\log |\varepsilon_N - \varepsilon_c| \propto -\beta \log N, \quad (11)$$

cuya pendiente nos da un valor preciso del exponente $\beta = 1.362 \pm 0.259$.

Cabe aclarar, sin embargo, que este exponente crítico no guarda una clara relación con aquellos estudiados por las transiciones de fase estándares, ligados a la divergencia de la longitud de correlación en el punto crítico. Por el contrario, en muchos sistemas colectivos que presentan ESQPT, no existe una geometría que nos permita definir una longitud de correlación.

La ley de potencias que siguen los precursores de la energía crítica es, por tanto, una observación heurística sobre la cual no existe todavía una teoría sólida. A pesar de ello, los resultados numéricos obtenidos en el presente estudio apoyan fuertemente este comportamiento escalado de dichos precursores de tamaño finito.

Con este resultado podemos apreciar la gran significación de los precursores de tamaño finito de la ESQPT que presenta el modelo, ya que un número muy modesto de átomos nos permite distinguir con notable precisión un escalado bien definido de la energía crítica numérica hacia su valor teórico, que sólo podría alcanzarse con un tamaño infinito del sistema.

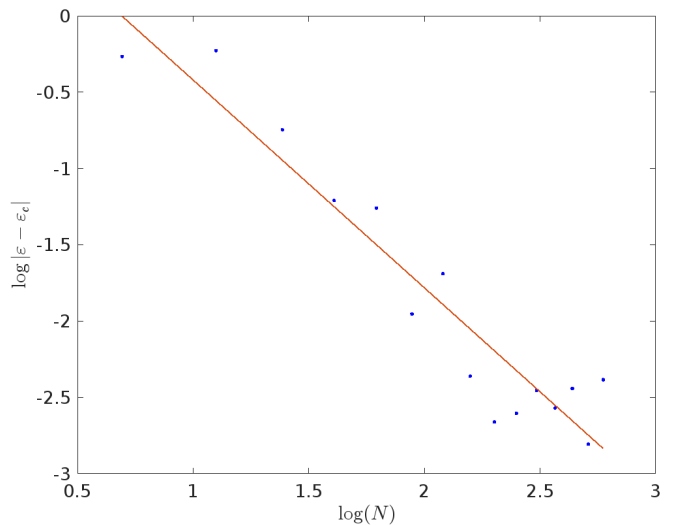


Figura 6. (Azul) $\log |\varepsilon_N - \varepsilon_c|$ en función de $\log(N)$. (Rojo) Ajuste lineal de los datos ($y = p_1 \cdot x + p_2$) al 95 % de confianza. Resultado del ajuste: $p_1 = -1.362 \pm 0.259$, $p_2 = 0.942 \pm 0.554$. Parámetros estadísticos: $R^2 = 0.9079$.

VI. CONCLUSIONES

Tras el estudio realizado, hemos comprobado la existencia de una ESQPT en un modelo físico con un elevado número de grados de libertad semiclassical. Esta complejidad añadida da lugar a una gran dificultad de análisis cuantitativo por medio de los indicadores estadísticos comunes. Sin embargo, hemos demostrado cómo la cantidad conjeturada en [12] toma un papel fundamental en la caracterización de dicha transición, hasta ahora sólo probada en sistemas mucho más simples.

Los resultados que emanan de este operador dan cuenta de la gran significación de los precursores de tamaño finito que presenta el modelo, ya que un número muy modesto de átomos nos permite distinguir con notable precisión un comportamiento escalado bien definido de la energía crítica numérica hacia su valor teórico.

Asimismo, esta cantidad actúa como mediador en la relación de las ESQPT con las transiciones de fase dinámicas (DPT). Esta clase de transiciones se basa en el comportamiento crítico de los estados cuánticos en el dominio temporal [22], manifestando diferentes propiedades dinámicas que típicamente se encuentran en protocolos de *quench* cuántico [23]. Un ejemplo paradigmático de esta clase de procesos es el modelo de Lipkin–Meshkov–Glick [24], una generalización de rango infinito del modelo de Ising que presenta diferentes fases dinámicas (ferromagnética o paramagnética) en su evolución temporal tras la aplicación de un *quench* cuántico.

Este importante vínculo ha empezado a estudiarse recientemente [25], y el presente estudio está orientado en dicho avance.

VII. DISPONIBILIDAD DE MATERIALES

Las simulaciones numéricas realizadas para el presente estudio han sido realizadas mediante un extenso código implementado en C, de creación propia. Este código, junto con todos los datos extraídos, se puede encontrar en <https://github.com/d-michel/TFM> bajo una licencia de uso pública GNU v3.0.

VIII. AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mi tutor, Armando Relaño, su inestimable dedicación y atención durante los años que he tenido

la oportunidad de trabajar junto a él. A Daniel Doña, por su impagable ayuda al proporcionarme los medios computacionales que han permitido llevar a cabo este trabajo, aunque incomparable a su constante apoyo y consejo. A Beatriz, Rodrigo y todos los que no caben aquí, por sufrirme en mi sufrimiento. A mis padres, a ellos les dedico todo cuando soy y he hecho.

-
- [1] P. Cejnar, P. Stránský, M. Macek, and M. Kloc, “Excited-state quantum phase transitions,” *J. Phys. A: Math. Theor.*, vol. 54, p. 133001, 2021.
 - [2] P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, J. Dukelsky, and J. E. García-Ramos, “Decoherence due to an excited-state quantum phase transition in a two-level boson model,” *Phys. Rev. A*, vol. 80, p. 032111, 2009.
 - [3] M. Kloc, P. Stránský, and P. Cejnar, “Quantum quench dynamics in Dicke superradiance models,” *Phys. Rev. A*, vol. 98, p. 013836, 2018.
 - [4] Q. Hummel, B. Geiger, J. D. Urbina, and K. Richter, “Reversible quantum information spreading in many-body systems near criticality,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 123, p. 160401, 2019.
 - [5] J. Chávez-Carlos, B. L. del Carpio, M. A. Bastarrachea-Magnani, P. Stránský, S. Lerma-Hernández, L. F. Santos, and J. G. Hirsch, “Quantum and classical Lyapunov exponents in atom-field interaction systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 122, p. 024101, 2019.
 - [6] R. P. Feynman, “Forces in molecules,” *Phys. Rev.*, vol. 56, pp. 340–343, 1939.
 - [7] M. A. Caprio, P. Cejnar, and F. Iachello, “Excited state quantum phase transitions in many-body systems,” *Ann. Phys.*, vol. 323, pp. 1106–1135, 2008.
 - [8] I. Baena, P. Pérez-Fernández, M. Rodríguez-Gallardo, and J. M. Arias, “Entropies and IPR as markers for a phase transition in a two-level model for atom-diatom molecule coexistence,” *Entropy*, vol. 24, pp. 113–128, 2022.
 - [9] L. F. Santos, M. Távora, and F. Pérez-Bernal, “Excited-state quantum phase transitions in many-body systems with infinite-range interaction: localization, dynamics and bifurcation,” *Phys. Rev. A*, vol. 94, p. 012113, 2016.
 - [10] A. Peres, “New conserved quantities and test for regular spectra,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 53, pp. 1711–1713, 1984.
 - [11] P. Pérez-Fernández, A. Relaño, J. M. Arias, P. Cejnar, J. Dukelsky, and J. E. García-Ramos, “Excited-state phase transition and onset of chaos in quantum optical models,” *Phys. Rev. E*, vol. 83, p. 046208, 2011.
 - [12] A. L. Corps and A. Relaño, “Constant of motion identifying excited-state quantum phases,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 127, p. 130602, 2021.
 - [13] Q. Wang and F. Pérez-Bernal, “Characterizing the Lipkin–Meshkov–Glick model excited-state quantum phase transition using dynamical and statistical properties of the diagonal entropy,” *Phys. Rev. E*, vol. 103, p. 032109, 2021.
 - [14] R. Puebla, A. Relaño, and J. Retamosa, “Excited-state phase transition leading to symmetry-breaking steady states in the Dicke model,” *Phys. Rev. A*, vol. 87, p. 023819, 2013.
 - [15] P. Feldmann, C. Klempt, A. Smerzi, L. Santos, and M. Gessner, “Interferometric order parameter for excited-state quantum phase transitions in Bose–Einstein condensates,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 126, p. 230602, 2021.
 - [16] J. E. García-Ramos, P. Pérez-Fernández, and J. M. Arias, “Excited-state quantum phase transitions in a two-fluid Lipkin model,” *Phys. Rev. C*, vol. 95, p. 054326, 2017.
 - [17] A. Baksic, P. Nataf, and C. Ciuti, “Superradiant phase transitions with three-level systems,” *Phys. Rev. A*, vol. 87, p. 023813, 2013.
 - [18] P. Nataf and C. Ciuti, “No-go theorem for superradiant quantum phase transitions in cavity QED and counterexample in circuit QED,” *Nat. Commun.*, vol. 1, 2010.
 - [19] M. A. Bastarrachea-Magnani and J. G. Hirsch, “Peres lattices and chaos in the Dicke model,” *J. Phys.: Conf. Ser.*, vol. 512, p. 012004, 2013.
 - [20] A. L. Corps, R. A. Molina, and A. Relaño, “Chaos in a deformed Dicke model,” *J. Phys. A: Math. Theor.*, vol. 55, p. 084001, 2022.
 - [21] Y. Y. Atas, E. Bogomolny, O. Giraud, and G. Roux, “Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 084101, 2013.
 - [22] J. Marino, M. Eckstein, M. S. Foster, and A. M. Rey, “Dynamical phase transitions in the collisionless prethermal states of isolated quantum systems: theory and experiments,” *arXiv*, 2022.
 - [23] R. Puebla, “Finite-component dynamical quantum phase transitions,” *Phys. Rev. B*, vol. 102, p. 220302, 2020.
 - [24] A. Das, K. Sengupta, D. Sen, and B. K. Chakrabarti, “Infinite-range Ising ferromagnet in a time-dependent

transverse magnetic field: quench and ac dynamics near the quantum critical point,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 144423, 2006.

[25] A. L. Corps and A. Relaño, “Dynamical and excited-state quantum phase transitions in collective systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 106, p. 024311, 2022.