



TÍTULO

ESTUDIO DE TRANSICIONES DE FASE CUÁNTICAS EN EL
OSCILADOR CUÁRTICO Y EN EL MODELO DE
LIPKIN-MESHKOV-GLICK

AUTORA

Elena Domínguez Prieto

Directores	Esta edición electrónica ha sido realizada en 2022
Instituciones	Dr. D. Francisco Bartolomé Pérez Bernal ; Miguel Carvajal Zaera
Curso	Universidad Internacional de Andalucía ; Universidad de Huelva
©	<i>Máster Universitario en Simulación Molecular (2020/21)</i>
©	Elena Domínguez Prieto
Fecha documento	De esta edición: Universidad Internacional de Andalucía
	2021

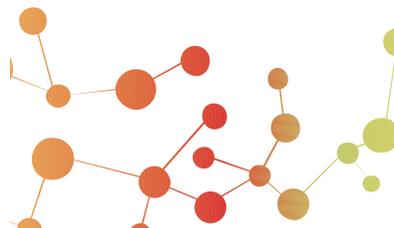


**Atribución-NoComercial-SinDerivadas
4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0)**

Para más información:

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.es>

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.en>



Estudio de transiciones de fase cuánticas en el oscilador cuártico y en el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick

Elena Domínguez Prieto

Trabajo entregado para la obtención del grado de
Máster en Simulación Molecular

Septiembre 2021

Directores:
Francisco Bartolomé Pérez Bernal
Miguel Carvajal Zaera



Índice de contenidos

Resumen	3
Summary	5
1 Introducción	7
1.1 Motivación	7
1.2 Aspectos relevantes	8
1.3 Objetivos	8
2 Metodología	11
2.1 Oscilador cuártico	11
2.1.1 Hamiltoniano	13
2.1.2 Segunda cuantización	13
2.2 Modelo de Lipkin-Meshkov-Glick	15
2.2.1 Modelo simplificado	17
2.2.2 Modelo anarmónico	17
2.3 Magnitudes para la identificación de las transiciones de fase	18
2.3.1 Razón de participación	18
2.3.2 Densidad de niveles	18
2.3.3 Fidelidad cuántica y susceptibilidad	19
3 Resultados y discusión	21
3.1 Transiciones de Fase Cuánticas del oscilador cuártico	21
3.1.1 Transiciones de Fase Cuánticas de Estado Fundamental	22
3.1.1.1 Transición de Fase de Primer Orden	23
3.1.1.2 Transición de Fase de Segundo Orden	25
3.1.2 ESQPT: Transiciones de Fase de Estado Excitado	28
3.1.2.1 Potencial Cuártico Puro	29
3.1.2.2 Doble pozo simétrico	30
3.1.2.3 Doble pozo asimétrico con término cúbico	32
3.1.2.4 Doble pozo asimétrico con término lineal	34
3.2 Transiciones de Fase Cuánticas en el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick	36
3.2.1 Modelo simplificado	36
3.2.2 Modelo anarmónico	40
4 Resumen y Conclusiones	45
A Resultado del oscilador cuártico puro	47

A.1	Autovalores y autovectores	47
A.2	Elementos de matriz de $\langle X \rangle$ y $\langle X^2 \rangle$	48
B	Programas Python del Oscilador Cuártico	51
B.1	Programa de diagonalización	51
B.2	Programa de cálculo de funciones de onda	53
C	Programas Python del modelo de Lipkin-Meshkov-Glick	55
C.1	Programa para el cálculo de autoestados del modelo simplificado	55
C.2	Programa para el cálculo de autoestados del modelo anarmónico	56
	Bibliografía	59

Resumen

Se han caracterizado las transiciones de fase, tanto de estado fundamental como de estados excitados, en dos sistemas cuánticos diferentes: el oscilador cuártico y el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick. Se han calculado y representado magnitudes útiles en la caracterización de transiciones de fase cuánticas como son la fidelidad cuántica y su susceptibilidad o la densidad de estados, la razón de participación y la diferencia de energía entre niveles consecutivos. Las dos primeras se calculan para transiciones de fase de estado fundamental y las tres últimas para transiciones de fase de estados excitados. Para este estudio, se han desarrollado varios programas en lenguaje Python que escriben y diagonalizan las matrices de los distintos Hamiltonianos analizados en este trabajo y calculan las magnitudes mencionadas.

Summary

Quantum phase transitions for both, ground and excited states, have been characterized in two different quantum systems: the quantum quartic oscillator and the Lipkin-Meshkov-Glick model. Several quantities, that have proven useful in the identification of quantum phase transitions, have been calculated and plotted, such as the quantum fidelity and the fidelity susceptibility for ground state quantum phase transitions, and the density of states, the inverse participation ratio and the energy difference between consecutive energy levels for excited-state quantum phase transitions. In this way, several codes have been developed in Python language that write and diagonalize the matrices for the different Hamiltonians analyzed in this work and compute the mentioned quantities.

Introducción

1.1 Motivación

En termodinámica, el estudio de las transiciones de fase se centra en cómo se alteran las propiedades de un sistema al cambiar su estado de agregación. Para llevar esto a cabo se analiza la dependencia de las propiedades del sistema de ciertas variables -o parámetros- de control. En el punto crítico de una transición de fase, una pequeña variación en los valores de los parámetros de control conlleva un cambio abrupto en alguna de las propiedades del sistema.

Las transiciones de fase cuánticas (QPTs, del inglés *quantum phase transitions*) son, al igual que las anteriores, función de uno o varios parámetros de control. Estos parámetros forman parte del Hamiltoniano del sistema. De forma análoga a las transiciones de fase termodinámicas, se puede usar para su clasificación el criterio de Ehrenfest, otorgándoles un orden de acuerdo a la derivabilidad de la energía del sistema: las transiciones de fase de primer orden implican la aparición de una discontinuidad en la primera derivada de la energía del estado fundamental, las de segundo orden presentan la discontinuidad en la segunda derivada, etc. El estudio de las QPTs se ha desarrollado considerablemente en los últimos años en diferentes sistemas físicos [1,2]. Además, recientemente, el estudio de las QPTs se ha extendido más allá del estado fundamental, a las transiciones de fase de estado excitado (ESQPTs, del inglés *excited-state quantum phase transitions*), donde las transiciones se caracterizan por la existencia de discontinuidades en la densidad de niveles de energía o en sus derivadas para unos valores críticos de la energía [3–6]. Al representar la energía frente a un parámetro de control aparecen unas líneas de alta densidad de niveles de energía, llamadas *separatrices*, que separan dos fases distintas del sistema, por ejemplo, zonas donde existe degeneración en los niveles de otras donde la degeneración se rompe [6]. En este trabajo se estudiarán las QPTs y ESQPTs que presentan dos sistemas cuánticos diferentes: el oscilador cuártico en una dimensión, y el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick [7].

El oscilador cuártico se diagonaliza usando una base de oscilador armónico en el formalismo en segunda cuantización para así obtener los autoestados. La base de oscilador armónico es infinita, con lo que es necesario determinar una dimensión a la que trunca la forma matricial de Hamiltoniano para la diagonalización [8]. La dimensión a la que se trunca la matriz se puede seleccionar buscando la convergencia entre autovalores (o autovectores) para una tolerancia dada. Por otra parte, el modelo de

Lipkin-Meshkov-Glick se diagonaliza sobre una base finita y no es necesario el análisis de convergencia descrito para el oscilador cuártico.

1.2 Aspectos relevantes

Si se considera un Hamiltoniano, $H(g)$, que varía como función de un parámetro, g , se puede estudiar la evolución de la energía, tanto del estado fundamental como de los estados excitados en función del parámetro g . La teoría de Transiciones de Fase Cuánticas pretende encontrar los puntos no analíticos de la energía en función de este parámetro. Para llevar a cabo el estudio de QPTs y ESQPTs, es necesario diagonalizar el Hamiltoniano del sistema cuántico elegido. Una vez obtenidos los autovalores y autoestados, se pueden calcular algunas magnitudes que ayudan a la identificación y análisis de las transiciones. Para el estudio de las QPTs, la fidelidad cuántica y susceptibilidad de dicha fidelidad permiten comprobar el solapamiento entre funciones de onda de estado fundamental para Hamiltonianos con valores muy próximos del parámetro de control. Este solapamiento es mínimo entre los valores del parámetro del control entre los que se encuentra el punto crítico [9]. El estudio de las ESQPTs puede realizarse analizando magnitudes como la densidad de niveles, la diferencia de energía entre niveles y la razón de participación, donde se analiza la cantidad de estados de la base que participan en cada autoestado del Hamiltoniano. Estas magnitudes presentan puntos críticos para la energía crítica de la ESQPT. Para cada Hamiltoniano se analizarán distintos parámetros de control y, cuando sea necesario, parámetros de orden. Se denominan parámetros de orden a aquellos operadores, como por ejemplo el valor esperado de la posición, $\langle X \rangle$, que presentan también puntos críticos al alcanzarse la ESQPT. Es importante señalar que el carácter finito de los sistemas estudiados (sistemas mesoscópicos) hace que se suavicen las discontinuidades típicas de las transiciones de fase térmicas. Por tanto, encontraremos precursores de dichas transiciones -que resultan muy relevantes incluso para sistemas de tamaño pequeño- y que, al aumentar el tamaño del sistema, tienden a las discontinuidades esperadas en el límite termodinámico.

En este trabajo se estudiará un Hamiltoniano para un potencial cuártico, con tres parámetros de control que se corresponden con los coeficientes de los términos cúbico, cuadrático y lineal del potencial. Para el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick se analizarán dos Hamiltonianos: uno simplificado y otro en el que se incluye una corrección anarmónica. Para el estudio de estos Hamiltonianos se prepararán distintos códigos en lenguaje Python. En primer lugar, los códigos que generan y diagonalizan la matriz Hamiltoniano, uno para el oscilador cuártico y otro para cada Hamiltoniano del modelo de Lipkin-Meshkov-Glick. En el caso del oscilador cuártico, además, se añadirá una función para alcanzar la convergencia entre autovalores aumentando la dimensión de la base truncada de oscilador armónico. Se han escrito códigos para calcular y representar el potencial y las funciones de onda del oscilador cuártico. Además, también se han preparado códigos para el cálculo y representación de los diagramas de energía, parámetros de orden y las magnitudes relacionadas con las QPTs y ESQPTs.

1.3 Objetivos

El objetivo principal de este trabajo consiste en analizar y comparar las transiciones de fase cuánticas que se presentan en dos sistemas cuánticos diferentes: el oscilador cuártico y el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick. En ambos casos se analizarán las QPTs y ESQPTs. Así mismo, se aplicarán los códigos preparados a distintos casos de los dos sistemas estudiados y se mostrarán ejemplos de QPTs y

1. Introducción

ESQPTs de primer y segundo orden y de sus ESQPTs asociadas.

Metodología

En este capítulo se describirán los métodos utilizados en este trabajo para el estudio de las transiciones de fase cuánticas. Por un lado, se explicará el enfoque y los cálculos realizados para el análisis del oscilador cuártico. Este potencial presenta distintas formas en función de los valores que tomen los parámetros de control.

Por otra parte, se describirá el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick (LMG), donde se acoplan sistemas de dos niveles cuánticos con una interacción de largo alcance. En él se analizarán las transiciones de fase para dos Hamiltonianos, uno más general y otro con una corrección anarmónica.

Para el estudio de las transiciones de fase cuánticas, se analizarán algunas magnitudes que permiten identificarlas y caracterizarlas, así como descubrir qué caracteriza a los autoestados más cercanos a la energía crítica de las transiciones estudiadas. Se han estudiado la densidad de niveles, la razón de participación, la diferencia de energía entre niveles o la fidelidad cuántica y la susceptibilidad.

2.1 Oscilador cuártico

El oscilador cuártico se caracteriza por presentar uno o dos mínimos, dependiendo de los valores asignados a los parámetros de control. Cuando el potencial es puramente cuártico y presenta un solo mínimo, la estructura es similar a la del oscilador armónico, pero con un fondo más plano. Cuando el parámetro que afecta al término cuadrático es negativo, el potencial presenta dos mínimos que pueden ser simétricos o asimétricos dependiendo de los parámetros cúbico y lineal. Este potencial, también llamado de sombrero mexicano o de botella de champán, constituye uno de los ejemplos más claros de ruptura espontánea de la simetría, con aplicaciones en múltiples campos [10, 11]. Recientemente, este tipo de potenciales se ha utilizado, por ejemplo, para modelar el proceso de isomerización en moléculas como el HCN [12].

La función de potencial cuártico estudiada en este trabajo es de la forma:

$$V(x) = A_4x^4 + A_3x^3 + A_2x^2 + A_1x . \quad (2.1)$$

El comportamiento de esta función según el valor de los parámetros de control A_1 , A_2 , A_3 y A_4 , con $A_4 > 0$, puede estudiarse utilizando la Teoría de las Catástrofes [13], que asocia a este tipo de potenciales

una catástrofe en cúspide con transiciones de fase de estado fundamental de primer y segundo orden. La forma reducida de esta función puede obtenerse mediante la transformación de Tschirnhaus [14], es decir, haciendo el cambio de variable $x = z - \frac{A_3}{4A_4}$:

$$W(z) = z^4 + az^2 + bz \quad (2.2)$$

con:

$$a = \frac{A_2}{A_4} - \frac{3A_3^3}{8A_4^2},$$

$$b = \frac{A_1}{A_4} + \frac{A_2A_3}{2A_4^2} + \frac{A_3^3}{8A_4^3} \text{ y}$$

$$W(z) = \frac{V(x)}{A_4} + \frac{A_1A_3}{4A_4^2} + \frac{3A_3^4}{256A_4^4} - \frac{A_2A_3^2}{16A_4^3}$$

De esta forma se elimina el término cúbico y la forma del potencial queda en función de solo dos parámetros a y b . De acuerdo con la Teoría de las Catástrofes, esta expresión simplificada del potencial presenta la misma fenomenología que el potencial de la Ec. (2.1) con $A_4 > 0$ y se le asocia la catástrofe elemental en cúspide (o en fruncido). Esta catástrofe se denota, dentro de la clasificación de las posibles catástrofes, como catástrofe A_3 y lleva asociado un potencial igual al de la Ec. (2.2) [13]. Para encontrar los puntos críticos del potencial (2.2), se iguala a 0 su primera derivada:

$$\frac{dW(z)}{dz} = 4z^3 + 2az + b \quad (2.3)$$

El estudio y clasificación de los puntos críticos en el potencial cuártico de este trabajo puede realizarse empleando el método de Cardano [15]. Si partimos de la forma reducida del potencial cuártico (2.2), la ecuación que hay que resolver para encontrar las raíces de la primera derivada es de la forma:

$$z^3 + pz + q = 0, \quad (2.4)$$

donde, para simplificar el cálculo, se ha dividido entre 4 la Ec. (2.3) y, entonces, $p = \frac{1}{2}a$ y $q = \frac{1}{4}b$. El discriminante, Δ , viene dado por:

$$\Delta = \left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3 \quad (2.5)$$

- Si $\Delta > 0$: la ecuación tiene una solución real y dos complejas.
- Si $\Delta = 0$: si $p = q = 0$, la ecuación tiene un única solución real triple $z = 0$. Si no, la ecuación tiene dos soluciones reales, una simple y una doble.
- Si $\Delta < 0$: la ecuación tiene tres soluciones reales.

Del valor de p y q , relacionados con los parámetros de control del potencial (a y b), depende la forma que adoptará el potencial, como se puede ver en la figura 2.1.

En las siguientes subsecciones se procederá a formular el problema cuántico del oscilador cuártico en una dimensión, así como su resolución usando el método de segunda cuantización y una base de oscilador armónico.

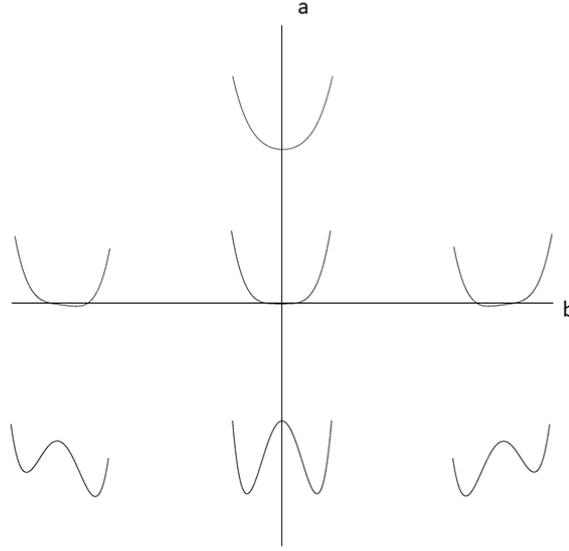


Figura 2.1: Formas del potencial cuártico según los parámetros a y b de la Ec. (2.2) [13].

2.1.1 Hamiltoniano

El operador Hamiltoniano para el potencial cuártico es:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2M} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + \left(A_4 x^4 + A_3 x^3 + A_2 x^2 + A_1 x \right), \quad (2.6)$$

con el conmutador $[x, p] = i\hbar$ y donde se asume $M = Km$, con m como unidad de masa en las unidades de interés y K como parámetro adimensional. Se definen las unidades de coordenada y momento adimensionales como $X = \frac{x}{\lambda_0} = \left(\frac{8mA_4}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{6}} x$ y $P = \left(\frac{\lambda_0}{\hbar} \right) p = \left(\frac{1}{8mA_4\hbar^4} \right)^{\frac{1}{6}} p$, con $\lambda_0 = \left(\frac{\hbar^2}{8mA_4} \right)^{\frac{1}{6}}$ [8]. Reescribiendo el Hamiltoniano (2.6) en términos de la coordenada X y el momento P , se obtiene:

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv \frac{\hat{H}}{\epsilon_0} = \frac{4P^2}{K} + X^4 + B_3 X^3 + B_2 X^2 + B_1 X, \quad (2.7)$$

donde se ha normalizado con la escala de energía del problema, $\epsilon_0 = \left(\frac{A_4\hbar^4}{64m^2} \right)^{\frac{1}{3}}$, y se han redefinido los parámetros del potencial como $B_3 = A_3 \left(\frac{8m}{A_4^5\hbar^2} \right)^{\frac{1}{6}}$, $B_2 = 2A_2 \left(\frac{m}{A_4^2\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}}$, y $B_1 = 2A_1 \left(\frac{2m}{A_4\hbar^{2/3}} \right)^{\frac{1}{2}}$.

2.1.2 Segunda cuantización

Con el objetivo de resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el Hamiltoniano propuesto (2.7) usando la base de oscilador armónico monodimensional, es conveniente trabajar usando el formalismo de segunda cuantización, introduciendo los operadores de creación y aniquilación u

operadores escalera: a^\dagger y a . El Hamiltoniano para el oscilador armónico en una dimensión es:

$$\hat{H}_{HO} = \frac{p^2}{2m} + V_{HO}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 . \quad (2.8)$$

La unidad natural de energía para el oscilador armónico es $\hbar\omega$ y la unidad natural de longitud es $\lambda'_0 = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}$. Definiendo la unidad adimensional de la coordenada como $y = x/\lambda'_0$, el Hamiltoniano del oscilador armónico (2.8) se transforma en:

$$\hat{\mathcal{H}}_{HO} = \frac{\hat{H}_{HO}}{\hbar\omega} = -\frac{d^2}{2dy^2} + \frac{1}{2}y^2 , \quad (2.9)$$

y las funciones de onda del oscilador armónico se expresan como:

$$\langle y|n\rangle = \psi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \pi^{-\frac{1}{4}} H_n(y) e^{-\frac{y^2}{2}} , \quad (2.10)$$

donde $H_n(y)$ son los polinomios de Hermite.

Para usar el formalismo en segunda cuantización se pueden introducir los operadores de creación y aniquilación como:

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y - \frac{d}{dy} \right) , \quad a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(y + \frac{d}{dy} \right) , \quad (2.11)$$

con el conmutador $[a, a^\dagger] = 1$, y cuya acción en los elementos de la base de oscilador armónico, $|n\rangle$, es [16, 17]:

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle . \quad (2.12)$$

La introducción de estos operadores de creación y aniquilación transforman el Hamiltoniano del oscilador armónico (2.9) en:

$$\hat{\mathcal{H}}_{HO} = \frac{\hat{H}_{HO}}{\hbar\omega} = \hat{n} + \frac{1}{2} . \quad (2.13)$$

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, Ec. (2.7), puede resolverse usando una base truncada de oscilador armónico de dimensión D , $\{|n\rangle\}$, con $n=0, \dots, D-1$. De acuerdo a las referencias [4, 18], el parámetro K introducido en la energía cinética permite alcanzar el límite clásico para valores grandes de K , ya que estos implican que la masa del sistema es muy grande -o que la constante de Planck es cero- eliminando la contribución del término de energía cinética del Hamiltoniano. Para transformar el Hamiltoniano del potencial cuántico (2.7) a su expresión en segunda cuantización, se deben tener en cuenta las variables adimensionales definidas anteriormente: $X = x/\lambda_0$ y $y = x/\lambda'_0$. Así, se define $X = \xi y$, con $\xi = \lambda'_0/\lambda_0$. Si se reescribe, entonces, el Hamiltoniano para el oscilador cuántico (2.7) en segunda cuantización se obtiene:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & E_0 + \left(\frac{4}{K\xi^2} + 3\xi^4 + B_2\xi^2 \right) \hat{n} + \frac{\xi^4}{4} (a^{\dagger 4} + a^4) + \frac{3\xi^4}{2} a^{\dagger 2} a^2 + \xi^4 (a^\dagger a^3 + a^{\dagger 3} a) \\ & + \frac{B_3\xi^3}{2\sqrt{2}} (a^{\dagger 3} + a^3 + 3a^{\dagger 2} a + 3a^\dagger a^2) + \frac{-4K^{-1}\xi^{-2} + 3\xi^4 + B_2\xi^2}{2} (a^{\dagger 2} + a^2) \\ & + \left(\frac{B_1\xi}{\sqrt{2}} + \frac{3B_3\xi^3}{2\sqrt{2}} \right) (a^\dagger + a), \end{aligned} \quad (2.14)$$

donde la energía en el punto cero es $E_0 = \frac{2}{K\xi^2} + \frac{3\xi^4}{4} + \frac{B_2\xi^2}{2}$.

2. Metodología

Esta expresión del Hamiltoniano permite escribirlo como una matriz cuyos elementos no nulos diagonales y de las diagonales inferiores son:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{n,n} &= \left(\frac{4}{K\xi^2} + 3\xi^4 + B_2\xi^2 \right) n + \frac{3\xi^4}{2} n (n-1) + \frac{4}{K\xi^2} + \frac{3\xi^4}{2} + \frac{B_2\xi^2}{2} \\
 \mathcal{H}_{n,n-1} &= \frac{B_1\xi}{\sqrt{2}} + \frac{3B_3\xi^3}{2\sqrt{2}}\sqrt{n} + \frac{3B_3\xi^3}{\sqrt{8}} (n-1) \sqrt{n} \\
 \mathcal{H}_{n,n-2} &= \left(-\frac{2}{K\xi^2} + \frac{3B_3\xi^3}{\sqrt{8}} \right) \sqrt{n(n-1)} \\
 \mathcal{H}_{n,n-3} &= \frac{B_3\xi^3}{\sqrt{8}} \sqrt{n(n-1)(n-2)} \\
 \mathcal{H}_{n,n-4} &= \frac{\xi^4}{4} \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)}.
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

El cálculo de los autovalores y autofunciones del oscilador cuártico en segunda cuantización (2.14), así como las funciones de onda de sus estados, $\Psi(X)$, se calculan diagonalizando la matriz hamiltoniana y expresando los resultados en función de la base:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi(X) = \epsilon\Psi(X), \quad \Psi(X) = \sum_{i=1}^D c_i\psi_i(X). \tag{2.16}$$

A priori, la representación matricial del Hamiltoniano debería tener dimension infinita, sin embargo, para realizar los cálculos, es necesario definir un valor para la dimensión, D , que sea finito. Se han preparado códigos en lenguaje Python con el fin de realizar estos cálculos. Por un lado, se preparó un código que calcula la matriz y la diagonaliza. Este mismo código puede analizar la convergencia de los autovalores y aumentar la dimension D hasta alcanzar la tolerancia deseada. Por otra parte, se preparó otro código que calcula las funciones de onda del oscilador cuártico en función de la base de oscilador armónico.

2.2 Modelo de Lipkin-Meshkov-Glick

El modelo de Lipkin-Meshkov-Glick (LMG) describe un conjunto de N partículas de espín $s = \frac{1}{2}$ (fermiones), repartidos en dos niveles de energía con una cierta separación (ϵ), y con N huecos cada uno. Al estado de menor energía se le asocia el número cuántico $\sigma = -1$ y al de mayor energía $\sigma = 1$. Etiquetamos cada a partícula con un índice $p = 1, \dots, N$. Así, cada valor de p puede corresponderse con dos estados, uno en la capa inferior y otro en la capa superior. Este modelo se introdujo originalmente en estudios de estructura nuclear como un modelo simplificado para comprobar la validez de aproximaciones que se venían usando en el campo de la estructura nuclear [7, 19]. Más recientemente, ha servido para el estudio de numerosos fenómenos en el campo de las QPTs [20–28].

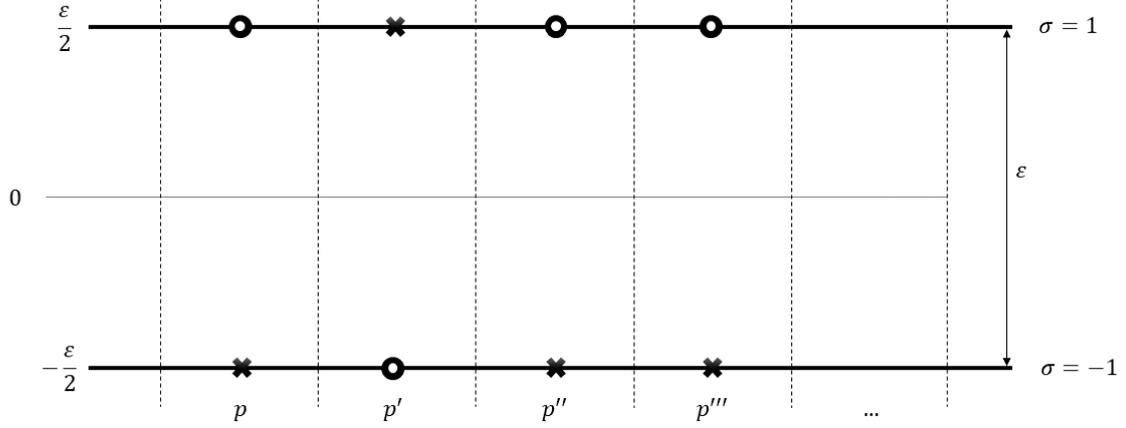


Figura 2.2: Esquema del modelo de Lipkin-Meshkov-Glick [7]

El Hamiltoniano general del modelo de Lipkin es [7]:

$$H = \frac{1}{2}\epsilon \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma} + \frac{1}{2}V \sum_{pp'\sigma} a_{p\sigma}^\dagger a_{p'\sigma}^\dagger a_{p'-\sigma} a_{p-\sigma} + \frac{1}{2}W \sum_{pp'\sigma} a_{p\sigma}^\dagger a_{p'-\sigma}^\dagger a_{p'\sigma} a_{p-\sigma}, \quad (2.17)$$

donde $a_{p\sigma}^\dagger$ y $a_{p\sigma}$ son los operadores de creación y destrucción, respectivamente, de la partícula p en el nivel σ . El primer término calcula la energía total por la situación de cada partícula en su nivel correspondiente. El segundo y tercer término introducen interacciones de largo alcance entre pares de partículas. Como cada partícula tiene solamente dos estados posibles, puede usarse la formulación de quasi-espín:

$$S_+ = \sum_p a_{p+1}^\dagger a_{p-1}, \quad S_- = \sum_p a_{p-1}^\dagger a_{p+1}, \quad S_z = \frac{1}{2} \sum_{p\sigma} \sigma a_{p\sigma}^\dagger a_{p\sigma}. \quad (2.18)$$

En la formulación de quasi-espín, el Hamiltoniano (2.17) se expresa como:

$$H = \epsilon \hat{S}_z + \frac{1}{2}V(S_+^2 + S_-^2) + \frac{1}{2}W(S_+S_- + S_-S_+). \quad (2.19)$$

Este Hamiltoniano puede estudiarse en una versión más simplificada, suponiendo que $V=W$. En las siguientes subsecciones, se describen los dos Hamiltoniano estudiados en este trabajo. El primero, un modelo de Lipkin simplificado donde se toman $V = W = \frac{-2\xi}{S}$ y $\epsilon = 1 - \xi$, y donde el parámetro de control para el estudio de las transiciones de fase es ξ . El segundo, un modelo equivalente al primero pero al que se añade un término anarmónico en función de otro parámetro de control, α .

2.2.1 Modelo simplificado

En primer lugar, se estudiará el Hamiltoniano del modelo simplificado, que presenta una transición de fase cuántica de segundo orden y una transición de fase cuántica de estado excitado asociada:

$$\hat{H}_0^{LMG} = (1 - \xi)(\hat{S}_z + S) - \frac{2\xi}{S}\hat{S}_x^2, \quad (2.20)$$

donde \hat{S}_x y S_z son las componentes x y z de espín, respectivamente. El parámetro $\xi \in [0, 1]$ es el parámetro de control responsable de trasladar al sistema de una fase a otra. El espín total S cumple $S = \frac{N}{2}$, donde N es el número de partículas. Los momentos angulares siguen la conocida regla de conmutación:

$$[\hat{S}_\alpha, \hat{S}_\beta] = i \epsilon_{\alpha,\beta,\gamma} \hat{S}_\gamma, \quad (2.21)$$

y los operadores escalera \hat{S}_+ y \hat{S}_- se definen como:

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y, \quad (2.22)$$

donde los operadores de espín actúan sobre la base $|S, m_S\rangle$ como [29]:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z|S, m_S\rangle &= m_S|S, m_S\rangle \\ \hat{S}_+|S, m_S\rangle &= \sqrt{S(S+1) - m_S(m_S+1)}|S, m_S+1\rangle \\ \hat{S}_-|S, m_S\rangle &= \sqrt{S(S+1) - m_S(m_S-1)}|S, m_S-1\rangle. \end{aligned} \quad (2.23)$$

El Hamiltoniano (2.20) puede escribirse en función de los operadores de espín como:

$$\hat{H}_0^{LMG} = (1 - \xi)(\hat{S}_z + S) - \frac{\xi}{N}(\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2 + 2\hat{S}_+\hat{S}_- - 2\hat{S}_z), \quad (2.24)$$

Así, el Hamiltoniano, como ocurría con el oscilador cuártico, puede escribirse en forma matricial, donde los elementos no nulos diagonales y de la diagonal inferior son:

$$\begin{aligned} \langle S, m_S | \hat{H}_{LMG}^0 | S, m_S \rangle &= (1 - \xi)(m_S + S) + \frac{\xi m_S}{S} - \frac{\xi}{S}(S(S+1) - m_S(m_S-1)) \\ \langle S, m_S | \hat{H}_{LMG}^0 | S, m_S - 2 \rangle &= -\frac{\xi}{2S} \sqrt{S(S+1) - S m_S(m_S-1)(S+1) - (m_S-1)(m_S-2)} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Para el cálculo de valores y vectores propios de este Hamiltoniano, se preparó un código en Python donde, de forma similar a lo presentado para el oscilador cuártico, se escriben las diagonales principal y segunda de la matriz hamiltoniana y se diagonaliza. En este caso, la matriz tiene una dimensión finita $D = N + 1$ y no es necesario llevar a cabo un análisis de convergencia.

2.2.2 Modelo anarmónico

En el siguiente Hamiltoniano se incluye, además de ξ , otro parámetro de control, α , que está asociado con una corrección anarmónica que crea una segunda ESQPT:

$$\hat{H}_1^{LMG} = (1 - \xi)(\hat{S}_z + S) + \frac{\alpha}{2S}(\hat{S}_z + S)(\hat{S}_z + S + 1) + \frac{2\xi}{S}(S^2 - \hat{S}_x^2). \quad (2.26)$$

Los elementos de matriz no nulos diagonales y diagonales inferiores son:

$$\begin{aligned} \langle S, m_S | \hat{H}_{LMG}^1 | S, m_S \rangle &= (1 - \xi)(m_S + S) + \frac{\xi m_S}{S} - \frac{\xi}{S}(S(S+1) - m_S(m_S - 1)) + \alpha \left(\frac{m_S^2 + m_S}{2S} + m_S + \frac{5}{8S} \right) \\ \langle S, m_S | \hat{H}_{LMG}^1 | S, m_S - 2 \rangle &= -\frac{\xi}{2S} \sqrt{(S(S+1) - m_S(m_S - 1))(S(S+1) - (m_S - 1)(m_S - 2))} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Las matrices, tanto (2.25) como (2.27) pueden separarse por paridad: cada estado está relacionado con él mismo y con los niveles que están dos estados por encima o por debajo de él. Esto hace posible disminuir la dimensión de la matriz Hamiltoniano separándola en dos bloques de distinta paridad. Los programas preparados en Python para la diagonalización de estas matrices tienen la función de escribirlas y diagonalizarlas separando, si así se indica, los niveles por paridad.

2.3 Magnitudes para la identificación de las transiciones de fase

A continuación se describirán algunas magnitudes que han demostrado su utilidad a la hora de identificar los puntos críticos tanto de las transiciones de fase de estado fundamental y de estados excitados.

2.3.1 Razón de participación

De la diagonalización del Hamiltoniano, se obtienen los autovalores y autovectores correspondientes. Los autovectores pueden usarse para calcular la razón de participación (en inglés, *inverse participation ratio*, IPR). Esta magnitud da una idea de la localización o deslocalización de un estado propio de ese Hamiltoniano en la base utilizada, es decir, qué tan repartido está el autovector en cuestión entre los elementos de la base. De un estado más localizado se obtendrá un valor de IPR más bajo, mientras que de un estado más mezclado se obtendrán valores mayores de IPR. La IPR se calcula como [30]:

$$IPR = \frac{1}{\sum_i |c_i^{(k)}|^4} \quad (2.28)$$

donde $c_i^{(k)}$ son las componentes del autovector de un estado, k , dado sobre la base usada. Dado que estos autovectores están normalizados, la suma $\sum_i |c_i|^2 = 1$. Entonces, para un estado puro, o con contribución de un único elemento de la base, el valor de $IPR = 1$. Un estado totalmente deslocalizado, es decir, sobre el que cada elemento de la base tiene la misma contribución, tendría el valor máximo de IPR, $IPR = D$, donde D es la dimensión de la base. Recientemente se ha demostrado que el estudio de la IPR caracteriza las transiciones de fase de estado excitado ya que, para bases que cumplen ciertas características, la IPR muestra cómo los autoestados cercanos a la energía crítica están particularmente localizados [31–33].

2.3.2 Densidad de niveles

La densidad de niveles se define como:

$$\nu(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dP \int_{-\infty}^{\infty} dX \delta(E - H(P, X)), \quad (2.29)$$

donde $H(P, X)$ es el Hamiltoniano del sistema estudiado en cada caso. En esta ecuación se puede tomar en cuenta la propiedad de composición de la función delta de Dirac [34]:

$$\delta(g(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|}. \quad (2.30)$$

donde los puntos x_i son las raíces de la función $g(x)$.

En el caso particular del oscilador cuártico estudiado en este trabajo, Ec. (2.7), puede obtenerse la densidad de niveles como:

$$\nu(E) = \frac{\sqrt{K}}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dX}{\sqrt{E - X^4 - B_3 X^3 - B_2 X^2 - B_1 X}}. \quad (2.31)$$

Esta integral puede resolverse numéricamente para los valores de $E \geq X^4 + B_3 X^3 + B_2 X^2 + B_1 X$ y darle valor 0 en el resto de puntos, que se encontrarían fuera de la curva de potencial. Con esto se obtiene una función que puede predecir la densidad de niveles según los valores de los parámetros.

Por otra parte, puede calcularse la densidad de niveles a partir de las energías de los estados obtenidas mediante la diagonalización del Hamiltoniano. En primer lugar, se obtienen los autovalores correspondientes al Hamiltoniano estudiado en cada caso con los programas de diagonalización. De estos, se consideran un número N de niveles de energía, $\{E_j\}_{j=1}^N$, y se seleccionan en este intervalo n valores equiespaciados, $\{\epsilon_i\}_{i=1}^n$. La densidad de niveles de energía se calculará como:

$$\rho_s(\epsilon_i) = \frac{2s + 1}{E_{j+s} - E_{j-s}}, \quad (2.32)$$

donde s es un número entero de E_j vecinos en torno a cada valor de ϵ_i . De esta forma, se obtiene la representación de la densidad de estados en cada zona del espectro de energía, donde podrá analizarse cómo cambia esta densidad en las zonas de los puntos críticos para las transiciones de fase cuántica.

En el caso del modelo de Lipkin-Meskov-Glick, se analizará la densidad de estados únicamente con la Ec. (2.32).

2.3.3 Fidelidad cuántica y susceptibilidad

Para calcular la fidelidad cuántica [9] se parte de los autovectores de sistema. Con estos autovectores, puede calcularse el solapamiento entre dos autoestados para los que el parámetro de control ha sido levemente modificado. La fidelidad cuántica se define como el módulo de este solapamiento:

$$\mathcal{F}(\xi) = |\langle \psi_0(\xi) | \psi_0(\xi + \delta\xi) \rangle|, \quad (2.33)$$

donde $\psi_0(\xi)$ es el autovector del estado fundamental obtenido mediante la diagonalización del Hamiltoniano. El parámetro de control tiene un valor ξ , y $\psi_0(\xi + \delta\xi)$ es el autovector del estado fundamental cuando se perturba el Hamiltoniano con $\delta\xi$. Cuando los autovectores están normalizados, como en nuestro caso, la fidelidad cuántica entre autovectores idénticos vale 1, y es más baja conforme aumenta la diferencia existente entre los autovectores tomados para su cálculo. Así, para un valor pequeño de $\delta\xi$, conforme aumenta el valor de ξ , la fidelidad se mantiene cercana a la unidad hasta alcanzar los

2.3. Magnitudes para la identificación de las transiciones de fase

puntos críticos, donde una pequeña variación del parámetro de control provoca grandes cambios en los autoestados.

La susceptibilidad de la fidelidad , $S(\xi)$, es el término de segundo orden del desarrollo en serie de la fidelidad como función de $\delta\xi$ [9]. La susceptibilidad es máxima en los puntos críticos y también identifica las QPTs. Una forma de obtener la susceptibilidad es:

$$S(\xi) = \frac{2(1 - \mathcal{F}(\xi))}{\delta\xi^2}, \quad (2.34)$$

Resultados y discusión

A continuación, se presentan los resultados obtenidos para los dos modelos estudiados. Además de las energías y las funciones de onda de los estados, se calcularon también la razón de participación, la densidad de niveles, la fidelidad cuántica y su susceptibilidad asociada, y la diferencia de energía entre estados consecutivos. Todas estas cantidades ayudan a identificar los puntos críticos y las transiciones de fase cuántica en el oscilador cuártico y el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick. Todos los códigos desarrollados se han realizado usando Python, en concreto el Python suministrado por Anaconda [35], las librerías NumPy [36] y SciPy [37]. Las gráficas se han realizado con Matplotlib [38].

3.1 Transiciones de Fase Cuánticas del oscilador cuártico

En esta sección se muestran los resultados obtenidos en el estudio del oscilador cuártico con Hamiltoniano (2.7):

$$\hat{\mathcal{H}} \equiv \frac{\hat{H}}{\epsilon_0} = \frac{4P^2}{K} + X^4 + B_3 X^3 + B_2 X^2 + B_1 X .$$

Para los cálculos llevados a cabo en esta parte del trabajo, se prepararon varios programas en lenguaje Python, que se incluyen en el Apéndice B. Un primer programa de diagonalización (Apéndice B.1) escribe la matriz Hamiltoniano según las ecuaciones (2.15) en función de los parámetros B_1 , B_2 , B_3 , ξ y K y obtiene las autoenergías y autofunciones para una dimensión dada, D . En este mismo programa, se incluye una función que va aumentando la dimensión de la matriz hasta alcanzar convergencia en los autovalores para una tolerancia dada. Además, el programa puede calcular los autoestados separados por paridad siempre que el potencial sea simétrico, es decir, tenga un solo mínimo ($B_2 \geq 0$, $B_1 = B_3 = 0$) o dos mínimos simétricos ($B_2 < 0$, $B_1 = B_3 = 0$).

Con el programa de cálculo de las funciones de onda (Apéndice B.2) se representan gráficamente las densidades de probabilidad de cada autoestado, $|\psi|^2$, a partir de la Ec. (2.16), así como el potencial, en función de ξ y K y de los parámetros de control B_1 , B_2 y B_3 .

Para un potencial con $B_3 = 0$:

$$V(X) = X^4 + B_2 X^2 + B_1 X, \quad (3.1)$$

los puntos en los que la primera y segunda derivada del potencial se igualan a 0, cumplen la siguiente relación:

$$16 B_2^3 + 57 B_1^2 = 0 \quad (3.2)$$

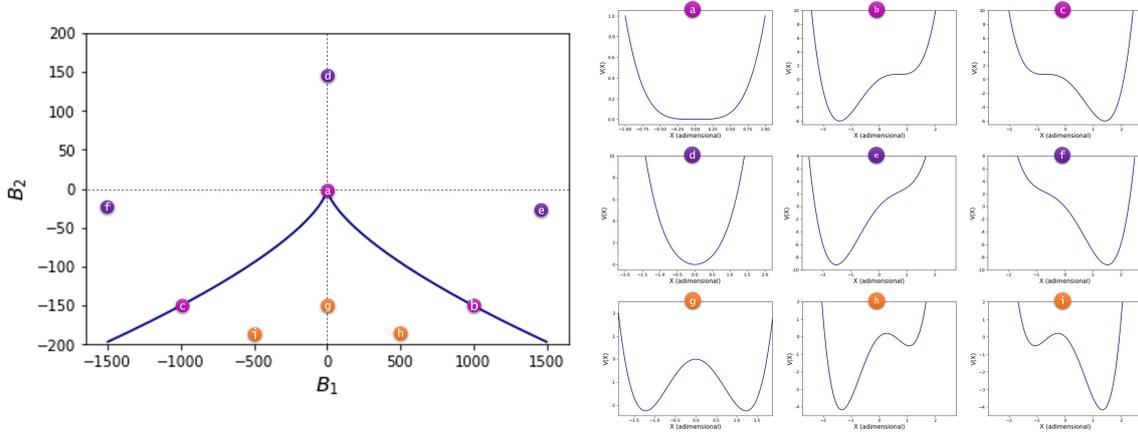


Figura 3.1: A la izquierda, el diagrama de fases de potencial cuártico con $B_3 = 0$. La curva en azul viene dada por la Ec. (3.2), delimitando las distintas regiones con diferentes formas del potencial. A la derecha, las distintas formas del potencial marcadas en el diagrama de fases. Los valores de los parámetros (B_1, B_2) son: (a)(0,0), (b)(2.83,-3), (c)(-2.83,-3), (d)(0,3), (e)(5,-3), (f)(-5,-3), (g)(0,-3), (h)(1.5,-3), (i)(-1.5,-3).

Esta función, que define las diferentes fases de la catástrofe en cúspide, permite distinguir las posibles formas que el potencial puede tener de acuerdo al intervalo de valores de B_1 y B_2 . En los puntos que pertenecen a la Ec. (3.2) y por encima de estos, el potencial tiene un solo mínimo, y por debajo de la función aparecen dos mínimos que pueden ser simétricos cuando $B_1 = 0$, o asimétricos con $B_1 \neq 0$. A la izquierda, en la figura 3.1, la Ec. (3.2) viene representada con una línea azul. Los puntos de la (a) a la (i) de esta gráfica indican las formas del potencial en función de los parámetros B_1 y B_2 , representados en los paneles a la derecha de la figura 3.1. El punto (a) se corresponde con un potencial cuártico puro, con un único mínimo de fondo plano. En el punto (d) se representa un potencial que también tiene un único mínimo, pero más parecido al potencial del oscilador armónico. El punto (g) presenta dos mínimos simétricos. Los puntos (b) y (c), que pertenecen a la Ec. (3.2), presentan un único mínimo pero con un punto de silla en $X = 0$, con distinta orientación dependiendo de si B_1 es positivo o negativo. Los puntos (e) y (f), que están por encima de la Ec. (3.2), presentan también un solo mínimo. Finalmente, los puntos (h) e (i), por debajo de la Ec. (3.2), presentan un doble mínimo asimétrico.

3.1.1 Transiciones de Fase Cuánticas de Estado Fundamental

Considerando el Hamiltoniano (2.7) con $B_3 = 0$, puede representarse la energía de los estados frente a los parámetros de control B_1 y B_2 . Para hacer estas representaciones se utilizó el programa de diagonalización B.1 y se buscó la convergencia en los autovalores con una tolerancia de 10^{-4} en unidades de energía adimensionales. El estudio de estas gráficas se hace considerando dos trayectorias dentro del diagrama de fases mostradas en la figura 3.2. En la trayectoria naranja, se mantiene constante el parámetro B_1 y se analiza la QPT de segundo orden para la variación del parámetro de control B_2 .

3. Resultados y discusión

En la trayectoria morada se mantiene constante el parámetro B_2 y se analiza la QPT de primer orden para la variación del parámetro de control B_1 .

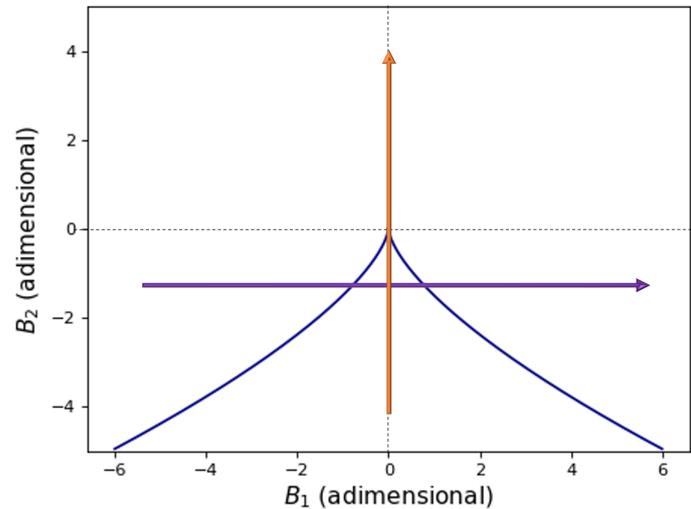


Figura 3.2: Trayectorias en el diagrama de fases del oscilador cuártico estudiadas para la transición de fase de segundo orden (en naranja) y para la transición de fase de primer orden (en morado).

3.1.1.1 Transición de Fase de Primer Orden

Siguiendo la trayectoria morada de la figura 3.2, se mantiene constante el parámetro B_2 y se varía el parámetro B_1 . En la figura 3.3 se muestra la dinámica de los niveles del potencial cuártico con término cuadrático negativo, $B_2 = -1$, donde aparece la transición de fase de primer orden al variar B_1 , el parámetro del control en este caso. La variación del coeficiente del término lineal B_1 desplaza la barrera de potencial entre los pozos cuando $B_2 < 0$. A lo largo de esta trayectoria, el potencial pasa de ser una función asimétrica con un único mínimo, a tener dos mínimos asimétricos. Cuando $B_1 = 0$, el potencial presenta dos mínimos simétricos. A partir de este punto, el potencial vuelve a transformarse en una función asimétrica, primero con dos mínimos y finalmente con un solo mínimo. Cuando el potencial recupera el doble mínimo simétrico, con $B_1 = 0$, el estado fundamental cambia su pendiente abruptamente, formando un pico que hace discontinua su primera derivada, que es lo esperado en una transición de fase de primer orden. Esto se debe a que para $B_1 = 0$ hay coexistencia de dos mínimos equivalentes y, al atravesar este punto, dependiendo del sentido, el mínimo pasa de estar a la derecha del origen a la izquierda del mismo, o viceversa.

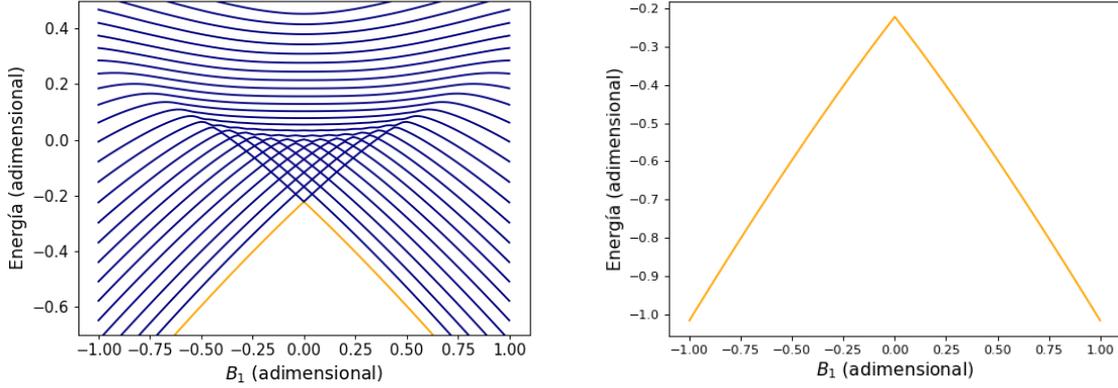


Figura 3.3: A la izquierda: diagrama de energía del oscilador cuártico para el parámetro de control B_1 . Con valores de los parámetros $B_2 = -1$ y $K = 10000$ y dimensión de la matriz $D = 1920$. A la derecha, la línea naranja corresponde a la energía del estado fundamental.

La transición de fase de primer orden tiene lugar en la zona donde la primera derivada de la energía respecto del parámetro de control, en este caso B_1 , presenta una discontinuidad. Para observar este hecho, se puede representar la primera derivada de la energía del estado fundamental respecto a B_1 , $\frac{dE_{gs}}{dB_1}$, calculada numéricamente¹ (Figura 3.4). El valor esperado de la posición, $\langle X \rangle$ (Figura 3.4, a la derecha), se puede considerar como parámetro de orden para esta transición ya que presenta también un cambio a la altura de la transición de fase ($B_1 = 0$) para el estado fundamental.

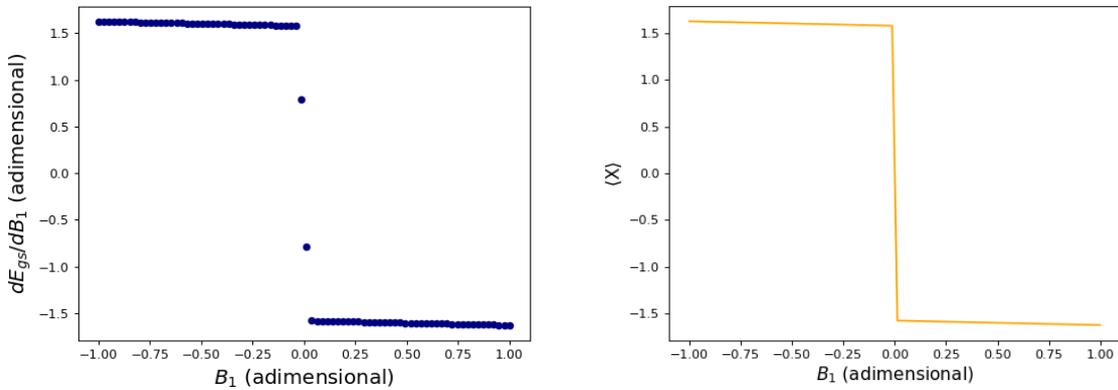


Figura 3.4: A la izquierda, se representa la derivada de la energía del estado fundamental para el oscilador cuártico respecto al parámetro B_1 calculada con $B_2 = -1$, una matriz de dimensión $D = 1920$ y $K = 10000$. A la derecha, se muestra el valor esperado de la posición, $\langle X \rangle$, como parámetro de orden frente a B_1 .

En cuanto a la fidelidad cuántica (\mathcal{F}) y la susceptibilidad de la fidelidad (\mathcal{S}), comentadas en la sección 2.3.3, la transición de fase de primer orden se hace patente al representar la variación de ambas cantidades frente al parámetro B_1 (Figura 3.5). En valores de $B_1 \neq 0$, el solapamiento entre autovectores del estado fundamental para valores diferentes de B_1 , aunque próximos, es prácticamente igual a 1. En $B_1 = 0$, la \mathcal{F} muestra un mínimo y la \mathcal{S} un máximo, que evidencian el cambio abrupto

¹Usando la función *gradient* de Numpy.

3. Resultados y discusión

que experimenta el estado fundamental del sistema en el punto crítico para la transición de fase de primer orden.

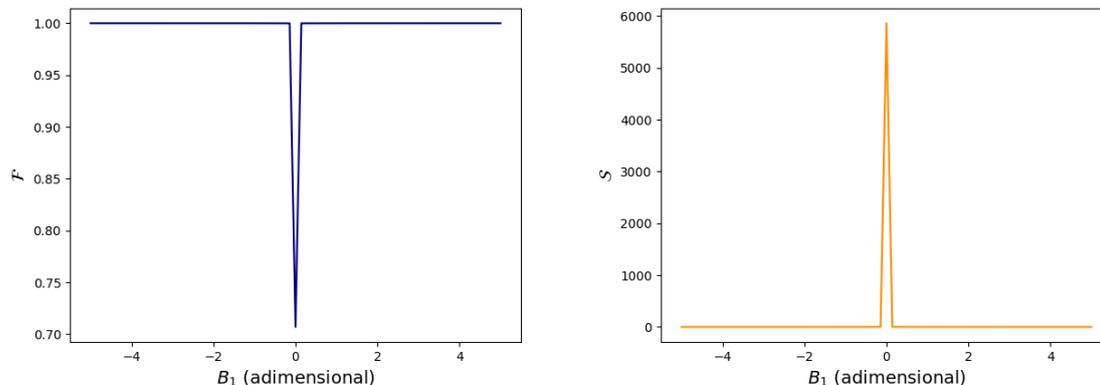


Figura 3.5: Fidelidad cuántica, izquierda, y susceptibilidad asociada, derecha, para la QPT de primer orden en función del parámetro B_1 para el oscilador cuántico. Los valores del resto de parámetros son: $B_2 = -1$, $K = 10000$, $\delta B_1 = 0.01$ y dimensión 1920.

3.1.1.2 Transición de Fase de Segundo Orden

La transición de fase de segundo orden tiene lugar cuando es la segunda derivada de la energía del estado fundamental del sistema la que presenta alguna discontinuidad. En nuestro caso, esto ocurre con la variación del parámetro de control B_2 , siguiendo la trayectoria naranja de la figura 3.2. Variando B_2 de valores negativos a positivos, el potencial (gráfica de la izquierda) se transforma de un doble pozo simétrico a un potencial con un único mínimo (Figura 3.1). En la figura 3.6 se representan las autoenergías del Hamiltoniano (2.7) con valores de $B_1 = B_3 = 0$, en función del parámetro B_2 . La gráfica de la derecha representa la variación de la energía del estado fundamental en función de B_2 . Cuando $B_2 > 0$ el potencial es un doble pozo simétrico y la energía del estado fundamental es negativa, mientras que si $B_2 \leq 0$, el potencial tiene un único mínimo y la energía del estado fundamental toma valores positivos. Se puede observar, cuando $B_2 < 0$, que los estados excitados están degenerados para energías por debajo de la barrera ($E = 0$), desdoblándose para energías positivas. En cambio, si $B_2 \geq 0$, los estados excitados no están degenerados y sus energías toman únicamente valores positivos.

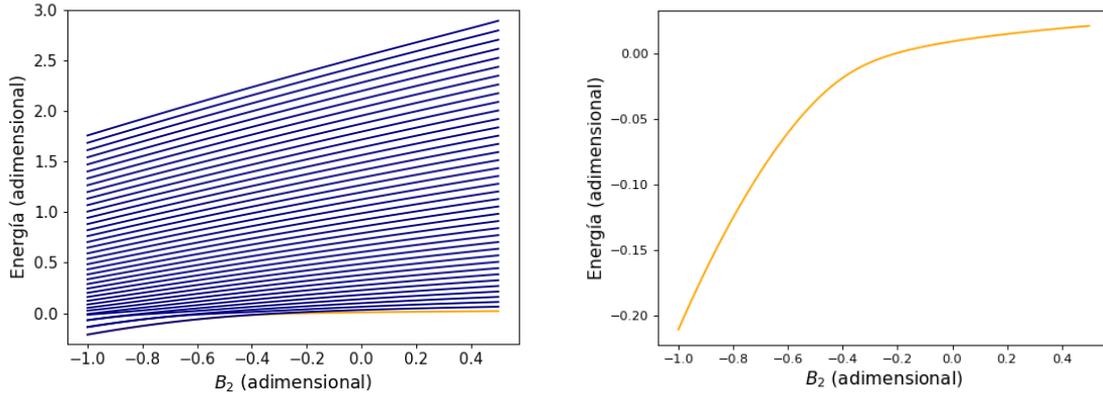


Figura 3.6: A la izquierda, diagrama de energía del oscilador cuártico para el parámetro B_2 . Con valores de los parámetros $B_1 = 0$ y $K = 5000$ y dimensión de matriz $D = 1920$. A la derecha, en naranja, está representado el estado fundamental.

En el caso del potencial cuártico con $B_1 = B_3 = 0$, se pueden comparar la segunda derivada del potencial respecto a B_2 calculada de forma analítica con la obtenida numéricamente a partir de las energías de los autoestados. Para calcular la segunda derivada analíticamente, se iguala a 0 la primera derivada del potencial respecto a X :

$$0 = \frac{dV(X)}{dX} = 4X^3 + 2B_2X, \quad (3.3)$$

para obtener el valor de X en los puntos críticos de la función, $X_c = \pm\sqrt{-\frac{B_2}{2}}$ y $X_c = 0$. Para valores de $B_2 \geq 0$ aparece un mínimo en $X_c = 0$ y, para valores de $B_2 < 0$, este mínimo se convierte en un máximo y los mínimos aparecen en $X = \pm\sqrt{-\frac{B_2}{2}}$. A posteriori, se sustituye este valor de X_c en el potencial y se deriva, ahora respecto a B_2 , para obtener la primera y segunda derivada del potencial y poder compararla con el resultado del cálculo numérico:

$$V'(B_2) = \begin{cases} 0 & \text{si } B_2 \geq 0 \\ -\frac{B_2}{2} & \text{si } B_2 < 0 \end{cases} \quad (3.4)$$

$$V''(B_2) = \begin{cases} 0 & \text{si } B_2 \geq 0 \\ -\frac{1}{2} & \text{si } B_2 < 0 \end{cases}, \quad (3.5)$$

donde se observa la discontinuidad en $B_2 = 0$ para la segunda derivada.

En la figura 3.7, se muestran la primera (a la izquierda) y segunda derivada (a la derecha) del potencial calculadas de forma tanto numérica como analíticamente, con respecto al parámetro B_2 . En la primera derivada, se observa una variación de la pendiente en $B_2 = 0$ que da lugar a la discontinuidad que se observa, para este mismo valor, en la segunda derivada.

3. Resultados y discusión

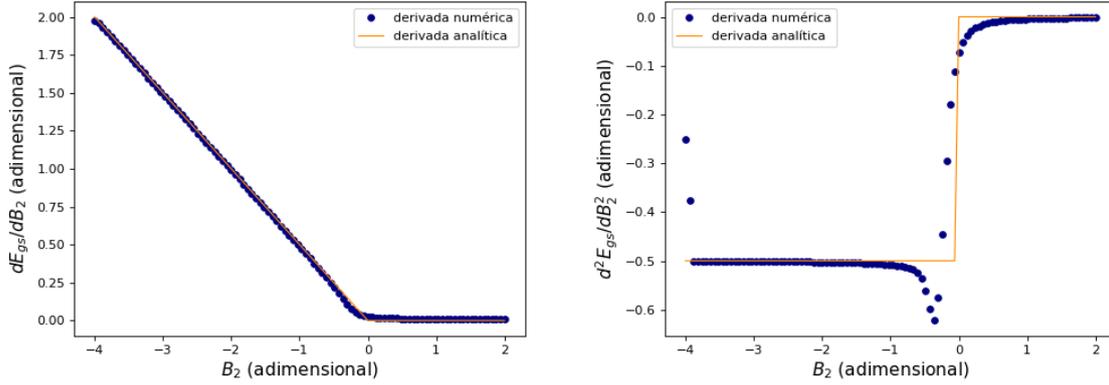


Figura 3.7: Comparación del cálculo numérico (puntos azules) y analítico (línea naranja) de la primera (gráfica izquierda) y la segunda derivada (gráfica derecha) de la energía del estado fundamental con respecto al parámetro de control B_2 del oscilador cuártico con $B_1 = 0$. Los valores de los parámetros utilizados son $K = 10000$ y dimensión 1000.

En esta QPT de segundo orden, se puede representar también el valor esperado de la posición, $\langle X \rangle$ como parámetro de orden (Figura 3.8), que también presenta un cambio abrupto a la altura del punto crítico de la QPT, $B_2 = 0$. Se puede observar que para valores de $B_2 < 0$ los estados pueden estar localizados en un pozo u otro del potencial, siendo este un claro ejemplo de bifurcación.

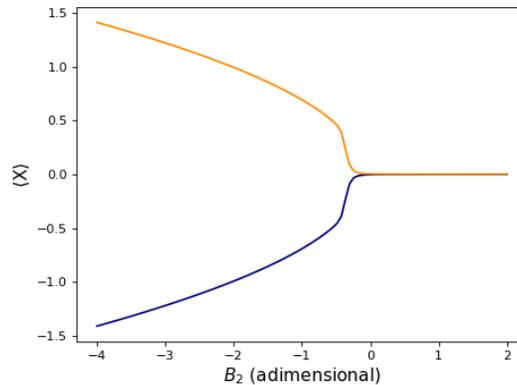


Figura 3.8: Parámetro de orden $\langle X \rangle$ para la QPT de segundo orden del oscilador cuártico ($B_1 = 0$, $K = 10000$ y dimensión 1000). Los estados localizados en uno u otro pozo vienen marcados en distinto color.

La fidelidad cuántica representada frente a B_2 (Fig. 3.9, a la izquierda), presenta su mínimo cerca de 0, donde se produce la transición de fase. Cuando B_2 es negativo, pero muy cercano a 0, los pozos simétricos son tan poco profundos que el estado fundamental queda por encima de la barrera de potencial. En este caso, el solapamiento entre estados es mínimo para valores de B_2 en los que aún aparece el doble pozo. En la figura 3.9 a la derecha, se representa el valor de B_2 en el punto crítico de la QPT (valor mínimo de \mathcal{F}), que se acerca a 0 al aumentar K . Esto se debe a que, al aumentar el valor de K , la diferencia de energía entre niveles disminuye. La susceptibilidad, \mathcal{S} , representada en la figura 3.10, muestra un máximo cercano a 0.

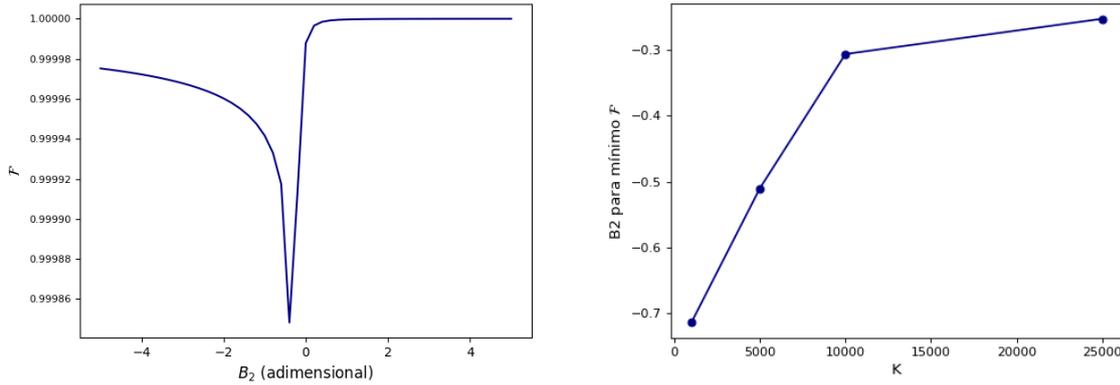


Figura 3.9: A la izquierda, la fidelidad cuántica para el estado fundamental en la QPT de segundo orden, con $K = 10000$ y dimensión 1000. A la derecha, valores de B_2 para los que aparece el mínimo en la fidelidad según el valor de K .

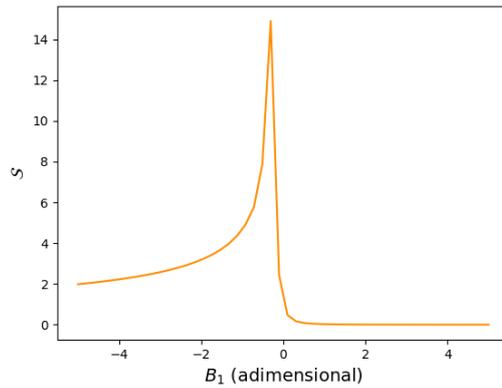


Figura 3.10: Susceptibilidad de la fidelidad para el estado fundamental en la QPT de segundo orden, con $K = 10000$ y dimensión 1000.

3.1.2 ESQPT: Transiciones de Fase de Estado Excitado

Para el estudio de ESQPTs, atendiendo a los parámetros que gobiernan la forma del potencial, se estudian cuatro casos diferentes dentro del diagrama de fases. Para todos los casos, el valor del parámetro ξ se mantendrá constante con valor 1, salvo que se indique lo contrario. En el primer caso, se estudia el potencial cuártico puro, con $B_1 = B_2 = B_3 = 0$, donde aparece un solo mínimo en 0. En el segundo caso, se estudian los valores de $B_1 = B_3 = 0$ y $B_2 = -7$, donde el potencial forma un doble pozo con dos mínimos simétricos y una barrera de potencial en $X = 0$. En el tercer y cuarto caso, se mantiene $B_2 = -5$ y se asignan valores de $B_3 = 1$ y $B_1 = 1$, respectivamente. En estos casos, aparece también un doble pozo, que en este caso es asimétrico. Además, cuando $B_1 \neq 0$, el máximo aparece desplazado de del origen. Cada caso será analizado mediante la representación y estudio de la densidad de niveles, la diferencia de energía entre niveles consecutivos y la razón de participación, introducidos en la sección 2.3.

3.1.2.1 Potencial Cuártico Puro

Como se menciona anteriormente, en este potencial se mantienen los valores de $B_1 = B_2 = B_3 = 0$, con lo que el potencial queda como $V(X) = X^4$ (potencial a de la figura 3.1). En este caso no existe ESQPT asociada, pero es relevante ya que nos permite comparar los resultados obtenidos en nuestros programas de cálculo con los publicados en [8], donde $B_1 = B_2 = B_3 = 0$, $k = 1$ y $\xi = \sqrt{2}$, obteniendo un perfecto acuerdo tanto para autovalores y autovectores como para los elementos de matriz de X y X^2 (Ver Ap. A).

La forma del potencial cuártico puro es similar a la del oscilador armónico, pero con un fondo sensiblemente más plano. En la figura 3.11 se muestra la curva de potencial (en naranja) y las funciones de densidad de probabilidad de cada estado (en azul) representada para una dimensión de matriz de 1700, una vez se ha alcanzado la tolerancia de 10^{-4} para los autovalores. Se puede observar que la anarmonicidad de este potencial es positiva, esto es, la distancia entre niveles crece al aumentar la energía. Esta distancia entre niveles aparece representada también en la gráfica de la derecha de la figura 3.12.

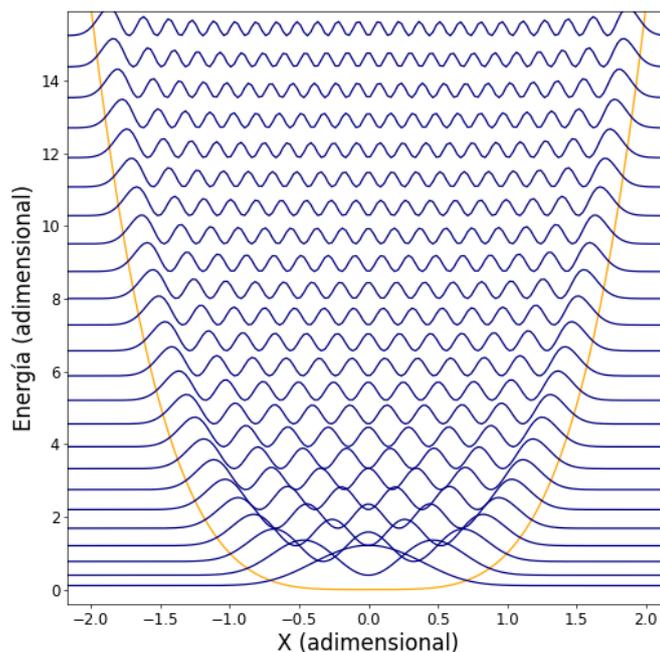


Figura 3.11: F. potencial (naranja) y densidades de probabilidad de las autofunciones (azul) del potencial cuártico puro, $V(X) = X^4$, con $K = 120$ y dimensión $D = 1700$.

La densidad de niveles, representada en la gráfica de la izquierda de la figura 3.12, se estimó usando los valores obtenidos mediante la Ec. (2.32) (línea y puntos naranjas) y se calculó de forma exacta en el límite clásico mediante la Ec. (2.31) (línea azul). En el límite clásico, con alto valor de K , se observa muy buen acuerdo entre ambos casos, como era de esperar teniendo en cuenta el valor de K ($K = 1000$). En ambas representaciones, la densidad de niveles disminuye al aumentar la energía debido a la creciente separación de los niveles excitados. La razón de participación se representó en la figura 3.13 para distintas dimensiones de la base truncada de oscilador armónico. En todos los

casos es creciente con la energía, con lo que se deduce que los niveles más excitados implican a un mayor número de estados de la base, como era de esperar. Además, al aumentar la dimensión de la matriz se alcanza mayor convergencia en las autofunciones, en especial para niveles de más alta energía.

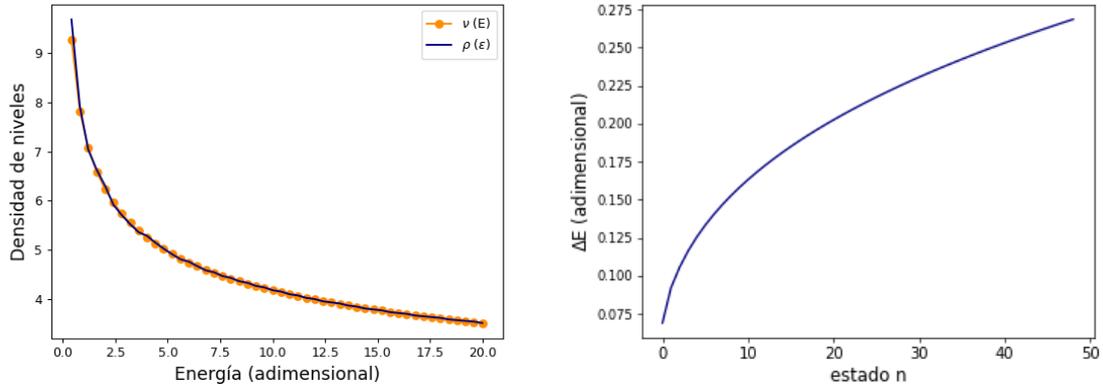


Figura 3.12: Densidad de niveles (gráfica izquierda), representadas según las Ec. 2.31), en azul, y (2.32), en naranja, y diferencia de energía entre niveles (gráfica derecha) del potencial cuártico puro, $V(X) = X^4$, con $K = 1000$ y dimensión $D = 2700$.

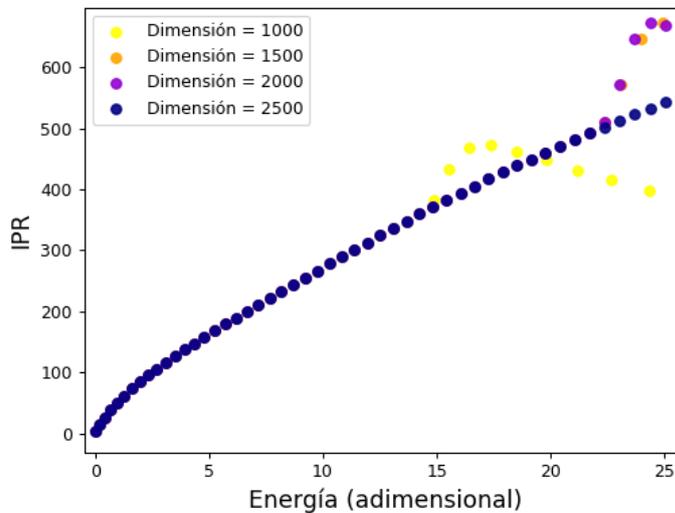


Figura 3.13: Razón de participación para el oscilador cuártico puro, $V(X) = X^4$, con valor de $K = 1000$ y distintas dimensiones de la base truncada de oscilador armónico

3.1.2.2 Doble pozo simétrico

El potencial usado es $V(X) = X^4 - 7X^2$, con $B_1 = B_3 = 0$. En la figura 3.14 se representa este potencial (en naranja), un doble pozo simétrico separado por una barrera de potencial en $X = 0$. Las densidades de probabilidad de los autoestados aparecen representadas en azul. Por debajo de la barrera de potencial, los estados están doblemente degenerados. Al acercarnos a este máximo, se rompe la degeneración y los estados empiezan a deslocalizarse entre los dos pozos, con lo que aumenta

3. Resultados y discusión

la densidad de niveles a la altura de $E = 0$. En la figura 3.15 (gráfica de la izquierda), se observa el aumento de la densidad de niveles alrededor de $E = 0$. En la gráfica de la derecha, puede verse que la diferencia de energía ΔE tiene un mínimo cercano al estado $n = 40$, donde se produce la ESQPT ($E = 0$), permitiendo identificar el punto crítico que coincide con el máximo del potencial.

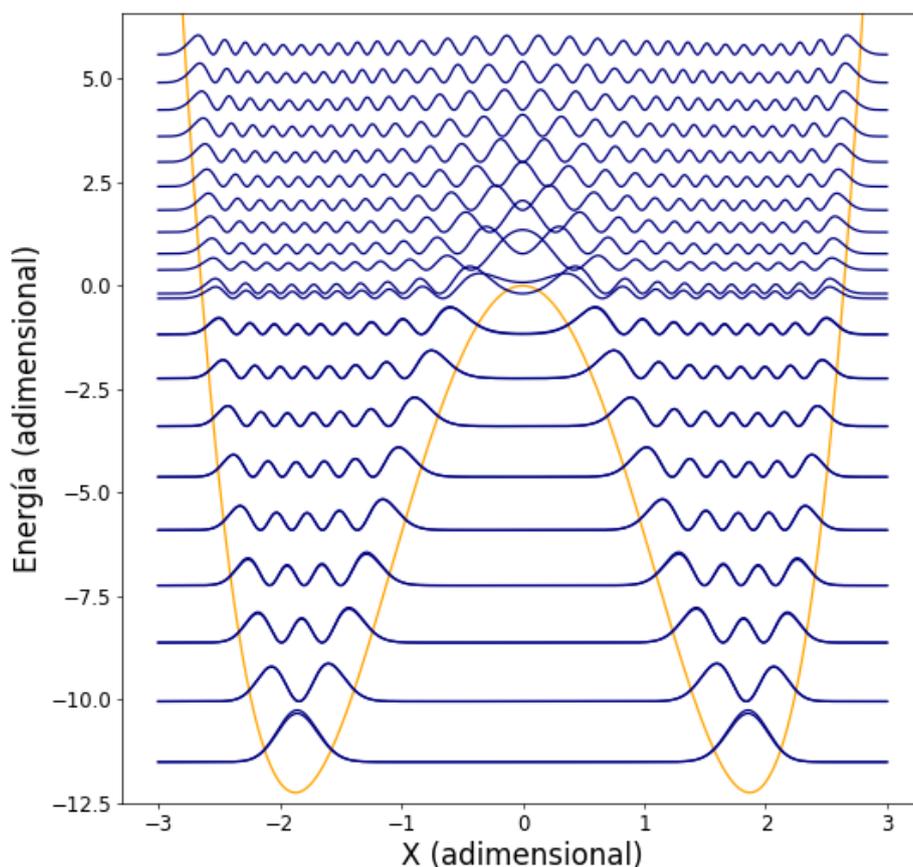


Figura 3.14: Función potencial (naranja) y densidades de probabilidad de las funciones de onda pares e impares (azul) del doble pozo simétrico, $V(X) = X^4 - 7X^2$, con $K = 100$ y dimensión $D = 1500$.

La razón de participación se representa en la figura 3.16) para distintas dimensiones de la matriz Hamiltoniano con el objeto de analizar la convergencia entre autovectores. Esta razón de participación empieza cercana a la unidad para los autoestados de menor energía, por efecto *de borde* al estar estos estados localizados en la frontera del espacio de Hilbert accesible al sistema. Al ir aumentando en energía, conforme la energía de los estados se aproxima al máximo del potencial, la razón de participación aumenta ya que un mayor número de estados de la base de oscilador armónico son necesarios para la descripción del autoestado. En el máximo del potencial, para $E = 0$, los autoestados más próximos a la energía crítica de la ESQPT están más localizados en los estados de la base, lo que provoca un mínimo en la razón de participación en $E = 0$. Para $E > 0$, la razón de participación aumenta como en el oscilador cuártico puro.

En este caso, tanto el máximo en la densidad de estados como el mínimo en la diferencia de energía

entre niveles consecutivos y en la razón de participación permiten localizar el punto crítico de la ESQPT ya que experimentan un cambio abrupto en la tendencia de su comportamiento conforme aumentamos la energía de excitación.

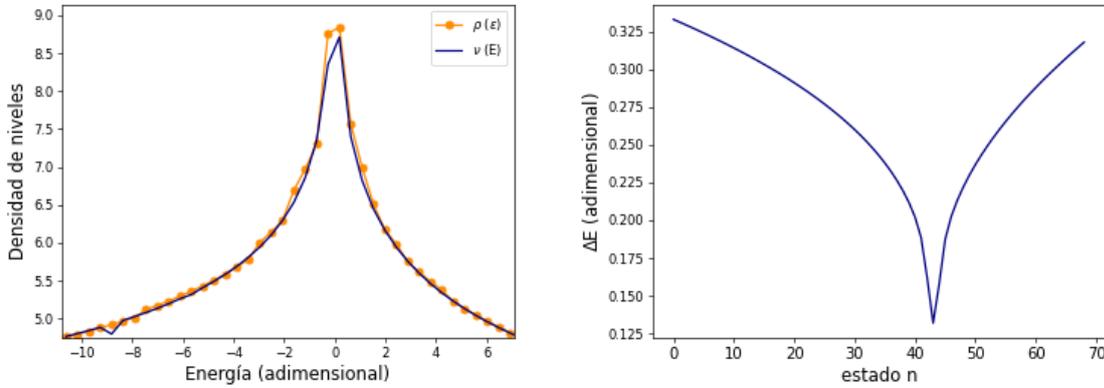


Figura 3.15: Para el potencial de doble pozo simétrico, $V(X) = X^4 - 7X^2$, con $K = 2000$ y dimensión $D = 3000$: densidad de niveles (gráfica izquierda), representadas según las Ec. (2.31), en azul, y (2.32), en naranja, y diferencia de energía entre niveles (gráfica derecha).

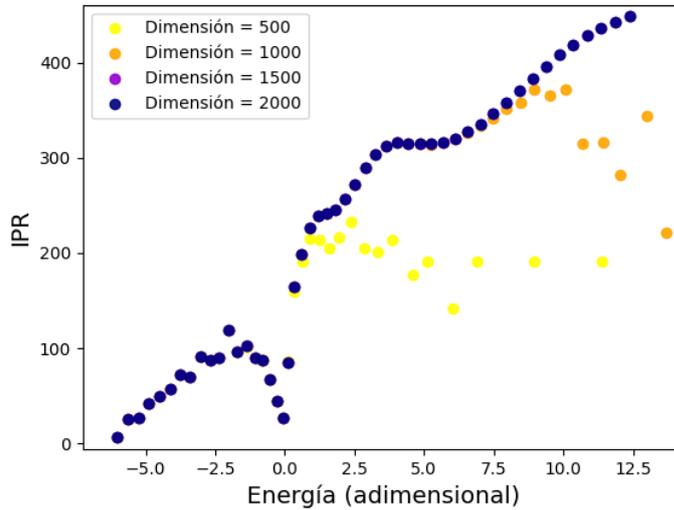


Figura 3.16: Razón de participación para el potencial de doble pozo simétrico, $V(X) = X^4 - 7X^2$, con valor de $K = 2000$ y distintas dimensiones de la matriz.

3.1.2.3 Doble pozo asimétrico con término cúbico

En este caso se ha analizado el potencial $V(X) = X^4 + X^3 - 5X^2$, figura 3.17, donde se ha representado la forma del potencial (en naranja) y la densidad de probabilidad de los autoestados (en azul). En este potencial, el término cuadrático hace que se mantenga el doble pozo, pero la inclusión del término cúbico provoca una asimetría en los pozos del potencial haciendo uno más profundo que el otro. En este caso, ya no existe degeneración en los primeros niveles, ya que los niveles más bajos solo pertenecen al pozo más profundo. La densidad de niveles (Fig. 3.18), gráfica izquierda) aumenta

3. Resultados y discusión

drásticamente a la altura en la que aparece el pozo menos profundo, y se hace máxima a la altura de la barrera de potencial, $E = 0$, de forma similar al doble pozo simétrico, indicando la presencia del punto crítico de la ESQPT. La diferencia de energía entre niveles (Fig. 3.18, gráfica derecha) disminuye al principio al acercarse a la altura del pozo menos profundo. Cuando este aparece, la diferencia de energía va alternando al irse calculando la diferencia de energías entre estados de uno y otro pozo. La amplitud de estas oscilaciones aumenta conforme disminuye el valor de B_3 . El mínimo de ΔE en $n = 60$ y $E = 0$ identifica el punto crítico de la ESQPT a la altura de la barrera de potencial (Fig. 3.18). En la figura 3.19, se presenta la razón de participación para distintas dimensiones de la base de estados del sistema para analizar la convergencia entre las autofunciones. Al igual que en casos anteriores, los estados a menor energía poseen una menor IPR por el efecto *de borde* y aumenta con la energía de excitación. Al aparecer el segundo pozo, se vuelve a observar esta misma tendencia. Los estados que pertenecen al pozo más profundo siguen la tendencia que se observaba en el doble pozo simétrico. De la misma forma, los estados que pertenecen al menos profundo, siguen una tendencia similar pero con IPR más bajas. De nuevo, en el punto crítico en $E = 0$, las dos ramas de puntos alcanzan el mínimo y la tendencia vuelve a ser similar a la del oscilador cuártico puro, aumentando la razón de participación con la energía de los estados.

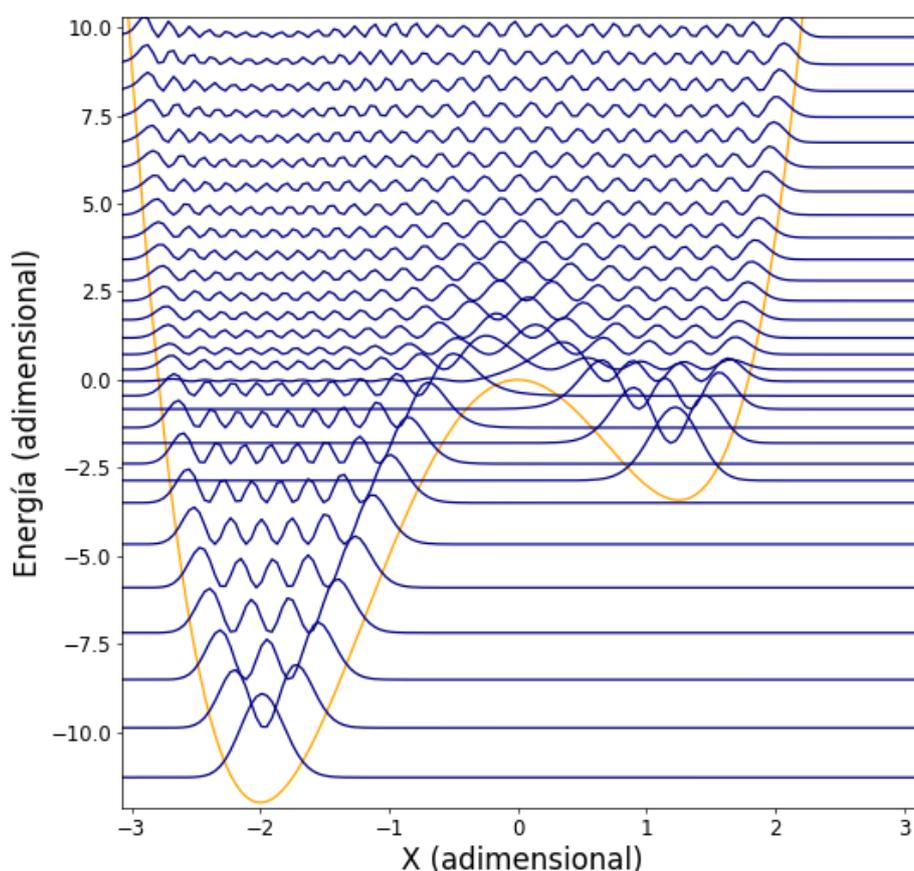


Figura 3.17: Función potencial (naranja) y densidades de probabilidad de los autoestados (azul) del potencial $V(X) = X^4 + X^3 - 5X^2$ con $K = 100$ y dimensión $D = 650$.

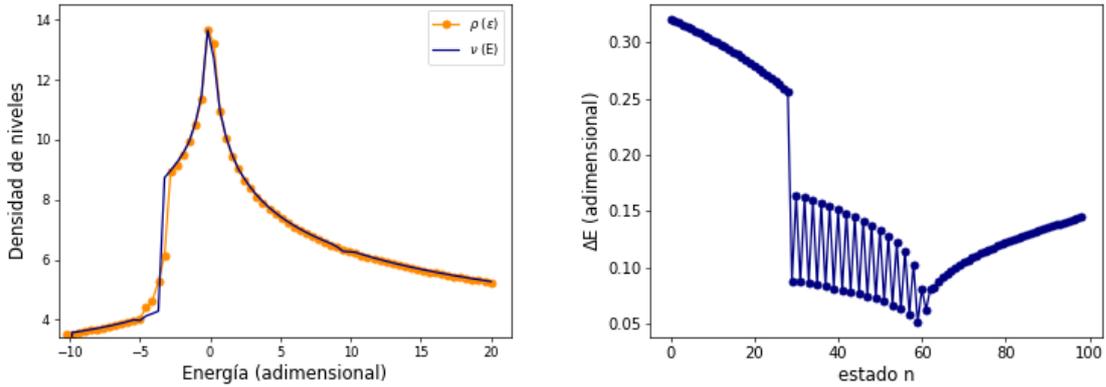


Figura 3.18: Para el potencial para el potencial $V(X) = X^4 + X^3 - 5X^2$ con $K = 2000$, $\xi = 0.5$, y dimensión $D = 4500$: densidad de niveles (gráfica izquierda), representadas según las Ec. (2.31), en azul, y (2.32), en naranja, y diferencia de energía entre niveles (gráfica derecha).

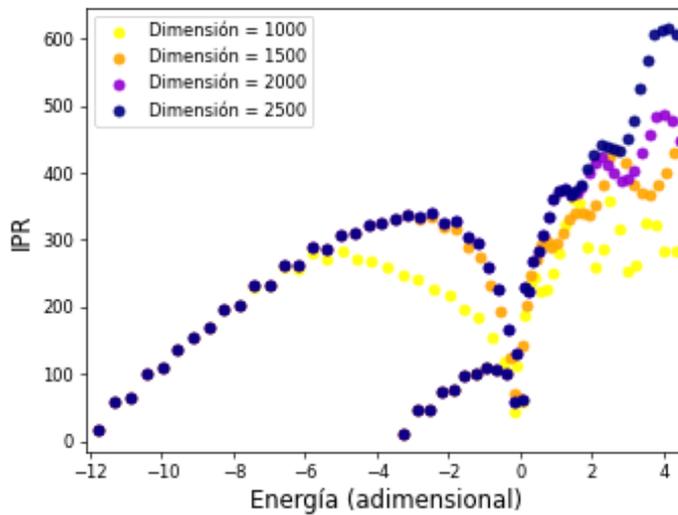


Figura 3.19: Razón de participación para el potencial $V(X) = X^4 + X^3 - 5X^2$ con $K = 2000$ y distintas dimensiones de la matriz.

3.1.2.4 Doble pozo asimétrico con término lineal

El potencial usado para analizar este caso es $V(X) = X^4 - 5X^2 + X$ presentado en la figura 3.20. La sustitución del término cúbico por el lineal no cambia la forma del potencial, manteniéndose el doble pozo asimétrico. La diferencia entre ambos casos estriba en que el término lineal desplaza el máximo de potencial. En este caso, el término $B_1 \geq 0$ hace que el máximo se desplace levemente a la derecha del origen. Sin embargo, tanto la densidad de niveles como la razón de participación muestran comportamientos muy similares a los del caso anterior.

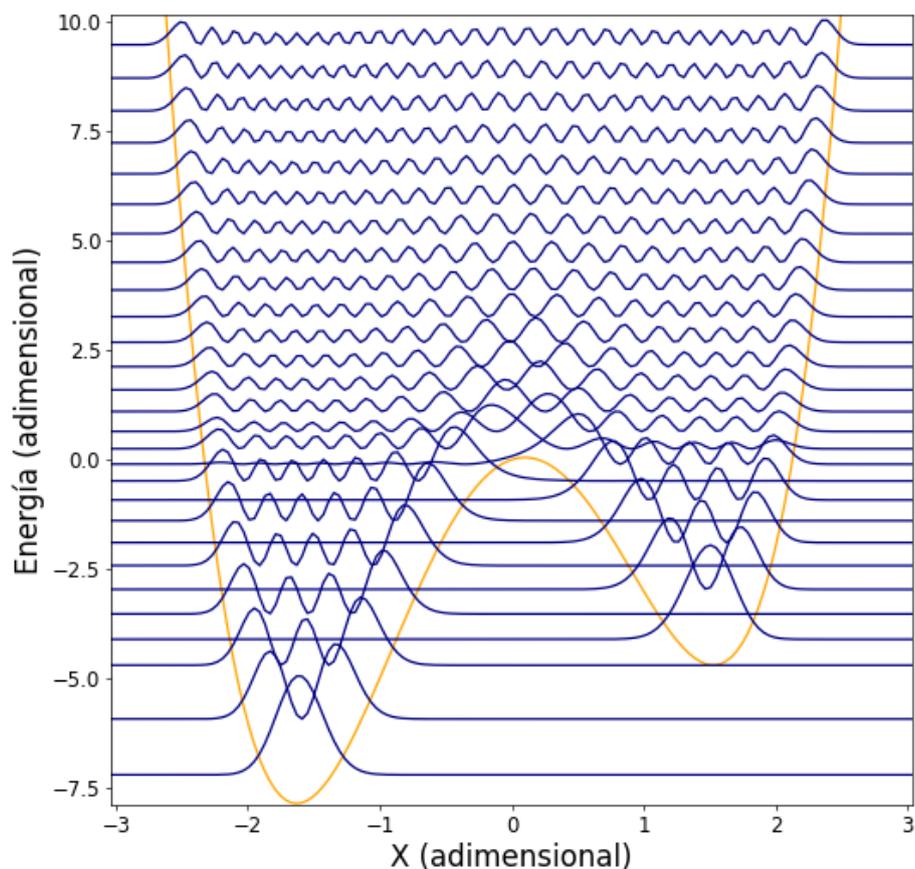


Figura 3.20: Función potencial (naranja) y densidades de probabilidad de las funciones de onda (azul) para el potencial $V(X) = X^4 - 5X^2 + X$ con $K = 100$ y dimensión $D = 660$.

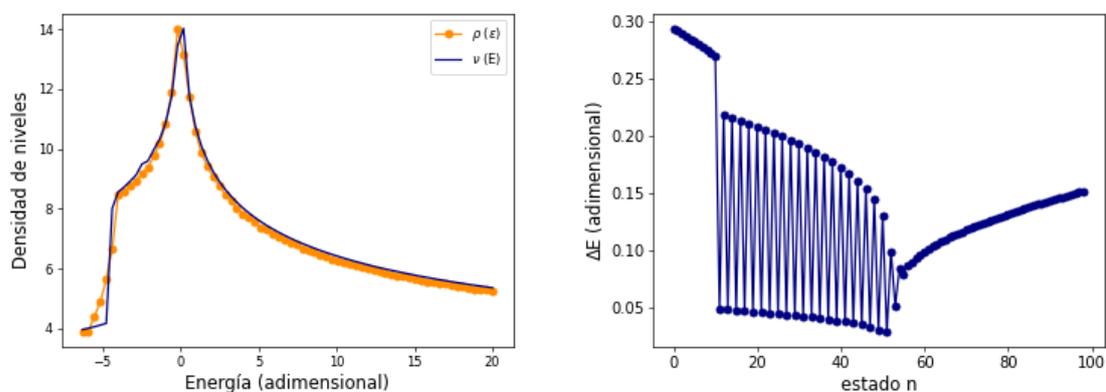


Figura 3.21: Densidad de niveles (gráfica izquierda), representadas según las Ec. (2.31), en azul, y (2.32), en naranja, y diferencia de energía entre niveles (gráfica derecha) para el potencial para el potencial $V(X) = X^4 - 5X^2 + X$ con $K = 2000$, $\xi = 0.5$, y dimensión $D = 4500$

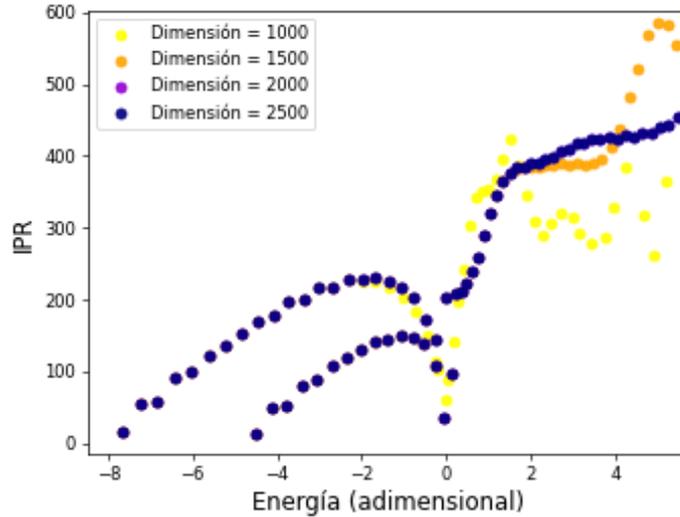


Figura 3.22: Razón de participación para el potencial $V(X) = X^4 - 5X^2 + X$ con $K = 2000$ y distintas dimensiones de la matriz.

3.2 Transiciones de Fase Cuánticas en el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick

Como se describe en la sección 2.2, el modelo LMG puede resolverse diagonalizando una matriz de dimensión definida, $D = 2S + 1$. Gracias a esto, el análisis de las transiciones de fase en este modelo será muy similar al realizado para el oscilador cuártico, pero sin la necesidad de buscar convergencia entre autovalores aumentando la dimensión de la matriz. Este modelo será analizado a partir de dos Hamiltonianos diferentes: un modelo simplificado (Ec. 2.20) y un modelo al que se ha añadido una corrección anarmónica (Ec. 2.26). Además, la matriz del Hamiltoniano es diagonal por bloques y se pueden separar sus estados por paridad para aumentar la eficiencia del programa de cálculo y para permitir un cálculo preciso de las distintas cantidades analizadas ya que algunas de ellas, como la fidelidad cuántica, pueden inducir a error en zonas donde exista degeneración entre niveles de diferente paridad. Para cada Hamiltoniano, se calcularán y representarán la densidad de estado, la razón de participación, la diferencia de energía entre niveles y la fidelidad cuántica y su susceptibilidad asociada, de forma similar a como se ha hecho previamente para el estudio del oscilador cuártico.

3.2.1 Modelo simplificado

En primer lugar, se analizan las transiciones de fase cuántica para el Hamiltoniano simplificado del modelo de LMG (Ec. 2.20). Este Hamiltoniano cuenta con un parámetro de control, ξ , que modifica el sistema. A través de la variación de este parámetro puede observarse una transición de fase de segundo orden para el estado fundamental. Los cálculos incluidos en esta sección se han realizado con un programa escrito en lenguaje Python, incluido en el Apéndice C.1.

En la figura 3.23 se representa el diagrama de energía, con $N = 100$, respecto al parámetro ξ . En esta figura se observa tanto la QPT como la ESQPT. La QPT aparece cuando el parámetro de control alcanza el valor crítico $\xi_c = 0.2$, donde el estado fundamental varía bruscamente. Además, la

3. Resultados y discusión

ESQPT se hace evidente para $\xi > \xi_c$ ya que, para energías negativas, solo se observan líneas azules que corresponden a estados de paridad positiva, y las líneas naranjas quedan ocultas debido a la degeneración. Para energías positivas se observan líneas tanto azules como naranjas al romperse la degeneración entre estados de distinta paridad. Por tanto, en $E = 0$ se localiza el punto crítico de la ESQPT para $\xi < \xi_c$.

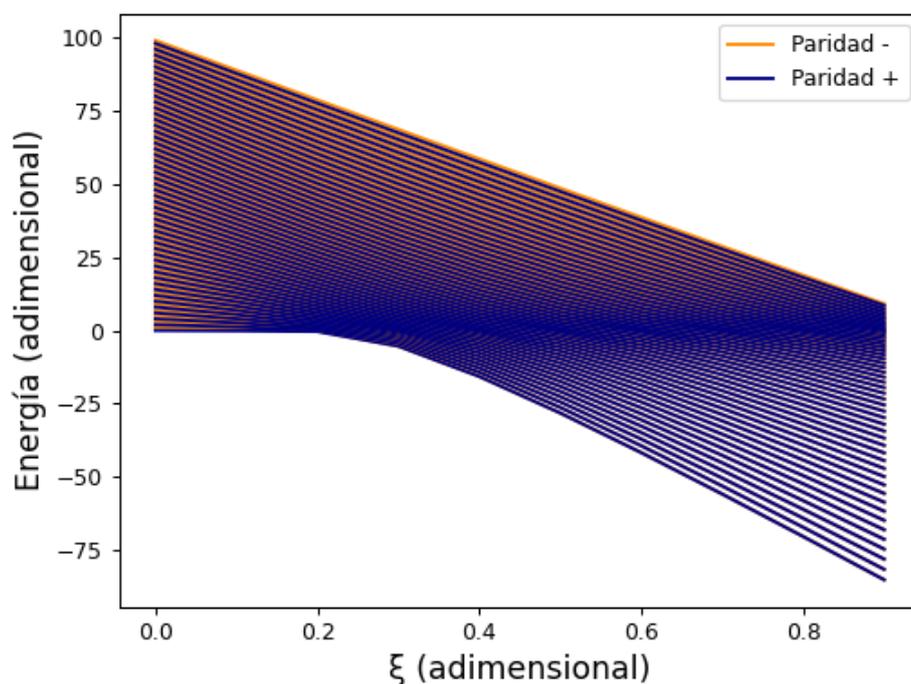


Figura 3.23: Diagrama de energía del modelo LMG simplificado con el parámetro ξ , con $N = 100$.

Para el análisis de la QPT de segundo orden se representan tanto la fidelidad cuántica como la susceptibilidad de la fidelidad (Fig. 3.24, a la izquierda, y 3.25) del estado fundamental (paridad positiva) con un tamaño del sistema de $N = 100$. Se observa que presentan un mínimo y un máximo, respectivamente, a la altura del valor crítico del parámetro de control para la QPT, $\xi_c = 0.2$. En la figura 3.24, a la derecha, se representa el valor del parámetro de control ξ en el que aparece el mínimo para la fidelidad. Este valor del parámetro de control al que aparece el mínimo se va acercando al punto crítico de la QPT, $\xi_c = 0.2$, al aumentar el tamaño del sistema, N .

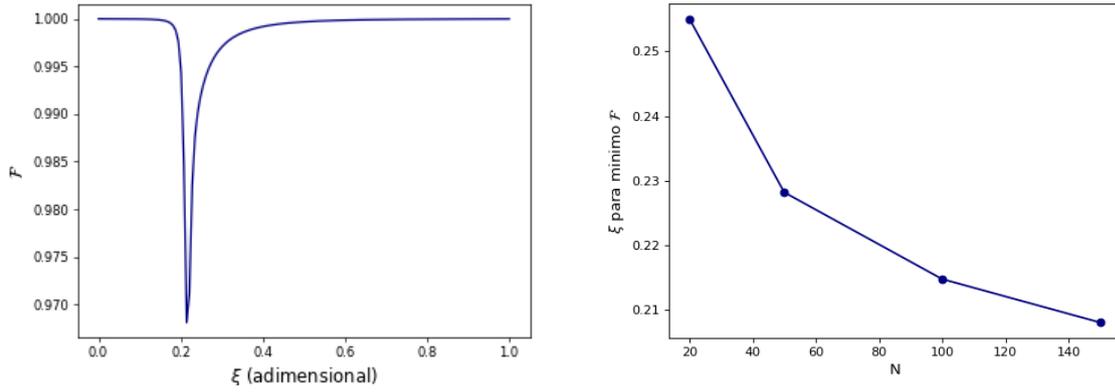


Figura 3.24: A la izquierda, fidelidad cuántica para el estado fundamental del modelo LMG simplificado con $N = 100$ y $\delta\xi = 0.005$. A la derecha, valor de ξ en el mínimo de la fidelidad para distintos tamaños del sistema.

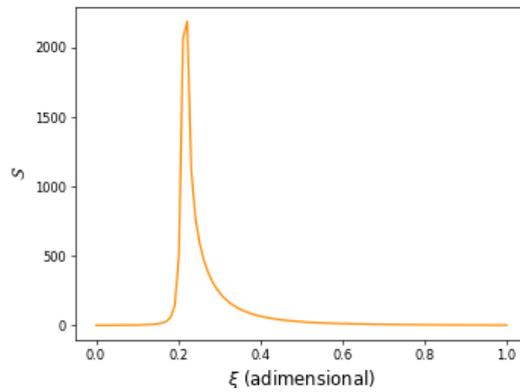


Figura 3.25: Susceptibilidad de la fidelidad del estado fundamental para el modelo LMG simplificado con $N = 100$ y $\delta\xi = 0.005$.

El operador $\langle \hat{S}_z + S \rangle$ puede ser considerado parámetro de orden para las transiciones de fase del LMG simplificado, tanto en la QPT como en la ESQPT. En la figura 3.26 aparece representado este operador frente a la energía entre el tamaño del sistema, a la izquierda, y su valor en el estado fundamental frente al parámetro de control ξ , a la derecha. En la gráfica de la izquierda se observa un mínimo en la energía crítica de la ESQPT, mientras que en la derecha se observa un cambio abrupto en el valor del operador sobre el estado fundamental en el punto crítico de la QPT, $\xi_c = 0.2$.

3. Resultados y discusión

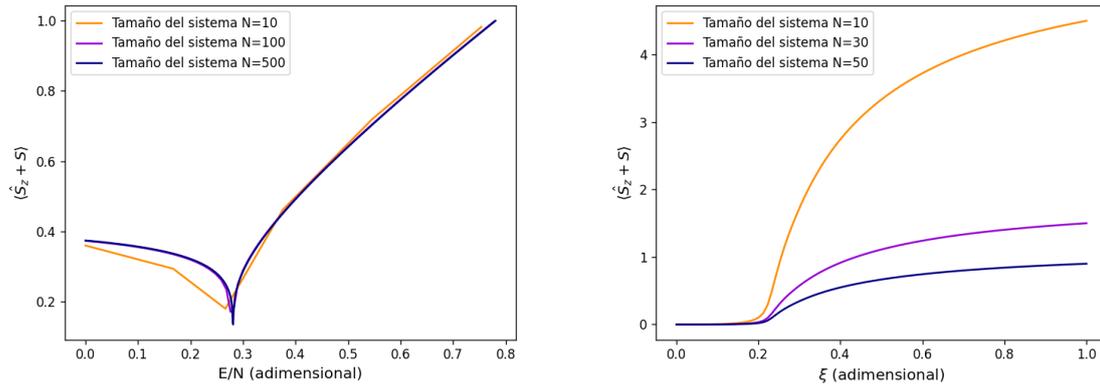


Figura 3.26: A la izquierda, parámetro de orden $\langle \hat{S}_z + S \rangle$ frente a la energía con $\xi = 0.4$ y, a la derecha, $\langle \hat{S}_z + S \rangle$ del estado fundamental del modelo LMG simplificado para distintos tamaños del sistema.

En la figura 3.27 se presenta la razón de participación de los estados de la base para distintos valores del parámetro $\xi > \xi_c$. En esta gráfica puede observarse como el mínimo en la razón de participación, que se corresponde con el punto crítico para la ESQPT, se mantiene siempre en $E = 0$ independientemente del valor de ξ . Este punto crítico también se observa en la figura 3.28, donde está representada la diferencia de energía entre niveles con paridad positiva y negativa, así como en la figura 3.29, donde se representa la densidad de niveles y que presenta un máximo también en $E = 0$.

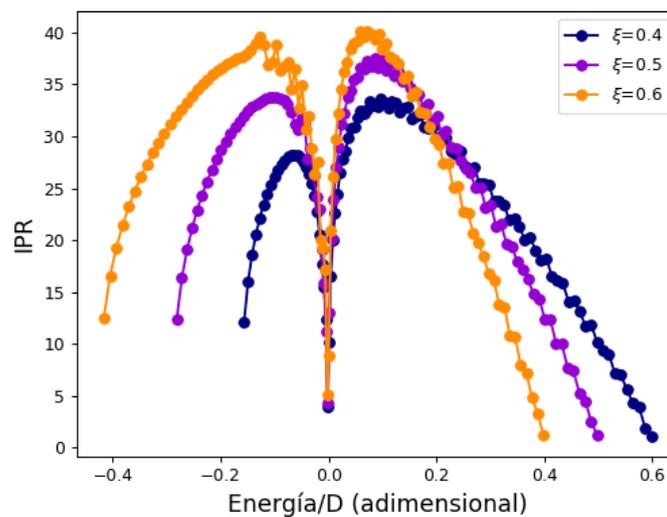


Figura 3.27: Razón de participación en el modelo LMG simplificado para distintos valores del parámetro ξ con $N = 100$.

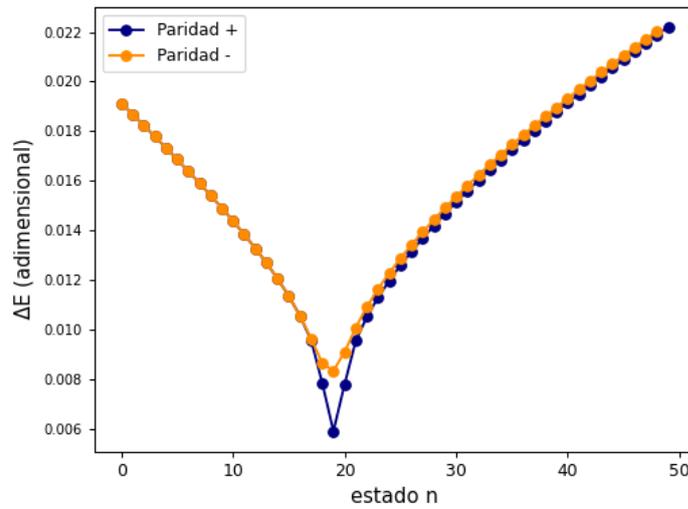


Figura 3.28: Diferencia de energía en el modelo LMG simplificado con $\xi = 0.5$ y $N = 100$.

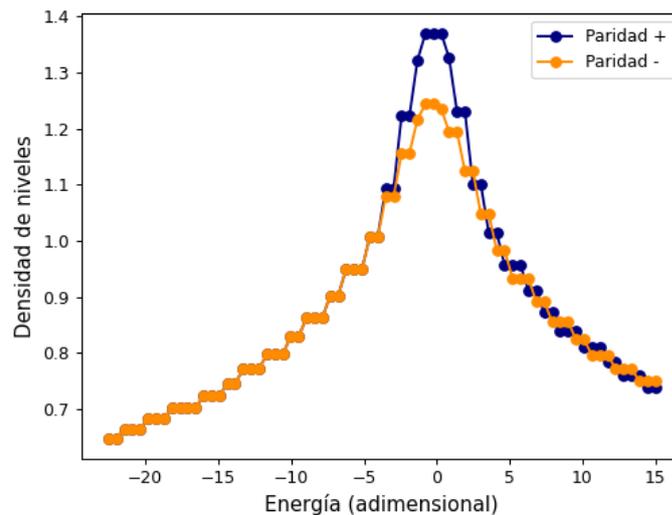


Figura 3.29: Densidad de niveles en el modelo LMG simplificado con $\xi = 0.5$ y $N = 100$.

3.2.2 Modelo anarmónico

El Hamiltoniano (Ec. 2.26) contiene un nuevo parámetro de control, α , que introduce una corrección anarmónica. Cuando $\alpha = 0$, el Hamiltoniano es equivalente al usado en la sección 3.2.1. En este caso, se analizará el efecto y la transición de fase cuántica que aparece con la variación del parámetro ξ y distintos valores de α . Los cálculos realizados en esta sección han sido realizados con el programa en lenguaje Python incluido en el Apéndice C.2.

En la figura 3.30 se representa la evolución de la energía de los estados en función de parámetro ξ con $\alpha = -0.5$. En esta gráfica se observan dos separatrices, una recta en diagonal relacionada con el parámetro ξ y otra horizontal en $E \approx 50$ relacionada con el parámetro α . Por encima y por debajo de estas separatrices, los estados aparecen degenerados, y solo se observan los de paridad positiva

3. Resultados y discusión

representados en azul. Cuando se rompe la degeneración, en las regiones situadas entre las separatrices, se observan también los estados con paridad negativa representados en naranja. En este caso, aparece de nuevo la QPT para el valor crítico del parámetro de control, $\xi_c = 0.2$, para el estado fundamental, y dos ESQTPs asociadas a las dos separatrices mencionadas. Se han publicado resultados para un caso muy similar a este, donde el término anarmónico se añade a un Hamiltoniano modelo de un sistema bidimensional de dos niveles, el límite 2D del modelo de vibrones [39]. Este caso también da lugar a dos separatrices y a un patrón de degeneración similar al del modelo LMG.

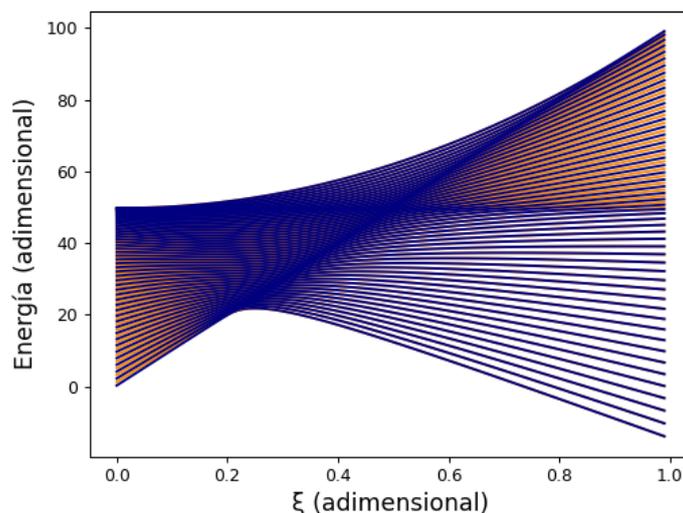


Figura 3.30: Evolución de la energía de los estados del modelo LMG anarmónico con el parámetro ξ para un valor constante de $\alpha = -0.5$ y un tamaño del sistema de $N = 100$.

En la figura 3.31 se representan la fidelidad cuántica y la susceptibilidad del estado fundamental frente al parámetro de control ξ (con $\alpha = -0.5$). Se puede observar que aparece la misma QPT que en Hamiltoniano del estado anterior, a la altura de $\xi_c = 0.2$, donde se observa un mínimo para \mathcal{F} y un máximo para \mathcal{S} .

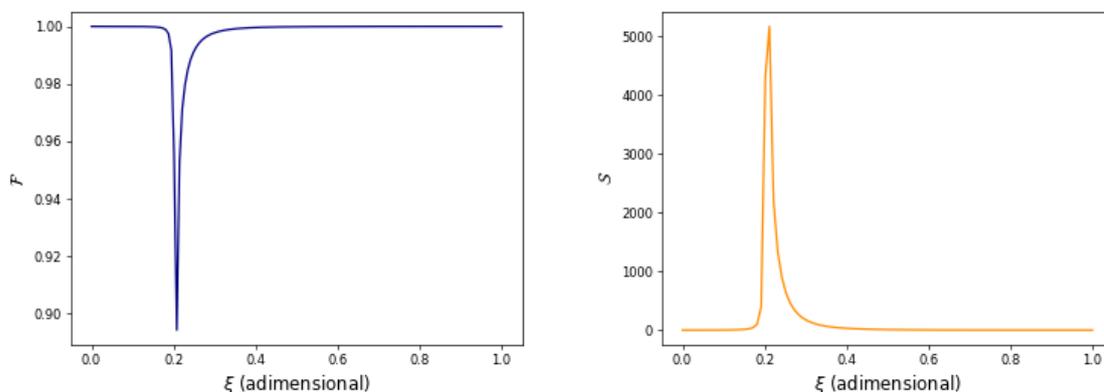


Figura 3.31: A la izquierda, fidelidad cuántica para el estado fundamental \mathcal{F} , y a la derecha, susceptibilidad de la fidelidad para el estado fundamental en función de ξ para el modelo LMG anarmónico con $\alpha = -0.5$, $\delta\xi = 0.005$ y $N = 100$.

De forma similar al modelo simplificado, el operador $\langle \hat{S}_z + S \rangle$ se considera parámetro de orden para las transiciones de fase. En la figura 3.32 aparece representado este operador frente a la energía entre el tamaño del sistema, a la izquierda, y su valor en el estado fundamental frente al parámetro de control ξ , a la derecha. En la gráfica de la derecha se observa un cambio abrupto en el valor del operador sobre el estado fundamental, muy similar al del modelo simplificado, el punto crítico de la QPT, $\xi_c = 0.2$. En este caso, en la gráfica de la izquierda se observan un mínimo y un máximo en la energía crítica de las dos ESQPT que presenta este sistema.

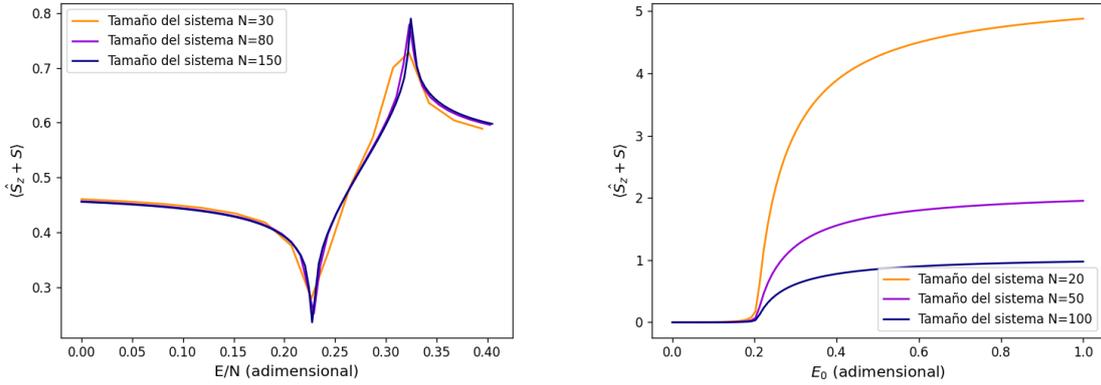


Figura 3.32: A la izquierda, parámetro de orden $\langle \hat{S}_z + S \rangle$ frente a la energía con $\xi = 0.4$ y $\alpha = -0.5$ y, a la derecha, $\langle \hat{S}_z + S \rangle$ del estado fundamental del modelo LMG simplificado con $\alpha = -0.5$ para distintos tamaños del sistema.

Para estudiar las ESQPTs puede representarse, como en secciones anteriores, la razón de participación (Fig. 3.33), la diferencia de energía entre niveles (Figura 3.34, a la izquierda) y la densidad de niveles (Fig. 3.34, a la derecha). La IPR se representa manteniendo α constante para distintos valores de ξ y viceversa. Cuando α es constante (con valor -0.5, igual que en el diagrama de energía de la figura 3.30) se observan dos mínimos en las gráficas con $\xi = 0.3$ y $\xi = 0.7$, que corresponden a los puntos críticos de ESQPTs marcados por las dos separatrices que separan las fases. Cuando $\xi = 0.5$, aparece un solo mínimo que se corresponde con el punto en el que se cortan las dos separatrices del diagrama de energía separando solamente entre dos zonas y dando lugar a una sola ESQPT. Para la representación de la IPR con ξ constante e igual a 0.5 (gráfica derecha), los distintos valores de α provocan también la aparición de uno o dos mínimos asociados a las correspondientes ESQPTs. En la representación de ΔE , se separan los estados por paridad. En este caso, con $\alpha = -0.5$ y $\xi = 0.3$ se observan los dos mínimos correspondientes a las dos ESQPT, como también se observan en la representación de la densidad de niveles, en ese caso como máximos.

3. Resultados y discusión

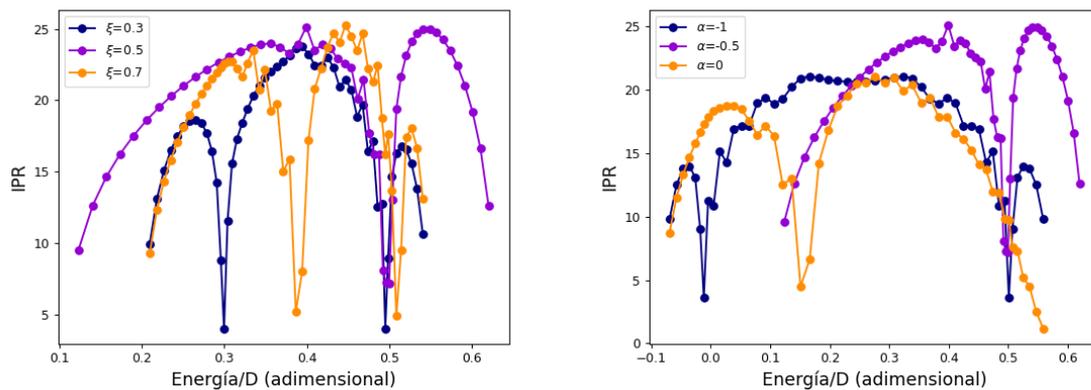


Figura 3.33: Razón de participación para distintos valores de ξ (con $\alpha = -0.5$), a la izquierda, y de α (con $\xi = 0.5$), a la derecha, del modelo LMG anarmónico con $N = 100$.

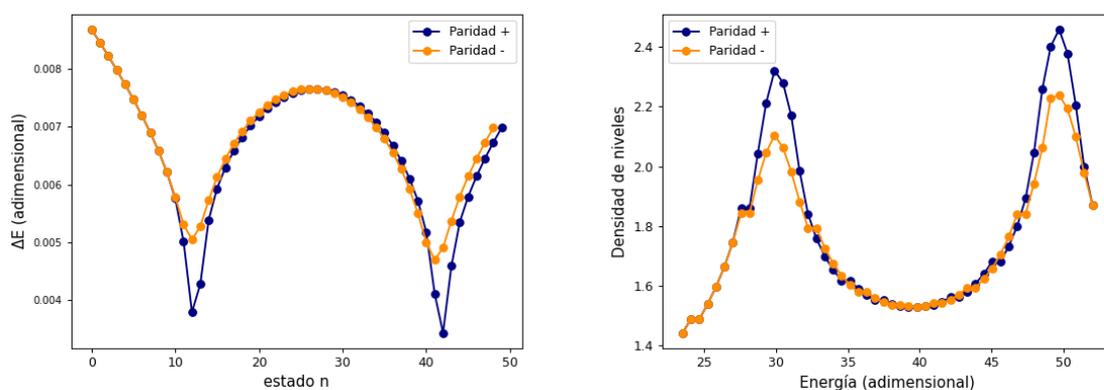


Figura 3.34: A la izquierda, diferencia de energía y, a la derecha, densidad de niveles para el modelo LMG anarmónico, con $\xi = 0.3$, $\alpha = -0.5$ y $N = 100$.

Resumen y Conclusiones

En este trabajo se han estudiado dos sistemas cuánticos diferentes: el oscilador cuártico y el modelo de Lipkin-Meshkov-Glick. Para ello, se han desarrollado varios programas de cálculo, tanto de diagonalización de las matrices Hamiltoniano como de cálculo y representación de algunas magnitudes de interés en la identificación y estudio de las QPTs y ESQPTs presentes en estos sistemas. Respecto a las transiciones de fase cuánticas observadas en este trabajo, se han alcanzado las siguientes conclusiones:

- Tanto el oscilador cuártico como el modelo LMG, en sus dos versiones, presentan una transición de fase cuántica de estado fundamental de segundo orden. El oscilador cuártico presenta una QPT de segundo orden respecto al parámetro de control B_2 del Hamiltoniano, y el modelo LMG, tanto el simplificado como el anarmónico, respecto al parámetro de control ξ con punto crítico en $\xi_c = 0.2$. Estas QPTs se han identificado mediante el cálculo de la fidelidad cuántica y la susceptibilidad de la fidelidad del estado fundamental para los dos sistemas cuánticos.
- El oscilador cuártico presenta, además, una transición de fase cuántica de estado fundamental de primer orden respecto al parámetro B_1 del Hamiltoniano. Esto se ha podido observar también en la representación de la fidelidad cuántica y la susceptibilidad del estado fundamental.
- Se ha representado el potencial cuártico con distintos valores de los parámetros B_1 , B_2 y B_3 con el fin de analizar los cambios en las transiciones de fase cuánticas que muestra este sistema. En potenciales de doble pozo simétrico, $B_2 < 0$ y $B_1 = B_3 = 0$, aparece una ESQPT a la altura de la barrera de potencial que separa los pozos. Esta misma ESQPT aparece también en los potenciales de doble pozo asimétrico, $B_2 < 0$ y $B_1 \neq 0$ o $B_3 \neq 0$.
- El modelo LMG simplificado presenta una ESQPT cuando el parámetro $\xi > \xi_c$ con una separatriz recta horizontal en $E = 0$. Cuando $\xi > \xi_c$, los niveles presentan degeneración en energías negativas que se rompe al subir a energías positivas.
- El modelo LMG anarmónico presenta dos separatrices asociadas a sendas ESQPTs. Estas separatrices distinguen diferentes regiones donde los estados están doblemente degenerados de otras donde se rompe la degeneración. Estos resultados, así como los del modelo LMG simplificado muestran los mismos resultados en el análisis de ESQPTs para las paridades positivas y negativas de los autoestados.

-
- Como se ha demostrado para el potencial cuártico y el modelo LMG en sus dos versiones, las magnitudes ΔE , $\rho(E)$ e IPR han servido para identificar los puntos críticos de las ESQPTs.

Además, un artículo sobre los resultados obtenidos en este trabajo se encuentra en preparación para su publicación en la revista *American Journal of Physics*.



Resultado del oscilador cuártico puro

A.1 Autovalores y autovectores

Tabla A.1: Autovalores y autovectores pares del oscilador cuártico puro con $K = 1$ y $\xi = \sqrt{2}$

n	0	2	4	6	8
E	2.671945	18.787182	40.977234	95.559975	159.765668
c_0	-9.785609e-01	-1.611882e-01	1.035611e-01	5.825129e-02	3.605073e-02
c_2	2.030033e-01	-7.294747e-01	4.316171e-01	3.257393e-01	2.402560e-01
c_4	-2.773389e-02	5.663723e-01	1.586881e-01	2.771244e-01	3.269941e-01
c_6	-1.166426e-02	-3.148436e-01	-4.839981e-01	-2.872077e-01	-1.366608e-01
c_8	1.416149e-02	1.398852e-01	5.192173e-01	6.173930e-04	-1.754875e-01
c_{10}	-9.016864e-03	-4.505504e-02	-4.118984e-01	2.758408e-01	2.743856e-01
c_{12}	4.311780e-03	2.996651e-03	2.725124e-01	-4.228751e-01	-1.606238e-01
c_{14}	-1.474724e-03	1.078776e-02	-1.543466e-01	4.423843e-01	-4.590366e-02
c_{16}	1.324578e-04	-1.195579e-02	7.266895e-02	-3.808909e-01	2.372312e-01
c_{18}	3.352514e-04	8.870743e-03	-2.430848e-02	2.862077e-01	-3.577359e-01
c_{20}	-3.893332e-04	-5.308572e-03	3.157357e-05	-1.914003e-01	3.979703e-01
c_{22}	2.952550e-04	2.588374e-03	9.368868e-03	1.134405e-01	-3.748399e-01
c_{24}	-1.794163e-04	-9.023035e-04	-1.087025e-02	-5.745956e-02	3.139360e-01
c_{26}	8.863444e-05	3.268996e-05	8.963977e-03	2.178802e-02	-2.386784e-01
c_{28}	-3.139243e-05	3.128345e-04	-6.157683e-03	-1.874540e-03	1.657008e-01
c_{30}	1.440985e-06	-3.741937e-04	3.628452e-03	-7.285950e-03	-1.043068e-01
c_{32}	1.066051e-05	3.109407e-04	-1.775543e-03	9.950574e-03	5.792511e-02
c_{34}	-1.293520e-05	-2.136116e-04	6.070423e-04	-9.233770e-03	-2.613986e-02
c_{36}	1.082869e-05	1.251448e-04	2.413612e-05	7.152597e-03	6.523510e-03
c_{38}	-7.480396e-06	-6.030363e-05	-2.944263e-04	-4.857438e-03	4.026779e-03

Tabla A.2: Autovalores y autovectores impares del oscilador cuártico puro con $K = 1$ y $\xi = \sqrt{2}$

n	1	3	5	7	9
E	9.574576	29.34292	53.517346	80.883398	110.82557377
c_1	8.948480e-01	-3.341243e-01	-2.196592e-01	1.425809e-01	9.691145e-02
c_3	4.176114e-01	-4.681026e-01	-4.132794e-01	3.729916e-01	3.141810e-01
c_5	-1.521701e-01	5.960652e-01	1.195133e-01	6.784612e-02	1.889288e-01
c_7	3.624695e-02	-4.589562e-01	2.597273e-01	-3.007936e-01	-2.568275e-01
c_9	4.445624e-03	2.811614e-01	-4.554175e-01	2.025887e-01	1.725959e-02
c_{11}	-1.324092e-02	-1.430709e-01	4.730015e-01	4.069170e-02	2.011940e-01
c_{13}	1.111619e-02	5.722053e-02	-3.902688e-01	-2.631460e-01	-2.502123e-01
c_{15}	-6.830883e-03	-1.239697e-02	2.760675e-01	3.906515e-01	1.452371e-01
c_{17}	3.337445e-03	-6.496760e-03	-1.709733e-01	-4.190742e-01	3.199855e-02
c_{19}	-1.180164e-03	1.149101e-02	9.143948e-02	3.771275e-01	-2.033592e-01
c_{21}	9.715391e-05	-1.032876e-02	-3.921656e-02	-2.996469e-01	3.224873e-01
c_{23}	3.158335e-04	7.272430e-03	9.296718e-03	2.143906e-01	-3.756267e-01
c_{25}	-3.828652e-04	-4.299379e-03	5.099771e-03	-1.383813e-01	3.710123e-01
c_{27}	3.088340e-04	2.095113e-03	-1.004139e-02	7.918893e-02	-3.269220e-01
c_{29}	-2.025805e-04	-7.194946e-04	1.001704e-02	-3.791389e-02	2.628272e-01
c_{31}	1.112089e-04	-6.452363e-06	-7.920965e-03	1.211986e-02	-1.945142e-01
c_{33}	-4.808776e-05	3.055720e-04	5.385935e-03	1.979131e-03	1.324010e-01
c_{35}	1.118618e-05	-3.639899e-04	-3.184982e-03	-8.176897e-03	-8.183274e-02
c_{37}	6.620757e-06	3.103657e-04	1.575204e-03	9.617322e-03	4.429412e-02
c_{39}	-1.261742e-05	-2.215937e-04	-5.457877e-04	-8.593303e-03	-1.881850e-02

A.2 Elementos de matriz de $\langle X \rangle$ y $\langle X^2 \rangle$

Tabla A.3: Elementos de matriz de $\langle X \rangle_{n,n'}$ para el oscilador cuártico puro con $K = 1$ y $\xi = \sqrt{2}$

$n' \setminus n$	0	2	4	6	8
1	-0.756967	0.925211	-0.046804	0.002163	0.000098
3	-0.040899	1.056952	-1.162350	0.056062	0.002541
5	-0.001923	0.051879	-1.251621	1.329768	0.062890
7	0.000088	-0.002371	0.059678	-1.399705	-1.463294
9	0.000004	-0.000107	0.002689	-0.065798	-1.521802
11	0.000000	0.000005	-0.000120	0.002940	0.070935
13	0.000000	0.000000	-0.000005	0.000131	0.003152
15	0.000000	0.000000	0.000000	-0.000006	-0.000139
17	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000006
19	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000

A. Resultado del oscilador cuártico puro

$n' \setminus n$	10	12	14	16	18
1	0.000004	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
3	0.000114	-0.000005	0.000000	0.000000	0.000000,
5	0.002821	-0.000126	-0.000006	0.000000	0.000000
7	-0.068464	0.003050	0.000135	0.000006	0.000000
9	-1.576135	0.073243	0.003248	0.000143	-0.000007
11	1.626964	-1.674805	-0.077463	-0.003423	0.000150
13	0.075413	-1.720062	-1.763057	-0.081275	0.003545,
15	-0.003338	0.079409	1.804047	1.843256	-0.084645
17	0.000146	-0.003500	-0.083086	-1.881036	1.917457,
19	-0.000007	0.000156	0.003618	0.086038	-1.951485

Tabla A.4: Elementos de matriz de $\langle X^2 \rangle_{n,n'}$ para el oscilador cuártico puro con $K = 1$ y $\xi = \sqrt{2}$ para n par

$n' \setminus n$	0	2	4	6	8
0	0.574675	-0.743682	-0.085380	-0.006611	-0.000434
2	-0.743682	1.975861	1.336926	0.133569	0.009672
4	-0.085380	1.336926	2.923372	1.813339	0.173101
6	-0.006611	0.133569	1.813339	3.734943	2.232293
8	-0.000434	0.009672	0.173101	2.232293	4.466116
10	0.000026	-0.000609	-0.012183	-0.208087	-2.614573
12	0.000001	-0.000035	-0.000753	-0.014405	-0.240168
14	0.000000	0.000002	0.000043	0.000879	0.016445
16	0.000000	0.000000	-0.000002	-0.000050	-0.000995
18	0.000000	0.000000	0.000000	0.000003	0.000057

Tabla A.5: Elementos de matriz de $\langle X^2 \rangle_{n,n'}$ para el oscilador cuártico puro con $K = 1$ y $\xi = \sqrt{2}$ para n impar

$n' \setminus n$	1	3	5	7	9
1	1.431210	1.063387	0.110919	-0.008225	-0.000526
3	1.063387	2.473027	1.584443	-0.154073	-0.010975
5	0.110919	1.584443	3.341496	-2.028321	-0.191029
7	-0.008225	-0.154073	-2.028321	4.108669	2.427235
9	-0.000526	-0.010975	-0.191029	2.427235	4.809794
11	0.000031	0.000684	0.013322	-0.224429	-2.795377
13	0.000002	0.000039	0.000817	-0.015444	-0.255386,
15	0.000000	-0.000002	-0.000047	0.000938	0.017413
17	0.000000	0.000000	0.000003	-0.000053	-0.001049
19	0.000000	0.000000	0.000000	0.000003	0.000061

Programas Python del Oscilador Cuártico

B.1 Programa de diagonalización

```

import numpy as np
#
# DIAGONALES DE LA MATRIZ #
#
def diag0(i,k,B1,B2,B3,xi):
    diag0=((4*k**-1*xi**-2)+(3.*xi**4)+(B2*xi**2))*i + (1.5*xi**4* i*(i-1)) + ((4*k**
                                                    -1*xi**-2) + (1.5*xi**4) + (B2*xi**2))
                                                    /2.
    return diag0
def diag1(i,k,B1,B2,B3,xi):
    diag1=((B1*xi)+(1.5*B3*xi**3))/np.sqrt(2.)*(np.sqrt(i)) + (3.*xi**3*B3/np.sqrt(8)
                                                    )*((i-1)*np.sqrt(i))
    return diag1
def diag2(i,k,B1,B2,B3,xi):
    diag2=((-2*k**-1*xi**-2) + (1.5*xi**4) + (B2*xi**2/2.)) *np.sqrt(i*(i-1.)) + ((xi
                                                    **4.) * (i-2.)*np.sqrt(i*(i-1.)))
    return diag2
def diag3(i,k,B1,B2,B3,xi):
    diag3=(xi**3 * B3 * np.sqrt(i*(i-1.)*(i-2.)))/np.sqrt(8.)
    return diag3
def diag4(i,k,B1,B2,B3,xi):
    diag4=0.25*xi**4 * np.sqrt(i*(i-1.)*(i-2.)*(i-3.))
    return diag4
#
# ESCRITURA DE LA MATRIZ
#
def mat(N=20,k=1.0,B1=0.0,B2=0.0,B3=0.0,xi=1): # igual a usar mat_parity(.....,
                                                    parity=False)
    """Escribe la matriz Hamiltoniano
    N: dimension de la matriz
    k, B1, B2, B3, xi= parametros del Hamiltoniano
    """
    A = np.zeros((N,N))
    for i in range(0,N):

```

```

    A[i,i]=diag0(i,k,B1,B2,B3,xi)
    for j in range(0,N):
        if j==i-1:
            A[j,i]=diag1(i,k,B1,B2,B3,xi)
        if j==i-2:
            A[j,i]=diag2(i,k,B1,B2,B3,xi)
        if j==i-3:
            A[j,i]=diag3(i,k,B1,B2,B3,xi)
        if j==i-4:
            A[j,i]=diag4(i,k,B1,B2,B3,xi)
    return A
#
### ESCRITURA DE MATRIZ SEPARADA POR PARIDAD
##### SOLO PARA B1=B3=0
#
def mat_parity(N=20,k=1.0,B2=0.0,xi=1,parity='even'):
    """Escribe la matriz Hamiltoniano separada por paridad
    N: dimension de la matriz
    k, B1, B2, B3, xi: parametros del Hamiltoniano
    """
    A = np.zeros((N,N))
    if parity=='even':
        for i in range(0,N*2-1,2):
            A[i//2,i//2]=diag0(i=i,k=k,B1=0,B2=B2,B3=0,xi=xi)
            for j in range(-1,2*N-1,2):
                if j==i-1:
                    A[j//2,i//2]=diag2(i=i,k=k,B1=0,B2=B2,B3=0,xi=xi)
                if j==i-3:
                    A[j//2,i//2]=diag4(i=i,k=k,B1=0,B2=B2,B3=0,xi=xi)
    if parity=='odd':
        for i in range(1,2*N,2):
            A[i//2,i//2]=diag0(i=i,k=k,B1=0,B2=B2,B3=0,xi=xi)
            for j in range(0,2*N,2):
                if j==i-1:
                    A[j//2-1,i//2]=diag2(i=i,k=k,B1=0,B2=B2,B3=0,xi=xi)
                if j==i-3:
                    A[j//2-1,i//2]=diag4(i=i,k=k,B1=0,B2=B2,B3=0,xi=xi)

    return A
#
# DIAGONALIZACION
#
def QQPot(M=10,N=20,k=1.0,B1=0.0,B2=0.0,B3=0.0,xi=1):
    """Calcula autovalores y autovectores despues de calcular la matriz
    N: dimension de la matriz
    M: numero de autovalores para calcular
    k, B1, B2, B3, xi: parametros del Hamiltoniano
    """
    aval,avec= np.linalg.eigh(mat(N,k,B1,B2,B3,xi), UPL0="U")
    M_aval=aval[:M]
    M_avec=avec[:N,:M]
    return (M_aval, M_avec)
#
### DIAGONALIZACION CON PARIDAD
#
def QQPot_parity(M=10,N=20,k=1.0,B1=0.0,B2=0.0,B3=0.0,xi=1,parity='even'):
    """Calcula autovalores y autovectores despues de calcular la matriz

```

B. Programas Python del Oscilador Cuártico

```
N: dimension de la matriz
M: numero de autovalores para calcular
k, B1, B2, B3, xi: parametros del Hamiltoniano
"""
aval,avec= np.linalg.eigh(mat_parity(N,k,B2,xi,parity), UPLO="U")
M_aval=aval[:M]
M_avec=avec[:N,:M]
return (M_aval, M_avec)
#
#
#ANALISIS DE CONVERGENCIA DE AUTOVALORES
#
def QOPot_conv_aval(M=10,N=20,k=1.0,B1=0.0,B2=0.0,B3=0.0,xi=1,tol=10**-6,Nmax=1000,dN
                    =5):
    """Calcula aval y avec hasta que se alcanza convergencia para una tol
    N: dimension de la matriz
    M: numero de autovalores para calcular
    k, B1, B2, B3, xi: parametros del Hamiltoniano
    Nmax: dimension maxima de stop
    dN: dimension que se aumenta la matriz para cada calculo de convergencia
    """
    while (N<=Nmax):
        aval_M1,avec_M1 = QOPot(M, N, k, B1, B2, B3, xi)
        aval_M2,avec_M2 = QOPot(M, N+dN, k, B1, B2, B3, xi)
        M_aval_M1 = aval_M1[:M]
        M_aval_M2 = aval_M2[:M]
        M_avec_M2 = avec_M2[:,M]
        dif=abs(M_aval_M2-M_aval_M1)
        if any(dif > tol):
            N = N + dN
        else:
            break
    return(M_aval_M2, M_avec_M2, N)
```

B.2 Programa de cálculo de funciones de onda

```
import numpy as np
from matplotlib import pyplot as plt
def expH01D(X):
    """Calcula la parte exponencial de las funciones de onda del OA, para un rango
    desde -x a x con y valores intermedios
    """
    import numpy as np
    exp=np.exp(-X*X/2.)
    return exp
def normH01D(n):
    """Construye un vector de dimension (n filas, 1 columna) con la normalizacion
    para n funciones de onda del HO
    monodimensional"""
    import numpy as np
    norm = np.zeros((n,1))
    norm[0,0]=1./(np.pi**(1./4.))
    for i in range(1,n):
        norm[i,0]=norm[i-1,0]/np.sqrt(2.*(i))
```

```

return norm
def psi(M=10, N=20, k=1., B1=0., B2=0., B3=0., xi=1, Xn=1000, Xif=2.5):
    """Calcula las Psi(x) de los M primeros autovalores en un intervalo x: (-Xif,Xif)
        con Xn puntos"""

    import numpy as np
    from mat import QOPot
    aval, avec= QOPot(M, N, k, B1, B2, B3, xi)
    nor_avec = normH01D(N) * avec[:, :]
    X = np.linspace(-Xif, Xif, Xn)
    exp = expH01D(X)
    psi = exp * np.polynomial.hermite.hermval(X, nor_avec)
    return (psi, Xn, Xif, aval)
def plot_psi(M=10, N=20, k=1., B1=0., B2=0., B3=0., xi=1, Xn=1000, Xif=2.5):
    import numpy as np
    from matplotlib import pyplot as plt
    """Representa las funciones de onda del oscilador cuartico
    """
    psi_val,Xn,Xif,aval=psi(M, N, k, B1, B2, B3, xi, Xn, Xif)
    X=np.linspace(-Xif,Xif,Xn)
    V_x = X**4 / (xi**2) + B3 * xi**3 * X**3 + B2 * xi**2 * X**2 + B1 * xi * X
    plt.figure(figsize=(10,10))
    plt.plot(X,V_x,'g')
    M_x=np.ones([M,Xn])
    for i in range(0,M):
        psi_val[i,:]=psi_val[i,:]**2 + aval[i]
        M_x[i,:] = aval[i]
        plt.plot(X, psi_val[i,:],'k')
        #plt.plot(X, M_x[i],'k') #Representar lineas de niveles
        plt.ylim(aval[0]-1,aval[M-1]+1)
        plt.ylabel('E')
        plt.xlabel('X')
    plt.show()

```

Programas Python del modelo de Lipkin-Meshkov-Glick

C.1 Programa para el cálculo de autoestados del modelo simplificado

```
import numpy as np
def LMG0_parity(N=4, xi=0.5, parity=True, par='even', e_n=True, exc=True):
    """Autovalores y autovectores - LMG0 (simplificado) con o sin paridad
    dimension de la matriz N+1
    N: numero de particulas
    xi: parametro del Hamiltoniano
    parity: si True, se separan matrices por paridad.
    par: cuando parity=True, se elige paridad 'even' o 'odd'
    e_n: si True, aval = E/N
    exc: si True, aval = energia de excitacion
    """
    #
    ##### PARIDAD ON
    #
    if parity:
        #
        ### CASOS PARES
        #
        if par=='even':
            matriz=np.zeros([N//2+1,N//2+1])
            for i in range(0,N//2+1):
                ms = -N/2 + 2*i
                matriz[i,i]=diag0(ms,N,xi)
            for i in range(1,N//2+1):
                ms = -N/2 + 2*i
                matriz[i-1,i]=diag2(ms,N,xi)
        #
        ### CASOS IMPARES
        #
        elif par=='odd':
            if N%2==0: #cuando N es par
                matriz=np.zeros([N//2,N//2])
```

```

        for i in range(0,N//2):
            ms = -N/2 + 1 + 2*i
            matriz[i,i]=diag0(ms, N, xi)
        for i in range(1,N//2):
            ms = -N/2 + 1 + 2*i
            matriz[i-1,i]=diag2(ms, N, xi)
    else: #cuando N es impar
        matriz=np.zeros([N//2+1,N//2+1])
        for i in range(0,N//2+1):
            ms = -N/2 + 1 + 2*i
            matriz[i,i]=diag0(ms, N, xi)
        for i in range(1,N//2+1):
            ms = -N/2 + 1 + 2*i
            matriz[i-1,i]=diag2(ms, N, xi)

#
###  PARIDAD OFF
#
    else:
        matriz=np.zeros([N+1,N+1])
        for i in range(0, N+1):
            ms = -N/2 + i
            matriz[i,i]=diag0(ms, N, xi)
        for i in range(2, N+1):
            ms = -N/2 + i
            matriz[i-2,i]=diag2(ms, N, xi)

#
###  PRINTS
#

    Aval, Avec = np.linalg.eigh(matriz, UPL0="U")
    if e_n:
        Aval=Aval/N
    if exc:
        Aval=Aval-Aval[0]
    return Aval,Avec

#
###  ESCRITURA DE DIAGONALES
#
def diag0(ms, N, xi):
    return (1-xi)*(ms+N/2) + 2*xi*ms/N - 2*xi/N*(N/2*(N/2+1)-ms*(ms-1))
def diag2(ms, N, xi):
    return - xi/N * np.sqrt(((N/2*(N/2+1)-ms*(ms-1))*(N/2*(N/2+1)-(ms-1)*(ms-2)))

```

C.2 Programa para el cálculo de autoestados del modelo anarmónico

```

import numpy as np
def LMG1_parity(N=4, xi=0.5, a=0,parity=True,par='even',e_n=True,exc=True):
    """Autovalores y autovectores - LMG1 anarmonico con o sin paridad
    dimension de la matriz N+1
    N: numero de particulas
    xi, a: parametro del Hamiltoniano
    parity: si True, se separan matrices por paridad.
    par: cuando parity=True, se elige paridad 'even' o 'odd'
    e_n: si True, aval = E/N

```

```

    exc: si True, aval = energia de excitacion
    """
#
#### PARIDAD ON
#
    if parity:
#
#### CASOS PARES
#
        if par=='even':
            matriz=np.zeros([N//2+1,N//2+1])
            for i in range(0,N//2+1):
                ms = -N/2 + 2*i
                matriz[i,i]=diag0(ms,N,xi,a)
            for i in range(1,N//2+1):
                ms = -N/2 + 2*i
                matriz[i-1,i]=diag2(ms,N,xi)
#
#### CASOS IMPARES
#
        elif par=='odd':
            if N%2==0: #cuando N es par
                matriz=np.zeros([N//2,N//2])
                for i in range(0,N//2):
                    ms = -N/2 + 1 + 2*i
                    matriz[i,i]=diag0(ms, N, xi, a)
                for i in range(1,N//2):
                    ms = -N/2 + 1 + 2*i
                    matriz[i-1,i]=diag2(ms, N, xi)
            else: #cuando N es impar
                matriz=np.zeros([N//2+1,N//2+1])
                for i in range(0,N//2+1):
                    ms = -N/2 + 1 + 2*i
                    matriz[i,i]=diag0(ms, N, xi, a)
                for i in range(1,N//2+1):
                    ms = -N/2 + 1 + 2*i
                    matriz[i-1,i]=diag2(ms, N, xi)
#
#### PARIDAD OFF
#
        else:
            matriz=np.zeros([N+1,N+1])
            for i in range(0, N+1):
                ms = -N/2 + i
                matriz[i,i]=diag0(ms, N, xi, a)
            for i in range(2, N+1):
                ms = -N/2 + i
                matriz[i-2,i]=diag2(ms, N, xi)
#
#### PRINTS
#
    Aval, Avec = np.linalg.eigh(matriz, UPL0="U")
    if e_n:
        Aval=Aval/N
    if exc:
        Aval=Aval-Aval[0]
    return Aval, Avec

```

C.2. Programa para el cálculo de autoestados del modelo anarmónico

```
#
####  ESCRITURA DIAGONALES
#
def diag0(ms, N, xi, a):
    return (1-xi)*(ms+N/2) + 2*xi*ms/N - 2*xi/N*(N/2*(N/2+1)-ms*(ms-1)) + xi*N + a *
                                                (ms**2/N + ms + ms/N + 0.25*N + 1/N)

def diag2(ms, N, xi):
    return - xi/N * np.sqrt((N/2*(N/2+1)-ms*(ms-1))*(N/2*(N/2+1)-(ms-1)*(ms-2)))
```

Bibliografía

- [1] S. Sachdev, “Quantum phase transitions,” *Physics world*, vol. 12, no. 4, p. 33, 1999.
- [2] L. Carr, *Understanding quantum phase transitions*. CRC press, 2010.
- [3] P. Cejnar, M. Macek, S. Heinze, J. Jolie, and J. Dobeš, “Monodromy and excited-state quantum phase transitions in integrable systems: Collective vibrations of nuclei,” *J. Phys. A: Math. and General*, vol. 39, pp. L515–L521, 2006.
- [4] P. Cejnar and P. Stransky, “Impact of quantum phase transitions on excited-level dynamics,” *Phys. Rev. E*, vol. 78, 2008.
- [5] M. Caprio, P. Cejnar, and F. Iachello, “Excited State Quantum Phase Transitions in Many-Body Systems,” *Ann. Phys.*, vol. 323, pp. 1106 – 1135, 2008.
- [6] P. Cejnar, P. Stránský, M. Macek, and M. Kloc, “Excited-state quantum phase transitions,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 54, p. 133001, mar 2021.
- [7] H. Lipkin, N. Meshkov, and A. Glick, “Validity of many-body approximation methods for a solvable model: (i). exact solutions and perturbation theory,” *Nuclear Physics*, vol. 62, no. 2, pp. 188–198, 1965.
- [8] S. I. Chan and D. Stelman, “Some energy levels and matrix elements of the quartic oscillator,” *J. Molec. Spectrosc.*, vol. 10, no. 1, pp. 278 – 299, 1963.
- [9] S.-J. Gu, “Fidelity approach to quantum phase transitions,” *International Journal of Modern Physics B*, vol. 24, no. 23, pp. 4371–4458, 2010.
- [10] A. J. Beekman, L. Rademaker, and J. van Wezel, “An Introduction to Spontaneous Symmetry Breaking,” *SciPost Phys. Lect. Notes*, p. 11, 2019.
- [11] G. C. Mellau, A. A. Kyuberis, O. L. Polyansky, N. Zobov, and R. W. Field, “Saddle point localization of molecular wavefunctions,” *Sci. Rep.*, vol. 6, no. 33068, p. 33068, 2016.
- [12] J. H. Baraban, P. B. Changala, G. C. Mellau, J. F. Stanton, A. J. Merer, and R. W. Field, “Spectroscopic characterization of isomerization transition states,” *Science*, vol. 350, no. 6266, pp. 1338–1342, 2015.
- [13] T. Poston and I. Stewart, *Catastrophe Theory and Its Applications*. Dover books on mathematics, Dover Publications, 1996.
- [14] R. Garver, “The Tschirnhaus transformation,” *Annals of Mathematics*, vol. 29, no. 1/4, pp. 319–333, 1927.

-
- [15] C. Ivorra, “Las fórmulas de Cardano-Ferrari,” *Recuperado de <http://www.uv.es/ivorra/Libros/Ecuaciones.pdf>*, vol. 17, 2011.
- [16] F. S. Levin, *An Introduction to Quantum Theory*. Cambridge University Press, 1st ed., 2001.
- [17] L. Susskind and A. Friedman, *Quantum Mechanics: The Theoretical Minimum*. Penguin Books, 1st ed., 2014.
- [18] R. Gilmore, S. Kais, and R. Levine, “Quantum Cusp,” *Phys. Rev. A*, vol. 34, pp. 2442–2452, 1986.
- [19] J. Gamito Gómez, “Análisis de un quantum quench en el modelo de lipkin anarmónico,” 2018. MSc thesis, University of Sevilla (ESP). Advisors: Arias Carrasco, José Miguel and Pérez Fernández, Pedro.
- [20] S. Dusuel and J. Vidal, “Continuous unitary transformations and finite-size scaling exponents in the Lipkin-Meshkov-Glick model,” *Phys. Rev. B*, vol. 71, p. 224420, Jun 2005.
- [21] O. Castaños, R. López-Peña, J. G. Hirsch, and E. López-Moreno, “Classical and quantum phase transitions in the Lipkin-Meshkov-Glick model,” *Phys. Rev. B*, vol. 74, p. 104118, Sep 2006.
- [22] P. Ribeiro, J. Vidal, and R. Mosseri, “Exact spectrum of the Lipkin-Meshkov-Glick model in the thermodynamic limit and finite-size corrections,” *Phys. Rev. E*, vol. 78, p. 021106, Aug 2008.
- [23] G. Engelhardt, V. M. Bastidas, C. Emary, and T. Brandes, “AC-driven quantum phase transition in the Lipkin-Meshkov-Glick model,” *Phys. Rev. E*, vol. 87, p. 052110, May 2013.
- [24] S. Campbell, “Criticality revealed through quench dynamics in the Lipkin-Meshkov-Glick model,” *Phys. Rev. B*, vol. 94, p. 184403, Nov 2016.
- [25] S. Morrison and A. S. Parkins, “Dynamical quantum phase transitions in the dissipative Lipkin-Meshkov-Glick model with proposed realization in optical cavity QED,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 040403, Jan 2008.
- [26] T. Zibold, E. Nicklas, C. Gross, and M. K. Oberthaler, “Classical bifurcation at the transition from Rabi to Josephson Dynamics,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, p. 204101, Nov 2010.
- [27] P. Jurcevic, H. Shen, P. Hauke, C. Maier, T. Brydges, C. Hempel, B. Lanyon, M. Heyl, R. Blatt, C. Roos, and et al., “Direct observation of dynamical quantum phase transitions in an interacting many-body system,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, no. 8, 2017.
- [28] J. A. Muniz, D. Barberena, R. J. Lewis-Swan, D. J. Young, J. R. K. Cline, A. M. Rey, and J. K. Thompson, “Exploring dynamical phase transitions with cold atoms in an optical cavity,” *Nature*, vol. 580, no. 7805, p. 602–607, 2020.
- [29] R. Romano, “A generalization of the Lipkin model as a testing ground for many-body theories,” 2018. MSc thesis, University of Milano (IT). Advisors: Colò, Gianluca and Roca-Maza, Xavier.
- [30] F. Wegner, “Inverse participation ratio in $2 + \epsilon$ dimensions,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 36, no. 3, pp. 209–214, 1980.
- [31] L. F. Santos and F. Pérez-Bernal, “Structure of eigenstates and quench dynamics at an excited-state quantum phase transition,” *Phys. Rev. A*, vol. 92, p. 050101, Nov 2015.

- [32] 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, Jul 2016.
- [33] F. Pérez-Bernal and L. F. Santos, “Effects of excited state quantum phase transitions on system dynamics,” *Fortschr. Phys.*, vol. 65, no. 6-8, p. 1600035, 2017.
- [34] D. Tannor, *Introduction to Quantum Mechanics*. University Science Books, 2007.
- [35] “Anaconda software distribution,” 2020.
- [36] C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, R. Gommers, P. Virtanen, D. Cournapeau, E. Wieser, J. Taylor, S. Berg, N. J. Smith, R. Kern, M. Picus, S. Hoyer, M. H. van Kerkwijk, M. Brett, A. Haldane, J. Fernández del Río, M. Wiebe, P. Peterson, P. Gérard-Marchant, K. Sheppard, T. Reddy, W. Weckesser, H. Abbasi, C. Gohlke, and T. E. Oliphant, “Array programming with NumPy,” *Nature*, vol. 585, p. 357–362, 2020.
- [37] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright, S. J. van der Walt, M. Brett, J. Wilson, K. J. Millman, N. Mayorov, A. R. J. Nelson, E. Jones, R. Kern, E. Larson, C. J. Carey, Í. Polat, Y. Feng, E. W. Moore, J. VanderPlas, D. Laxalde, J. Perktold, R. Cimrman, I. Henriksen, E. A. Quintero, C. R. Harris, A. M. Archibald, A. H. Ribeiro, F. Pedregosa, P. van Mulbregt, and SciPy 1.0 Contributors, “SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python,” *Nature Methods*, vol. 17, pp. 261–272, 2020.
- [38] J. D. Hunter, “Matplotlib: A 2D graphics environment,” *Computing in Science & Engineering*, vol. 9, no. 3, pp. 90–95, 2007.
- [39] F. Pérez-Bernal and O. Álvarez-Bajo, “Anharmonicity effects in the bosonic $U(2)$ - $SO(3)$ excited-state quantum phase transition,” *Phys. Rev. A*, vol. 81, p. 050101, May 2010.