



ACOPLAMIENTO ULTRA-FUERTE EN SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS EN MICROCAVIDADES II

Autor:

Luis Alberto De la Rosa Báez

Asesor:

Dr. Miguel Angel Bastarrachea Magnani

PROYECTO TERMINAL II: INVESTIGACIÓN TEÓRICA.

CLAVE 2111109. TRIMESTRE 21-O.

Licenciatura en Física.

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa.

4 de Febrero 2022

IN MEMORIAM

A mi abuelita Ignacia.

A Matias Cruz que siempre quizo presenciar el término de la carrera.

A Don Angel, mi abuelito, por ser el padre que siempre me faltó.

AGRADECIMIENTOS

A MI MAMÁ POR SU APOYO EN TODA LA CARRERA Y POR SER MI MAYOR
INSPIRACIÓN.

A MIS HERMANOS KARLA Y ERICK, MI TIA MARTHA Y MIS TIOS JUAN Y ANGEL.

A RITA POR TODO SU APOYO INCONDICIONAL, POR ESTAR A MI LADO EN ESTE
PROCESO, POR SU MOTIVACIÓN Y COMPRENSIÓN PERO SOBRE TODO POR SU AMOR.

A MI ASESOR, EL DR. MIGUEL BASTARRACHEA, POR SU PACIENCIA Y SU
CONFIANZA PARA REALIZAR ESTE TRABAJO.

Índice

1. Introducción	3
1.1. Excitones-polaritones orgánicos	3
1.2. Microcavidades	4
2. Hamiltoniano de TCH	5
2.1. Hamiltoniano de Tavis-Cummings	5
2.2. Solución numérica de TC	7
2.3. Modos vibracionales	9
2.4. Holstein-Primakoff en TCH	10
2.5. Solución numérica de TCH	11
2.6. Conservación total de excitaciones	13
3. ¿Qué es el acoplamiento ultra-fuerte?	13
3.1. Hamiltoniano de DH	15
4. Resultados	16
4.1. Espectro del Hamiltoniano TCH en SC	16
4.2. Espectro del Hamiltoniano TCH en USC	22
5. Conclusiones	26
5.1. Trabajo a futuro	27

1. Introducción

Los polaritones son cuasi-partículas que surgen gracias a la interacción fuerte entre luz y materia. Sabiendo esto, surge la interrogante de averiguar qué sucede cuando se aumenta la fuerza de interacción y se entra a un nuevo régimen, el denominado *acoplamiento ultra-fuerte* (USC) [1]. En este caso la aproximación de onda rotante ya no es válida como sucedía en el acoplamiento fuerte. Además, en el caso de polaritones orgánicos se deben considerar las excitaciones vibracionales de las moléculas del material.

En esta segunda parte del proyecto terminal se continúa con el estudio de los grados de libertad colectivos de los polaritones en semiconductores orgánicos dentro de microcavidades usando el *Hamiltoniano de Tavis-Cummings-Holstein* (TCH) y se investiga, dentro del espacio de estados que conservan excitaciones, la adición e los términos contrarrotantes, es decir, el caso del *Hamiltoniano de Dicke-Holstein*. El espectro de ambos modelos se obtiene mediante técnicas analíticas y computacionales para encontrar sus propiedades en función de los parámetros del sistema. Con esto, se da un primer paso en el análisis del efecto del *Acoplamiento Ultra-Fuerte* (USC) en los polaritones orgánicos dentro de una microcavidad.

1.1. Excitones-polaritones orgánicos

Cuando un electrón en un semiconductor se excita, se mueve desde la banda de valencia hasta la banda de conducción además y deja detrás de sí un hueco con carga positiva, de manera que el electrón y el hueco quedan ligados mediante la Fuerza de Coulomb [2]. A este sistema electrón-hueco se le conoce como *excitón*, ver Fig. 1.

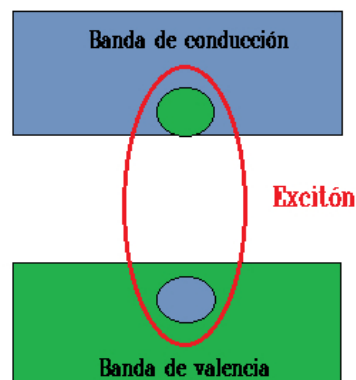


Figura 1: Formación de un excitón.

Por otro lado, un semiconductor orgánico es aquel semiconductor basado en el carbono y tienen estructura de cristales o polímeros. En estos materiales la conductividad, va aumentando con la oxidación y con esto se logran cambios significativos en sus propiedades eléctricas, mecánicas, ópticas, químicas y térmicas [3, 4].

En el caso de un semiconductor orgánico las excitaciones ópticas son transportadas por los excitones de Frenkel, ver Fig. 2, ya que en éste la interacción entre el electrón y el

huevo es muy fuerte pues tiene una energía de ligadura típica del orden de 1.0 e.V siendo la permitividad dieléctrica del material muy pequeña [5]. Si pensamos en las moléculas, en los semiconductores orgánicos hablamos de que el electrón pasa del HOMO (orbital molecular mas ocupado) al LUMO (orbital molecular mas vacío) creando una vacancia o electrón-huevo después de dicha excitación puede migrar a través de la molécula, formando un excitón-polaritón [6]. Los excitones-polaritones o simplemente polaritones [7, 8] son entonces cuaspartículas mixtas de luz y materia que surgen del acoplamiento fuerte entre fotones y excitones en un semiconductor en una microcavidad y tienen un tiempo de vida media corto, típicamente alrededor de los picosegundos (10^{-12} s) [9]. Cuando aumentamos la interacción entonces se tiene el acoplamiento ultrafuerte (USC por sus siglas en inglés) y entonces sus propiedades cambian. En este proyecto el objetivo es observar los cambios espectrales de un sistema de grados de libertad colectivos de excitones-polaritones cuando se entra en el USC. Para crear a los excitones-polaritones y aumentar el acoplamiento luz-materia se emplean microcavidades.

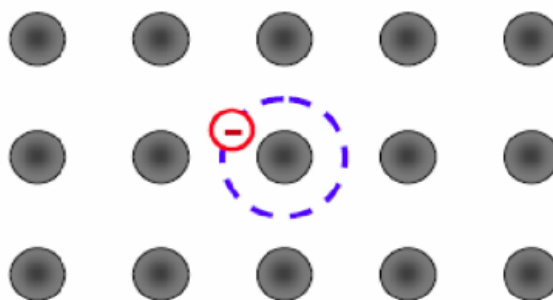


Figura 2: Excitón de Frenkel. El punto gris es el hueco y el círculo rojo representa al electrón. Su radio de separación es menor a 5 Amstrong (molécula excitónica). Tomado de Ref. [10].

1.2. Microcavidades

Una cavidad óptica es un dispositivo en el que los rayos de luz quedan confinados mediante espejos y que permite amplificar a la luz gracias a que en el centro, como se muestra en la Fig. 3, contiene un amplificador con un medio activo (rubí, He-Ne, CO₂, etc) que al inyectar luz (bombeo óptico) provoca una emisión espontánea del medio activo, por lo que se emitirán fotones y después de varios viajes de ida y vuelta entre los espejos, se estabiliza la potencia. Posteriormente, una pequeña porción de los fotones saldrá a través del espejo parcialmente reflejante produciendo un haz de luz monocromático y coherente [11, 10]. Entonces, una microcavidad es una cavidad óptica de dimensiones similares o menores a la longitud de onda de la luz que se desea confinar [12]. La mas conocida es la cavidad planar de Fabry-Perot, la cuál está formada por dos espejos de alto índice de reflexión llamados “Reflectores Distribuidos de Bragg” (DBR) y un espaciador [12].

Una de las ventajas principales de las microcavidades ópticas es permitir estudios para describir las interacciones entre luz y materia [14], pues es en estos dispositivos donde se

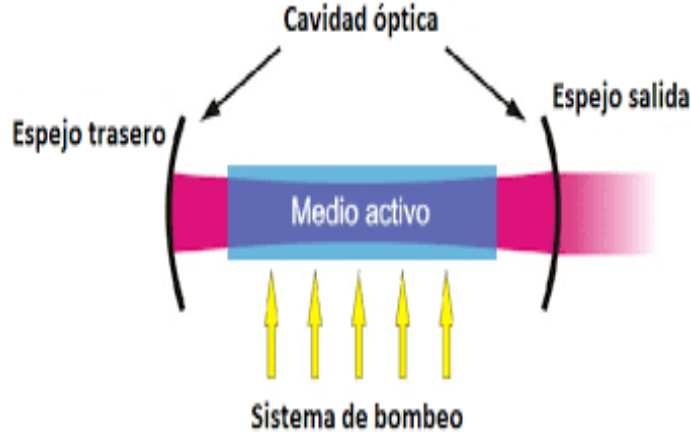


Figura 3: Cavidad o resonador óptico formado por dos espejos. Tomado de Ref. [13].

crean los polaritones y se logran los regímenes de acoplamiento del fuerte al ultra-fuerte.

2. Hamiltoniano de TCH

2.1. Hamiltoniano de Tavis-Cummings

El Hamiltoniano de Tavis-Cummings es un modelo que representa un sistema de N excitones de dos niveles acoplados a la luz y describe los grados de libertad colectivos de polaritones.

La interacción luz-materia se puede dividir en dos partes: con RWA [15, 16] y sin RWA. En esta investigación estudiaremos ambos casos comenzando con RWA, pues cuando las frecuencias de la luz y la materia están cerca de la resonancia, estos términos se pueden omitir. Entonces, tomando el caso para N excitones esta interacción se puede representar con el modelo de Tavis-Cummings (TC):

$$\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{\omega_0}{2} \sum_i \hat{\sigma}_z^i + \frac{2g}{\sqrt{N}} \sum_i (\hat{\sigma}_+^i \hat{a} + \hat{\sigma}_-^i \hat{a}^\dagger), \quad (2.1)$$

donde:

- \hat{a}^\dagger y \hat{a} son los operadores de creación y aniquilación, respectivamente.
- ω_c y ω_a son las frecuencias del modo de cavidad y la frecuencia de excitación, respectivamente.
- N es el número de átomos y está definido como $N = 2j$ donde j es la longitud de pseudoespín, de modo que $J^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle$.
- $\hat{\sigma}_\pm$ y $\hat{\sigma}_z$ son matrices de Pauli que describen el espín atómico para cada átomo.
- J_z y J_\pm son los operadores de momento angular de espín, estos son los grados de libertad colectivos a estudiar.
- g es la fuerza de acoplamiento entre la luz y la materia.

Esta relación se cumple para el n -ésimo estado excitado no degenerado. Y usando la siguiente relación:

$$\hat{J}_z = \frac{1}{2} \sum_i \hat{\sigma}_z^i, \quad \hat{J}_\pm = \sum_i \hat{\sigma}_\pm^i. \quad (2.2)$$

podemos reescribir el hamiltoniano de TC en términos de operadores colectivos de pseudoespín como:

$$\hat{H}_{TC} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_0 J_z + \frac{g}{\sqrt{N}} (J_+ \hat{a} + J_- \hat{a}^\dagger), \quad (2.3)$$

El primer término de la ecuación 2.3 representa la interacción del fotón, el segundo término representa a los grados colectivos de los excitones y el tercer término representa la interacción luz-materia. Diagonalizando \hat{H}_{TC} de la forma $\hat{H}_{TC} = PMP^{-1}$ encontramos que los valores propios en términos de la desintonización $\delta = \omega - \omega_0$, son:

$$\lambda_1 = \frac{\delta - 2\omega_0}{2} + \frac{\sqrt{(\delta)^2 + 4g^2}}{2}, \quad (2.4)$$

$$\lambda_2 = \frac{\delta - 2\omega_0}{2} - \frac{\sqrt{(\delta)^2 + 4g^2}}{2}. \quad (2.5)$$

Estos valores propios representan las energías de los polaritones superior (UP) e inferior (LP), de modo que $\lambda_1 = E_{UP}$ y $\lambda_2 = E_{LP}$. Estos modos se muestran en forma gráfica en la Fig. 4.

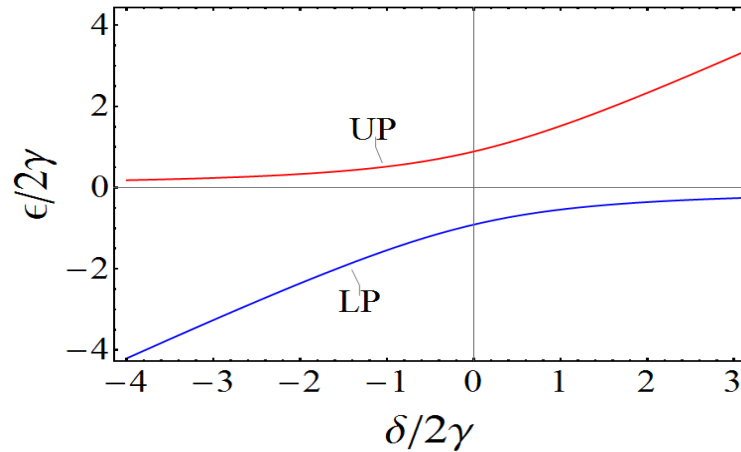


Figura 4: Espectro de energía de los polaritones superior (UP) e inferior (LP) como función de la desintonización. Esta gráfica se obtuvo con una frecuencia $\omega_0 = 0.01$ y una fuerza de acoplamiento $\gamma = 0.9$

Cabe mencionar que se está considerando N sistemas de dos niveles (qubits) por lo que la dimensión del espacio de Hilbert será $\dim H = 2^N$. Sin embargo, con la representación totalmente simétrica, es decir, la de bosones, la dimensión se reduce a $N + 1(2j + 1)$.

2.2. Solución numérica de TC

La base que se usará para resolver numéricamente el Hamiltoniano es el producto tensorial entre la base de Fock y la base de pseudo-espín.

$$|n\rangle \otimes |j, m\rangle = |n, m\rangle, \quad (2.6)$$

donde n es el número de fotones y m representa al polaritón formado por la superposición de la luz y un número específico de átomos y vibraciones.

Entonces, los elementos de matriz de \hat{H}_{TC} en la base de Eq. 2.6 se pueden escribir como:

$$\begin{aligned} \langle n', m' | \hat{H}_{TC} | n, m \rangle &= \omega n \delta_{n'n} \delta_{m'm} + \omega_0 m \delta_{n'n} \delta_{m'm} \\ &+ \frac{2g}{\sqrt{N}} (\sqrt{n} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{n'n-1} \delta_{m'm+1} . \\ &+ \sqrt{n+1} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{n'n+1} \delta_{m'm-1}) \end{aligned} \quad (2.7)$$

El Hamiltoniano de TC conmuta con el operador de número de excitaciones totales:

$$\hat{\Lambda} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{J}_z + j, \quad (2.8)$$

despejando el numero de fotones tenemos:

$$n = \lambda - (m + j), \quad (2.9)$$

y con esta relación se puede mostrar la evolución de los niveles de energía conforme cambia el número de excitaciones. Hay que destacar que $m[-j, +j]$ porque sigue el álgebra de momento angular.

Hay que recordar que $j = \frac{N}{2}$ por lo que para describir 1 átomo se usa una matriz de Pauli con spín $j = 1/2$, es decir $N = 1$, entonces con 2 átomos ($N = 2$) se tiene $j = 1$.

Así pues, para el caso mas simple cuando solo hay un número finito de excitaciones y dejando j fijo se puede encontrar todos los estados posibles del sistema, entonces en el caso de una excitación compartida en el sistema $\lambda = 1$, el espectro de energía se muestra en la Fig. 5:

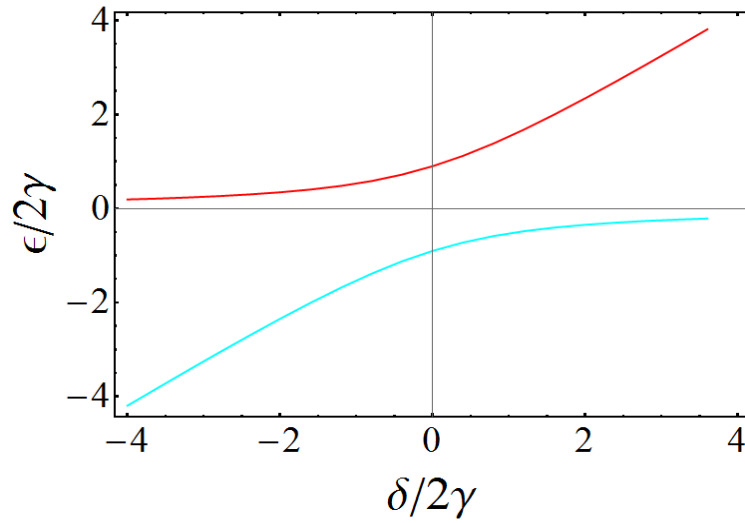


Figura 5: Gráfica de excitaciones correspondiente a $\lambda = 1$, y $j = 1$, $\omega_0 = 0.01$ y $\gamma = 0.9$. La línea roja corresponde al estado $|1, -5\rangle$ y la línea azul representa el estado $|0, -4\rangle$.

De modo que si se superponen la Fig. 4 y Fig. 5, se ve que coinciden perfectamente:

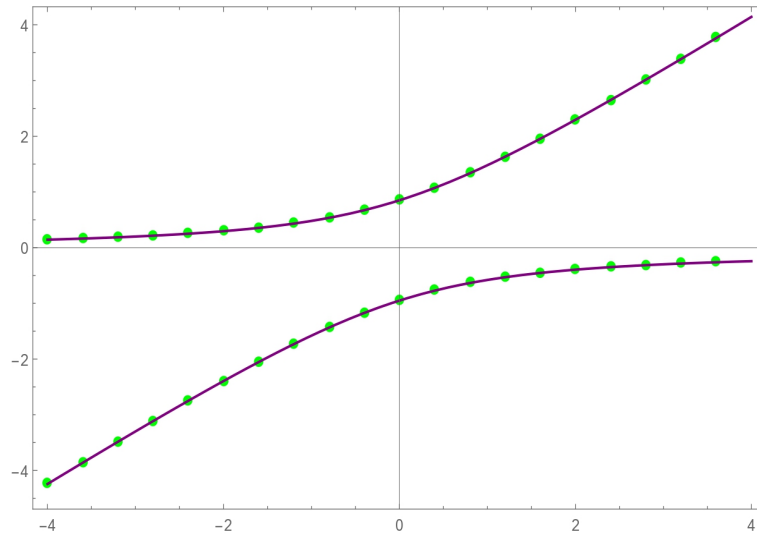


Figura 6: Las líneas moradas representan a los polaritones y las líneas punteadas representan los modos de una excitación y un átomo excitado. Ambas gráficas coinciden.

Esto significa que se recuperan los resultados de la aproximación de Holstein-Primakoff con una sola excitación. Al considerar más excitaciones en el sistema $\lambda > 1$ obtenemos un espectro como el que se muestra en la Fig. 7:

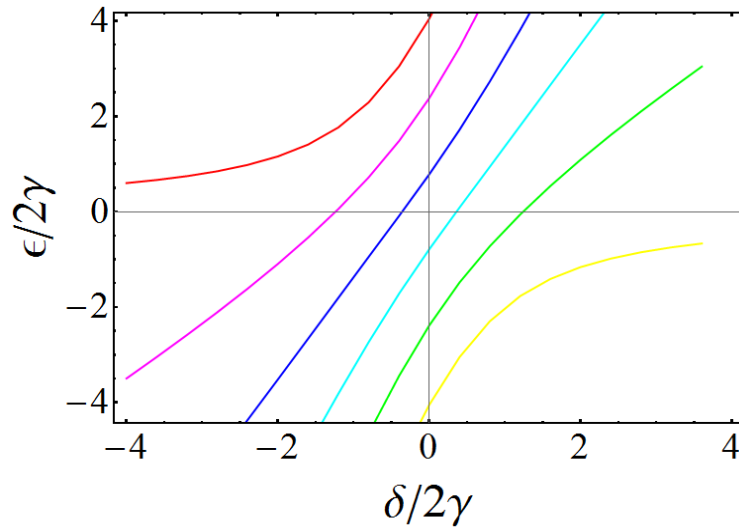


Figura 7: Gráfica correspondiente a 5 excitaciones, 5 átomos.

Cabe destacar que aumentar el número de átomos j cambia el número de niveles de energía que tendremos, es decir, aparecen nuevas ramas polaritónicas además de la inferior (LP) y la superior (UP), esto se vera mas adelante.

2.3. Modos vibracionales

Sin embargo, las moléculas orgánicas no son sistemas de dos niveles. El espectro de energía de los polaritones requieren de otro grado de libertad para estar completos. El modo vibracional es el grado faltante y para que el modelo esté completo se debe incluir el acoplamiento entre los estados electrónicos y la conformación molecular en los espectros [17]. El nuevo modelo resultante es el llamado *Hamiltoniano de Tavis-Cummings-Holstein*, Ec.(2.10), al cual se le ha añadido el modo vibracional. Este nuevo modelo describe la interacción fuerte entre luz y materia con la formación de polaritones, pero además incluyendo el revestimiento de estados electrónicos mediante excitaciones vibratorias [1].

$$\hat{H} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \sum_{i=1}^N \left[\omega_0 \hat{\sigma}_i^+ \hat{\sigma}_i^- + \frac{2g}{\sqrt{N}} (\hat{\sigma}_i^+ \hat{a} + \hat{\sigma}_i^- \hat{a}^\dagger) + \omega_v (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i - \lambda_0 \hat{\sigma}_i^+ \hat{\sigma}_i^- (\hat{b}_i^\dagger + \hat{b}_i)) \right]. \quad (2.10)$$

Los primeros tres términos corresponden al hamiltoniano de TC pero el término final en éste hamiltoniano refleja el desplazamiento entre la coordenada vibratoria óptima en el estado electrónico fundamental y en el estado electrónico excitado donde λ_0 está relacionado con el parámetro S de Huang-Rhys (medida de la fuerza de interacción entre los estados excitados y fundamentales de los electrones) mediante $S = \lambda_0^2$ y puede interpretarse como el desplazamiento de los modos vibracionales en unidades de la longitud, ω_v es la frecuencia de vibración y los elementos \hat{b}_i^\dagger y \hat{b}_i son los operadores de creación y aniquilación, respectivamente, de los modos vibracionales acoplados a cada excitón. Cabe recordar que se esta trabajando bajo la aproximación de onda rotante (RWA por sus siglas en ingles), por lo que se conserva el número de excitaciones electrónicas, es decir,

$N_{exc} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \sum_i \hat{\sigma}^+ \hat{\sigma}^-$ es invariante y por lo tanto $2g$ debe ser menor respecto a las frecuencia del sistema ω y ω_0 . Además, estamos considerando el acoplamiento fuerte entre la luz y la materia.

Este problema es complicado porque, en general, no es posible restringirnos al espacio completamente simétrico y escribir los grados de libertad colectivos si incluimos las vibraciones. Sin embargo, a partir de este punto emplearemos una aproximación para estudiar el espectro de un Hamiltoniano TCH con grados de libertad colectivos. Vamos a suponer que los modos vibracionales son independientes del sitio donde se encuentra el excitón. Además, vamos a asumir que $\kappa = \omega_v * \lambda_0$. Entonces, usando los operadores de pseudo-espín que empleamos en el \hat{H}_{TC} obtenemos un Hamiltoniano de Tavis-Cummings-Holstein aproximado:

$$\hat{H}_{TCH} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_0 J_z + \frac{g}{\sqrt{N}} (J_+ \hat{a} + J_- \hat{a}^\dagger) + \omega_v \hat{b}^\dagger \hat{b} + \kappa J_z (\hat{b}^\dagger + \hat{b}). \quad (2.11)$$

2.4. Holstein-Primakoff en TCH

Del mismo modo que lo que hicimos en el caso del \hat{H}_{TC} durante el proyecto terminal I, queremos encontrar las excitaciones polaritónicas más básicas del sistema. Sin embargo, no es posible construir una matriz como en el caso del Hamiltoniano de TC debido al término $\hat{J}_z (\hat{b}^\dagger + \hat{b})$ que incluye tres operadores en la aproximación de Holstein-Primakoff. Es por eso que, para tener una aproximación a los polaritones del sistema con la cual comparar, vamos a considerar un campo medio de ése término y escribirlo como κB , donde $B = \hat{J}_z (\hat{b}^\dagger + \hat{b})$. Aplicamos entonces la transformación de Holstein-Primakoff para bozonizar y diagonalizar nuestro nuevo hamiltoniano de la forma $\hat{H}_{TCH} = PMP^{-1}$. Entonces, en este caso obtenemos:

$$\hat{H}_{TCH} = \begin{pmatrix} \hat{a}^\dagger & \hat{c}^\dagger & \hat{b}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega & g & 0 \\ g & \omega_0 + \kappa B & 0 \\ 0 & 0 & \omega_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a} \\ \hat{c} \\ \hat{b} \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

donde:

$$M = \begin{pmatrix} \omega & g & 0 \\ g & \omega_0 + \kappa B & 0 \\ 0 & 0 & \omega_v \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

cuyos valores propios $\det(M - \lambda I) = 0$ son:

$$\lambda_1 = E_{UP} = \frac{\kappa B + \omega_0 + \omega}{2} + \frac{\sqrt{4g^2 + (\kappa B + \omega_0 - \omega)^2}}{2} \quad (2.14)$$

$$\lambda_2 = E_{LP} = \frac{\kappa B + \omega_0 + \omega}{2} - \frac{\sqrt{4g^2 + (\kappa B + \omega_0 - \omega)^2}}{2}, \quad (2.15)$$

y en términos de la desintonización $\delta = \omega_0 - \omega$:

$$\lambda_1 = E_{UP} = \frac{\kappa B + \delta - 2\omega_0}{2} + \frac{\sqrt{4g^2 N + (\kappa B - \delta)^2}}{2} \quad (2.16)$$

$$\lambda_2 = E_{LP} = \frac{\kappa B + \delta - 2\omega_0}{2} - \frac{\sqrt{4g^2 N + (\kappa B - \delta)^2}}{2}, \quad (2.17)$$

donde $\lambda_1 = E_{UP}$ y $\lambda_2 = E_{LP}$ son las energías de los polaritones superior e inferior respectivamente. Así pues, el espectro de los polaritones resultantes se indica en la Fig. 8.

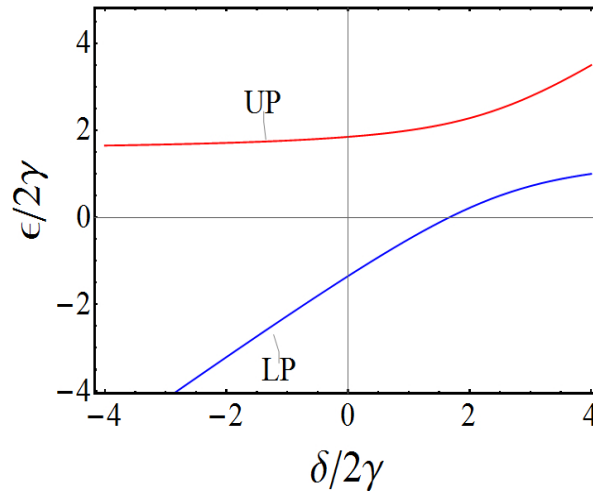


Figura 8: Modos resultantes de los polaritones superior(rojo) e inferior(azul) como función de la energía ϵ y la desintonización δ entre la luz y la materia usando la aproximación de Holstein-Primakoff. Se usó una frecuencia de materia $\omega_0 = 1$, un acoplamiento $\gamma = 1$, una frecuencia de vibración $\omega_b = 1$ y un parámetro $\kappa = 1$.

La Figura 8 muestra el caso mas simple del \hat{H}_{TCH} cuando $\kappa = 1$. Comparando con la Fig. 5, se observa que ésta gráfica esta desplazada a la derecha de modo que si $\kappa = 0$ obtenemos nuevamente los resultados para Tavis - Cummings.

El efecto de los grados de libertad vibracionales es, en la aproximación de orden más bajo, hacer más intensa la interacción radiación materia y recorrer el acoplamiento mínimo a desintonizaciones negativas. Lo que se puede observar de las ecuaciones anteriores. Al desarrollar el argumento de la raíz tenemos

$$(\omega - \omega_0)^2 + 2B\kappa(\omega_0 - \omega) + 4g^2 + \kappa^2 B^2. \quad (2.18)$$

La interacción efectiva ahora es $g_{eff}^4 = g^2 + \kappa^2 B^2/4$ y el corrimiento es $2B\kappa(\omega_0 - \omega)$.

2.5. Solución numérica de TCH

Ahora bien, para encontrar el espectro de energía completo de los polaritones es necesario expresar el hamiltoniano \hat{H}_{TCH} en forma matricial de la misma manera en que lo hicimos con el Hamiltoniano de TC en una base dada. Para ello se debe considerar, como

punto de partida, una base en el espacio de Fock, definidos por las relaciones de álgebra bosónica:

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (2.19)$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (2.20)$$

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle, \quad (2.21)$$

$$(2.22)$$

y con el operador de momento angular escrito como:

$$\hat{J}_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle \quad (2.23)$$

$$\hat{J}_\pm|j, m\rangle = C_\pm|j, m \pm 1\rangle \quad (2.24)$$

con

$$C_\pm = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)}.$$

Sin embargo, a diferencia de lo que sucede con el Hamiltoniano de Tavis-Cummings necesitamos introducir una nueva base de Fock correspondiente a las vibraciones:

$$|n\rangle \otimes |j, m\rangle \otimes |n_b\rangle = |n, m, n_b\rangle \quad (2.25)$$

donde n es el número de excitaciones (fotones), m es el excitón-polaritón y n_b es el número de vibraciones. Ahora requerimos los elementos de matriz que están representados como:

$$\langle n', m', n'_b | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n, m, n_b \rangle = n \langle n' | n \rangle \langle m | m \rangle \langle n'_b | n_b \rangle = n \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b}. \quad (2.26)$$

$$\langle n', m', n'_b | \hat{b}^\dagger \hat{b} | n, m, n_b \rangle = n \langle n' | n \rangle \langle m | m \rangle \langle n'_b | \beta \rangle = n_b \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b}. \quad (2.27)$$

$$\langle n', m', \beta' | J_z | n, m, \beta \rangle = m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b}. \quad (2.28)$$

$$\langle n', m', n'_b | \hat{a} J_+ | n, m, n_b \rangle = \sqrt{n_1} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{n'n-1} \delta_{m'm+1} \delta_{n'_b n_b}. \quad (2.29)$$

$$\langle n', m', n'_b | \hat{a}^\dagger J_- | n, m, n_b \rangle = \sqrt{n_1 + 1} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{n'n+1} \delta_{m'm-1} \delta_{n'_b n_b}. \quad (2.30)$$

$$\langle n', m', n'_b | \hat{b}^\dagger J_z | n, m, n_b \rangle = \sqrt{n_b + 1} m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b + 1}. \quad (2.31)$$

$$\langle n', m', n'_b | \hat{b} J_z | n, m, n_b \rangle = \sqrt{n_b} m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b - 1}. \quad (2.32)$$

Finalmente, nuestro hamiltoniano \hat{H}_{TCH} queda representado en esta base como:

$$\begin{aligned}
 \langle n', m', n'_b | \hat{H}_{TCH} | n, m, n_b \rangle = & \omega_n D \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b} + \omega_0 (j + m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b}) \\
 & + \frac{2g}{\sqrt{N}} (\sqrt{n_1} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{n'n-1} \delta_{m'm+1} \delta_{n'_b n_b} \\
 & + \sqrt{n_1 + 1} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{n'n+1} \delta_{m'm-1} \delta_{n'_b n_b}) \\
 & + \omega_v n B \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b} \\
 & + \omega_c (\sqrt{n_b + 1} m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b + 1} \\
 & + \sqrt{n_b} m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b - 1}).
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

2.6. Conservación total de excitaciones

Como se está retringiendo al caso cuando el número *total* de excitaciones se conserva, como en el caso de TC, entonces:

$$\hat{\Lambda} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{J}_z + j + \hat{b}^\dagger \hat{b}, \tag{2.34}$$

entonces, el último término de la ecuación anterior, que representa a las vibraciones del sistema, siempre será cero por lo que debemos plantear una base que incluya los operadores de creación y aniquilación de los modos vibracionales y éstos tomen valores arbitrarios. Entonces la base es tal que n_b debe ir de cero a un valor n_{bmax} que es un número máximo de vibraciones. De tal forma que $\lambda = n + j + m + n_{bmax}$ ya no se conserva, sólo se conserva el operador de excitaciones original que conmuta con el Hamiltoniano de TC, es decir, $\lambda = n + j + m$. De esta manera podemos obtener los espectros de energía de los polaritones del modelo de TCH como se muestra a continuación.

3. ¿Qué es el acoplamiento ultra-fuerte?

Cuando la frecuencia de resonancia de la materia (ω_a) es igual a ω_c (frecuencia de la cavidad), entonces se dice que se entra en resonancia $\omega_a = \omega_c \equiv \omega_0$. Las frecuencias propias del sistema acoplado se obtienen como: $\omega_{\pm} = \omega_0 + g$, correspondiente al polariton inferior (LP) y al polariton superior (UP). La diferencia de frecuencia entre ellos, $2g$, se llama *División de vacío de Rabi* (VRS). El acoplamiento fuerte (SC) ocurre cuando el VRS, $2g$, es mayor que la mitad del valor de la superposición de las velocidades de decaimiento de la materia y la luz:

$$2g > \frac{(k + \gamma)}{2},$$

donde γ es la velocidad de decaimiento de la materia y κ la velocidad de decaimiento del fotón, y el acoplamiento ultrafuerte (USC) se logra cuando g se convierte en una fracción considerable de ω_0 (10 %) [18]. Para medir la fuerza del acoplamiento se usa:

$$\eta \equiv \frac{g}{\omega_0},$$

η es la fuerza de acoplamiento generalizada. Entonces:

$$USC : \eta > 0.1$$

El acoplamiento ultra-fuerte es un régimen de la interacción entre la luz y la materia que surge cuando $g \sim \omega_0$ de modo que $\frac{g}{\omega_0} > 0.1$ o bien $\frac{\omega}{g} < 10$.

Pero ¿por qué investigar el acoplamiento ultrafuerte? El régimen USC permite interacciones más eficientes entre sus componentes fundamentales. Por ejemplo, el acoplamiento entre un solo fotón y un solo emisor da como resultado fenómenos no lineales significativas, (ya que es posible la interacción entre fotones a través de las excitaciones de la materia) que se han utilizado en dispositivos ópticos que operan en el régimen SC [19]. El aumento de η de SC a USC da como resultado un mejor rendimiento de dichos dispositivos [18].

Por otro lado, se han identificado varios sistemas donde el USC puede ser realizado como es el caso de los circuitos superconductores QED o los sistemas de estado sólido dentro de microcavidades que estamos investigando en este proyecto. En este contexto, se pueden simular cuánticamente los modelos de Rabi [20], la física de Dicke [21], la ecuación de Dirac [22, 23]. El estudio del régimen de la USC en semiconductores se demostró por primera vez usando polaritones entre subbandas en pozos cuánticos dopados en microcavidades [24], en donde las capas nanoscópicas de diferentes semiconductores crean un potencial de confinamiento, que divide las bandas electrónicas en subbandas paralelas discretas [25]. Éste es un tema nuevo, con pocos datos teóricos y experimentales y que seguramente, en un futuro no muy lejano dará mucho de que hablar [26, 27]. La promesa es que se puedan implementar todos los regímenes del acoplamiento luz-materia, del acoplamiento débil (WC) al fuerte profundo (DSC) en un sólo sistema.

También el USC para construir protocolos de procesamiento de información cuántica [28] con estados fundamentales entrelazados de muchos cuerpos para la corrección de errores cuánticos [29] o puertas cuánticas ultrarrápidas de 2 qubits [30]. Otra posible aplicación del USC es la batería cuántica donde la coherencia o entrelazamiento cuántico mejora la densidad de energía almacenada y la potencia de carga, acortando el tiempo de carga por \sqrt{N} para $N \gg 1$, debido al entrelazamiento entre átomos mediado por el modo fotónico [31]. La lista de aplicaciones emergentes de USC es mucho más larga e incluye: metrología cuántica, óptica no lineal, optomecánica cuántica, plasmónica cuántica, superconductividad, metamateriales, teoría cuántica de campos, termodinámica cuántica, química QED y ciencia de materiales, entre otros.

Incluso se ha propuesto que el USC puede ser usado para la detección de materia oscura a partir un haloscopio de axiones para la detección de axiones galácticos mediante USC magnón-fotón en una cavidad de frecuencia GHz. El USC magnón-fotón amplía el rango de esa frecuencia (energía) en el haloscopio y reduce el espacio de parámetros donde pueden existir axiones [32].

3.1. Hamiltoniano de DH

Para poder estudiar el USC hay que recordar que la RWA ya no es válida, es decir, ahora debemos considerar el Hamiltoniano completo con los términos contrarrotantes:

$$(\hat{a}J_- + \hat{a}^\dagger J_+).$$

En general, el modelo que se usa para el estudio del acoplamiento ultra-fuerte de grados de libertad colectivos es el modelo de Dicke, Ec.[3.1]:

$$\hat{H}_D = \omega_c \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_a \hat{J}_z + \frac{g}{\sqrt{N_a}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \hat{J}_x, \quad (3.1)$$

El modelo de Dicke proviene originalmente de la óptica cuántica. Así se asume un gas atómico de baja densidad con el fin de que no exista superposición de las funciones de onda de los átomos. Al mismo tiempo éstos deben estar cerca unos de otros para poder usar la aproximación de onda larga para el campo (el campo no cambia, es el mismo para todos los átomos), esto es posible para longitudes de onda grandes como microondas. Otra aproximación que requiere es que el átomo sólo tenga dos niveles energéticos.

Sin embargo, este modelo no está completo en el caso de los excitones-polaritones orgánicos, pues se requiere la parte vibracional de la materia, además de los ignorar la RWA, entonces el Hamiltoniano de Dicke-Holstein aproximado toma la forma:

$$\hat{H}_{DH} = \omega \hat{a}^\dagger \hat{a} + \omega_0 J_z + \frac{g}{\sqrt{N}} [(\hat{a}J_+ + \hat{a}^\dagger J_-)(\hat{a}J_- + \hat{a}^\dagger J_+)] + \omega_v \hat{b}^\dagger \hat{b} + \kappa J_z (\hat{b}^\dagger + \hat{b}). \quad (3.2)$$

En el tercer término de la ecuación (3.2) se tienen a los términos rotantes y contrarrotantes y los últimos dos factores de éste hamiltoniano hacen referencia a los modos vibracionales.

Para resolverlo numéricamente y encontrar el espectro de energía de los polaritones se considera nuevamente la base de Fock establecida anteriormente, Ec(2.25), junto con los elementos de matriz dados por las ecuaciones EC.(2.26 - 2.32) pero ahora se debe añadir los elementos de matriz de los términos contrarrotantes:

$$\langle n', m', n'_b | \hat{a}J_- | n, m, n_b \rangle = \sqrt{n_1} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{n'n+1} \delta_{m'm-1} \delta_{n'_b n_b}. \quad (3.3)$$

$$\langle n', m', n'_b | \hat{a}^\dagger J_+ | n, m, n_b \rangle = \sqrt{n_1 + 1} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{n'n-1} \delta_{m'm+1} \delta_{n'_b n_b}. \quad (3.4)$$

De este modo, el Hamiltoniano \hat{H}_{DH} , en forma matricial, en ésta base queda representado como:

$$\begin{aligned}
\langle n', m', n'_b | \hat{H}_{DH} | n, m, n_b \rangle = & \omega n D \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b} + \omega_0 (j + m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b}) \\
& + \frac{2g}{\sqrt{N}} \left[\left(\sqrt{n_1} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{n'n-1} \delta_{m'm+1} \delta_{n'_b n_b} \right. \right. \\
& + \left. \left. \sqrt{n_1+1} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{n'n+1} \delta_{m'm-1} \delta_{n'_b n_b} \right) \right. \\
& * \left(\sqrt{n_1} \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{n'n+1} \delta_{m'm-1} \delta_{n'_b n_b} \right. \\
& + \left. \left. \sqrt{n_1+1} \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{n'n-1} \delta_{m'm+1} \delta_{n'_b n_b} \right) \right] \\
& + \omega_v n B \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b} \\
& + \omega_c (\sqrt{n_b+1} m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b+1} \\
& + \sqrt{n_b} m_1 \delta_{n'n} \delta_{m'm} \delta_{n'_b n_b-1}).
\end{aligned} \tag{3.5}$$

4. Resultados

4.1. Espectro del Hamiltoniano TCH en SC

A continuación se analiza la evolución de los niveles de energía, como función de la desintonización, resultante de la solución completa del modelo de TCH para el acoplamiento fuerte. Estudiaremos un número pequeño de átomos y excitaciones para poder conectar entre los resultados del caso del acoplamiento fuerte y el ultra-fuerte. Para esto hay que recordar que n_b aquí está tomado de forma independiente, es decir, ya no se conserva. Entonces el número de fotones n tomará la forma conocida:

$$n = \lambda - (m + j),$$

solo que ahora n_b tendría cualquier valor desde 0 hasta un n_{bmax} . Tomando por ejemplo $j = 2$ (4 átomos) fijo, las excitaciones $\lambda = 2$ y el número de vibraciones independiente de la base, entonces, los estados que tendremos serán:

λ	n	$m + j$	$ n, m, n_b\rangle$
$\lambda = 2$	2	0	$ 2, -2, n_b\rangle$
	1	1	$ 1, -1, n_b\rangle$
	0	2	$ 0, 0, n_b\rangle$

Es decir, por cada valor de n_b desde 0 hasta n_{bmax} se tiene el mismo número de estados que surgieron sin n_b , entonces para 2 excitaciones hay 3 estados con $n_b = 0$ y 6 con $n_b = 1$ de la base para los niveles de energía, ver Fig. 10b).

Si $\lambda = 5$ se tendrán cinco estados por cada valor de n_b para los distintos niveles de energía:

λ	n	$m + j$	$ n, m, n_b\rangle$
$\lambda = 5$	5	0	$ 4, -2, n_b\rangle$
	4	1	$ 3, -1, n_b\rangle$
	3	2	$ 2, 0, n_b\rangle$
	2	3	$ 1, 1, n_b\rangle$
	1	4	$ 0, 2, n_b\rangle$

De modo que si todas las excitaciones se conservan, entonces naturalmente se recupera el mismo resultado que Tavis-Cummings. En ambos casos n_b puede tomar cualquier valor entre 0 y n_{bmax} .

A continuación se presentan algunas gráficas que muestran como evolucionan los niveles de energía para distinto número de átomos y de excitaciones:

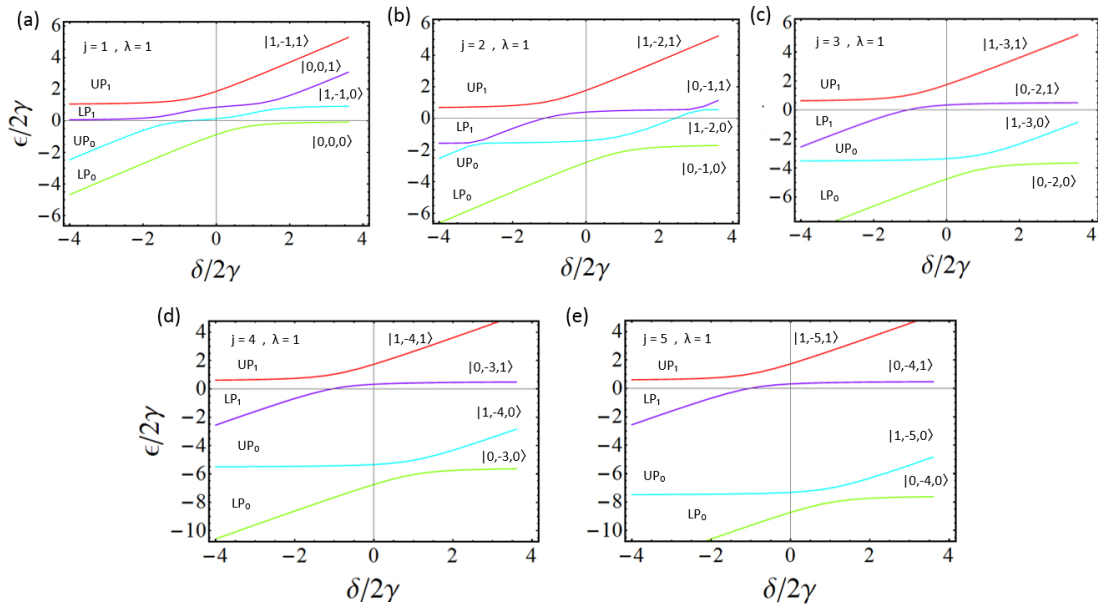


Figura 9: Espectro para $\gamma = 0.5$, $\kappa = \omega_b = \omega_0 = 1$ y $n_{bmax} = 1$, para diferentes valores de j y una excitación $\lambda = 1$, como función de la energía y la desintonización.

En la Fig. 9 se presenta el caso en el que mantenemos fijos el acoplamiento luz-materia γ , el acoplamiento vibración-materia κ , y consideramos resonancia $\omega_b = \omega_0$. Para $n_b = 0, 1$. Se puede ver como a medida que la cantidad de átomos va aumentando las ramas polaritónicas se van separando cada vez más, haciendo mas evidente los respectivos polaritones superiores e inferiores pertenecientes a los estados con vibración (UP_1 y LP_1) y sin vibración (UP_0 y LP_0). Cabe añadir que para una excitación $\lambda = 1$ solo existen 4 estados y que los polaritones con vibraciones van arriba pues tienen mayor energía y los polaritones inferiores se van desplazando hacia abajo pues la energía se va haciendo mas profunda, pues la energía base del sistema excitónico va como $\sim j\omega_0$.

Para identificar los respectivos polaritones se debe considerar la distancia que hay entre las distintas ramas, justo donde éstas se curvan, en este caso estamos considerando una distancia de $2\gamma = 1$ dado que $\gamma = 0.5$ y observando detenidamente cada gráfica se puede

ver que los polaritones están etiquetados correctamente pues presentan una distancia de 1. La desintonización donde esto ocurre corresponde al máximo de mezcla entre la luz y la materia.

Entonces se tiene que la rama roja y morada son los UP y LP respectivos a los estados con vibración y las ramas azul y verde son los UP y LP respectivos a los estados sin vibración, esto como resultado de la combinación lineal de un estado de 1 fotón excitado con hasta 10 átomos ($j = 5$) excitados.

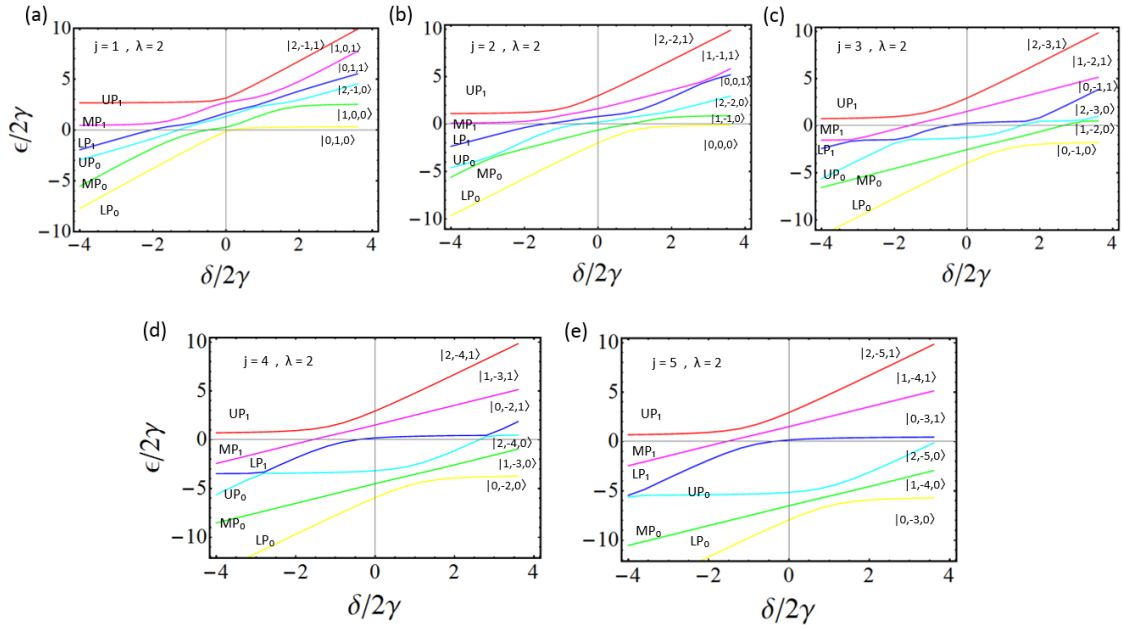


Figura 10: Espectro para $\gamma = 0.5$, $\kappa = \omega_b = \omega_0 = 1$ y $nb_{max} = 1$, para diferentes valores de j y ahora $\lambda = 2$ excitaciones, como función de la energía y la desintonización.

En la Fig. 10 tomamos los mismos parámetros que en la Fig. 9, pero considerando que el sistema tiene acceso a dos excitaciones. En este caso existen 6 estados de energía, los primeros 3 son los estados con vibración ya que tienen mayor energía y los últimos 3 son los estados sin vibración que se van desplazando hacia abajo del espectro conforme aumenta el número de átomos. También, conforme el número de átomos va aumentando las ramas polaritónicas se van separando hasta tener una forma más clara, sin embargo, entre UP y LP existe una rama polaritónica a la que se le ha puesto el nombre de MP, la cual es el polaritón que representa la energía de la luz y es una línea diagonal, ver Fig. 10 (e), pues cabe recordar que tanto el polaritón inferior como el superior son una combinación lineal de luz y materia.

De la figura anterior se puede deducir que cuando la desintonización es negativa se tiene luz y cuando la desintonización es positiva se tiene materia, pero cada rama da valores diferentes de esa descomposición para un mismo valor de desintonización. Se puede deducir también que al aumentar los átomos ya no habrá más estados porque el número de excitaciones limita la energía disponible en el sistema. El número de estados aumentará si permitimos más excitaciones en el sistema.

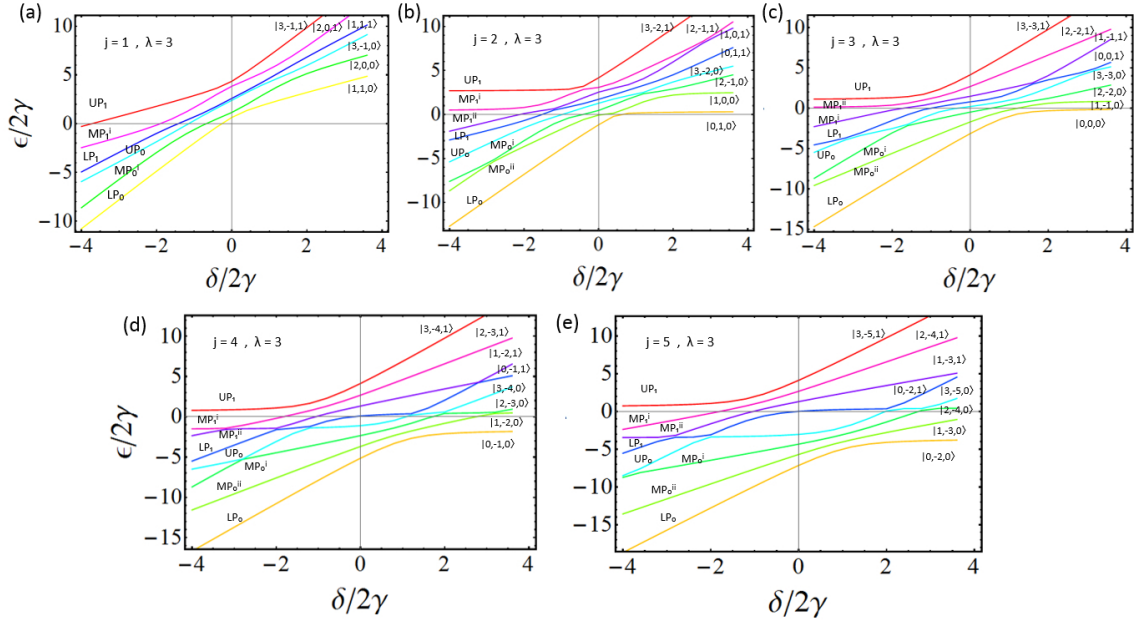


Figura 11: Espectro con los mismos valores que en las Fig. 9 y 10 pero con 3 excitaciones.

Con 3 excitaciones se tienen 6 estados para 2 átomos, sin embargo, a partir de 4 átomos van a existir 8 estados, ver Fig. 11, ya que para 2 átomos m solo puede tener 3 valores pero a partir de 4 átomos m tendrá 5 valores que serán combinados con 3 fotones excitados. Conforme se tiene un mayor número de ramas polaritónicas se vuelve más difícil saber cuáles son los UP y LP respectivos a estados con y sin vibraciones hasta que se llega a 10 átomos, ver Fig. 11(e). Ahora bien, se puede ver que entre los UP y LP se tienen dos ramas intermedias a las que se les ha llamado MP^i y MP^{ii} , estos polaritones, que hacen referencia a los fotones (luz), indican que según se vayan pareciendo más a la diagonal entonces se tendrá más componente fotónica, es decir, habrá más luz que materia.

Ahora se deja fijas las excitaciones y los átomos ($j = 1$, $\lambda = 1$, $n_{bmax} = 1$) y se cambia el valor del acoplamiento γ de 0 a 2 con $\kappa = 1$ en resonancia, ver Fig. 12. Se puede ver que los estados con un número dado cuantos de vibración son las ramas roja y azul, mientras que los estados sin cuantos de vibración son las ramas morada y verde. Como se hizo el cálculo con una sola excitación entonces se obtienen 4 estados y cuando $\gamma = 0$, ver Fig. 12 (a), se puede ver que la energía está totalmente degenerada, lo que corresponde al sistema desacoplado donde no hay cruce evitado sino sólo cruce entre los estados de luz y de materia.

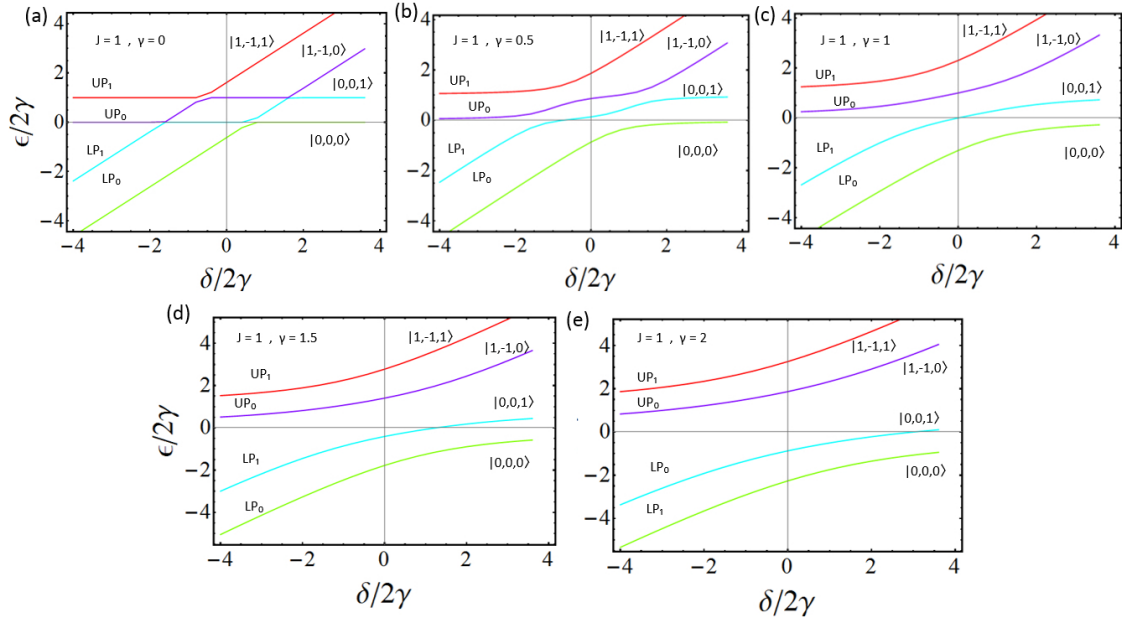


Figura 12: Espectro para $\kappa = \omega_b = \omega_0 = n_{b_{max}} = \lambda = 1$, para diferentes valores de γ y $j=1$, como función de la energía y la desintonización.

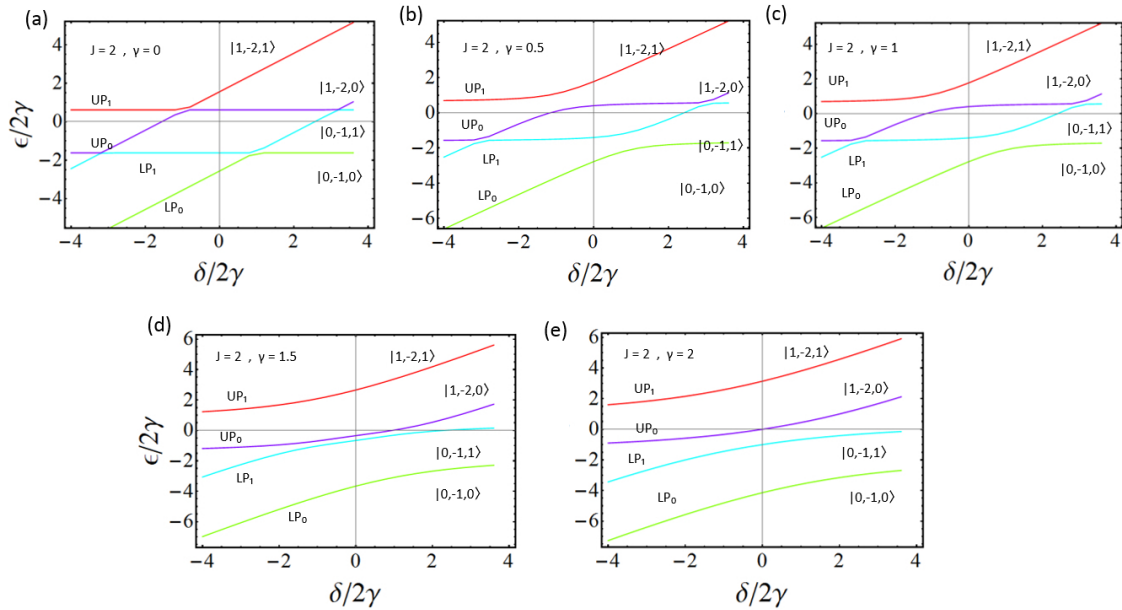


Figura 13: Espectro para $\kappa = \omega_b = \omega_0 = n_{b_{max}} = \lambda = 1$, para diferentes valores de γ y $j = 2$, como función de la energía y la desintonización.

En la Fig. 13 fijamos ahora $j = 2$ y nuevamente variamos γ notamos que las ramas se van separando, permitiendo identificar los polaritones con un número dado cuantos de vibración y sin cuantos de vibración. Los espectros no varían mucho en comparación con la Fig. 12, pero nos da la suficiente información para observar que cuando el número de átomos aumenta entonces la energía se recorre hacia abajo, debido a que entre más átomos

se metan al sistemas mayor es la energía requerida para excitarlos, es decir, la energía se hace mas profunda y UP_1 siempre se mantiene al mismo nivel pero los otros polaritones se ven desplazados hacia abajo de la gráfica, comparado con el caso de $j = 1$. La Fig.13(a) es de estados totalmente degenerados, donde al igual que la Fig.12, corresponde al sistema desacoplado donde sólo hay cruce entre los estados de luz y de materia.

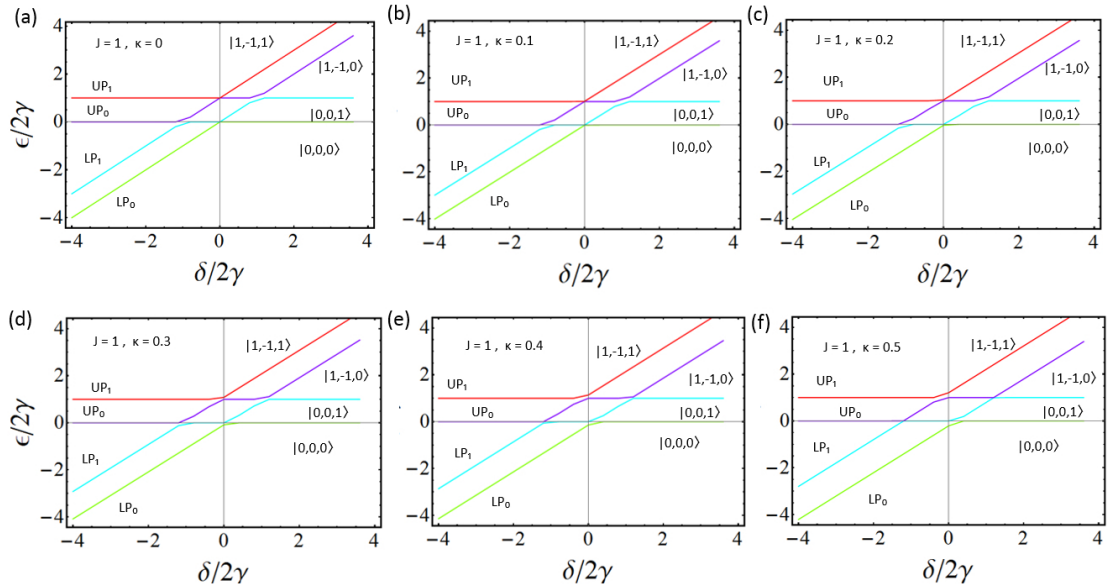


Figura 14: Espectro para $\gamma = 0, \omega_b = \omega_0 = nb_{max} = \lambda = 1$, para diferentes valores de κ y $j = 1$, como función de la energía y la desintonización.

Se sabe ahora que cuando no hay acoplamiento entre los polaritones ($\gamma = 0$), la energía esta totalmente degenerada, ahora, si se mantiene el acoplamiento nulo y se varia κ , ver Fig. 14 los estados se mantienen desacoplados y cuando $\kappa = 0$ hay una pequeña distancia entre los polaritones, ver Fig. 14(a), pero conforme va aumentando κ esa distancia va desapareciendo hasta que $\kappa = 0.5$, ver Fig. 14(f), el polaritón superior sin modos vibracionales y el polaritón inferior con modos vibracionales presentan cruces cuando la desintonización es -1 y cuando es $+1$. Esto indica que estos polaritones empiezan a interactuar entre sí.

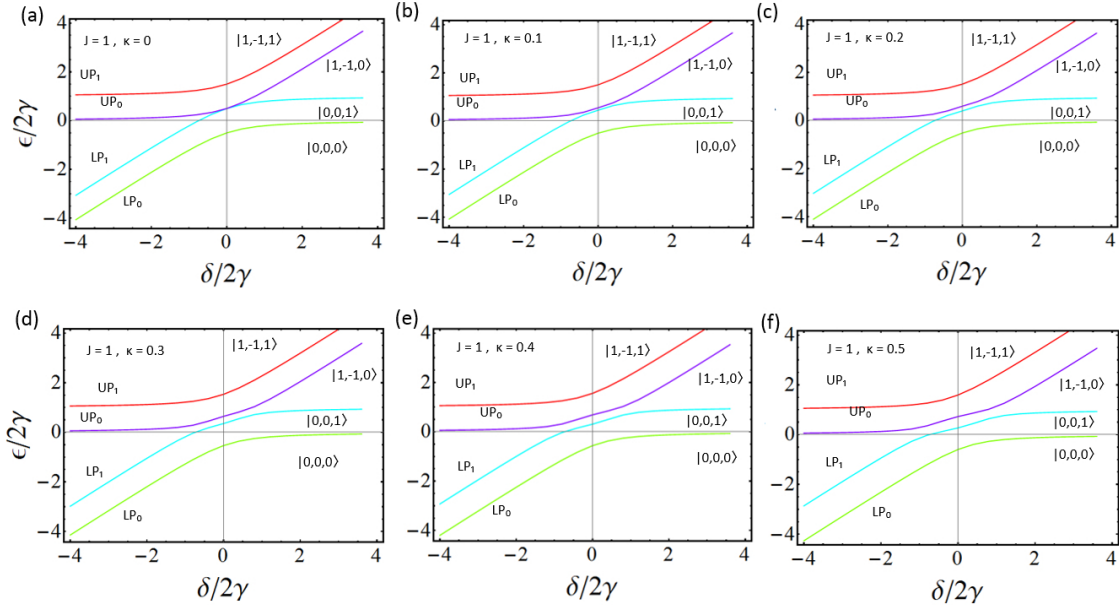


Figura 15: Espectro para $\gamma = \omega_b = \omega_0 = nb_{max} = \lambda = 1$, para diferentes valores de κ y $j = 1$, como función de la energía y la desintonización.

Finalmente, la Fig. 15 nos muestra como van cambiando los niveles de energía para $j = 1$ y 1 excitación pero variando los valores de κ desde 0 hasta 0.5, aquí ya se ha tomado un valor para el acoplamiento luz-materia. En Fig.14(a) hay un cruce con los polaritones morado y azul justo cuando $\delta = 0$, indicando que ambos polaritones tienen una mezcla de propiedades de luz y materia. Los espectros entre sí casi no cambian pues κ , solo va a juntar o repeler las ramas, en este caso quiere decir que, a medida que κ aumenta, comenzará a haber una repulsión entre los polaritones, ver Fig. 15 (b-f), mientras que con $\kappa = 0$ se obtienen los resultados del Hamiltoniano de Tavis-Cummings. Como se tienen 4 estados dos de ellos se cruzan. Ver Fig 15 (a).

4.2. Espectro del Hamiltoniano TCH en USC

En esta sección se presentan los espectros de energía en el USC, es decir, para el Hamiltoniano de Dicke-Holstein \hat{H}_{DH} . Se observará qué sucede con cada uno de los casos revisados al incluir los términos contrarrotantes. Cabe destacar que sólo se está restringiendo al espacio de excitaciones conservadas, cuando, en realidad, los términos contrarrotantes los mezclan.

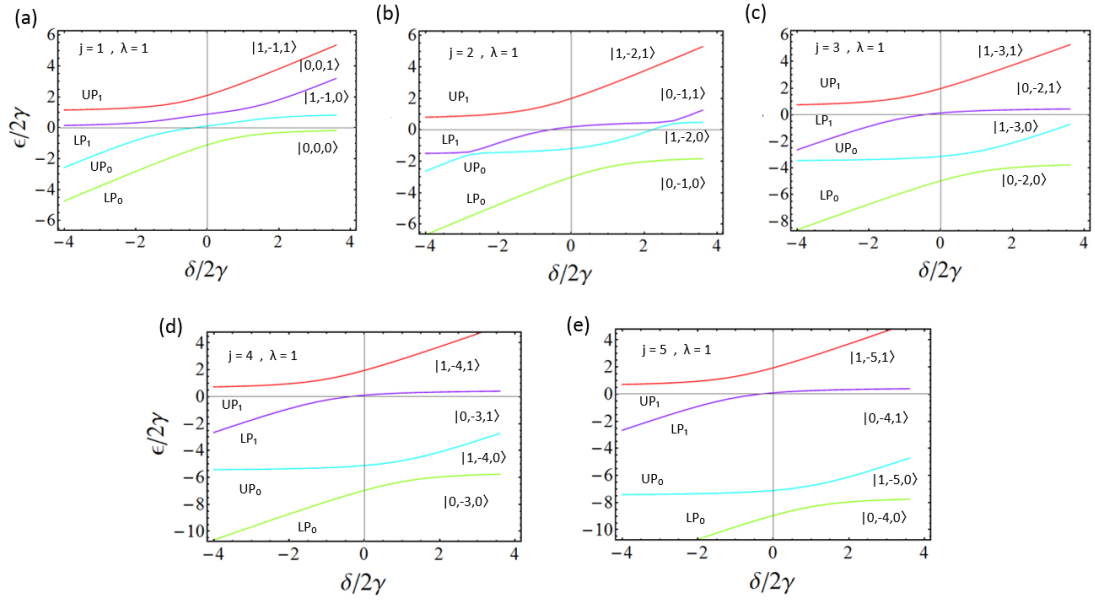


Figura 16: Espectro del Hamiltoniano de DH para $\gamma = 0.5$, $\kappa = \omega_b = \omega_0$ con $n_{bmax} = 1$, para diferentes valores de j y una excitación $\lambda = 1$, como función de la desintonización.

Primero, comparando la Fig. 9, con la Fig. 16 se ve que las ramas de polaritones evolucionan más suaves, es decir, no tienen tantas perturbaciones, sin embargo, la distancia entre polaritones es $2\gamma > 1$, esto significa que ahora se necesita mas energía que el acoplamiento entre luz y materia para pasar entre los estados de la base.

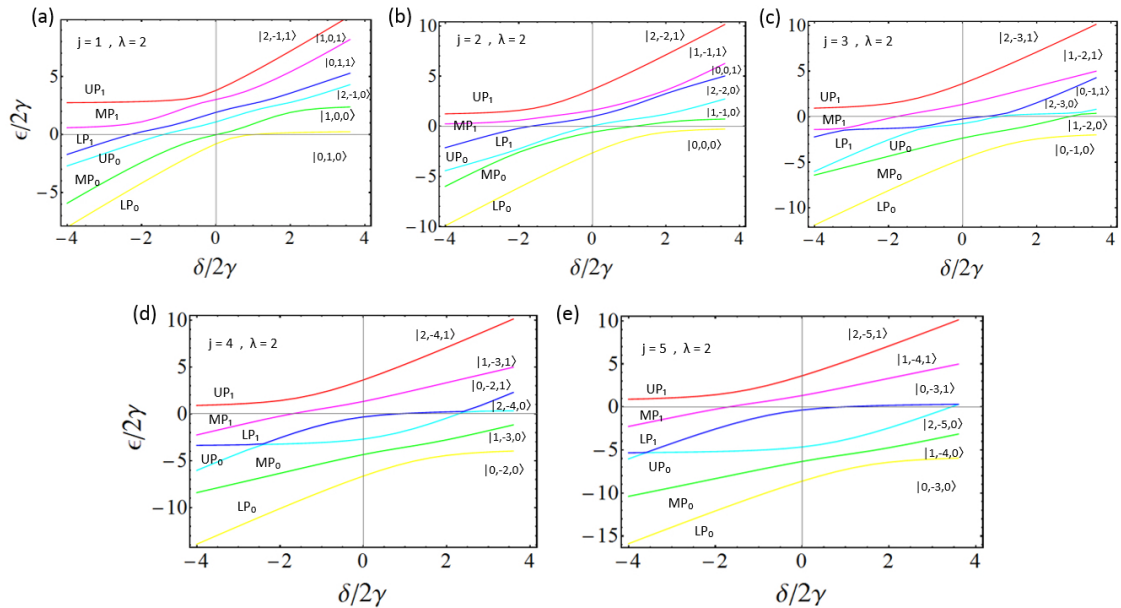


Figura 17: Espectro del Hamiltoniano DH para $\gamma = 0.5$, $\kappa = \omega_b = \omega_0 = 1$ y $n_{bmax} = 1$, para diferentes valores de j y 2 excitaciones, como función de la desintonización.

En la Fig. 17 se tienen 6 estados de la base representativos a cada polaritón. En la Fig. 17 (a) se ve que LP_1 y LP_0 tienen cierta interacción, la cual se va haciendo mas fuerte conforme aumenta el número de átomos a 6, Fig. 17 (c), practicamente éstos dos polaritones estan muy cerca uno del otro cuando la desintonización $\delta = 0$, entonces se puede decir que estos los polaritones tienen, en este punto, una forma equipartita de luz y materia.

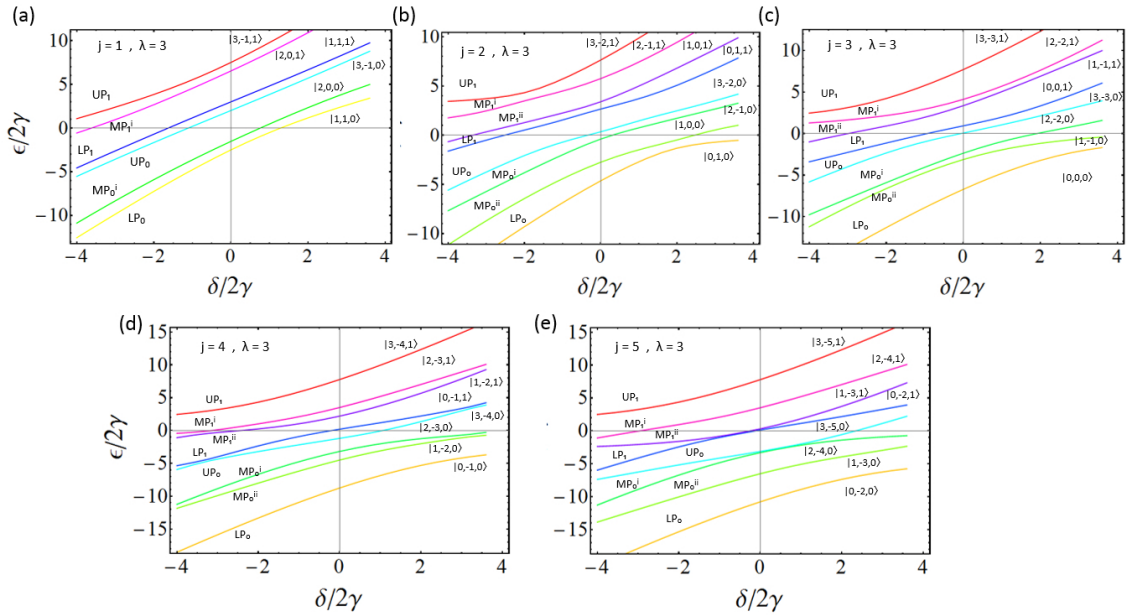


Figura 18: Espectro para el Hamiltoniano DH con $\gamma = 0.5$, $\kappa = \omega_b = \omega_0 = 1$ y $n_{bmax} = 1$, para diferentes valores de j y 3 excitaciones $\lambda = 1$, como función de la desintonización.

La Fig. 18 (a) tiene 6 estados los cuales son casi líneas rectas, en los estados con vibración los polaritones superior y el de la luz (MP) presentan interacción; en los estados sin vibración, los polaritones inferior y el de la luz también tienen una interacción, esto significa que los polaritones que estan cerca de MP son practicamente luz. A partir de 4 átomos se tienen 8 estados de la base, con dos polaritones en medio de LP y UP, igual que en el acoplamiento fuerte pero en este caso los polaritones MP_0 y MP_1 ya no son líneas rectas, Fig. 18 (b)-(e), esto porque ahora se necesita mas energía para llegar a los estados de la base.

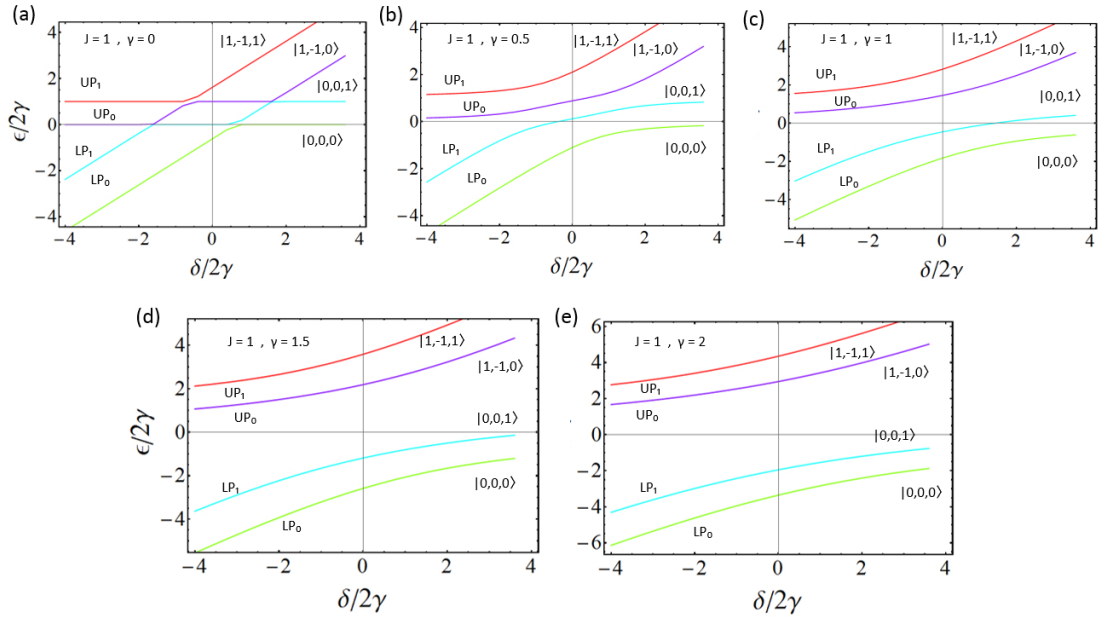


Figura 19: Espectro del Hamiltoniano de DH para $\kappa = \omega_b = \omega_0 = 1$ y $n_{bmax} = \lambda = 1$, para diferentes valores de γ y $j = 1$ como función de la desintonización.

En la Fig. 19(a) las ramas de polaritones están degeneradas ya que no hay fuerza de acoplamiento. Conforme se va aumentando el acoplamiento se puede ver cómo el polaritón superior e inferior se van repeliendo, los UP van incrementando de energía y se mantienen con una pequeña distancia entre ellos mientras que los LP se van desplazando hacia abajo, señal de que la energía es más profunda y, al igual que los UP, también tienen poca distancia entre ellos. La separación es más dramática que en el caso de TCH.

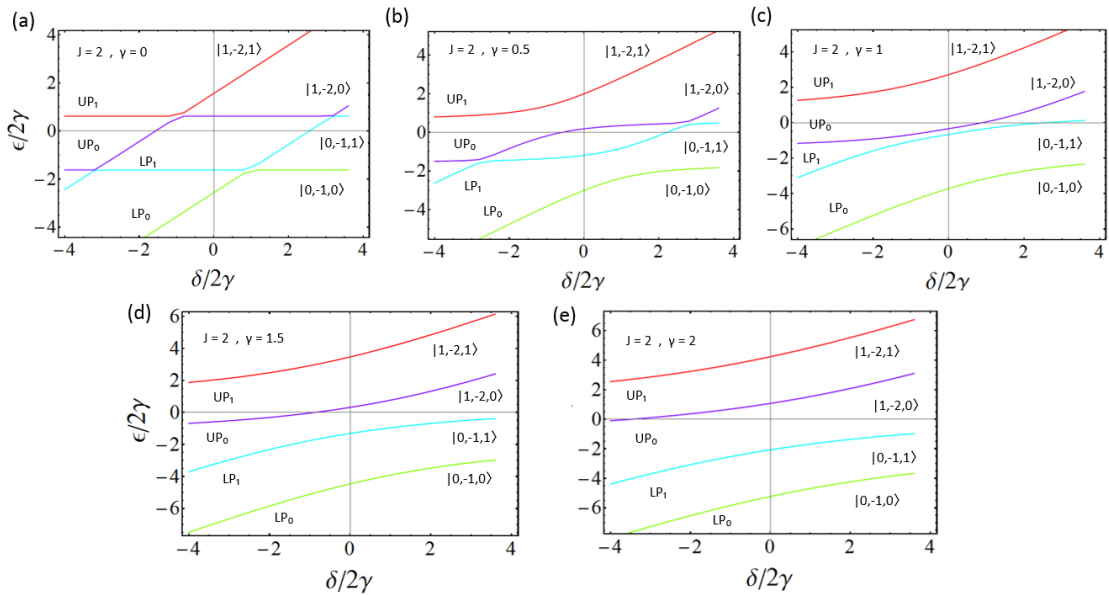


Figura 20: Espectro del Hamiltoniano de DH para $\kappa = \omega_b = \omega_0 = 1$ y $n_{bmax} = \lambda = 1$, para diferentes valores de γ y $j = 2$ como función de la desintonización.

En la Fig. 20 ahora se tienen 4 átomos, nuevamente se tienen energías de polaritones degeneradas en ausencia de fuerza de acoplamiento, Fig. 20 (a), y según se va aumentando el acoplamiento las ramas polaritónicas se van separando una de otra. Los UP van tomando mas energía y los LP se van haciendo mas profundos. En comparación con la Fig. 13 los UP ya presentan una distancia mayor entre ellos al igual que los LP. Esto significa que entre mas átomos se tengan mayor debe ser la fuerza de acoplamiento para tener a los polaritones acoplados.

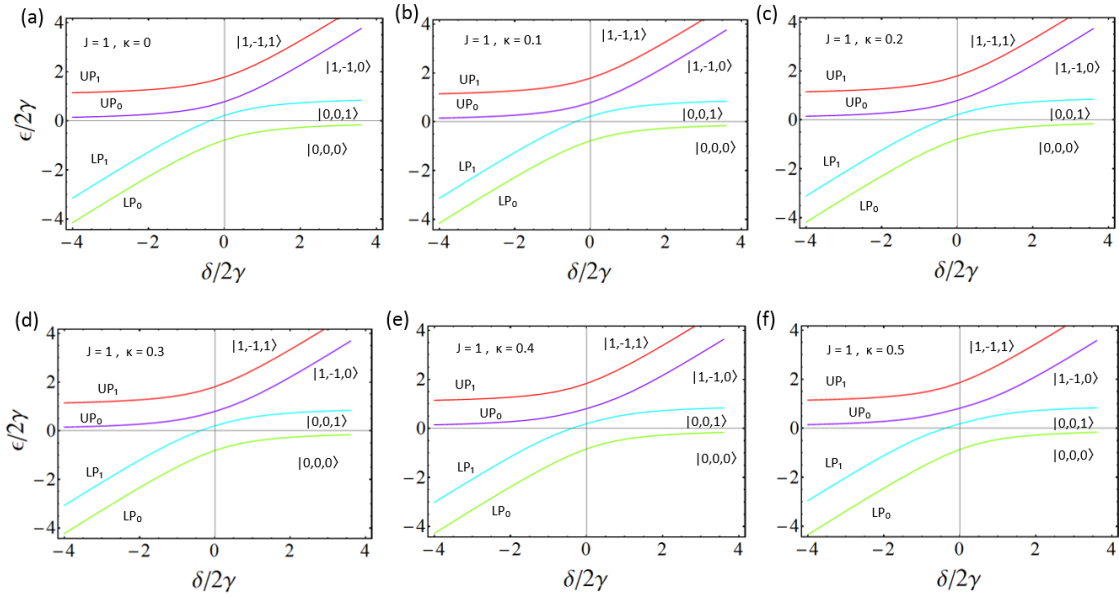


Figura 21: Espectro para $\gamma = 0.5, \omega_b = \omega_0 = nb_{max} = \lambda = 1$, para diferentes valores de κ y 1 átomo, como función de la energía y la desintonización.

Cuando $\kappa = 0$ en comparación con el acoplamiento SC, los polaritones nunca se juntan. Además, la distancia 2γ que separa a los polaritones va aumentando ligeramente conforme aumenta el valor de κ , pero la distancia entre los polaritones UP_0 y LP_1 es la misma en todos los espectros. Este es parte de los resultados que se quiere investigar a profundidad en un proyecto futuro.

5. Conclusiones

En este proyecto se investigaron los grados de libertad colectivos de los excitones-polaritones en un semiconductor orgánico dentro de una microcavidad en los regímenes de acoplamiento fuerte y ultrafuerte (USC) para la interacción luz-materia. Para esto se usó el modelo de Tavis-Cummings-Holstein en el acoplamiento fuerte (SC) para posteriormente incluir los términos contrarrotantes en el USC pasando al Hamiltoniano de Dicke-Holstein (DH). En ambos casos se incluye las interacciones con modos vibracionales, y se consideraron pocas excitaciones de ese grado de libertad vibracional colectivo, incluyendo un par de hipótesis adicionales: en el USC se está aproximando a estados que no se conservan las excitaciones totales para la base que se implemento donde las vibra-

ciones son independientes de la base.

Se obtuvieron los espectros de energía numéricamente como función de la desintonización, según el número de excitaciones, número de átomos, para distintos valores de la interacción y para distintos valores del factor κ en el SC y en el USC donde ya no se considera la aproximación de onda rotante [27]. Hay algunos aspectos genéricos del problema. Por ejemplo, cuando hay mas excitaciones hay mas ramas polaritónicas, cuando no hay fuerza de interacción γ se tienen polaritones degenerados, la energía del estado base es mas profunda con el incremento en el número de átomos.

En el USC la interacción entre las ramas polaritónicas pasa de tener mas fuerza representada por repulsión entre ellas y en ocasiones a tener cruces con los polaritones de luz (ver Fig. 17). Cuando γ aumenta en el USC los polaritones superiores van presentando una repulsión considerable con los polaritones inferiores. Finalmente, cuando κ es muy grande, los polaritones se van haciendo paralelos en ambos regímenes pues la distancia entre el polaritón superior y el inferior va aumentando también en la medida en la que κ atrae o repele las ramas como se observaba desde la aproximación de Holstein-Primakoff.

Con esto se puede concluir de forma más general que a diferencia del régimen SC, el modelo de Dicke-Holstein para el USC dá una mejor aproximación al estudio de los polaritones pues ahora ya se consideran los términos contrarrotantes, además la energía se hace mas profunda cuando hay más átomos y la distancia entre los polaritones (VRS) es mayor que 1 (en el SC es igual a 1) por lo que se requiere de más energía para llegar a los estados de la base y para que los polaritones se mantengan acoplados.

Aun existen muchas preguntas sobre cómo explicar y aplicar el régimen USC pues es un tema muy reciente, sin embargo, es una herramienta que promete ser de gran utilidad para las tecnologías cuánticas,

5.1. Trabajo a futuro

En el futuro, el proyecto a investigar sería resolver el Hamiltoniano de Dicke-Holstein en la base completa de estados y de ser posible cuando el número de modos vibracionales n_b ya no es independiente de la base [1]. Para ello se necesitará desarrollar nuevo código en *Mathematica* en el que se diagonalice el Hamiltoniano en la nueva base, considerando los términos contrarrotantes pues se quiere trabajar en el régimen USC, con el objetivo de encontrar los grados de libertad colectivos de los nuevos polaritones.

Referencias

- [1] M Ahsan Zeb, Peter G Kirton, and Jonathan Keeling. Exact states and spectra of vibrationally dressed polaritons. *ACS Photonics*, 5(1):249–257, 2018.
- [2] Robert Seiple Knox. Theory of excitons. *Solid State Phys.*, 5, 1963.

- [3] Hui Deng, Gregor Weihs, David Snoke, Jacqueline Bloch, and Yoshihisa Yamamoto. Polariton lasing vs. photon lasing in a semiconductor microcavity. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 100(26):15318–15323, 2003.
- [4] H Kondo, Y Yamamoto, A Takeda, S Yamamoto, and H Kurisu. Optical responses in single-crystalline organic microcavities. *Journal of luminescence*, 128(5-6):777–779, 2008.
- [5] J. Frenkel. On the transformation of light into heat in solids. i. *Physical Review* 37: 17, 1(1), 1931.
- [6] F Jaramillo. Semiconductores orgánicos de facil procesamiento para transistores de efecto de campo (ofets). *Universidad Tecnológica De Pereira. Issn 0122-1701*, 1(1), 2007.
- [7] Fabrice P. Laussy, Elena del Valle, and Carlos Tejedor. Strong coupling of quantum dots in microcavities. *Phys. Rev. Lett.*, 101:083601, Aug 2008.
- [8] A. Amo, D. Sanvitto, F. P. Laussy, D. Ballarini, E. del Valle, M. D. Martin, A. Lemaître, J. Bloch, D. N. Krizhanovskii, M. S. Skolnick, C. Tejedor, and L. Viña. Collective fluid dynamics of a polariton condensate in a semiconductor microcavity. *Nature*, 457(7227):291–295, Jan 2009.
- [9] Duong Thi Ha, Dinh Thi Thuy, Vo Thi Hoa, Tran Thi Thanh Van, and Nguyen Ai Viet. On the theory of three types of polaritons (phonon, exciton and plasmon polaritons). 865:012007, jun 2017.
- [10] Cohen Stephane. Strong exciton-photon coupling in organic semiconductor microcavities. *Princeton University*, 1(1), 2010.
- [11] Yuta Tsuchimoto, Hikaru Nagai, Masamitsu Amano, Kazuki Bando, and Hisao Kondo. Cavity polaritons in an organic single-crystalline rubrene microcavity. *Applied Physics Letters*, 104(23):90_1, 2014.
- [12] Ángel Andrés Torres Rosales. *Fabricación Y Caracterización De Microcavidades Ópticas De Silicio Poroso*. PhD thesis, Universidad Autónoma De San Luis Potosí., 2019.
- [13] y Gómez Vieyra A. Ibarra Villalón H.E., Pottiez O. El camino hacia la luz láser. *Revista mexicana de física E*, 64(2), 100-107, 1(1), 2018.
- [14] Oscar Ruiz Cigarrillo. *Crecimiento Y Caracterización De Microcavidades Ópticas*. PhD thesis, Universidad Autónoma De San Luis Potosí., 2017.
- [15] Leandro García-Calderón Palomino. *Simulación de la dinamica del micromáser más allá de la RWA*. PhD thesis, PUCP., 2003.
- [16] Allen L. Y J.H. Eberly. Optical resonance and two-level atoms. *Dover Publications Inc*, 1(1):41, 1987.

- [17] Iacopo Carusotto and Cristiano Ciuti. Quantum fluids of light. *Rev. Mod. Phys.*, 85:299–366, Feb 2013.
- [18] Nicolas Marquez Peraca, Andrey Baydin, Weilu Gao, Motoaki Bamba, and Junichiro Kono. Ultrastrong light–matter coupling in semiconductors. *Semiconductor Quantum Science and Technology*, 105:89–151, 2020.
- [19] Alexey V. Kavokin, Jeremy J. Baumberg, Guillaume Malpuech, and Fabrice P. Laussy. *Microcavities*. Series on Semiconductor Science and Technology. Oxford University Press, 2017.
- [20] Chesi S. Loss D. Bruder C. Wang, Y.-D. One-step multiqubit greenberger-horne-zeilinger state generation in a circuit qed system. *Phys. Rev. B* 81, 104524., 2010.
- [21] Settineri A. Macrì V. Garziano L. Stassi R. Savasta S. Nori F. Di Stefano, O. Resolution of gauge ambiguities in ultrastrong-coupling cavity qed. *Nat. Phys.* 15, 803–808., 2019.
- [22] Ballester D. Wang Y. M. Scarani V. Solano E. Romero, G. Ultrafast quantum gates in circuit qed. *Phys. Rev. Lett.* 108, 120501, 2012.
- [23] L. Lamata. Digital-analog quantum simulation of generalized dicke models with superconducting circuits. *Sci. Rep.* 7, 43768, 2017.
- [24] Cristiano Ciuti and Iacopo Carusotto. Quantum fluid effects and parametric instabilities in microcavities. *physica status solidi (b)*, 242(11):2224–2245, 2005.
- [25] Andrews A. Sagnes I. Colombelli R. Klang P. Strasser G. Sirtori C. Todorov, Y. Strong light-matter coupling in subwavelength metal-dielectric microcavities at terahertz frequencies. *Phys. Rev. Lett.* 102, 186402., 2009.
- [26] E. Rico J. Kono E. Solano P. Forn-Díaz, L. Lamata. Ultrastrong coupling regimes of light-matter interaction. *arXiv:1804.09275v3*, 1:1, 2019.
- [27] M. Bastarrachea. *Fenómenos críticos en sistemas átomo-campo*. PhD thesis, Universidad Nacional Autónoma de México, CDMX, 2016.
- [28] R. Paiella. Intersubband transitions in quantum structures. *McGraw-Hill, New York.*, 2006.
- [29] S. West, L. Eglash. First observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction band of a gaas quantum well. *Appl. Phys. Lett.* 46, 1156–1158., 1985.
- [30] Köhler R. Tredicucci A. Biasiol G. Sorba L. Dini, D. Microcavity polariton splitting of intersubband transitions. *Phys. Rev. Lett.* 90, 116401., 2003.
- [31] Campisi M. Andolina G. M. Pellegrini V. Polini M. Ferraro, D. High-power collective charging of a solid-state quantum battery. *Phys. Rev. Lett.* 120, 117702., 2018.

-
- [32] Andrews A. M. Colombelli R. De Liberato S. Ciuti C. Klang P. Strasser G. Sirtori C. Todorov, Y. Ultrastrong light-matter coupling regime with polariton dots. *Phys. Rev. Lett.* *105*, 196402., 2010.