Química cuántica polaritónica: desde la QED *ab initio* hasta el control de la materia con luz.

Expositor: M. Mendez*
Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación, Universidad Nacional de Córdoba and Instituto de Física Enrique Gaviola, CONICET-UNC, Ciudad Universitaria,Córdoba X5000HUA, Argentina

Director: Dr. F. M. Pont
(Dated: August 21, 2025)

Este seminario presenta la química cuántica polaritónica, un campo interdisciplinario que une la química cuántica, la óptica cuántica y la física de la materia condensada. Su motivación surge de hallazgos que demuestran cómo el acoplamiento fuerte (SC) entre luz y materia puede modificar fundamentalmente las propiedades de compuestos químicos, como la ralentización de reacciones de fotoisomerización y el aumento del rendimiento de productos.

Se explican los polaritones como cuasipartículas bosónicas híbridas luz-materia, que nacen del SC. El marco teórico detalla la construcción de Hamiltonianos ab-initio (desde Dirac hasta Pauli-Fierz) y sus conexiones con modelos usuales en óptica cuántica (Dicke, Rabi, Tavis-Cummings, Jaynes-Cummings).

El seminario profundiza en los regímenes de acoplamiento, destacando que el SC es esencial para la dinámica cuántica coherente y que la Aproximación de Onda Rotatoria (RWA) deja de ser válida en los regímenes ultra-fuerte (USC) y profundo-fuerte (DSC). También se discuten las implicaciones físicas de las aproximaciones en los Hamiltonianos.

Finalmente, se abordan perspectivas futuras clave, incluyendo la masa del electrón en cavidades, los efectos del vacío cuántico en las propiedades de materiales, el uso de superficies de energía potencial (PES) polaritónicas para fenómenos fotoquímicos, las simulaciones cuánticas y las transiciones de fase inducidas por la cavidad. Estos avances posicionan la ingeniería del vacío cuántico como una herramienta potente para el control de la materia y las reacciones químicas.

Keywords: Cavity-QED, Quantum Chemistry, Polaritones, Pauli-Fierz, self-polarización, Superradiance

CONTENTS

I. Introducción 2
A. Motivación 2
Óptica cuántica 2
Química cuántica 2
Física de la materia condensada 3
B. Contexto Histórico 3

II. Marco Teórico 5
A. Hamiltonianos ab-initio en cavity-QED y óptica cuántica: 5
1. **Dirac Hamiltonian** 5
Coulomb-gauged Dirac Hamiltonian 5
2. **Pauli Hamiltonian** 5
3. **Pauli-Fierz Hamiltonian** 6
Dipole-approximated Coulomb-gauged Pauli-Fierz Hamiltonian 6
Born-Oppenheimmer Dipole-approximated Coulomb-gauged Pauli-Fierz Hamiltonian 7
4. **Regímenes de acoplamiento** 8
5. **Cavidades** 8
6. **Conexiones del hamiltoniano de Pauli-Fierz con modelos usuales en óptica cuántica** 10
Dicke Hamiltonian 10
Quantum Rabi Hamiltonian 12
Tavis-Cummings Hamiltonian 12
Jaynes-Cummings Hamiltonian 12

III. Discusión y Conclusiones 12
1. Aproximaciones en los términos del Hamiltoniano 12
Minimal Coupling 12
Quadratic Diamagnetic Term 13
Two-Level System 13
Self-Polarization and Dipole Self-Energy terms 13
Rotating Wave Approximation 14
2. Perspectivas futuras 14
Masa física y desnuda 14
Efectos del vacío cuántico 15
Superficies de energía potencial 15
Simulaciones cuánticas 15
Óptica no lineal 16
Transiciones de fase 16
Comentarios generales 17

References 17

* martinmendez@unc.edu.ar

I. INTRODUCCIÓN

A. Motivación

Algunos trabajos científicos de la última década han despertado interés en la comunidad, ya que evidenciaron nuevos avances científicos en campos muy diversos, que sugieren una conexión directa entre campos científicos diversos, como ser por ejemplo, la química cuántica, la óptica cuántica y la física de la materia condensada, entre otros. A continuación, se exponen algunos de ellos, que motivaron a dar este seminario.

Óptica cuántica

Allá por el 2005, en un trabajo de Nature, Birnbaum [1] y colaboradores observaron experimentalmente el efecto de photon blockade (bloqueo fotónico) para la luz transmitida a través de una cavidad óptica que contiene un solo átomo de Cesio atrapado (ver Fig. 1). Mientras que los electrones interactúan directamente a través de la repulsión Coulombiana, las interacciones entre fotones deben ser mediadas por la materia. Cuando un primer fotón es absorbido resonantemente, alcanza un estado que detunéa la resonancia para la absorción de un segundo fotón, bloqueando así su transmisión. Para lograr este efecto, el sistema debe operar en el régimen de acoplamiento fuerte (strong coupling, SC). Este hallazgo representa un avance significativo más allá de los campos tradicionales como ser la óptica no lineal y la física del láser, adentrándose en un régimen donde los procesos dinámicos involucran átomos y fotones uno por uno. El experimento consiste en irradiar con un láser (luz coherente) la cavidad de tipo Fabry-Perot y, luego del la cavidad, se coloca un polarizing beam splitter (PBS) que permite medir la función de autocorrelación a segundo orden mediante el método Time Correlated Single Photon Counting (TCSPC) [2] y determinar la estadística de la emisión fotónica. En este trabajo, se detecta una estadística no clásica (sub-Poissonian o antibuched) debido a la interacción no-lineal entre entre campo y materia.

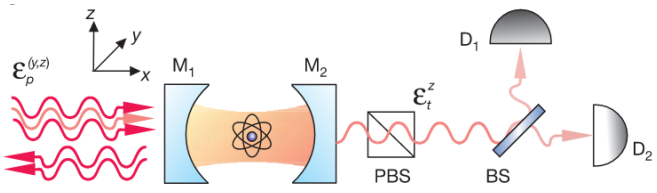


FIG. 1: *Simple diagram of the experiment. BS, beam splitter [1].*

Química cuántica

Después, en 2012, Hutchison y colaboradores [3] publicaron un Angewandte Chemie Communications, donde exploraron cómo el SC de las moléculas con los campos de vacío de una cavidad óptica puede modificar los niveles de energía en compuestos químicos. Los investigadores demostraron que, al colocar una molécula fotocromática (spiropyran [4]) en una cavidad resonante, la tasa de su reacción de fotoisomerización [5] se ralentizó significativamente, y el rendimiento del producto aumentó. Esto ocurre porque el SC crea nuevos estados híbridos luz-materia (denominados "polaritones") de energía de la reacción. Estos resultados sugieren que esta técnica podría ser una herramienta novedosa para controlar reacciones químicas y propiedades de materiales con implicaciones en campos como la optoelectrónica [6].

Luego, en el 2016, Galego y colaboradores [7] publicaron un Nature Communication que intenta demostrar que el SC de moléculas orgánicas a modos de luz confinados, puede suprimir significativamente las reacciones fotoquímicas, específicamente la fotoisomerización (ver Fig. 2).

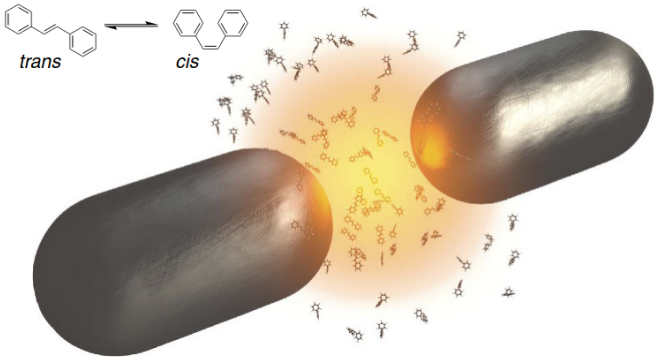


FIG. 2: *Sketch of an example system. A collection of molecules is coupled to a localized surface plasmon mode in the gap between two nanoparticles. Inset: Sketch of photoisomerization reaction between a trans- and cis-isomer. [7].*

Finalmente, en el 2021, Garcia-Vidal y colaboradores [8] publicaron en Science un artículo, donde explican que el vacío no es un *espacio vacío*, sino que está lleno de fluctuaciones electromagnéticas (campos del vacío) con energía de punto cero. Cuando un material se coloca dentro de una cavidad óptica resonante, como la formada por dos espejos paralelos, se produce una interacción entre la excitación del material y un modo de campo electromagnético confinado. Esta interacción da lugar a la formación polaritónes. En este trabajo muestran que el SC puede alterar las tasas de reacciones fotoquímicas al modificar la forma de las superficies de energía potencial (PES) de los estados excitados de las moléculas. También puede cambiar la reactividad química del estado fundamental al acoplar vibraciones moleculares a modos (infrarrojos) de la cavidad, con la simetría desempeñando un papel clave. Ejemplos de estos procesos incluyen la supresión de la fotoisomerización y la fotodegradación, así como la mejora de la transferencia de energía. Este trabajo, destaca cómo la ingeniería del vacío cuántico, en lugar de campos láser intensos, puede ser una her-

ramienta potente y no-invasiva para modificar y controlar propiedades fundamentales de la materia y reacciones químicas.

Física de la matería condensada

Por otro lado, en mayo de este año, Csehi y colaboradores [9] publicaron un PRL donde exploran un novedoso método para iniciar la dinámica molecular al excitar un átomo dentro de una cavidad, lo que ofrece una mayor flexibilidad en la elección de la fuente de luz. La investigación se centra en la transferencia de energía entre un átomo, una molécula y un fotón de cavidad, demostrando que el fotón actúa como un mediador crucial. Se simula este sistema híbrido (Na_2 y Ne) para comprender el flujo de energía bidireccional, incluso en cavidades con pérdidas. Los resultados indican una dinámica duradera a pesar de la corta vida útil del fotón de la cavidad, lo que sugiere que este enfoque es prometedor para futuras investigaciones experimentales en el control de propiedades moleculares. Este método tiene algunas ventajas, por ejemplo, mayor flexibilidad en la elección de la fuente de luz, uso de láseres débiles y dinámica de larga duración.

Casi al mismo tiempo que el trabajo anterior, Tay y colaboradores [10] publicaron un trabajo en Nature Communications, donde muestran, usando radiación en el rango de los terahercios (THz), cómo se acoplan los modos de la cavidad y los electrones (gas de electrones bidimensional en GaAs), en el régimen de acoplamiento ultra fuerte (USC [11]), dentro de una cavidad óptica 3D (ver Fig. 3). En este trabajo, no solo demostraron la USC , sino que también este acoplamiento multimodal entre la luz y la materia depende de la polarización de la luz entrante, lo que desencadena una de las dos formas de interacción (modos independientes o modos híbridos correlacionados). Este acoplamiento fotónico mediado por materia podría utilizarse para nuevos protocolos y algoritmos en computación y comunicaciones cuánticas [12].

De lo expuesto anteriormente surgen, naturalmente, los siguientes interrogantes: *¿Qué son los polaritones? ¿Cómo es posible modelar la física de polaritones, es decir, cómo podríamos escribir el Hamiltoniano? ¿Qué diferencia hay entre los distintos regímenes de acoplamiento y cómo estos se pueden comparar con los regímenes utilizados en óptica cuántica? ¿Cómo se obtienen las curvas de energía potencial y cómo se pueden analizar para interpretar la física del proceso?* Estas y muchas otras preguntas, trataremos de abordar (al menos tangencialmente) en este seminario. Espero que el viaje les resulte fascinante, tanto como a mi.

B. Contexto Histórico

El campo de la electrodinámica cuántica de cavidades (cavity QED) vio sus primeros avances experimentales significativos a principios de los años 90, cuando un grupo de investigadores del Caltech [13] demostraron el

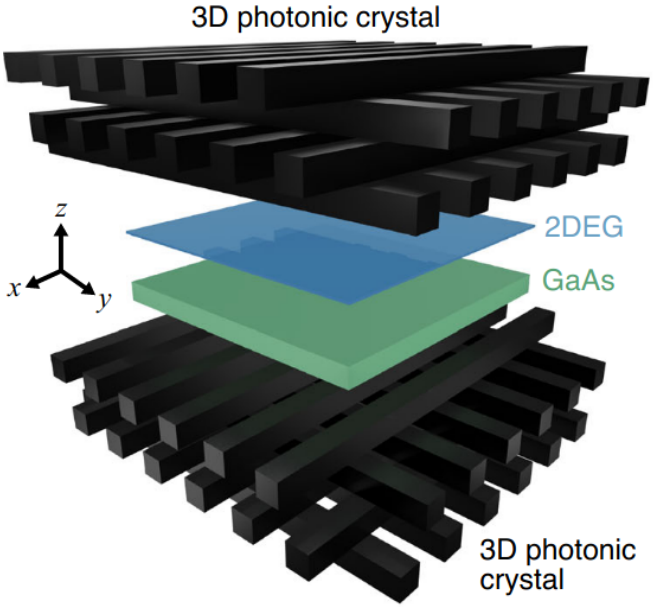
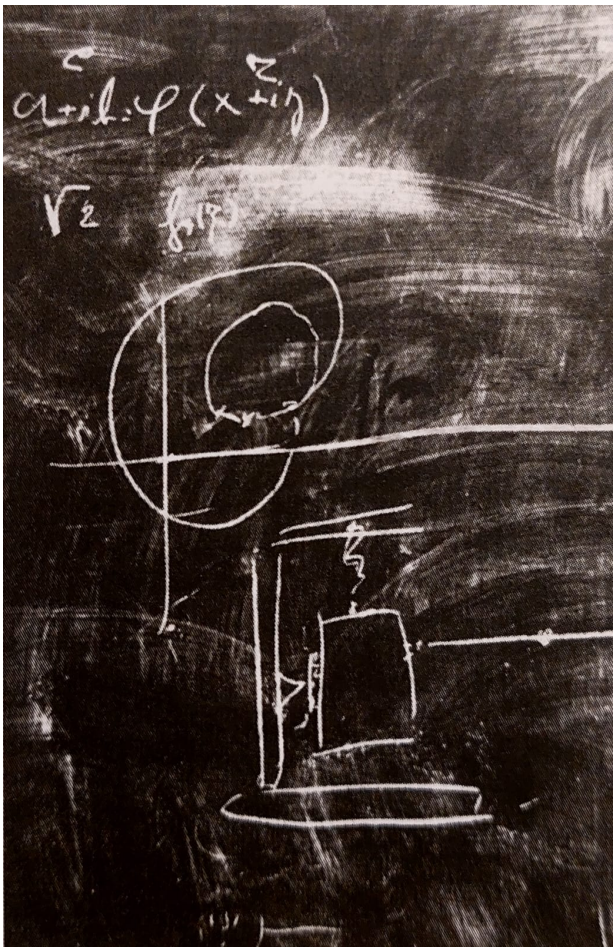


FIG. 3: Schematic of a 2DEG embedded in a 3D woodpile cavity. [10].

acoplamiento fuerte entre átomos individuales y campos electromagnéticos cuantizados en cavidades de tipo Fabry–Perot cuidadosamente diseñadas. Estos experimentos permitieron la observación directa de estados híbridos luz–materia, un precursor de muchas tecnologías modernas de cavity QED y óptica cuántica [14]. Los orígenes de este campo se podrían remontan a los inicios de la mecánica cuántica, con el famoso debate entre Albert Einstein y Niels Bohr sobre el gedankenexperiment ó experimento mental *photon in a box* expuesto en el congreso Solvay de 1930 (ver Figs. 4a, 4b). Einstein imaginó al fotón en una caja como un constructo teórico para desafiar el principio de incertidumbre de Heisenberg (energía-tiempo), pero lo que Einstein y Bohr no se imaginaban, es que este concepto resurgiría décadas más tarde como uno de los campos de experimentación favoritos de los científicos para probar, explorar y controlar la mecánica cuántica. De hecho, los átomos en cavidades ópticas se han convertido en uno de los componentes básicos por excelencia de las tecnologías cuánticas modernas. Un pionero clave en cavity QED es Serge Haroche (físico francés, Nobel 2012. Ver Fig. 5). Su grupo desarrolló experimentos fundamentales que mostraron la interacción cuantizada entre átomos y fotones dentro de cavidades de microondas, estableciendo la base para muchos avances posteriores [15].

Por otro lado, tradicionalmente, la química cuántica estudia sistemas moleculares asumiendo que el campo de fotones, responsable de la interacción entre partículas cargadas, puede aproximarse adecuadamente mediante la interacción de Coulomb. Por otro lado, la óptica cuántica describe el campo de fotones en detalle, pero aproxima los sistemas materiales mediante unos pocos niveles de

(a) Einstein y Bohr caminando juntos en Bruselas durante el Congreso Solvay de 1930, discutiendo sobre el experimento mental de la caja de luz de Eintein [16].



(b) El último dibujo realizado por Niels Bohr en la pizarra de su estudio la noche anterior a su muerte en noviembre de 1962 fue la caja de luz de Einstein de 1930. AIP Emilio Segrè Visual Archives [16].

FIG. 4: Gedankenexperiment de la caja de luz de Einstein.

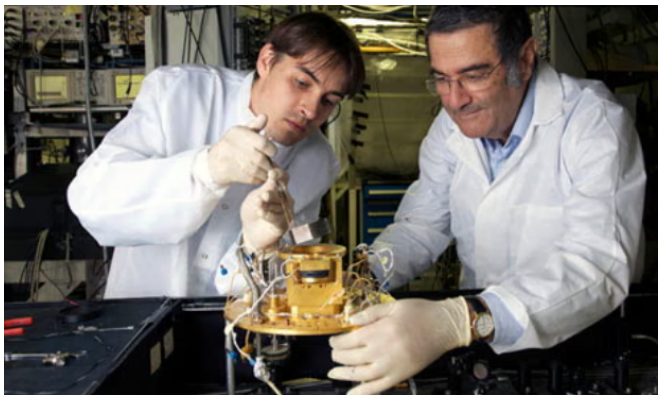


FIG. 5: French physicist Serge Haroche (right), and his assistant Igor Dotsenko at work in Paris, 2009. Reference from the Guardian's arcticle.

energía. Experimentos recientes en la interfaz entre estas dos áreas han revelado situaciones en las que tanto el sistema molecular como el campo de fotones deben tratarse con igual nivel de detalle [17].

Los *polaritones* son cuasipartículas bosónicas híbridas de luz-materia que emergen del acoplamiento fuerte entre el campo electromagnético y las excitaciones dipolares eléctricas (ó magnéticas) de moléculas (sistemas sólidos o fluidos). Además, son una expresión del avoided crossing principle. Y pueden pensarse como los nuevos modos normales (dress modes) de un dado material o estructura, que surge del acoplamiento fuerte de los modos originales (bare modes) (fotón y oscilación dipolar).

Entre 1949 y 1956, Kirill Borisovich Tolpygo (físico soviético) desarrolló una teoría de mecánica cuántica de la dinámica de las redes cristalinas. Ésta incluía la deformación de las capas electrónicas de los iones y los efectos de retardo. En la teoría de la dinámica de las redes cristalinas, este modelo se conoce ahora como modelo de Tolpygo, un modelo de iones deformables o modelo de

capas. En 1950, predijo los estados ligados de fotones y fonones ópticos en cristales iónicos, ahora conocidos como polaritones de red. Un año más tarde, Kun Huang (físico chino) obtuvo el mismo resultado de forma independiente utilizando un método diferente. Además, el término polaritón fue propuesto por John Hopfield (físico estadounidense, Nobel 2024) en su tesis doctoral de 1958, aunque la literatura soviética inicialmente los llamaba excitones de luz y Solomon Isaakovich Pekar (físico soviético) sugirió ese nombre en 1957. El concepto de cuasipartícula polariton se originó en este trabajo teórico de mediados del siglo XX que mostró cómo los fotones se acoplan fuertemente con las excitaciones de la materia para formar nuevas cuasipartículas híbridas.

El marco teórico de la electrodinámica cuántica (QED) parece ser, actualmente, el más adecuado para estudiar estos acoplamientos luz-materia. Ahora bien, como siempre sucede en física, uno debe hacer aproximaciones matemáticas para lograr ecuaciones manejables, sin embargo, las suposiciones físicas que uno realiza debe tenerlas en cuenta a la hora de analizar la física y el alcance de los resultados obtenidos. Por ello, en este seminario hablaremos un poco sobre las implicancias físicas que estas aproximaciones conllevan.

Para los curiosos, las Refs. [18–23] y el número editorial temático virtual de Chemical Reviews explican, de forma general y completa, la química polaritónica, por lo que podría ser un buen punto de partida para adentrase en este fascinante campo de investigación.

II. MARCO TEÓRICO

A. Hamiltonianos ab-initio en cavity-QED y óptica cuántica:

En lo que sigue nos guiearemos con el trabajo de la Ref. [24] y deduciremos algunos de los Hamiltonianos más comunes partiendo de primeros principios.

1. *Dirac Hamiltonian*

El Hamiltoniano de Dirac (DH) representa el operador de energía total que describe el comportamiento de partículas de spin 1/2 (como el electrón) incluyendo efectos relativistas. Fue formulado por Paul Dirac en 1928 (físico e ingeniero inglés, Nobel 1933) para extender la ecuación de Schrödinger al régimen relativista, incorporando la energía de reposo y el momento con matrices que permiten describir el espín y la creación/aniquilación de partículas.

$$\hat{H}_D = -i\hbar c\,(\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) + \hat{\beta}mc^2 \tag{1}$$

donde $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ y $\hat{\beta}$ son matrices 4×4 que satisfacen relaciones de anticonmutación y, para el caso de particulas de spin 1/2 pueden escribirse usando el operador vectorial de Pauli,

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \end{pmatrix};\ \beta = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 \\ 0 & -\hat{I} \end{pmatrix} \tag{2}$$

Realizando *minimal coupling* (ver discusión en la Sec. III 1) en el DH obtendremos una expresión según la Eq. 3.

$$\hat{H}_D = -i\hbar c\left[\hat{\boldsymbol{\alpha}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right] + \hat{\beta}mc^2 + q\phi \tag{3}$$

donde $\boldsymbol{A}$ y ϕ son el potencial vector y potencial escalar, respectivamente.

Coulomb-gauged Dirac Hamiltonian

Considerando el gauge de Coulomb ($\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$) tendremos que el potencial escalar se anula ($\phi = 0$) y que el potencial vector no depende del tiempo y se expande en modos de Fourier como sigue,

$$\boldsymbol{A}(r) = \sqrt{\frac{\hbar c^2}{\epsilon_0(2\pi)^3}} \times \sum_{\eta=1}^{2}\int \frac{1}{\sqrt{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\left(\hat{a}(\boldsymbol{k},\eta)\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{k},\eta)e^{(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})} + \text{h.c.}\right)d\boldsymbol{k}, \tag{4}$$

donde se ha hecho uso del procedimiento de segunda cuantización. Aquí, $\boldsymbol{k}$ y $\omega_{\boldsymbol{k}}$ son el vector de onda y la frecuencia de la radiación, respectivamente; η son los coeficientes de helicidad ($\eta = 1$ si tiene helicidad positiva y $\eta = 2$ si tiene helicidad negativa) y $\boldsymbol{\epsilon}(\boldsymbol{k},\eta)$ son los vectores de polarización circular. Luego, reemplazando los operadores $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ y $\hat{\beta}$ y teniendo en cuenta que se trata de una partícula de spin 1/2, el Coulomb-gauged Dirac Hamiltonian (CGDH) quedaría de la forma mostrada en la Eq. 5.

$$\hat{H}_D = \begin{pmatrix} mc^2 & -i\hbar c\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right] \\ -i\hbar c\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)\right] & -mc^2 \end{pmatrix} \tag{5}$$

2. *Pauli Hamiltonian*

Notemos que la ecuación de Dirac respeta la relación energía momento

$$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2 \tag{6}$$

y, notemos que esta relación tiene dos soluciones, una energía positiva asociada a la partícula (e.g.: electrón) y una energía negativa asociada a la antipartícula (e.g.: positrón). Sin embargo, la ecuación de Schrödinger sólo tiene en cuenta energía de partículas (y no de antipartículas) por lo que, en el límite no relativista solo debemos considerar energía positiva. Además notamos que, en el límite no relativista se cumplirá que

$E_+ = mc^2 + E_s$ donde E_s es la energía que aparece en la ecuación de Schrödinger que representa la energía no relativista $\left(E_s \ll mc^2\right)$ entonces tendremos las aproximaciones mostradas en las Eqs. 7.

$$\begin{aligned} E_+ + mc^2 &\approx 2mc^2 + E_s \\ E_+ - mc^2 &\approx E_s \end{aligned} \tag{7}$$

En la teoría de Dirac el spinor se divide en componentes *grande* ψ_+ y *pequeña* ψ_-. En el límite no relativista $\psi_- \ll \psi_+$ y la ecuación para ψ_+ se reduce a la ecuación de Pauli, que es una generalización de la ecuación de Schrödinger para partículas con spin. Y resolviendo para ψ_+ tendremos el Pauli-Hamiltonian (PH) mostrado en la Eq. 8, propuesto originalmente por Wolfgang Pauli en 1927 (físico austríaco, Nobel 1945).

$$\hat{H}_P = \frac{1}{2mc}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{i\hbar q}{2mc^2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B} \tag{8}$$

3. *Pauli-Fierz Hamiltonian*

El Hamiltoniano de Pauli-Fierz (PFH) fue propuesto a finales de los años 30' (1939), como parte de trabajos conjuntos entre Wolfgang Pauli y Markus Fierz (físico suizo) que extendieron la teoría cuántica para describir la interacción entre partículas con spin y el campo electromagnético cuantizado. Para derivar el PFH debemos considerar al campo electromagnético, de forma relativista, mientras que las partículas cargadas serán no-relativistas. Entonces, consideramos que las interacciones en las partículas materiales serán de tipo Coulomb, es decir,

$$\hat{H}_i = \frac{1}{2m}\left(\hat{p} - \frac{q}{c}\hat{\boldsymbol{A}}\right)^2 + q\phi + V_{ij} \tag{9}$$

$$V_{ij} = \frac{q_l q_m}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}_l - \boldsymbol{r}_m|};\ i \neq j \tag{10}$$

(creo que hay un factor de 1/2 extra en el paper de Ruggenthaler [24]). Luego, considerando un sistema de N_e electrones y N_N núcleos y, partiendo del HP (Eq. 8), obtendremos el PFH según la Eq. 11.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\mathrm{PF}} = &\sum_{l=1}^{N_e}\frac{1}{2m_e^b}\left(-i\hbar\nabla_{\boldsymbol{r}_l} + \frac{|e|}{c}\hat{\boldsymbol{A}}_\perp(\boldsymbol{r}_l)\right)^2 + \frac{|e|\hbar}{2m_e^b}\left[\hat{\boldsymbol{\sigma}}_l\cdot\hat{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{r}_l)\right] + \frac{1}{2}\sum_{l\neq m}^{N_e}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}_l - \boldsymbol{r}_m|} \\ &+ \sum_{l=1}^{N_N}\frac{1}{2m_N}\left(-i\hbar\nabla_{\boldsymbol{R}_l} - \frac{Z_l|e|}{c}\hat{\boldsymbol{A}}_\perp(\boldsymbol{R}_l)\right)^2 - \frac{Z_l|e|\hbar}{2m_N}\left[\hat{\boldsymbol{S}}_l\cdot\hat{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{R}_l)\right] \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{l\neq m}^{N_N}\frac{Z_l Z_m e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{R}_l - \boldsymbol{R}_m|} - \sum_{l=1}^{N_e}\sum_{m=1}^{N_N}\frac{Z_m e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}_l - \boldsymbol{R}_m|} + \sum_{\lambda=1}^{2}\int\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{k},\lambda)\hat{a}(\boldsymbol{k},\lambda)d\boldsymbol{k} \end{aligned} \tag{11}$$

donde m_e^b es la masa desnuda del electrón (ver discusión en la Sec. III 2), m_N es la masa física nuclear efectiva, e es la carga electrónica, $Z_l|e|$ es la carga nuclear efectiva, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_l$ es la matriz de Pauli para partículas de spin 1/2 y $\hat{\boldsymbol{S}}_l$ es la matriz de spin efectiva.

Dipole-approximated Coulomb-gauged Pauli-Fierz Hamiltonian

Partiendo del gauge de Coulomb tendremos que, el potencial vector viene dado por la Eq. 4, mientras que el potencial escalar se anula y donde debemos recordar que $|\boldsymbol{k}| = 2\pi/\lambda$ es el vector de onda de la radiación con λ siendo su longitud de onda. Para un $|\boldsymbol{r}|$ de dimensiones atómicas típicas (unos pocos Ångstroms) y λ de longitudes de onda ópticas típicas (unos pocos cientos de nanómetros), tendremos que $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} \ll 1$, entonces en toda la extensión del sistema material el potencial vector es espacialmente uniforme (ver Eq. 12) [25].

$$\boldsymbol{A}_\perp(\boldsymbol{r}) \approx \boldsymbol{A}_\perp(0) = \boldsymbol{A}_\perp \tag{12}$$

aquí $\boldsymbol{r} = 0$ indica el centro de cargas u origen de centro de coordenadas, donde el sistema material se encuentra, en términos prácticos, localizado. La consideración anterior se denomina Dipole-Approximation (DA) o Length Gauge (LG). Esta aproximación (single-center) se denomina también Velocity Gauge (VG). Bajo esta aproximación, entonces, obtendremos el Dipole-approximated Coulomb-gauged Pauli-Fierz Hamiltonian (DCPFH) según la Eq. 15. De hecho, hay una forma equivalente unitaria del DCPFH, que consiste en efectuar la transformación unitaria (Power-Zienau-Woolley,

PZW, gauge transformation [26]) dada por,

$$\hat{\mathcal{U}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar c}\boldsymbol{A}_{\perp}\cdot\hat{\boldsymbol{D}}\right) \tag{13}$$

$$\hat{\boldsymbol{D}} = -\sum_{l=1}^{N_e}|e|\boldsymbol{r}_l + \sum_{l=1}^{N_N} Z_l|e|\boldsymbol{R}_l \tag{14}$$

donde $\hat{\boldsymbol{D}}$ es el operador dipolar eléctrico. Entonces, el DCPFH estará dado por la Eq. 15 [24], donde $\lambda_\alpha = \sqrt{1/\epsilon_0 L^3}$ con L^3 siendo el volumen cuantizado del espacio libre [27].

$$\begin{aligned}\hat{H}'_{\mathrm{PF}} &= \hat{\mathcal{U}}\hat{H}_{\mathrm{PF}}\hat{\mathcal{U}}^{\dagger} \\ &= -\sum_{l=1}^{N_e}\frac{\hbar^2}{2m_e^b}(\nabla_{\boldsymbol{r}_l})^2 + \frac{1}{2}\sum_{l\neq m}^{N_e}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}_l-\boldsymbol{r}_m|} - \sum_{l=1}^{N_e}\sum_{m=1}^{N_N}\frac{Z_m e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}_l-\boldsymbol{R}_m|} - \sum_{l=1}^{N_N}\frac{\hbar^2}{2m_N}(\nabla_{\boldsymbol{R}_l})^2 + \frac{1}{2}\sum_{l\neq m}^{N_N}\frac{Z_l Z_m e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{R}_l-\boldsymbol{R}_m|} \\ &+ \sum_{\alpha=1}^{N_p}\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial(q_\alpha)^2} + \frac{(\omega_\alpha)^2}{2}\left[q_\alpha + \frac{\lambda_\alpha}{\omega_\alpha}\left(\boldsymbol{\epsilon}_\alpha\cdot\hat{\boldsymbol{D}}\right)\right]^2\right\}\end{aligned} \tag{15}$$

Born-Oppenheimmer Dipole-approximated Coulomb-gauged Pauli-Fierz Hamiltonian

La Born-Oppenheimmer Approximation (BOA) nos permite transformar el hamiltoniano molecular en un sistema de niveles donde, para cada coordenada nuclear, tendremos estados electrónicos discretos dados por superficies de energía potencial (PES), y estas se obtienen resolviendo la parte electrónica dejando la coordenada nuclear como variable paramétrica, es decir, resolviendo la TISE asociada al problema electrónico para cada uno de los núcleos.

$$\hat{H}^{\mathrm{BO}}_{\mathrm{mol}}(\boldsymbol{R}_m)\psi_i(\boldsymbol{r};\{\boldsymbol{R_m}\}) = \epsilon_n(\boldsymbol{R}_m)\psi_i(\boldsymbol{r};\{\boldsymbol{R_m}\}) \tag{16}$$

donde, el hamiltoniano molecular parametrizado en la coordenada nuclear será de la forma,

$$\begin{aligned}\hat{H}^{\mathrm{BO}}_{\mathrm{mol}}(\boldsymbol{R}_m) &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^b}(\nabla_{\boldsymbol{r}_l})^2 + \frac{1}{2}\sum_{j\neq l}^{N_e}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_l|} \\ &- \frac{Z_m e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{r}_l-\boldsymbol{R}_m|} + \frac{1}{2}\sum_{j\neq m}^{N_N}\frac{Z_j Z_m e^2}{4\pi\epsilon_0|\boldsymbol{R}_j-\boldsymbol{R}_m|}\end{aligned} \tag{17}$$

Entonces, las energías $\epsilon_n(\boldsymbol{R}_m)$ son PES asociadas al núcleo m que, para el caso unidimensional ($m = 1$), tendremos simplemente curvas de energía potencial (PECs). Físicamente, BOA implica que estamos separando las dinámicas electrónica de la dinámica nuclear. Dicho en otras palabras, al ser el núcleo más masivo que el electrón, la dinámica electrónica será, con buena aproximación, mucho más rápida que la nuclear y, al estudiar el electrón, podremos considerar al núcleo fijo. De igual forma, el operador dipolar deberá considerarse como un operador parametrizado en la coordenada nuclear, cuyos elementos de matriz serán,

$$\begin{aligned}\left[\hat{\boldsymbol{D}}(\boldsymbol{R}_m)\right]_{n_1n_2} &= \left\langle\xi_{n_1}\middle|\hat{\boldsymbol{D}}(\boldsymbol{R}_m)\middle|\xi_{n_2}\right\rangle \\ &= \left(Z_m|e|\boldsymbol{R}_m - |e|\left\langle\xi_{n_1}|\boldsymbol{r}_l|\xi_{n_2}\right\rangle\right) \\ &= \boldsymbol{\mu}_{n_1n_2}(\boldsymbol{R}_m)\end{aligned} \tag{18}$$

entonces, el operador se podrá escribir como,

$$\hat{\boldsymbol{D}}(\boldsymbol{R}_m) = \sum_{n_1,n_2=1}^{N_{\mathrm{PES}}}\boldsymbol{\mu}_{n_1n_2}(\boldsymbol{R}_m)\hat{P}_{n_1n_2}(\boldsymbol{r}_l;\boldsymbol{R}_m) \tag{19}$$

$$\hat{P}_{n_1n_2}(\boldsymbol{r}_l;\boldsymbol{R}_m) = |\xi_{n_1}(\boldsymbol{r}_l;\boldsymbol{R}_m)\rangle\left\langle\xi_{n_2}(\boldsymbol{r}_l;\boldsymbol{R}_m)\right| \tag{20}$$

donde N_{PES} es el número de PES del problema electrónico y $\hat{P}_{n_1n_2}$ es el proyector sobre los estados electrónicos. Entonces, el operador momento dipolar, teniendo en cuenta todos los núcleos y todos los electrones será

$$\hat{\boldsymbol{D}}_{\mathrm{BO}} = \sum_{l=1}^{N_e}\sum_{m=1}^{N_N}\hat{\boldsymbol{D}}(\boldsymbol{R}_m) \tag{21}$$

Finalmente, tendremos el Born-Oppenheimmer Dipole-approximated Coulomb-gauged Pauli-Fierz Hamiltonian (BODCPFH) dado por la Eq. 22.

$$\hat{H}^{'}_{\text{PF-BO}} = -\sum_{l=1}^{N_N} \frac{\hbar^2}{2m_N}(\nabla_{\boldsymbol{R}_l})^2 + \sum_{l=1}^{N_e}\sum_{m=1}^{N_N}\sum_{n=1}^{N_{\text{PES}}} \epsilon_n(\boldsymbol{R}_m)\hat{P}_{nn}(\boldsymbol{r}_l;\boldsymbol{R}_m) + \sum_{\alpha=1}^{N_p}\left\{-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial(q_\alpha)^2} + \frac{(\omega_\alpha)^2}{2}\left[q_\alpha + \frac{\lambda_\alpha}{\omega_\alpha}\left(\boldsymbol{\epsilon}_\alpha \cdot \hat{\boldsymbol{D}}_{\text{BO}}\right)\right]^2\right\} \tag{22}$$

4. *Regímenes de acoplamiento*

Los experimentos entandares de cavidades QED se encontraban, históricamente, limitados por el modelos bien conocidos de tipo Jaynes-Cummings (JC) [28], donde se consideran que los acoplamientos luz-materia son ordenes de magnitud más pequeños que las frecuencias naturales (contribuciones no interactuantes). En este régimen de acoplamiento débil (weak coupling, WC) se puede aplicar la RWA. Sin embargo, es necesario considerar el régimen de acoplamiento fuerte (strong coupling, SC) para observar dinámica cuántica coherente entre luz y materia [29]. El trabajo [30] nos cuenta sobre los últimos avances en los regímenes de acoplamiento ultra fuerte (ultrastrong coupling, USC) y acoplamiento fuerte y profundo (deep-strong coupling, DSC). En el régimen de USC, la RWA no es más valida debido a que los términos contra rotantes producen fenómenos físicos no esperados. En el régimen donde los términos contra rotantes pueden analizarse de forma perturbativa el Quantum Rabi Model (QRM) se suele describir mediante el Hamiltoniano de Block-Siegert (BSH). Sin embargo, hay experimentos recientes que sugieren un régimen USC no perturbativo y se debe considerar el full QRM. Uno puede entrar al régimen USC sin necesidad de satisfacer la definición usual de SC [31], es decir, $g \gg \gamma, \kappa$ donde κ y γ representan las tasas de decaimiento del átomo y la tasa de perdida de la cavidad, respectivamente. Entonces, los regímenes se pueden clasificar mediante el factor de acoplamiento luz-materia [20]. Por un lado, si $g/\{\gamma, \kappa\} \ll 1$ entonces estamos en el régimen de weak coupling (WC), mientras que si $g/\{\gamma, \kappa\} \gg 1$ entonces estamos en el régimen de strong coupling (SC). Por otro lado, si $0.1 < g/\omega_c < 1$ entonces estamos en el régimen ultra strong coupling (USC), mientras que si $g/\omega_c \gg 1$ estamos en el régimen deep strong coupling (DSC). En la Fig. 6 se mencionan algunos fenómenos o desarrollos tecnológicos asociados a los regímenes de acoplamiento. Además, en la Fig. 7 se muestra, lo que podría ser una especia de ley de Moore para el factor de acoplamiento luz-materia.

5. *Cavidades*

Una cavidad óptica (ver Fig. 9) es una estructura física compuesta por espejos dispuestos para confinar y hacer resonar luz (campo electromagnético) dentro de un espacio definido. Típicamente consta de dos o más espejos enfrentados, formando un trayecto cerrado donde la luz rebota repetidamente. Las cavidades ópticas son componentes esenciales en láseres y diversos dispositivos ópticos, proporcionando retroalimentación que mantiene las oscilaciones luminosas y generando modos de onda estacionaria en frecuencias de resonancia específicas. Su función principal es atrapar y almacenar luz con pérdidas mínimas, caracterizándose por un alto factor de calidad (Q), lo que permite múltiples ciclos de oscilación de la luz confinada.

La Cavidad de Electrodinámica Cuántica (QED-Cavity), por otro lado, se refiere a un sistema de cavidad óptica (o de microondas) especializado, donde se explora la interacción entre la luz y la materia a nivel cuántico (ver Fig. 11). Una cavidad QED no solo confina la luz, sino que también está diseñada para acoplar fuertemente sistemas cuánticos (e.g.: átomos individuales, iones o puntos cuánticos) con un campo electromagnético cuantizado. Esta interacción cuántica suele describirse mediante el modelo de Jaynes-Cummings, controlando fenómenos como las oscilaciones de Rabi en el vacío, el entrelazamiento de estados cuánticos y el intercambio coherente de energía entre fotones y átomos dentro de la cavidad. La cavidad potencia los efectos cuánticos al sintonizar con precisión su frecuencia de resonancia para que coincida con la frecuencia de transición del sistema cuántico, permitiendo manipulación cuántica avanzada y tecnologías como la computación y comunicación cuánticas.

Ahora, analizaremos tres implementaciones reales de cavidades. Por un lado, el trabajo [32] (ver Figs. 10) se centra en un método híbrido electro-óptico para confinar y enfriar una nanopartícula de sílice cargada en el vacío. Para el confinamiento, se utiliza una trampa de Paul de radiofrecuencia (RF). Esta trampa emplea campos eléctricos que varían en el tiempo, generados por electrodos. Su función es esencial para proporcionar un confinamiento tridimensional estable en vacío, lo que evita las inestabilidades que surgirían si la partícula fuera atrapada solo con campos ópticos a bajas presiones. El enfriamiento se logra a través de un proceso optomecánico que involucra una cavidad óptica Fabry-Pérot. El enfriamiento optomecánico ocurre cuando la luz láser en la cavidad está desintonizada en rojo (a una frecuencia ligeramente por debajo de la resonancia de la cavidad). El movimiento de la nanopartícula modula la longitud de la cavidad, y el retraso en el aumento de la potencia intracavidad debido al tiempo de decaimiento de la luz, amortigua su movimiento, extrayéndole energía. Un aspecto crucial y novedoso es que la trampa de Paul participa activamente y mejora la eficiencia del enfriamiento. Lo hace al introducir un desplazamiento cíclico del punto de equilibrio de la nanopartícula en el campo óptico. Esto provoca una oscilación asimétrica alrededor del antinodo óptico, lo cual es vital para que el enfriamiento sea efectivo, ya que de otro modo sería ineficaz cuando la

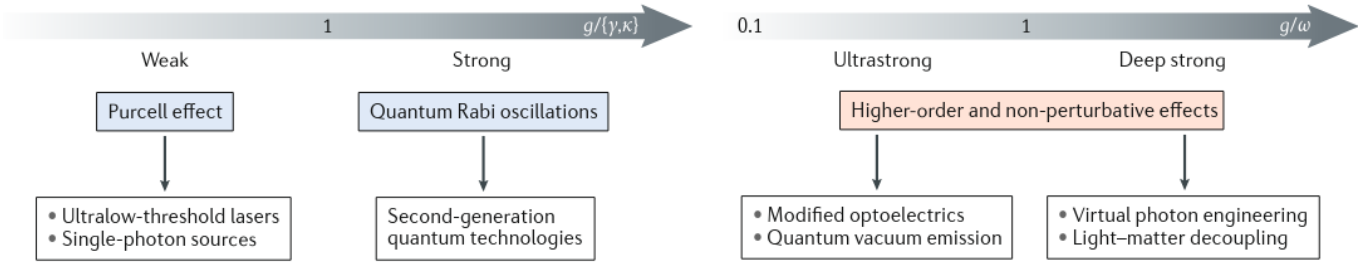


FIG. 6: Regímenes de acoplamiento luz-materia (ver Ref. [20]).

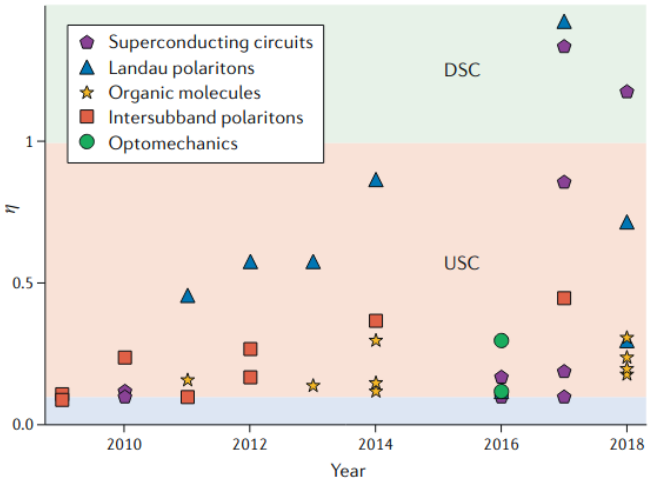
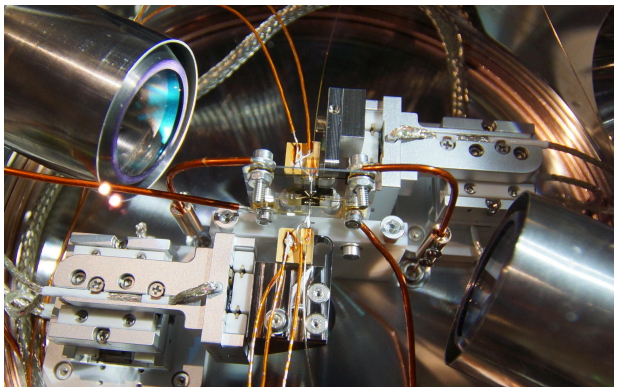


FIG. 7: *Measured η for all experiments that have achieved ultrastrong coupling (USC), excluding experiments with USC to a continuum and quantum simulations of USC. In something that can be called Moore's law for light–matter coupling strength, the past decade has seen experiments progressing steadily from breaking the barrier to the USC regime to entering the deep-strong-coupling (DSC) regime.*

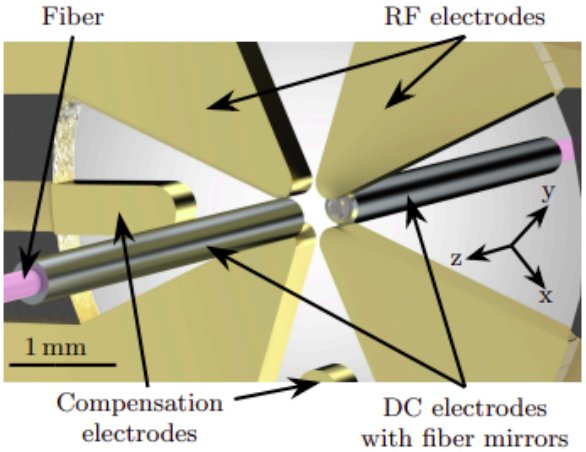
partícula está en el fondo del antinodo. Como resultado de este enfoque híbrido, el movimiento del centro de masa de la nanósfera se enfría hasta aproximadamente 10 K, lo que representa una reducción de energía de unas 100 veces. Una vez enfriada, la partícula es capturada y confinada con precisión en un único antinodo óptico.

Por otro lado, el trabajo [33] (ver Figs. 8) muestra la integración de cavidades de fibra óptica en una trampa de iones. Aquí, las fibras ópticas no solo permiten el ingreso de fotones, sino que sus facetas, moldeadas con ablación láser de CO_2, son directamente los espejos cóncavos de la cavidad Fabry-Pérot, donde los fotones son confinados. Este proceso de ablación láser también se utiliza para cargar iones de Calcio mediante la remoción de material de un objetivo neutro. Una vez atrapados, la detección de la fluorescencia de los iones se realiza a través de "inverted viewports" que contienen objetivos ópticos que recolectan la luz emitida y la dirigen a detectores. Para el confinamiento tridimensional y estable de los iones, el sistema requiere una combinación de electrodos: los electrodos DC (corriente continua) son cruciales para el confinamiento a lo largo del eje z, mientras que los electrodos RF (radiofrecuencia) son indispensables para el confinamiento radial, especialmente en la configuración simétrica que anula el campo eléctrico a lo largo del eje z, permitiendo el atrapamiento de múltiples iones sin micromovimiento excesivo. Finalmente, los electrodos de compensación se emplean para minimizar el micromovimiento residual de los iones, asegurando su posición en el centro del potencial de la trampa.

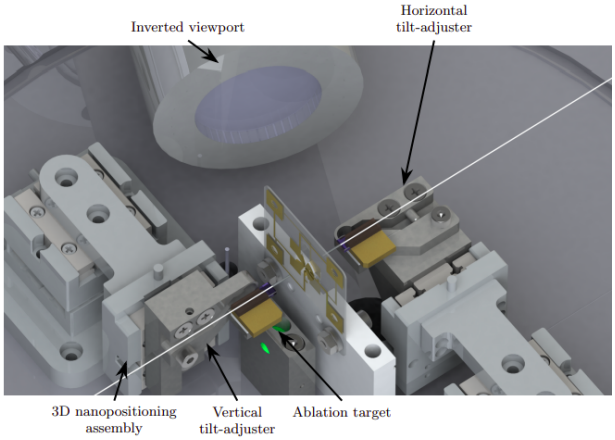
Finalmente, podemos mencionar otros tipos de implementaciones como ser el resonador de cristal fotónico explicado en el trabajo [34]. Aquí, la materia, específicamente los iones de neodimio (Nd^{3+}), encuentra su confinamiento de forma intrínseca al ser dopantes en un cristal sólido de ortovanadato de itrio (YVO_4), en una concentración de 50 ppm. Estos iones de Nd^{3+} son incorporados a la red cristalina del YVO_4), lo que significa que están naturalmente situados y, por ende, confinados dentro de su estructura. Es crucial destacar que el dopado se realiza con iones Nd^{3+}, y no con átomos neutros. En cuanto al confinamiento de la luz, este se logra a través de un resonador de nanocavidad fotónica. Para entender cómo funciona, podemos mencionar que un resonador de cristal fotónico es un tipo de resonador óptico formado dentro de una estructura de cristal fotónico, es decir, materiales con una variación periódica del índice de refracción a la escala de la longitud de onda de la luz, lo que afecta la propagación de las ondas electromagnéticas de manera similar a cómo los cristales semiconductores afectan a los electrones. Esta periodicidad crea bandas prohibidas fotónicas. En esta implementación, se trata de un resonador de nanoviga triangular de cristal fotónico de YVO_4). Este resonador se crea al introducir un defecto o una interrupción en la red periódica del cristal fotónico, formando una cavidad óptica fuertemente confinada que puede localizar la luz en un volumen muy pequeño con un alto factor de calidad. El resonador funciona atrapando la luz mediante interferencia constructiva dentro de la región de la banda prohibida, formando efectivamente una microcavidad (microresonador). La técnica de fabricación fundamental para crear este resonador es el fresado con haz de iones enfocado (FIB). Es importante aclarar que el FIB no se utiliza para dopar el cristal, sino para mecanizar y dar forma a la nanoviga



(a) *Fiber-cavity setup, consisting of a miniaturized cavity-QED interface. It features a linear trap designed to integrate a fiber-based Fabry-Pérot cavity with minimum disturbance of the ion. Figure from Universität Innsbruck web page.*



(b) *Schematic of the ion–cavity system [33].*



(c) *Rendered image of the ion–cavity system. An ablation target, along the line of sight of the wheel trap, is indicated in green. In this image, one of two inverted viewports is shown. [33].*

FIG. 8: *Real QED-Cavity implementation.*

triangular a partir del cristal de YVO_4) que ya contiene los iones Nd^{3+}. De esta manera, el FIB es la herramienta que permite esculpir la estructura específica que confina los modos fotónicos y acopla eficientemente la luz con los iones Nd^{3+}. En la Fig. 12 se muestra una implementación real.

6. *Conexiones del hamiltoniano de Pauli-Fierz con modelos usuales en óptica cuántica*

Dicke Hamiltonian

Si partimos del Hamiltoniano de BODCPFH (ver Eq. 22) y hacemos las siguientes aproximaciones: consideramos N núcleos fijos, en posiciones particulares $\boldsymbol{R}_m^*$ (en consecuencia la energía cinética nuclear desaparece) y para cada una de estas posiciones consideramos un TLS (ver discusión en Sec. III 1), suponemos

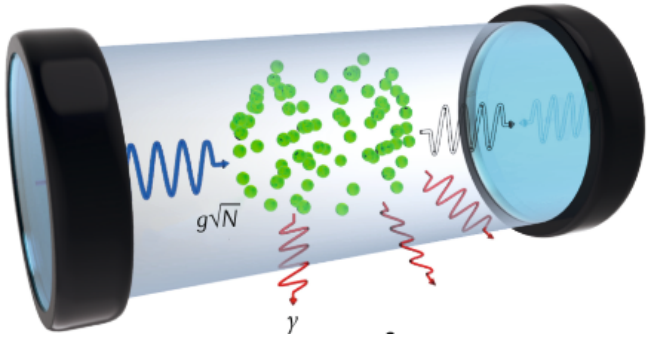


FIG. 9: *Sketch of an optical resonator coupled to many quantum emitters. The light–matter coupling strength can be enhanced by increasing the number N of emitters interacting with the resonator. The resulting collective coupling strength scales as $g\sqrt{N}$.*

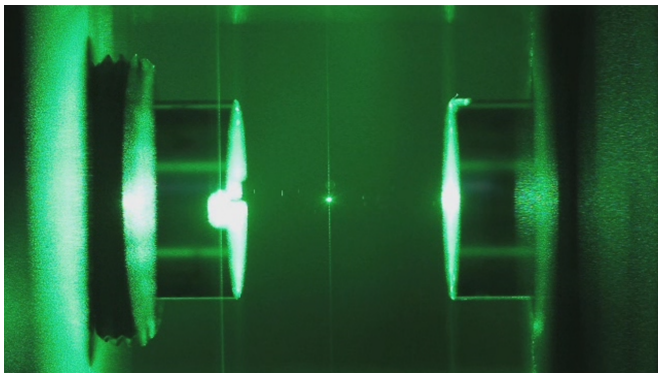


FIG. 10: *Consisting of a Paul trap and standing wave optical cavity potential. The sphere (Silica nanospheres of radius 209 nm) is trapped by the Paul trap and driven across the standing wave formed by the light in the cavity, scattering light. When cooled, the sphere is trapped by the optical field and confined to one fringe of the standing wave. [32].*

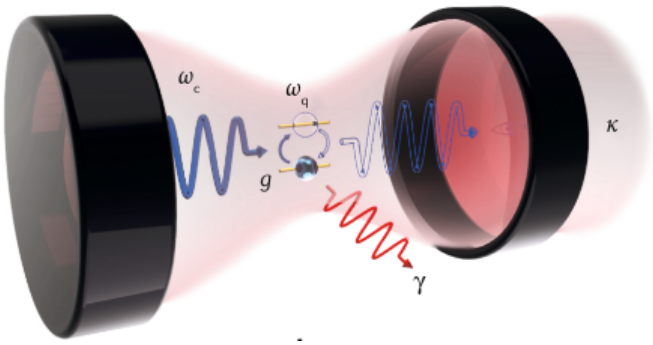


FIG. 11: *Sketch of a cavity quantum electrodynamics (QEDs) system with a single two-level atom (qubit; the simplest example of a matter system). The parameters determining the different interaction regimes are the resonance frequency ω_c of the cavity mode, the transition frequency ω_q of the qubit, the coupling strength g and the cavity and qubit loss rates, κ and γ, respectively.*

que los TLSs son idénticos entre sí, es decir, la separación entre niveles tiene la misma magnitud constante $[\Delta\epsilon_{12} = \epsilon_1(\boldsymbol{R}_m^*) - \epsilon_2(\boldsymbol{R}_m^*)]$. Además, despreciamos el Dipole Self-Energy Term (ver discusión en Sec. III 1) y, despreciamos los momentos dipolares permamentes ($\mu_{n_1 n_2}(R_m) = 0$), es decir, consideramos un sistema de tipo *átomo*, donde la distribución de cargas es simétrica. También, utilizamos operadores creación y aniquilación para los potenciales electromagnéticos $(\hat{a}; \hat{a}^\dagger)$, considerando un único modo ($\alpha = 1$), y para las excitaciones electrónicas en cada uno de los TLSs $\left[\hat{P}_{21}(\boldsymbol{R}_m^*) = \hat{\sigma}_{+,m}; \hat{P}_{12}(\boldsymbol{R}_m^*) = \hat{\sigma}_{-,m}\right]$. Entonces, tendremos el Hamiltoniano dado por,

$$\hat{H}_{\text{Dicke}} = \sum_{m=1}^{N} \frac{1}{2}\left[\epsilon_1(\boldsymbol{R}_m^*)(\hat{\sigma}_{0,m} - \hat{\sigma}_{z,m}) + \epsilon_2(\boldsymbol{R}_m^*)(\hat{\sigma}_{0,m} + \hat{\sigma}_{z,m})\right] + \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) + \sum_{m=1}^{N}\sqrt{\frac{\omega\hbar}{2}}\lambda\left[\boldsymbol{\epsilon}\cdot\vec{\hat{\mu}}_{12}(\boldsymbol{R}_m^*)\right]\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)(\hat{\sigma}_{-,m} + \hat{\sigma}_{+,m}) \tag{23}$$

ahora, definiendo las siguientes cantidades $\hat{P}_{11}(\boldsymbol{R}_m^*) = (\hat{\sigma}_{0,m} + \hat{\sigma}_{z,m})/2$, $\hat{P}_{22}(\boldsymbol{R}_m^*) = (\hat{\sigma}_{0,m} - \hat{\sigma}_{z,m})/2$, $\Delta\epsilon_{12}(\boldsymbol{R}_m^*)/2$ y, teniendo en cuenta que todos los TLSs son idéticos tendremos que $\hat{\mu}_{12}(\boldsymbol{R}_m^*) = \hat{\mu}_{12} = \hat{\mu}_{21}$ son cantidades constantes. También, definiendo operadores colectivos de excitaciones electrónicas dadas por $\sum_{m=1}^{N}\hat{\sigma}_{\pm,m} = \sqrt{N}\hat{\sigma}_{\pm,N}$ y $\sum_{m=1}^{N}\hat{\sigma}_{z,m} = \hat{\sigma}_{z,N}$, tendremos el Hamiltoniano de Dicke según la Eq. 24.

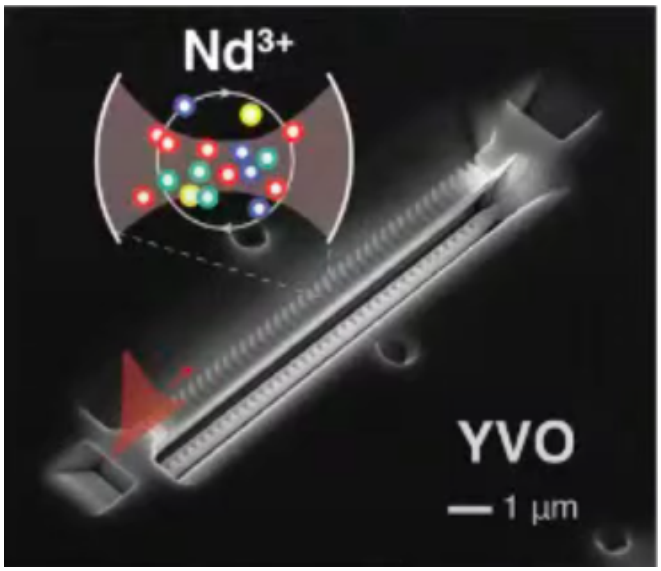


FIG. 12: *SEM images of the triangular nanobeam photonic crystal cavity in YVO_4) fabricated in a nominally 50 ppm doped Nd^{3+} using focused ion beam (FIB) milling. The nanocavity fundamental mode volume is $V_{mode} = 0.056\ \mu m^3$ with a measured quality factor $Q = 3900$ (energy decay rate $\kappa = 2\pi \times 90$ GHz) [34] (There is a seminar related to this work in Youtube web page.*

$$\hat{H}_{\text{Dicke}} = \tilde{\Delta}\hat{\sigma}_{z,N} + \hbar\omega\hat{n} + \sqrt{N}\tilde{g}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)\left(\hat{\sigma}_{-,N} + \hat{\sigma}_{+,N}\right) \tag{24}$$

donde hemos definido el factor de acoplamiento del sistema como $\tilde{g} = g(\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{\mu}_{12})$ con $g = \sqrt{(\omega\hbar)/2\lambda}$ y hemos utilizado la propiedad de operadores de Pauli $\hat{\sigma}_x = (\hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-)$. Finalmente, pero no menos importante, debemos hacer notar que se han descartado las energías de punto cero del campo electromagnético ($\hbar\omega/2$) y del sistema de los TLSs $\left(\frac{1}{2}\left[\epsilon_1(\boldsymbol{R}^*_m) + \epsilon_2(\boldsymbol{R}^*_m)\right]\hat{\sigma}_{0,N}\right)$.

Quantum Rabi Hamiltonian

Si partimos del Hamiltoniano de Dicke y consideramos un únicos TLS obtenemos el Quantum Rabi Hamiltonian (RH) según su forma usual (Eq. 25) [35].

$$\hat{H}_{\text{Rabi}} = \tilde{\Delta}\hat{\sigma}_z + \hbar\omega\hat{n} + \tilde{g}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right)\hat{\sigma}_x \tag{25}$$

Tavis-Cummings Hamiltonian

Si partimos del Hamiltoniano de Dicke y realizamos la Rotating Wave Approximation (RWA, ver discusión en Sec. III 1), es decir, descartando los términos contrarotantes tendremos el Hamiltoniano de Tavis-Cummings (TCH) según la Eq. 26.

$$\hat{H}_{\text{TC}} = \tilde{\Delta}\hat{\sigma}_{z,N} + \hbar\omega\hat{n} + \sqrt{N}\tilde{g}\left(\hat{a}\hat{\sigma}_{+,N} + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_{-,N}\right) \tag{26}$$

Jaynes-Cummings Hamiltonian

Partiendo del TCH según la Eq. 26, y considerando un único TLS tendremos el Hamiltoniano de Jaynes-Cummings (JCH) [19] según la Eq. 27.

$$\hat{H}_{\text{JC}} = \tilde{\Delta}\hat{\sigma}_z + \hbar\omega\hat{n} + \tilde{g}\left(\hat{a}\hat{\sigma}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{\sigma}_-\right) \tag{27}$$

III. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

1. *Aproximaciones en los términos del Hamiltoniano*

Acá discutiremos sobre la física detrás de las aproximaciones que fuimos haciendo desde el Hamiltoniano de Dirac hasta el Hamiltoniano de Jaynes-Cummings.

Minimal Coupling

El minimal coupling es una regla fundamental en física que describe cómo una partícula cargada interactúa con un campo electromagnético. Consiste en modificar el momento lineal y la energía de la partícula para incluir los efectos del potencial electromagnético $(\phi, \boldsymbol{A})$. En mecánica clásica y cuántica, el minimal coupling surge de requerir que las ecuaciones de movimiento sean invariantes bajo transformaciones de gauge, es decir, que la física no cambie si redefinimos los potenciales de cierta manera. Si queremos aplicar minimal coupling a la ecuación de Schrödinger de una partícula cargada de carga q y masa m tendremos que modificar el operador momento $\hat{p}$ por $\hat{p} - q\boldsymbol{A}$ y la energía potencial se ajusta con $q\phi$, el resultado se muestra en la Eq. (28).

$$i\hbar\frac{\partial\left|\psi\right\rangle}{\partial t} = \left(\frac{(-i\hbar\boldsymbol{\nabla} - q\boldsymbol{A})^2}{2m} + q\phi\right)\left|\psi\right\rangle, \tag{28}$$

donde el término $q\boldsymbol{A}$ introduce el efecto del campo magnético en la dinámica de la partícula, mientras que el término $q\phi$ da cuenta de la energía potencial eléctrica. Esta modificación garantiza que la teoría sea gauge-invariante, es decir, cambios como $\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} + \boldsymbol{\nabla}\lambda$ y $\phi \to \phi - \partial_t\lambda$ no afectan predicciones físicas. Entonces, pedir minimal coupling a una teoría es pedirle que cumpla invariancia de gauge. Pero este pedido se hace de la forma más simple y universal posible. Se implementa la forma más sencilla posible, sustituyendo derivadas ordinarias por derivadas covariantes en la ecuación de Dirac (ver Eq. (29)), es decir, $\partial_\mu \to D_\mu = \partial_\mu + iqA_\mu$ donde $A_\mu = (\phi, \boldsymbol{A})$ es el campo de gauge, esto nos permite considerar la interacción más simple entre el spinor y el campo electromagnético, este acoplamiento es el mínimo necesario para preservar la simetría gauge sin imponer dinámica adicional con correcciones de orden superior (estrictamente hablando, en el contexto de QFT, se pide un desarrollo a primer ordenen del término de interacción entre el campo de Dirac (materia) y el campo Fotónico (luz) ver Ref. [36]).

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0 \tag{29}$$

Además, el minimal coupling no restringe el tipo de gauge que puedo considerar, se puede usar el gauge de Lorenz, Coulomb, axial, etc., y el minimal coupling seguirá siendo válido. La restricción está en cómo se acoplan los campos, es decir, se imponen restricciones a las propiedades que deben tener los potenciales vector y escalar. El minimal coupling exige que el acoplamiento sea sustituyendo derivadas ordinarias por derivadas covariantes, pero no impone condiciones sobre A_μ, eso lo hace el gauge. Por ejemplo:

- Gauge de Coulomb ($\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$). El potencial escalar ϕ se calcula instantáneamente a partir de la densidad de carga ($\nabla^2\phi = -\rho/\epsilon_0$). El minimal coupling se aplica igual, pero ahora $\mathbf{A}$ es transversal (solo tiene componentes físicas).
- Gauge de Lorenz ($\partial_\mu A^\mu = 0$). Los potenciales *phi* y $\boldsymbol{A}$ se propagan como ondas. El minimal coupling no cambia, pero las ecuaciones de movimiento se simplifican.

en ambos casos, el acoplamiento mínimo es el mismo, pero el gauge afecta cómo se manipulan los potenciales. Debemos notar que el gauge de Coulomb no es invariante relativista, en contraste con el gauge de Lorentz. Sin embargo, en términos prácticos, en la mayoria de los casos es una buena aproximación. Este gauge tiene la ventaja de que el campo de radiación se describe completamente mediante el potencial vector. Físicamente, esto significa que en el gauge de Coulomb, las interacciones asociadas al potencial escalar se consideran instantáneas entre cargas, porque dependen de la distribución local de carga y, si por ejemplo, las cargas están muy alejadas entre si y muevo una partícula cargada, se modificaría la interacción de forma instantánea. Esto es coherente en contextos no relativistas donde el tiempo absoluto puede asumirse para simplificar, pero no es compatible con la relatividad especial, que exige que ninguna señal o influencia pueda propagarse más rápido que la luz.

Quadratic Diamagnetic Term

El término cuadrático diamagnético viene dado por el potencial vector al cuadrado ($\propto \hat{\boldsymbol{A}}^2$) del Hamiltoniano de Pauli-Fierz (según la Eq. 11) que es el acoplamiento multimodo total para el campo electromagnético. Este término es un término puramente cinético y está asociado con la contribución de la energía cinética de las partículas cargadas al hamiltoniano cuando están en presencia de un campo electromagnético (ver Ref. [37]). Además, en el siguiente trabajo [38] se muestra que la ausencia de este término en el Hamiltoniano de Dicke es lo que permite la transición de fase en este modelo (transición de fase superradiante).

$$\sum_{l=1}^{N_e} \frac{1}{2m_e^b} \left(\frac{|e|}{c} \hat{\boldsymbol{A}}_\perp(\boldsymbol{r}_l) \right)^2 \tag{30}$$

$$\sum_{l=1}^{N_N} \frac{1}{2m_N} \left(\frac{Z_l|e|}{c} \hat{\boldsymbol{A}}_\perp(\boldsymbol{R}_l) \right)^2 \tag{31}$$

Two-Level System

El sistema de dos niveles (TLS), consiste en considerar solamente dos niveles electrónicos ($N_{\text{PES}} = 2$) no degenerados, entonces tendremos, para cada coordenada nuclear, un sistema de dos niveles. Esta aproximación en muchos casos está bien fundamentada, teniendo en cuenta que hay dos niveles de energía desacoplados del resto de niveles, ya sea por la naturaleza misma del sistema físico o porque se ha impuesto externamente una interacción que ocasiona este desacople. Con lo cual, si trabajamos en un rango de energía adecuado, el sistema no podrá acceder físicamente a los otros niveles de energía. Entonces, el sistema puede oscilar entre estos dos únicos estados y el estado del sistema puede describirse matemáticamente como una superposición de ellos. El TLS es particularmente útil en computación e información cuántica, donde es necesario construir los llamados qubits, que son esencialmente TLS.

Self-Polarization and Dipole Self-Energy terms

El Self-Polarization term surge específicamente de la polarización del vacío (o del medio material) inducida por las fluctuaciones cuánticas del campo electromagnético. No es un término directamente asociado con la energía cinética de las partículas, sino con la interacción del campo con sus propias fluctuaciones cuánticas o con las propiedades dieléctricas del medio.

La energía electromagnética QED viene dada por la Eq. 32 y, si utilizamos las definiciones del campo de desplazamiento eléctrico $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ y del campo de magnetización $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ según las Eqs. 33 donde los vectores $\boldsymbol{P}$ y $\boldsymbol{M}$ son los vectores de polarización y magnetización respectivamente, tendremos términos cuadráticos denominados Self-Polarization term ($\propto \boldsymbol{P}^2$) y Self-Magnetization term ($\propto \boldsymbol{M}^2$) [37].

$$\mathcal{H}_{\text{em}}(t) = \frac{\epsilon_0}{2} \int d^3r \left[\boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{r},t) + c^2 \boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{r},t) \right] \tag{32}$$

$$\boldsymbol{\mathcal{D}}(\boldsymbol{r},t) = \epsilon_0 \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) + \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r},t) \tag{33}$$

$$\boldsymbol{\mathcal{H}}(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{\mu_0} \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) - \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r},t) \tag{34}$$

En el contexto del artículo [37], el término de autopolarización se introduce para corregir inconsistencias que surgen al truncar el hamiltoniano a un orden lineal en el acoplamiento luz-materia. Es crucial para mantener la

invariancia de gauge y evitar comportamientos no físicos cuando se consideran sistemas en cavidades. A menudo, este término se puede interpretar como una corrección al potencial vectorial o a la energía del campo electromagnético en un medio dieléctrico, o como una manifestación de la interacción del campo con las propiedades de vacío o las polarizaciones del material.

Por otro lado, en el trabajo [37], suele usarse el término de autopolarización para denominar a un término proporcional al cuadrado del operador dipolar eléctrico (ver Eq. 35) en el DCPFH (ver Eq. 15) que, estrictamente hablando, se trataría del Dipole Self-Energy term. Recordemos que este término surge de realizar la PZW transformation (ver Eq. 13) y es un término de energía potencial armónica que depende de las coordenadas de las partículas (a través del momento dipolar). No es un término cinético ni un término de campo puro. El artículo [39] argumenta enfáticamente que este término es esencial para la estabilidad del sistema luz-materia en el límite de longitud de onda larga. Sin él, el sistema no tiene un estado fundamental, lo que implica una inestabilidad fundamental. También es crucial para describir correctamente el "depolarization shift" y para asegurar que las ecuaciones de Maxwell se satisfagan.

$$\sum_{\alpha=1}^{N_p} \frac{\lambda_\alpha^2}{2} \left(\boldsymbol{\epsilon}_\alpha \cdot \hat{\boldsymbol{D}}\right)^2 \tag{35}$$

esto parece ser particularmente relevante en el debate de superradiancia en modelos de tipo Dicke-model [39]. Si estamos interesados en estudiar la dinámica a tiempos largos o estados de scattering, entonces no se cumplirá que los modos fotónicos tienen una longitud de onda mayor que el tamaño típico de la molécula [39].

Por otro lado, debemos tener mucho cuidado en no confundir Dipole Self-Energy term con Self-Polarization term, estos dos no son equivalentes, por lo tanto, el término de autoenergía no puede absorberse simplemente redefiniendo la frecuencia y la polarización del campo electromagnético. Por un lado, Self-Polarization Term es un término genérico para la energía de auto-interacción que surge de la polarización de un medio, mientras que Dipole Self-Energy Term es un término muy específico en la formulación de la interacción luz-materia en el length gauge.

Rotating Wave Approximation

En general, la Rotating Wave Approximation (RWA) es utilizada en el régimen de acoplamiento débil para simplificar el análisis, ya que desprecia los términos contrarotantes (CRW). Explícitamente la RWA requiere que se cumplan ciertas propiedades entre los términos del Hamiltoniano de Rabi (ver Eq. 25),

$$\tilde{\Delta} - \hbar\omega \ll \tilde{\Delta} + \hbar\omega \tag{36}$$

$$\tilde{g} \ll \hbar\omega \tag{37}$$

En el reciente trabajo (ver Ref. [40]) se muestran los efectos que tiene los *RWA terms* comparando los modelos de Travis-Cummings, Dicke y Pauli-Fierz. En particular, si se analizan estos tres modelos en condición resonante, se observa que al realizar la RWA no se evidencia el fenómeno de batido (beatings) en la evolución temporal del valor de expectación del operador número y demuestran que el beatings se debe al shift asimétrico en las autoenergías.

Por otro lado, la primer evidencia clara de la no validez de la RWA fue observada en el vacuum Block-Siegert shift en el sistema polaritónico de Landau [41]. Es más, la RWA falla en los regímenes USC y DSC [42].

2. Perspectivas futuras

Masa física y desnuda

La masa física (medida) del electrón en el espacio libre incluye contribuciones de las nubes de fotones que rodean a la partícula cargada. Estos efectos ilustran que los campos de fotones no son meramente pasivos, sino activos en la configuración de la estructura atómica [36, 43]. De hecho, si consideramos los componentes básicos de la materia desde una perspectiva de QED, nos damos cuenta de que, incluso los electrones y los átomos son, en sí, objetos híbridos de luz-materia. Si tomamos por ejemplo, el átomo de hidrógeno descrito por la ecuación de Schrödinger no relativista en la aproximación Born-Oppenheimer tendremos

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|r|}\right)\Psi(r) = E\Psi(r) \tag{38}$$

donde m_e es la masa física del electrón. Sin embargo, desde una perspectiva de QED, el electrón de un átomo de hidrógeno tiene una masa que depende de la estructura del vacío electromagnético que lo rodea, y también la atracción Coulombiana depende de la forma de dicho vacío. De hecho, la masa física del electrón tiene dos contribuciones:

$$m_e = m_e^b + m_{ph}, \tag{39}$$

donde m^b es una contribución bare ó "desnuda" (no observable directamente) que depende de como los modos del vacío electromagnético decaen al estar en frecuencia altas (*regularización ultravioleta*) y la masa inducida por el fotón m_{ph} surge de la interacción con los fotones virtuales del vacío electromagnético. En otras palabras, lo que llamamos un átomo de hidrógeno se define con respecto a un entorno fotónico específico, en este caso, el vacío del campo electromagnético libre, pero podría ser otro como por ejemplo: una cavidad [18, 44]. El término *regularización ultravioleta* está relacionado con la necesidad de regularizar (o "suavizar") las divergencias

que surgen en la teoría clásica y cuántica de partículas cargadas interactuando con su propio campo electromagnético (auto-campo). Estas divergencias ocurren a energías muy altas (o longitudes de onda muy cortas), que es la región ultravioleta en el contexto de la teoría de campos. El objetivo es hacer que las cantidades físicas sean finitas temporalmente, para luego redefinirlas de manera consistente mediante el proceso de *renormalización*. En línea con lo anterior, el trabajo [44] estudia la renormalización de la masa no perturbativa debido a los grados de libertad fotónicos transversales en química polaritónica, y demuestran cómo, el procedimiento de renormalización de masa, introduce la masa observable renormalizada (masa física) y cómo está conectada con la dispersión de energía usual de una única partícula libre en mecánica cuántica, es decir,

$$m_e = \left[\frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2 E_{\boldsymbol{k}}(N_p)}{(\partial \boldsymbol{k}_i)^2}\right]^{-1} = \frac{m_e^b}{1-g(N_p)} \tag{40}$$

donde $i = \{x, y, z\}$ y $g(N_p) = \frac{1}{N_p}\sum_{\alpha=1}^{N_p}\frac{(\omega_d)^2}{(\Omega_\alpha)^2}(\tilde{\boldsymbol{\epsilon}}_\alpha \cdot \boldsymbol{\epsilon}_i)^2$ es el acoplamiento multimodo total para el campo electromagnético.

Efectos del vacío cuántico

Algunos científicos creen que del vacío podría extraerse una cantidad increíble de energía si fuésemos capaces de jugar con la estructura del espacio, de aprovechar las fluctuaciones cuánticas que allí se producen y acá conviene recordar una frase de Richard Feynamn (físico estadounidense, Nobel 1965) que dice *"la energía contenida en el volumen de una taza de café es suficiente para que hiervan todos los océanos de la Tierra"*.

Este estudio [42] examina la creciente área de la ingeniería del vacío cuántico en la materia, donde las fluctuaciones electromagnéticas inherentes al vacío cuántico interactúan con los materiales. Los autores explican que un "vacío" no es un espacio vacío, sino que está lleno de campos electromagnéticos (fotones virtuales) fluctuantes que pueden alterar las propiedades de los materiales, incluso sin campos externos. Estas fluctuaciones son de corta duración, pero son responsables de fenómenos como la emisión espontánea, el desplazamiento de Lamb y la fuerza de Casimir. La investigación destaca la importancia de las cavidades fotónicas para mejorar estos efectos, discutiendo varios diseños de cavidades, como las de Fabry-Pérot y las plasmónicas. Además, aborda fenómenos observados experimentalmente, como las modificaciones del efecto Hall cuántico y las transiciones de fase metal-aislante, aunque señala que la modificación del estado fundamental del vacío aún no se ha probado de forma concluyente. Finalmente, el documento subraya los retos teóricos y experimentales que aún persisten, como la comprensión de las interacciones de largo alcance y la necesidad de modelos unificados, y proyecta el futuro de la electrónica habilitada por el vacío.

Superficies de energía potencial

En la Fig. 13 se explica cómo son las funciones de onda asociada a las superficie de energía potencial (PES) de tipo Cavity Born-Oppenheimer (CBO) y de tipo Polaritonic. Matemáticamente, para obtener estas superficies deben resolverse problemas de autovalores (TISE) mostrados en la Eq. 41.

$$(\hat{H}_{\rm mol} - \hat{T}_{\boldsymbol{R}})\psi_i(\boldsymbol{r};\{\boldsymbol{R}\}) = \epsilon_n^{\rm mol}(\boldsymbol{R})\psi_i(\boldsymbol{r};\{\boldsymbol{R}\}) \tag{41}$$

$$(\hat{H}_{\rm PF} - \hat{T}_{\boldsymbol{R}} - \hat{T}_{\boldsymbol{Q}})\psi_i(\boldsymbol{r};\{\boldsymbol{Q},\boldsymbol{R}\}) = \epsilon_n^{\text{BO-pol}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{R})\psi_i(\boldsymbol{r};\{\boldsymbol{Q},\boldsymbol{R}\}) \tag{42}$$

$$(\hat{H}_{\rm PF} - \hat{T}_{\boldsymbol{R}})\psi_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{Q};\{\boldsymbol{R}\}) = \epsilon_n^{\rm pol}(\boldsymbol{R})\psi_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{Q};\{\boldsymbol{R}\}) \tag{43}$$

donde $\epsilon_n^{\rm mol}(\boldsymbol{R})$, $\epsilon_n^{\rm pol}(\boldsymbol{R})$ y $\epsilon_n^{\text{BO-pol}}(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{R})$ son las energías que definen las PES moleculares, de tipo CBO y polaritónicas, respectivamente.

Los diferentes tipos de PES deben utilizarse cuidadosamente para interpretar el comportamiento del sistema global. En la Ref. [45] se explica que las CBO-PES son útiles para explicar la dinámica en ausencia de cavidad (aunque nosotros hemos encontrado cierta correlación entre estas PES y el valor de expectación del operador número). Por otro lado, las PES polaritónicas son útiles para explicar algunos fenómenos observados en la interacción luz-materia en cavidades (por ejemplo: mejora en la conductividad eléctrica, supresión fotoquímica de reacciones [7] y superradiancia), sin embargo, la dinámica no puede predecirse directamente debido a que no se tienen en cuenta los efectos no adiabáticos del acoplamiento fotón-materia interactuando con los acoplamientos electrón-núcleo. Finalmente, el trabajo explica cómo ,mediante el enfoque de factorización exacta (PES exactas dependientes del tiempo), se logra representar el potencial exacto en el que evoluciona el paquete de ondas nuclear, conteniendo exactamente los efectos del acoplamiento a los electrones y los fotones.

Computación y simulaciones cuánticas

El trabajo [23] explora el uso de computadoras cuánticas para la química polaritónica ab initio, que investiga cómo la luz y la materia interactúan en cavidades ópticas. Los autores comparan tres arquitec-

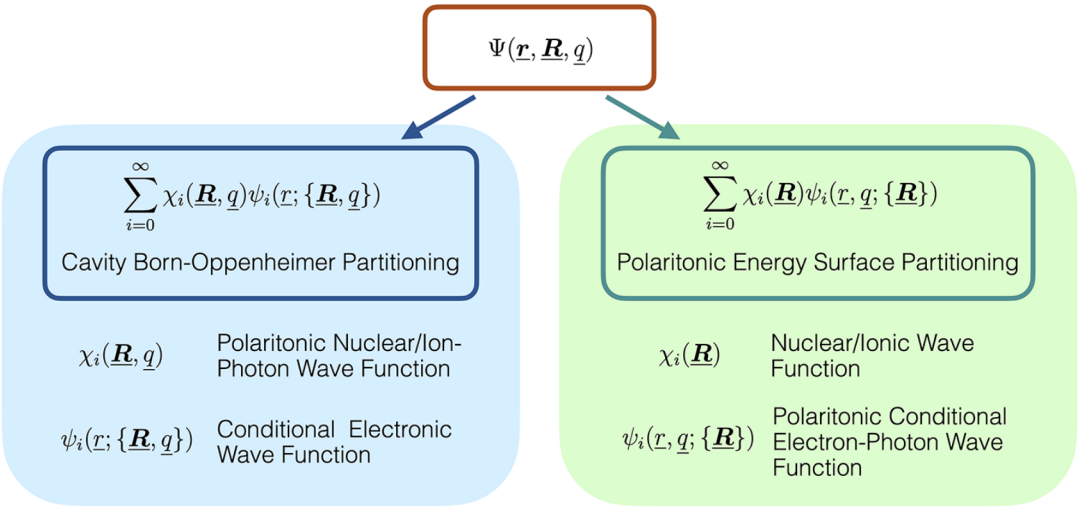


FIG. 13: Las dos formas principales de la expansión generalizada de Born-Huang para sistemas acoplados light-matter. Mientras que la partición de Born-Oppenheimer en cavidades está orientada a las reacciones químicas en el estado fundamental, la partición de la superficie de energía polaritónica está más orientada a los procesos fotoquímicos (ver Ref. [24]).

turas cuánticas —basadas en cúbits, qudits y qumodes híbridos— para simular estos complejos sistemas de fermiones (electrones) y bosones (fotones). Demuestran que, si bien las tres plataformas pueden reproducir fenómenos clave como los cruces evitados inducidos por la luz, el enfoque de cúbit-qumode híbrido es el más eficiente en recursos. El trabajo subraya el potencial de las plataformas cuánticas de mayor dimensión para simular interacciones complejas de luz-materia.

Por otro lado, el trabajo [46] explora la simulación cuántica del hamiltoniano de Pauli-Fierz de primera cuantificación, un modelo esencial para describir la interacción entre la luz y la materia en sistemas cuánticos. Los autores proponen y analizan dos algoritmos principales para esta simulación: un enfoque de "divide y vencerás" recursivo utilizando la fórmula de Trotter-Suzuki y un método basado en "qubitización". El trabajo detalla las descomposiciones de los operadores hamiltonianos y sus complejidades de puerta, así como la cuantificación de los errores de Trotter mediante el análisis de conmutadores. Finalmente, se realiza una comparación de costos entre los dos algoritmos en diferentes regímenes, como sistemas atómicos pequeños y materiales extendidos, para determinar su eficiencia relativa.

Óptica no lineal

El trabajo [47] presenta una investigación sobre la óptica cuántica no lineal sin fotones reales, centrándose en cómo los átomos pueden interactuar y transferir excitación mediante el intercambio de fotones virtuales. Los autores proponen un proceso análogo a la conversión descendente paramétrica espontánea, donde un átomo excitado transfiere su energía a un par de átomos separados espacialmente. La investigación explora la mezcla de tres y cuatro cúbits (3QM y 4QM) como procesos coherentes y reversibles que pueden ocurrir a través de estas interacciones virtuales. Se discute la posible aplicación de estos procesos en el desarrollo de dispositivos cuánticos en un chip, incluyendo su potencial para implementar códigos de corrección de errores cuánticos.

Por otro lado, el trabajo [48] explora numéricamente la interacción de un fotón en un estado volador con un sistema de dos niveles fuertemente acoplado a una guía de ondas fotónica. La investigación, que va más allá de la aproximación de onda rotatoria (RWA), predice nuevos fenómenos ópticos no lineales, incluyendo un cambio al azul en la frecuencia de resonancia, la aparición de una resonancia Fano asimétrica y la presencia de procesos inelásticos de Raman de un solo fotón. Estos descubrimientos surgen de la existencia de modos multifotónicos ligados que se vuelven accesibles en el régimen de acoplamiento ultrastrong, lo que sugiere un potencial para futuras implementaciones experimentales.

Transiciones de fase

Mencionar brevemente que se predice teóricamente y se observa experimentalmente el fenómeno de superradiancia, tanto en sistemas donde un único Two-Level System (TLS) acoplado una cavidad-QED, como en sistemas colectivos de muchos TLSs.

En la Ref. [49] muestran un arreglo experimental para estudiar un único ión en una cavidad QED, en régimen *strong coupling*.

En el trabajo [50] se introduce un nuevo marco teórico para la química polaritónica, conectándola con la física de vidrios de espín. Los autores proponen que las correlaciones electrónicas intermoleculares mediadas por la cavidad bajo acoplamiento vibracional fuerte (VSC) pueden ser mapeadas al modelo esférico de Sherrington-Kirkpatrick (SSK), un tipo de vidrio de espín. Esta

conexión sugiere una transición de fase inducida por la cavidad, explicando por qué los cambios químicos solo ocurren bajo condiciones específicas de acoplamiento. Además, el modelo predice dinámicas fuera de equilibrio como envejecimiento y alteraciones en la relación fluctuación-disipación, lo que podría explicar observaciones experimentales de calentamiento y cambios de histéresis en sistemas polaritónicos.

Comentarios generales

Hay muy pocos trabajos que incluyen la dinámica nuclear en modelos de óptica cuántica y de momentos dipolares permanentes para estudiar moléculas (distribución no homogéneas de cargas) (Refs. [51, 52]) [53].

Finalmente, el trabajo [54] explora la producción de partículas en el régimen de acoplamiento ultra-fuerte dentro de la electrodinámica cuántica de guía de ondas (wQED) [55], un área donde la interacción luz-materia es significativamente mejorada. Los autores introducen una nueva metodología de simulación basada en funciones de onda de estados coherentes multimodo para abordar este complejo problema, que va más allá de las capacidades de los métodos tradicionales de la óptica cuántica. Descubren que los procesos no conservadores de excitación (no-RWA) dominan la señal inelástica en condiciones de desafinación, llevando a la generación de fotones adicionales. Además, el trabajo detalla cómo estas interacciones inusuales se manifiestan en los espectros de emisión y las correlaciones temporales de fotones, como el antibunching incompleto y el bunching fuerte, ofreciendo nuevas perspectivas para futuros experimentos en circuitos cuánticos superconductores.

---

[1] K. M. Birnbaum, A. Boca, R. Miller, A. D. Boozer, T. E. Northup, and H. J. Kimble, Nature **436**, 87 (2005).

[2] Ver la siguiente página web para mayor información.https://www.edinst.com/resource/what-is-antibunching/.

[3] J. A. Hutchison, T. Schwartz, C. Genet, E. Devaux, and T. W. Ebbesen, Angewandte Chemie International Edition **51**, 1592 (2012).

[4] Es un tipo de compuesto químico orgánico fotocrómico, caracterizado por su capacidad de cambiar reversiblemente entre dos formas estructurales —espiropirano y merocianina— al ser expuesto a la luz u otros estímulos externos. Esta transformación reversible altera sus propiedades ópticas y electrónicas, lo que los hace valiosos en diversas aplicaciones tecnológicas.

[5] La fotoisomerización es el proceso físico en el que una molécula experimenta un cambio estructural de una forma isomérica a otra al absorber energía lumínica. Esta transformación generalmente implica una reorganización de la estructura molecular, como la rotación alrededor de un doble enlace (por ejemplo, isomerización cis-trans) o un cambio en la estructura de un anillo (como la transición anillo abierto-cerrado), lo que altera sus propiedades físicas y químicas. El proceso suele ser reversible, permitiendo que la molécula cambie entre isómeros de un lado a otro, lo que lo convierte en un mecanismo fundamental para interruptores moleculares activados por luz. Un ejemplo clave es la isomerización cis-trans del retinal en la rodopsina, que desencadena el evento inicial de la visión humana al modificar la forma de la molécula e iniciar una cascada de señales. La fotoisomerización es un proceso fotoquímico fundamental que puede tener efectos beneficiosos, como en la visión humana, pero también detrimentales, por ejemplo, causando daño al ADN bajo irradiación solar o limitando la eficiencia de las células solares. Evitarla simplemente blindando el sistema de la luz no es una solución viable para aplicaciones que dependen de la interacción con la luz [7].

[6] La optoelectrónica es el estudio y aplicación de dispositivos electrónicos que generan, detectan y controlan la luz, considerada frecuentemente como una subdisciplina de la fotónica. Involucra la interacción entre la luz y materiales electrónicos, particularmente semiconductores, para convertir señales eléctricas en señales ópticas y viceversa.

[7] J. Galego, F. J. Garcia-Vidal, and J. Feist, Nature Communications **7**, 13841 (2016).

[8] F. J. Garcia-Vidal, C. Ciuti, and T. W. Ebbesen, Science **373**, eabd0336 (2021).

[9] A. Csehi, K. Szabó, Á. Vibók, L. S. Cederbaum, and G. J. Halász, Physical Review Letters **134**, 188001 (2025).

[10] F. Tay, A. Mojibpour, S. Sanders, S. Liang, H. Xu, G. C. Gardner, A. Baydin, M. J. Manfra, A. Alabastri, D. Hagenmüller, *et al.*, Nature Communications **16**, 3603 (2025).

[11] Que es un régimen donde el intercambio de energía entre la luz y la materia ocurre tan rápido que resiste la disipación.

[12] Los autores también fueron estrevistados y el material fue publicado en la web APS.

[13] R. Thompson, G. Rempe, and H. Kimble, Physical review letters **68**, 1132 (1992).

[14] T. W. Ebbesen, A. Rubio, and G. D. Scholes, Introduction: polaritonic chemistry (2023).

[15] J. Yuen-Zhou and V. M. Menon, Proceedings of the National Academy of Sciences **116**, 5214 (2019).

[16] M. Kumar, *Quantum: Einstein, Bohr and the great debate about the nature of reality* (Icon Books Ltd, 2008).

[17] J. Flick, M. Ruggenthaler, H. Appel, and A. Rubio, Proceedings of the National Academy of Sciences **114**, 3026 (2017), https://www.pnas.org/doi/pdf/10.1073/pnas.1615509114.

[18] V. Rokaj, S. I. Mistakidis, and H. R. Sadeghpour, SciPost Phys. **14**, 167 (2023).

[19] A. Mandal, M. A. Taylor, B. M. Weight, E. R. Koessler, X. Li, and P. Huo, Chemical Reviews **123**, 9786 (2023).

[20] A. Frisk Kockum, A. Miranowicz, S. De Liberato, S. Savasta, and F. Nori, Nature Reviews Physics **1**, 19 (2019).

[21] J. Fregoni, F. J. Garcia-Vidal, and J. Feist, ACS photonics **9**, 1096 (2022).

[22] N. Meher and S. Sivakumar, The European Physical Journal Plus **137**, 985 (2022).

[23] E. Chiari, W. Makhlouf, L. Pepe, E. Koridon, J. Klein, B. Senjean, B. Lasorne, and S. Yalouz, arXiv preprint arXiv:2506.12504 (2025).

[24] M. Ruggenthaler, D. Sidler, and A. Rubio, Chemical Reviews **123**, 11191 (2023), pMID: 37729114, https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00788.

[25] C. C. Gerry and P. L. Knight, *Introductory quantum optics* (Cambridge university press, 2023).

[26] A. Vukics, G. Kónya, and P. Domokos, Scientific Reports **11**, 16337 (2021).

[27] Notemos que, otra expresión común para el último término de la Eq. 15 suele ser con el signo negativo en el desplazamiento de la coordenada fotónica, el cual surge de aplicar la transformación unitaria $\hat{\mathcal{U}}_0 = \exp\left(-i\pi\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)$ al hamiltoniano $\hat{H}_{\mathrm{PF}}$, es decir, $\hat{H}'_{\mathrm{PF}} = \hat{\mathcal{U}}_0\hat{H}_{\mathrm{PF}}(\hat{\mathcal{U}}_0)^\dagger$. El rol de $\hat{\mathcal{U}}_0$ es causar un corrimiento de fase de π al grado de libertad fotónico y un cambio de signo al desplazamiento de la coordenada fotónica, es decir, de cambia de un desplazamiento positivo a uno negativo [19].

[28] E. T. Jaynes and F. W. Cummings, Proceedings of the IEEE **51**, 89 (1963).

[29] S. Haroche, Reviews of Modern Physics **85**, 1083 (2013).

[30] P. Forn-Díaz, L. Lamata, E. Rico, J. Kono, and E. Solano, Reviews of Modern Physics **91**, 025005 (2019).

[31] S. De Liberato, Nature communications **8**, 1465 (2017).

[32] J. Millen, P. Fonseca, T. Mavrogordatos, T. Monteiro, and P. Barker, Physical review letters **114**, 123602 (2015).

[33] M. Teller, V. Messerer, K. Schüppert, Y. Zou, D. A. Fioretto, M. Galli, P. C. Holz, J. Reichel, and T. E. Northup, AVS Quantum Science **5** (2023).

[34] T. Zhong, J. M. Kindem, J. G. Bartholomew, J. Rochman, I. Craiciu, V. Verma, S. W. Nam, F. Marsili, M. D. Shaw, A. D. Beyer, *et al.*, Physical review letters **121**, 183603 (2018).

[35] Q. Xie, H. Zhong, M. T. Batchelor, and C. Lee, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **50**, 113001 (2017).

[36] M. E. Peskin, *An Introduction to quantum field theory* (CRC press, 2018).

[37] C. Schäfer, M. Ruggenthaler, V. Rokaj, and A. Rubio, ACS Photonics **7**, 975 (2020), pMID: 32322607, https://doi.org/10.1021/acsphotonics.9b01649.

[38] K. Rzażewski, K. Wódkiewicz, and W. Żakowicz, Phys. Rev. Lett. **35**, 432 (1975).

[39] V. Rokaj, D. M. Welakuh, M. Ruggenthaler, and A. Rubio, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **51**, 034005 (2018).

[40] I. Ganti and J. Cao, arXiv preprint arXiv:2507.17339 (2025).

[41] X. Li, M. Bamba, Q. Zhang, S. Fallahi, G. C. Gardner, W. Gao, M. Lou, K. Yoshioka, M. J. Manfra, and J. Kono, Nature Photonics **12**, 324 (2018).

[42] A. Baydin, H. Zhu, M. Bamba, K. R. Hazzard, and J. Kono, Optical Materials Express **15**, 1833 (2025).

[43] F. Mandl and G. Shaw, *Quantum field theory* (John Wiley & Sons, 2013).

[44] D. M. Welakuh, V. Rokaj, M. Ruggenthaler, and A. Rubio, Physical Review Research **7**, 013093 (2025).

[45] L. Lacombe, N. M. Hoffmann, and N. T. Maitra, Physical review letters **123**, 083201 (2019).

[46] P. Mukhopadhyay, T. F. Stetina, and N. Wiebe, PRX Quantum **5**, 010345 (2024).

[47] R. Stassi, V. Macrì, A. F. Kockum, O. Di Stefano, A. Miranowicz, S. Savasta, and F. Nori, Physical Review A **96**, 023818 (2017).

[48] E. Sánchez-Burillo, D. Zueco, J. Garcia-Ripoll, and L. Martin-Moreno, Physical review letters **113**, 263604 (2014).

[49] H. Takahashi, E. Kassa, C. Christoforou, and M. Keller, Phys. Rev. Lett. **124**, 013602 (2020).

[50] D. Sidler, M. Ruggenthaler, and A. Rubio, arXiv preprint arXiv:2409.08986 (2024).

[51] A. Mandal, S. M. Vega, and P. Huo, arXiv preprint arXiv:2005.00201 (2020).

[52] A. Burgess, M. Florescu, and D. M. Rouse, AVS Quantum Science **5** (2023).

[53] Actualmente, con Federico M. Pont, estamos trabajando en la incorporación de dinámica nuclear y de momentos dipolares permanentes.

[54] N. Gheeraert, X. H. Zhang, T. Sépulcre, S. Bera, N. Roch, H. U. Baranger, and S. Florens, Physical Review A **98**, 043816 (2018).

[55] A. Blais, R.-S. Huang, A. Wallraff, S. M. Girvin, and R. J. Schoelkopf, Physical Review A—Atomic, Molecular, and Optical Physics **69**, 062320 (2004).

[56] M. Uria, P. Solano, and C. Hermann-Avigliano, Phys. Rev. Lett. **125**, 093603 (2020).

[57] M. Uria, A. Maldonado-Trapp, C. Hermann-Avigliano, and P. Solano, Phys. Rev. Res. **5**, 013165 (2023).