



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

CAOS EN SISTEMAS DE BOSONES

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN CIENCIAS(FÍSICA)

PRESENTA
JAVIER ISRAEL DE LA CRUZ MORENO

TUTOR PRINCIPAL
DR. JORGE GUSTAVO HIRSCH GANIEVICH
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTOR
DR. SANTIAGO FRANCISCO CABALLERO BENÍTEZ
INSTITUTO DE FÍSICA

MIEMBRO DEL COMITÉ TUTOR:
DR. JORGE AMIN SEMAN HARUTINIAN
INSTITUTO DE FÍSICA

CIUDAD DE MÉXICO, DICIEMBRE DE 2019.



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Resumen

Presentamos un estudio del caos cuántico en uno de los modelos paradigmáticos de la física cuántica y materia condensada en los últimos años, el modelo de Bose-Hubbard. El modelo de Bose-Hubbard unidimensional con condiciones de frontera periódicas es un sistema con un alto grado de simetrías, lo cual dificulta el análisis estadístico de la separación de niveles de primeros vecinos para determinar si presenta caos cuántico.

En este trabajo mostramos una manifestación dinámica del caos cuántico. Esta manifestación consiste en analizar el comportamiento de la probabilidad de supervivencia definida como la probabilidad de encontrar el sistema en el estado inicial a un tiempo posterior t . Observamos el llamado agujero de correlación que es un descenso por debajo del punto de saturación de la probabilidad de supervivencia. La presencia del agujero de correlación es una señal clara de las correlaciones en el espectro del sistema, relacionadas con el caos cuántico.

Uno de nuestros resultados principales indica que la separación en simetrías del espectro no es necesaria para observar el agujero de correlación. Este resultado es de gran relevancia teórica y experimental pues muestra que se pueden encontrar señales de caos aún cuando es complicado hacer la separación en simetrías y el llamado desdoblamiento de niveles o que incluso no se tiene acceso al espectro completo del sistema.

Aunque el agujero de correlación ha sido investigado ya en otros sistemas de muchos cuerpos, no se había estudiado en el modelo de Bose-Hubbard, el cual merece una atención especial por su relevancia en la física de átomos fríos.

Índice general

Resumen	I
Introducción	IV
1. Caos y regularidad	1
1.1. Integrabilidad y caos clásico	1
1.2. Caos cuántico	3
1.2.1. Teoría de matrices aleatorias y estadística de niveles	4
2. Modelo de Bose-Hubbard	7
2.1. Derivación del Hamiltoniano	7
2.1.1. Representación de Wannier	8
2.1.2. Representación de Bloch	10
2.2. Simetrías	12
2.2.1. Ejemplos	14
2.3. Parametrización y unidades	18
2.4. Diagonalización exacta	19
2.5. Realización experimental	21
2.5.1. Redes ópticas	22

3. Caos cuántico en el modelo de Bose-Hubbard	25
3.1. Estadística de niveles	25
3.2. Probabilidad de supervivencia	32
3.2.1. Estados iniciales	32
3.2.2. Expresión analítica	34
3.3. El agujero de correlación	36
3.3.1. Probabilidad de supervivencia en diferentes subespacios .	39
3.3.2. Análisis por regiones	41
Conclusiones	42
Apéndice	45
Bibliografía	51

Introducción

El caos cuántico es un área de la física que comenzó en la década de los 70's del siglo pasado y que intenta explicar cómo se pueden describir los sistemas caóticos clásicos en términos de la teoría cuántica. El tipo de pregunta que se trata de responder en esta área es ¿Qué características hay en los sistemas cuánticos de tal forma que la contraparte clásica es no integrable y presenta caos clásico?

Los sistemas cuánticos que tienen contraparte clásica caótica presentan propiedades muy particulares en su espectro. *Wigner* encontró que la distribución de espaciamiento entre niveles del espectro de ciertas matrices aleatorias sigue una distribución, después llamada de Wigner-Dyson, que es la misma distribución que sigue el espaciamiento entre niveles de algunos núcleos atómicos. Después de esto se formularon dos conjeturas respecto a los espectros de los sistemas cuánticos. La conjetura Bohigas-Giannoni-Schmit establece que los espectros de los sistemas cuánticos que tienen contra parte clásica caótica siguen una distribución tipo Wigner-Dyson[1], mientras que la conjetura de Berry-Tabor establece que los sistemas con contraparte clásica regular presentan niveles de energía no correlacionados, es decir que la separación de primeros vecinos en el espectro siguen una distribución de Poisson[2].

Esto muestra que la estadística del espectro es un buen indicador de caos en el sistema. Recientemente se han estudiado diferentes observables que al analizar su dinámica se observan fenómenos que dan una señal clara de las correlaciones en el espectro. Tal es el caso de la probabilidad de supervivencia que es la probabilidad de encontrar al tiempo t el sistema en su estado inicial y que muestra esta correlación en el espectro mediante el llamado agujero de correlación. Existe una ventaja al tratar con este observable y es que se tiene una expresión analítica obtenida a partir de teoría de matrices aleatorias con la que se puede comparar las soluciones numéricas. En esta tesis se estudian estas propiedades de la probabilidad de supervivencia en el modelo de Bose-Hubbard.

El modelo de Bose-Hubbard es un modelo paradigmático en la mecánica cuántica y la materia condensada. Este modelo es la descripción más simple de

un sistema de átomos bosónicos con interacción por pares y que están colocados en una red óptica.

Los primeros resultados referentes al caos cuántico en el modelo de Bose-Hubbard fueron publicados por *Kolovsky* y *Buchleitner* en [3]. Ellos mostraron que la estadística de niveles de primeros vecinos en el modelo con ocho partículas y ocho sitios sigue una distribución de Wigner-Dyson que generalmente caracteriza a los sistemas cuánticos caóticos. Posteriormente, con el objetivo de estudiar las correlaciones cuánticas, en el trabajo de *Lubasch* [4] se hace un estudio del caos y su relación con el entrelazamiento. Recientemente se ha propuesto en [5] usar la estadística de número de partículas como un indicador para distinguir experimentalmente el régimen caótico del regular.

En este trabajo presentamos el estudio del agujero de correlación en el modelo y mediante este observable estudiamos diferentes subespacios del espacio de Hilbert y diferentes zonas del espectro introduciendo así una forma de medir la correlación en cada región.

La tesis está organizada de la siguiente manera. En el primer capítulo se presenta una recopilación del estudio del caos y la regularidad en sistemas clásicos y cuánticos. En el siguiente capítulo presentamos el modelo de Bose-Hubbard, la forma de tratar las simetrías del sistema y la solución mediante diagonalización exacta, además de una breve descripción de la realización experimental. En el tercer capítulo mostramos los resultados que encontramos al examinar la dinámica de la probabilidad de supervivencia y por último las conclusiones del trabajo.

Capítulo 1

Caos y regularidad

La mecánica clásica es el área de la física que mejor entendemos actualmente, sus principios y métodos son ideales para muchas otras disciplinas, en particular para la física cuántica. Diferentes fenómenos que se han estudiado ya en la mecánica clásica han sido trabajados desde el punto de vista cuántico, algunos de estos siguen siendo un campo de investigación actual. Tal es el caso del caos, un área que comenzó a principios del siglo pasado y que ha sido ampliamente estudiada a partir de entonces.

En este capítulo presentamos los principales conceptos de integrabilidad y caos en la mecánica clásica y cómo es que ha surgido el concepto de caos cuántico.

1.1. Integrabilidad y caos clásico

Consideremos un sistema con n grados de libertad y con función Hamiltoniana H_0 . Su espacio fase tiene $2n$ dimensiones. Se dice que el sistema es integrable si existen n integrales de movimiento linealmente independientes I_i tales que

$$I_i(p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_n) = C_i, \quad (1.1)$$

con $i \in \{1, 2, 3, \dots, n\}$, donde C_i es una constante y q_i, p_i son las coordenadas y momentos asociados al i -ésimo grado de libertad. En este caso dice que el sistema es soluble pues generalmente el problema se puede reducir a cuadraturas[6].

Supongamos ahora que perturbamos el sistema, sea H_1 la perturbación tal

que el paréntesis de Poisson $\{H_0, H_1\} \neq 0$ y consideremos a γ como el parámetro con el que se regula la intensidad de la perturbación. La descripción de la dinámica del sistema estará dada por la función Hamiltoniana

$$H = H_0 + \gamma H_1. \quad (1.2)$$

El teorema KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser) establece que conforme la intensidad de la perturbación crezca el sistema perderá cantidades conservadas. Los toros en el espacio fase que describían el comportamiento regular del sistema serán deformados hasta que lleguen a destruirse y se conviertan en órbitas caóticas[7]. En este caso el sistema ya no es integrable y generalmente se vuelve caótico.

En la práctica, el caos se define en términos del comportamiento dinámico de pares de órbitas que inicialmente se encuentran muy cerca en el espacio fase. Si las órbitas se separan exponencialmente en cualquier dirección del espacio se dice que el flujo es caótico. La tasa a la que se separan las órbitas es medida por el llamado exponente de Lyapunov que se puede definir de la ecuación

$$|\delta Z(t)| \approx e^{\lambda t} |\delta Z_0|. \quad (1.3)$$

Donde λ es el exponente de Lyapunov y δZ_0 la separación inicial de las trayectorias en el espacio fase. Hay un exponente por cada dimensión del espacio fase. Si todos los exponentes son cero el flujo es regular. Si al menos un exponente es positivo, entonces el flujo es caótico y las trayectorias se separan exponencialmente. Esto último es una de las características que más se reconoce en sistemas caóticos, la sensibilidad a las condiciones iniciales[8].

Una herramienta gráfica para determinar si un sistema es caótico son las superficies o secciones de Poincaré. Una sección de Poincaré es un subespacio de menor dimensión que el espacio fase y que es transversal al flujo del sistema. En tal superficie se observan las intersecciones de una órbita periódica a partir de condiciones iniciales dentro de la sección y se observan los puntos en los cuales la órbita regresa a la sección. Si se emplea una sección de Poincaré para observar el comportamiento de sistemas integrables, las trayectorias en el espacio fase se pueden ver como curvas regulares. Si se observan las trayectorias de sistemas no integrables, estas se verán como patrones irregulares.

En el sentido del teorema KAM, esto quiere decir que conforme crezca la perturbación se encontrarán patrones más irregulares en la sección de Poincaré donde antes se encontraban las órbitas del sistema integrable, hasta que el espacio fase se cubra densamente por los puntos de las trayectorias. La ahora llamada teoría KAM estableció los principios para el tratamiento de los sistemas hamiltonianos no integrables y ahora es una área con técnicas matemáticas

bien establecidas.

1.2. Caos cuántico

En la mecánica cuántica la noción de integrabilidad no es tan clara como en el caso clásico. Sin embargo, se puede pensar en la no integrabilidad de los sistemas cuánticos como se hace con los sistemas clásicos. Un sistema cuántico es integrable si existen tantas cantidades conservadas como grados de libertad. Es decir que podemos etiquetar con tantos números cuánticos como grados de libertad a los autoestados del sistema. Si esto no se puede hacer entonces se dice que el sistema no es integrable.

Aún cuando se puede hablar de integrabilidad en sistema cuánticos, no queda claro cómo introducir el concepto de caos. En gran medida porque el principio de incertidumbre de Heisenberg no permite definir trayectorias en el espacio fase. Además, los principios de la mecánica cuántica nos obligan a estudiar la dinámica desde el punto de visto de la evolución lineal de una amplitud de probabilidad, la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle. \quad (1.4)$$

En el caso clásico el caos está fuertemente relacionado a la no linealidad de las ecuaciones de movimiento. Esta característica no se puede trasladar directamente a la mecánica cuántica pues la ecuación Schrödinger es una ecuación lineal[8].

Una de las maneras de abordar el concepto del caos cuántico es mediante el principio de correspondencia, el cual establece que el comportamiento de los sistemas descritos por la teoría de la mecánica cuántica reproduce la física clásica en el límite en que las dimensiones del sistema sean mayores a la longitud de onda de De Broglie. Considerando esto, nos podemos preguntar ¿Qué propiedades tienen los sistemas cuánticos tal que su límite clásico presenta caos?

A partir de preguntas como la anterior se puede definir el caos cuántico como la rama de la física que estudia cómo el caos clásico de los sistemas dinámicos puede ser descrito en términos de la teoría cuántica[9]. Cuando comenzó el estudio del caos cuántico se consideraba un tema de interés académico. Sin embargo con el avance de las técnicas experimentales se ha encontrado evidencia experimental del comportamiento caótico en diferentes sistemas[10, 11].

1.2.1. Teoría de matrices aleatorias y estadística de niveles

Tal vez el resultado más importante que se ha obtenido en la teoría del caos cuántico es el siguiente: *los sistemas cuánticos con contraparte clásica caótica tienen un espectro con propiedades estadísticas muy similares a las de matrices aleatorias*[8].

Las matrices aleatorias son matrices con entradas que son variables aleatorias y siguen cierta distribución de probabilidad. El uso de las matrices aleatorias en la teoría cuántica fue introducido por Wigner cuando las usó por primera vez para describir propiedades estadísticas del espectro de núcleos atómicos[12]. La comparación entre las propiedades estadísticas de los sistemas cuánticos con los sistemas clásicos correspondientes y las predicción de la teoría de matrices aleatorias son ahora una herramienta estándar en esta área de la mecánica cuántica[13].

Un aspecto importante a considerar son las propiedades de simetría de un sistema y cómo estas imponen restricciones en la forma del Hamiltoniano. Estas propiedades nos llevan a considerar tres tipos de matrices que son de mayor interés en la física. Los primeros son Hamiltonianos reales y simétricos que describen la dinámica de sistemas invariantes ante rotaciones e inversión temporal. El segundo tipo son Hamiltonianos complejos y hermitianos que describen a sistemas que son simétricos respecto a rotaciones pero no ante inversión temporal y por último a Hamiltonianos con elementos de matriz que son cuaterniones y que describen sistemas que no son invariantes ante rotaciones y sí lo son ante inversión temporal[8].

Se puede obtener una distribución de probabilidad conjunta para los elementos de matriz de los Hamiltonianos descritos en el párrafo anterior y esta resulta ser una distribución Gaussiana. Para Hamiltonianos reales y simétricos, las transformaciones de similitud son ortogonales y se dice que la distribución de probabilidad describe un ensamble ortogonal Gaussiano (GOE) de matrices Hamiltonianas. Para Hamiltonianos complejos, las transformaciones de similitud son unitarias y se dice que la distribución de probabilidad describe un ensamble Gaussiano unitario (GUE) y para Hamiltonianos reales con estructura de cuaternión se dice que la distribución de probabilidad describe un ensamble Gaussiano simpléctico (GSE)[14].

Estadística de niveles

En el trabajo sobre el espectro de núcleos atómicos de Wigner[12] se encontró que la distribución normalizada del espaciamiento entre niveles adyacentes de energía $s = (E_{j+1} - E_j) / \Delta E$ (donde ΔE es el espaciamiento medio entre niveles) de un ensamble específico de matrices aleatorias es la misma que la distribución

de espaciamiento en núcleos atómicos. Después se encontró que la distribución del espaciamiento también permite distinguir entre el régimen regular y caótico de un sistema.

La conjetura de *Berry-Tabor* establece que la densidad de probabilidad $P(s)$ del espaciamiento de niveles de un sistema cuántico análogo a un sistema clásico regular sigue una distribución de Poisson[2]

$$P(s) = e^{-s}. \quad (1.5)$$

En la práctica, una distribución de Poisson de un espectro regular está caracterizada por muchos espaciamientos de nivel nulos, es decir por un cruce de niveles. Por otro lado, se ha observado que la distribución de probabilidad del espaciamiento de niveles en un sistema cuántico análogo a un sistema clásico caótico sigue una distribución tipo Wigner-Dyson que depende de las simetrías específicas del sistema,

$$P_{GOE}(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2}, \quad (1.6)$$

$$P_{GUE}(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4}{\pi} s^2}, \quad (1.7)$$

$$P_{GSE}(s) = \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 e^{-\frac{64}{9\pi} s^2}, \quad (1.8)$$

y la conjetura de Bohigas-Giannoni-Schmit establece que esto se cumple para cualquier sistema con análogo clásico caótico[1].

En contraste con los espectros regulares los espectros caóticos son caracterizados por la repulsión de niveles. La presencia de este fenómeno es una señal de un régimen de acoplamiento fuerte. Los tres ensambles difieren en su grado de repulsión de niveles, especificado en la potencia de s de la distribución, es decir, el GOE exhibe repulsión lineal, el GUE cuadrática y el GSE cuártica. Dada la simetría de inversión temporal y la invarianza ante rotaciones, las propiedades del espectro del Hamiltoniano de Bose-Hubbard pueden ser comparadas con las del ensamble ortogonal Gaussiano(GOE) y por lo tanto exhibe repulsión de niveles lineal. En la Figura 1.1 se muestra la distribución de Poisson y las distribuciones de Wigner-Dyson para los ensambles GOE, GUE y GSE.

Existen diferentes sistemas cuánticos cuya estadística espectral sigue una distribución tipo Wigner-Dyson entre los cuales se encuentran los núcleos pesados[15], versiones cuánticas de billares dinámicos[1], átomos de hidrógeno en un campo magnético fuerte[16], sistemas de espín 1/2 en cadenas lineales[17, 18], sistemas

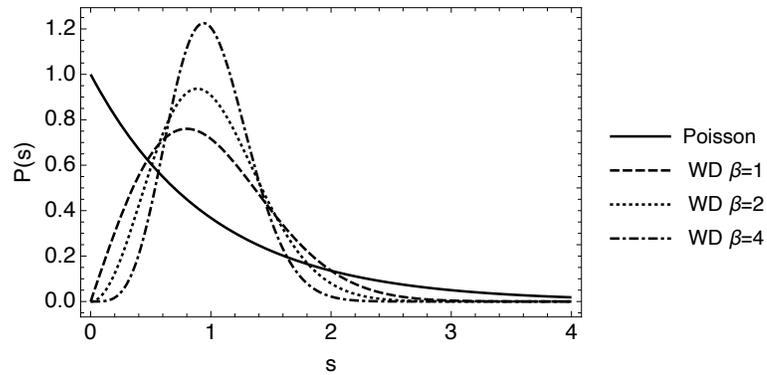


Figura 1.1: (Línea continua) Distribución de Poisson. (Líneas punteadas) Distribución de Wigner-Dyson para el caso de repulsión de niveles lineal (GOE), cuadrática (GUE) y cuártica (GSE).

de bosones con espín[19]. Curiosamente la distribución de Wigner-Dyson también es la distribución del espaciamiento entre los ceros de la función zeta de Riemann[20].

Capítulo 2

Modelo de Bose-Hubbard

El modelo de Bose-Hubbard es la descripción física más simple de un conjunto de partículas con interacción por pares que se mueven en una red. El modelo fue propuesto independientemente por tres científicos en 1963. Por Hubbard para describir las correlaciones entre electrones en bandas de energía[21], Gutzwiller para el estudio del ferromagnetismo [22] y Kanamori para investigar propiedades de los metales de transición[23]. Esto muestran la gran variedad de sistemas físicos en los que el modelo se ha aplicado. Aún cuando se puede usar para describir fermiones o bosones en este trabajo nos centramos en el estudio con bosones sin espín.

2.1. Derivación del Hamiltoniano

Para llegar al Hamiltoniano de Bose-Hubbard (BH) partimos del formalismo de segunda cuantización en el que se describe la dinámica de un sistema de muchos cuerpos con el Hamiltoniano

$$\begin{aligned} \hat{H}' = & \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ext}(x) - \mu \right) \hat{\Psi}(x) \\ & + g \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x), \end{aligned} \quad (2.1)$$

donde $\hat{\Psi}$ es el operador de campo, $V_{ext}(x)$ el potencial externo, μ el potencial químico y g la constante de acoplamiento entre bosones. Como trataremos con un sistema aislado el número de partículas es fijo con lo cual podemos redefinir

la energía del sistema y olvidarnos del potencial químico. Consideremos además un potencial externo óptico, periódico y unidimensional, el cual tiene la forma [24]

$$V_{ext}(x) = V_0 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right).$$

Entonces el Hamiltoniano toma la forma

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right) \right) \hat{\Psi}(x) \\ & + g \int dx \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}^\dagger(x) \hat{\Psi}(x) \hat{\Psi}(x). \end{aligned} \quad (2.2)$$

El Hamiltoniano de BH surge de demandar que el potencial sea tal que los bosones solo puedan estar en el estado de mínima energía en cada uno de los pozos, además de que el acoplamiento túnel sea entre sitios adyacentes y las interacciones solo entre partículas del mismo sitio.

Dependiendo de la base que usemos para representar el operador de campo $\hat{\Psi}(x)$ obtendremos una representación específica del modelo. Primero lo haremos con las funciones de Wannier como los autoestados de una partícula y con esto derivaremos la forma más común del Hamiltoniano. Después con las funciones de Bloch y veremos que estas dos representaciones son en algún sentido conjugadas una de la otra. Así como los observables de posición y momento.

2.1.1. Representación de Wannier

Escribimos el operador de campo de la ecuación (2.2) en la representación de Wannier

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(x) &= \sum_l \hat{a}_l \psi_l(x) \\ \hat{\Psi}^\dagger(x) &= \sum_l \hat{a}_l^\dagger \psi_l^*(x) \end{aligned} \quad (2.3)$$

sustituimos en la ecuación (2.2) y obtenemos

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \int \sum_{l,l'} \hat{a}_l^\dagger \psi_l^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right) \right) \hat{a}_{l'} \psi_{l'}(x) dx \\
&+ g \int \sum_{l,l',m,m'} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'}^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_{m'} \psi_l^*(x) \psi_{l'}^*(x) \psi_m(x) \psi_{m'}(x) dx \\
&= \sum_{l,l'} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} \int \psi_l^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right) \right) \psi_{l'}(x) dx \\
&+ \sum_{l,l',m,m'} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'}^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_{m'} g \int \psi_l^*(x) \psi_{l'}^*(x) \psi_m(x) \psi_{m'}(x) dx \\
&= \sum_{l,l'} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'} J_{l,l'} + \sum_{l,l',m,m'} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l'}^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_{m'} U_{l,l',m,m'},
\end{aligned} \tag{2.4}$$

en donde se definió

$$\begin{aligned}
J_{l,l'} &= \int \psi_l^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2 \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right) \right) \psi_{l'}(x) dx, \\
U_{l,l',m,m'} &= g \int \psi_l^*(x) \psi_{l'}^*(x) \psi_m(x) \psi_{m'}(x) dx.
\end{aligned} \tag{2.5}$$

En este punto introducimos las hipótesis principales del modelo:

- Consideremos que las partículas solo interactúan si se encuentran en el mismo sitio. Es decir, imponemos en la ecuación anterior que $U_{l,l',m,m'}$ sea diferente de cero sólo si todos los subíndices son iguales. En este caso definimos

$$U = g \int |\psi_l(x)|^4 dx. \tag{2.6}$$

Además, usando las relaciones de conmutación de los operadores de creación y aniquilación

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \tag{2.7}$$

el segundo término en la ecuación (2.4) resulta

$$\hat{V} = \frac{U}{2} \sum_l \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \tag{2.8}$$

- Consideramos en el término cinético que el tunelaje solo puede ocurrir entre pozos vecinos y que este es isotrópico $J_{l,l'} = J$.

Con estas hipótesis el Hamiltoniano de BH resulta

$$\hat{H}_{BH} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^L \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (2.9)$$

donde $\langle i, j \rangle$ en la primera suma indica que los índices corren sobre primeros vecinos.

Condiciones a la frontera

Hay dos formas de considerar las fronteras en el modelo lineal. La cadena abierta (o de paredes rígidas) se obtiene cuando la primera suma en el Hamiltoniano corre de 1 a $L - 1$ y esta representa un arreglo lineal de L pozos,

$$\hat{H}_{BH} = -J \sum_{l=1}^{L-1} \left(\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + h.c. \right) + \frac{U}{2} \sum_{l=1}^L \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1). \quad (2.10)$$

Este Hamiltoniano modela un arreglo lineal de pozos que tiene paredes rígidas en los extremos. Estas condiciones a la frontera también se conocen como condiciones abiertas.

Las condiciones de frontera periódicas se obtienen cuando las dos sumas van de 1 a L y se identifica el sitio $L + 1$ con el sitio 1, es decir $L + 1 := 1$. En este caso los sitios 1 y L están conectados y el Hamiltoniano modela un anillo de pozos.

$$\hat{H}_{BH} = -J \sum_{l=1}^L \left(\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + h.c. \right) + \frac{U}{2} \sum_{l=1}^L \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \quad (2.11)$$

Observemos que las condiciones a la frontera determinan las simetrías del modelo. Veremos que las condiciones con paredes rígidas solo muestra invarianza sobre paridad mientras que el modelo con condiciones periódicas muestra adicionalmente una invarianza traslacional.

2.1.2. Representación de Bloch

Tomemos ventaja de la invarianza traslacional en el Hamiltoniano (2.11). Presentamos aquí un cambio de base de las funciones de Wannier a las funciones

de Bloch para tomar ventaja de la simetría, la cual se manifiesta en el hecho de que al hacer el cambio $l \rightarrow l + 1$ el Hamiltoniano (2.11) no sufre modificación alguna.

Las funciones de Bloch $\phi_k(x)$ son la transformada de Fourier de las funciones de Wannier $\psi_l(x)$, estas se escriben como

$$\phi_\kappa(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_l e^{i\kappa l} \psi_l(x) \quad (2.12)$$

donde $\kappa = \frac{2\pi k}{L}$ es el cuasimomento de una partícula y $k = \{1, 2, 3, \dots, L\}$. En el formalismo de Bloch un cambio de base de los autoestados de una partícula se traslada a un cambio en los operadores de creación y aniquilación de la siguiente forma

$$\hat{a}_l = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_l e^{-i\kappa l} \hat{b}_\kappa, \quad (2.13)$$

y análogamente para el operador de creación

$$\hat{a}_l^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_l e^{i\kappa l} \hat{b}_\kappa^\dagger. \quad (2.14)$$

Al sustituir las dos ecuaciones anteriores en el Hamiltoniano (2.11) llegamos a la representación de Bloch (ver el Apéndice para los detalles en el cálculo)

$$\hat{H}_{BH}^{bloch} = -2J \sum_{k=1}^L \cos\left(\frac{2\pi k}{L}\right) \hat{n}_k + \frac{U}{2L} \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^L \hat{b}_{k_1+k_2-k_3} \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_1}. \quad (2.15)$$

En la ecuación anterior el índice de la segunda suma $k_1 + k_2 - k_3$ se calcula módulo L lo cual asegura la conservación de cuasimomento. Esta es la razón por la que el Hamiltoniano periódico se puede descomponer en una suma directa

$$\hat{H}_{BH} = \oplus \hat{H}_k, \quad (2.16)$$

lo que en representación matricial se ve como una matriz diagonal a bloques.

2.2. Simetrías

Uno de los aspectos más importantes a considerar en los modelos físicos son las simetrías que presentan. Una de las razones principales para considerarlas es que reducen la dificultad del problema, otra es porque están asociadas a cantidades conservadas que generalmente son de interés para nosotros.

Supongamos que el operador hermitiano \hat{O} está asociado a alguna simetría, entonces \hat{O} y el Hamiltoniano del sistema conmutan

$$[\hat{H}, \hat{O}] = 0.$$

Sabemos que si se cumple lo anterior entonces es posible escribir a \hat{H} como suma directa de operadores que solo actúan en los subespacios asociados a diferentes valores propios de \hat{O} , es decir que su representación matricial es diagonal a bloques.

Esto es de gran importancia para nuestro problema por dos razones. La primera es porque podemos separar el espectro del sistema e identificar las degeneraciones que se presentan debido a las simetrías, lo cual es un paso necesario para realizar la estadística de niveles. La segunda razón es numérica y es que el tiempo necesario para hacer la descomposición espectral completa de una matriz de $\mathcal{D} \times \mathcal{D}$ es $\mathcal{O}(\mathcal{D}^3)$ [25]. Por ejemplo, consideremos N partículas y L sitios en el modelo, si $N = L = 10$ entonces la dimensión del espacio de Hilbert es $\mathcal{D} = 92378$, el Hamiltoniano se puede escribir como una matriz diagonal con diez bloques. La descomposición espectral de los diez bloques va como $10\mathcal{O}((\mathcal{D}/10)^3) = 0.01\mathcal{O}(\mathcal{D}^3)$. Es decir, es cien veces más rápido diagonalizar a bloques que hacerlo con la matriz completa.

Consideremos primero el Hamiltoniano de BH con paredes rígidas. En este caso el sistema solo tiene una simetría que es la asociada al operador de paridad definido como

$$\hat{\mathcal{P}} |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle = |n_L, n_{L-1}, \dots, n_2, n_1\rangle.$$

El operador de paridad conmuta con el Hamiltoniano

$$[\hat{H}_{BH}, \hat{\mathcal{P}}] = 0. \quad (2.17)$$

El sistema con condiciones de frontera rígidas tiene las mismas simetría que el grupo \mathbb{Z}_2 [4]. Según la teoría de grupos la paridad genera todos los elementos de \mathbb{Z}_2 . Por lo tanto esta es la única simetría del sistema.

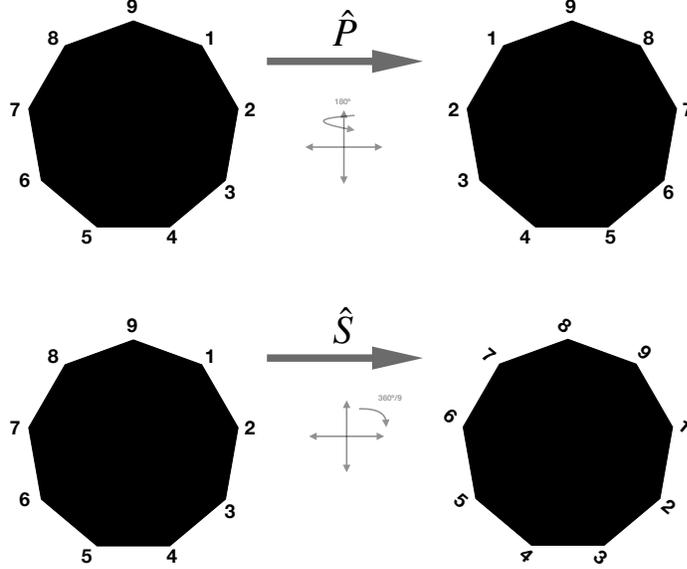


Figura 2.1: Representación gráfica de las simetrías del modelo de BH.

Consideremos ahora el sistema con condiciones de frontera periódicas. Además de la simetría de paridad tenemos que el operador de traslación \hat{S} está asociado a la simetría que hace irrelevante el origen de las etiquetas. Este se define por la acción en un estado de Fock

$$\hat{S} |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle = |n_L, n_1, \dots, n_{L-1}\rangle.$$

Este operador es responsable de la descomposición del Hamiltoniano en diferentes subespacios y al igual que \hat{P} conmuta con el Hamiltoniano del sistema periódico

$$[\hat{H}_{BH}, \hat{S}] = 0.$$

Los valores propios de \hat{S} están relacionados con los diferentes κ y la simetría asociada es la invarianza traslacional del Hamiltoniano debido a las condiciones de frontera periódicas.

Observemos que las simetrías del sistema periódico son las mismas que las de un polígono regular de L lados, el cual se conoce como grupo diédrico D_L . Gráficamente podemos apreciar las simetrías en la Figura 2.1. Cada uno de los sitios del sistema está asociado a un vértice del polígono. El operador \mathcal{P} refleja

el polígono mientras que \hat{S} lo rota por $2\pi/L$. Sin embargo, estos dos operadores no conmutan

$$[\hat{S}, \hat{\mathcal{P}}] \neq 0.$$

Esto nos limita a escoger alguna de las dos simetrías y representar el Hamiltoniano en la base de autoestados del operador correspondiente. Es decir, para el sistema periódico tenemos dos opciones, representar el Hamiltoniano en la base de estados de $\hat{\mathcal{P}}$ y obtener una matriz con dos bloques asociados a los valores propios ± 1 o representarlo en la base de \hat{S} y obtener una matriz con L bloques asociados a los valores $\kappa = 2\pi k/L$ con $k = \{1, 2, \dots, L\}$. Sin embargo, se sigue de la teoría de grupos que el subespacio con $\kappa = 2\pi$ se puede descomponer aún más cuando el número de sitios es impar al igual que los subespacios $\kappa = 2\pi, \pi$ cuando el número de sitios es par[26].

En el trabajo que presentamos aquí nos limitamos a trabajar con el sistema con condiciones de frontera periódicas y en lo sucesivo nos referiremos al Hamiltoniano que describe este sistema como el Hamiltoniano de BH descrito por la ecuación (2.11).

2.2.1. Ejemplos

Ilustremos con dos ejemplos todos los resultados expuestos antes. Tomemos el caso de tres partículas en tres sitios. La dimensión del sistema es $\mathcal{D} = 10$ y la base en los estados de Fock es

$$\begin{aligned} & \{|3, 0, 0\rangle, |2, 1, 0\rangle, |2, 0, 1\rangle, |1, 2, 0\rangle, |1, 1, 1\rangle, \\ & |1, 0, 2\rangle, |0, 3, 0\rangle, |0, 2, 1\rangle, |0, 1, 2\rangle, |0, 0, 3\rangle\}, \end{aligned}$$

a partir de la cual construimos la nueva base de autoestados del operador \hat{S} , esta base es

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e^{i\kappa_1} |3, 0, 0\rangle + e^{i2\kappa_1} |0, 3, 0\rangle + e^{i3\kappa_1} |0, 0, 3\rangle) \\
|2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e^{i\kappa_1} |2, 1, 0\rangle + e^{i2\kappa_1} |0, 2, 1\rangle + e^{i3\kappa_1} |1, 0, 2\rangle) \\
|3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e^{i\kappa_1} |2, 0, 1\rangle + e^{i2\kappa_1} |1, 2, 0\rangle + e^{i3\kappa_1} |0, 1, 2\rangle) \\
|4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e^{i\kappa_2} |3, 0, 0\rangle + e^{i2\kappa_2} |0, 3, 0\rangle + e^{i3\kappa_2} |0, 0, 3\rangle) \\
|5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e^{i\kappa_2} |2, 1, 0\rangle + e^{i2\kappa_2} |0, 2, 1\rangle + e^{i3\kappa_2} |1, 0, 2\rangle) \\
|6\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (e^{i\kappa_2} |2, 0, 1\rangle + e^{i2\kappa_2} |1, 2, 0\rangle + e^{i3\kappa_2} |0, 1, 2\rangle) \\
|7\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|3, 0, 0\rangle + |0, 3, 0\rangle + |0, 0, 3\rangle) \\
|8\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|2, 1, 0\rangle + |0, 2, 1\rangle + |1, 0, 2\rangle) \\
|9\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} (|2, 0, 1\rangle + |1, 2, 0\rangle + |0, 1, 2\rangle) \\
|10\rangle &= |1, 1, 1\rangle,
\end{aligned} \tag{2.18}$$

donde $\kappa_{\{1,2,3\}} = 2\pi k/3$ con $k \in \{1, 2, 3\}$. Como podemos ver, los estados $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ son autoestados de \hat{S} con valor propio $e^{i\kappa_1}$, los estados $\{|4\rangle, |5\rangle, |6\rangle\}$ con valor propio $e^{i\kappa_2}$ y los estados $\{|7\rangle, |8\rangle, |9\rangle, |10\rangle\}$ con valor propio $e^{i\kappa_3} = 1$.

Veamos que el subespacios $\kappa_3(k=3)$ se puede descomponer en dos bloques con paridad definida. Consideremos la nueva base de este subespacio como

$$\begin{aligned}
|7'\rangle &= |7\rangle \\
|8'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|8\rangle + |9\rangle) \\
|9'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|8\rangle - |9\rangle) \\
|10'\rangle &= |10\rangle.
\end{aligned} \tag{2.19}$$

En esta base el conjunto $\{|7'\rangle, |8'\rangle, |10'\rangle\}$ tienen paridad par y son autoestados del operador de traslación y el de paridad mientras que el estado $|9'\rangle$ tienen paridad impar y también es autoestado de los dos operadores.

Según lo expuesto antes, si escribimos el Hamiltoniano de BH en la base (2.18) se verá como una matriz por bloques con dos de estos bloques de dimen-

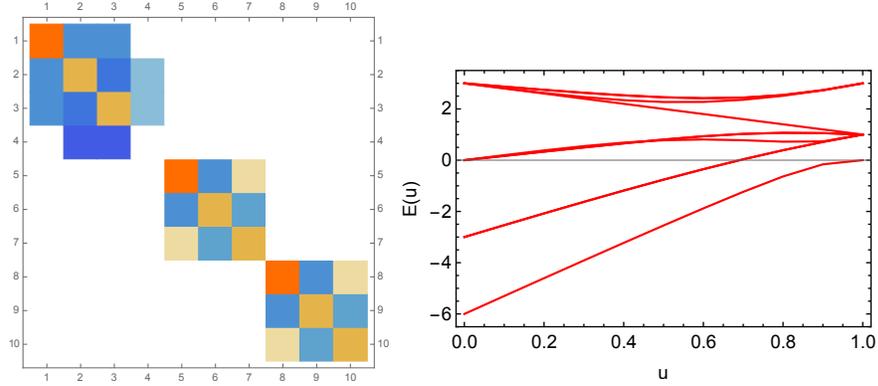


Figura 2.2: (Izquierda) EL Hamiltoniano de BH en la base del operador de traslación para $N = L = 3$. (Derecha) Espectro del Hamiltoniano en el intervalo $u \in [0, 1]$.

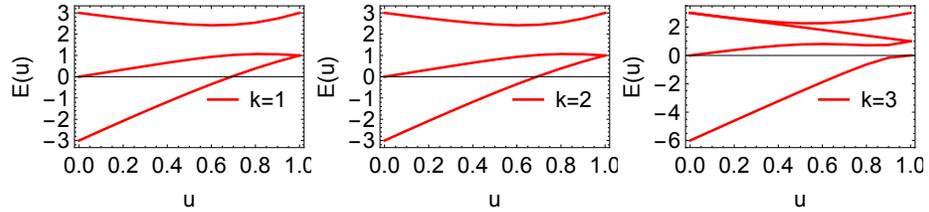


Figura 2.3: Al descomponer el espectro en los subespacios de momento vemos que los subespacios que corresponden a $k = 1$ y $k = 2$ están degenerados.

sión tres por tres correspondientes a $k = 1$ y $k = 2$ y uno de dimensión cuatro por cuatro correspondiente a $k = 3$. Esta descomposición se puede ver en la Figura 2.2. También se muestra el espectro completo usando la parametrización $U = u \in [0, 1]$ y $J = 1 - U$, en el cual esperamos ver diez curvas sin embargo solo se distinguen siete, esto se debe a que los espacios con $k = 1$ y $k = 2$ están degenerados, lo cual se aprecia en la Figura 2.3 donde se separó el espectro en los diferentes subespacios.

Como siguiente ejemplo veamos el caso de cuatro partículas en cuatro sitios. En este caso ya no es tan sencillo escribir explícitamente las dos bases pues la dimensión del espacio de Hilbert ahora es de $\mathcal{D} = 35$. En la Figura 2.4 se muestra un esquema del Hamiltoniano en la base del operador de traslación. Esperamos ver que se descomponga en cuatro bloques correspondientes a los valores de $k = \{1, 2, 3, 4\}$. Al descomponer el espectro, en la Figura 2.5, se observa que los subespacios con $k = 1$ y $k = 3$ tienen el mismo espectro.

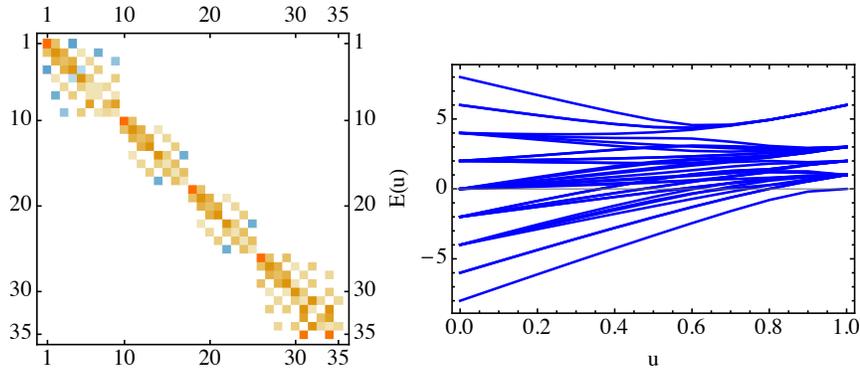


Figura 2.4: (Izquierda) Hamiltoniano de BH con condiciones de frontera periódicas y con $N = L = 4$ representado en la base del operador de rotación. (Derecha) Espectro del Hamiltoniano en el rango de $u \in [0, 1]$.

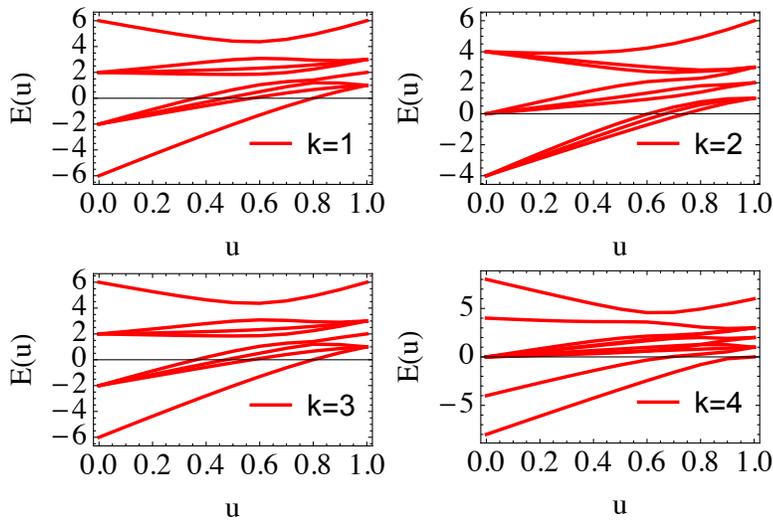


Figura 2.5: Descomposición del espectro del Hamiltoniano de BH con $N = L = 4$. Podemos concluir que los subespacios con $k = 1$ y $k = 3$ tienen el mismo espectro.

2.3. Parametrización y unidades

La medida natural de energía en átomos confinados en redes ópticas es la energía de retroceso (recoil energy) $E_R = \hbar^2 k^2 / 2m$ donde k es el número de onda de la luz utilizada en la red y m es la masa de los bosones. Para experimentos con ^{87}Rb la energía de retroceso es del orden de varios kHz[24]. Usamos entonces E_R como unidad de medida de los parámetros U y J y el tiempo en la escala natural del sistema que es \hbar/E_R . Como muestran anticipadamente los resultados anteriores, es posible tratar el modelo de BH con un solo parámetro adimensional que se expresa en función de U y J y que en los casos anteriores etiquetamos como u . Sin embargo no hay una única forma de hacer tal parametrización. En los siguientes párrafos explicamos algunas de estas.

El modelo de BH cuenta con un solo parámetro en el sentido de que si factorizamos U en la ecuación (2.9) tenemos (para $J, U \neq 0$)

$$\hat{H}_U = \left(-\frac{J}{U} \sum_l (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + h.c.) + \frac{1}{2} \sum_{l=1}^L \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \right), \quad (2.20)$$

y el espectro adimensional que se obtiene al diagonalizar \hat{H}_U debe ser multiplicado por U para obtener las energías en unidades de E_R . Análogamente se puede factorizar J para obtener energías en unidades de J 1 diagonalizar el Hamiltoniano

$$\hat{H}_J = \left(-\sum_l (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + h.c.) + \frac{U}{2J} \sum_{l=1}^L \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \right), \quad (2.21)$$

Esto significa que si resolvemos \hat{H}_J como función del parámetro U/J entonces las energías serán adimensionales y tendremos que multiplicar por J para obtenerlas en unidades de E_R .

Supongamos ahora que queremos evolucionar en el tiempo algún estado inicial con U y J dados. Supongamos además que se eligió en los cálculos $\hbar = 1$. Entonces el procedimiento para evolucionar el estado es: calculamos U/J y evolucionamos el estado con el Hamiltoniano \hat{H}_J , entonces multiplicamos el tiempo por \hbar/J para obtenerlo en las unidades naturales del sistema que son \hbar/E_R .

La parametrización que usaremos es tomada de [3] y es de gran utilidad para estudiar el caos en el sistema. En este caso el parámetro a utilizar es $u = 1 - J$ y $u = U$ donde $u \in [0, 1]$ y al igual que J y U está en unidades de E_R . El Hamiltoniano correspondiente se escribe como

$$\hat{H}_u = \left(- \sum_{l=1}^L \left(\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_{l+1} \hat{a}_l^\dagger \right) + \frac{u}{2(1-u)} \sum_{l=1}^L \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \right). \quad (2.22)$$

La energía adimensional que se obtiene de diagonalizar \hat{H}_u se multiplica por $1 - u$ y obtendremos la energía en unidades de E_R . El tiempo del estado evolucionado con \hat{H}_u tendrá que ser multiplicado por $\hbar/(1 - u)$ para obtenerlo en las unidades naturales del sistema \hbar/E_R .

2.4. Diagonalización exacta

Existen dos límites que son integrables en el modelo de BH. Estos límites son cuando $U = 0$ y cuando $J = 0$. Sin embargo en el caso general el modelo no es soluble. La dificultad radica en el término que acompaña a J el cual acopla a los operadores bosónicos en diferentes sitios de la red.

Hay diferentes formas de resolver el Hamiltoniano de BH. Se pueden hacer aproximaciones que resuelven el sistema bajo ciertas hipótesis o se pueden usar métodos computacionales para resolverlo[27]. Debido a que nosotros analizaremos la estadística de niveles del sistema, trataremos el sistema con el método de diagonalización exacta el cual nos permite obtener el espectro completo del sistema.

La diagonalización exacta de sistemas de muchos cuerpos solo se puede realizar para sistemas pequeños dadas las dimensiones enormes del espacio de Hilbert. En el caso del modelo de BH la dimensión del espacio está dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(N, L) &= \frac{(N + L - 1)!}{N!(L - 1)!} \\ &\approx^* \left[(1 + n_b) \left(1 + \frac{1}{n_b} \right)_b^n \right]^L, \end{aligned} \quad (2.23)$$

donde N es el número de átomos y L el número de sitios en la red. Para ilustrar la restricción impuesta por la ecuación (2.23) consideramos el tamaño del espacio de Hilbert para $L = N$. Por ejemplo para $N = 8, 10$ y 12 uno obtiene que la dimensión del espacio es 6435, 92378 y 1352078 respectivamente. Se puede verificar que para $N \gg 1$ se cumple que $\mathcal{D}(N + 1, N + 1) \approx 4\mathcal{D}(N, N)$ lo cual cuantifica el rápido crecimiento de la dimensión del espacio. Más aún, si la densidad de átomos en la red $n_b = N/L$ permanece constante entonces la

dimensión del espacio crece exponencialmente como se muestra en la segunda parte de la ecuación (2.23). Esto muestra que una diagonalización estándar donde todos los elementos de matriz se almacenan puede traer problemas para $N = L > 8$.

En los siguientes párrafos describiremos los pasos a seguir para obtener el espectro del sistema.

El primer paso es construir el Hamiltoniano en la base de los estados de Fock. Esta parte del código se describe en [28] y consiste en lo siguiente.

1. Comenzamos con la construcción de la base. Observemos que se puede ordenar los estados de Fock con un orden lexicográfico. Comenzando del estado $|N, 0, 0, \dots, 0\rangle$.
2. Sea $|n\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle$ un estado de Fock. Sea $k \in \{1, 2, 3, \dots, n_{L-1}\}$ el índice que indica el sitio del estado $|n\rangle$ tal que para todo $L > m > k$ se cumple que $n_m = 0$.
3. Entonces el siguiente estado $|n+1\rangle = |n'_1, n'_2, \dots, n'_L\rangle$ de la base estará dado por:
 - Para todo $m < k$, $n'_m = n_m$.
 - $n'_k = n_k - 1$
 - $n'_{k+1} = N - \sum_{s=1}^k n'_s$
4. Una vez construida la base, asociamos una etiqueta mediante una función real biyectiva a cada elemento de la base, tomamos por ejemplo la función descrita en [28].
5. La construcción de la parte de interacción en el Hamiltoniano es diagonal y resulta trivial escribirla en esta base.
6. Para la parte cinética construimos el operador $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}$ y lo aplicamos al elemento $|n\rangle$ de la base. Sea $|n'\rangle = \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1} |n\rangle$. Buscamos la etiqueta asociada a $|n\rangle$ y $|n'\rangle$. Entonces si las etiquetas están en el sitio p y p' el elemento $H_{p,p'}$ será el escalar que acompaña a $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1} |n\rangle$.
7. La parte asociada al operador $\hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}$ corresponderá a la matriz transpuesta del inciso anterior.

Con el algoritmo descrito en los incisos anteriores se construye una matriz que solo tiene elementos diferentes de cero en la diagonal y en los sitios (p, p') .

La segunda parte del código consiste en tomar en cuenta las simetrías del sistema en particular el operador de traslación \hat{S} .

La matriz que contiene en sus columnas a los autoestados de \hat{S} escritos en la base de Fock corresponde a la matriz de cambio de base que lleva del espacio de Fock al espacio de autoestados de \hat{S} . Describimos enseguida cómo se construye el Hamiltoniano en esta nueva base.

1. Se construye los vectores propios de \hat{S} según lo explicado en la sección de simetrías.
2. Sea \hat{A} la matriz que contiene en sus columnas a los vectores propios de \hat{S} escritos en la base de estados de Fock.
3. El Hamiltoniano en la nueva base estará dado por

$$\hat{H}_{BH}^s = \hat{A}^\dagger \hat{H}_{BH} \hat{A}, \quad (2.24)$$

donde \hat{H}_{BH}^s y \hat{H}_{BH} son los Hamiltonianos escrito en la base de \hat{S} y en la base de estados de Fock respectivamente.

Con los pasos descritos hasta aquí tenemos el Hamiltoniano construido en L bloques. Cada uno asociado a un valor propio de \hat{S} . Sin embargo, como se describió en la sección de simetrías el subespacio asociado a $k = L$ se puede descomponer en dos bloques con paridad bien definida. Para hacer esto se construye el operador de paridad y se aplica a cada elemento $|l\rangle$ del subespacio. Esto nos regresara un vector $|l'\rangle$ del mismo subespacio con el que podremos construir la combinación par e impar

$$\begin{aligned} |l+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|l\rangle + |l'\rangle), \\ |l-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|l\rangle - |l'\rangle). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Con esta descomposición del subespacio tendremos el espectro completamente separado en todas las simetrías que el sistema posee.

2.5. Realización experimental

Los átomos ultra fríos atrapados en redes ópticas son el medio por el cual se ha logrado la realización experimental de sistemas como el descrito en este trabajo. Las técnicas experimentales que se han desarrollado en la manipulación de átomos ultra fríos abrieron un nuevo capítulo en la física atómica, molecular y en general, en la realización experimental de sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

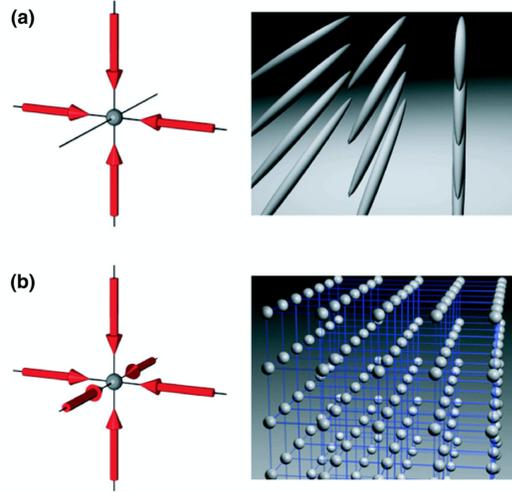


Figura 2.6: Los potenciales de redes ópticas están formados por la superposición de dos o más ondas estacionarias ortogonales. a) Para una red óptica dos dimensional, los átomos están confinados en una serie de tubos de potencial unidimensionales confinantes. En el caso 3D, la red óptica puede ser aproximada por un conjunto cúbico simple 3D de potenciales de oscilador armónico confinantes en cada sitio de la red (tomada de [24]).

En esta sección haremos una descripción sin entrar en detalles de la forma en que se crean estos sistemas.

2.5.1. Redes ópticas

Las redes ópticas son creadas con láseres contrapropagantes que forman ondas electromagnéticas estacionarias. El origen físico del confinamiento de átomos fríos con luz láser es la fuerza dipolar[24].

La interferencia entre los haces de luz forma una onda estacionaria de periodo $\lambda/2$ en la cual se atrapan los átomos. Haciendo interferir más láseres, se crean redes de una, dos o tres dimensiones, ver la Figura 2.6. Una ventaja importante de crear trampas mediante la interferencia de láseres es que la profundidad y la geometría de la trampa está bajo control total del experimentador.

La geometría de la trampa puede ser controlada cambiando el ángulo entre los láseres incidentes y la longitud de onda lo cual posibilita la formación de redes ópticas complejas. Mientras que la profundidad de la trampa puede ser modulada cambiando la intensidad del haz.

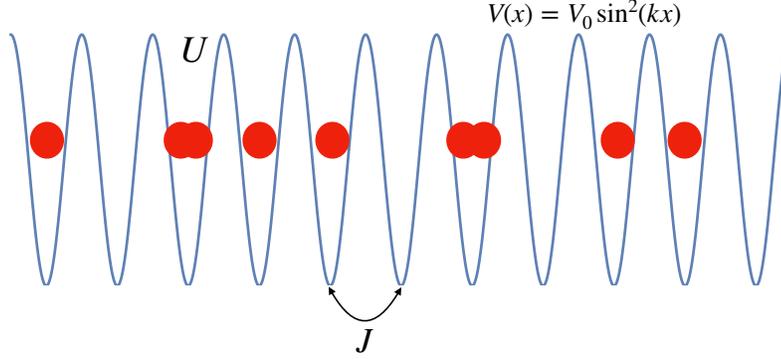


Figura 2.7: Esquema de átomos confinados en un potencial periódico unidimensional de la forma $V(x) = V_0 \sin^2(kx)$.

Como ya mencionamos, en este trabajo nos restringimos al modelo lineal. Asumiendo entonces un red óptica lineal, el potencial de confinamiento tiene la forma

$$V(x, y) = V_0 \sin^2(kx), \quad (2.26)$$

donde $k = 2\pi/\lambda$ es el vector de onda del láser y V_0 la profundidad del potencial usualmente dado en unidades de la energía de retroceso $E_R = \hbar^2 k^2 / 2m$ (con m la masa de un átomo neutro) que es la unidad natural de energía en estos sistemas. En la Figura 2.7 se muestra la forma del potencial de la ecuación (2.26).

El modelo de BH considera átomos bosónicos que ocupan la primera banda de energía, lo cual se logra teniendo pozos suficientemente profundos. Suponiendo que se cumple lo anterior tendríamos que $V_0 \gg E_R$. En este caso, los parámetros del modelo J y U se pueden aproximar a[29]

$$\begin{aligned} \frac{J}{E_R} &\approx \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{V_0}{E_R} \right)^{3/4} e^{-2\sqrt{V_0/E_R}}, \\ \frac{U}{E_R} &\approx \sqrt{\frac{8}{\pi}} k a_s \left(\frac{V_0}{E_R} \right)^{3/4}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

donde a_s es la longitud de dispersión de onda s . Supongamos que el experimento se realiza con ^{87}Rb . Los valores típicos en el experimento son $\lambda = 825\text{nm}$ y $a_s = 5.45\text{nm}$ [30]. La forma de J y U como función de V_0 en unidades de E_R se muestra en la Figura 2.8. Usando la tercera parametrización descrita al inicio

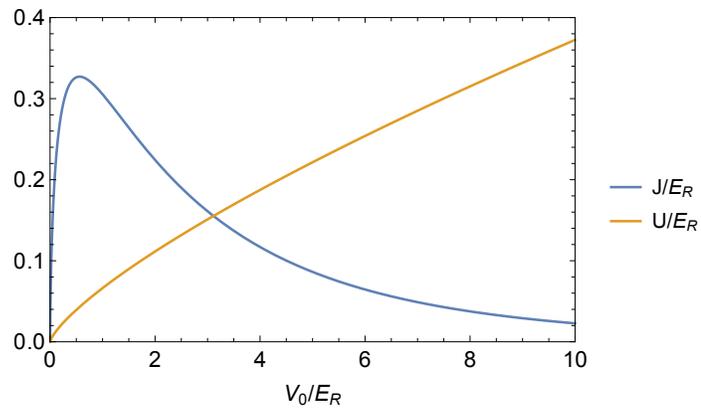


Figura 2.8: Se muestra el comportamiento de J y U como función de V_0 en unidades de E_R .

de este capítulo, los valores de U y J correspondientes a $u = 0.5$ concuerdan con el cruce en la Figura 2.8. Lo cual se cumple para $V_0/E_R = 3.11252$.

Capítulo 3

Caos cuántico en el modelo de Bose-Hubbard

La manera tradicional en la que se determina si un sistema presenta caos cuántico es mediante el análisis estadístico de su espectro, tal y como se describió en el primer capítulo. Sin embargo, hay situaciones en las que por alguna razón no se tiene acceso al espectro del sistema o hacer el desdoblamiento de niveles puede resultar difícil además de que las pruebas de distribución de probabilidad pueden dar resultados ambiguos.

En este capítulo analizamos la estadística de niveles del modelo de BH y presentamos una prueba alterna del comportamiento caótico del sistema. Esta prueba consiste en la observación del llamado agujero de correlación, el cual es un descenso por debajo del punto de saturación de la probabilidad de supervivencia, definida como la probabilidad de encontrar el sistema al tiempo t en el estado inicial. Estudiar este observable nos permite comparar los resultados numéricos con una expresión analítica que se derivó a partir de teoría de matrices aleatorias[19, 31, 32, 33, 34]. Aunque el agujero de correlación ya ha sido estudiado en otros sistemas caóticos, en los cuales se basó gran parte del trabajo, nunca había sido investigado en el modelo de BH.

3.1. Estadística de niveles

Consideremos el modelo de BH con nueve bosones sin espín colocados en un arreglo lineal de nueve sitios con condiciones de frontera periódicas. El Hamiltoniano del sistema es

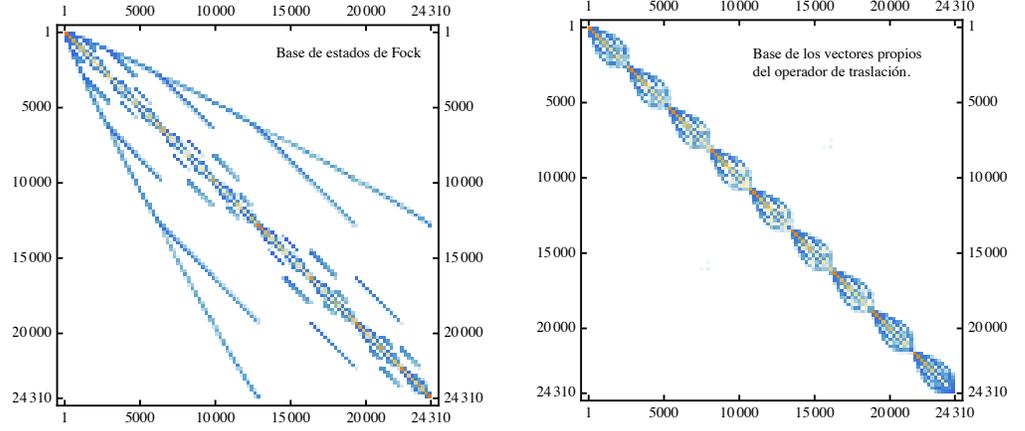


Figura 3.1: (Izquierda) Hamiltoniano de BH con $N = L = 9$ en la base de estados de Fock. (Derecha) Hamiltoniano en los estados de la base del operador \hat{S} .

$$\hat{H}_{BH} = -J \sum_{l=1}^9 \left(\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + h.c. \right) + \frac{U}{2} \sum_{l=1}^9 \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1). \quad (3.1)$$

La dimensión del espacio de Hilbert esta dada por la ecuación (2.23) y en este caso es $\mathcal{D} = 24310$. Usando la parametrización $u = U$, $u = 1 - J$ descrita en el segundo capítulo construimos el Hamiltoniano (3.1) con $u = 0.5$ el cual se muestra en la Figura 3.1. A la izquierda se muestra el Hamiltoniano en la base de número. A la derecha se muestra en la base de los vectores propios de \hat{S} .

Se sigue del análisis de las simetrías que el espacio de Hilbert se descompone en 9 subespacios ortogonales asociados a $k = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\}$. Además el subespacios $k = 9$ se puede descomponer en dos subespacios con paridad bien definida, la descomposición en estos dos subespacios se puede ver en la Figura 3.2. El bloque superior representa los autoestados con paridad par y el inferior con paridad impar.

Los valores propios del operador de traslación \hat{S} se muestran gráficamente en el Figura 3.3. Cada una de las etiquetas que se encuentra a un costado de los puntos es el valor de k al cual pertenece dicho valor propio. Como podemos ver, los valores propios para los subespacios ocho y uno son el complejo conjugado uno del otro, lo mismo para los subespacios dos y siete, tres y seis, cuatro y cinco. Esta característica se ve reflejada en el espectro del modelo, pues al ser

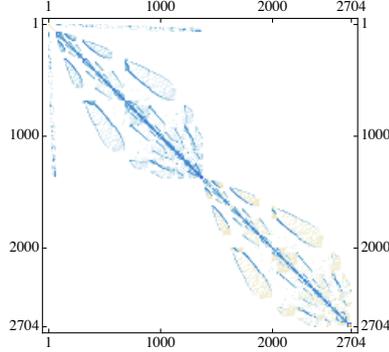


Figura 3.2: Descomposición del espacio $k = 9$ (dimensión 2704) en dos subespacios con paridad definida.

el Hamiltoniano un operador autoadjunto, no hay ninguna diferencia entre las parejas de subespacios anteriores. Eso lo confirmamos al ver que tienen el mismo espectro para cualquier valor de $u \in [0, 1]$. Dado lo anterior, nos limitaremos a analizar los subespacios con $k \in \{1, 2, 3, 4, 9\}$.

Comencemos por analizar la densidad de estados tanto del sistema completo como de cada uno de los subespacios. Mediante diagonalización exacta se obtuvo el espectro completo en cada uno de los subespacios. El gráfico de la densidad de estados para el sistema completo se muestra en la Figura 3.4 mientras que la de los subespacios en la Figura 3.5. El análisis de las energías muestra que en todos los subespacios la distribución es normal con parámetros muy similares. Los parámetros de cada distribución se muestran en la tabla 3.1.

La densidad en cada subespacio muestra que no hay diferencia significativa entre los subespacios pues aproximadamente todos tienen la misma distribución de energías. Esto nos hace suponer que todos los subespacios tendrán el mismo comportamiento.

Consideremos la estadística de separación de niveles para cada subespacio. Tomemos la parte central del espectro, quitando el 10% de las energías tanto en la parte inferior como en la superior. En la Figura 3.5 se muestra en gris la parte del espectro que se analizó y en amarillo los extremos que se descartaron. Consideramos $s_i = (E_{i+1} - E_i)/\sigma_i$ donde σ_i es la separación media de estados en el intervalo (E_i, E_{i+1}) y calculamos la distribución de dicha separación. El resultado para cada subespacio se muestra en la Figura 3.7.

La línea continua en rojo es la distribución de Wigner-Dyson mientras que las barras en color gris corresponden a la distribución de s en cada subespacio. Claramente se observa que en los subespacios con $k = 1, 2, 3, 4$ la estadística sigue una distribución de Wigner-Dyson y por lo tanto se presenta caos cuántico.

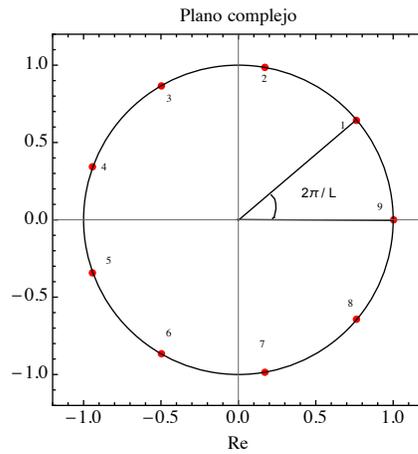


Figura 3.3: Valores propios del operador de traslación para el modelo de BH con nueve sitios.

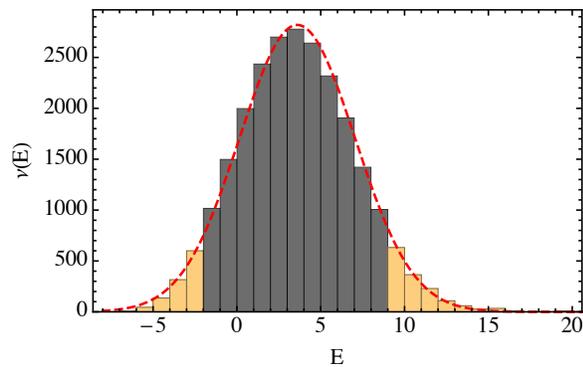


Figura 3.4: Densidad de estados del modelo de BH con $N = L = 9$ y $u = 0.5$. La línea punteada en rojo representa el ajuste a la distribución. Las franjas amarillas son el 10% de los datos que no se usan para la estadística de niveles.

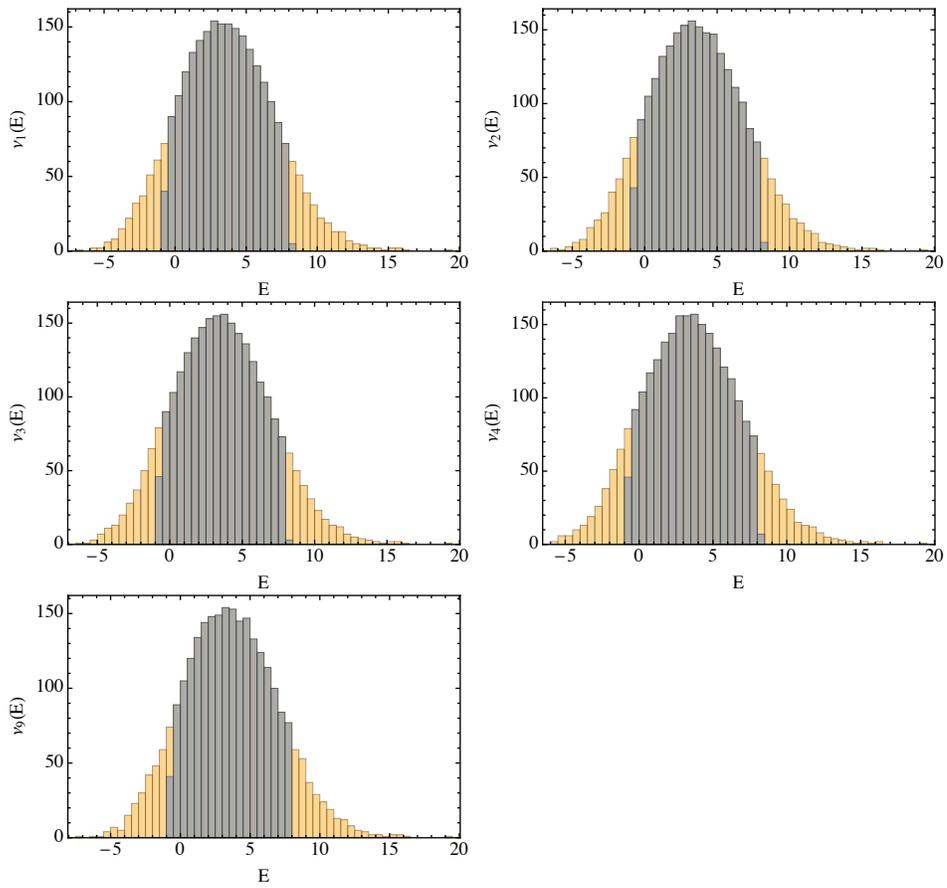


Figura 3.5: Densidad de estados en los diferentes subespacios. Las regiones amarillas son aquellas que se omitieron para hacer la estadística de niveles.

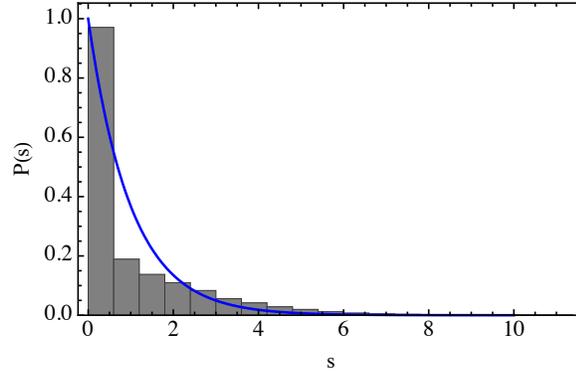


Figura 3.6: Distribución de los espaciamientos del espectro sin separar por simetrías.

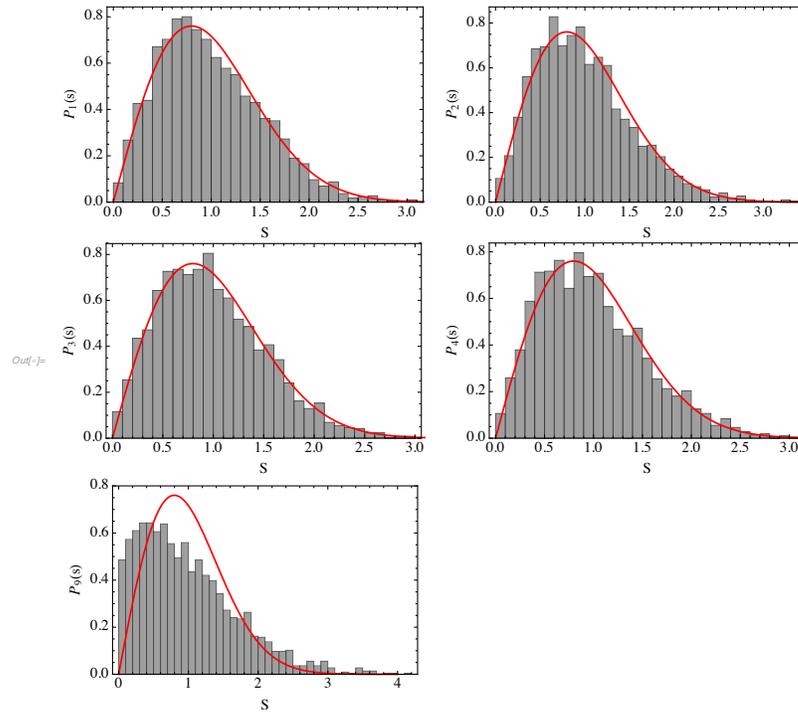


Figura 3.7: Distribuciones de los espaciamientos del espectro en los diferentes subespacios comparada con la distribución de Wigner-Dyson.

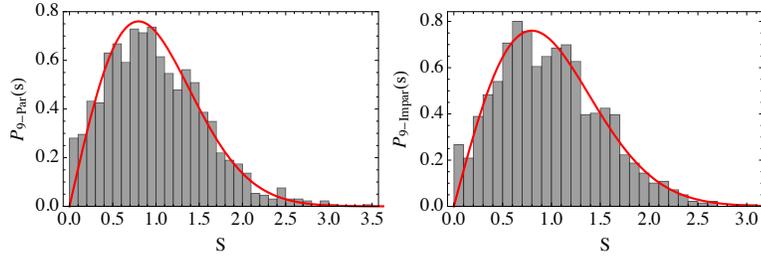


Figura 3.8: Distribuciones del espaciamiento en el subespacio $k = 9$ para los estados con paridad par(derecha) y paridad impar(izquierda).

Subespacio	Media	Desviación estándar
k=1,8	3.60056	3.43885
k=2,7	3.60056	3.43885
k=3,6	3.60137	3.43807
k=4,5	3.60056	3.43885
k=9(par)	3.55263	3.49504
k=9(impar)	3.64579	3.38887
Completo	3.60033	3.43994

Tabla 3.1: Media y desviación estándar de las distribuciones de energía en cada subespacio.

A diferencia de los subespacios anteriores en el subespacio $k = 9$ no se aprecia una clara concordancia con la distribución de Wigner-Dyson aunque tampoco se aprecia que concuerde con la distribución de Poisson. Esta fue una de las razones por las que se decidió analizar más el subespacio $k = 9$. Cuando se separó el espacio en los dos subespacios con paridad definida, tal y como se describe en el segundo capítulo se obtuvieron espacios de dimensión 1387 con paridad par y 1317 con paridad impar. La estadística de niveles de cada uno de estos subespacios sí sigue una distribución de Wigner-Dyson y se muestra en la Figura 3.8.

Analicemos ahora la estadística de niveles del espectro completo, es decir sin separar en simetrías. En la Figura 3.6 se muestra que la distribución de primeros vecinos para el espectro completo parece seguir más una distribución de Poisson, como la que se muestra en azul, que una distribución tipo Wigner-Dyson. Esto muestra que con este método de estadística espectral no es posible determinar si un sistema presenta caos al estudiar el espectro completo aún cuando el análisis de los subespacios muestra claramente la correlación en los niveles.

3.2. Probabilidad de supervivencia

La probabilidad de supervivencia $S_P(t)$ es un observable definido como la probabilidad de encontrar al sistema en el estado inicial $|\Psi(0)\rangle$ a un tiempo posterior t ,

$$S_P(t) = |\langle \Psi(0) | \Psi(t) \rangle|^2. \quad (3.2)$$

Si consideramos tanto el estado inicial como el estado al tiempo t en la base de la energía,

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_k c_k |\phi_k\rangle, \quad c_k = \langle \phi_k | \Psi(0) \rangle, \quad \hat{H}_{BH} |\phi_k\rangle = E_k |\phi_k\rangle, \quad (3.3)$$

podemos escribir la probabilidad de supervivencia como,

$$S_P(t) = \left| \sum_k |c_k|^2 e^{-iE_k t} \right|^2. \quad (3.4)$$

La evolución a tiempos cortos depende de la distribución en la energía del estado inicial. Para ver esto, observemos que $S_P(t)$ se puede escribir de la siguiente manera

$$S_P(t) = \left| \int \rho_0(E) e^{-iEt} dE \right|^2, \quad (3.5)$$

con $\rho_0(E) = \sum_k |c_k|^2 \delta(E - E_k)$ es la densidad local de estados (LDoS), que es la distribución de la energía pesada por las componentes del estado inicial[32].

3.2.1. Estados iniciales

Consideraremos ensambles de estados iniciales definidos en una región caótica de la energía con componentes seleccionados aleatoriamente, tales que

$$|c_k|^2 = \frac{r_k f(E_k)}{\sum_q r_q f(E_q)}. \quad (3.6)$$

donde r_k son números aleatorios positivos de una distribución uniforme en el intervalo $[0, 1]$. La función $f(E) = \rho(E)/\nu(E)$ garantiza que el estado inicial tiene un perfil dado por $\rho(E)$, que se consigue compensando los cambios en la densidad de estados $\nu(E)$. En la Figura 3.4 se muestra la densidad de estados del modelo de BH para $u = 0.5$ $N = L = 9$, que es el caso que se analiza.

Consideraremos un perfil rectangular dado por

$$\rho^R(E) = \begin{cases} \frac{1}{2\sigma_R} & E \in [E_c - \sigma_R, E_c + \sigma_R] \\ 0 & \text{Otro caso.} \end{cases} \quad (3.7)$$

El perfil está centrado en la energía E_c que será seleccionado como un punto del espectro en que sabemos que el caos domina la dinámica y σ_R es el ancho de la distribución.

Como ya mencionamos, la distribución de energía de $|\Psi(0)\rangle$ determina el decaimiento de $S_P(t)$. Si aproximamos la LDoS en la ecuación (3.5) por su perfil suavizado $\rho_0(E) \approx \rho^R(E)$, obtenemos el comportamiento inicial de la probabilidad de supervivencia

$$\begin{aligned} S_P^{bc}(t) &= \left| \int_{E_c - \sigma_R}^{E_c + \sigma_R} \frac{1}{2\sigma_R} e^{-iEt} dt \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2\sigma_R t} (\sin(Et) - i \cos(Et)) \Big|_{E_c - \sigma_R}^{E_c + \sigma_R} \right|^2 \\ &= \frac{4 \sin^2(\sigma_R t)}{4\sigma_R^2 t^2} |\cos(E_c t) + i \sin(E_c t)|^2 \\ S_P^{bc}(t) &= \frac{\sin^2(\sigma_R t)}{(\sigma_R t)^2}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

Para tiempos muy cortos, $t \ll \sigma_R^{-1}$, la expresión anterior muestra el decaimiento universal de la probabilidad de supervivencia $1 - \sigma_R^2 t^2$. Esto se puede ver expandiendo en serie de Taylor la última expresión de la ecuación (3.8).

La ley de decaimiento de la probabilidad de supervivencia es causada por la presencia de los límites de la energía en la LDoS, que en nuestro caso presentan una discontinuidad, el exponente depende de cómo se aproximan los límites[19]. Observemos que el comportamiento inicial es simplemente la transformada de Fourier del perfil de energía del estado inicial.

3.2.2. Expresión analítica

Existen dos características adicionales del espectro del sistema que no están capturadas en la ecuación (3.8). Estas características surgen de que el espectro es discreto y de la correlación en los valores propios. Veremos que la manifestación de las correlaciones en el espectro es a través del agujero de correlación el cual aparece a tiempos largos. La segunda característica que no está presente en la ecuación (3.8) es la saturación de la dinámica al valor asintótico alrededor del cual oscilará la probabilidad de supervivencia,

$$\overline{S_P(t)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t S_P(t') dt', \quad (3.9)$$

Para observar estos fenómenos en la ecuación que describe a $S_P(t)$ reescribimos la ecuación (3.2) separando los términos con la misma componente de la energía de la siguiente forma,

$$S_P(t) = \sum_{k \neq l} |c_l|^2 |c_k|^2 e^{-i(E_k - E_l)t} + I_{PR}, \quad (3.10)$$

donde

$$I_{PR} = \sum_k |\langle \phi_k | \Psi(0) \rangle|^4 = \overline{S_P}, \quad (3.11)$$

es la llamada razón inversa de participación, que da el valor asintótico de $S_P(t)$. La I_{PR} da una medida del inverso del número de elementos de la base que participan en un estado inicial arbitrario $|\Psi(0)\rangle$.

Con las consideraciones tomadas en los párrafos anteriores es posible determinar una expresión para la tasa inversa de participación si consideramos el promedio sobre el ensamble de estados iniciales,

$$\langle I_{PR} \rangle = \left\langle \frac{\sum_k r_k^2 f^2(E_k)}{\left(\sum_q r_q f(E_q)\right)^2} \right\rangle \approx \frac{\langle r_k^2 \rangle}{\langle r_q \rangle^2} \frac{1}{\nu_c} \int \rho^2(E) dE, \quad (3.12)$$

lo que resulta para el perfil rectangular

$$\langle I_{PR}^R \rangle = \frac{2}{3\sigma_R \nu_c}, \quad (3.13)$$

donde $\nu_c = \nu(E_c)$ es la densidad de estados evaluada en el centro del perfil E_c , que es igual al espaciado medio inverso de niveles de energía consecutivos en la región sondeada por el estado inicial.

Hemos descrito dos regiones de la dinámica en la probabilidad de supervivencia. El comportamiento inicial que está determinado por la ecuación (3.8) y el valor asintótico que está dictado por la ecuación (3.13). Nos falta considerar el comportamiento intermedio, el cual está determinado por las correlaciones que existen entre los niveles de energía del sistema.

Mencionamos ya en el capítulo uno que las propiedades estadísticas de los sistemas cuánticos caóticos son comparables a las del ensemble Gaussiano ortogonal (GOE) de la teoría de matrices aleatorias. Es a partir de esta consideración que se deriva el comportamiento intermedio de la probabilidad de supervivencias. Siguiendo los pasos que se describen [34, 33, 19] llegamos a la expresión analítica para la probabilidad de supervivencia

$$\langle S_P(t) \rangle = \frac{1 - \langle I_{PR} \rangle}{\eta - 1} \left[\eta S_P^{bc}(t) - b_2 \left(\frac{t}{2\pi\nu_c} \right) \right] + \langle I_{PR} \rangle. \quad (3.14)$$

En la ecuación anterior, η es la dimensión efectiva del ensemble, definida como [19]

$$\eta = \frac{\nu_c}{\int \rho^2(E) dE} = \frac{\langle r_k^2 \rangle}{\langle r_k \rangle^2} \frac{1}{\langle I_{PR} \rangle}, \quad (3.15)$$

En la ecuaciones (3.14), $S_P^{bc}(t)$ describe el comportamiento antes de la manifestación de la correlación entre los valores propios (el subíndice bc se refiere a *before correlations*) y corresponde a la ecuación (3.8). El comportamiento determinado por esta ecuación se cumple hasta que $\langle S_P(t) \rangle$ llega a su valor mínimo, que es menor a $\langle I_{PR} \rangle$. Después de este valor la dinámica está controlada por el factor de forma de dos niveles

$$b_2(\bar{t}) = [1 - 2\bar{t} + \bar{t} \ln(2\bar{t} + 1)] \Theta(1 - \bar{t}) + \left[\bar{t} \ln \left(\frac{2\bar{t} + 1}{2\bar{t} - 1} \right) - 1 \right] \Theta(\bar{t} - 1) \quad (3.16)$$

donde Θ es la función escalón de Heaviside. $b_2(t)$ lleva la probabilidad de supervivencia de su valor mínimo a su valor asintótico $\langle I_{PR} \rangle$, creando el descenso que es conocido como agujero de correlación.

El agujero es una señal directa de la presencia de valores propios correlacionados y no se forma con valores propios no correlacionados. Como la ecuación

anterior se deriva considerando la teoría de matrices aleatorias y no el sistema físico particular se concluye que la dinámica de la probabilidad de supervivencia después de alcanzar el mínimo es universal.

La dinámica completa de la probabilidad de supervivencia está determinada por la ecuación (3.14). Observemos que la ecuación no tiene parámetros de ajuste. Todos los parámetros pueden ser determinados del modelo y el perfil de energía del estado inicial.

Comencemos nuestro análisis por estudiar el espectro y la distribución de las energías. Después analizaremos la probabilidad de supervivencia y aplicaremos los resultados descritos en esta sección.

3.3. El agujero de correlación

Para cada uno de los subespacios tomemos el perfil cuadrado en la energía centrado en E_c donde E_c es el centro de la distribución en cada subespacio, es decir, toma los valores de la segunda columna en la tabla 3.1 dependiendo del subespacio que se analice. Para todos los casos tomamos $\sigma_R = 2$ y consideramos tantos estados iniciales como niveles de energía hay en el intervalo $[E_c - \sigma_R, E_c + \sigma_R]$ que son del orden de 1800 para los subespacios con $k \in \{1, 2, 3, 4\}$ y de 1100 para los subespacios con $k = 9$.

Usando la definición de la probabilidad de supervivencia (3.4) se calcula dicho observable para cada estado inicial en el intervalo temporal $t \in [0, 10^5]$ en una malla de 10^4 puntos con separación exponencial de tal forma que en escala logarítmica la separación entre puntos es constante.

Hacemos el mismo cálculo con la expresión analítica (3.14) y usando la misma malla temporal. En las Figura 3.9 y 3.10 se muestran, en gris el comportamiento de algunas trayectorias de la probabilidad de supervivencia, en color rojo se observa el promedio sobre el ensamble y en verde se observa la trayectoria predicha por la expresión analítica para cada uno de los subespacios del sistema.

De estas figuras podemos concluir algunas cosas. No parece haber alguna diferencia en las probabilidades de supervivencia entre los primeros cuatro subespacios, tanto en la teórica que corresponde a la curva verde como en el promedio sobre el ensamble que es la curva roja. Incluso las variaciones de la curva roja parecen ser del mismo orden en todos los casos. Lo mismo sucede entre los dos subespacios de $k = 9$. Las probabilidades de supervivencia parecen ser idénticas en ambos casos. Sin embargo si hay diferencia significativa entre los dos subespacios de $k = 9$ y los primeros cuatro.

El agujero de correlación solo se observa al hacer promedios sobre el ensamble

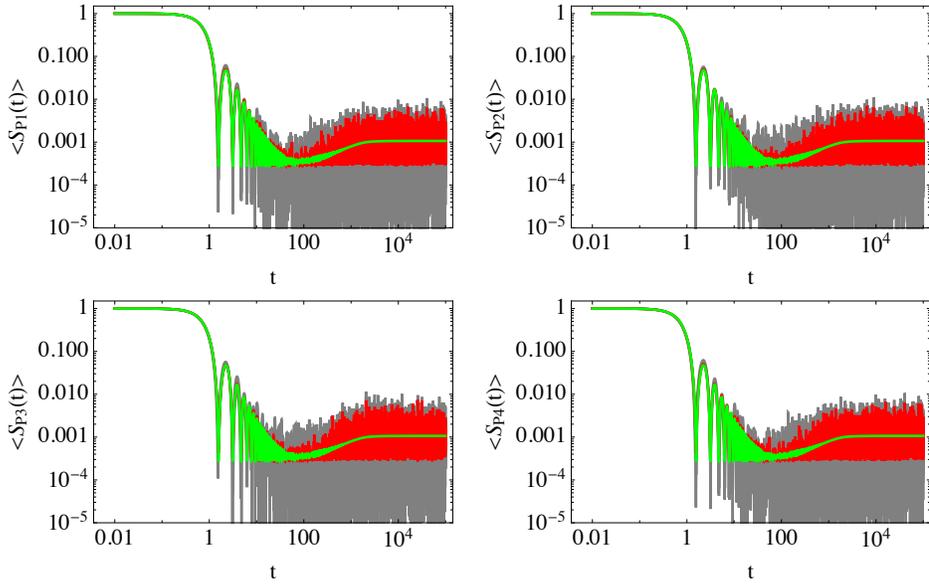


Figura 3.9: Comportamiento de la probabilidad de supervivencia en los subespacios $k = 1, 2, 3, 4$ en orden de izquierda a derecha y de arriba a abajo. En gris se muestra algunas de las trayectorias para diferentes estados iniciales, en rojo se muestra en promedio sobre todas las trayectorias y en verde el comportamiento analítico.

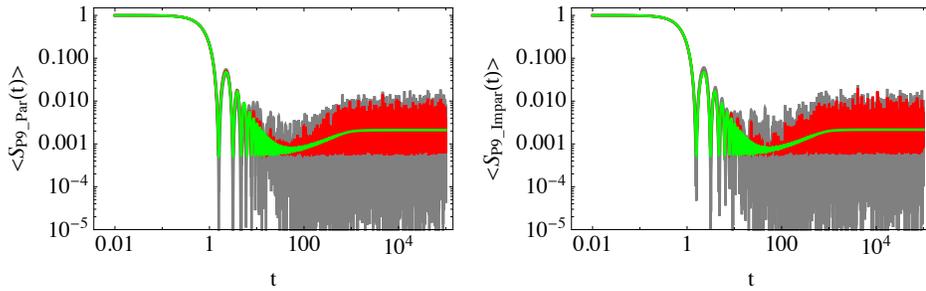


Figura 3.10: Comportamiento de la probabilidad en los subespacios con paridad par e impar y $k = 9$.

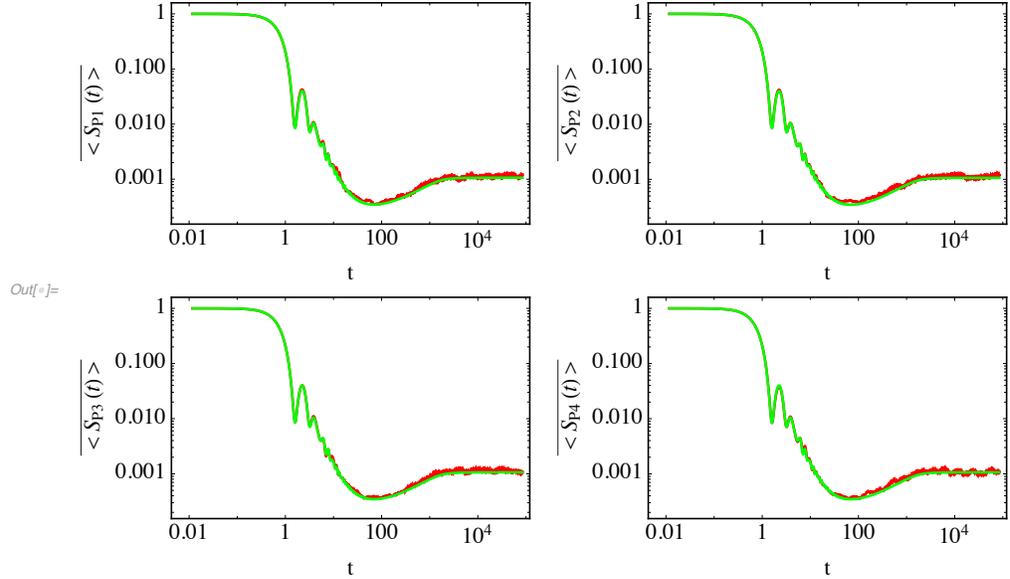


Figura 3.11: Promedio temporal de S_P para los subespacios $k = 1, 2, 3, 4$ (en rojo) y para la expresión analítica de la ecuación (3.14) (en verde).

y en el tiempo en la probabilidad de supervivencia. En las Figuras 3.11 y 3.12 se observa el promedio temporal de las probabilidades de supervivencia en cada uno de los subespacios. En todos los casos se realizó el promedio usando un intervalo de 100 puntos en el tiempo.

En todos los casos se encuentra muy buena concordancia entre la expresión analítica mostrada en verde y el resultado numérico que se muestra en rojo. Confirmamos que la probabilidad de supervivencia en los subespacios $k = \{1, 2, 3, 4\}$ es idéntica en los cuatro subespacios, de hecho, al sobreponer las trayectorias de la Figura 3.11 no se nota diferencia alguna entre las cuatro trayectorias. Esta semejanza en $\langle S_P(t) \rangle$ también se observa en los subespacios de $k = 9$ de las Figuras 3.12.

La observación del agujero de correlación es una evidencia clara de que se presenta caos cuántico en el modelo[32]. Como se muestra en la Figura 3.13, además de la descripción cualitativa del agujero de correlación también encontramos concordancia con las expresiones para el tiempo de relación T_r que es el tiempo al cual la dinámica satura al valor asintótico y el tiempo de Thouless T_{th} que es el momento en que la probabilidad de supervivencia alcanza su valor mínimo.

Se observa un decaimiento oscilatorio modulado por una ley de potencias t^{-2} . Este comportamiento es causado por los extremos en el perfil de energía y

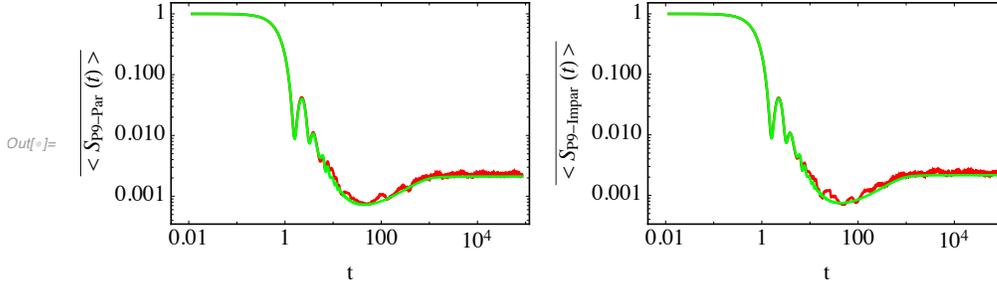


Figura 3.12: Promedio temporal de S_P en los subespacios con paridad par e impar y $k = 4$ (en rojo) y para la expresión analítica de la ecuación (3.14) (en verde).

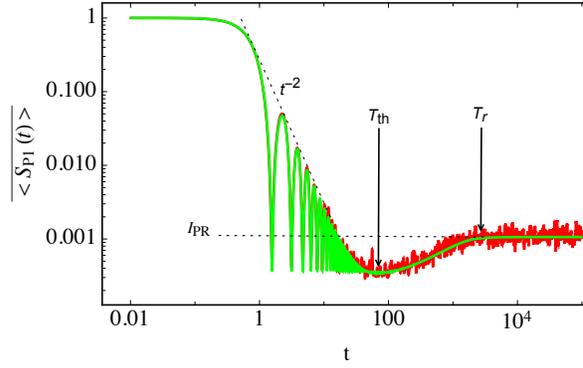


Figura 3.13: Ley de decaimiento en la probabilidad de supervivencia y tiempo de Thouless y de relajación.

concuera con el comportamiento ya observado en otros sistemas[19].

3.3.1. Probabilidad de supervivencia en diferentes subespacios

Supongamos que el análisis anterior no se realiza así, es decir, no se separa el Hamiltoniano en sus diferentes subespacios y se analizan por separado. En lugar de eso se calcula la probabilidad de supervivencia en el espectro completo del sistema. Considerando las mismas condiciones, $\sigma_R = 2$, tantos estados iniciales como energías del espectro completo hay en el intervalo $[E_c - \sigma_R, E_c + \sigma_R]$.

El resultado se muestra en la Figura 3.14. Se observa que no coincide el

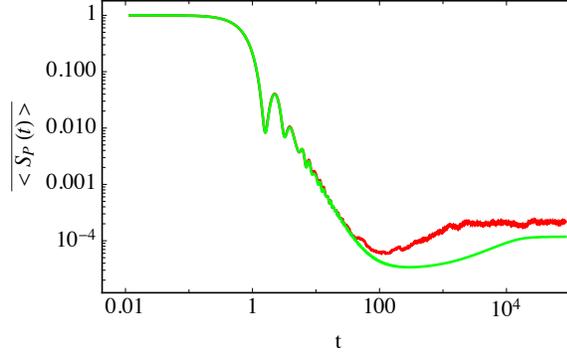


Figura 3.14: Promedio temporal de S_P considerando todo el espectro. En este caso el resultado analítico no coincide el resultado numérico.

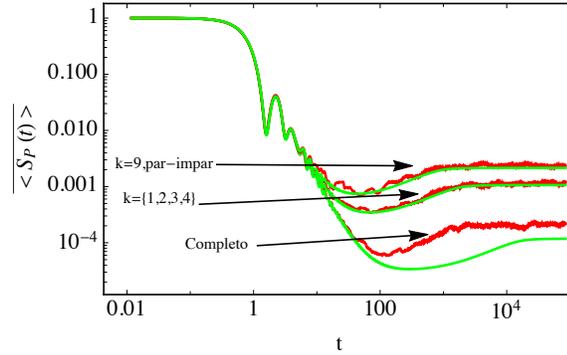


Figura 3.15: Se muestra el valor promedio de la probabilidad de supervivencia en los subespacios con $k = \{1, 2, 3, 4\}$, para $k = 9$ y para el sistema completo.

resultado analítico con el resultado numérico. El tiempo de relajación y la profundidad del agujero parecen ser mayores en la expresión analítica mientras que el valor asintótico es de 0.0001182. A pesar de estas diferencias se observa claramente el agujero de correlación en el resultado numérico, lo cual es una demostración contundente del comportamiento caótico del sistema.

La diferencia entre los tres comportamientos encontrados se observa mejor en la Figura 3.15. Se observa claramente que el valor asintótico es mayor en el subespacio $k = 9$ que en los subespacios $k = \{1, 2, 3, 4\}$ y este es mayor que el valor asintótico si consideramos el espectro completo. En la tabla 3.2 se muestra el valor asintótico calculado numéricamente.

Según la deducción de la expresión analíticas, la única diferencia entre las diferentes probabilidades de supervivencia es la densidad de estados. Si se tiene

Subespacio	Valor asintótico	Valor teórico
$k = 9$	0.00233(3)	0.0021277
$k = \{1, 2, 3, 4\}$	0.00113(2)	0.0010634
Completo	0.000207(9)	0.0001182

Tabla 3.2: Valor asintótico de las probabilidades de supervivencia para los diferentes subespacios.

una densidad de estados entonces todo el comportamiento ya estará determinado.

La dimensión de los subespacios es 2700 para los subespacios $k = \{1, 2, 4, 5, 7, 8\}$, 2703 para los subespacios $k = \{3, 6\}$ y 2704 para el subespacio $k = 9$. Creemos que la diferencia de dimensión es insignificante y no se refleja de manera importante en el comportamiento promedio de los observables. De hecho la tabla 3.1 muestra que la densidad de estados es prácticamente la misma en todos los subespacios y que la densidad de estados del sistema completo se puede aproximar simplemente como nueve veces la densidad de estados en alguno de los nueve subespacios.

Sabemos que los dos subespacios de paridad con $k = 9$ tienen aproximadamente la misma dimensión y es la mitad de la dimensión de los otros subespacios, por esta razón el valor asintótico resulta ser el doble, tal como se muestra en la Tabla 3.2.

Una de las preguntas que surge del análisis anterior es ¿Por qué la expresión analítica de la probabilidad de supervivencia no reproduce el comportamiento numérico para el ensamble del sistema completo? si la expresión está construida a partir de considerar ya una separación de las simetrías entonces ¿Por qué aún así podemos observar el agujero de correlación sin hacer la separación? ¿En qué casos se puede obtener estos resultados? es decir ¿Qué condiciones tiene que tener el sistema para observar tal comportamiento?

En la Figura 3.16 se muestra en rojo el valor numérico de la probabilidad de supervivencia y en verde el ajuste por mínimos cuadrados de la expresión analítica. El mejor ajuste encontrado es cuando se multiplica la densidad de estados de un subespacios por 5.45 lo cual suena razonable si consideramos que el número de subespacios que tienen espectro diferente entre ellos es precisamente 5.

3.3.2. Análisis por regiones

Consideremos el subespacio $k = 1$ cuya dimensión es de 2700. Sabemos ya que la región que se analizó en el espectro presenta caos cuántico. Analicemos

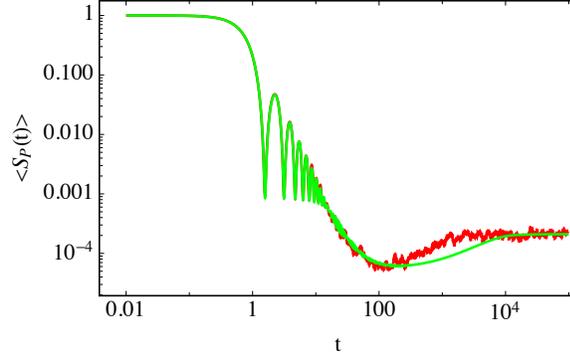


Figura 3.16: Probabilidad de supervivencia considerando el espectro completo en rojo y la expresión analítica con un ajuste de mínimos cuadrados en la densidad de estados.

ahora, con la misma distribución, diferentes partes del espectro. Las regiones que analizaremos se muestran en la Figura 3.17.

Siguiendo el mismo procedimiento que en el análisis por subespacios, consideramos tantos estados iniciales como energías hay en la región del espectro correspondiente. Cada uno de estos estados iniciales tienen componentes seleccionadas aleatoriamente según la ecuación (3.6).

Calculamos la probabilidad de supervivencia para los estados iniciales en las regiones mencionadas. Tomamos el promedio sobre las trayectorias y de la misma forma que antes, tomamos el promedio temporal. El resultado se observa en la Figura 3.18.

Cada trayectoria de la Figura 3.18 tiene el color correspondiente a la región de la energía de la cual se está analizando. Como esperábamos ver, las dos regiones centrales del espectro muestran claramente el agujero de correlación y por lo tanto estas dos regiones son caóticas en el sentido del caos cuántico mientras que las colas de la distribución son regiones regulares.

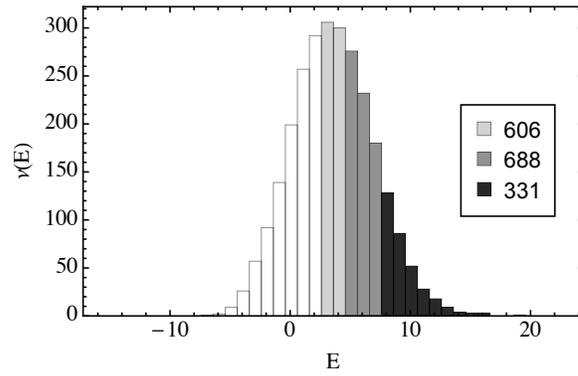


Figura 3.17: Las regiones oscuras son las diferentes regiones del espectro que se analizan. Las etiquetas indican el número de energías que se encuentran en cada región.

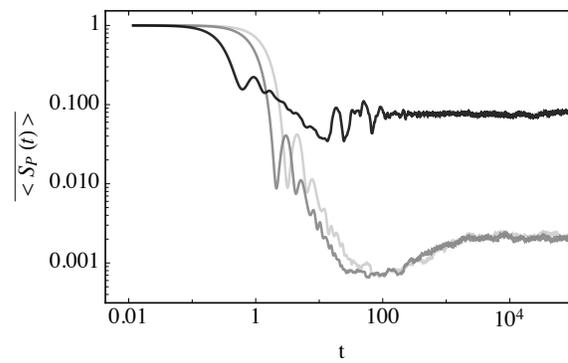


Figura 3.18: Promedio temporal de la probabilidad de supervivencia para ensambles de estados iniciales con distribución en la energía marcados en la Figura 3.17

Conclusiones

Analizamos el espectro completo del Hamiltoniano de Bose-Hubbard. El análisis de las simetrías nos permitió encontrar un algoritmo mucho más eficiente para diagonalizar el Hamiltoniano.

Se pudo demostrar que el sistema es caótico en el sentido del caos cuántico. Esto se determinó analizando la estadística del espectro y observando que la estadística de niveles de primeros vecinos sigue una distribución de Wigner-Dyson. Además se encontró que la dinámica de la probabilidad de supervivencia exhibe una señal clara de las correlaciones espectrales conocida como agujero de correlación. El análisis de la probabilidad de supervivencia lo hicimos en cada uno de los subespacios del sistema y logramos comprender la diferencia en el comportamiento de diferentes subespacios.

Encontramos que el agujero de correlación se presenta también cuando no separamos el espacio en simetrías. Lo cual puede ser de gran ayuda si esta separación no es fácil de realizar o no se tiene acceso al espectro del sistemas. Consideramos que esto se cumple si, como en este caso, la distribución de la energía en los diferentes subespacios es prácticamente la misma.

Con este método se pueden analizar diferentes regiones del espectro. Logramos observar que el agujero de correlación no se presenta cuando el ensamble de estados iniciales tiene componentes en las colas de la distribución de energía mientras que en la región central se observa claramente.

Consideramos que los resultados expuestos en este trabajo son una aportación al entendimiento de la dinámica de este Hamiltoniano y aunque se ha demostrado que otros sistemas cuánticos de muchos cuerpos presentan caos, creemos que este sistema merece una atención especial por su importancia en la física de átomos fríos.

Apéndice

Representación de Bloch

En esta parte del apéndice desarrollamos los cálculos para llevar el Hamiltoniano de Bose-Hubbard a la representación de Bloch.

Consideremos las relaciones de transformación definidas por la ecuación (2.13) y su conjugada. Al sustituir en el Hamiltoniano de BH obtenemos para la parte cinética:

$$\begin{aligned}
 \hat{T} &= -J \sum_l \left(\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1} \right) \\
 &= -J \sum_l \left(\frac{1}{L} \left(\sum_\kappa e^{i\kappa(l+1)} \hat{b}_\kappa^\dagger \sum_{\kappa'} e^{-i\kappa' l} \hat{b}_{\kappa'} + \sum_\kappa e^{i\kappa l} \hat{b}_\kappa^\dagger \sum_{\kappa'} e^{-i\kappa'(l+1)} \hat{b}_{\kappa'} \right) \right) \\
 &= -J \left(\sum_{\kappa, \kappa'} \frac{1}{L} \sum_l e^{i(\kappa - \kappa')l} e^{i\kappa} \hat{b}_\kappa^\dagger \hat{b}_{\kappa'} + \sum_{\kappa, \kappa'} \frac{1}{L} \sum_l e^{i(\kappa - \kappa')l} e^{-i\kappa'} \hat{b}_\kappa^\dagger \hat{b}_{\kappa'} \right) \\
 &= -J \left(\sum_{\kappa, \kappa'} \delta_{\kappa, \kappa'} e^{i\kappa} \hat{b}_\kappa^\dagger \hat{b}_{\kappa'} + \sum_{\kappa, \kappa'} \delta_{\kappa, \kappa'} e^{-i\kappa'} \hat{b}_\kappa^\dagger \hat{b}_{\kappa'} \right) \\
 &= -2J \sum_\kappa \frac{e^{i\kappa} + e^{-i\kappa}}{2} \hat{b}_\kappa^\dagger \hat{b}_\kappa \\
 &= -2J \sum_\kappa \cos(\kappa) \hat{n}_\kappa.
 \end{aligned} \tag{17}$$

En donde se usaron las relaciones

$$\sum_{m=1}^L e^{i \frac{2\pi k}{L} m} = 0, \tag{18}$$

$$\frac{1}{L} \sum_{\kappa} e^{i\kappa(l-l')} = \delta_{l,l'}. \quad (19)$$

Hagamos el mismo procedimiento para la energía potencial del sistema

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{U}{2} \sum_l \hat{n}_l (\hat{n}_l - 1) \\ &= \frac{U}{2} \sum_l \left(\frac{1}{L} \sum_{\kappa_1 \kappa_2} e^{i(\kappa_1 - \kappa_2)l} \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} \right) \left(\frac{1}{L} \sum_{\kappa_1 \kappa_2} e^{i(\kappa_1 - \kappa_2)l} \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} - 1 \right) \\ &= \frac{U}{2L} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4} \frac{1}{L} \sum_l e^{i(\kappa_1 - \kappa_2 + \kappa_3 - \kappa_4)l} \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} \hat{b}_{\kappa_3}^\dagger \hat{b}_{\kappa_4} - \frac{U}{2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} \frac{1}{L} \sum_l e^{i(\kappa_1 - \kappa_2)l} \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} \\ &= \frac{U}{2L} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4} \delta(\kappa_1 - \kappa_2 + \kappa_3 - \kappa_4) \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} \hat{b}_{\kappa_3}^\dagger \hat{b}_{\kappa_4} - \frac{U}{2} \sum_{\kappa_1, \kappa_2} \delta_{\kappa_1, \kappa_2} \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} \\ &= \frac{U}{2L} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4} \delta(\kappa_1 - \kappa_2 + \kappa_3 - \kappa_4) \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} \hat{b}_{\kappa_3}^\dagger \hat{b}_{\kappa_4} - \frac{UN}{2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Usemos las relaciones de conmutación para los operadores de creación y aniquilación bosónicos

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad (21)$$

entonces la energía potencial resulta

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{U}{2L} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4} \delta(\kappa_1 - \kappa_2 + \kappa_3 - \kappa_4) \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} \hat{b}_{\kappa_3}^\dagger \hat{b}_{\kappa_4} \\ &\quad + \frac{U}{2L} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4} \delta(\kappa_1 - \kappa_2 + \kappa_3 - \kappa_4) \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_4} \delta_{\kappa_2, \kappa_3} - \frac{UN}{2} \\ &= \frac{U}{2L} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4} \delta(\kappa_1 - \kappa_2 + \kappa_3 - \kappa_4) \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_3} \hat{b}_{\kappa_2} \hat{b}_{\kappa_4} \\ &\quad + \frac{U}{2L} L \sum_{\kappa_1, \kappa_2} \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_1} - \frac{UN}{2} \\ &= \frac{U}{2L} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3, \kappa_4} \delta(\kappa_1 - \kappa_2 + \kappa_3 - \kappa_4) \hat{b}_{\kappa_1}^\dagger \hat{b}_{\kappa_3} \hat{b}_{\kappa_2} \hat{b}_{\kappa_4} \end{aligned} \quad (22)$$

$$\hat{V} = \frac{U}{2L} \sum_{\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3} \hat{b}_{\kappa_1 + \kappa_2 - \kappa_3}^\dagger \hat{b}_{\kappa_3}^\dagger \hat{b}_{\kappa_2} \hat{b}_{\kappa_1} \quad (23)$$

Finalmente el Hamiltoniano de Bose-Hubbard en la representación de Bloch es

$$\hat{H}_{BH}^{bloch} = -2J \sum_{k=1}^L \cos\left(\frac{2\pi k}{L}\right) \hat{n}_k + \frac{U}{2L} \sum_{k_1, k_2, k_3=1}^L \hat{b}_{k_1 + k_2 - k_3} \hat{b}_{k_3}^\dagger \hat{b}_{k_2} \hat{b}_{k_1} \quad (24)$$

Bibliografía

- [1] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Phys. Rev. Lett.*, 52:1–4, Jan 1984.
- [2] Michael Victor Berry, M. Tabor, and John Michael Ziman. Level clustering in the regular spectrum. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 356(1686):375–394, 1977.
- [3] A. R. Kolovsky and A. Buchleitner. Quantum chaos in the bose-hubbard model. *Europhysics Letters (EPL)*, 68(5):632–638, dec 2004.
- [4] M Lubasch. Quantum chaos and entanglement in the bose-hubbard model. *Diploma (Master) thesis, Heidelberg University*. See http://www.thphys.uni-heidelberg.de/wimberger/diploma_thesis_lubasch.pdf, 2009.
- [5] R. A. Kidd, M. K. Olsen, and J. F. Corney. Quantum chaos in a bose-hubbard dimer with modulated tunneling. *Phys. Rev. A*, 100:013625, Jul 2019.
- [6] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Pearson Education, 2002.
- [7] Vladimir Igorevich Arnol'd. *Mathematical methods of classical mechanics*, volume 60. Springer Science & Business Media, 2013.
- [8] Linda Reichl. *The transition to chaos: conservative classical systems and quantum manifestations*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [9] F. Haake. *Quantum Signatures of Chaos*. Physics and astronomy online library. Springer, 2001.
- [10] Gabriela B. Lemos, Rafael M. Gomes, Stephen P. Walborn, Paulo H. Souto Ribeiro, and Fabricio Toscano. Experimental observation of quantum chaos in a beam of light. *Nature Communications*, 3(1):1211, 2012.
- [11] Mark G. Raizen. Experimental study of quantum chaos with cold atoms. 2000.

-
- [12] Eugene P. Wigner. On the development of the compound nucleus model. *American Journal of Physics*, 23(6):371–380, 1955.
- [13] Martin C Gutzwiller. *Chaos in classical and quantum mechanics*, volume 1. Springer Science & Business Media, 2013.
- [14] Akhilesh Pandey, Avanih Kumar, and Sanjay Puri. Quantum chaotic systems and random matrix theory. *arXiv preprint arXiv:1905.10596*, 2019.
- [15] K.H. Bockhoff. *Nuclear Data for Science and Technology: Proceedings of the International Conference Antwerp 6–10 September 1982*. Springer Netherlands, 2012.
- [16] Harald Friedrich and Hieter Wintgen. The hydrogen atom in a uniform magnetic field — an example of chaos. *Physics Reports*, 183(2):37 – 79, 1989.
- [17] Lea F. Santos and Marcos Rigol. Onset of quantum chaos in one-dimensional bosonic and fermionic systems and its relation to thermalization. *Phys. Rev. E*, 81:036206, Mar 2010.
- [18] Lea F. Santos and Marcos Rigol. Localization and the effects of symmetries in the thermalization properties of one-dimensional quantum systems. *Phys. Rev. E*, 82:031130, Sep 2010.
- [19] S. Lerma-Hernández, D. Villaseñor, M. A. Bastarrachea-Magnani, E. J. Torres-Herrera, L. F. Santos, and J. G. Hirsch. Dynamical signatures of quantum chaos and relaxation time scales in a spin-boson system. *Phys. Rev. E*, 100:012218, Jul 2019.
- [20] Luca D’Alessio, Yariv Kafri, Anatoli Polkovnikov, and Marcos Rigol. From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. *Advances in Physics*, 65(3):239–362, 2016.
- [21] J. Hubbard and Brian Hilton Flowers. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 276(1365):238–257, 1963.
- [22] Martin C. Gutzwiller. Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals. *Phys. Rev. Lett.*, 10:159–162, Mar 1963.
- [23] Junjiro Kanamori. Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals. *Progress of Theoretical Physics*, 30(3):275–289, 09 1963.
- [24] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, 80:885–964, Jul 2008.
- [25] W.T. Vetterling and W.H. Press. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Fortran numerical recipes. Cambridge University Press, 2007.

-
- [26] R. McWeeny. *Symmetry: An Introduction to Group Theory and Its Applications*. Dover Books on Physics. Dover Publications, 2012.
- [27] M. Lewenstein, A. Sanpera, and V. Ahufinger. *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating quantum many-body systems*. OUP Oxford, 2012.
- [28] J M Zhang and R X Dong. Exact diagonalization: the bose–hubbard model as an example. *European Journal of Physics*, 31(3):591–602, apr 2010.
- [29] Wilhelm Zwerger. Mott hubbard transition of cold atoms in optical lattices. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, 5(2):S9–S16, apr 2003.
- [30] C. Kollath, A. Iucci, T. Giamarchi, W. Hofstetter, and U. Schollwöck. Spectroscopy of ultracold atoms by periodic lattice modulations. *Phys. Rev. Lett.*, 97:050402, Jul 2006.
- [31] E. J. Torres-Herrera and Lea F. Santos. Extended nonergodic states in disordered many-body quantum systems. *Annalen der Physik*, 529(7):1600284, 2017.
- [32] E. J. Torres-Herrera and Lea F. Santos. Dynamical manifestations of quantum chaos: correlation hole and bulge. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 375(2108):20160434, 2017.
- [33] E. J. Torres-Herrera, Antonio M. García-García, and Lea F. Santos. Generic dynamical features of quenched interacting quantum systems: Survival probability, density imbalance, and out-of-time-ordered correlator. *Phys. Rev. B*, 97:060303, Feb 2018.
- [34] Mauro Schiulaz, E. Jonathan Torres-Herrera, and Lea F. Santos. Thouless and relaxation time scales in many-body quantum systems. *Phys. Rev. B*, 99:174313, May 2019.