tab = require("src/andpocalipse")

Universidad de San Carlos de Guatemala
Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas

Anteproyecto Prácticas Finales:

Caos cuántico en el modelo de Bose-Hubbard

Saúl Estuardo Nájera Allara

Carné: 202107506

Septiembre de 2025

Licenciatura en Física Aplicada

Asesorado por: *M.Sc. José Alfredo de León (IF–UNAM),*
Ing. Rodolfo Samayoa (ECFM–USAC)

1 Descripción general de la institución

1.1 Instituto de investigación de Ciencias Físicas y Matemáticas, USAC

El Instituto de investigación de Ciencias Físicas y Matemáticas (ICFM) es la unidad de la Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas (ECFM) que promueve y realiza estudios avanzados en áreas científicas, fundamentales y aplicadas, de las ciencias físicas y matemáticas. El ICFM se proyecta como una plataforma regional de excelencia dedicada a la investigación y difusión del conocimiento en física y matemática. Las principales líneas de trabajo del ICFM son:

- La investigación académica en ciencia básica y aplicada.
- La promoción de la investigación en ciencia básica y aplicada en el ámbito universitario.
- La difusión y divulgación del conocimiento generado por la investigación en ciencias físicas y matemáticas.
- La actualización continua de programas académicos de ciencias físicas y matemáticas.

2 Descripción general del proyecto

El estudio estadístico del espectro de sistemas cuánticos es una herramienta de valiosa utilidad para el ámbito teórico, experimental y aplicado. Se han distinguido dos tipos de propiedades: globales y locales. Respecto a las propiedades locales, se han estudiado fluctuaciones del espectro de energía, es decir, se han observado desviaciones de las distribuciones de niveles de energía respecto de un comportamiento promedio [1].

En un contexto de física clásica, el caos presenta dos características. La primera es sensibilidad exponencial a cambios pequeños en las condiciones iniciales y la segunda es el "*mixing*", cualquier distribución inicial de condiciones iniciales se dispersa hasta volverse indistinguible de la distribución de equilibrio. En física cuántica, en vista del principio de incertidumbre, no es posible tener trayectorias definidas en el espacio de fase. Una de las formas para estudiar el caos cuántico es mediante la estadística espectral, es decir, estudiando el espectro de energía del Hamiltoniano asociado al sistema.

Las fluctuaciones espectrales de sistemas cuánticos complejos es analizada mediante el marco teórico de la Teoría de Matrices Aleatorias (RMT) en varias áreas de la física, tales como la física de materia condensada, física nuclear y física atómica. Las fluctuaciones contienen señales distintivas para la identificación de diferentes fases observadas en sistemas físicos, por ejemplo para identificar límites entre integrabilidad o caoticidad en un sistema con análogo clásico, determinación de fases de metalicidad o insulación, fases localizadas o termalizadas de sistemas de muchos cuerpos, estudio de regímenes en espectros nucleares, entre otros [2] El presente consenso es que las fluctuaciones espectrales de sistemas cuánticos complejos presentan una repulsión entre sus niveles de energía que están en concordancia con alguno de los ensambles de matrices aleatorias, en los que se resaltan los ensambles GOE (Gaussian Orthogonal Ensemble), GUE (Gaussian Unitary Ensemble) y GSU (Gaussian Simplectic Ensemble). El primero en usar la idea de RMTs fue Wigner, en los años 50, con el motivo de estudiar el espectro de núcleos atómicos pesados [3]. Una de las observaciones que resaltan de su discusión es la observación de que los niveles de energía presentan una tendencia a repelerse unos a otros, ello motivo en parte a el uso de RMT para la descripción del Hamiltoniano de este tipo de sistemas.

Para Hamiltonianos cuánticos cuya contraparte clásica es integrable, la conjetura Berry-Tabor establece que la estadística de los niveles de energía sigue una estadística de Poisson [4], mientras que para Hamiltonianos cuya contraparte clásica sea caótica, la conjetura BGS (Bogigas, Gianoni, Schmit) establece que la estadística de los niveles de energía es descrita por alguno de los ensambles de RMT [5]

Este trabajo consistirá en hacer un estudio espectral del Hamiltoniano del modelo de Bose Hubbard con el objetivo de diagnosticar la región de parámetros en donde el sistema exhibe una estadística espectral que coincide con la propuesta por el ensamble Gaussiano Ortogonal (GOE). El modelo de Bose Hubbard es escogido por ser un buena primera aproximación a distintos sistemas físicos de interés presentes en la física de matería condensada y física atómica, notablemente, se han hecho realizaciones experimentales con átomos ultrafríos sobre un red óptica y se ha podido observar la transición SF-MI (Superfluidez-Aislante de

Mott) [6]. El modelo se puede emplear tanto para fermiones como para bosones. En este trabajo se modelará para bosones. El Hamiltoniano de este modelo es:

$$\hat{H} = -\frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\hat{a}_i^{\dagger}\hat{a}_j + \hat{a}_j^{\dagger}\hat{a}_i\right) + \frac{U}{2}\sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1). \tag{1}$$

Los términos $\hat{a}_i^{\dagger}, \hat{a}_j$ son los operadores creación y aniquilación respectivamente y $\hat{n}_i$ es el operador número (cuenta el número de particulas en el sitio). El parámetro J describe la parte cinética del Hamiltoniano y dicta la probabilidad de que los bosones "salten" de un sitio a otro adyacente. El segundo parámetro U describe la parte de interacción del Hamiltoniano, nos dice cómo es la fuerza de interacción entre bosones en mismo sitio [6]. En este trabajo, mediante una variación de la cantidad J/U, se buscará determinar las regiones de integrabilidad y caos del sistema.

Para el diagnostico de las regiones de caos cuántico, se utilizarán las siguientes cantidades:

- Mean level spacing ratio, $\langle r\rangle$:

  Denotando por E_n las energía ordenadas del espectro del Hamiltoniano, y el espaciamiento consecutivo de niveles de energía como $s_n = E_{n+1} - E_n$, se define la cantida [5]:

  $$r_n = \frac{\text{mín}(s_n, s_{n-1})}{\text{máx}(s_n, s_{n-1})}. \tag{2}$$

  Esta cantidad permite observar la universalidad de RMT en los espectros de energía. Estudiando la distribución de probabilidad asociada a las r's, es posible determinar si la configuración está en un regímen integrable o caótico. Por lo que es importante tener presente la forma análitica de la distribución de probabilidad de los cocientes entre los espaciamientos de niveles del ensabamble GOE y de Poisson. La distribución asociada a GOE es de la forma [5]:

  $$P_{GOE}(r) = 2\Theta(1-r)\cdot\left(\frac{27}{8}\frac{r+r^2}{(1+r+r^2)^{5/2}}\right), \tag{3}$$

  donde $\Theta(r)$ es la función de Heaviside. Y para la distribución de Poisson es de la forma [2]:

  $$P_{Poisson}(r) = 2\Theta(1-r)\cdot\left(\frac{1}{(1+r)^2}\right) \tag{4}$$

  Con estas expresiónes es posible extraer un $\langle r\rangle$ característico de cada distribucion. En particular, para el ensamble GOE, dicho valor es de $\langle r\rangle_{GOE} = 0.5307$ [5] y para la distribución de Poisson un valor de $\langle r\rangle_{Poisson} = 0.38629$ [5]. Se calculará para cada configuración de J/U todos los r_n, para posteriormente determinar el valor $\langle r\rangle$ del espectro del sistema.

- Divergencia de Kullback-Leibler (KL): Es una medida de diferencia entre dos distribuciones de probabilidad. En este caso, se comparará la distribucion de probabilidad de los r_n de la ecuación (2) respecto a la distribucion de probabilidad de la misma cantidad según el ensamble GOE. Viene dada por [7]:

  $$KL(P, P_{GOE}) = \int_0^1 P(x)\,\ln\left(\frac{P(x)}{P_{GOE}(x)}\right)\,dx. \tag{5}$$

  En esencia, es una medida de que tanto se aleja la distribución del sistema respecto a la distribución de GOE.

Tanto el valor promedio de los cocientes $\langle r\rangle$ como la divergencia KL son indicadores que permiten establecer una conexión entre las fluctuaciones espectrales de un sistema físico con la universalidad predicha por RMT, y por tanto permiten establecer una conexión con la definción de caos cuántico adoptada en este trabajo.

3 Objetivos

3.1 Objetivo general

Estudiar la estadística espectral del Hamiltoniano de Bose-Hubbard para identificar la región de paramétros sobre la cual el sistema exhibe caos cuántico.

3.2 Objetivos específicos

- Estudiar el modelo de Bose-Hubbard e investigar su importancia en la física contemporánea.
- Estudiar acerca del mean level spacing ratio $\langle r \rangle$ y la divergencia KL. También investigar acerca de la distribuciones de los cocientes de espaciamientos de valores propios de los ensambles de matrices aleatorias, en particular, el ensamble GOE.
- Programar el Hamiltoniano de Bose-Hubbard con condiciones de frontera abiertas, sus sectores de simetría bajo el operador reflexión y los dos indicadores de caos propuestos.
- Analizar distintas configuraciones del sistema variando J/U con los indicadores de caos propuestos y con ello identificar las regiones de integrabilidad y caos del sistema.

4 Justificación del Proyecto

El estudio de caos cuántico ha sido investigado desde hace ya más de 40 años, notablemente empezando con un estudio de sistemas cuánticos que tuviesen una contraparte clásica [1]. Gracias a la innovación tecnológica y al aumento en la capacidad computacional, se ha sido capaz de tener un estudio más robusto del tema, pudiendo estudiar con mayor facilidad sistemas de muchos cuerpos que no tienen contraparte clásica, algo que ha traido un reavivamiento en el estudio de caos cuántico. Este trabajo es un ejemplo de ello, ya que se estará trabajando con un sistema que no tiene análogo clásico y es un buen punto de partida para estudiar el caos cuántico desde el punto de vista de RMT. Este trabajo es un primer paso para una investigación más grande, que busca estudiar el caos cuántico y el efecto de mezclar la estadística de distintos sectores de simetría. Esta investigación más grande buscará arrojar más luz acerca de la descipción de sistemas cuánticos y su conexión con la teoría de RMT.

5 Cronograma

A continuación, la lista de tareas a llevar a cabo a lo largo de la práctica:

- Tarea 1: Estudiar sobre de las simetrías en un Hamiltoniano y su forma diagonal por bloques de simetría.
- Tarea 3: Estudiar sobre el lenguaje de programación Wolfram Mathematica.
- Tarea 4: Programar la base de Fock que describe las configuraciones físicas del modelo.
- Tarea 5: Programar el Hamiltoniano de Bose Hubbard con condiciones de frontera abiertas.
- Tarea 6: Programar los sectores de simetría del Hamiltoniano.
- Tarea 7: Programar las herramienta de diagnostico de caos cuántico.
- Tarea 8: Obtener los valores propios del Hamiltoniano para distintos valores de J/U y crear una base de datos con los mismos.
- Tarea 9: Hacer la estadística respectiva para cada configuración calculada.
- Tarea 10: Escribir el informe final.

Tareas	**Mes 1**	**Mes 2**	**Mes 3**	**Mes 4**
Tarea 1	tab.ANDpocalipse(1,2)			
Tarea 2	tab.ANDpocalipse(2,3)			
Tarea 3	tab.ANDpocalipse(3,4,5)			
Tarea 4	tab.ANDpocalipse(4,5)			
Tarea 5	tab.ANDpocalipse(6,7)			
Tarea 6	tab.ANDpocalipse(8,9)			
Tarea 7	tab.ANDpocalipse(10,11)			
Tarea 8	tab.ANDpocalipse(12,13,14)			
Tarea 9	tab.ANDpocalipse(14,15)			
Tarea 10	tab.ANDpocalipse(15,16)			

Referencias

[1] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit, “Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws,” *Physical Review Letters*, vol. 52, p. 1–4, Jan. 1984.

[2] S. H. Tekur and M. S. Santhanam, “Symmetry deduction from spectral fluctuations in complex quantum systems,” *Physical Review Research*, vol. 2, Sept. 2020.

[3] E. P. Wigner, “Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions,” *Annals of Mathematics*, vol. 62, no. 3, pp. 548–564, 1955.

[4] M. V. Berry and M. Tabor, “Level clustering in the regular spectrum,” *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 356, no. 1686, pp. 375–394, 1977.

[5] Y. Y. Atas, E. Bogomolny, O. Giraud, and G. Roux, “Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles,” *Physical Review Letters*, vol. 110, Feb. 2013.

[6] J. M. Zhang and R. X. Dong, “Exact diagonalization: the bose-hubbard model as an example,” *European Journal of Physics*, vol. 31, pp. 591–602, Apr. 2010.

[7] L. Pausch, A. Buchleitner, E. G. Carnio, and A. Rodríguez, “Optimal route to quantum chaos in the bose–hubbard model,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 55, p. 324002, July 2022.