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

Prácticas:

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

S: Ejemplo de uso **NEW ver.**

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 clásico, el caos se define por la sensibilidad exponencial a las condiciones inicales (las trayectorias en el espacio de fase divergen a medida que transcurre el tiempo) y por la característica de que cualquier distribución inicial de condiciones iniciales se "mezcla"de tal manera que pierde toda información con el estado inicial, es decir, cualquier distribución inicial se dispersa hasta volverse indistinguible de la distribución de equilibrio, esto se conoce como mixing. En un contexto cuántico, 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 RMTs para la descripción.

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] Es de mencionar que la universalidad de RMT para la descripción de los niveles de energía de sistemas físicos es válida cuando la densidad media de los niveles de energía es igual a la unidad [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 latice óptica y se ha podido observar la transición SF-MI (Superfluidity-Mott insulator) [6]. El modelo se puede emplear tanto para fermiones como para bosones. En este trabajo se modelará para bosones, y el hamiltoniano presentado describe dicha situación. 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 es proporcional a la parte cinética del hamiltoniano y describe físicamente como los bosones "saltan"de un sitio a otro, el segundo parámetro es proporcional a la parte de interacción del hamiltoniano, describe la interacción partícula a partícula y la fuerza de interacción siendo caracterizada por U [6]. En este trabajo, mediante una variación de la cantidad J/U, se buscará determinar las regiones de interés.

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 cantidad:

  $$r_n = \frac{\min(s_n, s_{n-1})}{\max(s_n, s_{n-1})}. \tag{2}$$

  Esta cantidad cumple con la propiedad de que la densidad media de los niveles de energía es igual a la unidad y por tanto es válido asumir la universalidad de RMT para el análisis. Se calculará para cada configuración de J/U todos los r_n, para posteriormente determinar el valor medio $\langle r\rangle$. Se espera que este valor medio sea un indicador de caos, ya que para el ensamble GOE, dicho valor es de $\langle r\rangle_{GOE} = 0.5307$ [5]. Así mismo, si el sistema está en un regímen integrable, se espera un valor medio de $\langle r\rangle_{Poisson} = 0.38629$ [5].

- 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]:

  $$KL(P, P_{GOE}) = \int_0^1 P(x)\,\ln\left(\frac{P(x)}{P_{GOE}(x)}\right)dx. \tag{3}$$

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

Tanto $\langle r\rangle$ como la divergencia (KL) son indicadores 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 defínción de caos cuántico adoptada en este trabajo.

Por último, es importante tener presente la forma análitica de la distribución de los cocientes entre los espaciamientos de niveles del ensabamble GOE, el cual es de la forma [5]:

$$P_{GOE}(r) = \frac{27}{8}\frac{r + r^2}{(1 + r + r^2)^{5/2}}. \tag{4}$$

Y para la distribución de espaciamiento de niveles de energía para un espectro integrable (Poisson) es de la forma [2]:

$$P_{Poisson}(r) = \frac{1}{(1 + r)^2} \tag{5}$$

OLD ver.

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 clásico, el caos se define por la sensibilidad exponencial a las condiciones inicales (las trayectorias en el espacio de fase divergen a medida que transcurre el tiempo) JA: y el segundo ingrediente es mixing, buscalo si no lo conocés. Lo platicamos. En un contexto cuántico, en vista del principio de incertidumbre, no es posible tener trayectorias definidas y es mediante estadísticas espectrales que se analiza la dinámica caótica del sistema JA: Prefiero que maticés la segunda parte del enunciado. Parece que estás diciendo que el caos cuántico sólo se analiza desde estadística en el espectro, y aunque es nuestra enfoque, tenemos que reconocer que existen otros (enfoque semiclásico). Un arreglo rápido podría ser algo como "...y la estadística espectral es una forma de estudiar el llamado caos cuántico.". 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] JA: Por ser un anteproyecto no es absolutamente necesario, pero sería bueno que agregués citas para respaldar cada una de las cosas que enumeraste en este enunciado. Decime si no entendés a qué me refiero.

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 ensamble) JA: ensAmble, corregí este y el que falta, también agregando las mayúsculas como dejé el primero y GSU (Gaussian simplectic ensamble) JA: Dos cosas: 1) no sirven los párrafos de un enunciado, integralo al párrafo pasado u otra cosa que te parezca mejor. 2) estos ensambles son los que resaltan para describir los Hamiltonianos de los sistemas complejos, decilo. Sería chilero que agregués el comentario de que Wigner fue el primero en usar esta idea en los 50's para el estudio de núcleos pesados, con su respectiva cita.

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 JA: cita al paper de Berry-Tabor, importantísimo!!!, 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] JA: por qué citaste aquí el artículo de las P(r) y no el del 84 de BGS??. Es de mencionar que la universalidad de RMT para la descripción de los niveles de energía de sistemas físicos es válida cuando la densidad media de los niveles de energía es igual a la unidad [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 Hamiltoniano de este modelo es:

$$\hat{H} = -\frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i\right) + \frac{U}{2}\sum_i \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1), \tag{6}$$

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 latice óptica y se ha podido observar la transición SF-MI (Superfluidity-Mott insulator) [6]. El modelo se puede emplear tanto para fermiones como para bosones. En este trabajo se modelará para bosones, y el hamiltoniano presentado describe dicha situación. JA: Todo lo que va despúes hasta antes del último enunciado movelo para justo despúes de la ecuación del Hamiltoniano 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 es proporcional a la parte cinética del hamiltoniano y describe físicamente como los bosones "saltan"de un sitio a otro, el segundo parámetro es proporcional a la parte de interacción del hamiltoniano, describe la interacción partícula a partícula y la fuerza de interacción siendo caracterizada por U [6]. En este trabajo, mediante una variación de la cantidad J/U JA: Ojo! esto entre $$, se buscará determinar las regiones de interés.

Para el diagnostico de las regiones de caos cuántico, se determinan JA: utilizaremos** no determinar, suena extraño las siguientes cantidades:

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

  Denotando por E_n las energía ordenadas del espectro del hamiltoniano, y $s_n = E_{n+1} - E_n$ JA: el espaciamiento consecutivo de niveles, se define la cantidad:

$$r_n = \frac{\text{mín}(s_n, s_{n-1})}{\text{máx}(s_n, s_{n-1})} \tag{7}$$

  JA: Punto al terminar la ecuación si luego vas a comenzar otro enunciado! Esta cantidad cumple con la propiedad de que la densidad media de los niveles de energía es igual a la unidad JA: en serio?? Quiero entender esto mejor y por tanto es válido asumir la universalidad de RMT para el análisis. Se calculará para cada configuración de J/U JA: $$ todos los r_n, para posteriormente determinar el valor medio $\langle r \rangle$. Se espera que este valor medio sea un indicador de caos, ya que para el ensamble GOE, dicho valor es de $\langle r \rangle = 0.5307$ [5] JA: falta también decir el valor para Poisson.

- Divergencia JA: poné el nombre de Kulblack no sé que aquí(KL): Es una medida de diferencia entre dos distribuciones de probabilidad, en este caso, se comparará la distribucion de probabilidad de los r_n JA: de la ecuación tal, aprovechá que las tenes enumeradas respecto a la distribucion de probabilidad de la misma cantidad según el ensamble GOE. Viene dada por [7]:

$$KL(P, P_{GOE}) = \int_0^1 P(x) \, \ln\left(\frac{P(x)}{P_{GOE}(x)}\right) \, dx \tag{8}$$

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

Se espera que $\langle r \rangle$ y la divergencia KL estén relacionadas, pues ambas son indicadores de caos cuántico JA: me gustaría que aquí volvieras a matizar diciendo que son indicadores que nos permiten revisar el acuerdo de las fluctuaciones espectrales de un sistema física con la universidad que predice RMT, cosa que conectamos con la definición de caos que adoptaremos para este trabajo. Algo así, con tus palabras.

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

NEW ver.

- Estudiar el modelo de Bose-Hubbard e investigar su importancia en la física contemporánea.
- Programar el hamiltoniano de Bose-Hubbard con condiciones de frontera abiertas, sus sectores de simetría bajo el operador reflexión y las herramientas estadísticas, en particular el mean level spacing ratio $\langle r \rangle$ y la divergencia (KL).
- Estudiar acerca de los indicadores de caos propuestos y acerca de la distribuciones de espaciamientos de valores propios de los ensambles de matrices aleatorias, en particular, el ensabamble GOE.
- 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.

OLD ver.

- Estudiar el formalismo para el tratamiento de un Hamiltoniano bajo ciertas simetrías. JA: Yo prefiero que cambiés este objetivo por "Estudiar el modelo de Bose-Hubbard e investigar su importancia en la física contemporánea.". La razón es que si dejás este objetivo, te estás comprometiendo a poner eso en tu informe final, y qué hueva (creo yo y no es parte fundamental del objetivo general, eso fue más preliminares técnicos que necesitaste para entender las simetrías del Bose-Hubbard)
- Programar el hamiltoniano de Bose-Hubbard con condiciones de frontera abiertas, sus sectores de simetría bajo el operador reflexión y las herramientas estadísticas JA: especifcá que la r promedio y la KL divergence necesarias para el estudio.
- Estudiar acerca de los correlacionadores JA: indicadores de caos propuestos y acerca de la distribuciones de espaciamientos de valores propios de los ensambles de matrices aleatorias, en particular, el ensabamble GOE.
- Analizar distintas configuraciones del sistema variando J/U JA: $$ con las herramientas estádisticas JA: los indicadores de caos propuestos y con ello identificar las regiones de integrabilidad y caos del sistema.

4 Justificación del Proyecto

NEW ver. El estudio de caos cuántico ha sido investigado desde hace ya más de 40 años, sin embargo debido a la innovación tecnológica y el aumento en nuestra capacidad computacional, se ha sido capaz de tener un estudio más robusto del tema en los últimos años, notablemente ha habido un reavivamiento del estudio del caós cuántico en sistemas de muchos cuerpos que no tienen contraparte clásica. 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 cumple con que esta primera investigación 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.

OLD ver. El estudio de caos cuántico ha sido investigado desde hace ya más de 40 años, sin embargo debido a la innovación tecnológica y el aumento en nuestra capacidad computacional, se ha sido capaz de tener un estudio más robusto del tema JA: en los últimos años y también menciona que ha habido un reavivamiento del caos cuántico en sistemas de muchos cuerpos, sin contraparte clásica. Este trabajo es un ejemplo de ello, ya que se estará trabajando con matrices cuyas dimensiones son del orden de 10^3 en adelante [6], pudiendo tener la capacidad de diagonalizar dichas matrices y extraer la información relevante del sistema JA: me parece que este es tu enunciado clave en el que querés decir la relevancia del trabajo. En ese sentido, no está bueno porque la relevancia no es trabajar con HAmiltonianos grandes, sino investigar y entender el caos cuántico, desde el punto de vista de RMT, de un sistema cuántico sin análogo clásico. Cambiá ese enunciado acorde a esto que dije. Este trabajo cumple con dos objetivos, el primero es verificar que la teoría de RMT satisface en la descripción de la estadística espectral en las regiones de caos cuántico y JA: todo antes de aquí lo podés quitar (porque ya está en los objetivos) y dedicarte sólo a hablar de que es el principio de otra cosa más grande el segundo objetivo es que esta primera investigación 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

(Pendiente)

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.