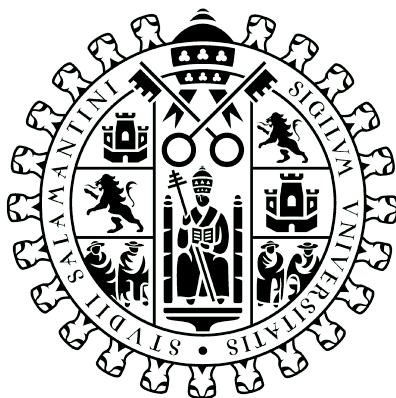




Dinámica de bosones en una red óptica con un campo externo estático

Trabajo Fin de Grado

GRADO EN FÍSICA

Autor:

Eduardo Gil San Millán

Dirigido por:

Alberto Rodríguez González

Año académico 2024-25

Departamento de Física Fundamental
Facultad de Ciencias

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

Dinámica de bosones en una red óptica con un campo externo estático

Trabajo Fin de Grado

GRADO EN FÍSICA

Autor: **Eduardo Gil San Millán**

Dirigido por: **Alberto Rodríguez González**

Presentado en Salamanca, a 4 de Julio de 2025

Firmado por EDUARDO GIL SAN MILLAN el día
04/07/2025 a las 21:18 con un certificado emitido por AC
FNMT Usuarios



Departamento de Física Fundamental
Facultad de Ciencias

VNiVERSiDAD D SALAMANCA

Resumen

Estudamos la dinámica de un sistema de N bosones dispuestos en L estados de partícula independiente en una red unidimensional, la cual se somete a un campo externo estático. La evolución temporal del sistema está determinada por el hamiltoniano de Bose-Hubbard, que gobierna la dinámica de los bosones confinados en la red. Comprobamos cómo la influencia de un campo externo, que ejerce una fuerza efectiva sobre el centro de masas del sistema, modifica la evolución temporal de ciertos observables físicos dando lugar a las denominadas oscilaciones de Bloch y, a su vez, cómo estas oscilaciones se ven afectadas por la intensidad con la que interactúan los bosones y el valor del campo externo.

La fase caótica exhibida por el hamiltoniano persiste en presencia de valores moderados del campo. Es por ello que, tomándose un diagrama de fases para un sistema similar al nuestro, establecemos un espacio de valores para los parámetros en los que se define la fase caótica para estudiar numéricamente la dinámica como función de la interacción U y de la intensidad de campo externo F , tomando un estado inicial específico. Particularmente, investigamos la influencia de la fase caótica del modelo en la dinámica de las oscilaciones de Bloch descrita por ciertos observables de interés.

Palabras clave: Modelo de Bose-Hubbard, segunda cuantización, red óptica, oscilaciones de Bloch, caos cuántico.

Abstract

We study the dynamics of a system of N bosons distributed over L single-particle states in a one-dimensional lattice under the influence of a static external field. The time evolution of the system is determined by the Bose-Hubbard Hamiltonian, which governs the dynamics of the bosons confined in the lattice. We investigate how the presence of an external field, which exerts an effective force on the center of mass of the system, modifies the time evolution of certain physical observables, giving rise to the so-called Bloch oscillations. In turn, we analyze how these oscillations are affected by both the interaction strength between the bosons and the magnitude of the external field.

The chaotic phase exhibited by the Hamiltonian persists in the presence of moderate values of the external field. To this end, we consider a phase diagram corresponding to a system closely related to ours in order to identify a region in parameter space where the chaotic phase is expected to emerge. Within this regime, we carry out a numerical analysis of the system's dynamics as a function of the interaction strength U and the external field F , starting from a well-defined initial Fock state. In particular, we focus on the influence of the chaotic phase on the dynamics of Bloch oscillations, as characterized by the time evolution of selected physical observables.

Keywords: Bose-Hubbard model, second quantization, optical lattice, Bloch oscillations, quantum chaos.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Contexto científico	1
1.2. Objetivos y estructura del trabajo	2
2. El modelo de Bose-Hubbard	3
2.1. Formalismo de segunda cuantización	3
2.1.1. Estados de Fock	3
2.1.2. Relaciones de conmutación	5
2.2. El hamiltoniano de Bose-Hubbard	6
2.3. Simetrías del hamiltoniano de Bose-Hubbard	8
2.3.1. Simetría de reflexión	9
2.3.2. Simetría traslacional	11
2.4. Soluciones analíticas del hamiltoniano sin campo externo	12
2.4.1. Caso $J = 0$	12
2.4.2. Caso $U = 0$	13
2.5. Caos cuántico en el modelo de Bose-Hubbard	14
3. Dinámica de las oscilaciones de Bloch	16
3.1. Descripción	16
3.2. Solución del modelo tight-binding para una partícula	17
3.3. Efecto de las interacciones	20
4. Cálculo numérico de la evolución de observables	23
4.1. Evolución temporal de la función de onda	23
4.1.1. Polinomios de Chebyshev	23
4.1.2. Algoritmo de la evolución temporal	24
4.1.3. Implementación en el código	26
4.1.4. Estimación de errores	27
4.2. Cálculo de los valores esperados	28
4.2.1. Evolución temporal de la densidad bosónica	28
4.2.2. Posición y velocidad del centro de masas	28
4.2.3. Transformadas de Fourier	29
5. Dinámica en función del campo externo y la interacción	31
5.1. Condiciones iniciales y espacio de parámetros	31
5.2. Evolución de observables con F/J	32
5.3. Evolución de observables con U/J	40
5.4. Características principales	44
6. Conclusiones	45

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto científico

El estudio de sistemas cuánticos de muchas partículas representa uno de los campos de interés en muchos ámbitos de la física. Su complejidad radica en la emergencia de correlaciones no triviales entre partículas interactuantes, el desconocimiento, en general, de soluciones exactas y en la dificultad computacional asociada a la descripción de estados cuánticos en espacios de Hilbert de dimensión exponencial, como sucede en el modelo de interés en el presente trabajo, el modelo de Bose-Hubbard [1, 2].

A lo largo de las últimas décadas se han realizado varios estudios experimentales dedicados a estos sistemas usando gases de átomos ultrafríos que, mediante su confinamiento en redes ópticas a muy bajas temperaturas, constituyen una potente herramienta en simulación cuántica aplicada al estudio de sistemas de muchas partículas [3]. Las redes ópticas consisten en potenciales periódicos originados por la interferencia entre dos o más haces láser coherentes que se propagan en distintas direcciones, dando como resultado una onda estacionaria descrita por un patrón periódico de intensidades del campo eléctrico [4, 5], donde los átomos sienten una fuerza atractiva hacia zonas de baja o alta intensidad del campo. Las redes ópticas proporcionan un modelo mucho más simplificado y accesible para simulaciones cuánticas respecto de los sólidos cristalinos [6], cuyas dimensiones típicas son alrededor de tres órdenes de magnitud menor.

Un aspecto de interés de estos sistemas es su respuesta dinámica cuando se les aplica una fuerza externa estática, dando lugar al surgimiento de las características oscilaciones de Bloch [7, 8] y cuya naturaleza, como se discutirá más adelante, está íntimamente ligada a la naturaleza cuántica de las bandas de energía. Sin embargo, la introducción de interacciones entre pares de átomos modifica sustancialmente este comportamiento aumentando complejidad al estudio de la evolución temporal de estos sistemas.

Otro de los motivos por los que la dinámica descrita por el modelo de Bose-Hubbard es tan compleja es por la existencia, bajo determinadas circunstancias, de caos cuántico. Pese a la abundante literatura sobre el modelo de Bose-Hubbard, el régimen caótico exhibido por el modelo no se había abordado hasta recientemente [9–11], incluyendo el estudio de esta fase en sistemas sometidos a campo externo [12]. En nuestro estudio tomamos como referencia los resultados de Ref. [13], donde experimentalmente se observa un decaimiento irreversible de un estado que describe un gas de átomos bosónicos interactuantes confinados en una trampa armónica al someterlos a un campo débil como una evidencia de la transición del

sistema hacia un régimen caótico. Pese a la abundante literatura existente sobre el modelo de Bose-Hubbard, aún no existen estudios teóricos que aborden de manera concisa la dinámica descrita por sistemas sometidos a campo externo mediante el cambio sistemático de la interacción entre las partículas y de la intensidad del campo.

1.2. Objetivos y estructura del trabajo

Los principales objetivos de este estudio son:

- Comprender la fenomenología de las oscilaciones de Bloch en el contexto del modelo de Bose-Hubbard.
- Determinar el efecto de las interacciones sobre las oscilaciones.
- Caracterizar la dinámica de observables en función de los parámetros del modelo.
- Identificar la fase caótica para nuestro sistema.

Los contenidos del trabajo se organizan del siguiente modo. En el capítulo 2 se explica brevemente el formalismo de segunda cuantización, así como el álgebra de los operadores creación y destrucción sobre el que se desarrolla y escribe el hamiltoniano del modelo. Hablamos de las principales características del modelo de Bose-Hubbard, enfocando nuestro estudio a un caso general en donde no consideramos la acción de un campo externo, estudiando las simetrías que presenta, así como sus soluciones analíticas y las bases en las que diagonaliza para cada caso. Además, introducimos los elementos que definen al caos cuántico del modelo, describiendo brevemente la Teoría de Matrices Aleatorias como aquella en la que basaremos su definición.

En el capítulo 3 explicamos la fenomenología de las oscilaciones de Bloch, presentes en la dinámica de la evolución del sistema cuando es sometido a un campo externo F . Además, realizamos los cálculos en la aproximación tight-binding para una partícula de las autoenergías y autoestados del modelo y discutimos la influencia que las interacciones ejercen sobre la dinámica de las oscilaciones.

Posteriormente, en el capítulo 4 exponemos el método numérico empleado para el cálculo de observables, comenzando por la evolución temporal del propio estado inicial mediante la expansión en polinomios de Chebyshev.

Por último, en el capítulo 5 estudiamos, estableciendo un espacio de parámetros fijo a partir del diagrama de fases para un sistema equivalente al nuestro, cómo evoluciona la dinámica temporal de observables de forma que podamos diferenciar distintos regímenes dinámicos como función de los parámetros que los definen.

Capítulo 2

El modelo de Bose-Hubbard

En este capítulo desarrollaremos el modelo que permite comprender el comportamiento de un sistema de muchos bosones situados en una red óptica, el modelo de Bose-Hubbard. Para ello, primeramente es necesario introducir el formalismo matemático empleado para describirlo.

2.1. Formalismo de segunda cuantización

Para describir sistemas de muchas partículas cuánticas interactuantes entre sí se emplea un formalismo de la Mecánica Cuántica llamado formalismo de segunda cuantización, que se basa en el uso de operadores de creación y destrucción que actúan en un espacio de Fock y que satisfacen unas reglas de conmutación para bosones (anticomutación para fermiones), llevando implícitos los postulados de simetrización (antisimetrización).

2.1.1. Estados de Fock

Consideremos un sistema de una única partícula en el que definimos un espacio de estados de partícula independiente $\mathcal{E}_1$, de dimensión L , y una base ortonormal asociada $\{|u_i\rangle\}_{i=1,\dots,L}$. Si ahora tomamos un sistema de N partículas indistinguibles, podemos construir el espacio total de estados $\mathcal{E}_N$ a partir del producto tensorial

$$\mathcal{E}_N = \mathcal{E}_1(1) \otimes \mathcal{E}_1(2) \otimes \dots \otimes \mathcal{E}_1(N), \quad (2.1)$$

cuya dimensión viene dada por el número de formas no equivalentes en las que podemos distribuir las N partículas en los L estados de partícula independiente y donde definimos una base asociada a este espacio dada como [14]

$$\left\{ \{ |(1) : u_{i_1}; (2) : u_{i_2}; \dots ; (N) : u_{i_N} \rangle \} \equiv \{ |(1) : u_{i_1} \rangle \} \otimes \{ |(2) : u_{i_2} \rangle \} \otimes \dots \otimes \{ |(N) : u_{i_N} \rangle \} \right\}_{i \in [1,L]}, \quad (2.2)$$

de modo que el estado $|(j) : u_{i_j}\rangle$ se corresponde con la ocupación de la partícula $j \in \{1, \dots, N\}$ en el i_j -ésimo estado de partícula independiente. A menudo se dice que cada estado de partícula independiente define un *modo* del sistema, por lo que emplearemos ambas terminologías de manera indistinta para referirnos al mismo concepto.

Si nuestro sistema tiene $N > 2$ partículas idénticas, el espacio de Hilbert será o bien el

subespacio simétrico, o bien el subespacio antisimétrico de $\mathcal{E}_N$. Estos contienen todos los estados accesibles, pues para N bosones indistinguibles, el subespacio físicamente accesible se corresponde con el de estados completamente simétricos bajo permutaciones en los grados de libertad de las partículas, $\mathcal{E}_S$, mientras que para un sistema de N fermiones indistinguibles, es el subespacio de estados completamente antisimétricos bajo permutaciones, $\mathcal{E}_A$. Es por ello que hemos de hallar una base válida para cada uno de ellos por medio de la aplicación de los operadores simetrización S_N y antisimetrización A_N sobre los estados (2.2). Estos operadores son útiles para generar los estados simétricos o antisimétricos correspondientes a un estado sin simetría definida, y vienen dados por

$$S_N = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} P_{\alpha}, \quad (2.3a)$$

$$A_N = \frac{1}{N!} \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} P_{\alpha}, \quad (2.3b)$$

donde P_{α} son los $N!$ operadores de permutación para las N partículas y ε_{α} es la paridad de P_{α} , que vale $+1$ (-1) si P_{α} es una permutación par (impar).

Para un sistema de N bosones idénticos, la acción del simetrizador S_N sobre (2.2) da lugar a los estados

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle \equiv & \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_L!}} S_N \left| \underbrace{(1) : u_1, (2) : u_1, \dots, (n_1) : u_1;}_{n_1 \text{ partículas en } |u_1\rangle} \right. \\ & \underbrace{(n_1 + 1) : u_2, (n_1 + 2) : u_2, \dots, (n_1 + n_2) : u_2;}_{n_2 \text{ partículas en } |u_2\rangle} \\ & \dots ; \\ & \left. \underbrace{(N - n_L + 1) : u_L, \dots, (N) : u_L}_{n_L \text{ partículas en } |u_L\rangle} \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.4)$$

de modo que los estados $\{|n_i\rangle\}_{i \in 1, \dots, L}$ definen los números de ocupación bosónicos por cada uno de los L modos, que pueden ser nulos (representando estados de partícula independiente vacíos) o distintos de cero (estados en los que, al menos, hay un bosón). Los estados definidos por la ecuación (2.4) se denominan **estados de Fock**, en los cuales los números de ocupación por cada estado de partícula independiente están dados por $n_{i \in \{1, \dots, L\}}$. Para N fermiones se puede definir de igual modo estados de Fock definidos en base a números de ocupación, donde cada n_i sólo se restringe a 0 o 1.

Puesto que trabajaremos con un sistema de N bosones, la notación que emplearemos para los estados de Fock consistirá en kets que incluyan los números de ocupación y que, como veremos más adelante, se construyen a partir de los autoestados del operador número para cada modo de partícula independiente:

$$|\mathbf{n}\rangle \equiv |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle. \quad (2.5)$$

A partir de estos estados se puede construir una base del espacio de Fock para el sistema de N bosones si se imponen las condiciones de cierre y ortonormalidad dada por las relaciones

$$\langle n'_1, n'_2, \dots, n'_L | n_1, n_2, \dots, n_L \rangle = \delta_{n'_1 n_1} \delta_{n'_2 n_2} \dots \delta_{n'_L n_L}, \quad (2.6a)$$

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_L} |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle \langle n_1, n_2, \dots, n_L| = \mathbb{1}. \quad (2.6b)$$

2.1.2. Relaciones de conmutación

La forma en la que construiremos sistemáticamente los kets definidos por la ecuación (2.5) es consecuencia del álgebra de conmutación que los operadores que actúan sobre el espacio de Hilbert deben seguir. Estas reglas proporcionan la propia definición de la acción de los operadores.

Escojamos una base del espacio de N partículas y L estados (modos) de partícula independiente definida por los kets $\{|u_i\rangle\}_{i=1, \dots, L}$ y un set de operadores creación y destrucción de partículas en esta base, que los nombramos respectivamente por $b_i^\dagger$ y b_i .

Dados los modos ortogonales $\{|u_i\rangle, |u_j\rangle\}$, dichos operadores obedecen las siguientes relaciones de conmutación,

$$[b_i, b_j] = [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0, \quad (2.7a)$$

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{i,j}. \quad (2.7b)$$

De este modo, aquellos operadores que actúen en distintos modos de partícula independiente conmutan siempre entre sí. Los operadores $b_i, b_i^\dagger$ obedecen el mismo álgebra que los operadores escalera del oscilador armónico. A continuación, definimos el operador número como

$$\hat{n}_i \equiv b_i^\dagger b_i, \quad (2.8)$$

que es autoadjunto y no negativo, pues trivialmente se comprueba que¹

$$\hat{n}_i^\dagger = (b_i^\dagger b_i)^\dagger = b_i^\dagger (b_i^\dagger)^\dagger = b_i^\dagger b_i, \quad (2.9)$$

$$\langle \psi | b_i^\dagger b_i | \psi \rangle = \langle \psi' | \psi' \rangle \geq 0, \quad (2.10)$$

y por tanto sus autovalores serán números no negativos:

$$\hat{n}_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle, \quad n_i \geq 0. \quad (2.11)$$

A partir del álgebra de conmutación, se deduce la actuación de $b_i^{(\dagger)}$ en los autoestados $|n_i\rangle$ del operador número. Utilizando (2.7), (2.11) y (2.8),

$$\begin{aligned} \hat{n}_i b_i |n_i\rangle &= b_i^\dagger b_i b_i |n_i\rangle = (b_i^\dagger b_i - \mathbb{1}) b_i |n_i\rangle = b_i b_i^\dagger b_i |n_i\rangle - b_i |n_i\rangle = (n_i - 1) b_i |n_i\rangle \\ &\Rightarrow b_i |n_i\rangle = c |n_i - 1\rangle, \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde puede comprobarse que la constante de normalización c está dada por $c = \sqrt{n_i}$, por tanto,

$$b_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle. \quad (2.13)$$

¹ $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$.

De igual manera, podemos encontrar la actuación del operador creación,

$$b_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle. \quad (2.14)$$

Teniendo presente que $\hat{n}_i$ es no negativo y de autovalores enteros, se puede alcanzar vacío si se satisface

$$b_i |0\rangle = 0. \quad (2.15)$$

De este modo, los autovalores de $\hat{n}_i$ pueden interpretarse como los números de ocupación por cada sitio $i \in [1, L]$, y es directo ver que $b_i^{(\dagger)}$ destruye (crea) una partícula en ese estado. A partir de la propia definición de $\hat{n}_i$, se pueden derivar las siguientes relaciones de conmutación²:

$$[\hat{n}_l, b_j] = -\delta_{l,j} b_l, \quad (2.16)$$

$$[\hat{n}_l, b_j^\dagger] = +\delta_{l,j} b_l^\dagger, \quad (2.17)$$

$$[\hat{n}_l, \hat{n}_j] = 0. \quad (2.18)$$

Entonces, puesto que los operadores número conmutan entre ellos, pueden diagonalizarse simultáneamente y los estados de Fock definidos en (2.5) se construyen a partir de los autoestados del operador número $\hat{n}_i$, donde $i = \{1, \dots, L\}$ [?] :

$$|n_1, n_2, \dots, n_L\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes \dots \otimes |n_L\rangle. \quad (2.19)$$

Así, los tres operadores actúan sobre los estados de Fock del siguiente modo:

$$b_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots, n_L\rangle, \quad (2.20)$$

$$b_i^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, n_2, \dots, n_i + 1, \dots, n_L\rangle, \quad (2.21)$$

$$\hat{n}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle = n_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle. \quad (2.22)$$

Por otra parte, podemos entender los estados de Fock como la aplicación repetitiva del operador creación sobre el vacío,

$$|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots, n_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \dots n_i! \dots n_L!}} (b_1^\dagger)^{n_1} (b_2^\dagger)^{n_2} \dots (b_i^\dagger)^{n_i} \dots (b_L^\dagger)^{n_L} |0\rangle. \quad (2.23)$$

Definimos el operador número total de partículas como

$$\hat{N} \equiv \sum_{i=1}^L \hat{n}_i, \quad (2.24)$$

cuya acción sobre los ket (2.19) da el número total de partículas:

$$\hat{N} |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle = \left(\sum_{i=1}^L n_i \right) |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle. \quad (2.25)$$

2.2. El hamiltoniano de Bose-Hubbard

Consideremos una red óptica y, de ahora en adelante, asociemos los modos de partícula independiente definidos en la sección (1.1) a los estados localizados en cada uno de los distintos sitios de dicha red, situados en los mínimos del potencial. Dichos estados son los

²Se ha hecho uso de $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$.

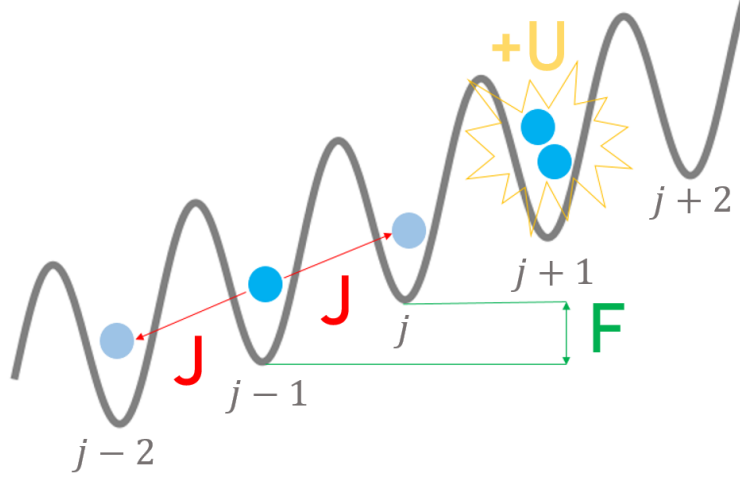


Figura 2.1: Representación esquemática de una red óptica modelada como un potencial sinusoidal periódico sometido a una fuerza externa de parámetro F . En la figura se ilustran tanto los fenómenos de interacción entre pares de bosones, parametrizados por U , como del tunneling entre sitios de la red, parametrizado por J .

estados de Wannier, que están localizados en el sitio j -ésimo de la red, $\phi_j(x)$ [15].

Con todas las ideas expuestas anteriormente, podemos construir el hamiltoniano de Bose- Hubbard unidimensional, el cual supone un modelo simple para describir un sistema de N bosones interactuantes entre sí en una red óptica con L sitios, correspondientes a los estados de Wannier, y al que se le puede someter a un campo externo, que en nuestro caso será estático (ver Figura 2.1). Su forma analítica es [12, 16]

$$H = \underbrace{-J \sum_{j=1}^{L-1} (b_j^\dagger b_{j+1} + h.c.)}_{H_{tun}} + \underbrace{\frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1)}_{H_{int}} + \underbrace{F \sum_{j=1}^L \left(j - \frac{L+1}{2}\right) \hat{n}_j}_{H_{tilt}}, \quad (2.26)$$

donde $h.c.$ denota el hermítico conjugado de $b_j^\dagger b_{j+1}$, $b_j^{(\dagger)}$ es el operador destrucción (creación) asociado al orbital de Wannier localizado en el j -ésimo sitio de la red, y $\hat{n}_j$ el operador número. El parámetro de la constante de red, correspondiente a la distancia constante entre cada sitio, se fija a la unidad por simplicidad. Analicemos cada uno de los términos de la ecuación (2.26):

- El primero corresponde al hamiltoniano asociado al tunneling, H_{tun} , que es el responsable de la contribución energética al sistema debido al paso de cada uno de los bosones entre sitios vecinos de la red periódica por efecto túnel. Está parametrizado por la constante de tunneling $J > 0$, con dimensiones de energía. El tunneling de un bosón entre sitios vecinos de la red se corresponde con la destrucción de un bosón en el j -ésimo pozo de potencial, es decir en el estado de Wannier $|\phi_j\rangle$, seguido por la creación de un bosón en el sitio $(j+1)$ -ésimo, en el estado $|\phi_{j+1}\rangle$, y viceversa.
- El segundo es el hamiltoniano de interacción, H_{int} , que contribuye energéticamente cuando en algún sitio de la red tenemos al menos un par de bosones, que interactúan entre sí. El parámetro que gobierna esta interacción *on-site* es U , que tomamos como constante positiva. Nótese que el factor $\frac{1}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1)$ cuenta el número de pares de bosones en el sitio j .

N	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\dim \mathcal{H}$	3	10	35	126	462	1716	6435	24310	92378

Cuadro 2.1: Evolución exponencial de la dimensión del espacio de Hilbert con N para un sistema con densidad unidad, $\bar{n} = 1$.

- Por último, el tercero es el hamiltoniano asociado al campo externo inducido a la red, H_{tilt} , que suponemos además estático, el cual causa una diferencia energética parametrizada por la constante $F > 0$ entre dos sitios consecutivos de la red. En la formulación del hamiltoniano (2.26) consideramos que el potencial externo es simétrico respecto del centro de la red.

Además, es de interés conocer las dos principales condiciones de contorno aplicables al modelo de Bose-Hubbard que se imponen en los extremos de la red unidimensional. Para aclarar la notación, es importante saber que a los sitios de dicha red se los enumerará coherentemente usando el set de índices $\{1, \dots, L\}$:

- **Condiciones de contorno periódicas (PBC)**, en las que los sitios 1 (primer sitio) y L (último sitio) están conectados directamente. Esto quiere decir que los bosones pueden pasar por efecto túnel del sitio 1 al L , y viceversa, de forma que se puede visualizar la geometría de la red en forma de anillo. Estas condiciones sólo pueden ser impuestas en ausencia de campo externo ($F = 0$).
- **Condiciones de pared dura (HWBC)**. A diferencia de las condiciones periódicas, los sitios arriba mencionados no están conectados (no son vecinos). Ambos están conectados por uno de sus extremos a una *pared dura*, asumida como un potencial infinito. Puesto que consideramos un campo externo $F > 0$, estas condiciones son las apropiadas para nuestro estudio.

Dada la base del espacio de Hilbert para una red óptica unidimensional de L sitios y N bosones, determinada por los estados de Fock $|\mathbf{n}\rangle$, podemos construir el correspondiente espacio de Hilbert, cuya dimensión viene dada por la cantidad de formas de distribuir N bosones idénticos en L sitios, dada por el coeficiente binomial

$$\dim \mathcal{H} = \binom{N + L - 1}{N}. \quad (2.27)$$

Para un sistema con densidad de partículas $\bar{n} \equiv \frac{N}{L}$ constante, la dimensión del espacio de Hilbert crece exponencialmente con N o L . A modo de ejemplo, para un sistema con densidad $\bar{n} = 1$, mostramos la dimensión del espacio de Hilbert como función de $N = L$ en el cuadro (2.1).

2.3. Simetrías del hamiltoniano de Bose-Hubbard

El hamiltoniano de Bose-Hubbard exhibe varias simetrías que pueden servir de utilidad para reducir la dimensión del espacio de Hilbert y, por tanto, simplificar su diagonalización para la obtención de autoestados y autovalores. Las simetrías asociadas al hamiltoniano permiten reducir la matriz total del sistema en submatrices que representen subespacios independientes.

La más evidente de todas es la conservación del número total de partículas, N , ya que nuestro sistema es aislado y no intercambia materia con el exterior. El hamiltoniano conserva el número total de partículas, ya que

$$[H, \hat{N}] = 0. \quad (2.28)$$

Para demostrar esta simetría, basta con calcular el conmutador del término de tunneling con $\hat{N}$, pues este operador conmuta trivialmente con el resto de términos del hamiltoniano al ser dependientes únicamente del operador número, $\hat{n}_i$,

$$\begin{aligned} [b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j, \hat{N}] &= b_j^\dagger [b_{j+1}, \hat{N}] + [b_j^\dagger, \hat{N}] b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger [b_j, \hat{N}] + [b_{j+1}^\dagger, \hat{N}] b_j \\ &= b_j^\dagger b_{j+1} - b_{j+1}^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j - b_{j+1}^\dagger b_j = 0. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Esto implica que H puede diagonalizarse de forma independientemente en subespacios con un número fijo de partículas.

Por otra parte, el hamiltoniano exhibe simetría de inversión temporal, y como resultado la matriz de H en la base Fock de sitios (o de Wannier) es real. El operador inversión temporal Θ es antiunitario, y si se cumple

$$[H, \hat{\Theta}] = 0, \quad (2.30)$$

entonces siempre puede encontrarse una base de estados en la que H es una matriz no diagonal real y simétrica [17].

Las simetrías anteriores son válidas para $F \neq 0$, pero en ausencia de campo existen más simetrías que se discutirán por completitud.

2.3.1. Simetría de reflexión

Para cualquier elección de las condiciones de contorno, y siempre y cuando no consideremos un campo externo, el hamiltoniano es invariante bajo simetría de reflexión. El operador paridad, $\hat{\Pi}$, actúa sobre un estado de Fock de la siguiente forma:

$$\hat{\Pi}|n_1, n_2, \dots, n_{L-1}, n_L\rangle = |n_L, n_{L-1}, \dots, n_2, n_1\rangle, \quad (2.31)$$

y obviamente

$$\hat{\Pi}^2 = \mathbb{1}, \quad (2.32)$$

lo cual nos indica que sus autovalores sólo pueden ser ± 1 . Teniendo en cuenta además que se trata de un operador unitario, es decir,

$$\hat{\Pi}\hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi}^\dagger\hat{\Pi} = \mathbb{1}, \quad (2.33)$$

concluimos que $\hat{\Pi}$ es autoadjunto,

$$\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^\dagger. \quad (2.34)$$

De la ecuación (2.31), se sigue que la acción de $\hat{\Pi}$ sobre los operadores creación y destrucción en la base de Wannier es

$$\hat{\Pi}b_j^{(\dagger)}\hat{\Pi}^\dagger = b_{L-j+1}^{(\dagger)}. \quad (2.35)$$

La transformación bajo paridad de $\hat{n}_j$ será, por tanto,

$$\hat{\Pi}\hat{n}_j\hat{\Pi}^\dagger = \hat{n}_{L-j+1}. \quad (2.36)$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones (2.35) y (2.36), la transformación del hamiltoniano, en ausencia de campo externo, bajo paridad es

$$\hat{\Pi}H_{F=0}\hat{\Pi}^\dagger = H_{F=0} \Rightarrow [H_{F=0}, \hat{\Pi}] = 0. \quad (2.37)$$

Puesto que $H_{F=0}$ y $\hat{\Pi}$ pueden diagonalizarse y en la misma base, podemos separar los espacios de Hilbert en los subespacios simétrico y antisimétrico correspondientes a los autovalores $+1$ y -1 de $\hat{\Pi}$, respectivamente. Así, podemos diagonalizar el hamiltoniano en cada uno de los dos subespacios de forma independiente. Comencemos primero diagonalizando $\hat{\Pi}$. Para ello, definimos los proyectores S y A como

$$S = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \hat{\Pi}), \quad (2.38)$$

$$A = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \hat{\Pi}). \quad (2.39)$$

Estos proyectores son además ortogonales,

$$SA = AS = 0, \quad (2.40)$$

lo cual significa que proyectan sobre subespacios ortogonales entre sí. Comprobamos que ambos nos proporcionan los autoestados de $\hat{\Pi}$, pues

$$\hat{\Pi}(S|\mathbf{n}\rangle) = \frac{1}{2}\hat{\Pi}(\mathbb{1} + \hat{\Pi})|\mathbf{n}\rangle = S|\mathbf{n}\rangle, \quad (2.41)$$

$$\hat{\Pi}(A|\mathbf{n}\rangle) = \frac{1}{2}\hat{\Pi}(\mathbb{1} - \hat{\Pi})|\mathbf{n}\rangle = -A|\mathbf{n}\rangle, \quad (2.42)$$

de modo que los estados $S|\mathbf{n}\rangle$ ($A|\mathbf{n}\rangle$) son autoestados de $\hat{\Pi}$ con autovalor $+1$ (-1). Otra propiedad importante es que satisfacen

$$S + A = \mathbb{1}, \quad (2.43)$$

y como consecuencia, el espacio de Hilbert se descompone en la suma directa de dos subespacios correspondientes a las proyecciones de S y A ,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_S \oplus \mathcal{H}_A. \quad (2.44)$$

Teniendo en cuenta esta descomposición, la matriz de H tiene una estructura en dos bloques diagonales correspondientes cada uno de ellos a los dos subespacios en los que se divide:

$$H = \begin{pmatrix} H_S & 0 \\ 0 & H_A \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

por tanto, la diagonalización de H se traduce en la de las dos matrices correspondientes a los subespacios simétrico y antisimétrico bajo paridad.

Para cada subespacio, se definen las bases asociadas como

$$\left\{ |\psi_S\rangle = \frac{S|\mathbf{n}\rangle}{(\langle\mathbf{n}|S|\mathbf{n}\rangle)^{\frac{1}{2}}}, \forall |\mathbf{n}\rangle \in \mathcal{H} \right\} \quad (2.46)$$

para el simétrico, y

$$\left\{ |\psi_A\rangle = \frac{A|\mathbf{n}\rangle}{(\langle \mathbf{n}|A|\mathbf{n}\rangle)^{\frac{1}{2}}}, \forall |\mathbf{n}\rangle \in \mathcal{H} \right\} \quad (2.47)$$

para el antisimétrico.

Como se ha mencionado anteriormente, en presencia de campo externo se rompe la simetría de paridad, de modo que si $F \neq 0$:

$$[H, \hat{\Pi}] \neq 0. \quad (2.48)$$

2.3.2. Simetría traslacional

En caso de usar condiciones de contorno periódicas (PBC), el hamiltoniano con $F = 0$ también exhibe simetría de traslación. Sea $\hat{T}$ el operador responsable de dicha transformación de simetría, que viene definido por la siguiente acción sobre los estados de Fock en la base de Wannier:

$$\hat{T}|n_1, n_2, \dots, n_{L-1}, n_L\rangle = |n_L, n_1, n_2, \dots, n_{L-1}\rangle. \quad (2.49)$$

Este operador es unitario, pero no autoadjunto,

$$\hat{T} \neq \hat{T}^\dagger. \quad (2.50)$$

Análogamente al operador paridad, $\hat{T}$ puede definirse por su acción sobre los operadores creación y destrucción en la base de Wannier,

$$\hat{T}b_j^{(\dagger)}\hat{T}^\dagger = b_{j+1}^{(\dagger)}, \quad (2.51)$$

y para $\hat{n}_j$,

$$\hat{T}\hat{n}_j\hat{T}^\dagger = \hat{n}_{j+1}, \quad (2.52)$$

pudiendo verificarse que el operador traslación conmuta también con el número total de partículas,

$$[\hat{N}, \hat{\Pi}] = 0. \quad (2.53)$$

La invariancia de $H_{F=0}$ bajo traslaciones significa que

$$\hat{T}H_{F=0}\hat{T}^\dagger = H_{F=0} \Rightarrow [H_{F=0}, \hat{T}] = 0, \quad (2.54)$$

que lógicamente sucede cuando en el hamiltoniano pueden aplicarse las equivalencias $b_L^{(\dagger)} \equiv b_0^{(\dagger)}$ y $b_{L+1}^{(\dagger)} \equiv b_1^{(\dagger)}$, responsables de la propia definición de condiciones tipo PBC, pues

$$\begin{aligned} \hat{T}H_{F=0}\hat{T}^\dagger &= -J \sum_{j=1}^L \left(b_{j+1}^\dagger b_{j+2} + b_{j+2}^\dagger b_{j+1} \right) + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_{j+1}(\hat{n}_{j+1} - 1) \\ &= -J \sum_{j=1}^L \left(b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j \right) + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1) = H_{F=0}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Obviamente, cuando aplicamos este operador un número de veces igual al número de sitios de red tenemos

$$\hat{T}^L = \mathbb{1}, \quad (2.56)$$

luego los autovalores η de $\hat{T}$ se corresponden con las L raíces de la unidad:

$$\eta = \exp(iQ), \quad Q \equiv \frac{2\pi k}{L}, \quad k \in \{1, \dots, L\}. \quad (2.57)$$

Definimos los proyectores

$$P_Q = \frac{1}{L} \sum_{r=1}^L \exp(iQr) T^r, \quad (2.58)$$

que son mutuamente ortogonales, y obedecen

$$\sum_Q P_Q = \mathbb{1}, \quad (2.59)$$

lo que implica que el espacio de Hilbert puede descomponerse como

$$\mathcal{H} = \oplus_{Q=1}^L \mathcal{H}_Q, \quad (2.60)$$

de modo que cada subespacio $\mathcal{H}_Q$ se obtiene por la actuación de P_Q en los estados $|\mathbf{n}\rangle$, cuya base es

$$\left\{ |\psi\rangle = \frac{P_Q |\mathbf{n}\rangle}{(\langle \mathbf{n} | P_Q | \mathbf{n} \rangle)^{\frac{1}{2}}}, \quad \forall |\mathbf{n}\rangle \in \mathcal{H} \right\}. \quad (2.61)$$

De este modo, la matriz del hamiltoniano se descompone en L bloques (submatrices) independientes entre sí cuya dimensión es considerablemente menor que H , donde

$$\dim \mathcal{H}_Q \approx \frac{\dim \mathcal{H}}{L}. \quad (2.62)$$

2.4. Soluciones analíticas del hamiltoniano sin campo externo

El hamiltoniano

$$H_{F=0} = -J \sum_{j=1}^{L-1} \left(b_j^\dagger b_{j+1} + h.c. \right) + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1) \quad (2.63)$$

puede resolverse analíticamente en los casos en los que o bien no hay tunneling ($J = 0$), o bien no hay interacción entre bosones ($U = 0$). En estos dos límites, se dice que el sistema es integrable y se pueden encontrar tantos observables independientes que conmutan entre sí como grados de libertad presentes en el modelo, dados por L .

En el caso general en el que $J \neq 0$, y $U \neq 0$, independientemente del valor de F , el hamiltoniano no es integrable, incluso tampoco puede hallarse analíticamente el estado fundamental. En este contexto, y para ciertos valores de J , U y F , tiene lugar la aparición de una fase caótica, que se discutirá más adelante. Estudiemos por separado cada caso en el que el hamiltoniano es integrable.

2.4.1. Caso $J = 0$

En ausencia de tunneling, el hamiltoniano (2.63) se reduce a

$$H_{int} = \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1), \quad (2.64)$$

cuyos autoestados son los estados de Fock en la base de Wannier, identificados unívocamente por los L números de ocupación asociados a cada sitio de la red:

$$H_{int}|\psi\rangle = E_\psi|\psi\rangle, \quad (2.65)$$

donde

$$|\psi\rangle = \otimes_{j=1}^L |n_j\rangle \Rightarrow E_\psi = \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1). \quad (2.66)$$

En este caso, tenemos modos (estados) desacoplados y los bosones están perfectamente localizados en sus respectivos sitios de red. Por otra parte, según vemos en (2.66), los niveles energéticos estarán fuertemente degenerados, pues todos los sets de números de ocupación relacionados por permutaciones dan lugar a los mismos valores de la energía E_ψ .

De este modo, considerando un sistema con densidad unidad, $\bar{n} = 1$, se puede ver que el estado fundamental es el único no degenerado:

$$E_0 = 0 \Rightarrow |\psi_0\rangle = \underbrace{|1, 1, \dots, 1\rangle}_L.$$

Para los estados excitados no sucede lo mismo. Tomando como ejemplo la primera excitación, $E_1 = U$, el número de estados degenerados viene dado por el conjunto de todas las permutaciones de $|2, 0, 1, \dots, 1\rangle$, siendo $L(L-1)$ el número total de estados degenerados, mientras que para el estado de mayor energía, $E_{max} = \frac{U}{2}N(N-1)$, existen L estados distintos definidos por todas las permutaciones posibles de $|N, 0, \dots, 0\rangle$.

2.4.2. Caso $U = 0$

En ausencia de interacciones, el hamiltoniano (2.63) se reduce al de partícula única

$$H_{tun} = -J \sum_{i=1}^{L-1} \left(b_i^\dagger b_{i+1} + h.c. \right), \quad (2.67)$$

donde $h.c.$ denota el hermítico conjugado de la combinación de operadores $b_i^\dagger b_{i+1}$.

El hamiltoniano puede resolverse analíticamente efectuando un cambio de base en los operadores de creación y destrucción. Dicho de otro modo, es necesario usar un set distinto de modos de partícula independiente, que dependerá de las condiciones de contorno escogidas. Denotamos al nuevo set de operadores por $d_k^{(\dagger)}$ que está definido como

$$d_k = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j=1}^L \exp\left(\frac{-i2\pi jk}{L}\right) b_j, & \text{para condiciones tipo PBC,} \\ \sqrt{\frac{2}{L+1}} \sum_{j=1}^L \sin\left(\frac{\pi jk}{L+1}\right) b_j, & \text{para condiciones tipo HWBC,} \end{cases} \quad (2.68)$$

donde $k = 1, \dots, L$.

De este modo, para condiciones de contorno periódicas, $d_k^{(\dagger)}$ destruyen (crean) bosones en los estados de Bloch $|k\rangle$, mientras que para condiciones de pared dura, destruyen (crean) bosones en modos de onda estacionaria, dados por la función seno. Estos nuevos operadores

siguen el mismo álgebra que los anteriores, dado por (2.7).

En la nueva base, el hamiltoniano se reduce a

$$H_{tun} = -2J \sum_{k=1}^L \cos(\gamma(k)) d_k^\dagger d_k, \quad (2.69)$$

donde

$$\gamma(k) = \begin{cases} \frac{2\pi k}{L}, & \text{para condiciones tipo PBC,} \\ \frac{\pi k}{L+1}, & \text{para condiciones tipo HWBC,} \end{cases} \quad (2.70)$$

con $k = 1, \dots, L$.

Los autoestados, en analogía con el set definido anteriormente, han de ser los estados de Fock contruidos a partir de los nuevos operadores número en la nueva base,

$$|\psi'\rangle = |n'_1, \dots, n'_L\rangle, \quad (2.71)$$

donde

$$\hat{n}'_k = d_k^\dagger d_k. \quad (2.72)$$

Los autovalores de (2.69) se construyen a partir de las energías para cada partícula,

$$E_k = -2J \cos \gamma(k), \quad (2.73)$$

como

$$E_{\psi'} = -2J \sum_k \cos \gamma(k) n_k, \quad \text{con } k \in \{1, \dots, L\}, \quad (2.74)$$

que también pueden presentar degeneración, pues la ocupación de distintos sets de modos puede dar lugar a la misma energía total.

2.5. Caos cuántico en el modelo de Bose-Hubbard

En ausencia de campo y $J \neq 0$, $U \neq 0$, el hamiltoniano de Bose-Hubbard exhibe una fase caótica dentro de un rango bien definido de los parámetros anteriores, cuya extensión y escalado con el tamaño del sistema, así como sus manifestaciones en la dinámica se han caracterizado recientemente en detalle [9, 10, 18]. Experimentalmente, su existencia se ha probado con átomos ultrafríos analizando la dinámica de configuraciones iniciales fuera del equilibrio, normalmente correspondientes a estados de Fock en la base de Wannier.

La fase caótica se caracteriza a partir del estudio comparativo de ciertas propiedades espectrales del hamiltoniano con las que pueden obtenerse a través de la Teoría de Matrices Aleatorias (RMT, por sus siglas en inglés), que es la teoría en la que se basa la definición de caos cuántico. Concretamente, la existencia de caos en el modelo de Bose-Hubbard, puede comprobarse con ayuda del conjunto de las matrices gaussianas ortogonales (GOE), incluidas en la RMT. Estas matrices son reales, simétricas, invariantes bajo transformaciones ortogonales y cuyas entradas h_{ij} son elementos aleatorios procedentes de una distribución gaussiana, cuyas medias y desviaciones típicas están dadas por

$$\mu(h_{ij}) = 0, \quad \sigma^2(h_{ij}) = 1 + \delta_{ij}, \quad (2.75)$$

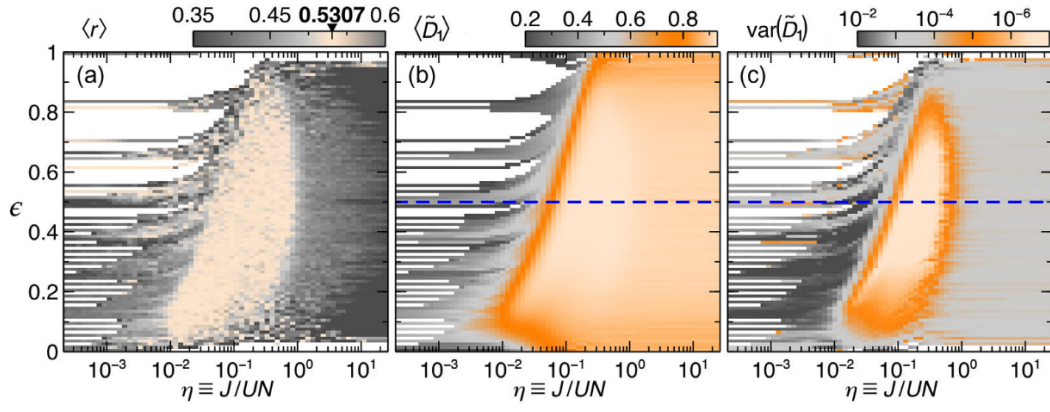


Figura 2.2: Caracterización de la fase caótica para un sistema en ausencia de campo externo como función de la energía escalada entre 0 y 1, dada por $\epsilon = \frac{E-E_{min}}{E_{max}-E_{min}}$, y por el tunneling escalado, η . En (a) se muestra el análisis del valor medio de la tasa de espaciamiento entre niveles energéticos, $\langle r \rangle$, para el hamiltoniano Bose-Hubbard en un subespacio irreducible y para $L = N = 12$. En (b) se muestra el valor medio de una dimensión fractal generalizada, mientras que en (c) se muestra su varianza. Figura extraída de la Ref. [10].

respectivamente.

Abordando el estudio a partir de las propiedades espectrales del hamiltoniano, lo más conveniente a la hora de comparar con la RMT y caracterizar la fase caótica es considerar la tasa de espaciado entre niveles energéticos del espectro teniendo en cuenta la definición de dicho espaciado como $s_n \equiv E_{n+1} - E_n$,

$$r_n = \min \left(\frac{s_{n+1}}{s_n}, \frac{s_n}{s_{n+1}} \right) \in [0, 1]. \quad (2.76)$$

Para las matrices gaussianas ortogonales $\langle r \rangle_{GOE} = 0.5307$, por lo que podemos usar el valor del momento $\langle r \rangle$ como figura de mérito para determinar la existencia de caos cuántico (Figura 2.2). En cuanto a los autovectores, se conoce que el régimen caótico y en el límite termodinámico, se extienden completamente en todo el espacio de Hilbert, y además todos los autoestados exhiben las mismas propiedades estructurales, algunas de ellas descritas por la RMT.

Cuando se somete al sistema a una fuerza externa se ha observado la persistencia de la fase caótica para ciertos valores de F manteniendo $J \neq 0$ y $U \neq 0$ [12, 19, 20]. En los siguientes capítulos analizaremos algunas manifestaciones dinámicas de la fase caótica en este régimen.

Capítulo 3

Dinámica de las oscilaciones de Bloch

En este capítulo estudiaremos qué sucede cuando sometemos una red óptica a un campo externo estático, como por ejemplo un campo gravitatorio, que conlleva la consideración del término asociado, H_{tilt} , en el hamiltoniano total (2.26). Nuestra red se «inclinará» debido a la diferencia energética constante inducida entre los consecutivos sitios de la red, y en la dinámica de las partículas tendrá lugar la aparición de las características oscilaciones de Bloch [7, 13, 21], que describiremos a continuación. Este sistema es un paradigma de la influencia de una fuerza estática sobre un potencial periódico.

3.1. Descripción

Estudiaremos la dinámica de una partícula en un potencial de red unidimensional $V(x)$ bajo la acción de un campo estático que induce una fuerza F sobre la red en la que se sitúa dicha partícula [22]. El hamiltoniano que genera la dinámica descrita es

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + Fx, \quad (3.1)$$

donde el potencial cumple la condición de periodicidad

$$V(x) = V(x + d), \quad (3.2)$$

siendo d la constante de red. Antiintuitivamente, un paquete de onda inicialmente localizado en un sitio de la red, no experimenta una aceleración uniforme como consecuencia de la fuerza F , sino que sigue un movimiento oscilatorio coherente bien definido debido a la naturaleza cuántica de las bandas de energía, con un período inversamente proporcional a la magnitud de la fuerza estática externa,

$$T_B = \frac{2\pi\hbar}{Fd}, \quad (3.3)$$

que denominaremos **período de Bloch**. Además, el movimiento periódico está caracterizado por la amplitud de la oscilación dada por

$$A = \frac{\Delta}{F}, \quad (3.4)$$

donde el factor Δ se corresponde con el ancho energético de la banda que participa en la dinámica. Lógicamente la frecuencia con la que se repiten las oscilaciones es inversamente proporcional al período de la ecuación (3.3), y viene dada por

$$\omega_B = \frac{Fd}{\hbar}, \quad (3.5)$$

conocida como frecuencia de Bloch. Las oscilaciones de Bloch constituyen un fenómeno de una partícula evolucionando en un potencial periódico con campo externo, de modo que si hay múltiples partículas no interactuantes, cada una oscilaría de forma independiente, con la misma frecuencia, e igual a la de Bloch.

En la figura 3.1 mostramos dos ejemplos de evolución de los valores esperados de la densidad de partículas en el sitio j de la red, $\langle \hat{n}_j \rangle$, para una partícula cuya dinámica está gobernada por el hamiltoniano (2.26) en ausencia del término de interacciones. En el panel izquierdo, esto se muestra para una partícula inicialmente localizada en el centro de una red de $L = 11$ sitios con $F = 0$, de modo que la densidad evoluciona siguiendo una propagación balística en donde la misma se dispersa por la red deslocalizándose por acción del tunneling, único parámetro presente en la dinámica. Por otra parte, en el panel derecho se muestra la evolución estableciendo un valor de campo arbitrario distinto de cero $F \neq 0$, de modo que la densidad de ocupación se propaga por la red describiendo oscilaciones con un período definido e igual al período de Bloch, T_B .

Para campos externos lo suficientemente pequeños podemos entender las oscilaciones a partir de la aproximación en donde la estructura de bandas $E(k)$ no es esencialmente modificada por la fuerza F , y el momento k del paquete de onda asociado a la partícula evoluciona a través del espacio recíproco según el teorema de aceleración [8],

$$k(t) = k(0) - \frac{Ft}{\hbar}, \quad (3.6)$$

hasta llegar al borde de la zona de Brillouin, situado en $k = \pm\pi/d$, donde sufre una reflexión de Bragg, de modo que el mismo permanece en la misma banda invirtiendo la velocidad de grupo del paquete, $\frac{dE(k)}{dk}$, repitiéndose el movimiento cada período de Bloch.

3.2. Solución del modelo tight-binding para una partícula

Consideremos un modelo eficiente para la descripción de la dinámica de una sola partícula en una red con un campo externo que permita despreciar el tunneling de la partícula entre bandas de energía (tunneling Zener), que será un modelo de banda única tight-binding en donde sólo hay acoplamiento entre sitios vecinos de red [1], descrito por un hamiltoniano que, en términos de los estados de Wannier localizados en el sitio j de la red, se escribe como

$$H = -J \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left(|\phi_j\rangle\langle\phi_{j+1}| + |\phi_{j+1}\rangle\langle\phi_j| \right) + Fd \sum_{j=-\infty}^{\infty} j |\phi_j\rangle\langle\phi_j|. \quad (3.7)$$

En esta representación, escribimos los estados de Bloch en términos de los estados de Wannier como

$$|k\rangle = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\phi_j\rangle\langle\phi_j|k\rangle = \sqrt{\frac{d}{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\phi_j\rangle \exp(ikjd), \quad (3.8)$$

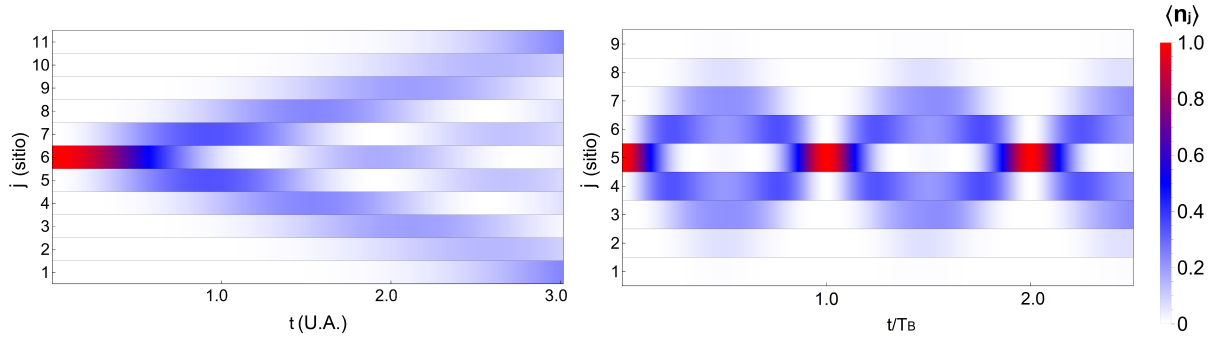


Figura 3.1: Evolución temporal de la densidad $\langle \hat{n}_j \rangle$, de una partícula inicialmente localizada en el centro de la red con $L = 11$ y ausencia de campo (izquierda), y con $L = 9$ y $F \neq 0$ (derecha). Por conveniencia y para el primer caso mostramos la evolución temporal en unidades arbitrarias. Para el segundo, expresamos el tiempo en unidades de períodos de Bloch.

donde se satisface la siguiente condición de periodicidad $\langle \phi_{j+1} | k \rangle = \exp(ikd) \langle \phi_j | k \rangle$ y el momento asociado al paquete de onda, k , está definido dentro de la primera zona de Brillouin, $-\pi/d \leq k \leq +\pi/d$. De este modo, y teniendo en cuenta las relaciones

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} \langle k' | \phi_{j+1} \rangle \langle \phi_j | k \rangle = \delta(k' - k) \exp(-ikd), \quad (3.9)$$

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} j \langle k' | \phi_j \rangle \langle \phi_j | k \rangle = \delta(k' - k) \frac{i}{d} \frac{d}{dk}, \quad (3.10)$$

se comprueba directamente que el hamiltoniano tight-binding es diagonal en la base de Bloch,

$$\langle k' | H | k \rangle = \delta(k' - k) H(k)d, \quad (3.11)$$

y su forma analítica es

$$H(k) = -2J \cos(kd) + iF \frac{d}{dk}. \quad (3.12)$$

Cuando no hay campo, se comprueba a partir de (3.12) que el espectro de energía de partícula única es

$$E(k) = -2J \cos(kd), \quad (3.13)$$

cuya forma analítica coincide con la que obtuvimos en el capítulo 2 para una partícula y en ausencia de interacción, (2.73). Resolvamos el problema de autovalores y autoestados del hamiltoniano (3.12), integrando la ecuación de Schrödinger

$$-2J \cos(kd) \Psi(k) + iF \frac{d\Psi(k)}{dk} = E \Psi(k), \quad (3.14)$$

de la que, sabiendo que han de cumplirse las condiciones de periodicidad $\Psi(k + \frac{2\pi}{d}) = \Psi(k)$, obtenemos los autoestados del sistema

$$\Psi_m(k) = \sqrt{\frac{d}{2\pi}} \exp \left[-i \left(mkd + \frac{2J}{Fd} \sin(kd) \right) \right], \quad m \in \mathbb{Z}, \quad (3.15)$$

que se denominan estados de Wannier-Stark, y están normalizados en la primera zona de Brillouin. De este modo, los autovalores de (3.12) conforman la denominada escalera de Wannier-Stark [8, 19], dada por

$$E_m = mFd, \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (3.16)$$

Podemos expresar los estados de Wannier-Stark (3.15) en la base de Wannier, $\Psi_m(j) \equiv \langle \phi_j | \Psi_m \rangle$, a partir de su transformada de Fourier,

$$\begin{aligned} \Psi_m(j) &= \int_{-\pi/d}^{+\pi/d} \langle \phi_j | k \rangle \langle k | \Psi_m \rangle dk = \frac{d}{2\pi} \int_{-\pi/d}^{+\pi/d} \exp \left\{ i \left[(j-m)kd - \frac{2J}{Fd} \sin(kd) \right] \right\} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} \exp \left\{ i \left[(j-m)u - \frac{2J}{Fd} \sin u \right] \right\} du \\ &= \mathcal{J}_{j-m} \left(\frac{2J}{Fd} \right), \end{aligned} \quad (3.17)$$

donde $\mathcal{J}_{j-m}$ es la función de Bessel de primera especie a orden $j-m$, por tanto los estados de Wannier-Stark en la representación de Wannier están dados por

$$|\Psi_m\rangle = \sum_j \mathcal{J}_{j-m} \left(\frac{2J}{Fd} \right) |\phi_j\rangle. \quad (3.18)$$

En aquellos casos en los que el campo domina sobre los efectos de tunneling $F \gg J/d$, los estados de Wannier-Stark coinciden prácticamente con los estados de Wannier, estando fuertemente localizados en los sitios individuales

$$\lim_{F \gg J/d} \Psi_m(j) \rightarrow \delta_{m,j}, \quad (3.19)$$

mientras que a medida que el tunneling domina sobre F , los estados de Wannier-Stark se van extendiendo sobre los sitios de la red de modo que cuando $F \ll J/d$, se recupera el límite de estados extendidos en toda la red.

Las ecuaciones (3.16) y (3.15) surgen como consecuencia de la rotura de la simetría traslacional del modelo debido a F . Teniendo en cuenta el espectro equiespaciado de energías dado por (3.16), cualquier estado tiene una evolución oscilatoria en el tiempo con frecuencia igual a la de Bloch,

$$\omega_B = \frac{E_{m+1} - E_m}{\hbar} = \frac{(m+1)Fd - mFd}{\hbar} = \frac{Fd}{\hbar}. \quad (3.20)$$

En la figura 3.2 mostramos la evolución del espectro escalado E/J , para varios campos $F/J \in [0, 2]$ de un sistema de una partícula y $L = 5$ sitios (panel izquierdo) y $L = 50$ sitios (panel derecho). Recordando que la escalera de Wannier-Stark se puede observar sólo bajo la condición previamente descrita en la que tenemos un número infinito de sitios, podemos comprobar que cuando L es finito, existen desviaciones dadas por los límites espaciales del sistema y el espaciamiento entre niveles deja de ser uniforme, especialmente para estados localizados cerca de los extremos. Para un sistema de $L = 5$ podemos ver

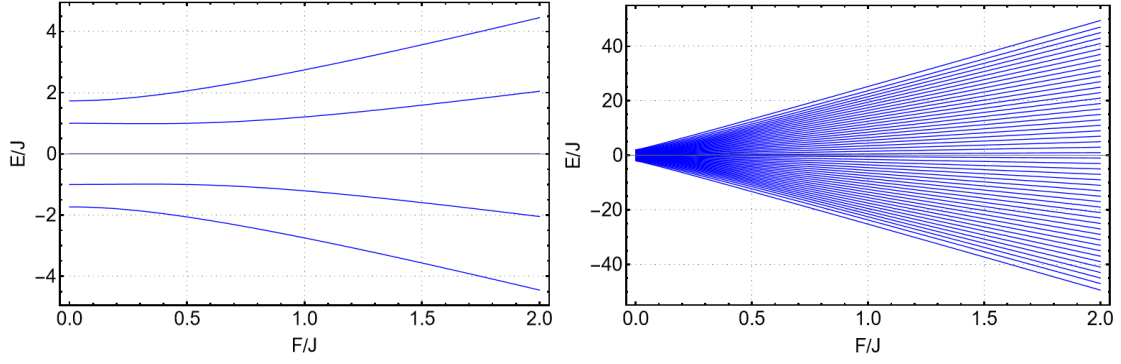


Figura 3.2: Evolución de los autovalores del hamiltoniano tight-binding, E/J con el campo F/J en un sistema de $L = 5$ (izquierda) y $L = 50$ (derecha).

las desviaciones mencionadas para $F/J \lesssim 2$, mientras que cuando $L = 50$, pese a que nuestra red sigue siendo finita, las energías parecen ir conformando un espectro equidistante.

En el caso de tener un sistema de muchas partículas sin interacciones, el espectro energético mantiene la estructura de la escalera de Wannier-Stark y, por tanto, se espera igualmente el surgimiento de las oscilaciones de Bloch, pudiendo observarse, por ejemplo, monitorizando la evolución temporal del valor esperado de observables de partícula única como puede ser la densidad en un sitio específico de la red, $\langle \hat{n}_j \rangle$.

3.3. Efecto de las interacciones

Consideremos el modelo de bosones interactuantes dado por el hamiltoniano de Bose-Hubbard (2.26), que en el caso no interactuante $U = 0$, se reduciría al modelo tight-binding discutido en la sección anterior. La interacción acopla los grados de libertad de las partículas, haciendo que la dinámica no sea separable en las partículas individuales y tiene, en general, un efecto no trivial sobre el espectro y los autoestados del sistema.

Varios estudios [1, 2, 13, 20], han demostrado que el efecto de la interacción es introducir una frecuencia adicional en la dinámica dando lugar a oscilaciones de Bloch moduladas. Parece lógico pensar que si tenemos interacciones débiles en comparación con F ($U \ll F$, donde consideramos $d = 1$) se esperaría que la fenomenología de las oscilaciones de Bloch fuera observable, si bien modificada debido a estas. Estudiemos el efecto que tienen estas interacciones sobre las oscilaciones de Bloch.

Sea $U_I(t)$ al operador evolución temporal en la representación de interacción, cuya solución formal es

$$\begin{aligned} U_I(t) &= \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H_I(t') dt' \right] \\ &= \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t U_0^\dagger(t') H_{int}(t') U_0(t') dt' \right], \end{aligned} \quad (3.21)$$

con $\mathcal{T}$ el operador de ordenamiento temporal, y $U_0(t)$ el operador evolución temporal en ausencia de interacciones entre bosones,

$$U_0(t) = \exp(-iH_0 t/\hbar), \quad (3.22)$$

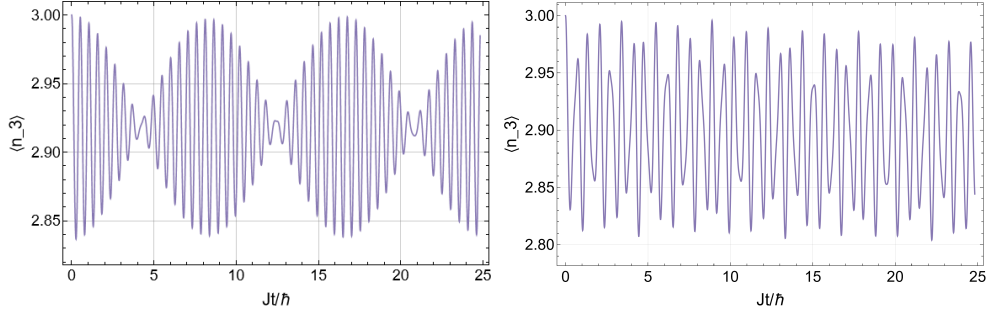


Figura 3.3: Densidad de ocupación bosones en el sitio central de una red con $L = 5$, en el que inicialmente se colocan tres bosones, con $F/J = 12$ en dos regímenes dados por las interacciones $U/J = 0.3$ (izquierda) y $U/J = 1.5$ (derecha). El tiempo total de las simulaciones es $JT_{max}/\hbar = 25$, con un paso temporal de $J\Delta t/\hbar = 0.08$.

el operador evolución temporal en la representación de Schrödinger se escribe como

$$U(t) = U_I(t)U_0(t). \quad (3.23)$$

Nuestro objetivo será evaluar $U(t)$ a un período de Bloch teniendo en cuenta que para el sistema no interactuante

$$U_0(T_B) = \mathbb{1}, \quad (3.24)$$

y para ello consideramos, como fuerte aproximación, que $Fd \gg J$, de modo que podamos despreciar el término de tunneling en el hamiltoniano H_0 en la ecuación (3.21), por tanto,

$$U_I(T_B) \simeq \mathcal{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^{T_B} \left[\exp \left(+it' \frac{H_{tilt}}{\hbar} \right) \left(\frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1) \right) \exp \left(-it' \frac{H_{tilt}}{\hbar} \right) dt' \right] \right]. \quad (3.25)$$

De este modo, todos los términos dentro de la integral conmutan entre sí, y como el término de interacción del hamiltoniano no tiene dependencia temporal, podemos prescindir de la actuación de $\mathcal{T}$, y teniendo en cuenta que $U_I(t)$ es diagonal en la base de Fock,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{n}' | U_I(T_B) | \mathbf{n} \rangle &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} T_B \langle \mathbf{n}' | \left(\frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1) \right) | \mathbf{n} \rangle \right] \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n}} \\ &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} T_B \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1) \right]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

De la ecuación anterior puede deducirse que el efecto del operador evolución temporal $U_I(t)$ es introducir una frecuencia adicional en la dinámica. Si el estado inicial es un estado de Fock $|\mathbf{n}\rangle$, la frecuencia adicional dominante será

$$\omega_U(|\mathbf{n}\rangle) = \frac{U \sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1)}{2\hbar}, \quad (3.27)$$

cuyo período asociado es

$$T_U(|\mathbf{n}\rangle) = \frac{4\pi\hbar}{U \sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1)}. \quad (3.28)$$

Así, el efecto que introduce la interacción, siempre que sea lo suficientemente débil en comparación con el campo externo ($U \ll F$), es el de modular las oscilaciones de Bloch con un período T_U , debido a una nueva fase adicional dependiente del estado de Fock escogido. Por otra parte, si el estado inicial fuera combinación lineal de muchos estados de Fock, aparecerán varios múltiplos de una frecuencia fundamental $\omega_U = \frac{U}{\hbar}$, dado que $\sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1)$ es siempre un número par. Nótese que si no se asumiera la fuerte aproximación en la que $F \gg J$, entonces (3.26) no sería diagonal y los efectos de U sobre la dinámica del sistema serían no triviales.

En la figura 3.3 probamos la consistencia de los cálculos para un sistema de $N = 3$ bosones interactuantes inicialmente dispuestos en el centro de una red de $L = 5$ sitios. Aquí, se muestra el cálculo de la evolución temporal de la densidad en el sitio central de la red, $\langle \hat{n}_3 \rangle$. En ambos casos mantenemos un campo de gran intensidad, de valor $F/J = 12$. Cuando el potencial de interacción U es tal que $U \ll F$ como en el panel izquierdo, en que $U/J = 0.3$, se observa la modulación de las oscilaciones de Bloch debida a U . Las oscilaciones están descritas por un período de Bloch, dado por (3.3) y de valor $T_B = 0.52$, y están moduladas por una envolvente que, de acuerdo a (3.28), coincide aproximadamente con el valor teórico dado por $T_U = 7$. En cuanto al valor de la densidad, nuestra elección del campo F/J limita la amplitud de estas oscilaciones a un pequeño intervalo definido entre los valores de la densidad de 3 y 2.84. Sin embargo, cuando $U/J = 1.5$ (panel derecho), no podemos afirmar que las interacciones sean lo suficientemente perturbativas respecto al campo como para que la modulación de las oscilaciones de Bloch sean vistas.

Capítulo 4

Cálculo numérico de la evolución de observables

A continuación, desarrollaremos el procedimiento empleado para el cálculo computacional de la evolución de un sistema que sigue el modelo de Bose-Hubbard. El algoritmo descrito ha sido implementado mediante el software *Mathematica* en un laptop convencional.

4.1. Evolución temporal de la función de onda

Como se comentó en el primer capítulo, la dimensión del espacio de Hilbert crece críticamente con los valores de N y L de acuerdo con (2.27), de modo que el coste computacional del cálculo de las propiedades espectrales del sistema hace que tengamos que buscar métodos óptimos. En nuestro caso, calcularemos el operador evolución temporal del hamiltoniano por medio de su expansión en polinomios de Chebyshev [23, 24], dada su eficiencia computacional debido a la recursividad del cálculo, óptimo para matrices dispersas y grandes dimensiones del espacio de Hilbert, y de rápida convergencia.

4.1.1. Polinomios de Chebyshev

Dada una función peso $w(x)$ definida en un intervalo real $[a, b]$ y dos funciones integrables f y g también definidas en el mismo intervalo, se define el producto escalar

$$\langle f|g \rangle = \int_a^b w(x)f(x)g(x)dx, \quad (4.1)$$

de modo que existe un set de polinomios ortogonales, $p_n(x)$, que verifican

$$\langle p_n(x)|p_m(x) \rangle = \frac{\delta_{n,m}}{N_n}, \quad (4.2)$$

siendo N_n el inverso de la norma al cuadrado de $p_n(x)$, dado por

$$N_n \langle p_n(x)|p_n(x) \rangle = 1. \quad (4.3)$$

Con dicho set se puede expandir cualquier otra función $f(x)$ cuyo dominio es el intervalo $[a, b]$ como

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n p_n(x), \quad (4.4)$$

donde los coeficientes α_n se corresponden con la proyección de $f(x)$ en la base de polinomios p_n ,

$$\alpha_n = \frac{\langle p_n | f \rangle}{\langle p_n | p_n \rangle}. \quad (4.5)$$

Los polinomios de Chebyshev de primer orden están definidos en $[a, b] = [-1, 1]$,

$$T_n(x) = \cos(n \arccos(x)), \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4.6)$$

y forman un conjunto de polinomios ortogonales en dicho intervalo con la función peso

$$w(x) = \frac{1}{\pi \sqrt{1-x^2}}. \quad (4.7)$$

Usando (4.1), estos polinomios cumplen la relación de ortogonalidad dada por

$$\langle T_n | T_m \rangle = \frac{\delta_{n,m}(1 + \delta_{n,0})}{2}, \quad (4.8)$$

la relación de recursividad

$$T_{m+1}(x) = 2xT_m(x) - T_{m-1}, \quad (4.9)$$

la de adición

$$2T_m(x)T_n(x) = T_{m+n}(x) + T_{m-n}(x), \quad (4.10)$$

así como las siguientes propiedades:

$$T_n(x) = T_{-n}(x), \quad (4.11)$$

$$T_0(x) = 1. \quad (4.12)$$

A partir de (4.6), los dos primeros polinomios de la expansión son $T_0(x) = 1$ y $T_1(x) = x$, con los que, de forma recursiva, podemos calcular el resto.

4.1.2. Algoritmo de la evolución temporal

La evolución temporal de un estado inicial $|\psi_0\rangle$ inducida por el hamiltoniano de Bose-Hubbard puede implementarse mediante la expansión en polinomios de Chebyshev del operador evolución temporal, $U(t)$.

Consideremos la ecuación de Schrödinger, tomando por simplicidad la constante $\hbar = 1$

$$-i \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H |\psi(t)\rangle. \quad (4.13)$$

Si sistema se encuentra en el estado $|\psi(t)\rangle$ a tiempo t , a un tiempo posterior, $t + \Delta t$, tenemos

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = \exp(-iH\Delta t) |\psi(t)\rangle. \quad (4.14)$$

Puesto que los polinomios de Chebyshev están definidos en el intervalo $[-1, 1]$, para que la expansión del operador evolución temporal en estos polinomios sea válida se ha de

reescalar el hamiltoniano. De este modo, aplicamos la transformación lineal siguiente sobre H ,

$$\tilde{H} = \frac{H - b\mathbb{1}}{a}, \quad (4.15)$$

donde las constantes a y b toman los valores

$$a = \frac{E_{max} - E_{min}}{2 - \epsilon}, \quad (4.16a)$$

$$b = \frac{E_{max} + E_{min}}{2}, \quad (4.16b)$$

con E_{max} , E_{min} el máximo y mínimo valor posible de las autoenergías de H respectivamente. El parámetro $\epsilon \ll 1$, asegura que los autovalores de $\tilde{H}$ no alcancen los límites -1 o +1, pues en estos casos pueden aparecer problemas numéricos en el cálculo.

Usando el escalado (4.16), expandimos el operador evolución a un paso temporal dado, $U(\Delta t)$, en una serie de M polinomios de Chebyshev,

$$\begin{aligned} U(\Delta t) &= \exp(-iH\Delta t) \\ &= \exp(-i(a\tilde{H} + b)\Delta t) \\ &= \exp(-ib\Delta t) \left(c_0 + 2 \sum_{k=1}^M c_k T_k(\tilde{H}) \right), \end{aligned} \quad (4.17)$$

donde los polinomios T_k se calculan mediante la relación recursiva (4.9). Los coeficientes c_k están dados por

$$c_k = \int_{-1}^1 \frac{T_k(x) \exp(-iax\Delta t)}{\pi \sqrt{1-x^2}} dx = (-i)^k J_k(a\Delta t), \quad (4.18)$$

donde se ha hecho uso de la definición de los polinomios de Chebyshev (4.6), y de la integral que define la función de Bessel,

$$J_k(a\Delta t) = \frac{1}{\pi i^k} \int_0^\pi d\theta \exp(ia\Delta t \cos \theta) \cos(k\theta). \quad (4.19)$$

En el límite $k \rightarrow \infty$,

$$J_k(a\Delta t) \sim \frac{1}{k!} \left(\frac{a\Delta t}{2} \right)^k \sim \frac{\exp(k)}{\sqrt{2\pi k}} \left(\frac{a\Delta t}{2k} \right)^k, \quad (4.20)$$

lo que nos indica que $c_k \sim k^{-k}$, de modo que el coeficiente decae exponencialmente para k suficientemente grande, permitiendo truncar la serie con un error despreciable.

Si ahora aplicamos (4.17) en (4.14),

$$\begin{aligned} U(\Delta t)|\psi(t)\rangle &= \exp(-ib\Delta t) \left(c_0|\nu_0(t)\rangle + 2 \sum_{k=1}^M c_k|\nu_k(t)\rangle \right) \\ &= \exp(-ib\Delta t) \left(J_0(a\Delta t)|\nu_0(t)\rangle + 2 \sum_{k=1}^M (-i)^k J_k(a\Delta t)|\nu_k(t)\rangle \right), \end{aligned} \quad (4.21)$$

de manera que los vectores $|\nu_k(t)\rangle$ están dados por la aplicación recursiva de los polinomios de Chebyshev sobre el estado $|\psi(t)\rangle$. Conocemos la expresión de los dos primeros, con los que podemos calcular el resto de términos hasta el *cutoff* deseado, M , según (4.9),

$$|\nu_0(t)\rangle = |\psi(t)\rangle, \quad (4.22a)$$

$$|\nu_1(t)\rangle = T_1(\tilde{H})|\nu_0(t)\rangle = \tilde{H}|\psi(t)\rangle, \quad (4.22b)$$

$$|\nu_{k+1}(t)\rangle = 2\tilde{H}|\nu_k(t)\rangle - |\nu_{k-1}(t)\rangle. \quad (4.22c)$$

Este procedimiento se aplica recursivamente tantas veces sea necesario para obtener la evolución tras un tiempo escogido. Una de las razones por las que este algoritmo es eficiente es que solo se requiere de multiplicaciones matriz-vector.

4.1.3. Implementación en el código

Los cálculos se han desarrollado partiendo de un código que calcula la matriz del hamiltoniano, cuya evaluación se hace en paralelo, a partir de varios input asociados a los parámetros del sistema, como J, U, F , así como el número de sitios L , bosones N y condiciones de contorno, que en nuestro caso siempre son de pared dura. Inicialmente se calculan las energías superiores e inferiores del hamiltoniano para el reescalado del mismo mediante (4.15) y (4.16).

Antes de calcular la dinámica, debemos elegir el valor de corte M para la serie (4.21), y la condición que impondremos para ello será que para cualquier orden k superior al de corte, $k > M$, $|J_k(a\Delta t)|$ debe ser menor que una precisión p elegida (que en nuestro caso será 10^{-12}), es decir $|J_k(a\Delta t)| < p$. Lógicamente, cuanto mayor sea el paso temporal Δt escogido, mayor será el número de términos necesario para lograr la precisión deseada. Este procedimiento se hará repetitivamente incrementando el valor del orden k hasta encontrar el primer valor del mismo para el cual se cumpla la condición de que el valor absoluto de la función de Bessel a dicho orden evaluado a un argumento fijo tenga que ser estrictamente menor que la precisión escogida.

Una vez tengamos el valor del corte, que para la mayoría de nuestras simulaciones será $M = 18$, y habiendo discretizado el tiempo total T deseado para la evolución temporal en N_p pasos temporales, $\Delta t = T/N_p$, calculamos recursivamente los kets (4.22) para nuestro estado inicial, $|\psi_0\rangle$, que elegiremos como un estado de Fock $|\mathbf{n}\rangle$, es decir, nuestro estado inicial será siempre un único elemento de la base del espacio de Hilbert escogido. El estado inicial se almacena en el vector $psi0$, cuyas coordenadas son nulas salvo aquella correspondiente a la secuencia de ocupación elegida. Por ejemplo, para una red de $L = 3$ sitios y $N = 3$ bosones ($dim\mathcal{H} = 10$), la secuencia de ocupación en la red (0,3,0) se corresponde con el séptimo elemento de la base del espacio de Hilbert, de modo que el estado inicial, $psi0$, es la transposición de (0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0).

Con esto, definimos un array llamado psi de dimensión $N_p + 1$ para incluir explícitamente el estado inicial en $t = 0$. Implementamos el algoritmo de la evolución temporal a partir de los primeros términos de la expansión según (4.22) que los definimos, por simplicidad, como

$$\nu_0 \equiv |\psi_0\rangle, \quad (4.23)$$

$$\nu_1 \equiv \tilde{H}|\psi_0\rangle. \quad (4.24)$$

De este modo, calculamos el primer término de la serie (4.21) y almacenamos el resultado en la variable $psi1$. Calculamos recursivamente los siguientes términos de la expansión en la variable ν_2 ,

$$\nu_2 \equiv 2\tilde{H}\nu_1 - \nu_0, \quad (4.25)$$

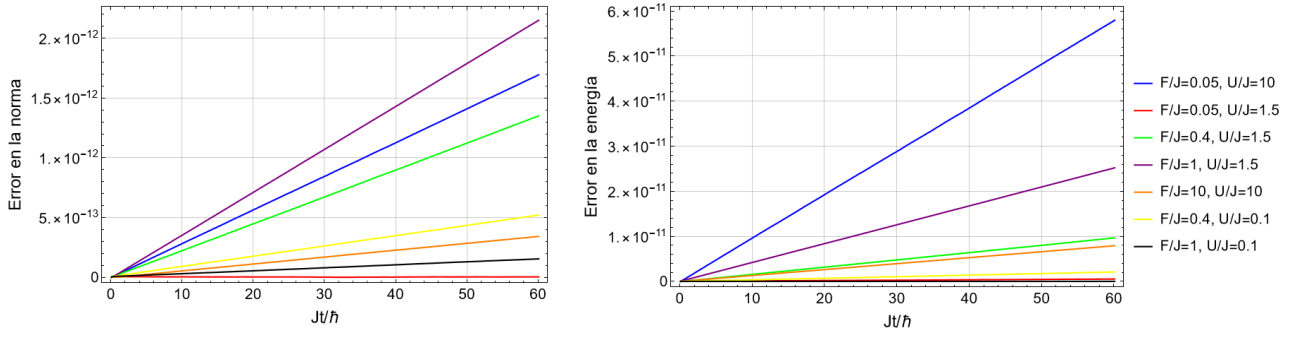


Figura 4.1: Evolución temporal del error en la conservación de la norma (izquierda) y de la energía (derecha), para ciertos valores de F/J y U/J y cuya precisión elegida es $p = 10^{-12}$.

reassignando tanto $\nu_0 = \nu_1$ como $\nu_1 = \nu_2$, de modo que acumulamos el cálculo de la serie para los siguientes términos de k en la variable *psi1* hasta llegar al valor de corte M previamente obtenido. Una vez efectuado el cálculo, el valor de *psi1* se guarda en la posición $j + 1$ de *psi*, correspondiente al instante $t_j = j\Delta t$ de los N_p pasos equidistantes en los que se ha dividido el tiempo total, y por último, actualizamos el valor de *psi0* igualándolo al resultado obtenido, *psi1*. Se repite de nuevo todo el bucle anterior hasta calcular los $N_p + 1$ términos del array asociado a la evolución temporal discretizada del estado.

4.1.4. Estimación de errores

En cada paso del algoritmo temporal descrito, la precisión de la evolución está determinada por nuestra elección de la precisión, p , que determina el número de términos de la serie (4.21). Por tanto, el error inducido en el cálculo aumentará linealmente con el número de pasos implementados en la evolución.

Cuantificamos el error inducido en los cálculos monitorizando la desviación en la conservación de la norma del estado y en la conservación de la energía en función del tiempo, dados respectivamente por las expresiones

$$\Delta_\psi(t) = |\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle - 1|, \quad (4.26)$$

$$\Delta_E(t) = |\langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle - \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle|, \quad (4.27)$$

donde H es el hamiltoniano sin reescalar.

En la figura 4.1 mostramos tanto la evolución temporal del error en la norma como de la energía para un paso temporal $J\Delta t/\hbar = 0.1$ hasta un valor máximo del tiempo de $JT/\hbar = 60$, que son valores característicos en nuestras simulaciones, para un sistema particular con $L = 8$ y $N = 4$, con distintos valores de F/J y U/J . La precisión empleada para los cálculos ha sido $p = 10^{-12}$. Debido al truncamiento de la suma en polinomios, el error computacional en ambos casos crece linealmente con el número de pasos temporales empleados para el muestreo. De este modo, comprobamos que son lo suficientemente pequeños como para asumir que nuestros cálculos son precisos.

4.2. Cálculo de los valores esperados

4.2.1. Evolución temporal de la densidad bosónica

Dada una red con L sitios y N bosones, la evolución temporal de la densidad de partículas en el j -ésimo sitio de la red es

$$\langle n_j(t) \rangle \equiv \langle \psi(t) | \hat{n}_j | \psi(t) \rangle, \quad (4.28)$$

donde el estado $|\psi(t)\rangle = \sum_{\mathbf{n}} \alpha_{\mathbf{n}}(t) |\mathbf{n}\rangle$ es el calculado según se ha descrito en la sección anterior y se almacena en la variable *psi*, y $\hat{n}_j$ es el operador número asociado a cada sitio. El valor esperado de un operador autoadjunto, siempre y cuando diagonalice en la misma base en que expresamos el estado $|\psi\rangle$, se calcula sumando todos los posibles autovalores del operador multiplicados por la correspondiente probabilidad de medir dicho valor, de forma que

$$\langle \psi(t) | \hat{n}_j | \psi(t) \rangle = \sum_{\mathbf{n}} |\alpha_{\mathbf{n}}(t)|^2 n_j. \quad (4.29)$$

Implementamos el cálculo de la evolución de $\langle \hat{n}_j \rangle$ definiendo en primer lugar una matriz *sec* que contenga las secuencias de números de ocupación de todos los elementos $|\mathbf{n}\rangle$ de la base,

```
Do[
  sec[[i]] = GiveSequence[i, L, N]
, {i, 1, Dim[L, N]}];
```

donde la función *GiveSequence* nos da la secuencia de ocupación de los bosones en la red a partir del índice del estado $|\mathbf{n}\rangle$ en la base del espacio de Hilbert, L y N . Seguidamente, para cada índice temporal, dado por $t \in [1, Np + 1]$, construimos la matriz de $\langle \hat{n}_j(t) \rangle$ para cada sitio de la red, $j \in [1, L]$, mediante

```
Do[
  Do[
    n[[j, t]] =
      Abs[Conjugate[
        psi[[t]]].(DiagonalMatrix[sec[[All, j]]].psi[[t]])]
    , {j, 1, L}],
  , {t, 1, 1 + Np}];
```

de modo que $n[[j, t]]$ contiene la densidad de partículas en el sitio indexado por j y en el instante de tiempo indexado por t .

4.2.2. Posición y velocidad del centro de masas

Otros observables de interés en el estudio de la dinámica serán los valores esperados de la posición y la velocidad del centro de masas, dados respectivamente por $\langle \hat{x}_{CM} \rangle$ y $\langle \hat{v}_{CM} \rangle$.

El valor medio de la posición del centro de masas del sistema de partículas está dado por

$$\langle \hat{x}_{CM} \rangle = \frac{1}{N} \langle \psi(t) | \sum_{j=1}^L j \hat{n}_j | \psi(t) \rangle. \quad (4.30)$$

Implementamos la suma ponderada de posiciones tomando como peso la densidad de partículas obtenida previamente, $n[[j, t]]$, que se multiplica por el índice j correspondiente a cada sitio, evaluando la suma en cada estado *psi*:

```

Do[
  xcm[[t]] =
    (1/N)*Abs[Conjugate[Transpose[psi[[t]]]]]
    .(Sum[j*n[[j, t]], {j, 1, L}]*Abs[psi[[t]]])
, {t, 1, 1 + Np}];

```

El operador velocidad del centro de masas se puede definir como

$$\hat{v}_{CM}(t) \equiv \frac{i}{\hbar}[H, \hat{x}_{CM}(t)] = \frac{-iJd}{\hbar} \sum_{j=1}^{L-1} \left(b_j^\dagger(t)b_{j+1}(t) - b_{j+1}^\dagger(t)b_j(t) \right). \quad (4.31)$$

Su valor medio depende únicamente de los elementos de matriz densidad reducida de partícula única

$$\rho_{j+1,j}^{(1)} = \langle \psi(t) | b_j^\dagger b_{j+1} | \psi(t) \rangle, \quad (4.32)$$

entonces, y recordando que fijamos el período de red a la unidad, $d = 1$,

$$\langle \hat{v}_{CM}(t) \rangle = \frac{2J}{\hbar} \text{Im} \left[\sum_{j=1}^{L-1} \rho_{j+1,j}^{(1)}(t) \right], \quad (4.33)$$

cantidad que prueba la coherencia de fase entre sitios vecinos de la red. Implementamos la ecuación (4.33) en nuestro código,

```

Do[
  vcm[[t]] = 2*J*Im[Conjugate[Transpose[psi[[t]]]] . (htun.psi[[t]])],
  {t, 1, 1 + Np}];

```

de modo que *htun* es la matriz triangular correspondiente al primer término de H_{tun} , previamente calculada y que evaluada en los estados *psi*, representa la matriz densidad (4.32).

4.2.3. Transformadas de Fourier

Con el fin de identificar las frecuencias presentes en la dinámica del sistema, se obtendrán las transformadas de Fourier de las series temporales de los observables descritos. Las mismas se han realizado mediante la función *Fourier*, que aplica la Transformada Discreta de Fourier (DFT) a una lista de datos muestreados en el dominio temporal para una lista de datos de longitud igual al número de puntos temporales N_p definida por $u_{r=\{1, \dots, N_p\}}$, la transformada se calcula como

$$\text{DFT}[u_r] \equiv \nu_s = \frac{1}{\sqrt{N_p}} \sum_{r=1}^{N_p} u_r \exp(2\pi i(r-1)(s-1)/N_p), \quad (4.34)$$

de modo que obtenemos una nueva lista $\nu_{s=\{1, \dots, N_p\}}$ de amplitudes correspondientes a un conjunto específico de frecuencias, de igual longitud que la lista u_r . Las frecuencias correspondientes a cada elemento de la lista ν_s se obtienen como

$$f_s = \frac{(s-1)}{N_p \Delta t}, \quad (4.35)$$

siendo $N_p \Delta t$ el producto entre el número de puntos en que dividimos el tiempo total por el paso de la señal, por tanto, el tiempo total T . De este modo, la frecuencia dada por el índice $s = 1$ es la frecuencia cero y la máxima observable es

$$f_{N_p} \approx \frac{1}{\Delta t}, \quad (4.36)$$

que está determinada por el paso temporal. El espectro de frecuencias presenta una simetría respecto de la mitad de la frecuencia máxima, por lo que en nuestro análisis descartamos las frecuencias correspondientes a la segunda mitad, de modo que se mostrarán únicamente las frecuencias $f_s \in [0, \frac{1}{2\Delta t}]$. Nuestro interés será identificar las frecuencias angulares de estos espectros, que están dadas por

$$\omega_s = \frac{2\pi}{T}(s - 1), \quad (4.37)$$

con

$$0 \leq \omega_s \leq \frac{\pi}{\Delta t}, \quad (4.38)$$

mientras que la resolución del espectro está dada por

$$\Delta\omega_s = \frac{2\pi}{T}, \quad (4.39)$$

y por consiguiente, inversamente proporcional a la duración total de la señal T . En la práctica, calcularemos el espectro de frecuencia para el observable de interés tomando el módulo al cuadrado de cada componente de Fourier, de modo que obtengamos una lista donde cada elemento es la potencia asociada a una frecuencia específica para el conjunto de valores temporales de la señal.

Capítulo 5

Dinámica en función del campo externo y la interacción

En este capítulo estudiamos la evolución temporal de ciertos observables, cuya implementación numérica ha sido descrita en el capítulo anterior, de un sistema que sigue el modelo de Bose-Hubbard en función de los valores del campo y las interacciones entre partículas.

5.1. Condiciones iniciales y espacio de parámetros

Consideramos un sistema que tiene $L = 8$ sitios de red y $N = 4$ partículas, cuyo estado inicial es un estado de Fock con dos bosones en cada uno de los sitios centrales de la red,

$$|\psi_0\rangle = |0, 0, 0, 2, 2, 0, 0, 0\rangle. \quad (5.1)$$

En la figura 5.1, mostramos nuestro punto de partida, un diagrama de fases para un sistema parecido al nuestro, en el que $\bar{n} = 1/2$, y que tiene $N = 7$ bosones en una red de $L = 14$ sitios. Este diagrama será nuestro marco de referencia para establecer nuestro espacio de parámetros escalados F/J y U/J en el que trabajar. Si nos fijamos en el panel derecho de la figura, en donde nuestro espacio está caracterizado por el logaritmo de la varianza de una dimensión fractal generalizada, y que será nuestra referencia en el estudio, podemos distinguir de forma clara dos regiones dadas por las fases caótica, emergente para valores de los parámetros $F/J \lesssim 0.15$ y $0.1 \lesssim U/J \lesssim 2$, caracterizada por valores muy pequeños de la variancia mencionada [9–12] y no ergódica, separadas por una región de transición que hace de frontera entre ambas. Es en estas regiones en las que caracterizaremos la evolución temporal de los observables e intentaremos comprender el efecto de la fase caótica mediante los indicadores dinámicos arrojados por los resultados. Sobre el diagrama de la figura mostramos las trayectorias, con U/J o F/J constante que cubren las regiones de interés y en las que analizamos la dinámica. Además, también discutiremos los casos en los que $U/J = 0$ o $F/J = 0$.

El tiempo empleado en todos los resultados mostrados en este capítulo está dado por

$$\tilde{t} \equiv Jt/\hbar, \quad (5.2)$$

donde $\hbar/J$ es el tiempo característico de un proceso de tunneling. Damos, además, las redefiniciones del período de Bloch,

$$\tilde{T}_B \equiv 2\pi \frac{J}{F}, \quad (5.3)$$

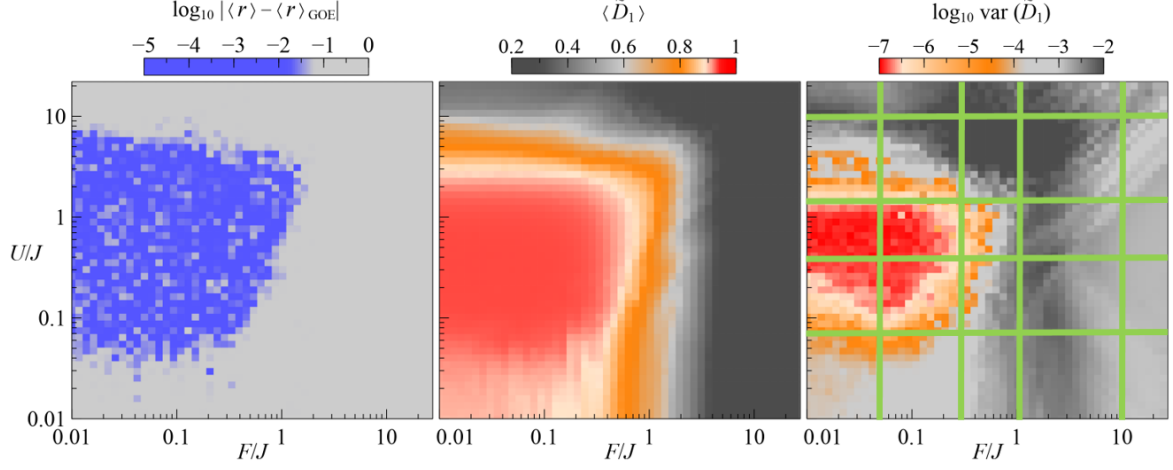


Figura 5.1: Caracterización de la fase caótica para el hamiltoniano (2.26) con densidad $\bar{n} = 1/2$, $N = 7$ y $L = 14$. Asociada a cada punto del mapa, se representan tres magnitudes distintas. En la izquierda se muestra el logaritmo del valor absoluto de la diferencia entre el valor medio de la tasa de espaciado entre niveles energéticos $\langle r \rangle$ (2.76), y la tasa de espaciado de niveles para matrices gaussianas ortogonales. En el centro, el valor medio de la dimensión fractal generalizada $\tilde{D}_1$. En la derecha, se muestra el logaritmo de su varianza, y sobre esta gráfica se han representado las trayectorias en las que estudiaremos la dinámica. Figura cortesía de Alberto Rodríguez.

y del período adicional inducido por las interacciones,

$$\tilde{T}_U \equiv 4\pi \frac{J}{U \sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1)}, \quad (5.4)$$

que serán empleados en este capítulo para la discusión de resultados. Por tanto, será conveniente redefinir también el valor de la frecuencia en las nuevas unidades

$$\tilde{\omega} \equiv \hbar\omega/J, \quad (5.5)$$

de modo que la frecuencia de Bloch y de las interacciones en unidades del inverso del tiempo de tunneling, están dadas respectivamente por

$$\tilde{\omega}_B \equiv \frac{F}{J}, \quad (5.6)$$

$$\tilde{\omega}_U \equiv \frac{U}{2J} \sum_{j=1}^L n_j(n_j - 1). \quad (5.7)$$

5.2. Evolución de observables con F/J

Comencemos estudiando la evolución de la dinámica en ausencia de interacciones, de modo que el hamiltoniano (2.26) se reduce a

$$H = -J \sum_{j=1}^{L-1} \left(b_j^\dagger b_{j+1} + h.c \right) + F \sum_{j=1}^L \left(j - \frac{L+1}{2} \right) \hat{n}_j, \quad (5.8)$$

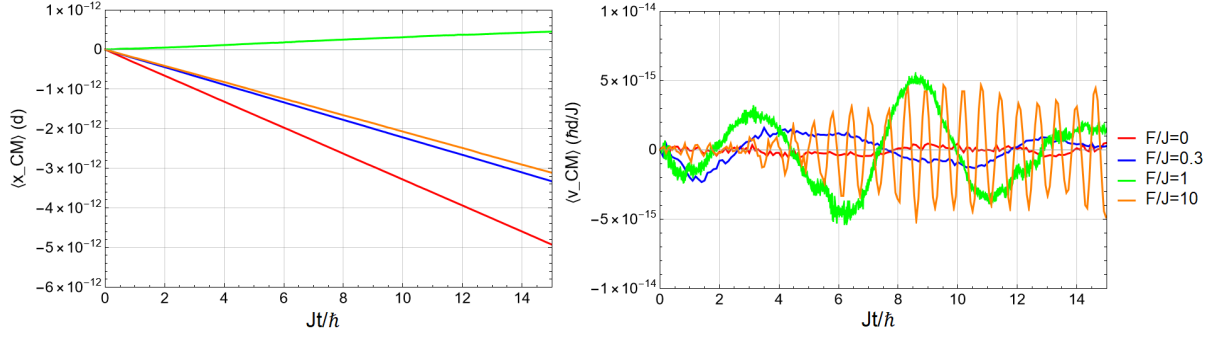


Figura 5.2: Evolución temporal de $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (4.30) (izquierda) y $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (4.33) (derecha) para $U/J = 0$ y cuatro valores del campo: $F/J = 0$ (rojo), $F/J = 0.3$ (azul), $F/J = 1$ (verde) y $F/J = 10$ (naranja). En ambos casos se muestra la evolución hasta un tiempo $\tilde{T}_{max} = 15$ con paso temporal $\Delta\tilde{t} = 0.1$.

que tiene solución analítica tanto para $F \neq 0$ como para $F = 0$. En ausencia de campo el problema se reduce a una red de bosones no interactuantes descrito por un hamiltoniano de partícula independiente, soluble analíticamente en la base de Bloch. Si $F \neq 0$, las soluciones generales son estados de Wannier- Stark. Ambas situaciones fueron discutidas en el Capítulo 2.

Para $F = 0$, como mostramos en la figura 5.2, no se espera evolución alguna de la posición del centro de masas debido a la simetría de paridad que obedece $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ y, por tanto, se espera una velocidad asociada al centro de masas constante e igual a cero. Si ahora $F/J > 0$, cabría esperar observar una evolución del momento total debido a la fuerza inducida por el gradiente de potencial entre sitios de la red, que además rompe la simetría de paridad del hamiltoniano. No obstante, mientras mantengamos $U = 0$, para un estado inicial que exhibe simetría de paridad (es decir, $\hat{\Pi}|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle$), la evolución del valor esperado de la densidad, $\langle \hat{n}_j \rangle$, es simétrica respecto del centro de la red para todos los tiempos. Esto puede demostrarse usando la transformación de H bajo paridad $\hat{\Pi}$ y la transformación bipartita de la red, según se muestra en el Apéndice A. Por tanto, y como se muestra en la figura 5.2, aun cuando $F/J > 0$, el desplazamiento del centro de masas es nulo en ausencia de interacciones. En nuestros resultados se observan señales temporales de la velocidad del centro de masas que fluctúan alrededor de cero con amplitudes del orden de 10^{-14} y 10^{-15} , y de la posición con amplitud del orden de 10^{-12} , debidos a errores numéricos inherentes a la precisión finita de los cálculos computacionales.

En la figura 5.3 mostramos la evolución de $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ cuando $U = 0$, que es simétrica respecto del centro de la red. Para $F/J = 0$, la dinámica de bosones está dominada únicamente por el hopping entre sitios vecinos. Cuando $F/J > 0$, cabría esperar observar una señal oscilante con un período de Bloch definido. No obstante, para poder observarla es necesario situarnos en un régimen que nos permita distinguir los períodos de Bloch claramente. En primer lugar, necesitamos que el período de las mismas abarque un intervalo temporal adecuado y dentro de los límites dados por los tiempos inicial y final del cálculo considerado, de modo que aseguremos $\tilde{T}_B < \tilde{T}_{max}$. Esto se consigue aumentando el valor de F hasta conseguir un valor del período apropiado. En segundo lugar, y como sabemos a partir de la ecuación (3.4), el valor de la amplitud de estas oscilaciones está limitado por la intensidad de campo F , de modo que necesitamos que este sea lo suficientemente grande como para reducir la amplitud de las mismas a un tamaño contenido dentro de los límites espaciales de la red. Conforme aumentamos F , se va reduciendo la amplitud de las

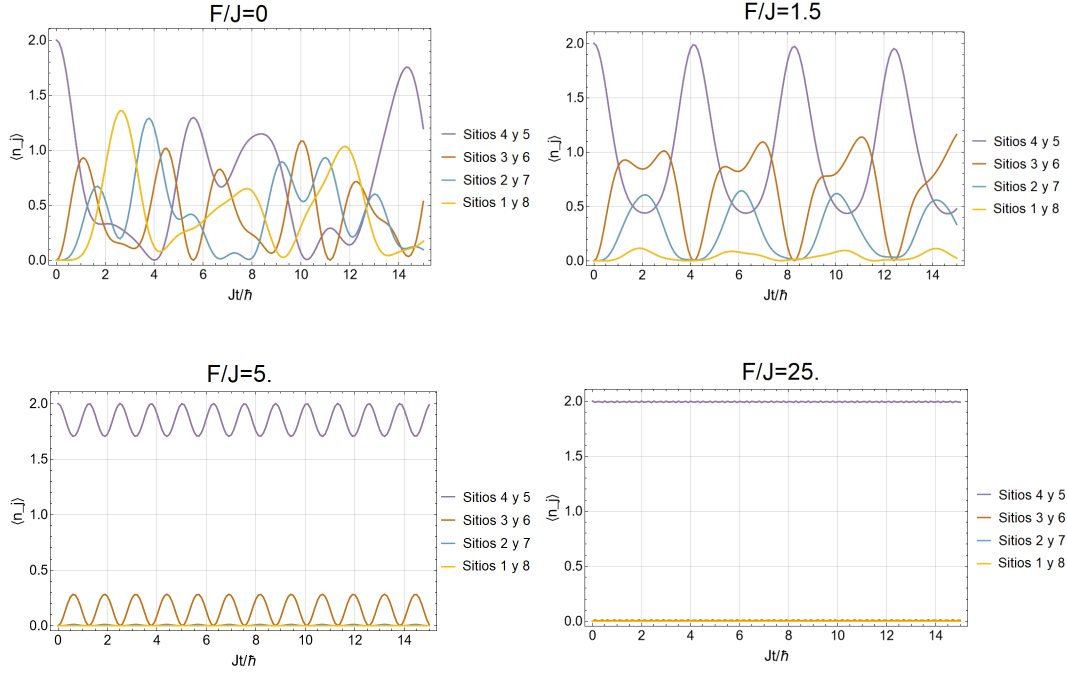


Figura 5.3: Evolución de $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ en función de F/J cuando $U = 0$. Se ha tomado un tiempo total $\tilde{T}_{max} = 15$ y un paso temporal $\Delta\tilde{t} = 0.05$.

oscilaciones hasta verlas bien definidas en $F/J = 5$ (en los sitios 4, 5, 3 y 6), con un período $\tilde{T} \approx \frac{2\pi}{5}$, correspondiente al valor teórico esperado. En el límite en el que $F \gg J$, nos aproximamos a un régimen en el que los estados de Wannier-Stark prácticamente coinciden con los estados de Wannier, es decir, con los estados propios del operador número, de modo que nuestro estado inicial (5.1), se convierte en un estado propio del hamiltoniano dado por (5.8). Así, en este límite no habría evolución del estado inicial. Esto también se puede interpretar en base a que, a medida que crece el campo, cada vez se requiere mayor energía para que las partículas hagan hopping hacia sus sitios vecinos debido al salto energético entre ellos inducido por el propio campo F . Por tanto, es lógico esperar que, en el límite $F \gg J$, la dinámica temporal se congele en el estado inicial, tal y como puede verse en la señal obtenida para $F/J = 25$.

Para estudiar $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ cuando establecemos un valor fijo de interacciones $U/J \neq 0$ variando F/J , nos basamos en la figura 5.4. En ella, aparece una serie de paneles, que muestran la evolución temporal de dicho observable, dispuestos de forma que cada fila contiene cuatro paneles que comparten el mismo valor de U/J y se diferencian respecto del de F/J , facilitando la comparación de los resultados obtenidos.

Comenzando por $U/J = 0.07$ como ejemplo de régimen de interacciones muy débiles, observamos fluctuaciones notables de $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ en toda la red a campos bajos, cuando $F/J = 0.05$ y $F/J = 0.3$, de modo que las partículas pueden moverse fácilmente entre sitios vecinos, según mostramos en los paneles A y B de la figura 5.4. A medida que F/J , el hopping y el campo externo se hacen comparables, el movimiento de las partículas por la red parece cambiar siguiendo una dinámica algo más ordenada. Si seguimos incrementando F/J comenzamos a entrar en un régimen en el que las oscilaciones de Bloch deben ser visibles y en nuestros resultados se ve un período temporal en la evolución de los sitios centrales de $\tilde{T} \approx \tilde{T}_B = 2\pi$ (ver panel C). No obstante, para $F/J = 1$, estas oscilaciones

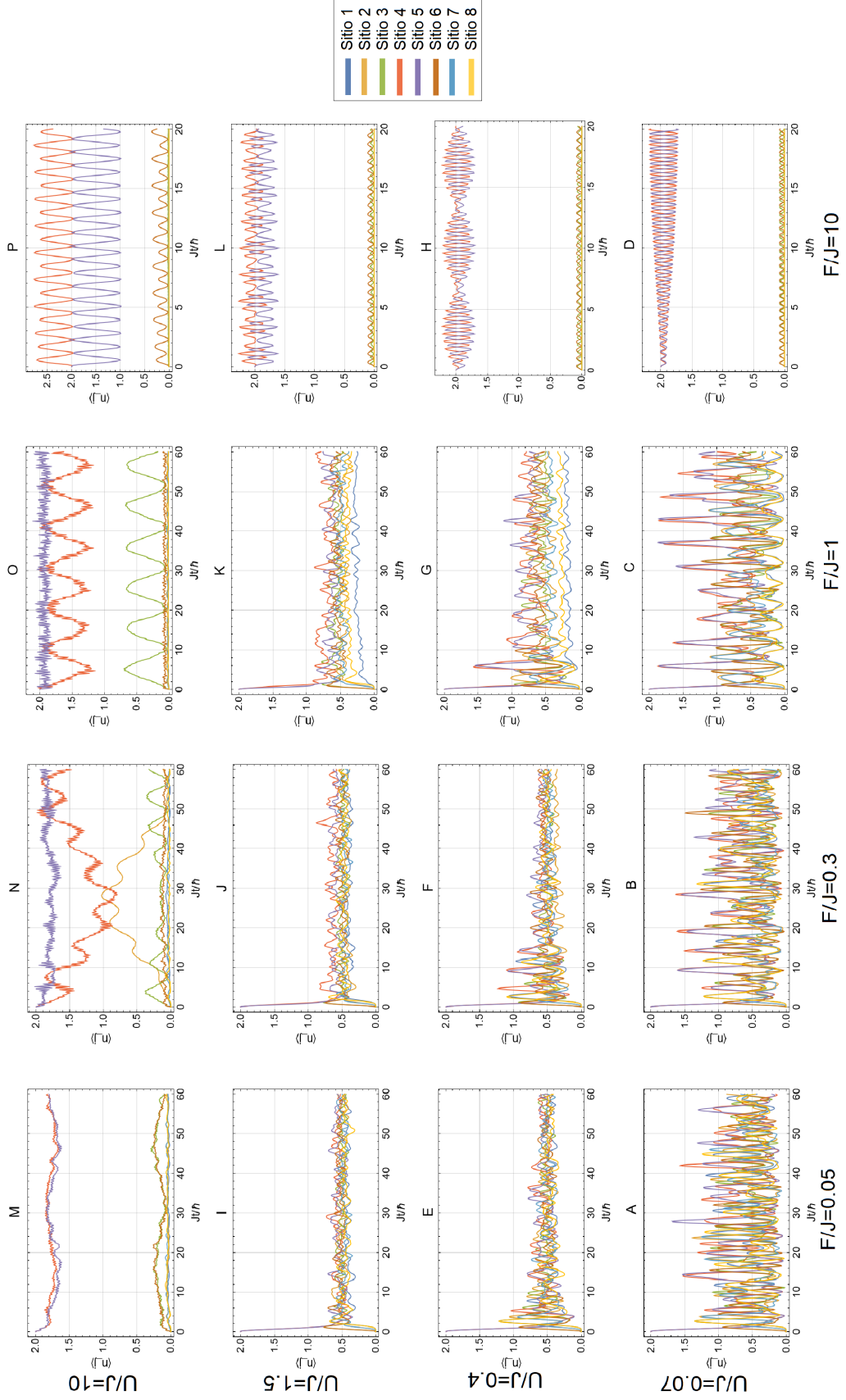


Figura 5.4: Evolución temporal de $\langle \hat{n}_j(t) \rangle$ para distintos F/J y U/J . El tiempo máximo y la resolución, respectivamente, son $\tilde{T}_{max} = 60$ y $\Delta\tilde{t} = 0.1$ para todos los paneles salvo en D, H, L y P, donde $\tilde{T}_{max} = 30$ y $\Delta\tilde{t} = 0.05$.

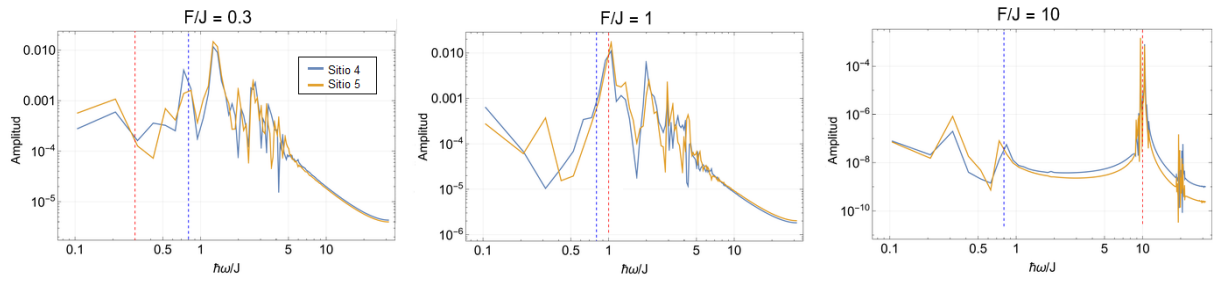


Figura 5.5: Evolución del espectro de frecuencias asociado a las densidades de los sitios 4 (línea azul) y 5 (línea naranja) para $U/J = 0.4$. Se muestran los perfiles para $F/J = 0.3$ (izquierda), $F/J = 1$ (centro) y $F/J = 10$ (derecha) (ver señales en los paneles F, G y H de la figura 5.4). Las líneas punteadas roja y azul muestran los valores teóricos de las frecuencias $\tilde{\omega}_B$ y $\tilde{\omega}_U$, respectivamente. Se ha empleado una resolución en frecuencia de $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

se observan distorsionadas, y se ve dinámica en los sitios extremos de la red (sitios 1 y 8). Estas observaciones son indicativas del efecto que tiene el tamaño finito de la red en la dinámica, en el que los bordes juegan un papel importante distorsionando la señal e impidiendo oscilaciones completas bien definidas. Por tanto, debemos considerar mayores valores del campo si queremos que haya oscilaciones mejor definidas, como puede apreciarse cuando se aumenta el campo hasta $F/J = 10$. Para este campo, hay oscilaciones de Bloch con período $\tilde{T} \simeq \tilde{T}_B = 0.62$ moduladas por la frecuencia adicional debida a U (ver panel D), dada por la ecuación (3.27), cuyo valor excede el límite temporal establecido y es $\tilde{T}_U = 44.87$, de modo que el resultado parece consistente con lo que esperaríamos ver para los valores de los parámetros considerados, donde $F \gg J$ y $F \gg U$.

Estableciendo ahora $U/J = 0.4$, a campos bajos como $F/J = 0.05$ y $F/J = 0.3$, según mostramos en los paneles E y F de la figura 5.4, se observa que todas las ocupaciones se aproximan rápidamente al valor de la densidad $\bar{n} = 1/2$ y exhiben fluctuaciones temporales moderadas. Cuando $F \simeq J$, ya no se observa una distribución de densidades por sitio homogénea y las fluctuaciones temporales son más pronunciadas (ver panel G), mientras que si aumentamos el campo hasta un valor $F/J = 10$, éste domina sobre el resto de parámetros, gobierna la escala temporal y en las señales se observan oscilaciones de Bloch completas y moduladas. De acuerdo a lo que mostramos en el panel H, el período de la modulación es $\tilde{T}' \approx 7$, muy similar al teórico (3.28), cuyo valor es $\tilde{T}_U = 7.85$ para este régimen. En la figura 5.5 mostramos la evolución del espectro de frecuencias asociado a las densidades en los sitios centrales de la red, manteniendo $U/J = 0.4$, mostrando en líneas punteadas rojas y azules los valores teóricos de las frecuencias de Bloch y las debidas a las interacciones, respectivamente. Para $F/J = 0.3$, si bien la frecuencia de Bloch, mostrada por la línea roja discontinua, está presente, no tiene suficiente amplitud como para ser principal. Sin embargo, para $F/J = 1$ esta aparece claramente junto a otras frecuencias debidas principalmente al tamaño finito del sistema y domina para $F/J = 10$, en coherencia con lo esperado teniendo en cuenta que en esta situación la dinámica está gobernada por el propio campo. Cabe mencionar, en este último caso, el surgimiento de un splitting de frecuencias alrededor de la de Bloch, según se muestra en el panel derecho de la figura, debida a la influencia sobre dicha frecuencia de las interacciones.

Para $U/J = 0.4$, con $F/J = 0.05$ y $F/J = 0.3$, las ocupaciones evolucionan a una configuración final en la que todos los sitios muestran densidad $\bar{n} = 1/2$ y presentan

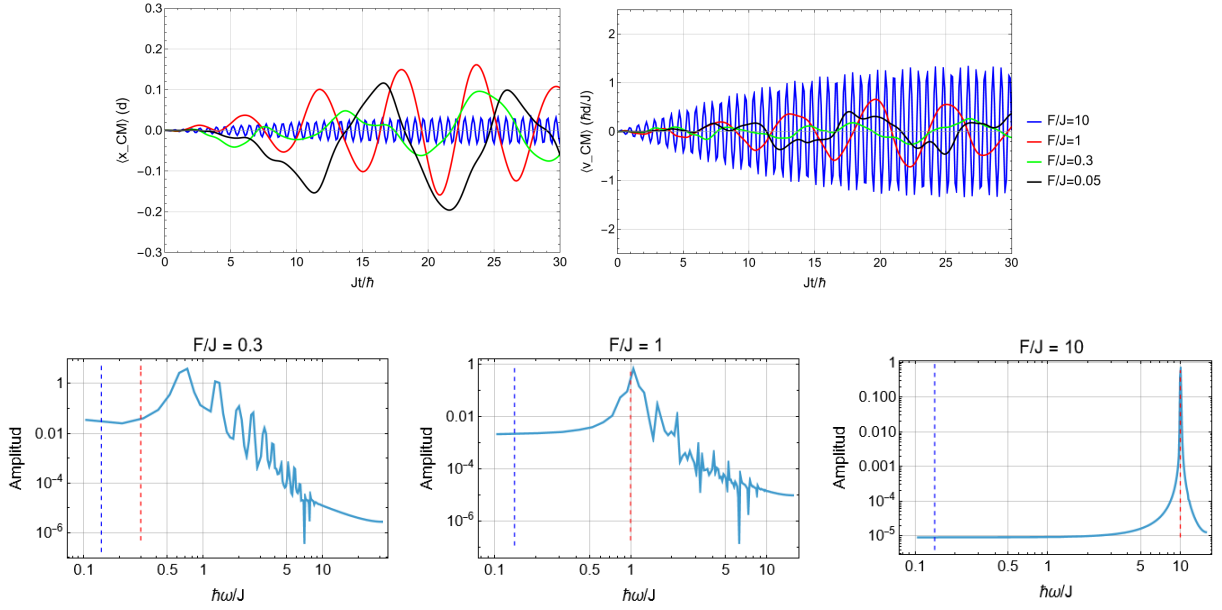


Figura 5.6: Arriba: evolución de $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (izquierda) y $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (derecha) para $U/J = 0.07$ y valores de campo igual a 0.05 (negro), 0.3 (verde), 1 (rojo) y 10 (azul). Se muestra la evolución hasta un tiempo $\tilde{T}_{max} = 30$ y con un paso temporal $\Delta\tilde{t} = 0.08$. Abajo: transformadas de Fourier de $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ para $U/J = 0.07$ y los valores de F/J analizados. Las líneas punteadas roja y azul muestran los valores teóricos de las frecuencias $\tilde{\omega}_B$ y $\tilde{\omega}_U$, respectivamente. Se ha empleado una resolución en frecuencia de $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

fluctuaciones temporales reducidas (ver paneles I y J de la figura 5.4). A medida que aumenta F/J , la distribución final de ocupación deja de ser homogénea, como para $F/J = 1$ y según se ve en el panel K. De modo similar, esto sucede para $U/J = 1.5$, en donde además ya no se observan oscilaciones de Bloch una vez alcanzamos nuestro valor máximo establecido F/J (ver panel L), que sugiere que el campo ya no es lo suficientemente intenso respecto a las interacciones como para ver oscilaciones moduladas.

Para altos valores de la interacción, como fijamos con $U/J = 10$, la dinámica adquiere mayor complejidad. En el panel M, se muestra una evolución temporal muy lenta para $F/J = 0.05$, dado que nuestro estado inicial se aproxima a ser un autoestado del sistema. Para $U \gg J, F$, la contribución principal a la dinámica debe provenir de los estados degenerados con el inicial en el límite $F = J = 0$, y de cómo se rompe dicha degeneración debido a la acción perturbativa del tunneling. Según vemos en los paneles N y O, a medida que F/J aumenta, existe una mayor competencia entre los efectos del campo y de la interacción originando una dinámica no trivial. Este régimen puede entenderse a partir de la existencia de pares de partículas fuertemente ligados por la interacción, comportándose cada uno de ellos de manera efectiva como una partícula compuesta cuya dinámica está descrita por una amplitud espacial reducida [7]. Para $F = U \gg J$, en el panel P, se observa una señal definida por una serie de oscilaciones, cuyo comportamiento se explicará más adelante.

Para tener una visión más completa de la dinámica, analizamos el comportamiento de $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ y $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$, estableciendo como referencia tres valores fijos de interacciones y para cada uno de ellos estudiamos la evolución con F/J , para cuatro valores específicos del campo. Para $U/J = 0.07$ y $U/J = 0.4$, observamos una mayor localización del centro

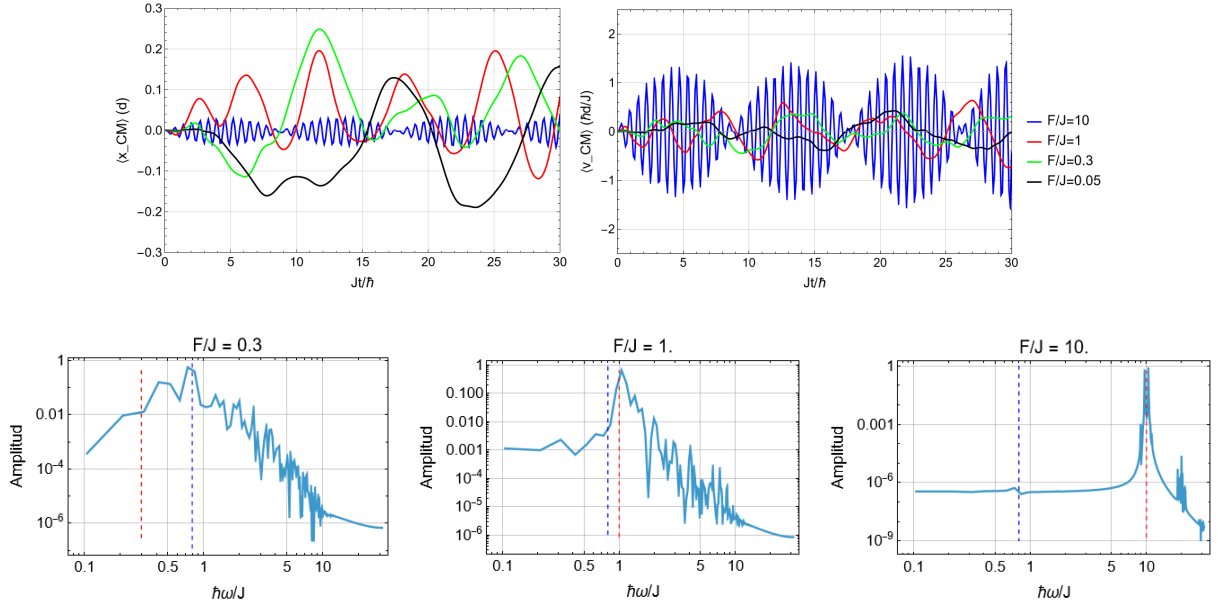


Figura 5.7: Arriba: evolución de $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (izquierda) y $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (derecha) para $U/J = 0.4$ y los valores de F/J analizados. Se muestra la evolución hasta un tiempo $\tilde{T}_{max} = 30$, con un paso temporal de $\Delta\tilde{t} = 0.08$. Abajo: transformadas de Fourier de $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ para los valores de F/J estudiados. Las líneas punteadas roja y azul muestran los valores teóricos de las frecuencias $\tilde{\omega}_B$ y $\tilde{\omega}_U$, respectivamente. La resolución en frecuencia empleada es $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

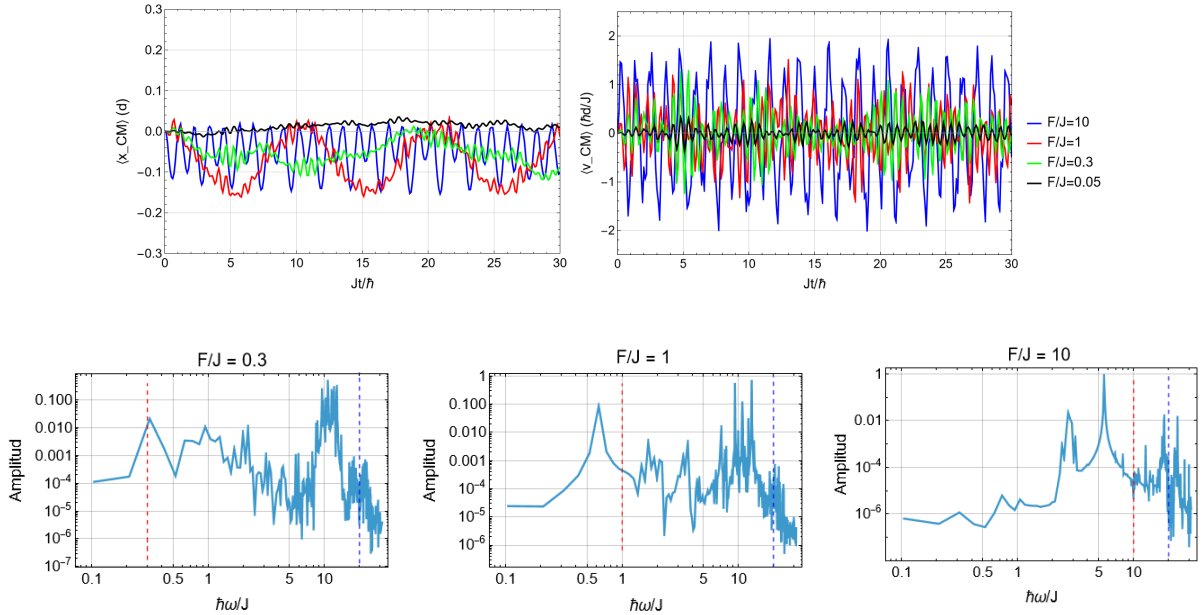


Figura 5.8: Arriba: evolución de $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (izquierda) y $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (derecha) para $U/J = 10$ y los valores de F/J analizados. Se muestra la evolución hasta un tiempo $\tilde{T}_{max} = 30$, con un paso temporal de $\Delta\tilde{t} = 0.08$. Abajo: transformadas de Fourier de $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ para los valores de F/J estudiados. Las líneas punteadas roja y azul muestran los valores teóricos de las frecuencias $\tilde{\omega}_B$ y $\tilde{\omega}_U$, respectivamente. La resolución en frecuencia empleada es $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

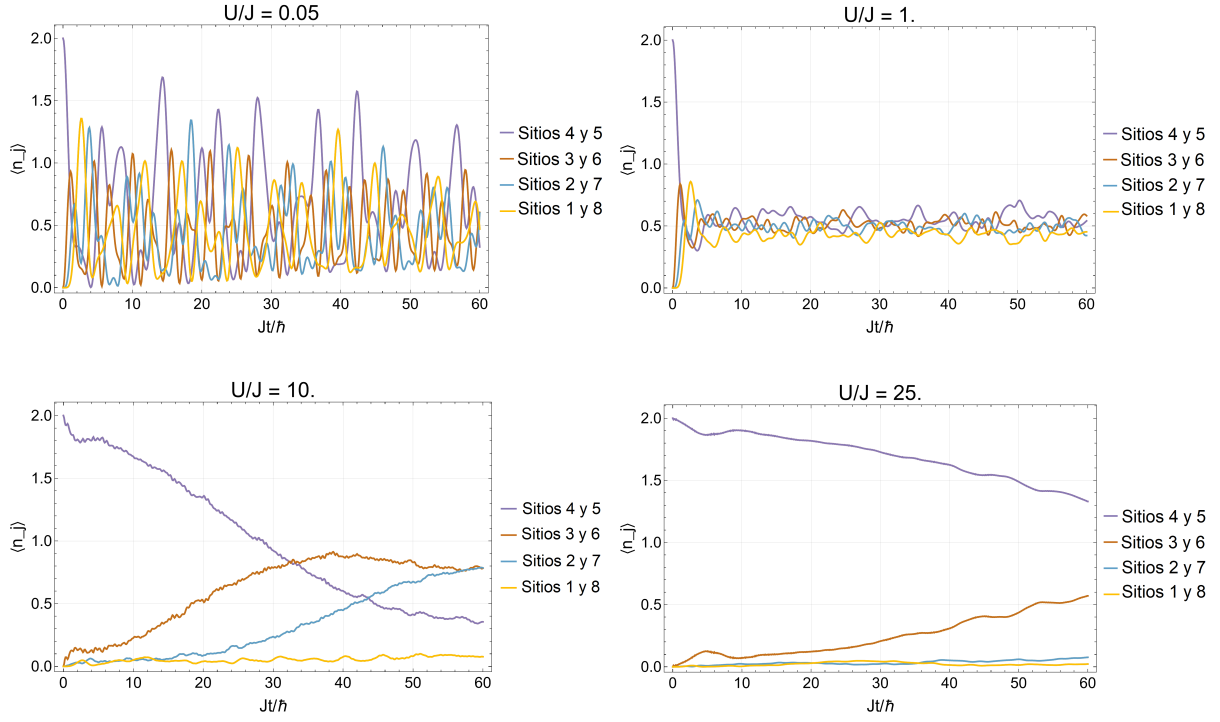


Figura 5.9: Evolución de $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ en función de U/J para $F/J = 0$. Se ha tomado un tiempo total $\tilde{T}_{max} = 15$ y un paso temporal $\Delta\tilde{t} = 0.05$.

de masas en el centro de la red con el aumento de F/J dentro del rango de parámetros en el que las oscilaciones son visibles ($F/J = 1$ y $F/J = 10$), según mostramos en la parte superior de las figuras 5.6 y 5.7, lo cual es lógico de acuerdo con la ecuación (3.4). Además, comprobamos cómo el período de Bloch de las oscilaciones va disminuyendo con el campo, y se requiere de menos tiempo para completar una oscilación, de modo que el centro de masas oscila a una velocidad cada vez mayor. Comprobamos que las modulaciones debidas a U de las oscilaciones de Bloch se observan cuando $F \gg U, J$, régimen en el que esto es esperable. Dado que los perfiles espectrales de $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ y $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ son eminentemente similares, consideramos únicamente las transformadas de Fourier de $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ para analizar las frecuencias que modelan la dinámica del centro de masas. Para $U/J = 0.07$ y $U/J = 0.4$, mostramos la evolución de los espectros con F/J en la parte inferior de las figuras 5.6 y 5.7. En ellos, la frecuencia de Bloch no toma relevancia en la dinámica hasta que $F \simeq J$. Para $U/J = 0.07$ con $F/J = 10$ no vemos la frecuencia de los revivals debido a que el tiempo total escogido no permite resolverla, no obstante, para $U/J = 0.4$ y con el mismo campo, el cálculo teórico se acerca al valor observado.

Considerando un régimen muy interactuante con $U/J = 10$, como se muestra en la parte superior de la figura 5.8 comprobamos que, debido a la dinámica no trivial inducida en este régimen, no se observa la localización progresiva con el campo del centro de masas en el centro de la red previamente mencionado, luego las oscilaciones de Bloch no son visibles con el aumento del campo dado que en todo momento $U \geq F$. Llegamos a la misma conclusión a partir de los espectros mostrados en la parte inferior de la figura, donde aparecen varias frecuencias desconocidas como origen del comportamiento de las señales.

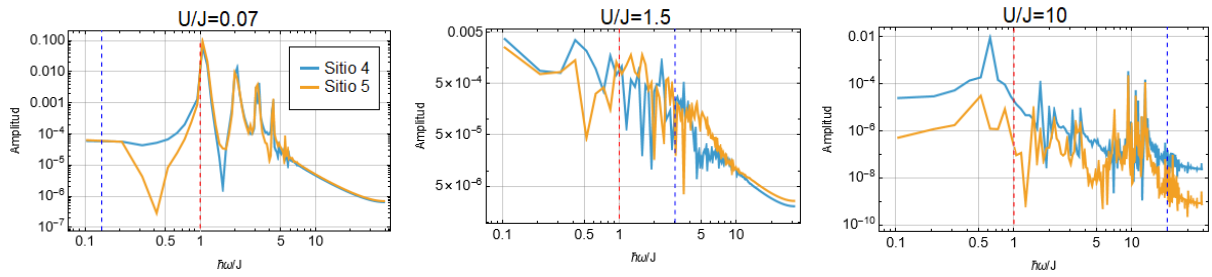


Figura 5.10: Evolución del espectro de frecuencias asociado a las densidades de los sitios 4 (línea azul) y 5 (línea naranja) cuando $F/J = 1$. Se muestran los perfiles para $U/J = 0.07$ (izquierda), $U/J = 1.5$ (centro) y $U/J = 10$ (derecha) (ver señales de los paneles C, J y K de la figura 5.4). Las líneas punteadas roja y azul muestran los valores teóricos de las frecuencias $\tilde{\omega}_B$ y $\tilde{\omega}_U$, respectivamente. Se ha empleado una resolución en frecuencia de $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

5.3. Evolución de observables con U/J

En ausencia de campo el hamiltoniano (2.26) se escribe como

$$H = -J \sum_{j=1}^{L-1} \left(b_j^\dagger b_{j+1} + h.c. \right) + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1), \quad (5.9)$$

y en el caso general donde $J, U \neq 0$, el hamiltoniano no tiene solución analítica. En la figura 5.9 comprobamos la preservación de la simetría de reflexión como consecuencia de una evolución simétrica respecto del centro de la red de la densidad $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ y, consecuentemente, la ausencia del desplazamiento del centro de masas del sistema. Según mostramos en la figura, a medida que aumentamos U/J la dinámica no está descrita por oscilaciones con período definido y pasa por un régimen en el que las densidades se equilibran rápidamente a $\bar{n} = 1/2$ y exhiben fluctuaciones temporales reducidas para $U/J = 1$, hacia una dinámica mucho más lenta para $U/J = 10$ y $U/J = 25$, en donde la contribución principal a la misma vendría del conjunto de estados degenerados al que pertenece el estado inicial en el límite $J \rightarrow 0$, y de cómo se rompa la degeneración. Al igual que sucedía con $F \gg J$ en ausencia de interacciones, con $U \gg J$ en ausencia de campo el hamiltoniano diagonaliza en la base de estados de Fock del operador número.

Tomando la figura 5.4, podemos comparar la evolución de $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ con U/J para $F/J = 0.05$ con la discutida para $F/J = 0$ mencionando la ruptura de simetría de este observable respecto del centro de la red debido al campo no nulo. En el panel A se muestra una dinámica caracterizada por fluctuaciones temporales dada la prevalencia de J sobre el resto de parámetros que, a medida que U crece, decaen con el tiempo dando lugar a un sistema final de densidad homogénea cuando $U/J = 0.4$ y $U/J = 1.5$ (paneles E e I). Para $U/J = 10$ las interacciones dominan sobre el resto de parámetros, y a diferencia de lo observado en la figura 5.9, la acción perturbativa del campo mantiene una distribución de bosones en la red parecida a la del estado inicial escogido. Similarmente, manteniendo $F/J = 0.3$ y $F/J = 1$, la deslocalización en la red de las partículas da paso a un régimen protagonizado por las interacciones que describen una dinámica no trivial donde la ocupación está en gran parte concentrada en los sitios centrales de la red.

En la figura 5.10, mostramos la evolución del espectro de frecuencias de las señales de $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ en los sitios centrales de la red, respecto a tres valores de U/J , para $F/J = 1$

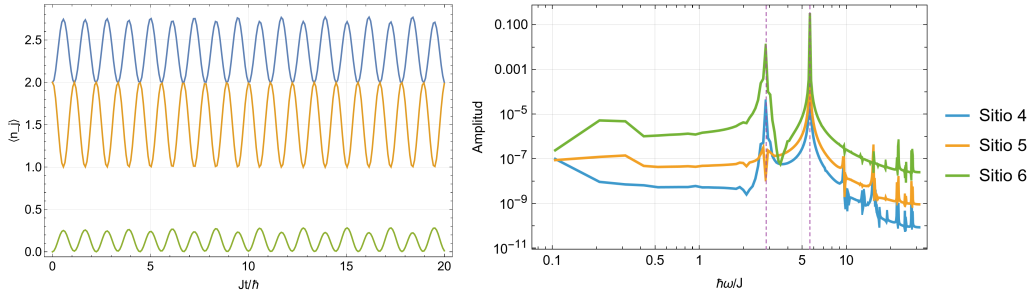


Figura 5.11: Señal de $\langle \hat{n}_j(t) \rangle$ para $F = U = 25J$ (izquierda) y su correspondiente transformada de Fourier para los sitios 4, 5 y 6 (derecha). Con las líneas discontinuas marcamos los valores teóricos de $\tilde{\omega}_1$ y $\tilde{\omega}_2$. El paso escogido y la resolución en frecuencia son, respectivamente, es $\Delta\tilde{t} = 0.05$ y $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

mostrando, de nuevo, el valor teórico de las frecuencias de Bloch y de las interacciones con líneas discontinuas roja y azul, respectivamente. Para $U/J = 0.07$, verificamos el dominio de la frecuencia de Bloch en las oscilaciones vistas en los sitios centrales de la red en el panel C de la figura 5.4. El crecimiento de las interacciones a $U/J = 1.5$, conlleva la aparición de nuevas frecuencias cuyas amplitudes eclipsan a la de Bloch, que no puede ser vista en la señal temporal. Finalmente, para $U/J = 10$, las interacciones son tan elevadas que ocasionan la aparición de una serie de frecuencias adicionales en el espectro.

Estableciendo $F/J = 10$ y para $U/J = 0.07$ y como ya discutimos en la sección anterior, las oscilaciones de Bloch están moduladas con un período superior al total siendo el valor teórico $\tilde{T}_U = 44.87$ que, de acuerdo con lo que cabría esperar debido a (3.28), disminuye al aumentar la interacción a $U/J = 0.4$, aproximándose a $\tilde{T}'_U = 7.85$. Para $U/J = 1.5$, según se observa en el panel L, nos situamos en una zona de transición hacia la dinámica observada para $U/J = 10$.

Para el régimen donde $F \approx U \gg J$, la contribución principal a la dinámica tiene que venir de los estados degenerados con el estado de Fock inicial en el límite $J \rightarrow 0$, y de cómo se rompa la degeneración por la acción de J . Nuestro estado inicial, $|\psi_1\rangle = |0, 0, 0, 2, 2, 0, 0, 0\rangle$, está degenerado a primer orden con los estados $|\psi_2\rangle = |0, 0, 0, 3, 1, 0, 0, 0\rangle$ y $|\psi_3\rangle = |0, 0, 0, 2, 1, 1, 0, 0\rangle$, requiriéndose de una acción de hopping que conecte el estado inicial con cada uno de los mencionados previamente. Por ello, en este límite podemos reformular el hamiltoniano como

$$H = H_0 + W_J, \quad (5.10)$$

siendo W_J la matriz de la perturbación dada por J , que representa el acoplamiento entre los tres estados degenerados a primer orden y que hemos de diagonalizar,

$$W_J = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{6} & 0 \\ \sqrt{6} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

de modo que se obtienen los autovalores $x = \{0, \pm 2\sqrt{2}\}$, que representan correcciones a la energía, cuyas diferencias determinan las frecuencias de oscilación en el sistema y que resultan ser las que observamos en el límite antes mencionado. Estas frecuencias obtenidas, junto con sus períodos asociados, son

$$\tilde{\omega}_1 = 2\sqrt{2} \longrightarrow \tilde{T}_1 = \frac{\pi}{\sqrt{2}}, \quad (5.12)$$

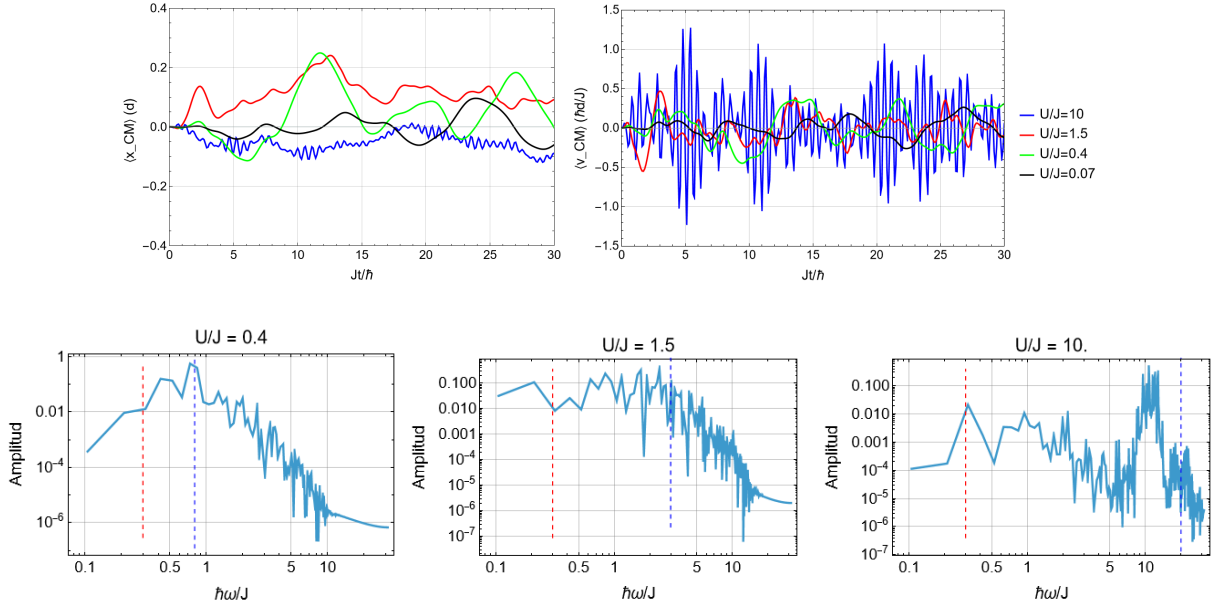


Figura 5.12: Arriba: evolución de $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (izquierda) y $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (derecha) para $F/J = 0.3$ y los valores de U/J analizados. Se muestra la evolución hasta un tiempo $\tilde{T}_{max} = 30$, con un paso temporal de $\Delta\tilde{t} = 0.08$. Abajo: transformadas de Fourier de $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ para los valores de U/J estudiados. Las líneas punteadas roja y azul muestran los valores teóricos de las frecuencias $\tilde{\omega}_B$ y $\tilde{\omega}_U$, respectivamente. La resolución en frecuencia empleada es $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

$$\tilde{\omega}_2 = 4\sqrt{2} \longrightarrow \tilde{T}_2 = \frac{\pi}{2\sqrt{2}}. \quad (5.13)$$

Si bien es cierto que este comportamiento ya se observa en las señales obtenidas para $F = U = 10J$ (panel P de la figura 5.4), hemos tomado como ejemplo un régimen en el que nos aproximemos aún más a este límite, de modo que $F = U = 25J$ y donde según comprobamos en la figura 5.11, en la transformada de Fourier de la evolución de la densidad pueden observarse las frecuencias calculadas $\tilde{\omega}_1$ y $\tilde{\omega}_2$, siendo $\tilde{\omega}_1$ la dominante.

Analizando el comportamiento de $\langle x_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ y $\langle v_{CM}(\tilde{t}) \rangle$, establecemos como referencia tres regímenes de campo y mostramos sus evoluciones con U/J , tomando como valores específicos de interacción $U/J = \{0.07, 0.4, 1.5, 10\}$ para $F/J = 0.3$ y $F/J = 1$, y $U/J = \{0.4, 1.5, 10\}$ para $F/J = 10$. En la figura 5.12 se muestra la evolución manteniendo fijo $F/J = 0.3$. Como es lógico, se observa que a medida que las interacciones crecen, la dinámica de ambos observables no puede describirse mediante oscilaciones de período definido, pues $F < J$ para $U/J = 0.07$ y $F/J < U/J$ para el resto de casos considerados. De las transformadas de Fourier de la velocidad, mostradas en la parte inferior de la figura, se sigue una dinámica compleja descrita por la suma de muchas frecuencias. Un análisis similar puede hacerse para el caso en que $F/J = 1$ para $U/J = 1.5$ y $U/J = 10$, según mostramos en la figura 5.13. Por otro lado, fijando $F/J = 10$ según mostramos en la figura 5.14, se distinguen oscilaciones moduladas en el régimen de $U/J = 0.4$. El análisis de Fourier de la velocidad revela la coexistencia de las frecuencias de revivals y de Bloch en la dinámica. Sin embargo, para $U/J = 1.5$, la frecuencia de Bloch presenta un splitting debido a las interacciones, indicando su progresiva supresión en el espectro, como se confirma en el caso fuertemente interactuante dado por $U/J = 10$.

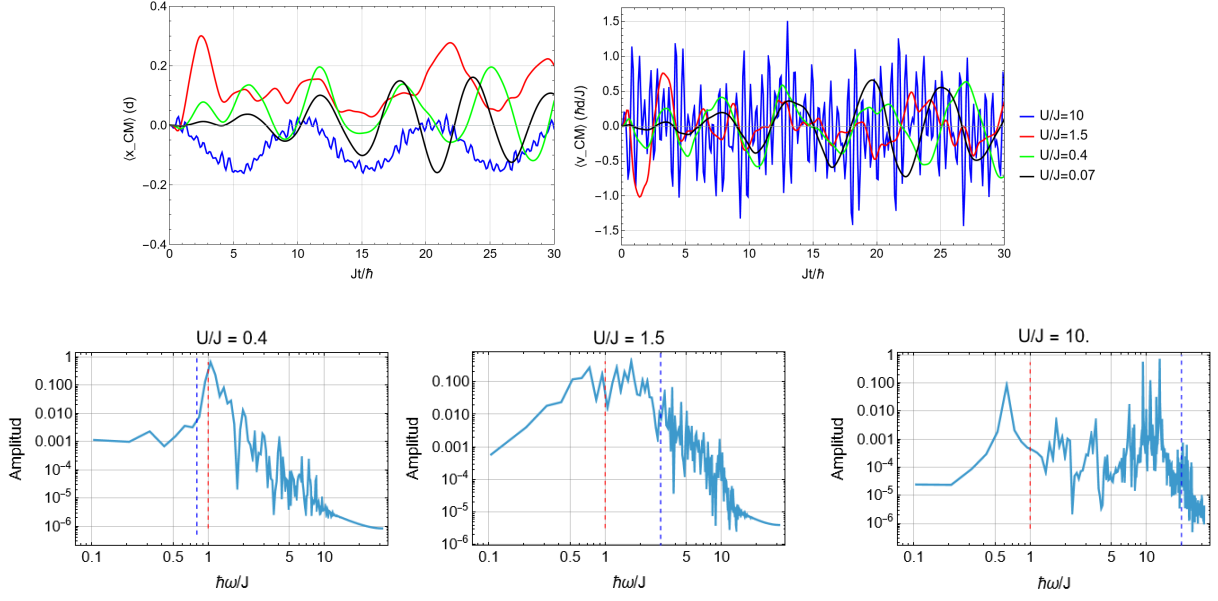


Figura 5.13: Arriba: evolución de $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (izquierda) y $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (derecha) para $F/J = 1$ y los valores de U/J analizados. Se muestra la evolución hasta un tiempo $\tilde{T}_{max} = 30$, con un paso temporal de $\Delta\tilde{t} = 0.08$. Abajo: transformadas de Fourier de $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ para los valores de U/J estudiados. Las líneas punteadas roja y azul muestran los valores teóricos de las frecuencias $\tilde{\omega}_B$ y $\tilde{\omega}_U$, respectivamente. La resolución en frecuencia empleada es $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

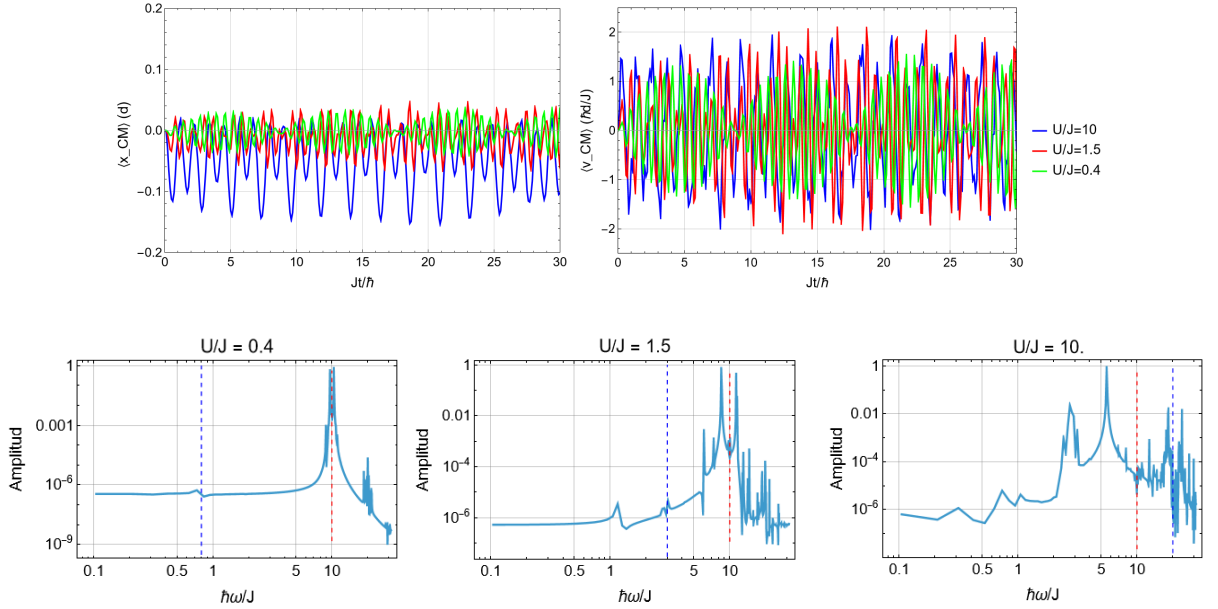


Figura 5.14: Arriba: evolución de $\langle \hat{x}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (izquierda) y $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ (derecha) para $F/J = 10$ y los valores de U/J analizados. Se muestra la evolución hasta un tiempo $\tilde{T}_{max} = 30$, con un paso temporal de $\Delta\tilde{t} = 0.08$. Abajo: transformadas de Fourier de $\langle \hat{v}_{CM}(\tilde{t}) \rangle$ para los valores de U/J estudiados. Las líneas punteadas roja y azul muestran los valores teóricos de las frecuencias $\tilde{\omega}_B$ y $\tilde{\omega}_U$, respectivamente. La resolución en frecuencia empleada es $\Delta\tilde{\omega} = 0.1$.

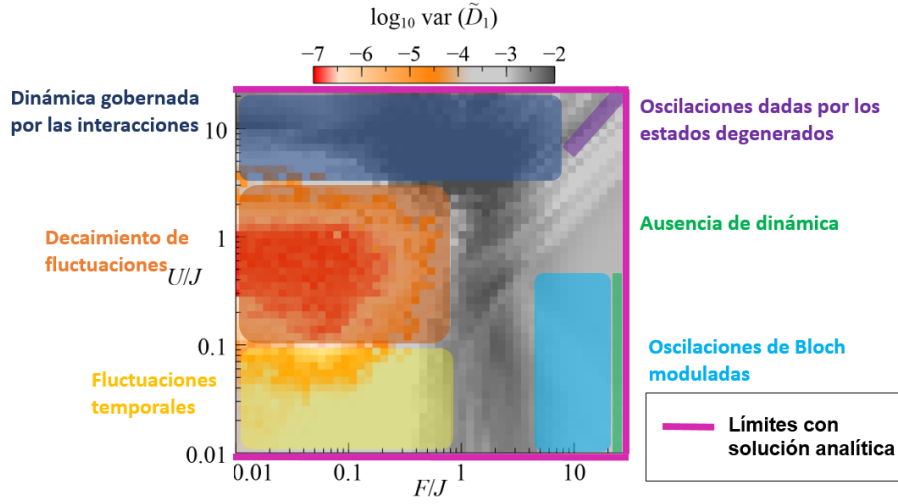


Figura 5.15: Representación esquemática de las zonas con dinámicas características identificadas sobre el mapa de fases para un sistema de densidad $\bar{n} = 1/2$, con $N = 7$ bosones distribuidos en $L = 14$ sitios.

5.4. Características principales

Con todo, caracterizamos los principales regímenes en cada región del espacio de parámetros en base al comportamiento dinámico de los observables estudiados. Resumimos los principales comportamientos dinámicos observados, marcando, de forma muy aproximada, las zonas en los que se dan en la figura 5.15, de modo que aquellas regiones en las que no se marcan ninguno en particular, se corresponden con las zonas que deben corresponderse a regiones de transición entre distintos comportamientos. Se marcan los límites en los que $U/J = 0$, $U/J \rightarrow \infty$ y $F/J \rightarrow \infty$ como aquellos con solución analítica (morado).

La región etiquetada en amarillo es aquella en la que hemos observado una dinámica de fluctuaciones temporales en nuestros observables, y, de manera aproximada, abarca los límites $0.01 \leq U/J \lesssim 0.1$ y $0.01 \leq F/J \lesssim 1$. La región anaranjada muestra aquellos puntos en los que se han observado una rápida homogeneización del estado de Fock, convergiendo a densidad homogénea y cubre aproximadamente $0.01 \leq F/J \lesssim 0.7$ y $0.1 \leq U/J \lesssim 3$, mostrando una concordancia con las manifestaciones dinámicas de la fase caótica de acuerdo con otros trabajos [11]. Marcamos el régimen en el que las oscilaciones de Bloch moduladas por las interacciones son visibles en color azul celeste, presente para valores de F/J suficientemente grandes respecto de U/J . Para $U/J \gtrsim 3$ se representa, en azul oscuro, la región donde la dinámica está gobernada por las interacciones. En la línea oblicua lila, marcamos aquellos casos en los que $U \approx F \gg J$ de modo que la dinámica está dada por la rotura de la degeneración a primer orden del estado inicial debido al tunneling, propiciando una evolución oscilatoria dada fundamentalmente por $\tilde{\omega}_1$ y $\tilde{\omega}_2$ y, por último, la región verde, situada para $F \gg J, U$, cubre la región en la que el sistema inicial se aproxima a ser autoestado del sistema propiciando que la evolución temporal se congele en este estado.

Capítulo 6

Conclusiones

Se ha abordado el estudio de la dinámica de un sistema de bosones interactuantes en una red óptica sometida a un campo externo que obedece el modelo de Bose-Hubbard, descrito por el hamiltoniano (2.26), mediante el cálculo numérico de la evolución temporal de observables de interés como son la densidad de partículas por sitio, la posición y la velocidad del centro de masas, tomando un estado inicial de Fock dado por (5.1). El propósito inicial era hacer un estudio sistemático de la dinámica como función de la interacción entre partículas y de la intensidad de campo, y en particular ver la influencia de la fase caótica que, bajo ciertas condiciones, exhibe el hamiltoniano.

En primer lugar se introdujo el modelo de Bose-Hubbard en ausencia de campo y se discutieron los principales rasgos que definen la fase caótica del modelo dentro de un rango de valores definido por los parámetros de tunneling y de interacción, poniendo énfasis en la persistencia de esta fase incluyendo en nuestro modelo al campo externo. De este modo, presentamos un conjunto específico de matrices (GOE), incluida en la teoría de matrices aleatorias, como principal herramienta para comprobar la existencia del mencionado caos cuántico. Mediante el cálculo de la solución del modelo tight-binding para una partícula, demostramos cómo la dinámica generada se ve afectada por la introducción de un campo estático pudiendo comprobar que propicia un movimiento oscilatorio bien definido en los observables que la describen, las oscilaciones de Bloch, comprobándose cómo estas oscilaciones se ven afectadas cuando las interacciones toman relevancia en la dinámica. Asumiendo que el campo dominase sobre el resto de parámetros, derivamos expresiones para unas frecuencias adicionales, determinadas por la interacción, que modulan estas oscilaciones. Para la implementación de la evolución temporal de observables en Mathematica, nos basamos en la descripción del procedimiento basado en los polinomios de Chebyshev.

Respecto a la dinámica manifestada por los observables para nuestro estado inicial, y según resumimos en la figura 5.15, podemos establecer la siguiente síntesis. Como era esperable por el modelo teórico y, según mostramos en las figuras 5.6, 5.7 y en los paneles D y H de la figura 5.4, las oscilaciones de Bloch moduladas han sido observadas en todos los casos estudiados para $1 \lesssim F/J < 10$ manteniendo interacciones muy débiles frente al campo, hasta que el splitting causado por estas en la frecuencia de Bloch (según mostramos en la parte inferior de la figura 5.7) es lo suficientemente notable y salimos del régimen en el que las oscilaciones de Bloch son visibles. Como mostramos en la figura 5.3, comprobamos

cómo la dinámica se congela en el estado inicial a medida que aumentamos el valor de F/J alcanzando el límite $F \gg J, U$, en donde nuestro estado inicial se aproxima a ser autoestado del sistema.

Para nuestro estado inicial, la rotura de la degeneración a primer orden explica la oscilatoria evolución temporal descrita por las partículas, determinada por las frecuencias (5.12) y (5.13) y según mostramos en 5.11, en el régimen en que $F \approx U \gg J$.

Adicionalmente, hemos comprobado numéricamente y demostrado analíticamente la evolución simétrica de la densidad de ocupación $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ respecto del centro de la red en los casos en los que $F = 0$ (ver figura 5.9) o bien $U = 0$ (ver figura 5.3).

Por último, situándonos en valores del campo $F/J \lesssim 1$, las densidades decaen a un valor fijo propiciando una configuración final de ocupación homogénea para $0.15 \leq U/J \lesssim 3$, donde hemos de hallar rasgos indicativos de la existencia de la fase caótica. Este comportamiento está en acuerdo con otros trabajos [11], en los que se estudian las manifestaciones dinámicas de la fase caótica, y se observa cómo las densidades se equilibran rápidamente con el tiempo hacia el valor de la densidad del sistema, presentando fluctuaciones temporales que se reducen con el tamaño del sistema, lo que nos permite identificar el régimen caótico para nuestro estudio. Se han realizado estudios experimentales [13] en donde se ha intentado caracterizar esta fase mediante otros estados iniciales, como estados homogéneos de densidad cercana a la unidad, donde se pudo observar también un decaimiento irreversible de las oscilaciones de Bloch.

Conclusions

In this work, we have studied the dynamics of a system of interacting bosons in an optical lattice subjected to a static external field, governed by the Bose-Hubbard model as described by Hamiltonian (2.26). The analysis was carried out through numerical calculations of the time evolution of relevant physical observables, such as the site-resolved particle density, the position, and the velocity of the center of mass, starting from a Fock state given by (5.1). The initial goal was to perform a systematic study of the dynamics as a function of both the interaction strength and the external field amplitude, with particular emphasis on understanding the influence of the chaotic phase that the Hamiltonian exhibits under certain conditions.

We began by introducing the Bose-Hubbard model in the absence of an external field and discussed the main features that characterize the chaotic phase of the model within a range of values defined by the tunneling and interaction parameters. Special emphasis was placed on the persistence of this phase when an external field is included in the model. In this context, we presented a specific class of matrices, namely those belonging to the Gaussian Orthogonal Ensemble, within the framework of random matrix theory, as the primary tool for verifying the presence of quantum chaos. By computing the solution of the tight-binding model for a single particle, we showed how the introduction of a static field modifies the resulting dynamics, giving rise to well-defined oscillatory motion in certain observables, known as Bloch oscillations. We also demonstrated how these oscillations are affected when interactions become significant. Under the assumption that the field dominates over other parameters, we derived expressions for additional interaction-dependent frequencies that modulate the Bloch dynamics. The time evolution of observables was implemented in Mathematica using a numerical procedure based on Chebyshev polynomial expansion.

Regarding the dynamics exhibited by the observables for our chosen initial state, and as summarized in Fig 5.15, the following conclusions can be drawn. As expected from the theoretical model, and as shown in Figs. 5.6, 5.7, and in panels D and H of 5.4, modulated Bloch oscillations were observed in all the studied cases for $1 \lesssim F/J < 10$, where the interactions remain weak compared to the external field. These oscillations persist until the interaction-induced splitting in the Bloch frequency, illustrated in the lower panels of Fig 5.7, becomes sufficiently pronounced, pushing the system out of the regime in which these oscillations remain visible. As shown in Fig.5.3, we also verify that the dynamics become frozen in the initial state as the value of F/J increases, eventually reaching the limit $F \gg J, U$, in which the initial Fock state approaches an eigenstate of the system.

For our initial state, in the regime where $F \approx U \gg J$, the first-order lifting of degeneracy explains the oscillatory time evolution exhibited by the particles, governed by the frequencies

(5.12), (5.13) as shown in 5.11. Additionally, we have numerically verified and analytically demonstrated the symmetric evolution of the occupation density, $\langle \hat{n}_j(\tilde{t}) \rangle$ with respect to the center of the lattice in the cases where $F = 0$ (Fig. 5.9), or $U = 0$ (Fig. 5.3).

Finally, focusing on values of the field $F/J \lesssim 1$, the densities begin to decay toward a fixed value, leading to a final homogeneous occupation configuration for $0.15 \leq U/J \lesssim 3$, where we expect to identify features indicative of the existence of the chaotic phase. This behavior is consistent with previous works [11], where the dynamic manifestations of the chaotic phase were studied, showing how the densities rapidly equilibrate over time toward the system's average density, exhibiting temporal fluctuations that decrease with system size, which allows us to identify the chaotic regime for our study. Experimental studies [13] have also been conducted to characterize this phase using other initial states, such as homogeneous states with densities close to unity, where an irreversible decay of Bloch oscillations was likewise observed.

Apéndice A

Simetría de paridad en $\langle \hat{n}_j(t) \rangle$ con $F \neq 0$.

La descripción de un sistema de N bosones interactuantes en una red unidimensional de L sitios, está dada por el hamiltoniano de Bose-Hubbard,

$$H = \underbrace{-J \sum_{j=1}^{L-1} (b_j^\dagger b_{j+1} + h.c.)}_{H_{tun}} + \underbrace{\frac{U}{2} \sum_{j=1}^L \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1)}_{H_{int}} + \underbrace{F \sum_{j=1}^L \left(j - \frac{L+1}{2}\right) \hat{n}_j}_{H_{tilt}}, \quad (\text{A.1})$$

Consideremos dos operaciones de simetría: la transformación de paridad, en la que los operadores destrucción se transforman como

$$\hat{\Pi} b_j \hat{\Pi}^\dagger = b_{L-j+1}, \quad (\text{A.2})$$

y la transformación bipartita, en la que

$$\hat{B} b_j \hat{B}^\dagger = (-1)^j b_j, \quad (\text{A.3})$$

con $\hat{B}$ unitario.

En este apéndice, se demuestra que para un caso general en el que $U = 0$, la evolución temporal de $\langle \hat{n}_j \rangle$ en un estado inicial con simetría de paridad,

$$\hat{\Pi} |\psi\rangle = |\psi\rangle, \quad (\text{A.4})$$

es simétrica respecto del centro de la red, pese a que el campo F rompe de forma explícita dicha simetría en el hamiltoniano. Si transformamos el hamiltoniano, al que por conveniencia le añadimos el subíndice asociado al campo, H_F , bajo la acción de $\hat{B}$, obtenemos

$$\hat{B} H_F \hat{B}^\dagger = J \sum_{j=1}^{L-1} (b_j^\dagger b_{j+1} + b_{j+1}^\dagger b_j) + F \sum_{j=1}^L \left(j - \frac{L+1}{2}\right) \hat{n}_j \equiv -H_{-F}. \quad (\text{A.5})$$

Por otra parte, si transformamos el hamiltoniano bajo la acción de $\hat{\Pi}$, se tiene

$$\begin{aligned} \hat{\Pi} H_F \hat{\Pi}^\dagger &= -J \sum_{j=1}^{L-1} (b_{L-j+1}^\dagger b_{L-j} + b_{L-j}^\dagger b_{L-j+1}) + F \sum_{j=1}^L \left(j - \frac{L+1}{2}\right) \hat{n}_{L-j+1} \\ &= -J \sum_{s=1}^{L-1} (b_{s+1}^\dagger b_s + b_s^\dagger b_{s+1}) - F \sum_{j'=1}^L \left(j' - \frac{L+1}{2}\right) \hat{n}_{j'} \\ &= H_{-F}, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

donde se han implementado los cambios de índices $s \equiv L - j$ y $j' \equiv L - j + 1$, de modo que F rompe de manera explícita la simetría de paridad del hamiltoniano. Así, el resultado de aplicar ambas transformaciones es

$$\hat{\Pi} \hat{B} H_F (\hat{\Pi} \hat{B})^\dagger = -H_F. \quad (\text{A.7})$$

Por otro lado, para un estado de Fock $|\psi\rangle$ en la base de sitios con simetría de paridad, y sabiendo que la transformación bipartita actúa sobre éste como

$$\hat{B}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle, \quad (\text{A.8})$$

donde el signo viene dado en función del número total de partículas así como de los modos que ocupan, la densidad evoluciona en función de F como

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{n}_j(t)|\psi\rangle &= \langle\psi|\exp(+iH_F t/\hbar)\hat{n}_j\exp(-iH_F t/\hbar)|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\hat{\Pi}\hat{B}\exp(+iH_F t/\hbar)\hat{n}_j\exp(-iH_F t/\hbar)(\hat{\Pi}\hat{B})^\dagger|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\exp(-iH_F t/\hbar)\hat{\Pi}\hat{B}\hat{n}_j(\hat{\Pi}\hat{B})^\dagger\exp(+iH_F t/\hbar)|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\exp(-iH_F t/\hbar)\hat{n}_{L-j+1}\exp(+iH_F t/\hbar)|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Como sabemos, el valor esperado de cualquier observable es siempre real. Tomando el complejo conjugado de (A.9) y dado que las matrices de H_F y de $\hat{n}_j$ son reales en la base de Fock de sitios, podemos concluir que

$$\langle\hat{n}_j(t)\rangle = \langle\hat{n}_{L-j+1}(t)\rangle \quad (\text{A.10})$$

de modo que la evolución temporal de la densidad obedece la simetría de paridad.

Bibliografía

- [1] A. R. Kolovsky and H. J. Korsch, *Bloch oscillations of cold atoms in optical lattices*, International Journal of Modern Physics B **18**, 1235 (2004).
- [2] A. R. Kolovsky, *New Bloch Period for Interacting Cold Atoms in 1D Optical Lattices*, Physical Review Letters **90**, 213002 (2003).
- [3] C. Gross and I. Bloch, *Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices*, Science **357**, 995 (2017).
- [4] C. Gross and W. Bakr, *Quantum gas microscopy for single atom and spin detection*, Nature Physics **17**, 1316 (2021).
- [5] I. Bloch, J. Dalibard, and S. Nascimbène, *Quantum simulations with ultracold quantum gases*, Nature Physics **8**, 267 (2012).
- [6] M. Greiner and S. Fölling, *Condensed-matter physics: optical lattices.*, Nature **453**, 736 (2008).
- [7] P. M. Preiss, R. Ma, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, P. Zupancic, Y. Lahini, R. Islam, and M. Greiner, *Strongly correlated quantum walks in optical lattices*, Science **347**, 1229 (2015).
- [8] T. Hartmann, F. Keck, H. J. Korsch, and S. Mossmann, *Dynamics of Bloch oscillations*, New Journal of Physics **6**, 2 (2004).
- [9] L. Pausch, E. G. Carnio, A. Rodríguez, and A. Buchleitner, *Chaos and Ergodicity across the Energy Spectrum of Interacting Bosons*, Physical Review Letters **126**, 150601 (2021).
- [10] L. Pausch, E. G. Carnio, A. Buchleitner, and A. Rodríguez, *Chaos in the Bose-Hubbard model and Random Two-Body Hamiltonians*, New Journal of Physics **23**, 123036 (2021).
- [11] L. Pausch, E. G. Carnio, A. Buchleitner, and A. Rodríguez, *How to seed ergodic dynamics of interacting bosons under conditions of many-body quantum chaos*, Reports on Progress in Physics **88**, 057602 (2025).
- [12] P. M. Clavero and A. Rodríguez, *Characterization of the chaotic phase in the tilted Bose-Hubbard model*, Physical Review E **111**, 064214 (2025).
- [13] F. Meinert, M. J. Mark, E. Kirilov, K. Lauber, P. Weinmann, M. Gröbner, and H. C. Nägerl, *Interaction-induced quantum phase revivals and evidence for the transition to the quantum chaotic regime in 1D atomic bloch oscillations*, Physical Review Letters **112**, 193003 (2014).

- [14] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Mécanique quantique - Tome 3* (EDP Sciences, Paris, 2020).
- [15] C. Kittel and D. F. Holcomb, *Introduction to Solid State Physics*, American Journal of Physics **35**, 547 (1967).
- [16] K. V. Krutitsky, *Ultracold bosons with short-range interaction in regular optical lattices*, Physics Reports **607**, 1 (2016).
- [17] F. Haake, S. Gnutzmann, and M. Kuś, in *Quantum Signatures of Chaos*, fourth ed., edited by H. Haken (Springer International Publishing, Berlin, 2018).
- [18] A. M. Kaufman, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, R. Schittko, P. M. Preiss, and M. Greiner, *Quantum thermalization through entanglement in an isolated many-body system*, Science **353**, 794 (2016).
- [19] A. Buchleitner and A. R. Kolovsky, *Interaction-Induced Decoherence of Atomic Bloch Oscillations*, Physical Review Letters **91**, 253002 (2003).
- [20] A. R. Kolovsky and A. Buchleitner, *Quantum chaos in the Bose-Hubbard model*, Europhysics Letters (EPL) **68**, 632 (2004).
- [21] B. Longstaff and E.-M. Graefe, *Bloch oscillations in a Bose-Hubbard chain with single-particle losses*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **53**, 195302 (2020).
- [22] M. Glück, *Wannier–Stark resonances in optical and semiconductor superlattices*, Physics Reports **366**, 103 (2002).
- [23] E. Board and R. Beig, in *Computational Many-Particle Physics*, edited by H. Fehske, R. Schneider, and A. Weiße (Springer, Heidelberg, 2008), Vol. 739.
- [24] A. Weiße, G. Wellein, A. Alvermann, and H. Fehske, *The kernel polynomial method*, Reviews of Modern Physics **78**, 275 (2006).