

00382
4



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

**Propiedades Estadísticas de
Sistemas Semiclásicos con
pocas Partículas.**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO
DE

DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

P R E S E N T A :

Hugo Hernández Saldaña

Directores de Tesis:

Dr. François A. Leyvraz Waltz

Dr. Felix Izrailev Mikhailovich

2002

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas
UNAM a difundir en formato electrónico el
contenido de mi trabajo receptor

NOMBRE:

Hugo Hernández Saldaña

FECHA:

21 Noviembre 2002

FIRMA:

Hugo Hernández Saldaña



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Índice General

Introducción	v
1 Antecedentes	1
2 Comportamiento Clásico del Sistema	5
2.1 El modelo	5
2.1.1 El Hamiltoniano	5
2.1.2 Dinámica Clásica del Hamiltoniano	6
2.2 Análogos Clásicos de Cantidades Cuánticas	8
2.2.1 Eigenfunción Clásica	8
2.2.2 Ejemplos de CEF en una dimensión	17
2.2.3 Análogos Clásicos de la LDOS y de \hat{n}_s	21
3 El Hamiltoniano Cuántico	25
3.1 Cálculo de la Matriz Hamiltoniana	25
3.2 Convergencia del Cálculo Numérico	28
3.2.1 Espectro Energético	28
3.3 Medida de las Fluctuaciones	35
3.3.1 Rectificación de las Eigenfunciones	35
3.3.2 Un Modelo de Matrices Aleatorias para las Fluctuaciones	42
4 Correspondencia Clásico-Cuántica	45
4.1 Los Hamiltonianos Numéricos	45
4.2 Eigenfunciones de Pocos Cuerpos	46
4.2.1 Razón de Participación	46
4.2.2 Correspondencia Clásico-Cuántica	51

5	Fluctuaciones	73
5.1	Fluctuaciones de H_1 y H_4	73
5.1.1	Fluctuaciones Globales	74
5.1.2	Fluctuaciones locales	79
5.2	Hamiltonino Caótico <i>vs</i> Hamiltoniano Caótico	88
6	Número de ocupación	101
6.1	Definición y Cálculo de $n(\epsilon_s)$	102
6.2	Resultados Individuales y Promedio	103
6.3	Fluctuaciones	111
6.4	Factor de Boltzmann	111
7	Conclusiones	119
A	Parámetros Permitidos	123
B	Identidades Matemáticas	125
B.1	Demostración de la Ec.(2.17)	125
B.2	Cálculo de la integral angular d -dimensional	126
	Bibliografía	128

RESUMEN

En este trabajo analizamos las propiedades estadísticas de eigenfunciones de sistemas de pocos cuerpos, centrándonos en la distribución que es el límite clásico de las intensidades promediadas y en las fluctuaciones alrededor de ésta. Se discute la definición correcta de esta distribución clásica y se analizan algunas de sus propiedades aplicadas a sistemas de osciladores cuárticos acoplados de dos y cuatro cuerpos. Se contrasta el límite clásico con las intensidades cuánticas dando una buena correspondencia clásico-cuántica conforme subimos en la energía. Ambos resultados, el clásico y el cuántico fueron hallados numéricamente. Las fluctuaciones de las eigenfunciones cuánticas se analizan rectificándolas con su distribución clásica, siendo ésta la única manera de encontrar propiedades universales en las fluctuaciones. Se encontró que la distribución de amplitudes rectificadas son, en buena aproximación, Gaussianas y de ancho unidad. Este cálculo no requiere del ajuste de ningún parámetro adicional, es decir que este ancho es una propiedad clásica. Se propone un modelo de matrices aleatorias para el cual la intensidad promedio fue tomada como restricción y tienen el papel de la distribución clásica de las intensidades. Este modelo da distribuciones Gaussianas de ancho unidad bajo consideraciones de máxima entropía. En la última parte del trabajo se desarrolla el análisis de la estadística de número de ocupación y su correspondiente límite clásico para el caso de cuatro partículas aisladas. Para este último, se encontró una buena correspondencia con la distribución de Boltzmann, un hecho remarcable considerando que se trata de un sistema aislado y que corresponde al ensemble microcanónico.

ABSTRACT

In this work we analyzed the statistical properties of the eigenfunctions of few body systems. Mainly paid attention to the classical distribution which gives the average shape of quantum intensities and to the fluctuations around it. We discuss the correct definition and some properties, in particular systems, of this distribution. The systems considered were coupled quartic oscillators of two and four bodies. Quantum classical correspondence was checked between the quantum intensities and the classical distribution. As expected the fit improves as the semiclassical limit is reached. Quantum and classical results were found numerically. Quantum fluctuations in eigenfunctions were analyzed after unfolding the quantum function with the classical distribution, this being the only way to find universal properties in fluctuations. Gaussian distribution of width unity were found for the unfolded amplitudes, no extra parameter being needed. This means that such a width is a classical property. A Random Matrix Model was proposed for which the average intensity was taken as a constraint, playing the role of the classical distribution intensities. Such a model gives Gaussian distribution in amplitudes of width unity, from maximum entropy considerations. In the last part we give the analysis of occupation number statistics and of their classical limit in the four body case. For this last, a good correspondence with the Boltzmann distribution was found, a remarkable fact considering that this is an isolated systems and corresponds to the micro-canonical ensemble.

Introducción

Con el cambio de siglo se está desarrollando un cambio significativo en el estudio de las manifestaciones cuánticas del caos clásico. Dos han sido los enfoques más exitosos en aportar luz sobre dichas manifestaciones: La teoría de matrices aleatorias (RMT por sus siglas en inglés) [1, 2, 3, 4, 5], por un lado, y las teorías semi-clásicas por el otro [6, 7, 8, 9, 24]. Sin embargo, el éxito de ambos enfoques se ha restringido, principalmente, al estudio de las propiedades de *fluctuación de las energías de sistemas muy complejos como los núcleos atómicos, billares caóticos, puntos cuánticos, estados de Rydberg en moléculas u osciladores anarmónicos, entre otros sistemas*. No obstante que aún falta mucho en el entendimiento y la descripción del espectro de sistemas con una dinámica mixta, el estudio de las eigenfunciones de sistemas con límite clásico caótico había quedado relegado y sólo hasta los últimos años se recobró el interés.

El estudio de las eigenfunciones cuánticas (que denominaremos QEF por sus siglas en inglés, *Quantum Eigenfunction*, o simplemente EF) ha sido poco desarrollado. Una de las razones para ello es la fuerte dependencia que tienen sus propiedades en la base en la que se escribe la matriz hamiltoniana. Empero, la importancia de su estudio es más que evidente.

Los problemas que se presentan para explicar propiedades de átomos, moléculas, puntos cuánticos y efectos de localización y delocalización en sistemas cuánticos o mesoscópicos han renovado los esfuerzos para el estudio de las QEF [26, 43, 16], además del interés teórico inherente a su comprensión. Hasta ahora se han realizando algunos estudios en modelos de matrices aleatorias en banda y con algunas otras modificaciones[53] para modelar estos sistemas.

Para bases específicas, dos han sido las vertientes más importantes de desarrollo. Por un lado, el estudio de las eigenfunciones en el espacio fase y por el otro la base de partícula independiente. La primera línea tiene el

estímulo de su relación directa con la dinámica clásica y mucho del trabajo semi-clásico se ha desarrollado especialmente con las distribuciones de Wigner y Husimi. Los billares han sido de los modelos mas usados para entender las propiedades de las eigenfunciones [45, 44]. La segunda ha sido, desde el inicio de la mecánica cuántica, la más importante y sus aplicaciones han sido muy amplias y útiles [18] en física nuclear, atómica y molecular.

El estudio de estados que se desvían significativamente de los promedios, particularmente aquéllos cicatrizados por órbitas periódicas, variedades parabólicas, etc, [23, 22, 25] (denominados *scars*), ha sido un área muy importante de desarrollo [21, 24]. Pese a estos esfuerzos, aún queda mucho por entender sobre la estructura y fluctuaciones de las funciones de onda de sistemas con una dinámica caótica en el límite clásico. De esta manera, el presente trabajo se encuentra en este marco de renovado interés abordando, de la manera más general posible, algunas propiedades de las QEFs, tanto en el promedio como en las fluctuaciones, para un sistema dinámico específico, más que para un modelo de matrices aleatorias. Además, hacemos uso del límite clásico de las de las intensidades de las QEFs en el espacio de energía en el sentido propuesto por Berry [12] y desarrollado por Benet *et al* [36] y Luna *et al* [37] para estudiar la correspondencia clásico-cuántica y las fluctuaciones alrededor de dicho límite clásico. Una parte fundamental en cuanto al estudio de las fluctuaciones de las eigenfunciones es que para obtener resultados *universales*, independientes de la parte secular, se requiere de rectificarlas de alguna manera. Esto puede hacerse calculando su promedio, pero, al igual que en el caso de fluctuaciones en la energía es mejor hacer uso de límite clásico correspondiente. En el caso de energías se usa la fórmula de Weyl para la densidad, en este trabajo se hace uso del equivalente clásico de la eigenfunción y de alguna manera constituye su densidad clásica. Así, los resultados obtenidos se pueden comparar entre varios sistemas, pues ya no dependerán de la parte secular.

Por otra parte, en muchos de los sistemas cuánticos complejos sobre los que se está trabajando experimentalmente [16, 17, 29], por ejemplo átomos, aunque poseen muchas partículas, su dinámica efectiva se realiza con las pocas partículas que se encuentran en la capa de valencia. Por lo tanto, estudiar esta dinámica efectiva es de particular interés [16, 42].

La tesis está organizada de la siguiente manera: en el Capítulo 1 se hace una breve reseña de los antecedentes en el estudio de las propiedades de las Eigenfunciones de sistemas cuánticos. En el Capítulo 2 se presenta el modelo sobre el cual trabajaremos, sus características clásicas y sus ventajas

para la solución numérica. En ese mismo capítulo se definen los análogos clásicos para las intensidades de las eigenfunciones, densidad local de estados y estadística de número de ocupación. Los resultados de la solución numérica del hamiltoniano cuántico se presentan en el Capítulo 3, así como las propiedades estadísticas que siguen los espectros energéticos. También se explica en detalle el proceso que se sigue para el estudio de las fluctuaciones de las eigenfunciones alrededor de su análogo clásico. En el Capítulo 4 se exhiben los resultados numéricos de la correspondencia clásico-cuántica para las QEFs, tanto para dos como para cuatro cuerpos. Las fluctuaciones que presentan alrededor de su límite clásico se explican en el Capítulo 5. En el Capítulo 6 damos los resultados para la estadística de número de ocupación, su comportamiento promedio y sus fluctuaciones. El último Capítulo contiene las conclusiones de ésta tesis. En los apéndices se abunda y complementa el material presentado en el cuerpo de la tesis.

Capítulo 1

Antecedentes

El estudio de las manifestaciones clásicas en sistemas cuánticos es muy añejo y desde entonces el tratamiento de sistemas un poco más complicados que el átomo de hidrógeno marcó nuevos retos. Desde el nacimiento de las reglas de cuantización de Bohr para las variables de acción hubo problemas, pues, para un sistema integrable, la integral sobre una trayectoria que define la variable de acción siempre existe, pero hay sistemas para los cuales esa integral no es fácilmente calculable o no existe, como apuntó Einstein en 1917 [30]. Este problema en la mecánica clásica no se había resuelto y faltaba tiempo para darle solución y forma parte del siguiente capítulo en el estudio de sistemas no lineales. Así, en la primera mitad del siglo pasado, no sólo se trataba de entender la nueva mecánica, la mecánica cuántica, sino que la propia mecánica clásica tenía sus propios retos por ser descifrados. La solución al problema de cuantización sobre las variables de acción perdió relevancia con el advenimiento de las mecánicas cuánticas de Heisenberg y Schrödinger.

Un entendimiento de la naturaleza de la dinámica clásica de sistemas no integrables fue posible con el advenimiento del teorema KAM, por Kolmogorov, Arnold y Moser [33, 32], a finales de los 50's y principios de los 60's. Mucho trabajo se ha desarrollado desde entonces en el campo para sistemas independientes del tiempo, así como dependientes de él, de sistemas ligeramente perturbados a completamente caóticos [7, 32, 34]. Poco tiempo después de establecido el teorema KAM, la búsqueda de las manifestaciones del caos clásico en mecánica cuántica se convirtió en una exitosa área de investigación, encontrándose varias propiedades universales en las fluctuaciones de los espectros de operadores cuánticos, en particular del Hamiltoniano. Las dos teorías que han dado resultados han sido la teoría de matrices alea-

torias (RMT) [2, 3, 4, 5] y las teorías semi-clásicas basadas en la fórmula de la traza al estilo Selberg [6, 10, 11]. La RMT ha sido particularmente exitosa para entender propiedades de fluctuación en un rango increíblemente amplio, que va desde la distribución de resonancias en núcleos atómicos hasta la distribución de tiempos entre micro-buses en la ciudad de Cuernavaca [61]. La segunda teoría tiene orígenes más físicos y aunque rápidamente se vuelve muy complicada, ha ayudado a entender más profundamente las propiedades de estos sistemas en términos de sus órbitas periódicas.

El estudio de las eigenfunciones de sistemas cuánticos ha sido menos abordado en la literatura debido al problema inherente de que sus propiedades dependen de la base específica que se seleccione para su estudio. En el caso de sistemas integrables su estudio es más o menos claro en la aproximación WKB (por G. Wentzel, H.A. Kramers y L. Brillouin), siendo el principal problema el estudio del comportamiento de las QEF's en las cáusticas del sistema [15, 12]. En este caso se puede definir una base de partícula independiente que sea solución al problema completo como sus productos directos. Para sistemas no integrables, no necesariamente con dinámica caótica, una solución aproximada es el uso de una base de partícula independiente adecuadamente seleccionada y el uso de un principio de autoconsistencia y/o variacional. Los métodos de Hartree y Hartree-Fock [18] en todas sus variedades han sido la herramienta fundamental para mucho del trabajo realizado en la física nuclear, atómica y molecular.

En el caso de sistemas muy complicados o con una dinámica caótica, los modelos de matrices aleatorias han permitido una descripción estadística muy buena de los eigenvalores. Para eigenfunciones, la RMT predice que la distribución de amplitudes de un *ensemble*, digamos de matrices ortogonales, es una distribución Gaussiana y que sus intensidades siguen, por lo tanto, una distribución Porter-Thomas (es decir, una distribución χ^2 con un grado de libertad). Este resultado ha sido *insuficiente para comprender algunos resultados* (Véase, por ejemplo, la referencia [31]).

Por otra parte, los resultados propuestos desde el punto de vista de las teorías semi-clásicas han sido muy importantes, aunque limitados. Los primeros resultados importantes son los teoremas debidos a Schnirelman, Zeldich y Colin de Verdiere [14] que establecen que para un billar caótico bidimensional o en general para un sistema caótico, las eigenfunciones de un operador en su mayoría cubren el espacio fase disponible y en el límite semi-clásico el valor esperado de un operador fijo arbitrario converge al promedio ergódico y microcanónico de la versión clásica del operador (en parte tomado de la refe-

rencia [24]). Sin embargo, el tipo de promedio que se requiere impide obtener información de las EF's individuales. Es importante señalar que la presencia de *scars* en estos sistemas no está prohibida por estos teoremas. Por su parte, Berry [12] y Voros [13] propusieron en 1976 y 77 que las EF's estarían distribuidas más o menos uniformemente sobre el cascarón de energía y que sus fluctuaciones serían al azar. En la Ref [12] Berry propuso que el cascarón de energía del sistema era el único objeto semi-clásico capaz de soportar las eigenfunciones. La formulación matemática y la aplicación de este concepto da sustento a la posibilidad de confirmar el principio de correspondencia de Bohr, para las eigenfunciones, en sistemas cuánticos cuyo límite clásico es caótico. Dicho límite corresponde a las intensidades de la EF cuántica en el espacio de energía y, como objeto clásico, no lleva información sobre la fase cuántica.

Las desviaciones importantes del comportamiento ergódico han sido estudiadas desde la década de los ochentas [20, 21, 24, 23, 25, 22]; especialmente se trató el fenómeno de cicatrización de funciones de onda de sistemas caóticos alrededor de órbitas periódicas inestables, los denominados *scars*.

Desde mediados de la década pasada el estudio más general de las eigenfunciones y la densidad local de estados (LDOS) de sistemas caóticos fue nuevamente impulsado, tanto experimental [16], como numéricamente [43]. Una parte de los estudios busca entender el comportamiento promedio de las eigenfunciones en alguna base particular [43, 37] tratando de encontrar el límite semi-clásico que corresponde al cascarón de energía. Estos resultados provienen del estudio de sistemas dinámicos y no de modelos de matrices aleatorias. Para este último caso existe mucho trabajo desarrollado pero aún no se cuenta con el análogo clásico de sus EF's [26].

La otra parte de nuestro estudio consiste en el análisis de las fluctuaciones de las EF alrededor de su límite clásico. En este campo, poco trabajo sistemático se ha hecho fuera del trabajo de Gribakin *et al* [16] y ésta es la parte novedosa del presente trabajo: iniciar un trabajo sistemático para analizar las fluctuaciones de eigenfunciones de sistemas dinámicos [38].

El comportamiento de las fluctuaciones puede darnos información acerca de la estabilidad estadística del sistema; si las primeras se mantienen más o menos constantes, se dice de que el sistema ha alcanzado una estabilidad estadística. Además de la importancia de su estudio *per se*, esto último es relevante en una serie de investigaciones llevadas a cabo por Izrailev y colaboradores([26] y referencias en él) en matrices en banda y cadenas de espines [62], donde encuentran un símil a la termalización en sistemas aisla-

dos de pocos cuerpos que han alcanzado la estabilidad estadística. En este trabajo presentaremos resultados que ayuden a entender cuál es el comportamiento de dichas fluctuaciones en sistemas dinámicos en el límite semi-clásico. Además se puede averiguar cuál es el papel que la caoticidad y la ergodicidad juegan en las propiedades de estos sistemas.

Capítulo 2

Comportamiento Clásico del Sistema

2.1 El modelo

2.1.1 El Hamiltoniano

Para el estudio de las propiedades estadísticas se eligió un hamiltoniano de partículas fermiónicas interactuantes a través de osciladores no lineales en una dimensión y sin espín. La razón de elegir un sistema fermiónico es que deseamos estudiar estados en el régimen semi-clásico, y ésta es la única clase de simetría que permite alcanzar tal límite rápidamente.

El hamiltoniano del sistema es

$$H = \sum_{i=1}^{N_p} \left(\frac{1}{2m} p_i^2 + \alpha x_i^4 \right) + \beta \sum_{1 \leq i < j \leq N_p} x_i^2 x_j^2 + \gamma \sum_{1 \leq i < j \leq N_p} (x_i^3 x_j + x_i x_j^3), \quad (2.1)$$

donde α, β y γ son parámetros reales y N_p es el número de partículas en una dimensión¹. Se utilizarán unidades tales que $m = \hbar = 1$. Este hamiltoniano es el mismo que se usó en las referencias [36, 40] con $N_p = 2$. Separaremos el potencial de la siguiente manera: $V(\mathbf{x}) = V_0(\mathbf{x}) + \tilde{V}(\mathbf{x})$, siendo $V_0(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N_p} \alpha x_i^4$ el potencial de partícula independiente y

$$\tilde{V}(\mathbf{x}) = \beta \sum_{1 \leq i < j \leq N_p} x_i^2 x_j^2 + \gamma \sum_{1 \leq i < j \leq N_p} (x_i^3 x_j + x_i x_j^3) \quad (2.2)$$

¹Se realizó el estudio para dos y cuatro partículas.

es la interacción; \mathbf{x} representa el conjunto de coordenadas $\{x_1, \dots, x_{N_p}\}$. Adicionalmente, denominaremos al hamiltoniano de partícula independiente como $h^0(p_i, x_i) = \frac{1}{2m}p_i^2 + \alpha x_i^4$, donde el número de partícula se identifica por el subíndice en las variables. La dinámica del sistema, en general, es caótica. Este hamiltoniano tiene además la virtud de ser escalable, esto es, $H(\lambda^{\frac{1}{2}}p, \lambda^{\frac{1}{4}}x) = \lambda H(p, x)$, lo que facilita el número de cálculos a realizar y garantiza que la dinámica clásica en una escala de energías sea la misma que en otra. Adicionalmente, presenta la facilidad con que se calculan las matrices en la base de osciladores armónicos para el desarrollo cuántico, aunque el estudio se realizará seleccionando la base de osciladores cuánticos independientes, como se explicará en el siguiente capítulo.

El problema posee las siguientes simetrías: i) invariancia ante inversión en el tiempo; ii) invariancia ante la reflexión de todas las coordenadas; iii) invariancia ante intercambio de partículas; y, si $\gamma = 0$, iv) invariancia ante reflexión de cada coordenada independientemente ($x_i \rightarrow -x_i, p_i \rightarrow -p_i$, para $i = 1, \dots, N_p$), simetría que sólo H_0 cumple.

Para que el sistema se mantenga acotado, se requiere que el potencial permanezca positivo definido, por lo que se procede a calcular las condiciones de disociación: $V(\mathbf{x}) = 0$. Esto define el espacio de parámetros del que podemos seleccionar algunos valores de los parámetros para trabajar (véase la figura 2.1). Este espacio se describe en el apéndice A.

Para potenciales acotados, los cortes de sección en el espacio de coordenadas corresponden al tipo de las que aparecen en la figura (2.1), para el caso $N_p = 4$. Aquí, se grafica el potencial como función de x_1 y x_2 con el resto de las variables iguales a la unidad. Debido a la simetría, los otros cortes de sección son similares. En la Fig.(2.2) se encuentran las curvas de nivel en el plano x_1x_2 del corte de sección anterior a un valor de la función arbitrario. Las protuberancias que se observan se deben a la perturbación y juegan un papel importante tanto en la caoticidad del sistema como en la convergencia de los estados cuánticos [39, 40]; su orientación depende del signo de γ . Los parámetros usados corresponden a los indicados para H_4 en la Tabla 2.1.

2.1.2 Dinámica Clásica del Hamiltoniano

Dentro de los parámetros posibles, se procedió a seleccionar un conjunto de ellos para los cuales el sistema es casi completamente caótico. Esto se obtuvo calculando el exponente de Lyapunov máximo para varios miles de condiciones iniciales. Sin embargo, debido a que los exponentes de Lyapunov son

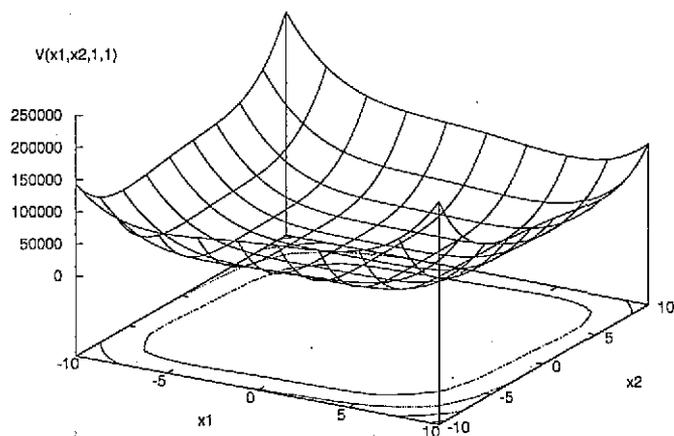


Figura 2.1: Corte de sección del potencial $V(\mathbf{x})$ para $N_p = 4$ y $x_3 = x_4 = 1$. Los parámetros corresponden a H_4 y están dados en la tabla 2.1. En el plano x_1x_2 se encuentra la proyección a algunos valores de la función.

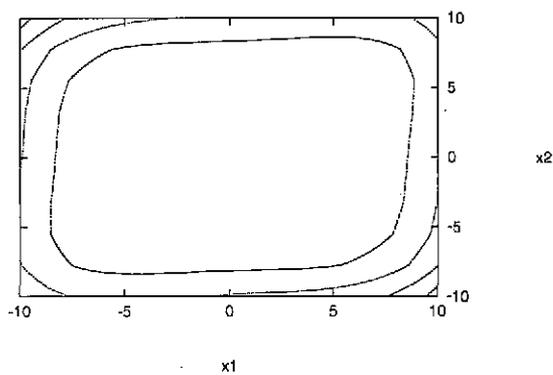


Figura 2.2: Proyección del corte de sección de la figura anterior en el plano x_1x_2 .

asintóticos y en un espacio fase tan grande (de 8 y 10 dimensiones para cuatro y cinco partículas), puede ocurrir que se requiera de un tiempo de cómputo muy largo para obtenerlos, por lo que será suficiente que el exponente máximo alcance y mantenga valores positivos para algunos cientos de periodos típicos del sistema, probado sobre unos cuantos miles de condiciones iniciales seleccionadas al azar en el espacio fase permitido. Esto no nos garantiza que el sistema sea completamente caótico, pero sólo requerimos que lo sea en un porcentaje importante. El problema de verificar que un sistema multidimensional como éstos sea en gran medida caótico no es algo trivial de resolver [32]. Para el caso de dos dimensiones, donde el espacio es más pequeño y las secciones de Poincarè son de gran utilidad para verificar la caoticidad, el problema no es tan complicado.

Por simplicidad, los valores de los parámetros usados en esta tesis corresponden a los usados en las referencias [36, 40] para dos partículas; los de cuatro cuerpos corresponden a la Ref. [41] y todas ellas se muestran en la Tabla 2.1. Esta decisión se tomó considerando que los valores de los parámetros dan una dinámica suficientemente caótica y que cualquier otra elección que desemboque en caos será equivalente. Además el estudio que realizamos de las fluctuaciones de estas EFs no se desarrolló en esas referencias. Por otra parte, utilizando los programas desarrollados por L. Benet se hicieron algunas otras búsquedas de parámetros que se usaron para el caso de tres y cinco cuerpos, que incluimos en la Tabla 2.1, y sólo fueron incluidos en el estudio de algunas cantidades clásicas. El desarrollo de la comparación clásico-cuántica se centró en dos y cuatro partículas. No sobra puntualizar que el objetivo del presente trabajo es realizar el análisis de las fluctuaciones alrededor del límite clásico haciendo uso de este último como la función para rectificar (*unfolding*) los resultados y no sólo a la comparación de la correspondencia entre ambos casos.

2.2 Análogos Clásicos de Cantidades Cuánticas

2.2.1 Eigenfunción Clásica

Como se mencionó en la introducción, el principio de correspondencia de Bohr nos hace pensar que la simetría entre cantidades cuánticas y clásicas va más allá de los eigenvalores de ciertos operadores cuánticos.

En la búsqueda de los análogos clásicos de cantidades cuánticas, L. Benet

Tabla 2.1: Parámetros de los hamiltonianos considerados en este trabajo con su correspondiente etiqueta y el número de partículas al que corresponden. El cálculo cuántico se centró en los primeros tres casos.

Etiqueta	N_p	α	β	γ
H_1	2	10	-5.5	5.6
H_2	2	10	-4.15	-4.15
H_4	4	10	-2.1	-2.2
H_{T3}	3	10	-4.35	-2.8
H_{T5}	5	10	-1.1	-1.8

et al [36] propusieron que la distribución de energías del sistema no perturbado en el cascarón de energía del sistema perturbado sea el análogo clásico para las intensidades de la eigenfunción cuántica en el espacio de energía. La expresión matemática de lo anterior es

$$g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = \int dpdq \delta(\mathcal{E} - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \delta(\mathcal{E}^0 - H_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})), \quad (2.3)$$

donde \mathcal{E} y \mathcal{E}^0 son las energías perturbada y no perturbada, respectivamente [36]. Esta cantidad no tiene información sobre la fase cuántica, ni es la solución de una ecuación de eigenvalores; pese a ello y por corresponder al límite clásico de las intensidades de las QEFs las llamamos eigenfunciones clásicas. Mas adelante se muestra la relación que proponemos para ser considerado como el análogo clásico de las QEF's y que difiere de (2.3). La expresión 2.3 se obtiene de la misma forma en que se determina la parte promedio de la densidad de niveles energéticos cuánticos a través de la fórmula de Weyl (véase, por ejemplo, la ref. [35]) y está basada en las idea de Berry [12] y Voros [13] de que la superficie de energía constante es el único invariante clásico capaz de soportar la descripción semi-clásica de una eigenfunción caótica.

Una manera de ver el significado físico de esta integral es la siguiente: a una energía total del sistema fija, \mathcal{E} , la energía del sistema se distribuye entre la energía de la parte no perturbada, \mathcal{E}^0 , y la perturbación. Así, \mathcal{E}^0 irá cambiando en el tiempo y su distribución es la que define la CEF, como se muestra esquemáticamente en la figura (2.3). El tiempo en el que se alcanza la distribución límite se denomina tiempo de mezclado.

Es importante hacer notar que buscamos expresar las eigenfunciones del

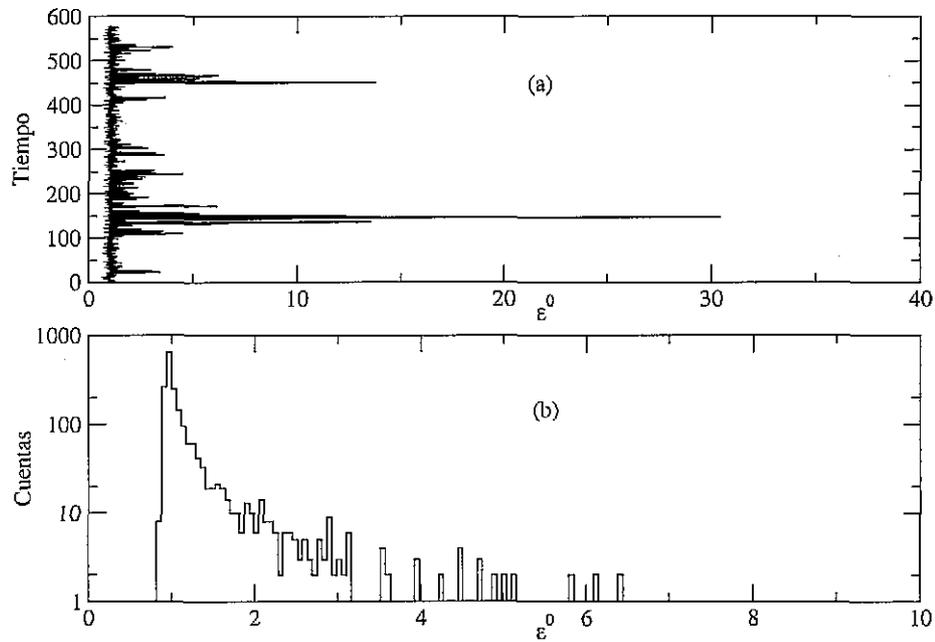


Figura 2.3: (a) Evolución de la energía no perturbada \mathcal{E}^0 a energía $\mathcal{E} = 1$ para el hamiltoniano H_4 . (b) Histograma de la distribución de \mathcal{E}^0 de (a) en escala semi-logarítmica. Sólo se muestra la región donde \mathcal{E}^0 toma valores entre 0 y 10. En el límite en que el tiempo tiende al tiempo de mezclado, esta distribución corresponde a la función $g(\mathcal{E}^0, \mathcal{E})$ de la Ec.(2.3).

hamiltoniano H en alguna base diferente de la propia, pues una eigenfunción en su propia base estará siempre representada por una función delta, independientemente de si el sistema es integrable, caótico o mixto. El análogo clásico de una EF en su propia base es una delta de Dirac como se verá en la siguiente sección. Además, debido a que (2.3) es simétrica respecto de cuál es el hamiltoniano perturbado y cuál es el hamiltoniano de la base, nos permite definir otra cantidad relacionada: el correspondiente clásico de la densidad local de estados, LDOS, calculando la integral de la Ec. (2.3) a una energía no perturbada \mathcal{E}^0 fija y evaluándola como función de la energía perturbada \mathcal{E} , como se explicará más adelante.

Realizamos la evaluación de la integral en el espacio fase que define a la Ec. (2.3) por el método de Monte Carlo ². Para ello, basta calcular con precisión la integral a una energía fija, gracias a la propiedad de escalamiento:

$$g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = \mathcal{E}^{-1}g(1, \mathcal{E}^0/\mathcal{E}). \quad (2.4)$$

De esta manera, obtenemos el equivalente clásico de una eigenfunción particular escalando a la eigenenergía correspondiente, como se mostrará en el capítulo siguiente. En la figura (2.4) podemos apreciar las gráficas que corresponden al resultado de la integral (2.3) para los hamiltonianos cuárticos en escala semi-logarítmica y a una energía de referencia igual a la unidad. Las cuales presentan algunas características que son típicas de los sistemas que tratamos en este trabajo: (i) Un máximo en una energía no perturbada cercana a la energía perturbada, en este caso a 1. (ii) La función no se extiende hasta el infinito sino que presenta una zona de definición, fuera de la cual vale cero. En (2.4b) ese límite se alcanza a una energía alta y que no aparece en la gráfica. (iii) Un decaimiento exponencial (la gráficas esta en escala semilogarítmica) para energías no perturbadas altas y antes del rápido decaimiento que marca la zona clásicamente prohibida. Dado que es un sistema muy complicado y es difícil entender éstas características haremos el estudio, más adelante, con sistemas mucho más simples en donde podamos entender algunas de estas características y en un capítulo posterior aplicarlas, cuando sea posible, al problema de los osciladores cuárticos acoplados.

Ya que nuestro interés es la comparación del análogo clásico con las QEF's debemos notar que hay un punto delicado en cuanto a la normalización se

²El cálculo también se puede realizar como la distribución límite que aparece en la Fig. (2.3). Este método es usado en la ref [37] por Luna-Acosta *et al* para calcular las EF's de un billar con frontera rizada.

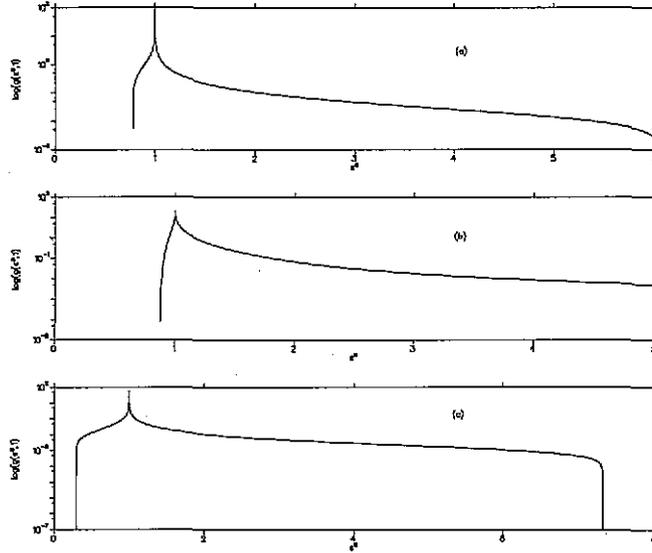


Figura 2.4: Límite clásico de las eigenfunciones de los hamiltonianos (a) H_1 , (b) H_4 y (c) H_2 a una energía de referencia de $\mathcal{E} = 1$ de acuerdo a la Ec.(2.3).

refiere [36]. En nuestro caso es crucial tener una normalización tal que podamos comparar intensidad por intensidad sobre el espectro no perturbado: ese es el principal interés en esta parte del trabajo, pues el rectificado así lo requiere. Si consideramos alguna clase de promediamiento en el espectro \mathcal{E}^0 , como es el caso de [36], perdemos la correlación que existe entre las intensidades y los niveles energéticos. De esta manera procedemos a encontrar la normalización y la equivalencia de la CEF a la QEF. Integrandó la Ec.(2.3) respecto a \mathcal{E}^0 obtenemos

$$\begin{aligned} \int g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) d\mathcal{E}^0 &= \int \int d\mathbf{p} d\mathbf{q} d\mathcal{E}^0 \delta(\mathcal{E} - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \delta(\mathcal{E}^0 - H_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \\ &= \int d\mathbf{p} d\mathbf{q} \delta(\mathcal{E} - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \int \delta(\mathcal{E}^0 - H_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})) d\mathcal{E}^0 \\ &= (2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E}), \end{aligned} \quad (2.5)$$

puesto que

$$\int \delta(\mathcal{E}^0 - H_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})) d\mathcal{E}^0 = 1 \quad (2.6)$$

y

$$\rho(\mathcal{E}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int d\mathbf{p} d\mathbf{q} \delta(\mathcal{E} - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})). \quad (2.7)$$

Integrando sobre \mathcal{E} y usando los mismos argumentos obtenemos

$$\int g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) d\mathcal{E} = (2\pi\hbar)^d \rho_0(\mathcal{E}^0). \quad (2.8)$$

De lo anterior tenemos que la cantidad

$$\frac{g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)}{(2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E})} \quad (2.9)$$

tiene norma 1, es decir

$$\int \frac{g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)}{(2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E})} d\mathcal{E}^0 = 1. \quad (2.10)$$

Por otra parte, la generalización al continuo de la norma de las QEF's es

$$\sum_k |\langle \varphi_k | \Psi_i \rangle|^2 = 1 \longrightarrow \int C^2(\mathcal{E}^i, \mathcal{E}^0) \rho_0(\mathcal{E}^0) d\mathcal{E}^0 = 1 \quad (2.11)$$

donde $C^2(\mathcal{E}^i, \mathcal{E}^0)$ es la función continua en \mathcal{E}^i y \mathcal{E}^0 tal que evaluada en el espectro es $|\langle \varphi_k | \Psi_i \rangle|^2$. Por claridad usamos la notación siguiente: las energías $\mathcal{E}^0, \mathcal{E}$ son variables continuas, mientras que las E_k^0, E son las variables discretas. La energía del sistema perturbado esta fija de tal manera que $\mathcal{E} = E^i$. Para entender este paso de variables discretas a continuas recordamos que la manera de expresar la densidad de estados cuánticos es

$$\rho_0^Q(\mathcal{E}^0) = \sum_k \delta(\mathcal{E}^0 - E_k^0), \quad (2.12)$$

y aplicándola al lado izquierdo de la Ec.(2.11) tenemos

$$\begin{aligned} \sum_k |\langle \varphi_k | \Psi_i \rangle|^2 &\equiv \sum_k C^2(E^i, E_k^0) \\ &= \sum_k \int C^2(E^i, \mathcal{E}^0) \delta(\mathcal{E}^0 - E_k^0) d\mathcal{E}^0 \\ &= \int C^2(E^i, \mathcal{E}^0) \sum_k \delta(\mathcal{E}^0 - E_k^0) d\mathcal{E}^0 \\ &= \int C^2(\mathcal{E}^i, \mathcal{E}^0) \rho_0^Q(\mathcal{E}^0) d\mathcal{E}^0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Cuando $\rho_0^Q \rightarrow \rho_0$ con el límite de $\hbar \rightarrow 0$, más algún tipo de suavización, la expresión anterior tiende al lado derecho de la Ec. (2.11). De esta manera es claro que lo que queremos comparar son las cantidades

$$\int \frac{g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)}{(2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E})} d\mathcal{E}^0 \quad (2.14)$$

y

$$\int C^2(\mathcal{E}^i, \mathcal{E}^0) \rho_0(\mathcal{E}^0) d\mathcal{E}^0. \quad (2.15)$$

De aquí se sigue que el análogo clásico de las intensidades cuánticas es

$$\tilde{g}(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = \frac{g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)}{(2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E}) \rho_0(\mathcal{E}^0)}. \quad (2.16)$$

A esta ecuación la denotaremos como la CEF (por sus siglas en inglés *Classical Eigenfunction*) y de aquí en adelante, al mencionar la eigenfunción clásica CEF nos referiremos a esta cantidad. En términos prácticos para normalizar, evaluamos la función $g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)/\rho_0(\mathcal{E}^0)$ en la energía perturbada E_i y en los valores correspondientes del espectro *discreto* E_k^0 del hamiltoniano no perturbado H_0 . Esto nos permite definir a la CEF como una función discreta de los índices k y que normalizamos como $\sum_k \tilde{g}_k^i = 1$, a semejanza de los coeficientes cuánticos y que podemos comparar *intensidad por intensidad* sobre el espectro. La diferencia en la definición usada en las referencias [36, 40] y esta es poco importante en el caso de dos partículas, pero es crucial para cuatro partículas, especialmente en las regiones de alta energía, ya que la densidad varía entonces muy rápidamente.

Para entender las propiedades de $\tilde{g}(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)$ procedemos a evaluar, hasta donde sea posible, la integral de $g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)$. En la siguiente sección se dan algunos ejemplos en una dimensión del análogo clásico de las intensidades de una eigenfunción cuántica. La primera integral que realizamos es la que tiene que ver con el momentum. Para este efecto, utilizamos la igualdad siguiente, cuya demostración la dejamos para el apéndice B,

$$\delta(x - f)\delta(x - g) = \delta\left(x - \frac{f + g}{2}\right)\delta(f - g). \quad (2.17)$$

La integral (2.3) la reacomodamos recordando que la función delta es par, es decir $\delta(-x) = \delta(x)$, con lo que

$$\begin{aligned} g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) &= \int d\mathbf{p}d\mathbf{q} \delta(\mathcal{E} - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \delta(\mathcal{E}^0 - H_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})), \\ &= \int d\mathbf{p}d\mathbf{q} \delta(p^2/2 + V(\mathbf{q}) - \mathcal{E}) \delta(p^2/2 + V^0(\mathbf{q}) - \mathcal{E}^0). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Ahora usamos la igualdad (2.17) con $f = \mathcal{E} - V(\mathbf{q})$ y $g = \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})$, de esta manera los argumentos de las funciones delta de la ecuación anterior quedan como

$$\delta\left(p^2/2 - \frac{\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})}{2}\right) \delta(\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) - (\mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q}))). \quad (2.19)$$

De esta manera la integral sobre los momentos queda independiente del resto de las integrales y podemos evaluarla,

$$g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = \int d\mathbf{q} \delta(\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) - (\mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q}))) \int d\mathbf{p} \delta(p^2/2 - \frac{\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})}{2}). \quad (2.20)$$

La variable momental p^2 es la suma de los cuadrados de todos los momentos individuales, es decir, es el radio de una esfera d -dimensional, por lo que pasamos a variables esféricas. El elemento diferencial esférico d -dimensional es

$$dV = r^{d-1} \sin^{d-2}(\theta_{d-1}) \sin^{d-3}(\theta_{d-2}) \cdots \sin^1(\theta_2) \sin^0(\theta_1) dr d\theta_{d-1} d\theta_{d-2} \cdots d\theta_2 d\theta_1, \quad (2.21)$$

donde $\theta_1 \in [0, 2\pi]$ y $\theta_i \in [0, \pi]$ con $i = 2, \dots, d-1$, por lo que podemos arreglar la integral sobre los momentos como

$$\int \delta(p^2/2 - \frac{\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})}{2}) p^{d-1} \sin^{d-2}(\theta_{d-1}) \sin^{d-3}(\theta_{d-2}) \cdots \sin^1(\theta_2) \times \sin^0(\theta_1) dp d\theta_{d-1} d\theta_{d-2} \cdots d\theta_2 d\theta_1 = \int d\Omega_{\theta_p} \int \delta(p^2/2 - \frac{\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})}{2}) p^{d-1} dp,$$

donde $d\Omega_{\theta_p}$ contiene las integrales angulares. Realizamos la integral radial haciendo el cambio de variable $u = p^2/2$ y $du = p dp$, con lo que

$$\int_0^\infty \delta(u - \frac{\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})}{2}) (2u)^{\frac{d-2}{2}} du = [2(\frac{\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})}{2})]^{\frac{d-2}{2}} \Theta(\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})). \quad (2.22)$$

La función escalón $\Theta(\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q}))$ surge al hacer el cambio de variable pues la integral va de 0 a infinito y no de $-\infty$ a ∞^3 . De ahí la integral que define a g queda como

$$g = \int d\mathbf{q} \delta(\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) - (\mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q}))) [\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})]^{\frac{d-2}{2}} \times \Theta(\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})) \int d\Omega_{\theta_p}. \quad (2.23)$$

La parte angular es $\int d\Omega_{\theta_p} = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ [66], como se muestra en el apéndice B. La ecuación anterior tiene tres comportamientos dependiendo del valor de d . Para $d = 1$ la potencia es $-1/2$, para d igual a 2 esta parte no

³Esto surge del hecho de que si bien la integral $\int_{-\infty}^\infty \delta(x-a) = 1$, pues no importa si a es positiva o negativa, la integral $\int_0^\infty \delta(x-a) = \Theta(a)$ pues sólo vale uno si a es positiva, si es negativa, la integral se anula

contribuye a la integral y para $d > 2$ el exponente es positivo. Esto indica que $d = 1, 2$ son casos particulares y que no podemos siempre generalizar los resultados para ellos a más dimensiones. Hay que resaltar que la expresión $[\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})]^{\frac{d-2}{2}}$ es una raíz cuadrada elevada a una potencia y juega un papel similar a la conocida raíz $\sqrt{2(E - V)}$, que es la que nos define los puntos de retorno y la región clásicamente permitida a energía E . Por otra parte la delta nos fija que la integral sólo tendrá contribuciones cuando ambas energías cinéticas sea iguales, $\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) = \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})$. Esto nos define una zona donde g no está definida como función de la energía \mathcal{E}^0 dependiendo de la forma de los potenciales $V(\mathbf{q})$ y $V^0(\mathbf{q})$. Más adelante, en los ejemplos, veremos con detalle de qué manera funciona esto pues depende de la clase de potenciales que estemos usando. Es importante hacer notar que las zonas de permitibilidad están dadas por los ceros del argumento de la función delta y por los ceros de la suma de energías cinéticas.

Evaluar la integral de la ecuación anterior presenta serias dificultades. Una de ellas es que la relación para las funciones delta de argumento funcional

$$\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|f'(x_i)|}, \quad (2.24)$$

con $f(x_i) = 0$, no es única para dimensiones mayores a 1. Formalmente seguiremos la evaluación de la integral en $d = 1$, aunque algunos detalles técnicos se dejarán para cuando mostremos los ejemplos unidimensionales. Aplicando esta última expresión a la integral de la ecuación (2.23) con $d = 1$ tenemos

$$\begin{aligned} g &= \int dq \delta(\mathcal{E} - V(q) - (\mathcal{E}^0 - V^0(q))) [\mathcal{E} - V(q) + \mathcal{E}^0 - V^0(q)]^{-\frac{1}{2}} \\ &= \sum_i \int \frac{\delta(q - q_i)}{|\frac{d}{dq}(V^0 - V)(q_i)|} [\mathcal{E} - V(q) + \mathcal{E}^0 - V^0(q)]^{-\frac{1}{2}} dq, \end{aligned} \quad (2.25)$$

donde q_i es tal que $V^0(q_i) - V(q_i) + \mathcal{E} - \mathcal{E}^0 = 0$ y $\frac{d}{dq}(V^0 - V)(q_i)$ significa la derivada de $V^0 - V$ evaluada en q_i . El resultado de la integral es

$$g(\mathcal{E}^0, \mathcal{E}) = \sum_i \frac{[\mathcal{E} - V(q_i) + \mathcal{E}^0 - V^0(q_i)]^{-\frac{1}{2}}}{|\frac{d}{dq}(V^0 - V)(q_i)|}. \quad (2.26)$$

La diferencia entre las energías $\mathcal{E}^0, \mathcal{E}$ sólo aparece en las raíces como parte de la derivada. Es por esto que la singularidad en $\mathcal{E}^0 = \mathcal{E}$ depende fuertemente de los potenciales que estemos usando.

El problema de $H = H_0$ es un caso especial y la ecuación anterior no se aplica pues en ese caso el argumento de la función delta no depende de q :

$$\int dq \delta(\mathcal{E} - V(q) - (\mathcal{E}^0 - V^0(q))) [\mathcal{E} - V(q) + \mathcal{E}^0 - V^0(q)]^{-\frac{1}{2}} = \int dq \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) [\mathcal{E} + \mathcal{E}^0]^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.27)$$

pues $V = V^0$, lo que nos da una función delta en $\mathcal{E} - \mathcal{E}^0$ veces el volumen ocupado y veces $[\mathcal{E} + \mathcal{E}^0]^{-\frac{1}{2}}$.

Una manera de ver en una dimensión cómo funciona la cantidad g es fijarnos en el espacio fase de cada uno de los sistemas y encontrar las intersecciones que marcan las deltas. A manera de ejemplo consideremos por un momento que $H = p^2/2 + q^4$ y que $H_0 = p^2/2 + q^2$. A energía fija E , la órbita que sigue una partícula en el potencial cuártico esta dada por la ecuación $\pm\sqrt{2(E - q^4)}$, que se muestra en la Fig. (2.5) en línea continua.

Para el hamiltoniano H_0 las órbitas seguirán la curva $\pm\sqrt{2(E^0 - q^2)}$. Los puntos donde estas funciones se igualan son las soluciones de la ecuación $E - q^4 = E^0 - q^2$, o $q^4 - q^2 + E^0 - E = 0$. Haciendo $x = q^2$ tenemos una ecuación cuadrática cuyo discriminante es $1 + 4E - E^0$. Para tener soluciones reales es necesario que este discriminante sea positivo. Esto nos lleva a la desigualdad $E + 1/4 > E^0$, que marca la máxima energía E^0 para la que hay soluciones en los reales. Para encontrar la cota inferior en este ejemplo buscamos las soluciones de la ecuación $E - q^4 = 0$, es decir $q = E^{1/4}$ y evaluamos en la ecuación del hamiltoniano no perturbado, esto es $\sqrt{2(E^0 - (E^{1/4})^2)}$, de donde obtenemos que $E^0 = \sqrt{E}$. El rango de valores que puede tomar E^0 y que contribuyan a la conformación de g va de \sqrt{E} a $E + 1/4$. Esto nos dice que para energías $E > 1$ la EF clásica esta definida para $E^0 - E > 0$ y para $E^0 - E < 0$. Este mecanismo que permite la existencia de una región válida es del mismo tipo que define los cortes de los sistemas cuárticos de la fig. (2.4), que son más complicados. La función clásica CEF se construye haciendo el histograma de las contribuciones de estos puntos como función de la energía no perturbada E^0 pesadas por la función $\sqrt{E + E^0 - V - V^0}$. En la siguiente sección resolvemos este ejemplo con cuidado.

2.2.2 Ejemplos de CEF en una dimensión

Con la finalidad de entender de que manera se calcula la CEF y qué propiedades tiene, en esta sección presentamos algunos ejemplos sencillos.

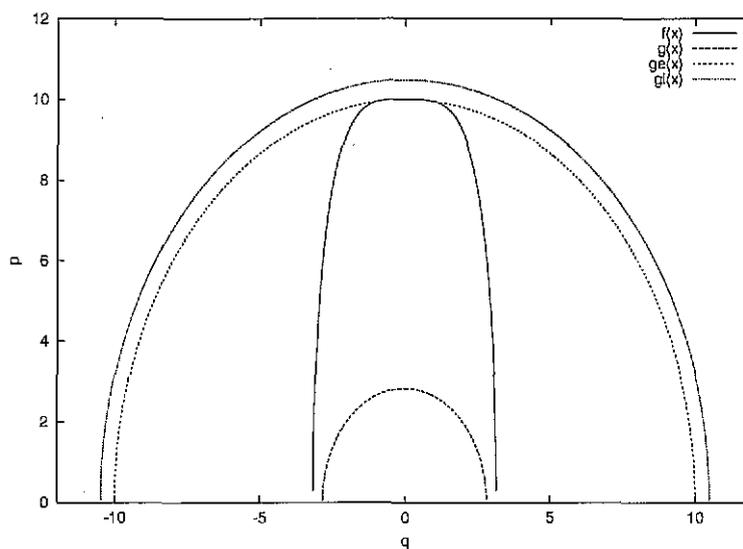


Figura 2.5: Espacio fase con $p > 0$ de los Hamiltonianos $H = p^2/2 + q^4$ y $H_0 = p^2/2 + q^2$. $f(x)$ es la curva $\sqrt{2(E - q^4)}$ de H a $E = 100$, mientras que $g(x)$, $ge(x)$ y $gl(x)$ son las curvas de $\sqrt{2(E^0 - q^2)}$ a energías $E^0 = 8$, $E^0 = E = 100$ y $E^0 = 110$ respectivamente, sólo $g(x)$ tiene puntos en común con la curva no perturbada. Véase la explicación en el texto.

Partícula libre en la base de partícula libre en 1-d

Un caso particularmente sencillo es el de una partícula libre en su propia base en $d = 1$, es decir $H = H_0 = p^2/2$. La integral la realizamos sobre una caja finita de tamaño L y después tomamos el límite de $L \rightarrow \infty$. La integral en g es

$$\int \delta(\mathcal{E} - H)\delta(\mathcal{E}^0 - H_0)dpdq = \int dq \int \delta(p^2/2 - \frac{\mathcal{E} + \mathcal{E}^0}{2})\delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0)dp, \quad (2.28)$$

donde hemos usado la relación (2.17). La integral en q es $\int dq = L$, mientras que la integral en *momentum* es

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(p^2/2 - \frac{\mathcal{E} + \mathcal{E}^0}{2})dp = (\sqrt{\mathcal{E} + \mathcal{E}^0})^{-1/2}. \quad (2.29)$$

De esta manera tenemos que

$$g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = \frac{L}{\sqrt{\mathcal{E} + \mathcal{E}^0}}\delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0). \quad (2.30)$$

Las densidades son

$$\begin{aligned} \rho = \rho_0 &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \delta(p^2/2 - \mathcal{E})dpdq \\ &= \frac{L}{2\pi\hbar} \int \delta(u - \mathcal{E})\frac{du}{\sqrt{2u}} \\ &= \frac{L}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2\mathcal{E}}}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

De esta manera la CEF, en este caso, la escribimos como

$$\bar{g}(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) \frac{1}{2\pi\hbar\rho^2(\mathcal{E}^0)} = (2\pi\hbar\sqrt{2\mathcal{E}}/L)\delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0), \quad (2.32)$$

donde hemos usado la propiedad $f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a)$. En el límite $L \rightarrow \infty$ el factor $2\pi\hbar\sqrt{2\mathcal{E}}/L$ tiende a cero, pero la hacer la integral de normalización la dependencia en L desaparece y la integral es la unidad.

Hamiltonianos iguales en d-dimensiones

Como comentamos antes, las eigenfunciones de un sistema cuántico en su misma base son deltas de Kronecker o de Dirac. Este hecho se refleja también en el análogo clásico que estamos usando aquí. En este caso usamos, de

nuevo, la identidad (2.17) considerando como la variable independiente a todo el hamiltoniano H , por lo que tenemos

$$\begin{aligned}
 g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) &= \int \delta(\mathcal{E} - H) \delta(\mathcal{E}^0 - H) d\mathbf{p}d\mathbf{q} \\
 &= \int \delta(H - \frac{\mathcal{E} + \mathcal{E}^0}{2}) \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) d\mathbf{p}d\mathbf{q} \\
 &= \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) \int \delta(H - \frac{\mathcal{E} + \mathcal{E}^0}{2}) d\mathbf{p}d\mathbf{q}.
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

Usando la propiedad de que $f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a)$ podemos escribir

$$\begin{aligned}
 g(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) &= \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) \int \delta(H - \frac{2\mathcal{E}}{2}) d\mathbf{p}d\mathbf{q} \\
 &= \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) \int \delta(H - \mathcal{E}) d\mathbf{p}d\mathbf{q} \\
 &= \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) (2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E}),
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

por lo que la CEF la podemos escribir como

$$\tilde{g} = \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) (2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E}) / (2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E}) \rho_0(\mathcal{E}^0) = \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) / \rho_0(\mathcal{E}^0). \tag{2.35}$$

Evaluando la densidad en la energía perturbada tenemos

$$\tilde{g}(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}^0) / \rho_0(\mathcal{E}). \tag{2.36}$$

Nótese que este resultado es independiente de los potenciales y de la dimensionalidad del sistema.

Oscilador armónico en la base de partícula libre en 1-d

En este problema los hamiltonianos que consideramos son $H = T + \beta q^2$ y $H_0 = T$. Consideramos que la partícula libre se encuentra en una caja de tamaño L y al final hacemos tender L al infinito. Haciendo uso de la Ec.(2.26) tenemos

$$\begin{aligned}
 g &= \int_{-L/2}^{L/2} dq \delta(E - E^0 - \beta q^2) / \sqrt{E + E^0 - \beta q^2} \\
 &= \int_{-L/2}^{L/2} dq \frac{1}{\beta} \delta(q^2 - (E - E^0)/\beta) / \sqrt{E + E^0 - \beta q^2} \\
 &= \frac{1}{\beta} \int_{-L/2}^{L/2} dq \frac{\delta(q - \sqrt{(E - E^0)/\beta}) + \delta(q + \sqrt{(E - E^0)/\beta})}{2\sqrt{(E - E^0)/\beta} \sqrt{(E + E^0) - (E - E^0)}} \\
 &= \Theta(E - E^0) / \sqrt{2\beta E^0 (E - E^0)}.
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

Para que el dominio de la integral contenga a las raíces del polinomio $q \pm \sqrt{(E - E^0)/\beta}$ se requiere que $|(E - E^0)/\beta| < (L/2)^2$, esto es que $E - \beta(L/2)^2 < E^0$.

La densidad para H^0 es

$$\rho_0(E^0) = \frac{L}{2\pi\hbar} \frac{1}{\sqrt{2E^0}} \quad (2.38)$$

como se mostró en el primer ejemplo. La densidad para el oscilador armónico es

$$\rho(E) = 1/\pi\hbar\sqrt{2\beta}, \quad (2.39)$$

como resultado de la evaluación de la fórmula de Weyl. De esta manera tenemos que

$$\tilde{g} = \pi\hbar\Theta(E - E^0)/L\sqrt{E - E^0}. \quad (2.40)$$

El hecho de que sea una función de un sólo lado se explica porque la curva de partícula libre $p = \sqrt{2E^0}$ no toca a la curva $p = \sqrt{2(E - \beta q^2)}$ para energías $E^0 > E$. Esto es similar a lo que ocurre a la Fig. (2.5). También podemos notar que hay una divergencia en $E = E^0$ del tipo $\sqrt{E - E^0}$. En este ejemplo muy particular existe esta singularidad que recuerda a las singularidades que aparecen en la Fig. (2.4) Debido a que la distancia permitida depende de la cantidad $\beta(L/2)^2$, en el límite en que $\beta \rightarrow 0$ y $L \rightarrow \infty$, la distribución \tilde{g} tiende a una función delta de Dirac.

2.2.3 Análogos Clásicos de la LDOS y de \hat{n}_s

No sólo se puede encontrar el análogo para las EF's, sino también para la densidad local de estados (LDOS) o aun más para la estadística de número de ocupación. En el caso de la LDOS, el cálculo es idéntico, excepto que la cantidad fija ahora es la energía no perturbada \mathcal{E}^0 , en vez de \mathcal{E} , por lo que podemos expresar la LDOS clásica como

$$\tilde{g}_{LDOS}(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = \frac{g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)}{(2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E}) \rho_0(\mathcal{E}^0)}, \quad (2.41)$$

que esta normalizada con

$$\int \tilde{g}_{LDOS}(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) \rho(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = 1. \quad (2.42)$$

La interpretación es, de manera práctica y *mutatis mutandis*, la misma que para el caso de la CEF. De hecho esta ecuación es idéntica a la Ec. (2.16), lo único que cambia es cuál es la variable que consideremos independiente.

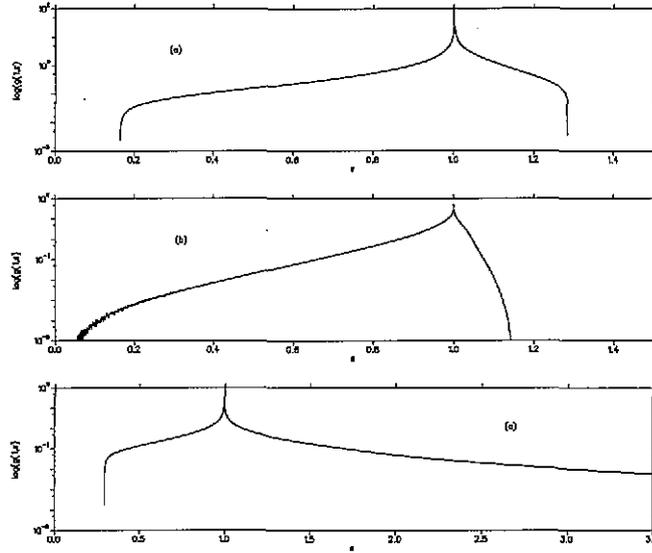


Figura 2.6: Límite clásico de la densidad local de estados LDOS para los hamiltonianos (a) H_1 , (b) H_4 y (c) H_2 a una energía de referencia de $\mathcal{E}' = 1$ de acuerdo a la Ec. (2.41).

En la Fig. (2.6) se encuentran las gráficas de tres LDOS correspondientes a cada uno de los hamiltonianos de la tabla 2.1, sólo que en el caso de H_2 el hamiltoniano H_0 no es el de partícula independiente, sino el hamiltoniano H_1 . En la referencia [36] se menciona el parecido de la CEF y el límite clásico de la LDOS bajo “cierta” reflexión especular en la gráfica (compárense las figuras (2.6a) y (2.4a)). No obstante, al comparar la CEF (Fig. 2.4) y la LDOS para este último caso, el aparente parecido entre la CEF y la LDOS bajo una reflexión se rompe. Como se aprecia en la Fig. (2.4c) y (2.6c) la CEF y la CLDOS son bastante parecidas, siendo un contra ejemplo a la afirmación hecha en [36].

Como mencionamos, otra cantidad cuántica cuyo análogo clásico podemos establecer es el operador de estadística de número de ocupación. Este operador mide la participación de los estados de partícula independiente en un eigenestado particular del hamiltoniano total, esto es

$$\langle n_s^i \rangle \equiv \langle \Psi_i | \hat{n}_s | \Psi_i \rangle = \sum_{k_1, \dots, k_{N_p}} |C_{k_1, \dots, k_{N_p}}^i|^2 \langle k_1, \dots, k_{N_p} | \hat{n}_s | k_1, \dots, k_{N_p} \rangle, \quad (2.43)$$

donde $|\Psi_i\rangle$ es el i -ésimo eigenestado del hamiltoniano total; $|k_1, \dots, k_{N_p}\rangle$ es

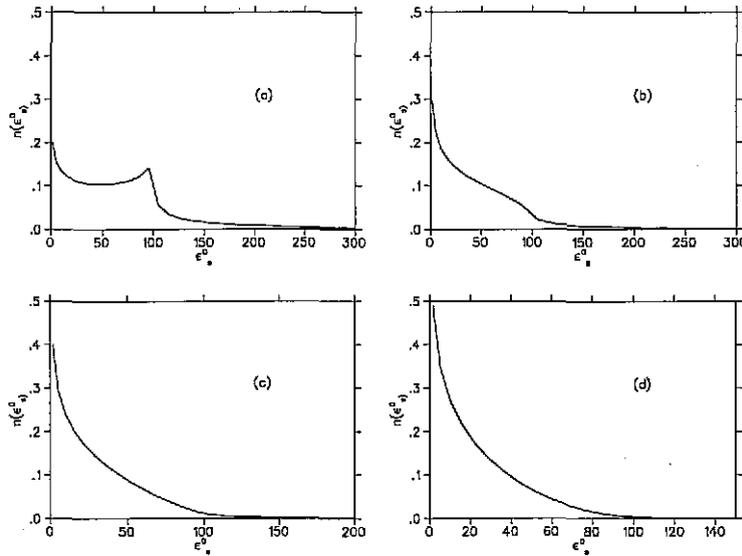


Figura 2.7: Análogo clásico para el operador de número de ocupación definido en la Ec. (2.44) a energía $\mathcal{E} = 100$ para (a) dos, (b) tres, (c) cuatro y (d) cinco partículas correspondientes a los hamiltonianos H_1 , H_2 , H_{T3} , H_4 y H_{T5} , respectivamente. Cada curva está normalizada al número de partículas que le corresponde.

el estado compuesto de los productos exteriores de las funciones de una partícula del hamiltoniano no perturbado $H_0 = \sum_m^{N_p} h_m^0$; mientras que las $C_{k_1, \dots, k_{N_p}}^i = \langle k_1, \dots, k_{N_p} | \Psi_i \rangle$, son los coeficientes de desarrollo y $\hat{n}_s = b_s^\dagger b_s$ es un operador que vale uno si el estado de partícula individual s está en la función $|k_1, \dots, k_{N_p}\rangle$ y cero si no está. De esta manera, la participación de cada estado de partícula independiente en la base de H_0 estará pesada por su contribución a la formación del estado completo del hamiltoniano H .

El análogo clásico de esta cantidad es

$$g_n(\epsilon, \mathcal{E}) = A' \int d\mathbf{p}d\mathbf{q} \delta(\mathcal{E} - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \sum_{i=1}^{N_p} \delta(\epsilon - h_i(p_i, q_i)) / (2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E}) \rho_i(\epsilon), \quad (2.44)$$

donde la suma corre sobre los hamiltonianos independientes h_i de una partícula, ϵ es la variable independiente, $\rho_i(\epsilon)$ es la densidad de cada partícula y \mathcal{E} es la energía del Hamiltoniano completo. La normalización es al número total de partículas N_p . En la Fig. (2.7) se muestran los resultados de la Ec. (2.44)

a energía $\mathcal{E} = 100$ para los casos de dos a cinco partículas. Los parámetros usados para tres cuerpos son $\alpha = 10$, $\beta = -4.35$ y $\gamma = -2.8$, mientras que los de cinco son $\alpha = 10$, $\beta = -1.1$ y $\gamma = -1.8$. Aunque no podemos comparar directamente estos resultados, la forma general que toma la $g_n(\epsilon, \mathcal{E})$ es significativa. Mientras que para dos partículas se presenta un pronunciado pico en $\epsilon \approx \mathcal{E} = 100$, éste, va desapareciendo conforme aumentamos el número de partículas. El decaimiento varía en cada región de energía como podemos verlo en la Fig. (2.7). Existen regiones en las cuales el decaimiento es exponencial y otras en las que decae como una ley de potencias. La forma de la función en la región más alta en energía es un efecto debido a que estamos usando un número finito de partículas [42]. También podemos notar que para la misma energía de referencia \mathcal{E} la contribución de estados de alta energía es menor conforme aumentamos el número de partículas. Esto es explicable si consideramos que a \mathcal{E} fija esta energía se tiene que distribuir entre más partículas, lo cual disminuye la energía individual ϵ_s^0 que pueden adquirir. Una discusión de la física de lo anterior la pospondremos para el capítulo 6.

Capítulo 3

El Hamiltoniano Cuántico

El segundo ingrediente de nuestro análisis es el cálculo de los estados y energías de la versión cuántica del hamiltoniano de la Ec.(2.1). Como es usual, la cuantización del hamiltoniano clásico se realiza reemplazando las variables clásicas por los operadores cuánticos correspondientes. Las soluciones de la ecuación estacionaria, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo $\hat{H}|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle$, las obtendremos haciendo uso del método variacional de Ritz. Nosotros aplicamos este método diagonalizando una matriz finita y optimizando un parámetro no lineal, lo que nos da las soluciones aproximadas. En el presente capítulo explicaremos la manera en que se desarrolló el cálculo cuántico de forma numérica, así como su estabilidad. También se dará la introducción formal a la clase de análisis que realizaremos sobre las diferentes cantidades cuánticas, antes de proceder a la discusión de los resultados. En particular se expondrá de manera cuidadosa el significado del rectificado de las funciones de onda y su implementación. En la parte final del capítulo presentamos un modelo de matrices aleatorias que incorpora la estructura de las EF's y que nos permite deducir algunas propiedades plausibles para las fluctuaciones.

3.1 Cálculo de la Matriz Hamiltoniana

Lo que deseamos resolver es la ecuación de Schrödinger $\hat{H}|\Psi_i\rangle = E_i|\Psi_i\rangle$. El procedimiento para realizar el cálculo de las eigenfunciones cuánticas $|\Psi_i\rangle$ y los eigenvalores E_i , se inicia con la elección de una base adecuada. En nuestro caso, la más obvia es la de partícula independiente que está rela-

cionada con el campo promedio, esto es, la base de osciladores cuánticos, $H_0 = \sum_{i=1}^{N_p} \left(\frac{1}{2m} p_i^2 + \alpha x_i^4 \right) = \sum_{i=1}^{N_p} h^0(p_i, x_i)$, donde, en general, $h^0(p_i, x_i)$ corresponde al hamiltoniano de la i -ésima partícula individual con eigenvalor $\epsilon_{n_i}^0$. Esto es, son soluciones de la ecuación de Schrödinger unidimensional $h^0 | \varphi_{n_i} \rangle = \epsilon_{n_i}^0 | \varphi_{n_i} \rangle$, cuyos eigenvectores se denotan como $| \varphi_{n_i} \rangle$. Las funciones propias de H_0 se calculan en la base de oscilador armónico, por lo que parte del código de computadora desarrollado corresponde al cambio de base de osciladores cuánticos a armónicos. Es en esta última base donde se optimiza la frecuencia ω de las funciones de oscilador que se usa como parámetro variacional [39, 40].

Como se mencionó en [43], una parte importante de la comparación clásico-cuántica tiene que ver con la forma en que ordenamos los estados de la base en la que expresamos el hamiltoniano. Así, sea cual sea la elección de esta última, los estados de la base se enumeran en orden de energía creciente. De esta manera, para una base que corresponde al hamiltoniano de N_p partículas independientes $H_0 = \sum_i h^0(p_i, x_i)$, con energías $\mathcal{E}_{n_1, n_2, \dots, n_{N_p}}^0 = \sum_i \epsilon_{n_i}^0$, éstas se ordenan de manera creciente y se numera el conjunto de índices de una partícula $\{n_1, n_2, \dots, n_{N_p}\}$ con el índice k , de tal manera que $\mathcal{E}_k^0 \equiv \mathcal{E}_{n_1, n_2, \dots, n_{N_p}}^0$. Los efectos de borde debidos al uso de una base finita fueron evitados, en parte, considerando una base mucho mayor a la energía de corte ¹, de tal manera que se garantice que tenemos todos los estados de la base que tienen energía menor a esa energía de corte. Es importante señalar que aun cuando no estemos en una base construida con eigenfunciones de una partícula, es crucial numerarla en energía creciente para obtener la correspondencia clásico-cuántica, como se verá en el estudio del hamiltoniano H_2 . En presencia de estados degenerados no es claro cómo manejarlos para que esta correspondencia sea buena.

Por otra parte, la simetría del hamiltoniano nos permite elegir una representación irreducible del grupo de permutaciones, por lo que seleccionamos las funciones antisimétricas para construir la matriz hamiltoniana

$$\langle \varphi_{n_1}, \varphi_{n_2}, \dots, \varphi_{n_{N_p}} | H | \varphi_{m_1}, \varphi_{m_2}, \dots, \varphi_{m_{N_p}} \rangle_A, \quad (3.1)$$

donde $| \varphi_{m_1}, \varphi_{m_2}, \dots, \varphi_{m_{N_p}} \rangle_A$ corresponde al determinante de Slater del producto directo de las funciones de onda de una sola partícula en el potencial

¹La energía $\mathcal{E}_{n_1, n_2, \dots, n_{N_p}}^0 = \sum_i \epsilon_{n_i}^0$ puede estar conformada por energías bajas de una o varias partículas y altas del resto, por que lo que habrá estados con un número grande de cuantos que tengan energías menores a la energía de corte fijada.

cuártico sin perturbar (es decir, son eigenfunciones del hamiltoniano h_i^0).

Para realizar el cálculo utilizaremos el formalismo de segunda cuantización [46, 47] que nos facilitará algunos de los cálculos. En este formalismo los estados se escriben en el espacio de Fock, donde la asignación se hace mapeando cada estado $|\varphi_{m_1}, \varphi_{m_2}, \dots, \varphi_{m_{N_p}}\rangle_A$ a un vector $b_{m_{N_p}}^\dagger \dots b_{m_1}^\dagger |0\rangle$. Aquí $|0\rangle$ es el vector vacío (que no contiene partículas) y b_m^\dagger es el operador de creación de una partícula en el estado m . Este operador cumple con la relación de anticonmutación con su operador adjunto b_m : $\{b_m^\dagger, b_k\} = \delta_{m,k}$, $\{b_m^\dagger, b_k^\dagger\} = 0$ y $\{b_m, b_k\} = 0$. Así, el estado $b_{m_{N_p}}^\dagger \dots b_{m_1}^\dagger |0\rangle$ corresponde a aquel con una partícula en cada uno de los estados m_1, m_2, \dots, m_{N_p} .

De aquí en adelante usaremos la notación $|m_1, m_2, \dots, m_{N_p}\rangle$ para denotar indistintamente la función en el espacio de Fock y a $|\varphi_{m_1}, \varphi_{m_2}, \dots, \varphi_{m_{N_p}}\rangle_A$, a menos que sea indispensable, por el contexto, especificar de cuál de ellas se trata.

En el formalismo de segunda cuantización escribimos el hamiltoniano como

$$\hat{H} = \sum_{k,k'} \langle k | h_1^0 | k' \rangle b_k^\dagger b_{k'} + \frac{1}{2} \sum_{k_1, k_2, l_1, l_2} \langle k_1 k_2 | \tilde{V}^{(2)} | l_1 l_2 \rangle b_{k_1}^\dagger b_{k_2}^\dagger b_{l_2} b_{l_1}, \quad (3.2)$$

donde las matrices $\langle k | h_1^0 | k' \rangle$ y $\langle k_1 k_2 | \tilde{V}^{(2)} | l_1 l_2 \rangle$ contienen la información dinámica y se refieren a operadores de una y dos partículas, respectivamente [47]. La matriz $\langle k | h_1^0 | k' \rangle$ contiene todos los operadores de una partícula del hamiltoniano completo; en nuestro caso estamos en la base en que h_1^0 es diagonal y por ello $\langle k | h_1^0 | k' \rangle = \epsilon_k^0 \delta_{k,k'}$. Pero no siempre es este el caso pues, en general, podemos escribir h_1^0 en una base en la que no es diagonal. La matriz $\langle k_1 k_2 | \tilde{V}^{(2)} | l_1 l_2 \rangle$, por su parte, contiene los operadores de dos partículas $\beta x_1^2 x_2^2 + \gamma(x_1^3 x_2 + x_1 x_2^3)$. La notación que usaremos será la siguiente: las EF del hamiltoniano perturbado H las denotaremos con Ψ_i y las del no perturbado como φ_k , siendo el producto interior de ambos estados denominado como $C_k^i \equiv \langle \varphi_k | \Psi_i \rangle$. Como se explico arriba, el índice k agrupa todos los índices de partícula individual.

El código computacional fue probado de las siguientes maneras: i) que el código obtuviera los sectores de simetría correctamente, ii) que el cálculo analítico de algunos elementos de la matriz coincidiera con el numérico, iii) que el re-escalamiento del programa de cuatro a dos partículas reprodujera los resultados de la ref. [36], iv) que el espectro obtenido del programa se ajustara a la fórmula semi-clásica de Weyl para la densidad integrada

de niveles, con los factores adecuados a la antisimetrización. (La fórmula explícita se da en la siguiente sección). La diagonalización de la matriz hamiltoniana fue realizada usando un programa desarrollado por Bunge [48].

3.2 Convergencia del Cálculo Numérico

3.2.1 Espectro Energético

Puesto que estamos resolviendo aproximadamente el problema, tenemos que establecer criterios de confiabilidad para nuestros cálculos de los valores y vectores propios para una matriz de tamaño finito $N \times N$.

Como parte del análisis de confiabilidad de los cálculos numéricos se consideró, para las energías, la comparación con la fórmula de Weyl de la densidad integrada de niveles,

$$\langle N(E) \rangle \approx \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \Theta(E - H) dpdq, \quad (3.3)$$

donde $\Theta(x)$ es la función escalón y d el número de grados de libertad del sistema. En términos de la densidad, se tiene:

$$\langle \rho(E) \rangle \approx \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int \delta(E - H) dpdq. \quad (3.4)$$

En ambas fórmulas, la integral se realiza sobre el espacio fase accesible al sistema. Esta fórmula da de manera aproximada las contribuciones del volumen de espacio fase al comportamiento promedio de los niveles de energía (véase, por ejemplo, [35]). Sin embargo, la Ec. (3.3) sólo es el primer término de una serie asintótica de $\langle N(E) \rangle$ en potencias de \hbar ; las correcciones a este comportamiento pueden ser fuertes, por ejemplo, en billares bidimensionales. Se deben incluir las contribuciones del perímetro, de la curvatura, del efecto de las esquinas y de la topología del billar. Aun más, existen correcciones importantes debidas a órbitas periódicas específicas que corresponden a variedades parabólicas [49]² en billares caóticos bi y tridimensionales. El caso de osciladores cuárticos con simetría permutacional no es la excepción. Las consideraciones de simetría permutacional definida y de paridad van más allá

²En [49] las desviaciones se deben a órbitas denominadas *bouncing ball orbits* u “órbitas de rebote”.

de dividir la $N(E)$ entre $N_p!$ y 2, respectivamente, para no contar los estados que se repiten. La selección de funciones antisimétricas actúa como la imposición de condiciones de frontera, por lo que existirán términos adicionales a la integral de la Ec. (3.3), como en el caso de los billares. Los términos más allá de esta parte de volumen de espacio fase son difíciles de calcular y, en este trabajo, se determinaron por medio de un ajuste en potencias decrecientes del número de onda. Lo anterior se traduce en el ajuste de los datos numéricos a un desarrollo en potencias de $E^{\frac{3d}{4}-\frac{i}{2}}$, de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle N(E) \rangle \approx & \frac{1}{2} \frac{1}{N_p!} \frac{1}{\Gamma(d/2+1)} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{d/2} \left[\int_{V(\mathbf{x}) < 1} (1 - V(\mathbf{x}))^{d/2} d\mathbf{x} \right] \times E^{\frac{3d}{4}} \\ & + \sum_{i=1}^{\infty} a_i E^{\frac{3d}{4}-\frac{i}{2}}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

donde el primer término corresponde a la integral (3.3) y el término restante corresponde al desarrollo en serie de potencias. Para la descomposición de la integral de la Ec.(3.3) a la integral que aparece en (3.5) se hizo uso de la propiedad de escalamiento del potencial ³ $V(\mathbf{x})$ de tal manera que la dependencia en la energía va como $E^{\frac{3d}{4}}$; la función $\Gamma(d/2 + 1)$ y el factor que incluye a \hbar surgen de esta transformación. El factor 1/2 se debe a que consideramos una paridad específica y el $1/N_p!$ corresponde a considerar partículas fermiónicas indistinguibles. La integral de volumen de espacio fase se calculó por el método de Monte Carlo y el ajuste de potencias se realizó a través de mínimos cuadrados. La corrección para dos cuerpos es pequeña, pero se va incrementando conforme aumenta N_p .

En la Fig.(3.1) se muestran los resultados para $N_p = 2$. La línea continua corresponde a los datos numéricos obtenidos para una matriz de $6,000 \times 6,000$ del hamiltoniano H_1 de dos cuerpos. (Para los valores de los parámetros de los hamiltonianos H_1 y H_4 véase la Tabla 2.1 del capítulo anterior.) La línea punteada corresponde, por su parte, a la fórmula de Weyl de la Ec.(3.3) y, para que coincidieran los datos, fueron trasladados al origen. Los resultados para cuatro partículas se encuentran en la Fig. 3.2 para una matriz de 10000×10000 . Aquí, la $\langle N(E) \rangle$ teórica corresponde a la parte de Weyl de la Ec.(3.3) más las correcciones de orden decreciente en potencias de E con los factores de la Tabla 3.1. Adicionalmente, se consideró la convergencia de los eigenvalores para matrices de diferentes dimensiones. De los análisis anteriores obtuvimos que el número de estados confiables para H_1 es de aproximadamente 1500 y lo mismo para H_4 .

³Véase los detalles en el apéndice B y en las ref. [50, 51].

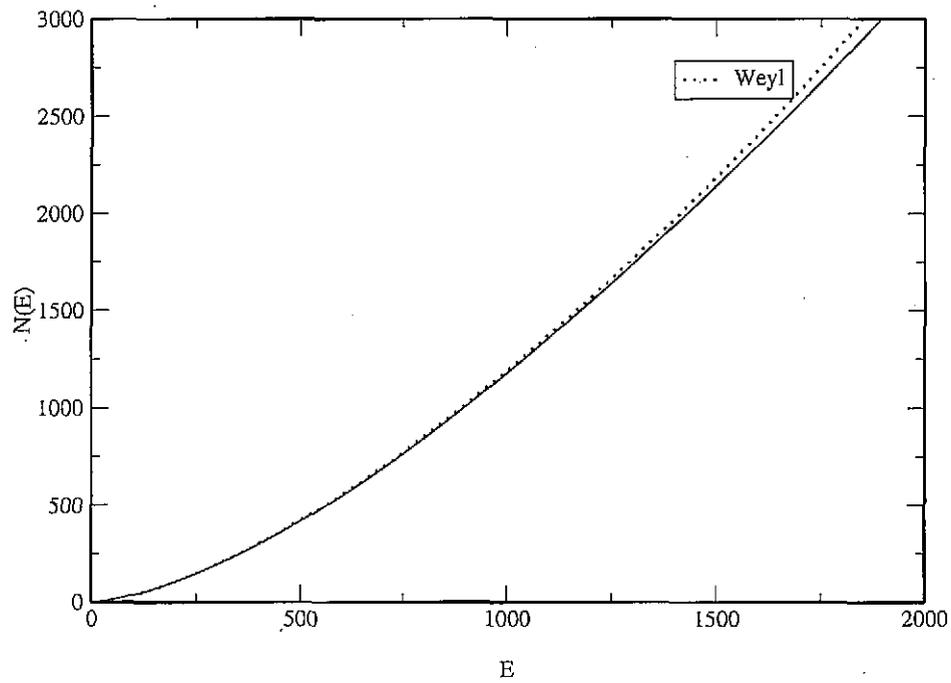


Figura 3.1: La línea sólida representa la densidad integrada $N(E)$ para el hamiltoniano H_1 resultado de la diagonalización de una matriz de $6,000 \times 6,000$. La línea punteada representa la aproximación de Weyl sin correcciones, lo que nos da cerca de 1500 estados confiables. Para que ambas gráficas coincidieran se trasladó la curva del resultado numérico al origen.

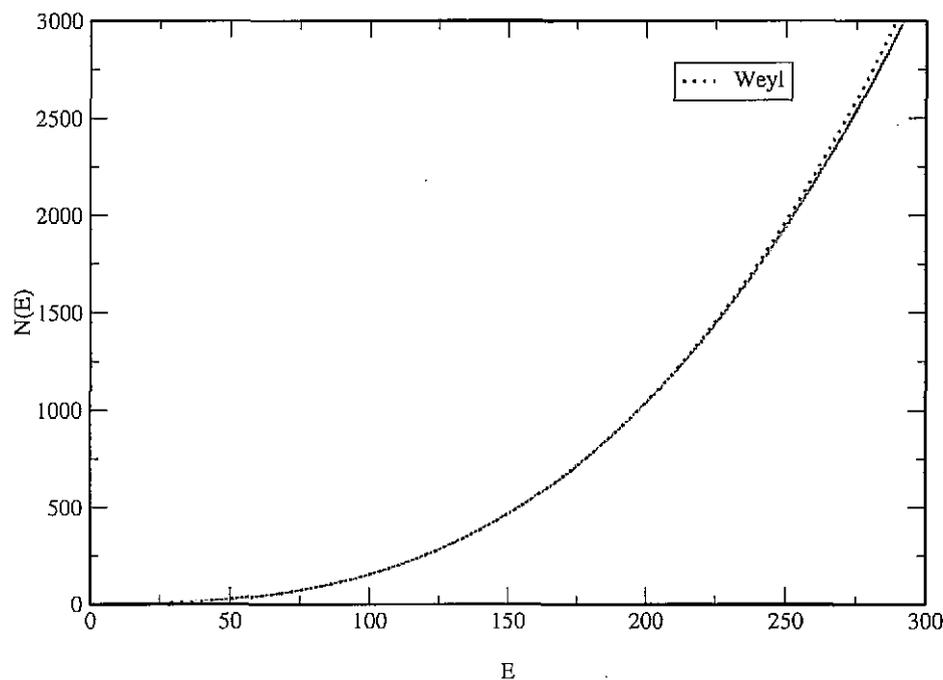


Figura 3.2: La línea sólida representa la densidad integrada $N(E)$ para el hamiltoniano H_4 resultado de la diagonalización de una matriz de $10,000 \times 10,000$. La línea punteada representa la aproximación de Weyl con correcciones, lo que nos da cerca de 1500 estados confiables. Para que ambas gráficas coincidieran se trasladó la curva del resultado numérico al origen.

Tabla 3.1: Coeficientes de expansión en la serie de potencias de la Ec. 3.5, para los diferentes hamiltonianos perturbados y los dos sin perturbación H_0^{2part} y H_0^{4part} . El primer coeficiente corresponde al valor de la integral en 3.5 veces los factores de simetría, los siguientes son calculados por un ajuste polinomial. Todo el cálculo se realizó sobre la curva numérica trasladada al origen.

Términos de expansión de $N(E)$				
Etiqueta	a_0	a_1	a_2	a_3
H_1	0.037606	–	–	–
H_2	0.034218	–	–	–
H_4	0.0001268745	–0.000511224	0.00786658	–
H_0^{2part}	0.031195	–0.021124695	0.57058245	–6.75
H_0^{4part}	0.000094985	–0.00022	0.00478	–

Dentro de los parámetros de confiabilidad de los cálculos numéricos se realizó el análisis de las fluctuaciones del espectro energético. Las estadísticas consideradas son: (i) la distribución de primeros vecinos $P(s)$, donde $P(s)ds$ es la probabilidad de encontrar dos niveles separados por una distancia entre s y $s + ds$; (ii) la varianza de número $\Sigma^2(L)$, que es la varianza del número de niveles energéticos en un intervalo de tamaño L y es una medida de las correlaciones a largo alcance. Como es usual, el espectro numérico se rectifica (*unfold*) con la densidad promedio con la finalidad de eliminar la parte secular y analizar sólo las fluctuaciones. Una manera de hacer esto es dividir el espectro por la densidad promedio calculada por la fórmula de Weyl. Este proceso democratiza las fluctuaciones dándoles un peso diferenciado, dependiendo de donde vivan en el espectro. Otra manera de realizar este procedimiento es evaluar el espectro en el mejor ajuste que tengamos de la densidad integrada y después normalizar el espaciamiento promedio a la unidad.

Los resultados principales para las dos primeras estadísticas se muestran en las figuras (3.3) y (3.4), para dos y cuatro partículas. En el caso de la $P(s)$ (Figs.(3.3a) y (3.4a)), el ajuste a la distribución de Wigner

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) \quad (3.6)$$

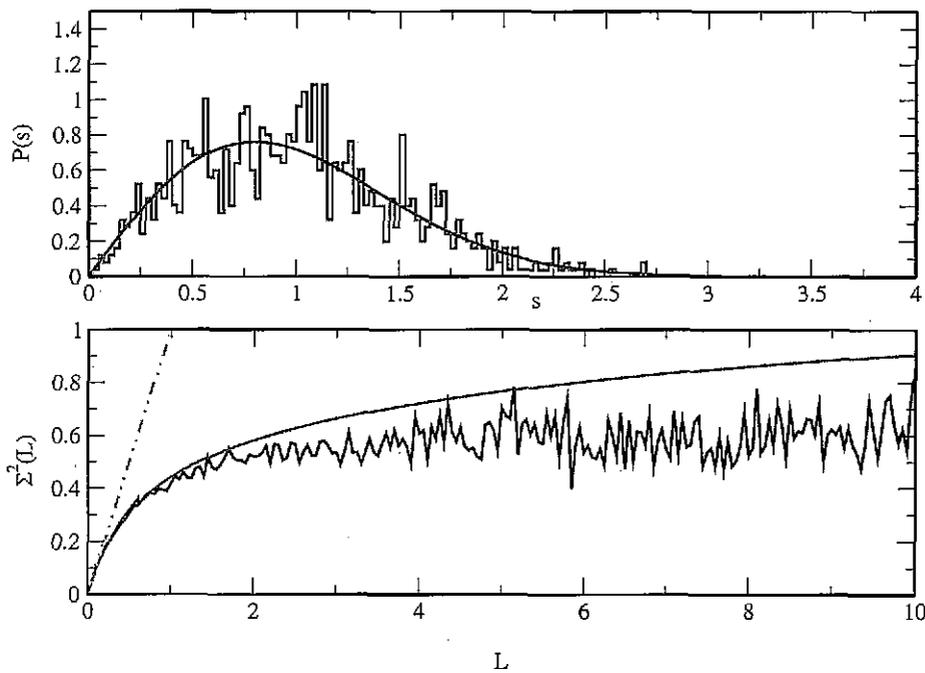


Figura 3.3: (a) Distribución de primeros vecinos $P(s)$ para el hamiltoniano $N_p = 2$ (histograma). En línea continua se presenta la distribución de Wigner. Se consideraron 1000 niveles para el cálculo. (b) Varianza de Número Σ^2 (línea irregular) para H_2 y las distribuciones límite: RMT, en línea continua, y Poisson en línea continua y dos puntos.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

es bueno y las desviaciones son estadísticas con un valor de $\chi_{17}^2 = 14.66835$ para el caso de $N_p = 2$ y de $\chi_{18}^2 = 21.0393$ para $N_p = 4$. En ambos se realizó la estadística para los estados del 51 al 1050 y se descartaron cajas con menos de 10 eventos. Cabe recordar que la distribución de Wigner es una muy buena aproximación a la distribución de primeros vecinos de la teoría de matrices aleatorias, usualmente asociada con sistemas caóticos con simetría de inversión en el tiempo. Para cuatro partículas hay algunas desviaciones pequeñas debidas a la dinámica clásica subyacente. Como explicamos anteriormente, garantizar una dinámica clásica caótica para sistemas de más de dos grados de libertad es difícil pues tenemos que explorar un espacio fase de dimensión mayor a 4, por lo que las desviaciones que aparecen en la $P(s)$ de cuatro partículas son una manifestación de la falta de hiperbolicidad, que se observa mejor en las correlaciones de largo alcance que veremos a continuación.

Mientras que la estadística de corto alcance $P(s)$ es bastante robusta a la presencia de pequeñas islas de orden en un mar caótico [3, 2, 34], la Σ^2 es muy sensible a la dinámica del sistema. Los resultados universales para un sistema sin correlaciones, con $\Sigma^2(L) \sim L$ y el predicho por RMT para sistemas caóticos, con $\Sigma^2(L) \sim \log(L)$, se obtienen bajo condiciones bastante más restringidas que las de la $P(s)$. Dos desviaciones típicas que se encuentran en esta estadística son, por un lado, el fenómeno denominado rigidez de largo alcance reportado por Seligman *et al* [50] y, por el otro, la falta de hiperbolicidad. La primera fue explicada en términos de órbitas periódicas por Berry [52]: La idea es que las principales contribuciones a las correlaciones de largo alcance en el régimen semiclásico provienen de dos fuentes: La primera fuente son las órbitas periódicas inestables en la región caótica en el espacio fase y la segunda de las órbitas periódicas cerradas que habitan donde existen toros invariantes. Al incrementarse el valor de L , la contribución de estas últimas crece en importancia, de tal manera que dominan las fluctuaciones a partir del umbral definido por L_{max} y saturan la estadística. Este umbral corresponde a la energía de las órbitas de periodo más corto:

$$L_{max} \equiv h\Delta/T_{min}, \quad (3.7)$$

donde Δ es el espaciamiento promedio de niveles. Este límite no es universal, pero su efecto siempre es saturar la estadística de largo alcance. La segunda desviación corresponde a la transición de orden a caos en el sistema. Si partimos del caso con correlaciones GOE, asociadas con el caso totalmente caótico, y disminuimos el valor de la interacción, la $\Sigma^2(L)$ tendrá una tran-

sición de una tendencia logarítmica a una lineal [50, 34]. Para el caso en que la interacción es nula la $\Sigma^2(L)$ será lineal. Esta transición se entiende semiclásicamente con el peso relativo que tengan las órbitas inestables de la región caótica contra las órbitas periódicas. Para el caso de dos cuerpos, la Σ^2 numérica, (Fig. 3.3b), se satura rápidamente debido a la falta de órbitas periódicas arbitrariamente cortas como explicamos arriba. El análisis clásico de este sistema de dos grados de libertad nos dice que el exponente de Lyapunov principal es positivo, por lo que el efecto que se observa se debe a una anormal falta de órbitas cortas. En el sistema de cuatro cuerpos, (Fig. 3.4b), la desviación que aparece, corresponde a la falta de hiperbolicidad del sistema. Como se explicó anteriormente, el espacio fase de 8 dimensiones es difícil de analizar en su totalidad, y aunque nuestro cálculo clásico aparentó suficiente hiperbolicidad, el cálculo cuántico muestra que fue insuficiente.

3.3 Medida de las Fluctuaciones sobre el Límite Clásico

En esta sección daremos la introducción formal a lo que constituye una de las principales contribuciones de este trabajo: el estudio de las fluctuaciones de las EF's rectificándolas con su límite clásico. Para ejemplificar de qué manera se realiza el cálculo usaremos algunas de la EF's de H_1 y H_4 , aunque los resultados numéricos *in extenso* se dan en el capítulo 4 mientras que los resultados de las fluctuaciones se dan en el capítulo 5. Además se presenta un modelo de matrices aleatorias para considerar que el promedio de las EF's permanezca fijo. Este modelo da como resultado que las fluctuaciones alrededor del promedio son gaussianas de ancho unidad.

3.3.1 Rectificación de las Eigenfunciones

Una vez que tenemos los dos ingredientes principales para el análisis, las eigenfunciones cuánticas (QEF) y su límite clásico, denominado eigenfunción clásica(CEF) [36] y que explicamos en el capítulo anterior, procedemos al estudio de las fluctuaciones. En la referencia [36] se propuso que su estudio podía hacerse siguiendo el mismo espíritu que para las energías. Si la CEF es la densidad clásica de la EF, la manera de rectificar (es decir, hacer el *unfolding*) los datos cuánticos para estudiar sus fluctuaciones sin la parte promedio será la misma que para las energías: dividimos la QEF por su

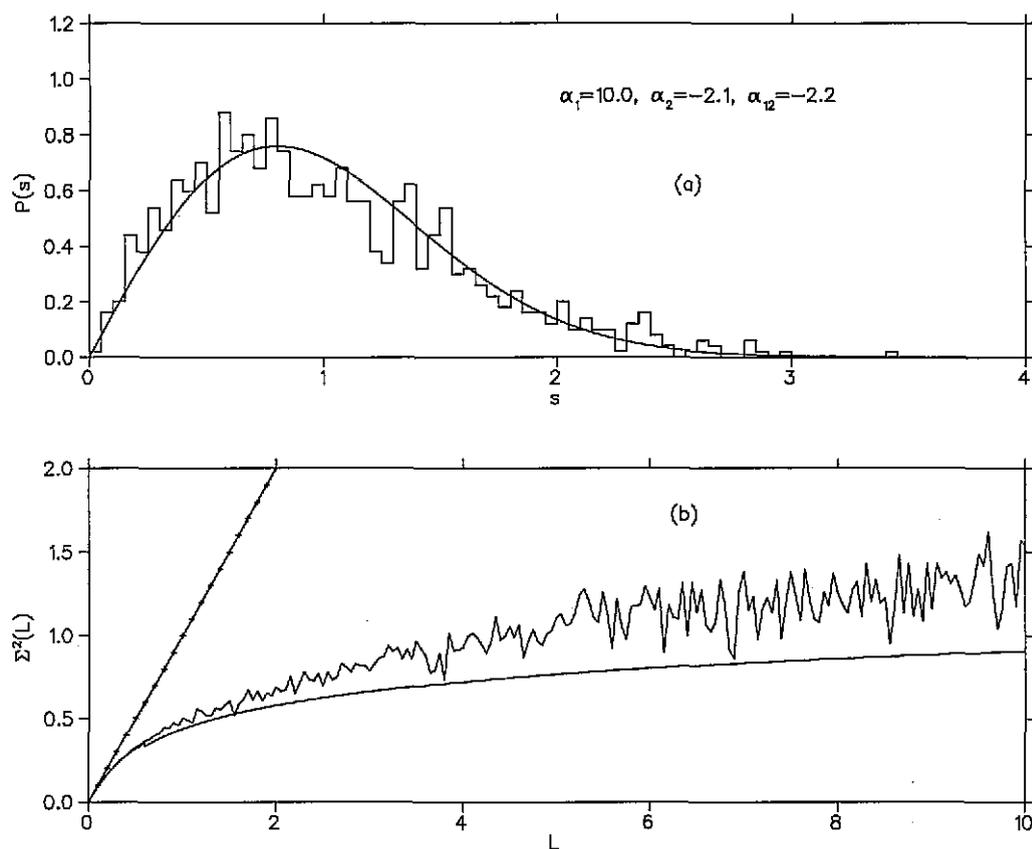


Figura 3.4: (a) Distribución de primeros vecinos $P(s)$ para el hamiltoniano $N_p = 4$ (histograma). En línea continua se presenta la distribución de Wigner. Se consideraron 1000 niveles para el cálculo. (b) Varianza de Número Σ^2 (línea irregular) para H_4 y las distribuciones límite: RMT, en línea continua y Poisson en línea continua con cruces.

densidad promedio, la CEF:

$$\bar{C}_k^i = \frac{C_k^i}{\sqrt{\tilde{g}(\mathcal{E}_k^0, \mathcal{E}^i)}}, \quad (3.8)$$

donde $C_k^i = \langle \varphi_k | \Psi_i \rangle$ son los coeficientes de desarrollo de la EF en la base de H_0 y $\tilde{g}(\mathcal{E}_k^0, \mathcal{E}^i)$ es la CEF definida en la Ec.(2.16). Hemos puesto explícitamente los índices k e i en las energías de \tilde{g} para indicar que está evaluada en los valores discretos de los hamiltonianos cuánticos H_0 y H . En el capítulo anterior mencionamos el problema de normalización entre la CEF y la QEF que resolvimos normalizando la $\tilde{g}(\mathcal{E}_k^0, \mathcal{E}^i)$ evaluada en \mathcal{E}_k^0 (y por lo tanto discretizada) como una función del índice k de tal manera que $\sum_k \tilde{g}_k^i = 1$, donde $g(\mathcal{E}_k^0, \mathcal{E}^i) \equiv g_k^i$. Un detalle adicional a la Ec. (3.8) es que, como se verá más adelante, cada EF tiene una región donde la razón (3.8) esta bien definida y donde no, por ello, la norma es $\sum_k |\tilde{C}_k^i|^2 = N_{eff}^i$, donde N_{eff}^i es el número efectivo de componentes considerados en el estado i . Por lo anterior renormalizamos a la unidad todas las amplitudes: $y_k^i \equiv \tilde{C}_k^i / \sqrt{N_{eff}^i}$. Sobre este punto volveremos en el capítulo cuatro.

La factibilidad de (3.8) depende de que, en promedio, las C_k^i sean aproximadamente iguales a su límite clásico, esto es:

$$\langle |C_k^i|^2 \rangle \approx \tilde{g}(\mathcal{E}_k^0, \mathcal{E}^i) \equiv \tilde{g}_k^i, \quad (3.9)$$

donde $\langle \cdot \rangle$ representa un promedio en una banda de energía sobre varios estados o sobre un *ensemble*, en caso de ser esto posible. En sistemas dinámicos esta igualdad aproximada puede no ocurrir para todos los estados o fallar en ciertas regiones de espectro no perturbado sobre el que esta definida la EF.

Como ejemplo de la clase de situaciones que se dan cuando se realiza el procedimiento de rectificado presentamos algunas EF's de nuestros sistemas y analizamos sus características, en el siguiente capítulo se muestran y explican los resultados numéricos en detalle. En la figura (3.5) se observa un promedio sobre 101 EF's alrededor de (a) Ψ_{500} y (b) Ψ_{900} para el hamiltoniano H_1 . Podemos notar que existen zonas en las que la igualdad aproximada (3.9) está lejos de cumplirse. La primera zona corresponde a energías \mathcal{E}^0 bajas respecto a la energía de corte clásico abajo de la cual la CEF tiene valor cero. Esto se debe a las zonas de energía no permitida que definen los ceros del argumento de la función delta en la Ec.(2.23), como se mostró en los ejemplos unidimensionales. Esta zona prohibida es de tunelaje cuántico, por

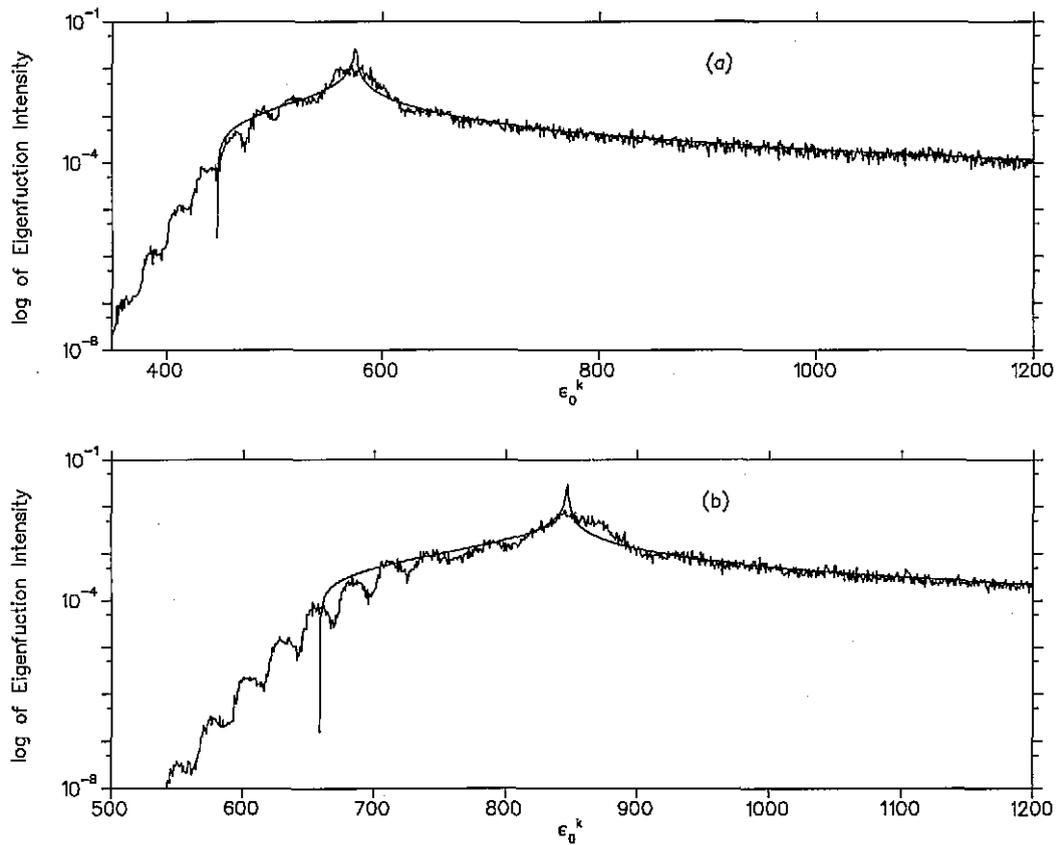


Figura 3.5: Logaritmo de una eigenfunción promediada $\langle |C_k^i|^2 \rangle$ sobre 101 estados alrededor de (a) Ψ_{500} y (b) Ψ_{900} para el hamiltoniano H_1 ; estos estados son sólo ejemplos y en el siguiente capítulo se explican en detalle. La línea suave y continua corresponde al límite clásico o eigenfunción clásica, que es la misma, escalada a energía E^i , que la que aparece en la figura 2.4(a) y dividida por la densidad $\rho_0(E^0)$.

lo que el rectificado en esta zona no tiene sentido pues $\tilde{g} = 0$. Más aun, debido al rápido decaimiento de la CEF, la correspondencia clásico-cuántica no se cumple aun para un intervalo de energías arriba de este corte, por lo que para evitar fluctuaciones extremas se evita esta región de rápido cambio en la CEF. Esto se explica más adelante con mayor detalle. Otra zona en la que no hay buena correspondencia es para energías \mathcal{E}^0 altas, donde, debido a los efectos de borde por tratarse del resultado de diagonalizar una matriz finita, la confiabilidad de las intensidades cuánticas falla, efecto que aparece a energías más allá de las que aparecen aquí, pero cuya forma es similar a como se verá en las figuras (4.16) a (4.18). En la zona central las singularidades de \tilde{g} en la vecindad de $\mathcal{E}_k^0 \approx \mathcal{E}^i$ está mal calculada numéricamente debido a que estamos evaluando la CEF sobre el espectro discreto \mathcal{E}_k^0 , por ésta razón y porque la tasa de crecimiento de la CEF es muy grande, excluimos esta zona central del análisis de las fluctuaciones. Para ser equitativos, tanto para la CEF y como para la QEF no se considera el rectificado (Ec. 3.8) en las zonas de rápido cambio en la CEF. Esto es, en las zonas de energías \mathcal{E}_k^0 bajas ni en la vecindad donde $\mathcal{E}_k^0 \approx \mathcal{E}^i$. Tampoco se realiza en las zonas en las que la correspondencia clásico-cuántica, expresada en la Ec. (3.9), es mala. En términos prácticos a la QEF y a la CEF se les recortan esas zonas y se renormalizan. A estas amplitudes rectificadas y renormalizadas las denominaremos como y_k^i , como se expresó arriba.

De manera estricta la razón de la QEF a la CEF se puede hacer donde quiera que esta última no sea nula. Sin embargo, las zonas de rápido crecimiento, o donde no hay una buena correspondencia, dan lugar a fluctuaciones extremas. En las Figs. 3.6 y 3.7 mostramos este efecto. En la Fig. 3.6 aparecen las amplitudes (a) e intensidades (b) del estado Ψ_{549} de H_4 . En línea continua se presenta la envolvente clásica $\sqrt{\tilde{g}(\mathcal{E}^0, \mathcal{E})}$ y $-\sqrt{\tilde{g}(\mathcal{E}^0, \mathcal{E})}$ para las amplitudes (a) y la correspondiente $\tilde{g}(\mathcal{E}^0, \mathcal{E})$ para intensidades (b). En la Fig. 3.7(a) se muestra la razón \tilde{C}_k^i para el rango de energía que va de \mathcal{E}_c^0 a la última energía confiable, con \mathcal{E}_c^0 definida como $\tilde{g}(\mathcal{E}_c^0, \mathcal{E}) = 1 \times 10^{-4}$. Este rango considera parte de la zona de rápido cambio en \tilde{g} . El efecto de considerarlo así es la presencia de las grandes fluctuaciones que se observan para energías \mathcal{E}^0 bajas, tanto en amplitudes(a) como en intensidades (b). Esta es la razón por la cual descartamos estas zonas para nuestro análisis de las fluctuaciones (cap. 5) y consideramos sólo regiones de cambio suave en la CEF.

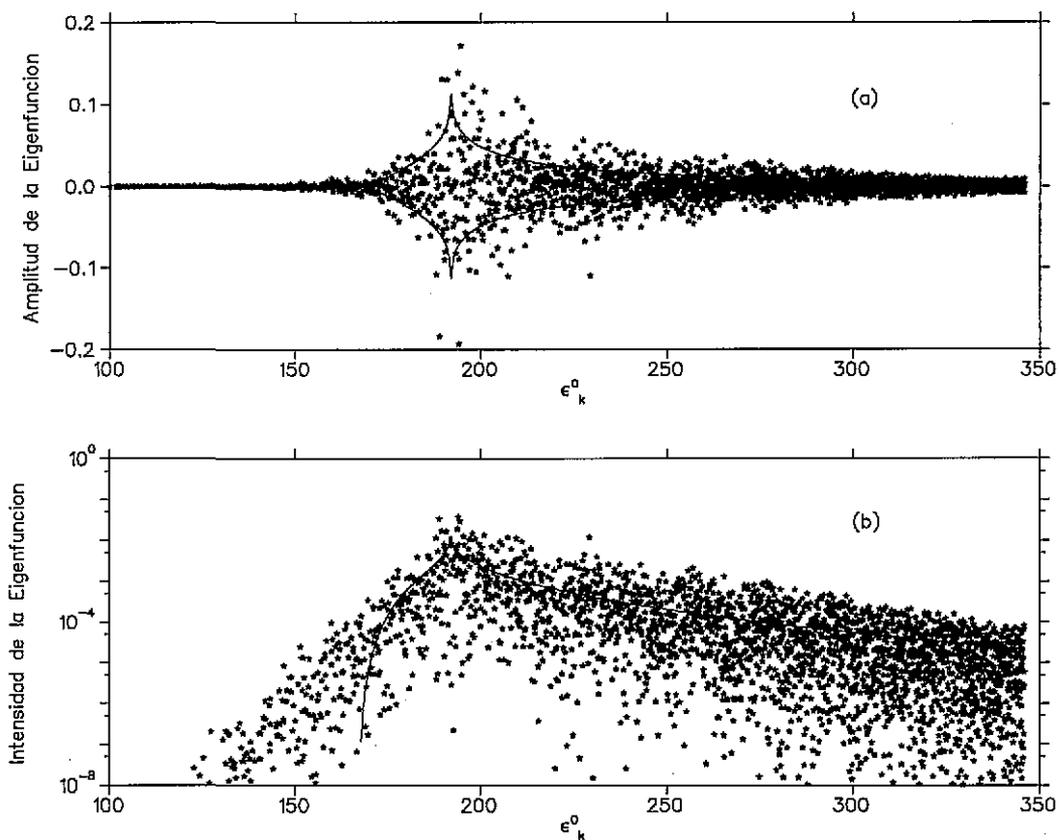


Figura 3.6: Eigenfunción Ψ_{549} de H_4 en (a) amplitudes y en (b) intensidades. La línea suave y continua corresponde al límite clásico $\bar{g}(\mathcal{E}^0, \mathcal{E})$ en intensidades. En (a) se muestra la envolvente de la QEF, como $\sqrt{\bar{g}(\mathcal{E}^0, \mathcal{E})}$ y $-\sqrt{\bar{g}(\mathcal{E}^0, \mathcal{E})}$.

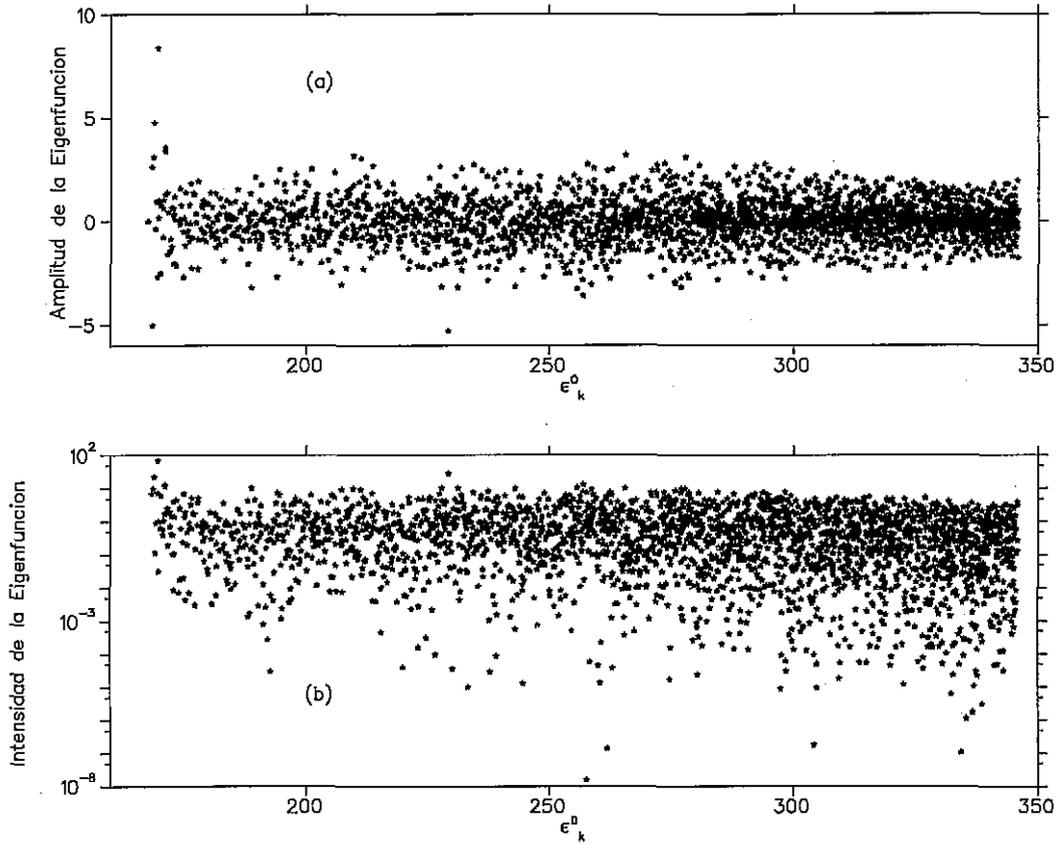


Figura 3.7: Eigenfunción rectificada Ψ_{549} de H_4 en (a) amplitudes y en (b) intensidades. Nótese las grandes fluctuaciones a baja energía no perturbada que corresponden a la región de rápido crecimiento de la CEF. Véase la explicación en el texto.

3.3.2 Un Modelo de Matrices Aleatorias para las Fluctuaciones

La predicción de la Teoría de Matrices Aleatorias (RMT) para EF's corresponde a funciones con una distribución Gaussiana de las amplitudes y Porter-Thomas de las intensidades. En los modelos estándar de RMT cualquier información sobre el promedio no aparece intrínsecamente, pues se trata de EF's en la base más general posible, sólo restringida por las simetrías del problema y por la normalización. En nuestro caso, cualquier modelo aleatorio necesita incluir la restricción de que los elementos de matriz O_{ik} , que representan las eigenfunciones de un ensemble de hamiltonianos aleatorios H en la base de otros H_0 , cumplan con la condición

$$\langle |O_{ik}|^2 \rangle = I_{ik}, \quad (3.10)$$

donde I_{ik} es el valor promedio al que se sujetará el modelo. Esta cantidad contiene la información sobre la base especificada. Sin pérdida de generalidad podemos considerar matrices ortogonales que, como en nuestro caso, se aplican para sistemas invariantes ante inversión en el tiempo. Así, podemos considerar los elementos de matriz O_{ik}^μ de un *ensemble* de matrices ortogonales sujetos a la restricción (3.10) y donde $\mu = 1, \dots, M$ corre sobre los elementos del *ensemble* e $i, k = 1, \dots, N$, donde $N \times N$ es el tamaño de las matrices.

Si realizamos el cambio de variable

$$x_{ik}^\mu = \frac{O_{ik}^\mu}{\sqrt{I_{ik}}}; \quad (3.11)$$

proponemos que $\langle x_{ik} \rangle = 0$ y, de la condición (3.10), que $\langle x_{ik}^2 \rangle = \langle |O_{ik}|^2 \rangle / I_{ik} = 1$. Nótese que la normalización de x_{ik}^μ es a N , puesto que $\sum_k |x_{ik}^\mu|^2 = \sum_i |x_{ik}^\mu|^2 = \sum_k |O_{ik}|^2 / I_{ik} = N$. De esta manera, tenemos una variable aleatoria sujeta a las restricciones de seguir una norma, una media y una varianza fijas. ¿Cuál es su distribución? Para obtener la distribución de mínima información sujeta a las restricciones anteriores aplicamos multiplicadores de Lagrange para ellas y la distribución de x_{ik} bajo estas condiciones resulta ser una Gaussiana. Es ésta la distribución que siguen las amplitudes rectificadas en este modelo.

No obstante, hay que tener cuidado sobre las condiciones bajo las cuales este modelo se aplica. Para un sistema dinámico, las primeras desviaciones que podemos considerar son las debidas a los estados cicatrizados sobre

órbitas periódica inestables (*scars*) o en general, a estados localizados en el espacio de energía. Otra desviación corresponde a la falta de ergodicidad del sistema, lo que haría que el modelo se pudiera aplicar sólo en algunas regiones del espectro o, en el peor de los casos, no se aplicara. Además, en regiones donde las intensidades son grandes ($I_{ik} \simeq 1$) se presenta el problema de que estas no son zonas idóneas para una aproximación estadística y sus fluctuaciones estarán fuera del alcance de un modelo como el que presentamos.

Cuando trabajamos con un sistema dinámico en particular buscamos en donde es posible contrastarlo con el modelo de matrices aleatorias. De lo dicho anteriormente, podemos deducir que una distribución Gaussiana para las amplitudes rectificadas de un sistema en particular se verificará en regiones donde $I_{ik} \ll 1$ y la correspondencia clásico-cuántica sea buena, esto es, donde el requisito (3.9) se cumpla en buena medida. Como veremos más adelante, esto ocurre en determinadas ventanas de energía en las EF's de los sistemas que analizamos. Es posible atenuar los problemas de ergodicidad y presencia de *scars* si ambos hamiltonianos, H y H_0 son caóticos y, en algún sentido, poco relacionados entre sí. Podemos entender esto haciendo uso de la idea de Berry [12] para EF's en el espacio fase: es de esperarse que las EF's de un hamiltoniano caótico cubran de manera uniforme todo el espacio accesible, de dimensión $2d - 1$, siendo d el número de grados de libertad. Esta imagen se cumple excepto por pequeñas concentraciones sobre las órbitas periódicas. Para un hamiltoniano integrable, las EF's están localizadas sobre los toros bien definidos y confinados a un espacio fase disponible mucho menor que el caso anterior, pues su dimensión es d . De lo anterior es claro que una superposición anormalmente grande de estados caóticos tendrá una probabilidad mucho menor de ocurrir que en el caso de funciones en que un hamiltoniano es caótico y el otro integrable. En la última sección del capítulo 4 damos un ejemplo de lo anterior.

Capítulo 4

Correspondencia Clásico-Cuántica para EF's

Como vimos anteriormente, la correspondencia clásico-cuántica es fundamental para el proceso de rectificado. Motivados por ello, en este capítulo presentamos los resultados numéricos *in extenso* para esta correspondencia en el caso de dos y cuatro partículas como base para el análisis de las fluctuaciones que se presentan en el siguiente capítulo.

4.1 Los Hamiltonianos Numéricos

Los hamiltonianos fueron construidos como se explica en el capítulo anterior. Las matrices con las que se realizaron los cálculos fueron de 6000×6000 y de 10000×10000 para dos y cuatro cuerpos, respectivamente. Los valores α , β y γ son los indicados en la Tabla 2.1 para los hamiltonianos H_1 y H_4 .

Las bases que se usaron fueron las de osciladores cuárticos independientes $H_0 = \sum_i p_i^2 + \alpha x_i^4$, para el hamiltoniano de dos partículas H_1 y de cuatro partículas H_4 . En el caso del hamiltoniano de dos cuerpos H_2 se usó la base de las eigenfunciones de H_1 , la cual, evidentemente, no es de partícula independiente.

4.2 Eigenfunciones de Pocos Cuerpos

4.2.1 Razón de Participación

Una manera útil de clasificar las funciones de onda es calcular el número de estados de una base que participan en su composición. Una medida de ese número efectivo es la razón de participación $P_i^{(+)} = (\sum_k |C_k^i|^4)^{-1}$ y su inverso $P_i^{(-)} = 1/P_i^{(+)}$ [58, 59]. Este último es muy utilizado en la literatura por la comodidad que presenta para su estudio analítico, pero en esta tesis nos centraremos en el primero por ser más manejable en las gráficas. Un estado que se encuentra en su eigenbase tendrá $P^{(+)} = 1$, mientras que uno que se encuentre igualmente distribuido en una base de tamaño N tendrá una razón de participación $P^{(+)} = (\sum_k \frac{1}{(\sqrt{N})^4})^{-1} = N$. Para un *ensemble* de matrices aleatorias ortogonales (o sea, GOE) el resultado para $P^{(+)}$ es $(N + 2)/3$ (Ref. [3]).

En la gráfica (4.1) se muestra la razón de participación, como función de la energía en (a) y como función de número de estado en (b). Su inverso aparece en la Fig. (4.2) en escala logarítmica en ambos ejes. En las refs. [36, 40] se observó que existen estados localizados en el espacio de energía que son los estados con un $P^{(+)}$ muy por abajo del promedio y a energías E^i alta. Estos estados pueden estar asociados con *scars* o no, pero su influencia en las fluctuaciones de las QEF es importante, como lo veremos adelante. El promedio de la razón de participación crece linealmente y lo calculamos haciendo un promedio sobre cajas que incluyan 5 niveles cada vez.

En la figura 4.3 se muestra el resultado para 4 cuerpos, la gráfica está ordenada de la misma manera que para 2 cuerpos. La presencia de estados con bajas razones de participación también se encuentran aquí aunque la densidad de niveles es diferente, pues en el caso de dos cuerpos es proporcional a $E^{1/2}$ mientras que en cuatro lo es a E^2 .

En términos generales *no* esperamos que la razón de participación decrezca pues sea cual sea la dimensionalidad de los sistemas las eigenfunciones de H a energías mayores tendrán un número mayor de nodos y requeriremos cada vez más funciones de la base para representarla. Recuérdese que la razón de participación es una medida del número efectivo de estados de la base que participan en la conformación de cada estado.

De manera marginal, mencionaremos que para los estados localizados en energía se puede comprobar si son *scars* o no usando los métodos descritos en la referencia [24], por ejemplo. Sin embargo, tal comprobación está fuera del

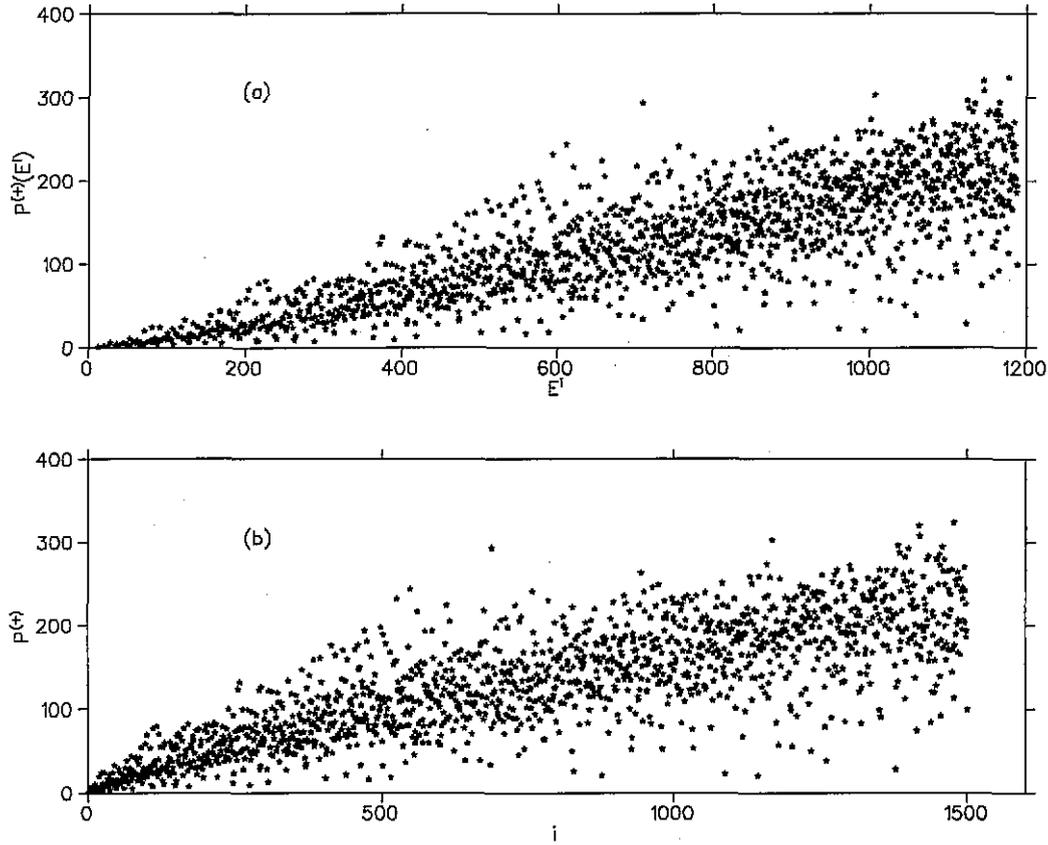


Figura 4.1: Razón de participación $P_i^{(+)} = (\sum_k |C_k^i|^4)^{-1}$ para el hamiltoniano H_1 contra (a) la energía perturbada E^i y contra (b) el número de estado. Se consideraron 3000 componentes por estado. El estado marcado por el cuadro corresponde al estado localizado Ψ_{878} .

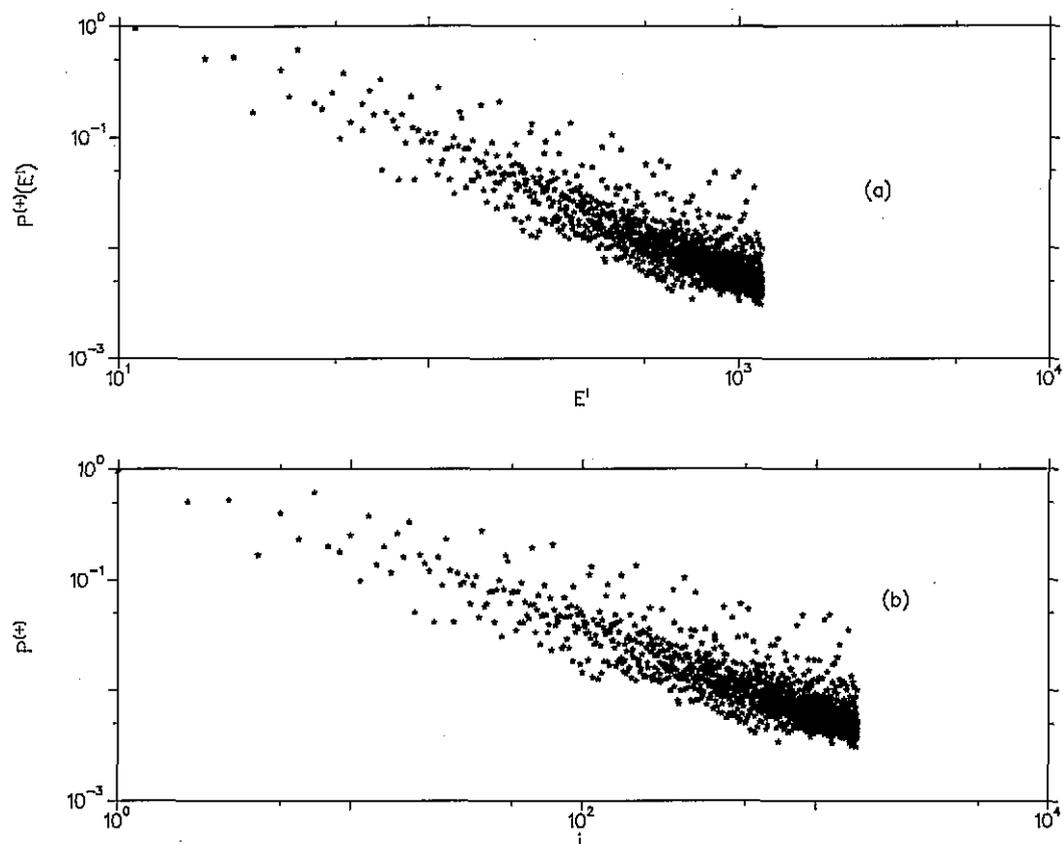


Figura 4.2: Razón de participación inversa $P_i^{(-)} = \sum_k |C_k^i|^4$ para el hamiltoniano H_1 contra (a) la energía perturbada E^i y contra (b) el número de estado en escala log-log. Se consideraron 3000 componentes por estado.

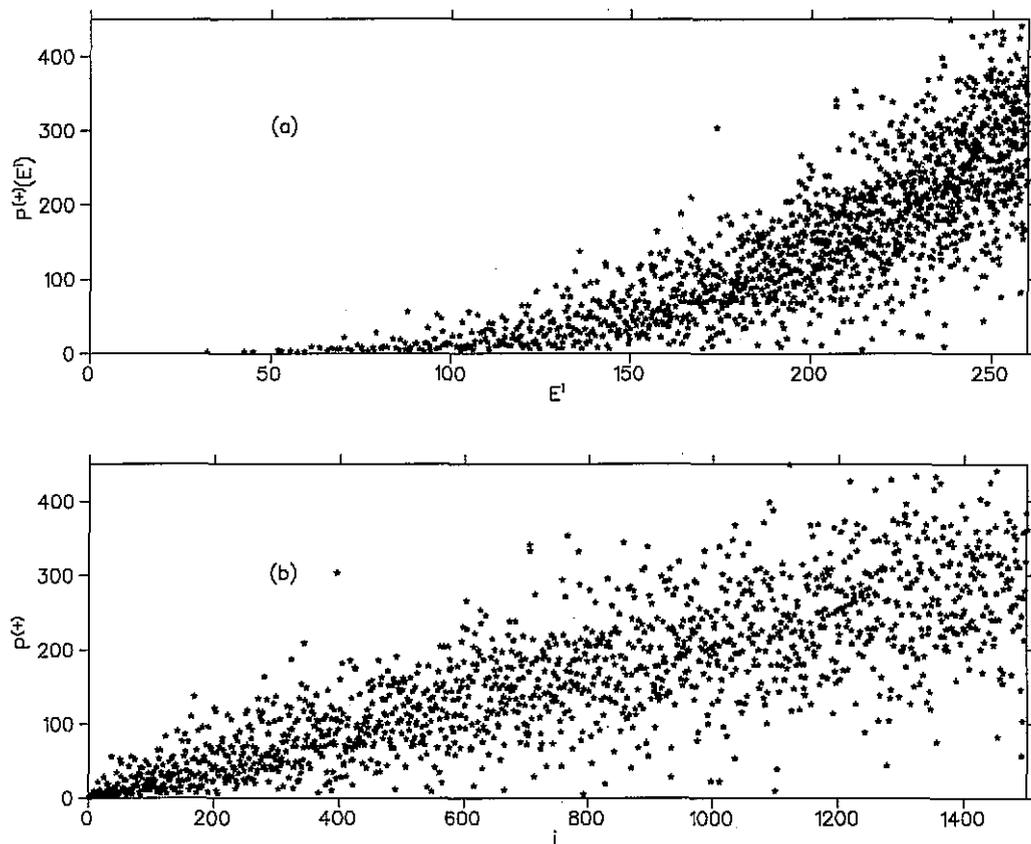


Figura 4.3: Razón de participación $P_i^{(+)} = (\sum_k |C_k^i|^4)^{-1}$ para el hamiltoniano H_4 contra (a) la energía perturbada E^i y contra (b) el número de estado. Se consideraron 3000 componentes por estado.

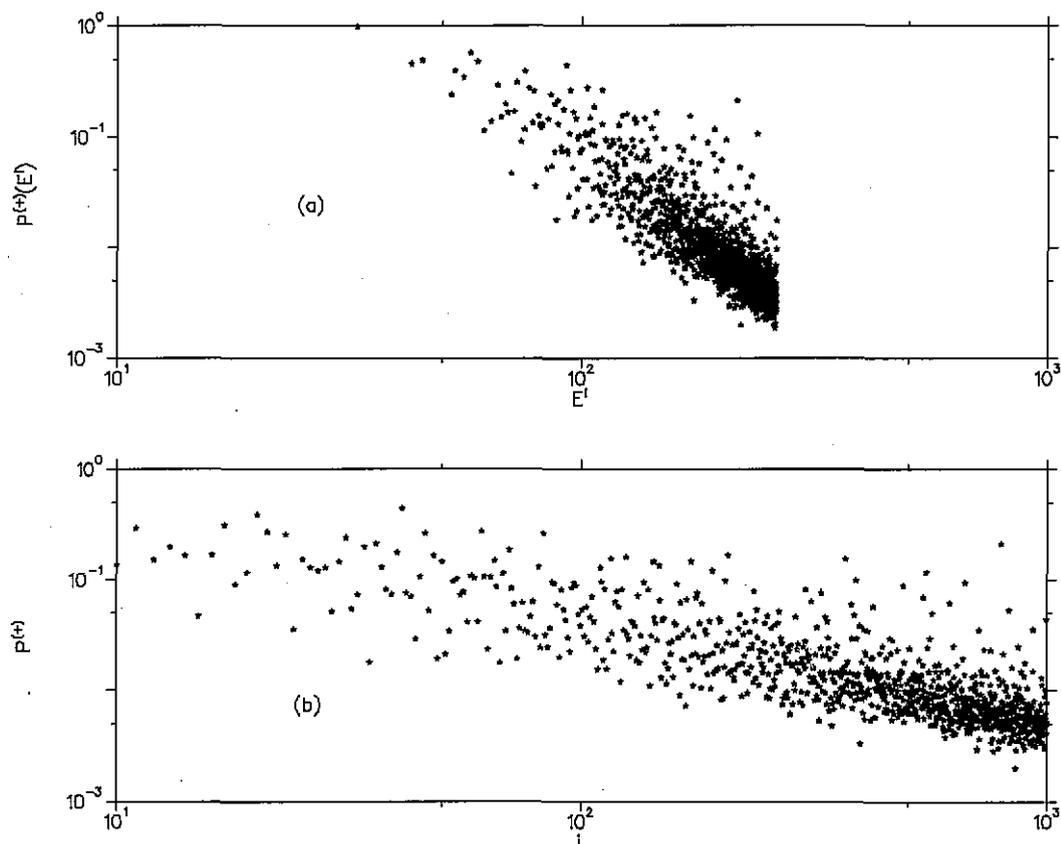


Figura 4.4: Razón de participación inversa $P_i^{(-)} = \sum_k |C_k^i|^4$ para el hamiltoniano H_1 contra (a) la energía perturbada E^i y contra (b) el número de estado en escala log-log. Se consideraron 3000 componentes por estado.

alcance de esta tesis y no es relevante para el estudio de las fluctuaciones que veremos adelante. Además, para el caso de cuatro partículas la comprobación conlleva las dificultades inherentes al estudio clásico de un sistema de 4 grados de libertad.

4.2.2 Correspondencia Clásico-Cuántica

Una parte importante de nuestro análisis es comprobar que la correspondencia clásico-cuántica de las funciones de onda y su límite clásico realmente ocurre. Este análisis se ha verificado, en parte, en el caso de osciladores cuárticos de dos cuerpos [36] y en el billar ondulado [37] dando una excelente correspondencia. Esto también se verifica para los ejemplos presentados en la sección 2.2.2. En esta sección presentamos los resultados numéricos para 2 y 4 partículas, tanto para EF's individuales como para sus promedios. Aunque los resultados de 2 partículas fueron reportados en la ref. [36, 40] la correspondencia clásico-cuántica se realizó de una forma que depende fuertemente de la elección de las ventanas en energía E_k^0 que se usaron para normalizar (véase la sección 2.2), además de hacer imposible el rectificado de las EF's. Tanto la normalización como la manera de presentar los resultados que damos aquí permiten una comparación unívoca de los estados individuales y casi-unívoca, como se explicará adelante, para los promedios.

Cabe esperar que la correspondencia sea mejor conforme incrementamos la energía y tomamos el límite $\hbar \rightarrow 0$, salvo, tal vez, alguna clase de suavización. Como veremos más adelante, los promedios se ajustan muy bien al límite clásico para energías altas.

EF's cuánticas sin promediar

En esta sección presentamos las EF's cuánticas individuales para el hamiltoniano H_1 y el H_4 en la base de los osciladores cuárticos anarmónicos desacoplados H_0 , es decir $|\langle \varphi_k | \Psi_i \rangle|^2 \equiv |c_k^i|^2$ como función de E_k^0 .

La clase de estructura esperada en general para las EF's en la base de energía no perturbada es la siguiente: i) Una función con fuertes fluctuaciones, por ser el problema cuántico y no integrable. ii) Una función decreciente debido que los sistemas perturbado y sin perturbar no son genéricos, (de hecho comparten algunas propiedades como la homogeneidad de grado 4), de ello deducimos que la transposición (*overlap*) de estados decaerá exponencialmente a altas energías no perturbadas. iii) Una función cuyo máximo

este centrados en la vecindad de $E_k^0 \approx E^i$ y que presente un ancho, pues es de esperarse que la interacción ensanche un eigenfunción.

La forma de la función no es universal pues es función de la base. Sin embargo, en sistemas genéricos con una interacción pequeña se espera una función Lorentziana, mientras que para interacciones fuertes se espera una función Gaussiana. Esta transición se observa en Ce [16, 17] y en el caso del TBRE [26]. Para el caso de el *ensemble* GOE, que es una base lo más general posible la forma es al azar, más o menos equidistribuida a lo largo de la base y con una razón de participación que sea aproximadamente un tercio de la dimensión de las matrices del *ensemble*. En nuestro caso, la forma depende la interacción y como veremos el promedio de las EF's no se ajusta ni a una Lorentziana ni a una Gaussiana.

Del análisis general del capítulo 2 podemos deducir algunas de las características de la forma de las CEF's, que esperamos sean el promedio de las EF. En el capítulo 2 encontramos que la CEF estaba dada por la expresión

$$\tilde{g}(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0) = \frac{g(\mathcal{E}, \mathcal{E}^0)}{(2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E}) \rho_0(\mathcal{E}^0)}. \quad (4.1)$$

Después de integrar la parte de momentum lineal la expresión de la g a la que se llegó es

$$g = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)} \int d\mathbf{q} \delta(\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) - (\mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q}))) [\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})]^{\frac{d-2}{2}} \times \Theta(\mathcal{E} - V(\mathbf{q}) + \mathcal{E}^0 - V^0(\mathbf{q})), \quad (4.2)$$

Como se vió en la sección 2.2.2 una parte determinante en el comportamiento de esta función proviene de las raíces de los argumentos de la función delta y de la raíz cuadrada. Este último determina los límites de la integral en el espacio de configuración. El argumento de la función delta es especialmente delicado, pues no sólo necesitamos los ceros de su argumento, sino también sus derivadas evaluadas en los ceros.

En el caso de dos cuerpos podemos hacer un análisis plausible sobre el valor de la integral cuando $E^0 = E$, esto es, evidenciar que hay una singularidad en ese punto. Evaluando g en ese punto tenemos

$$g(E, E) = \int d\mathbf{q} \delta(V(\mathbf{q}) - V^0(\mathbf{q})) \Theta(2E - V(\mathbf{q}) - V^0(\mathbf{q})), \quad (4.3)$$

donde el término $(\sqrt{E + E^0 - (V(\mathbf{q}) + V^0(\mathbf{q}))})^{d-2}$ no contribuye por tratarse de $d = 2$. El término perturbativo es

$$V(\mathbf{q}) - V^0(\mathbf{q}) = \beta q_1^2 q_2^2 + \gamma (q_1^3 q_2 + q_1 q_2^3) \quad (4.4)$$

$$= q_1 q_2 (\beta q_1 q_2 + \gamma (q_1^2 + q_2^2)), \quad (4.5)$$

cuyas raíces son $q_1 = q_2 = 0$ y las soluciones reales de la ecuación $q_1^2 + q_2^2 = (-\beta/\gamma)q_1 q_2$.

La importancia de tener al origen como una de las raíces es clara en el caso del oscilador cuártico en la base del armónico analizado en la sección 2.2.2, la evaluación de la integral en $E^0 = E$ nos da

$$g(E, E) = \int \delta(q^2(\alpha q^2 - \beta))(\sqrt{2E - q^2(\alpha q^2 + \beta)})^{-1} dq, \quad (4.6)$$

donde las constantes α y β son diferentes a las del problema 2 - d. Para continuar el cálculo necesitamos las derivadas del argumento de la función delta evaluada en los ceros. Esta derivada es $q(2\beta - 4\alpha q^2)$ y es claro que evaluada en $q = 0$ hará diverger la expansión

$$\delta(f(q)) = \sum_i \frac{\delta(q - q_i)}{|f'(q_i)|}, \quad (4.7)$$

como se vió en 2.2.2. Algo similar podemos argumentar en el caso de dos cuerpos, la función $q_1 q_2 (\beta q_1 q_2 + \gamma (q_1^2 + q_2^2))$ tiene un mínimo en el origen, por lo que sus derivadas se anulan. Así, todas las derivadas de primer orden se anulan en el origen y dividir por ellas hará divergente a la función. Puede ocurrir que existan otras raíces que no anulen las derivadas, pero la contribución de la derivada en el origen se encuentra presente.

Para ver de que manera diverge podemos usar coordenadas esféricas de nuevo, haciendo el cambio de variable $q_1 = r \cos(\varphi)$ y $q_2 = r \sin(\varphi)$ la función $q_1 q_2 (\beta q_1 q_2 + \gamma (q_1^2 + q_2^2))$ será $r^4 f(\varphi)$, donde $f(\varphi)$ es la función que contiene todos los ángulos (Recuérdese que el potencial es homogéneo por lo que la variable r saldrá de factor común). De esta manera tenemos que

$$\int d\mathbf{q} \delta(q_1 q_2 (\beta q_1 q_2 + \gamma (q_1^2 + q_2^2))) = \int r dr d\varphi \delta(r^4 f(\varphi)) = \int d\varphi \delta(f(\varphi)) \int r dr / r^4. \quad (4.8)$$

Como podemos apreciar, la integral radial da como resultado $\int dr / r^3 = -1/r^2$, que diverge al tender $r \rightarrow 0$, como esperábamos.

Para el tipo de potencial que estamos analizando, los casos de más partículas presentan una similitud con el de dos, pues

$$V(\mathbf{q}) - V^0(\mathbf{q}) = \beta \sum_{i < j}^{N_p} q_i^2 q_j^2 + \gamma \sum_{i < j}^{N_p} (q_i^3 q_j + q_i q_j^3), \quad (4.9)$$

presenta siempre un cero en el origen. Para el caso específico de cuatro partículas podemos hacer el mismo cambio a variables esféricas y tenemos que

$$\int d\mathbf{q} \delta(\beta \sum_{i<j}^4 q_i^2 q_j^2 + \gamma \sum_{i<j}^4 (q_i^3 q_j + q_i q_j^3)) = \int \delta(r^4 f(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)) r^3 dr d\Omega, \quad (4.10)$$

donde f es la función que contiene toda la dependencia angular y sus diferenciales se encuentran en $d\Omega$. La integral sobre la parte radial nos da

$$\int r^3 dr / r^4 = \int dr / r = \log r, \quad (4.11)$$

que diverge nuevamente al tender $r \rightarrow 0$.

En cuanto al rango finito en el que se encuentran definidas las CEF es más difícil hacer una evaluación. Sin embargo, el mecanismo que lo provoca es bastante claro y para una dimensión se explicó en el capítulo 2 (véase la figura (2.5)). La función delta marca la contribución a la integral que conforma g cuando las energías cinéticas son iguales, esto es cuando las hipersuperficies $\sqrt{E - V(\mathbf{q})}$ y $\sqrt{E^0 - V^0(\mathbf{q})}$ se intersecten. Es muy claro que habrá un conjunto de energías no perturbadas cuyas hipersuperficies no alcancen a intersectarse con la hipersuperficie a energía E . Dependiendo del grado de deformación de esta última hipersuperficie será el rango de energías E^0 que contribuyan a la integral y después de un cierto valor dejarán de intersectarse nuevamente.

A continuación presentamos los resultados numéricos, tanto clásicos como cuánticos. Todas las figuras que siguen en el capítulo tienen el siguiente formato: La parte superior de la figura corresponde a la gráfica del estado en escala normal y la inferior al mismo estado en escala semi-logarítmica. La línea suave en ellas corresponde a la CEF de cada estado. Iniciamos el recorrido con las EF's de H_1 . En las figuras siguientes se presentan las gráficas de algunos de los estados que son típicos: el estado Ψ_{100} con una $P^{(+)} = 12.722$ y una energía $E^{100} = 134.3$ en la Fig. 4.5; el estado Ψ_{500} con una $P^{(+)} = 110.81$ y una energía $E^{500} = 576.855$ en la Fig. 4.6; el estado Ψ_{900} con una $P^{(+)} = 127.135$ y una energía $E^{900} = 846.68$ en la Fig. 4.7; y, finalmente, el estado *scarificado* Ψ_{878} con una $P^{(+)} = 20.88$ y una energía $E^{878} = 833.333$ en la Fig. 4.8. Este último estado corresponde al estado marcado dentro de un cuadrado en la figura 4.1. En los tres primeros casos, como puede apreciarse en las figuras, el ajuste en las alas alrededor de la singularidad es bueno en el sentido de que sigue a la CEF aunque con muchas

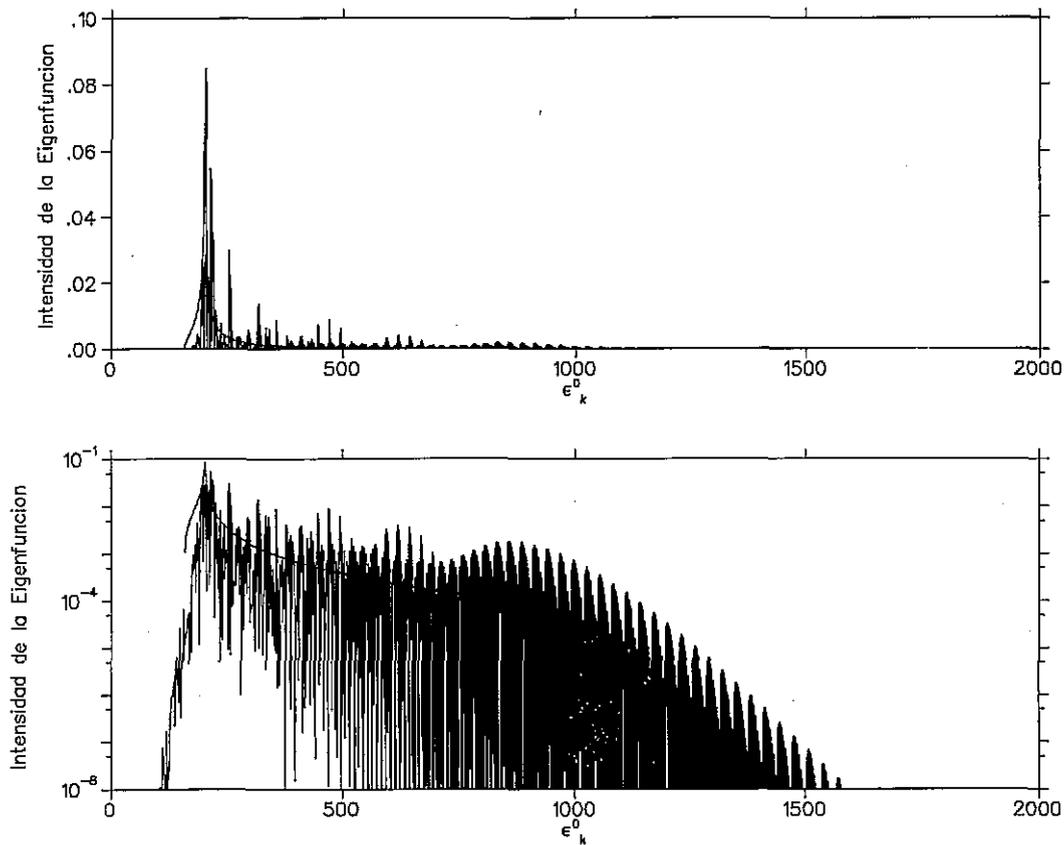


Figura 4.5: En la parte de arriba de esta figura y en las figuras 4.6 a la 4.12 se muestran las intensidades de las EFs sin promediar en escala normal contra el espectro energético del hamiltoniano H_0 y en la parte de abajo en escala semi-logarítmica. Aquí se muestra el estado Ψ_{100} del hamiltoniano H_1 . Las especificaciones aparecen en el texto.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

fluctuaciones, pero es compatible con la CEF. Esto se nota especialmente en las gráficas en escala normal; el caso 4.8 es la excepción a este ajuste pues corresponde a un estado localizado. Si nos restringimos a la región central de la eigenfunción, es decir al rango de energías no perturbadas que están dentro del ancho clásico, el ajuste es válido para un amplio intervalo de estados, desde el estado Ψ_{50} (que no se muestra) hasta estados muy arriba en el espectro. Todas las fluctuaciones están alrededor del límite clásico y la principal diferencia es la presencia importante de otros estados de H_0 alrededor de $E_k^0 \approx E^i$. Así, en general, existen varios picos prominentes dentro del ancho dado por la CEF. Es importante mencionar que la zona central presenta grandes fluctuaciones para la correspondencia de ambos casos: En el clásico se trata de una singularidad difícil de representar numéricamente como se explicó anteriormente, mientras que en el caso cuántico estamos aproximando con un espectro discreto en esta zona por lo que a las fluctuaciones cuánticas normales en este caso le agregamos la relativa escasez de niveles. Es de esperarse que la correspondencia mejore conforme la densidad de niveles aumente para un número mayor de partículas.

En la parte inferior de las figuras se muestran las mismas EF's en escala semi-logarítmica. La correspondencia clásico-cuántica es buena, en general, en las regiones de energía E_k^0 alta y baja respecto al centro. Las fluctuaciones son grandes pero, por lo regular y para estados altos en energía E^i , la CEF está dentro de ellas, particularmente en la zona que se encuentra después del centroide. El ala izquierda es comparativamente más estrecha y sus desviaciones estadísticamente significativa son mayores. Por ejemplo, no siempre la separación entre la CEF y la EF inicia en el hombro de la primera, cuando empieza su caída abrupta a cero. De esta manera, en esa zona, el rango de crecimiento suave de la CEF es pequeña. Eso no ocurre siempre así y una muestra de ello se dará más adelante.

Para energías E_k^0 bajas se nota un decaimiento exponencial en promedio, en general, más oscilaciones para la parte cuántica que se encuentra en la zona clásicamente prohibida, esto es, se trata de un efecto de *tunelaje* cuántico. La tendencia general más allá de estas características particulares es exponencial. Las oscilaciones aparecen también en la zona de alta energía E_k^0 y ocurren aun en la región de poca confiabilidad. La razón de su aparición no es clara, pero se borran o son muy débiles en el caso de cuatro partículas. Esto parecería ser algo dependiente de la baja dimensionalidad del sistema y de la base pues, como veremos más adelante, no tenemos tales oscilaciones para las EF's de H_2 en la base de las EF's de H_1 .

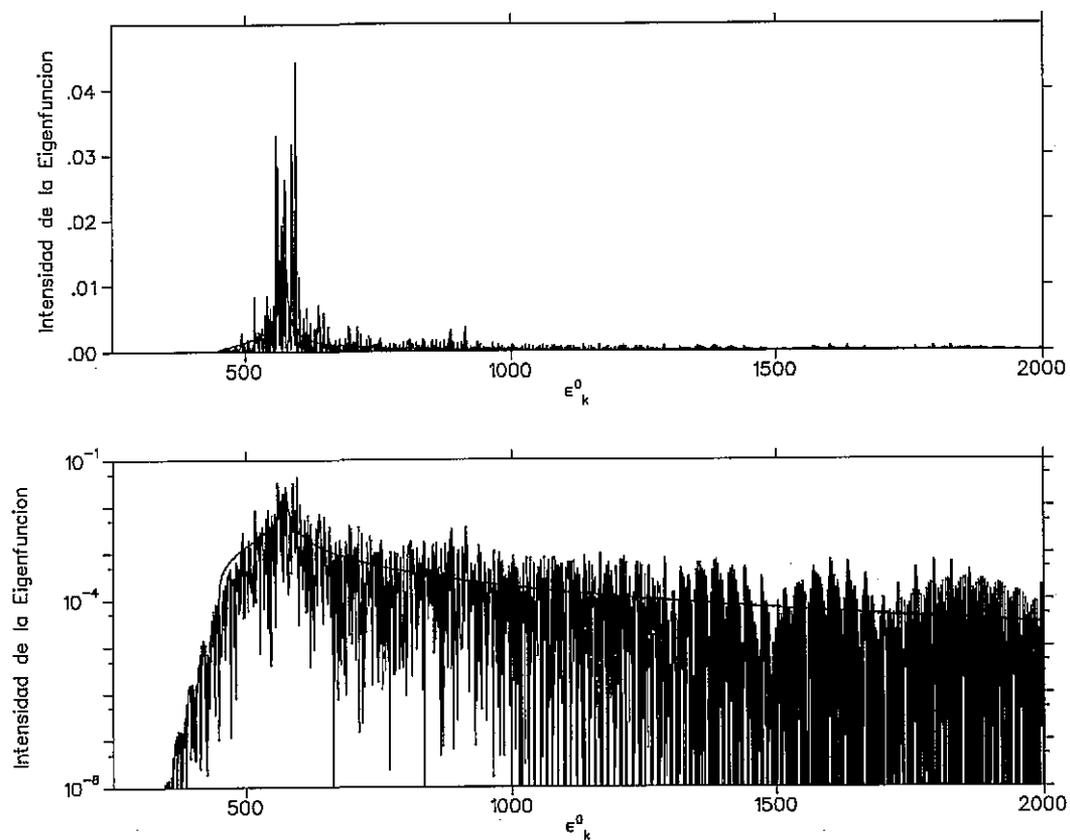


Figura 4.6: Intensidad de la eigenfunción Ψ_{500} sin promediar del hamiltoniano H_1 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

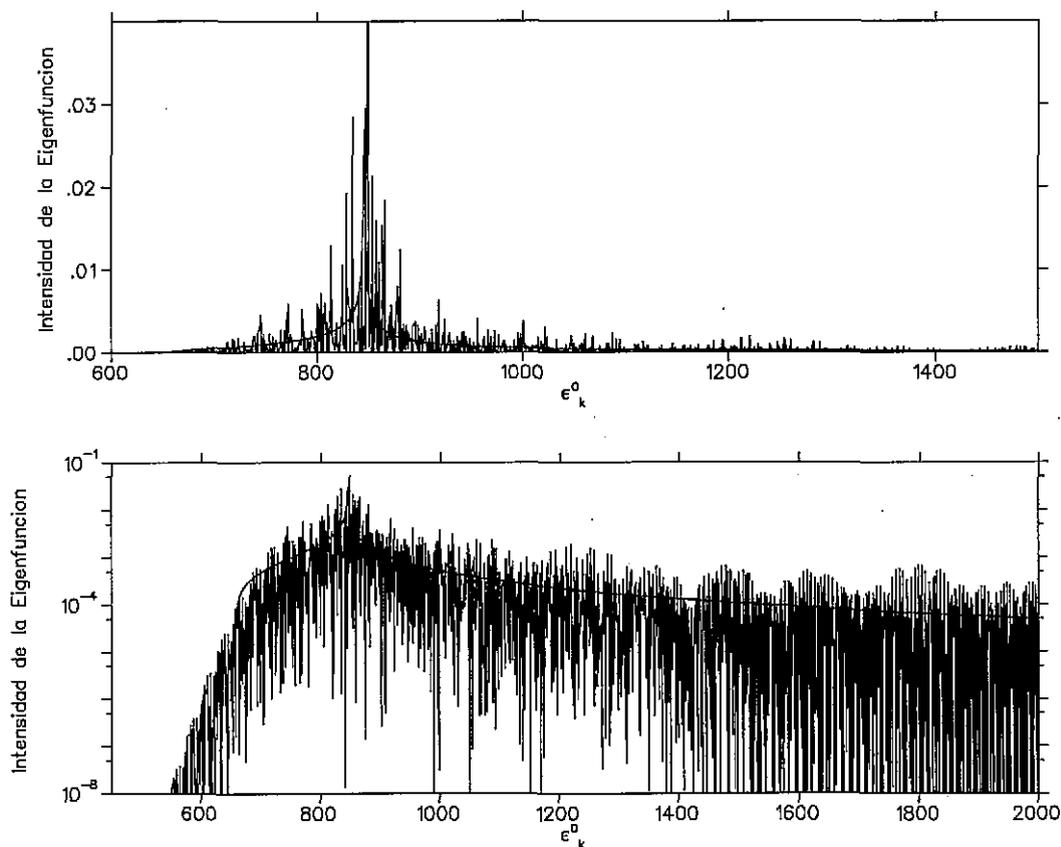


Figura 4.7: Intensidad de la eigenfunción Ψ_{900} sin promediar del hamiltoniano H_1 .

La correspondencia clásico-cuántica en las alas depende fuertemente de la energía del estado, mejorando notablemente por arriba del estado Ψ_{200} cuya razón de participación es $P^{(+)} = 80.654$.

Ahora bien, los estados localizados en energía presentan formas similares a la mostrada en la figura 4.8 donde, de nuevo, se dibuja la correspondiente CEF. Nótese que los dos picos principales de la QEF están alrededor del máximo de la CEF y que su valor máximo es del orden de 0.15, mientras que en el resto de las gráficas el valor máximo es unas tres veces menor. Esto es típico de estados *scarificados*, pues este fenómeno es esencialmente de interferencia de estados cuánticos. Un *scar* sobre una órbita periódica inestable es un estado que presenta una preferencia por estar *alrededor* de

TESIS CON
 FALLA DE ORIGEN

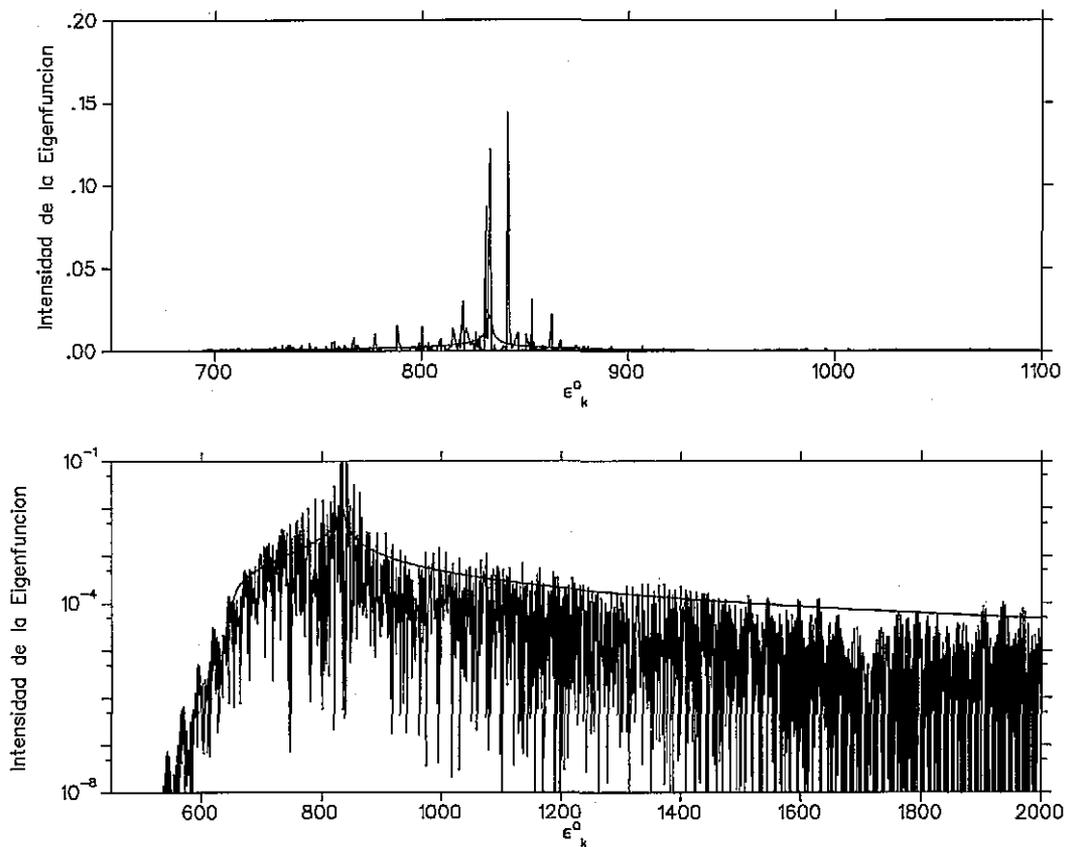


Figura 4.8: Intensidad de la eigenfunción Ψ_{878} sin promediar del hamiltoniano H_1 , este estado está localizado y como puede observarse tiene un pico de intensidad muy grande lejos del centro. Estos picos contienen gran parte de la intensidad y por una regla de suma el resto de ellas es menor que el promedio. Véase la explicación en el texto. Este estado corresponde al marcado dentro de un cuadro en la Fig.4.1

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

la órbita clásica, pero no sobre ella. Para lograr este efecto se requiere la participación de unos pocos estados de energía cercana a la del eigenestado. Así, estos estados interfieren para dar lugar a esa estructura preferencial. Debido a que estos pocos estados contribuyen de manera importante, la regla de suma hace que el resto de las intensidades se encuentre sistemáticamente por abajo de la CEF.

Para cuatro fermiones las EF's también siguen su límite clásico en el centro como puede verse en las Figuras 4.9, 4.10 y 4.11. Los estados presentados son el Ψ_{100}^4 con una $P^{(+)} = 25.895$ y energía $E^{100} = 117.32$; el Ψ_{500}^4 con una $P^{(+)} = 145.231$ a energía $E^{500} = 186.5$ y el Ψ_{900}^4 cuya razón de participación es $P^{(+)} = 144.832$ y cuya energía es $E^{900} = 214.789$. Hemos introducido el superíndice 4 para remarcar que tratamos el sistema de cuatro cuerpos. En este caso la correspondencia clásico-cuántica en la zona central comienza un poco antes que en el caso previo con $N_p = 2$, pues para los estados entre el 200 y el 250 la correspondencia en general es buena. En el apéndice se muestra una secuencia de estados para ambos casos y ahí es posible ver la diferencia.

La estructura de otros estados localizados es muy similar al caso previo, como puede apreciarse en la Fig. 4.12 pero el efecto de localización es muy claro pues no sólo tiene uno o dos picos muy importantes sino también permanece sistemáticamente abajo del promedio clásico por una regla de suma. En este caso, también presenta dos picos cerca del máximo, como en la Fig. 4.8. Este efecto de suma es claro al comparar la ordenada de las gráficas en escala normal, pues los picos de los *scars* son mayores que los picos de los estados no localizados. Este efecto de localización depende de la base, pues al cambiarla se puede destruir el efecto, como se verá más adelante cuando hagamos el estudio de los estados de un hamiltoniano caótico en otro caótico.

Cuando observamos las regiones de baja y alta energía, que se muestra en la gráfica inferior de las figuras (en escala semi-logarítmica), es evidente la disminución de las oscilaciones que aparecen en la Fig. 4.6, por ejemplo. La fluctuaciones siguen siendo fuertes, pero tienden a estabilizarse y conforme subimos en la energía la correspondencia es buena. Por otra parte, la región de tunelaje decae de nuevo como una exponencial. En el otro extremo, a energías altas, la correspondencia continúa hasta aproximadamente 400 o 500Δ , después de la cual la CEF se encuentra por arriba de la QEF. Como veremos más adelante, esto se refleja claramente en el ajuste de la CEF con la QEF promediada.

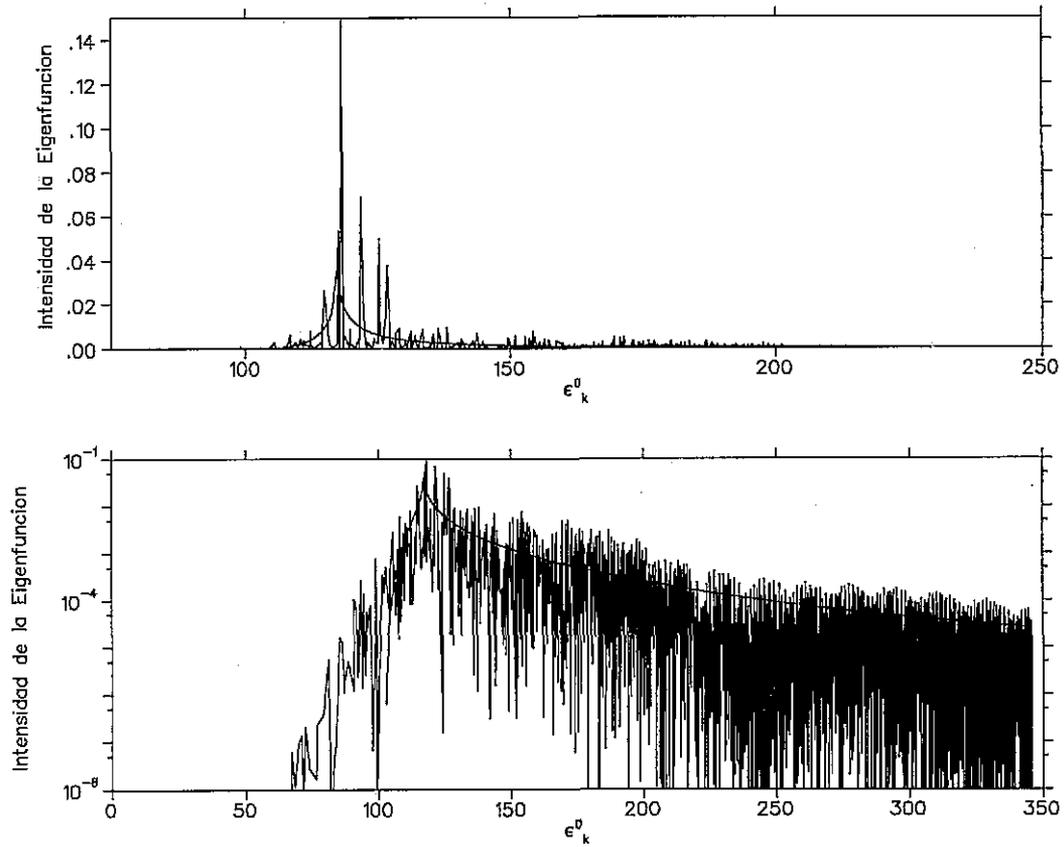


Figura 4.9: Intensidad de la eigenfunción Ψ_{100} sin promediar del hamiltoniano H_4 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

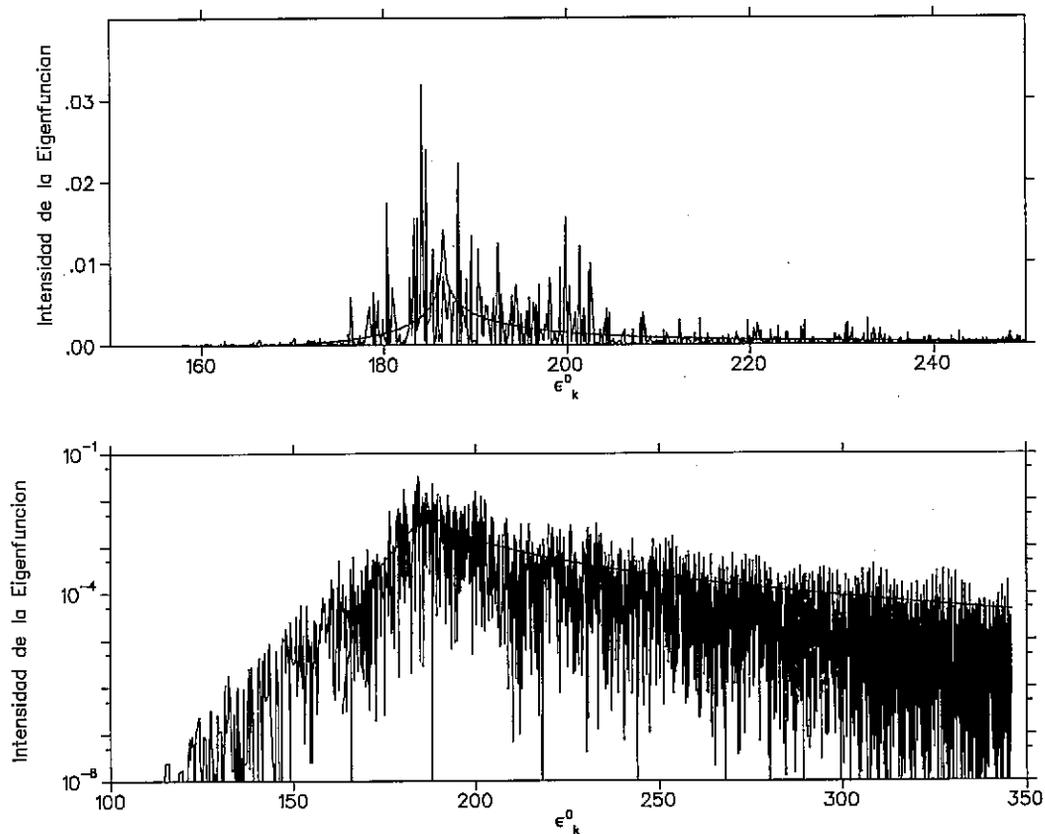


Figura 4.10: Intensidad de la eigenfunción Ψ_{500} sin promediar del hamiltoniano H_4 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

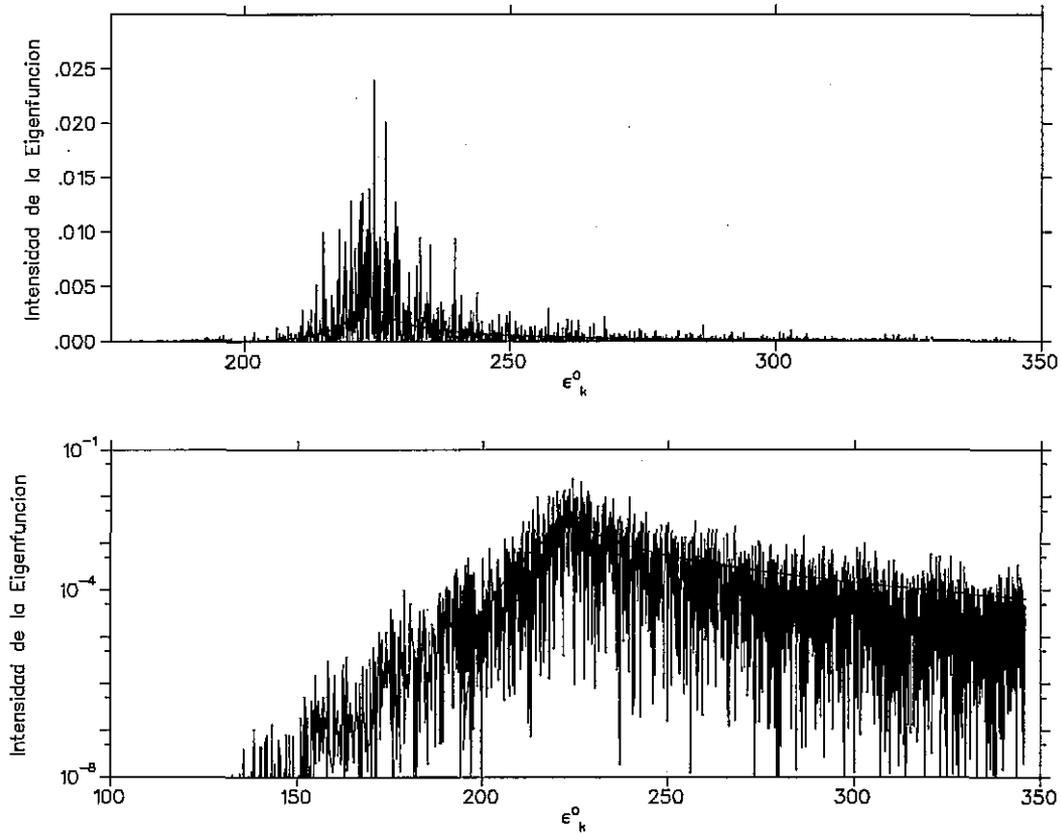


Figura 4.11: Intensidad de la eigenfunción Ψ_{900}^4 sin promediar del hamiltoniano H_4 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

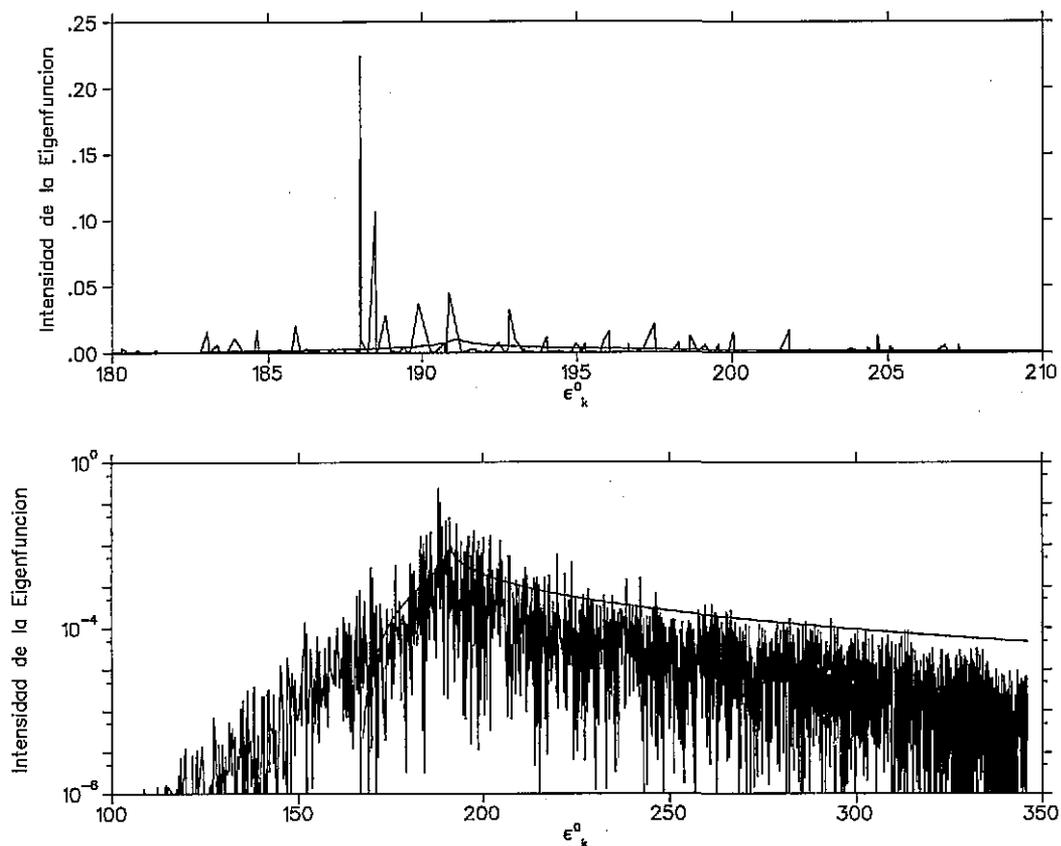


Figura 4.12: Intensidad de la eigenfunción Ψ_{541} sin promediar del hamiltoniano H_4 . Nótese el cambio en las escalas y la preeminencia de un pico que no está cerca de la singularidad de la CEF correspondiente, aunque se halla dentro de su ancho.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

EF's con Promedio

La correspondencia clásico-cuántica del promedio y su límite clásico es mejor conforme nos acercamos al límite semi-clásico $\hbar \rightarrow 0$, aunque es posible que se requiera de una suavización para borrar las fluctuaciones. En este trabajo se considera que podemos hacer un promedio sobre eigenfunciones en un rango pequeño de energía perturbada y que sea compatible con el ancho de la densidad local de estados, la idea es que este promediamento suavice las fluctuaciones y nos de una idea del límite a energías mucho mas altas. Como veremos a continuación, las fluctuaciones del promedio en algunas de las zonas de validez son pequeñas comparadas con las fluctuaciones de las EF's individuales.

Un problema que surge con el promediamento de las funciones de onda es que la energía no perturbada más cercana a la energía del estado va desplazándose, por lo que si hacemos un promediamento por ventanas de energía E^0 fija estaremos comparando intensidades que no se corresponden realmente al rango de energías. Un manera de ver esto es considerar que las funciones de onda son Lorentzianas centradas a energía $E_k^0 \approx E^i$; si las promediamos, los centros no coincidirán y obtendremos un promedio ensanchado de manera espuria. Si la densidad de estados perturbados es muy grande y la ventana de estados perturbados que usamos es tal que no cambia mucho la posición del centro, el error será pequeño, pero si no es así, el error crecerá. En este trabajo el promedio de las EF's se realiza de la misma manera que en las referencias [36, 40]: Se toma el centroide de cada EF como referencia y se le hace coincidir con la energía E_k^0 más próxima a la energía del estado alrededor del cual estamos haciendo el promedio. Se traslada el resto de las intensidades rígidamente, es decir, se hace una translación en los índices, y se promedia sobre índices. En este trabajo, la EF promedio está evaluada sobre el espectro del hamiltoniano correspondiente a la base y no sobre una ventana de tamaño finito como en [36, 40], lo que nos permite una comparación que prácticamente no depende del promediamento. Las gráficas siguientes, de la (4.13) a la (4.18), muestran los promedios sobre 101 estados de las EF's de la sección anterior, en la parte superior en escala normal y en la inferior en escala semi-logarítmica. El ajuste es bueno en donde cabe esperar que lo sea, mientras que para bajas energías hay algunos problemas. Para dos partículas en escala normal, figuras (4.13) a la (4.15), la correspondencia es buena en general aunque se presentan desviaciones oscilatorias aun no explicadas y que sobreviven incluso después de hacer el promedio, debido que las

oscilaciones tienen la misma frecuencia y coinciden al hacer el corrimiento de los estados para el promedio. Esto no ocurre para el caso de cuatro cuerpos, ni, como veremos, para el hamiltoniano H_2 .

Para cuatro partículas (figuras de la (4.16) a la (4.18)) el ajuste es bueno aunque con algunas desviaciones adicionales al caso anterior, pues como se ve en todas las gráficas hay una tendencia de la EF promedio en permanecer arriba de su límite clásico en una región a la derecha del centro y cercana a éste, formando un ligero hombro. Los promedios presentados corresponden a 101 estados alrededor de los estados Ψ_{100}^4 , Ψ_{500}^4 y Ψ_{900}^4 . Una desviación importante es que el promedio se mantenga por abajo del clásico después de cierta energía como resultado de una regla de suma que provoca el que la EF esté sobre la QEF para energías E_k^0 cercanas a E^i . Este es un efecto cuántico cuyo origen se desconoce y será motivo de estudio posteriormente.

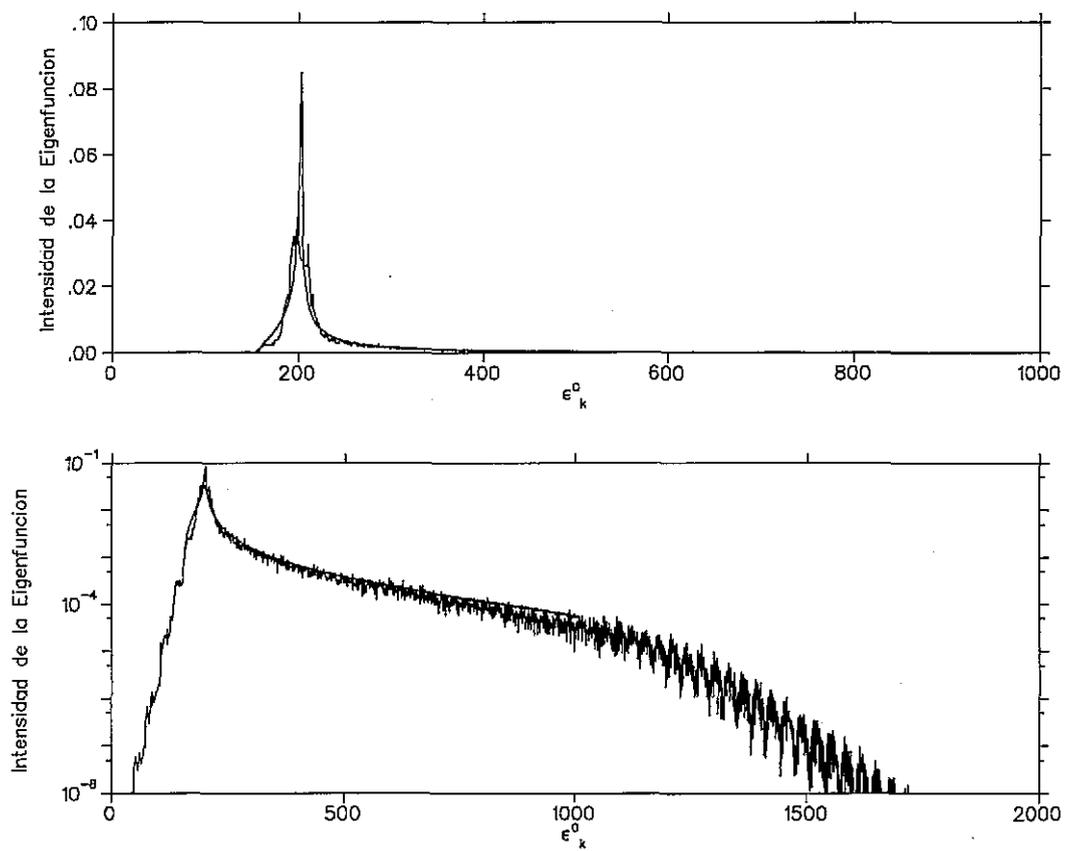


Figura 4.13: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{100} del hamiltoniano H_1 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

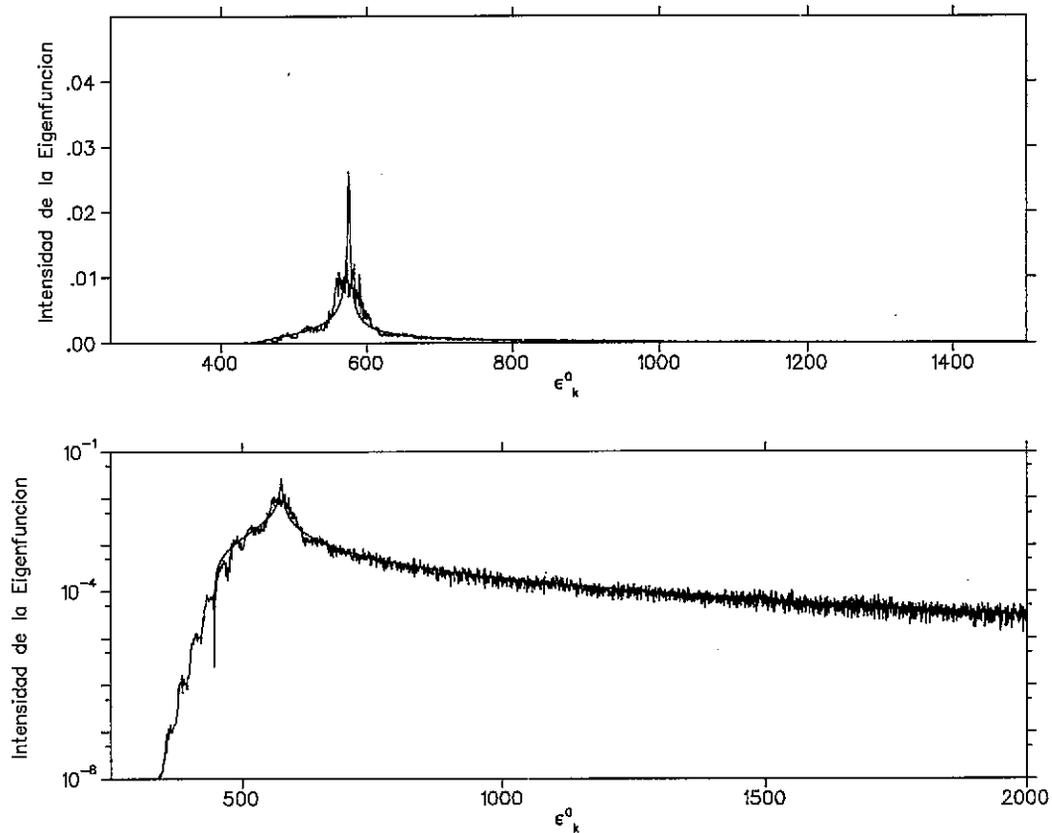


Figura 4.14: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{500} del hamiltoniano H_1 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

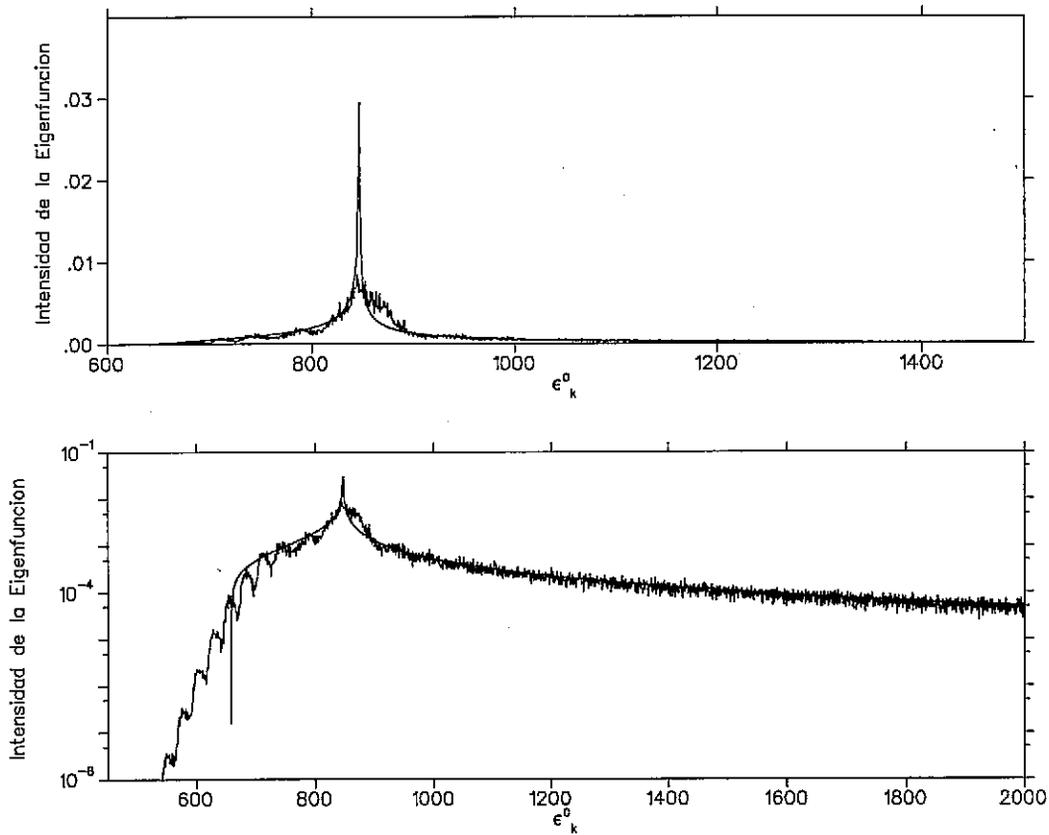


Figura 4.15: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{900} del hamiltoniano H_1 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

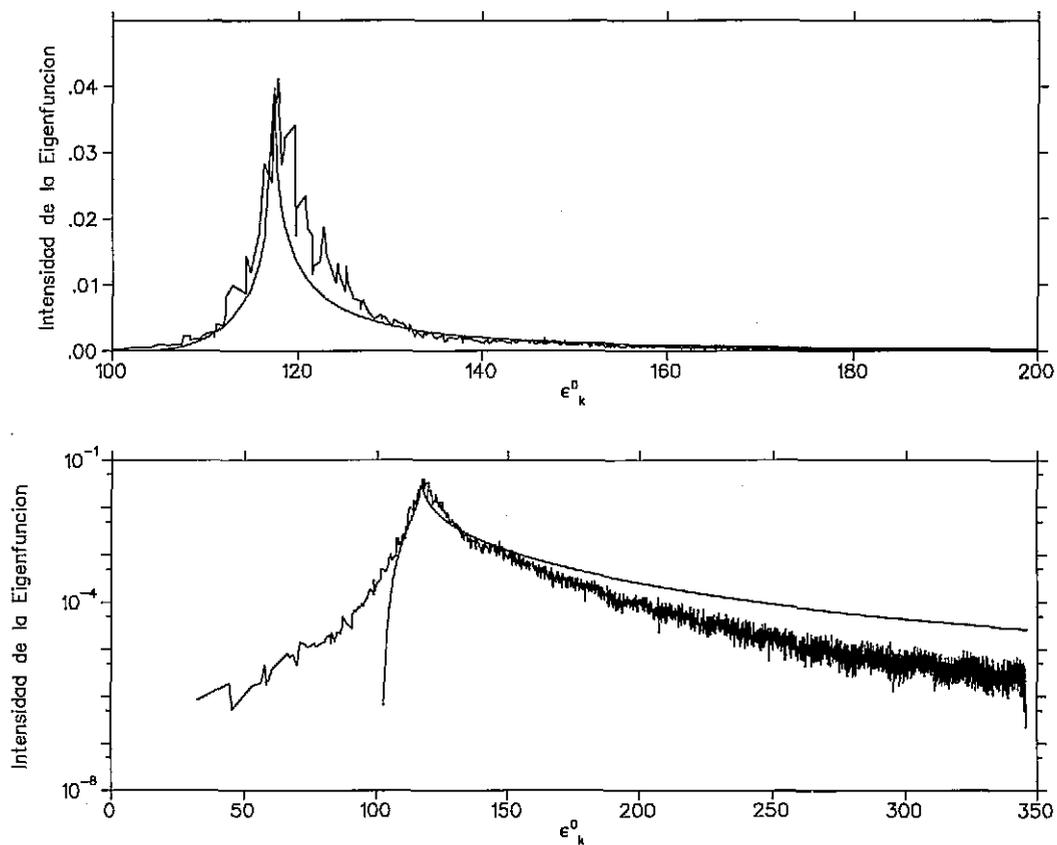


Figura 4.16: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{100}^4 del hamiltoniano H_4 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

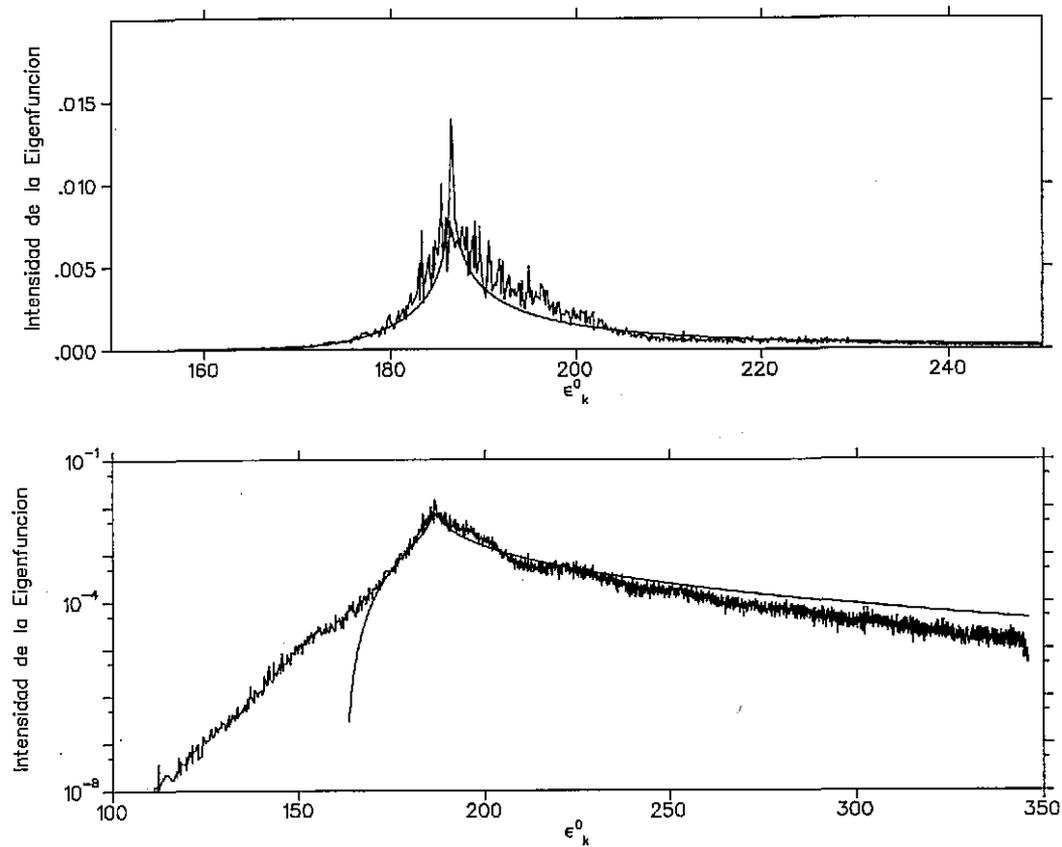


Figura 4.17: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{500}^4 del hamiltoniano H_4 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

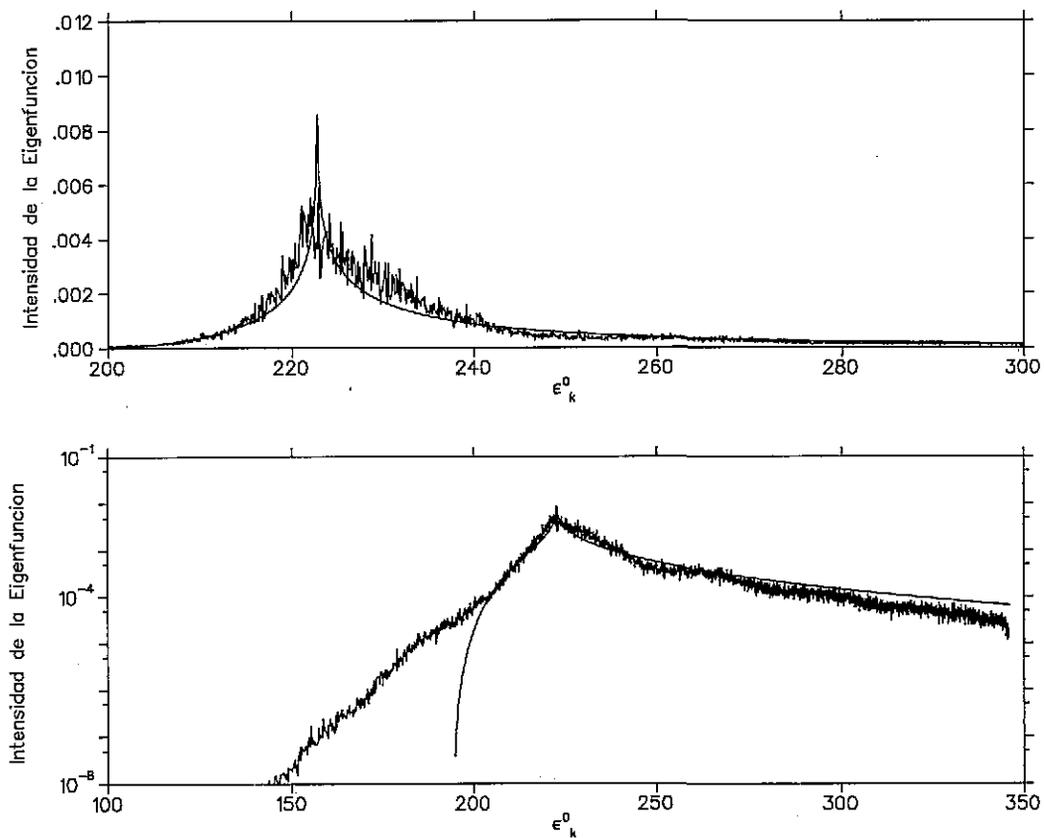


Figura 4.18: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{900}^4 del hamiltoniano H_4 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Capítulo 5

Fluctuaciones

En este capítulo se presenta la discusión sobre los resultados de las fluctuaciones de las funciones de onda rectificadas y constituye una de las aportaciones principales de este trabajo pues, cualquier estudio de las fluctuaciones de eigenfunciones que pretenda ser universal requiere que las mismas estén rectificadas, es decir, sin la parte secular. Como se explicó anteriormente, se esperan desviaciones debidas a estados localizados por lo que también se analizará el caso de un hamiltoniano de dos cuerpos con dinámica caótica en la base de otro, también con dinámica caótica. La comparación con el modelo de matrices aleatorias consiste en la expectativa de que las fluctuaciones de las amplitudes rectificadas (véase la Ec.5.1) sean gaussianas y de un ancho unidad.

5.1 Fluctuaciones de H_1 y H_4

Realizaremos el análisis de las fluctuaciones en dos partes. En la primera consideraremos las fluctuaciones de las amplitudes de las EF's rectificadas sobre las zonas grandes que en la Fig. 5.1 se denominan B y C. La zona de mejor correspondencia clásico-cuántica fue considerada para determinar los límites de las zonas. Definimos estas zonas como las alas de la EF. La zona A es la unión de las zonas B y C. La segunda parte del análisis corresponde a las fluctuaciones locales en ventanas con ancho igual a unas decenas de espaciamentos promedio. Para poder realizar estadística siempre se consideraron promedios sobre 101 estados y las ventanas corresponden a la misma distancia en espaciamentos promedio medidas desde el centro de cada EF.

De esta manera, aunque el centro de la EF se mueve conforme aumentamos la energía del estado, la ventana en E_k^0 que estamos analizando también se moverá de estado en estado, conservando su ancho. En esta sección se presenta, también, el comportamiento de los anchos de las distribuciones y su correspondencia con el modelo de matrices aleatorias presentado en el capítulo anterior. La cantidad analizada es, como hemos expresado, las amplitudes cuánticas rectificadas por la cantidad clásica $\sqrt{\tilde{g}_k^i}$:

$$\tilde{C}_k^i = \frac{c_k^i}{\sqrt{\tilde{g}_k^i}} \equiv \langle \varphi_k | \Psi_i \rangle. \quad (5.1)$$

Después de cortadas las regiones de validez, la normalización de \tilde{C}_k^i es una función de i pues la suma $\sum_k |\tilde{C}_k^i|^2 = N_{eff}^i$ donde N_{eff}^i es el número total de estados no perturbados que consideramos para hacer el rectificado y que, como vimos, varía de estado en estado. De hecho disminuye conforme crece i para una base finita de tamaño N pues el corte clásico inferior se encuentra a una mayor energía E_k^0 cuando aumentamos E^i . Renormalizando esta cantidad $y_k^i = \tilde{C}_k^i / \sqrt{N_{eff}^i}$, es sobre la que hacemos el análisis, como explicamos en el capítulo 3.

5.1.1 Fluctuaciones Globales

Presentamos primeramente los resultados para el caso H_1 . En la Fig. 5.2 podemos observar cuál es el comportamiento de la distribución de amplitudes rectificadas y_k^i en la zona C en dos extremos de la energía, los promedios sobre 101 estados alrededor de Ψ_{100} y Ψ_{900} . Dentro de las funciones promediadas se consideraron también a los estados localizados. En la columna de la derecha se muestran los mismos resultados pero en escala semi-logarítmica. Al aumentar el valor de la energía E^i , es decir de Ψ_{100} a Ψ_{900} se nota un mejor ajuste a una distribución Gaussiana, excepto por el exceso de amplitudes pequeñas atribuibles a scars que tienen muchas de ellas. La línea continua corresponde a una distribución Gaussiana con los mismos primer y segundo momentos que el histograma (datos numéricos). En este caso el límite inferior de la zona C es de 4 espaciamentos promedio de niveles, que denotamos por Δ , a la derecha de la singularidad. El límite superior es de 400Δ por arriba del límite inferior.

En el caso de la zona B, la estadística no es muy buena debido a la estrechez de la zona de correspondencia clásico-cuántica y por lo tanto las

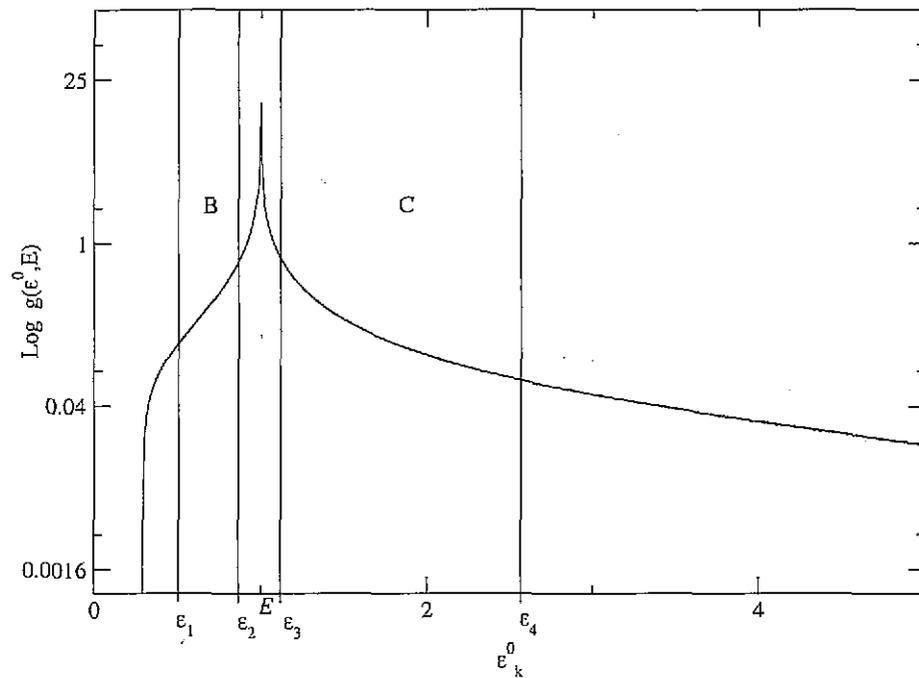


Figura 5.1: Zonas B y C de las alas o colas de la EF considerada para el análisis. Los cortes de los extremos están determinados por la correspondencia clásico-cuántica, Para el centro se consideraron varios anchos. El esquema está dibujado en escala semi-logarítmica.

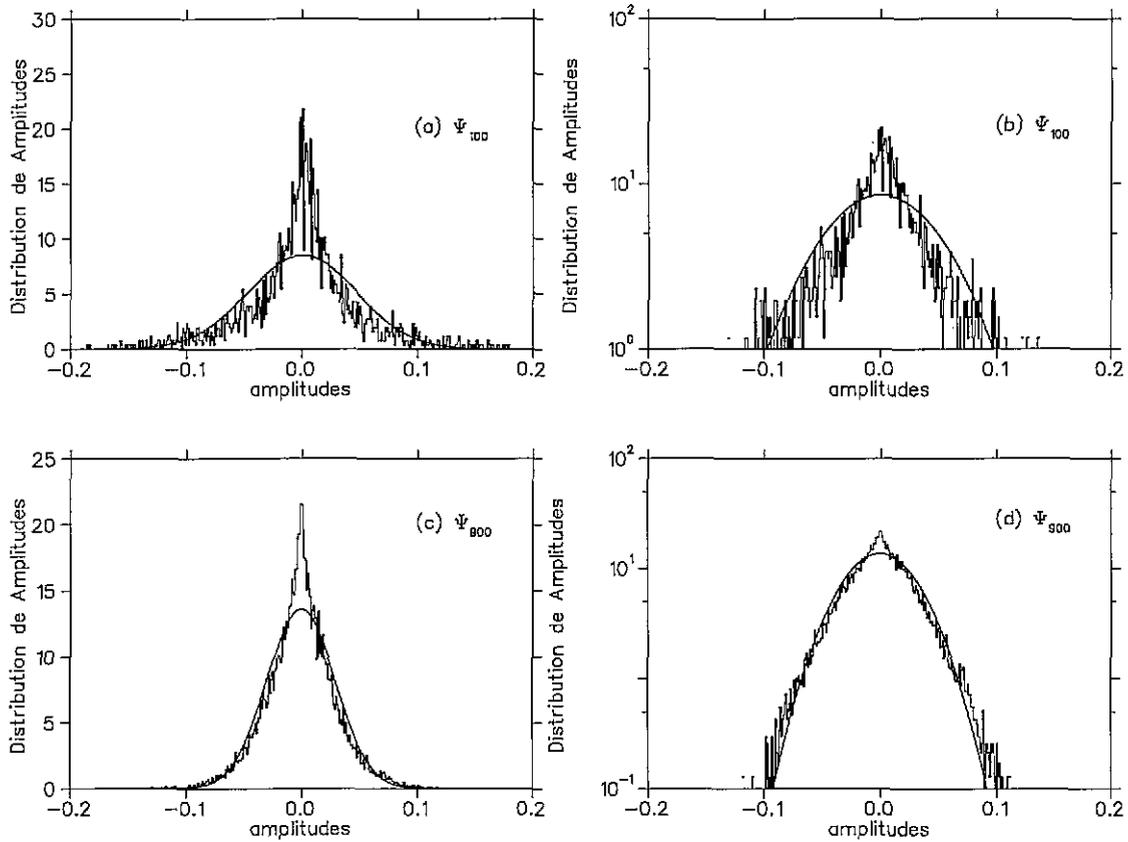


Figura 5.2: Distribución promedio de las amplitudes rectificadas y_k^i tomadas de la región C sobre 101 EF's de H_1 alrededor de la eigenfunción Ψ_{100} (parte superior de la figura) y de Ψ_{900} (parte inferior). A la izquierda aparecen en escala normal y a la derecha se muestran en escala semi-logarítmica. Con línea continua aparecen las distribuciones Gaussianas con la misma media y varianza que los histogramas.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

fluctuaciones son mayores que en el caso previo. Esta zona está definida por energías E_k^0 entre $0.78 \times E^i$ y $E^i - 2\Delta$. Pese a la falta de datos, los resultados para estados de alta energía (Fig.5.3) siguen un comportamiento parecido al anterior.

Si juntamos las amplitudes de ambos histogramas en uno solo obtenemos unas distribuciones como las que aparecen en la Fig.5.4 para los mismos estados de las figuras anteriores. Es notable que para estados bajos en el espectro exista un buen ajuste con una distribución Gaussiana para amplitudes entre 0.2 y 3 (Fig.5.4b).

El efecto de los estados localizados en las distribuciones se va atenuando si hacemos el promedio evitando ese tipo de estados. La distribución mejora su ajuste a una Gaussiana y el pico de amplitudes pequeñas disminuye notablemente si sólo consideramos estados con razón de participación $P_i^{(+)}$ mayores que su promedio $\langle P^{(+)} \rangle$ (Figs. 4.1 y 4.3)

Las varianzas de las distribuciones de amplitudes no renormalizadas, es decir $Var(\tilde{C}_k^i)$, para las zonas A, B y C conforme aumenta la energía E^i del estado perturbado se presentan en la Fig. 5.5. En la zona C (Fig. 5.5i), la varianza para estados de baja energía E^i está por debajo de la unidad y continúa creciendo hasta E^{1000} . Este comportamiento es típico de esta zona aun cuando consideremos ventanas localizadas más lejos del centro. Para la zona B (Fig. 5.5ii) la tendencia es a disminuir, pero este comportamiento no es concluyente debido a la falta de suficientes datos estadísticos. El comportamiento de la zona conjunta A tiende a mantenerse cercana a la unidad, pero la tendencia a estar por arriba de 1 se mantiene y crece lentamente (Fig. 5.5iii). Las gráficas anteriores fueron realizadas sobre un promedio de 101 estados para 1 de cada 10 estados Ψ_i consecutivos. Es importante señalar que la distribución de amplitudes *no* renormalizadas x_k^i , del modelo de matrices aleatorias tiene una varianza unidad (Ec. 3.11), por lo que las \tilde{C}_k^i estarán más cercanas a la unidad si hay buena correspondencia clásico-cuántica. De hecho, la varianza de las distribuciones de \tilde{C}_k^i tiene valores cercanos a uno *sin ningún ajuste adicional*, tal y como aparecen en las figuras.

Para cuatro fermiones, las zonas están definidas de la siguiente manera para cada estado Ψ_i : para B el límite inferior corresponde a $0.93 \times E^i$ y el superior a $E^i - 20\Delta$. En este caso el valor del espaciamiento promedio es de $\Delta \approx 0.122$; para la zona C los correspondientes límites son $E^i + 20\Delta$ y $E^i + 400\Delta$. Como en los casos anteriores hay una transición de la clase de distribución de estados bajos a estados altos en energía perturbada, con la presencia de un exceso de amplitudes pequeñas. En cuatro cuerpos también

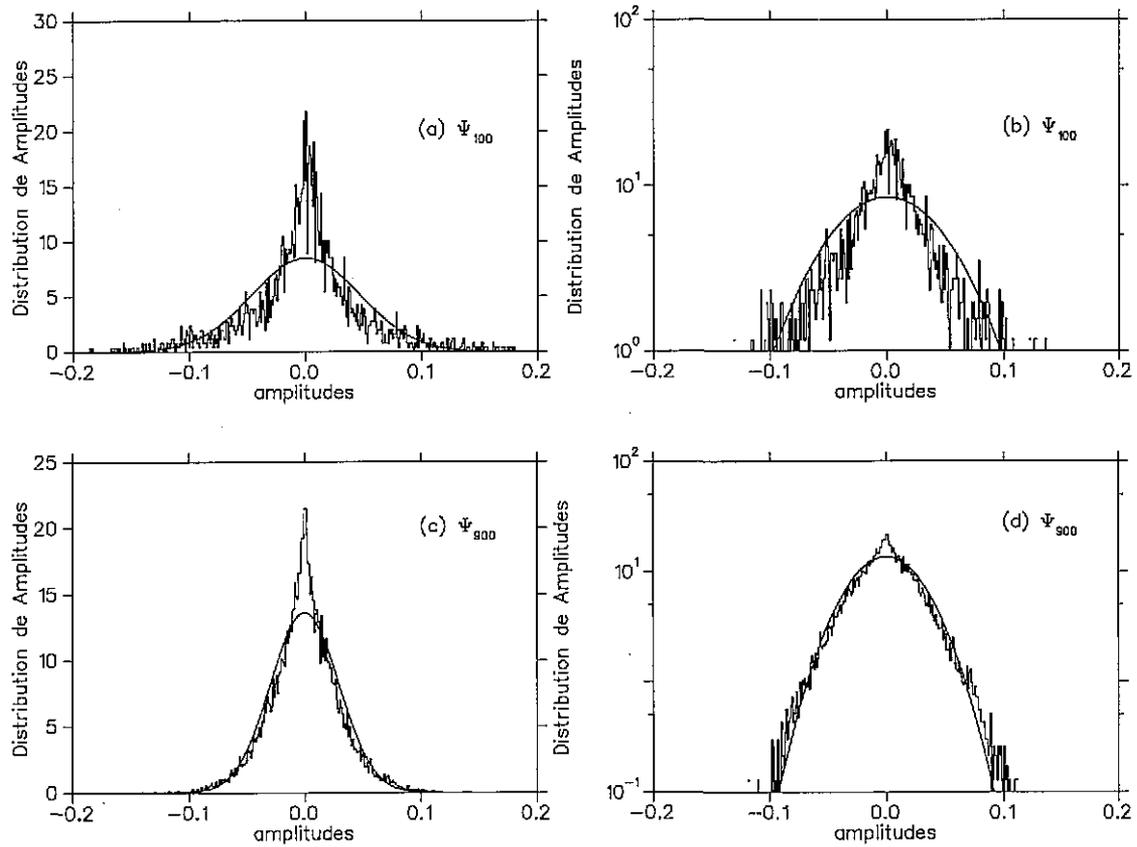


Figura 5.3: Distribución promedio de las amplitudes rectificadas tomadas de la región B para el mismo caso que la figura anterior. Nótese en (d) que las alas de la distribución siguen una parábola, es decir, una gaussiana en escala normal.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

tenemos una presencia importante de estados localizados, como puede apreciarse en la figura 4.3 donde se ve la presencia de estados de baja razón de participación. Véanse las figuras de la (5.6) a la (5.8) para las zonas C, B y A. En este caso ese exceso para el estado 100 es pequeño. Para estados más abajo en la energía E^i este exceso se incrementa pero nunca llega a ser tan marcado como para el caso de H_1 . El fenómeno de que las intensidades intermedias sigan una distribución gaussiana aparece nuevamente en este caso. Aun las fluctuaciones para la zona B son menores y se ajustan mejor a una Gaussiana para energías altas. Es importante notar que la densidad de energía en H_4 es mucho mayor que en H_1 . También puede apreciarse que hay un cambio apreciable en el ancho de las distribuciones conforme subimos en la energía.

El comportamiento de estos anchos o varianzas de las distribuciones se presenta en la figura (5.9). En este caso todas las varianzas crecen lentamente, a diferencia del caso anterior. El ancho de las ventanas consideradas incluye la transición del promedio $\langle |C_k^i|^2 \rangle$ a estar por arriba de \tilde{g} a estar por abajo. Véase la Fig. 4.18 para un ejemplo, pero el efecto aparece en muchos de los promedios. El comportamiento de estos anchos es sugestivo por presentar una tendencia, aun cuando su separación de la unidad no sea grande. En el análisis de las fluctuaciones locales, tanto en el caso de H_1 y H_4 , como en el de H_2 que se verá más adelante, los valores de $Var(\tilde{C}_k^i)$ se encuentran dispersos alrededor de la unidad y no muestran una tendencia aparente. Esto nos lleva a pensar en las fluctuaciones crecientes logarítmicamente que encontró Voros [13] para las funciones de Husimi en el límite semiclásico. Sin embargo, no se pudo encontrar evidencia de que las fluctuaciones globales de este sistema sean logarítmicas, ni que estén relacionadas con las de Voros. El punto amerita un análisis posterior pues plantea el límite semiclásico de las fluctuaciones y no solo de los promedios.

5.1.2 Fluctuaciones locales

Puesto que la zona C tiene un mayor ancho que la B nos restringiremos al estudio de las fluctuaciones locales en esta zona. Las ventanas en energía E^i que consideramos son de un ancho de 10, 20, 50 y 100 espaciamentos promedio para $N_p = 2, 4$.

En el primer caso, el ajuste de las amplitudes a una distribución Gaussiana es muy bueno en casi todas las ventanas consideradas. Las fluctuaciones son mayores que en los casos previos, pero el número de datos es mucho me-

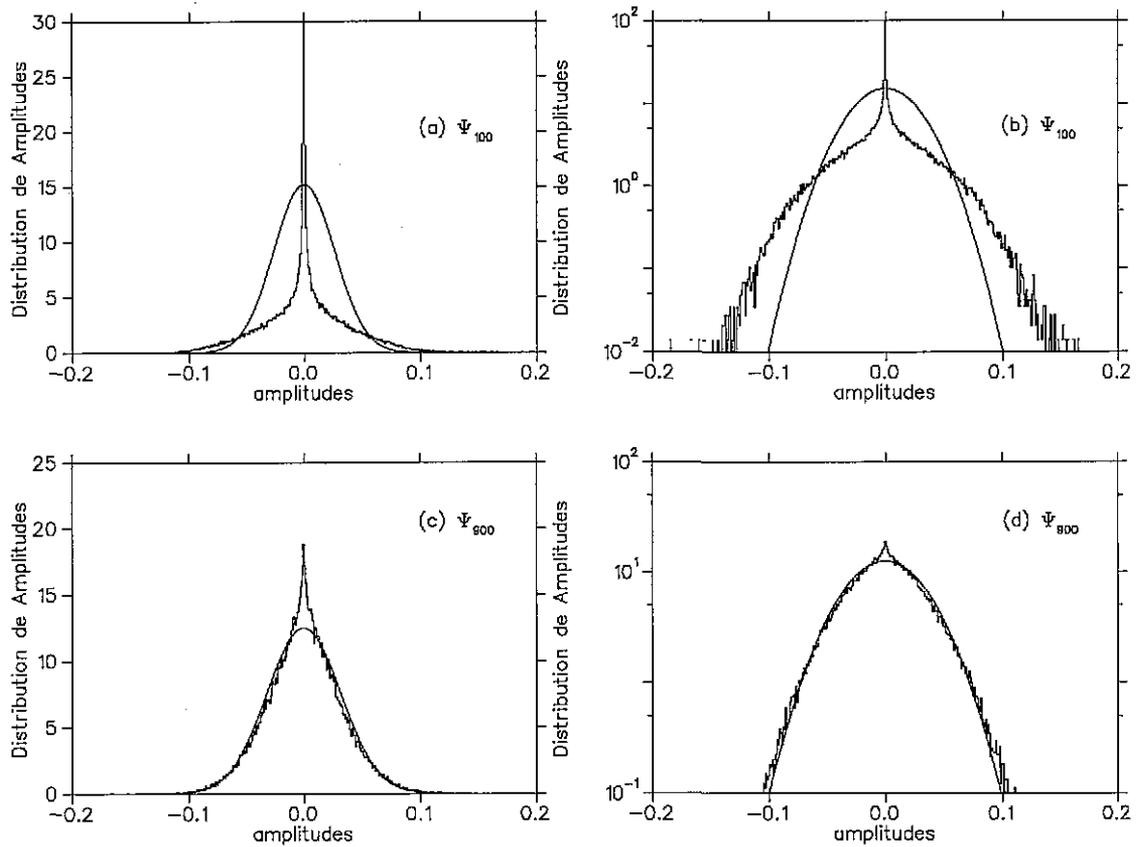


Figura 5.4: Distribución de las amplitudes rectificadas tomadas de la región A, que es la unión de las zonas B y C, para el mismo caso que las dos figuras previas.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

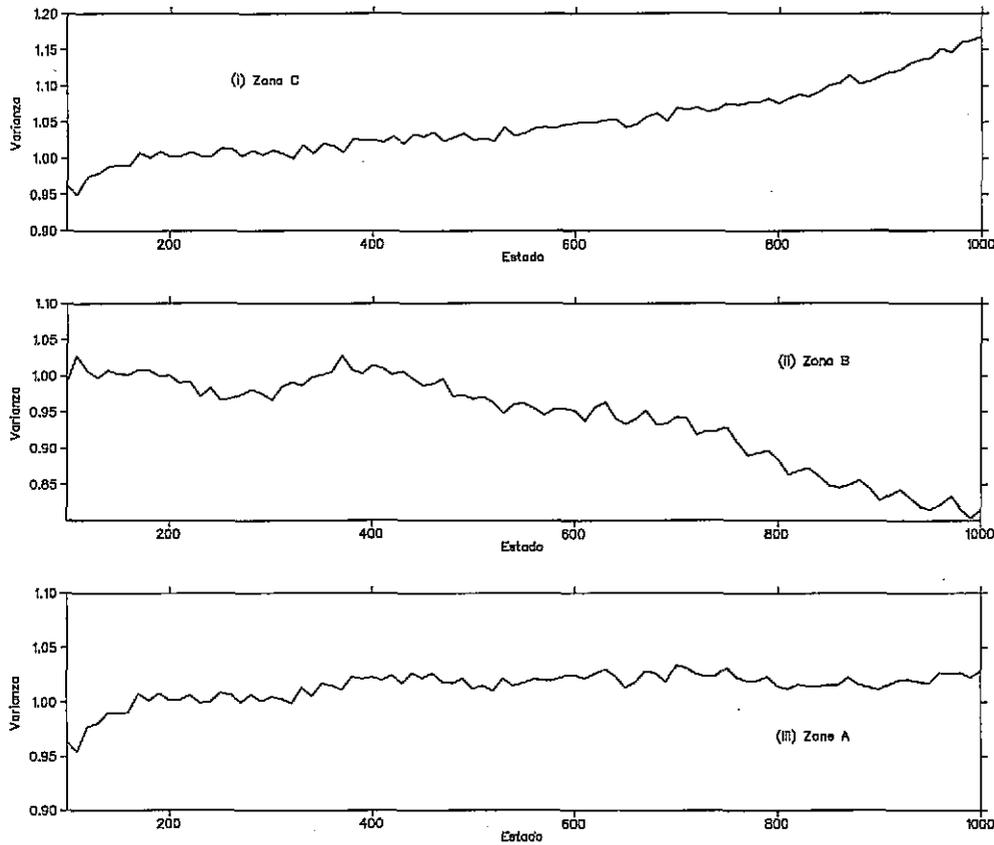


Figura 5.5: Varianza de las distribuciones de amplitudes rectificadas y no renormalizadas \tilde{C}_k^i de H_1 como función del índice del estado perturbado. En (i) para la región C, en (ii) para B y en (iii) para A.

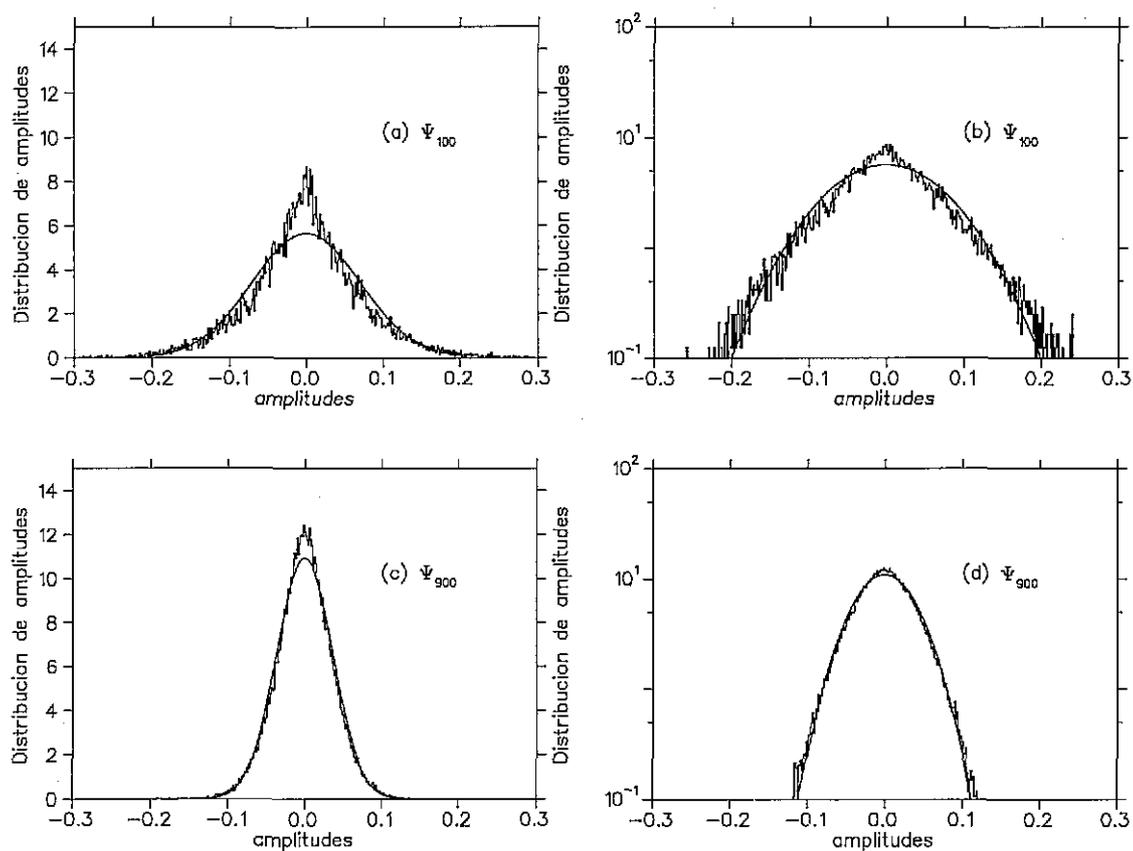


Figura 5.6: Distribución de las amplitudes rectificadas tomadas de la región C sobre 101 EF's de H_4 alrededor de la eigenfunción Ψ_{100}^4 (Parte superior de la figura) y de Ψ_{900}^4 (parte inferior). A la izquierda aparecen e en escala normal y en la derecha se muestra en escala semi-logarítmica. En línea continua aparecen las distribuciones Gaussianas con la misma media y varianza que los histogramas.

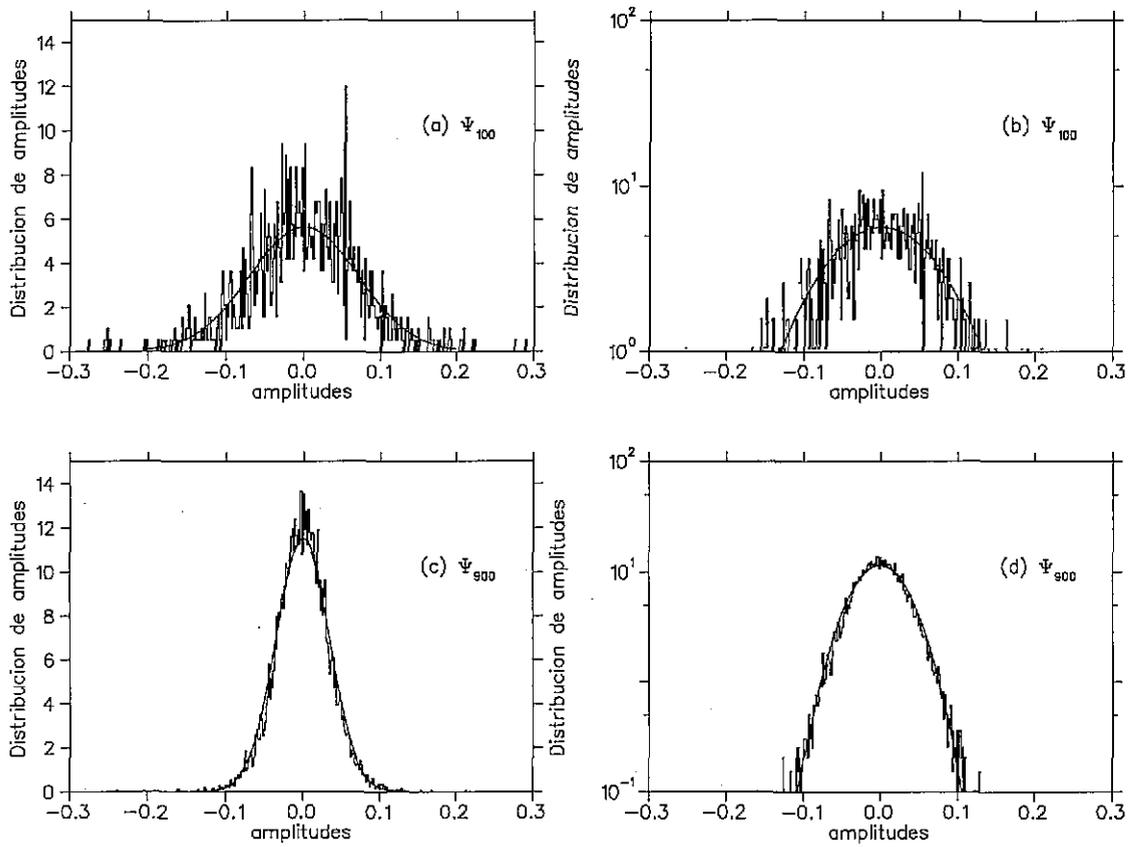


Figura 5.7: Distribución de las amplitudes rectificadas tomadas de la región B para el mismo caso que la figura anterior.

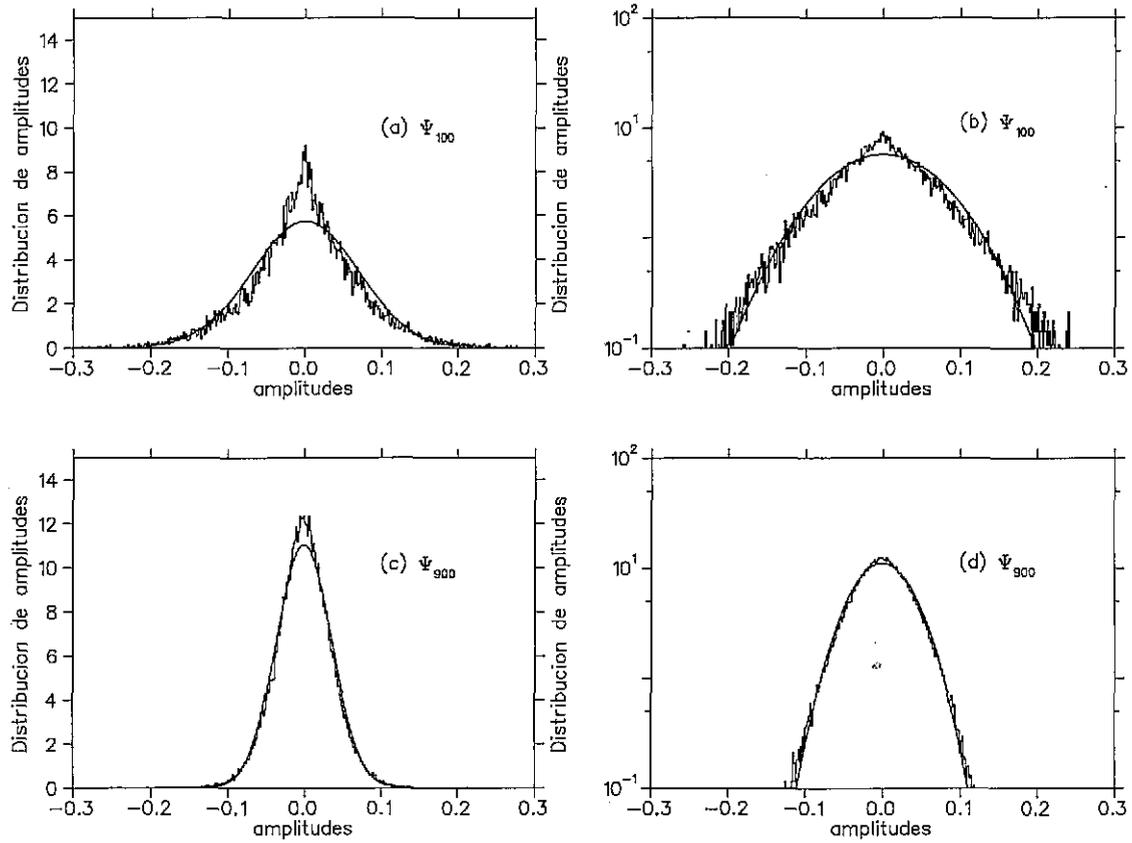


Figura 5.8: Distribución de las amplitudes rectificadas tomadas de la región A, que es la unión de las zonas B y C, para el mismo caso que las dos figuras previas.

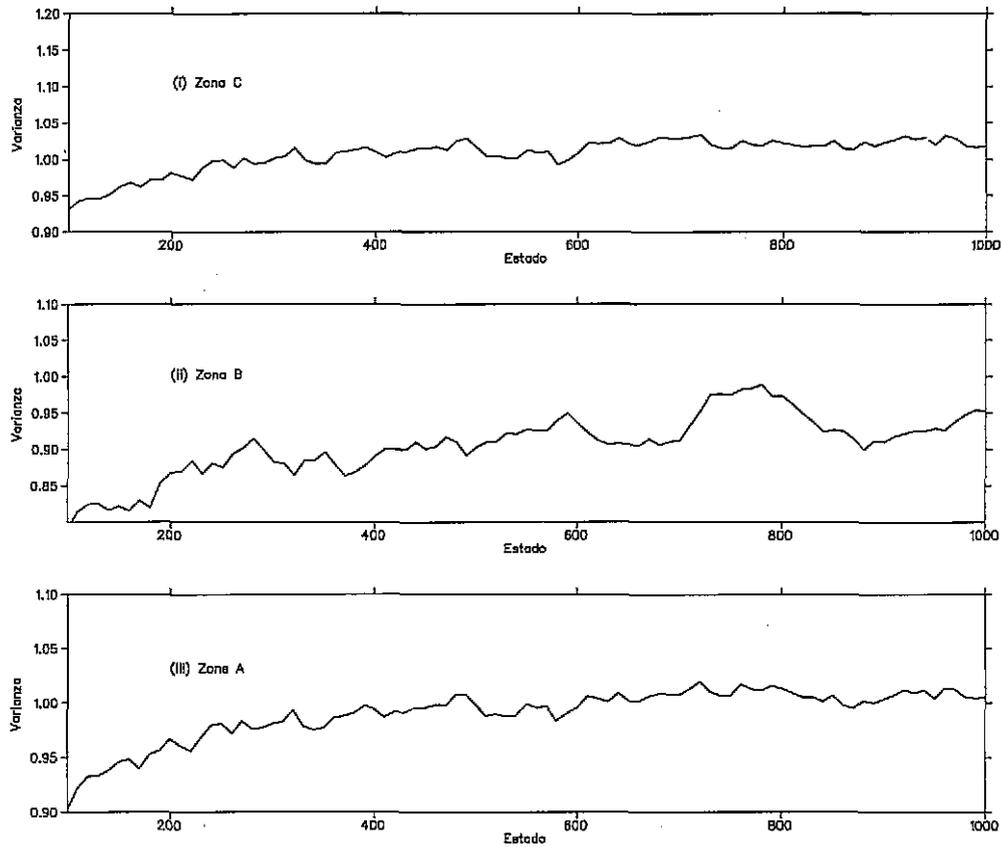


Figura 5.9: Varianza de las distribuciones de amplitudes rectificadas y no renormalizadas \tilde{C}_k^i de H_4 como función del índice del estado perturbado Ψ_i . En (i) para la región C, en (ii) para B y en (iii) para A.

nor; el orden de datos en la ventanas de la sección anterior es del orden de 40000 y aquí consideramos ventanas que contuvieran del orden de 2000 amplitudes ¹. Sin embargo, estas fluctuaciones son estadísticas pues al aplicar la prueba de χ^2 obtuvimos valores, por ejemplo, de $\chi_{16}^2 = 12.289$ para el caso de la Fig.5.10(a) que corresponde a una ventana de energías E_k^i entre 1000 y 1200 y el promedio está centrado alrededor del estado Ψ_{900} . Resultados similares se obtienen para ventanas de ancho 20Δ .

Se observan algunas desviaciones a partir de ventanas de ancho 50, así como para algunas de las subzonas consideradas, siendo los extremos los lugares que presentan mayores desviaciones. Las fluctuaciones en ventanas cercanas al centro de la EF corresponden a las zonas de rápido crecimiento de la CEF, mientras que la zona al final del espectro E^0 considerado presenta efectos de borde. La zona intermedia corresponde a un suave decaimiento de la CEF, además de ser una zona donde las intensidades son, por lo regular, un orden de magnitud más pequeñas que en la zona central. De esto es claro que el modelo de matrices aleatorias expuesto al final del capítulo anterior resulta particularmente adecuado a escala local pues el ancho de las distribuciones Gaussianas de las variables no renormalizadas \tilde{C}_k^i esta alrededor de la unidad; en contraste con el comportamiento de los anchos de las zonas globales B y C de 2 y 4 partículas.

Una razón para que el modelo sea aplicable a pesar de estar considerando dentro del promedio estados Ψ_i con *scars*, i.e. no se observa un exceso de amplitudes pequeñas como en los casos anteriores, es que en las regiones centrales de energías no perturbadas (del orden de 20Δ) de las ventanas grandes (del orden de 400Δ) las amplitudes de los *scars* se encuentran dentro de la fluctuaciones del resto de las amplitudes, mientras que en las ventanas de los extremos, cercanos al centro de cada eigenfunción y en las colas largas de las mismas, dichas amplitudes se encuentran ya alejadas de las amplitudes típicas del resto de las eigenfunciones.

¹Para este cálculo se procuró mantener constante esta cantidad de tal manera que entre más grande sea la ventana, menor será el número de EF's consideradas.

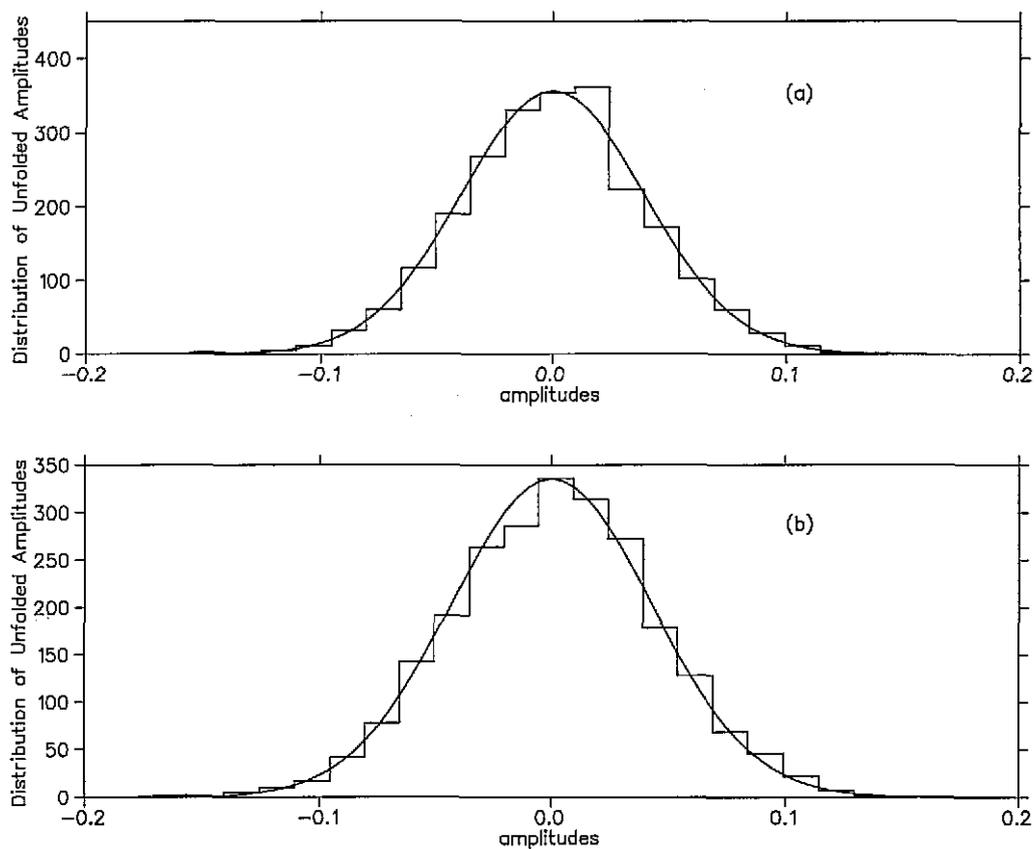


Figura 5.10: Histograma de las amplitudes en una ventana de 20 unidades de energía para 101 EF's alrededor de (a) Ψ_{900} de H_1 y de (b) Ψ_{500} de H_2 . La normalización corresponde al número de eventos por bin, siendo el número total de eventos, respectivamente, de 2525 y 2595 para (a) y (b). En el texto se indican los valores de la prueba χ^2 . La línea continua corresponde a una distribución Gaussiana con los mismos primer y segundo momentos.

5.2 Un Hamiltoniano con Dinámica Caótica en la Base de otro Hamiltoniano Caótico

El exceso de amplitudes pequeñas en los casos anteriores nos hace pensar que la presencia de estados localizados sea la responsable de este comportamiento. Como se observó en las EF's localizadas, gran parte de las intensidades se encuentra por abajo de la CEF, por lo que al rectificarla obtendremos una amplitud menor en valor absoluto menor que 1. Si los estados localizados no son considerados en el cálculo de las distribuciones, el ajuste mejora. Más aun, si consideramos estados con una razón de participación arriba del promedio de ésta, el ajuste de las amplitudes es excelente. Sin embargo, no hay una buena razón física para no considerar estados con razón de participación intermedia, excepto, tal vez, los estados que corresponden a verdaderos *scars*.

Una manera de hacer el análisis más limpiamente es considerar las EF's de un hamiltoniano caótico en la base de otro, también caótico. Cabe esperar que la relación entre estados de una y otra base sea menor y que la posibilidad de localización sea también menor. Esto se explica semiclásicamente con la idea de Berry [12]: Un estado caótico estará más o menos extendido al azar por el espacio fase accesible, de tal manera que si lo expandemos en la base de otro hamiltoniano caótico, la probabilidad de que el valor de la superposición de ambos estados sea grande es pequeña. En el caso de estados de sistemas integrables las órbitas se encuentran localizadas sobre los toros integrable por lo que es factible que se den valores de la superposición grandes. En la referencia [67] se discute un régimen para modelos de matrices aleatorias cuyos elementos decaen como un ley de potencia en las que hay un cambio en la varianza de la razón de participación inversa que concuerda con la clase de resultados que obtenemos aquí.

Con este fin desarrollamos las eigenfunciones del hamiltoniano H_2 en la base de EF's de H_1 , analizadas en las secciones anteriores. Los parámetros de H_2 son $\alpha = 10$, $\beta = \gamma = -4.15$. Para el cálculo se consideraron las matrices de 6000×6000 de H_1 y H_2 en la base de H_0 y luego se realizó el cambio de base. El número de estados confiables calculados de esta manera se reduce considerablemente, siendo de aproximadamente 700, pero como veremos más adelante, la correspondencia clásico-cuántica es buena para estados del orden de Ψ_{400} . En la Fig. 5.11 se muestran la razón de participación y su inverso en la Fig. 5.12 para este caso. El número de estados localizados es mucho menor a su equivalente de la gráfica 4.1, es decir el número de estados con

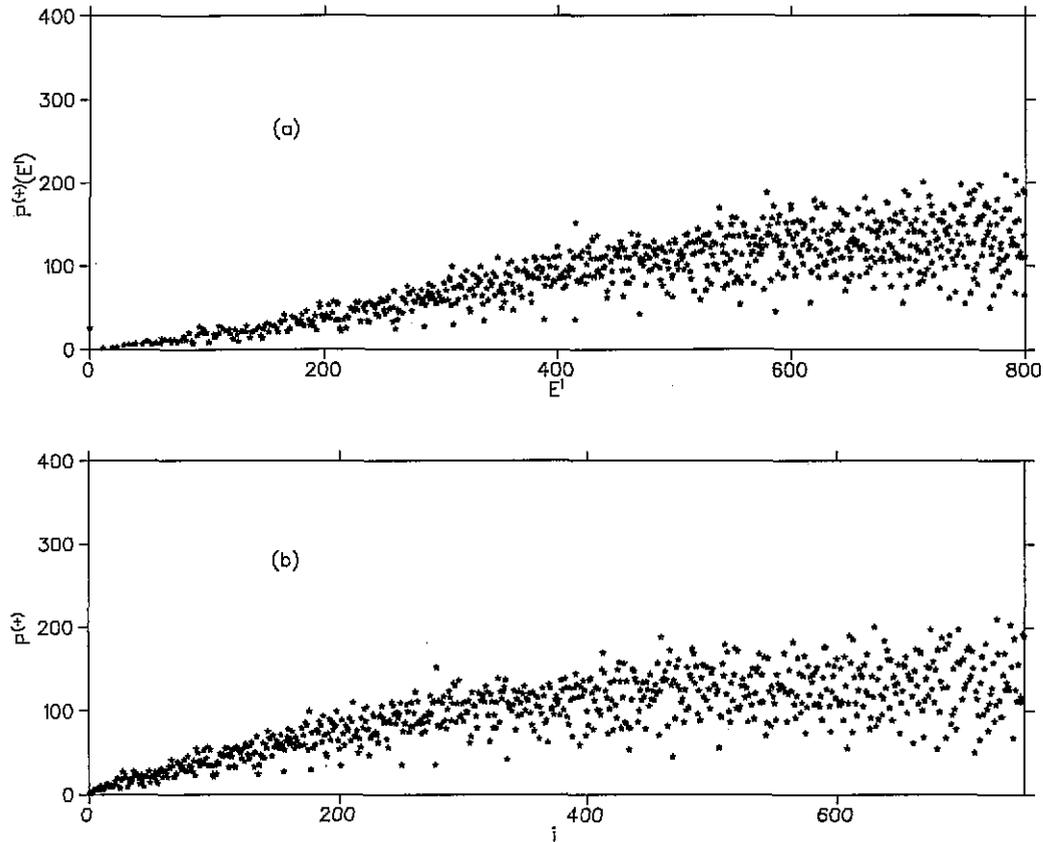


Figura 5.11: Razón de participación $P_i^{(+)} = (\sum_k |C_k^i|^4)^{-1}$ para el hamiltoniano H_2 contra (a) la energía perturbada E^i y contra (b) el número de estado. Recuerdese que las EF's se desarrollan en la base de H_1 . Contrástese ésta figura con la (4.1) en la cual la base es la de H_0 y la dispersión alrededor del promedio es mayor. Nótese que la escala vertical es la misma.

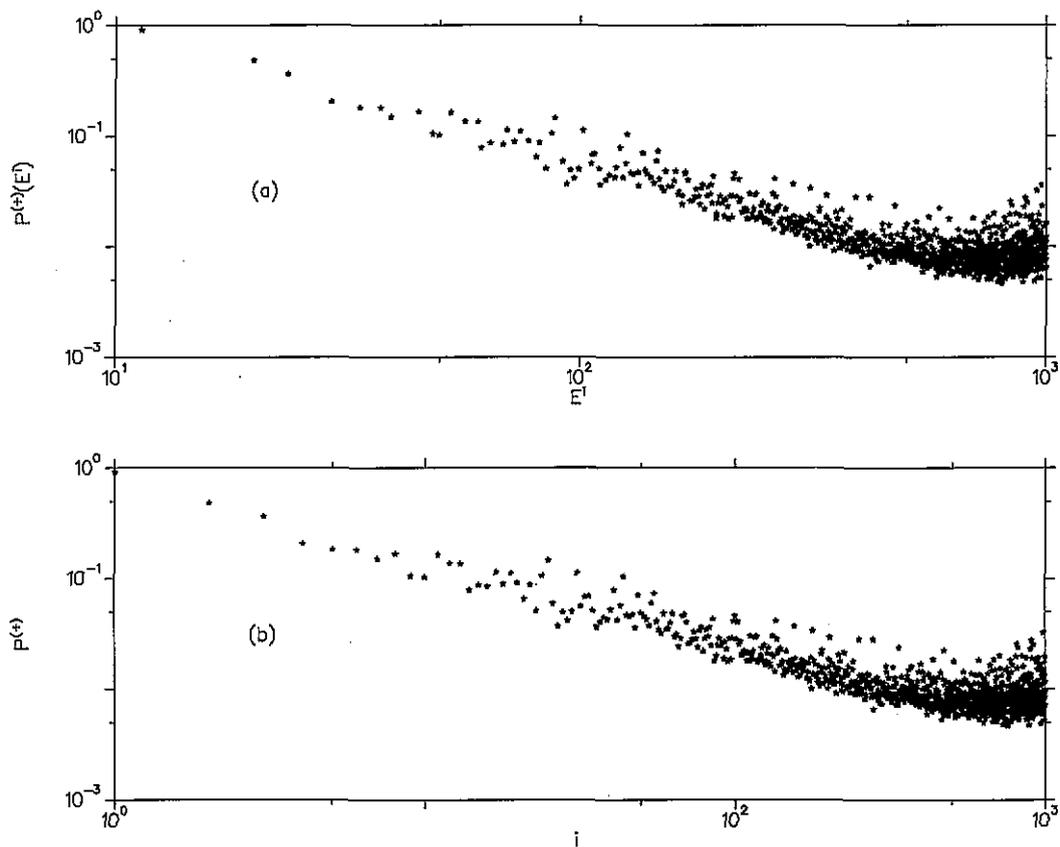


Figura 5.12: Razón de participación inversa $P_i^{(-)} = \sum_k |C_k^i|^4$ para el hamiltoniano H_2 contra (a) la energía perturbada E^i y contra (b) el número de estado en escala log-log. El cambio en la pendiente corresponde a la falta de confiabilidad de los estados en esta base.

una razón de participación baja. Su comportamiento promedio es lineal, como en el caso anterior y que está de acuerdo a la ley de escalamiento mencionada en [36]. Su ancho es mucho menor que en el caso de H_0 . Esto se nota por el hecho de que el número de estados entre Ψ_{200} y Ψ_{1000} con razón de participación menor a 50 es de 67, mientras que en el presente caso es de apenas 13. En el caso del hamiltoniano H_4 es de 99 estados con razón menor a 50. Esto muestra que el concepto de localización es un concepto que depende de la base. El cambio de pendiente en ambas gráficas se debe a la falta de confiabilidad de los estados.

La correspondencia clásico-cuántica es buena, aun en la zona B, pues ésta es mucho más ancha que en los casos previos. En las figuras 5.13 a 5.15 se muestran algunos ejemplos de EF's sin promediar. La selección se realizó de manera similar a la hecha para $N_p = 2$ y 4. El ajuste es bueno para estados de energía perturbada alta, aunque aun en este caso para estados de baja energía E^i la correspondencia fuera del centro es mala, esto se puede deber a un efecto de localización dinámica a bajas energías E^i , cuyo estudio lo dejaremos para un trabajo posterior. Un efecto curioso que aparece para estados altos en energía E^i es que el decaimiento en la zona clásicamente prohibida tarda en aparecer manteniéndose el promedio en un decaimiento suave. Los efectos de tunelaje en varias dimensiones cuántico en sistemas con límite clásico caótico no son fáciles de estudiar y no hay acuerdo sobre él [65], por lo que no nos ocuparemos de ello por el momento.

En la Fig. 5.17 se muestra el promedio de la EF, que es extremadamente bueno en las alas, pese a fallar ligeramente en la zona central. El ajuste es bueno en las alas para los casos de baja (Fig. 5.16), así como en el de alta energía E^i , (Fig. 5.18). El promedio es sobre 101 EF's, como en los casos previos. El fallo en la zona central se explica por que aún estamos bajos en la energía perturbada, por lo que hay una mayor dispersión de las componentes de las funciones de onda individuales en la base de H_1 . Nótese que el ancho del promedio no es mayor que el ancho clásico y esto se debe a que está determinado por él, esto es, el ancho de la eigenfunción es una cantidad clásica. Para ver esto basta notar que este ancho no es mas que la varianza:

$$\text{var}(\bar{g}(E, E^0)) = \int (E^0)^2 \bar{g}(E, E^0) \rho_0(E^0) dE^0 - \left(\int E^0 \bar{g}(E, E^0) \rho_0(E^0) dE^0 \right)^2. \quad (5.2)$$

Es de esperarse que conforme subimos en el espectro perturbado el ajuste sea cada vez mejor, es decir, que los efectos cuánticos desaparezcan aun cuando

queden algunas fluctuaciones que sea necesario suavizar. Esta falta de ajuste en la zona central no es privativa de este caso, pues como vimos, ocurre en el caso de H_1 y de H_4 . En esos casos la desviación no es simétrica.

En este caso del Hamiltoniano H_2 en la base de H_1 , las fluctuaciones globales alrededor del promedio clásico han perdido significativamente su exceso de amplitudes pequeñas, aun para estados de energía baja. En la Fig. 5.19 se muestra el estado 500 de este hamiltoniano en la base de H_1 . El ajuste es muy bueno y las fluctuaciones pequeñas. En la región de energía donde la correspondencia clásico-cuántica es buena las EF's son bastante parecidas, como se aprecia en la razón de participación; de ahí el buen ajuste.

Los anchos (Fig.5.20) en la zona C crecen aunque la derivada parece tender a cero. Hay que tener en cuenta que los últimos estados no son confiables. En este sentido, se parece más a lo que ocurre en el caso H_4 , Fig.5.9. En la zona B hay una tendencia a decrecer aunque no tan rápido como en H_1 . Ahora los comportamientos de H_2 y H_4 son muy parecidos. Además, nótese que las fluctuaciones alrededor de 1 en este último caso son menores a los casos anteriores.

En cuanto a las fluctuaciones locales, un análisis similar al realizado para H_1 y H_2 no ofrece grandes diferencias, como puede observarse en la Fig. 5.10(b) en un análisis semejante al aplicado en H_2 . En este caso la prueba estadística resulta ser de $\chi_{16}^2 = 14.483$ para una ventana con un ancho de 20Δ sobre un promedio alrededor del estado Ψ_{500} . Nuevamente, los anchos fluctúan alrededor de la unidad, como era de esperarse del análisis de matrices aleatorias.

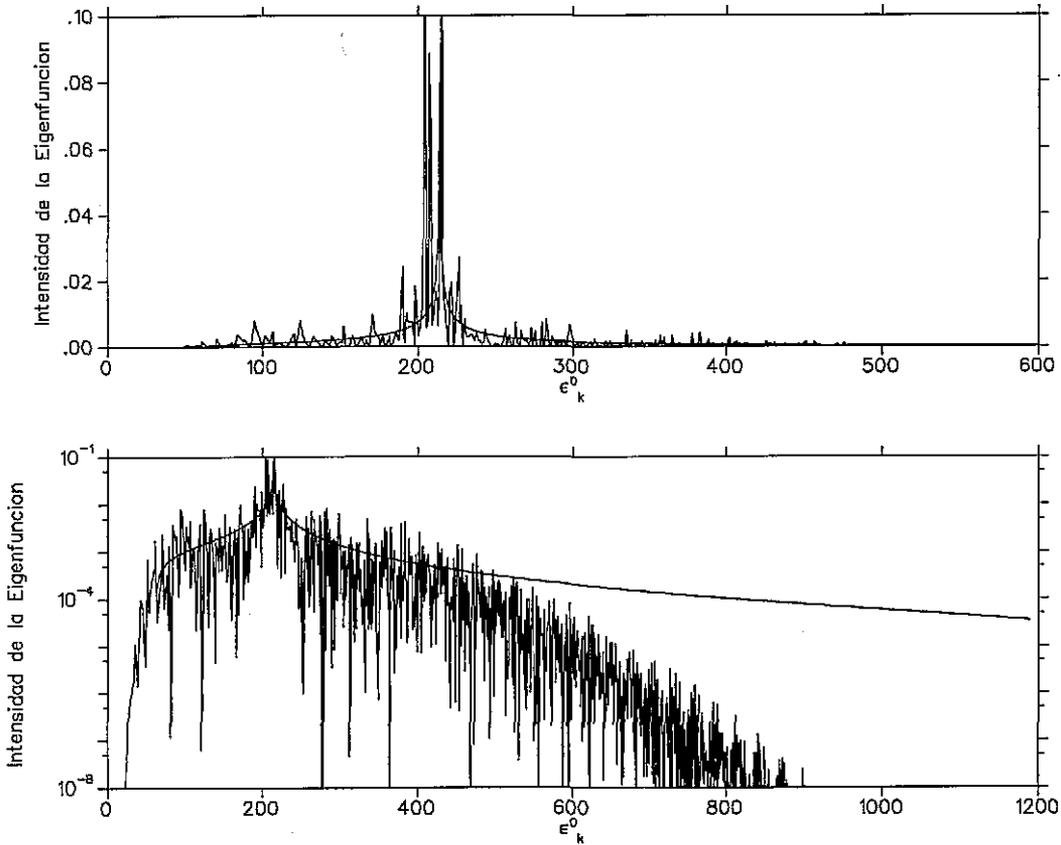


Figura 5.13: Intensidad sin promediar de la eigenfunción Ψ_{100}^2 del hamiltoniano H_2 . Arriba aparece en escala normal contra el espectro energético del hamiltoniano H_1 . Nótese que las E_k^0 son las energías de H_1 , en tanto que en las del capítulo previo lo eran de H_0 . En la parte de abajo se muestra la misma EF en escala semi-logarítmica. Lo mismo es válido para las figuras (5.14) a (5.15)

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

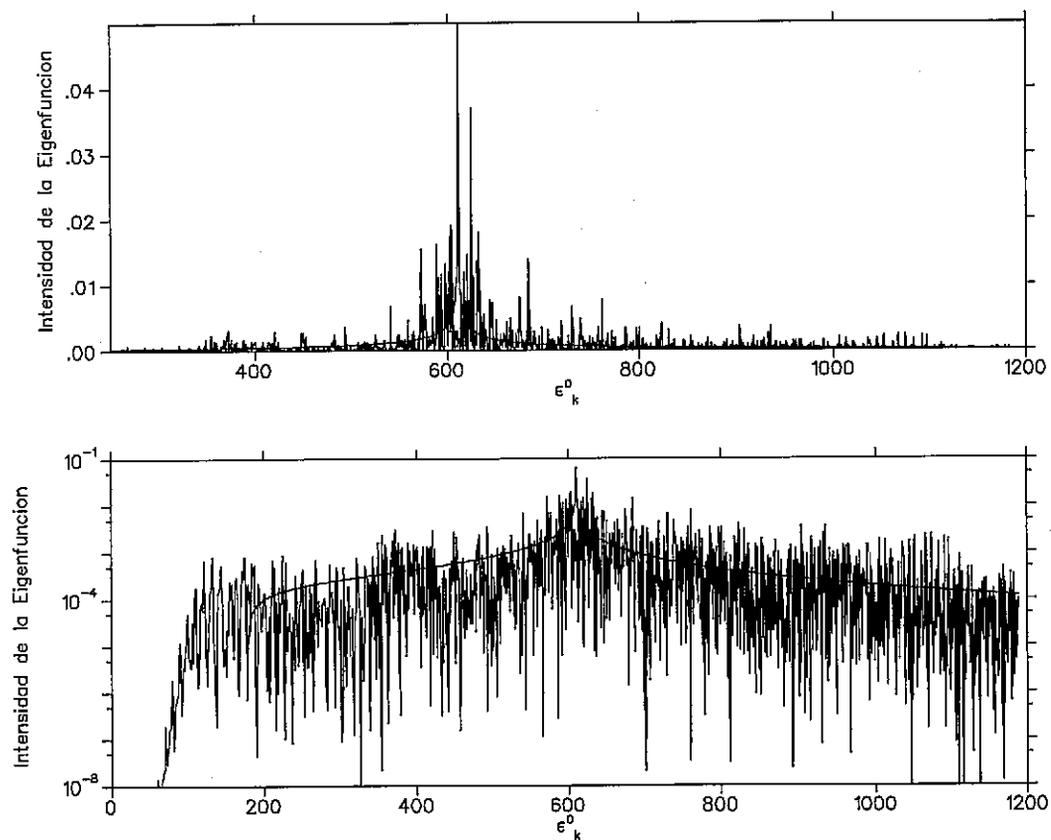


Figura 5.14: Intensidad sin promediar de la eigenfunción Ψ_{500}^2 del hamiltoniano H_2 , siendo el hamiltoniano base H_1 .

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

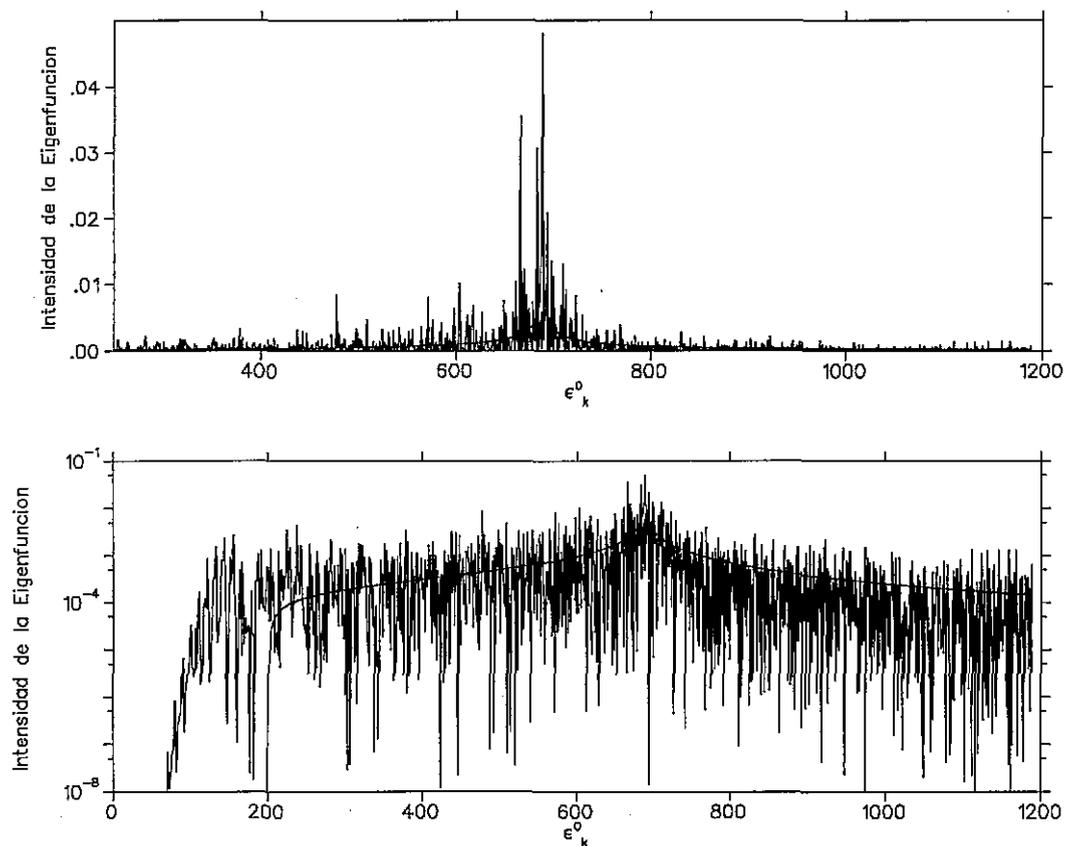


Figura 5.15: Intensidad sin promediar de la eigenfunción Ψ_{600}^2 del hamiltoniano H_2 , arriba aparece en escala normal contra el espectro energético del hamiltoniano H_1 . En la parte de abajo se muestra la misma EF en escala semi-logarítmica.

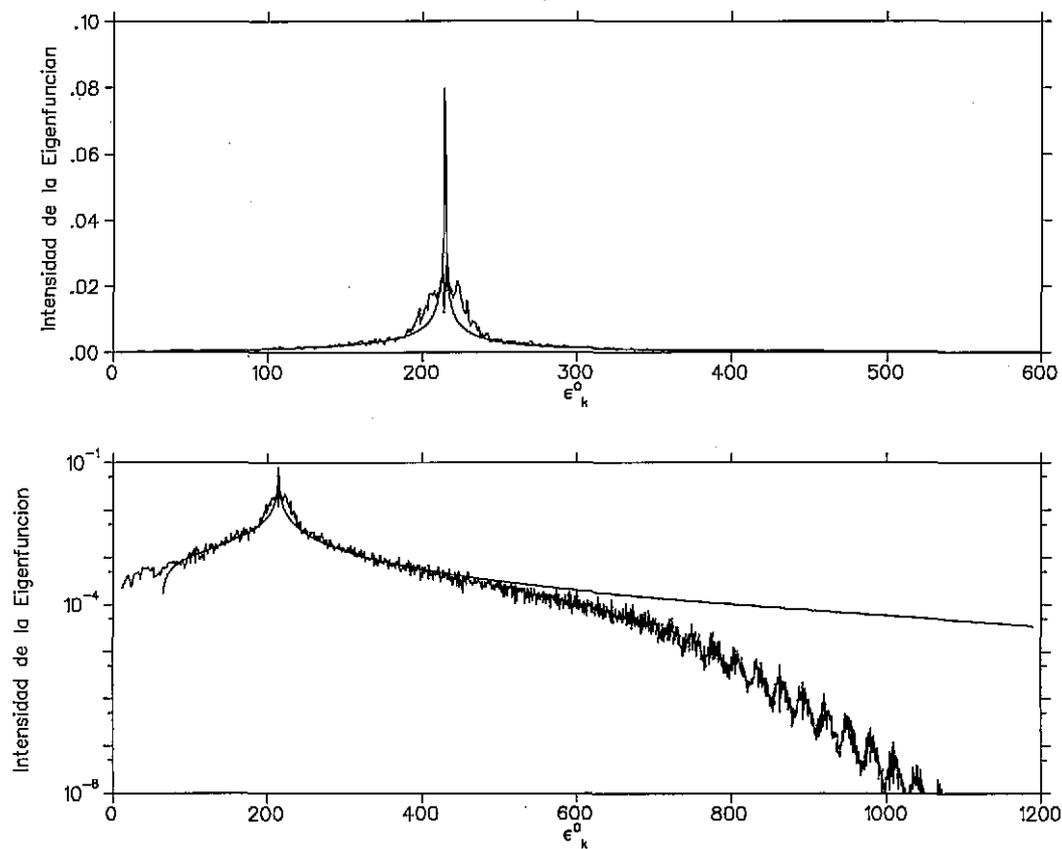


Figura 5.16: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{100}^2 del hamiltoniano H_2 .

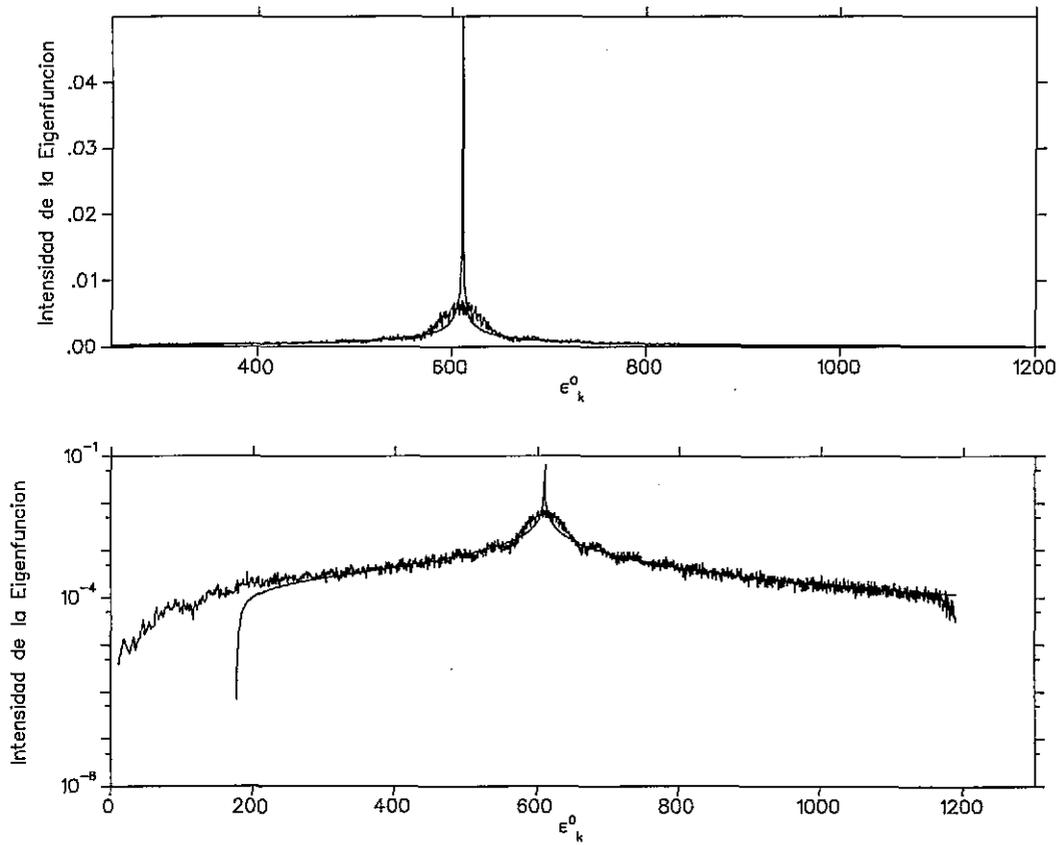


Figura 5.17: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{500}^2 del hamiltoniano H_2 .

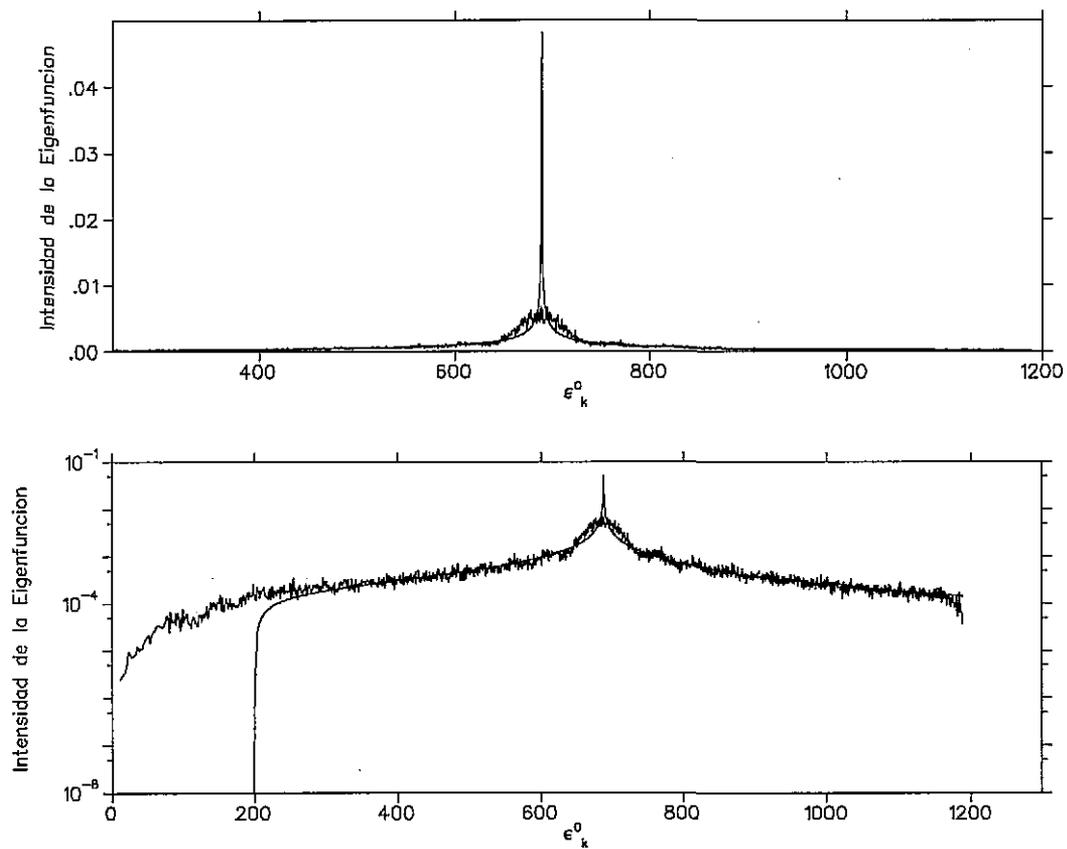


Figura 5.18: Intensidad promediada sobre 101 EF alrededor de la eigenfunción Ψ_{600}^2 del hamiltoniano H_2 .

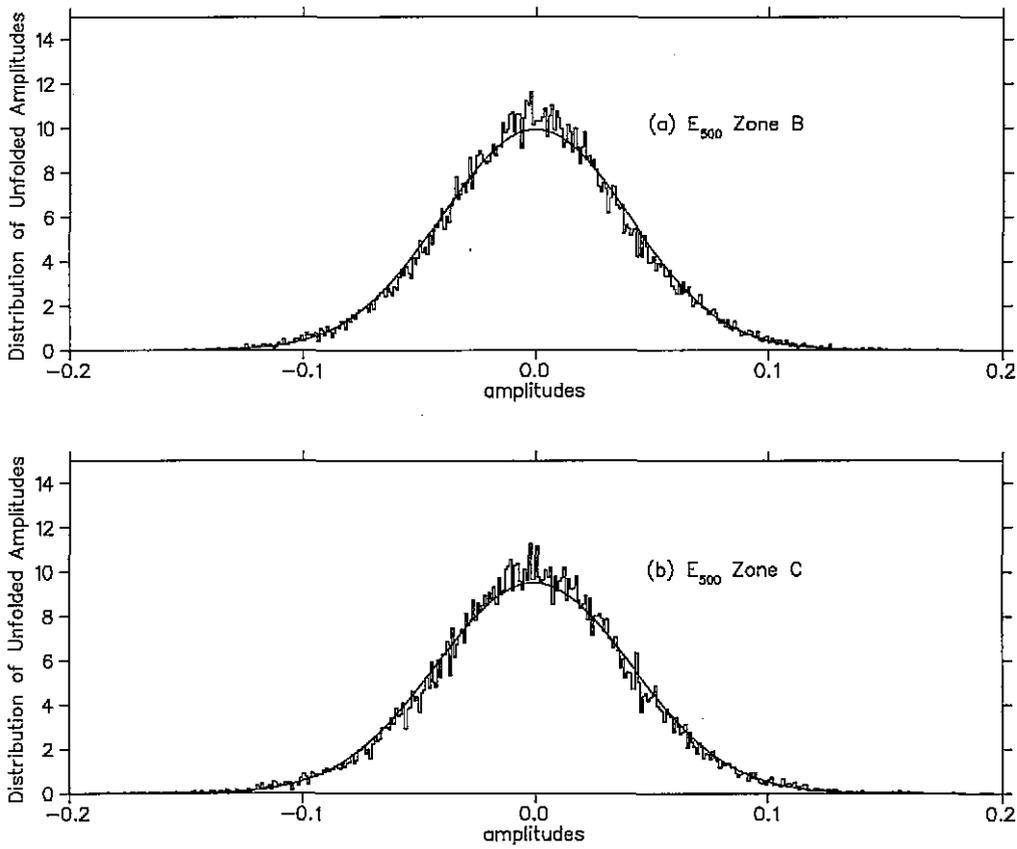


Figura 5.19: Distribución de las amplitudes rectificadas tomadas alrededor del estado Ψ_{500} de H_2 con energía de 611.717 para la región (a) B y (b)C.

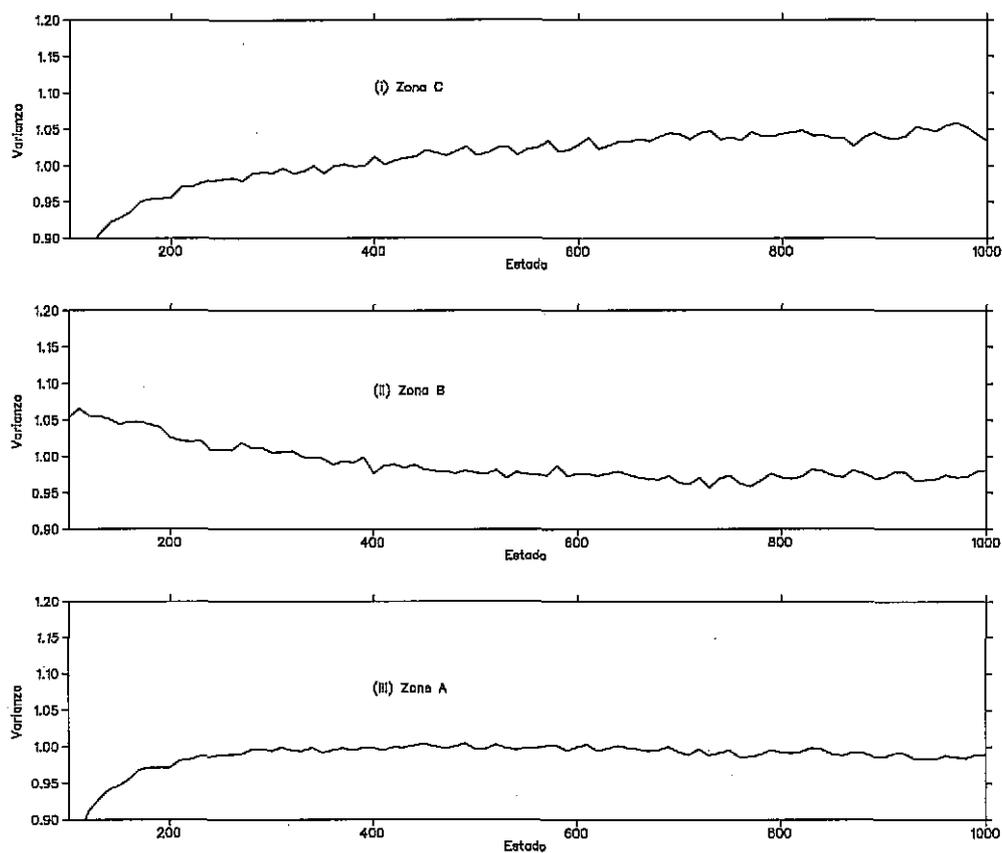


Figura 5.20: Varianza de las distribuciones de amplitudes rectificadas y no renormalizadas de H_2 como función del índice del estado. En (i) para la región C, en (ii) para B y en (iii) para A. Nótese la ausencia de fluctuaciones grandes.

Capítulo 6

Número de ocupación

Un aspecto importante en sistemas cuánticos que están expresado en alguna base de partícula independiente es la distribución del número de ocupación, que mide la distribución de cada estado del hamiltoniano total en los estados de una partícula. Este operador es importante pues el valor esperado de cualquier operador de una partícula puede ser calculado a partir de él.

En mecánica estadística, la distribución del número de ocupación para sistemas de partículas independientes y con $N_p \gg 1$ se conoce, y depende de la simetría permutacional, pues para sistemas de bosones (cuyas funciones de onda son simétricas ante el intercambio de partículas) la distribución límite es la de Bose-Einstein, mientras que para fermiones es la de Fermi-Dirac. En el límite semiclásico ambas distribuciones tenderán a la de Boltzmann, donde la importancia del carácter cuántico ha desaparecido. Para el caso de muchos cuerpos con interacción entre ellos el problema de calcular esta distribución es complicado [63]. Para el caso de sistemas aislados con interacción sólo en años recientes se han obtenido algunos resultados [26, 27, 28].

En este capítulo presentamos los resultados del cálculo de la estadística de número de ocupación para $N_p = 4$ en la base de H_0 de partículas independientes. En la primera sección damos una breve explicación sobre la clase de cálculo que realizamos, tanto cuántica como clásicamente. Como en los capítulos anteriores, mostramos la correspondencia clásico-cuántica para las funciones individuales y sus promedios. El análisis de las fluctuaciones se realiza rectificando las funciones cuánticas de la manera que ha sido usual en este trabajo, poniendo especial atención a las regiones donde el decaimiento clásico sigue una exponencial. En la introducción mencionamos que algo interesante de analizar en sistemas cuánticos aislados de pocas partículas es

su correspondencia con un proceso de termalización, donde se busca analizar la factibilidad de establecer análogos del operador en número de ocupación en el *ensemble* canónico. En este sentido los resultados analíticos obtenidos para el modelo de matrices aleatorias denominado *ensemble* aleatorio de dos cuerpos interactuantes (TBRI) [26] no son aplicables en nuestro caso, pero, existen algunas relaciones que numéricamente fueron probadas para este trabajo. Los resultados se presentan en la última parte de este capítulo.

6.1 Definición y Cálculo de $n(\epsilon_s)$

Como explicamos al final del capítulo 2 el operador de número de ocupación nos permite determinar la participación de estados de partícula independiente en la conformación de los eigenestados del hamiltoniano completo. Definimos este operador como

$$\langle n_s^i \rangle \equiv \langle \Psi_i | \hat{n}_s | \Psi_i \rangle = \sum_{k_1, \dots, k_{N_p}} |C_{k_1, \dots, k_{N_p}}^i|^2 \langle k_1, \dots, k_{N_p} | \hat{n}_s | k_1, \dots, k_{N_p} \rangle, \quad (6.1)$$

donde $|\Psi_i\rangle$ es el i -ésimo eigenestado antisimétrico del hamiltoniano total; $|k_1, \dots, k_{N_p}\rangle$ es el estado compuesto de los productos exteriores de las funciones de una partícula del hamiltoniano no perturbado $H_0 = \sum_{m=1}^{N_p} h^0(p_m, q_m)$, mientras que $C_{k_1, \dots, k_{N_p}}^i = \langle k_1, \dots, k_{N_p} | \Psi_i \rangle$, son los coeficientes de desarrollo y $\hat{n}_s = b_s^\dagger b_s$ es un operador que aplicado a la función $|k_1, \dots, k_{N_p}\rangle$ vale uno si el estado s está en ella y cero si no está. La energía ϵ_s es eigenestado de h^0 y usaremos la notación $\langle n_s^i \equiv n_s^i \equiv n^i(\epsilon_s)$. De esta manera, la participación de cada estado de partícula independiente en la base de H_0 estará pesada por su contribución a la formación del estado completo del hamiltoniano H . La normalización corresponde al número de partículas N_p . Las n_s^i individuales están definidas en la Ec. (6.1) y los promedios se realizan sobre las n_s^i de las diferentes EF's. En este caso no es necesario recentrar para promediar como en el caso de EF's pues todas las n_s^i están definidas de la energía del estado base del oscilador cuártico unidimensional hasta la energía del máximo número de cuantos considerado para la construcción de la base de partícula independiente. Lo que sí ocurre es que la distribución de n_s^i va alargándose conforme i lo hace, es decir, que estados de un cuerpo de energía cada vez mayor van siendo más importantes en la conformación de la función y por una regla de suma disminuyen las intensidades. Esto lo veremos más adelante.

Por otra parte, el análogo clásico de esta cantidad es

$$g_n(\epsilon, \mathcal{E}) = A' \int dpdq \delta(\mathcal{E} - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) \sum_{m=1}^{N_p} \delta(\epsilon - h^0(p_m, q_m)) / (2\pi\hbar)^d \rho(\mathcal{E} \rho_i(\epsilon)), \quad (6.2)$$

donde la suma corre sobre las variables de una partícula, ϵ es la variable independiente y \mathcal{E} es la energía del Hamiltoniano completo. El subíndice n se usa para indicar que se trata del análogo clásico de n^i . En términos prácticos esta cantidad es evaluada en el espectro poco denso de una partícula, por lo cual su comportamiento no es tan suave como en el caso de la CEF para el número de condiciones iniciales usadas en el cálculo Monte Carlo.

6.2 Resultados Individuales y Promedio

En esta sección presentamos los resultados del cálculo cuántico del número de ocupación para cuatro cuerpos, tanto individuales como en promedio y su comparación con su análogo clásico.

Los resultados para dos cuerpos, obtenidos por Suárez-Moreno [40], resaltan que la correspondencia entre el cálculo cuántico, Ec. (6.1), y su límite clásico, Ec. (6.2), es buena. Por otra parte, las fluctuaciones, aunque grandes, tienen una tendencia a disminuir conforme subimos en el espectro energético. Dichas fluctuaciones no se analizaron en términos de funciones rectificadas sino del cálculo de error relativo de las n_s^i , $|n_s^i - g_n(\epsilon, \mathcal{E})|/g_n(\epsilon, \mathcal{E})$. En ese mismo trabajo se encontró que la energía a la cual la distribución tiene un máximo más la energía del estado base corresponde aproximadamente a la energía de la componente principal de la EF de la cual proviene.

Para el caso de 4 partículas, H_4 , la correspondencia clásico cuántica es similar que en el caso analizado en [40]. En la Fig. (6.1) se muestran algunas de las n_s^i 's individuales. En (6.1a) para Ψ_{500}^4 , y en (6.1c) para Ψ_{900}^4 , el la columna derecha de la figura aparece el resultado en escala semilogarítmica. El ajuste es malo en los extremos y mejora en el centro, principalmente en la zona donde el análogo clásico sigue una exponencial. Como se explicó previamente hay un cambio de comportamiento en la parte final de la distribución debido a que el número de partículas es pequeño [42] y la correspondencia entre el cálculo clásico y el cuántico no existe. En la Fig.(6.2a) y (c) se muestran los estado Ψ_{541}^4 y Ψ_{793}^4 que corresponden a estados localizados con una razón de participación de 14.23418 para el primero y de 4.721931 para

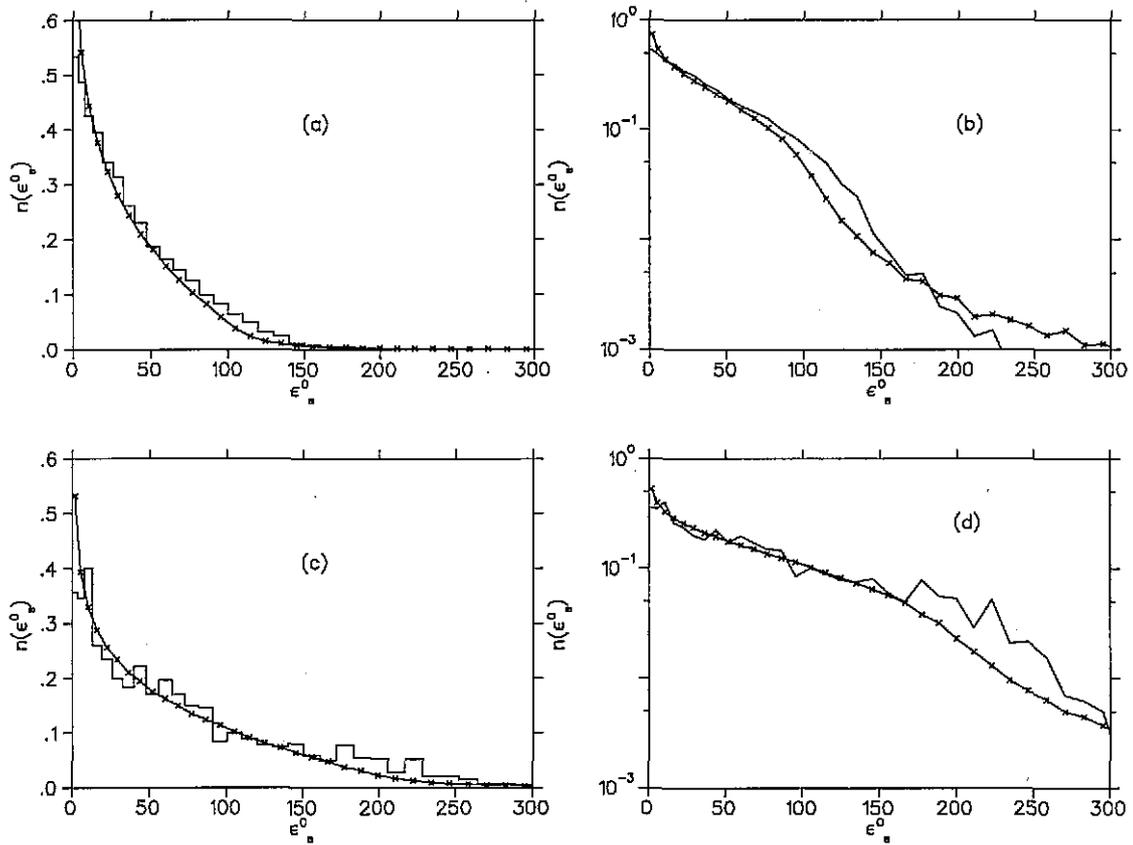


Figura 6.1: Número de ocupación de los estados 500(a) y 900(c) del hamiltoniano H_4 en histograma. En la columna derecha se aprecian los mismos resultados pero en escala semilogarítmica. La línea continua con cruces es el análogo clásico.

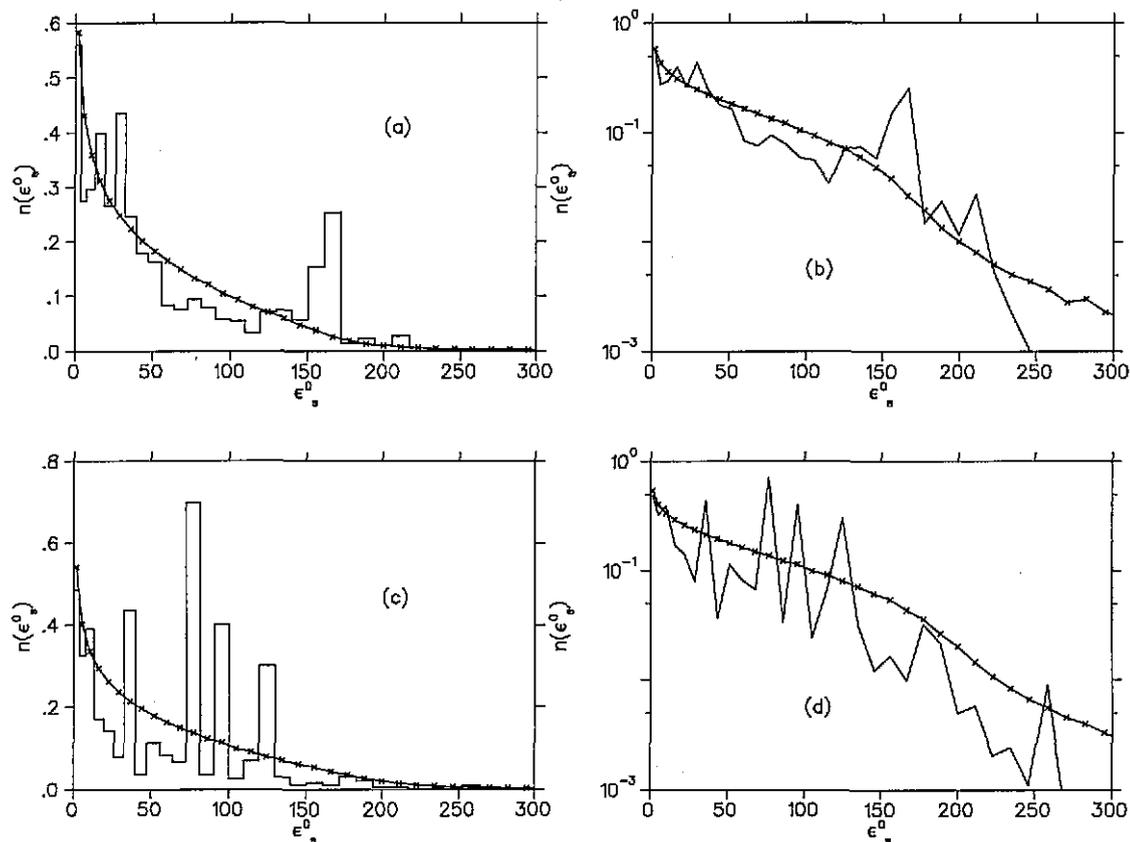


Figura 6.2: Número de ocupación de los estados 541(a) y 793(c) del hamiltoniano H_4 en histograma. En la columna derecha se aprecian los mismos resultados pero en escala semilogarítmica. La línea continua con cruces es el análogo clásico. Estos estados son fuertemente localizados.

el segundo. Como podemos observar, la correspondencia es mala y presenta grandes fluctuaciones. La explicación de esto es la siguiente: Consideremos una EF de H_0 , es decir que sólo el estado antisimétrico $|k_1, k_2, k_3, k_4\rangle$ contribuye a su conformación. El operador \hat{n}_s cuenta una sola vez cada estado de partícula independiente, por lo que la gráfica de n_s^i esta conformada de únicamente cuatro puntos no nulos, $\epsilon_{n_1}, \epsilon_{n_2}, \epsilon_{n_3}$ y ϵ_{n_4} . Si el estado no es una eigenfunción de H_0 , y hay una pequeña contribución de otros estados, la función n_s^i cambia ligeramente para tomar en cuenta las otras contribuciones. Un ejemplo de ello es el estado base de H_4 cuya distribución de número de ocupación se muestra en la figura 6.3. Las pequeñas contribuciones de otros estados y la normalización hacen que las intensidades asociadas a las energías ϵ_{n_i} no sean 1 (recuérdese que la normalización en este caso es a $N_p = 4$). De hecho, las distribuciones individuales de n_s^i que recuerdan a la de Fermi-Dirac corresponden a estados localizados, como se muestra en la Fig. XXXX.

Para el promedio sobre E^i la correspondencia mejora aunque se mantiene por abajo del análogo clásico, como puede observarse en la figura 6.4 para un promedio sobre 101 estados alrededor de Ψ_{500}^4 y Ψ_{900}^4 . Como en el caso de EF's, la presencia de estados localizados altera el promedio. En las figuras (6.5) y (6.6) se muestran los promedios sobre 101 estados centrados en el estado 100, 200, ..., 900; en la primera en escala normal y en la segunda en escala semilogarítmica. La ventana está ordenada en estados crecientes hacia la derecha y hacia abajo. La correspondencia con su límite clásico no es tan buena, salvo algunas regiones donde el análogo clásico sigue una exponencial. En general, el análogo clásico subvalúa el promedio cuántico. Cerca del origen g_n sobrevalúa al promedio, \bar{n}_s^i , mientras que en la zona de decaimiento exponencial lo subvalúa. Esto se debe a que el cálculo cuántico utiliza sólo los estados fermiónicos mientras que g_n no lleva esta información. En particular, la falta de estados de baja energía es típica en fermiones mientras que en bosones el número de estados de baja energía es mayor; piénsese, por ejemplo, en el condensado de Bose: $|0000\rangle$. Para energías mayores éste comportamiento pierde importancia y es por eso que el límite clásico de ambas energías es la distribución de Boltzmann. Este argumento nos lleva a que la correspondencia de g_n mejore si consideramos ambas simetrías en el caso cuántico.

En este caso no podemos realizar el cálculo de n^i para H_2 en la base de H_1 pues las EF's de este último hamiltoniano no son de partícula independiente.

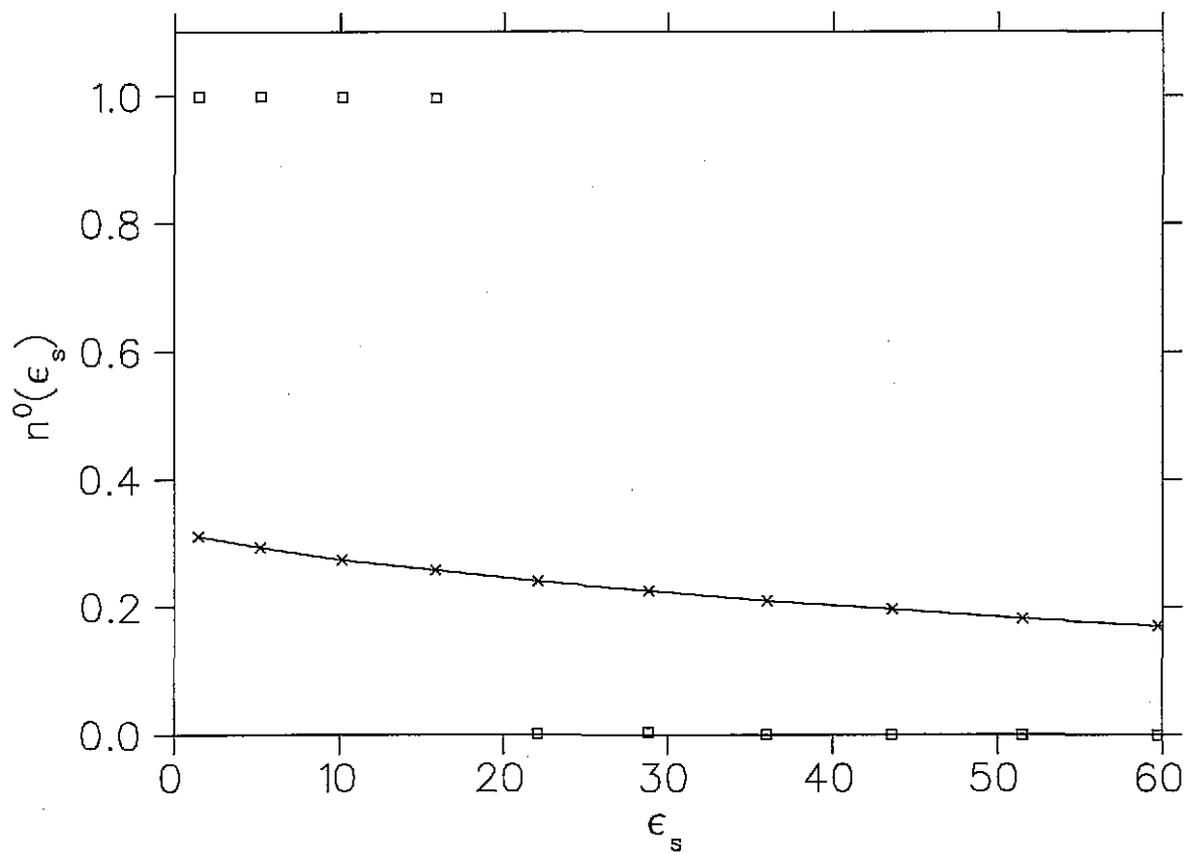


Figura 6.3: Número de ocupación del estado Ψ_1 , es decir el estado base del hamiltoniano H_4 . En cuadros los valores del número de ocupación cuántico. La línea continua con cruces es el análogo clásico.

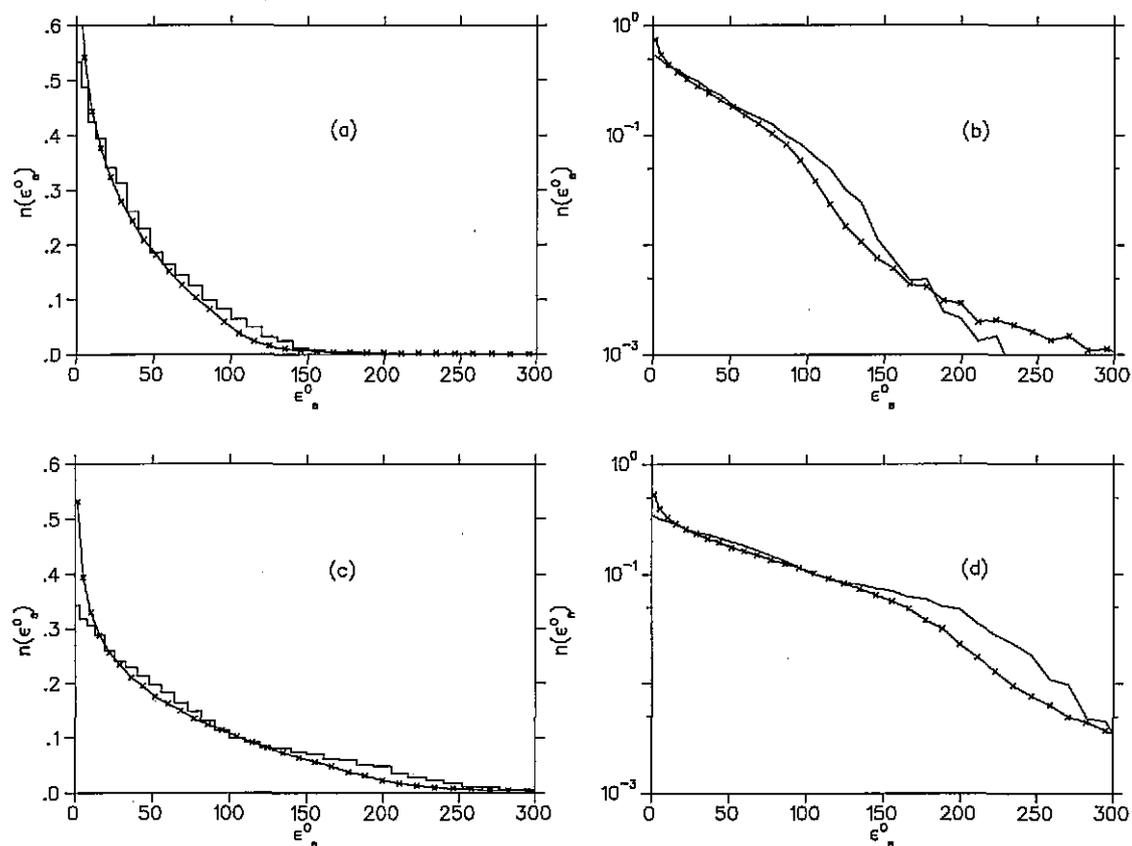


Figura 6.4: Número de ocupación promediado sobre 101 estados alrededor de los estados 500(a) y 900(c) del hamiltoniano H_4 . En la columna derecha se aprecian los mismos resultados pero en escala semilogarítmica. La línea continua con cruces es el análogo clásico.

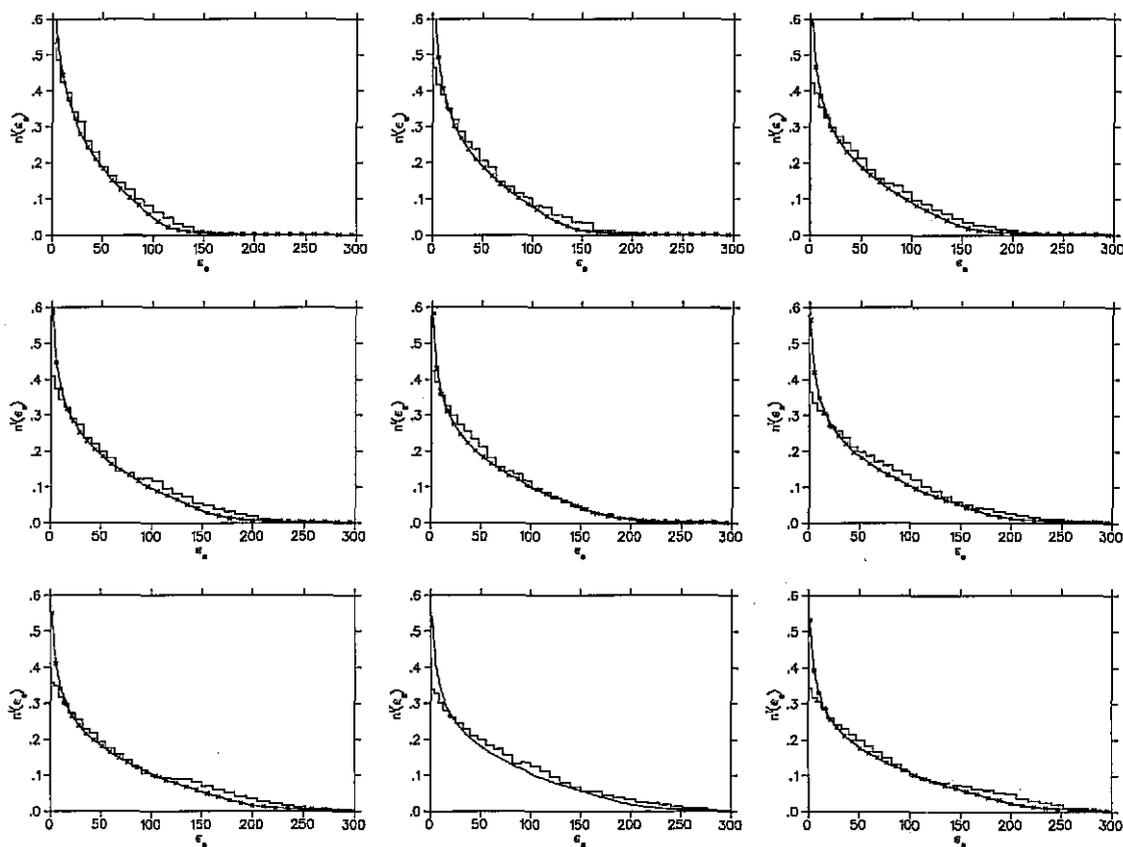


Figura 6.5: Número de ocupación promediado sobre 101 estados alrededor de los estados 100, 200, \dots , 900. El número de estado se incrementa hacia la derecha y hacia abajo. La línea continua con cruces es el análogo clásico.

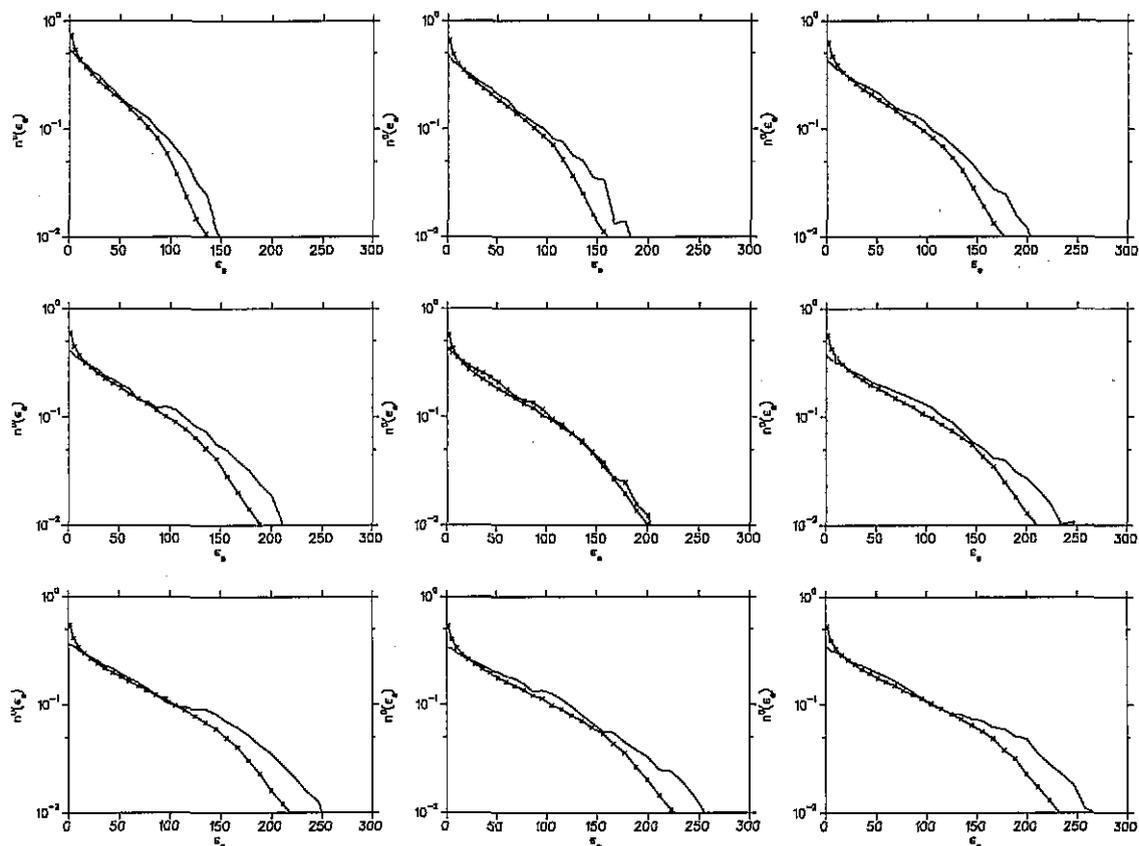


Figura 6.6: Número de ocupación promediado sobre 101 estados alrededor de los estados 100, 200, \dots , 900 en escala semilogarítmica. El número de estado se incrementa hacia la derecha y hacia abajo. La línea continua con cruces es el análogo clásico.

6.3 Fluctuaciones

Pese a la ligera falla de la correspondencia clásico-cuántica, realizamos el análisis de las fluctuaciones de las funciones n_s^i rectificadas. Para esto consideramos un promedio de 101 estados alrededor del estado 500 y del 800 y nos restringimos a energías ϵ_s^0 entre 30 y 100 para el primer caso y entre 40 y 120 para el segundo. En esta región es donde la parte clásica sigue una exponencial. Los resultados se aprecian en las figuras (6.7) y (6.8). El primer momento está ligeramente corrido del valor unidad, siendo 1.05 en el primer caso y de 1.099 en el segundo. Hay una presencia de valores grandes que hace asimétrica la distribución. Sin embargo, el ajuste a una distribución gaussiana es bueno en la zona central. Como en el caso de los EF's, la expectativa de máxima entropía es una distribución Gaussiana de varianza unidad. En la gráfica (6.7) aparece dicho ajuste a la distribución numérica entre $\epsilon_s^0 = .6$ y $\epsilon_s^0 = 1.6$ y cuyo valor para el centroide es de 1.00949 y para la varianza es de 0.0486; para (6.8) los valores respectivos son de 1.05943 y 0.0368. El número de datos considerados en cada caso fue del orden de 1000.

6.4 Factor de Boltzmann

Como mencionamos anteriormente, el estudio del equilibrio estadístico de sistemas aislados puede relacionarse, con sumo cuidado, con una descripción termodinámica [26]. Izrailev *et al* desarrollaron un formalismo para el proceso de termalización dentro del modelo de TBRE (*Two Body Random Interacting Ensemble*) que representa un sistema aislado y donde las fluctuaciones del sistema tienden a estabilizarse.

Para este trabajo, lo primero que establecemos es la posibilidad de definir un factor de Boltzmann en la clase de sistemas que estamos analizando. Para esto, partimos de la expresión que relaciona el punto de vista macroscópico y el microscópico

$$S = k_B \log(\Gamma(E)), \quad (6.3)$$

donde S es la entropía, k_B es la constante de Boltzmann, Γ es el número de micro estados accesibles al sistema a energía E y, en el caso de un sistema clásico, ese número está relacionado con la densidad clásica $\rho(E)$. Esta densidad es la integral de espacio fase calculada para la fórmula de Weyl. De ésta sabemos que es proporcional a $E^{3d/4-1}$, donde d es el número de grados

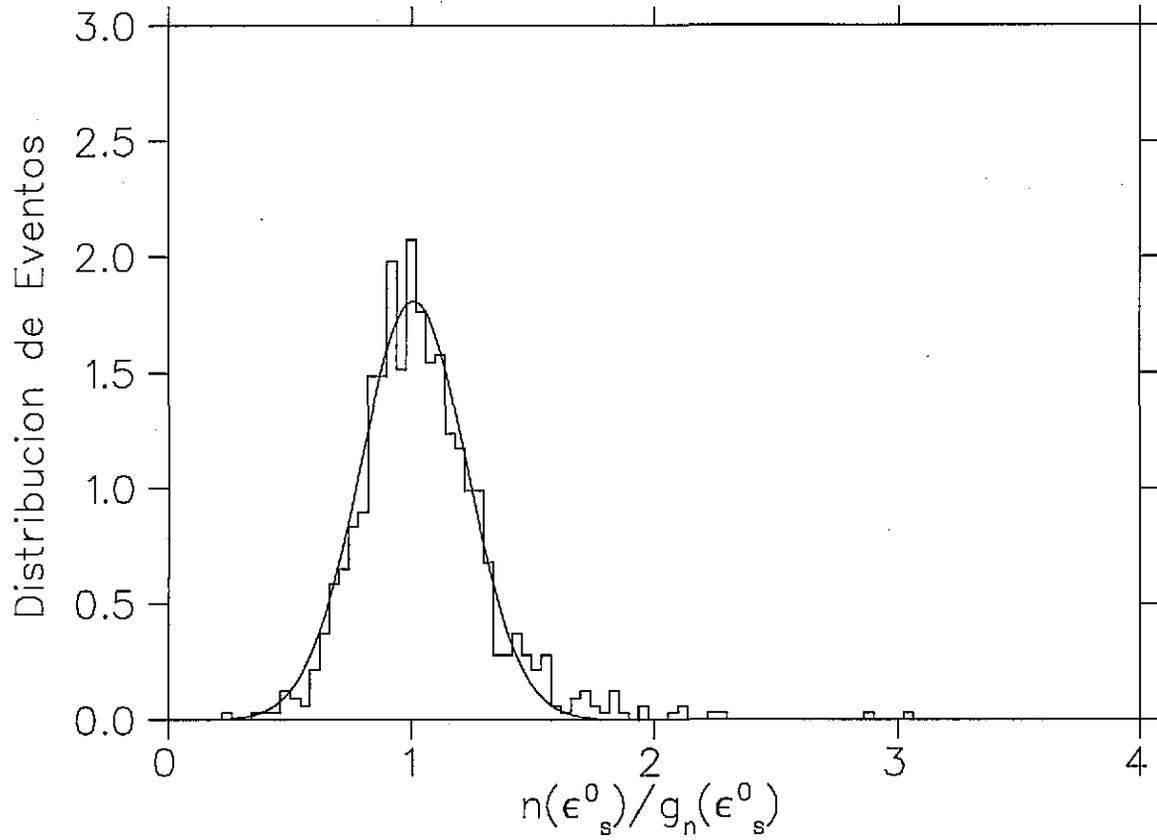


Figura 6.7: Fluctuaciones del número de ocupación sobre 101 estados alrededor del estado 500. En línea continua corresponde a la Gaussiana que mejor ajusta al histograma de $\epsilon_s^0 = .6$ a $\epsilon_s^0 = 1.6$.

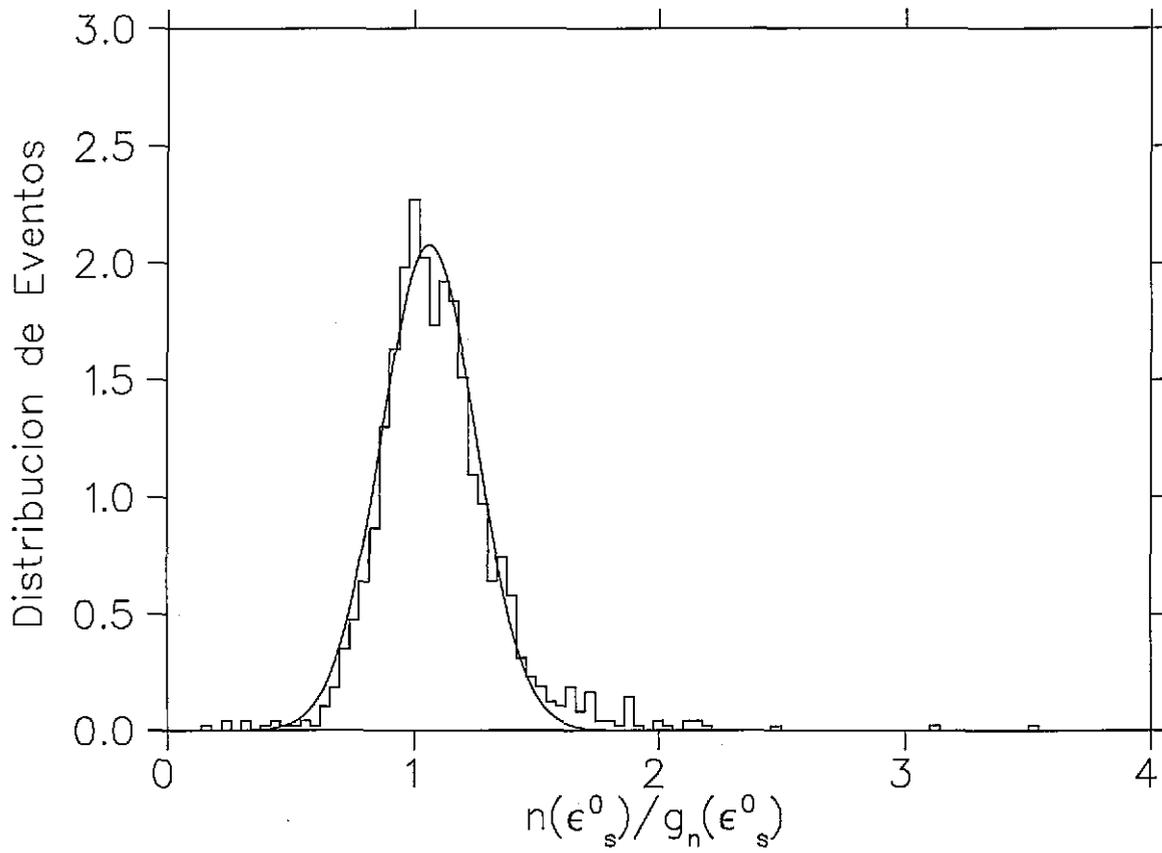


Figura 6.8: Fluctuaciones del número de ocupación rectificado sobre 101 estados alrededor del estado 800. En línea continua, la Gaussiana que mejor ajusta al histograma de $\epsilon_s^0 = .6$ a $\epsilon_s^0 = 1.6$.

de libertad, más correcciones debidas a la (anti)simetrización que, aquí, hemos considerado como polinomios en orden decreciente de $E^{3d/4-i/2-1}$, con $i = 0, 1, \dots$. Haciendo uso de la relación termodinámica

$$\beta_B = \frac{1}{k_B} \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right), \quad (6.4)$$

tenemos que

$$\beta_B = \frac{\partial \log(\rho(E))}{\partial E}, \quad (6.5)$$

cuyo resultado será, para nuestro sistema,

$$\beta_B = \frac{3d/4 - 1}{E}, \quad (6.6)$$

si sólo consideramos el término de Weyl. Si consideramos las correcciones a este término la expresión será

$$\beta_{B,4} = \frac{3a_0 E^2 + \frac{15}{4} a_1 E^{1/2} + 2a_2}{3a_0 E^2 + \frac{5}{2} a_1 E^{3/2} + 2a_2 E}, \quad (6.7)$$

para el caso especial de $N_p = 4$. Véanse la Ec.(3.5) y la tabla 3.1. Para los otros valores de d los resultados son fácilmente calculables y la Ec. 6.7 es la que usamos más adelante.

De manera similar podemos calcular este factor para el análogo clásico del número de ocupación, definido en la Ec. 6.2. Como podemos observar de las gráficas de las secciones anteriores, en algún rango energético el análogo clásico tiene un decaimiento exponencial. Lo anterior se observó en todos los casos estudiados clásicamente, es decir $N_p = 2, \dots, 5$. Si realizamos un ajuste por mínimos cuadrados a esa región para cada EF podemos obtener el factor de decaimiento y es de esperarse que éste sea el factor de Boltzmann correspondiente a la distribución. Graficamos este factor contra la energía del estado E^i en la Fig. 6.9. El cálculo es muy sensible a los efectos de borde de la región que consideramos para el ajuste. El mejor resultado se obtuvo haciendo el cálculo sólo en el centro de la zona con decaimiento exponencial para cada curva. En la figura aparecen también las funciones correspondientes a $\frac{2}{E}$ y a la Ec.(6.7). (Nótese que las tres curvas son clásicas). Aunque hay una diferencia entre el cálculo a través de las CEF's y el de densidades, la forma de decaimiento es una ley de potencia. De hecho el decaimiento

como $\frac{1}{E}$ es una consecuencia de las propiedades de escalamiento del sistema. Como las EF's el análogo clásico de la $n^i(\epsilon_s^0)$ tiene la propiedad de que $g_n(\epsilon_s^0, E) = E^{-1}g_n(\epsilon_s^0/E, 1)$, por lo que si $g_n(\epsilon_s^0, E)$ decae exponencialmente en algún rango de energía su escalamiento es

$$\exp(-\beta(E)\epsilon_s^0) = E^{-1} \exp(-\beta(1)\epsilon_s^0/E), \quad (6.8)$$

de donde $\beta(E) = -\beta(1)/E$.

El cálculo cuántico también es delicado. El número de ocupación para una EF individual $n^i(\epsilon_s^0)$ tendrá un comportamiento promedio por fluctuaciones¹, como se mostró en las secciones anteriores. El promedio realizado sobre una ventana de energía centrada en E^i puede ser considerado como una clase de promedio microcanónico, puesto que nos encontramos a energía fija E . Esta relación con un *ensemble* estadístico ha de tomarse con cuidado, pues estamos hablando de $N_p \approx 1$ y no de 10^{23} partículas, por lo que una descripción termodinámica y una descripción basada en la existencia de un equilibrio estadístico en sistemas aislados ha de considerarse con la debida reserva.

Por ejemplo, en la Ref. [26] se considera la relación entre la expresión del número de ocupación de la Ec. 6.1, debidamente normalizada, y un equivalente en el *ensemble* canónico

$$n(\epsilon_s^0, T) = \frac{\sum_i n^i(\epsilon_s^0) \exp(E^i/T)}{\sum_i \exp(E^i/T)}, \quad (6.9)$$

a temperatura T de un baño térmico. Ambas expresiones están relacionadas por

$$E = \langle E \rangle_T = \frac{\sum_i E^i \exp(E^i/T)}{\sum_i \exp(E^i/T)}. \quad (6.10)$$

Esta relación entre el número de ocupación microcanónico y el canónico es válida en el TBRE, como demostraron Izrailev *et al* [26, 27, 28] En ese modelo la densidad de estados es una gaussiana y facilita mucho los cálculos analíticos. En nuestro caso, la densidad es polinomial y no acotada por arriba, por lo que esos resultados no se aplican a nuestro caso. Encontrar que esa relación se cumple para nuestro sistema se dejará para un trabajo posterior. Sin embargo, numéricamente podemos revisar una de las relaciones que se

¹Esta es una de las razones por las que el rectificado de esta clase de funciones también puede llamarse desconvolucionamiento.

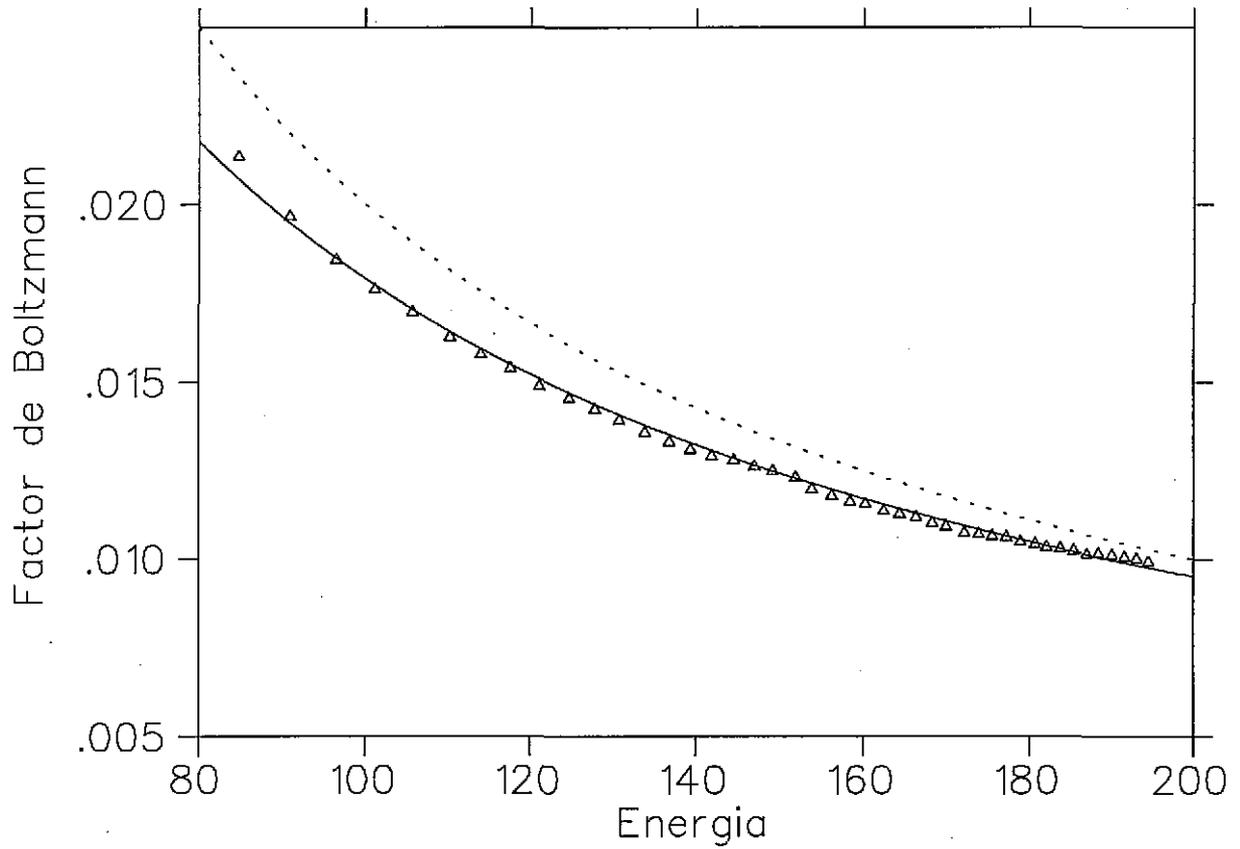


Figura 6.9: Factor de Boltzmann calculado usando la tasa de decaimiento exponencial del análogo clásico de $n(\epsilon_s^0)$ (en triángulos) y de acuerdo a la Ec. 6.12, con dos aproximaciones a la densidad de estados, la curva punteada representa el cálculo correspondiente al término de Weyl, la curva continua corresponde al término de Weyl más las dos primeras correcciones al espectro numérico.

presentan en los trabajos citados. Esta se refiere a la existencia de una función de “promediamento (térmico) canónico” que nos permitirá establecer la relación entre un *ensemble* y otro, esto es

$$\sum_i n^i(\epsilon_s^0) \exp(E^i/T) \approx \sum_k n^k(\epsilon_s^0) \int F_k^i \Phi_T(E^i) dE^i, \quad (6.11)$$

donde F_k^i es el promedio de los coeficientes de expansión $|C_k^i|^2$ o EF promedio y $\Phi_T(E) = \rho(E) \exp(E/T)$ es la citada función de “promediamento (térmico) canónico”. La Φ es una gaussiana para el caso de TBRE, mientras que para sistemas de muchos cuerpos la función Φ presenta un máximo y alrededor de él es bastante delgada. Para el sistema de osciladores cuárticos analizado la densidad es un polinomio de grado máximo $3d/4 - 1$ y es creciente, pero la exponencial garantiza que el producto decaerá a energías altas. Así la Φ es una función con un máximo y un ancho, que pueden ser calculados: la posición del máximo es la solución de la ecuación

$$\frac{d}{dE} \log \rho(E) = \frac{1}{T}, \quad (6.12)$$

y su ancho es

$$\Delta_T = \left| \frac{d^2}{dE^2} \log \rho(E) \right|^{-1/2}. \quad (6.13)$$

La ecuación (6.12) es el mismo resultado que la Ec. (6.5) y que se muestra en la figura 6.9. Una de las posibles razones para la falta de acuerdo entre los resultados numéricos y este análisis es la falta de intensidad de la interacción, que demostró ser un factor importante para la bondad de esta clase de ajuste en el caso de $N_p = 2$ [40].

Capítulo 7

Conclusiones

Los objetivos de esta tesis fueron: por un lado, estudiar la relación clásico-cuántica para una cantidad dependiente de la base, como lo son las eigenfunciones, en un sistema de pocas partículas. Por el otro, el objetivo es analizar la clase de fluctuaciones que presentan las eigenfunciones de esos sistemas alrededor de su límite clásico.

La primera parte de trabajo muestra que:

‡Existen zonas de validez donde se cumple la relación entre la intensidad de las eigenfunciones cuánticas en el espacio de energía del sistema cuántico y su correspondiente límite clásico, que denominamos eigenfunción clásica. El ajuste al promediar las eigenfunciones en un rango de energía es en general bueno y mejora conforme subimos en el espectro energético del sistema.

Hay varias zonas en donde esto falla, debido al efecto túnel, a la falta de confiabilidad del cálculo numérico, a la singularidad que presenta el límite clásico y a fluctuaciones cuánticas. Las tres primeras fallas ocurren genéricamente en los tres casos analizados en este trabajo. La última falla fue tratada particularmente, pues en la mayoría de los casos se debía a funciones de onda localizadas en el espacio de energías. Estas funciones presentan fuertes desviaciones del límite clásico y su influencia en la distribución de las fluctuaciones es muy importante. Se encontraron otros estados cuyos promedios no se ajustaban a la eigenfunción clásica en algunas regiones de la energía, sin embargo *la eigenfunción clásica en parte del intervalo de energía calculado se encontró dentro de las fluctuaciones de la eigenfunción cuántica*. Tal fue

el caso de cuatro partículas, donde es más notorio este efecto. De lo anterior concluimos que:

†La ergodicidad que presentan las eigenfunciones es, por lo tanto, un ingrediente importante en el desarrollo de teorías estadísticas para estos sistemas.

Para el estudio de las fluctuaciones seguimos la propuesta de Benet *et al* en el sentido de que la manera de democratizar las fluctuaciones en las funciones de onda es rectificarlas usando su límite clásico. Este método tiene la gran ventaja de que dicho límite es una cantidad puramente clásica, como lo es el término de Weyl para la densidad de niveles. Como esta última, la eigenfunción clásica puede tener correcciones para ajustarse a un sistema cuántico dado. Este análisis está aun por hacerse. Para darnos una idea sobre la clase de fluctuaciones que se pueden encontrar, se propuso un modelo de matrices aleatorias con la constricción de sujetarse a un promedio. Este promedio no es más que la eigenfunción clásica. En el modelo se cumple la relación clásico-cuántica, en el límite de matrices grandes, de manera exacta y para matrices finitas tiene fluctuaciones de orden $1/\sqrt{N}$. En este modelo las amplitudes rectificadas tienen distribuciones Gaussianas, lo cual implica que la distribución de las intensidades sea Porter-Thomas. El ancho de las distribuciones Gaussianas es de valor unidad. Las condiciones de aplicabilidad de este modelo requieren de cierta ergodicidad del sistema y, por ende, de la ausencia de intensidades extraordinariamente grandes. Para nuestros sistemas dinámicos estas condiciones sólo se cumplen en pequeñas ventanas de energía en las colas de la función de onda. Encontramos que:

†Para sistemas caóticos cuyas eigenfunciones están expresadas en las funciones de un sistema ordenado existe una abundancia anormal de amplitudes pequeñas. Esta abundancia proviene de la existencia de estados localizados en esas bases, por lo que si los descartamos recuperamos la "Gaussianidad" de las fluctuaciones.

Estos estados localizados pueden corresponder a cicatrices en la base de espacio fase. Para un sistemas caótico en la base de otro con una dinámica clásica también caótica, hay menos oportunidad para la localización. De ahí que:

†Nuestro sistema de osciladores anarmónicos expresados en una base de un sistema caótico redujo sensiblemente la presencia de las amplitudes pequeñas.

Además

†En las ventanas de energía de la base donde la distribución de las amplitudes rectificadas y no renormalizadas son, en buena aproximación, Gaussianas su varianza fluctúa alrededor de la unidad, que es el valor predicho por el modelo de matrices aleatorias.

Por otra parte,

†las fluctuaciones en ventanas con anchos iguales a muchos espaciamientos promedio tienden a incrementarse lentamente.

No se pudo determinar la clase de crecimiento de estas fluctuaciones y si están relacionadas, de alguna manera, con el crecimiento de las fluctuaciones en otras bases, por ejemplo, la del espacio fase a través de funciones de Husimi.

En términos generales, podemos decir que:

†Las eigenfunciones de esta clase de sistemas dinámicos con un límite clásico caótico pueden representarse por su límite clásico por fluctuaciones gaussianas.

Las razones de las desviaciones más allá de los estados localizados permanece abierta y como una posibilidad de investigación. El estudio de las fluctuaciones de densidad local de estados y de la estadística de número de ocupación está por hacerse. Lo mismo ocurre con la aplicación a otros sistemas donde un cálculo rápido de las funciones de onda o de la densidad local de estados puede evitar la diagonalización de matrices enormes. La aplicación a sistemas de capa cerrada, donde la dinámica importante por arriba del nivel de Fermi se da entre pocas partículas, es un área especialmente atractiva para continuar este trabajo.

Por otra parte, se estableció la correspondencia clásico-cuántica para la estadística de número de ocupación para el caso de cuatro partículas, la cual presenta ligeras desviaciones en el centro y grandes en los extremos.

†Por lo que la correspondencia clásico-cuántica para la función de estadística de número de ocupación presenta desviaciones aun al promediar en energía.

Las desviaciones del extremo superior se deben al número pequeño de partículas usadas. Las otras desviaciones aun no están explicadas. Sin embargo, *las fluctuaciones en el centro de la curva del número de ocupación tienden a*

ser gaussianas. En esa misma zona central, donde además el decaimiento es *exponencial*, se estableció la factibilidad de una relación entre el factor de Boltzmann y la existencia de una función de termalización canónica. Hay que recordar, que los cálculos cuánticos los efectuamos a energía fija, esto es, en el *ensemble* microcanónico.

‡La evidencia numérica indica que el factor de Boltzmann calculado “termodinámicamente” y el calculado haciendo uso del análogo clásicos del número de ocupación concuerdan. Es importante resaltar que se trata de un sistema de cuatro o dos partículas aisladas.

Esto abre una puerta para la relación entre el *ensemble* microcanónico y el canónico para sistemas dinámicos aislados y es especialmente fructífera. Está en proceso un análisis cuidadoso para esta clase de sistemas que irá más allá de los modelos de matrices aleatorias y que se presentará en un trabajo posterior.

Apéndice A

Parámetros Permitidos

Nuestro interés está centrado en los estados ligados del potencial

$$V(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{Np} \alpha x_i^4 + \beta \sum_{1 \leq i < j \leq Np} x_i^2 x_j^2 + \gamma \sum_{1 \leq i < j \leq Np} (x_i^3 x_j + x_i x_j^3), \quad (\text{A.1})$$

cuya estructura para los parámetros del hamiltoniano H_4 se mostraron en el capítulo 2. Para conseguir sólo estados ligados el potencial debe permanecer cerrado, esto es que $V(\mathbf{x}) > 0$ para todo $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. Los valores de los parámetros para los que esto ocurre los encontraremos buscando las soluciones de la ecuación $V(\mathbf{x}) = 0$, que constituyen el límite de disociación del potencial. Esto implica encontrar las ceros de un polinomio de cuarto orden en N_p variables.

En vez de hacer lo anterior, notamos que el potencial se deforma justo en los ejes $x_i = x_j$ o $x_i = -x_j$ (véase la fig. 2.2, del cap. 2), conforme aumentamos el valor de la interacción a través de los parámetros β y γ . Son estos ejes los candidatos para convertirse en canales que permitan la salida de las partículas. El método que emplearemos para encontrar los límites de disociación será buscar cuándo el potencial se anula sobre estos ejes.

Para dos cuerpos consideramos los ejes $x_1 = x_2 = x$ y $x_1 = -x_2 = x$, que sustituyendo en el potencial de dos cuerpos nos da

$$V(x) = (2\alpha + \beta + 2\gamma)x^4 = 0, \quad (\text{A.2})$$

en el primer caso y

$$V(x) = (2\alpha + \beta - 2\gamma)x^4 = 0, \quad (\text{A.3})$$

en el segundo. Consideramos en todos los casos que $\alpha > 0$. De las ecuaciones anteriores tenemos que el espacio donde el potencial se mantiene acotado está en la parte superior de las rectas $\beta = -2\gamma - 2\alpha$ y $\beta = 2\gamma - 2\alpha$ para γ negativa y positiva, respectivamente.

Además de marcarnos las zonas en que el potencial se mantiene acotado nos es útil para encontrar los máximos valores que alcanzan las x 's a una energía fija. Esto es si $V(\mathbf{x}) = E$, queremos encontrar la caja mínima en la que el potencial está contenido y ésta es la que utilizaremos en el cálculo de Monte Carlo de las integrales que definen las eigenfunciones clásicas.

Para tres cuerpos los ejes considerados son: (i) la identidad, (ii) $x_1 = x_2 = -x_3$ y (iii) $x_1 = -x_2 = -x_3$. Esto nos da las desigualdades para las que el potencial se mantiene acotado:

$$3\alpha + 3\beta + 6\gamma \geq 0, \quad (\text{A.4})$$

$$-2\gamma \geq 0, \quad (\text{A.5})$$

$$3\alpha + 3\beta - 2\gamma \geq 0. \quad (\text{A.6})$$

La región permitida corresponde a la zona dentro de las rectas definidas por la igualdad en las ecuaciones anteriores.

Para cuatro cuerpos las desigualdades obtenidas son

$$4\alpha + 6\beta + 12\gamma \geq 0, \quad (\text{A.7})$$

$$4\alpha + 6\beta \geq 0, \quad (\text{A.8})$$

$$4\alpha + 6\beta - 4\gamma \geq 0. \quad (\text{A.9})$$

Siendo los ejes considerados los siguientes: para (i) la identidad; para (ii) $x_1 = x_2 = x_3 = -x_4$ y para (iii) $x_1 = x_2 = -x_3 = -x_4$.

Para 5 partículas tenemos, finalmente

$$5\alpha + 10\beta + 20\gamma \geq 0, \quad (\text{A.10})$$

$$5\alpha + 10\beta + 4\gamma \geq 0, \quad (\text{A.11})$$

$$5\alpha + 10\beta - 4\gamma \geq 0, \quad (\text{A.12})$$

con los ejes en el mismo orden que en los casos anteriores.

Nótese que el área disponible con $\beta < 0$ se reduce conforme aumentamos el número de partículas.

Apéndice B

Identidades Matemáticas

En esta sección presentamos la demostración de algunas de las identidades que se usan en este trabajo.

B.1 Demostración de la Ec.(2.17)

Demostración de la identidad

$$\delta(x - f)\delta(x - g) = \delta\left(x - \frac{f + g}{2}\right)\delta(f - g). \quad (\text{B.1})$$

Para este efecto usamos la secuencia de funciones ϕ_n Gaussianas cuyo límite cuando $n \rightarrow \infty$ es la delta de Dirac [64]

$$\phi_n(x) = \frac{n}{\sqrt{\pi}} \exp(-n^2 x^2), \quad (\text{B.2})$$

para expresar cada una de las funciones delta en B.1. Asumimos que la secuencia de n 's es la misma para ambas funciones delta. De esta manera, tenemos que

$$\phi_n(x - f)\phi_n(x - g) = \left(\frac{n}{\sqrt{\pi}}\right)^2 \exp(-n^2((x - f)^2 + (x - g)^2)). \quad (\text{B.3})$$

Desarrollando el argumento de la exponencial de tal manera que nos quede

en un binomio cuadrado perfecto toda la dependencia en x ,

$$\begin{aligned}
 (x-f)^2 + (x-g)^2 &= 2x^2 - 2(f+g)x + f^2 + g^2 \\
 &= 2(x^2 - (f+g)x + f^2/2 + g^2/2) \\
 &= 2(x^2 - (f+g)x + (\frac{f+g}{2})^2 - (\frac{f+g}{2})^2 + f^2/2 + g^2/2) \text{(B.4)} \\
 &= 2((x - \frac{f+g}{2})^2 + \frac{1}{4}(f-g)^2) \\
 &= (\sqrt{2}(x - \frac{f+g}{2}))^2 + (\frac{f-g}{\sqrt{2}})^2.
 \end{aligned}$$

Con lo que volvemos a tener expresiones cuadráticas para que en el límite de $n \rightarrow \infty$ recuperemos las funciones delta con los nuevos argumentos, esto es

$$\delta(\sqrt{2}(x - \frac{f+g}{2}))\delta(\frac{f-g}{\sqrt{2}}), \quad (\text{B.5})$$

y usando la propiedad de la delta $\delta(ax) = \delta(x)/|a|$, tenemos

$$\delta(\sqrt{2}(x - \frac{f+g}{2}))\delta(\frac{f-g}{\sqrt{2}}) = \frac{\delta(x - \frac{f+g}{2})}{\sqrt{2}}\sqrt{2}\delta(f-g) = \delta(x - \frac{f+g}{2})\delta(f-g). \quad (\text{B.6})$$

Con lo que queda demostrada la igualdad (B.1).

B.2 Cálculo de la integral angular d -dimensional

Queremos demostrar que la integral angular en variables esféricas d -dimensional es

$$\int d\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}. \quad (\text{B.7})$$

Explícitamente tenemos que la integral es

$$\int d\Omega_d = \sin^{d-2}(\theta_{d-1}) \sin^{d-3}(\theta_{d-2}) \cdots \sin^1(\theta_2) \sin^0(\theta_1) d\theta_{d-1} d\theta_{d-2} \cdots d\theta_2 d\theta_1, \quad (\text{B.8})$$

donde $\theta_1 \in [0, 2\pi]$ y $\theta_i \in [0, \pi]$ con $i = 2, \dots, d-1$. La integral sobre θ_1 es

$$\int_0^{2\pi} d\theta_1 = 2\pi. \quad (\text{B.9})$$

Las siguientes integrales son

$$\begin{aligned}
 \int_0^\pi \sin(\theta_2) d\theta_2 &= 2 \\
 \int_0^\pi \sin^2(\theta_3) d\theta_3 &= \pi/2 \\
 \int_0^\pi \sin^3(\theta_4) d\theta_4 &= -\cos(\theta_4) + (1/3)\cos^3(\theta_4)|_0^\pi = 4/3.
 \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

B.2. CÁLCULO DE LA INTEGRAL ANGULAR D-DIMENSIONAL 127

Hasta llegar a la última integral $\int_0^\pi \sin^{d-2}(\theta_{d-1})d\theta_{d-1}$. Haciendo inducción matemática y recordando que $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$, tenemos que

$$\int_0^\pi d\Omega_d = \frac{2\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}. \quad (\text{B.11})$$

que es a lo que queríamos llegar.

Bibliografía

- [1] C.E. Porter. *Statistical Theory of Spectra: Fluctuations* (Academic Press, New York, 1967).
- [2] M.L. Mehta. *Random Matrices*. 2nd ed. (Academic Press, New York, 1991)
- [3] T.A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey and S.S.M. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **53** (1981) 385.
- [4] T. Guhr, A. Mueller-Groeling, H.A. Weidenmüller, *Phys. Rept.* **299** (1998), 189-425.
- [5] E. Cartan, *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg* **11** (1935) 116.
- [6] M.V. Berry. *Semiclassical Mechanics of Regular and Irregular Motion in Chaotic Behaviour of Deterministic Systems*, Les Houches Lectures XXXVI; R.H. Helleman and G. Ioos Eds.(North Holland, Amsterdam, 1985), pp. 171-271.
- [7] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. (New York, Springer Verlag, 1990). pp 282-321.
- [8] D. Wintgen, K. Richter and G. Tanner, *Chaos* **2** (1992) 19-32.
- [9] A.M. Ozorio de Almeida. *Hamiltonian systems: Chaos and quantization* (Cambridge, Cambridge Press, 1988) 238p.
- [10] R. Balian and C. Bloch, *Ann. Phys. N.Y.* **69** (1972) 76.
- [11] M.C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **12** (1971) 343.
- [12] M.V. Berry, *J. Phys. A: Math. Gen.* **10** (1977) 2083.

- [13] A. Voros. *Annales de l'Institut Henri Poincaré A* **24** (1976) 31; **26** (1977) 343.
- [14] A. I. Schnirelman, *Usp. Mat. Nauk.* **29** (1974) 181. Y. Colin de Verdiere, *Commun. Math. Phys.* **102** (1985) 497. S. Zeldich, *Duke Math. J.* **55** (1987) 919.
- [15] M.V. Berry and M. Tabor, *Proc. Roy. Soc. A* **349** (1976) 101. M.V. Berry and M. Tabor, *J. Phys. A: Math. Gen.* **10** (1977) 371.
- [16] V.V. Flambaum, A.A. Gribakina, G.F. Gribakin, *Phys. Rev A* **50** (1994) 267.
- [17] A.A. Gribakina, V.V. Flambaum, G.F. Gribakin, *Phys. Rev. E* **52** (1995) 5667.
- [18] M.G. Mayer and J.H.D. Jensen. *Elementary theory of nuclear shell structure.* (Wiley, New York, 1955).
D.R. Hartree, *Proc. Cambridge Phil. Soc* **24** (1928) 89.
J.C. Slater, *Phys. Rev.* **35** (1930) 210.
V. Fock, *Physik* **61** (1930) 126.
C.J. Roothaan, *Rev. Mod. Phys.* **32**(1960) 179.
- [19] E.P. Wigner, *Ann. Math.* **62**(1955) 548. E.P.Wigner, *Ann. Math.* **65** (1957) 203.
- [20] S.W. McDonald, Lawrence Berkley Laboratory Report No. LBL-14837, 1983 (unpublished). S.W. McDonald and A.N. Kaufman, *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979) 1189.
- [21] E. J. Heller, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984), 1515.
- [22] T. Papenbrock, T.H. Seligman, H.A. Weidenmüller, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 3057.
- [23] T. Prosen, *Phys. Lett. A* **233** (1997) 332.
- [24] L. Kaplan, *Nonlinearity* **12** (1999) R1.
- [25] F.J. Arranz, F. Borondo and R.M. Benito, *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998) 944.

- [26] F.M. Izrailev, *Quantum Chaos and Thermalization for Interacting Particles*, in “Proceedings of the International School of Physics *Enrico Fermi*”, Course CXLIII, Varenna July 20-30. G. Casati, I. Guarneri and U. Smilansky, eds. IOS Press, 2000. pp. 371-430.
- [27] V.V. Flambaum, F.M. Izrailev, and G. Casati *Phys. Rev. E* **54** (1996) 2136.
- [28] V.V. Flambaum and F.M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **56** (1997) 5144.
- [29] Taylor et al, Rost
- [30] A. Einstein. *Verh. Dt. Phys. Ges.* **19** (1917) 82
- [31] T. Kottos and D. Cohen, *Phys Rev. E* **64** (2001) 065202-R.
- [32] A.J. Lichtenberg and M.A. Lieberman, *Regular and stochastic motion*. (New York, Springer, 1983) 499p.
- [33] A.N. Kolmogorov *Dokl. Akad. Nauk. SSSR* **98** (1954) 527. (Traducción al Inglés en R. Abraham, *Foundations of Mechanics* (W.A. Benjamin, Ney York, 1967) Appendix D.)
A.I. Arnol'd, *Russ. Math. Survey* **18** (1963) 9; **18**(1963) 85.
J. Moser. *Nachr. Akad. Wiss. Gottingen II, Math. Phys. Kd* **1** 1.
V.I. Arnold, *Small denominators and problems of stability of motion in classical and celestial mechanics*, *Russian Mathematical Surveys* **18:6**, (1963) 85-191, reprinted in *Hamiltonian Dynamical Systems*, R.S. MacKay and J.D. Meiss eds., Adam Hilger, Bristol (1987).
- [34] L.E. Reichl, *The Transition to Chaos. In Conservative Classical Systems: Quantum Manifestations*. (Springer Verlag, New York, 1992).
- [35] O. Bohigas, En Les Houches, Session LII, 1989. Chaos and Quantum Physics. M.-J. Gianonni, A. Voros and J. Zinn-Justin, eds. (Elsevier. 1991.)
- [36] L. Benet, F.M. Izrailev, T. H. Seligman, A. Suárez-Moreno, *Phys. Lett. A* **277**(2000) 87.
- [37] G.A. Luna-Acosta, J.A. Méndez-Bermúdez and F.M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **64**(2001) 036206.

- [38] L. Benet, J. Flores, H. Hernández-Saldaña, F.M. Izrailev, F. Leyvraz and T.H. Seligman, *Fluctuations of wave functions about their classical average*. Sent to *J. Phys. A: Math. Gen.* In Chao-Dyn: nlin.CD/0207039.
- [39] L. Benet Fernández. Tesis de Licenciatura. *Sobre la Convergencia de Eigenfunciones de Oscilador Anarmónico Cuártico en la base de Osciladores Armónicos*. Fac. de Ciencias, UNAM (1992).
- [40] A. Suárez Moreno. Tesis de Licenciatura. *Propiedades semiclásicas de Eigenfunciones de un sistema clásicamente caótico*. Fac. de Ciencias, UNAM (2000).
- [41] L. Benet. Comunicación personal.
- [42] F.M. Izrailev. Comunicación personal.
- [43] V.V. Flambaum, F.M. Izrailev, *Phys.Rev E* **56** (1997) 5144.
- [44] M. Srednicki, F. Stiernelof. *J. Phys. A: Math. and Gen.* **29** (1996) 5817.
- [45] S. W. McDonald A. N. Kaufman. *Phys. Rev. A.* **37** (1988) 3067.
- [46] D.J. Thouless. *The quantum mechanics of many-body systems* 2da. ed.(New York. Academic press. 1964.)
- [47] M. Moshinsky. *Many body problems and other selected topics in theoretical physics*. En *Lecture notes of ELAF 1965*. M. Moshinsky, T. A. Brody y G. Jacob eds. (New York, Gordon and Breach, 1966).
- [48] A.V. Bunge, C.F. Bunge. *Comput. Chem.* **10** (1986) 259. C.F. Bunge, *Comp. Phys. Commun.* **138**(2001) 92.
- [49] A. Richter. *Playing Billiards with Microwaves-Quantum Manifestations of Classical Chaos*. En *Emerging Applications of Number Theory*. IMA Mathematics and Applications. Vol 109. Ed. D.A. Hejhal, J. Friedman, M.C. Gutzwiller and A.M. Odlyzko.(Springer, New York, 1999) pp. 479-523. Véase además M. Sieber, U. Smilansky, S.C. Creagh and R.G. Littlejohn, *J. Phys. A.* **26** (1993) 6217.
- [50] T.H. Seligman, J.J.M. Verbaarschot, M. R. Zirnbauer *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 215.

- [51] L.D. Landau, E. M. Lifshitz. *Mechanics*. 3a. ed. (Oxford, Pergamon press, 1976) 169 p.
- [52] M.V. Berry, *Proc. Roy. Soc. London* **400**(1985) 229.
- [53] F.M. Izrailev, *Phys. Rep.* **196** (1990) 299.
- [54] Y.V. Fyodorov and A.D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1991) 361.
- [55] A.D. Mirlin and Y.V. Fyodorov, *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** (1991) 2273.
- [56] Y.V. Fyodorov and A.D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* **66** (1991) 2049.
- [57] S. N. Evangelos and E.N. Econoumou, *Phys. Rev. Lett* **68** (1991) 361.
- [58] L. Benet, T.H. Seligman, H.A. Weidenmüller, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 529.
- [59] C. Mejía-Monasterio, J. Richert, T. Rupp, H.A. Weidenmüller, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 5189.
- [60] S. Nonnenmacher, A. Voros, *J. Stat. Phys.* **92** (1998) 431.
- [61] M. Krbalek and P. Šeba, nlin.CD/0001015.
- [62] F. Borgonovi, F.M. Izrailev, *Phys.Rev. E* **62** (2000) 6475.
- [63] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Butterworth-Heinemann, Great Britain, 1997).
- [64] E. Butkov. *Mathematical Physics*, (Reading, Mass. Addison-wesley, 1968).
- [65] S.C. Creagh *J. Phys. A: Math and Gen* **27** (1994) 4969.
- [66] M. Abramowitz e I.A. Stegun, Eds. *Handbook of mathematical functions, with formulas, graphs and mathematical tables*. (New. York, Dover, 1965) 1046p.
- [67] A.D. Mirlin, Y.V. Fyodorov, F.M. Dittes, J. Quezada, T.H. Seligman *Phys. Rev E*, **54** (1996) 3221.

