

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA, FÍSICA TÉRMICA Y
ELECTRÓNICA



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Código de TFG: ETE37

Ergodicidad y caos en mecánica cuántica

Ergodicity and chaos in quantum mechanics

Supervisor: Armando Relaño Pérez

Daniel Michel Pino González

Grado en Física

Curso académico 2020-21

Convocatoria extraordinaria

Resumen:

La caracterización del movimiento caótico en mecánica cuántica se ve dificultada por la imposibilidad de trasladar conceptos del caos clásico a este nuevo marco teórico. Discutiremos estas particularidades empleando diversas estrategias de estudio y analizando las posibles contradicciones e implicaciones físicas que emergen de ello. Será a partir de su fenomenología característica que podrá postularse un modelo descriptivo de estos sistemas, gracias a la introducción de la conjetura BGS. Dicha propuesta relaciona de forma unívoca las propiedades estadísticas de los espectros de energía de sistemas cuánticos, con diferentes colectividades formuladas por la teoría de matrices aleatorias. Se propondrán, asimismo, diversos estadísticos espectrales como herramientas descriptivas de sistemas integrables y puramente ergódicos. Para dinámicas intermedias, sin embargo, no existen estadísticos que puedan caracterizarlas de manera universal, si bien existen diversos modelos que pueden analizar sus propiedades físicas bajo ciertas aproximaciones. Se realizará un estudio exhaustivo de estos estadísticos espectrales, así como de las transiciones entre la integrabilidad y el caos, mediante simulaciones numéricas basadas en los modelos matemáticos de la teoría de matrices aleatorias.

Abstract:

The characterization of chaotic motion in quantum mechanics is hampered by the impossibility of transferring concepts from classical chaos to this new theoretical framework. We will discuss these particularities by following different study strategies and analyzing the possible contradictions and physical implications which emerge from it. It will be from their characteristic phenomenology that a descriptive model of these systems can be postulated, thanks to the introduction of the BGS conjecture. Such proposal unequivocally relates the statistical properties of quantum systems' energy spectra, with different ensembles formulated by random matrix theory. Likewise, various spectral statistics will be proposed as descriptive tools for integrable and purely ergodic systems. However, for intermediate dynamics, there are no statistics that can characterize them universally, although there is a set of models that can analyze their physical properties under certain approximations. An exhaustive study of these spectral statistics, as well as the transitions between integrability and chaos, will be carried out through numerical simulations based on mathematical models of random matrix theory.

Contents

1	Introducción	2
2	Objetivos y metodología	2
3	Del caos clásico al caos cuántico	3
3.1	Caos clásico y el concepto de integrabilidad	3
3.2	Cuantización de sistemas integrables y caóticos	4
3.2.1	Integrabilidad en mecánica cuántica	4
3.2.2	Fenomenología del caos en mecánica cuántica	5
4	Descripción estadística de los espectros de energía en sistemas caóticos	7
4.1	Descripción de la conjetura BGS	8
4.2	Teoría de matrices aleatorias	8
4.2.1	Formulación matemática	9
4.3	Estadísticos espectrales	10
4.4	Sistemas intermedios	13
5	Simulaciones numéricas y resultados	13
5.1	Distribución de autovalores y espectros de energías	14
5.2	Análisis de los estadísticos espectrales	15
5.2.1	Ratios entre espaciamientos	15
5.2.2	Mínimos entre ratios y sus inversos	16
5.3	Caracterización de sistemas intermedios	17
6	Conclusiones	19

1 Introducción

La mecánica estadística, gestada durante el siglo XVIII por Bernoulli, con su descripción del comportamiento de los fluidos, y desarrollada en el siguiente siglo de la mano de físicos como Joule, Kelvin y Boltzmann en su estudio de la termodinámica y la cinética molecular, abrió el marco de la física clásica al análisis de sistemas de muchos cuerpos y sus propiedades emergentes; en resumen, a la complejidad de la naturaleza.

El determinismo mecanicista del *Traité de Mécanique Céleste*¹ de Laplace empezaba a mostrar las limitaciones de toda una época de pensadores. Un siglo después, Poincaré comenzaba a plantear la existencia del caos y la alatoriedad en la evolución de la mecánica celeste, dando paso más tarde a los avances de Lorenz en el estudio de esta nueva fenomenología de sistemas no lineales.

La impredecibilidad del movimiento caótico, que se da incluso en sistemas muy sencillos y que no proviene de nuestras limitaciones de cálculo sino de las propias leyes físicas, asestó un golpe final a esta visión mecanicista de la realidad.

Por otro lado, un cambio de paradigma aún mayor se avecinaba sobre la física del siglo XX: la mecánica cuántica. El nacimiento de esta nueva teoría revolucionó por completo una visión clásica del mundo que durante años, a pesar de sus ya aparentes limitaciones, parecía inquebrantable. Las consecuencias epistemológicas y ontológicas de esta nueva concepción de la realidad obligaron a replantear todo aquello que se creía que era la materia y su dinámica. Por supuesto, este fenómeno abriría un nuevo horizonte en el estudio sobre el movimiento caótico a dimensiones subatómicas: si todo cuanto nos rodea es, en última instancia, cuántico, el caos que se encuentra en la naturaleza macroscópica debería tener su explicación en las escalas más pequeñas del universo.

Sin embargo, tras múltiples intentos en vano, la imposibilidad de trasladar los avances logrados en el marco del caos clásico a la mecánica cuántica puso en evidencia la necesidad de una reformulación completa de sus principios descriptivos. No fue hasta la introducción de la conjetura BGS, que fusionaba la fenomenología característica del caos cuántico con la potencialidad matemática de la teoría de matrices aleatorias, que pudo postularse un método estadístico capaz de caracterizar de forma concluyente estos fenómenos naturales.

Tras casi 40 años desde su proposición, esta conjetura sigue a día de hoy sin haber podido ser demostrada, si bien los innumerables progresos acometidos en el estudio del caos cuántico gracias a sus planteamientos, la revelan como una teoría verdaderamente eficaz.

Empero, la investigación en este campo de la física sigue abierta, cuyo foco principal es la búsqueda de una descripción globalizante de sistemas transitorios entre el caos y la dinámica regular, que presentan una gran dificultad añadida debida a las particularidades de sus propiedades físicas.

2 Objetivos y metodología

El eje vertebrador del presente estudio es exponer una discusión acerca de la complejidad a la hora de describir el caos en mecánica cuántica. En primer lugar, se demostrará la imposibilidad de traducir conceptos principales del caos clásico a la mecánica cuántica. Será necesario, por tanto, basarnos en la fenomenología característica de los sistemas cuánticos caóticos, en concreto, las propiedades estadísticas de sus espectros de energía. En este punto, será determinante la introducción de la conjetura BGS y la descripción de la teoría de matrices aleatorias. Asimismo, nos detendremos en diferentes modelos propuestos para la determinación de los sistemas transitorios entre el caos y la integrabilidad.

¹ “Podemos mirar el estado presente del universo como el efecto del pasado y la causa de su futuro. Se podría concebir un intelecto que en cualquier momento dado conociera todas las fuerzas que animan la naturaleza y las posiciones de los seres que la componen; si este intelecto fuera lo suficientemente vasto como para someter los datos a análisis, podría condensar en una simple fórmula el movimiento de los grandes cuerpos del universo y del átomo más ligero; para tal intelecto nada podría ser incierto y el futuro, así como el pasado, estarían frente a sus ojos”. Ídem [1].

Una vez comprendida la base teórica del tema en cuestión, se realizará un estudio cuantitativo de sus conclusiones, basado en la reproducción de resultados sobre colectividades de matrices aleatorias de interés físico para el caos cuántico. Este proceso vendrá mediado por la realización de simulaciones numéricas computadas a partir de un algoritmo desarrollado de forma propia para dicho objetivo.

3 Del caos clásico al caos cuántico

3.1 Caos clásico y el concepto de integrabilidad

Un caso particular de la mecánica clásica hamiltoniana son los sistemas integrables, cuyas ecuaciones canónicas pueden ser resueltas, bien de forma exacta, bien bajo aproximaciones cuya precisión no depende del tiempo, para cualquier conjunto de condiciones iniciales. Estos sistemas son descritos por el *teorema de Liouville–Arnold* [2].

Teorema 1 (Liouville–Arnold) *Sea un sistema hamiltoniano de n grados de libertad, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, definido sobre un espacio fásico y no dependiente explícitamente del tiempo. Si existen n funciones independientes (F_1, \dots, F_n) y en involución, esto es, que conmutan entre sí y con el hamiltoniano bajo el corchete de Poisson:*

$$\{H, F_i\} = \frac{\partial F_i}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial F_i}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} = \frac{dF_i}{dt}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 0 \quad \forall i, \quad (1)$$

entonces dichas funciones son constantes del movimiento y las ecuaciones del movimiento del sistema, que quedan reducidas a la expresión anterior, pueden resolverse por cuadraturas; en conclusión, el sistema se dice integrable.

Bajo estas condiciones, podemos demostrar que existe una transformación canónica a coordenadas de acción–ángulo, bajo la cual, para el hamiltoniano escrito en dichas coordenadas, $H(\mathbf{I}, \phi)$, se cumple que:

- i) las coordenadas de acción, $\mathbf{I}(F_1, \dots, F_n)$, son constantes del movimiento,
- ii) cada coordenada I_i es conjugada de una coordenada de ángulo $\phi_i \forall i$,
- iii) las coordenadas de ángulo evolucionan linealmente en el tiempo, dando lugar a trayectorias cíclicas (de periodo 2π) acotadas a una región toroidal del espacio fásico.

Descritos de esta forma, puede apreciarse cómo los sistemas integrables exhiben un comportamiento sencillo y predecible, si bien no son más que excepciones en la dinámica de la naturaleza. Por ello, es interesante expandir nuestro estudio al de sistemas no integrables, caóticos, que, pese a que presentan un comportamiento complejo, están mucho más extendidos en la realidad que nos rodea. Su complejidad emana de que, al contrario de lo que sucede en los sistemas integrables, sus posibles soluciones, siempre aproximadas, poseen una imprecisión que aumenta con el tiempo, de manera que el número de operaciones necesarias para evitar esta limitación a su predictibilidad crece a un valor infinito de forma irremediable.

En relación al concepto de integrabilidad, un sistema dinámico exhibirá un movimiento caótico bajo la siguiente condición necesaria –a veces, suficiente: el número de constantes del movimiento funcionalmente independientes que posee debe ser menor que el número de grados de libertad del sistema². De forma general, un sistema de muchas partículas puede ser considerado como caótico si

²Bajo este criterio, una partícula en un espacio unidimensional –sin grados de libertad internos– conforma siempre un sistema integrable. En dos dimensiones, en cambio, la conservación de la energía no será suficiente para garantizar la integrabilidad del sistema, por lo que será posible que exhiba un movimiento caótico si no se conserva otra cantidad adicional –por ejemplo, el momento angular.

no posee un número extenso de cantidades conservadas³.

Asimismo, se puede demostrar que todo hamiltoniano integrable H posee en su entorno un hamiltoniano H' no integrable⁴. De esta manera, si el hamiltoniano H sufre pequeñas perturbaciones de forma gradual, se acabará rompiendo su integrabilidad. Es por ello por lo que consideramos a los sistemas integrables como casos singulares de la naturaleza.

Este proceso gradual entre sistemas integrables y caóticos viene descrito por el teorema KAM (Kolmogorov, Arnold y Moser), que establece que, para un sistema con un número finito de grados de libertad, la mayor parte de los toros que folian las cercanías de la clausura topológica del subconjunto integrable del espacio fásico permanecen invariantes bajo perturbaciones suficientemente pequeñas. Por tanto, según este teorema, a medida que la intensidad de las perturbaciones crece, el número de toros invariantes disminuye, produciéndose una transición –descrita de forma general por dicho teorema– del sistema hacia un comportamiento caótico.

Será un interesante objeto de nuestro estudio el análisis de sistemas intermedios entre dinámicas regulares y caóticas, siendo tratado en secciones posteriores [véase sec. 4.4].

3.2 Cuantización de sistemas integrables y caóticos

3.2.1 Integrabilidad en mecánica cuántica

Podemos pretender trasladar de forma apriorística los anteriores postulados sobre integrabilidad y caos a la mecánica cuántica. En este modelo físico, las coordenadas de las que dependen los hamiltonianos son observables (operadores diferenciales lineales y autoadjuntos) y las ecuaciones del movimiento son sustituidas por la ecuación de Schrödinger, que describe la dinámica y los estados de los sistemas. Asimismo, la información de esta dinámica no reposa sobre las trayectorias que siguen los sistemas en su espacio fásico, sino en su función de onda.

No obstante, es posible definir constantes del movimiento en mecánica cuántica –ya no como funciones, sino como observables–, por lo que una primera definición consistente de integrabilidad como análoga a la expuesta en mecánica clásica sería:

Definición 1 (Integrabilidad en mecánica cuántica) *Sea un sistema cuántico hamiltoniano de n dimensiones, \hat{H} . Se dice que dicho sistema es integrable si existen n operadores funcionalmente independientes $(\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_n)$ que son constantes del movimiento, esto es, que no varían con el tiempo ($d\langle\hat{F}_i\rangle/dt = 0$), y que están en involución –conmutan entre sí y con el hamiltoniano bajo un conmutador análogo al corchete de Poisson:*

$$[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = \hat{F}_i\hat{F}_j - \hat{F}_j\hat{F}_i = 0 \quad \forall i, j \quad . \quad (2)$$

Sin embargo, esta propiedad de conmutación es incompatible con la condición de independencia funcional entre las constantes del movimiento. En efecto, consideremos un conjunto de operadores hermíticos $(\hat{F}_1, \dots, \hat{F}_n)$ definidos sobre un espacio de Hilbert de dimensión arbitraria, que conmutan entre sí y con el hamiltoniano del sistema, $[\hat{F}_i, \hat{F}_j] = [\hat{H}, \hat{F}_i] = 0 \quad \forall i, j$. Entonces, existe una base ortonormal de vectores propios, $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^n$, común a todos estos operadores en la que pueden ser diagonalizados simultáneamente:

$$\hat{H}|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle \quad ; \quad \hat{F}_i|\phi_j\rangle = \lambda_{i,j}|\phi_j\rangle \quad (3)$$

³En este sentido, un sistema de partículas no interactuantes no puede ser considerado caótico, incluso si cada una de las partículas exhibe un movimiento caótico en la región del espacio fásico asociada a sus propios grados de libertad. Esto es debido a que la energía por partícula es conservada por separado. En todo caso, es esperable que la introducción de interacciones dé lugar a una dinámica caótica.

⁴En un sentido topológico, esto se traduce en que los hamiltonianos no integrables forman un conjunto denso en el de los hamiltonianos analíticos, propiedad que los hamiltonianos integrables no cumplen.

donde los distintos valores propios $\lambda_{i,j} \in \mathbb{R}$ forman un espectro discreto de dichos observables. Se dice entonces que estos operadores forman un conjunto de observables compatibles.

A continuación, definamos un nuevo operador diagonal en la base de vectores propios, como:

$$\hat{G} = \sum_{i=1}^n i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad \Rightarrow \quad \langle\hat{G}\rangle = \langle\phi_j|\hat{G}|\phi_j\rangle = j \quad , \quad (4)$$

que tiene por elementos diagonales los números naturales $1, 2, \dots, n$. Así, podemos idear un conjunto de n funciones $f_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tales que:

$$f_i(j) = \lambda_{i,j} \quad , \quad j = 1, \dots, n \quad (5)$$

Es decir, de cada función f_i , evaluada en un número natural j menor o igual que n , se obtiene como imagen el valor propio $\lambda_{i,j}$ asociado al operador \hat{F}_i . Se deduce, por tanto, de (4) y (5) que todos los operadores anteriores pueden escribirse como funciones del operador \hat{G} :

$$f_i(\langle\hat{G}\rangle)|\phi_j\rangle = \lambda_{i,j}|\phi_j\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{F}_i = f_i(\langle\hat{G}\rangle) \quad (6)$$

En conclusión, existe una relación funcional⁵ entre las n constantes del movimiento, pudiéndose expresar en función de una sola constante independiente. La versión original de esta demostración, debida a von Neumann, puede encontrarse en [4].

Puesto que resulta imposible buscar otros $n - 1$ observables funcionalmente independientes, queda inhabilitada la utilización del concepto de integrabilidad –extendido desde su definición clásica– para diferenciar con nitidez los sistemas integrables de los no integrables en mecánica cuántica. En efecto, se podría demostrar que, bajo la anterior definición, análogos cuánticos de sistemas clásicos integrables podrían ser interpretados como caóticos y viceversa.

Existen diversos estudios al respecto del problema, cuyas conclusiones bien niegan la posibilidad de discriminar sistemas integrables de caóticos, bien afirman que la mecánica cuántica es siempre integrable, sin resultados totalmente concluyentes⁶.

3.2.2 Fenomenología del caos en mecánica cuántica

La imposibilidad de alcanzar una definición concluyente del concepto de integrabilidad en mecánica cuántica sugiere una determinación del caos a través de sus propiedades fenomenológicas. De hecho, esta vía es utilizada ampliamente en mecánica clásica, ya que, aunque en este régimen la integrabilidad esté bien definida, no suele ser fácil demostrar que no existen suficientes constantes del movimiento para poder determinar un sistema como caótico.

Condiciones iniciales

En mecánica clásica, una de las propiedades más características de los sistemas caóticos es la gran sensibilidad de la trayectorias a cambios infinitesimales de sus condiciones iniciales: $\mathbf{x}_0 \rightarrow \mathbf{y}_0 = \mathbf{x}_0 + \varepsilon$, con $\varepsilon \rightarrow 0$. En concreto, podremos decir que un sistema clásico es cuántico si presenta una separación exponencial entre trayectorias con condiciones iniciales infinitamente próximas, caracterizada por los denominados exponentes de Lyapunov.

⁵Podríamos asimismo considerar el propio conmutador como una relación funcional entre los operadores, como una generalización a espacios funcionales del teorema de dependencia funcional definido para funciones reales en [3], aunque es necesario un cuidado riguroso en el tratamiento al trasladar el teorema a espacios funcionales complejos.

⁶Estos estudios consideran que los sistemas cuánticos son equivalentes a sistemas clásicos con un espacio fásico de dimensión infinita y, aunque el concepto de integrabilidad puede ser generalizado a un número de grados de libertad no finito, concluyendo que la mecánica cuántica es globalmente integrable, no está demostrado que sistemas integrables de dimensión infinita posean entropía de Kolmogórov nula. Esta entropía mide la pérdida de información a lo largo de la evolución del sistema, que debe ser nula en sistemas integrables.

En mecánica cuántica, el concepto de trayectoria es reemplazado por la función de onda, $\psi(\mathbf{x}, t)$, cuya evolución viene determinada por la ecuación de Schrödinger. Así, si consideramos un sistema cuántico con análogo clásico no integrable, podríamos intentar estudiar cómo se modifica el desarrollo temporal de su función de onda con dos condiciones iniciales ligeramente distintas: $\Psi(\mathbf{x}_0)$, $\Psi(\mathbf{y}_0)$.

Sin embargo, el principio de indeterminación inherente a cuántica impide medir simultáneamente momento y posición con precisión absoluta. Asimismo, dado que el operador evolución temporal, $\hat{U}(t)$, es unitario, el grado de solapamiento entre las dos funciones de onda –que evolucionan bajo el mismo propagador temporal– permanece constante en el tiempo, independientemente del hamiltoniano del sistema.

En conclusión, no es posible tampoco definir el caos en mecánica cuántica a raíz de esta característica fenomenológica propia de regímenes clásicos.

Perturbaciones en la función de onda

En mecánica clásica, una perturbación en el hamiltoniano actúa sobre la estabilidad de las trayectorias del mismo modo que lo haría aplicada a sus condiciones iniciales. Por ello, una posible alternativa al planteamiento anterior es el estudio de la función de onda bajo este otro tipo de alteraciones. De hecho, esta sensibilidad puede ser medida en mecánica cuántica a partir de la fidelidad del movimiento de los sistemas.

En efecto, consideremos un operador evolución temporal y aplicamos sobre él una pequeña perturbación tal que:

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \rightarrow \hat{U}_\delta(t) = \hat{U}(t)e^{-i\hat{A}t\delta} \quad (7)$$

donde \hat{A} es un operador hermítico y δ un parámetro infinitesimal. La influencia de la perturbación vendrá descrita por el solapamiento entre dos funciones de onda que evolucionan respectivamente bajo cada uno de estos operadores:

$$\langle \Psi_\delta(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \hat{U}_\delta^\dagger(t) \hat{U}(t) | \Psi(t_0) \rangle \quad (8)$$

cuya norma al cuadrado es la fidelidad, $F(\Psi_\delta, \Psi)$. Esta cantidad, más allá sus potenciales aplicaciones en diferentes campos de la física, ha demostrado su gran utilidad a la hora de definir el caos en sistemas cuánticos, ya que, bajo ciertas condiciones, presenta un decaimiento exponencial cuyo ritmo coincide con el exponente de Lyapunov medio de sus análogos clásicos.

Empero, el decaimiento de la fidelidad en sistemas integrables se revela aún mayor –gaussiano en lugar de exponencial– que en sistemas no integrables. Este sorprendente resultado resulta en una mayor estabilidad del movimiento de los sistemas caóticos en espacios de Hilbert que de sistemas regulares.

No obstante, este método de análisis no es siempre efectivo, por lo que solamente puede ser considerado como un éxito parcial del que no podemos servirnos para dar una definición general del caos en la mecánica cuántica, y sobre el cual sigue habiendo lugar a la investigación. Puede encontrarse un tratamiento más minucioso de este fenómeno en [5].

Por otro lado, una alternativa a este fenómeno digna de mención es el estudio de los OTOC (*out-of-time-order correlators*, en inglés), que está relacionada igualmente con los exponentes de Lyapunov clásicos. Este método viene aplicándose como posible indicador cuántico de caos de forma más reciente al anteriormente descrito, que ha quedado en relativo desuso desde principios de siglo. Como breve resumen, se puede decir que un OTOC se corresponde al promedio temporal del conmutador de dos operadores en la imagen de Heisenberg, tal que:

$$\text{OTOC}(t) = \langle [\hat{A}(0), \hat{B}(t)]^2 \rangle \quad (9)$$

Se ha demostrado que, para sistemas cuánticos con análogo clásico caótico, los OTOC crecen exponencialmente, a un ritmo idéntico al de los exponentes de Lyapunov. Se recomienda la lectura de [6] para una mayor profundización sobre esta materia.

Fluctuaciones en el espectro de energía

Hasta ahora, toda pretensión –en general, en vano– de formular una descripción del caos en mecánica cuántica ha seguido como metodología una traducción de la fenomenología de los sistemas clásicos caóticos a este nuevo paradigma. Las implicaciones físicas y matemáticas de esta extensión extraen resultados no concluyentes o contradictorios. En su lugar, se podría intentar partir de las propiedades fenomenológicas propias del caos cuántico y construir a partir de ellas una formulación general de éste.

En mecánica clásica, la energía de cualquier sistema representa un simple parámetro que puede tomar cualquier valor en un intervalo continuo. Por el contrario, una de las propiedades más características de la mecánica cuántica es que la energía sólo puede adquirir algunos valores determinados, formando un espectro discreto de niveles.

De hecho, el comportamiento estadístico de estos espectros se ha evidenciado como un atributo universal del caos cuántico. En efecto, según si el análogo clásico de un sistema cuántico es integrable o caótico, pueden apreciarse propiedades estadísticas discernibles a través de la observación de sus niveles de energía.

En concreto, la densidad de estados energéticos de cualquier sistema físico nos proporciona una valiosa información estadística, siendo así de gran utilidad para el estudio de los espectros de energía. Esta magnitud se define como el número de estados existentes por unidad de energía y volumen, y puede ser expresada en función de magnitudes puramente clásicas:

$$g(E) = \frac{1}{V} \sum_i \delta(E - E_i) \quad (10)$$

donde la suma se extiende a las energías permitidas en una ventana del espectro. Asimismo, es posible descomponer⁷ esta cantidad en una parte suave, $\bar{g}(E)$, que procede del análogo clásico –añadiendo ciertas correcciones cuánticas–, y otra fluctuante, $\tilde{g}(E)$:

$$g(E) = \bar{g}(E) + \tilde{g}(E) \quad (11)$$

La información que aporta este último término caracteriza de forma exclusiva el sistema cuántico, y su expresión, así como sus propiedades estadísticas, son diferentes para sistemas integrables y caóticos. Será en la sección 4.1 donde se establecerá el carácter universal de esta parte fluctuante de la densidad de estados de los sistemas cuánticos y su relación con las colectividades de matrices aleatorias.

4 Descripción estadística de los espectros de energía en sistemas caóticos

El estudio de las propiedades estadísticas de las fluctuaciones en el espectro de energía abre la posibilidad a una descripción satisfactoria del movimiento caótico en mecánica cuántica. Para ello, fue decisiva la introducción de la conjetura BGS, que planteaba por primera vez de forma explícita⁸ la universalidad de éste fenómeno.

Este resultado dio paso a la introducción de la teoría de matrices aleatorias como un potente recurso matemático que permite realizar un estudio concluyente sobre los sistemas caóticos, que vendrá mediado por el empleo de ciertos estadísticos de gran utilidad: el espaciamiento entre niveles energéticos y los ratios entre éstos.

⁷En sistemas integrables, este resultado proviene de construir los espectros de energía a partir de la dinámica clásica mediante las reglas de cuantización SWI (Sommerfield–Wilson–Ishiwara). Sin embargo, el tratamiento en sistemas caóticos no es tan directo, requiriendo de la aproximación semiclásica WKB (Wentzel–Kramers–Brillouin). Puede encontrarse un desarrollo extenso de estos cálculos en [7].

⁸Cabe destacar también el trabajo de [8], que apuntaba en esta misma dirección y, junto a la conjetura BGS, supone uno de los trabajos más importantes que asentaron la teoría del caos cuántico.

4.1 Descripción de la conjetura BGS

En 1984, O. Bohigas, M. J. Giannoni y C. Schmit propusieron una conjetura a raíz de la fenomenología de los sistemas caóticos en mecánica cuántica⁹, que establece:

Los métodos desarrollados en la teoría de matrices aleatorias para estudiar las fluctuaciones proveen las herramientas adecuadas para caracterizar los espectros caóticos. Asimismo, la generalidad de las fluctuaciones GOE se encuentra en muchas propiedades de los sistemas caóticos. En resumen, la cuestión es demostrar (o refutar) la siguiente conjetura: los espectros de sistemas invariantes bajo inversión temporal cuyos análogos clásicos son sistemas K ¹⁰ muestran las mismas propiedades de fluctuaciones tal y como precide la colectividad GOE (conjeturas alternativas más fuertes que no pueden ser excluidas podrían ser aplicadas a sistemas menos caóticos, si éstos son ergódicos). Si la conjetura resulta ser cierta, habrá sido establecida la universalidad de las leyes de fluctuaciones de niveles en espectros cuánticos. [10]

Esta declaración sobre el carácter universal de las fluctuaciones energéticas se basa en la posibilidad de expresar la densidad de estados de cualquier sistema cuántico en función únicamente de magnitudes clásicas, tal que cada órbita periódica en el sistema clásico contribuye a esta cantidad de forma sinusoidal. No será necesario calcular de forma explícita esta contribución –conocer las órbitas periódicas de un hamiltoniano resulta una tarea demasiado ardua–, sino que, puesto que a partir de cierto periodo se sabe que el número de órbitas periódicas es suficientemente grande¹¹, sólo bastará conocer ciertas propiedades globales para evaluar la densidad de estados.

En conclusión, puede demostrarse que las propiedades estadísticas de sistemas integrables y completamente caóticos –no pasa así con los sistemas intermedios [véase sec. 4.4]– son universales, al menos para aquellos con órbitas cuyo periodo es suficientemente grande.

Más de 30 años después de su formulación, esta conjetura no ha podido ser demostrada, si bien sus predicciones han permitido una descripción rigurosa y exacta del caos cuántico. Para comprender este logro en toda su profundidad, será necesario introducir los postulados de la teoría de matrices aleatorias.

4.2 Teoría de matrices aleatorias

A finales de los años cincuenta, Eugene Wigner inventó la teoría de matrices aleatorias con el fin de describir las propiedades estadísticas de los espectros de energía de núcleos atómicos pesados. A principios de la década siguiente, Freeman Dyson pudo formalizar matemáticamente [11] este modelo estadístico con gran oportunidad de aplicación física.

Sin embargo, a pesar de los múltiples intentos en vano por parte de Dyson y Madan L. Mehta de realizar un agudo análisis teórico que coincidiese con los datos experimentales, no fue hasta 20 años después de ese momento que devino el resurgir de la utilidad física de esta teoría, con la introducción de la conjetura de Montgomery, que relacionaba las funciones de correlación por pares de la función Zeta de Riemann y de los autovalores de matrices aleatorias hermíticas [12].

Esta teoría es una generalización de los métodos estándares que se aplican en el paradigma de la física estadística. En este modelo, se prescinde por completo del conocimiento exacto del estado microscópico de los sistemas, pues es una información innecesaria para entender el comportamiento colectivo de sistemas complejos. En su lugar, se construye una descripción probabilística en la que

⁹En concreto, fenómenos “silenciosos” como la ergodicidad espectral –fluctuaciones alrededor del promedio de densidad de estados– y la evidencia de repulsión entre niveles energéticos –tendencia a evitar agrupamiento entre niveles.

¹⁰Un sistema K es un sistema dinámico ergódico que, para cualquier partición no trivial del espacio clásico, su entropía de Kolmogorov es mayor que cero. Para una descripción más rigurosa, se recomienda la lectura de [9].

¹¹En efecto, el número de órbitas periódicas en un intervalo de frecuencias crece muy deprisa con el periodo, polinomialmente en sistemas integrables y de forma exponencial en sistemas ergódicos.

entran en juego distintas colectividades. Por ejemplo, la colectividad microcanónica basa su funcionamiento en una única propiedad general: todos los microestados presentes en el espacio fásico de cualquier sistema hamiltoniano que poseen la energía total de éste tienen la misma probabilidad de definir el estado en el que se encuentra, mientras que los demás poseen probabilidad nula.

La teoría de matrices aleatorias da un paso más allá, considerando que el conocimiento exacto de las interacciones que median en un sistema físico (p. e. núcleos pesados) es innecesario para describir ciertas propiedades de su espectro energético, ya que no se basa en la posición exacta de cada uno de los niveles de energía que lo forman, sino de sus características globales. Por este motivo, se prescinde de una modelización precisa del hamiltoniano, construyendo en su lugar colectividades compuestas por todos los posibles hamiltonianos que cumplen unas ciertas simetrías. Es decir, una colectividad incluye todas las posibles interacciones que pueden darse en el sistema físico.

Estas colectividades, en definitiva, constituyen objetos matemáticos muy complejos, ya que incluyen todas las posibles interacciones que pueden darse en un sistema físico. Sin embargo, el sistema físico a partir del cual se formuló la conjetura BGS es el denominado billar de Sinai¹², cuya dinámica es realmente simple –aunque caótica. Este hecho demuestra el carácter rompedor de la conjetura BGS y, por tanto, su importante potencialidad al hacer de la teoría de matrices aleatorias la herramienta descriptiva por excelencia del caos cuántico.

4.2.1 Formulación matemática

La teoría de matrices aleatorias –en su formulación estándar– se compone de cuatro colectividades, diferenciándose según la integrabilidad de los sistemas que describen y las simetrías que éstos presentan.

- **GDE (gaussian diagonal ensemble):** también denominada colectividad de Poisson. Compuesta por matrices aleatorias, diagonales y reales. Todos sus elementos son estadísticamente independientes. Es la única colectividad aplicable a sistemas integrables o, más rigurosamente en mecánica cuántica, no caóticos.
- **GOE (gaussian orthogonal ensemble):** matrices aleatorias, hermíticas y simétricas –y, por tanto, reales. Sus elementos por encima (debajo) de la diagonal, así como los diagonales, son estadísticamente independientes y su distribución de probabilidad es invariante bajo transformaciones reales y ortogonales de la matriz hamiltoniana, H . Describe correctamente sistemas invariantes bajo inversión temporal, tanto con simetría bajo rotaciones como sin simetría bajo rotaciones pero con espín entero.
- **GUE (gaussian unitary ensemble):** matrices aleatorias y hermíticas. Sus elementos diagonales –reales– y las partes real e imaginaria de sus elementos por encima (debajo) de la diagonal son estadísticamente independientes y su distribución de probabilidad es invariante bajo transformaciones unitarias de H . Se ajusta a sistemas sin invarianza bajo inversiones temporales.
- **GSE (gaussian symplectic ensemble):** matrices hermíticas y autoduales. Sus elementos diagonales –reales– y los cuatro componentes cuaterniónicos de los elementos por encima (debajo) de la diagonal son estadísticamente independientes y su distribución de probabilidad es invariante bajo transformaciones simplécticas de H . Describe sistemas con espín semientero e invariantes bajo inversión temporal.

Las propiedades globales de las distribuciones de autovalores y autovectores de estas colectividades gaussianas podrán ser comparadas con las de los espectros de energía de los sistemas físicos reales, tal y como se hizo con el billar de Sinai para formular la conjetura BGS. En definitiva, se estaría estableciendo un método descriptivo concluyente del caos cuántico.

¹²Podría interpretarse este sistema como una versión cuántica de una pelota rebotando elásticamente en un contorno bidimensional.

De hecho, se ha demostrado cómo ciertas cantidades, extraídas de estas distribuciones, poseen toda la información de las fluctuaciones de los espectros de energía. Son los denominados estadísticos espectrales, y se han revelado como herramientas de gran utilidad para realizar estas comparaciones con los datos obtenidos experimentalmente de cualquier sistema.

4.3 Estadísticos espectrales

Podemos definir el concepto de estadístico como un valor extraído de la información que porta una secuencia finita de números, tal que su media y su varianza son conocidas a partir de un modelo teórico dado.

La estadística espectral, en resumen, estudia cómo los niveles energéticos de un espectro cuántico se ajustan estadísticamente a las predicciones que aporta la teoría de matrices aleatorias.

Así, considérese el espectro de energía de un sistema cuántico cualquiera, $\{E_i\}_{i=1}^n$, a partir del cual se puede calcular la densidad de estados, de la cual sólo la parte fluctuante –revelada como universal– poseerá un verdadero interés para su determinación en tanto que es la portadora de la información cuántica del sistema.

Es por ello por lo que se deberá transformar los niveles de energía en cantidades adimensionales mediante un proceso de reescalado, tal que:

$$\epsilon_i = \bar{N}(E_i) = \int_{-\infty}^{E_i} dx \bar{g}(x) \quad (12)$$

donde $N(E) = \bar{N}(E) + \tilde{N}(E)$ denota la densidad de estados acumulada. Este nuevo espectro, $\{\epsilon_i\}_{i=1}^n$, verifica:

$$\langle s_i \rangle = 1 \quad ; \quad s_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i \quad (13)$$

donde s_i denota el espaciamiento entre dos niveles de energía contiguos. Sin embargo, estos espaciamientos poseerán fluctuaciones en torno a este valor, cuyas propiedades estadísticas servirán, en última instancia, para estudiar el carácter caótico del sistema.

Espaciamientos entre niveles

El estadístico más extendido en el estudio de las correlaciones de corto alcance presentes en el espectro de energía de sistemas cuánticos es la distribución de probabilidad de los espaciamientos entre niveles, que, para diferentes regímenes dinámicos –relacionados con las distintas colectividades propuestas por la teoría de matrices aleatorias– presenta la siguiente expresión analítica [13]:

$$P(s) = \begin{cases} e^{-s} & \text{(Poisson)} \\ \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2} & \text{(GOE)} \\ \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4}{\pi} s^2} & \text{(GUE)} \\ \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 e^{-\frac{64}{9\pi} s^2} & \text{(GSE)} \end{cases} \quad (14)$$

Su representación gráfica es:

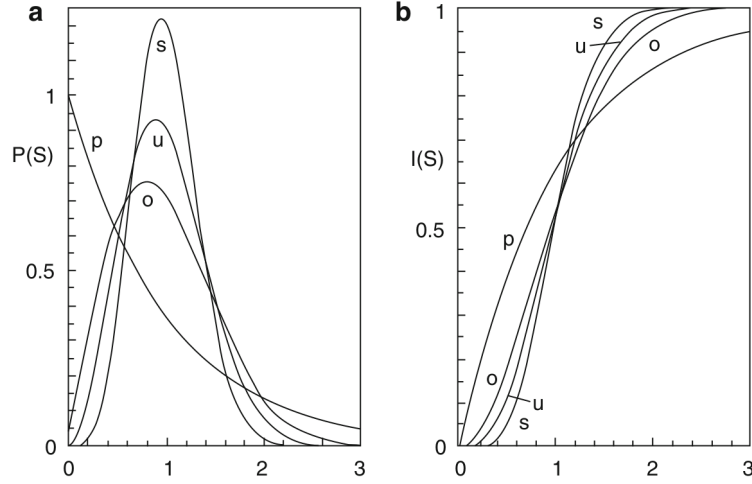


Figure 1: **a)** Distribución de probabilidad de espaciamientos entre niveles contiguos de energía para las colectividades poissoniana (p), GOE (o), GUE (u) y GSE (s); y **b)** sus integrales, $I(s) = \int_0^s ds' P(s')$ (Figura 5.1 [13]).

Como puede apreciarse en la figura (1), los espaciamientos en sistemas integrables –regidos por la colectividad de Poisson– no tienen una restricción de cercanía, esto es, la parte fluctuante de su densidad de estados no presenta correlaciones. Por el contrario, para sistemas caóticos, $P(0) = 0$, de donde se deduce que sí existe una correlación entre niveles traducida en una repulsión en corto –y largo¹³– alcance. En conclusión, en los espectros caóticos, los niveles tienden a distribuirse sin grandes desviaciones respecto al valor medio de espaciados. Esta propiedad se denomina rigidez espectral.

Ratios entre espaciamientos

Un estadístico adicional a los espaciamientos, propuesto por V. Oganessian y D. A. Huse [14], es la distribución de ratios entre espaciamientos consecutivos, definidos como:

$$r_i = \frac{s_i}{s_{i-1}} = \frac{E_{i+1} - E_i}{E_i - E_{i-1}} \quad (15)$$

Esta cantidad posee una ventaja añadida sobre los espaciamientos, ya que se supone que la densidad local de estados entre dos espaciamientos contiguos permanece constante, pudiendo prescindir, por tanto, del proceso de reescalado de los niveles de energía –como se muestra en la segunda igualdad de la ec. anterior. En definitiva, este estadístico es independiente de la densidad de estados local.

La distribución de ratios permite una comparación más transparente con los datos experimentales que la de espaciados, por lo que es ampliamente utilizada en trabajos recientes de investigación en sistemas de muchas partículas.

Adicionalmente, podemos definir otra cantidad relacionada con los ratios:

$$\tilde{r}_i = \min \left(r_i, \frac{1}{r_i} \right) = \frac{\min(s_i, s_{i-1})}{\max(s_i, s_{i-1})} \quad (16)$$

que supone una ventaja frente a los anteriores porque posee su misma distribución, aunque está restringida al intervalo $[0, 1]$ y su valor medio, $\langle \tilde{r}_i \rangle$, siempre está definido, cosa que no siempre se satisface con los ratios –sólo cuando el sistema en estudio es caótico, no integrable. Esta cualidad

¹³Esta repulsión de largo alcance puede visualizarse igualmente en la figura (1) cuando $s \gg 1$, donde $P(s)$ decrece a un mayor ritmo para sistemas caóticos que para integrables.

del valor medio del estadístico \tilde{r}_i permitirá analizar, por tanto, sistemas transitorios entre el caos y la integrabilidad.

Así, la distribución de probabilidad de ratios –y sus inversos– toma la forma [15]:

$$P(r) = \frac{1}{Z_\beta} \frac{(r + r^2)^\beta}{(1 + r + r^2)^{1+3\beta/2}} \quad ; \quad P\left(\frac{1}{r}\right) = r^2 P(r) \quad (17)$$

donde los parámetros de los que depende son diferentes para cada colectividad. Se muestran, junto a otros valores de gran relevancia, tabulados a continuación:

Colectividad	Poisson	GOE	GUE	GSE
β	0	1	2	4
Z_β	\dots	$\frac{8}{27}$	$\frac{4}{81} \frac{\pi}{\sqrt{3}}$	$\frac{4}{729} \frac{\pi}{\sqrt{3}}$
$\langle r \rangle_{(teo)}$	∞	$\frac{7}{4}$ $= 1.75$	$\frac{27}{8} \frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2}$ ≈ 1.360735	$\frac{243}{80} \frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2}$ ≈ 1.174661
$\langle r \rangle_{(num)}$	\dots	1.7781(1)	1.3684(1)	1.1769(1)
$\langle \tilde{r} \rangle_{(teo)}$	$2 \log 2 - 1$ ≈ 0.38629	$4 - 2\sqrt{3}$ ≈ 0.53590	$\frac{2\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2}$ ≈ 0.60266	$\frac{32}{15} \frac{\sqrt{3}}{\pi} - \frac{1}{2}$ ≈ 0.67617
$\langle \tilde{r} \rangle_{(num)}$	\dots	0.5307(1)	0.5996(1)	0.6744(1)

Table 1: Valores de parámetros útiles y valores medios de r y \tilde{r} , tanto teóricos –a partir de la ec. (17)– como obtenidos a partir de simulaciones numéricas, con colectividades de matrices 3×3 (Tabla 1 [15]).

Asimismo, seguidamente se representa la distribución $P(r)$, donde puede visualizarse cómo presenta la misma repulsión cuando $r \rightarrow 0$ que $P(s)$, mientras que en régimen asintótico decae más lentamente: $r^{-(2+\beta)}$ frente al decrecimiento exponencial de $P(s)$.

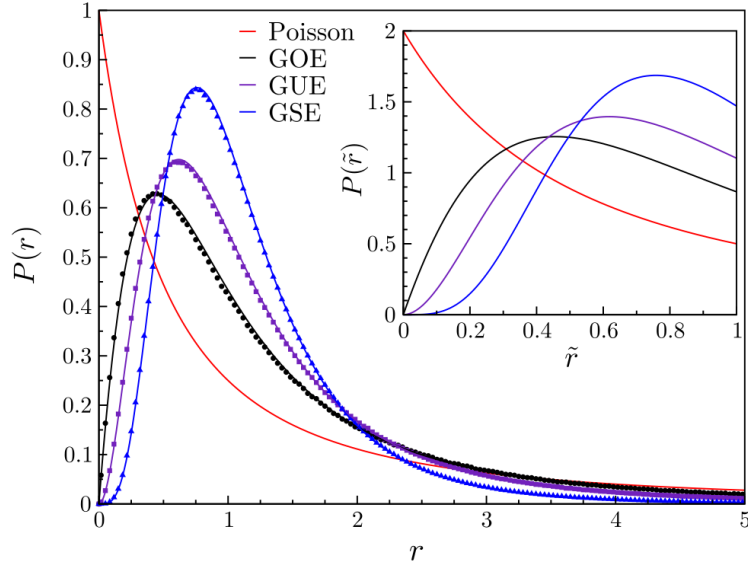


Figure 2: Distribución de ratios de espaciamientos entre niveles consecutivos para diferentes colectividades. Las líneas continuas son representaciones extraídas de la expresión analítica de $P(r)$ –ec. (17)– y los puntos han sido obtenidos a partir de resultados numéricos (Figura 1 [15]).

Conviene aclarar que la forma analítica (17) de la distribución de probabilidad de los ratios solamente es exacta para el caso de Poisson. Para el resto de colectividades, si bien da buenos resultados –en comparación a los numéricos [tabla (1)]–, sólo es una aproximación obtenida a partir de simulaciones numéricas con matrices 3×3 . De hecho, existe otra expresión para esta distribución, que para la

colectividad GOE –la de mayor interés físico– adquiere la siguiente forma:

$$P(r) = \frac{96}{25} \frac{r + r^2}{((1 + r)^2 - \frac{4}{5}r)^{5/2}} \quad (18)$$

Esta nueva función ha sido propuesta recientemente [16] partir de simulaciones numéricas con colectividades de matrices de dimensión $N \gg 1$, y constituye una versión mejorada de la expuesta en (17).

4.4 Sistemas intermedios

Es interesante recalcar que toda la teoría planteada hasta ahora es únicamente aplicable a sistemas puramente integrables o caóticos. Sin embargo, la mayoría de sistemas hamiltonianos poseen espacios fásicos clásicos mixtos, con regiones integrables y caóticas sin características globales que puedan definirlos –el teorema KAM no es suficiente en este punto. Por ello, en mecánica cuántica, al contrario que para sistemas integrables o totalmente caóticos, no existe una sistematización del estudio de este tipo de sistemas intermedios: puesto que las transiciones se dan de distinta forma para diferentes sistemas físicos, no existe ningún estadístico que pueda caracterizarlos de forma global. Véase [16] para un tratamiento extenso de la cuestión¹⁴.

En todo caso, existen posibilidades de análisis bajo una aproximación basada en la separación de regiones perteneciente a regímenes distintos. Es la denominada teoría de Berry y Robnik [17], y supone que el espectro de energías del sistema resulta de una superposición de los espectros relativos a estas regiones, tratados como estadísticamente independientes.

Esta aproximación permite la introducción de estadísticos sencillos que describen los sistemas intermedios, si bien sus resultados no son tan precisos como para sistemas integrables o ergódicos: dependen del sistema concreto en estudio.

Como causa de esta divergencia con los datos experimentales de algunos sistemas, se ha propuesto que, en sistemas cuánticos, no puede darse una independencia estadística total entre espectros, pues existiría un fenómeno de tunelamiento cuántico entre las partes integrables y caóticas del espacio fásico.

En definitiva, esta aproximación sólo aporta predicciones precisas en el límite semiclásico –donde este efecto se hace despreciable. Una posible solución a este problema sería considerar estas interacciones cuánticas en las distribuciones de probabilidad de los espaciamientos entre niveles.

Por otro lado, en la sección 5.3 se describirá y analizará numéricamente la estadística espectral de otro posible modelo para describir este tipo de transiciones entre la integrabilidad y el caos, que posee algunas ventajas sobre el expuesto por Berry y Robnik.

5 Simulaciones numéricas y resultados

La conjetura BGS ha puesto en valor la potencialidad descriptiva de la teoría de matrices aleatorias sobre el caos en mecánica cuántica, a partir del tratamiento estadístico del espectro energético de cualquier sistema dinámico.

Las herramientas que en su formulación estándar propone esta teoría, descritas en la sección 4.2.1, requieren un tratamiento computacional a partir de simulaciones numéricas. Para ello, nos hemos servido de un algoritmo propio desarrollado en lenguaje *Python*, cuyo código fuente puede ser consultado en [18]. La implementación de este programa consiste en un generador de matrices aleatorias cuyas características matemáticas atienden a las restricciones generales que imponen las diferentes colectividades propuestas [19].

¹⁴P. e. figura (5), ídem.

Estas matrices, como ya se ha explicado en secciones anteriores, se corresponden con los diferentes hamiltonianos que podrían, con cierta probabilidad, describir las interacciones que posee el sistema. Si bien estos hamiltonianos están definidos, en realidad, sobre un espacio de Hilbert de dimensión infinita, se puede considerar un conjunto de n matrices de orden N para que el problema pueda ser tratado numéricamente. Así, cada matriz poseerá $N(N - 1)/2$ parámetros aleatorios independientes. Esta aproximación no compromete, como se verá, la exactitud de los resultados, ya que, en la mayoría de situaciones, su dependencia respecto de N resulta ser muy débil.

Fijémonos, por ejemplo, en la colectividad de mayor interés físico, en relación a la cual se expondrán la mayoría de resultados del presente estudio. Es el caso de la colectividad GOE, compuesta por un conjunto de matrices simétricas reales, cuyos elementos por encima de la diagonal, así como los diagonales, son estadísticamente independientes entre sí. Su cálculo se realiza con ayuda de un generador de números aleatorios, que siguen una distribución normal de media nula y cuya desviación típica es igual a 1 para elementos diagonales y $1/\sqrt{2}$ para aquellos fuera de la diagonal.

5.1 Distribución de autovalores y espectros de energías

Una vez construidas las matrices de cualquier colectividad, procederemos a calcular sus autovalores, que, en última instancia, describirán las energías permitidas en las que se descompone el espectro del sistema regido por el hamiltoniano al que representa cada matriz. Es decir, al calcular los autovalores de todas las matrices de la colectividad –ordenados de menor a mayor–, estaremos construyendo un espectro de energías, de cuyas propiedades estadísticas nos serviremos para caracterizar cualquier sistema físico real.

La existencia de dichos autovalores está garantizada¹⁵ por la propia definición de cada una de las colectividades propuestas: cualquier matriz hermítica es diagonalizable unitariamente, y los elementos que componen dicha diagonal son los autovalores asociados a dicha matriz, que, además, son reales.

Una vez hallado y ordenado de menor a mayor –en una única secuencia– el conjunto de autovalores de todas las matrices, procederemos a representarlo gráficamente en un histograma, donde se ve reflejada la frecuencia en la que aparecen los distintos valores dentro del espectro formado, esto es, su densidad de estados. Dicha simulación numérica se ha realizado con un conjunto de $n = 200$ matrices de tamaño $N \times N = 200 \times 200$, suficientemente grande para realizar un análisis estadístico preciso.

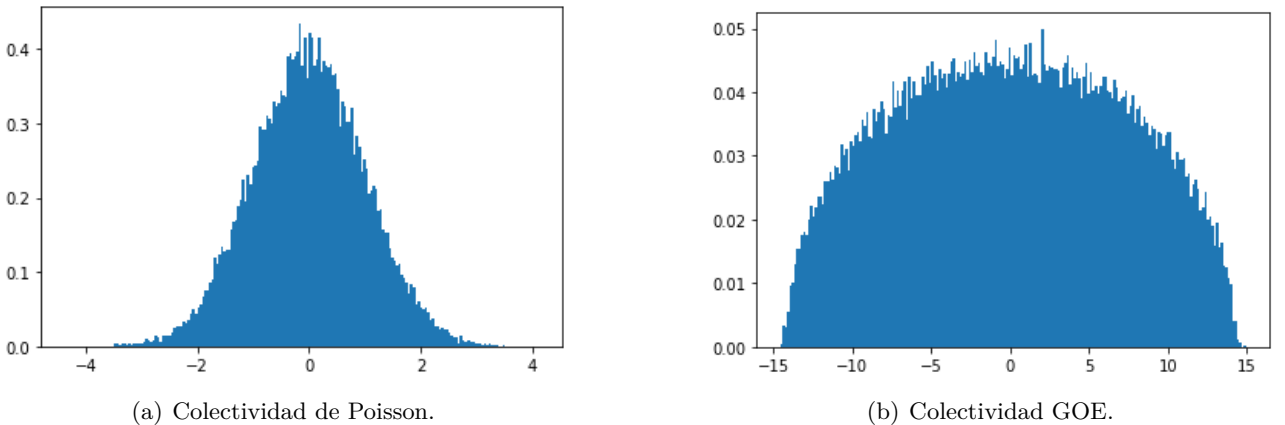


Figure 3: Histograma de autovalores de conjuntos de 200 matrices de tamaño 200×200 para diferentes colectividades.

Como puede observarse en la figura (3), la distribución de autovalores de sistemas cuánticos integrables y caóticos –representados por las colectividades de Poisson y GOE, respectivamente–, es notablemente diferente. La primera posee una forma gaussiana, ya que los autovalores son generados

¹⁵En el caso particular de la colectividad poissoniana, no es necesario una diagonalización de las matrices, pues éstas ya son diagonales, y sus elementos constituyen directamente su secuencia de autovalores.

directamente bajo una distribución normal. Sin embargo, la colectividad GOE guarda una forma característica de semicírculo, que es un resultado analítico propio de la teoría de matrices aleatorias. Las colectividades GUE y GSE presentan aspecto muy similar a la de esta colectividad en su distribución de autovalores.

Esta densidad semicircular, empero, no representa ninguna propiedad física de los sistemas cuánticos caóticos. De hecho, en el espectro de sistemas reales, esta forma no se da. Esta contradicción puede considerarse una muestra de que la teoría de matrices aleatorias es del todo inservible para modelar magnitudes que dependen de la densidad de estados, que justamente es lo que representa esta distribución.

Es por ello por lo que será necesaria la construcción de estadísticos espectrales útiles para la determinación del caos en mecánica cuántica.

5.2 Análisis de los estadísticos espectrales

A partir del espectro de autovalores, se podrían calcular numéricamente los estadísticos descritos en la sección 4.3. Nuestro análisis se va a centrar la utilización de los ratios entre espaciamentos, puesto que éstos poseen una gran ventaja sobre la distribución de espaciamentos entre niveles, lo que hace que sean generalmente elegidos por encima de éstos en la investigación sobre caos cuántico.

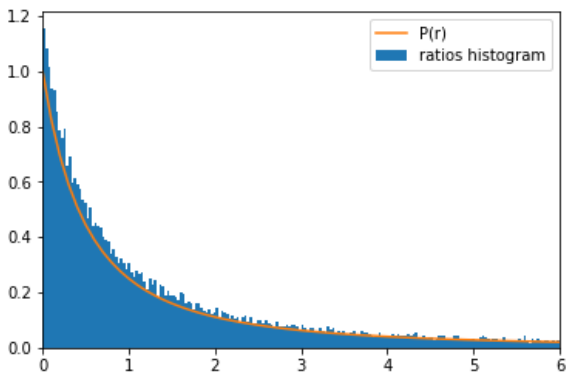
En primer lugar, para obtener la secuencia de espaciamentos entre los autovalores de una colectividad, se debería realizar con anterioridad un proceso de reescalado que los transformase en cantidades adimensionales. Sin embargo, esto no es necesario para el cálculo de los ratios, para el cual nos podemos servir directamente –ec. (15)– de los datos de los autovalores.

5.2.1 Ratios entre espaciamentos

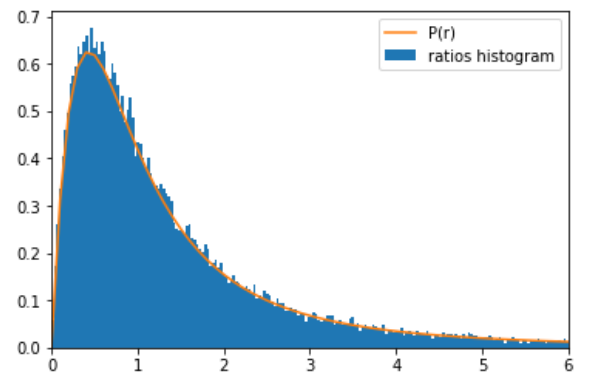
Para computar este estadístico, se deberá calcular, para cada una de las matrices de la colectividad, el cociente entre espaciamentos contiguos de la secuencia de autovalores ordenados, $\{\lambda_i\}_{i=0}^N$, tal que:

$$r_i = \frac{\lambda_{i+1} - \lambda_i}{\lambda_i - \lambda_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, N-2 \quad (19)$$

Una vez hecho esto, se dispondrá de $n \cdot (N-2)$ valores de los ratios de la colectividad en su conjunto, que podrán ser, igualmente, representados mediante un histograma:



(a) Colectividad de Poisson.



(b) Colectividad GOE. Comparación con expresión analítica de $P(r)$.

Figure 4: Histograma de ratios de conjuntos de 200 matrices de tamaño 200×200 para diferentes colectividades.

Estos resultados coinciden a la perfección con los expuestos por la figura (2) en [15]. Puede observarse claramente cómo en la colectividad de Poisson, los ratios no muestran correlación alguna de niveles: su probabilidad cuando $r \rightarrow 0$ no disminuye en ningún momento, llegando, de hecho, a ser máxima en este límite. Por otro lado, para la colectividad GOE sí se aprecia cómo existe una repulsión a corto alcance entre niveles que hace que la distribución de probabilidad de los ratios se anule en el origen.

Asimismo, estos histogramas han sido comparados, con las expresiones (17) y (18), respectivamente. Para el caso de Poisson, como ya se adelantó en la sección 4.3, es exacta y toma la forma particular:

$$P(r) = \frac{1}{(1+r)^2} \quad (20)$$

mientras que para GOE, es un resultado obtenido a partir de cálculo numérico. Es por ello por lo que ajustamos a esta otra forma analítica, que supone una ligera mejora con respecto a la original.

Asimismo, si calculamos el valor medio de la secuencia de ratios para la colectividad GOE, obtenemos $\langle r \rangle = 1.7702$, un valor estimado que guarda un 99.56% de exactitud en relación a los presentados a partir de simulaciones numéricas en la tabla (1).

El valor medio de los ratios para la colectividad de Poisson, en cambio, no tiene sentido que se calcule. La integral:

$$\int_0^\infty dr r P(r) \quad (21)$$

diverge¹⁶, por lo que el valor medio es infinito. Esta es una propiedad muy rara, que se encuentra en muy pocas distribuciones de probabilidad con significado físico. En la práctica numérica, se observan grandes oscilaciones de este valor para cada realización, concluyendo que esta magnitud no está bien definida.

5.2.2 Mínimos entre ratios y sus inversos

El cálculo del estadístico \tilde{r} es similar al ya expuesto para los propios ratios. El proceso consiste en: para cada ratio r_i obtenido, se compara con su inverso, $1/r_i$, y se escoge el menor de ambos. La secuencia resultante está comprendida en el intervalo $[0, 1]$ y su representación gráfica tiene la siguiente forma:

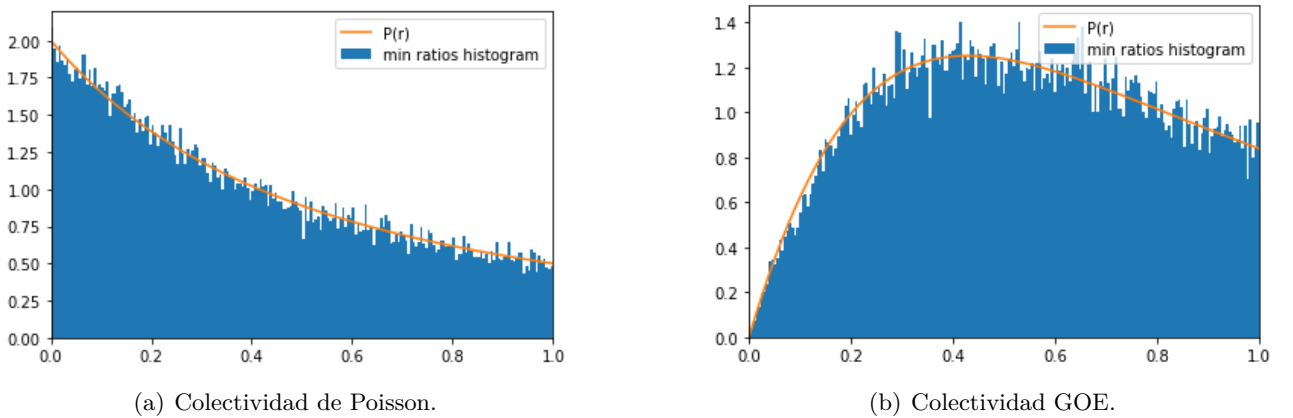


Figure 5: Histograma de \tilde{r} de conjuntos de 200 matrices de tamaño 200×200 para diferentes colectividades.

Estos resultados gráficos coinciden con los apreciados en la figura (2) y, puesto que este estadístico posee la misma distribución de probabilidad que los ratios, también presentan, para el caso caótico,

¹⁶De hecho, la integral para el caso GOE no diverge porque para $r \gg 1$ la probabilidad decrece a un mayor ritmo debido a las correlaciones de largo alcance.

correlación entre niveles energéticos. De hecho, en este caso se puede apreciar a simple vista, no sólo la correlación de corto alcance –repulsión entre niveles–, sino también de largo alcance, ya que en el límite $P(\tilde{r} \rightarrow 0) \rightarrow 0$ contribuyen tanto ratios pequeños, $r \rightarrow 0$, como grandes, $1/r \rightarrow 0$.

Para que sean comparadas estas distribuciones con sus expresiones analíticas, simplemente habrá que multiplicar por 2 las ecuaciones (20) y (18) y, como se puede ver en la figura (5), se ajustan con gran precisión a los datos numéricos en ambos casos.

Asimismo, tal y como se ha indicado en la sección 4.3, este estadístico posee una ventaja respecto a los ratios: su valor medio siempre está bien definido, incluso para sistemas integrables. Así, como resultado de las simulaciones realizadas, hemos obtenido los siguientes valores medios para ambas colectividades: $\langle \tilde{r} \rangle = 0.3876$ en Poisson, y $\langle \tilde{r} \rangle = 0.5285$ en GOE, que guardan un 99.66% y un 98.62% de exactitud, respectivamente, en relación a los presentados en la tabla (1).

La existencia de este valor medio para sistemas integrables, nos permitirá caracterizar los sistemas transitorios entre la integrabilidad y el caos en mecánica cuántica.

5.3 Caracterización de sistemas intermedios

Como ya se adelantó en la sección 4.4, no existe ningún estadístico global que describa de forma concluyente los sistemas cuyos espacios fásicos son mixtos. Sin embargo, se han propuesto algunos modelos que intentan comprender la manera en que se producen las transiciones entre el caos y la integrabilidad.

Uno de ellos, en el que se va a centrar el presente estudio, propone un método numérico basado en aplicar perturbaciones en las componentes no diagonales de la colectividad de Poisson, transformándose de forma uniforme en la colectividad GOE. Este planteamiento posee una virtud notable: la generación de transiciones suaves en la repulsión de niveles, fundamentada en la distribución de probabilidad $P(s)$, que en sistemas intermedios adquiere la forma

$$P(s) \sim s^\beta \quad , \quad \beta \in (0, 1) \quad (22)$$

para espaciamientos pequeños. Esta propiedad no se ve contemplada por la teoría de Berry y Robnik ya expuesta, y sus resultados han podido observarse en multitud de sistemas físicos.

Una manera de implementar numéricamente este modelo, consiste en analizar a lo largo de la transición el valor medio del estadístico \tilde{r} , bien definido y diferente para sistemas caóticos e integrables. Así, partimos de la colectividad de Poisson, cuyos elementos diagonales son variables aleatorias que siguen una distribución de probabilidad normal, de media nula y desviación típica 1:

$$a_{ii} = N(\text{mean} = 0, \sigma = 1) \quad (23)$$

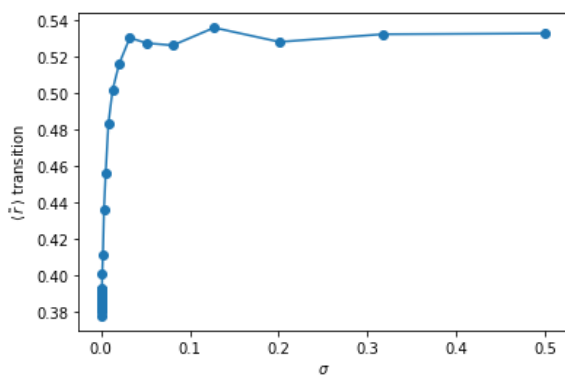
mientras que sus elementos no diagonales son nulos. Esto equivale a una distribución normal de números aleatorios de media y desviación típica nulas:

$$a_{ij} = N(\text{mean} = 0, \sigma = 0) \quad \forall i \neq j \quad (24)$$

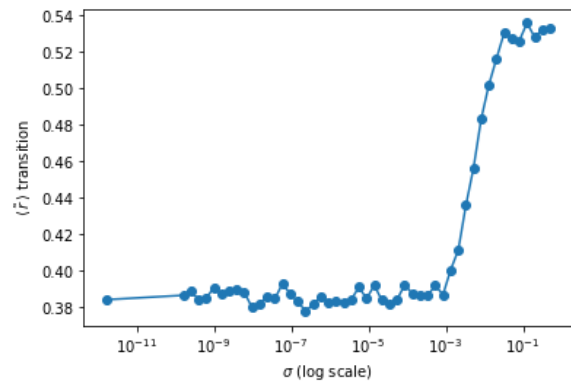
La colectividad GOE, por otro lado, posee la misma distribución de sus elementos diagonales que (23), mientras que los no diagonales se definen como:

$$\tilde{a}_{ij} = N(\text{mean} = 0, \sigma = 1/\sqrt{2}) \quad \forall i \neq j \quad (25)$$

Así, el proceso de transición consistirá en hacer pequeñas perturbaciones los elementos no diagonales de la colectividad de Poisson para que dejen de ser nulos, transitando de forma suave hasta la colectividad GOE. Numéricamente, esto se traducirá en realizar pequeños incrementos de σ desde cero hasta $1/\sqrt{2}$, calculando en cada paso el valor medio de \tilde{r} :



(a) Escala lineal.

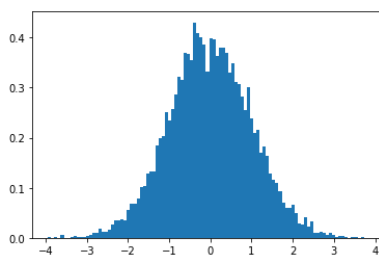


(b) Escala logarítmica.

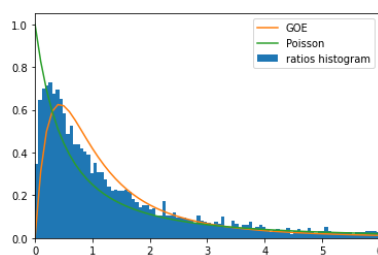
Figure 6: Variación del valor medio de \tilde{r} en una transición entre las colectividades de Poisson y GOE, para 100 matrices 100×100 y 50 valores de σ en secuencia geométrica.

Se puede observar en la figura (6) cómo la integrabilidad se pierde rápidamente¹⁷ para perturbaciones muy pequeñas sobre la desviación típica –del orden de $\sigma \sim 10^{-3}$ – de los elementos no diagonales de las matrices que componen la integrabilidad, dando paso a un régimen caótico.

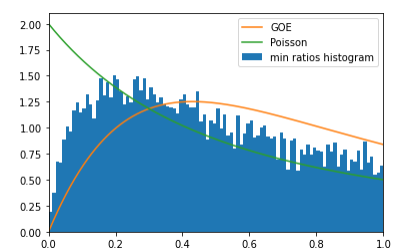
Durante esta transición, conviven en los espacios fásicos regiones integrables y caóticas, y su evolución no sigue un ajuste analítico concluyente. La distribución de autovalores, ratios y \tilde{r} de estos sistemas mixtos sigue una forma intermedia entre la integrable y la puramente ergódica –fig. (3), (4) y (5).



(a) Distribución de autovalores.



(b) Distribución de ratios. Ajuste a ec. (20) y ec. (18).



(c) Distribución de \tilde{r} . Ajuste al doble de ec. (20) y ec. (18).

Figure 7: Distribuciones de estadísticos para un sistema intermedio con $\sigma = 5 \cdot 10^{-3}$. Colectividad de 100 matrices 100×100 .

Por otro lado, será necesario tener en cuenta otros estadísticos adicionales que midan correlaciones a más larga distancia que los propuestos. El objetivo principal de esta propuesta es comprobar el nivel de caos de sistemas con $10^{-2} < \sigma < 1/\sqrt{2}$, esto es, una vez superado la transición abrupta. Los ratios indican que el régimen de estos sistemas es puramente ergódico, pero un estudio mediado por otros estadísticos desvelará que este resultado no es del todo cierto, sino que, en realidad, no se está teniendo en cuenta toda la información de estos sistemas.

En conclusión, se demuestra la gran inestabilidad de las trayectorias regulares en el espacio de fases de los sistemas cuánticos, así como la dificultad de sistemas intermedios para ser modelados bajo los estadísticos espectrales propuestos.

¹⁷Es por ello por lo que se ha elegido una secuencia de desviaciones típicas con forma geométrica, para poder apreciar con mayor detalle el intervalo abrupto de transición.

6 Conclusiones

Se ha mostrado cómo los diversos intentos de descripción del caos en mecánica cuántica, por diversas vías, se ven sometidos a las grandes dificultades interpretativas y conceptuales que caracterizan a la mecánica cuántica. En este hecho radica la sorprendente fortaleza de la conjetura BGS, que ha posibilitado la realización de un estudio sistemático sobre estos sistemas, apoyada por la potencialidad matemática que ofrece la teoría de matrices aleatorias de Wigner.

La introducción de los estadísticos espectrales en este proceso permiten la caracterización estadística de sistemas puramente caóticos e integrables, si bien el tratamiento de los sistemas mixtos requiere de modelos adicionales que sólo son útiles frente al análisis de algunos de ellos, pues no existen estadísticos capaces de determinarlos de forma universal.

El modelo de análisis desarrollado a partir de las simulaciones numéricas realizadas en el presente estudio, deja notar la volatilidad de la condición de integrabilidad, que deja paso rápidamente al movimiento caótico. Sin embargo, este resultado es parcialmente debido al modelo de estadísticos utilizado: en sistemas físicos reales no se observa una transición abrupta, sino que, por el contrario, la integrabilidad transiciona al caos de una forma suave y más pausada.

Referencias

- [1] P. S. Laplace, *Traité de mécanique céleste*. 1825.
- [2] V. I. Arnold, *Mathematical methods of classical mechanics*. Springer-Verlag, 1989.
- [3] G. Vera, *Lecciones de análisis matemático II*. Universidad de Murcia, 2011.
- [4] J. von Neumann, *Mathematical foundations of quantum mechanics*. Princeton University Press, 1955.
- [5] R. A. Jalabert and H. M. Pastawski, “Environment-independent decoherence rate in classically chaotic systems,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, no. 12, pp. 2490–2493, 2001.
- [6] K. Hashimoto, J. Murata, and R. Yoshii, “Out-of-time-order correlators in quantum mechanics,” *J. High Energy Phys.*, vol. 2017, no. 8, pp. 1–31, 2017.
- [7] A. Relaño, *Caracterización del caos cuántico mediante series temporales*. PhD thesis, Universidad Complutense de Madrid, 2004.
- [8] M. V. Berry and M. Tabor, “Level clustering in the regular spectrum,” *Proc. R. Soc. Lond. A.*, vol. 356, no. 1686, pp. 375–394, 1977.
- [9] D. Ullmo, *The Bohigas-Giannoni-Schmit conjecture*. Université Paris-Sud, 2016.
- [10] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit, “Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 52, no. 1, pp. 1–4, 1984.
- [11] F. J. Dyson, “Statistical theory of energy levels of complex systems I–III (IV),” *J. Math. Phys.*, vol. 3 (4), no. 1 (1), pp. 140–175 (701–712), 1962 (1963).
- [12] H. L. Montgomery, “The pair correlation of zeros of the zeta function,” *Pure Math.*, no. 24, pp. 181–193, 1973.
- [13] F. Haake, S. Gnutzmann, and M. Kuś, *Quantum signatures of chaos*. Springer, 1991.
- [14] V. Oganesyan and D. A. Huse, “Localization of interacting fermions at high temperature,” *Phys. Rev. B*, vol. 75, no. 15, p. 155111, 2007.

- [15] Y. Y. Atas, E. Bogomolny, O. Giraud, and G. Roux, “Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, no. 8, p. 084101, 2013.
- [16] A. L. Corps and A. Relaño, “Distribution of the ratio of consecutive level spacings for different symmetries and degrees of chaos,” *Phys. Rev. E*, vol. 101, no. 2, p. 022222, 2020.
- [17] M. V. Berry and M. Robnik, “Semiclassical level spacings when regular and chaotic orbits coexist,” *J. Phys. A: Math. Gen.*, vol. 17, no. 12, p. 2413, 1984.
- [18] D. M. Pino, “Ergodicity and chaos in quantum mechanics.” <https://github.com/d-michel/quantic-chaos>, 2021. Source code on GitHub repository.
- [19] G. Livan, M. Novaes, and P. Vivo, *Introduction to random matrix theory and practice*. Springer, 2017.