

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS



**CAOS CUÁNTICO EN SISTEMAS HAMILTONIANOS DE
MUCHOS CUERPOS**

**MEMORIA PARA OPTAR AL GRADO DE DOCTOR
PRESENTADA POR**

Rafael Alejandro Molina Fernández

Bajo la dirección de los Doctores:

José María Gómez Gómez
Joaquín Retamosa Granado

Madrid, 2004

ISBN: 978-84-669-1748-3

©Rafael Alejandro Molina Fernández, 2002

CAOS CUÁNTICO EN SISTEMAS
HAMILTONIANOS DE MUCHOS
CUERPOS

Memoria presentada por

D. Rafael Alejandro Molina Fernández
*para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas
por la Universidad Complutense de Madrid*

Dirigida por los profesores

D. José María Gómez Gómez

y

D. Joaquín Retamosa Granada

Noviembre 2001

A Olalla

Agradecimientos

El trabajo de realización de una tesis doctoral es una tarea ardua y prolongada en la que confluyen numerosas contribuciones. Durante estos años he recibido apoyo y ayuda muy variada de muchas personas, cada una de las cuales ha sabido aportar su particular contribución a mi trabajo. Resulta difícil enumerarlas a todas y más difícil aún expresarles mi profundo agradecimiento en unas pocas líneas.

Quiero nombrar en primer lugar a mis directores de tesis, José María Gómez y Joaquín Retamosa, a los que debo agradecer no sólo todas sus enseñanzas y los esfuerzos que han realizado para que este trabajo viera la luz, sino también la confianza que han depositado en mí durante todo este tiempo.

Desde aquí manifiesto también mi más sincero agradecimiento a Vincenzo Manfredi de la Università degli Studi di Padova por haberme acogido cálidamente en mi primera estancia en el extranjero durante la cual mantuvimos agradables y fructíferas conversaciones y que fue el primero en resaltar la importancia de nuestros resultados sobre el reescalado local. Quiero destacar asimismo la contribución de Andrés Zuker del Institut de Recherches Subatomiques de Strasbourg, cuyas ideas han servido de base a parte de este trabajo. También agradezco a Rodolfo Jalabert y a Dietmar Weinmann su confianza durante mi estancia en Estrasburgo y las conversaciones científicas que hemos mantenido.

También deseo hacer mención especial de los miembros del grupo de física nuclear del Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad Complutense, donde he estado integrado durante estos años. La relación personal con todos ellos ha sido excelente. A José Manuel, siempre presto en ayudar a resolver cualquier problema, a Javi, que ha sido el mejor compañero de despacho, a Armando, al que debo agradecer su colaboración y sugerencias y al recién llegado César.

Tengo una deuda especial con las personas que, con su amistad y cariño, han conseguido que vaya a recordar estos años de formación con nostalgia durante el resto de mi vida. Borja, al que agradezco su ayuda, sus comentarios y sus charlas de sobremesa. Esperanza compartió nuestras comidas cuando pudo. Mirta me acompañó en mis viajes diarios en tren hasta que partió hacia tierras más frías. Elise y Roberto hicieron más agradable mi estancia en Estrasburgo. Laura, Bruno, David y Javi, los compañeros de Salamanca, en donde establecimos lazos de amistad que perdurarán toda la vida. Y, finalmente, Olalla, que ha compartido todas mis penas y alegrías durante los tres últimos años.

Índice General

Dedicatoria	i
Agradecimientos	iii
Índice general	v
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xiii
1 Introducción	1
2 Conceptos fundamentales del caos cuántico	5
2.1 Caos	6
2.1.1 Caos hamiltoniano y teorema KAM	7
2.1.2 Jerarquía del caos	9
2.2 Caos cuántico	10
2.3 Aplicación de la teoría de matrices aleatorias al caos cuántico	13
2.3.1 Análisis espectrales	14
2.3.2 Intentos de demostrar la conjetura BGS	18
2.4 Billares cuánticos	20
2.5 Localización dinámica	22
2.6 Caos cuántico en sistemas de muchos cuerpos	23
2.6.1 Núcleos atómicos	27
2.6.2 Fluctuaciones espectrales	28
2.6.3 Anchura de las resonancias	30
2.6.4 Átomos	31
2.6.5 Moléculas	31
2.7 Interacciones a dos cuerpos	32

2.8	Espectroscopía estadística	34
2.8.1	Espectroscopía estadística y caos	35
2.9	Dinámica de niveles	35
2.9.1	Gas de Pechukas-Yukawa	36
2.9.2	Gas de solitones	37
2.9.3	Transiciones internas y transiciones externas	39
3	Método de reescalado	41
3.1	Necesidad de reescalado	41
3.2	Descripción general	42
3.3	Procedimientos para realizar el reescalado del espectro	42
3.4	Efectos espurios en las fluctuaciones espectrales	44
3.5	Análisis de Fourier de las correlaciones	49
3.6	Análisis de Fourier para un billar rectangular	52
3.7	Conclusiones sobre el efecto espurio en las correlaciones de largo alcance	54
3.8	Reescalado de los espectros del modelo de capas	55
4	Caos cuántico en el modelo de capas	61
4.1	Introducción	61
4.1.1	Trabajos previos sobre matrices del modelo de capas	62
4.1.2	Aspectos técnicos de nuestro trabajo	63
4.2	Resultados para la capa pf	63
4.2.1	$P(s)$ y correlaciones de corto alcance	64
4.2.2	Δ_3 y correlaciones de largo alcance	70
4.2.3	Entropía de la información de las funciones de onda	72
4.3	Variando la intensidad relativa de las interacciones $T = 0$ y $T = 1$	76
4.4	Δ_3 para grandes valores de L	79
4.5	Efecto de la interacción de pareamiento	80
4.6	Resultados para la región del Pb	83
4.6.1	Pareamiento en la región del Pb	86
4.7	Conclusiones	86
5	Dinámica de niveles en matrices del modelo de capas	89
5.1	Transición del hamiltoniano diagonal al hamiltoniano completo	89
5.2	Repulsión de niveles	91
5.3	Cruces evitados	94

5.4	Funciones de onda	95
6	Matrices de Lanczos	103
6.1	Método de Lanczos	103
6.2	Estructura de las matrices de Lanczos	104
6.3	Modelización del caos cuántico con matrices tridiagonales	105
6.4	Fluctuaciones de los elementos de matriz de las matrices de Lanczos	106
6.4.1	Parámetro de repulsión	109
6.5	Hamiltoniano del campo medio en la base de Lanczos	114
6.6	Propiedades de localización de los vectores en la base de Lanczos	114
7	Conclusiones	119
A	Teoría de Matrices Aleatorias (RMT)	123
A.1	Colectividades gaussianas y simetrías	123
A.2	Distribuciones de autovalores	125
A.3	Densidad de estados	125
A.4	Distribución de espaciamentos a primeros vecinos: La distribución de Wigner	126
A.5	Funciones de correlación a n-puntos	126
A.6	Los estadísticos Σ^2 y Δ_3	127
A.7	Distribución de autovectores	129
B	Modelo de capas	131
B.1	Espacio de Fock	132
B.2	<i>Core</i> inerte y espacio de valencia	132
B.3	Interacciones efectivas en el espacio de valencia	133
B.4	Capas más utilizadas	133
B.4.1	Capa <i>p</i>	133
B.4.2	Capa <i>sd</i>	135
B.4.3	Capa <i>fp</i>	135
B.4.4	Región del Pb	135
B.5	Interacciones efectivas realistas	135
B.6	Parte multipolar de la interacción	136

Índice de Figuras

2.1	Solapamiento de dos vectores de onda para el <i>kicked top</i>	11
2.2	$P(s)$ para el estadio de Sinai.	15
2.3	Distribuciones de Brody y de Izrailev	17
2.4	$P(s)$ para resonadores de microondas	21
2.5	$P(s)$ del NDE.	24
2.6	Δ_3 del NDE.	25
2.7	Resultados experimentales del ajuste de ω a la distribución de espaciamientos en distintas regiones de la carta nuclear.	29
2.8	Comparación entre el EGOE(1+2) y los resultados del modelo de capas para el ^{48}Ca	33
2.9	Estructura bisolitónica de cruces evitados	38
2.10	Turbulencia de solitones en el espectro de un sistema cuántico	39
3.1	$P(s)$ matriz GOE	44
3.2	Δ_3 para una matriz GOE $N = 10000$ con distintos tipos de reescalado.	45
3.3	Δ_3 para $N = 10000$ niveles Poisson con distintos tipos de reescalado.	46
3.4	Δ_3 para el ^{50}Ca con distintos tipos de reescalado.	47
3.5	Δ_3 para el ^{52}Ca $J = 1$ con reescalado suave y con reescalado local $v = 5$	48
3.6	Espectro de potencias comparado para S y D_L	50
3.7	Espectro de potencias comparado para s y s_L	51
3.8	Espectro de potencias comparado para s y s_G	52
3.9	$\Delta_3(L)$ para un billar rectangular con dos tipos distintos de reescalado.	53
3.10	Espectro de potencias comparado para las distintas secuencias de espaciamientos del billar rectangular.	54

3.11	Representación esquemática de la densidad total de un núcleo a partir de las densidades parciales en los distintos subespacios.	56
3.12	$\rho(E)$ para el ^{46}Sc $J = 3$, $T = 2$ utilizando la expansión de Edgeworth.	58
3.13	$N(E)$ a baja energía para el ^{48}Ca $J = 2$	59
4.1	ω para los núcleos de la capa pf	66
4.2	$P(s)$ para los isótopos de Ca y Sc con $E < 5$ MeV y ajuste a Brody.	67
4.3	$P(s)$ para los isótopos de Ca y Sc con $E < 10$ MeV y ajuste a Brody.	68
4.4	$P(s)$ para los isótopos de Ca y Sc y ajuste a Brody.	69
4.5	Energías de partícula independiente para el ^{48}Ca y de hueco para el ^{52}Ca .	70
4.6	$\Delta_3(L)$ para los estados $J^\pi = 0^+$ $T = T_z$ de los núcleos ^{46}Ca , ^{46}Sc y ^{46}Ti .	72
4.7	$\Delta_3(L)$ para los estados $J^\pi = 0^+$ $T = T_z$ de los núcleos ^{52}Ca , ^{52}Sc	73
4.8	$\langle l_H \rangle$ para los estados 0^+ en la capa pf .	74
4.9	l_H en función de E para los estados $J = 6$ del ^{50}Ca y $J = 1$ ^{46}Sc .	75
4.10	Distribución local de las componentes al cuadrado de las funciones de onda del ^{50}Ca $J = 0$.	76
4.11	ω en función de la intensidad de la interacción multipolar.	78
4.12	$\langle l_H \rangle$ en función de la intensidad de la interacción multipolar.	79
4.13	L_{sep} de la Δ_3 para el ^{46}Sc en función de λ	80
4.14	Efecto del apareamiento en las $P(s)$ para el ^{48}Ca .	82
4.15	Efecto del apareamiento en las $P(s)$ para el ^{52}Ca .	83
4.16	Δ_3 para los núcleos con $A = 212$	85
4.17	Efecto del apareamiento en las $P(s)$ para el ^{212}Pb .	86
5.1	Energía de los niveles del ^{46}Sc $J = 11$ en función del valor de λ .	92
5.2	Energía de los niveles en función de λ para el ^{50}Ca $J = 0$.	93
5.3	Valores de ω para el ^{46}Sc $J = 11$ en función del acoplamiento entre la parte monopolar y multipolar del hamiltoniano.	93
5.4	Valores de ω para el ^{50}Ca $J = 0$ en función del acoplamiento entre la parte monopolar y multipolar del hamiltoniano.	94

5.5	Número de cruces evitados en función de λ y valor del parámetro ω para el modelo basado en matrices GOE.	96
5.6	Número de cruces evitados en función de λ para el ^{46}Sc $J = 11$	97
5.7	Número de cruces evitados en función de λ para el ^{50}Ca $J = 0$	97
5.8	Dinámica de niveles y entropía de las funciones de onda para el bisolitón.	99
5.9	Dinámica de niveles y entropía de la información para un modelo de 100 solitones.	100
5.10	Evolución de la entropía de la información para el nivel $N = 69$ del ^{46}Sc $J = 11$	102
6.1	Elementos de matriz de la matriz Lanczos correspondiente al ^{48}Ca $J = 4$	105
6.2	Elementos de matriz de la matriz Lanczos correspondiente al $(fpgd)^8$ $J = 6$	107
6.3	Fluctuaciones de los elementos de matriz de Lanczos	108
6.4	Elementos de la matriz de Lanczos correspondientes al GOE	109
6.5	β_{ef} en función de un parámetro que nos mide las fluctuaciones de los elementos de matriz de las matrices Lanczos	110
6.6	Δ_3 para distintas matrices Lanczos variando las fluctuaciones	111
6.7	β_{ef} en función de un parámetro que nos mide las fluctuaciones de los elementos de matriz de las matrices Lanczos para el caso de fluctuaciones aleatorias gaussianas.	113
6.8	Elementos de matriz de Lanczos para el campo medio.	115
6.9	Entropía de las funciones de onda para distintos valores de F	117
6.10	Correspondencia entre la dinámica de niveles en función de F y la evolución de la entropía de la información.	118
A.1	$R_2(r)$ para el GOE y el GUE	127
B.1	Capas y números cuánticos en el modelo de capas	134

Índice de Tablas

4.1	Número de espaciamentos utilizados en la capa pf	64
4.2	Resultados en la región del Pb para $A = 212$	84

Capítulo 1

Introducción

El caos cuántico es una materia que todavía carece de una definición clara. Incluso su propio nombre es objeto de controversia. Por el contrario el caos determinista clásico posee una definición precisa y sus propiedades son perfectamente conocidas. A pesar de ello, en las dos últimas décadas se han conseguido importantes avances en nuestra comprensión de la mecánica cuántica gracias a las ideas aportadas por este nuevo campo.

Podemos dividir los estudios sobre caos cuántico en dos tipos: el caos cuántico en sistemas de un cuerpo y el caos cuántico en sistemas de muchos cuerpos. En el primero, las herramientas utilizadas son principalmente aproximaciones semiclásicas, que permiten una conexión inmediata con las propiedades de regularidad o caos del límite clásico del sistema. En el segundo caso no tenemos posibilidad de comparación con ningún tipo de dinámica clásica ya que, debido al comportamiento bosónico o fermiónico de las partículas cuánticas, el límite clásico de los sistemas cuánticos de muchos cuerpos no está bien definido. A los sistemas de un solo cuerpo se le puede aplicar la definición más usual de caos cuántico. El caos cuántico es lo que le sucede a un sistema cuántico cuyo análogo clásico es caótico. Aunque no existan dudas sobre su aplicabilidad en este caso, esta definición dista mucho de ser satisfactoria. Nos gustaría encontrar características puramente cuánticas que permitieran una definición más precisa sin necesidad de acudir al límite clásico y, al mismo tiempo, válida tanto para sistemas cuánticos de una sola partícula como para muchas partículas en interacción.

El punto de unión entre ambos tipos de sistemas lo provee la teoría de matrices aleatorias. Las propiedades estadísticas de las fluctuaciones del espectro de un sistema cuántico caótico tienen características universales

idénticas a las del espectro de una matriz aleatoria. Son aplicables, tanto para una única partícula moviéndose en un billar con forma de estadio, el análogo cuántico de un sistema caótico clásicamente, como para un núcleo complejo con sus protones y neutrones interaccionando fuertemente. Nuestro trabajo se fundamenta en el análisis de propiedades estadísticas del espectro y de las funciones de onda de sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Hemos centrado nuestro estudio en el núcleo atómico, paradigma de sistema cuántico complejo. La herramienta teórica más adecuada para estudiar la dinámica nuclear en este sentido es el modelo de capas. Por esta razón, la mayor parte de este trabajo se basa en el análisis de los espectros y las funciones de onda resultantes de la diagonalización de las matrices del modelo de capas.

En el capítulo 2 introducimos los conceptos de caos cuántico y matrices aleatorias que vamos a utilizar en el resto del trabajo. El paso previo para un análisis adecuado de las fluctuaciones de los espectros cuánticos es la eliminación del comportamiento medio de los niveles de energía, particular de cada sistema. Nos referimos a este proceso como *reescalado* (traducción libre de la palabra inglesa *unfolding*). Lo estudiaremos en detalle en el capítulo 3. Demostramos en este capítulo que el conocimiento de una función suave de la densidad media es indispensable para la caracterización del espectro como caótico o regular y limitamos la validez de los métodos estándares de reescalado que dependen de una ventana de energía. El capítulo 4 contiene los resultados relacionados con la estadística del espectro y las funciones de onda de los núcleos en la capa *pf* y en la región del Pb. Obtenemos una clara dependencia de la caoticidad del núcleo en el isospín y en la energía de excitación en ambas regiones. La mayor regularidad a baja energía del espectro de los núcleos con un solo tipo de fluido (neutrones o protones) se explica mediante la conservación parcial del número cuántico de senioridad debido a la importancia de la interacción de apareamiento en esa región. A mayor energía existen todavía diferencias apreciables entre núcleos con un solo fluido y núcleos con protones y neutrones. Estas diferencias se pueden apreciar estudiando las funciones de onda y las correlaciones de largo alcance en las fluctuaciones del espectro. La diferencia en la intensidad de la parte de la interacción residual de isospín $T = 1$ y la de isospín $T = 0$ explican este comportamiento. En el capítulo 5 estudiamos la dinámica de niveles en función de un parámetro que lleva el sistema de la regularidad al caos y el mecanismo de la estocastización de las funciones de onda a partir de los cruces evitados de los niveles de energía. En el capítulo 6 introducimos y analizamos un nuevo modelo de matrices tridiagonales para el caos

cuántico en sistemas de muchos cuerpos basado en el método de Lanczos. El método de Lanczos ha sido utilizado tradicionalmente para estudiar la región cercana al estado fundamental, sin embargo, en este trabajo se utiliza para investigar propiedades globales de la dinámica. En el capítulo 7 finalizaremos exponiendo las conclusiones fundamentales del trabajo. Con el fin de aligerar el contenido del segundo capítulo se han recogido los detalles sobre la teoría de matrices aleatorias en el apéndice A y sobre el modelo de capas en física nuclear en el apéndice B.

Capítulo 2

Conceptos fundamentales del caos cuántico

Existen dos tipos de movimiento radicalmente distintos en la mecánica clásica: el *movimiento regular* de los sistemas integrables y el *movimiento caótico* de los sistemas no integrables. Para distinguir el tipo de dinámica que corresponde a un sistema dado podemos observar un grupo de trayectorias que comiencen en puntos cercanos del espacio de fases. En el caso caótico la distancia entre dos de esas trayectorias cualesquiera crece exponencialmente con el tiempo. El ritmo de crecimiento de esa distancia es lo que se denomina exponente de Lyapunov. Para el movimiento regular el ritmo de crecimiento puede crecer como una potencia, pero nunca de forma exponencial. En este caso decimos que el exponente de Lyapunov es idénticamente cero. En mecánica cuántica la noción de trayectoria en el espacio de fases pierde su sentido y, por tanto, también lo pierde la noción de exponente de Lyapunov. Cuando tenemos un espectro discreto de energías, como en los sistemas cuánticos ligados, la dinámica se caracteriza por ser cuasiperiódica y no puede existir esa sensibilidad a las condiciones iniciales.

Como al pasar a la mecánica cuántica se pierde la distinción clásica entre el movimiento regular y el caótico, nos podríamos preguntar si existen otros criterios completamente mecanocuánticos que nos permitan distinguir dos tipos de dinámica cuántica de forma paralela al caso clásico. Cuando $\hbar \rightarrow 0$ un grupo debe convertirse en regular y el otro en caótico. El nuevo campo del caos cuántico ha demostrado durante estas dos últimas décadas que estos criterios existen.

Los trabajos pioneros de Berry[1] y Bohigas, Giannoni y Schmit[2] rela-

cionaron las propiedades estadísticas del espectro de los sistemas cuánticos con el comportamiento caótico o regular de su análogo clásico. Desde entonces numerosos sistemas cuánticos u ondulatorios han sido analizados desde este punto de vista. Como ejemplos podemos citar los estudios sobre billares cuánticos y su realización experimental como cavidades de microondas[3, 4], cavidades acústicas[5], sistemas mesoscópicos[6, 7], sistemas atómicos y moleculares[8, 9, 10] o sistemas nucleares[11, 12].

Los avances en estas dos últimas décadas han sido espectaculares. La profundidad de nuestro conocimiento sobre la relación entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica y sobre la dinámica de los sistemas cuánticos complejos ha aumentado en gran medida gracias a las nuevas ideas introducidas en este campo. La intención de este capítulo es presentar una breve introducción a esta vastísima materia. No pretendemos ser exhaustivos sino concentrarnos en los aspectos que más nos interesan y en los que se encuentran más relacionados con la física nuclear, ya que sobre ella se basa la mayor parte de este trabajo.

2.1 Caos

El descubrimiento del caos determinista y sus aplicaciones a gran variedad de sistemas físicos representan uno de los grandes avances de la física del último tercio del siglo XX. La mayoría de los sistemas dinámicos no lineales son caóticos. Este nuevo concepto ha permitido el estudio de muchos sistemas complejos que antes no podían ser tratados. Dos excelentes textos introductorios sobre la teoría del caos determinista son los libros de Schuster[13] y de Lichtenberg y Liebermann[14], el primero más básico y el segundo más riguroso en el aspecto matemático.

El caos determinista presenta las siguientes características definitorias:

- a) Las leyes de evolución del sistema son deterministas.
- b) Comportamiento aperiódico. El espectro de potencias del movimiento del sistema es continuo.
- c) La sensibilidad extrema a las condiciones iniciales producida por la separación exponencial de las trayectorias en el espacio de fases. El exponente de Lyapunov del sistema es el parámetro que mide este efecto de forma cuantitativa. Viene definido por:

$$\lambda(\mathbf{x}_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{d(\mathbf{x}_0, t)}{d(\mathbf{x}_0, 0)} \quad (2.1)$$

donde $d(\mathbf{x}_0, t)$ es la separación entre dos trayectorias a tiempo t y con condiciones iniciales \mathbf{x}_0 y el resultado se debe promediar sobre todas las condiciones iniciales. El exponente de Lyapunov nos da un límite práctico al tiempo máximo para el que las predicciones sobre la evolución de un sistema son válidas, dependiendo de la precisión con la que se midan las condiciones iniciales.

d) El sistema está confinado. Solamente con un exponente de Lyapunov positivo los sistemas no son necesariamente caóticos. Es también imprescindible que se cumpla la propiedad matemática de *mixing*, esto es, que las trayectorias que se separan se vuelvan a encontrar una y otra vez. Las trayectorias cercanas se separan localmente pero la dinámica está confinada globalmente a una región finita del espacio de fases y, necesariamente, las trayectorias se reaproximan arbitrariamente cerca unas a otras infinitas veces. Es necesario que la entropía topológica, que mide el ritmo de crecimiento del número de trayectorias topológicamente distintas, sea positiva.

La principal sorpresa que nos reserva el caos determinista es que se puede producir en sistemas muy simples de pocos grados de libertad. En física, los sistemas hamiltonianos con un número finito de grados de libertad han sido divididos tradicionalmente en dos tipos: aquellos con pocos grados de libertad, que se suponía que debían exhibir algún tipo de movimiento ordenado que fuera aproximadamente resoluble por teoría de perturbaciones; y aquellos con un gran número de grados de libertad, para los que se debían aplicar los métodos de la mecánica estadística. Sin embargo, el descubrimiento del caos determinista ha cambiado totalmente este punto de vista. La dinámica de los sistemas de pocos grados de libertad puede ser increíblemente compleja.

2.1.1 Caos hamiltoniano y teorema KAM

Dependiendo de que el sistema conserve la energía o no, el caos determinista se puede dividir en dos clases con características y propiedades muy distintas.

En los sistemas disipativos el volumen ocupado por las trayectorias en el espacio de fases decrece con el tiempo. En el límite $t \rightarrow \infty$ el conjunto de las trayectorias se convierte en un atractor extraño. Normalmente su dimensión es menor que la del espacio de fases original y fraccionaria. Es un fractal.

Para los sistemas conservativos el volumen del espacio de fases ocupado por las trayectorias es constante en el tiempo. Es el denominado teorema de Liouville para sistemas hamiltonianos. La conservación del volumen en el

espacio de fases impide el colapso del movimiento del sistema. No existen los atractores en este tipo de sistemas. El caos en sistemas conservativos viene caracterizado por el teorema KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser) [15, 16].

Para entender el teorema KAM imaginemos un hamiltoniano que consista en dos partes

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \quad (2.2)$$

con un coeficiente numérico ϵ . Supongamos que H_0 es integrable pero el hamiltoniano completo H no lo es debido a H_1 . Cuando $\epsilon = 0$ hay n constantes de movimiento F_α , donde n es la dimensión del espacio de configuraciones. Para un sistema hamiltoniano una de esas constantes de movimiento debe ser la energía.

$$F_\alpha(q_i, p_i) = cte. \quad \alpha, i = 1, 2, \dots, n \quad (2.3)$$

Estas n ecuaciones definen un toro n -dimensional en el espacio de fases $2n$ -dimensional. Por tanto, la trayectoria permanece en este toro para todo t . El movimiento es equivalente a n movimientos en una dimensión cada uno con su propia frecuencia. Si las razones entre las diferentes frecuencias son fracciones racionales, las trayectorias son todas periódicas. Si la relación entre las distintas frecuencias es irracional, el toro tiene una única trayectoria que nunca se cierra y lo recubre completamente. El movimiento se denomina cuasiperiódico. En cualquiera de los dos casos el movimiento es regular. Podemos dividir el movimiento en el toro n -dimensional en movimientos en toros bidimensionales que corresponden a cada una de las relaciones entre las distintas constantes de movimiento. Llamaremos a estos toros racionales o irracionales según que la relación de frecuencias correspondiente sea racional o no.

¿Qué sucede cuando ϵ es distinto de cero? El sistema deja de ser completamente integrable pero la energía sigue siendo una constante del movimiento. Por tanto, todas las trayectorias permanecen en la capa de energía constante. Pero, ¿qué es lo que ocurre con los toros? Los teoremas KAM y de Birkhoff-Poincaré nos dan las respuestas adecuadas a esta pregunta según el toro sea racional o no. Todos los toros racionales desaparecen, pero algunos toros irracionales permanecen. Los toros cuya relación entre frecuencias sea suficientemente irracional en el sentido de las fracciones continuas, de tal forma que se cumpla que

$$\left| \frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{m}{n} \right| > \frac{k(\epsilon)}{n^{2.5}}, \quad (2.4)$$

donde $k(\epsilon) \rightarrow 0$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$ y m y n son enteros primos entre sí, son estables bajo la perturbación ϵH_1 cuando $\epsilon \ll 1$. Cuando esto se cumple el movimiento originalmente en ese toro se perturba ligeramente dando lugar a un toro algo deformado. Para un ϵ suficientemente grande la perturbación destruye todos los toros. El último toro KAM que será destruido será aquel con la razón de frecuencias más *irracional* de todas $\omega_1/\omega_2 = (\sqrt{5} - 1)/2$, la razón áurea de los griegos.

Los toros racionales, por el contrario, son inestables bajo la perturbación y se destruyen siempre. Sin embargo, un número finito de sus trayectorias periódicas permanece. La mitad son estables y la otra mitad inestables. En la vecindad de cada una de las trayectorias estables aparece un nuevo conjunto de toros más largos y delgados. Una vez más de este conjunto de toros faltan los racionales, excepto unas pocas trayectorias periódicas y así sucesivamente. En la vecindad de cada una de las trayectorias inestables pertenecientes a los toros racionales originales el movimiento es extraño y complicado, pero no aleatorio. Ha aparecido el caos en el sistema. La estructura es autosimilar y confiere propiedades fractales a la frontera entre el movimiento regular de los toros y el movimiento caótico de los espacios intermedios. Al aumentar ϵ el tamaño del espacio de fases completamente caótico alrededor de los toros racionales destruidos aumenta y los nuevos toros creados disminuyen de tamaño hasta que para un ϵ suficientemente grande desaparecen completamente.

Por tanto, para un ϵ pequeño, una fracción finita del espacio de fases está ocupada por movimiento regular, una fracción finita está ocupada por movimiento caótico y la frontera entre ambas regiones es un fractal. Esta es la situación en un sistema hamiltoniano genérico. Este tipo de sistemas se dice que presentan un espacio de fases *mezclado*.

Conforme aumentamos la perturbación llega un momento en que los restos de movimiento regular desaparecen. Todas las trayectorias periódicas se vuelven inestables. El espacio de fases es completamente caótico. Es lo que se denomina un sistema K (de Kolmogorov).

2.1.2 Jerarquía del caos

Los matemáticos han desarrollado una detallada jerarquía de posibles comportamientos en los sistemas dinámicos. Existen tres clases básicas de sistemas, cada una más *caótica* que la anterior. Intentaremos explicar brevemente sus diferencias sin entrar en definiciones rigurosas que necesitarían la

introducción de conceptos matemáticos demasiado complicados para lo que nos interesa en esta introducción.

(a) Sistemas ergódicos: Un sistema es ergódico si su promedio espacial es igual a su promedio temporal. Es la definición que se corresponde con la idea original de Boltzmann para explicar la segunda ley de la termodinámica. La ergodicidad implica que el espacio de fases no puede dividirse en subconjuntos invariantes bajo la acción del sistema (*hipótesis ergódica*).

(b) Sistemas *mixing*: Un sistema es *mixing* si cada subconjunto del espacio de fases se dispersa de forma homogénea bajo la acción del sistema. Es una propiedad fundamental de los sistemas caóticos, como ya hemos explicado.

(c) Sistemas K: Los sistemas K son los sistemas cuyo espacio de fases es completamente caótico. A ellos no se les aplica el teorema KAM ya que la posible perturbación es tan fuerte que ya ha destruido por completo los toros invariantes. Las órbitas periódicas son todas inestables.

Todos los sistemas K son *mixing* y ergódicos. A su vez, todos los sistemas *mixing* son ergódicos, pero lo contrario no es cierto.

2.2 Caos cuántico

Una vez establecidas las características del caos en mecánica clásica, ¿qué sucede con los sistemas cuánticos? Por un lado, tenemos que la ecuación de Schrödinger es lineal, por lo que no debería aparecer el caos en sus soluciones. Por otro lado, el principio de correspondencia nos indica que la mecánica clásica debe aparecer como límite de la mecánica cuántica para escalas grandes comparadas con la longitud de onda de De Broglie.

La idea intuitiva de caos se basa en la inestabilidad del sistema ante pequeños cambios. La sensibilidad extrema a las condiciones iniciales es lo que utilizamos para definirla matemáticamente, siendo cuantificada mediante el exponente de Lyapunov. En mecánica cuántica las trayectorias dejan de tener sentido, por lo que debemos buscar otra forma de medir esta inestabilidad. Lo primero que podemos pensar es en sustituir la trayectoria clásica por la función de onda cuántica y buscar una separación de dos funciones de onda próximas producida por la evolución del sistema. Sin embargo, la linealidad de la ecuación de Schrödinger implica que la evolución es unitaria. Por tanto, si tenemos dos funciones de onda distintas como condiciones iniciales $|\phi(0)\rangle$ y $|\psi(0)\rangle$, la evolución unitaria conserva el producto escalar en

el espacio de Hilbert,

$$|\langle \phi(t) | \psi(t) \rangle|^2 = |\langle \phi(0) | \psi(0) \rangle|^2. \quad (2.5)$$

Sin embargo, una caracterización alternativa del caos clásico, sensibilidad extrema a pequeños cambios en el Hamiltoniano, en lugar de a pequeños cambios en las condiciones iniciales, sí parece que pueda trasladarse a la mecánica cuántica[17]. En la Fig. 2.1 podemos comprobar lo que sucede con la función de onda cuando cambiamos ligeramente el hamiltoniano para un sistema cuántico según estemos en la zona en que ese sistema es clásicamente regular o caótico. El solapamiento de las funciones de onda está siempre próximo a la unidad en el caso regular mientras que decrece exponencialmente en el caso caótico.

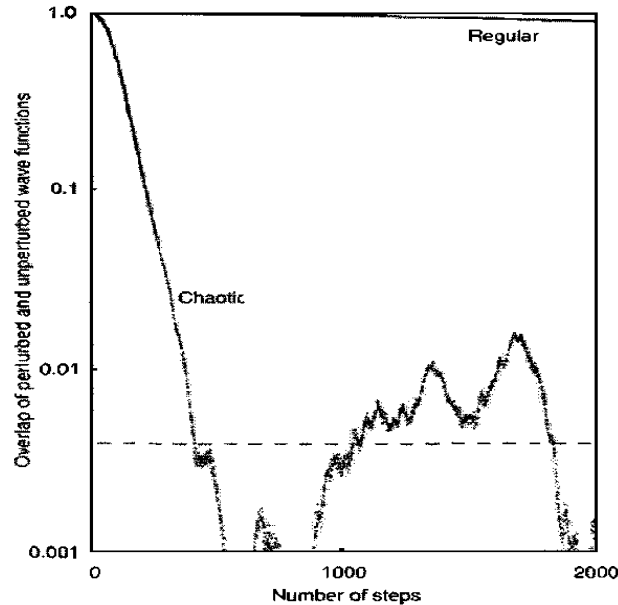


Figura 2.1: Dependencia temporal del solapamiento de dos vectores de onda del *kicked top* evolucionando a partir del mismo estado original pero con hamiltonianos ligeramente perturbados. La curva superior se refiere a condiciones correspondientes a movimiento clásicamente regular y la inferior a movimiento clásicamente caótico[18].

En este sentido recientemente se han encontrado interesantes relaciones entre el ritmo de decoherencia de un sistema cuántico y el exponente de Lyapunov de su análogo clásico[19].

En cualquier caso, la posibilidad de definir el caos cuántico de forma rigurosa utilizando la sensibilidad a pequeños cambios del hamiltoniano no está suficientemente desarrollada todavía. En la literatura científica sobre el tema solamente existen ejemplos de sistemas concretos pero no una teoría general sobre la inestabilidad del hamiltoniano ante pequeñas perturbaciones. Una definición rigurosa presenta el problema de cómo definir la perturbación de manera apropiada, ya que cada hamiltoniano tiene propiedades distintas ante la misma perturbación y ante perturbaciones de la misma *intensidad*.

Otra característica importante del caos hamiltoniano son las propiedades del espacio de fases de un sistema que cumple el teorema KAM. En mecánica cuántica, debido al principio de indeterminación de Heisenberg, nuestro espacio de fases está discretizado en celdas de volumen h^N , por lo que la frontera fractal entre el movimiento regular y caótico, que hemos visto que caracterizaba el caso hamiltoniano, desaparece.

Estas y otras dificultades provocan que no exista todavía ninguna definición de caos cuántico universalmente aceptada. En buena parte de la literatura simplemente se utiliza caos cuántico cuando hablamos de lo que sucede con los sistemas cuánticos cuyo análogo clásico es caótico. Esta definición no incluye a sistemas sin límite clásico claro, como los sistemas de muchas partículas en los que las estadísticas cuánticas juegan un papel fundamental.

Gran parte de la investigación en caos cuántico se ha efectuado en el límite semiclásico. En este sentido Berry propuso una de las definiciones más ampliamente aceptadas de caos cuántico al que denominó *caología cuántica*. “La *caología cuántica* es el estudio del comportamiento semiclásico, pero no clásico, característico de los sistemas cuyo movimiento clásico exhibe caos” [20].

La principal herramienta del *caos semiclásico* es la fórmula de la traza de Gutzwiller[21]. Ya en 1917, en un artículo pionero en el campo y que fue ignorado durante muchos años, Einstein[22] advertía que la teoría de cuantización semiclásica no tenía sentido para sistemas no integrables. La fórmula de Gutzwiller resuelve este problema mediante el cálculo de un observable puramente cuántico, como es la densidad de niveles, a partir de cantidades puramente clásicas, como son las órbitas periódicas del sistema clásico, igualándolos en el límite $\hbar \rightarrow 0$.

La densidad de estados semiclásica se puede escribir como una parte suave más una parte fluctuante

$$\rho_{sc}(E) = \bar{\rho}(E) + \rho_{fl}(E), \quad (2.6)$$

la parte suave $\bar{\rho}(E)$ se puede calcular en la aproximación de Thomas-Fermi, mientras que la parte fluctuante

$$\rho_{fl}(E) = \frac{1}{\hbar^{\mu+1}} \sum_{op} A_{op}(E) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{op}(E)\right). \quad (2.7)$$

El subíndice op se refiere a que el sumatorio recorre todas las órbitas periódicas. El factor de fase depende de la acción clásica $S_{op}(E)$ de las órbitas y la amplitud A_{op} está relacionada con sus propiedades de estabilidad. El parámetro $\mu = (d-1)/2$ para sistemas integrables y $\mu = 0$ para sistemas caóticos, donde d es la dimensión del espacio.

En 1973, Percival[23] conjeturó que existían dos tipos de espectro de energías para un sistema ligado con más de un grado de libertad. El espectro regular que aparece cuando el movimiento clásico es integrable y el espectro irregular que sucede cuando no existen suficientes constantes de movimiento. La principal diferencia entre el comportamiento del espectro entre sistemas integrables y aquellos que no lo son es la posibilidad de que los niveles se crucen cuando variamos un parámetro del sistema. Si el sistema es integrable, cada nivel viene caracterizado por tantos números cuánticos como grados de libertad tiene el sistema. En sistemas integrables genéricos, los niveles se comportan como si no estuvieran correlacionados y se pueden producir cruces entre ellos. La excepción a esta regla son los sistemas de osciladores. En sistemas no integrables los niveles de energía están muy correlacionados si los estados poseen las mismas propiedades de simetría. Los cruces no se pueden producir cuando cambiamos un parámetro del sistema. En lugar de ellos tenemos los denominados cruces evitados. La aparición de cruces evitados produce repulsión entre los niveles del espectro. Esta repulsión de niveles enlaza directamente con la teoría de matrices aleatorias de la que hablaremos en el próximo apartado. El espectro de energías constituye un observable puramente cuántico, cuyas propiedades estadísticas nos permiten distinguir entre movimiento regular y caótico.

2.3 Aplicación de la teoría de matrices aleatorias al caos cuántico

La RMT (Apéndice A) fue diseñada por Wigner para tratar las estadísticas de los autovalores y autofunciones de sistemas cuánticos complejos [24]. La

idea principal es reemplazar el hamiltoniano del sistema que estamos investigando por una colectividad de hamiltonianos aleatorios con las mismas propiedades de simetría. Las primeras aplicaciones de la RMT consistieron en explicar resultados de física nuclear, que en ese momento era la única parte de la física cuyos resultados experimentales tenían la suficiente resolución a energías apropiadas[25]. Más tarde ha sido aplicada con éxito a las propiedades de las fluctuaciones espectrales en átomos y moléculas complejos[8]. Dependiendo de la simetría del sistema debemos considerar una colectividad de matrices aleatorias distintas, la colectividad de matrices ortogonales gaussianas (*Gaussian Orthogonal Ensemble* o GOE), la colectividad de matrices unitarias gaussianas (*Gaussian Unitary Ensemble* o GUE) o la colectividad de matrices simplécticas gaussianas (*Gaussian Symplectic Ensemble* o GSE).

La observación de que los resultados de la RMT se aplican no sólo a sistemas complejos con muchos grados de libertad, sino también a sistemas con pocos grados de libertad pero con dinámica clásica caótica ha sido el origen fundamental de la disciplina del caos cuántico y es, en cierto modo, equivalente al descubrimiento de movimiento irregular en sistemas clásicos sencillos.

En 1984 Bohigas, Giannoni y Schmit (BGS) propusieron su famosa conjetura: “Las fluctuaciones del espectro de sistemas cuánticos invariantes bajo inversión temporal cuyos análogos clásicos son *sistemas K* son iguales a las predichas por el GOE”. [2]. Una versión más suave formulada por los mismos autores reemplaza los sistemas *K* por sistemas menos caóticos siempre que sean ergódicos. Para sistemas que no sean simétricos bajo inversión temporal el GOE se reemplaza por el GUE.

Todavía no se ha alcanzado una demostración satisfactoria de la conjetura BGS. Todos los intentos para demostrarla se basan en algún tipo de aproximación semiclassical cuando $\hbar \rightarrow 0$.

2.3.1 Análisis espectrales

Las fluctuaciones del espectro se miden mediante estadísticos. Siguiendo a Mehta[26] definiremos un estadístico espectral como un número W que puede calcularse utilizando solamente una secuencia de niveles sin más información. Su valor medio $\langle W \rangle$ y su varianza $V_W = \langle (W - \langle W \rangle)^2 \rangle$ deben conocerse a partir de un modelo teórico. Para que un estadístico sea conveniente la desviación media entre el valor de W observado y el esperado debe ser pequeña si el modelo teórico es apropiado.

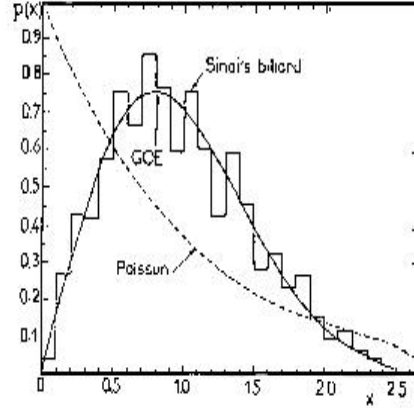


Figura 2.2: Resultados para el estadio de Sinai en los que se basó la conjetura BGS. La figura de la izquierda muestra el acuerdo de la $P(s)$ con la distribución de Wigner. Se han utilizado mil autovalores consecutivos [2].

Antes de realizar cualquier análisis de las fluctuaciones espectrales para comparar sus resultados con el valor teórico correspondiente a la teoría de matrices aleatorias necesitamos reescalar las energías del sistema con el valor de la densidad media. Este procedimiento, denominado *reescalado* será el tema principal del capítulo 2. No nos detendremos aquí a explicarlo en detalle pero, a partir de ahora, supondremos que ha sido efectuado satisfactoriamente en la secuencia de autoenergías que estamos considerando. Cuando haya posibilidad de confusión, denominaremos E_i a las energías antes del *reescalado* y ϵ_i a las energías después del *reescalado*.

Los estadísticos más importantes que se utilizan en el estudio del caos cuántico son la $P(s)$ y la Δ_3 .

La $P(s)$ se define como la distribución de espaciamientos de primeros vecinos s_i , siendo $s_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$. La $P(s)$ mide las correlaciones de corto alcance en el espectro y la repulsión de los niveles. Como hemos dicho antes los sistemas no integrables presentan repulsión entre los niveles mientras que los sistemas integrables no. Una buena aproximación a la $P(s)$ correspondiente al GOE es la distribución de Wigner.

$$P(s) = \frac{\pi}{2}s \exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right). \quad (2.8)$$

Según la conjetura BGS la distribución de Wigner se corresponde con el caso

caótico. En este caso, $P(0) = 0$ y tenemos una repulsión entre niveles lineal $P(s) \sim s$ cuando $s \rightarrow 0$. En el caso regular, por el contrario, los niveles se comportan como si no estuvieran correlacionados. La $P(s)$ sigue una ley de Poisson e^{-s} , similar a ley de desintegración de núcleos radiactivos. La estadística de Poisson se corresponde con el caso regular. No tenemos repulsión, $P(0) = 1$. La repulsión caracteriza a las distintas colectividades de matrices aleatorias. Si en lugar del GOE se calcula la distribución de Wigner para el GUE obtenemos una repulsión cuadrática $P(s) \sim s^2$ y para el GSE el resultado es una repulsión cuártica $P(s) \sim s^4$. Denominaremos β a este parámetro característico de cada una de las colectividades. Para el GOE $\beta = 1$, para el GUE, $\beta = 2$ y para el GSE $\beta = 4$. Damos una definición rigurosa de β en el apéndice A.

Para estadísticas intermedias, que se corresponderían a sistemas KAM con el espacio de fases mezclado, con partes regulares y partes caóticas, la repulsión de los niveles es intermedia entre Wigner y Poisson. Se han desarrollado numerosas distribuciones que interpolan entre los dos casos extremos. Aunque ninguna es completamente satisfactoria teóricamente, sirven para evaluar cuantitativamente el grado de caos de un sistema cuántico.

La más utilizada es la distribución de Brody[27].

$$P(s, \omega) = \alpha(\omega + 1)s^\omega \exp(-\alpha s^{\omega+1}), \quad \alpha = \left(\Gamma \left[\frac{\omega + 2}{\omega + 1} \right] \right)^{\omega+1}. \quad (2.9)$$

Esta distribución interpola entre el caso Poisson, que corresponde a $\omega = 0$ y el caso Wigner, que se corresponde con $\omega = 1$. En realidad, es conveniente remarcar que la $P(s)$ exacta para el GOE se puede ajustar a la distribución de Brody con una $\omega = 0.957$ [28]. La distribución de Wigner solamente es una buena aproximación analítica. El parámetro ω se denomina parámetro de repulsión, debido a que mide el comportamiento de la distribución de espaciamentos de primeros vecinos a cortas distancias.

Izrailev propuso otra fórmula de interpolación fenomenológica[29],

$$P(s, \beta_{ef}) = A_{\beta_{ef}} s^{\beta_{ef}} \exp \left(-\frac{\pi^2 \beta_{ef}}{16} s^2 - \left(B_{\beta_{ef}} - \frac{\pi \beta_{ef}}{4} \right) s \right). \quad (2.10)$$

La ventaja de esta fórmula es que varía suavemente entre cero, el valor para Poisson, y cuatro, que se aplica a la simetría simpléctica. Cuando $\beta_{ef} = 1$ obtenemos la distribución de Wigner del GOE y cuando $\beta_{ef} = 2$ la distribución de Izrailev es igual a la distribución de Wigner para el GUE. Las

constantes $A_{\beta_{ef}}$ y $B_{\beta_{ef}}$ se determinan a partir de la condición de normalización y la condición de que el valor medio del espaciamiento sea uno (ya se ha realizado el *reescalado* de las energías). En la Fig. 2.3 se representan la distribución de Brody y la distribución de Izrailev para distintos valores de sus parámetros de repulsión respectivos. Para β_{ef} y ω entre 0 y 1 ambas distribuciones son bastantes similares para $\omega = \beta_{ef}$ aunque se diferencian por el comportamiento para s grande. La ventaja de la distribución de Izrailev es que puede ajustar de forma correcta repulsiones mayores de 1.

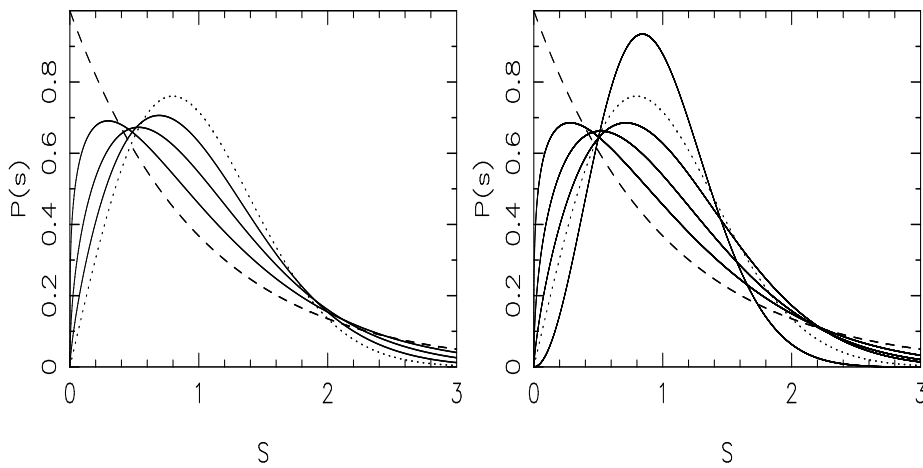


Figura 2.3: En el panel de la izquierda se representa la distribución de Brody (2.9) para valores de $\omega = 0$ (línea discontinua, equivalente a una distribución de Poisson), $\omega = 0.25, 0.5, 0.75$ (línea continua, el máximo se desplaza hacia la izquierda) y $\omega = 1$ (línea de puntos, Wigner para el GOE). En el panel de la derecha se representa la distribución de Izrailev (2.10) con $\beta_{ef} = 0$ (Poisson), $\beta_{ef} = 0.25, 0.5, 0.75, \beta_{ef} = 1.0$ (Wigner para el GOE) y $\beta_{ef} = 2.0$ (Wigner para el GUE).

Ciertos trabajos han intentado relacionar el parámetro de repulsión con la fracción del espacio de fases cubierta por trayectorias caóticas [30, 31]. Berry y Robnik supusieron una superposición de una secuencia poissoniana de niveles regulares y tantas secuencias caóticas de niveles GOE como subconjuntos aislados del espacio de fases con trayectorias caóticas. Cada secuencia recibe un peso relativo dependiendo del porcentaje de espacio de fases que ocupan las órbitas regulares y las caóticas.

Hay una diferencia fundamental entre la distribución de Berry y Robnik

y otras más fenomenológicas como la de Brody o la de Izrailev. La primera implica que hay un grupo de autovalores no correlacionado con los demás. Por tanto, para Berry y Robnik, $P(0)$ es un número entre 0 y 1. Sin embargo, en el caso de las distribuciones de Brody o de Izrailev, existe repulsión entre todos los niveles pero no es tan intensa como en el caso completamente caótico. En ambos casos $P(0) = 0$, pero $P(s) \sim s^{\beta_{ef}}$ o $P(s) \sim s^\omega$ cuando $s \rightarrow 0$. En unos pocos sistemas sencillos con análogo clásico claro en los que se conoce perfectamente el espacio de fases clásico, se han encontrado indicios de que la distribución de Berry y Robnik es correcta, aunque todavía es un tema de investigación abierto. Sin embargo, en sistemas a muchos cuerpos todas las indicaciones apuntan a una repulsión parcial para sistemas intermedios[32].

Las correlaciones de largo alcance entre niveles de energía se pueden caracterizar por la Δ_3 , que se define en el intervalo $[a, a + L]$ de la densidad de niveles acumulada $\bar{N}(E)$ como

$$\Delta_3(a, L) = \frac{1}{L} \min_{A,B} \int_a^{a+L} [N(E) - AE - B]^2 dE. \quad (2.11)$$

Por tanto, mide las desviaciones de un espectro cuasiuniforme respecto a un espectro verdaderamente equidistante. También es denominada *rigidez espectral*, debido que nos indica si el espectro tiene una cierta estructura *cuasicristalina*, esto es, rígida. Este tipo de estructura puede aparecer debido al efecto a larga distancia de la repulsión de niveles. En la práctica la Δ_3 para un espectro determinado se calcula haciendo la media para distinta a . El procedimiento más estándar, introducido por Bohigas et al.[2], es el de utilizar los intervalos $[0, L]$, $[L/2, 3L/2]$, $[L, 2L]$,... y calcular el promedio de la $\Delta_3(L)$. En el límite GOE $\Delta_3 \sim L/15$ para L pequeño, mientras que $\Delta_3 \sim \pi^{-2} \ln L$ para L grande. En el caso de estadística de Poisson $\Delta_3(L) = L/15$ en todo el intervalo de L .

2.3.2 Intentos de demostrar la conjetura BGS

El primer y más exitoso intento de demostrar teóricamente la conjetura BGS lo realizó Berry en 1985. Berry intentó calcular la Δ_3 de forma semi-clásica y comprobó que, para sistemas caóticos, el resultado coincidía con los valores de la teoría de matrices aleatorias. También calculó correcciones no universales, esto es, dependientes del sistema, a la forma de la $\Delta_3(L)$ para L grande.

Utilizando la fórmula de la traza de Gutzwiller para la densidad (2.7) y la definición de la Δ_3 (2.11) podemos comprobar fácilmente que el resultado es un doble sumatorio sobre órbitas periódicas. Berry[33] lo simplificó aún más convirtiéndolo en una integral sobre todos los periodos.

$$\Delta_3(L) = \frac{2}{\hbar^{2\mu}} \int_0^\infty \frac{dT}{T^2} \phi(T) G\left(\frac{DTL}{2\hbar}\right), \quad (2.12)$$

donde la función ϕ es un sumatorio doble sobre todas las órbitas periódicas,

$$\phi(T) = \left\langle \sum_i \sum_{j,+} A_i A_j \cos\left(\frac{S_i - S_j}{\hbar}\right) \delta\left(T - \frac{1}{2}(T_i + T_j)\right) \right\rangle. \quad (2.13)$$

El signo positivo en el segundo sumatorio indica que la suma se restringe a los periodos $T_j > 0$. Las A_i son las amplitudes y las S_i las acciones que aparecen en (2.7) y D es el espaciamiento medio del espectro. La función

$$G(y) = 1 - \left(\frac{\text{sen}(y)}{y}\right)^2 - 3\left(\frac{d}{dy} \frac{\text{sen}(y)}{y}\right)^2 \quad (2.14)$$

no depende de las órbitas individuales j . $G(y)$ selecciona de los sumatorios en $\phi(T)$ únicamente aquellas parejas de órbitas cuyo periodo medio es mayor que $2\hbar/DL$. Comparando la ecuación (2.12) con la que nos define la relación entre la Δ_3 y la función de agrupamiento Y_2 (A.18) podemos comprobar que $\phi(T)$ nos da una cierta aproximación semiclásica para el factor de forma espectral, la transformada de Fourier de Y_2 . A partir de aquí Berry demostró la universalidad de los resultados de la teoría de matrices aleatorias para el GUE usando una aproximación diagonal a $\phi(T)$, pero solamente hasta un $L_{max} \propto \frac{1}{T_{min}}$ a partir del cual la rigidez espectral satura a un valor $\Delta_3(\infty)$. Berry y otros han demostrado numéricamente la existencia de la saturación de la Δ_3 en sistemas cuánticos y comprobado su teoría, extendiendo el resultado también al GOE. Sin embargo, como veremos en el capítulo tercero, también se han cometido errores en el establecimiento de la saturación de la rigidez espectral para ciertos sistemas debido a un procedimiento de reescalado equivocado.

Otros intentos de demostrar la conjetura BGS utilizan teorías de campos y supersimetría o complejos argumentos de teoría de grupos. No vamos a tratar estos aspectos, mucho más matemáticos y con menos interés para los problemas abordados en este trabajo.

2.4 Billares cuánticos

El estudio de los billares cuánticos ha sido fundamental para alcanzar el nivel de comprensión actual del caos cuántico. Los primeros resultados importantes en esta materia se basaron en cálculos en billares, que, debido a su sencillez, tienen un tratamiento matemático mucho más simple que otros sistemas mecánicos, lo que permite demostrar rigurosamente las propiedades dinámicas de su movimiento clásico y una resolución sencilla del sistema cuántico.

Un billar clásico consiste en una partícula que se mueve libremente en un dominio compacto de un espacio d -dimensional y que se refleja elásticamente en la frontera de ese dominio. Debido a que sólo existen choques elásticos la energía y el módulo del momento son constantes del movimiento para este tipo de sistemas. La dinámica, regular, mezclada o caótica, es la misma para todas las energías. $d = 2$ es la primera dimensión para la que la dinámica del sistema no es trivial, por este motivo la mayoría de los ejemplos estudiados se restringen a este caso. El círculo y la elipse son ejemplos de billares integrables. Dos casos muy estudiados de billares caóticos son el billar de Sinai, que consiste en un cuadrado del que se ha extraído un círculo concéntrico, y el estadio de Bunimovich, que consiste en dos rectas de la misma longitud que se han unido por dos semicírculos. Sinai y Bunimovich han demostrado que ambos billares pertenecen a la clase de sistemas de Bernoulli, un tipo de sistemas K, la forma más fuerte de dinámica caótica[34, 35, 36].

El análogo cuántico de un billar clásico se define como la ecuación de Schrödinger estacionaria con condiciones de frontera de Dirichlet, esto es, la función de onda se anula en la frontera. El hamiltoniano de la partícula es simplemente el laplaciano multiplicado por algunas constantes, por tanto, el problema es equivalente matemáticamente a las vibraciones de una membrana. Por este motivo el caos cuántico en este contexto ha sido también denominado caos ondulatorio. Los fenómenos del *caos cuántico* ocurren de forma paralela en las teorías ondulatorias.

Las propiedades de la dinámica clásica dependen de la forma de la frontera. Lo mismo ocurre con las propiedades de las fluctuaciones espectrales del sistema cuántico. La fórmula de Weyl[21] nos da la densidad media para los billares cuánticos y se utiliza para hacer el reescalado de su espectro. Esta fórmula es equivalente a la aproximación de Thomas-Fermi.

Las numerosas investigaciones numéricas concuerdan con la conjetura BGS que fue formulada por Bohigas et al. a la vista de los resultados de

la $P(s)$ y la Δ_3 en el estadio de Sinai y en el estadio de Bunimovich (Fig. 2.2). Además, en billares cuánticos regulares las fluctuaciones espectrales siguen la ley de Poisson.

En los billares también se ha estudiado detalladamente la transición entre el movimiento regular y movimiento caótico para sistemas con espacio de fases mezclado. El primero de estos trabajos es el de Robnik[37]. Estudiando un sistema KAM y aumentando el parámetro de no integrabilidad, encontró que la distribución $P(s)$ cambiaba suavemente desde Poisson a GOE de una forma que podía ajustarse bastante satisfactoriamente por la distribución de Brody (2.9).

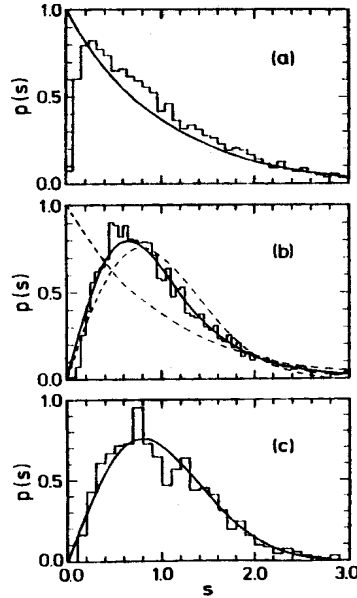


Figura 2.4: Distribuciones $P(s)$ para distintos resonadores de microondas rectangulares de longitudes $a = 16.5 \dots 51.0$ cm, $b = 20$ cm, para dos rangos de frecuencia (a) 5-10 GHz, (b) 15-18 GHz[40]. En el caso (a) el hueco para s pequeña es debido a la resolución del montaje experimental que no permite distinguir resonancias demasiado próximas. Al aumentar la energía en el caso (b) hay que tener en cuenta el efecto de la forma de la antena. El billar deja de ser rectangular y se vuelve caótico. El caso (c) es para un resonador con forma de un cuarto de estadio[3].

Los billares cuánticos pueden ser simulados experimentalmente por cavi-

dades de microondas (Fig. 2.4). Parámetros como el tamaño y la forma de la cavidad y el rango de frecuencias pueden modificarse para estudiar experimentalmente aspectos del caos cuántico.

2.5 Localización dinámica

En un sistema clásico al que se le aplica una fuerza externa dependiente del tiempo, la probabilidad de ocupación en el espacio de fases se propaga de forma difusiva. No ocurre lo mismo en su análogo cuántico. Después de algún tiempo característico, el paquete de ondas detiene su difusión en el espacio de momentos. Es el fenómeno de localización dinámica. Está muy relacionado con la localización en el espacio de configuraciones, típica de los sistemas desordenados[38]. En ambos casos hay una supresión de la difusión clásica. El paquete de onda se relaja a un estado localizado y, por tanto, no ergódico.

Para medir la localización de las funciones de onda, Izrailev[39] introdujo la longitud de localización de la entropía

$$l_h = \exp(h), \quad (2.15)$$

donde h es la entropía de la información de las funciones de onda

$$h = - \sum_n |\phi(n)|^2 \log |\phi(n)|^2, \quad (2.16)$$

y $\phi(n)$ son las componentes de las funciones de onda expresadas en la base del espacio de momentos.

En el caso de localización extrema la distribución de espaciamientos de los estados localizados obedece a la estadística de Poisson mientras que para estados completamente deslocalizados la distribución de espaciamientos sigue la distribución de Wigner. En estudios numéricos sobre matrices banda se ha encontrado que el parámetro de repulsión de la distribución de Izrailev, la fórmula 2.10, escala con la longitud de localización como,

$$\beta_{ef} = \beta \frac{\langle l_h \rangle}{l_e}, \quad (2.17)$$

donde l_e es la máxima longitud de localización de la entropía posible, un valor que depende únicamente de la máxima dimensión del espacio que se esté considerando.

Las *cicatrices* que las órbitas periódicas clásicas dejan en las funciones de onda son una de las causas que se han identificado para la localización dinámica[41]. En experimentos de ionización por microondas del átomo de hidrógeno se ha demostrado que las cicatrices reducen la difusión cuántica[42].

2.6 Caos cuántico en sistemas de muchos cuerpos

En sistemas de muchos cuerpos no tenemos un límite clásico claro, ya que el principio de exclusión de Pauli y las estadísticas cuánticas juegan un papel preponderante. Para el análisis del caos cuántico en este tipo de sistemas no podemos basarnos en un estudio previo de su análogo clásico. Sin embargo, la estadística de las fluctuaciones de los niveles de energía y la estadística de las funciones de onda nos proveen de herramientas apropiadas para estudiar el grado de caos y complejidad del sistema.

Ya en el famoso artículo de N. Bohr sobre el núcleo compuesto[43] se introducían conceptos estadísticos para explicar el comportamiento del núcleo a energías de excitación de varios MeV.

Inspirado por esas ideas Wigner desarrolló la teoría de matrices aleatorias. En la Fig. 2.6 podemos ver la distribución de espaciamientos de primeros vecinos de la colectividad de datos nucleares (NDE, *Nuclear Data Ensemble*) en función de la variable s (el espaciamiento en unidades del espaciamiento medio D). Los datos se obtuvieron mediante espectroscopía de tiempo de vuelo de neutrones. Por tanto, se refieren a energías de excitación por encima de la barrera de emisión de neutrones. La NDE se compone de 1726 espaciamientos. Los niveles elegidos son aquellos medidos con núcleos blanco de espín y paridad 0^+ . Al ser neutrones lentos de baja energía en la difusión sólo interviene la onda S. Por tanto, todas las resonancias del núcleo compuesto por el blanco más un neutrón tienen el mismo espín y paridad $J^\pi = 1/2^+$ para distintos núcleos. La curva denominada como GOE se refiere a las predicciones de la teoría de matrices aleatorias para la $P(s)$ (apéndice A), el acuerdo es excelente y más impresionante aún teniendo en cuenta que es una teoría sin parámetros ajustables. Podemos comprobar también que los resultados para las correlaciones de largo alcance concuerdan perfectamente con las predicciones de la RMT, Fig. 2.6.

La nueva física estadística de Wigner difiere de modo fundamental de la

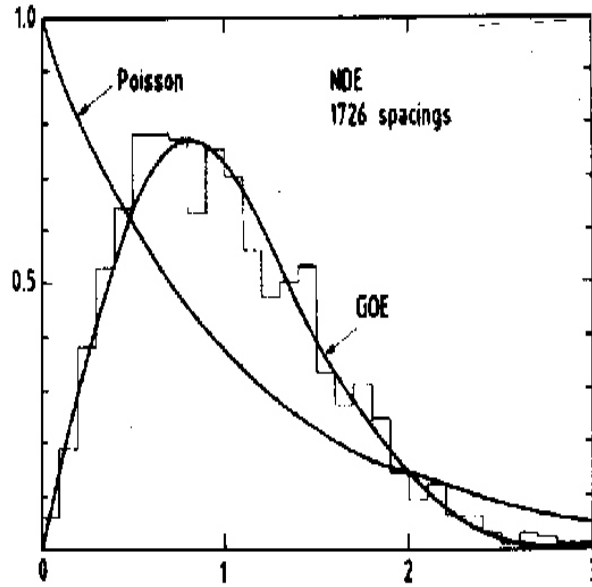


Figura 2.5: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos $P(s)$ para el NDE. Se muestran también el resultado de la distribución GOE y de la distribución de Poisson[44].

aplicación normal de los conceptos estadísticos. En la mecánica estadística estándar se considera una colectividad de sistemas físicos idénticos, todos gobernados por el mismo hamiltoniano, pero con condiciones iniciales distintas, y se calculan los valores de las funciones termodinámicas haciendo el promedio sobre la colectividad. Wigner consideró colectividades de sistemas dinámicos gobernados por hamiltonianos distintos pero con una propiedad de simetría común. Se buscan propiedades genéricas, comunes a casi todos los miembros de la colectividad y que vengan determinadas únicamente por sus propiedades de simetría. Los resultados obtenidos se aplican a sistemas físicos individuales siempre que exista un teorema ergódico adecuado. La hipótesis ergódica utilizada es que el promedio sobre la colectividad es igual a un promedio sobre una sección suficientemente grande del espectro de casi cualquier miembro de la colectividad. En algunos casos específicos esta hipótesis ha podido ser probada[28].

Cuando un sistema tiene números cuánticos conservados como el espín o la paridad, el hamiltoniano se puede transformar a una forma que sea diagonal

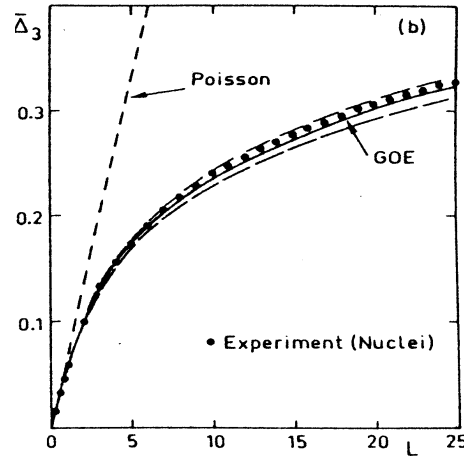


Figura 2.6: Δ_3 del NDE. Se muestran los resultados para el GOE y para la estadística de Poisson[44].

por bloques. Cada bloque se caracteriza por el valor fijo de un conjunto de números cuánticos. En todos los casos supondremos que esa operación ya se ha realizado y tratamos con un solo bloque. La teoría de matrices aleatorias se aplica a cada uno de estos bloques por separado.

En general, en sistemas de muchos cuerpos solamente tenemos clara una imagen semiclásica en la aproximación del campo medio. Cada una de las partículas (en realidad deberíamos hablar de cuasipartículas) que componen el sistema se mueven en el campo medio autoconsistente que crea el resto. Dependiendo de la simetría o ausencia de esta el campo medio determina el movimiento regular o caótico de las partículas individuales. En el campo medio nuclear esférico, consistente esencialmente en un oscilador más términos de superficie y el término espín-órbita, los nucleones se mueven en órbitas de forma regular. Al añadir la interacción residual es cuando introducimos el caos en el sistema. La representación del campo medio, por tanto, permite el análisis de la transición del movimiento de cuasipartículas independiente y regular al movimiento complicado de los estados complejos. En este caso podemos calcular la complejidad de las funciones de onda de los estados de muchos cuerpos utilizando el concepto de localización en el espacio de Hilbert. La entropía de la información de un estado $|\alpha\rangle$ se define

como

$$I_H(|\alpha\rangle) = \sum_{i=1}^d -|\omega_i^\alpha|^2 \log(|\omega_i^\alpha|^2), \quad (2.18)$$

donde ω_i^α es el conjunto de amplitudes de este estado en la base del campo medio. Para un estado de la base $I_H = 0$ y toma su valor máximo $\log(d)$ para un estado distribuido uniformemente. Obviamente, no pueden existir muchos autoestados con todas sus componentes iguales a $1/d$. La ortogonalidad y otras simetrías como la invariancia bajo rotaciones y la invariancia bajo inversión temporal dan lugar a un valor medio menor. Para las matrices del GOE $\langle I_H \rangle = \log(0.48d)$ (Apéndice A). Para eliminar la dependencia en la dimensión y poder comparar distintos estados se introduce la longitud de localización de la entropía normalizada[45, 39] como

$$l_H = \frac{\exp(I_H)}{0.48d}. \quad (2.19)$$

Para evitar las fuertes fluctuaciones de un estado a otro definimos la longitud de localización media[39]

$$\langle l_H \rangle = \frac{\exp(\langle I_H \rangle)}{0.48d}, \quad (2.20)$$

donde $\langle l_H \rangle$ se obtiene haciendo la media de la entropía sobre todos los autoestados de la misma matriz. El valor de la $\langle l_H \rangle = 1$ para el GOE. En este caso, los autoestados están máximamente deslocalizados en el espacio de Hilbert. Para Poisson $\langle l_H \rangle = 0$ y las autofunciones están localizadas en el espacio de Hilbert.

La entropía de la información en la base del campo medio crece con la energía de tal forma que el grado de complejidad se puede tomar como escala de temperaturas alternativa[46]. Esto permite relacionar la termalización con el caos en sistemas cuánticos de muchos cuerpos y añade una nueva justificación para la utilización privilegiada de la base del campo medio.

En las próximas secciones revisaremos la situación actual de los datos experimentales sobre caos cuántico en sistemas de muchos cuerpos con especial hincapié en el núcleo atómico pero con datos también de la física atómica y molecular.

2.6.1 Núcleos atómicos

El núcleo atómico es el paradigma de sistema cuántico complejo. Un núcleo se compone de A nucleones con N neutrones y Z protones, $A = N + Z$. Todos ellos interactúan fuertemente a distancias del orden del fm y energías del orden del MeV.

La sección eficaz de difusión elástica de neutrones lentos por núcleos pesados muestra resonancias agudas con anchuras que van de los 3 meV a 1eV y espaciamientos entre ellas de 1 eV. Estas resonancias no pueden ser debidas a la interacción con un solo nucleón, ya que una estimación de la anchura en ese caso nos daría un resultado del orden del MeV. Son necesarias las interacciones con muchos nucleones del blanco y que la función de onda de la resonancia sea suficientemente compleja. En la práctica las propiedades de las resonancias individuales son imposibles de dilucidar. Sin embargo, con argumentos estadísticos sencillos podemos calcular la sección eficaz media sobre muchas resonancias si suponemos que la energía disponible se distribuye uniformemente sobre todos los nucleones participantes de forma que el nucleón incidente y los nucleones blanco forman un nuevo sistema, el núcleo compuesto[43].

La imagen del núcleo compuesto recibió un espaldarazo importante gracias al trabajo de Ericson[47]. Demostró que la sección eficaz en los núcleos puede tratarse como una variable aleatoria. Sus ideas se aplican al régimen en que las resonancias se superponen fuertemente. A una energía dada, la sección eficaz se debe a la superposición de muchas resonancias. Si cada resonancia contribuye con una amplitud aleatoria, la sección eficaz fluctúa de forma aleatoria frente a la energía. Los máximos y los mínimos no están relacionados con resonancias individuales. A pesar de ello, las fluctuaciones no son un ruido blanco y son reproducibles de un experimento a otro, son producto del comportamiento estocástico interno del núcleo.

Sin embargo, antes de la observación de Ericsson la imagen que se tenía del núcleo atómico era muy diferente. A ciertos valores de Z y de N , la energía de ligadura por nucleón del núcleo presenta máximos. Son los denominados números mágicos de protones y de neutrones. Estos datos sugerían un modelo de capas para el núcleo similar al de la física atómica. Para reproducir estos números fue necesario añadir al modelo de capas una fuerte interacción espín-órbita[48, 49] (Apéndice B). En la imagen resultante cada nucleón se mueve en el campo medio generado por el resto de nucleones. Además, todos ellos interactúan mediante una interacción residual a dos cuerpos. Así

constituído, el modelo reproduce con gran éxito el espectro de baja energía de los núcleos.

En el espacio de los determinantes de Slater de los estados del campo medio, la matriz hamiltoniana del modelo de capas adquiere una estructura muy compleja. En esta base, los elementos de matriz tienen prácticamente una distribución gaussiana, añadiendo una nueva justificación a la teoría de matrices aleatorias.

Los núcleos son capaces todavía de otro tipo de movimiento. El núcleo se puede ver como una pieza de materia densa pero elástica con forma esférica o elipsoidal. Este objeto puede vibrar y, si está deformado, rotar. Muchos núcleos poseen modos colectivos, manifestaciones cuánticas de las vibraciones y las rotaciones.

Resumiendo, el movimiento del núcleo se compone de movimiento de partícula independiente acoplado a través de la interacción residual, modos colectivos debidos a la deformación y una componente estocástica. Estos elementos tienen importancia relativa distintas dependiendo de la energía de excitación y el número atómico. En los últimos años, sin embargo, el modelo de capas ha logrado integrar todos estos componentes de forma satisfactoria [50].

Uno de los objetivos de este trabajo es ayudar a responder a la pregunta de cómo se integra el modelo de capas con la imagen del núcleo como objeto cuántico caótico con propiedades descritas por la teoría de matrices aleatorias.

2.6.2 Fluctuaciones espectrales

Ha habido numerosos estudios sobre las fluctuaciones espectrales de los espectros experimentales de los núcleos atómicos. Para analizar las fluctuaciones espectrales de los niveles experimentales es crucial que las secuencias de niveles del mismo espín y paridad sean completas (no falten niveles entre medias) y puras (no haya niveles con asignaciones incorrectas de sus números cuánticos). Un espectro que contenga niveles con distintos números cuánticos producirá una distribución de espaciamientos de tipo Poisson, debido a que los niveles en distintas cajas del hamiltoniano no están correlacionados. Una de las ventanas de energía donde se encuentran datos de suficiente calidad es la que forman los niveles del NDE del que ya hemos hablado anteriormente.

Cerca del estado fundamental se han investigado también las fluctuaciones espectrales. El primer trabajo en esta región fue realizado por Brody

et al.[51] que encontraron algunas evidencias de comportamiento tipo GOE. El grupo de von Egidy[52, 53] ha efectuado análisis mucho más detallados en un conjunto de datos provenientes de 75 isótopos entre el ^{20}F y el ^{250}Cf con 1761 niveles en total. Los datos se separan en secuencias puras y se analizan por separado uniendo al final todos los espaciamientos en el mismo conjunto para hallar la $P(s)$. El resultado obtenido está entre Wigner y Poisson. Resultados más completos en la misma línea fueron obtenidos por Shriner et al.[54]. Estos autores analizaron un conjunto de datos con 988 espaciamientos de un total de 60 isótopos. Mostramos los resultados en la Fig. 2.7. Todas las secuencias empezaban en el estado fundamental. Pudieron analizar por separado regiones de masa distinta y encontraron una dependencia clara en A . La distribución de espaciamientos para núcleos ligeros era tipo GOE, mientras que la de núcleos pesados tendía a Poisson, sugiriendo que el comportamiento colectivo, propio de los núcleos pesados estaba en el origen de la estadística de Poisson. Se sabe muy poco de las fluctuaciones

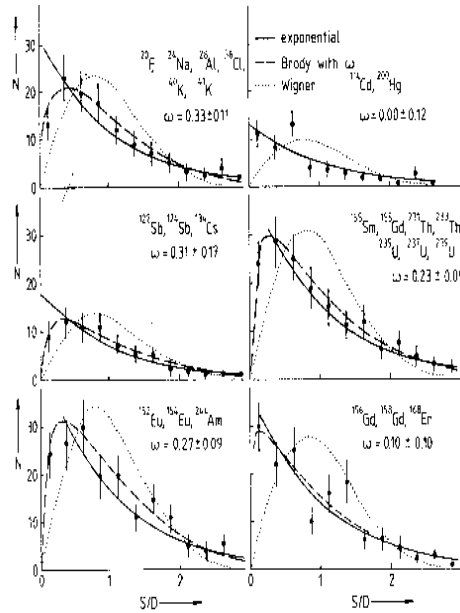


Figura 2.7: Resultados experimentales del ajuste de ω a la distribución de espaciamientos en distintas regiones de la carta nuclear[54].

espectrales de núcleos individuales. Los conjuntos de niveles más completos se conocen para los núcleos ^{26}Al , analizado por Mitchell et al.[55, 56] y para

el ^{116}Sn , analizado por Raman et al.[57]. Estos autores presentaron un esquema de niveles casi completo para el ^{116}Sn desde el estado fundamental hasta una energía de excitación de 4.3 MeV. En total tuvieron en cuenta 76 niveles y obtuvieron un resultado intermedio entre Poisson y Wigner. El parámetro de Brody se ajusta en este caso a $\omega = 0.51 \pm 0.19$. Como vemos el error es muy grande. En el caso del ^{26}Al se analizaron unos 100 niveles entre $E_x = 0 - 8$ MeV el resultado del ajuste del parámetro de Brody fue de $\omega = 0.47 \pm 0.14$. Este resultado fue interpretado desde el punto de vista de la rotura de la simetría de isoespín debido a la interacción coulombiana. Cálculos en el modelo de capas incluyendo esta interacción debidos a Endt et al.[58] y a Ormand y Broglia[59] son consistentes con esta interpretación.

Sin embargo, hay que tener en cuenta que muchos de los niveles utilizados tienen varias asignaciones posibles de momento angular. En este caso se ha elegido la más probable para poder tener suficientes espaciamentos y poder hacer estadística con ellos. También es posible que en algunas de las secuencias falten niveles intermedios. Para secuencias de niveles tan cortas añadir o quitar un sólo nivel puede cambiar apreciablemente el resultado del cálculo de los espaciamentos, debido no sólo a los espaciamentos alrededor del nivel afectado sino al cambio en la función $\bar{\rho}(E)$ utilizada para efectuar el *reescalado*. Existen, por tanto, numerosas fuentes de error incontroladas. Sin menoscabar el valor de estos estudios experimentales podemos concluir que no son suficientemente fiables para establecer los dominios del caos cuántico cerca del estado fundamental de los núcleos atómicos.

2.6.3 Anchura de las resonancias

La RMT predice que la distribución de anchuras parciales de las resonancias tiene la forma de Porter-Thomas[60]. Antes de comparar los datos experimentales es necesario eliminar los factores de penetración debido a barreras de Coulomb o de momento angular para las anchuras parciales medidas. Los datos sobre la anchura de las resonancias fueron los primeros resultados experimentales que se compararon con las predicciones de la RMT[25, 61]. Más recientemente se ha demostrado con mejor estadística que las anchuras parciales de las resonancias de protón [62] y neutrón[63] son consistentes con los resultados del GOE.

2.6.4 Átomos

Rosenzweig y Porter[64] fueron los primeros en investigar las propiedades de las fluctuaciones del espectro de átomos complejos. Su artículo fue el primero en utilizar los conceptos de la RMT fuera del ámbito de la física nuclear y el que demostró que sus resultados eran aplicables a cualquier sistema cuántico complejo.

El trabajo reciente de Flambaum et al.[8] sobre el átomo de Ce ha aplicado un modelo realista y comparado sus resultados con las predicciones del GOE. Por encima de 1 eV de energía de excitación los estados adquieren una estructura compleja. Cada estado es una superposición lineal de muchos estados de la base, de la misma forma que en el modelo de capas en física nuclear.

2.6.5 Moléculas

En una molécula poliatómica existen tres tipos de excitaciones con escalas de energía distintas, electrónicas (de unos cuantos eV), vibracionales (con una escala de 0.1 eV) y rotacionales (con una escala de energía de 0.1 meV). En general no existe la simetría esférica, sino que la molécula pertenece a un grupo puntual de simetría. La moderna espectroscopía láser es capaz de resolver el complejo espectro de esas moléculas incluso a la más alta densidad. En este caso una descripción individual de los niveles es imposible y se necesita un análisis estadístico.

La molécula de NO_2 es un ejemplo particularmente interesante y ha jugado un papel especial en la aplicación de los conceptos de la RMT. Los trabajos de Haller et al.[65] y Zimmerman et al. [66, 67] demostraron que la estadística de las fluctuaciones sigue las predicciones del GOE y la distribución de intensidades es compatible con la ley de Porter-Thomas. Leitner et al.[68] compararon la estadística del espectro y la dinámica clásica del NO_2 y también del C_2H_4^+ .

Los trabajos de Borondo et al.[69] han estudiado de forma similar el espectro y la dinámica clásica para la molécula de LiCN. Además han realizado un análisis de las órbitas periódicas clásicas de sus electrones y su relación con las cicatrices de las funciones de onda cuánticas de la molécula, estableciendo interesantes similitudes entre fenómenos del caos cuántico de sistemas a un cuerpo, que se estudia en los billares y otros sistemas sencillos, y fenómenos del caos cuántico en sistemas de muchos cuerpos.

2.7 Interacciones a dos cuerpos

La densidad de niveles del GOE sigue la ley del semicírculo de Wigner (A.8). Esto es debido a que sus elementos de matriz no están correlacionados y representan fuerzas a N cuerpos. Para corregir estas características no físicas se introdujeron las colectividades de matrices gaussianas aleatorias embebidas (EGOE, *Embedded Gaussian Orthogonal Ensembles*)[70] que, en general, utilizan interacciones a k cuerpos. El EGOE(k) se define suponiendo los elementos de matriz de un hamiltoniano a k cuerpos entre los estados de k partículas variables aleatorias gaussianas independientes. En el espacio de las k partículas es el GOE, pero se proyecta en un espacio de m partículas que ocupan n niveles de partícula independiente degenerados, $k \leq m \ll n$. Para $k = 2$, el EGOE(2) también se denomina colectividad de matrices aleatorias con interacciones a dos cuerpos (TBRE, *Two-body random ensemble*). El TBRE es una suposición realista para la física nuclear. Cuando proyectamos nuestra interacción del espacio de 2 partículas a un espacio de m partículas, los elementos de matriz de todo el hamiltoniano se construyen como combinaciones lineales de los elementos de matriz a dos cuerpos. Los elementos de matriz finales de la matriz hamiltoniana están fuertemente correlacionados. No son independientes, como supone el GOE. Si representamos la matriz en la base del campo medio, la mayoría de sus elementos de matriz no diagonales son nulos.

Lamentablemente las complejidades añadidas en el TBRE impiden cálculos analíticos parecidos a los que se pueden hacer en el GOE. Sin embargo, extensivos cálculos numéricos han llegado a la conclusión de que las propiedades de las fluctuaciones espectrales del TBRE son indistinguibles de las del GOE[28]. Sin embargo, el comportamiento medio de sus observables es distinto. La densidad media de niveles en el límite de $n \rightarrow \infty$ y $m \rightarrow \infty$, siendo n el número de órbitas y m el número de partículas que llenan las órbitas, es una gaussiana. Para un número finito de partículas y órbitas la densidad media se puede parametrizar por una gaussiana con correcciones (véase la sección 2.7).

Para describir un núcleo de forma realista necesitamos el campo medio, que se representa mediante una interacción a un cuerpo, y la interacción residual a dos cuerpos. La colectividad de matrices aleatorias correspondiente es el denominado EGOE(1+2). Como su propio nombre indica, corresponde a considerar un GOE para la interacción a un cuerpo y otro en el espacio de dos cuerpos. En este caso además de la dimensión del espacio existe

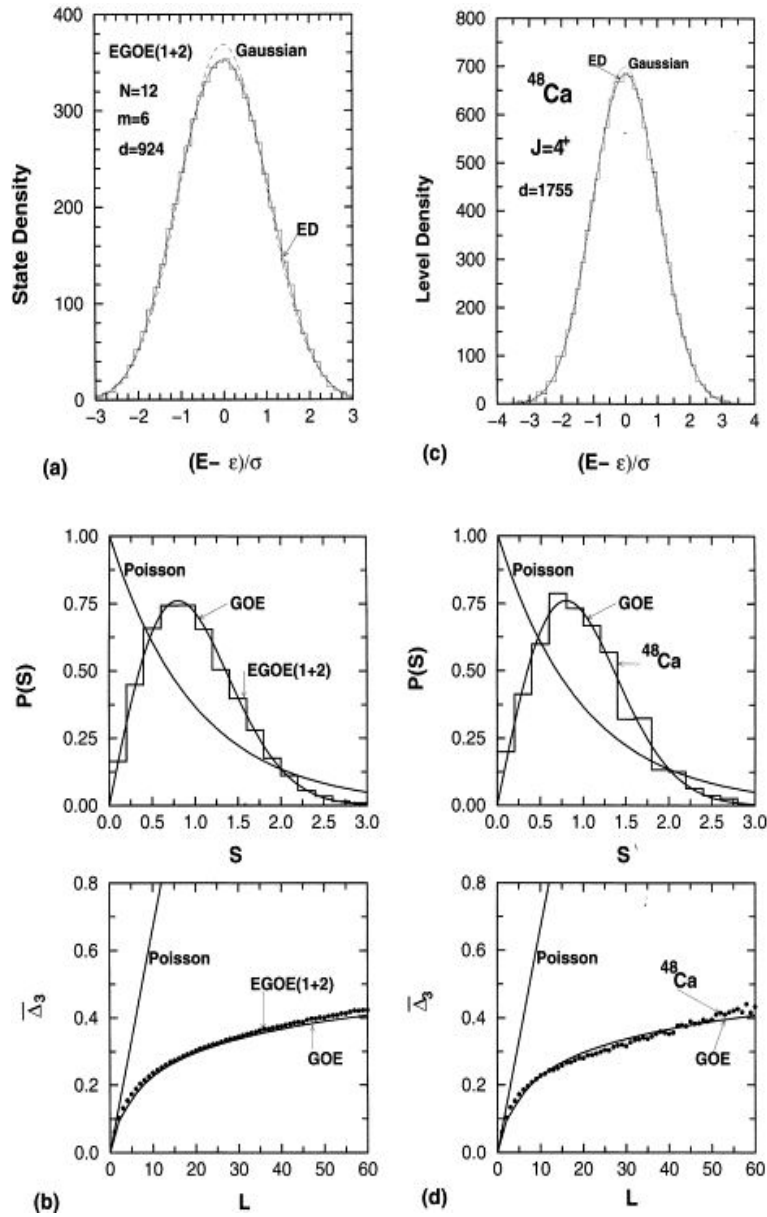


Figura 2.8: Comparación entre el EGOE(1+2) y los resultados del modelo de capas para el estado $J^\pi = 4^+$ del ^{48}Ca . En las figuras se muestran los resultados para la densidad de estados, la distribución de espaciamientos entre próximos vecinos y la $\Delta_3(L)$ [71].

otro parámetro en la colectividad, que es la relación entre el espaciamiento medio de los estados correspondientes al EGOE(1) y los correspondientes al EGOE(2). En la Fig. 2.8 se representa la comparación entre los principales estadísticos del espectro para una matriz del modelo de capas y una colectividad EGOE(1+2).

2.8 Espectroscopía estadística

La espectroscopía estadística fue concebida como una unión de los métodos microscópicos del modelo de capas y los análisis estadísticos de la teoría de matrices aleatorias. Las técnicas estadísticas se utilizan para reducir la complejidad de los cálculos sin sacrificar la información esencial de los resultados. En la espectroscopía estadística se mantiene un contacto siempre con el hamiltoniano real del problema. Sin embargo, renunciamos a un cálculo de los autovalores individuales y nos concentramos en la dependencia de los observables físicos con la energía y otras variables[72].

El uso del espacio de valencia finito en el modelo de capas permite expandir la dependencia en energía u otras cantidades de cualquier observable en términos de los momentos de la distribución. La dependencia en energía de los valores esperados o de las intensidades de excitación de un operador se puede separar en dos partes, una parte secular que se corresponde con cambios lentos, sólo importantes a distancias de varios estados, y las fluctuaciones correspondientes a diferencias entre estados vecinos. La misma separación se puede caracterizar en términos de momentos de las respectivas distribuciones. Los momentos de orden bajo se corresponden con la variación secular y los momentos de orden alto con las fluctuaciones. En la espectroscopía estadística suponemos que las variaciones lentas de la distribución son las características importantes del sistema y que una expansión de la distribución se puede limitar a los momentos más bajos.

La justificación de ese punto de vista proviene, en parte, del estudio de las colectividades de matrices aleatorias. Las fluctuaciones en la distribución de las cantidades físicas sólo dependen de la clase de universalidad a la que pertenezca un sistema y no son propiedades específicas de un hamiltoniano concreto.

Por tanto, la complejidad de los cálculos microscópicos en espacios grandes puede ser evitada sin la pérdida de información esencial. Debido al gran número de grados de libertad presentes en los núcleos domina el efecto del

teorema central del límite, las distribuciones son gaussianas y están dominadas por unos pocos momentos bajos. Por supuesto, hay características de la dinámica nuclear que no puede ser explicadas por la espectroscopía estadística. Los movimientos colectivos de los nucleones no pueden ser tratados con esta teoría y no ganamos información de los estados concretos que permita distinguirlos de los estados adyacentes.

2.8.1 Espectroscopía estadística y caos

Recientemente ha sido puesta de manifiesto la relación entre la espectroscopía estadística y el caos cuántico en sistemas nucleares[73, 74, 75]. Extensivos cálculos con matrices de gran dimensión han llegado a la conclusión de que en la zona caótica del espectro la espectroscopía estadística llega a resultados muy buenos, comparables a cálculos realistas del modelo de capas, mientras que en la zona regular los resultados pueden diferir bastante de los cálculos realistas. Las intensidades de las transiciones han sido propuestas como un nuevo estadístico capaz de distinguir entre orden y caos.

2.9 Dinámica de niveles

En numerosos sistemas experimentales los niveles de energía pueden depender de un parámetro externo. El ejemplo más claro es el de un átomo de hidrógeno en un campo magnético. El estudio de la evolución de los autoestados de un hamiltoniano en términos de un parámetro es lo que denominamos dinámica de niveles. Una introducción a su estudio aparece en el libro de Nakamura[76].

Uno de los conceptos más importantes a tener en cuenta cuando se estudia la dinámica de niveles es el de cruce evitado. En sistemas no es integrables no pueden tener lugar degeneraciones excepto las denominadas *degeneraciones accidentales*, que solamente aparecen en hamiltonianos no genéricos, esto es, tienen medida cero. Cuando se varía un parámetro del hamiltoniano en sistemas no integrables los autovalores no se cruzan. En su lugar aparecen los denominados cruces evitados.

Si en el intervalo del parámetro en que los dos autovalores tienen el cruce evitado ambos están alejados del resto de energías del sistema, éste se puede

analizar con un modelo de dos niveles.

$$\begin{pmatrix} a_1 & V \\ V & a_2 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

La diagonalización de esta matriz nos da la distancia entre los dos autovalores,

$$\delta E = \sqrt{(a_1 - a_2)^2 + 4|V|^2}. \quad (2.22)$$

Los valores de los elementos de la matriz dependen del parámetro λ y se toman cerca del valor de λ donde ocurre el cruce. Para que el cruce sea real y no evitado deben cumplirse tres condiciones simultáneamente: $x = |a_1 - a_2| = 0$, $y = \text{Re}V = 0$, $z = \text{Im}V = 0$. En general, x , y , z son funciones distintas de λ por lo que las tres condiciones no serán ciertas a la vez y habrá solamente cruces evitados. Si no, tendremos una degeneración accidental. Si los estados pertenecen a diferentes clases de simetría, no se pueden mezclar y $V = 0$. Un cruce real ocurrirá cuando $a_1 = a_2$. Si el sistema es invariante bajo inversión temporal (o bajo cualquier otra operación antiunitaria) $z = 0$ y las condiciones son más fáciles de cumplir.

Cada cruce evitado individual es similar a la colisión de dos partículas en un gas. Se puede describir por la velocidad de los niveles $v_\alpha = dE_\alpha/d\lambda$, la distancia de máxima aproximación y la curvatura de los niveles $K_\alpha = d^2E_\alpha/d\lambda^2$, donde λ es el parámetro variable en el hamiltoniano.

2.9.1 Gas de Pechukas-Yukawa

A menudo nos encontramos con un sistema integrable H_0 que al aplicarle una perturbación V se vuelve gradualmente caótico,

$$H = H_0 + tV, \quad (2.23)$$

donde t representa un parámetro que nos mide la intensidad de la perturbación.

Pechukas interpretó la Ec. (2.23) de una forma dinámica dándole al parámetro t el significado tiempo. De esta forma se puede establecer una correspondencia biunívoca entre la dinámica de los autovalores y el movimiento clásico de un gas de partículas interactuantes en una dimensión [77, 78]. Se identifica la energía de los autovalores de $H(t)$ como la posición de unas partículas que se mueven en una dimensión. Además se puede demostrar

que este sistema clásico es completamente integrable ya que tiene tantas constantes de movimiento como grados de libertad[79, 80].

Denominaremos a los autovalores de $H(t)$ son $x_n(t)$, donde la n es el orden en energías del autovalor y recorre toda la dimensión del espacio de Hilbert. Las correspondientes autofunciones las denominaremos $\phi_n(t)$. Los elementos de matriz de la perturbación son

$$V_{nm}(t) = \langle \phi_m(t) | V | \phi_n(t) \rangle. \quad (2.24)$$

Se puede demostrar de forma sencilla que estas cantidades satisfacen las siguientes *ecuaciones de movimiento*:

$$\frac{dx_n}{dt} = p_n \quad (2.25)$$

$$\frac{dp_n}{dt} = 2 \sum_{m \neq n} \frac{f_{nm}^2}{(x_n - x_m)^3} \quad (2.26)$$

$$\frac{df_{nm}}{dt} = (x_n - x_m) \sum_{l \neq n, m} \frac{f_{nl} f_{lm}}{|x_n - x_l| |x_l - x_m| \left(\frac{1}{x_n - x_l} + \frac{1}{x_m - x_l} \right)}, \quad (2.27)$$

donde $f_{nm} = |x_m - x_n| V_{mn}$ para $n \neq m$.

Estas ecuaciones describen un sistema clásico conservativo en el espacio de fases de coordenadas (x_n, p_n, f_{nm}) . Nakamura y Lakshmanan[80] demostraron que este sistema es completamente integrable.

El problema se ha convertido en entender un sistema con infinitos grados de libertad y con infinitas constantes de movimiento. Al aplicar la mecánica estadística al gas de Pechukas-Yukawa se obtiene la distribución de autovalores del GOE. Obtenemos así una interpretación alternativa de los resultados de la RMT para los sistemas cuánticos caóticos. Por una parte, las propiedades estadísticas del GOE se obtienen como resultado de la diagonalización de matrices con elementos de matriz aleatorios y ciertas propiedades de simetría y por otra se obtienen como resultado de las propiedades de equilibrio de un sistema de partículas en una dimensión que interactúan entre sí según las ecuaciones (2.25), (2.26) y (2.27).

2.9.2 Gas de solitones

El descubrimiento de que un sistema clásico no lineal integrable equivale a la dinámica de niveles de los sistemas cuánticos caóticos pone a nuestra

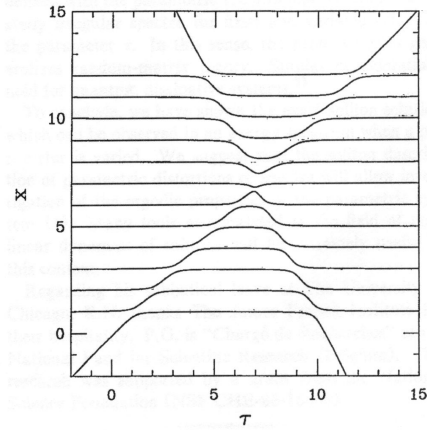


Figura 2.9: Estructura bisolitónica de cruces evitados en un hamiltoniano modelo[84].

disposición una gran cantidad de herramientas nuevas para el análisis de estos fenómenos que todavía no ha sido aprovechada completamente. La existencia de solitones y su efecto en el sistema ha sido una de las primeras aplicaciones de la dinámica no lineal al caos cuántico.

Un solitón es una onda solitaria que mantiene su forma y velocidad de manera asintótica cuando interacciona con otras ondas solitarias o con perturbaciones locales[81]. Los cruces evitados móviles han sido identificados con estas estructuras solitónicas y su existencia ha sido confirmada experimentalmente con átomos de Rydberg diamagnéticos[82] y en datos numéricos. La aparición de estos solitones ha sido relacionada con el sistema clásico análogo atribuyéndose a órbitas regulares como los toros KAM estables o a órbitas periódicas inestables en sistemas K.

Ishio y Nakamura interpretaron el espectro de matrices aleatorias como debido a la turbulencia en el gas de solitones[83]. En la Fig. 2.9 podemos comprobar como las estructuras de cruces evitados móviles mantienen su forma cuando evolucionan con el parámetro de pseudotiempo t para una solución del gas de Pechukas-Yukawa encontrada por Gapard, Rice y Nakamura[84]. Sin embargo, el espectro adquiere una imagen muy distinta cuando mezclamos muchos solitones, como se muestra en la Fig. 2.10.

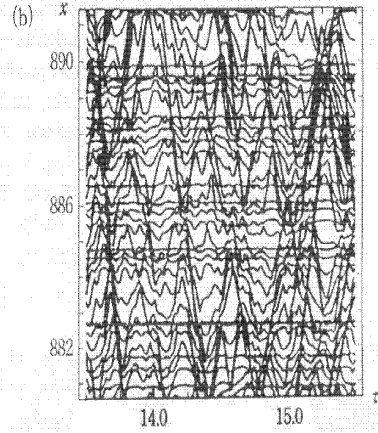


Figura 2.10: Turbulencia de solitones en el espectro de un sistema cuántico[83].

2.9.3 Transiciones internas y transiciones externas

Siguiendo a Kuntsman et al.[85] distinguiremos dos tipos de dinámica de niveles. Las *transiciones internas* en las que los cambios en el parámetro mantienen la colectividad a la que pertenece el hamiltoniano y las *transiciones externas* en las que los cambios en el parámetro producen el paso de una colectividad a otra.

Como modelo para las transiciones internas se ha utilizado un hamiltoniano del tipo

$$H(\lambda) = H_1 \text{sen}(\lambda) + H_2 \text{cos}(\lambda), \quad (2.28)$$

donde H_1 y H_2 pertenecen a la misma clase de simetría (GOE, GUE o GSE).

Para este tipo de transiciones se han extraído comportamientos universales una vez se realiza el *reescalado* del espectro y, a su vez, los parámetros se reescalan de forma apropiada. Por ejemplo, reescalando la curvatura de los niveles definida a partir de las ϵ_α , $K_\alpha = d^2\epsilon_\alpha/d\lambda^2$ de la siguiente forma

$$\kappa = K \frac{1}{\beta \pi \sigma_v^2}, \quad (2.29)$$

donde σ_v^2 es la varianza de las velocidades de los niveles tras efectuar el *reescalado*. El parámetro β , se corresponde con el parámetro de repulsión para cada colectividad, $\beta = 1$ para el GOE, $\beta = 2$ para el GUE y $\beta = 3$

para el GSE. Podemos extraer la distribución universal para cada una de las clases de simetría[87, 88],

$$P(\kappa) = N_\beta \frac{1}{(1 + \kappa)^{\frac{\beta+2}{2}}}, \quad (2.30)$$

$$N_\beta = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(\frac{\beta+2}{2})}{\Gamma(\frac{\beta+1}{2})}. \quad (2.31)$$

Las transiciones externas, sin embargo, están mucho menos estudiadas, a pesar de su importancia para la interpolación entre movimiento regular y caótico (transición Poisson a GOE o Poisson a GUE). En estos casos, no se han encontrado comportamientos universales y se cree que sus características son dependientes del sistema.

Este tipo de transiciones serán las que nos interesen en el quinto capítulo.

Capítulo 3

Método de reescalado

3.1 Necesidad de reescalado

Para realizar cualquier tipo de análisis estadístico de las fluctuaciones del espectro de energías de un sistema cuántico es necesario efectuar una transformación del espectro para poder comparar con los resultados universales de la RMT. Esta operación se denomina “reescalado” [28]. Sin ella es imposible una comparación directa entre sistemas que tienen energías características y comportamientos muy diferentes.

La idea principal consiste en descomponer la densidad de niveles $\rho(E) = \sum_{n=1}^N \delta(E - E_n)$ en una parte suave y una parte fluctuante. La parte suave nos indica la escala de energías apropiada localmente para el espectro que estamos analizando. Debemos eliminarla para quedarnos con la parte fluctuante normalizada, que es la que podemos estudiar comparando con la RMT.

Aunque en general la separación del espectro entre estas dos partes, suave y fluctuante, puede ser una tarea no trivial [86], la descripción de los detalles del cálculo del reescalado es, a menudo, obviada en la literatura. En este capítulo demostraremos que, contrariamente a las suposiciones usuales, el cálculo de algunos estadísticos de las fluctuaciones depende fuertemente del procedimiento para realizar el reescalado utilizado y algunos métodos estándares pueden llevar a interpretaciones erróneas sobre la caoticidad de los sistemas cuánticos estudiados.

3.2 Descripción general

Para eliminar el comportamiento medio de la densidad de niveles del espectro de energías, primero, debemos caracterizar la densidad de niveles media $\bar{\rho}(E)$. Esta densidad media es una propiedad específica de cada sistema cuántico y debe ser sustraída para comparar resultados de sistemas distintos. En la elección de esta densidad media radican las principales dificultades del reescalado. Un error en este paso puede llevar a una caracterización equivocada de las propiedades estadísticas de las fluctuaciones espectrales.

Después de eso debemos reescalar el espectro con el espaciamiento medio, transformando las energías del sistema E_i en las variables adimensionales ε_i con una densidad media unidad. Por tanto, con las nuevas variables se resta la parte suave del espectro y se consideran sólo las fluctuaciones.

Teniendo en cuenta la densidad media integrada

$$\bar{N}(E) = \int dE \bar{\rho}(E) \quad (3.1)$$

las nuevas energías son

$$\varepsilon_i = \bar{N}(E_i) \quad (3.2)$$

Todos los estadísticos utilizados para comparar con la RMT se calculan a partir de estas nuevas energías ε_i .

3.3 Procedimientos para realizar el reescalado del espectro

Para algunos sistemas existen procedimientos para efectuar el reescalado de forma natural. La densidad de niveles media puede estar dada por un resultado teórico riguroso. Por ejemplo, se puede demostrar que $\bar{\rho}(E)$ para una matriz GOE $N \times N$ tiene una fórmula semicircular cuando $N \rightarrow \infty$ [26](Apéndice A). La ley de Weyl se utiliza para sistemas tipo billar y consiste en una expansión en serie de Laurent de $N(E)$ que se trunca para obtener $\bar{N}(E)$ [89]. En cálculos del modelo de capas con espacios de valencia grandes e interacciones a (1+2) cuerpos la densidad media tiene forma gaussiana[28]. Si tenemos una colectividad de sistemas podemos efectuar el reescalado de cada uno de ellos utilizando la densidad media de toda la colectividad (siempre que la colectividad sea ergódica).

Sin embargo, en muchos sistemas no hay una elección natural para $\bar{\rho}(E)$ y se tienen que usar otros métodos. En todos ellos la densidad local dependiente de la energía E se estima a partir de un conjunto de niveles adyacentes. El método más simple de este tipo es el denominado *reescalado local*. Se supone que la densidad de niveles media es aproximadamente lineal con la energía en una ventana de v niveles a cada lado de E_i y viene dada por

$$\bar{\rho}_L(E_i) = \frac{2v}{E_{i-v} - E_{i+v}} \quad (3.3)$$

donde L significa reescalado local. No podemos realizar el reescalado local para energías que no tienen suficientes niveles alrededor para completar la ventana. Por tanto, al utilizar el reescalado local debemos cortar el espectro y usar sólo autovalores con $i \in [v + i, N - v]$. También se puede hacer una media dándole un cierto peso a cada nivel[90]. Es importante en este método elegir de forma adecuada un valor razonable de la ventana v . Si es demasiado pequeña, no podemos calcular fluctuaciones. Si es demasiado grande, la densidad real es muy diferente de una recta. El método del reescalado local está ampliamente extendido para los casos en que una expresión analítica para la $\bar{\rho}(E)$ no se conoce[91, 11, 92].

Más sofisticado es el método del ensanchamiento gaussiano [89, 93]. La densidad de niveles $\rho(E) = \sum_i \delta(E - E_i)$ se sustituye por

$$\bar{\rho}^{(G)}(E) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \sum_i \exp \left\{ -\frac{(E - E_i)^2}{2\sigma^2} \right\}, \quad (3.4)$$

donde (G) significa ensanchamiento gaussiano. Estamos convolucionando cada nivel con una gaussiana de anchura σ . Aunque la suma recorre todos los niveles de energía, sólo aquellos que satisfacen que $|E - E_i| \lesssim \sigma$ contribuyen realmente al valor de $\bar{\rho}(E)$.

Aunque estos dos métodos son diferentes, ambos dependen de un parámetro v o σ que mide, de forma real o efectiva, cuántos niveles se usan para calcular la densidad media local. En este tipo de reescalado se supone implícitamente que los resultados son esencialmente independientes del valor de la ventana v o σ , dentro de unos tamaños *razonables*. Sin embargo, hemos realizado cálculos exhaustivos para comprobar esa suposición y hemos comprobado que no es cierta para las correlaciones espectrales de largo alcance.

3.4 Efectos espurios en las fluctuaciones espectrales

Como ejemplo significativo mostramos el estudio del espectro de una matriz GOE de dimensión $N = 10000$. Vamos a comparar las fluctuaciones del espectro obtenidas por tres métodos distintos: el reescalado suave efectuado mediante la ley del semicírculo, el reescalado local, y el método del ensanchamiento gaussiano. Las distribuciones de espaciamentos de primeros vecinos $P(s)$ para el reescalado local y el reescalado suave se muestran en la Fig. 3.4. Podemos comprobar que ambos métodos dan resultados prácticamente idénticos y en perfecto acuerdo con el resultado teórico para el GOE. Por tanto, el comportamiento de las correlaciones de corto alcance no se ve afectado por el método de reescalado utilizado.

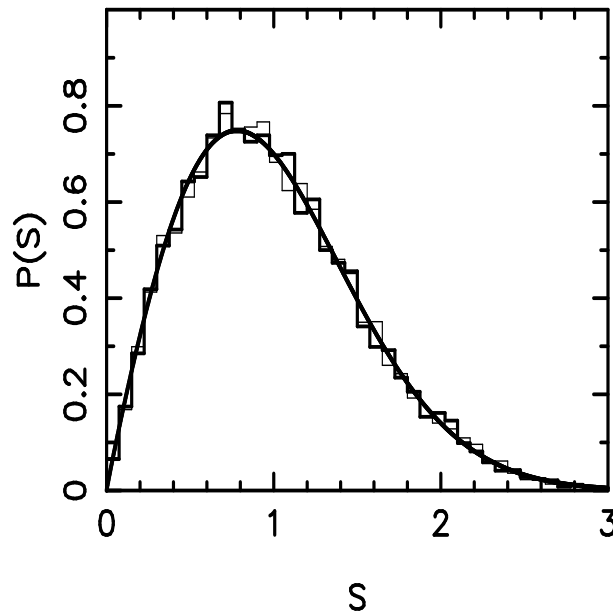


Figura 3.1: $P(s)$ para una matriz GOE $N = 10000$. El histograma de líneas finas representa el resultado obtenido con reescalado local. El de líneas gruesas la curva correspondiente al reescalado con la ley del semicírculo y la curva suave es el resultado teórico para el GOE.

Sin embargo, la Fig. 3.4 nos muestra que las cosas son completamente distintas para la Δ_3 que, como vimos en el segundo capítulo, mide las cor-

relaciones de corto alcance. Para el reescalado suave, la rigidez espectral se comporta siguiendo las predicciones de la RMT, hasta valores de L muy grandes. Hemos utilizado dos ventanas distintas para el reescalado local, $v = 9$ y $v = 21$. El cálculo de la Δ_3 en estos casos coincide con las predicciones de la RMT solamente hasta un valor $L \simeq 2v$. A partir de este punto el valor de la Δ_3 satura a una constante. El método del ensanchamiento gaussiano fue utilizado con valores de $\sigma = 1$ y $\sigma = 2$. En la parte central del espectro estos valores se corresponden con ventanas que contienen unos 10 y 20 estados respectivamente. Por tanto, el número efectivo de estados que afectan a la densidad media es aproximadamente el mismo que en el caso del reescalado local. También en este caso la Δ_3 satura para valores de L mayores que la ventana usada en el reescalado.

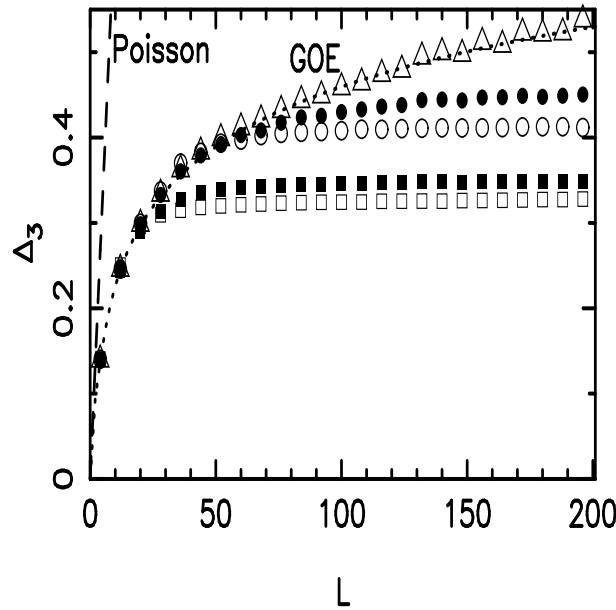


Figura 3.2: Δ_3 para una matriz GOE $N = 10000$. Los triángulos son los resultados obtenidos con el reescalado suave (ley del semicírculo). Los círculos llenos se corresponden con el reescalado local con $2v = 42$ y los cuadrados con $2v = 18$. Los círculos vacíos se corresponden con el reescalado realizado mediante ensanchamiento gaussiano correspondiente a una anchura $\sigma = 2$, y los cuadrados al ensanchamiento gaussiano con una anchura $\sigma = 1$.

Consideremos ahora un secuencia de $N = 10000$ niveles generada con

estadística de Poisson y una densidad media uniforme $\bar{\rho}(E) = 1$. Como muestra la Fig. 3.4, el cálculo con el reescalado suave da resultados muy próximos a las predicciones de la estadística de Poisson. Pero el reescalado local con valores de la ventana $v = 2, 9$ y 21 nos lleva a una saturación de la Δ_3 para $L \simeq 2v$. Incluso podemos comprobar que en el caso de $v = 2$ el espectro de Poisson parece seguir las predicciones del GOE.

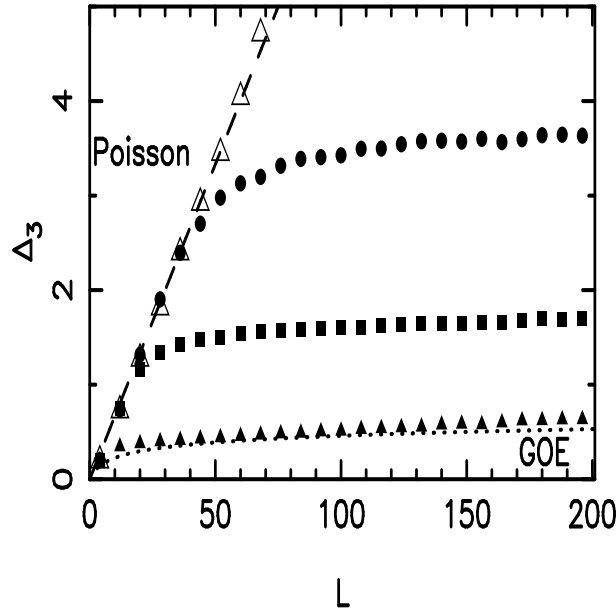


Figura 3.3: Δ_3 para una secuencia de 10000 niveles con estadística de Poisson y densidad uniforme. Los triángulos abiertos corresponden a los resultados con el reescalado suave. Los círculos, cuadrados y triángulos llenos son los cálculos usando el reescalado con el tamaño de la ventana igual a $2v = 42$, $2v = 18$ y $2v = 4$ respectivamente.

Mostramos también un ejemplo con el espectro de un núcleo para comprobar el efecto del reescalado sobre las correlaciones de largo alcance en el caso del espectro de un sistema cuántico realista del tipo que vamos a tratar más adelante en este trabajo.

Hemos estudiado un cálculo del modelo de capas de los estados $J^\pi = 4^+$ del ^{50}Ca representado por 10 neutrones en la capa pf . La dimensión de la matriz hamiltoniana es $N = 2755$. Hemos calculado la $P(s)$ y la Δ_3 (figura 3.4) usando dos métodos de reescalado: uno suave realizado mediante una

expansión de Edgeworth en términos de los cumulantes de la distribución de niveles de energía[72] y el reescalado local anteriormente descrito. Los resultados para la $P(s)$ son completamente indistinguibles y, como comentaremos posteriormente, muestran correlaciones intermedias entre Wigner y Poisson. Cuando calculamos la Δ_3 , en el caso del método suave observamos también un comportamiento intermedio. Sin embargo, para el reescalado local el cálculo nos muestra una saturación para $L = 2v$ igual que en el caso anterior.

A la vista de la gráfica para la Δ_3 en el caso de este espectro las conclusiones sobre su dinámica caótica o regular serían muy distintas si utilizamos los resultados con el cálculo realizado usando la densidad media suave o el método del reescalado local. Mientras que el resultado hasta $L = 100$ con la ventana $2v = 42$ (los círculos) parece indicar que el núcleo es completamente caótico, el resultado utilizando la densidad media gaussiana nos indica que es un núcleo con propiedades intermedias entre el caos y la regularidad. Este último resultado es el que se confirma, como veremos en el capítulo 3, con el cálculo de otros estadísticos como la longitud de localización de la entropía.

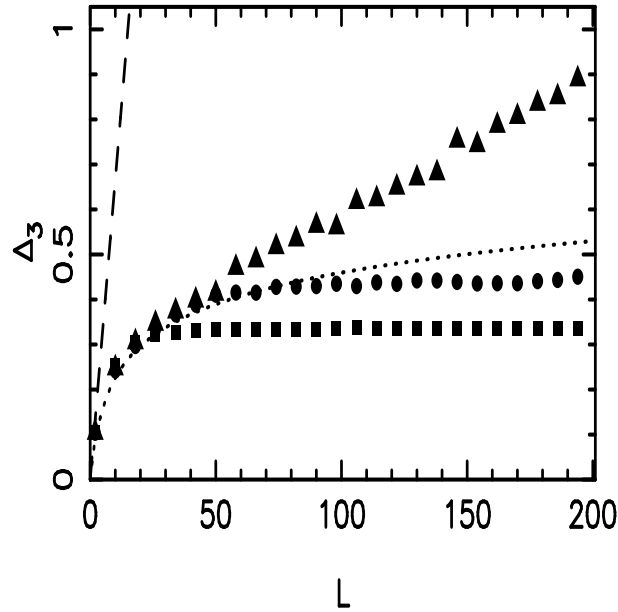


Figura 3.4: Δ_3 para el cálculo completo del modelo de capas de los estados $J = 4$ del ^{50}Ca en la capa fp. El reescalado suave se hizo con un expansión de Edgeworth (triángulos). Los círculos corresponden a un reescalado local con $2v = 42$ y los cuadrados son el resultado del reescalado local con $2v = 18$.

En ciertos casos, incluso podemos confundir un comportamiento intermedio entre GOE y Poisson con algo completamente caótico y, por tanto, analizar de forma equivocada nuestros resultados. En la Fig. 3.4 representamos el resultado de la Δ_3 para los estados $J = 1$ del ^{52}Ca . Según demostraremos en el capítulo siguiente es un núcleo bastante regular. Podemos comprobar que debido al uso de reescalado local con $v = 5$, un valor razonable de la ventana, la Δ_3 parece completamente GOE mientras que el cálculo con el reescalado suave indica un crecimiento lineal a partir de $L = 4 - 6$.

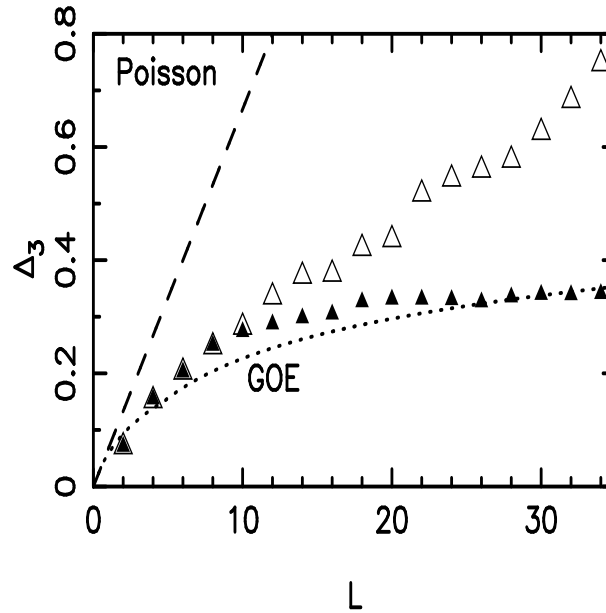


Figura 3.5: Δ_3 para el cálculo completo del modelo de capas de los estados $J = 1$ del ^{52}Ca $J = 1$. Los triángulos llenos se refieren al cálculo con el reescalado local con $v = 5$ mientras que los vacíos representan el cálculo con el reescalado suave.

La saturación que hemos mostrado en los ejemplos anteriores no está, en absoluto, relacionada con la saturación de la Δ_3 predicha por Berry[33] (sección 1.3.2). Esta es una consecuencia de las órbitas periódicas de periodo más corto del correspondiente movimiento clásico. En nuestro caso, la saturación es un efecto espurio debido a un reescalado inapropiado. La saturación implica que fuertes correlaciones de largo alcance se han introducido en el espectro debido a un procedimiento de reescalado inadecuado. Aunque

el método local ha sido utilizado por muchos autores, la función $\Delta_3(L)$ se dibuja solamente para L pequeñas y no se llega a observar el efecto. En ciertos casos en que se ha llegado a calcular para valores más altos de L , la saturación se ha interpretado erróneamente como el efecto de Berry[91].

3.5 Análisis de Fourier de las correlaciones

Para obtener una mayor información sobre las causas de la saturación espúrea de la Δ_3 hemos introducido un nuevo punto de vista en el análisis la estadística de los espectros[124]. Hemos considerado la secuencia de espaciamentos como una señal física y hemos aplicado las técnicas de analisis de Fourier a su estudio. El espectro de potencias $P(k)$ viene dado por

$$P(k) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} R(m)e^{-imk}, \quad (3.5)$$

donde $R(m) = \langle s_j s_{j+m} \rangle$ es la función de autocorrelación de la secuencia que estamos considerando calculada promediando en j . De esta forma analizamos el comportamiento de las correlaciones a distintas frecuencias de cada una de las listas de espaciamentos y podemos comparar los resultados. Hemos utilizado la notación habitual para el espectro de potencias $P(k)$. No se debe confundir con la distribución de espaciamentos $P(s)$.

Vamos a tratar de este modo un sistema con estadística de Poisson y una distribución de niveles uniforme. Parece un sistema apropiado para aplicar el reescalado local, ya que la densidad suave es contante. Por tanto, la suposición fundamental de este método, la linealidad de la densidad dentro de la ventana, es estrictamente cierta en este caso. El comportamiento espurio de la Δ_3 es más sorprendente si cabe.

Consideremos las siguientes cinco secuencias definidas para un espectro de N niveles: (a) La secuencia de los espaciamentos de primeros vecinos reales, esto es, del espectro verdadero antes de realizar el reescalado, $\{S_i = E_{i+1} - E_i\}_{i=1, N-1}$. (b) La secuencia de espaciamentos medios $\{D_i = (\bar{\rho}(E_i))^{-1}\}_{i=1, N}$ calculada con la densidad de niveles suave. (c) La secuencia media de espaciamentos $\{D_{L,i} = (\bar{\rho}_L(E_i))^{-1}\}_{i=v+1, N-v}$ calculada con la densidad local constante de la Eq. (3.3). (d) La secuencia de los espaciamentos de primeros vecinos una vez hecho el reescalado suave $\{s_i = S_i/D_i\}_{i=1, N-1}$. (e) La secuencia de los espaciamentos de primeros vecinos una vez hecho el reescalado local $\{s_{L,i} = S_i/D_{L,i}\}_{i=v+1, N-v}$.

En este caso especial, donde $\bar{\rho}(E_i) = 1$, tenemos que $D_i = 1$. Por tanto la transformada de Fourier de la secuencia D es cero para todas las frecuencias $K \neq 0$. Sin embargo, D_L fluctúa alrededor del valor D verdadero, y su transformada de Fourier no es ya una delta de Dirac.

En la Fig. 3.6 aparece representado el espectro de potencias de las secuencias S y D_L para $N = 10000$ y frecuencias hasta $k = 1000$. El tamaño de la ventana es $2v = 42$. Para una comparación más sencilla, las amplitudes $P(k)$ para D_L están representadas con signo negativo. Podemos comprobar que, efectivamente, el espectro de potencias no es una Delta de Dirac. Tiene valores finitos para k pequeños, que decrecen suavemente y se hacen prácticamente cero a una frecuencia de corte $k_0 = (N - 1)/2v$. Hay que fijarse también en que el espectro de potencias de la secuencia D_L es la imagen especular del espectro de potencias de la secuencia S si añadimos un decaimiento de la señal. Vemos así claramente que el procedimiento para realizar el reescalado local introduce componentes espúreas de baja frecuencia en la señal D_L . Este comportamiento nos empieza a iluminar sobre el origen de la saturación de la Δ_3 .

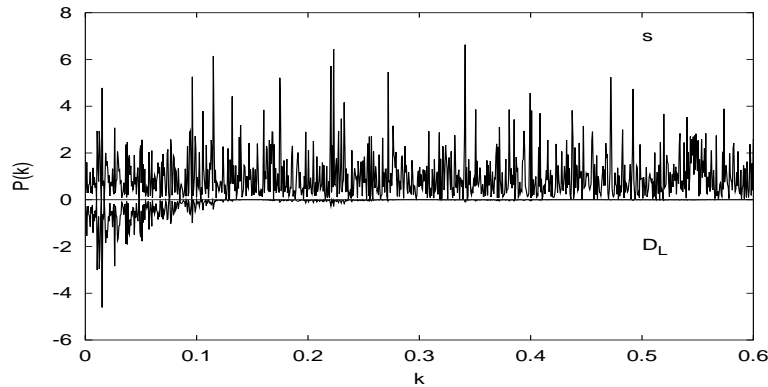


Figura 3.6: Comparación del espectro de potencias para las secuencias S (parte positiva) y D_L (parte negativa), calculado con la densidad media local en una ventana de tamaño $2v = 42$, para una secuencia con $N = 10000$ niveles no correlacionados y densidad uniforme.

La Fig. 3.7 compara el espectro de potencias de s y s_L . De nuevo, para clarificar la figura, dibujamos las amplitudes $P(k)$ de la secuencia de espaciamientos s_L en la parte negativa.

La potencia de la secuencia de espaciamientos s_L es esencialmente cero

cerca de $k = 0$, y crece lentamente hasta una frecuencia $k \simeq k_0$. Para k mayores ambos espectros son la imagen especular el uno del otro, aunque para frecuencias cercanas a k_0 las amplitudes del espectro de potencias de s_L son algo mayores, compensando la potencia perdida a bajas frecuencias. La potencia total es muy parecida para las dos secuencias.

Estos resultados clarifican las deficiencias del reescalado local. Este procedimiento elimina las fluctuaciones de baja frecuencia del espectro y las incluye impropiamente en D_L . Además, reduciendo o eliminado fluctuaciones de frecuencia menor que k_0 , el procedimiento está introduciendo correlaciones de largo alcance con longitudes de onda mayores que $2v$. Es precisamente este fenómeno el que ha sido detectado previamente por la Δ_3 . Esas fuertes correlaciones de largo alcance producen la saturación de la Δ_3 observada para $L \geq 2v$.

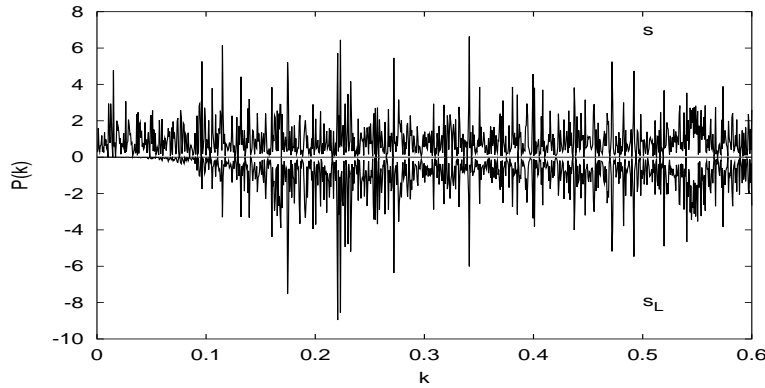


Figura 3.7: Lo mismo que en la Fig. 3.6 para las secuencias S and D_G .

En la figura 3.8 podemos comprobar el mismo efecto para la misma secuencia de $N = 10000$ niveles con densidad constante y no correlacionados, pero utilizando para efectuar el reescalado el método del ensanchamiento gaussiano. Denominamos a la nueva secuencia de espaciamientos medios tras el reescalado D_G . Comprobamos claramente que la introducción de correlaciones espúreas es un efecto general producido por el tamaño finito de la ventana efectiva de energía al realizar el reescalado.

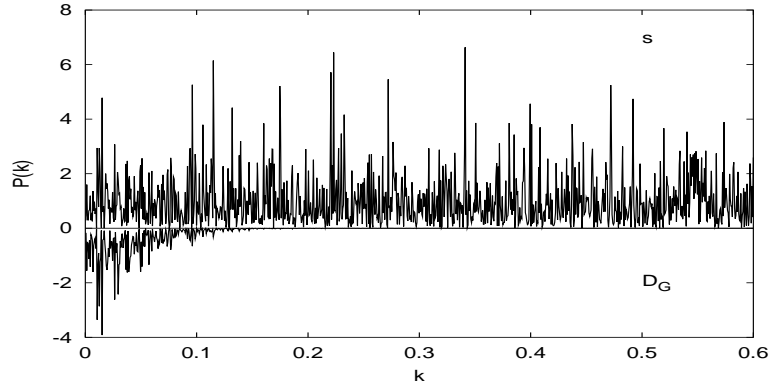


Figura 3.8: Lo mismo que la Fig. 3.7 para s y s_G , secuencia de espaciamientos después de aplicar el método del ensanchamiento gaussiano.

3.6 Análisis de Fourier para un billar rectangular

Con el fin de aplicar a un ejemplo concreto el análisis de la sección anterior hemos estudiado las correlaciones de largo alcance del espectro de energía de un billar rectangular. El análogo clásico de este sistema es integrable y, por tanto, regular. En cualquier libro básico de mecánica cuántica podemos encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger para este sistema. Sus energías son

$$E_{nm} = \left(\frac{1}{a^2}\right)n^2 + \left(\frac{1}{b^2}\right)m^2, \quad (3.6)$$

en las unidades en que $\hbar^2/2m = 1$. La órbita periódica más corta es aquella en que la partícula rebota perpendicularmente entre las dos paredes de los lados más largos del rectángulo que están a una distancia a . Su periodo será $T = \sqrt{2/mE}a$. La densidad de niveles para este sistema es independiente de la energía y vale $\bar{\rho}(E) = ab/4\pi$. Por tanto, según la teoría de Berry la L de saturación será

$$L_{sat} = \frac{mb}{2}\sqrt{E}. \quad (3.7)$$

Berry comparó los resultados de este sistema con su teoría semiclásica de la Δ_3 de forma muy satisfactoria[33].

Para realizar nuestros cálculos hemos considerado un billar rectangular con una relación de lados $b/a = \pi$ de manera que evitamos las degeneraciones

de los niveles. Hemos elegido una secuencia de 8000 niveles de alta energía con una $L_{sat} \simeq 750$. En la Fig. 3.9 comparamos los resultados del cómputo de la $\Delta_3(L)$ para esta parte del espectro utilizando la densidad constante para el reescalado con los valores cuando lo efectuamos mediante el método local de la Ec. (3.3) con $v = 5$. La saturación de Berry está fuera de la figura por lo que el valor de Δ_3 con el reescalado suave sigue la recta $L/15$ correspondiente a Poisson. Sin embargo, en el caso del reescalado local la saturación se produce mucho antes, para valores próximos a $2v$ como en los ejemplos vistos anteriormente, llevando los valores de Δ_3 a ser próximos a los del GOE.

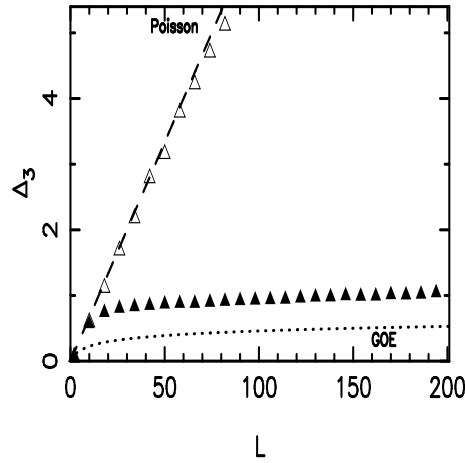


Figura 3.9: $\Delta_3(L)$ para un billar rectangular con relación entre lados $a/b = \pi$. Los triángulos llenos son el resultado con el reescalado local y los vacíos con el reescalado suave.

En la Fig. 3.10 se muestran los espectros de potencias de la secuencia de espaciamentos medios, de la secuencia de espaciamentos reales y de la secuencia de espaciamentos con el reescalado local. Podemos comprobar, de forma similar a lo que ocurría con la secuencia poissoniana de niveles, cómo se introducen las correlaciones espúreas en la secuencia de espaciamentos después de realizado el reescalado local. La secuencia de espaciamentos reales presenta también un hueco en el espectro de potencias, pero para frecuencias mucho menores que la secuencia de espaciamentos locales, debido a que la saturación real de Berry se produce para valores de L muy superiores a la saturación espúrea provocada por el reescalado local. La aparición de

armónicos en la secuencia de espaciamentos medios es mucho más clara en este caso que para la secuencia poissoniana de niveles.

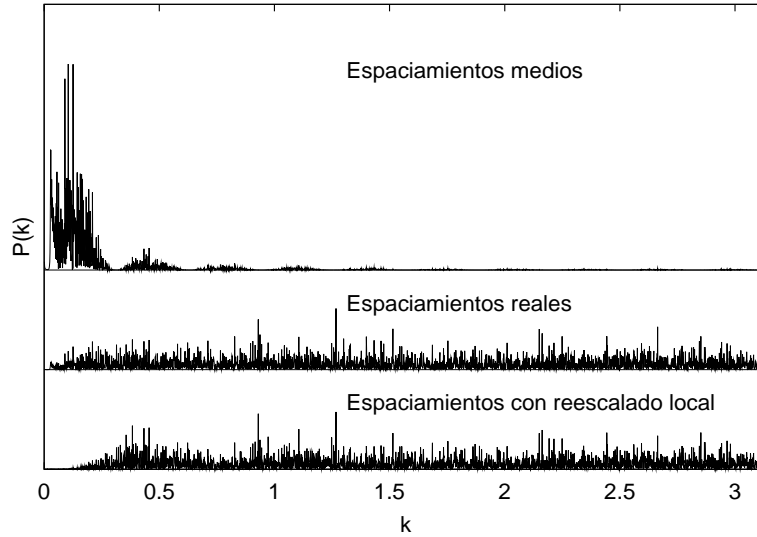


Figura 3.10: Espectro de potencias para las distintas secuencias de espaciamentos correspondientes al billar rectangular. El panel superior se corresponde con las secuencias de espaciamentos media, el panel intermedio con la secuencia de espaciamentos real y el panel inferior con la secuencia de espaciamentos después de efectuar el reescalado local con $v = 5$.

3.7 Conclusiones sobre el efecto espurio en las correlaciones de largo alcance

Hemos demostrado que el método del reescalado local y otros métodos semejantes, que calculan la densidad media mediante algún promedio utilizando algún tipo de ventana de energías, producen un efecto espurio en el cálculo de las correlaciones de largo alcance de los espectros de sistemas cuánticos. Gracias a la aplicación del análisis de Fourier a las secuencias de espaciamentos como si fueran una señal física hemos podido analizar en detalle las causas de este efecto que puede falsear las conclusiones sobre la caoticidad de un sistema cuántico. Usando estos métodos al realizar el reescalado se introducen componentes espúreas de bajas frecuencias en el

espaciamiento medio calculado. Estas fluctuaciones son espurias ya que la verdadera densidad media no contiene fluctuaciones, por definición. Estas componentes de bajas frecuencias introducidas en el espaciamiento medio se eliminan de la secuencia de espaciamientos una vez hecho el reescalado. Ya que las bajas frecuencias se corresponden con longitudes de onda largas se introducen correlaciones de largo alcance ficticias. Como veremos más adelante el cálculo de la $\Delta_3(L)$ para valores grandes de L es fundamental para conocer el comportamiento regular o caótico de un sistema. Por tanto, necesitamos una buena teoría estadística o una buena estimación empírica que nos den la densidad media correcta.

Los procedimientos estándar del reescalado local o del reescalado por ensanchamiento gaussiano conducen a conclusiones equivocadas sobre la caoticidad del espectro de un sistema cuántico. Debemos intentar encontrar una función suave para la densidad de niveles media. Sin ella, será imposible el estudio de las fluctuaciones de largo alcance y un análisis riguroso de la caoticidad del sistema.

3.8 Reescalado de los espectros del modelo de capas

La densidad de niveles para un núcleo determinado crece rápidamente con la energía de excitación de una manera reproducida satisfactoriamente por la fórmula empírica de Bethe[94], basada en un gas de nucleones libres,

$$\bar{\rho}(E) \simeq \frac{c}{(E - \Delta)^{5/4}} \exp(a\sqrt{E - \Delta}), \quad (3.8)$$

donde a , c y Δ son constantes distintas para cada núcleo.

Sin embargo, como las matrices del modelo de capas necesariamente calculan el espectro en un espacio finito y tienen una dimensión determinada, la densidad de los niveles en función de la energía tiene que reducirse en algún punto. Para recuperar la fórmula de Bethe debemos sumar las densidades parciales obtenidas en los distintos subespacios. En la Fig. 3.11 representamos de forma esquemática este proceso. En la densidad total podemos encontrar remanentes de la estructura de capas del núcleo. Cuando estudiamos el espectro de una matriz del modelo de capas solamente tenemos en cuenta el espectro de uno de estos subespacios y debemos realizar el reescalado apropiadamente.

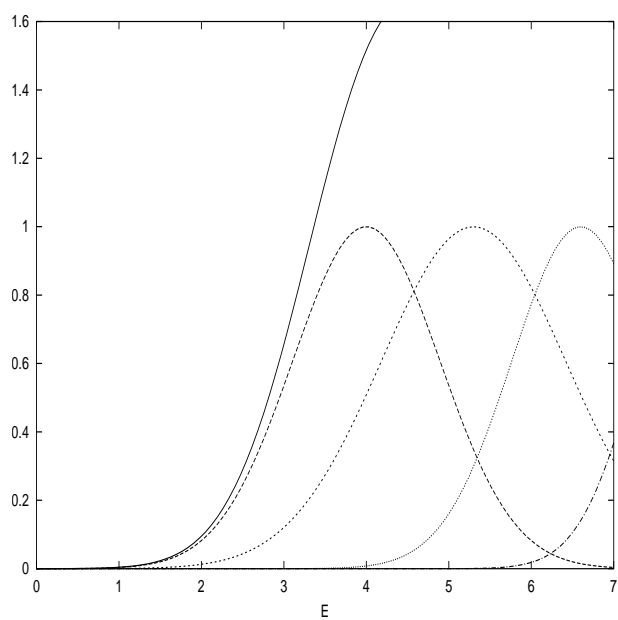


Figura 3.11: Representación esquemática de la densidad total de un núcleo, línea continua, a partir de las densidades parciales en distintos subespacios, líneas discontinuas.

Recientemente, una binomial generalizada ha sido propuesta por Zuker como verdadera densidad media de las matrices hamiltonianas con interacciones a dos cuerpos[95]. Utilizando una energía adimensional $x = E/S$ donde S es la distancia del autoestado más alto al autoestado más bajo del espectro, podemos escribir la densidad de la matriz como,

$$\bar{\rho}(E) = p^{xN} q^{\bar{x}N} d \frac{\Gamma(N+1)}{\Gamma(xN+1)\Gamma(\bar{x}N+1)} N/S. \quad (3.9)$$

Donde $\bar{x} = 1 - x$, N es el número efectivo de partículas, d es la dimensión y $q + p = 1$. A partir de los tres primeros momentos de la distribución de energías en el espectro: E_0 , σ^2 y γ_1 podemos calcular los tres parámetros libres que tenemos S , N y p . Cuando estudiemos la forma de las matrices de Lanczos en el capítulo sexto utilizaremos esta forma para la densidad.

Sin embargo, en el capítulo siguiente, la densidad de niveles de las matrices del modelo de capas ha sido ajustada de forma más tradicional mediante una gaussiana corregida. La expansión de Edgeworth en términos de los cumulantes de la distribución es una de las formas más eficaces. La distribución de la densidad media viene dada por [97, 72].

$$\bar{\rho}(E) = \rho_G(E) \left[1 + \frac{\kappa}{3!} H_{e_3} \left(\frac{E - E_0}{\sigma} \right) + \frac{\kappa}{4!} H_{e_4} \left(\frac{E - E_0}{\sigma} \right) + \dots \right], \quad (3.10)$$

donde κ_μ es el cumulante de orden μ y $\rho_G(x)$ es la densidad gaussiana

$$\rho_G(E) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(E - E_0)}{2\sigma^2}\right). \quad (3.11)$$

Si en lugar de los cumulantes utilizamos los momentos obtenemos la serie de Gram-Chalier[97]. Aunque son muy parecidas, la expansión de Edgeworth normalmente converge más deprisa así que es la que hemos utilizado en nuestros cálculos.

Para ajustar la densidad de niveles de los cálculos del modelo de capas se calcula el centroide E_0 , la variancia σ y el tercer y cuarto cumulantes, κ_3 y κ_4 y se aplica la ecuación 3.10 para el cálculo de $\bar{\rho}$. Con esta densidad media es con la que se realiza el reescalado.

También hemos utilizado

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{\sqrt{\pi}A(1 + BE_0)} \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{A^2}\right) (1 + BE), \quad (3.12)$$

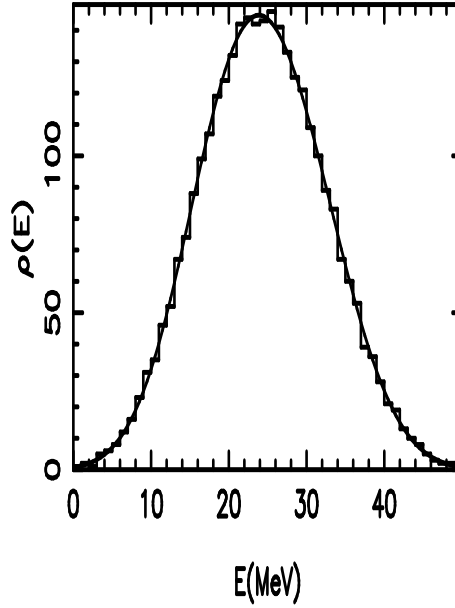


Figura 3.12: $\rho(E)$ para el ^{46}Sc $J = 3$, $T = 2$ utilizando la expansión de Edgeworth. Ec. (3.10).

como una aproximación razonable a la verdadera densidad de las matrices del modelo de capas[59]. En este caso los parámetros E_0 , A y B , se ajustan mediante mínimos cuadrados. El resultado es equivalente a un desarrollo de Edgeworth hasta el tercer cumulante despreciando el pequeño término en E^3 .

Después de hacer el reescalado utilizando como densidad media la expansión de Edgeworth o la binomial de Zuker, los resultados de la estadística de niveles son indistinguibles para matrices de la dimensión que hemos utilizado.

Cuando solamente tenemos unos pocos niveles al principio del espectro, para realizar el reescalado usamos la fórmula de la temperatura constante[99].

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{T} \exp[(E - E_0)/T] \quad (3.13)$$

Para ajustar las constantes por mínimos cuadrados es mejor usar su integral

$$\begin{aligned} \bar{N}(E) &= \int_0^E \bar{\rho}(E') dE' + N_0 \\ &= \exp[(E - E_0)/T] - \exp[-E_0/T] + N_0 \end{aligned} \quad (3.14)$$

La constante N_0 representa el número de niveles con energía menor que cero. Consideraremos la ecuación 3.14 como una función empírica para ajustar los datos y dejaremos que N_0 tenga valores distintos de cero[56].

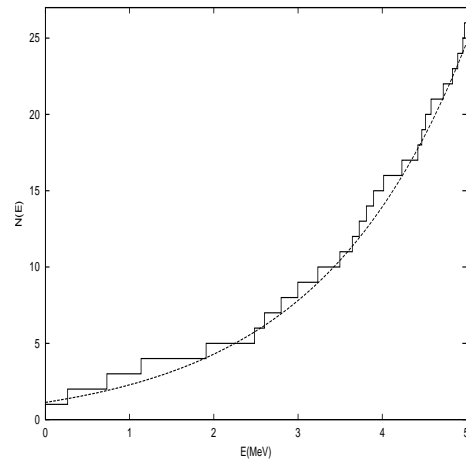


Figura 3.13: Ajuste de la $N(E)$ para $E < 5$ MeV con la fórmula (3.14). El espectro pertenece a los estados $J = 2$ del isótopo ^{48}Ca .

Capítulo 4

Caos cuántico en el modelo de capas

4.1 Introducción

El modelo de capas (apéndice B) es la teoría más completa que tenemos para describir el núcleo atómico y sus excitaciones a baja energía. La investigación de los efectos que el caos cuántico tiene en los autovalores y autovectores de las matrices del modelo de capas es fundamental para entender qué efectos tiene el caos en la física nuclear. Al ser el modelo de capas una teoría realista sobre un sistema de muchos cuerpos que interactúan fuertemente es un laboratorio teórico ideal para investigar el caos cuántico en este tipo de sistemas.

El núcleo atómico ha sido el primer sistema cuántico donde se han comprobado las predicciones de la RMT. Como comentamos en la introducción, las propiedades de las fluctuaciones en los niveles de energía experimentales han sido estudiadas principalmente en el dominio de las resonancias de protón y neutrón cerca de la barrera de emisión espontánea de neutrones, donde se conoce un gran número de niveles del mismo espín y paridad y del mismo núcleo. Se ha encontrado un acuerdo excelente con las predicciones del GOE[44]. Sin embargo, en la región del estado fundamental no hay suficientes datos experimentales para hacer un cálculo fiable de valores medios y fluctuaciones. Para soslayar esta dificultad se han realizado análisis combinados de distintos núcleos y para energías de excitación muy variadas, llegándose a la conclusión de que mientras los núcleos esféricos muestran un espectro

similar a GOE, los núcleos deformados tienen desviaciones importantes del comportamiento GOE[55, 56, 100]. Los dos únicos casos para los que se poseen secuencias de suficientes niveles consecutivos de los mismos momento angular y paridad para realizar un análisis estadístico suficientemente fiable son el ^{26}Al y el ^{116}Sn . El primero de ellos se compone de 13 protones y 13 neutrones. Posee 5 neutrones y 5 protones fuera de capas cerradas. Después del análisis de unos 160 niveles entre $E_x = 0 - 8$ MeV el resultado del ajuste del parámetro de Brody es de $\omega = 0.47 \pm 0.14$ [101]. El segundo se compone de 50 protones y 66 neutrones, 16 neutrones fuera de capas cerradas. El análisis de unos 100 niveles por debajo de 4.3 MeV de energía de excitación dio como resultado $\omega = 0.51 \pm 0.19$ [57].

En general, parece bastante claro que los datos experimentales son insuficientes para establecer una frontera entre el orden y el caos en el núcleo atómico. Para aclarar esta situación es imprescindible acudir a la teoría y, por tanto, al modelo de capas.

4.1.1 Trabajos previos sobre matrices del modelo de capas

Trabajos previos en la capa *sd* parecen indicar que los núcleos presentan un comportamiento fuertemente caótico incluso en las cercanías del estado fundamental. La estadística de niveles sigue las predicciones de la RMT y no se encuentra ninguna dependencia en energías u otro tipo de observables[59, 102]. Sin embargo, las dimensiones del espacio cuando tenemos un sólo tipo de partículas (neutrones o protones) son bastante reducidas, y el número de niveles de energía que se han tenido en cuenta en esos casos es muy limitado.

Los resultados experimentales para el ^{26}Al , un núcleo de la capa *sd*, fueron explicados por la mezcla de estados de distinto isospín, especialmente importante en este núcleo. En este caso el parámetro de Brody ω , ajustado a las secuencias experimentales J^π puras a baja energía tiene un valor intermedio entre Wigner y Poisson, contradiciendo los cálculos de modelo de capas, que predicen un comportamiento totalmente caótico incluso a muy baja energía de excitación. Sin embargo, teniendo en cuenta la mezcla de estados con esta distinta simetría, imposibles de separar experimentalmente, se alcanzan valores compatibles con el resultado experimental.

El cálculo de suficientes niveles excitados del ^{116}Sn no ha sido realizado debido a la enorme magnitud de sus matrices del modelo de capas.

En el interesante trabajo de Otsuka[11] se calculó el parámetro de Brody para el espectro de núcleos en la región del Pb obtenido mediante cálculos de modelo de capas con una fuerza esquemática y se llegó a la conclusión de que estos núcleos pesados presentaban características intermedias entre Poisson y GOE, sobre todo a baja energía. Estas propiedades fueron atribuidas a la intensidad del campo medio en esta región de la tabla nuclear.

4.1.2 Aspectos técnicos de nuestro trabajo

Nosotros hemos extendido este tipo de cálculos a la capa pf y a la región del Pb utilizando fuerzas realistas que dan buenos resultados espectroscópicos. Hemos utilizado matrices del modelo de capas con gran tamaño para acumular una abundante estadística y presentar resultados de suficiente calidad. También hemos analizado la estructura y complejidad de las funciones de onda mediante el cálculo de la entropía de la información

En la mayoría de los casos se ha procedido a la diagonalización completa de matrices de dimensiones entre 100 y 6000 aproximadamente. Para matrices mayores se han calculado solamente los autovalores más bajos. La dimensión mayor que hemos utilizado en el cálculo es la del estado $J^\pi = 1^+$ del ^{50}Sc que es de 36287. Los cálculos fueron efectuados en una estación de trabajo alpha 500au utilizando el código en esquema acoplado NATHAN[103]. Solamente la diagonalización de las matrices utilizadas llevó más de 2880 horas de CPU.

4.2 Resultados para la capa pf

La descripción de los núcleos en la capa pf consiste en considerar como *core* los nucleones, 20 protones y 20 neutrones, que forman el núcleo de ^{40}Ca . Estos nucleones se consideran inertes. El resto de protones y neutrones se mueven en las capas $0f_{7/2}$, $0f_{5/2}$, $1p_{3/2}$ y $1p_{1/2}$ con un campo medio dado por unas energías de partícula independiente ajustadas al experimento (son los niveles del ^{41}Ca). $\epsilon_{0f_{7/2}} = 0.0$, $\epsilon_{0f_{5/2}} = 6.5$, $\epsilon_{1p_{3/2}} = 2.0$ y $\epsilon_{1p_{1/2}} = 4.0$. Los nucleones interactúan mediante una fuerza efectiva renormalizada para actuar en este espacio de valencia. En nuestro caso utilizamos KB3, una interacción de Kuo-Brown modificada con correcciones monopulares[104]. Por tanto, en esta descripción los isótopos de Ca sólo tienen neutrones activos, los isótopos de Sc tienen activos un protón y el número de neutrones que

Tabla 4.1: Núcleos, valores de J y número de espaciamientos para las diferentes energías de corte utilizados en los cálculos para la capa pf . Sólo se incluyen los estados con $T = T_z$.

Núcleo	⁴⁶ Ca	⁴⁸ Ca	⁵⁰ Ca	⁵² Ca	⁴⁶ Sc	⁴⁸ Sc	⁵⁰ Sc	⁵² Sc	⁴⁶ Ti
J	0-12	0-12	0-12	0-12	0-12	0-4,7-12	0-1,9-12	0,11,12	0-5,8-12
$E < 5\text{MeV}$	96	128	140	133	155	173	120	55	77
$E < 10\text{MeV}$	441	654	818	658	1050	1328	950	405	553
Toda E	3937	11981	17203	11981	25498	14207	8031	11493	4508

posean por encima de 20 y los de Ti tienen dos protones activos más los neutrones apropiados.

Dos trabajos anteriores[105, 106] estudiaron las propiedades espectrales de los isótopos de Ca y los isóbaros con $A = 46$. Se demostró que los isótopos de Ca no seguían las predicciones del GOE en la región de baja energía. Además, añadiendo un protón las propiedades estadísticas de los niveles de energía cambiaban y se hacían compatibles con las predicciones de la RMT. Como explicación plausible, se sugirió que la interacción protón-neutrón perturbaba más el movimiento regular del campo medio que la interacción neutrón-neutrón mucho más débil que no era capaz de romperlo del todo.

Por tanto, en esta región podemos estudiar con cálculos de modelo de capas realistas cómo evolucionan las propiedades estadísticas del espectro en función de observables tales como la energía o el isospín. Para ello hemos realizado un estudio detallado de los niveles de energía y de las funciones de onda de los isótopos de Ca, Sc desde $A = 46$ hasta $A = 52$ y el ⁴⁶Ti. En la tabla 4.2 podemos ver el número de espaciamientos utilizados en este trabajo. La cantidad de niveles de energía que hemos usado permite realizar un estudio estadístico completo y fiable.

4.2.1 $P(s)$ y correlaciones de corto alcance

Hemos analizado la distribución de primeros vecinos $P(s)$ para distintas regiones de energía, incluyendo todos los niveles hasta 5 MeV sobre la línea yrast, todos los niveles hasta 10 MeV sobre la línea yrast y el espectro

completo. El reescalado ha sido realizado siguiendo las prescripciones de la sección 2.5. En el caso de energías hasta 5 MeV sobre la línea yrast se utilizó la fórmula de temperatura constante, ec. (3.14). Para el resto de casos utilizamos la ec. (3.12). A cada secuencia de niveles pura con momento angular y paridad J^π e isospín $T = T_z$ se le ha realizado el reescalado de forma separada, pero los espaciamentos finales han sido reunidos en un único conjunto para cada núcleo con el objetivo de tener mejor estadística.

Hemos calculado el parámetro de Brody ω para cada uno de los núcleos y dependencias energéticas. El parámetro se calcula mediante un ajuste por mínimos cuadrados al histograma de la distribución de espaciamentos considerada. Los resultados se muestran en la figura 4.1. Las figuras 4.2, 4.3, 4.4 comparan las distribuciones $P(s)$ para los isótopos de Ca y Sc dependiendo del corte en energías. Hasta 5 MeV por encima de la línea yrast los isótopos de Ca presentan fluctuaciones espectrales intermedias entre los sistemas caóticos y regulares. El caso del ^{52}Ca es el más espectacular con un valor de ω de 0.25. Está muy cerca de ser un sistema completamente regular. Por el contrario, los isótopos del Sc y el ^{46}Ti están muy próximos a las fluctuaciones tipo GOE. Para un A dado, las grandes diferencias entre los isótopos de Sc y de Ca tienen que ser debidas a la interacción residual a dos cuerpos, ya que las energías de partícula independiente son las mismas en los dos casos. Los resultados para $A = 46$ ya fueron mostrados en la referencia [106]. Allí se propuso como causa para esas diferencias que la interacción neutrón-neutrón era mucho más débil que la interacción protón-neutrón y no era suficiente para perturbar completamente el movimiento regular debido al campo central.

Podemos observar que el parámetro de Brody baja fuertemente de $A = 48$ a $A = 52$ para los isótopos de Ca. Se puede explicar la diferencia entre el ^{48}Ca y el ^{52}Ca teniendo en cuenta que ambos núcleos están relacionados, en nuestra descripción de la capa pf por una transformación partícula-agujero. Si el ^{48}Ca consiste en 8 partículas en la capa pf , el ^{52}Ca se puede ver como consistente en 8 huecos. Como la interacción residual partícula - partícula y la interacción residual hueco - hueco son idénticas, la única diferencia posible entre estos dos núcleos es la debida al campo central.

Si denominamos ϵ_j a las energías de partícula independiente y $\bar{\epsilon}_j$ a las correspondientes energías de hueco, se puede demostrar que

$$\bar{\epsilon}_j = \bar{\epsilon}_0 - \epsilon_j + \frac{1}{2j+1} \sum_k \sum_{\langle J \rangle} \frac{2J+1}{1+\delta_{j,k}} V_{jkjk}^{J,T=1} \quad (4.1)$$

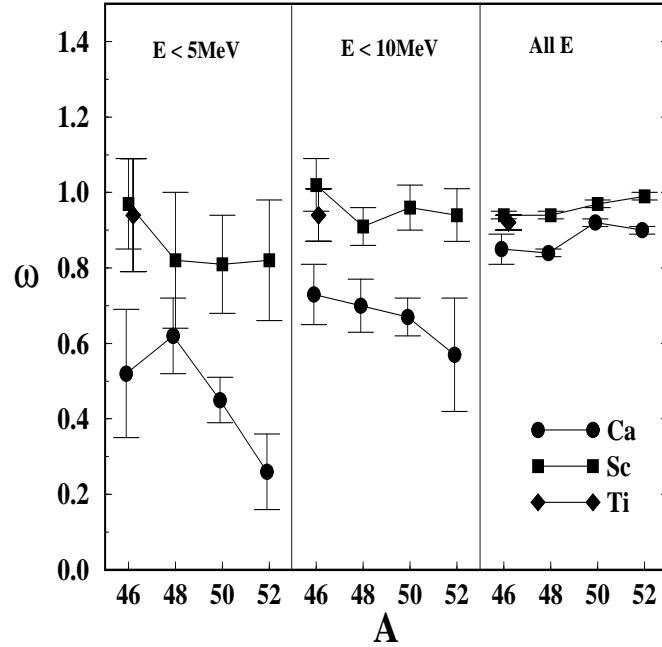


Figura 4.1: Parámetro de Brody ω para los isótopos de Ca y Sc con $A = 46$, $A = 48$, $A = 50$ y $A = 52$ y el ^{46}Ti usando todos los niveles de energía hasta 5 MeV y 10 MeV sobre la línea yrast y el espectro completo

donde ϵ_0 es una constante que viene dada por

$$\bar{\epsilon}_0 = \sum_j (2j+1)\epsilon_j + \sum_{j \leq k} \sum_{\langle J \rangle} (2J+1)V_{jkjk}^{J,T=1} \quad (4.2)$$

donde j y k son los momentos angulares de las órbitas de partícula independiente implicadas, en este caso $7/2$, $5/2$, $3/2$ y $1/2$ y $\langle J \rangle$ significa que los sumatorios están restringidos a los momentos angulares permitidos por el principio de Pauli.

En la figura 4.5 comparamos el espectro de una partícula con el de un hueco. La energía entre dos niveles adyacentes de hueco es, en general, mayor que la energía entre dos niveles adyacentes de partícula. Por tanto, será más difícil perturbar el movimiento de los huecos en el campo central que

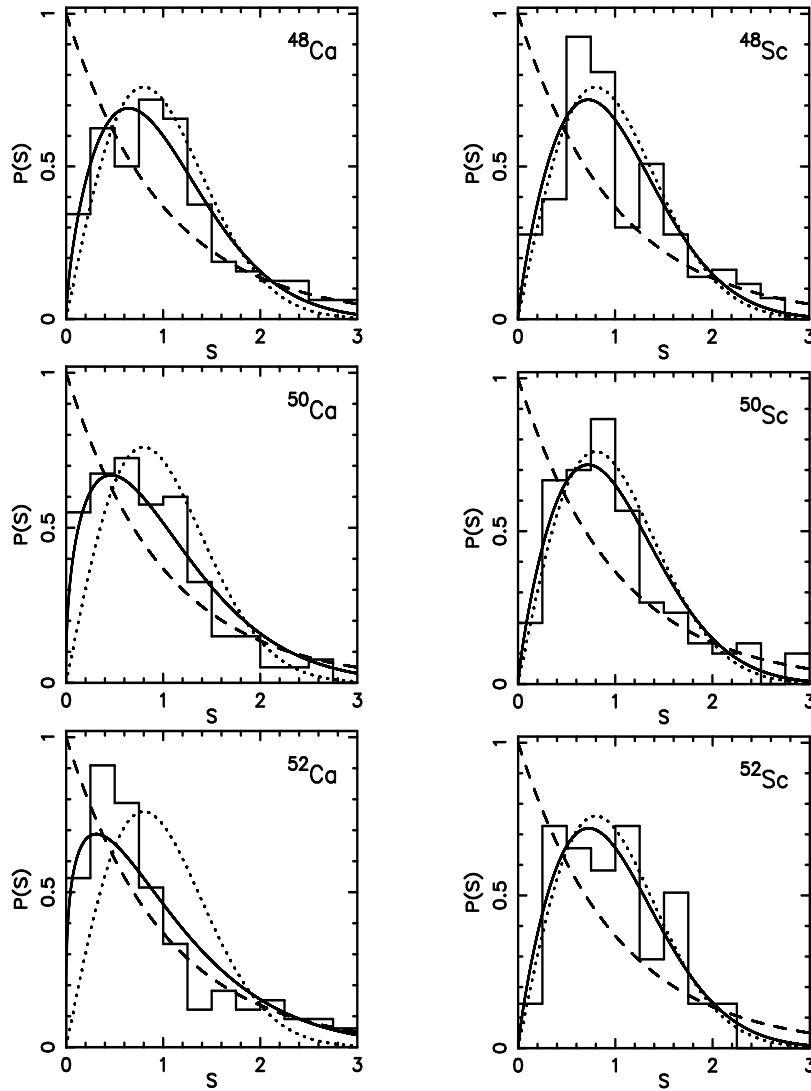


Figura 4.2: Histograma de la $P(s)$ para los isótopos de Ca y Sc con $A = 48 - 52$. Los espaciamientos considerados son desde la línea yrrasta hasta $E < 5$ MeV. También se muestra las distribuciones de Poisson, de Wigner y el mejor ajuste a Brody.

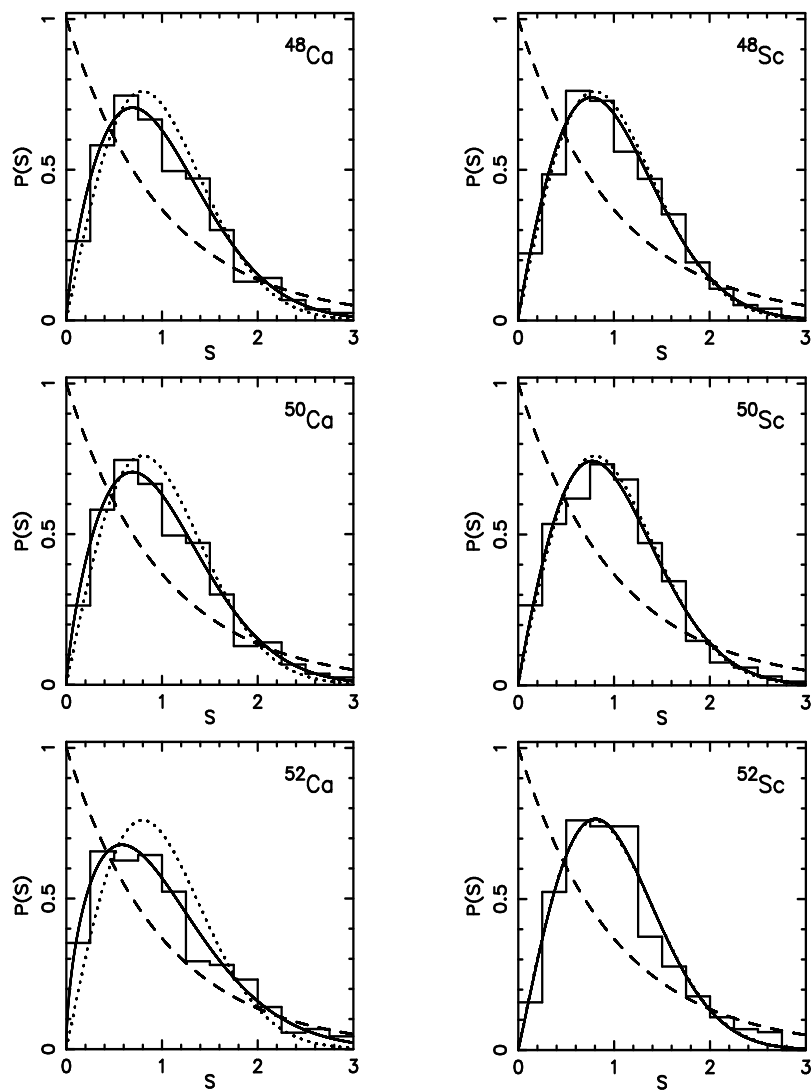


Figura 4.3: Lo mismo que la Fig. 4.2 pero $E < 10$ MeV.

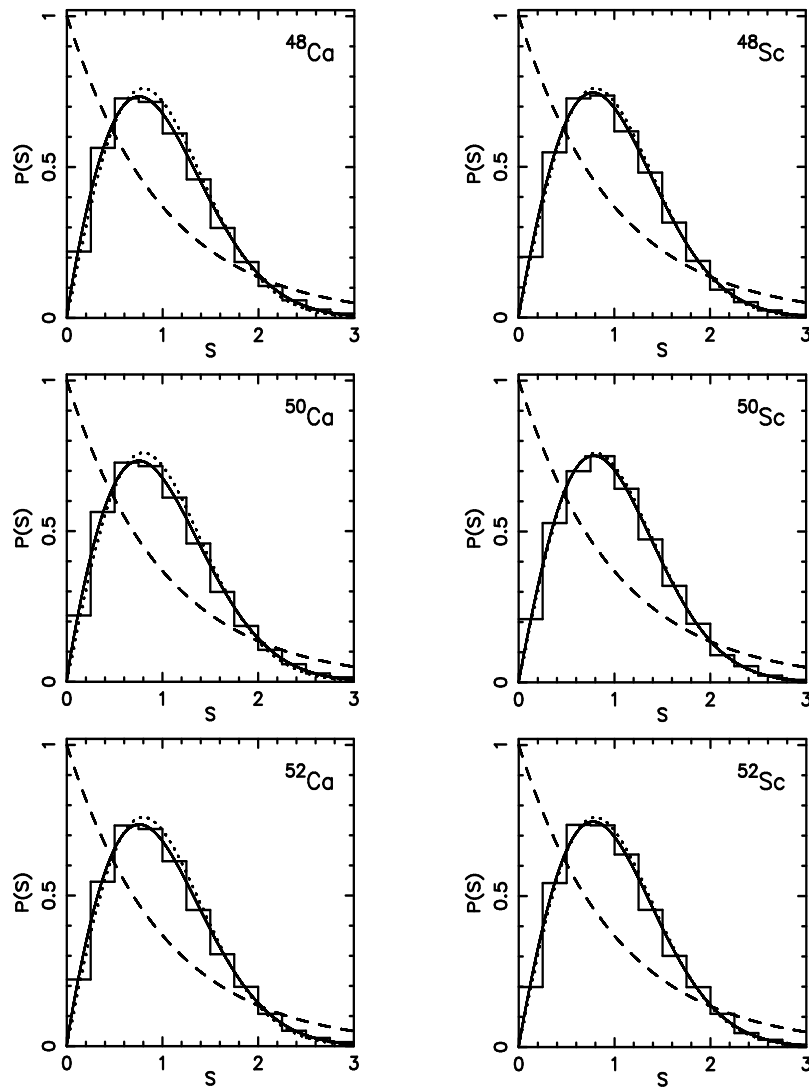


Figura 4.4: Lo mismo que la Fig. 4.2 pero incluyendo el espectro completo.

el de las partículas. A medida que subimos en energía los nuevos estados

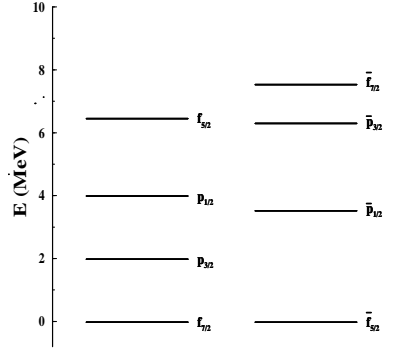


Figura 4.5: Energías de partícula independiente para el ^{48}Ca (izquierda) y de hueco para el ^{52}Ca comparadas (derecha).

son combinaciones más y más complejas de diferentes configuraciones y, por tanto, el hamiltoniano a un cuerpo es progresivamente menos importante. Podemos ver comparando las figuras 4.2 y 4.3 que los isótopos de Ca son más caóticos a 10 MeV que a 5 MeV, pero la $P(s)$ a 10 MeV todavía es intermedia entre las distribuciones de Poisson y Wigner. Para los isótopos de Sc son, por el contrario y en todos los casos, muy próximas a Wigner. En esta región el parámetro ω decrece lentamente del ^{48}Ca al ^{52}Ca .

Hemos incluido los resultados para el ^{46}Ti para comprobar que el parámetro de Brody alcanza su máximo ya con el ^{46}Sc . Para la $P(s)$ añadir dos protones o uno no produce ninguna diferencia. Sin embargo, reemplazar un único neutrón por un protón produce una transición clara de un regimen cuasirregular a uno completamente caótico.

4.2.2 Δ_3 y correlaciones de largo alcance

Para completar nuestro análisis de las fluctuaciones espectrales en los núcleos de la capa pf , además de examinar la $P(s)$ y las correlaciones de corto alcance, también hemos calculado las correlaciones de largo alcance analizándolas mediante la Δ_3 . Los resultados para la Δ_3 son resultados para todo el espectro, y no sólo para una región de energías determinada. La

Fig. 4.6 corresponde a los valores de este estadístico para $L \leq 50$ usando los estados con $J^\pi = 0^+$, $T = T_z$ del ^{46}Ca , ^{46}Sc y ^{46}Ti . De estos tres núcleos únicamente el ^{46}Ti sigue las predicciones del GOE. Para el ^{46}Sc la Δ_3 está próxima al valor del GOE, al menos hasta un cierto valor de separación, $L_{sep} \simeq 30$ donde se dobla hacia arriba. En el ^{46}Ca el punto en el que se dobla tiene un valor de L más pequeño $L_{sep} \simeq 10$. En este punto L_{sep} la curva de la Δ_3 abandona el crecimiento logarítmico, propio del GOE y la rigidez espectral de los sistemas caóticos, y se incrementa linealmente como en los sistemas regulares. Este tipo de comportamiento en la Δ_3 ha sido observado previamente en sistemas a un cuerpo como billares [108, 4] o, posteriormente, en cálculos del modelo de capas [59, 46]. Se ha interpretado como el límite a partir del cual los niveles dejan de estar correlacionados debido a que la interacción residual ya no es capaz de mezclar niveles con energías tan alejadas. Por tanto, la Δ_3 muestra, para la misma interacción y espacio de valencia, una clara dependencia en el isospín en los núcleos con $A = 46$, la caoticidad se incrementa cuando T decrece. Esto sucede no sólo del Ca al Sc sino también del Sc al Ti. El mismo fenómeno se observa para el resto de los valores de J . En la Fig. 4.7 podemos ver otro ejemplo que compara los valores de la Δ_3 para los estados $J^\pi = 0^+$, $T = T_z$ del ^{52}Ca y el ^{52}Sc . Se puede comprobar que el ^{52}Sc es mucho más caótico que el ^{52}Ca . En este caso $L_{sep} > 50$ para el ^{52}Sc y comparando con la figura anterior parece ser más caótico que el ^{46}Sc . La razón principal puede ser la mayor cantidad de interacciones protón-neutrón en el ^{52}Sc . Por tanto, podemos concluir que existe una clara dependencia en el isospín del grado de caoticidad del movimiento nuclear. Se incrementa de los estados $T = T_z$ del Ca a los del Sc y de este a los del Ti. Cuando se toma en cuenta todo el espectro, la $P(s)$ no es muy sensible a esta dependencia, pero el efecto se puede observar claramente en la Δ_3 . Para analizar de forma apropiada la dinámica de un sistema cuántico es necesario tener en cuenta, no sólo la $P(s)$, sino también la Δ_3 u otro estadístico que mida las correlaciones de largo alcance. Y, además, realizar un cálculo de este estadístico hasta el valor máximo de L que se pueda según la cantidad de niveles del espectro.

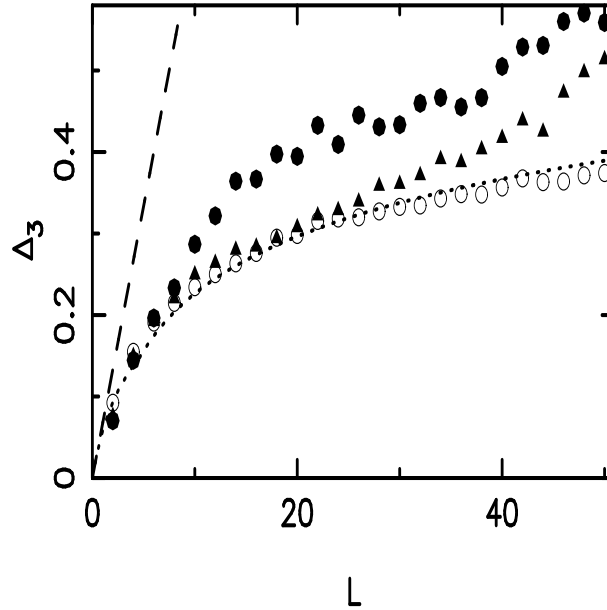


Figura 4.6: $\Delta_3(L)$ para los estados $J^\pi = 0^+$ $T = T_z$ de los núcleos ^{46}Ca (círculos), ^{46}Sc (triángulos llenos) y ^{46}Ti (triángulos huecos).

4.2.3 Entropía de la información de las funciones de onda

La entropía de la información de las funciones de onda en la base del campo medio es una cantidad muy importante para entender las propiedades de localización de las funciones de onda en el espacio de Hilbert. Constituye una forma alternativa de caracterizar el caos cuántico en sistemas de muchos cuerpos. Es importante comparar sus resultados con los provenientes del análisis de las fluctuaciones del espectro para obtener una imagen completa de la dinámica del sistema.

Para ello, hemos calculado la longitud de localización de la entropía media y normalizada $\langle l_H \rangle$ para los estados $J^\pi = 0^+$, $T = T_z$ de los isótopos del Ca, del Sc y para el ^{46}Ti . El valor medio se calcula utilizando la secuencia de estados completa. Por tanto, todo el espectro contribuye al resultado. Se puede ver en la Fig. 4.8 que hay una clara diferencia entre los isótopos del Ca y del Sc mientras que los resultados para el ^{46}Sc y el ^{46}Ti son muy similares. Para todos los isótopos del Ca $\langle l_H \rangle \simeq 0.2$ mientras que el valor crece hasta

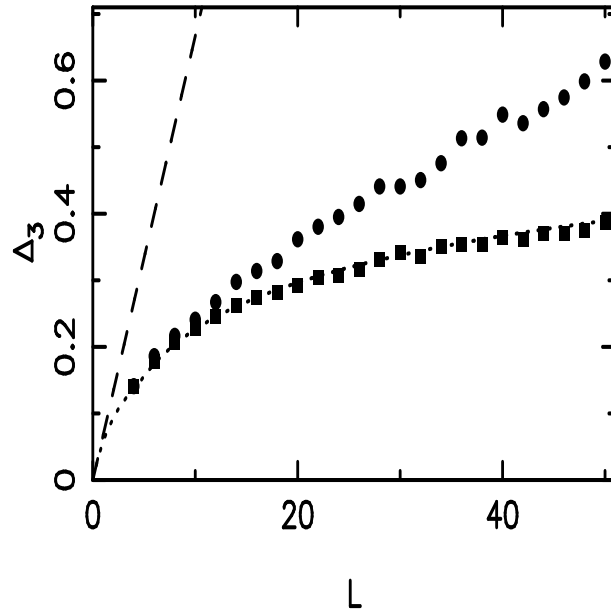


Figura 4.7: $\Delta_3(L)$ para los estados $J^\pi = 0^+ T = T_z$ de los núcleos ^{46}Ca (círculos), ^{46}Sc (cuadrados).

$\langle l_H \rangle \simeq 0.4$ para los isótopos del Sc. Todos los casos están muy alejados del valor máximo de 1 correspondiente al GOE y a la máxima deslocalización de los estados en el espacio de Hilbert. Los valores calculados de $\langle l_H \rangle$ nos indican que los estados en los isótopos de Ca están localizados en unas pocas componentes mientras que los isótopos del Sc están mucho más extendidos, aunque no llegan al límite del GOE.

Los valores medios de $\langle l_H \rangle$ indican únicamente cómo se distribuyen en promedio las componentes de las funciones de onda del modelo de capas sobre la base. Sin embargo, la l_H depende mucho de la energía de excitación del estado en el que se calcula. La forma de esta dependencia se puede ver claramente en la Fig. 4.9. En esta figura están representadas la l_H en función de la energía para los estados con $J = 6$ del ^{50}Ca y los estados con $J = 1$ y $T = 2$ del ^{46}Sc . Hemos elegido este ejemplo debido a la similitud de las dimensiones de ambos espacios 2051 y 2046 respectivamente. De esta forma eliminamos posibles efectos espurios debidos a la dimensión y podemos comparar ambas funciones. La forma es esencialmente gaussiana y su estructura ha sido explicada recientemente de forma bastante satisfactoria en el ámbito

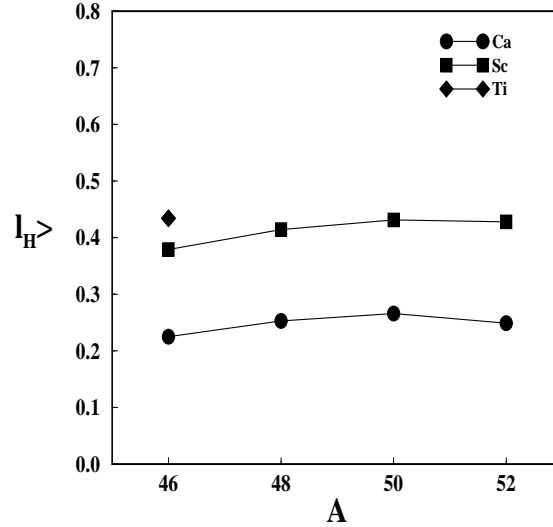


Figura 4.8: Longitud de localización media $\langle l_H \rangle$ para los estados 0^+ en la capa pf . Se incluyen los isótopos del Ca y Sc con $A = 46 - 52$ y el ^{46}Ti .

de la espectroscopía estadística[110, 111]. Las funciones de onda en la partes más bajas y más altas del espectro están fuertemente localizadas. Sin embargo, el valor de $\langle l_H \rangle$ prácticamente coincide con el valor de la l_H para la parte central del espectro, donde la densidad de estados es mucho más alta. La figura nos muestra que, incluso en la parte central del espectro, las funciones de onda del Ca están mucho más localizadas que las del Sc. Estos resultados son consistentes con los resultados obtenidos en las fluctuaciones espectrales. Como desarrollamos en el apéndice A, el valor de la $\langle l_H \rangle$ para el GOE se demuestra suponiendo la distribución de Porter-Thomas para las componentes de las funciones de onda. Por tanto, las funciones de onda de las matrices del modelo de capas que hemos estudiado no cumplen Porter-Thomas en la base del campo medio, ni siquiera eliminando las funciones de onda correspondientes a los bordes del espectro.

Sin embargo, en la Fig. 4.9 podemos comprobar que el valor para la longitud de localización tiene un comportamiento medio con la energía. Para comparar con la distribución Porter-Thomas del GOE debemos eliminar estas variaciones seculares de forma semejante a la manera de hacerlo para el

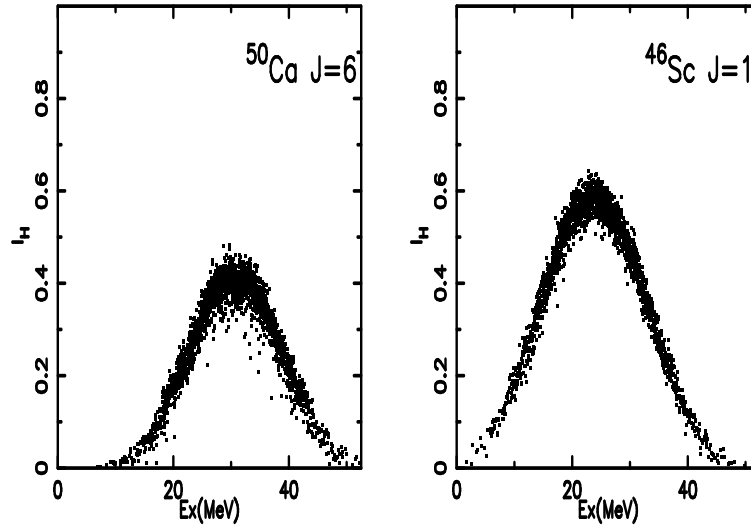


Figura 4.9: Longitud de localización en función de la energía para los 2051 estados $J^\pi T = 6^+5$ del ^{50}Ca y los 2042 estados $J^\pi T = 1^+2$ del ^{50}Sc .

espectro[125]. Para ello, en lugar de comparar la distribución de las componentes al cuadrado de las funciones de onda con la distribución de Porter-Thomas, se debe realizar previamente un promedio local en las componentes de las funciones de onda con energía próxima entre sí en los estados de la base también con energías próximas entre sí. El resultado de la distribución de las componentes promediadas de esta manera y su comparación con la distribución de Porter-Thomas se muestra en la Fig. 4.10 para los estados $J = 0$ del ^{50}Ca . Aunque todavía aparecen algunas pequeñas diferencias, el acuerdo general es bastante bueno. Para investigar la dinámica regular o caótica del sistema nos ha interesado la localización de las funciones de onda en la base privilegiada del campo medio. Sin embargo, la cuestión de hasta qué punto la distribución local de las componentes de onda se comporta como la distribución de Porter-Thomas merece un análisis más detallado.

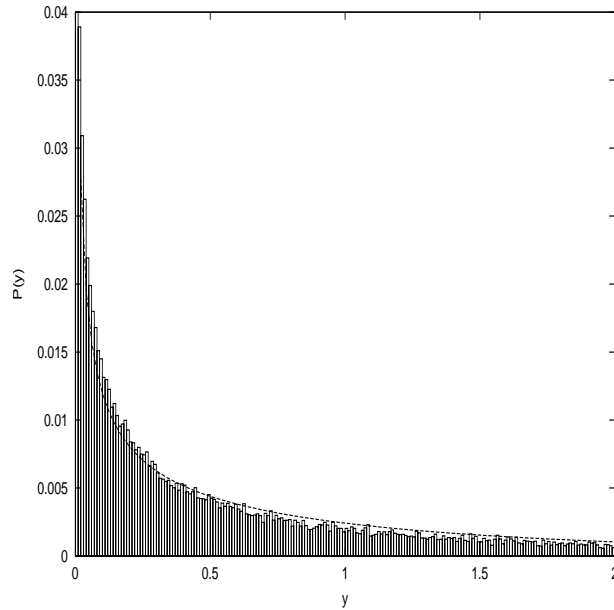


Figura 4.10: Distribución local de las componentes al cuadrado de las funciones de onda del ^{50}Ca $J = 0$. La y representa las componentes al cuadrado y la línea discontinua la distribución de Porter-Thomas.

4.3 Variando la intensidad relativa de las interacciones $T = 0$ y $T = 1$

Para corroborar las hipótesis sobre las causas de la dependencia del grado de caoticidad de los núcleos atómicos en el isoespín formuladas en [106, 112] vamos a analizar el efecto relativo de la parte $T = 0$ y la parte $T = 1$ de la interacción. Para ello vamos a estudiar cómo cambian la distribución $P(s)$ y la longitud de localización de la entropía l_H cuando variamos la intensidad de la parte no diagonal de la interacción, comparando el comportamiento de las fluctuaciones estadísticas cuando añadimos adiabáticamente la parte no diagonal completa y lo que se observa cuando sólo añadimos la parte $T = 1$ o la parte $T = 0$.

Vamos a separar la interacción en el monopolo y el multipolo. La parte monopolar es una buena aproximación a la parte diagonal del hamiltoniano ya que su traza es equivalente al hamiltoniano completo dentro de espacios con configuraciones fijas. Como se explica en el apéndice B la parte

monopolar contiene los términos que determinan la energía de partícula independiente y es el límite de movimiento regular de nuestro hamiltoniano. Si tenemos sólo esta parte del hamiltoniano los números de ocupación de cada una de las órbitas son buenos números cuánticos y el sistema es integrable.

Por tanto, primero escribimos el hamiltoniano como

$$H = H_m + \alpha H_M, \quad \alpha \in [0, 1] \quad (4.3)$$

donde $H_m(M)$ es la parte monopolar (multipolar) de la interacción y α es un parámetro real en el intervalo $[0, 1]$. Cuando α cambia de cero a uno, nos movemos de una interacción puramente diagonal a la interacción $KB3$ completa. En el panel izquierdo de la Fig. 4.11 mostramos el comportamiento de ω para el espectro completo de ese hamiltoniano en función de α para el caso de los estados $T = T_z$ del ^{46}Sc . En el intervalo $\alpha = 0.1 - 0.5$ el parámetro de Brody crece rápidamente desde 0 a 0.9 y a partir de ahí oscila alrededor de 0.94 que es aproximadamente el valor de ω para el GOE . Si usamos los siguientes hamiltonianos:

$$H = H_m + \alpha H_M^{T=1}, \quad \alpha \in [0, 1] \quad (4.4)$$

$$H = H_m + \alpha H_M^{T=0}, \quad \alpha \in [0, 1] \quad (4.5)$$

el comportamiento cambia claramente. En ambos casos, ω crece mucho más suavemente y no parece llegar a la saturación hasta $\alpha = 1$. La curva para $H_M^{T=0}$ va por encima de la curva $H_M^{T=1}$. Para $\alpha = 1$ los resultados en los tres casos son bastante similares.

Cuando tenemos en cuenta sólo los niveles de baja energía (panel de la derecha de la Fig. 4.11) el comportamiento es distinto. La estadística de las fluctuaciones espectrales de los niveles de baja energía es mucho más sensible a la intensidad de la interacción. Solamente si tenemos la interacción completa obtenemos el valor del GOE para el parámetro de Brody. La curva para $H_M^{T=0}$ tiene valores muy similares a los de la curva $H_M^{T=1}$ excepto en $\alpha = 1$.

El significado del valor de $\omega = 0$ que obtenemos cuando $\alpha = 0$ merece una aclaración. Cuando no tenemos en cuenta la interacción no diagonal todos los autovalores están fuertemente degenerados y agrupados. Por tanto, la $P(s)$ está caracterizada por un gran pico en $s = 0$ y valores muy pequeños para $s > 0$. Esto difiere de una distribución de Poisson. Sin embargo, el mejor ajuste sigue siendo $\omega = 0$. Hemos mantenido este resultado porque

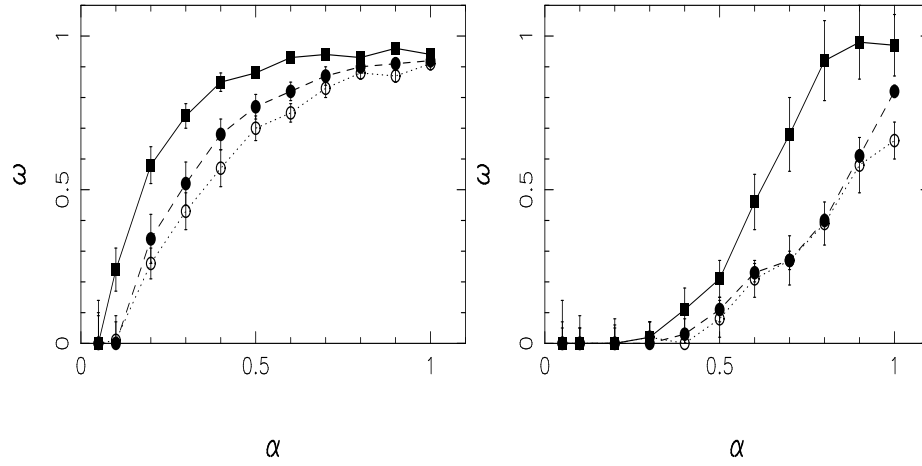


Figura 4.11: Parámetro de Brody para el ^{46}Sc cuando variamos el hamiltoniano según las ecuaciones 4.3 (cuadrados), 4.4 (círculos vacíos) y 4.5 (círculos llenos). En el panel izquierdo se representa el resultado para el espectro completo y en el panel derecho para energías de excitación menores de 5 MeV sobre la línea yrast.

un pequeño valor de α es suficiente para eliminar la degeneración de los autovalores y llevar la $P(s)$ a una distribución de Poisson real.

En la Fig. 4.12 representamos los resultados para la longitud de localización media en función del parámetro α para los tres modelos en el caso de los estados $J = 0$. Las curvas tienen un crecimiento distinto en los tres casos, siendo mucho menor para (4.4). El valor final de $\langle l_H \rangle$ es similar al obtenido para los isótopos de Ca .

Estos resultados explican la diferencia de comportamiento global entre los núcleos con un sólo tipo de nucleones, los isótopos de Ca en la capa pf , y los núcleos en que tenemos protones y neutrones. El comportamiento de la entropía de la función de onda y del parámetro ω para la totalidad del espectro se explican de forma apropiada con estos resultados. La menor intensidad de la parte residual de la interacción $T = 1$ comparada con la $T = 1$ es la causa de la diferencia en las características globales de la dinámica regular o caótica entre los isótopos de Ca y los isótopos de Sc . Sin embargo, el comportamiento espectacular de la $P(s)$ para los isótopos de Ca a baja energía no parece recibir una explicación adecuada si solamente tenemos en cuenta estos resultados. La diferencia entre los valores para la interacción

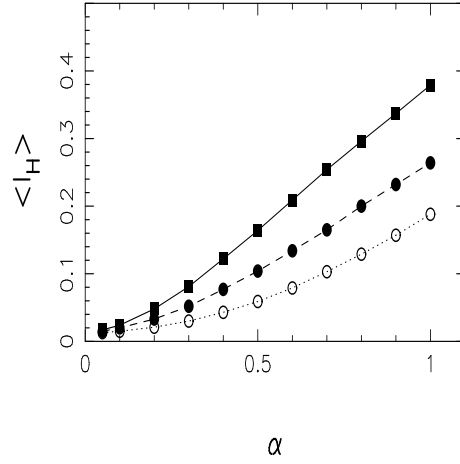


Figura 4.12: Valor de la longitud de localización media $\langle l_H \rangle$ cuando variamos el parámetro α de acoplamiento entre el hamiltoniano monopolar y sus distintas partes multipolares para los estados $J = 0, T = T_z$ del ^{46}Sc . Los cuadrados se corresponden con añadir el H_M completo, los círculos llenos son los resultados añadiendo $H_M^{T=0}$ y los vacíos $H_M^{T=1}$.

$T = 0$ y la $T = 1$ no resulta causa suficiente para la mayor regularidad observada en esos casos. Para una explicación completa necesitamos un ingrediente más. Abordaremos este problema en el apartado 4.5.

4.4 Δ_3 para grandes valores de L

En aquellos núcleos donde la distribución de espaciamientos a primeros vecinos es claramente tipo Wigner (por ejemplo, el ^{46}Sc o el ^{46}Ti) hemos encontrado que los valores de $\Delta_3(L)$ siguen la curva GOE, pero solamente hasta un valor $L = L_s$. Para $L > L_s$ la curva crece linealmente indicando un fuerte decrecimiento de la rigidez espectral. Este comportamiento también ha sido observado en la capa sd [46]. Hay distintas posibles explicaciones de este efecto en la Δ_3 . Ha sido relacionado con el inverso del exponente de Lyapunov que nos da la escala temporal para el desarrollo del caos clásico[108]. Las correlaciones de largo alcance que mide este estadístico, deben ser intensas únicamente para estados mezclados fuertemente por la interacción no diagonal. Debido a la intensidad finita de esta interacción debe existir un cierto

rango a partir del cual estas correlaciones disminuyan abruptamente. Este rango dependerá del parámetro α con el que relacionamos el hamiltoniano multipolar con el hamiltoniano monopolar.

Para verificar esta explicación hemos estudiado como la L_{sep} evoluciona en los estados $J^\pi = 1^+$ del ^{46}Sc a medida que cambiamos la intensidad de la interacción no diagonal. Hemos realizado los cálculos para valores del parámetro de acoplamiento $\alpha = 0.1 - 1.5$. La Fig. 4.4 nos muestra un incremento de L_{sep} hasta que alcanzamos $\alpha = 1$, en ese punto hay un pequeño aplanamiento y después continúa incrementándose. Estos resultados confirman nuestra hipótesis.

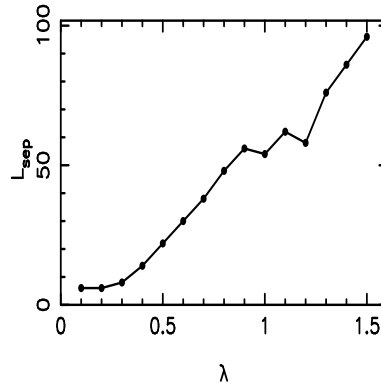


Figura 4.13: L_{sep} de la Δ_3 para los estados $J^\pi = 0^+$ del ^{46}Sc en función del parámetro de acoplamiento de la parte no diagonal del hamiltoniano con la parte diagonal.

4.5 Efecto de la interacción de pareamiento

Las interacciones realistas del modelo de capas presentan una estructura muy similar donde destaca la intensidad de ciertos elementos de matriz más importantes que el resto. Una de las partes de la interacción más importantes es la denominada *pareamiento*.

Una interacción de pareamiento constante en segunda cuantización se puede escribir como

$$V = -G \sum_{j,j',m,m'>0} (-1)^{j+m} (-1)^{j'+m'} a_{j,m}^+ a_{j,-m}^+ a_{j',-m'} a_{j',m'}, \quad (4.6)$$

donde j y m son los números cuánticos del momento angular y la tercera componente de las órbitas de partícula independiente. La interacción nos indica que un par de nucleones se aniquila en los estados $(j', m')(j', -m')$, esto es, un par acoplado a $J^\pi = 0^+$, y es dispersado a cualquier otro estado $(j, m)(j, -m)$ con intensidad constante G independiente del valor de m .

La interacción de pareamiento es considerada responsable de la separación entre el estado fundamental 0^+ y el primer estado excitado 2^+ . Interacciones de pareamiento esquemáticas son capaces de reproducir el espectro de excitación experimental de núcleos pesados y de tener en cuenta los efectos colectivos en las transiciones electromagnéticas en este tipo de núcleos.

Nosotros hemos investigado los efectos de la fuerza de pareamiento en las propiedades estadísticas del espectro. Hemos utilizado para ello un hamiltoniano

$$H = H_{KB3} + H_{par}(G), \quad (4.7)$$

variando la constante G de la interacción entre -0.12 MeV y 0.12 MeV , ya que la energía de excitación del primer estado 2^+ se puede reproducir por una interacción de pareamiento con $G = 0.12 \text{ MeV}$. Estamos quitando el pareamiento efectivo que existe en la fuerza KB3 y variamos la intensidad hasta añadir el doble.

Los resultados en la capa pf se muestran en las figuras 4.14 y 4.15. Podemos comprobar el dramático efecto del pareamiento en las fluctuaciones espectrales a baja energía mientras que para el espectro completo el efecto es inapreciable. Si quitamos parte de la interacción de pareamiento el valor del parámetro de Brody ω para $E < 5 \text{ MeV}$ crece apreciablemente, mientras que si lo aumentamos, ω se reduce, haciéndose el movimiento más regular. El efecto de reducción o aumento es parecido en ambos casos. Sin embargo, el valor del parámetro a baja energía era muy diferente en el ^{48}Ca con respecto al ^{52}Ca debido a la intensidad del campo medio, según hemos comentado anteriormente. Debido a esto, para $G = -0.12$ en el caso del ^{48}Ca tenemos un espectro a baja energía completamente caótico, mientras que la ω del ^{52}Ca para el mismo rango en el espectro vale 0.56.

Sin embargo, el cambio en el pareamiento no tiene efectos apreciables en el ^{46}Sc . Al ser los elementos de matriz de pareamiento los elementos acoplados a $J = 0$ solamente actúan cuando $T = 1$ para que se mantenga que $J+T = \text{impar}$. Por tanto sólo son importantes cuando tenemos nucleones del mismo tipo. La interacción residual en los isótopos del Sc es ya tan intensa que rompe el campo medio completamente y añadir pareamiento no cambia

nada.

El efecto más importante que produce el aumento de la intensidad del pareamiento es la conservación del número cuántico de senioridad. La senioridad ν se define como el número de partículas que no forman un par acoplado a $J = 0$. La interacción de pareamiento conserva el número ν . Cuando aumentamos G provocamos que ese número cuántico sea una cantidad aproximadamente conservada a baja energía. Sin embargo, al realizar el análisis estadístico del espectro mezclamos estados con ν distinto y bajamos la repulsión entre los niveles, aumentando la regularidad del espectro.

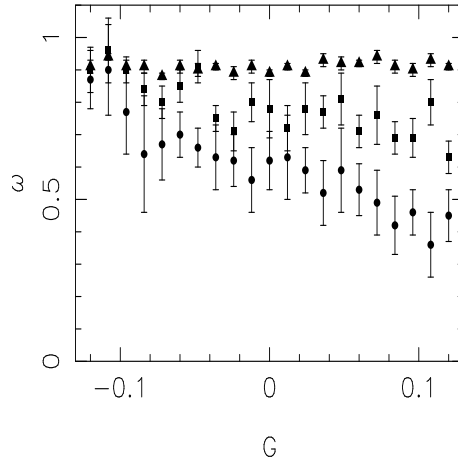


Figura 4.14: Efecto del pareamiento en el parámetro de Brody ω para la $P(s)$ en el ^{48}Ca . Los triángulos se refieren al espectro completo, los cuadrados al espectro para $E < 10\text{MeV}$ y los círculos al espectro para $E < 5\text{MeV}$.

Estadísticos que tienen en cuenta todo el espectro conjuntamente, como la l_H o la Δ_3 tampoco sufren variación apreciable al cambiar la intensidad del pareamiento.

Una explicación alternativa para el cambio de comportamiento de la Δ_3 para valores grandes de L fue propuesta por Zelevinsky et al. [46]. Se intentaba explicar el comportamiento de L_{sep} del que hemos hablado en una sección anterior relacionándolo con el comportamiento cuasiperiódico inducido por los elementos de matriz de pareamiento. Sin embargo, añadiendo una fuerza de pareamiento a KB3, hemos comprobado que la L_{sep} no cambia de manera significativa hasta que su intensidad G es tan grande que es la única interacción efectiva del hamiltoniano. El pareamiento, por tanto, no afecta

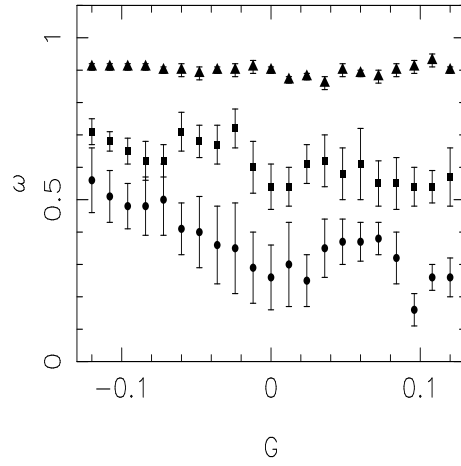


Figura 4.15: Efecto del pareamiento en el parámetro de Brody ω para la $P(s)$ en el ^{52}Ca . Los triángulos se refieren al espectro completo, los cuadrados al espectro para $E < 10\text{MeV}$ y los círculos al espectro para $E < 5\text{MeV}$.

a las propiedades globales de la dinámica y únicamente a los estados de baja energía.

4.6 Resultados para la región del Pb

La región del Pb es la región de los núcleos que se pueden describir a partir de un *core* del núcleo doble mágico del ^{208}Pb , que tiene $Z = 82$ y $N = 126$. El espacio de valencia para describir los protones y el de los neutrones son distintos, al contrario que en la capa pf .

El espacio de valencia para neutrones se compone de siete órbitas: $0i_{11/2}$, $1g_{9/2}$, $1g_{7/2}$, $2d_{5/2}$, $2d_{3/2}$, $3s_{1/2}$, $0j_{15/2}$ mientras que el espacio de valencia para protones se compone de seis órbitas: $0h_{9/2}$, $1f_{7/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$, $0i_{13/2}$.

Las dimensiones de las matrices del modelo de capas en este espacio crecen de forma vertiginosa con el número de partículas, por lo que nuestros resultados se limitan a unos pocos isótopos, pero son suficientemente significativas para comprobar que los fenómenos observados en la capa pf son suficientemente generales.

La densidad de energía en esta región es mucho mayor que en la región del Ca , por lo que las regiones de baja energía que consideramos son distintas.

En la tabla 4.2 tenemos una relación de los espaciamientos utilizados y los resultados para la ω y la l_h .

Tabla 4.2: Resultados en la región del Pb para $A = 212$.

Núcleo	^{212}Pb	^{212}Bi	^{212}Po	^{212}At	^{212}Rn
J	0-19	0-19	0-19	0-19	0-14
E<1 MeV	108	541	206	141	66
ω	0.25 ± 0.11	0.49 ± 0.06	0.51 ± 0.13	0.40 ± 0.06	0.02 ± 0.11
E<2 MeV	407	2641	998	671	203
ω	0.45 ± 0.05	0.66 ± 0.06	0.57 ± 0.09	0.83 ± 0.05	0.03 ± 0.07
Toda E	13973	38405	53371	23677	4843
ω	0.79 ± 0.03	0.88 ± 0.02	0.91 ± 0.01	0.84 ± 0.04	0.34 ± 0.02
$l_H(J = 0)$	0.1560	0.1985	0.2001	0.1977	0.0582

El reescalado en esta capa se realizó de forma distinta a la capa pf debido a las distintas energías que era necesario tener en cuenta. Hasta $1MeV$ por encima de la línea yrast utilizamos el reescalado con la fórmula de la temperatura constante. En los otros dos casos utilizamos la expansión de Edgeworth, ec. (3.10). Para un ajuste correcto de las densidades de niveles de las matrices en esta región era importante utilizar los primeros cuatro momentos.

Para completar el análisis de la región del Pb hemos realizado el cálculo para el ^{214}Pb . Las dimensiones del problema hace que sea imposible hacer el cálculo completo de las matrices excepto en el caso de momentos angulares altos. Los momentos angulares incluidos en el cálculo han sido $J = 23 - 35$. El resultado para el parámetro de Brody en el caso de todas las energías es $\omega = 0.83 \pm 0.03$ (10282 espaciamientos), para $E < 2MeV$ $\omega = 0.66 \pm 0.06$ (591 espaciamientos) y para $E < 1MeV$, $\omega = 0.50 \pm 0.14$ (136 espaciamientos). La longitud de localización de la entropía para el caso de $J = 23$ vale 0.1794. Los resultados son consistentes con un incremento suave de la caoticidad del ^{212}Pb al ^{214}Pb de forma similar a lo que sucedía en el caso de los isótopos de Ca en la capa pf .

En los núcleos pesados el campo medio es mucho más intenso que en los núcleos ligeros. La interacción residual debe ser de intensidad mayor para

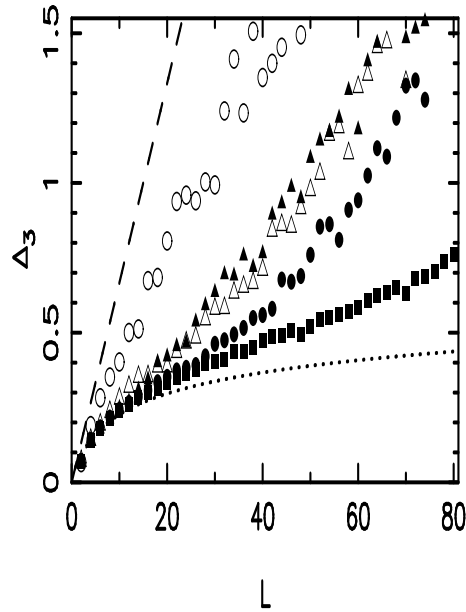


Figura 4.16: Δ_3 para los núcleos con $A = 212$. Ordenados de menos caótico a más caótico: Los círculos vacíos son los resultados para el ^{212}Rn que se describe mediante 4 n de valencia sobre el *core* de ^{208}Pb . Los triángulos negros se corresponden con el ^{212}Pb , 4 p de valencia. Los triángulos vacíos son el cálculo para el ^{212}At , 1 n y 3 p. Los círculos llenos el ^{212}Bi , 3 n y 1 p. Finalmente, los cuadrados llenos representan al ^{212}Po , 2 n y 2p. Los resultados muestran claramente una dependencia en el isospín y el número de interacciones n-p mucho más intensas que las n-n y p-p.

romper el movimiento regular. Por tanto, la estadística espectral en estos núcleos es más parecida a Poisson, sobre todo a baja energía.

En la Fig. 4.6 podemos observar los resultados del cálculo para la Δ_3 de los núcleos en la región del *Pb* con $A = 212$. Podemos comprobar con más detalle la dependencia en isospín de la caoticidad del núcleo, ya comentada para los núcleos de la capa pf. Los resultados son similares cualitativamente a los obtenidos por Otsuka et al.[11] pero son bastante diferentes cuantitativamente debido al uso de una interacción realista. La dependencia con el isospín está mucho más clara en nuestros cálculos, además de que los resultados a baja energía han incluido muchos más niveles y tienen mejor estadística.

4.6.1 Pareamiento en la región del Pb

En la región del *Pb* ajustamos la constante máxima G que utilizamos con la energía de excitación entre el estado fundamental y el primer estado 2^+ del ^{212}Pb con el resultado de $G = 0.08\text{MeV}$. Un análisis similar a los anteriores de la capa *pf* pero para este isótopo se muestra en la Fig. 4.17. Aquí también es muy intenso el campo medio por lo que no llegamos a tener un núcleo caótico a baja energía aunque quitemos todo el pareamiento, pero el efecto que tiene en el parámetro ω a baja energía es evidente.

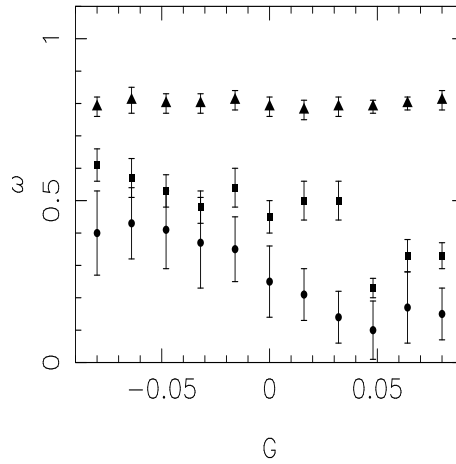


Figura 4.17: Efecto del pareamiento en el parámetro de Brody ω para la $P(s)$ en el ^{212}Pb . Los triángulos se refieren al espectro completo, los cuadrados al espectro para $E < 2\text{MeV}$ y los círculos al espectro para $E < 1\text{ MeV}$.

4.7 Conclusiones

El efecto del pareamiento en las dos regiones estudiadas es muy similar, a pesar de las diferencias de la intensidad del campo medio y de la interacción. Por lo tanto, podemos concluir que estos efectos deben ocurrir de forma semejante a lo largo de toda la carta nuclear. En este capítulo hemos realizado un estudio detallado de las fluctuaciones espectrales y la complejidad de las funciones de onda en el modelo de capas de física nuclear utilizando conceptos del caos cuántico y la teoría de matrices aleatorias. Nos hemos

concentrado en dos regiones de la tabla nuclear, la capa pf y la región del Pb , representativas de núcleos de masa intermedia y de núcleos pesados.

La relación entre la intensidad del campo medio y la intensidad de la interacción residual es el parámetro principal del que depende el nivel de caoticidad de los núcleos. Para energías de excitación bajas la mezcla de configuraciones en el modelo de capas es menor. Por tanto, la complejidad de las funciones de onda y la repulsión de los niveles disminuye. Que se reduzcan lo suficiente para que el espectro presente características de regularidad depende de múltiples factores interrelacionados de manera muy compleja: la interacción de apareamiento, el número pares neutrón-protón en relación al número de pares protón-protón y neutrón-neutrón, debido a que la interacción $T = 1$ es mucho más débil que la interacción $T = 0$ y la intensidad del campo medio.

La interacción de apareamiento puede reproducir numerosas características del espectro experimental de núcleos par-par a baja energía. En el modelo de capas hemos comprobado que tiene una influencia decisiva para el comportamiento de las fluctuaciones espectrales, en concreto de la $P(s)$ a baja energía. Sin embargo, a energías altas pierde esa influencia.

La intensidad del campo medio y la intensidad efectiva de la interacción residual, con su dependencia del isoespín, tienen influencia en la estadística del espectro completo de las matrices del modelo de capas. La $P(s)$, esto es, la repulsión a primeros vecinos, no es suficientemente sensible a estas diferencias. Sin embargo, otros estadísticos como la Δ_3 , que mide las correlaciones de largo alcance, y la entropía de la información de las funciones de onda cambian apreciablemente con el isoespín del núcleo considerado.

Para determinar el grado de caoticidad de un sistema a partir de su espectro cuántico no basta con medir su $P(s)$. Es necesario también calcular otros estadísticos como la $\Delta_3(L)$ y hacerlo hasta el máximo valor de L que se pueda en cada caso.

Capítulo 5

Dinámica de niveles en matrices del modelo de capas

La dinámica de niveles, como explicamos en la introducción, trata del estudio de los autovalores y las autofunciones de un hamiltoniano cuando variamos un parámetro de este. En el caso del modelo de capas lo que nos interesa es cómo cambian las propiedades del sistema cuando pasamos del campo medio sin interacción residual al hamiltoniano completo con el campo medio y la interacción residual completa. ¿Qué cantidad de interacción residual necesitamos para destruir el movimiento regular del campo medio?. ¿Dónde empieza el caos?. Estas son las preguntas que abordaremos en este capítulo.

5.1 Transición del hamiltoniano diagonal al hamiltoniano completo

Como ya hemos visto, existen dos tipos de transiciones entre hamiltonianos que pueden ser estudiadas mediante la dinámica de niveles. Las transiciones internas que no cambian las propiedades de la dinámica regular o caótica del sistema y las transiciones externas donde sí las cambiamos.

La transición del hamiltoniano diagonal al hamiltoniano completo en el modelo de capas pertenece al tipo de transiciones externas. Estamos cambiando las propiedades del sistema ya que incluimos las correlaciones que introducen los elementos no diagonales. Pasamos de un sistema regular a

uno caótico. Vamos a usar un $H(\lambda)$ de la forma,

$$H = H_d + \lambda H_{nd}. \quad (5.1)$$

Podemos identificar el hamiltoniano diagonal como el hamiltoniano monopolar y el no diagonal como el hamiltoniano multipolar como hemos explicado en el capítulo anterior. Estudiando el $H(\lambda)$ de esta transición estamos investigando cómo la interacción residual destruye paulatinamente la regularidad del campo medio.

Las cantidades que vamos a calcular serán el número de cruces evitados en función del parámetro, la repulsión de niveles en función de λ y la evolución de la entropía de la información de las funciones de onda en la base del campo medio.

Una matriz del modelo de capas se caracteriza por tener una diagonal con abundantes degeneraciones y numerosos elementos de matriz de la no diagonal nulos debido a la interacción a dos cuerpos. Estas características diferencian profundamente los resultados de la dinámica de niveles del modelo correspondiente a (5.1) de los resultados de un modelo similar basado en matrices GOE.

Hemos estudiado las transiciones paralelas en dos ejemplos: la matriz correspondiente al estado $J^\pi = 11^+$, $T - T_z = 0$ del ^{46}Sc con dimensión $d = 338$ y la matriz correspondiente al estado $J^\pi = 0^+$, $T - T_z = 0$ del ^{50}Ca con dimensión $d = 468$. Ambas los suficientemente grandes para tener una estadística significativa, pero lo suficientemente pequeñas para permitir el cálculo de numerosos valores de λ intermedios.

Además, hemos comparado nuestros resultados con la transición de Poisson a GOE para una matriz con $d = 400$. Hemos añadido a este modelo un factor dependiente del parámetro λ multiplicando al H_d para permitir que la $\text{Tr} H^2$ sea constante para todo λ evitando los efectos debidos al ensanchamiento del espectro que no ocurren en el modelo de la ecuación (5.1) basado en las matrices del modelo de capas.

$$H = f(\lambda)H_d^{GOE} + \lambda H_{nd}^{GOE}. \quad (5.2)$$

La función $f(\lambda)$ apropiada para que $\text{Tr} H^2(\lambda) = \text{Tr} H^2(\lambda = 1)$ es

$$f(\lambda) = \sqrt{\frac{1 - \lambda^2}{2}N + \frac{1 + \lambda^2}{2}}. \quad (5.3)$$

Si no tuvieramos en cuenta este factor, la densidad media de los niveles disminuiría al aumentar el valor de λ , produciendo un alejamiento entre ellos que enmascararía los efectos en la dinámica de niveles.

En las Fig. 5.1 y 5.2 se representa la energía de los niveles de ambos núcleos en función del valor del parámetro λ en una zona cercana al centro del espectro. Se puede observar una evolución similar en ambos casos. La única diferencia entre ambas figuras es debida a que hemos incluido más niveles en la figura correspondiente al Ca para comparar mejor el comportamiento en dos escalas. Las diferencias globales entre los isótopos de Ca y Sc que hemos descrito en el capítulo anterior no son suficientemente importantes para que se noten en una gráfica de este tipo. Al principio, las degeneraciones del hamiltoniano monopolar se rompen. Los niveles se separan en el régimen correspondiente a la teoría de perturbaciones a primer orden. Cuando uno de los grupos degenerados alcanza a otro, se producen colisiones muy violentas en el borde. El aspecto del espectro en función del parámetro es similar al de varios solitones independientes. Podemos distinguir estructuras de cruces evitados que se propagan prácticamente sin deformación durante un rango del parámetro λ suficientemente amplio. Sin embargo, a medida que aumentamos λ la imagen de turbulencia de solitones que comentamos en el segundo capítulo se hace más nítida. Las estructuras persistentes del espectro desaparecen.

5.2 Repulsión de niveles

Hemos calculado el parámetro ω de Brody para valores de λ entre 0 y 1, siendo $\lambda = 1$ el valor correspondiente a la matriz verdadera. Los resultados para el ^{46}Sc están representados en la Fig. 5.3 y los cálculos sobre el ^{50}Ca se muestran en la Fig. 5.4.

Lo primero que llama la atención de esas figuras son las rápidas oscilaciones del parámetro de repulsión en todos los valores de λ . Más adelante intentaremos explicar a qué son debidas las oscilaciones. El comportamiento general está más claro. El parámetro de Brody sube de forma lenta hasta que para valores de $\lambda = 0.7 - 0.8$ alcanza el valor de saturación correspondiente al GOE. El crecimiento de la matriz correspondiente al Sc va ligeramente por encima del correspondiente a la matriz del Ca para λ entre 0.2 y 0.7, valor a partir del cual ambas gráficas se entrecruzan. El comportamiento del parámetro de repulsión para el modelo de transición Poisson-GOE es muy

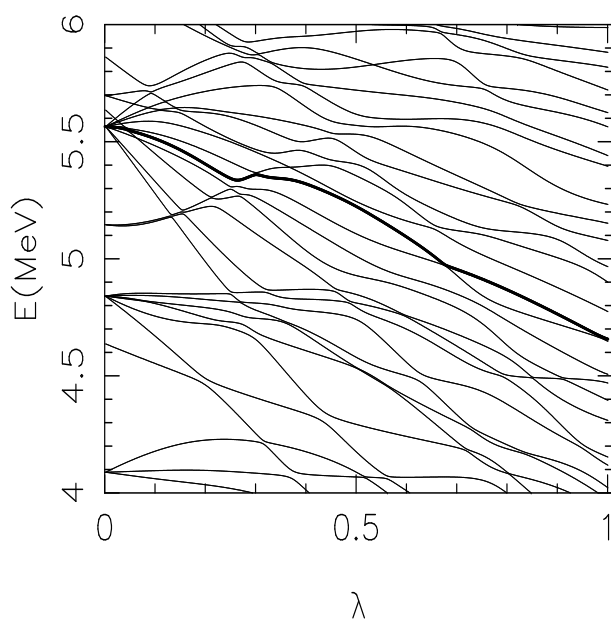


Figura 5.1: Energía de los niveles del ^{46}Sc $J = 11$ en función del valor de λ . El nivel número 69 está resaltado. Es el nivel al que corresponde la figura 5.10.

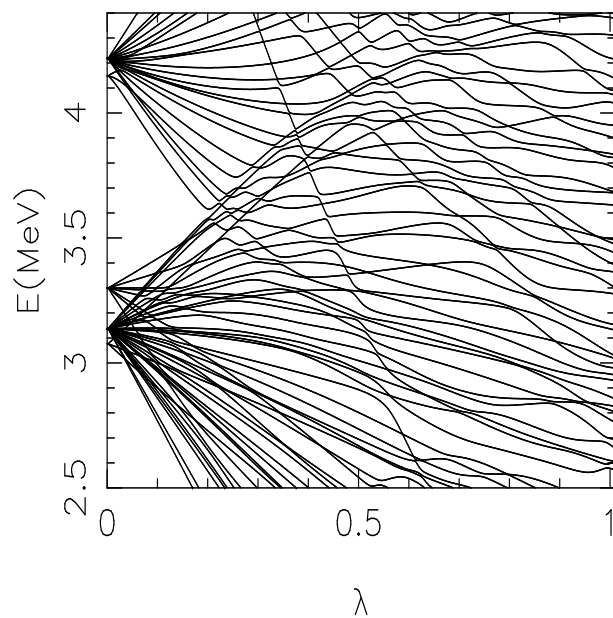


Figura 5.2: Energía de los niveles en función de λ para el ^{50}Ca $J = 0$.

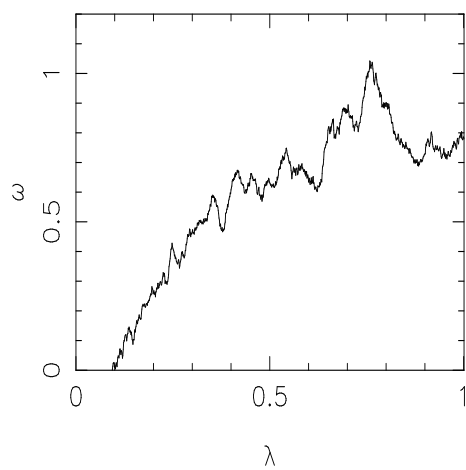


Figura 5.3: Valores del parámetro de repulsión ω para los niveles del ^{46}Sc con $J = 11$ en función del parámetro λ que nos acopla el hamiltoniano monopolar con el hamiltoniano multipolar.

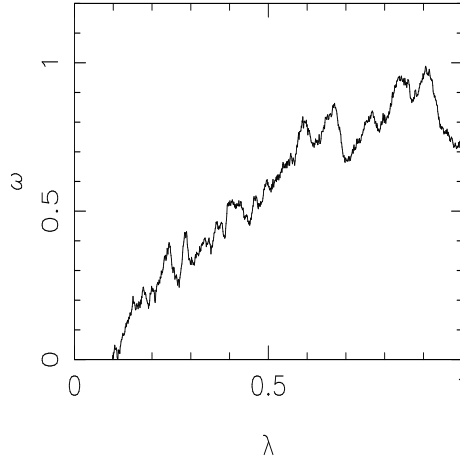


Figura 5.4: Valores del parámetro de repulsión ω para los niveles del ^{50}Ca con $J = 0$ en función del parámetro λ que nos acopla el hamiltoniano monopolar con el hamiltoniano multipolar.

distinto. Al no haber degeneraciones, el crecimiento de ω comienza en cuanto añadimos interacción no diagonal y al ser todos sus elementos distintos de cero el crecimiento es mucho más rápido, alcanzando la saturación para $\lambda \simeq 0.2$. Sin embargo, las oscilaciones una vez alcanzada la saturación se mantienen de forma similar.

5.3 Cruces evitados

El número de cruces evitados ha sido utilizado tradicionalmente para señalar la transición entre el espectro regular y el caótico[113]. En las siguientes figuras podemos comparar el número de cruces evitados dependiendo del valor de λ . En los dos ejemplos provenientes de matrices del modelo de capas tenemos un máximo en el número de cruces evitados aproximadamente en el punto en que el parámetro ω empieza a hacerse diferente de 0. Sin embargo, para el modelo de transición Poisson-GOE representado en la figura 5.5 el máximo ocurre para $\lambda = 1$ aunque también tenemos un crecimiento pronunciado del número de cruces evitados para valores de λ próximos a cero coincidente con el rápido paso de la repulsión de niveles desde un sistema regular a uno caótico. En los tres casos hay máximos locales en el número de cruces evitados en las zonas donde las fluctuaciones en el valor del parámetro

ω son mayores.

Según la ecuación (2.30) existe una relación directa entre la distribución de curvaturas y el parámetro β que mide la repulsión de niveles. En este caso podemos identificar β y ω por el comportamiento de la $P(s) \sim s^\beta$ cuando $s \rightarrow 0$ [89, 115]. La curvatura de los niveles aumenta cuando sufren cruces evitados y su distribución depende directamente de su número. Por tanto, las fluctuaciones del parámetro ω deben depender de alguna forma del número de cruces evitados.

Observando las figuras 5.1 y 5.2, que nos muestran cómo evolucionan los autovalores en la zona central del espectro, podemos imaginarnos el motivo de esa correlación entre el número de cruces evitados y el parámetro de repulsión. El primer máximo en el número de cruces evitados para el ^{46}Sc coincide con la zona donde los grupos de niveles degenerados se han abierto lo suficiente para alcanzarse entre sí, colisionando los niveles que están en los bordes unos con otros. Justo después de ese punto de máximo de colisiones tenemos máximos en el parámetro de repulsión ya que los niveles se alejan unos de otros. El carácter de la fuerza a dos cuerpos, con muchos ceros en la matriz, produce fuerzas más violentas en algunos niveles mientras que otros se ven menos afectados. Eso aumenta el número de colisiones global y explica cualitativamente la diferencia en las fluctuaciones del parámetro de repulsión.

Un estudio más detallado de todas estas cuestiones y el cálculo de la distribución de curvatura en función de λ sería altamente deseable pero, desgraciadamente, debido a la magnitud de los cálculos a realizar para ello no ha sido posible. En cualquier caso, hemos demostrado algunas características no universales de la transición entre movimiento regular y caótico de las matrices del modelo de capas mediante la comparación con el modelo de transición Poisson-GOE. Las degeneraciones en el límite regular y los ceros no diagonales que introducen correlaciones entre los niveles, inexistentes en las matrices GOE y directamente relacionadas con el carácter de la fuerza a dos cuerpos, son las causas más probables de estas características no universales.

5.4 Funciones de onda

Vamos a estudiar ahora la entropía de la información de las funciones de onda. Analizaremos un mecanismo basado en el modelo de gas de solitones para el espectro de los sistemas cuánticos para estudiar el comportamiento

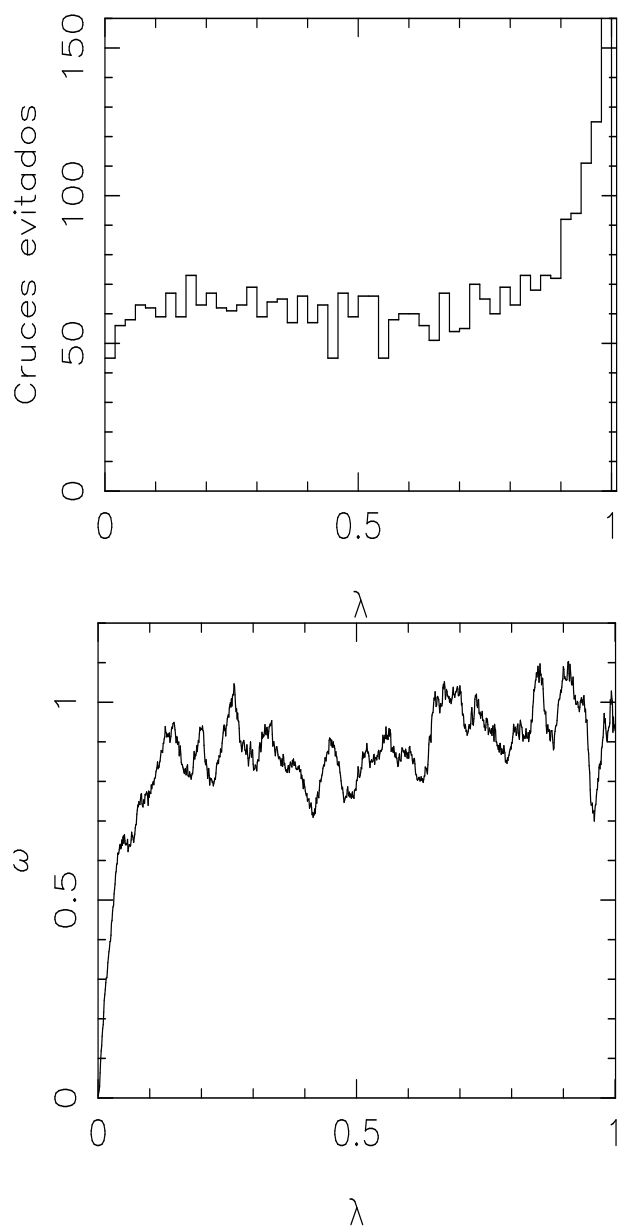


Figura 5.5: En el panel de arriba número de cruces evitados en función de λ para el modelo que relaciona la intensidad de la interacción diagonal con la no diagonal de una matriz GOE con $d = 400$ según la Eq. 5.2 y en el panel de abajo valor del parámetro ω para el mismo modelo.

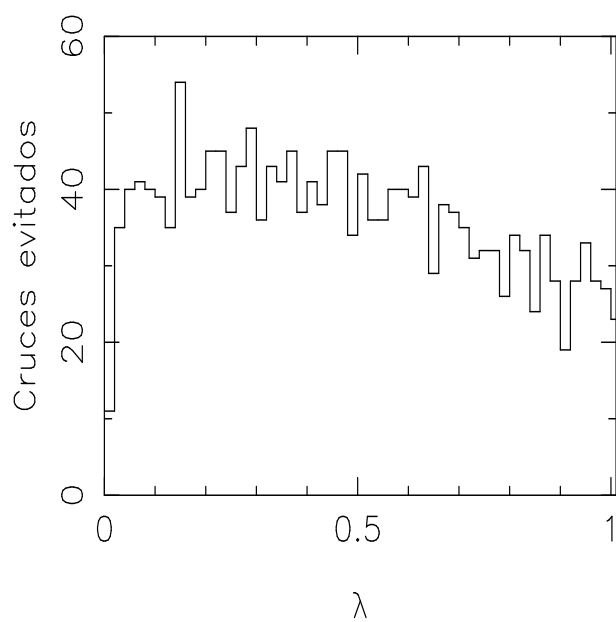


Figura 5.6: Número de cruces evitados en función de λ para el ^{46}Sc $J = 11$.

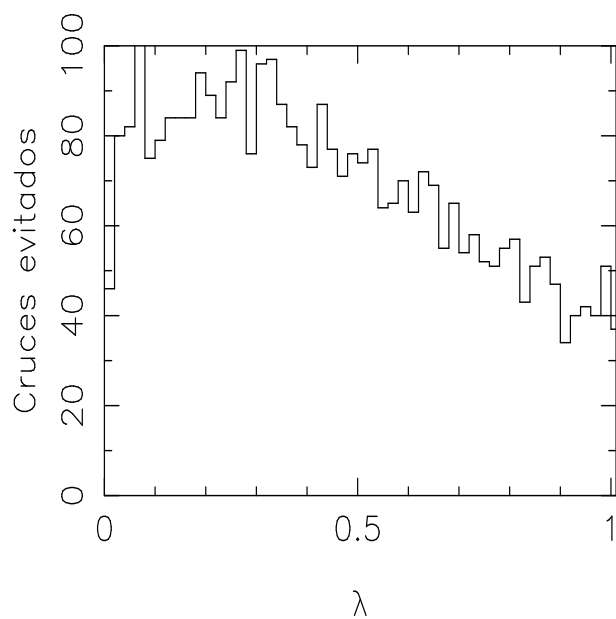


Figura 5.7: Número de cruces evitados en función de λ para el ^{50}Ca $J = 0$.

de las funciones de onda individuales.

Para tener una idea más clara de lo que ocurre con las funciones de onda cuando variamos un parámetro del hamiltoniano vamos a analizar primero modelos más sencillos basados en el solitón de Gaspard *et al.*[84]. El ejemplo que ellos proponen para una solución solitónica de las ecuaciones de la dinámica de niveles es una matriz con la siguiente dependencia en un parámetro τ ,

$$H(\tau) = \begin{pmatrix} y_1 & 0 & \dots & u_{i1} & \dots & 0 \\ 0 & y_2 & \dots & u_{i2} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_{i1} & u_{i2} & \dots & y_i + p_i\tau & \dots & u_{iN} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & u_{iN} & \dots & y_N \end{pmatrix}, \quad (5.4)$$

donde $y_n < y_{n+1}$. El espectro de este sistema se compone de N autovalores independientes de τ a los que cruza un nivel extra con una pendiente dada por el parámetro p . Cada cruce entre niveles es un cruce evitado.

Si sumamos dos de estas soluciones para distintos valores de i obtenemos el resultado representado en la Fig. 5.8. La dinámica de niveles y la evolución de la entropía de la información presentan una perfecta correspondencia en este caso. Los cruces evitados, que en este caso son simples, intercambian las funciones de onda. Durante el tiempo que dura el cruce la entropía de la información aumenta ya que las funciones de onda tienen componentes de los dos niveles. Al terminar el cruce la entropía vuelve a su valor anterior aunque las funciones de onda se han intercambiado. Este análisis demuestra que las soluciones son realmente solitónicas. La interacción entre dos de ellas no cambia su forma ni su velocidad. De alguna manera, podemos considerar que los solitones transportan la entropía de la información.

Vamos a ver ahora lo qué sucede cuando en lugar de dos o unos pocos solitones tenemos muchos. Consideraremos un modelo parecido al anterior pero sumando 100 soluciones del tipo (5.4) con valores de p_i y de u_{in} distribuidos uniformemente entre -1 y 1 . El resultado de la dinámica de niveles y de la entropía de la información de las funciones de onda aparece en la Fig. 5.9 representado para 12 niveles en el centro del espectro. En este caso la figura aparece completamente desordenada y sin estructura aparente aunque una mirada más atenta puede descubrir todavía los cruces evitados persistentes. La entropía de la información presenta oscilaciones y pequeños picos, pero no aparecen estructuras identificables. Tenemos un ejemplo de lo que

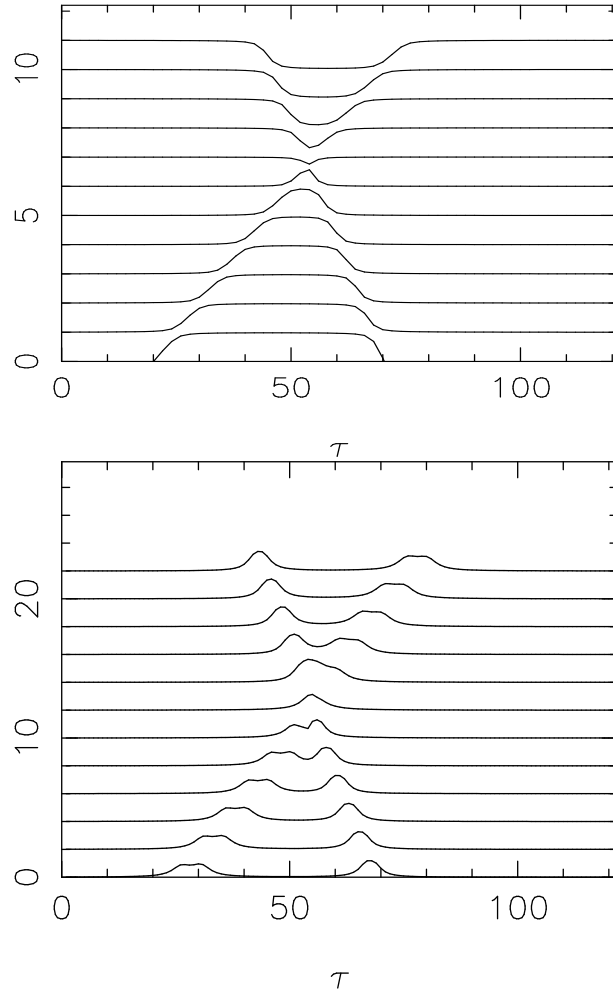


Figura 5.8: Bisoliton y entropía de información de las funciones de onda. En el panel de arriba se representa la evolución de los niveles en función del parámetro τ para dos soluciones del tipo de la fórmula (5.4) sumadas para dos valores de i distintos y con parámetros $y_n = n$, $p_1 = 1$, $p_{15} = -2$, $u_{1n} = 0.2$ y $u_{15n} = 0.3$. En el panel de abajo aparecen la entropía de la información de los doce primeros niveles en una escala arbitraria con el origen del eje de abscisas desplazado para cada uno de ellos para poder observar el efecto en la entropía de los cruces evitados y comparar con la dinámica de niveles.

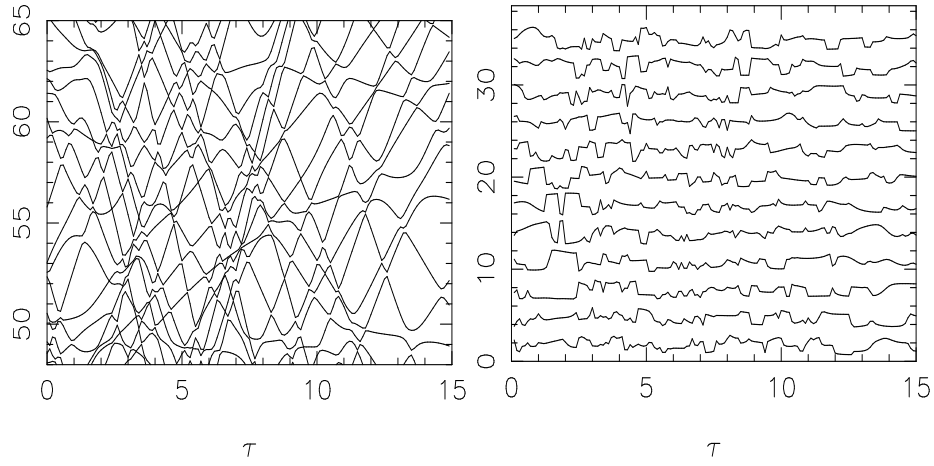


Figura 5.9: Dinámica de niveles (derecha) y entropía de la información (izquierda) para la parte central del espectro en un modelo de 100 solitones.

Ishio y Nakamura han denominado turbulencia de solitones en la dinámica de niveles. Aquí el espectro es completamente caótico. Sus fluctuaciones y la entropía de la información son similares a las del GOE[116].

Pasemos ahora a estudiar los modelos basados en matrices del modelo de capas y en matrices del GOE. La longitud de localización media de las funciones de onda crece de forma muy diferente en los dos modelos. En el caso de matrices de modelo de capas tiene una subida brusca debido a la rotura de las degeneraciones y después va subiendo muy lentamente hasta el valor final. Para el modelo basado en matrices GOE la $\langle l_H \rangle$ crece de forma constante entre 0 para $\lambda = 0$ y 1 para $\lambda = 1$.

Podemos investigar qué sucede con la entropía de un estado particular del espectro. En general, observamos dos tipos de fenómenos. Los picos individuales se producen debido a colisiones a dos niveles. Este tipo de colisiones intercambian la función de onda de dos niveles. Durante la colisión cada uno de los niveles tiene una función de onda mezcla de los dos, por lo que su entropía es mayor. Al terminar la colisión, la entropía es la misma que al principio. De la misma manera que en el modelo de dos solitones. Las funciones de onda simplemente se han intercambiado. Las verdaderas causantes del aumento de la entropía son las colisiones múltiples. Si durante una colisión a dos niveles un nuevo nivel colisiona en el mismo momento en que las funciones de onda están mezclándose sin dar tiempo a que se terminen

de intercambiar, la entropía crece mucho más deprisa. Los cruces evitados simples ocurren cuando el espectro está en una zona de solitones independientes mientras que los cruces evitados múltiples aparecen en la zona en que tenemos turbulencia de solitones. En la Fig. 5.10 vemos la evolución de la entropía de la información del estado 69 del espectro del $^{46}\text{Sc } J^\pi = 11^+$. La entropía crece de forma brusca al principio debido a que el nivel está degenerado con otros cinco y sus funciones de onda se mezclan completamente. Las primeras colisiones entre esos niveles degenerados producen un pequeño pico que no cambia esencialmente la entropía total función de onda. En la zona entre $\lambda = 0.2$ y $\lambda = 0.4$ el estado sufre una colisión múltiple. La entropía comienza a subir debido al intercambio de funciones de onda por la primera colisión y antes de que le de tiempo a bajar sufre nuevas colisiones que vuelven a mezclar las componentes, con el resultado final de un aumento importante en el valor de la entropía de la información del estado, que se mantiene cuando los choques acaban. Podemos comprobar observando esta figura y la evolución de la energía del estado en la Fig. 5.1 que la pendiente de aumento de la entropía está directamente relacionada con lo brusco que sea el cruce evitado, esto es, la velocidad de aproximación entre las dos partículas y la curvatura de los niveles en esa zona.

Podemos postular que este mecanismo de cruces evitados múltiples es universal para explicar el aumento de la entropía de las funciones de onda individuales en modelos de transición entre funciones de onda.

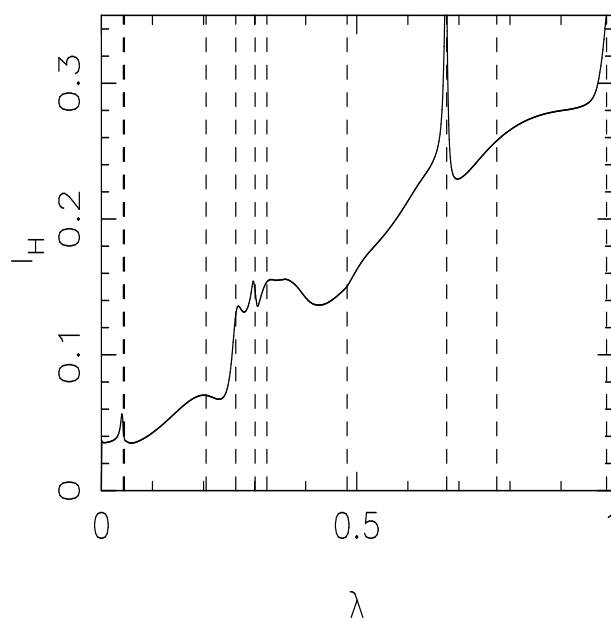


Figura 5.10: Evolución de la entropía de la información en función del parámetro λ para el nivel $N = 69$ del ^{46}Sc $J = 11$. La posición de los cruces evitados está señalada con líneas verticales discontinuas. La evolución de la energía del nivel se puede apreciar en la gráfica 5.1.

Capítulo 6

Matrices de Lanczos

6.1 Método de Lanczos

Para la solución de problemas que incluyan fermiones que interaccionan entre sí, como es el caso del modelo de capas, necesitamos diagonalizar matrices de dimensión muy grande. Uno de los métodos más apropiados en la práctica para la diagonalización de grandes matrices es el método de Lanczos.

Lanczos[114] demostró de forma constructiva que una matriz simétrica se puede reducir siempre a una matriz tridiagonal, rápida y fácil de diagonalizar.

El algoritmo que propuso consiste en elegir un vector de partida, denominado pivote, al que se aplica de forma repetida la matriz. En cada paso obtenemos nuevos vectores, que debemos ortonormalizar para conseguir una base. En esta nueva base la matriz es tridiagonal.

El primer paso del proceso consiste en:

$$H|0\rangle = \langle 0|H|0\rangle|0\rangle + [H - \langle 0|H|0\rangle]|0\rangle \equiv H_{00}|0\rangle + |1'\rangle. \quad (6.1)$$

Por construcción, el estado $|1'\rangle$ es ortogonal al $|0\rangle$. Cuando normalizamos obtenemos

$$|1'\rangle = \sqrt{\langle 1'|1'\rangle} \equiv \sqrt{\langle 1'|1'\rangle}|1\rangle \equiv H_{01}|1\rangle. \quad (6.2)$$

Aplicando posteriormente el hamiltoniano H sobre el estado $|1\rangle$ podemos obtener el estado $|2'\rangle$ y así sucesivamente. Si aplicamos H sobre el estado normalizado $|m\rangle$,

$$H|m\rangle = H_{mm-1}|m-1\rangle + H_{mm}|m\rangle + |(m+1)\rangle. \quad (6.3)$$

Por tanto, al normalizar el nuevo estado nos queda,

$$H_{mm+1} = \langle (m+1)' | (m+1)' \rangle^{1/2}. \quad (6.4)$$

En la nueva base de Lanczos la matriz es tridiagonal y sus elementos de matriz son los H_{mm} y los H_{mm+1}

El procedimiento de Lanczos es equivalente a ortogonalizar el conjunto de estados $|0\rangle, H|0\rangle, H^2|0\rangle, \dots, H^n|0\rangle$. Esta última forma de obtener la matriz es muy costosa desde un punto de vista práctico, pero nos permite obtener la forma de los estados de la base de Lanczos en función de los momentos del hamiltoniano con respecto al estado pivote $|0\rangle$, $\langle 0|H^k|0\rangle = \langle H^k \rangle$. Las expresiones son realmente complicadas, pero nos permiten comprender mejor como actúa el método de Lanczos. La submatriz IxI obtenida en la I-ésima iteración del método de Lanczos contiene toda la información concerniente a los momentos $\langle H^k \rangle$ para $k = 1, 2, \dots, 2I - 1$.

La gran ventaja del algoritmo de Lanczos es que la energía y las funciones de onda de los estados de menor y mayor energía obtenidos al diagonalizar las submatrices correspondientes a la I-ésima iteración convergen rápidamente a los valores reales. El tiempo de cálculo de cada iteración a partir de una cierta dimensión es considerable. Este tiempo se reduce enormemente si la matriz original en la base de campo medio tiene muchos elementos de matriz nulos, como es el caso de las matrices correspondientes a hamiltonianos con interacciones a dos cuerpos. Es en este contexto donde el método de Lanczos se vuelve extremadamente eficaz y se utiliza para resolver gran multitud de problemas en física de la materia condensada y en física nuclear.

6.2 Estructura de las matrices de Lanczos

En la Fig 6.1 podemos observar los elementos de matriz de la diagonal y de la no diagonal de la matriz Lanczos completa correspondiente al cálculo del espectro del ^{48}Ca con la interacción KB3.

Según el trabajo de Zuker *et al.*[95, 98, 117], los elementos de matriz de la diagonal en las matrices Lanczos correspondientes a hamiltonianos con interacciones a dos cuerpos se distribuyen alrededor de un valor constante con ciertas fluctuaciones dependientes del pivote para casos esféricos y fluctúan alrededor de una ley logarítmica para casos deformados. Los elementos de matriz de la no diagonal siguen lo que se ha denominado una binomial inversa, directamente relacionada con la densidad de estados correspondiente

al hamiltoniano estudiado, fórmula (3.9). La binomial inversa que reproduce

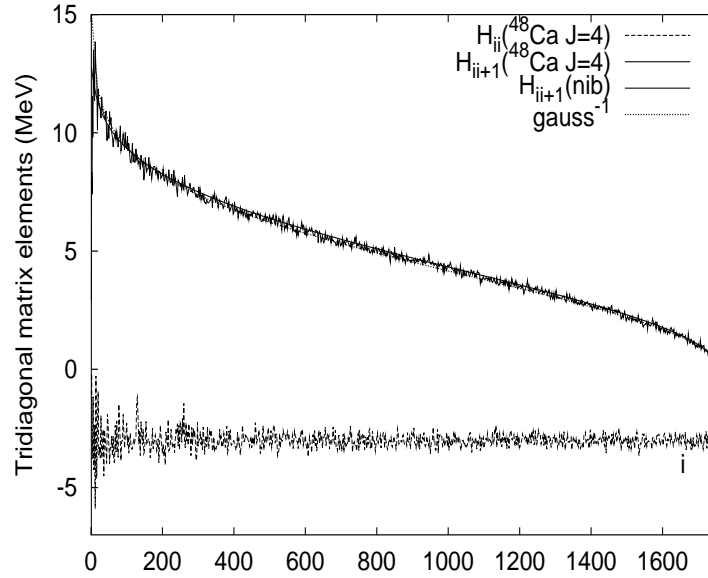


Figura 6.1: Elementos de matriz de la matriz de Lanczos correspondiente a los estados con $J = 4$ del ^{48}Ca . El ajuste de los elementos no diagonales se ha realizado para una binomial inversa y para una gaussiana invertida. Los elementos de matriz diagonal se puede comprobar que están alrededor de una recta constante de valor aproximadamente -3.5 MeV[98].

los elementos de la no diagonal tiene los mismos parámetros que la que ajusta la densidad de estados excepto que debe ser normalizada y desplazada apropiadamente.

La forma tridiagonal de Lanczos puede interpretarse como la forma canónica de los hamiltonianos con interacciones a uno más dos cuerpos en espacios que permitan desarrollar las simetrías del sistema.

6.3 Modelización del caos cuántico con matrices tridiagonales

Desde los inicios del estudio de las matrices aleatorias ha habido intentos de modelar el espectro de los sistemas cuánticos complejos mediante matrices

tridiagonales[121, 122, 123]. La gran ventaja de este tipo de matrices es de tipo numérico. Las matrices tridiagonales son muy fáciles y rápidas de diagonalizar. Además, los elementos de la no diagonal que conectan los estados consiguen mantener la complejidad de matrices provocando la repulsión de niveles.

El modelo basado en el método de Lanczos permite justificar el uso de matrices tridiagonales para el estudio del caos cuántico en sistemas de muchos cuerpos. En este modelo separamos de forma natural el comportamiento medio de las fluctuaciones en los propios elementos de matriz. Comprobaremos en los siguientes apartados cómo el valor medio de los elementos de matriz descrito en el apartado anterior es responsable de la densidad media mientras que las fluctuaciones de los elementos de matriz son responsables de la repulsión de niveles y las propiedades de las fluctuaciones del espectro.

Además de modelo para el caos cuántico, las matrices de Lanczos son interesantes por sí mismas. Se utilizan de forma generalizada para el cálculo de los primeros autovalores, autoestados y valores esperados de diversos operadores de matrices hamiltonianas demasiado grandes para diagonalizarse por completo.

6.4 Fluctuaciones de los elementos de matriz de las matrices de Lanczos

Nuestro interés en este capítulo es estudiar el significado de las fluctuaciones de los elementos de matriz de las matrices Lanczos sobre su valor medio. Variando estas fluctuaciones se cambian las propiedades de la repulsión de niveles del sistema.

Utilizaremos para nuestro análisis los dos ejemplos estudiados en el artículo original de Zuker et al.[98], la matriz correspondiente al ^{48}Ca $J = 4$ $d = 1755$ y la matriz correspondiente a la configuración consistente en 4 protones en las órbitas $0f_{7/2}$ y $1p_{3/2}$ y 4 neutrones en las órbitas $0g_{9/2}$ y $0d_{5/2}$ ($(fpgd)^8$ para abreviar). Este sistema tiene dimensión $d = 6579$ y da lugar a un núcleo deformado. En este caso los elementos de matriz de la diagonal siguen una función logarítmica en lugar de la recta constante del núcleo esférico ^{48}Ca . En la Fig. 6.2 están representados sus elementos de matriz. Si eliminamos el comportamiento medio de los elementos de matriz obtenemos las fluctuaciones representadas en la figura 6.3. Podemos comprobar a sim-

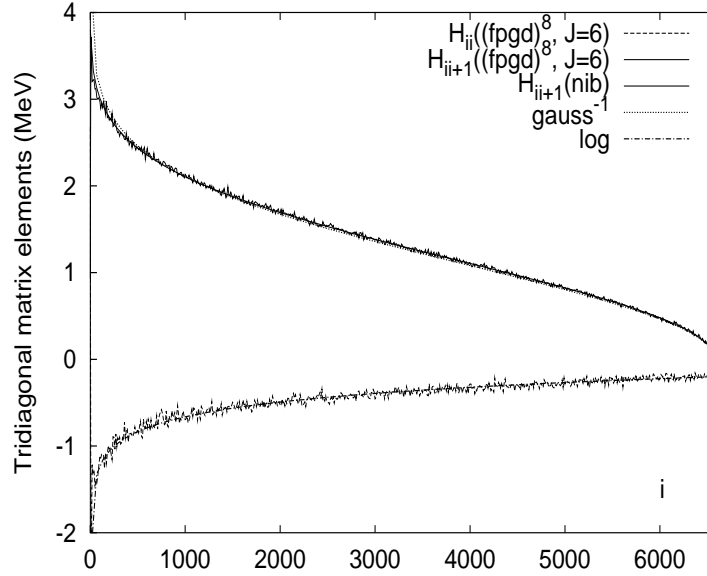


Figura 6.2: Elementos de matriz de la matriz de Lanczos correspondiente a los estados con $J = 6$ de la configuración $(fpgd)^8$. El ajuste de los elementos no diagonales se ha realizado para una binomial inversa y para una gaussiana invertida. Los elementos de matriz diagonal son proporcionales a $\log(H_{ii})$ [95].

ple vista que las fluctuaciones f disminuyen conforme aumentamos el valor de i . Se puede parametrizar de forma aproximada esa dependencia como $f(H_{ii}), f(H_{ii+1}) \propto i^{-0.75}$. Los valores iniciales de los elementos de matriz dependen del pivote elegido y de las propiedades específicas del sistema y se alejan de la forma media canónica.

Podemos también calcular cuál sería la matriz Lanczos correspondiente a una matriz del GOE. Si relacionamos la no diagonal con la densidad de niveles del sistema podemos suponer que la fórmula adecuada para esos elementos de matriz una vez eliminadas las fluctuaciones es $H_{ii+1} = \sqrt{1 - i/d}$, mientras que los elementos de matriz de la diagonal estarán centrados en cero para mantener la traza de H [98]. Los resultados para una matriz con dimensión 1000 están representados en la figura 6.4.

Podemos comprobar, por tanto, que el rango de la fuerza del hamiltoniano es fundamental para su forma canónica de Lanczos, de la misma manera que define la forma funcional de su densidad de niveles.

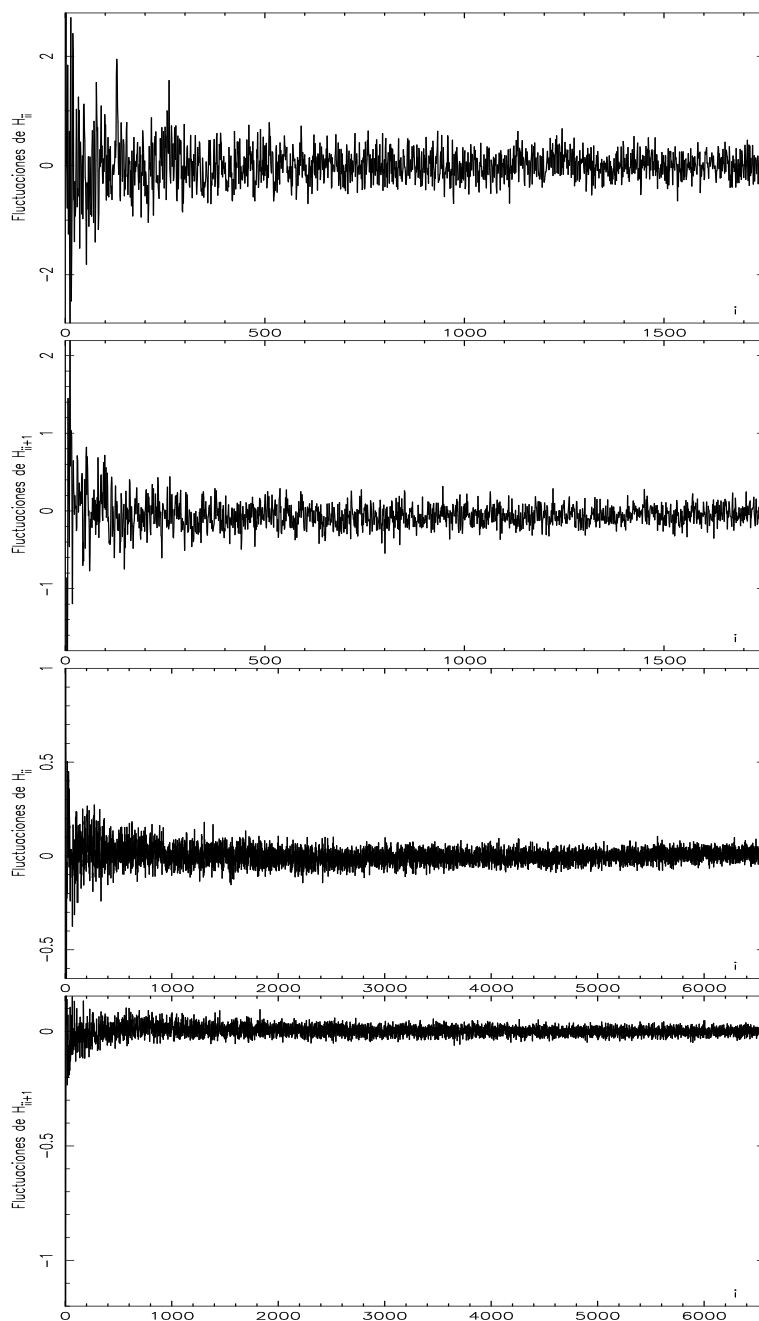


Figura 6.3: Fluctuaciones de los elementos de matriz de Lanczos para la diagonal y la no diagonal de los dos ejemplos comentados en el texto. De arriba a abajo El primer panel representa las fluctuaciones sobre el valor medio de los elementos de la diagonal correspondientes al ^{48}Ca $J = 4$, el siguiente los de la no diagonal, después se muestran los resultados para los estados $J = 6$ de la configuración $(fpgd)^8$, el tercer panel se corresponde con las fluctuaciones de la diagonal y el cuarto con los de la no diagonal.

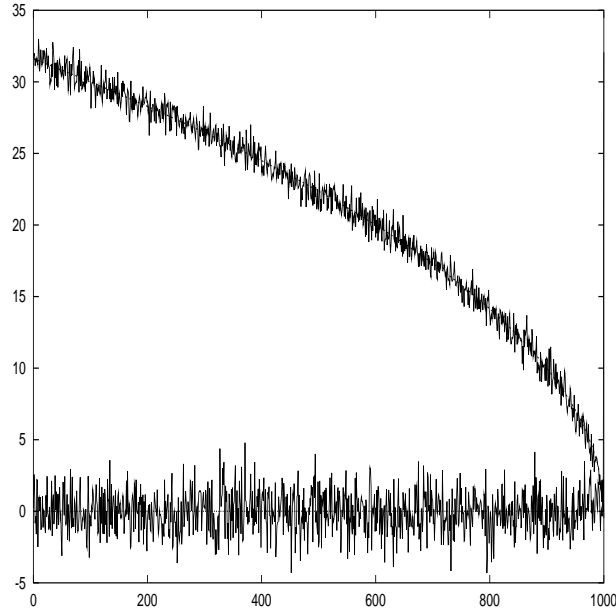


Figura 6.4: Elementos de la matriz de Lanczos correspondientes a una matriz GOE con $d = 1000$. Los elementos de la no diagonal son los de la parte superior de la figura y los de la diagonal son los que fluctúan alrededor de $y = 0$ en la parte inferior.

6.4.1 Parámetro de repulsión

Para entender el efecto de las fluctuaciones de los elementos de matriz de las matrices Lanczos en la estadística espectral de los sistemas que representan, hemos variado el tamaño de las fluctuaciones manteniendo el valor medio de los elementos de matriz. Esto es, transformamos la función de las fluctuaciones en función del número de orden del elemento de matriz, $f(i)$, multiplicándola por un parámetro F , a $Ff(i)$.

Si solamente cambiamos las fluctuaciones, el comportamiento de la densidad media es el mismo en todos los sistemas. Por tanto, $\bar{\rho}(E)$ vendrá dada por la misma función binomial. El unfolding para todos los espectros obtenidos de esta forma se podrá realizar con la misma función. En el caso de nuestro modelo sin fluctuaciones, que denominaremos modelo liso, después de efectuado el unfolding, obtendremos un espectro perfectamente equiespaciado. Los niveles se sitúan en posiciones exactas dadas por la función binomial de los elementos no diagonales. No hay fluctuaciones espectrales, la rigidez de este

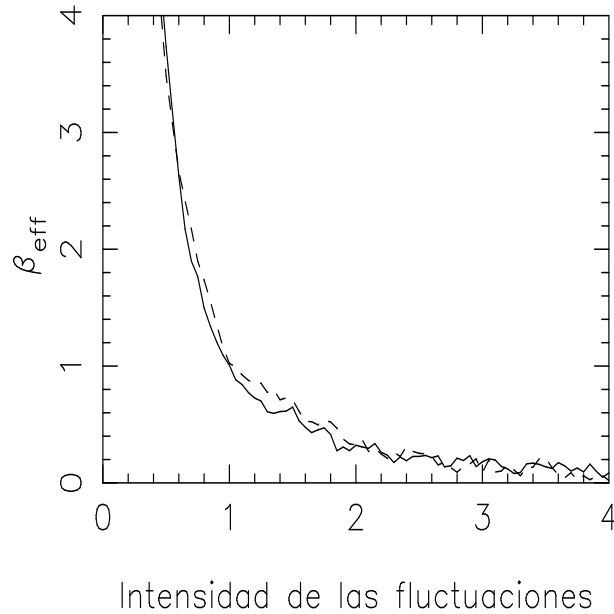


Figura 6.5: β_{ef} en función de un parámetro que nos mide las fluctuaciones de los elementos de matriz de las matrices Lanczos. El valor $F = 1$ se corresponde con las fluctuaciones de la matriz correspondiente al ^{48}Ca $J = 4$ en el caso de la línea continua y a una matriz GOE de dimensión $d = 1000$ para la línea de puntos.

modelo es máxima y se comporta de forma similar a un oscilador armónico unidimensional. Al añadir fluctuaciones a los elementos de matriz añadimos a su vez las fluctuaciones espectrales alrededor de la densidad media.

Para comprobar de qué manera estaban relacionadas las fluctuaciones en los elementos de matriz con las fluctuaciones espectrales hemos calculado el parámetro β_{ef} de la distribución de Izrailev (2.10). Los resultados están representados en la figura 6.5 para el ^{48}Ca $J = 4$ y una matriz GOE con dimensión 1000. Las dos funciones son muy similares. Hemos comprobado que la función representada en la figura es *universal* para distintos sistemas. Variando el tamaño de las fluctuaciones podemos pasar por todas las propiedades de repulsión del espectro. F muy grande se corresponde a un sistema tipo Poisson. $F = 1$ es un sistema con fluctuaciones espectrales similares a las del GOE. Con $F = 0.6$ tenemos $\beta_{ef} = 2$ y fluctuaciones tipo GUE. Las fluctuaciones del GSE se reproducen mediante $F = 4$. Para $F \rightarrow 0$ tenemos un $\beta_{ef} \rightarrow \infty$ que se corresponde a una distribución $P(s)$ con forma

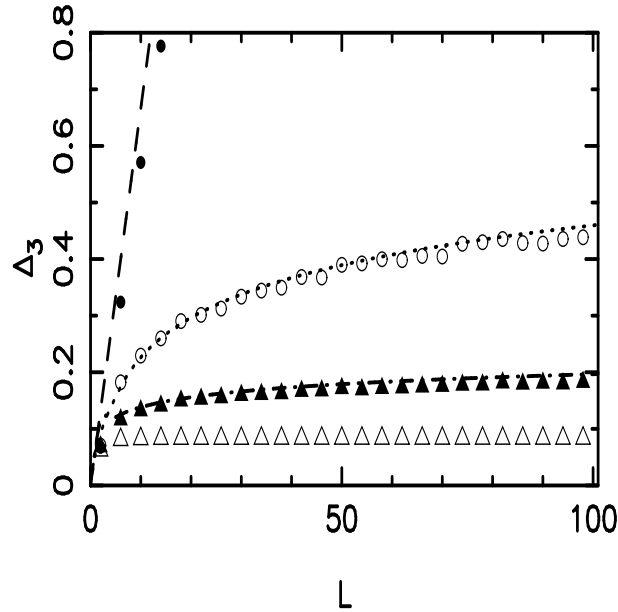


Figura 6.6: Resultado del cálculo de la Δ_3 para las matrices de Lanczos correspondientes al sistema obtenido mediante el cálculo del modelo de capas de la configuración *fpgd* con 8 partículas variando el valor de las fluctuaciones. Los círculos llenos corresponden a $F = 3$, los círculos vacíos a $F = 1$, los triángulos llenos $F = 0.5$ y los triángulos vacíos $F = 0$. Están representados el resultado para Poisson, para el GOE y para el GSE.

de delta de Dirac centrada en $s = 1$.

Las correlaciones espectrales de largo alcance varían de forma similar a la $P(s)$ en función del tamaño de las fluctuaciones F . En la Fig. 6.6 Mostramos la Δ_3 para cuatro ejemplos con $F = 0, F = 0.5, F = 1$ y $F = 3$. Cuando no cambiamos las fluctuaciones con respecto a su valor original, el valor de la Δ_3 es igual al del GOE. En este caso el ajuste a β_{ef} da un resultado de 1.06, muy similar al valor de $\beta_{ef} = 1$ de la distribución de Wigner. Cuando reducimos las fluctuaciones aumentamos la repulsión, para $F = 0.5$ el valor del parámetro de repulsión $\beta_{ef} = 3.88$. La repulsión es similar a la obtenida en el GSE, $\beta_{ef} = 4$ y lo mismo se ve en el cálculo de la Δ_3 . En el modelo liso $F = 0$ los espaciamientos a primeros vecinos son todos $s_i = 1$. La repulsión es *infinita* y el espectro presenta una rigidez máxima que se traduce en una Δ_3 mínima y constante. Por el contrario, cuando aumentamos las fluctuaciones

nos aproximamos a Poisson. En la figura está representado el caso $F = 3$ con $\beta_{ef} = 0.15$ cuya Δ_3 está muy próxima al valor $L/15$ válido para un espectro con fluctuaciones tipo Poisson.

Añadiendo al valor medio de los elementos de matriz, fluctuaciones gaussianas de amplitud modelizada mediante la forma aproximada $i^{-3/4}$ se puede reproducir de manera bastante buena los resultados representados en la Fig. 6.5.

Para ello, hemos calculado la σ de la fluctuación en cada punto mediante un promedio de 10 valores alrededor de ese punto. Hemos ajustado la función σ por,

$$\sigma(i) = \sigma_1 i^{-p} + \sigma_0. \quad (6.5)$$

El exponente que mejor ajustaba en todos los casos analizados era $p = -3/4$. Utilizamos la función obtenida $\sigma(i)$ para modelizar las fluctuaciones mediante una distribución gaussiana dependiente de i ,

$$\rho(f_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp \left[-(f_i/F)^2 / 2\sigma_i^2 \right]. \quad (6.6)$$

El valor $F = 1$ reproduce de forma aproximada la Fig. 6.3. Variando el parámetro F podemos calcular el espectro de las matrices resultantes y ajustar un β_{ef} para comparar con la Fig. 6.5.

Los cálculos para la β_{ef} en este caso se muestran en la Fig. 6.7. Las propiedades de repulsión del espectro dependen principalmente del tamaño de las fluctuaciones de los elementos de matriz, sin embargo, el hecho de que la función esté ligeramente desplazada indica la probable existencia de correlaciones entre las fluctuaciones de los elementos de matriz que no hemos tenido en consideración.

Un análisis preliminar más detallado de la distribución real de las fluctuaciones induce a pensar que éstas difieren bastante de una gaussiana. Las correlaciones entre los valores de las fluctuaciones en la diagonal y la no diagonal y la modelización adecuada de sus distribuciones debe influir en otras propiedades importantes de estas matrices y merecen, sin duda, un estudio más detallado.

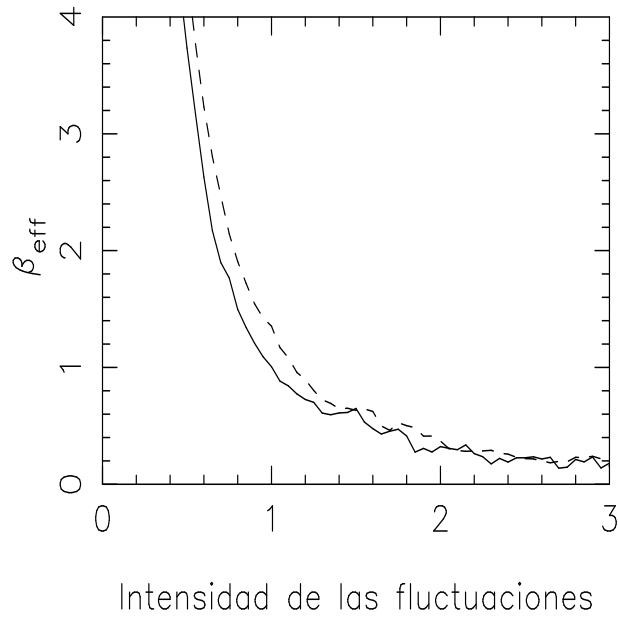


Figura 6.7: β_{ef} en función de un parámetro que nos mide las fluctuaciones de los elementos de matriz de las matrices Lanczos. El valor $F = 1$ se corresponde con las fluctuaciones de la matriz correspondiente al ^{48}Ca $J = 4$ en el caso de la línea continua y la línea discontinua a fluctuaciones elegidas aleatoriamente según una ley gaussiana con la σ^2 idéntica al valor real y pesada con $i^{-0.75}$.

6.5 Hamiltoniano del campo medio en la base de Lanczos

Los resultados del cálculo de los elementos de matriz de Lanczos para el ^{48}Ca $J = 4$ están representados en la figura 6.8. Podemos comprobar que la forma binomial de los elementos no diagonales prácticamente ha desaparecido y es muy difícil realizar un ajuste con sentido. Los elementos diagonales tienen unas fluctuaciones muy grandes. El resultado es similar a añadir fluctuaciones con $F = 12$ a la matriz de Lanczos del hamiltoniano del modelo de capas completo. Entendemos así el significado de la matriz de Lanczos cuando añadimos fluctuaciones hasta convertirla en un sistema con estadística Poisson. Estamos convirtiendo el sistema en un sistema de partícula independiente regular.

En el modelo de matrices tridiagonales el límite de fluctuaciones de los elementos de matriz muy grandes, que se corresponde con repulsión nula y estadística de Poisson, es un estado regular donde las partículas se comportan como si fueran independientes. La interacción residual entre ellas es nula. El límite de fluctuaciones nulas o repulsión de niveles infinita es también un estado regular, pero en este caso es un estado a muchos cuerpos, donde la interacción entre las partículas es tan fuerte que *congela* el sistema y en su conjunto este se comporta como si estuviera compuesto de osciladores acoplados.

6.6 Propiedades de localización de los vectores en la base de Lanczos

Los hamiltonianos que estamos tratando son hamiltonianos a muchos cuerpos que interaccionan entre sí. Al transformar la matriz hamiltoniana de la base de campo medio, en donde suele estar representada en el modelo de capas, a la base de Lanczos estamos introduciendo información sobre las correlaciones del sistema en los elementos de la base y gracias a eso podemos convertir la matriz en una matriz tridiagonal con las propiedades tan particulares que hemos comentado. Es interesante, por tanto, comprender qué sucede con los autoestados en su representación de Lanczos al cambiar la intensidad de las fluctuaciones de los elementos de matriz. En esta sección vamos a estudiar las propiedades de localización de nuestro modelo y a rela-

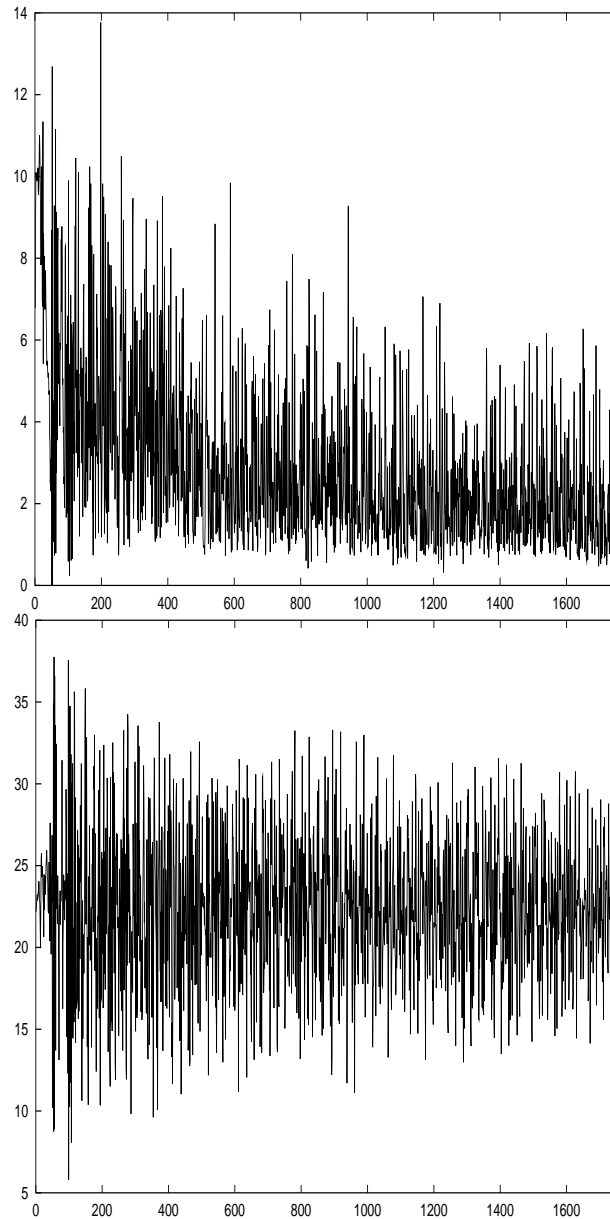


Figura 6.8: Elementos de matriz de Lanczos para el ^{48}Ca $J = 4$ utilizando el hamiltoniano del campo medio. El panel superior representa los elementos de la no diagonal y el panel inferior los de la diagonal.

cionarlas con la dinámica de niveles al cambiar el parámetro F de intensidad de las fluctuaciones.

En este problema el comportamiento de la entropía de la información en la base de Lanczos y la dinámica de niveles no se pueden comparar con las observaciones del capítulo anterior. La base de Lanczos es una base de estados complejos a muchos cuerpos mientras que en el capítulo 5 estábamos calculando la entropía de la información en la base del campo medio y viendo lo que pasaba cuando introducíamos la interacción residual.

La Fig. 6.9 representa la entropía de la información de las funciones de onda en la base de Lanczos para varios valores de F en los estados con $J = 4$ del ^{48}Ca . Cuando $F = 0$ las funciones de onda están completamente deslocalizadas. Las restricciones geométricas imponen la forma parabólica de la entropía de la información en función de la energía[71]. Al aumentar el valor de las fluctuaciones la longitud de localización media baja. Sin embargo, no lo hace de forma uniforme. Por el contrario, el valor medio de la entropía se reduce debido a que funciones de onda particulares se localizan. Al observar la forma de la entropía de la información en función de la energía seguimos observando la misma parábola que antes pero algunos puntos se encuentran en valores muy por debajo de la misma. Esos puntos son precisamente aquellos que están sufriendo colisiones evitadas.

En la figura 6.10 podemos ver de forma más clara lo que ocurre. El panel superior de la figura es un gráfico de los valores de las energías de los niveles desde $n = 901$ hasta $n = 950$ en función de la intensidad de las fluctuaciones para la matriz correspondiente al ^{48}Ca $J = 4$. El panel inferior representa en una escala de grises la entropía de la información de las funciones de onda correspondientes a esos mismos estados. Se puede comprobar inmediatamente la relación entre los choques evitados y la localización de las funciones de onda.

Además, en esta figura se pueden observar estructuras solitónicas similares a las representadas en la Fig. 2.9. Conforme aumentamos el valor de las fluctuaciones los choques evitados se van haciendo más frecuentes y más violentos, al mismo tiempo que el parámetro de repulsión tiende a $\beta_{ef} = 0$.

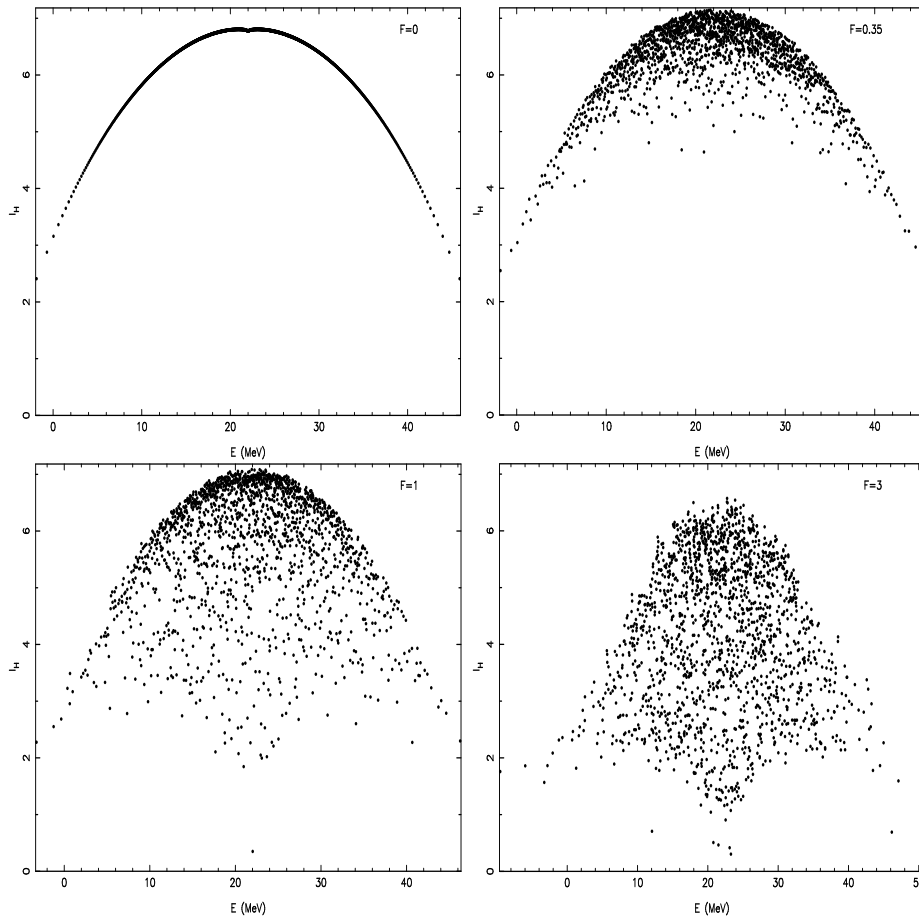


Figura 6.9: Entropía de las funciones de onda del modelo de Lanczos correspondiente a la matriz del ^{48}Ca $J = 4$ para valores del parámetro de las fluctuaciones de los elementos de matriz $F = 0$, $F = 0.35$, $F = 1$ y $F = 3$.

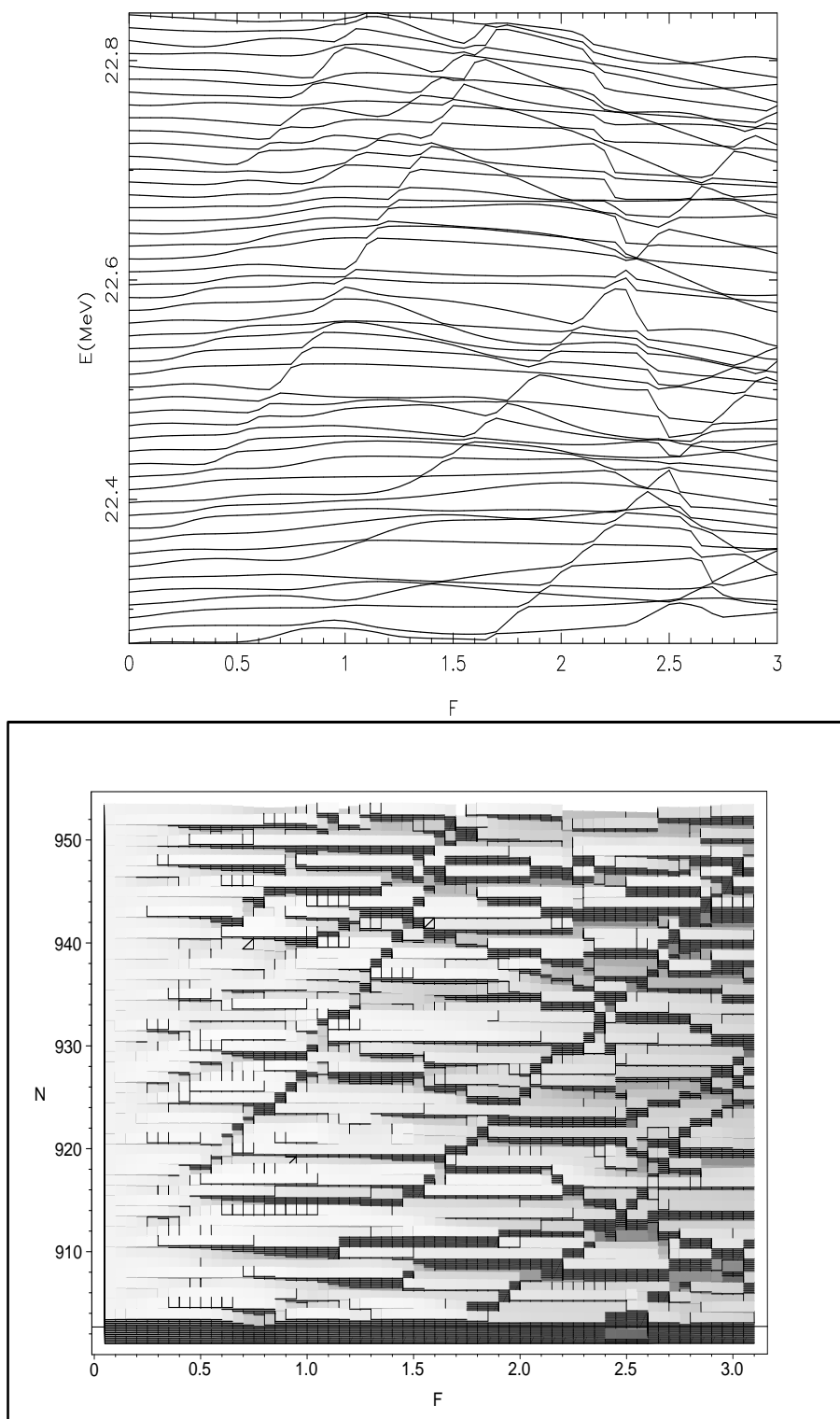


Figura 6.10: En el panel superior se representa la evolución de los autoestados del modelo de Lanczos correspondiente a la matriz del ^{48}Ca $J = 4$ en función del parámetro F que mide la intensidad de las fluctuaciones de los elementos de matriz. En el panel inferior se representa un histograma en tres dimensiones que muestra el valor de la entropía de la información en función del número de estado y de la F . Las estructuras creadas por la dinámica de niveles son claramente visibles

Capítulo 7

Conclusiones

La principal aportación de este trabajo es proporcionar nuevos elementos para mejorar la comprensión de los efectos del caos en sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Para analizar estos efectos hemos utilizado dos herramientas principales: la estadística de las fluctuaciones espectrales y las propiedades de localización de las funciones de onda.

La estadística espectral se estudia efectuando una separación entre correlaciones de corto alcance y correlaciones de largo alcance. El instrumento más extendido para el análisis de las primeras es la distribución de primeros vecinos $P(s)$. Para estudiar las correlaciones de largo alcance hemos optado por utilizar el estadístico $\Delta_3(L)$, donde L es la distancia en unidades de número de niveles de energía.

Hemos demostrado que el método utilizado para calcular la densidad media, empleada para realizar el reescalado de la energía, puede afectar al resultado del cómputo de las correlaciones de largo alcance. Cuando no se conoce una buena aproximación suave a la densidad se utilizan métodos de cálculo “locales”, que dependen de una ventana de energías en la cual se aproxima la densidad mediante un promedio. Nuestro trabajo demuestra que estos métodos introducen correlaciones de largo alcance espurias que provocan una saturación del valor de la $\Delta_3(L)$ para valores de L mayores que la ventana utilizada. Este efecto se puede confundir con el fenómeno de saturación predicho por Berry debido a la órbita periódica clásica más corta, o incluso, en ciertos casos en que las correlaciones reales son de tipo Poisson, la saturación espuria produce un comportamiento semejante al de las correlaciones de tipo GOE. Hemos mostrado además que para analizar el grado de regularidad o caoticidad en un sistema cuántico es muy importante

analizar también las correlaciones a valores de L medianos o grandes, lo cual es incompatible con el reescalado local. Si no se conoce la densidad media, se pierde esta información y se debe sustituir con otros datos provenientes de las funciones de onda o las transiciones, por ejemplo.

Un modelo muy apropiado para estudiar teóricamente el caos cuántico en sistemas realistas de muchos cuerpos es el modelo de capas de física nuclear. Es un sistema donde se puede tratar de forma exacta un número razonable de partículas interaccionando fuertemente entre sí en un espacio de valencia reducido y donde se pueden investigar los efectos del campo medio y la interacción residual. En el límite de campo medio el sistema es integrable. Posee suficientes simetrías para caracterizar todos sus autoestados mediante un conjunto completo de números cuánticos conservados. La interacción residual rompe las simetrías del campo medio. Sólo se siguen conservando los números cuánticos de momento angular y paridad. Debido a estas propiedades el campo medio se identifica con el movimiento regular y la interacción residual es la que induce el caos en el sistema.

La mayoría de los estudios teóricos concluyen que, incluso a muy baja energía, la estadística de los espectros en los núcleos es la correspondiente al GOE. Se han encontrado dos excepciones importantes: los núcleos pesados de la región del Pb y los núcleos que tienen solamente neutrones en la capa pf . Hemos realizado cálculos muy extensos en estas dos regiones y hemos conseguido establecer una dependencia general de la caoticidad de los núcleos en el isoespín y en la energía de excitación. Encontramos que los estados de isoespín más alto en una capa, que se corresponden con los estados de los núcleos semimágicos que sólo tienen neutrones y protones fuera de capas cerradas, son siempre mucho más regulares que el resto. En estos núcleos, el valor del parámetro de repulsión ω , calculado ajustando la $P(s)$, está mucho más próximo al cero, correspondiente a la estadística de Poisson. Comparando la estadística espectral de núcleos isóbaros, encontramos que los valores de la Δ_3 y de la longitud de localización de la entropía muestran un crecimiento paulatino de la caoticidad conforme disminuye el isoespín. También hemos podido comprobar el crecimiento del parámetro de Brody y de la entropía de la información de las funciones de onda cuando aumentamos la energía de excitación. Este fenómeno se produce de forma mucho más notable en los núcleos semimágicos.

Hemos investigado los posibles motivos de estas dependencias. Las distintas causas están bastante interrelacionadas y los efectos son difíciles de separar. En los núcleos semimágicos el comportamiento de la estadística del

espectro a baja energía está dominada por la interacción de apareamiento que favorece el acoplamiento de pares de partículas idénticas, protones o neutrones, a momento angular $J = 0$. Este efecto lo hemos visto claramente en un resultado espectacular: si se elimina la parte de apareamiento de la interacción realista, la dinámica de los núcleos semimágicos a baja energía pasa de un régimen cuasirregular a uno caótico. Por otra parte, la relación entre la intensidad del campo medio y la intensidad de la interacción residual afecta a la estadística de niveles y de funciones de onda a lo largo de todo el espectro, aunque sus efectos son más notorios también a baja energía, donde los estados tienen menor mezcla de configuraciones. Esto se ha puesto de manifiesto variando en la interacción la relación entre la intensidad de la interacción residual $T = 1$ y $T = 0$. Aunque nuestras conclusiones se basan en resultados obtenidos para núcleos de la capa pf y de la región del Pb, sin duda tienen una validez general a lo largo de toda la carta nuclear.

La dinámica de niveles resulta un instrumento muy útil para interpretar los resultados obtenidos en la transición entre el movimiento regular y el caótico. Mediante modelos basados en la teoría de matrices aleatorias y su comparación con modelos basados en las matrices del modelo de capas hemos identificado comportamientos no universales en la transición al caos de estas últimas. Hemos identificado el mecanismo por el que las funciones de onda aumentan su complejidad a través de cruces evitados múltiples. En los cruces evitados simples las funciones de onda simplemente se intercambian y no aumenta su entropía de la información. Sin embargo, cuando sufren muchos cruces evitados consecutivos, las funciones de onda se mezclan y la entropía sufre un incremento persistente. De esta manera se produce la deslocalización de las funciones de onda. Parece claro que este fenómeno es muy general y debe existir en todos los sistemas cuánticos de muchos cuerpos.

El estudio numérico de las matrices del modelo de capas ha llevado al descubrimiento de una forma canónica tridiagonal para las matrices hamiltonianas con fuerzas a dos cuerpos. Las matrices de Lanczos nos conducen a un modelo universal de las fluctuaciones espectrales en sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Hemos encontrado que se pueden relacionar directamente las fluctuaciones de los elementos de matriz en esta forma tridiagonal con las propiedades de las fluctuaciones espectrales y la repulsión de niveles. En el límite de fluctuaciones muy grandes la repulsión es nula y el sistema se aproxima a un modelo de partículas independientes e integrable. En el límite de fluctuaciones cero la repulsión infinita produce la *crystalización* de los niveles. Obtenemos un sistema de muchos cuerpos regular con un espectro similar al

de un oscilador.

El hilo conductor de este trabajo han sido las matrices del modelo de capas, que nos han permitido realizar un recorrido por las propiedades generales de la dinámica de los sistemas cuánticos de muchos cuerpos. Gracias a ellas hemos podido estudiar desde propiedades de la estadística de niveles de núcleos concretos hasta modelos generales basados en las matrices de Lanczos.

Apéndice A

Teoría de Matrices Aleatorias (RMT)

En este apéndice introduciremos de forma más técnica los conceptos utilizados en la teoría de matrices aleatorias. El libro de Mehta[26] es la referencia básica de la materia. Introducciones apropiadas para las aplicaciones del caos cuántico aparecen en el libro de Haake[89] y en la excelente revisión de Bohigas[120].

A.1 Colectividades gaussianas y simetrías

Dyson[107] demostró que existen tres clases de universalidad para las matrices aleatorias dentro de la ecuación de Schrödinger estándar. Para clasificar un sistema dentro de una de ellas necesitamos conocer sus propiedades fundamentales de simetría.

Los hamiltonianos que poseen simetría bajo inversión temporal y simetría bajo rotaciones se pueden representar por matrices reales invariantes bajo el grupo de transformaciones ortogonales. Este tipo de matrices también puede representar sistemas con simetría bajo inversión temporal y espín entero, aunque la invariancia bajo rotaciones no se cumpla. Los hamiltonianos sin la simetría bajo inversión temporal se pueden representar por matrices hermíticas invariantes bajo el grupo de transformaciones unitarias. Los hamiltonianos con la simetría bajo inversión temporal, con espín semientero y con ruptura de la simetría bajo rotaciones pueden ser representados por matrices reales cuaterniónicas invariantes bajo el grupo de transformaciones

simplécticas.

La teoría de matrices aleatorias supone que los detalles de la interacción de un sistema no son importantes para las propiedades de las fluctuaciones de su espectro y que basta con conocer sus propiedades de simetría. Por este motivo se reemplaza el hamiltoniano por una matriz cuyos elementos se eligen aleatoriamente. Los elementos de matriz no se pueden fijar con completa libertad. Se debe obedecer la clase de universalidad del hamiltoniano que se quiere representar. Para la clase ortogonal el hamiltoniano puede ser representado por una matriz real simétrica. Por tanto, tenemos $N(N+1)/2$ elementos de matriz independientes. En un sistema completamente aleatorio cualquier conjunto de funciones de la base es *a priori* tan bueno como cualquier otro. La función de probabilidad de los elementos de matriz $p(H_{11}, \dots, H_{NN})$ no debe depender de la base a la que se aplica. Esto nos lleva a la propiedad de invariancia

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = p(H'_{11}, \dots, H'_{NN}) \quad (\text{A.1})$$

H' se obtiene de H por una transformación ortogonal $H' = OHO^T$ con $OO^T = 1$. Las funciones de H_{nm} invariantes bajo transformaciones ortogonales sólo pueden depender de trazas de potencias de H .

Además suponemos que los elementos de matriz no están correlacionados $p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = p(H_{11})p(H_{12})\dots p(H_{NN})$. La única forma funcional que cumple estas dos condiciones es

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = C \exp [-BTr(H) - ATr(H^2)]. \quad (\text{A.2})$$

Podemos hallar las constantes usando la condición de normalización

$$\int p(H_{11}, \dots, H_{NN}) dH_{11} \dots dH_{NN} = 1. \quad (\text{A.3})$$

Para el caso ortogonal tenemos

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{N/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{N(N-1)/2} \exp \left[-A \sum_{n,m} H_{nm}^2 \right]. \quad (\text{A.4})$$

La constante A se puede expresar en términos de la variancia de los elementos de matriz diagonales o los no diagonales.

$$\langle H_{nn}^2 \rangle = \frac{1}{2A}, \quad (\text{A.5})$$

$$\langle H_{nm}^2 \rangle = \frac{1}{4A}. \quad (\text{A.6})$$

El conjunto de todas las matrices aleatorias con elementos de matriz que obedecen la función de distribución A.4 define la colectividad gaussiana ortogonal, *Gaussian Orthogonal Ensemble*, (GOE). De forma análoga podemos obtener la colectividad unitaria gaussiana (GUE) y la colectividad simétrica gaussiana (GSE).

A.2 Distribuciones de autovalores

La función de distribución de los elementos de matriz de las colectividades gaussianas no permiten una comparación directa con los datos experimentales, ya que usualmente sólo podemos acceder al espectro de energías. La distribución de los autovalores es de interés mucho más práctico. La expresión para todas las colectividades se puede incluir en una única fórmula

$$P(E_1, \dots, E_N) = cte \prod_{n>m}^{1..N} |E_n - E_m|^\beta \exp\left(-A \sum_n E_n^2\right), \quad (\text{A.7})$$

β es el índice de la clase de universalidad. $\beta = 1, 2, 4$ para el GOE, GUE y GSE. Para $\beta = 0$ los autovalores no están correlacionados. Tenemos la colectividad de Poisson. El factor $|E_n - E_m|^\beta$ produce la repulsión entre niveles, más fuerte según el valor de β . Este índice está relacionado con el espacio de números que hay debajo de cada matriz, 1 para números reales, 2 para números complejos y 4 para cuaterniones.

A.3 Densidad de estados

Wigner[121] derivó la densidad de estados para las colectividades de matrices aleatorias. La densidad media es un semicírculo.

$$\rho(E) = \begin{cases} \frac{A}{\pi} \sqrt{\frac{2N}{A} - E^2} & |E| \leq \frac{2N}{\pi}, \\ 0 & |E| > \frac{2N}{\pi}. \end{cases} \quad (\text{A.8})$$

A.4 Distribución de espaciamientos a primeros vecinos: La distribución de Wigner

La distribución de espaciamientos a primeros vecinos $P(s)$ se define como la distribución de las diferencias de las autoenergías contiguas $s_i = E_{i+1} - E_i$. Utilizando el GOE con $N = 2$ Wigner[121] derivó una muy buena aproximación a la distribución $P(s)$ para las colectividades gaussianas cuando $N \rightarrow \infty$. La distribución de Wigner para el GOE es

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4}s^2}. \quad (\text{A.9})$$

Cuando los autovalores no están correlacionados, el caso de estadística de Poisson la $P(s)$ vale,

$$P(s) = e^{-s} \quad (\text{A.10})$$

La distribución $P(s)$ completa para los tres tipos de clase de universalidad se puede derivar de forma completamente rigurosa. El resultado, sin embargo, sólo se puede expresar en forma de serie de potencias y la derivación es muy compleja. Una derivación completa aparece en el libro de Haake[89].

A.5 Funciones de correlación a n-puntos

Los estadísticos que miden las correlaciones de largo alcance del espectro dependen de la función de correlación a dos puntos. Esta es la densidad de probabilidad de encontrar dos autoenergías E_1 y E_2 a dos energías dadas independientemente de la posición del resto de autoenergías. La función más general de correlación a n puntos se define como

$$R_n(E_1, \dots, E_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \int P(E_1, \dots, E_N) dE_{n+1} \dots dE_N. \quad (\text{A.11})$$

En el libro de Mehta[26] se realiza el cálculo de las funciones de correlación utilizando la forma de $P(E_1, \dots, E_N)$ para las colectividades de matrices aleatorias GOE (Eq. A.7), GUE y GSE.

En la Fig. A.5 representamos las funciones de correlación a dos puntos para el GOE y el GUE. La función de correlación a dos puntos sólo depende de la diferencia de energías. $R_2(E_1, E_2) = R_2(r)$ donde $r = E_2 - E_1$. Podemos

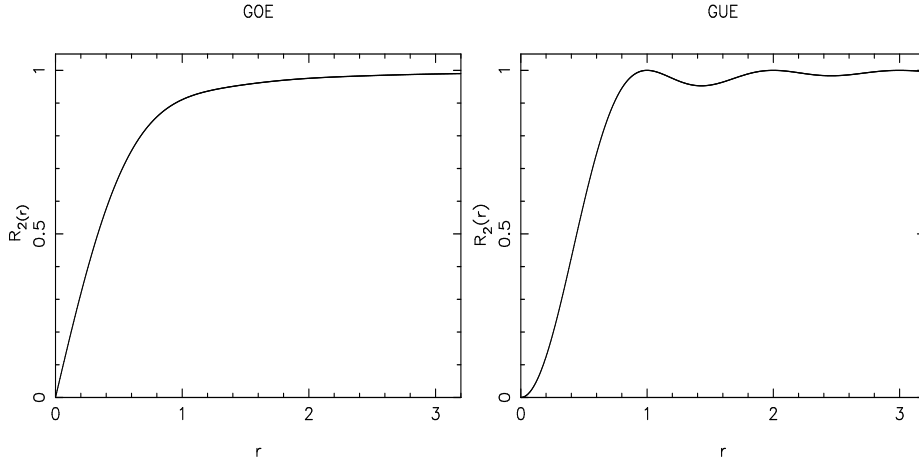


Figura A.1: Funciones de correlación a dos puntos para el GOE y para el GUE[26].

observar en las gráficas que

$$R_2(r) \sim \begin{cases} r & (\text{GOE}), \\ r^2 & (\text{GUE}). \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

Otras funciones importantes relacionadas con la función de correlación a dos puntos son la *función de agrupamiento*, definida como $Y_2(r) = 1 - R_2(r)$ y su transformada de Fourier

$$b(k) = \int_{-\infty}^{\infty} Y_2(r) \exp(2\pi ikr) dr. \quad (\text{A.13})$$

A.6 Los estadísticos Σ^2 y Δ_3

Consideremos el número de niveles en un intervalo de longitud L , $n(E, L)$. Si definimos los estadísticos después de realizado el unfolding (Capítulo 2), la densidad de niveles media está normalizada a la unidad. Por tanto, $\bar{n}(E, L) = L$. La varianza del número de niveles en un intervalo de longitud L $\Sigma^2(L)$ se define como

$$\Sigma^2(L) = \langle n(E, L)^2 \rangle - L^2 \quad (\text{A.14})$$

La media del cuadrado de $n(E, L)$ se puede expresar como

$$n(E, L)^2 = \int_{E-L/2}^{E+L/2} dE_1 \int_{E-L/2}^{E+L/2} dE_2 \langle \rho(E_1)\rho(E_2) \rangle \cdot \rho(E_2) \quad (\text{A.15})$$

Cuando $E_1 \neq E_2$ $\langle \rho(E_1)\rho(E_2) \rangle$ es la probabilidad media de encontrar a dos autovalores en las energías E_1 y E_2 independientemente de donde estén los demás. Eso es justo la función de correlación $R_2(E)$. Usando la definición de la densidad de estados en términos de funciones δ podemos comprobar fácilmente que para $E_1 = E_2$ $\langle \rho(E)^2 \rangle = \delta(0)$. Sustituyendo en la Eq. A.15 obtenemos

$$\Sigma^2(L) = L - 2 \int_0^L (L - E)Y_2(E)dE, \quad (\text{A.16})$$

donde $Y_2(E) = 1 - R_2(E)$.

Cuando los autovalores no están correlacionados $R_2(E) = 1$ y $\sigma^2(L) = L$. Para las colectividades gaussianas la repulsión de niveles tiende a igualar las distancias entre autovalores vecinos. La varianza en el número de niveles crece solamente de forma logarítmica en lugar de de forma lineal.

Otra cantidad basada en la función de correlación a dos puntos y que nos da una información similar a la Σ^2 es la Δ_3 [109]. También se denomina rigidez espectral. Se define utilizando la densidad integrada de estados de una forma peculiar. $N(E)$ es una función escalón con pendiente media unidad (después del *unfolding*). Ajustamos una línea recta a $N(E)$ en el intervalo $[E - L/2, E + L/2]$. La media en la colectividad del mínimo de la función χ^2 obtenida en el ajuste es la rigidez espectral, esto es,

$$\Delta_3(L) = \left\langle \frac{1}{L} \min_{A,B} \int_{E-L/2}^{E+L/2} [\bar{N}(E) - AE - B]^2 dE \right\rangle. \quad (\text{A.17})$$

Resolviendo el ajuste de A y B por mínimos cuadrados obtenemos un resultado independiente de E y que podemos escribir el resultado en términos de la función $Y_2(E)$.

$$\Delta_3(L) = \frac{L}{15} - \frac{1}{15L^4} \int_L^0 (L - E)^3 (2L^2 - 9LE - 3E^2) Y_2(E) dE. \quad (\text{A.18})$$

Para sistemas integrables, donde $Y_2(E) = 0$ la $\Delta_3(L) = L/15$. También podemos expresarla en función de la variancia del número de niveles.

$$\Delta_3(L) = \frac{2}{L^4} \int_0^L (L^3 - 2L^2E + E^3) \Sigma^2(E) dE. \quad (\text{A.19})$$

Como podemos comprobar en esta fórmula, la rigidez espectral es una versión suavizada de la varianza del número de niveles. Ambas dan una información muy parecida pero, por este motivo, la Δ_3 es mucho más popular. Su comportamiento asintótico para el GOE viene dado por

$$\Delta_3(L) = \frac{1}{\pi^2}(\ln(L) - 0.0687). \quad (\text{A.20})$$

Se puede demostrar que su desviación del valor asintótico es una constante pequeña independiente de L .

A.7 Distribución de autovectores

Los autovectores del GOE se pueden suponer reales. La única condición invariante de los autovectores es su propia norma. Por tanto, la densidad de probabilidad para las N componentes C_n está concentrada en la superficie de una esfera unidad N -dimensional.

$$P_{GOE}(C) = cte \delta\left(1 - \sum_{n=1}^N C_n^2\right). \quad (\text{A.21})$$

Si normalizamos de forma apropiada,

$$P_{GOE}(C_1, \dots, C_N) = \pi^{-N/2} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \delta\left(1 - \sum_{n=1}^N C_n^2\right). \quad (\text{A.22})$$

Un valor conveniente para comparar con los resultados numéricos es la densidad de probabilidad reducida de encontrar ocupado el primer estado de la base en un autoestado cualquiera del hamiltoniano. Si integramos la eq. A.22 sobre las variables C_2, \dots, C_N obtenemos,

$$P_{GOE}(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma(N/2)}{\Gamma[(N-1)/2]} \frac{(1-y)^{(N-3)/2}}{\sqrt{y}}, \quad (\text{A.23})$$

donde $y = C_1^2$.

En el límite asintótico $N \rightarrow \infty$ obtenemos la distribución de Porter-Thomas.

$$P_{GOE}(\nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\nu}} e^{-\nu/2}, \quad (\text{A.24})$$

donde $\nu = Ny$.

Utilizando esta condición podemos calcular la entropía de la información media (Eq. 2.18) para el GOE.

$$\langle I_H \rangle = -N \langle C^2 \ln C^2 \rangle \quad (\text{A.25})$$

$$= -2N \sqrt{\frac{2N}{\pi}} \int_0^\infty dC C^2 e^{-(N/2)C^2} \ln C, \quad (\text{A.26})$$

cambiando de variable a $x = \sqrt{(N/2)C}$ obtenemos,

$$\langle I_H \rangle = -\frac{8}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 \ln \sqrt{\frac{2}{N}} x e^{-x^2}. \quad (\text{A.27})$$

Teniendo en cuenta que,

$$\exp\left(-\frac{8}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty x^2 e^{-x^2} \ln x dx\right) = 4e^{\gamma-2} = 0.964\dots, \quad (\text{A.28})$$

donde $\gamma = 0.577\dots$ es la constante de Euler, finalmente obtenemos que para el GOE[45],

$$\langle I_H \rangle \simeq \ln(0.48N). \quad (\text{A.29})$$

Apéndice B

Modelo de capas

Supondremos al núcleo atómico compuesto de Z protones y N neutrones que interactúan mediante fuerzas a dos cuerpos y obedecen la ecuación de Schrödinger. La energía, el momento angular total y la paridad se conservan en el núcleo atómico. Un autoestado viene caracterizado por los tres números cuánticos E_n , J^π , donde J es el momento angular total y $\pi = +$ ó $-$ es la paridad.

$$H\Phi(1, \dots, A) = \left[\sum_{k=1}^A T(k) + \sum_{1=k<l}^A W(k, l) \right] \Phi(1, \dots, A) = E\Phi(1, \dots, A), \quad (\text{B.1})$$

siendo $A = N + Z$ el número total de nucleones.

En una primera aproximación consideraremos que cada nucleón se mueve independientemente en un potencial que representa la interacción media del resto de nucleones.

$$H = \sum_{k=1}^A [T(k) + U(k)] + \left[\sum_{1=k<l}^A W(k, l) - \sum_{k=1}^A U(k) \right] = H^{(0)} + H^{(1)}. \quad (\text{B.2})$$

$H^{(0)}$ representa el movimiento de partículas independientes y $H^{(1)}$ la interacción residual debido a que las partículas no se mueven de forma completamente independiente.

En el núcleo atómico esta interacción residual es muy fuerte, de intensidad comparable al campo medio. La imagen del modelo de capas en el núcleo parece incompatible con la intensidad de la interacción residual. Sin embargo, existe gran cantidad de información experimental indicando la existencia de

un comportamiento de modelo de capas, los números mágicos, los momentos magnéticos,...

B.1 Espacio de Fock

La aproximación de orden cero al problema nuclear viene dada por el campo medio esférico. Sus órbitas se utilizan como base para el espacio de números de ocupación, el espacio de Fock. Tenemos unos estados de partícula independiente i, j, \dots con energías $\epsilon_i, \epsilon_j, \dots$. Cada estado tiene asociado un momento angular que además indica su degeneración. Los estados de la base del espacio de Fock son los determinantes de Slater, funciones de onda de A partículas normalizadas y antisimetrizadas. Cualquier estado del espacio de Hilbert se puede expresar como combinación de determinantes de Slater.

B.2 *Core* inerte y espacio de valencia

En el modelo de capas la base que utilizamos para diagonalizar el problema del núcleo atómico es la del campo medio. Para realizar los cálculos del modelo de capas dividimos las infinitas órbitas del campo medio en tres conjuntos:

a) **El *core* inerte:** Se compone de las órbitas más bajas en energía que se suponen siempre llenas en el modelo. Los nucleones que ocupan estas órbitas no se tienen en cuenta en el cálculo excepto para renormalizar la interacción efectiva.

b) **El espacio de valencia:** La constituyen las órbitas en las que se pueden mover los nucleones de valencia, que son los que no están en el *core*. Los nucleones de valencia se mueven de acuerdo con la interacción efectiva ocupando parcialmente las órbitas en este espacio.

c) **El espacio externo:** Compuesto por las órbitas más altas en energía que suponemos que están siempre vacías en el problema que nos interesa estudiar.

Debemos encontrar el espacio de valencia apropiado para resolver el núcleo en cuestión. En la Fig. B.1 están representadas esquemáticamente las órbitas del campo medio esférico en el valle de estabilidad. Los espacios de valencia suelen estar comprendidos entre dos números mágicos. Las órbitas en esos casos tienen una separación muy grande en energía y podemos considerarlas

desocupadas para energías de excitación bajas.

B.3 Interacciones efectivas en el espacio de valencia

Cuando resolvemos nuestro problema en un espacio de valencia reducido, debemos regularizar la interacción para que tenga en cuenta de forma apropiada las configuraciones que hemos omitido.

$$H_{ef}\Phi_{ef} = H\Phi. \quad (\text{B.3})$$

El principal problema que presentan las interacciones efectivas encontradas con este método son su mala propiedad de saturación.

Una vez tenemos la interacción efectiva el problema del modelo de capas se reduce a la diagonalización del hamiltoniano en el espacio de valencia. Para construir la matriz hamiltoniano utilizamos la base del espacio de Fock. Para que el modelo de capas tenga sentido, su estructura no debe ser completamente borrada al introducir la interacción residual.

Si utilizamos el acoplamiento jj , la interacción efectiva se puede escribir en segunda cuantización como,

$$\sum_i t_i + \sum_{ijkl} W_{ijkl}^\Gamma [a_i^\dagger a_j^\dagger]^\Gamma [a_k a_l]^\Gamma, \quad (\text{B.4})$$

donde Γ representa el par de números cuánticos J, T correspondiente al momento angular y al isospín y $W_{ijkl}^\Gamma = \langle ij(JT) | V_{eff} | kl(JT) \rangle$. Las funciones de onda deben tener los números cuánticos apropiados a las simetrías del hamiltoniano.

B.4 Capas más utilizadas

Los espacios de valencia más utilizados para los cálculos del modelo de capas dependiendo de la región nuclear donde nos encontremos son:

B.4.1 Capa p

La capa p se compone de las órbitas $1p_{3/2}$ y $1p_{1/2}$. Este espacio de valencia se utiliza para describir los núcleos con $2 < N < 8$ y $2 < Z < 8$. Solamente

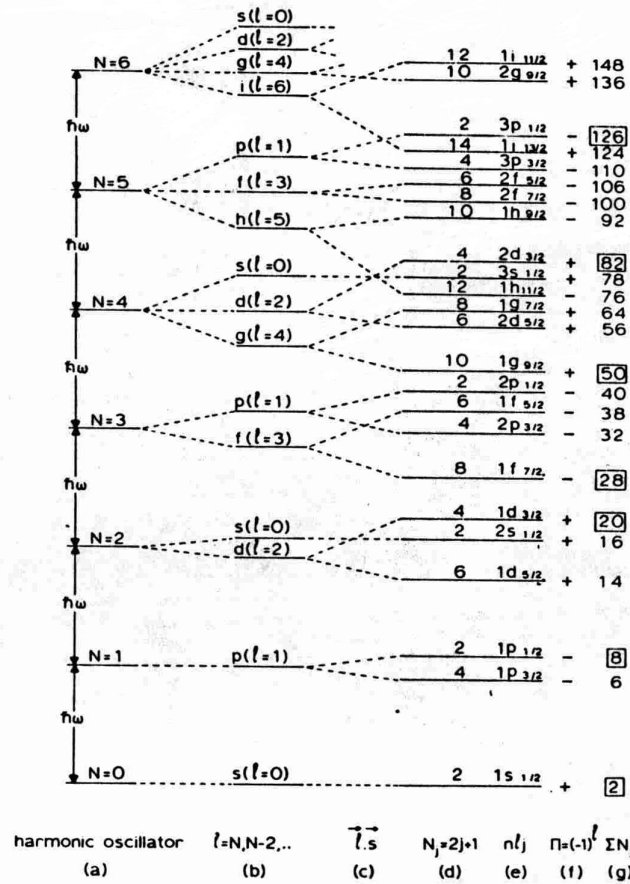


Figura B.1: Números cuánticos de las capas del modelo de capas. Los números mágicos están recuadrados a la derecha de la figura. (a) Capas en el oscilador armónico en tres dimensiones, (b) Espectro en un campo medio con un potencial tipo Woods-Saxon, (c) Espectro añadiendo la interacción espín-órbita, (d) Degeneración de las capas, (e) Denominación de la capa, (f) Paridad y (g) Número de llenado de las partículas. El número principal de cada órbita es superior en una unidad al utilizado en el texto[118].

se pueden reproducir los estados de paridad positiva en núcleos con A par y los estados de paridad negativa en los núcleos con A impar debido a que el momento angular $l = 1$ de las dos órbitas hace que cada nucleón siempre contribuya con paridad $\pi = -1$.

B.4.2 Capa sd

Compuesta de las órbitas $0d_{5/2}$, $1s_{1/2}$, $0d_{3/2}$. Se utiliza para describir los estados de paridad positiva de los núcleos con $8 < N < 20$ y $8 < Z < 20$.

B.4.3 Capa fp

Es el espacio de valencia compuesto por las órbitas $0f_{7/2}$, $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$ y $0f_{5/2}$. Debería ser utilizado para la descripción de los núcleos con $20 < N < 40$ y $20 < Z < 40$. Sin embargo, el término espín-órbita del campo medio rompe el ordenamiento del oscilador armónico y por encima de $N, Z = 32$ debemos incluir explícitamente la órbita $1g_{9/2}$.

B.4.4 Región del Pb

Se utiliza para describir los núcleos con unos pocos nucleones por encima del núcleo doblemente mágico ^{208}Pb . Este isótopo se compone de 82 protones y 126 neutrones. Por tanto, las órbitas del espacio de valencia en el que se mueven los protones y el espacio de valencia en que se mueven los neutrones son distintas. En el caso de los protones el espacio de valencia está compuesto por las órbitas $0h_{9/2}$, $1f_{7/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$, $0i_{13/2}$ que son las correspondientes a $Z = 82 - 126$. El espacio de valencia de neutrones se compone de las órbitas $0i_{11/2}$, $1g_{9/2}$, $1g_{7/2}$, $2d_{5/2}$, $2d_{3/2}$, $3s_{1/2}$, $0j_{15/2}$.

B.5 Interacciones efectivas realistas

Siguiendo a M. Dufour y A. Zuker[126] consideraremos el hamiltoniano dividido en dos partes principales

$$H = H_m + H_M \quad (\text{B.5})$$

donde H_m es la denominada parte monopolar que contiene los términos afectados por el método variacional de Hartree-Fock esférico. Por tanto, es la responsable de las propiedades globales de saturación y el espectro de partícula

independiente. H_M es el resto del hamiltoniano y se denomina parte multipolar.

Se puede demostrar[126] que

$$H_m = H_{sp} + \sum_{rs} \left[\frac{1}{1 + \delta_{rs}} a_{rs} n_r (n_s - \delta_{rs}) + \frac{1}{2} b_{rs} (\mathbf{T}_r \mathbf{T}_s - \frac{3n_r}{4} \delta_{rs}) \right] \quad (\text{B.6})$$

donde H_{sp} es el término de partícula independiente generado por las órbitas del core, n_r es el número de ocupación de la órbita r , \mathbf{T}_r es el operador de isospín de la órbita r y los coeficientes a y b se definen en términos de los centroides

$$V_{rs}^T = \frac{\sum_J (2J + 1) V_{rsrs}^{JT}}{\sum_J (2J + 1)} \quad (\text{B.7})$$

Este hamiltoniano nos da la energía completa cuando se aplica a capas cerradas o a capas cerradas más o menos una partícula. Esto es, nos determina los estados de partícula independiente en el espacio modelo.

Las malas propiedades de saturación de las interacciones nucleares realistas basadas en matrices G provocan que esta parte del hamiltoniano deba ser corregida fenomenológica para reproducir correctamente las propiedades espectroscópicas de los núcleos[119]. La interacción que hemos utilizado en los núcleos de la capa pf , KB3, es una de estas interacciones con modificaciones monopulares.

B.6 Parte multipolar de la interacción

La parte multipolar de la interacción es lo que queda cuando le quitamos el monopolo anteriormente descrito. Viene descrita de forma adecuada por las interacciones efectivas, que dan todas ellas resultados equivalentes.

La interacción multipolar contiene unos pocos elementos de matriz importantes, que son los que realmente se necesitan para reproducir las propiedades espectroscópicas de los núcleos. Uno de los términos más importantes es la interacción de apareamiento, son los elementos de matriz con $J = 0$, $T = 1$. Inducen a los nucleones del mismo tipo a acoplarse en pares con momento angular $J = 0$. Son los responsables de que el estado fundamental de los núcleos par-par tenga $J = 0$ sin excepción.

Otros términos muy importantes son los cuadrupolo-cuadrupolo, responsables de buena parte del comportamiento colectivo de los núcleos a baja energía, el término octupolar y otros pocos.

Si eliminamos estos pocos términos de la interacción multipolar, la distribución del resto de elementos de matriz tiene forma gaussiana. Las interacciones efectivas se componen de unas pocas partes fundamentales y el resto de sus elementos se comporta de forma estocástica. Los elementos de matriz más importantes son los responsables del comportamiento cuasirregular de los núcleos a baja energía y de sus modos colectivos, pero en seguida empieza a actuar la componente estocástica de la interacción provocando un comportamiento tipo matriz aleatoria del espectro. La inclusión de forma adecuada de todas estas componentes ha conseguido que el modelo de capas sea capaz de unificar nuestra descripción del núcleo atómico.

Bibliografía

- [1] M. V. Berry, Ann. Phys. **131**, 163 (1981).
- [2] O. Bohigas, M. J. Giannoni, C. Schmit, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984).
- [3] H. J. Stöckmann, J. Stein, Phys. Rev. Lett. **64**, 2215 (1990).
- [4] H. D. Gräf, H. L. Harney, H. Lengeler, C. H. Lewenkopf, C. Rangacharyulu, A. Richter, P. Schardt, H. A. Weidenmüller, Phys. Rev. Lett. **69**, 1296 (1992).
- [5] C. Ellegaard, T. Guhr, K. Lindemann, H. Q. Lorensen, J. Nygard, M. Oxborrr, Phys. Rev. Lett. **75**, 1546 (1995).
- [6] C. M. Marcus et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 506 (1992).
- [7] B. L. Altshuler, C. Biagini, M. Patriarca, *Quantum Chaos and Transport in Mesoscopic Systems in Field Theories for Low dimensional condensed matter systems*, G. Morandi, P. Sodano, A. Tagliacozzo, V. Tognetti (ed.). Springer Verlag, Heidelberg, (2000) pp. 235-269.
- [8] V. V. Flambaum, A. A. Gribakina, G. F. Gribakin, M. G. Kozlov, Phys. Rev. **A50**, 267 (1994).
- [9] D. Wintgen, H. Friedrich, Phys. Rev. A. **35**, 1464 (1987).
- [10] R. M. Benito, F. Borondo, J. H. kim, B. G. Jupler, G. S. Ezra, Chem. Phys. Lett. **161**, 60 (1989).
- [11] M. S. Bae, T. Otsuka, T. Mizusaki, N. Fukunishi, Phys. Rev. Lett. **69**, 2349 (1992).

-
- [12] O. Bohigas, H. A. Weidenmüller, *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **46**, 421 (1988).
- [13] H. G. Schuster, *Deterministic Chaos*, VCH, Physic Verlag, Weinheim (1988).
- [14] A. J. Lichtenberg, M. A. Leiberman, *Regular and chaotic dynamics*, Springer, New York (1992).
- [15] A. N. Kolmogorov, *Preservation of conditionally periodic movements with small change in the Hamilton function*(trad. del ruso), *Dokl. Akad. Nauk USSR* **98**, 527 (1954). Una traducción al inglés se puede encontrar en el apéndice D de R. Abraham, *Foundations of Mechanics*, W. A. Benjamin, New York, (1967).
- [16] A. M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization*, Cambridge University Press, Cambridge, (1988).
- [17] A. Peres, *Phys. Rev. A* **30**, 1610 (1984).
- [18] A. Peres, *Quantum theory: Concepts and methods* Kluwer Academic, New York, (1995).
- [19] R. A. Jalabert, H. M. Pastaswki, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2490 (2001).
- [20] M. V. berry, *Proc. R. Soc. Lond. A* **413**, 183 (1987).
- [21] M. Gutzwiller, *Chaos in classical and quantum mechanics*, Springer Verlag, Heidelberg (1990).
- [22] A. Einstein, *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* **19**, 82 (1917).
- [23] I. C. Percival, *J. Phys. B* **6**, L229-232.
- [24] E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **98**, 145 (1955).
- [25] C. E. Porter (ed.) *Statistical theories of spectra* Academic Press, New York, (1965).
- [26] M. L. Mehta, *Random matrices*, Academic Press, London, (1991).
- [27] T. A. Brody, *Lett. Nuovo Cimento* **7**, 482 (1973).

-
- [28] T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey, S. S. M. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 385, (1981).
- [29] F. M. Izrailev, *Phys. Lett. A* **134**, 13 (1988).
- [30] M. V. Berry, M. Robnik, *J. Phys. A: Math. Nucl. Gen.* **17**, 2413 (1984).
- [31] H. Seligman, J. J. M. Verbaarschot, M. R. Zirnbauer, *J. Phys. A* **18**, 2751 (1985).
- [32] M. Robnik, T. Prozen, *J. Phys. A*, (1998).
- [33] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. Lond. A* **400**, 229 (1985).
- [34] Y. G. Sinai, *Funct. Anal. Appl.* **2** 61, 245 (1968).
- [35] L. A. Bunimovich, *Funct. Anal. Appl.* **8**, 254 (1974).
- [36] Y. G. Sinai, L. A. Bunimovich, *Commun. Math. Phys.* **78**, 247 (1980).
- [37] M. Robnik, *J. Phys. A* **30**, 1610 (1984).
- [38] S. Fishman, D. R. Grempel, R. E. Prange, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 509 (1982).
- [39] F. M. Izrailev, *Phys. Rep.* **196**, 299 (1990).
- [40] F. Haake, G. Lenz, P. Seba, J. Stein, H. Stöckmann, K. Zyczkowski, *Phys. Rev. A*, **44**, R6161 (1991).
- [41] E. J. Heller, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1515 (1984).
- [42] P. M. Koch, K. A. H. van Leeuwen, *Phys. Rep.* **255**, 289 (1995).
- [43] N. Bohr, *Nature*, **137**, 344 (1936).
- [44] R. U. Haq, A. Pandey and O. Bohigas, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1086 (1982).
- [45] F. M. Izrailev, *J. Phys. A* **22**, 865 (1989).
- [46] V. Zelevinsky, B. A. Brown, N. Frazier, M. Horoi, *Phys. Rep.* **276**, 85 (1996).

- [47] T. O. E. Ericson, T. Mayer-Kuckuk, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **16**, 183 (1966).
- [48] M. G. Mayer, *Phys. Rev.* **75**, 1969 (1949).
- [49] O. Haxel, J. H. D. Jensen, H. E. Suess, *Phys. Rev.* **75**, 1766 (1949).
- [50] A. Poves, *Conferencias en la Ecole Internationale Joliot-Curie, "Structure nucleaire: Un nouvel horizon"*, septiembre 1997.
- [51] T. A. Brody, E. Cota, J. Flores, P. A. Mello, *Nucl. Phys. A* **259**, 87 (1976).
- [52] T. von Egidy, A. N. Behkami, H. H. Schmidt, *Nucl. Phys. A* **454**, 109, (1986).
- [53] T. von Egidy, H. H. Schmidt, A. N. Behkami, *Nucl. Phys. A* **481**, 189 (1988).
- [54] J. F. Shriner Jr., G. E. Mitchell, T. von Egidy, *Z. Phys. A* **338**, 309 (1991).
- [55] G. E. Mitchell, E. G. Bilpuch, P. M. Endt, J. F. Shriner Jr. *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 1473 (1988).
- [56] J. F. Shriner Jr., E. G. Bilpuch, P. M. Endt, G. E. Mitchell, *Z. Phys. A* **338**, 309 (1991).
- [57] S. Raman, T. A. Walkiewicz, S. Kahane, E. T. Journey, J. Sa, Z. Gácsi, J. L. Weil, K. Allart, G. Bonsignori, J. F. Shriner, Jr., *Phys. Rev. C* **43**, 521 (1991).
- [58] P. M. Endt, P. de Wit, C. Alderliesten, B. H. Wildenthal, *Nucl. Phys. A* **487**, 221 (1988).
- [59] W. E. Ormand, R. A. Broglia, *Phys. Rev.* **C46**, 1710 (1992).
- [60] C. E. Porter, R. G. Thomas, *Phys. Rev.* **104**, 483 (1956).
- [61] J. B. Garg (Ed.), *Statistical Properties of Nuclei*, Plenum, New York, (1972).
- [62] R. Chrien, *Phys. Rep.* **64**, 337 (1980).

- [63] G. E. Mitchell, E. G. Bilpuch, J. F. Shriner, Jr., A. M. Lane, Phys. Rep. **117**, 1 (1985).
- [64] N. Rosenzweig, C. E. Porter, Phys. Rev. **120**, 1698 (1960).
- [65] E. Haller, H. Köppel, L. S. Cederbaum, Chem. Phys. Lett. **101**, 215 (1983).
- [66] T. Zimmermann, H. Köppel, L. S. Cederbaum, G. Persch, W. Demtröder, Phys. Rev. Lett., **61**, 3 (1988).
- [67] T. Zimmermann, H. Köppel, L. S. Cederbaum, J. Chem. Phys. **91**, 3934, (1989).
- [68] E. M. Leitner et al.
- [69] G. García de Polavieja, F. Borondo, R. M. Benito, Phys. Rev. Lett. **73**, 1613 (1994).
- [70] K. K. Mon, J. B. French, Ann. Phys. (N.Y.) **95**, 90 (1975).
- [71] V. K. B. Kota, Phys. Rep. **347**, 223, (2001).
- [72] S. S. M. Wong *Nuclear Statistical Spectroscopy*, Oxford University Press, New York, (1986).
- [73] V. K. B. Kota, R. Sahu, K. Kar, J. M. G. Gómez, J. Retamosa, Phys. Rev. C **60**, 051306(R) (1999).
- [74] J. M. G. Gómez, K. Kar, V. R. Manfredi, R. A. Molina, J. Retamosa, Phys. Lett. B **480**, 245 (2000).
- [75] J. M. G. Gómez, K. Kar, V. K. B. Kota, J. Retamosa, R. Sahu, Phys. Rev. C **46**, 034305 (2001).
- [76] K. Nakamura, *Quantum Chaos: A New Paradigm of Nonlinear Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge (1993).
- [77] P. Pechukas, Phys. Rev. Lett., **51**, 943 (1983).
- [78] T. Yukawa, Phys. Rev. Lett., **54**, 1883 (1985).
- [79] T. Yukawa, Phys. Rev. A, **116**, 227 (1986).

-
- [80] K. Nakamura, M. Lakshmanan, Phys. Rev. Lett., **61**, 1661, (1986).
- [81] A. Kulakov, A. Rumiántsev, *Introducción a la física de procesos no lineales*, Mir, Moscú, (1990).
- [82] C. Iu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **63**, 1133 (1989).
- [83] H. Ishio, K. Nakamura, Phys. Rev. A **46**, R2193 (1992).
- [84] P. Gaspard, S. A. Rice, K. Nakamura, Phys. Rev. Lett. **63**, 930 (1989).
- [85] P. Kuntsman, K. Zyczkowski, J. Zakrzewski, Phys. Rev. E **55**, 2446 (1997).
- [86] T. Guhr, A. Müller-Groeling, H. A. Weidenmüller, Phys. Rep. **299**, 189 (1998).
- [87] J. Zakrewski, D. Delande, Phys. Rev. E **47**, 1650 (1993).
- [88] F. von Oppen, Phys. Rev. Lett. **73**, 798 (1994).
- [89] F. Haake *Quantum signatures of chaos* Springer Verlag, Heidelberg, (2001).
- [90] J. B. French, S. S. M. Wong, Phys. Lett. B **35**, 5 (1971).
- [91] V. Paar, D. Vorkapic, K. Heyde, A. G. M. van Hees, A. A. Wolters, Phys. Lett. B **271**, 1 (1991).
- [92] H. Meyer, J. C. Angles d'Auriac, J. M. Maillard, Phys. Rev. E **55**, 5380 (1997).
- [93] H. Bruus, J. C. Angles d'auriac. Phys. Rev. B **55**, 9142 (1997).
- [94] H. A. Bethe, Phys. Rev. **C**, 332 (1936).
- [95] A. P. Zuker, Phys. Rev. C **64**, 021303, (2001).
- [96] O. Bohigas, J. Flores, Phys. Lett. B **34**, 261 (1971).
- [97] H. Cramer *Mathematical Methods of Statistics*, Princeton University Press, Princeton, (1946).

- [98] A. P. Zuker, L. Waha Ndeuna, E. Caurier, F. Nowacki, Phys. Rev. C **64**, 021304, (2001).
- [99] A. Gilbert, A. G. W. Cameron, Can. J. Phys. **43** (1965) 1446.
- [100] J. F. Shriner Jr., G. E. Mitchell, T. Von Egidy, Z. Phys. A **338** (1991) 309.
- [101] J. F. Shriner Jr., E. G. Bilpuch, P. M. Endt and G. E. Mitchell, Z. Phys. A. **335**, 393 (1990).
- [102] M. Horoi, V. Zelevinsky, B. A. Brown, Phys. Rev. Lett. **74**, 5194 (1995).
- [103] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, J. Retamosa, A. P. Zuker, Phys. Rev. C **59**, 2033 (1999).
- [104] A. Poves and A. P. Zuker, Phys. Rep. **70**, 4 (1981).
- [105] E. Caurier, J. M. G. Gómez, V. R. Manfredi, L. Salasnich, Phys. Lett. B **365**, 7 (1996).
- [106] J. M. G. Gómez, V. R. Manfredi, L. Salasnich, E. Caurier Phys. Rev. C **58**, 2108 (1998).
- [107] F. J. Dyson, J. Math. Phys. **3**, 140 (1962).
Phys. Rev. C **60**, 051306(R) (1999).
- [108] P. Arve, Phys. Rev. A **44**, 6920 (1991).
- [109] F. J. Dyson, M. L. Mehta, J. Math. Phys. **4**, 701 (1963).
- [110] V. K. B. Kota, R. Sahu, Phys. Lett. B **429**, 1 (1998).
- [111] V. K. B. Kota, R. Sahu, Phys. Rev. E (2001).
- [112] R. A. Molina, J. M. G. Gómez, J. Retamosa, Phys. Rev. C (2001).
- [113] R. Ramaswamy, R. A. Marcus, J. Chem. Phys. **74**, 1379 (1981).
- [114] J. H. Wilkinson, *The Algebraic Eigenvalue Problem*, Oxford University Press, Oxford (1965).

-
- [115] P. Gaspard, S. A. Rice, H. J. Mikeska, K. Nakamura, *Phys. Rev. E* **42**, 4015 (1990).
- [116] H. Ishio, *J. Phys. Soc. Japan* **61**, 4325 (1992).
- [117] L. Waha Ndeuna, *Propriétés des matrices hamiltoniennes dans la base tridiagonale*, thèse de doctorat, IReS, Strasbourg (1999).
- [118] P. J. Brussaard, P. W. M. Glaudemans, *Shell Model Applications in Nuclear Spectroscopy*, North Holland, (1997).
- [119] A. Poves, A. P. Zuker, *Phys. Rep.*, **70**, 235 (1981).
- [120] O. Bohigas en *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches Session LII, Elsevier, (1991).
- [121] E. P. Wigner, *Ann. Math.* **62**, 548 (1955).
- [122] E. P. Wigner, *Ann. Math.* **65**, 203 (1957).
- [123] H. Wu, D. W. L. Sprung, D. H. Feng, M. Vallières, *Phys. Rev. E* **47**, 4063 (1993).
- [124] J. M. G. Gómez, R. A. Molina, A. Relaño, J. Retamosa, enviado para su publicación.
- [125] D. C. Meredith, *Phys. Rev. E* **47**, 2405 (1993).
- [126] M. Dufour, A. P. Zuker, *Phys. Rev. C* **54**, 1641 (1996).