ESTADÍSTICA DE NIVELES DE ENERGÍA COMO CRITERIO DEL CAOS CUÁNTICO

LUIS SEIDEL GÓMEZ DE QUERO
Universidad Politécnica de Madrid
Grupo de Sistemas Complejos

ÍNDICE

- Problema de Schrödinger estacionario
- Densidad de niveles y fluctuaciones
- Teoría de matrices aleatorias (RMT)
- Resultados fundamentales para caos cuántico
- Aplicaciones a sistemas moleculares

ESTADÍSTICA DE NIVELES

Problema de Schrödinger estacionario

- Para sistemas hamiltonianos acotados, la evolución temporal de la función de ondas cuántica es cuasiperiódica. No existe caos cuántico que se manifieste en la dinámica a tiempos largos.

- Consideramos propiedades estacionarias: autovalores (niveles de energía) y autofunciones (funciones de onda) de la ecuación de Schrödinger estacionaria

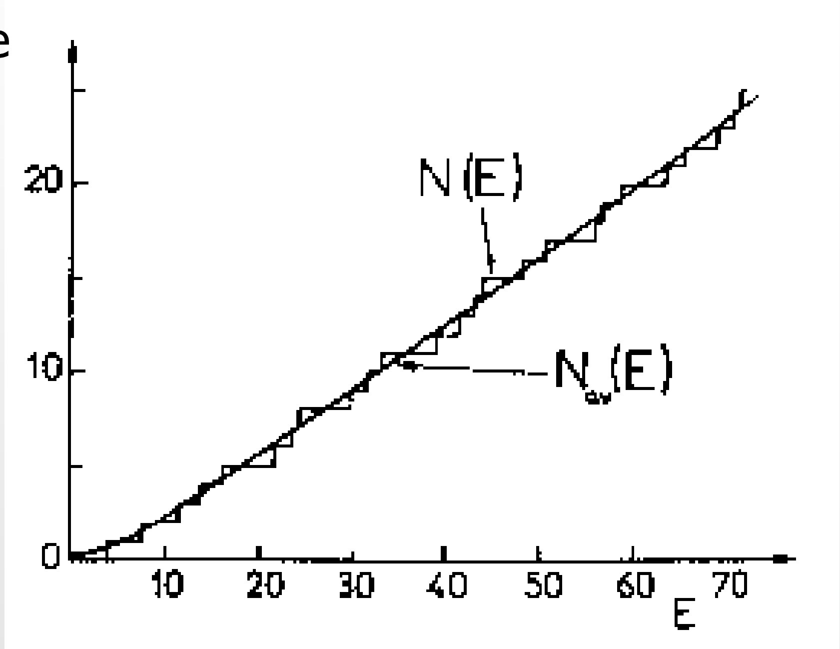
$$\nabla^2\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

Analogía con la ecuación de Helmholtz:
Kac (1966): ***Can one hear the shape of a drum?***

La distribución de los autovalores de la ecuación de Schrödinger estacionaria *presenta varias clases de universalidad* relacionadas con la dinámica clásica subyacente: sirve como puente entre las dinámicas clásica y cuántica.

Densidad de niveles: Medidas estadísticas

Si tenemos una sucesión de niveles de energía $\{E_i\}$ se define $N(E)$ como el número de niveles con energía ≤ E



Esta función escalera se puede descomponer en

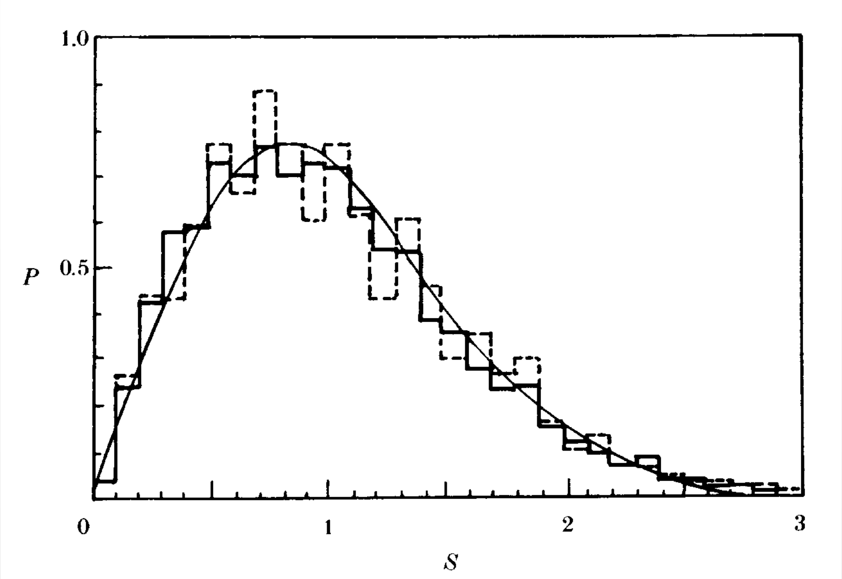
$$N(E) = \overline{N}(E) + N_{osc}(E)$$

$\overline{N}(E)$ se puede estimar semiclásicamente mediante la fórmula de Weyl, que equivale a contar el número de celdas de lado h que caben en el espacio de fases clásicamente accesible.

Densidad de niveles: Medidas estadísticas

Espaciado de vecinos más próximos:

$$S_i = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i$$



- Probabilidad de que el espaciado entre dos niveles se encuentre entre S y $S+dS$

$$P(S)dS$$

- Probabilidad acumulada: fracción de niveles con espaciado $\leq S$

$$W(S) = \int_0^S P(s)ds$$

Medidas estadísticas de largo alcance

- Varianza:

$$\Sigma^2(L) = \overline{(N(L) - L)^2}$$

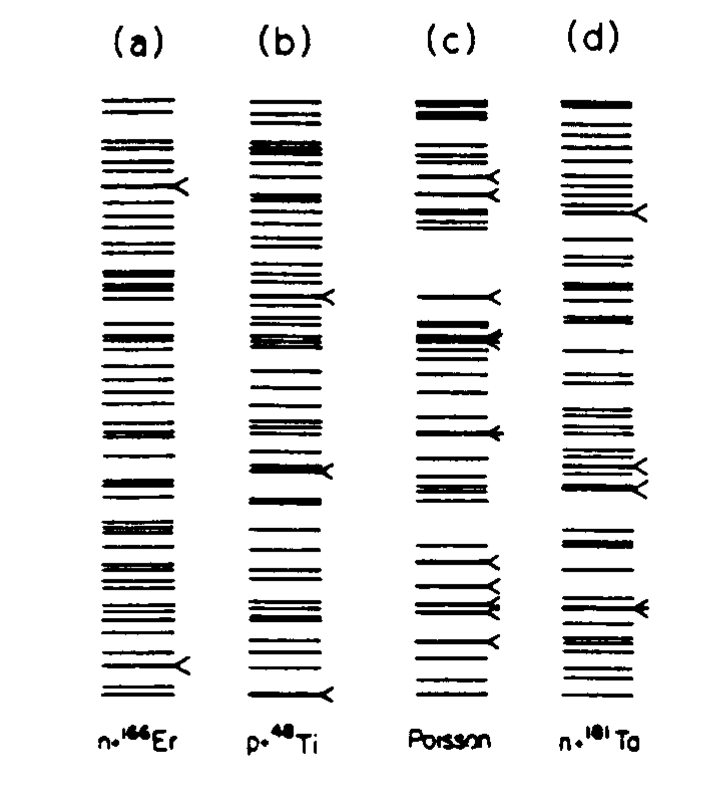
- Rigidez espectral:

$$\Delta_3(L;\alpha) = \frac{1}{L} \min_{A,B} \int_{\alpha}^{\alpha+L} (N(E) - AE - B))^2 dE$$

$$\overline{\Delta_3}(L) = \overline{\Delta_3(L;\alpha)}$$

Teoría de matrices aleatorias

En 1951, Wigner propuso explicar los espectros nucleares de modo estadístico utilizando la teoría de matrices aleatorias



No se conocía el hamiltoniano nuclear: Supongo matrices aleatorias e impongo simetrías: GUE, GOE,...

RMT proporciona la distribución de los autovalores de esas colectividades

Función ζ de Riemann

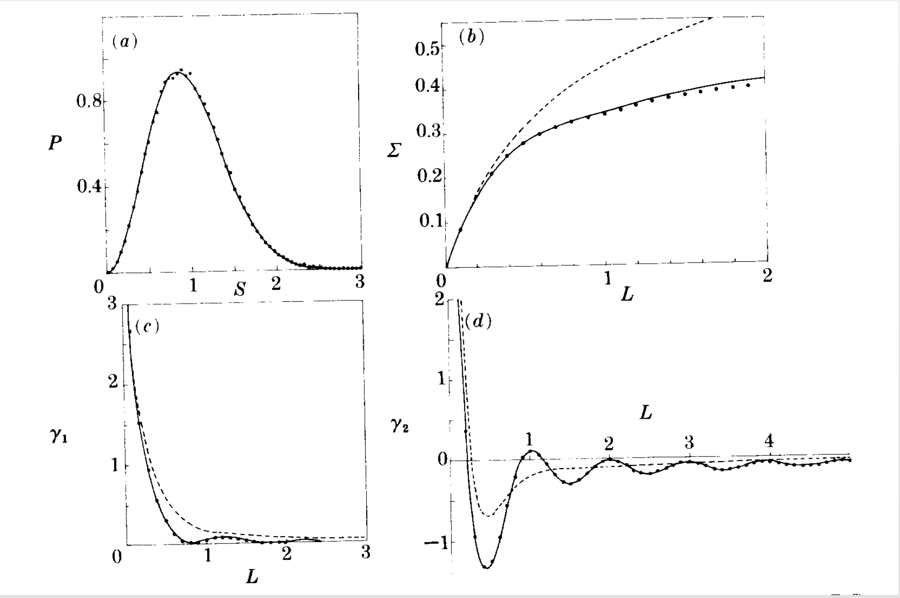
- La distribución de los números primos no es aleatoria.
- Teorema de los números primos:

$$\pi(x) \approx \frac{x}{\log x}$$

Función ζ de Riemann:

$$\zeta(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n^z} = \prod_p \frac{1}{1-p^{-z}}$$

Los ceros de la función ζ de Riemann (*conjetura de Riemann*) están sobre Re*(z)* = 1/2 y *se distribuyen como los autovalores de matrices aleatorias. (GUE)*



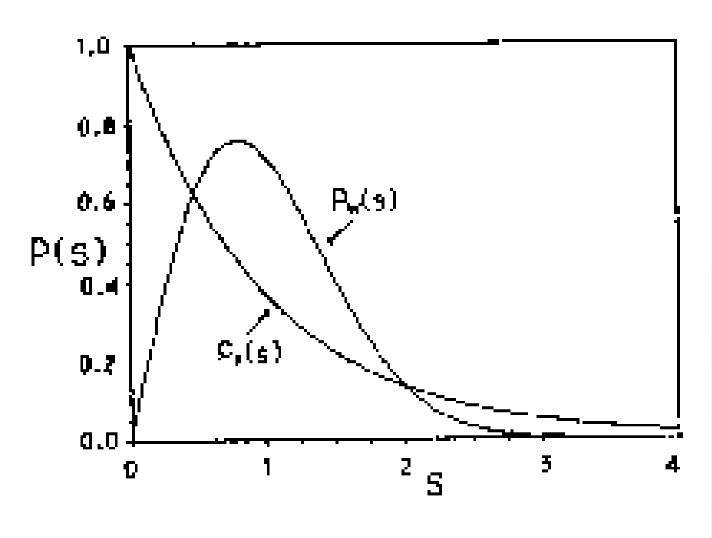
ESTADÍSTICA DE NIVELES

Teoría de matrices aleatorias

$$P(S) = \frac{\pi}{2} S \exp(-\frac{\pi}{4} S^2)(GOE)$$

$$P(S) = \frac{32}{\pi} S^2 \exp(-\frac{4}{\pi} S^2)(GUE)$$

$$P(S) = \exp(-S) \qquad (Poisson)$$



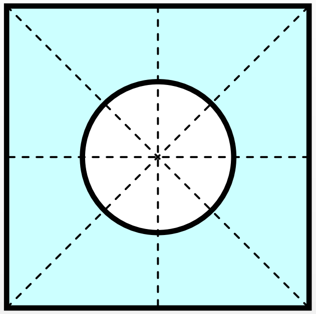
Expresiones asintóticas para las distribuciones de Poisson y Wigner:

$$\begin{aligned}
\Sigma_p^2(L) &= L \\
\Sigma_w^2(L) &= \frac{2}{\pi^2}(\ln(2\pi L) + \gamma + 1 - \frac{\pi^2}{8}) + O(1/L) \\
\Delta_{3p}(L) &= L/15 \\
\Delta_{3w}(L) &= \frac{1}{\pi^2}(\ln(2\pi L) + \gamma - \frac{5}{4} - \frac{\pi^2}{8}) + O(1/L)
\end{aligned}$$

ESTADÍSTICA DE NIVELES

Relación con el caos cuántico: sistemas clásicamente regulares o caóticos

En 1984, Bohigas Giannoni y Schmidt prueban numéricamente que en el billar de Sinai cuántico, la distribución de espaciados de niveles sigue la distribución GOE.



Conjetura BGS:
El espectro de sistemas t-invariantes cuyos análogos clásicos sean sistemas K (ergódicos o suficientemente caóticos) muestran las mismas propiedades de fluctuaciones que las que predice la colectividad GOE

En 1977 Berry y Tabor demuestran que, en la aproximación semiclásica, los sistemas clásicamente integrables (regulares) presentan una distribución que se ajusta a la de Poisson (sistemas aleatorios).
En sistemas regulares no hay repulsión de niveles.

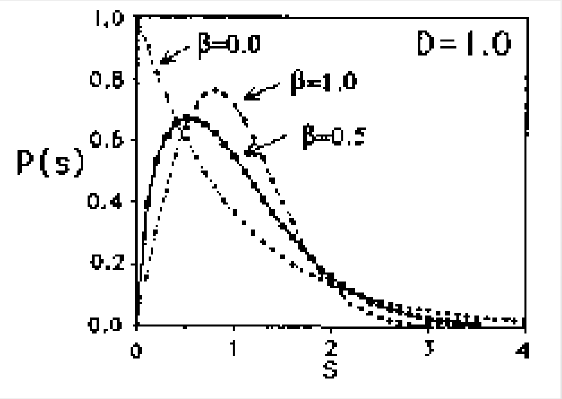
ESTADÍSTICA DE NIVELES

Relación con el caos cuántico: sistemas KAM

Régimen semiclásico: La estadística espectral de sistemas genéricos (KAM) se debe obtener como resultado de una superposición independiente de espectros de diferentes clases de universalidad, cada uno asociado a una región caótica o regular del espacio de fases.
Conjetura de Berry-Robnik

Régimen *no muy* semiclásico: Distribución de Brody

$$P(S) = C S^{\beta} \exp\left(-\frac{C S^{\beta+1}}{\beta+1}\right)$$

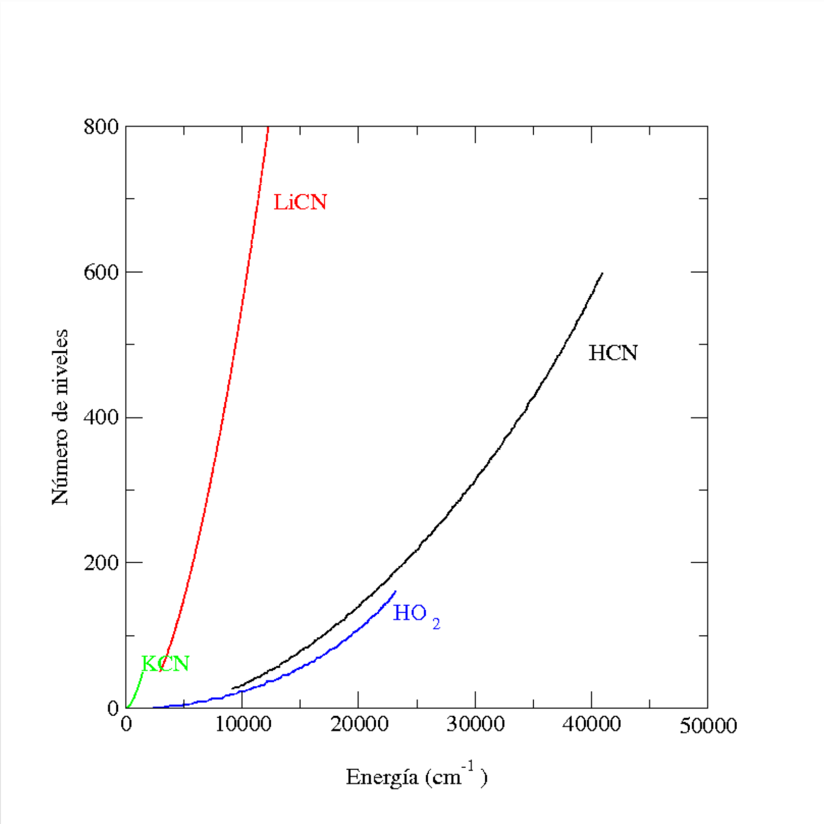


$$W(S) = 1 - \exp(-b s^{\beta+1}) \quad b = \Gamma(1 + (1+\beta)^{-1}))^{\beta+1}$$

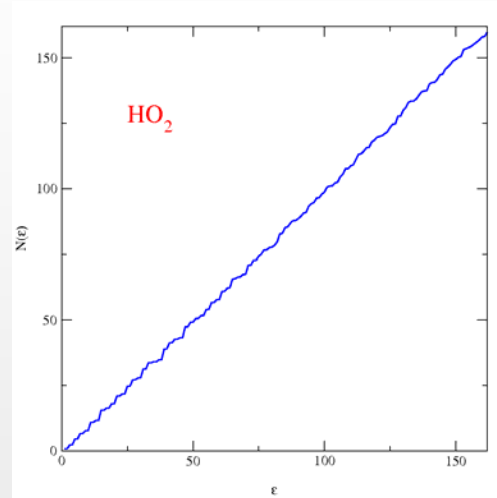
Saturación de las medidas espectrales de largo alcance

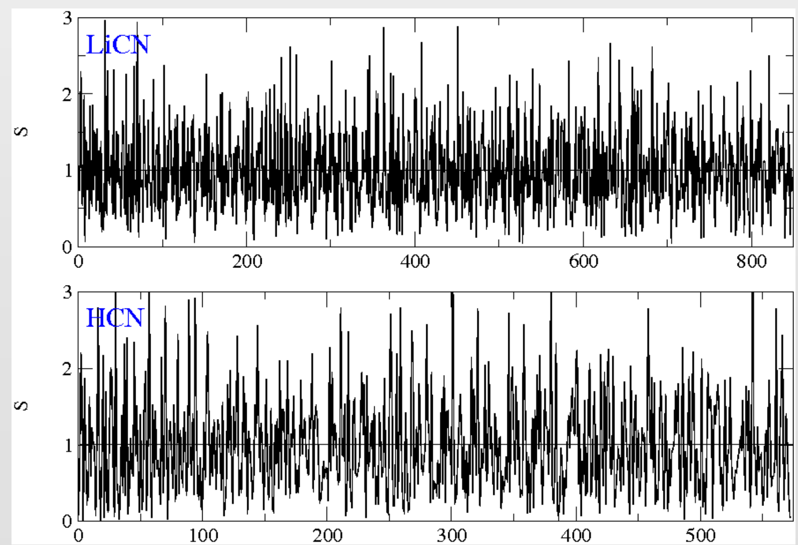
ESTADÍSTICA DE NIVELES

Resultados para sistemas moleculares



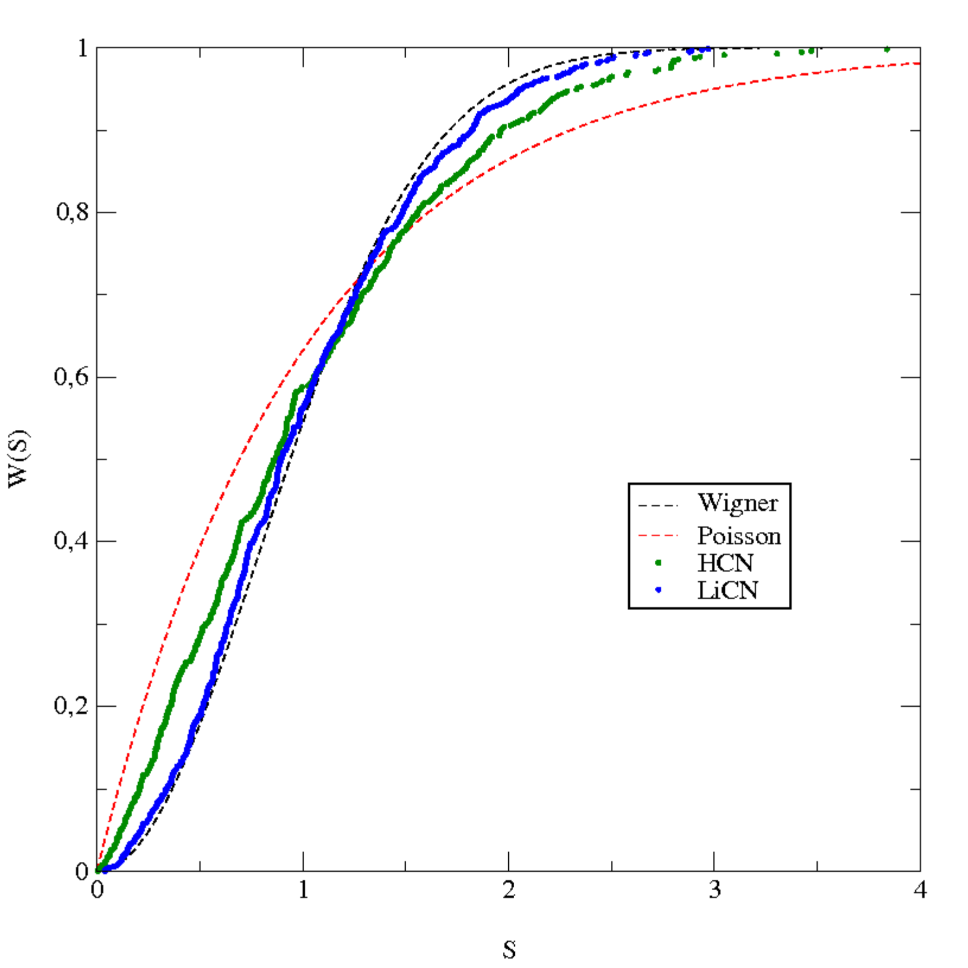
Densidad de niveles





ESTADÍSTICA DE NIVELES

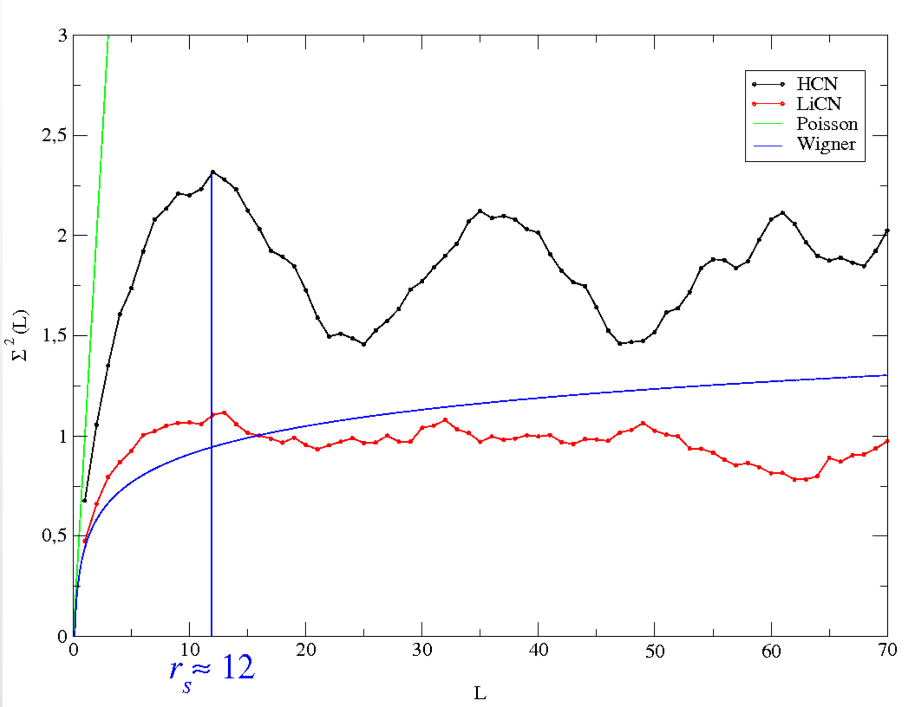
Resultados para sistemas moleculares

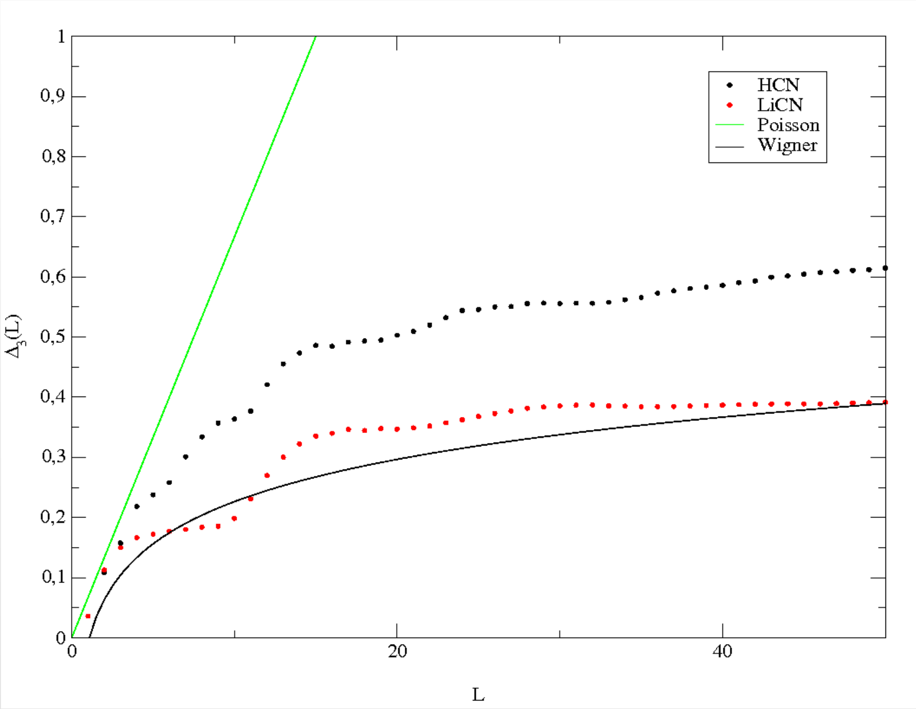


Distribución de Brody
HCN: β= 0,34
LiCN: β= 0,75

ESTADÍSTICA DE NIVELES

Resultados para sistemas moleculares





Σ^2

Δ_3