



UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTONOMA DE MEXICO
Facultad de Ciencias

Sobre la convergencia y estabilidad de
expansiones de osciladores anarmónicos en
términos de osciladores armónicos.

TESIS

Que para obtener el Título de:

Físico

Presenta:

Luis Benet Fernández

México, D.F.

1991.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Agradecimientos

Índice

Introducción	1
Referencias	3
Capítulo 1: Formulación del problema y estudio clásico	
1. Formulación del problema	4
2. Sistema por estudiar	5
3. Elección de los parámetros	7
Referencias	11
Capítulo 2: El hamiltoniano cuántico	
1. Criterios de estabilidad y convergencia	12
2. Elementos de matriz del hamiltoniano	15
3. Cambio de base entre diferentes funciones de oscilados armónico	18
Referencias	22
Capítulo 3: Resultados numéricos	
1. Estabilidad y convergencia de la energía	23
2. Estabilidad y convergencia de las eigenfunciones	33
Referencias	43
Conclusiones	44
Apéndice 1	46

INTRODUCCIÓN

Vengo a decirte lo que dicen mis ojos
y a preguntarte por lo que dicen los tuyos.
cuando en el camino nos cruzamos
y platicamos con nuestras miradas.
Nuestras miradas dicen muchas cosas
pero nuestras conciencias entienden muy pocas
y mi corazón, mi corazón sólo escribe estas simplezas.

L. Benet (abril 1990)

Las funciones de oscilador armónico son frecuentemente usadas como base para encontrar soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger usando el método variacional. Estas aplicaciones abarcan desde problemas de física atómica hasta de estructura de partículas, con particular énfasis en física nuclear [1], como por ejemplo, en el modelo de capas del núcleo de Mayer y Jensen (premio nobel 1963). Los parámetros variacionales usados en estos cálculos son parámetros lineales, lo que reduce el problema a uno de diagonalización; el único parámetro no lineal que se varía es la frecuencia de los osciladores. Recientemente, estas técnicas también han sido aplicadas a sistemas de osciladores anarmónicos bidimensionales [2]. Estos sistemas son importantes en el marco del caos cuántico ya que, a diferencia de los billares, sufren transiciones de orden a caos de manera suave [2] y no presentan correcciones semiclásicas debidas a efectos de superficie o curvatura.

Mientras que en las aplicaciones más antiguas el número de estados requeridos en los cálculos es bastante limitado, en las aplicaciones relacionadas con el caos cuántico este número aumenta hasta cientos e incluso miles de eigenvalores y eigenfunciones. Uno de los problemas que surgen al usar el método variacional para estados excitados está relacionado con la propagación de errores desde el estado fundamental; el método de la diagonalización limita pero no elimina este problema.

Por esto un estudio detallado de las propiedades de convergencia de los valores y funciones propias lejos del estado base es importante para estimar si se cumplen las necesidades del problema que se pretende estudiar. Motivados por esto, el presente trabajo tiene como objetivo estudiar la convergencia y estabilidad de expansiones de osciladores anarmónicos en términos de osciladores armónicos, cuando el análogo clásico es ordenado y caótico.

El presente trabajo está dividido en tres capítulos y una sección donde se enumeran las conclusiones. El apéndice contiene las figuras obtenidas a partir de las simulaciones numéricas que son la evidencia de las inferencias hechas y que se resumen en las conclusiones. Al final de cada capítulo se enumeran las referencias usadas en él de manera independiente.

En el primer capítulo se plantea de manera formal el problema que se va a estudiar, se explican las principales razones que condujeron a la elección del sistema y se hace un breve estudio de tal sistema desde el punto de vista de la mecánica clásica, resaltándose principalmente sus manifestaciones no lineales y caóticas, las cuales serán importantes en el resto del trabajo. Esto se lleva a cabo mostrándose algunas secciones de Poincaré y los exponentes de Lyapunov obtenidos al variar el parámetro de interacción que regula la caoticidad del sistema.

Pasando a la mecánica cuántica, en el capítulo 2 se describe la forma en que se realizará el estudio de la convergencia y estabilidad de los estados propios del sistema. Aquí se realizan los cálculos necesarios para llevar a cabo las simulaciones numéricas, como son los elementos de matriz del hamiltoniano, cambios de base entre funciones de osciladores armónicos con diferentes frecuencias, la introducción del método variacional y las sutilezas que se esconden en las simulaciones numéricas.

En el tercer capítulo se muestran los resultados numéricos obtenidos y se trata de explicarlos en base a la estabilidad de los eigenvalores correspondientes con respecto a la variación de la frecuencia. Esto liga de alguna manera la discusión con las leyes universales de fluctuación que describen las manifestaciones cuánticas del caos clásico que se conocen [2,3].

Finalmente, en las conclusiones se resumen en forma global los resultados numéricos y las inferencias hechas a partir de estos.

REFERENCIAS

- [1] M. Moshinsky, *The Harmonic Oscillator in Modern Physics: from atoms to quarks*, Gordon and Breach Publishers, Nueva York, 1969, en "Marcos Moshinsky, imagen y obra escogida", colección México y la UNAM, núm. 52, UNAM, 1984.
- [2] T.H. Seligman, J.J.M. Verbaarschot, M.R. Zirnbauer, *J. Phys. A: Math. Gen.* **18** (1985) 2751.
- [3] M. Berry, Semiclassical mechanics of regular and irregular motion, en *Chaotic behaviour of deterministic systems* (eds. G. Iooss, R. H. G. Helleman, R. Stora), Les Houches session XXXVI, North-Holland Publishing Company, Nueva York, 1983.

FORMULACIÓN DEL PROBLEMA Y ESTUDIO CLÁSICO

My chairman does not know what I am doing but thinks it is mathematics,

The Mathematics Department knows it is astronomy,

I know astronomers who believe it is physics,

Myself, I like what I do.

J. Ford (abril 1972)

1.1. Formulación del problema

Durante los últimos años, mucho tiempo y esfuerzo se ha invertido en el entendimiento de las manifestaciones en mecánica cuántica de los movimientos caóticos que se observan en la mecánica clásica. Esto está de alguna manera relacionado con el viejo problema que Einstein encontró en 1917 sobre la aplicación de las leyes de cuantización cuando el sistema no tiene suficiente número de integrales de movimiento (no es integrable) y, por supuesto, con el Principio de Correspondencia de Bohr (1913).

Para atacar este problema, los físicos han estudiado diversas propiedades en diferentes sistemas y han encontrado que, a pesar de que no existe caos en la mecánica cuántica en el mismo sentido que en la mecánica clásica (alta sensibilidad a condiciones iniciales, divergencia exponencial de condiciones iniciales cercanas), existen algunas manifestaciones del caos clásico en mecánica cuántica. Así, se tienen algunas leyes universales sobre la estadística de niveles cuando el sistema es caótico o casi integrable. Para estos estudios sobre la estadística de niveles es muy importante no sólo tener un gran número de energías como muestra estadística,

sino también que los valores de estas energías estén bien medidos (o aproximados teóricamente). Sin embargo, la información cuántica de la trayectoria (clásica) de las partículas reside, en algún sentido, en las eigenfunciones, por lo que el estudiar su estabilidad tiene su propia importancia. Los osciladores anarmónicos son un sistema adecuado para este tipo de estudios porque sufren transiciones continuas de orden a caos, al contrario de lo que ocurre en los billares en que la transición es típicamente abrupta.

Motivados por esto y reconociendo la importancia del oscilador armónico en la aproximación de soluciones de la ecuación de Schrödinger, el presente trabajo pretende estudiar la estabilidad y convergencia de las eigenfunciones de osciladores anarmónicos, cuando el sistema está cerca de ser integrable o completamente caótico.

En el resto del presente capítulo, se plantea el sistema que se va a estudiar y las razones para elegirlo. También se describe el comportamiento clásico de dicho sistema, con el fin de establecer los parámetros necesarios para que el sistema exhiba transiciones de orden a caos.

1.2. Sistema por estudiar

Como nos interesa estudiar las propiedades de estabilidad y convergencia de las eigenfunciones de un sistema de osciladores anarmónicos distinguiendo el tipo de comportamiento que el sistema clásico tiene (ordenado o caótico), el sistema que estudiaremos tiene que ser hamiltoniano, por lo que el cuantizar es simplemente cambiar las variables dinámicas por los operadores asociados a éstas, de la manera usual.

Por otro lado, las limitaciones de tipo numérico hacen que el sistema por elegir no presente singularidades, excepto tal vez en infinito. Pidiendo que el hamiltoniano sea independiente del tiempo para tener bien definido un espectro de energía, que conserve la paridad, y sea invariante ante escalamientos de energía para que ésta no sea una cantidad relevante y los resultados clásicos no dependan de ella [1], se propone estudiar al sistema cuyo hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) + V(x_1, x_2) \quad (1.1)$$

donde el potencial está dado por:

$$V(x_1, x_2) = \alpha_1 x_1^4 + \alpha_2 x_2^4 + \alpha_{12} (x_1 - x_2)^4, \quad (1.2)$$

con α_1 , α_2 y α_{12} parámetros que, escogidos de manera adecuada, hacen que el sistema clásico sufra transiciones de orden a caos al variar el parámetro de interacción, α_{12} [1]. Para romper la simetría de intercambio de partículas se eligió α_1 y α_2 diferentes. Las unidades usadas corresponden a $\hbar = 1$ y masa igual a 1.

La elección de un potencial homogéneo de cuarto grado está relacionada con la invarianza respecto a escalamientos de la energía y con el hecho que este es el sistema más sencillo que clásicamente exhibe caos y que cuánticamente tiene solamente estados ligados. Las transformaciones de escala para el caso general son [2]:

$$\begin{aligned} E &\rightarrow \lambda E \\ x &\rightarrow \lambda^{1/2m} x \\ p &\rightarrow \lambda^{1/2} p \\ t &\rightarrow \lambda^{(1-m)/2m} t \end{aligned} \quad (1.3)$$

donde $2m$ es el grado del polinomio.

Este sistema puede ser visualizado como dos partículas de masa igual a la unidad, que oscilan en una dimensión de manera no lineal con una interacción $V(x_1, x_2)$ entre ellas.

Es importante mencionar que, por tener este sistema tan sólo dos grados de libertad, algunas de las manifestaciones caóticas que se encuentran en sistemas con más grados de libertad, (como por ejemplo la difusión de Arnold [3]), no ocurren, por lo que las conclusiones de este trabajo sólo pueden ser aplicadas a sistemas con las manifestaciones caóticas típicas de sistemas de dos grados de libertad, o para sistemas de más dimensiones en los que los efectos de la multidimensionalidad no son relevantes.

1.3. Elección de los parámetros

La elección de los parámetros α_1 y α_2 que aparecen en el potencial (2) se hizo por ensayo y error, hasta encontrar aquéllos que al variar simplemente el parámetro de interacción hicieran que el sistema pasara de completamente integrable ($\alpha_{12} = 0$, para cualquier elección de α_1 y α_2 ya que el sistema en este caso es trivialmente separable) a caótico. Es decir, que la fracción del espacio fase accesible ocupada por las trayectorias caóticas, varíe entre 0 y 1. Esta transición se comprobó en forma independiente usando en primer término algunas secciones de Poincaré y, a continuación, considerando al exponente de Lyapunov para distintas trayectorias. Por otro lado, se pidió que los parámetros del potencial definieran clásicamente órbitas acotadas para todas las energías, o lo que es lo mismo, que $V \rightarrow +\infty$ al alejarse del origen en cualquier dirección.

Del número infinito de secciones de Poincaré que podían haberse elegido, se consideró en particular a aquélla definida por el plano x_1-p_1 para $x_2 = 0, p_2 > 0$. Algunas secciones de Poincaré de este tipo se muestran en las figuras 1 para $E = 20$, $\alpha_1 = 34.15$, $\alpha_2 = 76.2$ y $0 \geq \alpha_{12} \geq -5.0$. Los parámetros así elegidos garantizan un mínimo absoluto del potencial en el origen.

En las figuras 1 se observa como algunas superficies invariantes del sistema en un principio integrable ($\alpha_{12} = 0$) (Fig. 1a), al ser perturbado ligeramente ($\alpha_{12} = -0.4$) rompen con su topología formando cadenas de islas (Fig. 1b), dentro de las cuales la topología también se rompe formándose nuevas islas aún más pequeñas que siguen mostrando el mismo tipo de comportamiento (Figs. 1c, ampliación de la Fig. 1b). Pero aún así, se conservan ciertas superficies invariantes (también llamadas toros de KAM) como consecuencia del teorema de KAM [3], las cuales aíslan a las muy pequeñas regiones que muestran comportamiento caótico. A medida que la perturbación aumenta ($\alpha_{12} = -1.0$, Fig. 1d y su ampliación en la Fig. 1e), las superficies de KAM empiezan a desaparecer, incrementándose en forma muy notable las regiones con comportamiento caótico (Fig. 1f), hasta que se logra cubrir todo el espacio fase accesible (Fig. 1g).

Antes de entrar en detalles de tipo numérico con respecto al exponente de Lyapunov, hay que aclarar que la definición que se usó para el exponente de Lyapunov no es de ninguna manera la usual [3], que viene dada por:

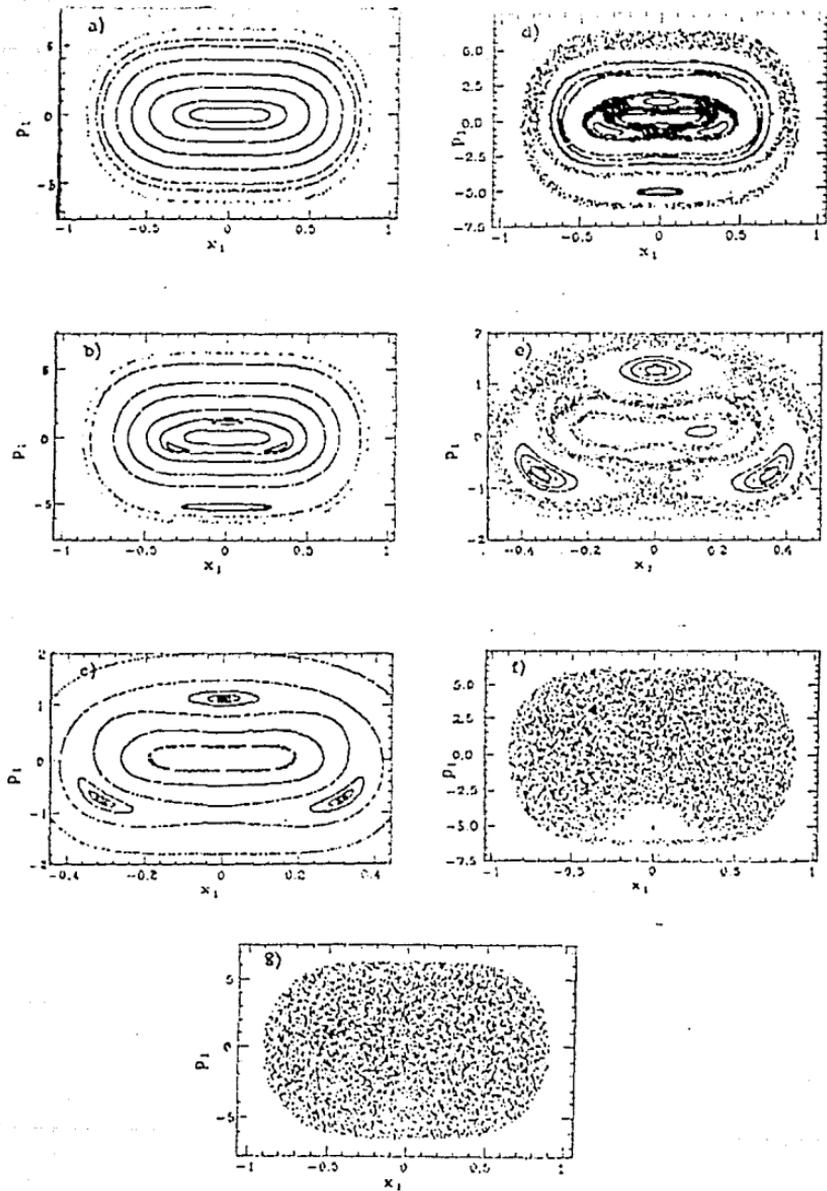


Fig. 1.1 : Superficies de Poincaré del sistema (ecs. (1) y (2)) para $E = 20$: a) $\alpha_{12} = 0$,
 b) $\alpha_{12} = -0.4$, c) $\alpha_{12} = -0.4$, d) $\alpha_{12} = -1.0$, e) $\alpha_{12} = -1.0$, f) $\alpha_{12} = -3.5$ y
 g) $\alpha_{12} = -5.0$. Las figs. c) y e) son respectivamente las ampliaciones de b) y d).

$$\Lambda = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ d(0) \rightarrow 0}} t^{-1} \log d(t)/d(0) \quad (1.4)$$

La definición usada es la propuesta por Seligman *et al* [4], la cual tiene ciertas ventajas sobre la usual (ec. (4)) ya que es independiente de la energía para sistemas invariantes ante transformaciones de escala, es una cantidad adimensional y usa una definición de métrica euclídeana para el espacio fase que no mezcla las distintas unidades. La expresión para el exponente de Lyapunov usado está dado por:

$$\tilde{\Lambda} = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ d(0) \rightarrow 0}} \frac{\tau_c}{t} \log d(t)/d(0) \quad (1.5)$$

donde la distancia se define introduciendo unos promedios sobre la longitud x_{av} y sobre el momento p_{av} [4]:

$$d(t) = \left[\left(\frac{\Delta x(t)}{x_{av}} \right)^2 + \left(\frac{\Delta p(t)}{p_{av}} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.6)$$

con τ_c un tiempo característico que está definido por:

$$\tau_c = M \frac{x_{av}}{p_{av}} \quad (1.7)$$

y donde M una constante con unidades de masa. Este tiempo característico define una escala típica de tiempo en el sistema (ref. [4]) que, para potenciales homogéneos, se escala de la misma manera que el tiempo t en las ecs. (3).

Como el sistema es conservativo y de dos grados de libertad, las trayectorias en el espacio fase de cuatro dimensiones ocupan una superficie de tres dimensiones definida por la energía, por lo que sólo se tienen tres exponentes de Lyapunov, uno para la dirección tangente a la trayectoria (en el espacio fase) y otros dos perpendiculares a esta dirección [3]. El exponente que está relacionado con el movimiento tangencial trivialmente es 0 [5] ya que las dos condiciones iniciales necesarias para evaluarlo están en la misma trayectoria; los otros dos exponentes, por conservarse el flujo en el espacio fase (teorema de Liouville) [3, 6], son uno el negativo del otro. En la Tab. 1.1 se muestran algunos exponentes de Lyapunov positivos medidos al variar el parámetro de interacción para las distintas condiciones iniciales usadas al construir las superficies de sección ($x_1(0) = x_2(0) = 0$, en todos los casos).

Tanto las secciones de Poincaré como los exponentes de Lyapunov fueron calculados usando el programa TRAJPOL, diseñado por M. R. Zirnbauer.

Tab. 1.1: Exponentes de Lyapunov y condiciones iniciales para algunas condiciones iniciales ($x_1(0) = x_2(0) = 0$) al variar el parámetro de interacción α_{12} .

Cond. inic.		α_{12}					
p_1	p_2	0	-0.4	-1.0	-2.5	-3.5	-5.0
6.32	0.240	0.8971×10^{-2}	0.1625	0.3734	1.1914	1.6558	2.0731
5.50	3.122	0.3846×10^{-2}	0.0141	0.4936	1.1408	1.6290	1.9138
4.00	4.899	2.1784×10^{-2}	0.0218	0.2470	1.1939	1.5913	1.9831
3.00	5.568	2.9488×10^{-2}	0.1216	0.2754	1.1789	1.6462	1.9374
2.00	6.000	1.9265×10^{-2}	0.0423	0.3085	1.2047	1.6524	1.9768
1.00	6.245	7.0480×10^{-2}	0.1960	0.0500	1.1737	1.6109	2.0120
0.50	6.305	0.3842×10^{-2}	0.1167	0.3038	1.1254	1.6069	2.0317
-1.0	6.245	7.0480×10^{-2}	0.2341	0.2833	1.1298	1.6391	1.9959
-3.0	5.568	3.2047×10^{-2}	0.0576	0.2214	1.1556	1.5835	1.9897
-5.0	3.873	0.6431×10^{-2}	0.0064	0.0	0.0	1.6673	1.9580

REFERENCIAS

- [1] T.H. Seligman, J.J.M. Verbaarschot, M.R. Zirnbauer, *J. Phys. A: Math. Gen.* **18** (1985)2751.
- [2] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Mechanics*, 3a ed., Pergamon Press, Oxford, 1976.
- [3] A.J. Lichtenberg y M.A. Lieberman, *Regular and Stochastic Motion*. Springer-Verlag, Nueva York, 1983.
- [4] T.H. Seligman, J.J.M. Verbaarschot, M.R. Zirnbauer, *Phys. Lett.* **110A** (1985)231.
- [5] H. Haken, *Phys. Lett. A* **94** (1983)71.
- [6] M. Tabor, *Chaos and integrability in nonlinear mechanics: an introduction*, John Wiley & Sons, Nueva York, 1989.

EL HAMILTONIANO CUÁNTICO

2.1. Criterios de estabilidad y convergencia

Como se dijo en el capítulo anterior, el interés de este trabajo es aproximar con funciones de oscilador armónico las eigenfunciones del sistema de osciladores anarmónicos cuyo hamiltoniano es

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \alpha_1 x_1^4 + \alpha_2 x_2^4 + \alpha_{12}(x_1 - x_2)^4, \quad (2.1)$$

es decir, estudiar la convergencia de las expansiones de osciladores anarmónicos en términos de osciladores armónicos. Para las aplicaciones es imperativo tener una buena convergencia de los eigenvalores del hamiltoniano, ya que si el eigenvalor no está bien aproximado la eigenfunción tampoco lo estará. Así, en esta sección describiremos los criterios de convergencia para los valores y las funciones propias de \mathcal{H} que se seguirán en el resto del trabajo.

Debido a que no se conoce el valor exacto de los eigenvalores, uno de los criterios de convergencia debe ser la propia estabilidad de los cálculos. Esta estabilidad como criterio de convergencia la entenderemos de dos maneras distintas. Estos criterios surgen de manera natural del álgebra lineal [1], donde encontramos que los valores propios de los operadores lineales son independientes de la descripción mientras que las funciones propias exhiben una sensible dependencia de la base usada. El primer criterio de estabilidad consiste en estudiar el comportamiento de los eigenvalores respecto a cambios de la frecuencia ω de los osciladores armónicos. El segundo criterio tiene que ver con el comportamiento del eigenvalor respecto al número de cuantas N con que se trunca la matriz hamiltoniana (infinita), cuando la frecuencia de los osciladores está fija.

Para que estos criterios de convergencia tengan sentido, tenemos que hablar de la

precisión que se quiere obtener. La fijación de la precisión tiene que relacionarse con el tipo de necesidades físicas del estudio. En nuestro caso nos interesa la aplicación en el caos cuántico, en particular en la estadística de niveles, por lo que debemos relacionar dicha precisión con algún parámetro estadístico. Este parámetro será la separación media de niveles (s). Una vez especificada la precisión, los criterios anteriores implican que un eigenvalor converge si: al variar la frecuencia las oscilaciones de la energía del valor propio son menores que la precisión (a la zona de convergencia por facilidad la llamaremos *zona plana* o *plateau*) para el primer caso; y si las correcciones de la energía al variar el número de cuantas de N a $N + 2$ es menor que la que se observaba entre $N - 2$ y N , y y ambas menores que la precisión*.

Por otro lado, tenemos un tercer criterio de convergencia independiente de los anteriores, el cual usaremos como prueba de consistencia de los resultados. Este criterio está relacionado con el número de modos $\mathcal{N}_{\text{sem}}(E)$, que es la función que indica el número de eigenestados con energía menor o igual a E . Este criterio es importante porque relaciona directamente los resultados numéricos con la fórmula semiclásica de Weyl, dada por [2]:

$$\mathcal{N}_{\text{sem}}(E) = \frac{1}{h^m} \int d^m p d^m q \Theta(E - H(p, q)), \quad (2.2)$$

donde $H(p, q)$ es el hamiltoniano del sistema en cuestión. Por lo tanto, en este método no requerimos de la estabilidad, pero sólo es aplicable a los eigenvalores.

Es importante señalar que a partir del primer criterio de convergencia (variación de la energía respecto a la frecuencia de los osciladores armónicos) uno puede definir una *base óptima*, la cual se usa para los estudios correspondientes a las eigenfunciones. La base óptima se suele definir a partir de la frecuencia que corresponde a la mínima energía del estado fundamental. Debido a la muy buena convergencia que se tiene para este estado (el plateau es muy amplio y las variaciones en la energía muy pequeñas), se le puede considerar independiente de ω dentro del plateau. Por esto, la definición de la base óptima que manejaremos estará dada en términos de la frecuencia ω_{op} que minimiza al último estado confiable según el primer criterio de

*La razón de comparar N con $N + 2$ en lugar de $N + 1$ está relacionada con el hecho de que las eigenfunciones del hamiltoniano (1) tienen paridad definida, por lo que las correcciones deben aparecer al cambiar por dos el número de cuantas.

convergencia, siempre que el plateau de este estado esté dentro de la zona plana de los estados de menor excitación.

Las eigenfunciones del hamiltoniano (1) las determinamos con la diagonalización de la matriz hamiltoniana (truncada), que se ha expandido en la base de osciladores armónicos de frecuencia ω . Así, los eigenestados del sistema los estamos aproximando por una serie *finita* de funciones de oscilador armónico. Los coeficientes de esta serie son precisamente las componentes de los vectores propios con respecto a la base truncada, por lo que estamos considerando sólo un subespacio del espacio de Hilbert.

De esta manera, dadas ω_{op} y ω , la frecuencia de la base óptima y otra cercana, tenemos dos espacios finitos $\mathcal{H}_{\omega_{op}}^N$ y \mathcal{H}_{ω}^N correspondientes a cada base truncada (el número de cuantas N define la forma de truncar la matriz). Diagonalizando en cada uno de ellos la matriz hamiltoniana asociada obtenemos los eigenkets $|\Psi_n(\omega_{op})\rangle$ y $|\Psi_n(\omega)\rangle$ para el n -ésimo estado, donde la dependencia de N la hemos suprimido por comodidad. Estos kets no pueden ser comparados directamente ya que corresponden a espacios distintos. Para compararlos es necesario tener sus proyecciones en el mismo espacio. Es aquí donde la base óptima y su espacio finito $\mathcal{H}_{\omega_{op}}^N$ adquieren importancia.

Para una frecuencia ω dentro del plateau del n -ésimo eigenvalor, construimos la proyección $|\Psi'_n(\omega)\rangle$ de $|\Psi_n(\omega)\rangle$ sobre el espacio $\mathcal{H}_{\omega_{op}}^N$ correspondiente a la base óptima, y estudiamos la convergencia en términos de los productos internos:

$$I_1 = \langle \Psi'_n(\omega) | \Psi'_n(\omega) \rangle \quad (2.3a)$$

$$I_2 = \frac{|\langle \Psi'_n(\omega) | \Psi_n(\omega_{op}) \rangle|}{\sqrt{\langle \Psi'_n(\omega) | \Psi'_n(\omega) \rangle}} \quad (2.3b)$$

La primer cantidad es la norma del vector transformado de la base ω a la base óptima, la cual contiene información sobre la magnitud de la componente de $|\Psi_n(\omega)\rangle$ dentro de $\mathcal{H}_{\omega_{op}}^N$. Por otro lado, I_2 puede interpretarse geoméricamente como el coseno del ángulo que forman los eigenkets $|\Psi'_n(\omega)\rangle$ y $|\Psi_n(\omega)\rangle$. La convergencia de las eigenfunciones la mediremos por la forma en que estas cantidades se acercan a 1 al variar la frecuencia y el número de cuantas como ya se explicó.

Es importante señalar que el estudio que se describe se realizó numéricamente, por lo que ciertas sutilezas que facilitan la programación fueron introducidas. En primer lugar, se consideró al *número total de cuantas* del sistema N para definir el tamaño de la matriz hamiltoniana, lo que no es más que definir una forma sistemática de truncar la matriz infinita. Una vez elegida N , la dimensión de la matriz truncada está dada por:

$$D = (N + 1)(N + 2)/2.$$

Pero, si usamos la simetría del hamiltoniano respecto al intercambio $x_1 \rightarrow -x_1$ y $x_2 \rightarrow -x_2$, lo que implica que las eigenfunciones tienen paridad definida, podemos reducir la dimensión (lo que además es una reducción en el tiempo de cómputo) eligiendo de antemano la paridad de las eigenfunciones. Así, la dimensión de la matriz cuyas eigenfunciones son pares está dada por

$$D = [\text{int}(N/2) + 1]^2$$

mientras que para la contribución impar es:

$$D = [\text{int}((N + 1)/2)][\text{int}((N + 1)/2) + 1].$$

La función $\text{int}(x)$ es la función valor entero, definida como el mayor entero menor o igual que x . Las ecuaciones anteriores se pueden demostrar por inducción.

2.2. Elementos de matriz del hamiltoniano

Debido a nuestra intención inicial de trabajar en la base de funciones de oscilador armónico, escribiremos al hamiltoniano del sistema (1) usando a los operadores de creación y aniquilación del oscilador armónico [3]

$$a_j^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2}}(x_j - i\omega^{-1}p_j) \quad (2.4a)$$

$$a_j = \sqrt{\frac{\omega}{2}}(x_j + i\omega^{-1}p_j) \quad (2.4b)$$

donde $j = 1, 2$. Las unidades usadas corresponden a $\hbar = 1$ y las masas de las partículas son uno en estas unidades. Los operadores de creación y aniquilación así definidos sabemos que satisfacen entre otras propiedades [3]:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{i,j} \quad (2.5)$$

$$\mathcal{H}_{\text{arm}} = \omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) \quad (2.6)$$

con \mathcal{H}_{arm} el hamiltoniano del oscilador armónico unidimensional. De su definición (ecs. (4)), obtenemos que los momentos y las coordenadas están dadas por:

$$p_j = i\sqrt{\frac{\omega}{2}}(a_j^\dagger - a_j) \quad (2.7a)$$

$$x_j = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(a_j^\dagger + a_j). \quad (2.7b)$$

Nótese que las ecuaciones anteriores expresan explícitamente la elección particular de las funciones de oscilador armónico que van a ser usadas a través de la dependencia del parámetro ω .

Por otro lado, si $|k, \omega\rangle$ representa el estado de k cuantas de un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω , es decir, es el ket que representa a la función de oscilador armónico de orden k y frecuencia ω dado por [3]

$$\langle x|k, \omega\rangle = \frac{\omega^{1/4}}{(2^k \pi^{1/2} k!)^{1/2}} \exp\left[-\frac{\omega x^2}{2}\right] H_k(\sqrt{\omega}x), \quad (2.8)$$

sabemos que se cumple [3]:

$$a^\dagger|k, \omega\rangle = \sqrt{k+1}|k+1, \omega\rangle, \quad (2.9a)$$

$$a|k, \omega\rangle = \sqrt{k}|k-1, \omega\rangle. \quad (2.9b)$$

La generalización de estas propiedades al caso bidimensional está dada por

$$a_1^\dagger|k, l, \omega\rangle = \sqrt{k+1}|k+1, l, \omega\rangle \quad (2.10a)$$

$$a_2^\dagger|k, l, \omega\rangle = \sqrt{l+1}|k, l+1, \omega\rangle \quad (2.10b)$$

$$a_1|k, l, \omega\rangle = \sqrt{k}|k-1, l, \omega\rangle \quad (2.10c)$$

$$a_2|k, l, \omega\rangle = \sqrt{l}|k, l-1, \omega\rangle, \quad (2.10d)$$

donde $|k, l, \omega\rangle$ identifica al estado del sistema en que el primer oscilador tiene k cuantos y el segundo l , ambos de frecuencia ω .

Para determinar los elementos de matriz del hamiltoniano (1) vamos a usar la independencia de los operadores respecto al espacio tensorial sobre el que se aplican. Es decir, usaremos que las contribuciones a los elementos de matriz de los operadores que aparecen en el hamiltoniano, se pueden escribir de una de las siguientes formas

$$\langle k', l', \omega|A_1 + B_2|k, l, \omega\rangle = \langle k', \omega|A_1|k, \omega\rangle\delta_{l', l} + \langle l', \omega|B_2|l, \omega\rangle\delta_{k', k}$$

$$\langle k', l', \omega|A_1 B_2|k, l, \omega\rangle = \langle k', \omega|A_1|k, \omega\rangle \langle l', \omega|B_2|l, \omega\rangle$$

donde A_1 y B_2 son operadores que actúan únicamente sobre la primer y segunda partícula, respectivamente.

Por esto, basta calcular las contribuciones de los elementos de matriz de los operadores p^2 , x , x^2 , x^3 , x^4 , y aplicarlos sobre la partícula que le corresponda al desarrollar el hamiltoniano (1) en estas potencias elementales.

Así, para calcular p^2 , por ejemplo, elevamos al cuadrado la expresión (7a) y usamos que a y a^\dagger no conmutan, obteniendo que:

$$p^2 = \frac{1}{2} (a^{\dagger 2} - a^\dagger a - a a^\dagger + a^2).$$

Usando (10a) y (10c) obtenemos que los elementos de matriz del hamiltoniano debidos al operador p^2 son:

$$\langle k', \omega | p^2 | k, \omega \rangle = \frac{\omega}{2} \left\{ -\sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k', k+2} + (2k+1) \delta_{k', k} - \sqrt{k(k-1)} \delta_{k', k-2} \right\}. \quad (2.11)$$

De igual manera obtenemos los elementos de matriz debidos a los demás operadores están dados por:

$$\langle k', \omega | x | k, \omega \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \left\{ \sqrt{k+1} \delta_{k', k+1} + \sqrt{k} \delta_{k', k-1} \right\} \quad (2.12)$$

$$\langle k', \omega | x^2 | k, \omega \rangle = \frac{1}{2\omega} \left\{ \sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k', k+2} + (2k+1) \delta_{k', k} + \sqrt{k(k-1)} \delta_{k', k-2} \right\} \quad (2.13)$$

$$\langle k', \omega | x^3 | k, \omega \rangle = \frac{1}{(2\omega)^{3/2}} \left\{ \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)} \delta_{k', k+3} + 3(k+1) \sqrt{k+1} \delta_{k', k+1} + 3k \sqrt{k} \delta_{k', k-1} + \sqrt{k(k-1)(k-2)} \delta_{k', k-3} \right\} \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned}
\langle k', \omega | x^4 | k, \omega \rangle = \frac{1}{4\omega^2} \left\{ \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)(k+4)} \delta_{k', k+4} \right. \\
+ 2(2k+3) \sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k', k+2} \\
+ 3 [k^2 + (k+1)^2] \delta_{k', k} \\
+ 2(2k-1) \sqrt{k(k-1)} \delta_{k', k-2} \\
\left. + \sqrt{k(k-1)(k-2)(k-3)} \delta_{k', k-4} \right\} \quad (2.15)
\end{aligned}$$

Para definir la aplicación de estos operadores sobre cada partícula sólo hay que distinguir los índices de cada una de ellas, y escribir la acción de estos operadores de manera adecuada al desarrollar el hamiltoniano.

2.3. Cambio de base entre diferentes funciones de oscilador armónico

Usando que el hamiltoniano \mathcal{H} de nuestro problema no depende explícitamente del tiempo, la ecuación de Schrödinger que vamos a resolver se reduce simplemente a

$$\mathcal{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$$

y, debido a que truncamos la matriz del hamiltoniano, esto hace que la ecuación de eigenvalores por resolver tenga una dependencia tanto del número de cuantas N como de la frecuencia ω de la base de osciladores:

$$\mathcal{H}(\omega, N)|\Psi_E(\omega, N)\rangle = E(\omega, N)|\Psi_E(\omega, N)\rangle. \quad (2.16)$$

Ahora bien, como nos interesa expandir las eigenfunciones de esta ecuación en términos de funciones de oscilador armónico, esto es, como una combinación lineal de las funciones de la base del oscilador armónico (truncado), escribimos

$$|\Psi_E(\omega)\rangle = \sum_{k, k'} c_{k k', E} |k, k', \omega\rangle, \quad (2.17)$$

donde E identifica el estado de los osciladores cuánticos, y en donde hemos omitido en la notación el número de cuantas N con que se ha hecho el truncamiento. Entonces,

si queremos escribir un eigenvector de la base ω_2 expandido en términos de la base ω_1 , debemos escribir

$$|\Psi_{E_2}(\omega_2)\rangle = \sum_{E_1} A_{E_1, E_2} |\Psi_{E_1}(\omega_1)\rangle \quad (2.18)$$

y, abusando de la notación (ya que los eigenvectores están en distintas bases) obtenemos que los coeficientes del cambio de base de las eigenfunciones están dados por:

$$A_{E_1, E_2} = \langle \Psi_{E_1}(\omega_1) | \Psi_{E_2}(\omega_2) \rangle. \quad (2.19)$$

Si usamos las respectivas funciones de oscilador armónico, tenemos

$$A_{E_1, E_2} = \sum_{\substack{k, k' \\ l, l'}} c_{kk', E_1}^* d_{ll', E_2} \langle k, k', \omega_1 | l, l', \omega_2 \rangle, \quad (2.20)$$

donde $\langle k, k', \omega_1 | l, l', \omega_2 \rangle$ es el traslape entre las funciones de oscilador armónico de la frecuencia ω_2 a la ω_1 y, c_{kk', E_1} y d_{ll', E_2} son los coeficientes de la expansión de las eigenfunciones $|\Psi_{E_1}(\omega_1)\rangle$ y $|\Psi_{E_2}(\omega_2)\rangle$ en términos de los osciladores armónicos de frecuencia ω_1 y ω_2 , respectivamente. Es importante notar que si las dos frecuencias son iguales, los coeficientes del cambio de base entre las funciones de oscilador armónico se comportarán simplemente como $\delta_{k,l} \delta_{k',l'}$, con lo que:

$$A_{E_1, E_2} = \sum_{k, k'} c_{kk', E_1}^* d_{kk', E_2}.$$

Por otra parte, como el traslape $\langle k, k', \omega_1 | l, l', \omega_2 \rangle$ se puede factorizar como

$$\langle k, k', \omega_1 | l, l', \omega_2 \rangle = \langle k, \omega_1 | l, \omega_2 \rangle \langle k', \omega_1 | l', \omega_2 \rangle, \quad (2.21)$$

es claro que la parte relevante de estos coeficientes son las integrales $\langle k, \omega_1 | l, \omega_2 \rangle$ y $\langle k', \omega_1 | l', \omega_2 \rangle$, las cuales están dadas por

$$\langle k, \omega_1 | l, \omega_2 \rangle = C_k(\omega_1) C_l(\omega_2) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{\omega_1 + \omega_2}{2} x^2\right] H_k(\sqrt{\omega_1} x) H_l(\sqrt{\omega_2} x) \quad (2.22)$$

con $C_k(\omega_1)$ y $C_l(\omega_2)$ las constantes de normalización.

Para evaluar las integrales de este tipo, hacemos uso de la función generadora de los polinomios de Hermite [4]:

$$g(x, t) = \exp[-t^2 + 2xt] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)t^n}{n!}. \quad (2.23)$$

Así, escribiendo

$$h_{kl} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-\frac{(\omega_1 + \omega_2)}{2}x^2\right] H_k(\sqrt{\omega_1}x) H_l(\sqrt{\omega_2}x)$$

observamos, por la paridad de $H_k(\sqrt{\omega_1}x)$ y $H_l(\sqrt{\omega_2}x)$, que h_{kl} se anula si k y l no tienen la misma paridad. Podemos entonces escribir a la ec. (22) como

$$\sum_{k,l} \frac{h_{kl}t^k s^l}{k!l!} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[-t^2 - s^2 + 2x(\sqrt{\omega_1}t + \sqrt{\omega_2}s) - \frac{(\omega_1 + \omega_2)}{2}x^2\right] \quad (2.24)$$

y, haciendo la integración del lado derecho, (24) se transforma en:

$$\sum_{k,l} \frac{h_{kl}t^k s^l}{k!l!} = \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_1 + \omega_2}} \exp\left[-t^2 - s^2 + \frac{2(\sqrt{\omega_1}t + \sqrt{\omega_2}s)^2}{\omega_1 + \omega_2}\right]. \quad (2.25)$$

Simplificando el argumento de la exponencial, podemos escribir

$$\sum_{k,l} \frac{h_{kl}t^k s^l}{k!l!} = A \exp[Bt^2 + Cs^2 + Dts] \quad (2.26)$$

donde las constantes que aparecen en esta expresión están dadas por:

$$\begin{aligned} A &= \sqrt{\frac{2\pi}{\omega_1 + \omega_2}} \\ B &= \frac{\omega_1 - \omega_2}{\omega_2 + \omega_1} = -C \\ D &= 4 \frac{\sqrt{\omega_1 \omega_2}}{\omega_1 + \omega_2}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Reescribiendo las exponenciales como series de Taylor, obtenemos:

$$\sum_{k,l} \frac{h_{kl}t^k s^l}{k!l!} = \sum_{\alpha, \beta, \gamma=0}^{\infty} A \frac{B^\alpha C^\beta D^\gamma}{\alpha! \beta! \gamma!} t^{2\alpha + \gamma} s^{2\beta + \gamma}. \quad (2.28)$$

Tomando $k + l$ par (ya que de otra forma se anularía la integral), definimos:

$$\begin{aligned} 2\alpha + \gamma &= k \\ 2\beta + \gamma &= l. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Entonces, usando el valor de los coeficientes de normalización y simplificando la expresión resultante obtenemos finalmente

$$(k, \omega_1 | l, \omega_2) = \left[\frac{k! l! (\omega_1 \omega_2)^{1/2}}{2^{k+l-1} (\omega_1 + \omega_2)} \right]^{1/2} \sum_{\gamma=k_{\text{par}}, 2}^{\min(k, l)} \frac{B^{(k-\gamma)/2} C^{(l-\gamma)/2} D^\gamma}{\left(\frac{k-\gamma}{2}\right)! \left(\frac{l-\gamma}{2}\right)! (\gamma)!} \quad (2.30)$$

donde la variable k_{par} es cero o uno, dependiendo de si k es par o impar respectivamente, y la notación usada en la parte inferior de la suma significa que γ varía de dos en dos.

REFERENCIAS

- [1] R. Courant, D. Hilbert, *Methods of mathematical physics* Vol. 1, Interscience Publishers, INC., Nueva York, 1953.
- [2] M.V. Berry, *Quantum Chaology* (Bakerian Lecture of the Royal Society), *Proc. R. Soc. Lond. A* **413** (1987)183.
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Labé, *Quantum Mechanics*, Vol. 1, Hermann, Paris, 1977.
- [4] G. Arfken, *Mathematical methods for physicists*, 2a ed, Academic Press, New York, 1970.

RESULTADOS NUMÉRICOS

3.1. Estabilidad y convergencia de la energía

Antes de presentar propiamente los resultados numéricos relacionados con la convergencia de los niveles energéticos conviene mencionar la precisión con que se trabajó. La precisión pedida para considerar a un estado bien definido se fijó en 2% del valor de la separación media de niveles (s). No es necesario especificar una anchura mínima del plateau ya que, como se ve más adelante, es claro cuando éste existe. Por otro lado, cuando esta zona plana desaparece se pierde toda convergencia del nivel. Además, el propio hecho de fijar una precisión induce una anchura mínima del plateau.

En cuanto al comportamiento de los eigenvalores al variar la frecuencia, una característica es que la frecuencia del mínimo de la energía típicamente crece al aumentar el número de cuantas [1] propiedad incluso general para todos los niveles de energía. Este aumento en la ω_{op} no es de extrañar, ya que al tomar un mayor número de cuantas estamos usando funciones de oscilador armónico de mayor orden que son más oscilantes. Para que estas funciones contribuyan a la convergencia, requieren que la frecuencia óptima aumente.

Pasemos ahora a analizar la convergencia respecto a cambios de la frecuencia en distintos estados y para diferentes números de cuantas. Para ocho cuantas, el último estado E_k confiable para el caso ordenado ocurre para $k = 8$, mientras que para el caso caótico es $k = 3$. Para $N = 16$, se tiene $k = 33$ y $k = 10$; en $N = 24$, $k = 74$ y $k = 36$ y, finalmente para $N = 32$ se tiene $k = 143$ y $k = 66$, respectivamente para los casos ordenados y caóticos. En todos estos casos el nivel de excitación al que se hace referencia corresponde al nivel de excitación de la matriz asociada con los eigenestados pares. El comportamiento típico de algunos estados (pares) para

los distintos números de cuantas se muestra en las gráficas de las Figs. 1-4. (Otras gráficas de este tipo se muestran en el apéndice 1).

De estas figuras (ver también otras en el apéndice 1) podemos notar una mejor convergencia de la energía (respecto a variaciones de la frecuencia) para el caso ordenado que el caótico, en los siguientes sentidos:

- (a) Cuando el número de cuantas está fijo, los niveles confiables para las energías en el caso ordenado son niveles más excitados que los niveles confiables en el caso caótico,
- (b) Cuando además se fija el estado, en el caso ordenado la zona plana suele ser más ancha y más plana que para el caso caótico.

Esto lo podemos entender si tomamos en cuenta las curvas equipotenciales tanto para el caso ordenado como el caótico (ver figs. 5a-b). En el caso ordenado, estas curvas son *suficientemente* simétricas respecto a x_1 y x_2 para que las funciones de oscilador armónico de frecuencia ω aproximen de manera adecuada las energías, incluso para niveles de excitación altos. Pero, para el caso caótico, las deformaciones que aparecen en las equipotenciales hacen que los osciladores armónicos no aproximen en forma tan adecuada a las energías, en particular a los niveles de mayor excitación, con lo que la estabilidad y la convergencia en este caso se vuelve más lenta.

La convergencia de los eigenvalores del hamiltoniano, a pesar de los inconvenientes anteriores, se puede considerar buena, ya que al aumentar el número de cuantas, las correcciones a las energías son mínimas, como puede verse para el estado base en la Tab. 1 y para el estado 27 (de la parte par del hamiltoniano) en la Tab. 2, y estas correcciones disminuyen al aumentar el número de cuantas.

La convergencia de la energía como función del número de cuantas suele ser muy característica para las funciones de oscilador armónico [1,2]. Un ejemplo de esto son las llamadas *series de Englefield* [2]; las correcciones al aumentar sucesivamente el número de cuantas al siguiente número permitido, alternan entre ser pequeñas y grandes, aunque estas deben tender naturalmente a cero. En nuestro caso por tenerse paridad definida, esto significa que al pasar de N a $N + 2$ y a $N + 4$, en un caso las correcciones serán importantes mientras que en el otro no. Pero éste no es precisamente el caso, como se puede observar para el estado base en las gráficas que aparecen en la Figs. 6, donde se grafican las energías del estado base en función

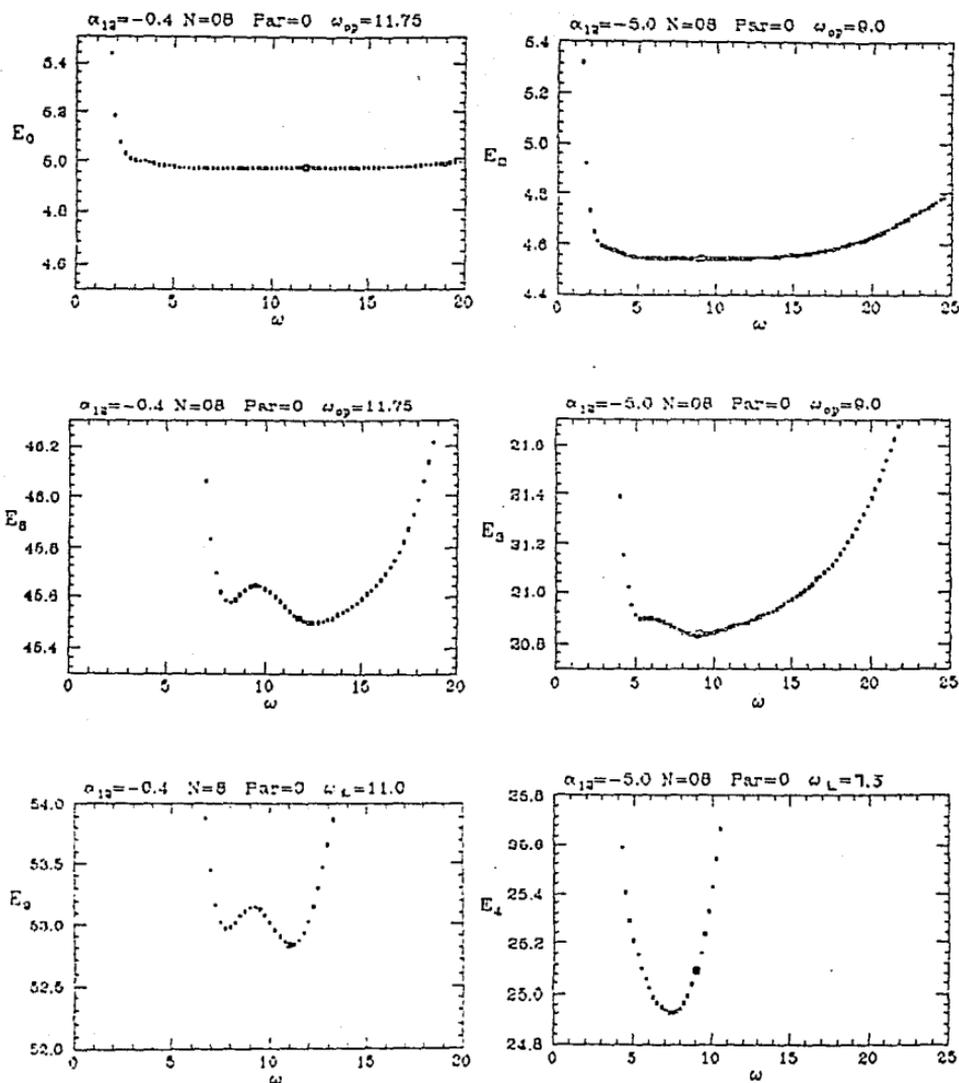


Fig. 3.1 : Estabilidad de algunos eigenvalores E_k respecto a la frecuencia tanto para el caso ordenado $\alpha_{12} = -0.4$ como para el caótico $\alpha_{12} = -5.0$ ($N = 8$). ω_{op} es la frecuencia óptima y ω_L es la frecuencia que minimiza al estado k .

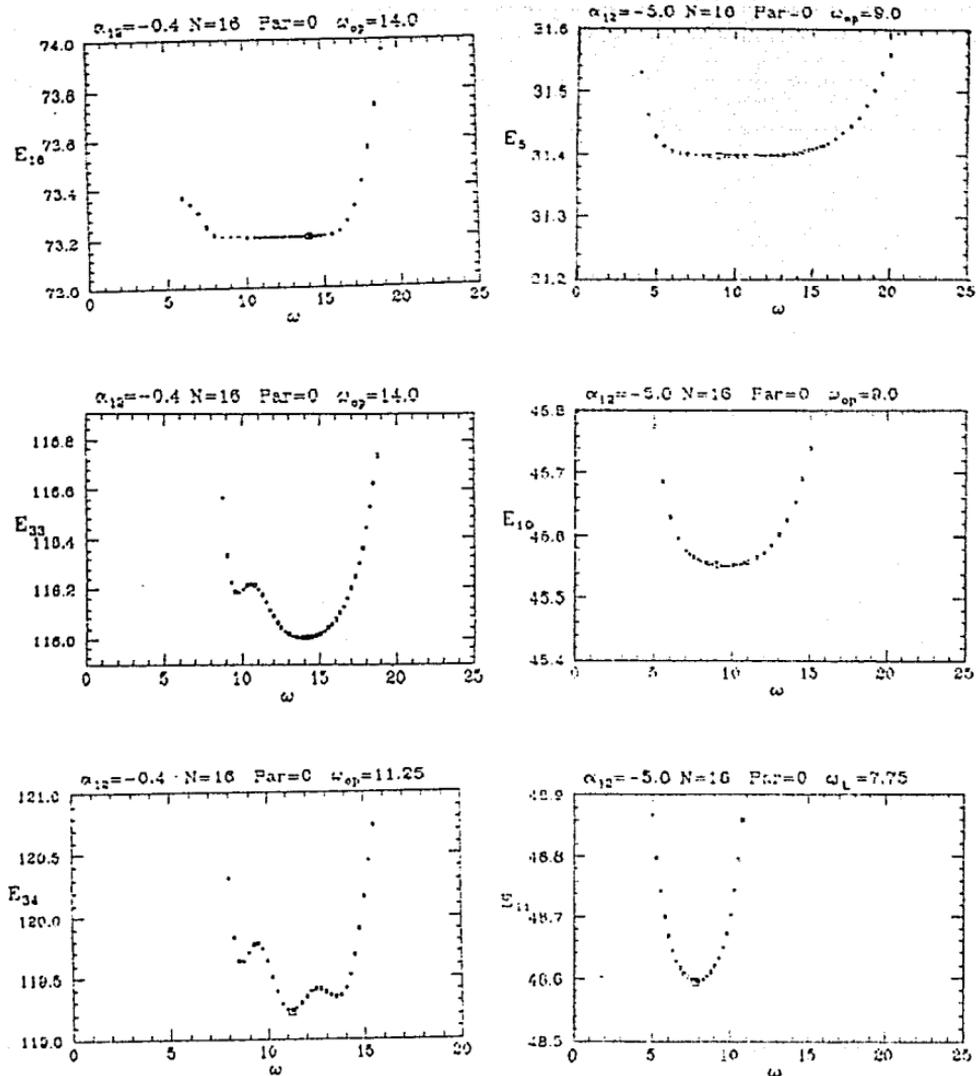


Fig. 3.2: Estabilidad de algunos eigenvalores respecto a la frecuencia tanto para el caso ordenado como para el caótico ($N = 16$).

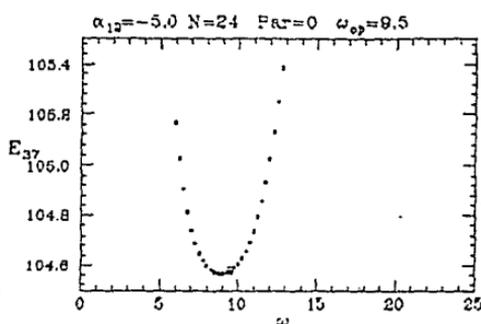
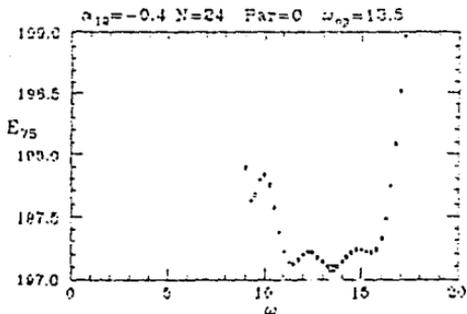
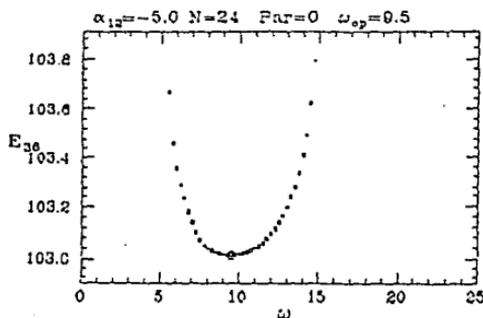
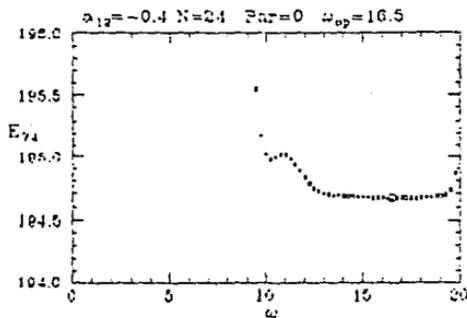
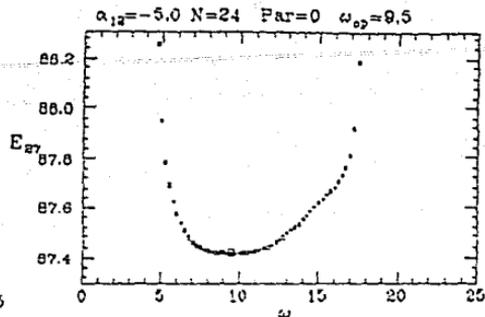
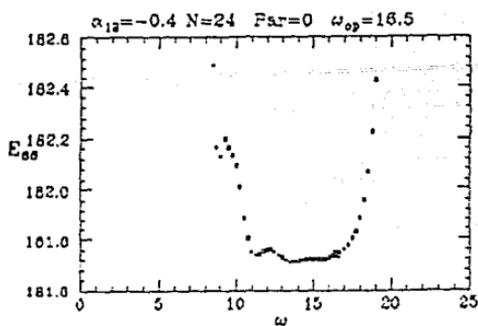


Fig. 3.3 : Estabilidad de algunos eigenvalores respecto a la frecuencia tanto para el caso ordenado como para el caótico ($N = 24$).

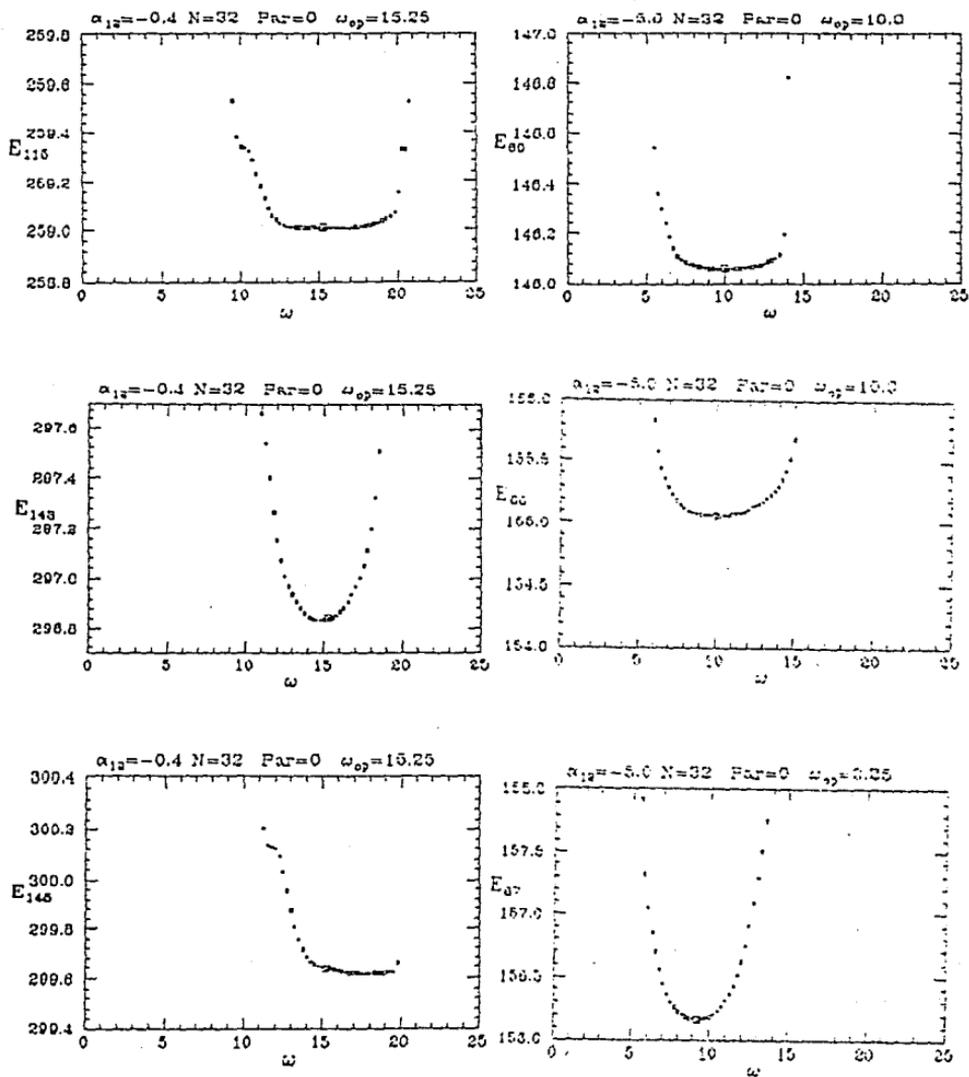


Fig. 3.4 : Estabilidad de algunos eigenvalores respecto a la frecuencia tanto para el caso ordenado como para el caótico ($N = 32$).

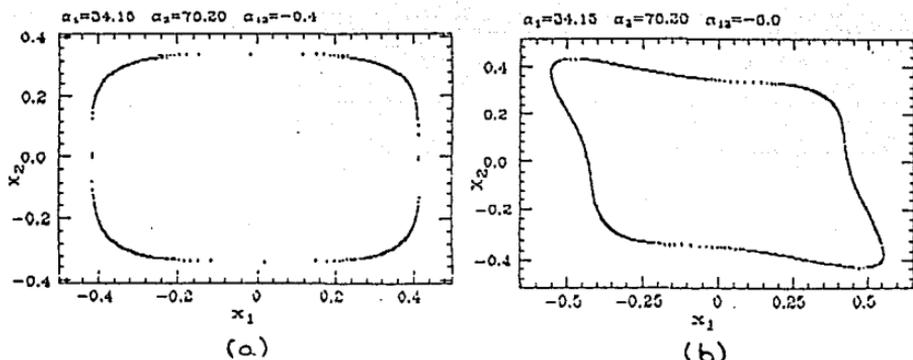


Fig. 3.5: Curvas equipotenciales del sistema: a) caso ordenado; b) caso caótico.

Tab. 3.1: Convergencia de la energía para el estado base en la base óptima para el sistema ordenado y el caótico, al variar el número de cuantas.

N	$\alpha_{12} = -0.4$	$\alpha_{12} = -5.0$
0	5.164540816	4.853846154
2	5.018641384	4.653985871
6	4.971373234	4.546667505
8	4.970940509	4.544936402
10	4.970899399	4.544426554
14	4.970895677	4.544351300
16	4.970895644	4.544347871
18	4.970895641	4.544347285
22	4.970895640	4.544347114
24	4.970895640	4.544347108
26	4.970895640	4.544347107
30	4.970895640	4.544347107
32	4.970895640	4.544347106

de la frecuencia para diferentes números de cuantas, tanto para el caso ordenado (fig. 6a) como para el caótico (fig. 6b).

Tab. 3.2: Convergencia de la energía para el estado 27 (57 del hamiltoniano completo) en la base óptima para el sistema ordenado y el caótico, al variar el número de cuantas.

N	$\alpha_{12} = -0.4$	$\alpha_{12} = -5.0$
14	99.634738530	88.416297498
16	99.442851635	88.009184266
18	99.411451087	87.677784808
22	99.405915587	87.452745252
24	99.405604385	87.418347450
26	99.405575809	87.405093119
30	99.405573035	87.398463006
32	99.405573015	87.397704069
32	99.405573015	87.397704069

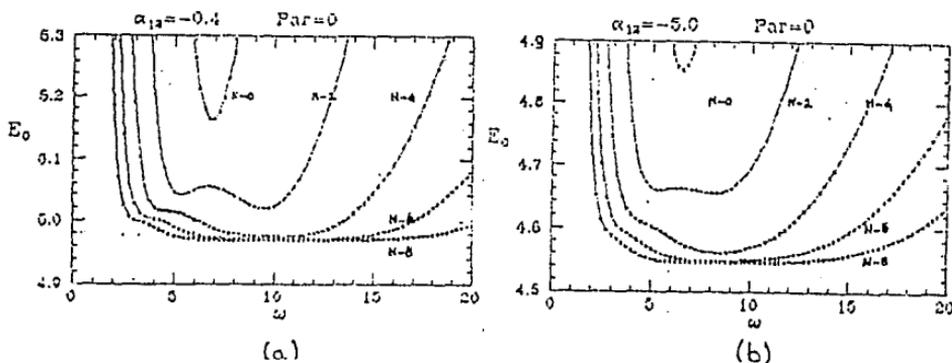
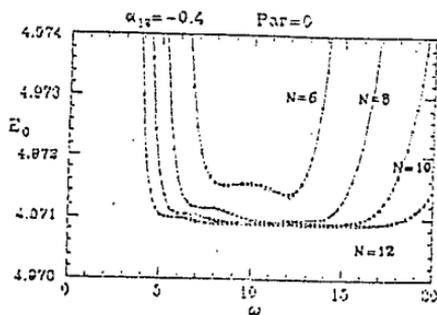


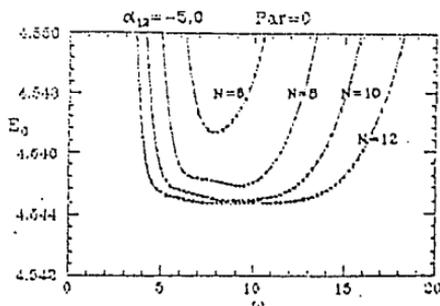
Fig. 3.6: Curvas de energía del estado base al variar ω para distintos números de cuantas: a) caso ordenado; b) caso caótico.

A pesar de que las correcciones a la energía no ocurren de cuatro en cuatro más que en casos muy específicos, en las Figs. 7 se puede observar que hay cierto escalamiento entre las curvas de energía al ir aumentando el número de cuantas. Con esto quiero decir que al hacer una ampliación de las curvas de energía en la zona plana y aumentar el número de cuantas, se obtienen gráficas muy parecidas al tipo de curvas que se tenían sin el cambio de escala, esto es, para un número

menor de cuantas (ver Figs. 7a y b). Más aún, este escalamiento aparentemente se da al aumentar el número de cuantas de N a $N + 4$. Esto tal vez puede ser una manifestación de las series de Englefield para potenciales del tipo (1.2), que no tienen la simetría del campo central.



(a)



(b)

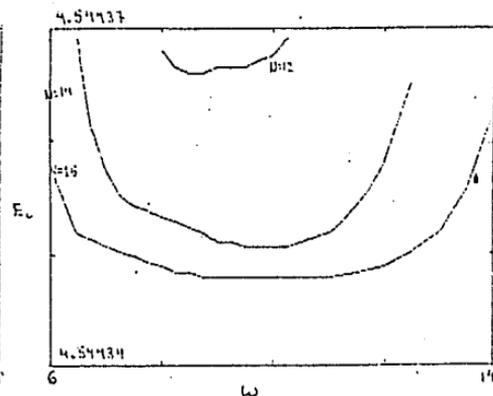
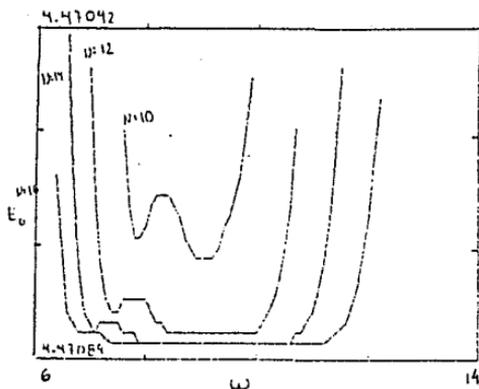


Fig. 3.7: Ejemplo del escalamiento de las curvas de energía para el estado base al variar el número de cuantas: a) caso ordenado; b) caso caótico.

Como se mencionó en el capítulo anterior, una prueba de consistencia de los resultados obtenidos se tiene de manera natural comparando el número de modos $\mathcal{N}(E)$ que se obtienen de la diagonalización con $\mathcal{N}_{sem}(E)$, obtenido a partir de la

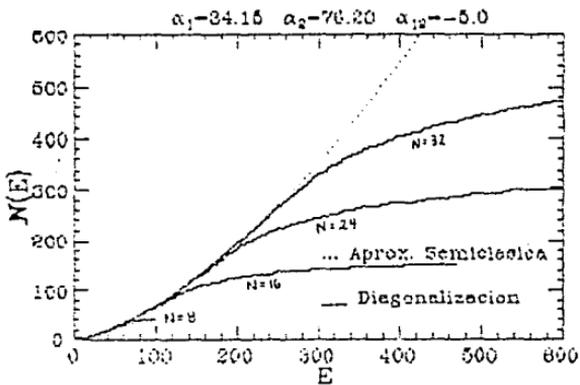
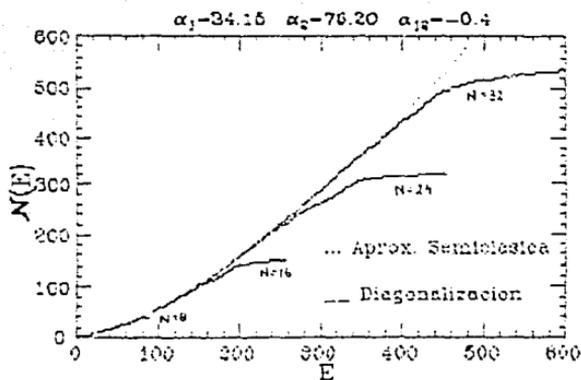


Fig. 3.8: Comparación del número de modos $N(E)$ obtenida por la diagonalización o una aproximación semiclassical para algunos números de cuantas: a) caso ordenado y b) caso caótico.

regla semiclásica que cada estado cuántico está asociado con un volumen h^{2m} (donde $2m$ es la dimensión del espacio fase, ec. (2.2)). En la fig. 8 se muestran las gráficas correspondientes al número de modos obtenido con diagonalización del hamiltoniano y con la regla semiclásica, al variar el número de cuantas. De estas gráficas se obtiene en el caso ordenado que para $N = 8$ el último estado confiable es el 33 del hamiltoniano completo, lo que corresponde al estado par 16; para el hamiltoniano caótico en este caso tenemos respectivamente el estado 22 que corresponde al estado par 10. De igual forma tenemos para $N = 16$ que los últimos estados pares confiables son el 52 y el 36; para $N = 24$ son el 100 y el 64; para $N = 36$ son el 196 y el 121; respectivamente para el caso integrable y caótico. Es de notar que estos valores están por encima de los obtenidos usando la convergencia respecto a la frecuencia, por lo que este método y los resultados los podemos considerar conservadores. Incluso, en base a estas gráficas podemos afirmar que nuestro requisito sobre la precisión en el plateau de las curvas de energía-frecuencia es demasiado fuerte, respecto al método semiclásico.

3.2. Estabilidad y convergencia para las eigenfunciones

Como dijimos en el capítulo 2, la convergencia de las eigenfunciones la entenderemos en términos del comportamiento que los productos internos

$$I_1 = \langle \Psi'_k(\omega) | \Psi'_k(\omega) \rangle \quad (3.1)$$

$$I_2 = \frac{|\langle \Psi'_k(\omega) | \Psi_k(\omega_{op}) \rangle|}{\sqrt{\langle \Psi'_k(\omega) | \Psi'_k(\omega) \rangle}} \quad (3.2)$$

muestran alrededor de la frecuencia óptima ω_{op} y al variar el número de cuantas N a $N + 2$ comparado con la corrección de $N - 2$ a N .

Como puede verse de las figuras 9-15 (ver también apéndice 1), el producto I_1 , que guarda información sobre el espacio ortogonal, es muy estable mientras la energía lo sea, sin importar el nivel de excitación del estado que se estudia, ni si el correspondiente sistema clásico es ordenado o caótico.

Por otro lado, el producto interno I_2 también es sensible a la estabilidad de la energía correspondiente al estado de interés (ver Figs. 9-15 y el apéndice 1). Esto lo

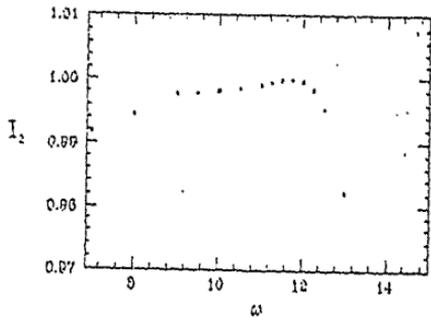
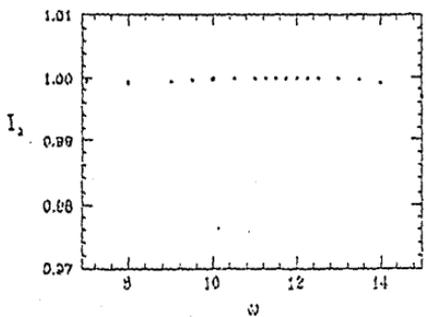
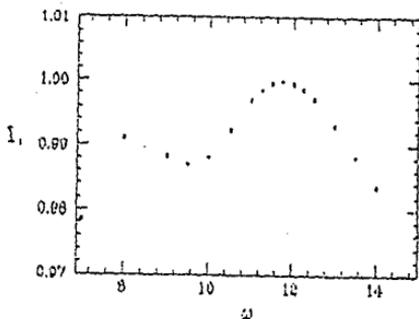
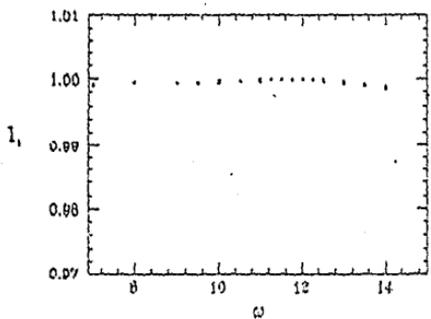
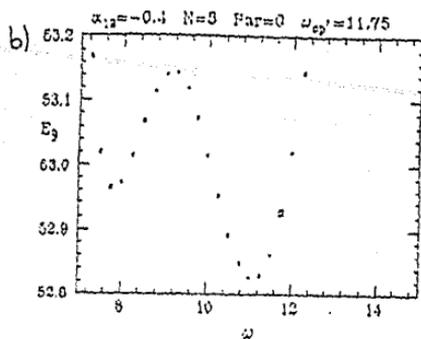
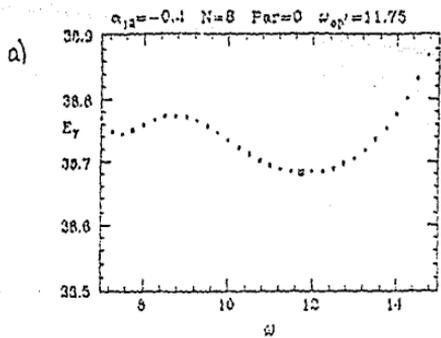


Fig. 3.9 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N=8$)
para el caso ordenado): a) E_7 , b) E_9 .

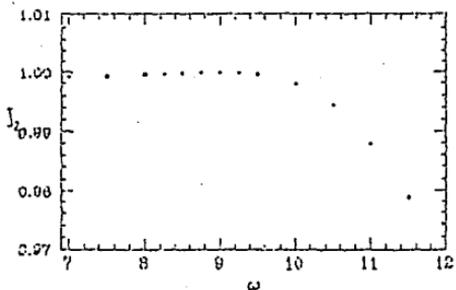
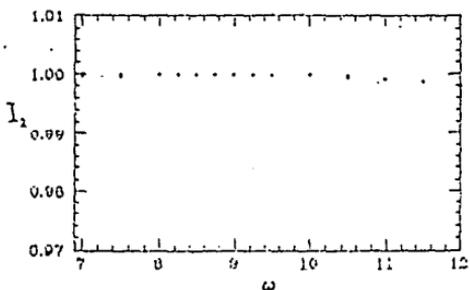
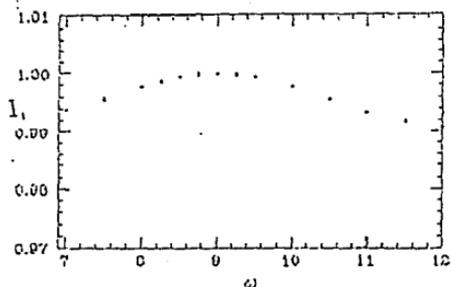
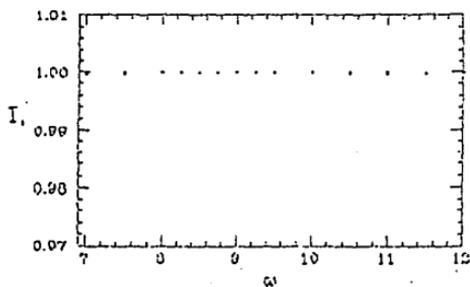
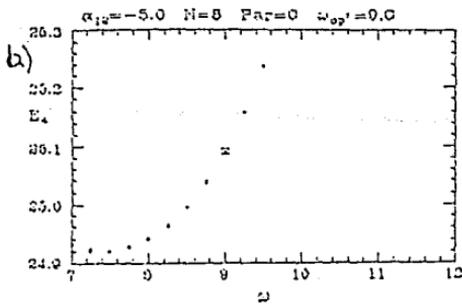
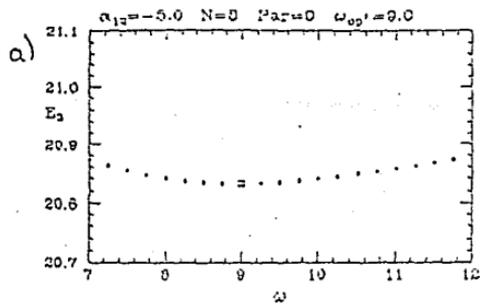


Fig. 3.10: Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N=8$) para el caso caótico): a) E_3 , b) E_4 .

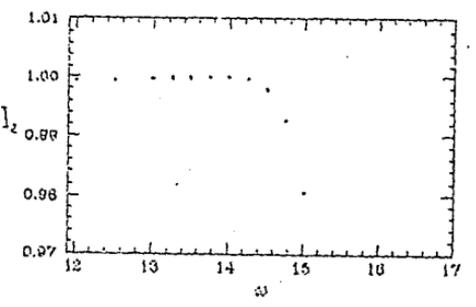
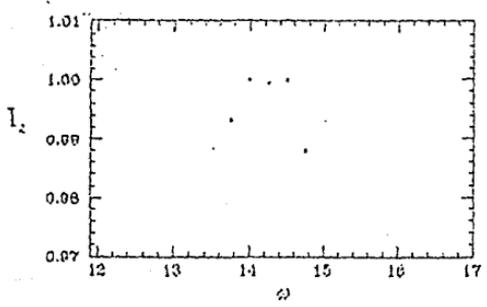
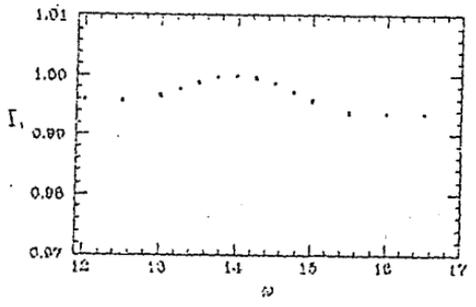
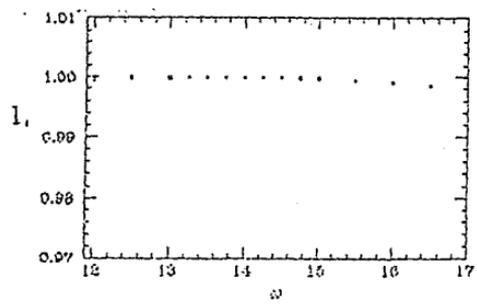
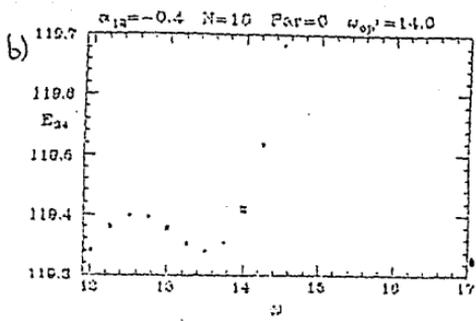
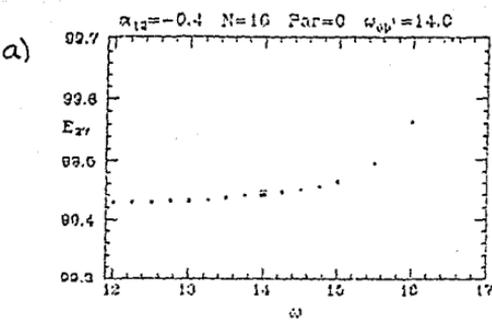


Fig. 3.11 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 16$ para el caso ordenado): a) E_{27} , b) E_{34} .

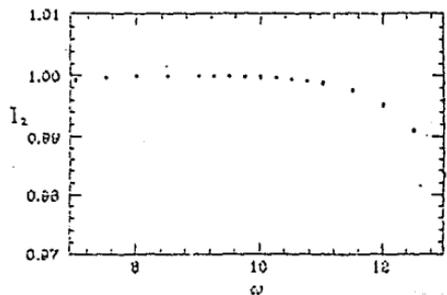
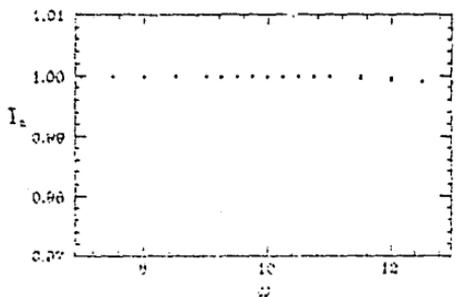
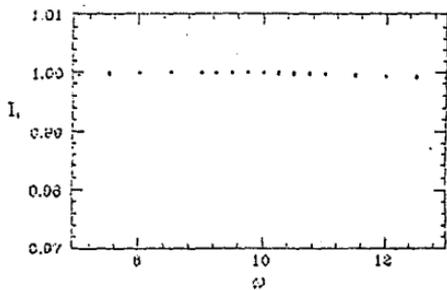
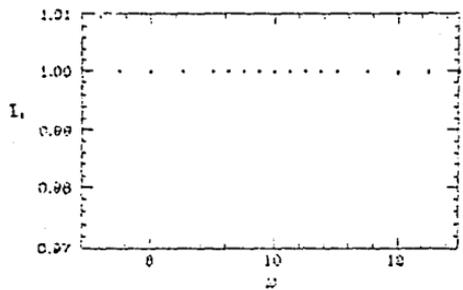
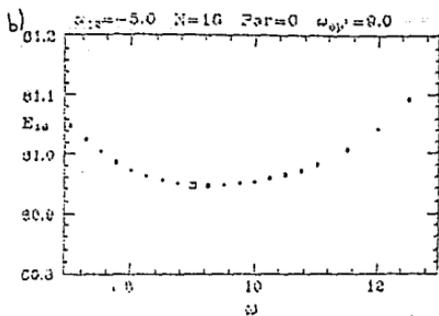
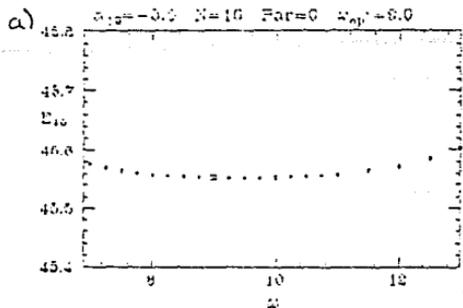


Fig. 3.12 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 16$ para el caso caótico): a) E_{10} , b) E_{16} .

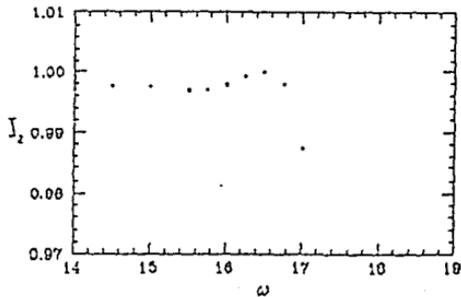
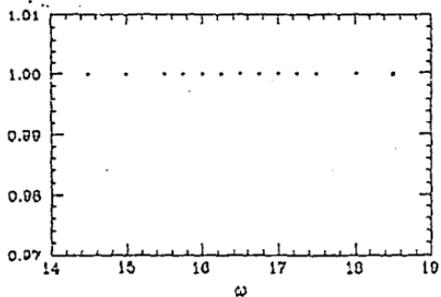
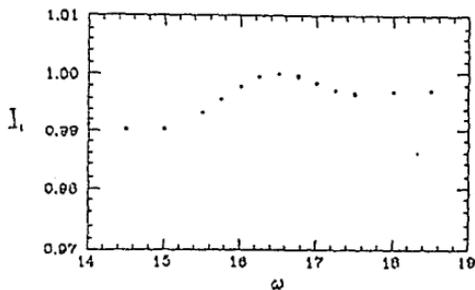
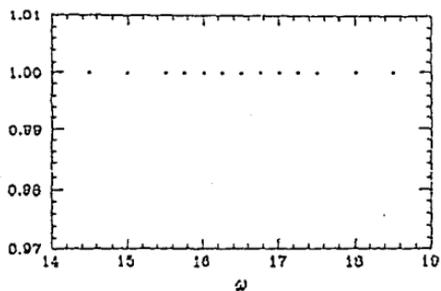
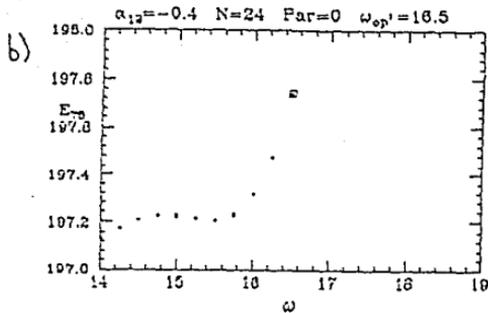
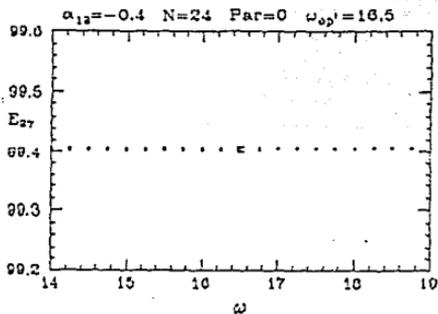


Fig. 3.13: Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 24$ para el caso ordenado): a) E_{27} , b) E_{75} .

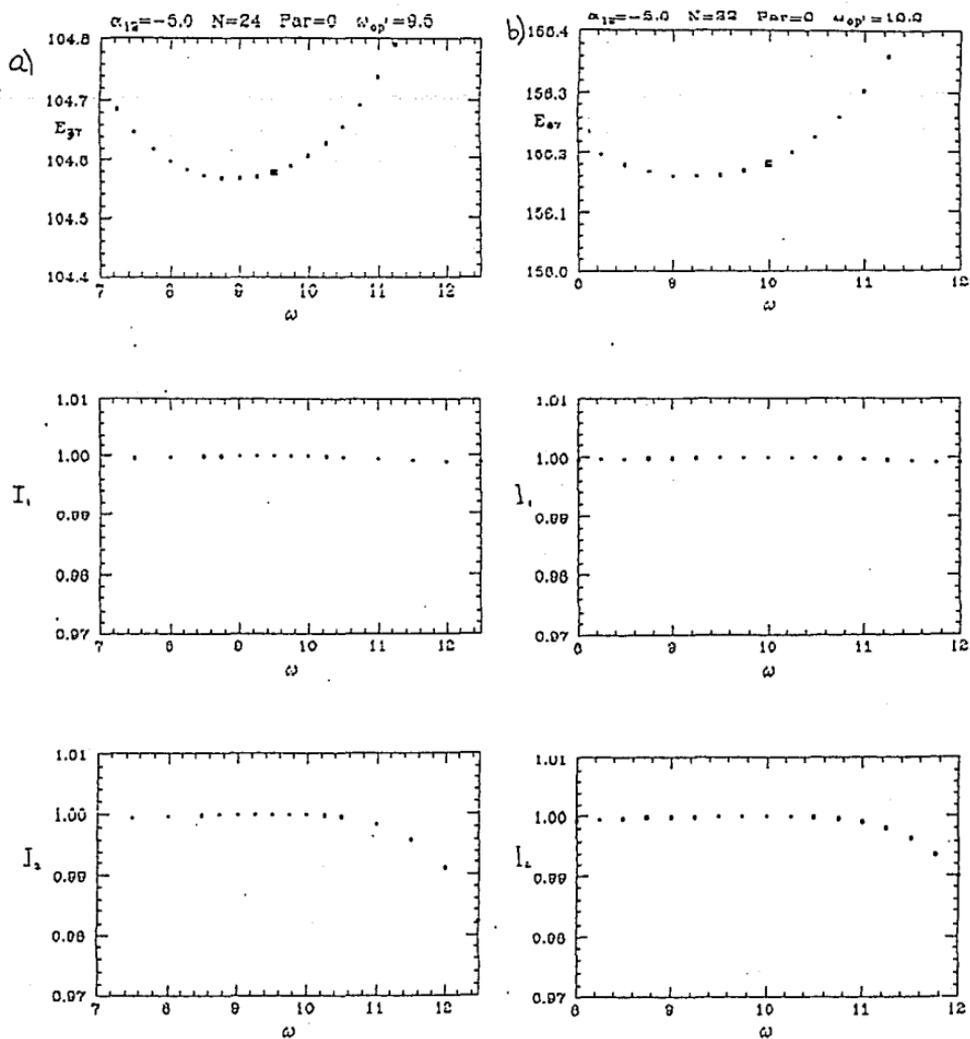


Fig. 3.14: Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 (para el caso caótico): a) $N = 24$ y E_{37} , b) $N = 32$ y E_{67} .

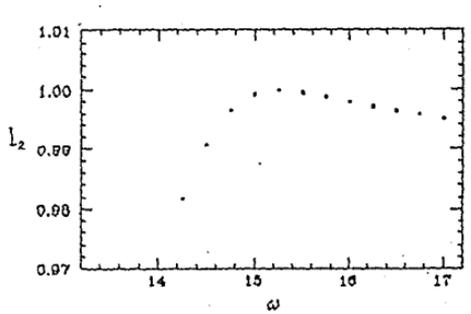
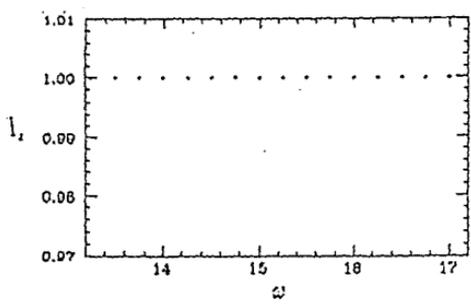
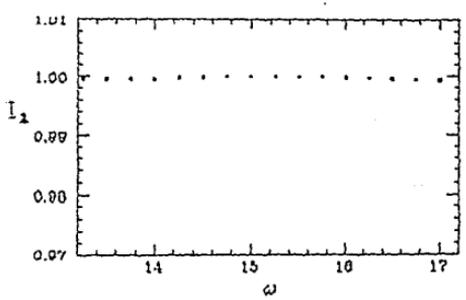
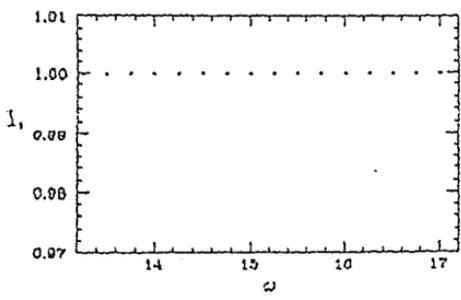
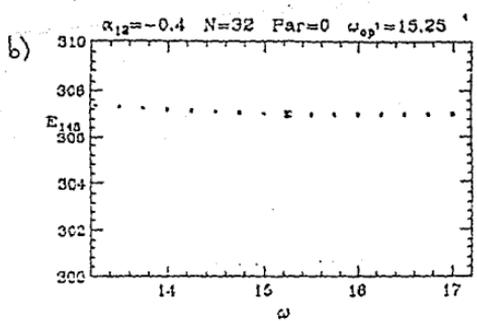
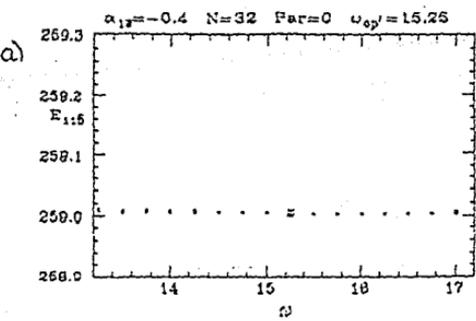


Fig. 3.15: Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 32$ para el caso caótico): a) E_{115} , b) E_{148} .

podemos entender fácilmente, por ejemplo para el estado base, usando la desigualdad variacional [3]:

$$\langle \mathcal{H} \rangle \geq E_1 + (E_0 - E_1) |A_0|^2 \quad (3.3)$$

donde $|A_0|$ es precisamente el producto interno I_2 y, E_0 y E_1 son los primeros dos eigenvalores del hamiltoniano en la base óptima. Si $E_1 - E_0$ es grande y el estado base está bien definido ($\langle \mathcal{H} \rangle \sim E_0$), entonces $|A_0|^2$ debe ser muy cercano a uno. Pero si la energía no es estable, entonces la falta de definición en la energía hace que aparezca una variación δE_0 respecto al valor de la energía del estado base, que a su vez hace que $|A_0|$ se aleje de la unidad y pierda definición.

Pero esta no es la única manifestación de falta de estabilidad de I_2 . Cuando tenemos un estado cuya energía es muy cercana al valor de un nivel consecutivo, es decir, que estemos cerca de degeneración (cosa que puede con mayor frecuencia ocurrir cuando el sistema es casi ordenado ya que la distribución del espaciamiento de niveles a primeros vecinos para este caso es la de Poisson [4], que es uno cuando la separación de niveles vale cero), tendremos una mala estabilidad para este producto interno. Siguiendo nuevamente (3), esta falta de estabilidad sólo se observa cuando la definición de la energía no es muy buena con respecto a la separación local $E_{k+1} - E_k$, más que con el espaciamiento promedio. Un ejemplo de esto se puede ver en la Fig. 13 en que la definición de la energía para el estado par 27 con $N = 16$, a pesar de ser buena no es suficiente para que I_2 sea estable, mientras que esto sí ocurre al incrementar N a 24 cuantas, manteniéndose estable con respecto a incrementos en el número de cuantas (ver Tab. 1). Este fenómeno obviamente es poco probable encontrarlo cuando el hamiltoniano corresponde a un sistema altamente desordenado. En este caso no se tienen muchos estados muy cercanos dado que la distribución del espaciamiento de niveles corresponde a una del tipo Wigner [4], que vale cero cuando el espaciamiento entre niveles es cero.

En cuanto a la convergencia del ángulo respecto a cambios en el número de cuantas podemos decir, igual que antes, que es mejor en el caso ordenado que en el caso caótico en general, aunque para los niveles casi degenerados que pueden aparecer en el caso ordenado una buena convergencia requiere mayor número de cuantas. Cuantitativamente podemos ver esto de los resultados que aparecen en las tablas 3 y 4, donde se muestra el valor de I_2 para los estados pares 27 y 34 al variar

en la base óptima el número de cuantas, tanto en el régimen casi ordenado como en el caótico.

Tab. 3.3: Convergencia de I_2 para los estados pares 27 y 34 en el caso ordenado.

ω_{op}	N_{op}	N	$k = 27$	$k = 34$
14.0	16	14	0.859455659	0.786001076
	18	16	0.998184050	0.997642529
16.5	24	22	0.999999992	0.999999999
	26	24	1.0	1.0

Tab. 3.4: Convergencia de I_2 para los estados pares 27 y 34 en el caso caótico.

ω_{op}	N_{op}	N	$k = 27$	$k = 34$
9.0	16	14	0.975352645	6.173828×10^{-2}
	18	16	0.983862668	0.973123681
9.5	24	22	0.999058692	0.998369337
	26	24	0.999832030	0.999636487
10.0	32	30	0.999998806	0.999997060
	34	32	0.999999712	0.999999312

La mejor convergencia en el caso ordenado que en el caótico la entendemos de la misma manera que para la energía, con el tipo de superficies equipotenciales que se tienen en cada caso, excepto cuando hay pérdida de estabilidad debido a estados casi degenerados para el sistema casi ordenado.

REFERENCIAS

- [1] M. Moshinsky, *The Harmonic Oscillator in Modern Physics: from atoms to quarks*, Gordon and Breach Publishers, Nueva York, 1969, en "Marcos Moshinsky, imagen y obra escogida", colección México y la UNAM, núm. 52, UNAM, 1984.
- [2] R.M. Méndez V., T.H. Seligman, *Phys. Lett.* **36 B** (1971) 307.
- [3] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Labé, *Quantum Mechanics*, Vol. 1, Hermann, Paris, 1977.
- [4] M. Berry, Semiclassical mechanics of regular and irregular motion, en *Chaotic behaviour of deterministic systems* (eds. G. Iooss, R. H. G. Helleman, R. Stora), Les Houches session XXXVI, North-Holland Publishing Company, Nueva York, 1983.

A fin de cuentas no somos más que vil polvo cósmico. . .

Pero permítaseme repetir. . . Cósmico.

F. Bonasso, L. Benet (febrero 1991)

En resumen, en esta tesis hemos estudiado el tipo de convergencia y estabilidad de expansiones de osciladores anarmónicos en términos de osciladores armónicos, cuando el análogo clásico del sistema tiene las manifestaciones típicas de los sistemas ordenados y caóticos, y hemos relacionado la convergencia de estas eigenfunciones con la del eigenvalor del hamiltoniano asociado al propio estado.

Hemos encontrado que para el sistema estudiado la convergencia de los eigenvalores del hamiltoniano es buena al usarse la base de osciladores armónicos como base para la descripción, tanto cuando el sistema clásico es ordenado como caótico. Sin embargo, esta convergencia es mucho mejor para el caso ordenado, cosa que podemos entender comparando la forma de las superficies equipotenciales con las que se tendrían para el oscilador armónico de cierta frecuencia. Así, en el caso caótico el potencial es tal que las curvas equipotenciales se deforman respecto al del oscilador armónico (que son círculos) mostrando ciertas "protuberancias" que entorpecen la convergencia; por otro lado, en el caso ordenado a pesar de que no se tienen círculos, se mantiene las simetrías respecto al origen y a cada eje, lo que facilita la convergencia de las funciones de oscilador armónico a las eigenfunciones buscadas. A partir de esto, la convergencia para el caso caótico (y también para el caso ordenado) podría ser mejorada haciendo un cambio de ejes, a fin de que estos coincidan con los ejes principales de simetría de las equipotenciales, y en lugar de considerar un parámetro variacional, considerar dos frecuencias independientes, una para cada dirección en estas nuevas coordenadas.

Por otro lado, se ha expuesto aquí una medida de la convergencia de las eigen-

funciones en términos de dos cantidades. Una de ellas mide la magnitud de la componente de un vector en una base \mathcal{H}_ω , que está dentro del espacio correspondiente a la base óptima $\mathcal{H}_{\omega_{op}}$. La otra da una medida del coseno del ángulo que forman el eigenvector en la base óptima con el vector transformado de otra base a la base óptima. Hemos encontrado que la estabilidad en el cálculo de los eigenvalores influye de manera muy notable en la estabilidad de las cantidades mencionadas. Se observa que las funciones propias son altamente sensibles a la estabilidad de la energía correspondiente, en el sentido que las funciones propias sólo se aproximan bien mientras la energía así lo haga (en general). Entonces, debido a que los eigenvalores son mejor aproximados para el caso ordenado que para el caótico, en general las eigenfunciones heredan esta propiedad.

Sin embargo, una importante inestabilidad del método ocurre para el caso ordenado, cuando dos niveles consecutivos están muy poco separados, la cual no ocurre con tanta frecuencia para el caso caótico por la repulsión típica de niveles que se manifiesta en este caso. Esta inestabilidad se resuelve aumentando la precisión del valor de la energía con respecto al espaciado local de niveles.

Finalmente, hemos mostrado de manera cualitativa que la convergencia de las expansiones de osciladores anarmónicos en términos de osciladores armónicos depende de la geometría del potencial, sin mostrar dependencia del orden o desorden del análogo clásico del sistema. Para demostrar esto de manera rigurosa basta tomar α_1 y α_2 muy alejadas a fin de deformar de manera más notoria las equipotenciales del caso ordenado, lo que reduciría la convergencia.

En este apéndice se presentan una serie de figuras obtenidas con las simulaciones numéricas que soportan las inferencias y resultados expuestos en el capítulo 3. A continuación se da la lista de las figuras que componen este apéndice.

Fig. 1 : Estabilidad de algunos eigenvalores E_k respecto a la frecuencia para el caso ordenado $\alpha_{12} = -0.4$, con distintos números de cuantas.

Fig. 2 : Estabilidad de algunos eigenvalores E_k respecto a la frecuencia para el caso caótico $\alpha_{12} = -5.0$, con distintos números de cuantas.

Fig. 3 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 16$ para el caso ordenado): a) E_{11} , b) E_{20} .

Fig. 4 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 24$ para el caso ordenado): a) E_{36} , b) E_{68} .

Fig. 5 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 32$ para el caso ordenado): a) E_{64} , b) E_{96} .

Fig. 6 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 16$ para el caso caótico): a) E_6 , b) E_{20} .

Fig. 7 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 24$ para el caso caótico): a) E_{20} , b) E_{33} .

Fig. 8 : Estabilidad de las eigenfunciones respecto a la frecuencia en base a I_1 e I_2 ($N = 32$ para el caso caótico): a) E_{57} , b) E_{64} .

Fig. 9 : Comparación entre la convergencia de las eigenfunciones del estado $k = 27$ para el a) caso ordenado y el b) caótico cuando $N = 16$. El estado 27 es un eigenvalor casi degenerado para el caso ordenado.

Fig. 10 : Comparación entre la convergencia de las eigenfunciones del estado $k = 27$ para el a) caso ordenado y el b) caótico cuando $N = 20$. El estado 27 es un eigenvalor casi degenerado para el caso ordenado.

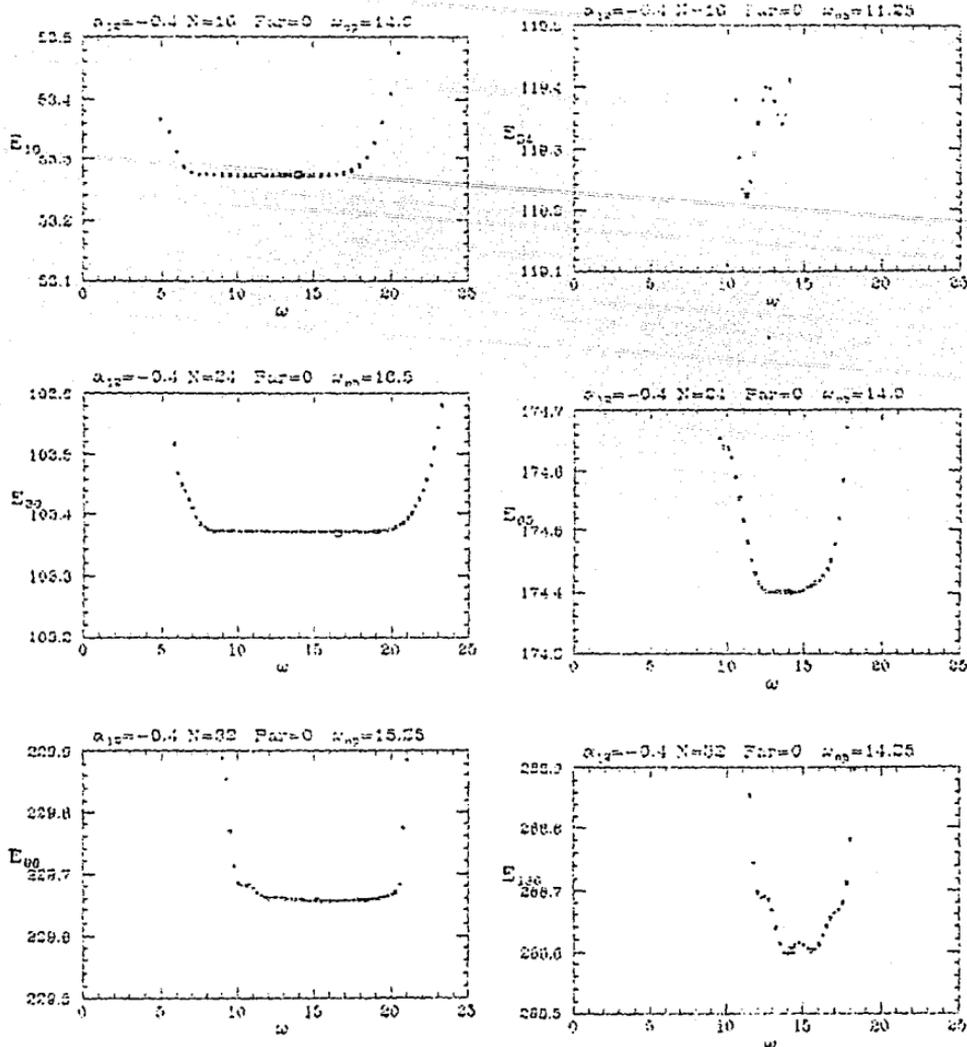


Fig. 1

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

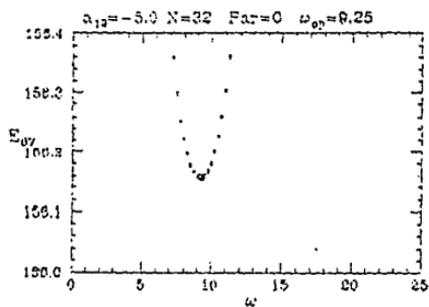
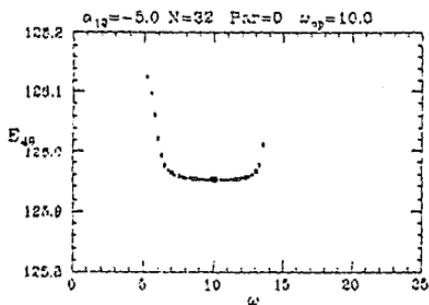
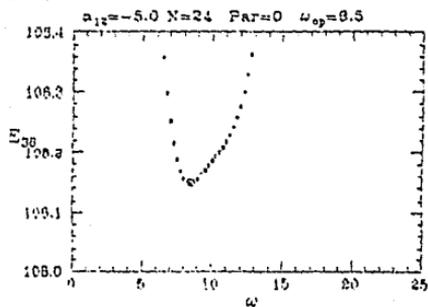
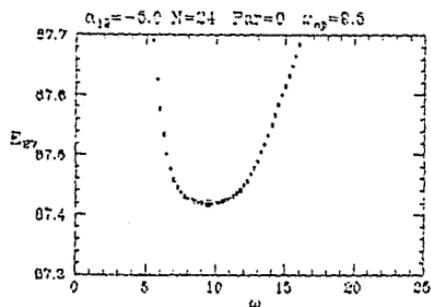
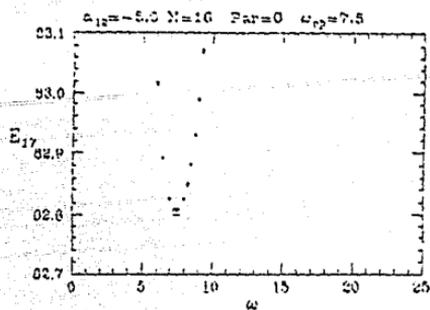
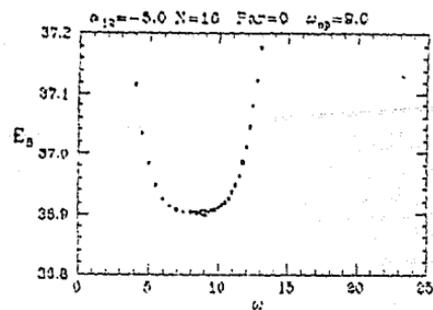


Fig. 2

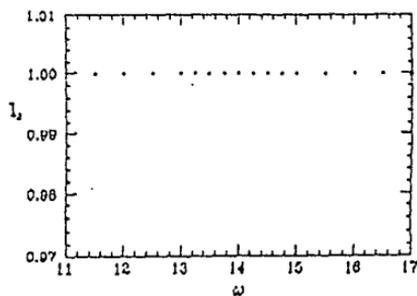
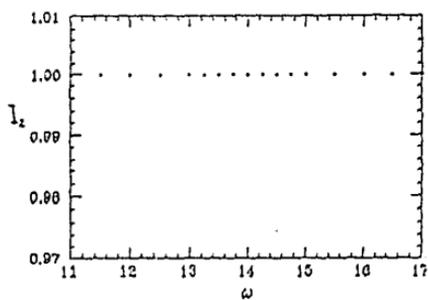
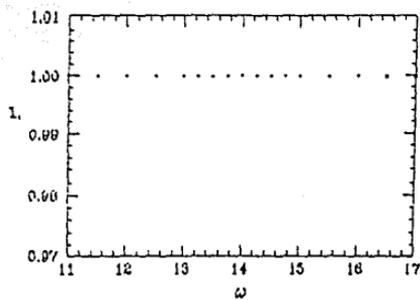
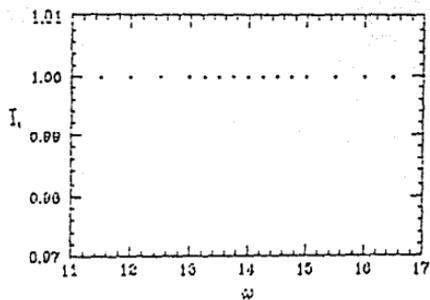
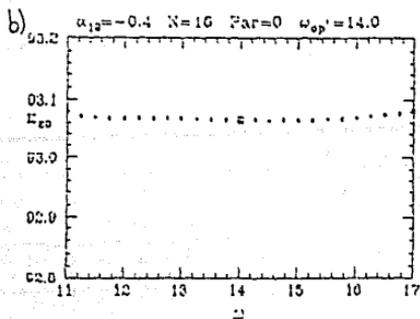
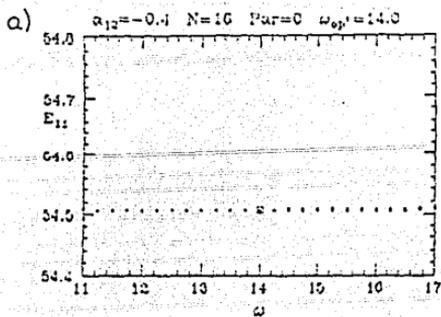


Fig. 3

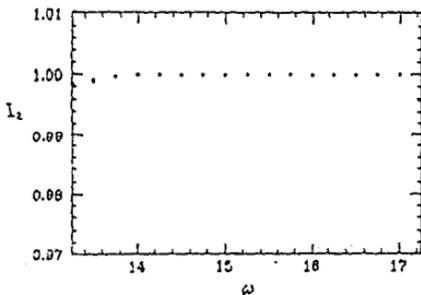
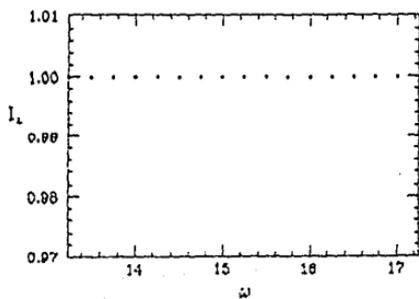
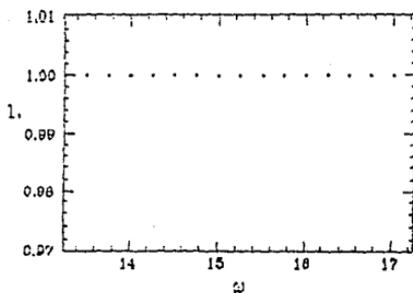
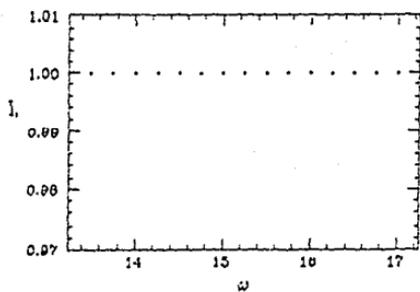
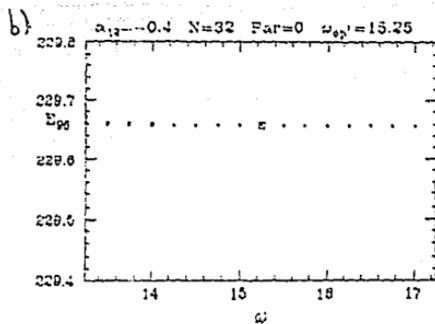
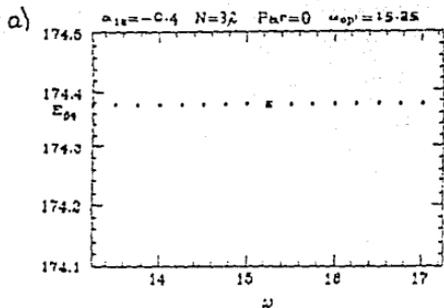


Fig. 4

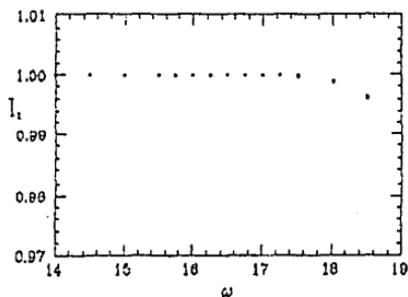
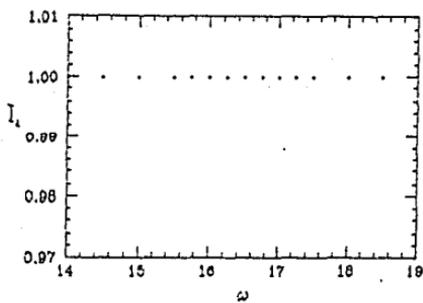
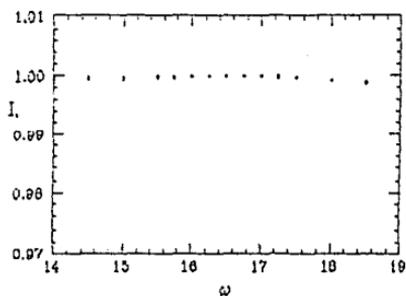
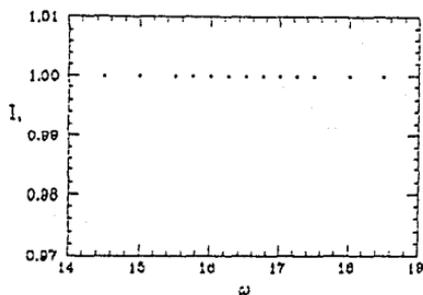
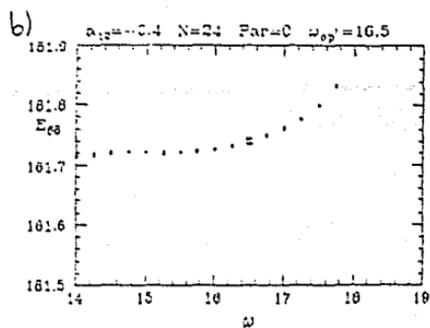
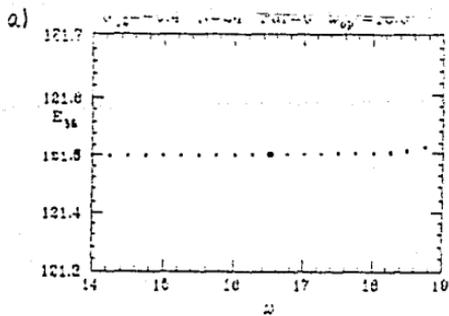


Fig. 5

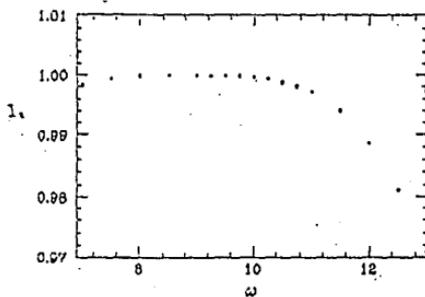
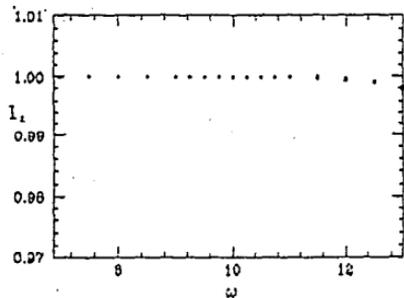
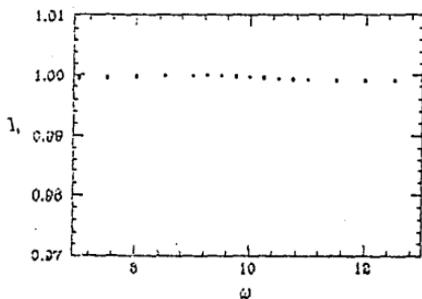
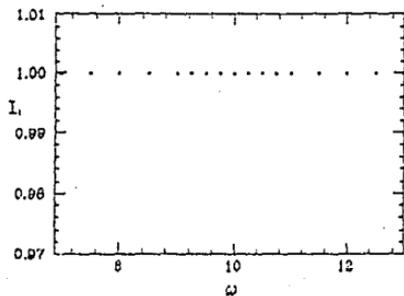
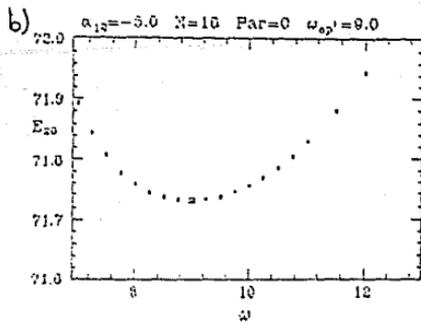
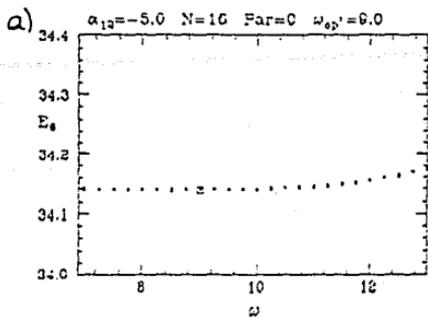


Fig. 6

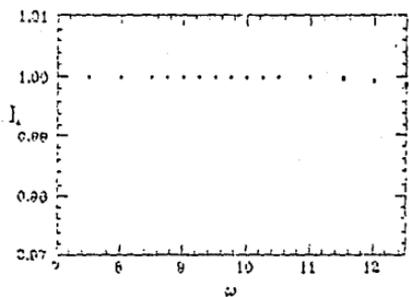
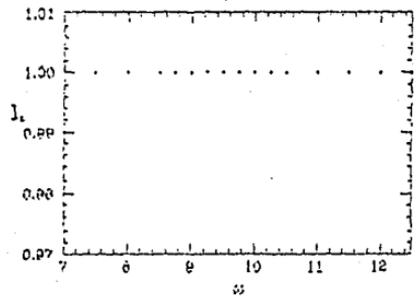
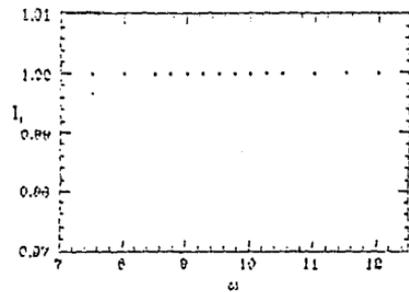
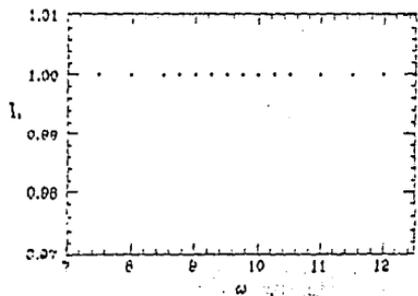
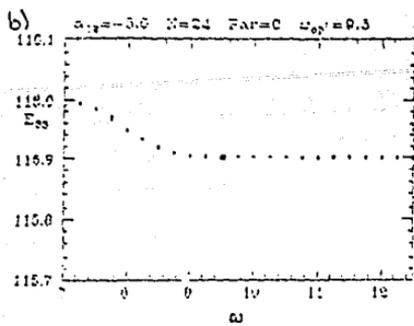
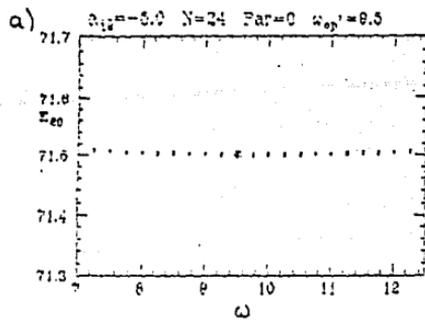


Fig. 7

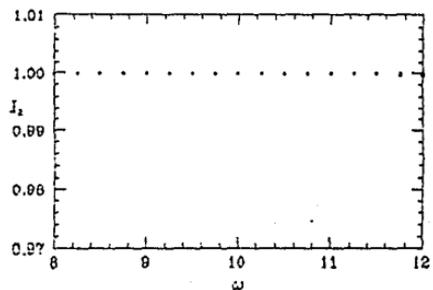
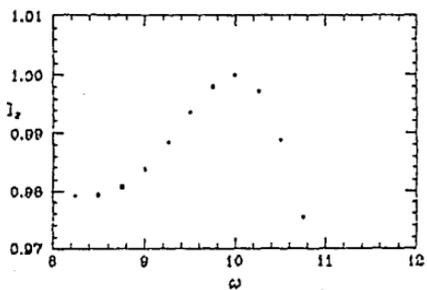
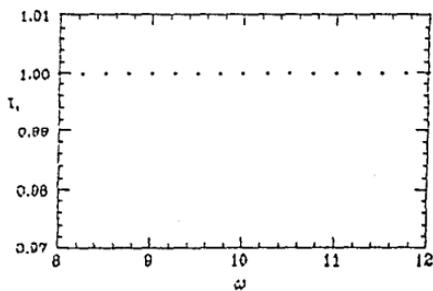
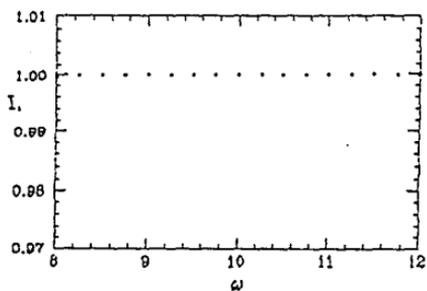
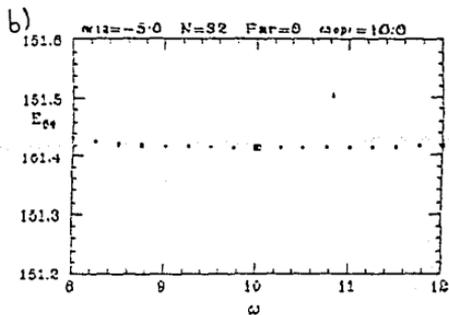
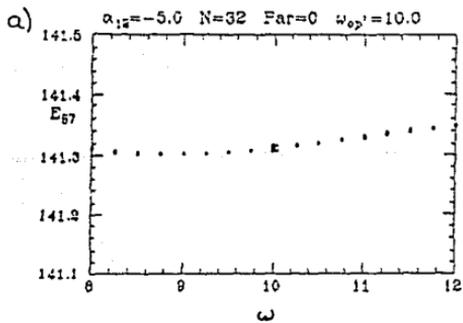


Fig. 8

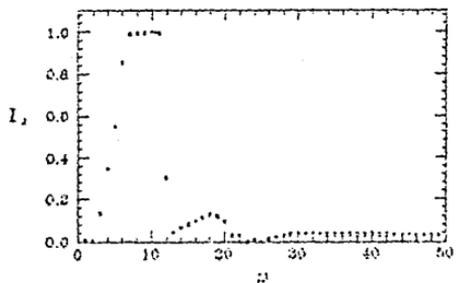
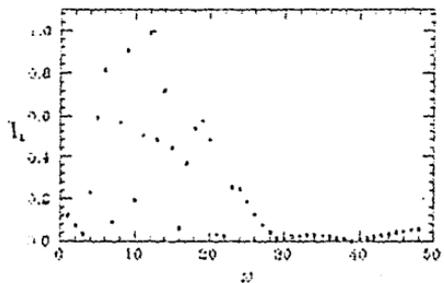
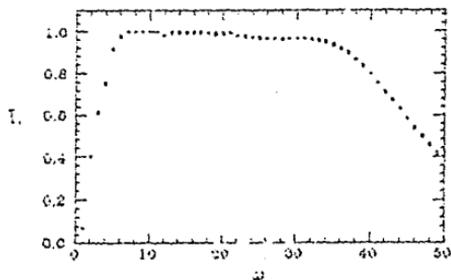
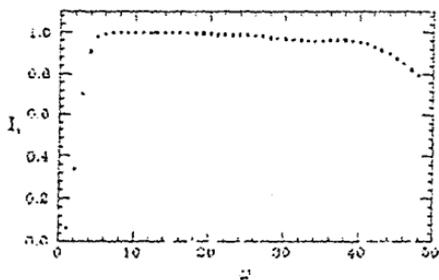
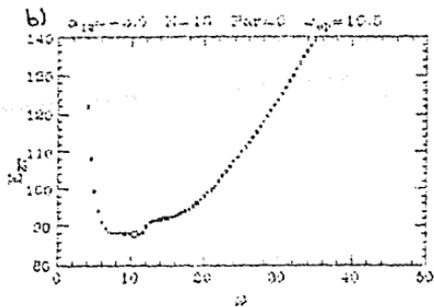
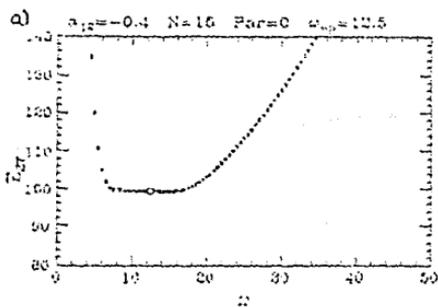


Fig. 9

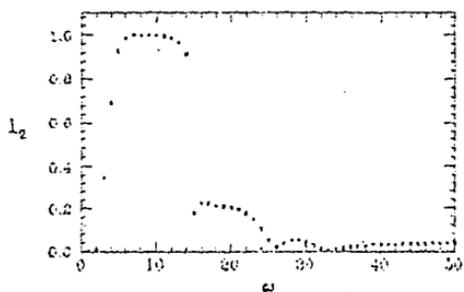
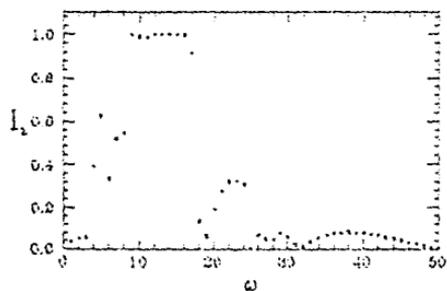
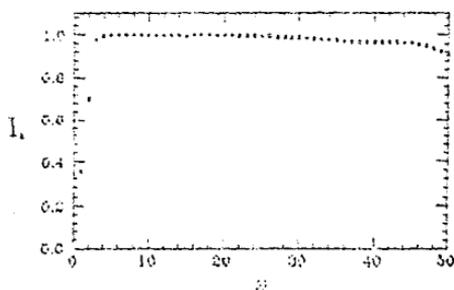
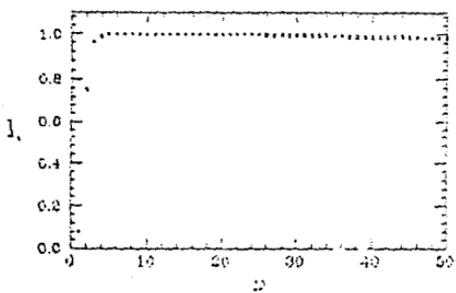
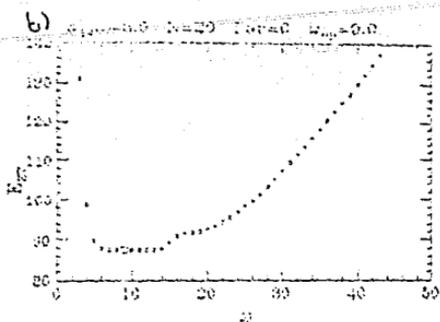
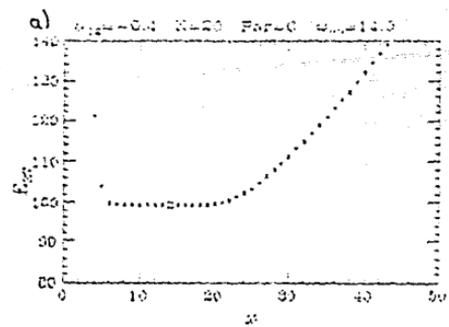


Fig. 10