



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

PROPIEDADES SEMICLASICAS DE EIGENFUNCIONES DE UN SISTEMA CLASICAMENTE CAOTICO.

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
F I S I C O
P R E S E N T A :
ALEJANDRO SUAREZ MORENO



DIRECTOR DE TESIS: DR. LUIS BENET FERNANDEZ

DIRECCION DE ESTUDIOS PROFESIONALES
FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR
2000

286887



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AV. 5 DE MAYO DE  
MEXICO

**MAT. MARGARITA ELVIRA CHÁVEZ CANO**  
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la  
Facultad de Ciencias  
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis:  
"Propiedades semi-clásicas de eigenfunciones de un  
sistema clásicamente caótico".

realizado por SUAREZ MORENO ALEJANDRO

con número de cuenta 3130330-3 , pasante de la carrera de Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis

Propietario

DR. LUIS BENET FERRANDEZ

Propietario

DR. MARCOS ROSKINSKI ZAMBOLANSKI

Propietario

DR. JORGE ANDRES FLORES VALDES

Suplente

DR. FELIX ISRAELEV MIKHAILOVICH

Suplente

DR. CRISTOF JUNG KOHL

*[Handwritten signatures: Luis Benet Ferrandez, Marcos Roskinski Zambolanski, Jorge Andres Flores Valdes]*

*[Handwritten signature: Felix Israelev Mikhailevich]*

Consejo Departamental de Física

*[Handwritten signature: Patricia Goldstein Menachem]*  
DRA. PATRICIA GOLDSTEIN MENACHEM  
Coordinadora de Licenciatura de Física

## RECONOCIMIENTO.

---

La dirección de esta tesis es compartida por el Dr. Felix Izrailev Mikhailovich, investigador del Instituto de Física de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, ya que su colaboración fue esencial para llevar a buen término este trabajo.

Sin embargo, por limitaciones reglamentarias él no aparece oficialmente como codirector. Por ello, sirvan estas palabras para asentar el profundo agradecimiento por sus valiosas ideas, comentarios y sugerencias.

---

	INTRODUCCION .....	1
1	DINÁMICA CLÁSICA DEL SISTEMA .....	5
1.1	Sistema por estudiar .....	5
1.2	Caos clásico .....	7
2	ESTRUCTURA DE LA MATRIZ HAMILTONIANA .....	11
2.1	Subespacios invariantes del sistema cuántico .....	11
2.2	Elementos de matriz del hamiltoniano .....	12
	<i>Base de osciladores armónicos <math>\hat{H}_{osc}</math></i> .....	12
	<i>Base del hamiltoniano no perturbado <math>\hat{H}_0</math></i> .....	14
2.3	Estructura de la matriz hamiltoniana en la base de $\hat{H}_{osc}$ y $\hat{H}_0$ .....	16
	<i>Decrecimiento de <math>H_{i,j}</math> con respecto a <math>H_{i,i}</math></i> .....	16
	<i>Promedio de <math>H_{i,j}</math> y elementos <math>H_{i,j}^2</math> de la matriz</i> .....	18
2.4	Varianza y banda efectiva de la matriz .....	21
2.5	Sumario .....	23
3	PROPIEDADES DE EIGENVALORES Y EIGENFUNCIONES ...	25
3.1	Análisis estadístico del espectro de energías de $\hat{H}$ .....	26
3.2	Estructura de eigenfunciones individuales en la base $\hat{H}_0$ .....	30
3.3	Estructura del promedio de eigenfunciones en la base $\hat{H}_0$ .....	39
3.4	Análisis de EF en términos de funciones de oscilador armónico .....	44
3.5	Densidad local de estados LDOS .....	49
3.6	Comparación entre EF y LDOS del sistema cuántico y clásico .....	56

---

4	<b>DISTRIBUCIÓN DEL NÚMERO DE OCUPACIÓN</b> .....	59
4.1	Distribución de $n_s$ en la base de $\hat{H}_0$ .....	60
4.2	Coefficiente de Boltzman $\beta_B$ .....	71
4.3	Comparación entre $n_s$ del sistema clásico y cuántico .....	73
4.4	Distribución de $n_s$ en la base de $\hat{H}_{osc}$ .....	74
5	<b>CONCLUSIONES</b> .....	77
	Referencias .....	79

## INTRODUCCIÓN.

---

Las propiedades definidas en una descripción estadística para sistemas con un número infinito de grados de libertad ha sido un importante tema de investigación. En los últimos años, estas propiedades se han estudiado en sistemas de pocas partículas cuya descripción cuántica tiene una contraparte clásica con caos [1-4].

El motivo de investigar este tipo de sistemas es obtener una estructura de estados que tengan un significado estadístico definido a través de su forma, es decir, la mayoría de los estados tienden a presentar una forma genérica desde el punto de vista cualitativo en una base dada. Como consecuencia, este comportamiento lleva a suponer que dichos sistemas presentan un equilibrio estadístico.

Las propiedades del sistema cuántico que se utilizan para investigar su posible equilibrio estadístico son:

- La estructura de eigenfunciones EF;
- La densidad local de estados LDOS;
- El número de ocupación  $n_s$ .

Incluso, estas propiedades pueden ser comparadas –en el límite semiclásico– con las correspondientes a la descripción clásica.

Por ejemplo, se han estudiado desde modelos de matrices aleatorias (RMT) hasta átomos complejos (como el Cerio) [1,3], incluyendo sistemas de espines acoplados [5] y fermiones aislados con interacción [6].

Sin embargo, los estados en estos sistemas no se relacionan con la dinámica de su contraparte clásica, exceptuando el caso de espines acoplados. En este último, existen limitaciones para la estadística debido a que el análogo clásico presenta caos sólo en una pequeña región del espacio fase.

Debido a ello, en la tesis se estudiará un sistema cuántico formado por dos osciladores anarmónicos cuárticos acoplados en una dimensión, donde su potencial tiene la forma de un polinomio de cuarto orden.

Una importante ventaja de este sistema es que el potencial hace que la dinámica clásica escale con la energía, es decir, el comportamiento dinámico es el mismo para cualquier energía. Por lo que, si el sistema es caótico, dicho comportamiento se observa en todo el espacio fase.

Para la descripción cuántica del sistema se usarán dos bases para expresar su hamiltoniano  $\hat{H}$ : una que representa dos osciladores cuárticos independientes, que denotaremos con  $\hat{H}_0$ , y otra definida por dos osciladores armónicos  $\hat{H}_{osc}$ . Cada uno de ellos es un hamiltoniano de partículas independientes, esto es, no cuentan con términos de acoplamiento entre las partículas. El uso de osciladores armónicos se debe, principalmente, a la disponibilidad de programas de computo desarrollados por Seligman y Benet [7,8]. Los resultados de esta descripción se presentarán en ambas bases y se analizarán sus diferencias.

A continuación se describe la estructura de la tesis:

En el capítulo 1 se estudiará el sistema desde el punto de vista de la mecánica clásica, estableciéndose el tipo de simetrías que presenta su hamiltoniano. En seguida se buscará, a través de los parámetros que definen el hamiltoniano clásico  $H$ , la transición de orden a caos. Esto se ilustrará utilizando el mapeo de Poincaré.

El sistema análogo en mecánica cuántica se analizará en el capítulo 2. Primero, en base a las simetrías del sistema cuántico, se utilizarán bosones y fermiones para estudiar el sistema en sus subespacios invariantes. Después se estudiarán las características de la matriz del hamiltoniano en ambas bases.

En el capítulo 3 se corroborará que el sistema cuántico muestra propiedades propias de los sistemas con contraparte clásica caótica. Esto se hace por medio de la distribución de espaciamentos a primeros vecinos  $P(s)$  y la varianza de número  $\Sigma^2(L)$ . En seguida se discutirá la estructura de eigenfunciones y la densidad local de estados, analizando su forma para eigenfunciones individuales y promedios. La estadística del sistema será determinada a través de la forma genérica que presenten las EF y LDOS. Adicionalmente, se considerarán medidas relacionadas con esas características, tales como la localización de estados y la entropía. Por último se presentará la concordancia de la EF y la LDOS con respecto a resultados en el sistema clásico.

---

El capítulo 4 se abocará al estudio de la distribución del número de ocupación  $n_s$  en las eigenfunciones de  $\hat{H}$ , mostrándose las formas que toman dichas propiedades para estados individuales y promedios de varios estados. Después se compararán los números de ocupación –correspondientes a bosones y fermiones– con las distribuciones obtenidas para el análogo clásico definido en el capítulo 1. Las comparaciones entre la  $n_s$  del sistema cuántico y su análogo clásico se mostrarán en el mismo capítulo.

Por último, en el capítulo 5 se darán las conclusiones.

# Capítulo 1

## DINÁMICA CLÁSICA DEL SISTEMA.

---

En este capítulo se considera un sistema formado por dos partículas idénticas moviéndose en un potencial de oscilador cuártico con interacción del mismo tipo. Primero, se detallan las características del hamiltoniano describiendo su estructura en términos del hamiltoniano no perturbado, llamado  $H_0$ , y una perturbación  $V$  asociada al acoplamiento de los osciladores. Posteriormente, se describe el tipo de simetrías que exhibe el hamiltoniano total  $H$ . Finalmente, se realizan mapeos de Poincaré mostrando una transición de orden a caos del sistema al variar sus parámetros.

### 1.1 Sistema por estudiar.

Consideremos un sistema de dos partículas en una dimensión, cuyo hamiltoniano es de la forma

$$H = H_0 + V. \quad (1.1)$$

Aquí,

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} + \alpha\{q_1^4 + q_2^4\} \quad (1.2)$$

representa dos osciladores cuárticos sin acoplamiento y

$$V = \beta\{q_1^2 q_2^2\} + \gamma\{q_1^3 q_2 + q_1 q_2^3\} \quad (1.3)$$

es el potencial que acopla las partículas.

Los parámetros  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  modifican  $H_0$  y  $V$ , hasta obtener una transición de orden a caos en el sistema clásico, como se mostrará en la sec. 1.2. Las masas de las partículas se consideran como  $m_1 = m_2 = 1$  y la constante de Planck  $\hbar = 1$ .

Se observa de la ec.(1.2) que

$$H_0 = h^{(1)} + h^{(2)}, \quad (1.4)$$

es separable en términos de hamiltonianos de una sola partícula con

$$h^{(i)} = \frac{p_i^2}{2} + \alpha q_i^4. \quad (1.5)$$

Esto implica que  $H_0$  es integrable.

Dada la forma de la interacción, el hamiltoniano  $H$  posee las siguientes simetrías.

- Invariancia ante inversión del tiempo:

$$p_1 \rightarrow -p_1 \quad (1.6a)$$

$$p_2 \rightarrow -p_2 \quad (1.6b)$$

- Invariancia ante la reflexión de coordenadas:

$$q_1 \rightarrow -q_1 \quad (1.7a)$$

$$q_2 \rightarrow -q_2 \quad (1.7b)$$

$$p_1 \rightarrow -p_1 \quad (1.7c)$$

$$p_2 \rightarrow -p_2 \quad (1.7d)$$

- Invariancia ante el intercambio de partículas:

$$q_1 \rightarrow q_2 \quad (1.8a)$$

$$q_2 \rightarrow q_1 \quad (1.8b)$$

$$p_1 \rightarrow p_2 \quad (1.8c)$$

$$p_2 \rightarrow p_1 \quad (1.8d)$$

En el caso  $\gamma = 0$ , se puede considerar la simetría adicional:

- Invariancia ante la reflexión de cada coordenada  $i = 1, 2$ :

$$q_i \rightarrow -q_i \quad (1.9a)$$

$$p_i \rightarrow -p_i \quad (1.9b)$$

Estas simetrías serán de gran importancia cuando se estudie el sistema cuántico, pues conllevan a subespacios invariantes que serán utilizados en el capítulo 2.

Por otro lado, el hamiltoniano  $H$  cuenta con un potencial en forma de un polinomio de cuarto grado (ecs. 1.2 y 1.3). Esto hace que el sistema escale con la energía, es decir, sus propiedades dinámicas son las mismas independientemente de qué energía se considere. Las transformaciones para el escalamiento son:

$$E \rightarrow \lambda E \quad (1.10a)$$

$$q_i \rightarrow \lambda^{1/4} q_i \quad (1.10b)$$

$$p_i \rightarrow \lambda^{1/2} p_i \quad (1.10c)$$

$$t \rightarrow \lambda^{-1/4} t \quad (1.10d)$$

## 1.2 Caos clásico.

Nuestro interés en esta sección es analizar el caso donde el sistema clásico es caótico. Por esto, vamos a considerar dos hamiltonianos  $H_F$  y  $H_D$  distintos que, como se mostrará más adelante, llevan a caos casi total pero se distinguen por la intensidad de la perturbación. Esto se hace con el propósito de ver la importancia del número de estados que participan en el desarrollo de las soluciones del problema perturbado en términos del integrable una vez que pasemos al sistema cuántico.

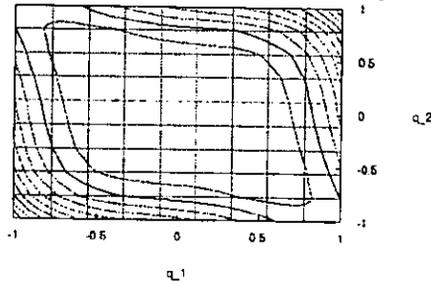
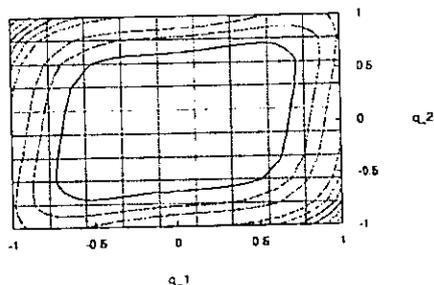


Figura 1.1. Curvas equipotenciales para el potencial del sistema. Los parámetros del potencial  $\alpha = 10.0$ ,  $\beta = -5.5$  y  $\gamma = 5.6$  corresponden a  $H_F$ .

En las figs. 1.1 y 1.2 se muestran las curvas equipotenciales de los potenciales  $H_F$  y  $H_D$ . El primero corresponde a los valores  $\alpha = 10.0$ ,  $\beta = -5.5$  y  $\gamma = 5.6$ , mientras que el segundo tiene  $\alpha = 10.0$  y  $\beta = \gamma = -4.15$ . Como puede notarse,  $H_F$  es más deformado que  $H_D$ .

Estos dos potenciales se usarán para construir las eigenfunciones de  $\hat{H}$  y estudiar algunas de sus propiedades. Además, se podrá analizar el comportamiento de dichas propiedades ante un cambio en la magnitud de la interacción  $V$ .



**Figura 1.2.** Curvas equipotenciales para el potencial del sistema. Los valores del potencial  $\alpha = 10.0$  y  $\beta = \gamma = -4.15$  corresponden a  $H_D$ .

Para sistemas con dos grados de libertad, una técnica importante para distinguir si un sistema es integrable o caótico es el mapeo de Poincaré. Las figuras 1.3 muestran secciones de Poincaré para los dos potenciales mencionados, para  $H_0$  y para otro con una interacción más débil, considerando el plano  $p_1, q_1$  con  $E = 1, q_2 = 0$  y  $p_2 > 0$ .

En la figura 1.3(a), con  $\alpha = 10.0$  y  $\beta = \gamma = 0$  ( $H_0$ ), se observa que el espacio fase está foliado en curvas cerradas conocidas como *toros invariantes*, las cuales son típicas de sistemas integrables. La figura 1.3(b), para  $\alpha = 10.0, \beta = 3.0$  y  $\gamma = 5.0$ , exhibe una transición de orden a caos, es decir, que la dinámica es caótica en ciertas regiones del espacio fase y en otras es ordenada. En las figs. 1.3(c) y 1.3(d) se utilizaron los hamiltonianos  $H_F$  y  $H_D$ , arriba mencionados, observándose que en ambos casos las trayectorias llenan el espacio fase disponible. Estos dos últimos mapeos corresponden a sistemas caóticos, aunque no se puede excluir islas estables muy pequeñas.

En todas las figuras se usó un ensemble con un número pequeño de condiciones iniciales (50) que se dejaron evolucionar hasta cumplir 500 secciones de la superficie. Posteriormente, se utilizaron un número mayor de condiciones iniciales (500) y las secciones se disminuyeron a 50. Los mapeos de Poincaré, utilizando los dos métodos, son cualitativamente iguales.

De aquí en adelante, se usarán los dos hamiltonianos caóticos y  $H_0$ . Una vez cuantizado este último, sus eigenfunciones definirán una base adecuada para expresar el hamiltoniano cuántico  $\hat{H}$ .

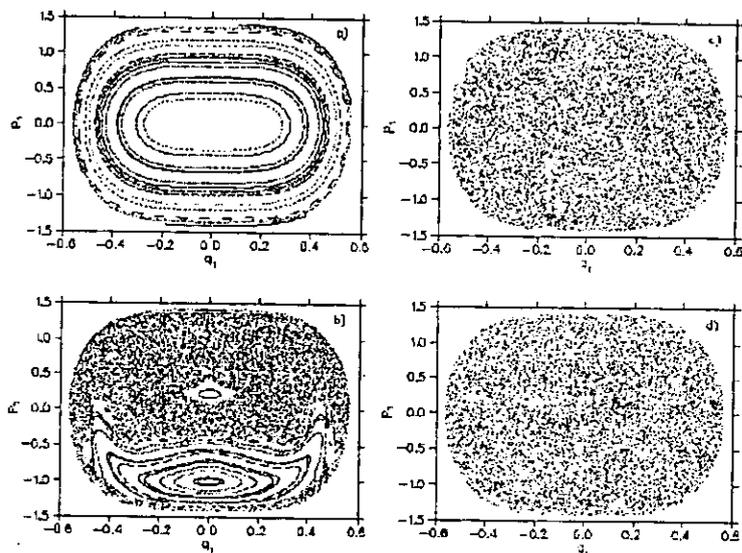


Figura 1.3. Plano fase del hamiltoniano  $H$  para diferentes valores de los parámetros  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ . Los ejes horizontal y vertical son  $q_1$  y  $p_1$ , respectivamente.

## Capítulo 2

### ESTRUCTURA DE LA MATRIZ HAMILTONIANA.

---

En este capítulo se analizan propiedades de la matriz asociada al hamiltoniano  $\hat{H}$ , usando los conjuntos de parámetros que se escogieron para el sistema clásicamente caótico. Primero, se establece qué propiedades tienen las eigenfunciones del sistema cuántico debido a sus simetrías. Se proponen dos bases de partícula independiente, osciladores armónicos  $\hat{H}_{osc}$  y osciladores cuárticos  $\hat{H}_0$ . En la matriz hamiltoniana se calculan propiedades tales como: el decaimiento de los elementos de matriz no diagonales en función de su distancia a la diagonal, el promedio, la varianza y la banda efectiva; todo ello con el fin de establecer la estructura de la matriz. Se entiende que la matriz está ordenada de acuerdo al número de cuanta para  $\hat{H}_{osc}$  y a los eigenvalores de  $\hat{H}_0$  en la base correspondiente.

#### 2.1 Subespacios invariantes del sistema cuántico.

El hamiltoniano  $H$  es simétrico respecto al intercambio de partículas (cf. eq.(1.8)). Esta invariancia permite separar las eigenfunciones y eigenvalores por sus propiedades de simetría bajo el grupo de permutaciones. Así, se tienen funciones simétricas y antisimétricas correspondientes a partículas de Bose-Einstein o Fermi-Dirac, respectivamente [9]. También es invariante ante la operación de reflexión, lo cual permite separar a las eigenfunciones por su paridad. Entonces, el hamiltoniano cuántico tiene cuatro tipos de estados correspondientes

a subespacios invariantes distintos:

- (i) Fermiones de paridad positiva.
- (ii) Fermiones de paridad negativa.
- (iii) Bosones de paridad positiva.
- (iv) Bosones de paridad negativa.

## 2.2 Elementos de matriz del hamiltoniano.

En esta sección se estudian los elementos de la matriz asociada a  $\hat{H}$  en las bases  $\hat{H}_{osc}$  y  $\hat{H}_0$ . En general, la base de osciladores armónicos  $\hat{H}_{osc}$  se utiliza frecuentemente para el estudio de sistemas de pocas partículas mediante el modelo de capas (*shell model*) y, además, los elementos de la matriz se pueden representar en una forma analítica sencilla [10].

Por otro lado, la base de osciladores cuárticos  $\hat{H}_0$  se aproxima a un campo promedio en el hamiltoniano  $\hat{H}$ , lo cual hace que esta base sea útil. Ambas bases representan modelos de partícula independiente que nos facilitarán el estudio de propiedades en el hamiltoniano como, por ejemplo, la distribución del número de ocupación en los estados de  $\hat{H}$  (ver cap. 4).

En seguida se analiza la estructura de la matriz asociada a  $\hat{H}$  y las posibles diferencias en su expresión cuando se utiliza cada una de las bases  $\hat{H}_{osc}$  y  $\hat{H}_0$ .

### 2.2.1 Base de osciladores armónicos $\hat{H}_{osc}$ .

El hamiltoniano  $\hat{H}$  se puede desarrollar en términos de osciladores armónicos utilizando los operadores de creación y aniquilación para estados de una partícula, respectivamente:

$$\hat{a}_j^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left\{ \hat{q}_j - \left( \frac{i}{\omega} \right) \hat{p}_j \right\}, \quad (2.1)$$

$$\hat{a}_j = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \left\{ \hat{q}_j + \left( \frac{i}{\omega} \right) \hat{p}_j \right\}, \quad (2.2)$$

donde el índice  $j = 1, 2$  identifica a la partícula y recordamos que usamos  $\hbar = m = 1$ . Aquí,  $\omega$  es la frecuencia de los osciladores armónicos y se utiliza como parámetro no lineal para determinar la estabilidad y convergencia de los eigenvalores y eigenfunciones de  $\hat{H}$ .

El efecto de estos operadores sobre eigenestados del operador de número  $a^\dagger a$  son dados por:

$$\hat{a}^\dagger |k, \omega\rangle = \sqrt{k+1} |k+1, \omega\rangle \quad (2.3)$$

$$\hat{a} |k, \omega\rangle = \sqrt{k} |k-1, \omega\rangle. \quad (2.4)$$

Así, los operadores de momento  $\hat{p}$  y posición  $\hat{q}$  se expresan como

$$\hat{p}_j = i\sqrt{\frac{\omega}{2}}(\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j), \quad (2.5)$$

$$\hat{q}_j = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(\hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j). \quad (2.6)$$

Las eigenfunciones de  $\hat{H}_{osc}$  se definen, en términos de eigenfunciones de una partícula, con dos eigenvalores del operador de número como

$$|k, l, \omega\rangle = |k, \omega\rangle \otimes |l, \omega\rangle = \frac{a_1^{\dagger k}}{\sqrt{k!}} |0, \omega\rangle \otimes \frac{a_2^{\dagger l}}{\sqrt{l!}} |0, \omega\rangle. \quad (2.7)$$

Es importante aclarar que la ec. 2.7 no está simetrizada (o antisimetrizada) con el fin de no complicar las expresiones posteriores.

Con las ecs.(2.3)-(2.6) se puede calcular, en forma separada, cada uno de los elementos de la matriz de una partícula:

$$\langle k', \omega | \hat{q} | k, \omega \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \{ \sqrt{k+1} \delta_{k', k+1} + \sqrt{k} \delta_{k', k-1} \}; \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} \langle k', \omega | \hat{q}^2 | k, \omega \rangle &= \frac{1}{2\omega} \{ \sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k', k+2} + \\ &+ (2k+1) \delta_{k', k} + \sqrt{k(k-1)} \delta_{k', k-2} \}; \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \langle k', \omega | \hat{q}^3 | k, \omega \rangle &= \frac{1}{(2\omega)^{3/2}} \{ \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)} \delta_{k', k+3} + \\ &+ 3(k+1) \sqrt{k+1} \delta_{k', k+1} + 3k \sqrt{k} \delta_{k', k-1} + \\ &+ \sqrt{k(k-1)(k-2)} \delta_{k', k-3} \}; \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned}
\langle k', \omega | \hat{q}^4 | k, \omega \rangle = & \frac{1}{4\omega^2} \{ \sqrt{(k+1)(k+2)(k+3)(k+4)} \delta_{k', k+4} + \\
& + 2(2k+3) \sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k', k+2} + 3[k^2 + (k+2)^2] \delta_{k', k} + \\
& + 2(2k-1) \sqrt{k(k-1)} \delta_{k', k-2} + \\
& + \sqrt{k(k-1)(k-2)(k-3)} \delta_{k', k-4} \}; \quad (2.11)
\end{aligned}$$

$$\langle k', \omega | \hat{p}^2 | k, \omega \rangle = \frac{\omega}{2} \{ -\sqrt{(k+1)(k+2)} \delta_{k', k+2} + (2k+1) \delta_{k', k} - \sqrt{k(k-1)} \delta_{k', k-2} \}. \quad (2.12)$$

El hecho de no poder trabajar con la matriz infinita que se asocia a  $\hat{H}$  nos lleva a truncarla y, así, trabajar con matrices cuya dimensión máxima será de  $3240 \times 3240$ , como se verá en los próximos capítulos. El criterio que se utiliza para truncar la matriz radica en considerar la base de osciladores armónicos (en dos dimensiones) para un número total de cuantos  $k+l$  menor o igual a  $N$ .

La cuestión sobre cuántos estados confiables se obtienen diagonalizando una matriz de determinado tamaño es de importancia fundamental para este tipo de cálculos. Se sabe de [10] que la convergencia puede depender en forma sensible de la frecuencia  $\omega$  de los osciladores que define la base, pero suele existir un rango en el cual las energías varían poco y que es conocido como "plateau".

En nuestro caso, para una matriz de dimensión  $3240 \times 3240$  (con  $N \leq 160$ ) contamos con 1100 eigenvalores confiables y una frecuencia óptima  $\omega_{op} = 8.5$ . El número de eigenfunciones confiables es menor, siendo del orden de 600 aproximadamente. Los métodos para obtener estos resultados son los mismos que se utilizan en [7].

### 2.2.2 Base de hamiltoniano no perturbado $H_0$ .

En esta base, el hamiltoniano puede escribirse de manera natural como un hamiltoniano de partículas independientes  $\hat{H}_0$  y la interacción concerniente al acoplamiento de partículas  $\hat{V}$  (cf. eqs(1.1)-(1.4)).

La ecuación de Schrödinger para el hamiltoniano de una partícula (cf. eq.(1.4)) está dada por

$$\hat{h}^{(i)} |\varphi_\nu^i\rangle = \epsilon_\nu^i |\varphi_\nu^i\rangle, \quad (2.13)$$

donde  $\epsilon_\mu$  y  $|\varphi_\mu\rangle$  son los eigenvalores y las eigenfunciones de una partícula, respectivamente.

Así, la energía  $E_{\kappa}^0$  del hamiltoniano sin acoplamiento  $\hat{H}_0$  puede ser expresada en términos de las energías del hamiltoniano de partículas independientes como

$$E_{\kappa}^0 = \epsilon_{\nu}^{(1)} + \epsilon_{\mu}^{(2)}. \quad (2.14)$$

Cada estado de  $\hat{H}_0$  puede ser expresado como un producto directo de eigenfunciones de  $\hat{h}^{(1)}$  y  $\hat{h}^{(2)}$  simetrizadas apropiadamente. La ec. (2.14) establece la relación entre los estados de oscilador cuártico de una partícula y la eigenfunción  $|\Phi_{\kappa}^{\mp}\rangle$  de  $\hat{H}_0$ :

$$|\Phi_{\kappa}^{\mp}\rangle = c_{\nu,\mu}^{\kappa,\mp} \{ |\varphi_{\nu}^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_{\mu}^{(2)}\rangle \mp |\varphi_{\mu}^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_{\nu}^{(2)}\rangle \}, \quad (2.15)$$

donde los coeficientes  $c_{\nu,\mu}^{\kappa,\mp}$  definen la normalización de  $\Phi_{\kappa}$ , para casos en que esta eigenfunción sea antisimétrica (fermiones) o simétrica (bosones). Según sea el caso, estos coeficientes son iguales a  $1/\sqrt{2}$  para fermiones y  $1/\sqrt{2}$  ó  $1/2$  para bosones, dependiendo de si  $\nu \neq \mu$  ó  $\nu = \mu$ , respectivamente. Nótese que en este caso la paridad de cada paridad se transfiere a la eigenfunción entera por la simetría adicional de  $\hat{H}_0$ , discutida en sec. (1.1).

En consecuencia, los elementos de la matriz para el hamiltoniano  $\hat{H}$  están dados por

$$\langle \Phi_l^{\mp} | \hat{H}_0 + \hat{V} | \Phi_m^{\mp} \rangle = \langle \Phi_l^{\mp} | \hat{H}_0 | \Phi_m^{\mp} \rangle + \langle \Phi_l^{\mp} | \hat{V} | \Phi_m^{\mp} \rangle, \quad (2.16)$$

con

$$\langle \Phi_l^{\mp} | \hat{H}_0 | \Phi_m^{\mp} \rangle = E_l^0 \delta_{l,m}. \quad (2.17)$$

Los elementos de la matriz  $\hat{V}$  se calculan a partir de

$$\begin{aligned} \langle \Phi_l^{\mp} | \hat{V} | \Phi_m^{\mp} \rangle &= c_{\nu,\nu'}^l \times \\ &\times \{ \langle \varphi_{\nu'}^{(1)} | \otimes \langle \varphi_{\mu'}^{(2)} | \mp \langle \varphi_{\mu'}^{(1)} | \otimes \langle \varphi_{\nu'}^{(2)} | \} \hat{V} \{ |\varphi_{\nu}^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_{\mu}^{(2)}\rangle \mp |\varphi_{\mu}^{(1)}\rangle \otimes |\varphi_{\nu}^{(2)}\rangle \}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Se encuentra que los elementos de la matriz quedan determinados por combinaciones de productos de la forma

$$\begin{aligned} \langle \Phi_l^{\mp} | \hat{q}_1^d \hat{q}_2^e | \Phi_m^{\mp} \rangle &= \\ c_{\nu,\nu'}^l c_{\mu,\mu'}^m &\times \{ \langle \varphi_{\nu'}^{(1)} | \hat{q}_1^d | \varphi_{\nu}^{(1)} \rangle \langle \varphi_{\mu'}^{(2)} | \hat{q}_2^e | \varphi_{\mu}^{(2)} \rangle \mp \langle \varphi_{\nu'}^{(1)} | \hat{q}_1^d | \varphi_{\mu}^{(1)} \rangle \langle \varphi_{\mu'}^{(2)} | \hat{q}_2^e | \varphi_{\nu}^{(2)} \rangle \\ &\mp \langle \varphi_{\mu'}^{(1)} | \hat{q}_1^d | \varphi_{\nu}^{(1)} \rangle \langle \varphi_{\nu'}^{(2)} | \hat{q}_2^e | \varphi_{\mu}^{(2)} \rangle + \langle \varphi_{\mu'}^{(1)} | \hat{q}_1^d | \varphi_{\mu}^{(1)} \rangle \langle \varphi_{\nu'}^{(2)} | \hat{q}_2^e | \varphi_{\nu}^{(2)} \rangle \}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

donde  $d + e = 4$ .

Ya que las eigenfunciones de  $\hat{H}_0$  forman una base mejor adaptada a  $\hat{H}$  que las del oscilador armónico, esperamos una mejor convergencia. Obtenemos eigenfunciones de una partícula mediante la diagonalización de  $\hat{h}^{(i)}$ , en funciones de oscilador, con excelente convergencia y usamos éstas en forma análoga para volver a construir matrices de  $3240 \times 3240$  como máximo. Usando el mismo tipo de criterios establecidos en [7] obtenemos 1200 eigenvalores y 800 eigenfunciones confiables, aproximadamente.

### 2.3 Estructura de la matriz hamiltoniana en la base de $\hat{H}_{osc}$ y $\hat{H}_0$ .

En esta sección estudiaremos el tipo de estructura que tiene la matriz hamiltoniana en cada una de las bases consideradas. Para ello, se realizan cálculos relacionados con la escasez de la matriz, el promedio de sus elementos no diagonales, la desviación estándar y la banda efectiva de la matriz. Aquí se utilizan matrices de dimensiones  $210 \times 210$  que son menores a las que se usarán posteriormente. El objetivo es mostrar las características de la matriz hamiltoniana, en cada una de las bases, para lo cual es suficiente con la dimensión de la matriz que aquí se menciona.

#### 2.3.1 Decrecimiento de $H_{i,j}$ con respecto a $H_{i,i}$ .

El valor relativo que existe entre los elementos diagonales  $H_{i,i}$  y no diagonales  $H_{i,j}$  permite empezar a determinar —en forma sencilla— qué tipo de estructura tiene la matriz del hamiltoniano  $\hat{H}$ .

En las figuras 2.1 y 2.2 se exhibe el decaimiento que presentan los elementos no diagonales de esta matriz, en cada una de las bases. Las figs. 2.1(a) y 2.1(c) muestran que, en la base de osciladores armónicos, existen elementos de matriz  $H_{i,j}$  comparables al elemento diagonal  $H_{i,i}$ , y además los elementos notablemente distintos de cero se concentran en cierta banda cerca de la diagonal. Esto es una consecuencia de las reglas de selección (ecs.(2.5)-(2.6)) en esta base, para cada partícula. Por otro lado, los elementos más importantes de la matriz, en la base  $\hat{H}_0$ , se encuentran en una banda del mismo ancho que la anterior; empero, su decrecimiento es más rápido (figs. 2.1(b) y (d)).

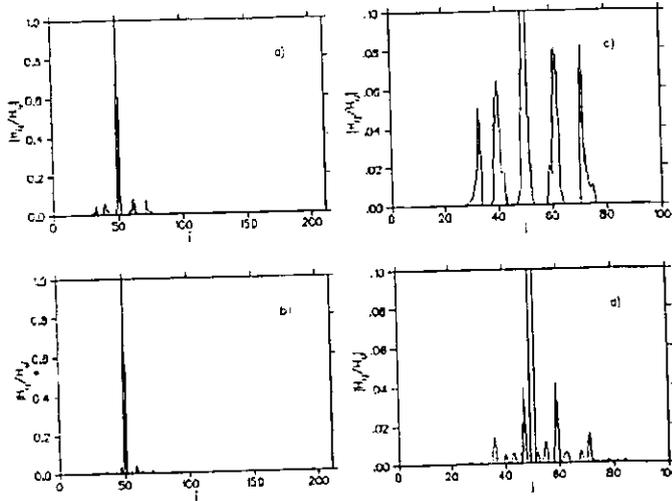


Figura 2.1. Decrecimiento en valor absoluto de los elementos  $H_{i,j}$ , de la matriz  $\hat{H}$ , con respecto al elemento diagonal  $H_{i,i}$ , para un renglón determinado. (a) Decrecimiento en el renglón  $i = 50$  de la matriz expresada en base de osciladores armónicos. (b) Decrecimiento en el mismo renglón de la matriz, en base de  $\hat{H}_0$ . La ampliación de las figs. (a) y (b) están en (c) y (d), respectivamente.

En la fig. 2.2 se muestra el decrecimiento de los elementos de la matriz  $\hat{H}$ , para ambas bases, en otro renglón de la matriz. Nuevamente, el decrecimiento para los elementos  $H_{i,j}$  es más rápido para la base  $\hat{H}_0$ .

El ancho de banda producido por el decrecimiento de los elementos de la matriz hamiltoniana es parecido para ambas bases. La diferencia estriba en la magnitud del decrecimiento de los elementos no diagonales de la matriz, lo cual se observa en las figs. 2.3(c) y (d). Si comparamos los elementos de la matriz  $H_{i,j}$ , en las bases  $\hat{H}_{osc}$  y  $\hat{H}_0$ , vemos que los primeros decrecen más lentamente. Esto implica que los elementos significativos de la matriz están más concentrados sobre la diagonal para la base de  $\hat{H}_0$ .

Los siguientes cálculos tienen como objetivo mostrar, de distintas formas, la estructura de bandas que presenta la matriz, estableciendo cuál de las bases utilizadas es la más adecuada para estudiar las propiedades del hamiltoniano.

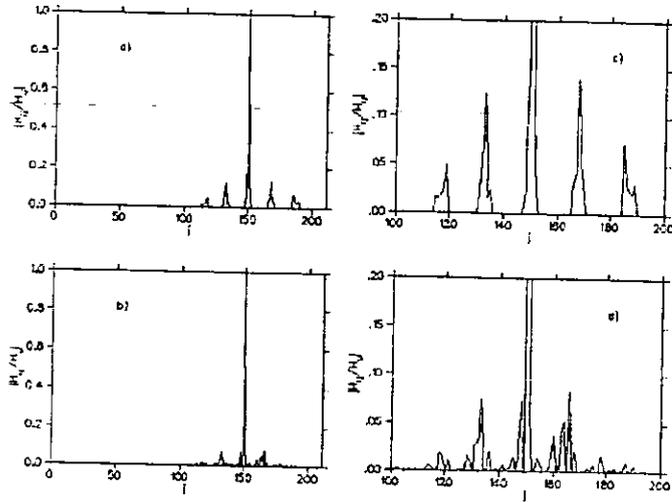


Figura 2.2. Lo mismo que en la fig. 2.1 pero para el renglón  $i = 150$  de la matriz expresada en (a) la base de osciladores armónicos y (b) en la base de  $\hat{H}_0$ . La ampliación de las figs. (a) y (b) están en (c) y (d), respectivamente.

### 2.3.2 Promedio de $H_{i,j}$ y elementos $H_{i,j}^2$ de la matriz.

Existen diferencias claras en los promedios de los elementos de la matriz hamiltoniana cuando sólo se considera a los elementos no diagonales. En la fig. 2.3, al hacer un cálculo de  $\overline{H_{i,j}}$  (denotado como  $\langle H_{i,j} \rangle$  en la figura) sobre todos los renglones de las dos matrices asociadas a  $\hat{H}$ , se observa cómo el promedio aumenta dentro de una estructura muy bien definida para el caso de osciladores armónicos. Por otro lado, en la base de  $H_0$ , el promedio sólo varía ligeramente alrededor de cero.

La información que se obtiene de calcular los elementos al cuadrado de la matriz  $H_{i,j}^2$  está basada, principalmente, en distinguir la distribución de los elementos significativos (en términos de magnitud) sobre cada uno de los renglones de la matriz hamiltoniana.

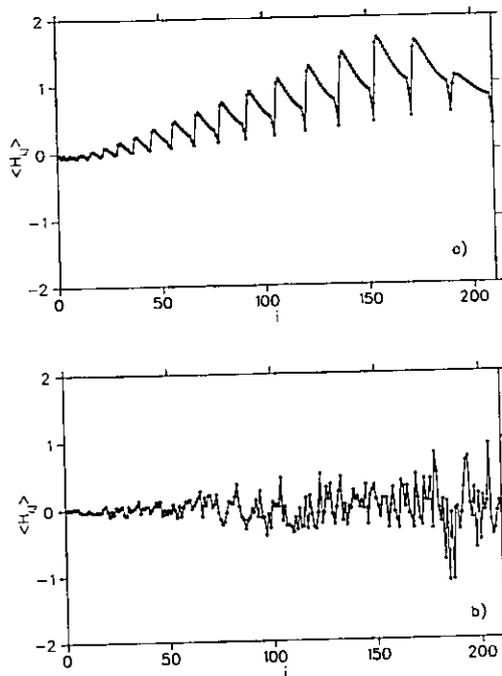


Figura 2.3. Promedio de  $H_{i,j}$  con respecto a los renglones de la matriz en (a) la base de osciladores armónicos y (b) en la base de  $\hat{H}_0$ . Las dimensiones de las matrices son las mismas que se utilizan en la fig. 2.1.

En la fig. 2.4 se observa una notable diferencia en la magnitud de los elementos al cuadrado de la matriz hamiltoniana. En la base de osciladores armónicos se tiene que estos elementos son más grandes que en la base de  $\hat{H}_0$ . Además, los  $H_{i,j}^2$  de la matriz en la primera base están más distribuidos sobre el renglón que en la segunda (figs. 2.4 (c) y (d)). En las figs. 2.5(a) y (b), para el renglón 150 de la matriz hamiltoniana, ya no es tan clara la diferencia en magnitud entre los elementos  $H_{i,j}^2$  con  $i \neq j$ . Sin embargo, sigue prevaleciendo la característica de que los elementos al cuadrado de la matriz en la base de  $\hat{H}_0$  están más concentrados sobre la diagonal que en la base  $\hat{H}_{osc}$ .

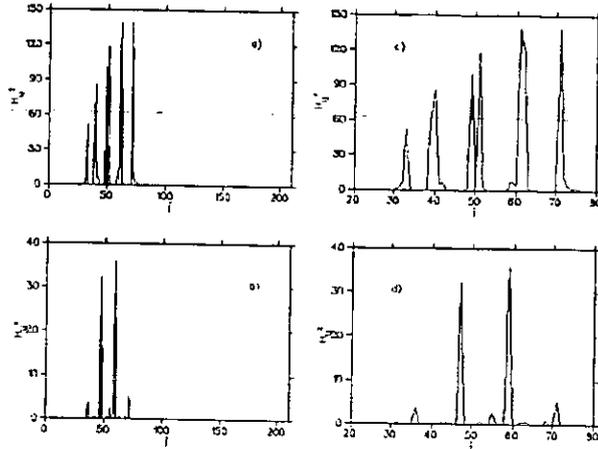


Figura 2.4. Elementos  $H_{i,j}^2$  de la matriz para el renglón  $i = 50$ , sin considerar su elemento diagonal. Los  $H_{i,j}^2$  en (a) la base de osciladores armónicos y (b) en la base del  $\hat{H}_0$ . El detalle de las figs. (a) y (b) están en (c) y (d), respectivamente. Nótese la diferencia de escalas.

Las figs. 2.4 y 2.5, muestran que los  $H_{i,j} \neq 0$  forman una estructura de banda similar en ambas bases. Pero, en la base  $\hat{H}_{osc}$  tenemos que aun elementos más alejados de la diagonal tienen una magnitud importante. A diferencia de la base  $H_0$  donde esa clase de elementos son poco importantes en su magnitud. De esta manera se corrobora el resultado, obtenido en la sección anterior, acerca del decrecimiento de los elementos en la matriz. Empero, el ancho de banda es casi el mismo para ambas bases.

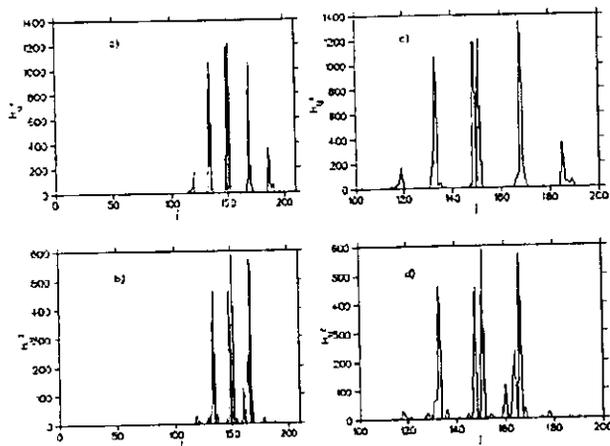


Figura 2.5. Elementos  $H_{i,j}^2$  de la matriz para el renglón  $j = 150$  sin considerar el elemento diagonal  $H_{i,i}^2$ . (a) En la base de osciladores armónicos y (b) en la base de  $\hat{H}_0$ . El detalle de las figs. (a) y (b) están en (c) y (d), respectivamente.

#### 2.4 Varianza y banda efectiva de la matriz.

La varianza en los elementos de la matriz  $\hat{H}$  se define como

$$\sigma_{i'}^2 = \overline{H_{i',j}^2} - \overline{H_{i',j}}^2, \quad (2.20)$$

para un renglón fijo ( $i'$ ) de la matriz, tomando el promedio sobre el índice  $j \neq i'$ . La fig. 2.6 muestra la varianza en función de los renglones en la matriz hamiltoniana, para cada una de las bases. La varianza en ambas bases tiene estructuras muy particulares, sin embargo, para la base de  $\hat{H}_0$  (fig. 2.6(b)) se tiene una  $\sigma^2$  menor que la correspondiente a osciladores armónicos (a la fig. 2.6(a)).

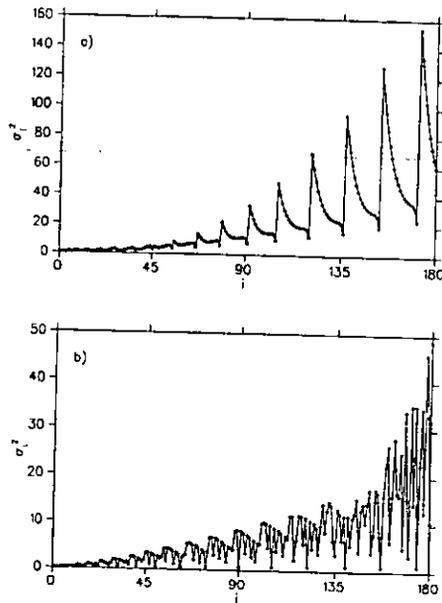


Figura 2.6. Varianza de la matriz  $\hat{H}$  con respecto a sus renglones. (a) La varianza en base de osciladores armónicos y (b) la correspondiente para  $\hat{H}_0$ . Nótese la diferencia de escalas.

Por último, se muestra el cálculo del ancho de banda efectivo en la matriz, que se define como

$$b_{ef}^i = \frac{\sum_j |i-j|^2 H_{i,j}^2}{\sum_j H_{i,j}^2}, \quad (2.21)$$

donde se excluyen los elementos diagonales.

En la fig. 2.7(a) se muestra que, en la base  $\hat{H}_{osc}$ , la banda efectiva contiene variaciones en su tamaño, indicando cómo aumenta la banda rápidamente con respecto a los renglones de la matriz. Por otro lado, en la base de  $H_0$  (fig. 2.7(b)), se observa que el aumento en la banda no contiene grandes fluctuaciones. Además, su magnitud es menor a la correspondiente a la matriz en osciladores armónicos.

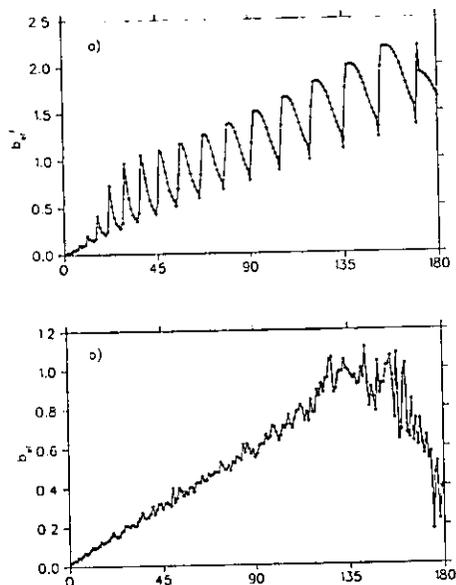


Figura 2.7. Banda efectiva de  $\hat{H}$  en función de los renglones de la matriz para las eigenfunciones (a) en la base de  $\hat{H}_{osc}$  y (b) en la base de  $\hat{H}_0$ . El decaimiento en la  $b_{ef}^{(b)}$ , para la base del hamiltoniano sin acoplamiento, se debe a los efectos de borde. Nótese la diferencia de escala.

Cabe mencionar que el decrecimiento de la banda efectiva en los últimos renglones se debe a los efectos de borde que representa el truncamiento de la matriz asociada a  $\hat{H}$ .

## 2.5 Sumario.

Las características de la estructura de la matriz hamiltoniana tales como: el decaimiento de elementos no diagonales, el promedio de elementos de un renglón, la varianza y banda efectiva, se pueden relacionar con una estructura de banda. Así lo muestran los cálculos hechos en este capítulo dado que la matriz asociada a  $\hat{H}$  presenta este tipo de estructura para las dos bases que hemos propuesto.

Las principales diferencias radican en el decaimiento de la magnitud para los elementos que forman la estructura de banda en ambas bases. La matriz hamiltoniana expresada en la base  $\hat{H}_0$  tiene un decaimiento en la magnitud de los elementos  $H_{i,j}$  que contrasta con el observado en la base  $\hat{H}_{osc}$ . Además, para la base  $\hat{H}_0$ , el ancho de banda crece uniformemente, mientras que en la base de osciladores armónicos existen grandes oscilaciones entre renglones consecutivos, como se observa en la banda efectiva de la matriz (fig. 2.7).

Esto nos da motivos para considerar que la base de osciladores cuárticos tiene mayores ventajas para expresar al hamiltoniano  $\hat{H}$ . Sin embargo, seguiremos considerando ambas bases para realizar el cálculo de propiedades en eigenvalores y eigenfunciones de  $\hat{H}$ , en el siguiente capítulo, en particular porque hemos expresado la base de  $\hat{H}_0$  en términos de osciladores y, en consecuencia, los resultados en la base de  $\hat{H}_{osc}$  se obtienen sin mayor esfuerzo.

## Capítulo 3

### PROPIEDADES DE EIGENVALORES Y EIGENFUNCIONES.

---

Los sistemas cuánticos de pocas partículas se han estudiado recientemente con el particular interés de determinar si tienen un comportamiento estadístico que se relacione con el correspondiente a un sistema de muchas partículas. Esto se basa, principalmente, en ciertas propiedades de sus eigenfunciones y en la distribución del número de ocupación que presentan sus estados [1,4,11,12].

Este capítulo comienza con el estudio de las propiedades estadísticas de los eigenvalores de  $\hat{H}$  utilizando la distribución de espaciamientos de primeros vecinos  $P(s)$  y la varianza de número  $\Sigma^2(L)$ . De esta manera se confirma que los eigenvalores de nuestro sistema siguen el comportamiento esperado para los sistemas con análogo clásico caótico [13]. Posteriormente, estudiaremos la forma genérica que presentan las eigenfunciones  $|\psi\rangle$  de  $\hat{H}$  a través de su proyección en las bases  $\hat{H}_{osc}$  y  $\hat{H}_0$ . Este análisis se sustenta en la estructura de las eigenfunciones, la densidad de estados LDOS, la localización de estados a través de la razón de participación  $P^+(E)$  y la medida  $\ell_\sigma$ , esta última relacionada con la entropía del sistema.

Se consideran los hamiltonianos  $\hat{H}_F$  y  $\hat{H}_D$  que se especificaron en el capítulo 1, y cuyos parámetros hacen que el sistema sea caótico en el límite clásico. La razón de utilizar ambos conjuntos es la diferencia con la cual responden a la magnitud de la interacción  $\hat{V}$ . Esto es interesante dado que en trabajos recientes se ha propuesto estudiar sistemas ergódicos, en equilibrio y con una interacción fuerte, para garantizar que las eigenfunciones presenten una forma similar en todo el espectro [14]. Aquí mostraremos que existe buena correspondencia a pesar de que la interacción no sea fuerte, por ejemplo, en el caso  $\alpha = 10.0$ ,  $\beta = \gamma = -4.15$  ( $\hat{H}_D$ ). De lo cual se establece que la interacción fuerte no es una condición necesaria para este tipo de análisis [6].

Finalmente, las propiedades de las eigenfunciones que consideraremos en este capítulo serán únicamente para el caso de fermiones pares, dado que los resultados para los casos restantes (bosones pares e impares y fermiones impares) son muy parecidos.

### 3.1 Análisis estadístico del espectro de energías de $\hat{H}$ .

Una herramienta para distinguir el comportamiento de un sistema cuántico con su contraparte clásica, ordenada o caótica, es la estadística espectral. Se sabe que las propiedades estadísticas del espectro son universales y en el caso de un sistema integrable corresponden a una distribución de Poisson, mientras que en un sistema caótico siguen las predicciones de la teoría de matrices aleatorias (RMT) [15].

Medidas típicas de ello son: la distribución de espaciamientos a primeros vecinos  $P(s)$  y la varianza de número de estados  $\Sigma^2(L)$  en un intervalo de energía  $L$ . Estas distribuciones se analizan sobre espectros rectificadas, esto es, espectros con densidad media de niveles igual a uno.

Ambas medidas se calculan sobre los espectros correspondientes a los cuatro casos establecidos por las simetrías presentes en el hamiltoniano  $\hat{H}$ . Los espectros obtenidos corresponden a espectros que satisfacen criterios de estabilidad y convergencia, e incluyen niveles suficientemente excitados (límite semiclásico).

La rectificación del espectro se hace con un ajuste polinomial, usando un polinomio de cuarto grado, para después calcular la distribución del espaciamiento de niveles próximos  $P(s)$ . Los resultados se comparan con las siguientes distribuciones:

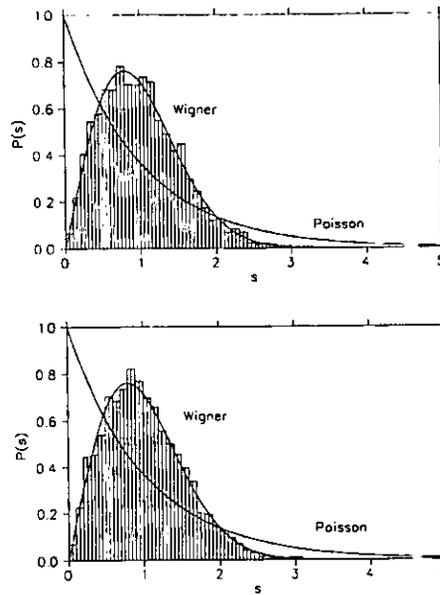
$$P_p(s) = e^{-s}, \quad (3.1)$$

correspondiente a la distribución de Poisson, que describe a una distribución de números aleatorios sin correlaciones, y

$$P_{Wigner}(s) = \left(\frac{\pi}{2}\right) s e^{-\frac{\pi}{4}s^2} \quad (3.2)$$

que es la distribución conocida como "Conjetura de Wigner-Dyson (W-D)", siendo ésta una excelente aproximación al resultado exacto para el caso de sistemas con invariancia temporal (*ensemble ortogonal gaussiano* GOE) [16].

En las figs. 3.1 y 3.2 se muestra que las  $P(s)$  para fermiones y bosones del hamiltoniano  $\hat{H}_F$  coinciden con la distribución de Wigner.



**Figura 3.1.** Distribución de primeros vecinos para (a) fermiones pares y (b) fermiones impares. El número de niveles considerado para ambos espectros es de 3100 estados confiables.

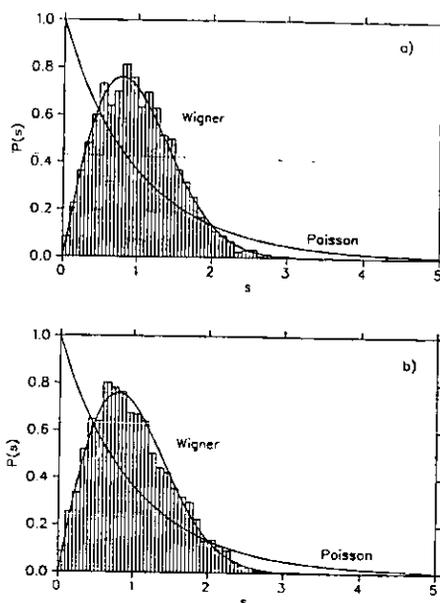


Figura 3.2. Distribución de primeros vecinos para (a) bosones pares y (b) bosones impares. Se utiliza el mismo número de niveles que en la fig 3.1

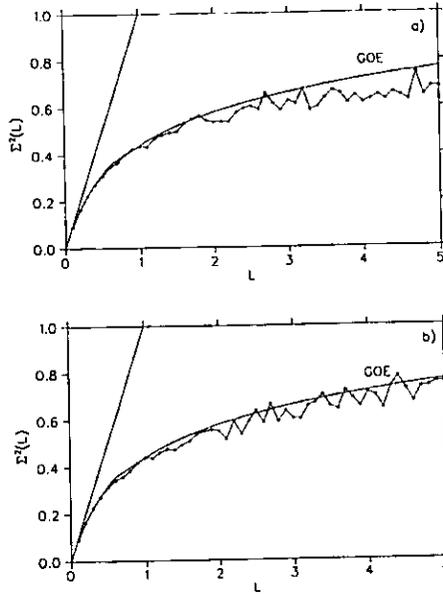
A continuación se presentan las comparaciones entre las  $\Sigma^2(L)$  obtenidas de los espectros de  $\hat{H}_F$  y la correspondiente a un espectro aleatorio:

$$\Sigma_p^2(L) = L, \quad (3.3)$$

y a un GOE:

$$\Sigma_{GOE}^2(L) = \frac{2}{\pi} \left\{ \ln(2\pi L) + \bar{\gamma} + 1 - \frac{\pi^2}{8} \right\} + O\left(\frac{1}{\pi^2 L}\right), \quad (3.4)$$

donde  $\bar{\gamma} = 0.5772\dots$  es la constante de Euler [15]. En esta ecuación los términos de orden  $(\pi^2 L)^{-1}$  se pueden despreciar, para cierto rango de  $L$ , dado que son muy pequeños y considerar sólo los términos restantes [15,16]. La diferencia entre ambas distribuciones nos interesa ya que la primera corresponde a un sistema cuántico con análogo clásico integrable, mientras que la segunda es propia de un sistema con análogo clásico caótico [13].



**Figura 3.3.** La varianza de número ( $\Sigma^2(L)$ ) para (a) fermiones pares y (b) fermiones impares. El número de niveles considerado es de 3200 estados confiables.

Como se observa en la fig. 3.3, los espectros de fermiones pares e impares de  $\hat{H}_F$  siguen las predicciones de la teoría de matrices aleatorias. En la fig. 3.3(a), se nota que la varianza de número de estados para fermiones pares presenta fluctuaciones por debajo de la curva correspondiente al GOE a partir de cierto valor de  $L$ . Este hecho es conocido como saturación, que se relaciona con la órbita más corta del sistema, cuyo período define semiclásicamente una escala típica en el espectro, donde los efectos particulares del sistema (no universales) son apreciables [18,19].

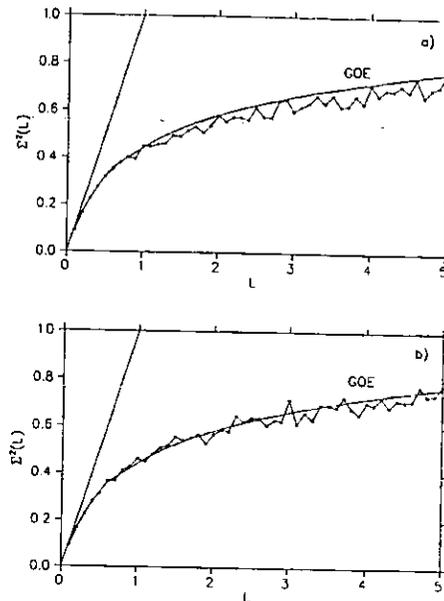


Figura 3.4. La varianza de número  $\Sigma^2(L)$  para (a) bosones pares y (b) bosones impares con el mismo número de niveles que en la fig 3.3.

Para el caso de bosones (fig. 3.4) los resultados obtenidos son similares al caso de fermiones. Entonces, los resultados de la estadística espectral en el hamiltoniano  $\hat{H}_F$  corroboran que el sistema cumple las propiedades estadísticas de los sistemas con contraparte clásica caótica. Para  $\hat{H}_D$ , los resultados son muy parecidos.

### 3.2 Estructura de eigenfunciones individuales en la base $\hat{H}_0$ .

Las siguientes características de las eigenfunciones son interesantes para nuestro estudio: la estructura de eigenfunciones EF, la densidad local de estados LDOS y la distribución del número de ocupación  $n_s$ . De las dos primeras propiedades se pueden calcular, adicionalmente, la razón de participación  $P^+$  y  $\ell_\sigma$ .

En trabajos recientes se han estudiado sistemas atómicos [1] y modelos basados en matrices aleatorias [2], entre otros, investigándose las propiedades antes mencionadas. En el caso de las EF se analiza su forma, así como su posible descripción analítica, buscando compararla con alguna medida similar en el caso clásico. Además, es posible investigar el grado de localización que presentan éstas.

Las bases de partículas independientes  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_{osc}$  se utilizan para representar las EF de  $\hat{H}$ . Las diferencias que presentan las EF permitirán determinar los efectos que produce la interacción  $\hat{V}$ . De esta manera, si la forma de las EF tiende a ser uniforme sin depender de los estados que consideremos, tendremos entonces una señal de equilibrio estadístico, lo cual será de gran importancia en la distribución del número de ocupación (cf. cap. 4).

Primeramente, la estructura de eigenfunciones EF para el hamiltoniano  $\hat{H}$ , en la base  $\hat{H}_0$ , se calcula a partir de

$$|\Psi^t\rangle = \sum_{\kappa} C_{\kappa}^t |\Phi_{\kappa}\rangle, \quad (3.5)$$

donde  $|\Psi\rangle$  y  $|\Phi\rangle$  son las eigenfunciones de  $\hat{H}$  y  $\hat{H}_0$ , respectivamente, y suprimimos el signo  $\mp$  (cf. eqs.(2.15)-(2.19)) ya que nos concentraremos sólo en fermiones con paridad positiva. Los  $C_{\kappa}^t$  son las proyecciones  $\langle \Phi_{\kappa} | \Psi^t \rangle$ .

En las figuras 3.5 y 3.6 se muestran las EF para diferentes estados individuales. Consideramos estados muy excitados para minimizar los efectos cuánticos y así tener mayores posibilidades de encontrar el equilibrio estadístico, como se mencionó anteriormente.

Lo primero que se observa de las figs. 3.5 y 3.6 es que las EF tienen un ancho que, en el caso de la primera figura, es relativamente mayor que en la segunda. Esto es causado por la fuerte deformación inducida por la interacción  $\hat{V}$ .

Por otro lado, las formas tan diferentes que presentan las eigenfunciones individuales, muestran claramente que a nivel individual no se cuenta con la uniformidad que se busca en las EF. Sin embargo, destaca el hecho de que las componentes más importantes de estas EF se concentran alrededor de un mismo valor de energías  $E_{\kappa}^0$  parecido al eigenvalor  $E^t$ ; esto se debe, principalmente, a la elección de  $\hat{H}_0$ .

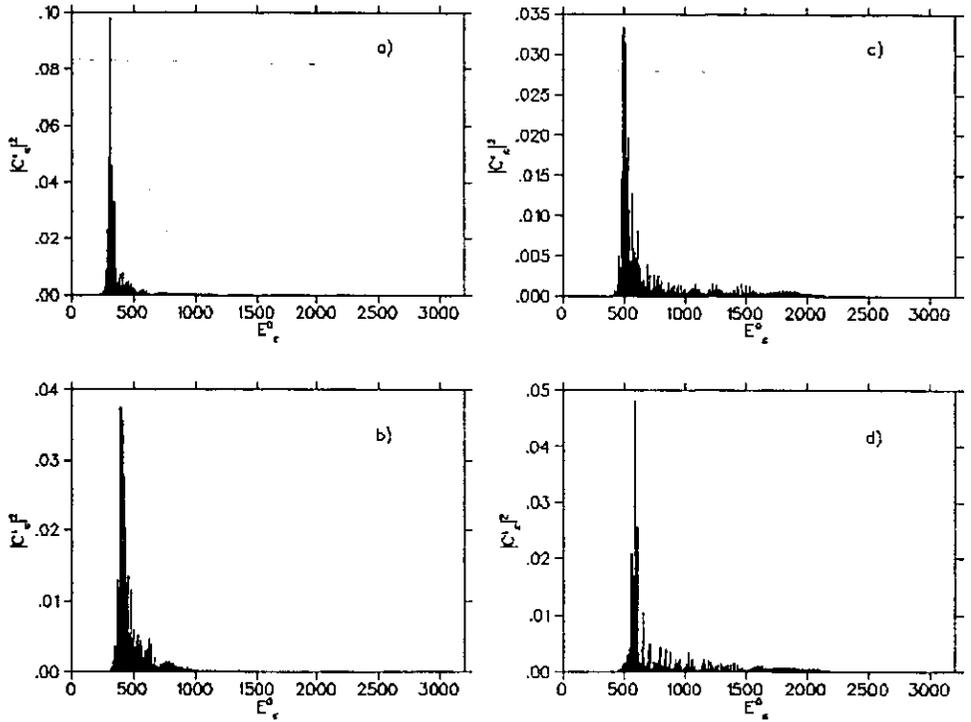


Figura 3.5. Estructura de eigenfunciones (EF) para diferentes estados  $|\Psi^l\rangle$  de  $\hat{H}_F$  con (a)  $l = 200$ , (b)  $l = 300$ , (c)  $l = 400$  y (d)  $l = 500$  para el caso de fermiones pares. La dimensión de la matriz es de  $3200 \times 3200$  y  $E_n^0$  es el espectro de energías de  $\hat{H}_0$

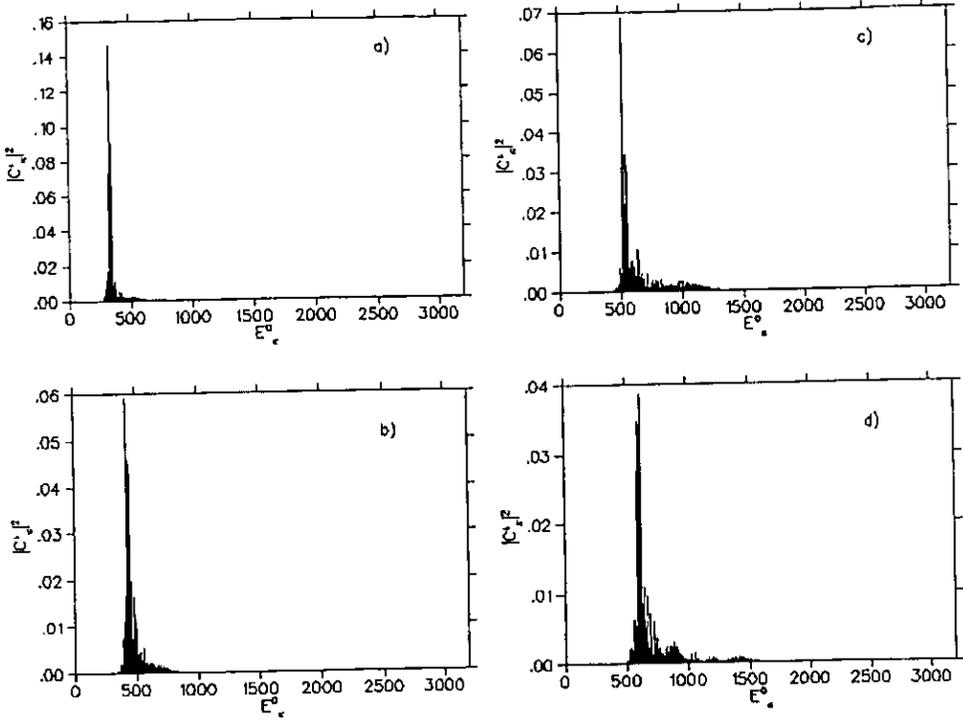


Figura 3.6. Estructura de eigenfunciones (EF) para diferentes estados  $|\Psi^\iota\rangle$  de  $\hat{H}_D$  con (a)  $\iota = 200$ , (b)  $\iota = 300$ , (c)  $\iota = 400$  y (d)  $\iota = 500$  para el caso de fermiones pares. Usamos una matriz con la misma dimensión del caso de la fig. 3.5.

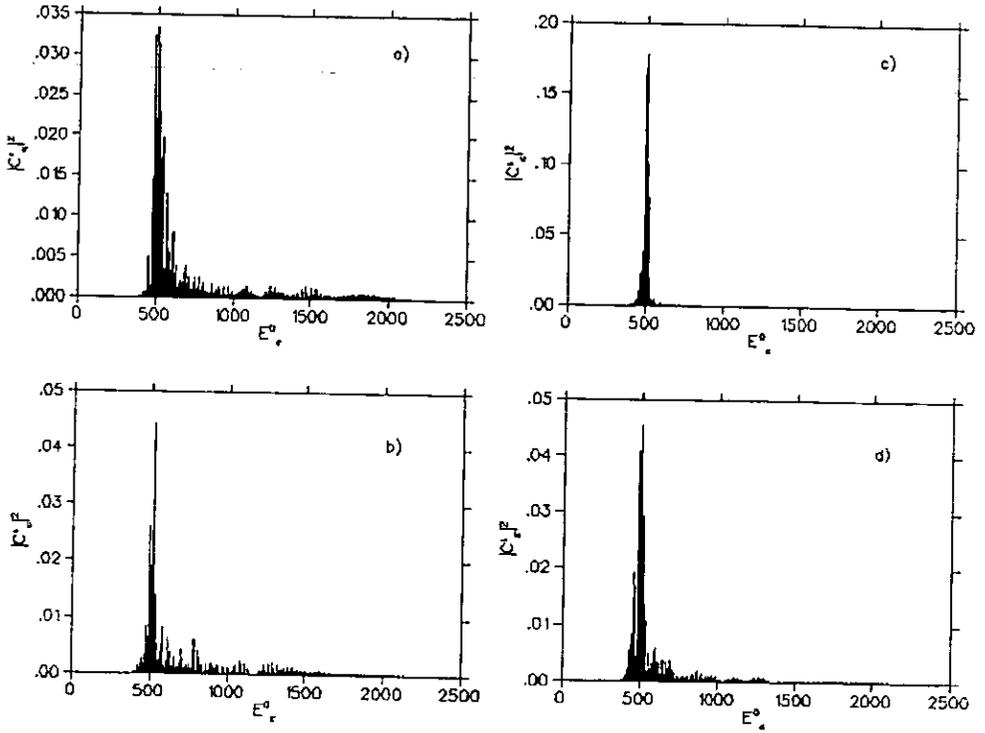


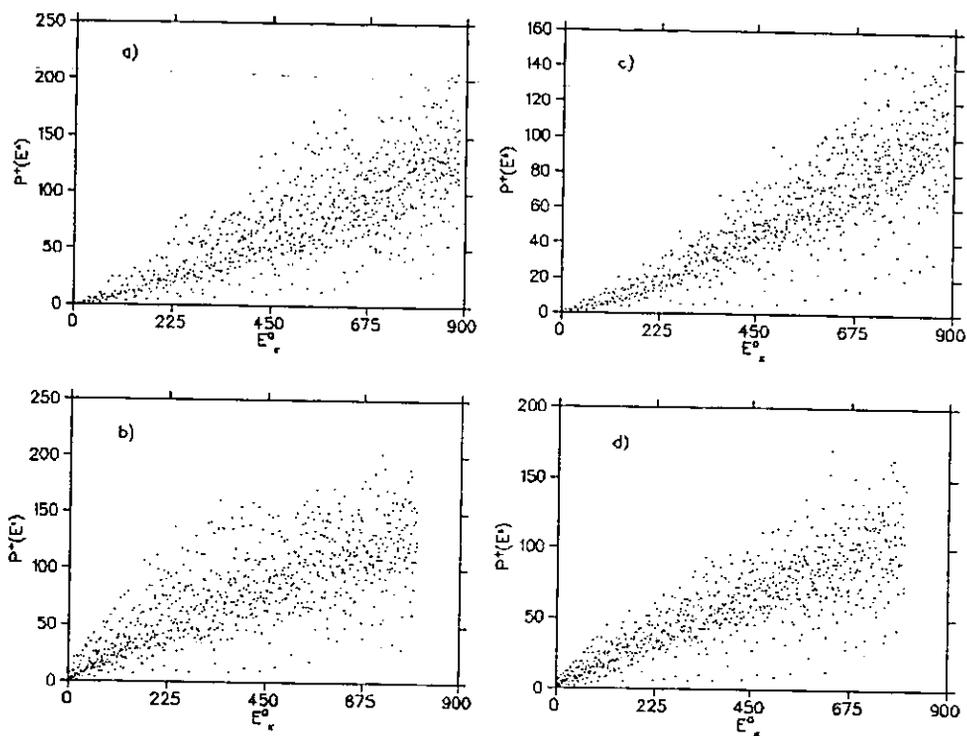
Figura 3.7. Estructura de eigenfunciones para los estados  $|\Psi^l\rangle$  con (a)  $l = 400$ , (b)  $l = 401$ , (c)  $l = 402$  y (d)  $l = 403$ . El hamiltoniano  $\hat{H}_F$  se considera para el caso de fermiones pares.

Un aspecto interesante de los resultados anteriores es la existencia de estados individuales cuyas EF son muy angostas, en comparación a la mayoría de los casos. A los estados que tienen dicha característica se les llama localizados, indicando así que la deformación producida por la interacción  $\hat{V}$  es mínima. En la fig. 3.7 se exhiben las EF para algunos estados consecutivos, notándose que  $|\Psi^{402}\rangle$  es un estado localizado. Además, es posible observar que esta clase de estados son un caso singular dentro de los estados del sistema. Esto marcará una gran diferencia, posteriormente, cuando se obtengan las EF en la base de  $\hat{H}_{osc}$ .

Una medida que permite determinar, de manera sencilla, si existen estados localizados en el sistema es

$$P^+(E^i) = \left\{ \sum_{\kappa} |C_{\kappa}^i|^4 \right\}^{-1}, \quad (3.6)$$

que se conoce como la razón de participación. Esta medida determina el número de componentes principales  $N_{pc}$  de cada eigenfunción  $|\Psi^i\rangle$ . Si para cierto estado tenemos  $N_{pc}$  pequeño lo consideramos como un estado localizado. En la fig. 3.8 se muestra  $P^+(E^i)$  para estados individuales, observándose que ésta crece a medida que se consideran estados más excitados del sistema. El cambio de escala que existe en  $P^+(E^i)$  es producido por la diferencia que existe en la magnitud de  $\hat{V}$  para cada caso, como se indica en el pie de la figura.



**Figura 3.8.** La razón de participación para estados individuales, considerando 800 eigenfunciones confiables de  $\hat{H}$  en la base de  $\hat{H}_0$ . (a) Fermiones pares y (b) bosones pares para  $\hat{H}_F$ , (c) fermiones pares y (d) bosones pares para  $\hat{H}_D$ .

El comportamiento general de la razón de participación es creciente y casi lineal, lo cual establece que el número de componentes principales crece a medida que se consideran estados más excitados. Sin embargo, las fluctuaciones de estado a estado aumentan también, incluyendo algunos donde  $P^+(E^i)$  es muy bajo. Tales casos indican que el  $N_{pc}$  es muy pequeño y por lo tanto se consideran localizados.

Otra medida que se puede calcular con base en la estructura de eigenfunciones es

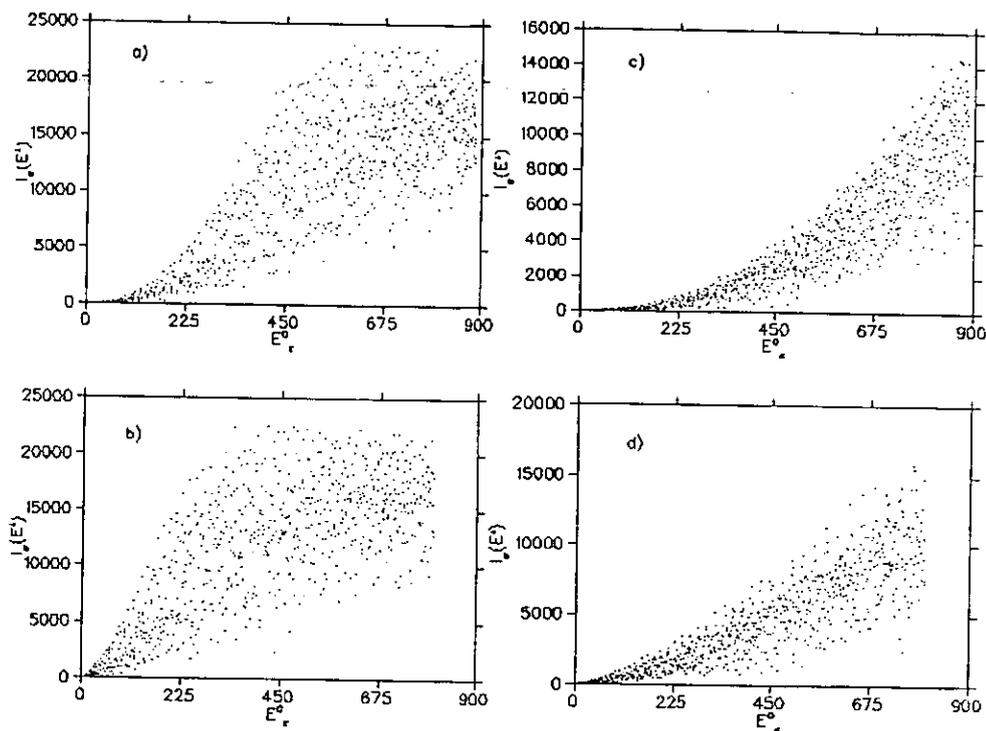
$$\ell_\sigma(E^i) = \sqrt{\sum_{\kappa} |C_{\kappa}^i|^2 (\kappa - n_c)^2}, \quad (3.7)$$

donde

$$n_c = \sum_{\kappa} \kappa |C_{\kappa}^i|^2 \quad (3.8)$$

es el centroide de la EF correspondiente a la eigenfunción  $|\Psi^i\rangle$  sobre la base en que se expresa, en este caso  $\hat{H}_0$ . Los resultados que se obtienen de esta medida para eigenfunciones individuales se presentan en la fig. 3.9. En esta figura se observa que la magnitud de  $\ell_\sigma$  crece a medida que se consideran eigenfunciones más excitadas de  $\hat{H}$ . La causa de este comportamiento general se debe a que los estados  $|\Psi\rangle$  contienen un número mayor de componentes principales en su EF. Sin embargo, el ancho de banda que se nota en todas las gráficas muestra que hay eigenfunciones que tienen una  $\ell_\sigma$  pequeña. Esto, como en el caso de la razón de participación, confirma la existencia de estados localizados.

De los resultados obtenidos para estados individuales  $|\Psi\rangle$  es claro que a partir de las EF no puede considerarse que presenten un equilibrio estadístico. Incluso del cálculo de la razón de partición y de  $\ell_\sigma$  se ve que dichos estados presentan grandes fluctuaciones. Por ello, al buscar evitar estos efectos se procede ahora a estudiar el promedio de estados dentro de un cierto intervalo de energía.



**Figura 3.9.** La longitud  $l_\sigma$  para estados individuales, considerando 800 eigenfunciones confiables de  $\hat{H}$  en la base de  $\hat{H}_0$ . (a) Fermiones pares y (b) bosones pares para  $\hat{H}_F$ , (c) fermiones pares y (d) bosones pares para  $\hat{H}_D$ .

### 3.3 Estructura del promedio de eigenfunciones en la base $\hat{H}_0$ .

Para los promedios se consideran las eigenfunciones que hay dentro de un intervalo de energías ( $E_\kappa^0 - \Delta E, E_\kappa^0 + \Delta E$ ), y se calcula un promedio de los coeficientes de expansión  $C_\kappa^\iota$ . La manera de hacer este promedio es considerando que las eigenfunciones tienen su pico principal cerca de la componente  $E_\kappa^0 \approx E^\iota$ . Después, se busca que el estado promediado reproduzca las características de las eigenfunciones típicas. Por eso, el promedio se define sobre los estados recentrados. Los estados se recentran de tal manera que los picos principales coincidan. Al pico principal del promedio se le asigna la energía del estado no perturbado más cercano a la energía promedio.

La EF de un promedio de eigenfunciones recentradas, llamada también función de ensanchamiento (*spreading function*  $F$ ) se define como

$$F_\kappa^\iota \equiv \overline{|C_\kappa^\iota|^2}, \quad (3.9)$$

donde los coeficientes  $\overline{|C_\kappa^\iota|^2}$  son el promedio de los  $|C_\kappa^\iota|^2$  para cada estado individual, mientras que  $\overline{E^\iota}$  es la energía promedio de las eigenfunciones  $|\Psi^\iota\rangle$  con energía  $E^\iota$  para  $\iota = 1, \dots, n$ . En algunos trabajos, la  $F_\kappa^\iota$  se usa como una función de partición microcanónica para sistemas de pocas partículas [2].

Las siguientes figuras muestran las EF para promedios recentrados de estados  $|\Psi^\iota\rangle$ , en las cuales sólo se consideran fermiones pares.

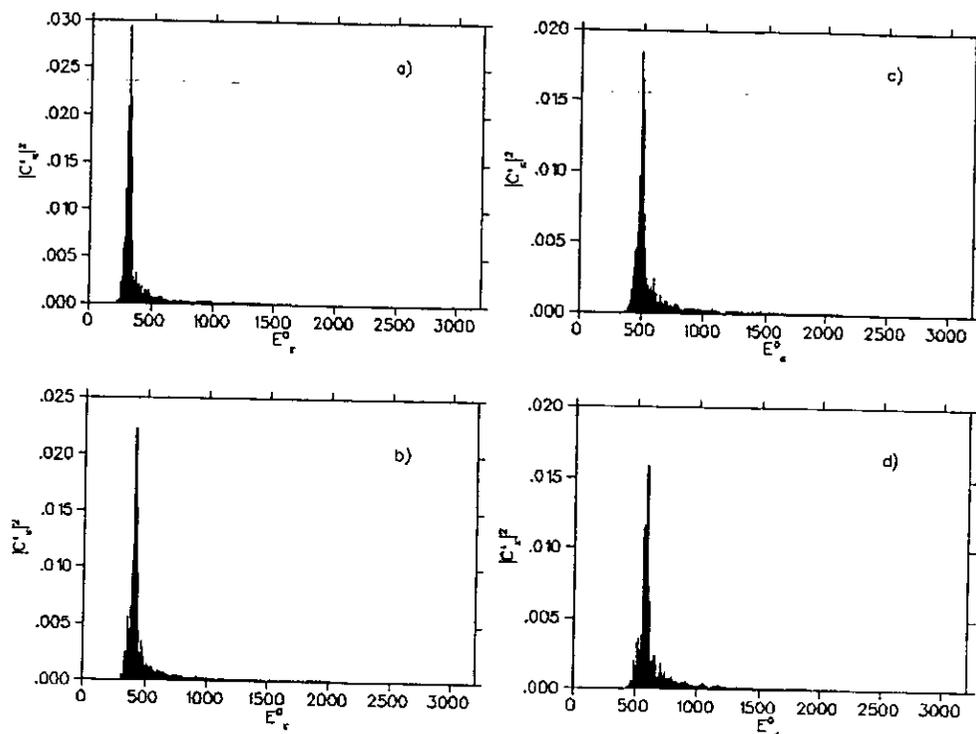
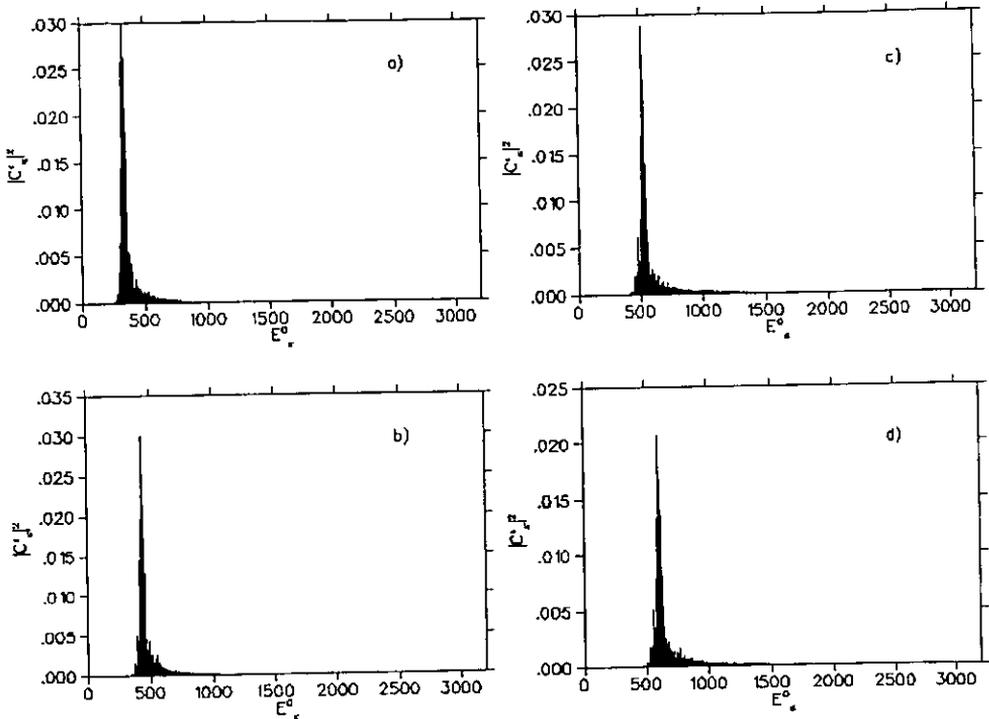


Figura 3.10. Estructura de eigenfunciones para un promedio de 20 estados alrededor de un estado  $|\Psi^\iota\rangle$  con (a)  $\iota = 200$ , (b)  $\iota = 300$ , (c)  $\iota = 400$  y (d)  $\iota = 500$ . El hamiltoniano  $\hat{H}_F$  que se considera es para el caso de fermiones pares.

Las EF para promedios de estados (figs. 3.10 y 3.11) muestran formas similares. Esto establece una diferencia sustancial con respecto a las estructuras de estados individuales (fig. 3.5).



**Figura 3.11.** Estructura de eigenfunciones para un promedio de 20 estados alrededor del estado  $|\Psi^i\rangle$  con (a)  $\iota = 200$ , (b)  $\iota = 300$ , (c)  $\iota = 400$  y (d)  $\iota = 500$ . El hamiltoniano  $\hat{H}_D$  que se considera es para el caso de fermiones pares.

En la fig. 3.12 se confirma lo anterior al utilizar eigenfunciones que tienen aproximadamente la misma energía  $E^i$  pero diferente magnitud en la interacción. Las estructuras de las eigenfunciones para  $\hat{H}_F$  (figs. 3.12 (a) y (c)) tienen la característica de que sus colas son mayores que las obtenidas para  $\hat{H}_D$  (figs. 3.12 (b) y (d)).

El aumento en el ancho de las estructuras y su disminución en magnitud son causados por considerar estados más excitados del espectro, además de su normalización. Sin embargo, destaca el hecho de que las fluctuaciones de las EF para promedios de estados recentrados disminuyen conforme se analizan eigenfunciones con mayor energía,

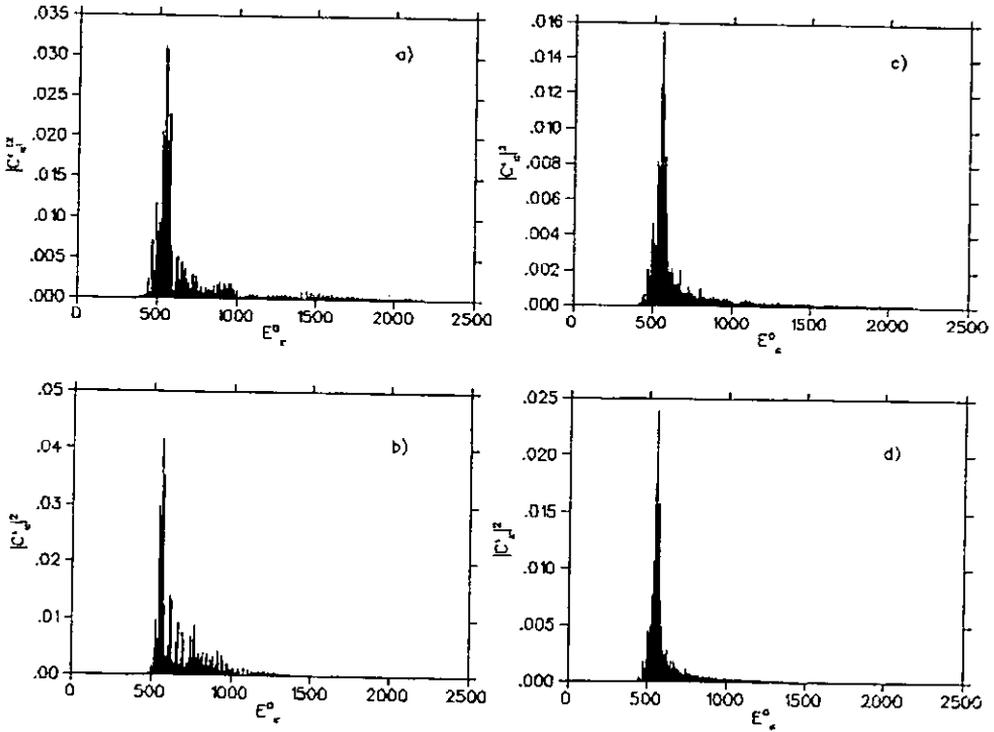
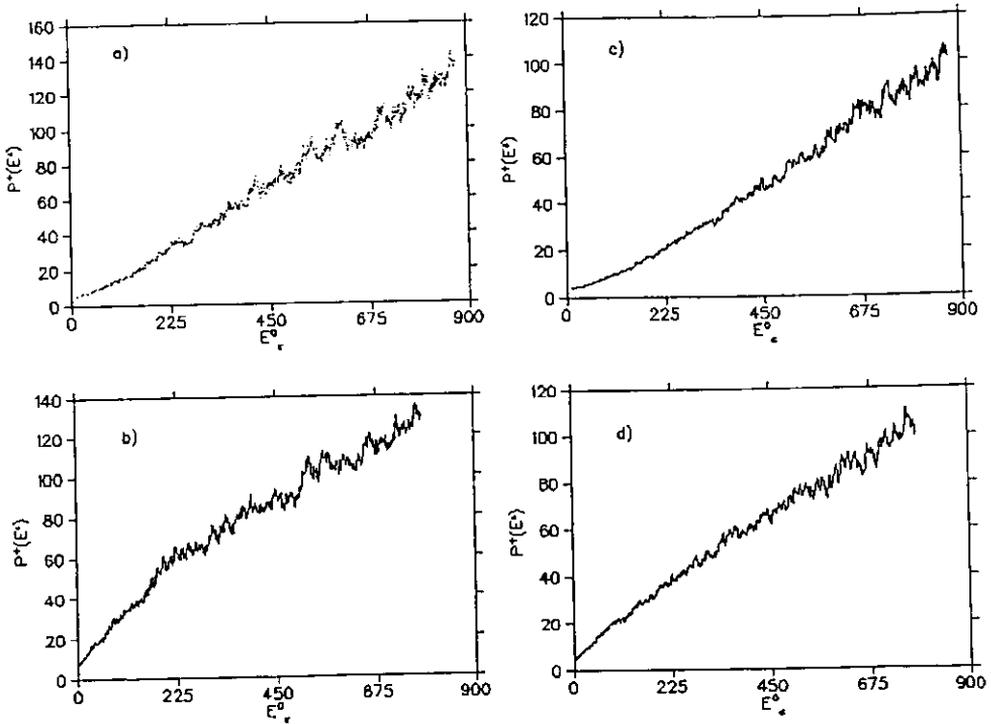


Figura 3.12. EF para estados de fermiones con paridad par y diferente magnitud en su interacción  $\hat{V}$ . Los estados individuales  $|\Psi^l\rangle$  con (a)  $l = 300$  para  $\hat{H}_F$  y (b)  $l = 273$  para  $\hat{H}_D$ . Los promedios de 20 estados son alrededor de los estados con (c)  $l = 300$  y (d)  $l = 273$ .

Una manera de confirmar la anterior aseveración es calcular la  $P^+(E^i)$ , como se hizo en el caso de los estados individuales.



**Figura 3.13.** La razón de participación para promedios sobre intervalos de energía  $\Delta E$  que contienen 20 estados. (a) Fermiones pares y (b) bosones pares para  $\hat{H}_F$ ; (c) fermiones pares y (d) bosones pares para  $\hat{H}_D$ .

En la figura 3.13 se muestran las razones de participación para promedios de estados. En ella se observa que  $P^+(E^i)$  crece a medida que se consideran promedios con estados más excitados, sin embargo, las grandes fluctuaciones que se obtienen para estados individuales (fig. 3.8) ya no aparecen.

El punto sobresaliente de estos resultados es que para eigenfunciones más excitadas del sistema, donde los efectos cuánticos son menos trascendentes, se observa que existe una mayor similitud entre las EF de los estados individuales típicos y los promedios recentrados. Esto nos lleva a considerar que el sistema presenta un equilibrio estadístico según la propuesta al inicio del capítulo, lo cual significa que los estados más excitados de  $\hat{H}$  se acercan al límite semiclásico.

### 3.4 Análisis de EF en términos de funciones de oscilador armónico.

Aquí se analiza la EF de  $|\Psi\rangle$  en términos de la base de osciladores armónicos  $\hat{H}_{osc}$  para comparar los resultados de esta base con la anterior.

El cálculo de la estructura de eigenfunciones en  $\hat{H}_{osc}$  se sigue a través del desarrollo

$$|\Psi^t\rangle = \sum_{k,l} C_{k,l}^t |k, l, \omega\rangle, \quad (3.10)$$

donde  $k$  y  $l$  son los números cuánticos principales de dos osciladores armónicos. En la frecuencia de los osciladores usamos el valor de  $\omega = 8.5$ , que es la frecuencia óptima determinada anteriormente (cap. 2).

Una característica del cálculo en esta base es que existe la posibilidad de que dos (o más) componentes  $C_{k,l}^t$  tengan la misma energía  $E_{k,l}$ . Esto, como se sabe, es causado por la degeneración en los niveles de energía para osciladores armónicos, la cual crece a medida que se consideran estados más excitados. Como consecuencia, el número de componentes de las EF con la misma  $E_{k,l}$  también aumenta, complicando así la representación de las EF en términos de la energía de los estados  $|k, l, \omega\rangle$ . Por esta razón, al calcular la EF de los estados  $|\Psi^t\rangle$  (en la base  $\hat{H}_{osc}$ ) sumaremos todos los coeficientes  $C_{k,l}^t$  con la misma energía  $E_{k,l}$  en una sola componente.

Las siguientes figuras muestran las estructuras de eigenfunciones individuales y promedios recentrados para fermiones pares.

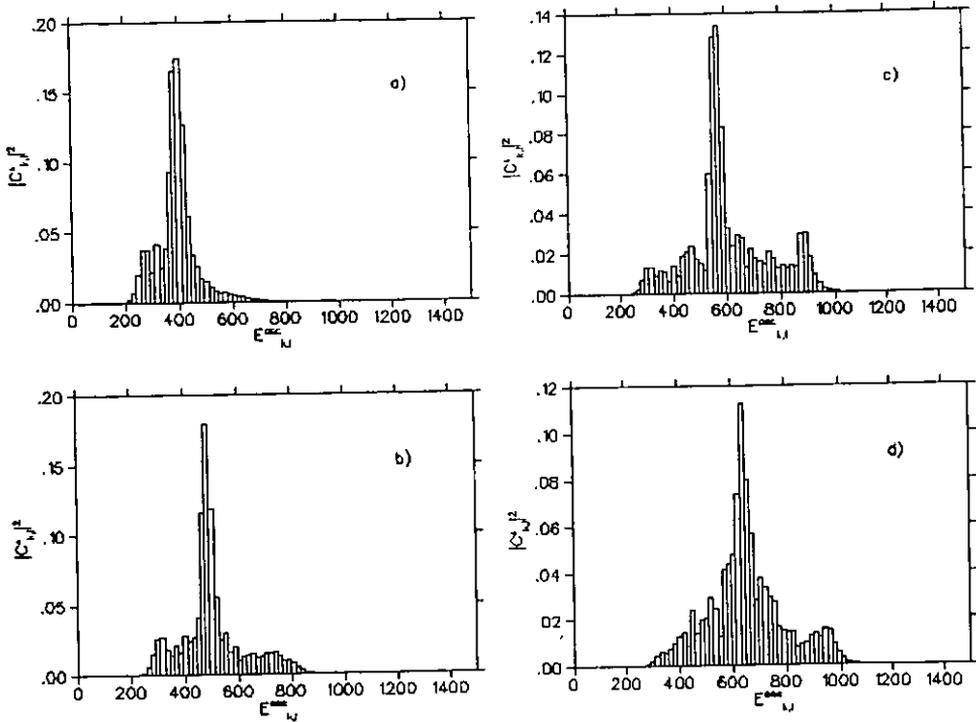


Figura 3.14. Estructura de eigenfunciones individuales de  $\hat{H}$  en base de osciladores armónicos para  $|\Psi^+\rangle$  con (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ . Todas ellas corresponden a  $\hat{H}_F$  y fermiones pares.

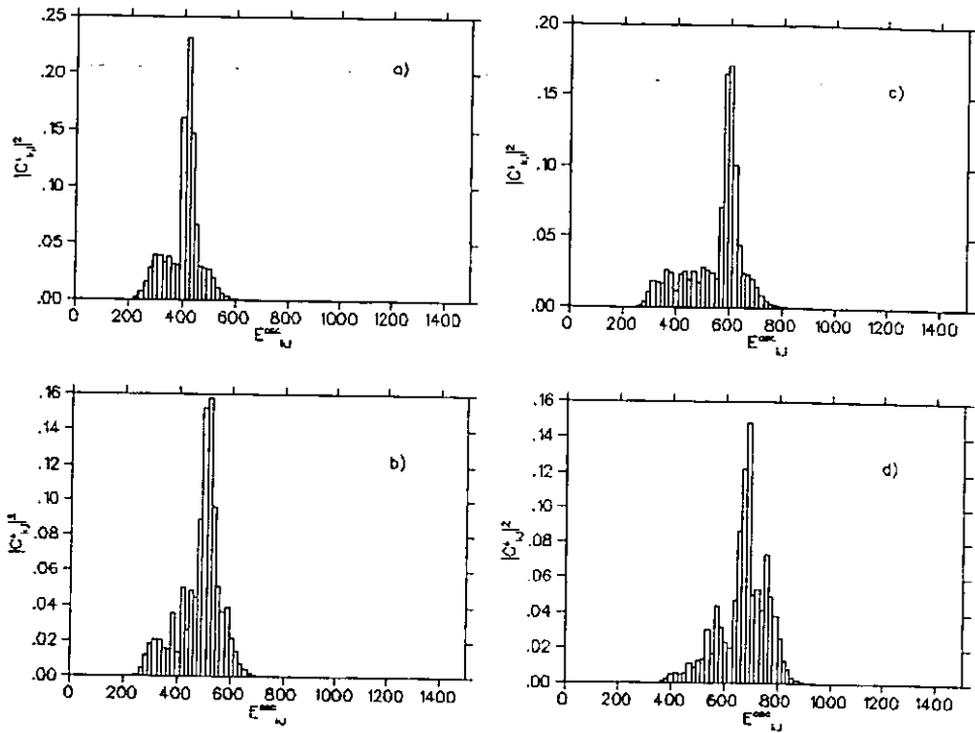


Figura 3.15. Estructura de eigenfunciones individuales de  $\hat{H}$  en base de osciladores armónicos para  $|\Psi^l\rangle$  con (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ . Todas ellas corresponden a  $\hat{H}_D$  y fermiones pares.

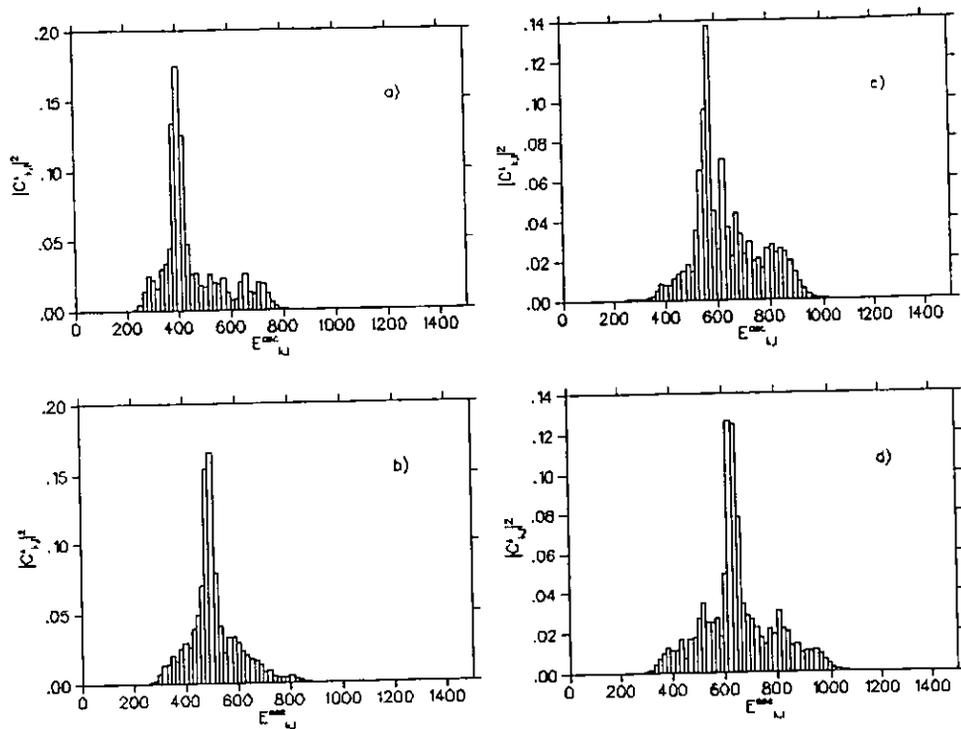


Figura 3.16. Estructura de eigenfunciones de  $\hat{H}$  en base de osciladores armónicos para un promedio de eigenfunciones. El promedio se hace sobre 20 estados alrededor de la eigenfunción  $|\Psi^l\rangle$  con (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ . Como en la fig. 3.14 consideramos  $\hat{H}_F$  y fermiones pares.

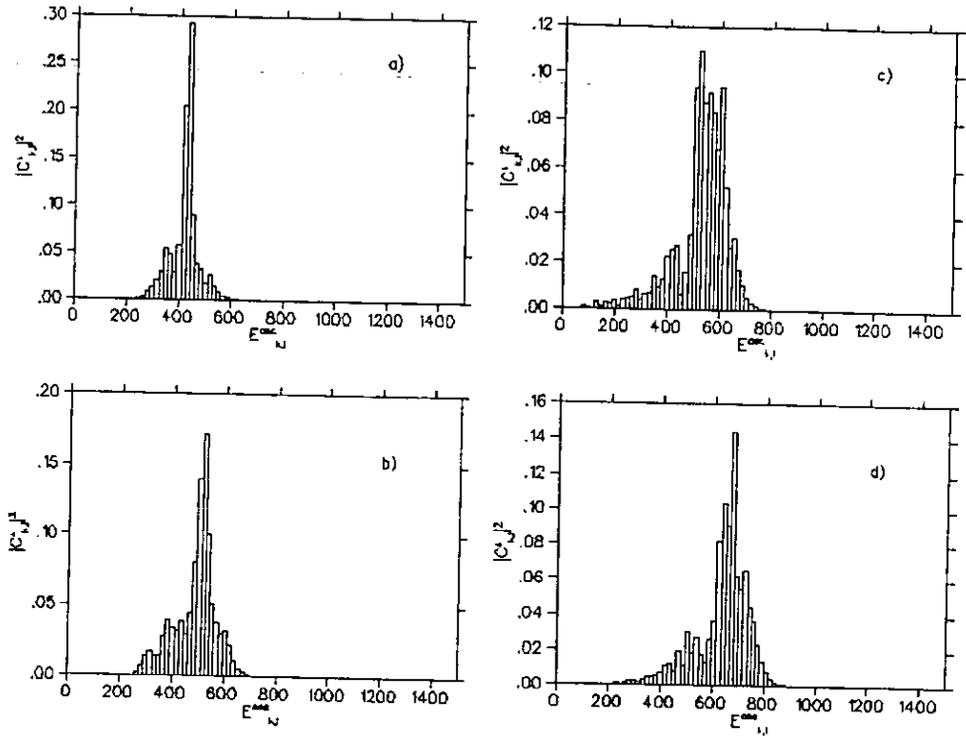


Figura 3.17. Estructura de eigenfunciones de  $\hat{H}$  en base de osciladores armónicos para un promedio de eigenfunciones. El promedio se hace sobre 20 estados alrededor de la eigenfunción  $|\Psi^t\rangle$  con (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ . Como en la fig. 3.15 consideramos  $\hat{H}_F$  y fermiones pares.

Como puede verse de las figs. 3.14 y 3.15, estas EF no presentan mejores características que las calculadas en la base  $\hat{H}_0$  (figs. 3.5 y 3.6). Sin embargo, es claro que el ancho de las EF en la base  $\hat{H}_{osc}$  tiene una relación con la magnitud de la interacción  $\hat{V}$ , situación que también se observó en la base de osciladores cuárticos.

En el caso de las EF para promedios de estados (figs. 3.16 y 3.17) tenemos que las componentes  $C_{k,i}^t$  sufren cambios sustanciales según se considere estados más excitados. Esto

hace que la forma de las EF cambie sensiblemente y exhiba formas bimodales en algunos estados individuales o promedios (figs. 3.14(c) y 3.16(c), respectivamente). Sin embargo, este comportamiento no puede considerarse como el producto de sólo utilizar estados más excitados, sino que también se debe a la suma de los  $C_{k,l}^i$  con la misma energía  $E_{k,l}$  como se mencionó antes.

Para eliminar las peculiares propiedades que resaltan de la degeneración en la base de  $\hat{H}_{osc}$  necesitaríamos promediar sobre un número grande de estados comparada a ésta, lo cual resulta imposible con los 600 estados confiables que tenemos en dicha base.

En la siguiente sección se analizará otro concepto importante que es la densidad local de estados (LDOS) cuyas características dan información sobre el decaimiento y tiempo de vida media de los estados de un sistema.

### 3.5 Densidad local de estados LDOS.

La densidad local de estados (LDOS), conocida en física nuclear como función de intensidad *strength function*, se calcula a través de la función

$$w(E^i) = \sum_{\kappa} |C_{\kappa}^i|^2 \delta(E^i - E_{\kappa}^0), \quad (3.11)$$

donde  $E^i$  y  $E_{\kappa}^0$  son las energías de  $\hat{H}$  y  $\hat{H}_0$ , respectivamente [23]. En esta ecuación, los coeficientes  $C_{\kappa}^i$  se obtienen del desarrollo  $|\Phi_{\kappa}\rangle = \sum_l C_l^{\kappa} |\Psi^l\rangle$ , que resulta ser inverso al realizado para las estructuras de eigenfunciones (ec. 3.5). Entonces, la forma de las LDOS queda determinada por la proyección de los estados del sistema sin interacción  $\hat{H}_0$  sobre los estados de  $\hat{H}$ , es decir,  $C_{\kappa}^i = \langle \Phi_{\kappa} | \Psi^i \rangle$ .

La importancia de la LDOS se basa en dos características: el decaimiento y el tiempo medio de vida de los estados  $|\Phi_{\kappa}\rangle$ . La última se determina a través del ancho de la LDOS, lo cual está relacionada con el número de componentes principales  $N_{pc}$  que presentan los estados de  $\hat{H}_0$  en la base de  $\hat{H}$ .

En las figs. 3.18 y 3.19 se muestran las LDOS de estados individuales  $|\Phi_{\kappa}\rangle$  para fermiones pares. Lo primero que se observa es la mínima contribución que hacen los estados más excitados del hamiltoniano  $\hat{H}$ . Esto, desde luego, está relacionado con el rápido decrecimiento de las componentes  $C_l^{\kappa}$  con respecto a la distancia  $|E_{\kappa}^0 - E^i|$ , de forma similar a lo encontrado en las EF.

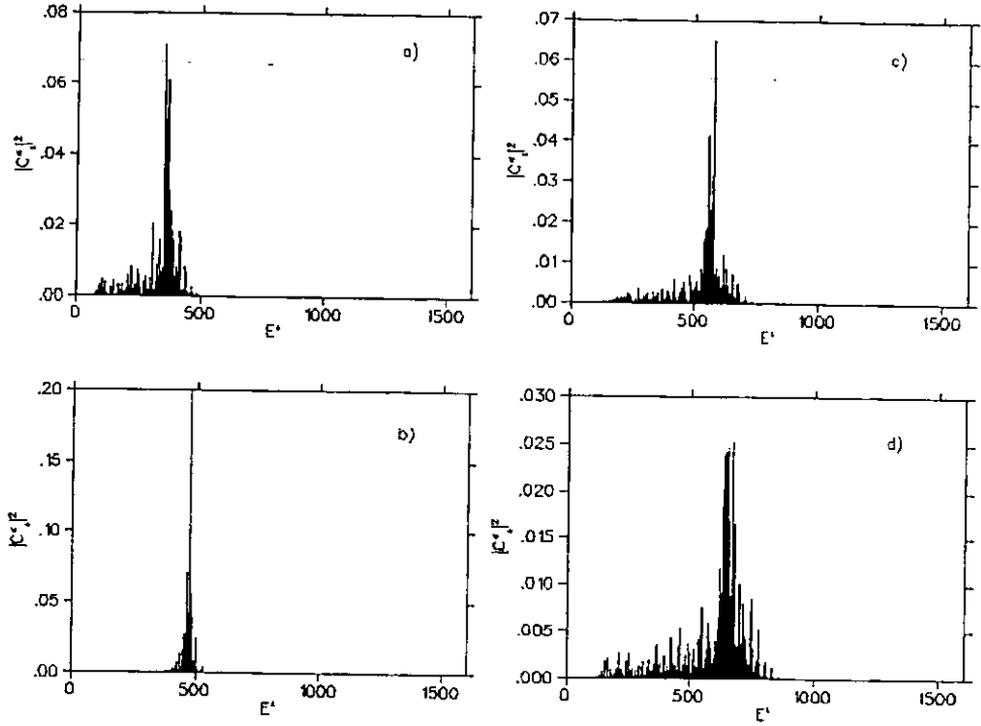
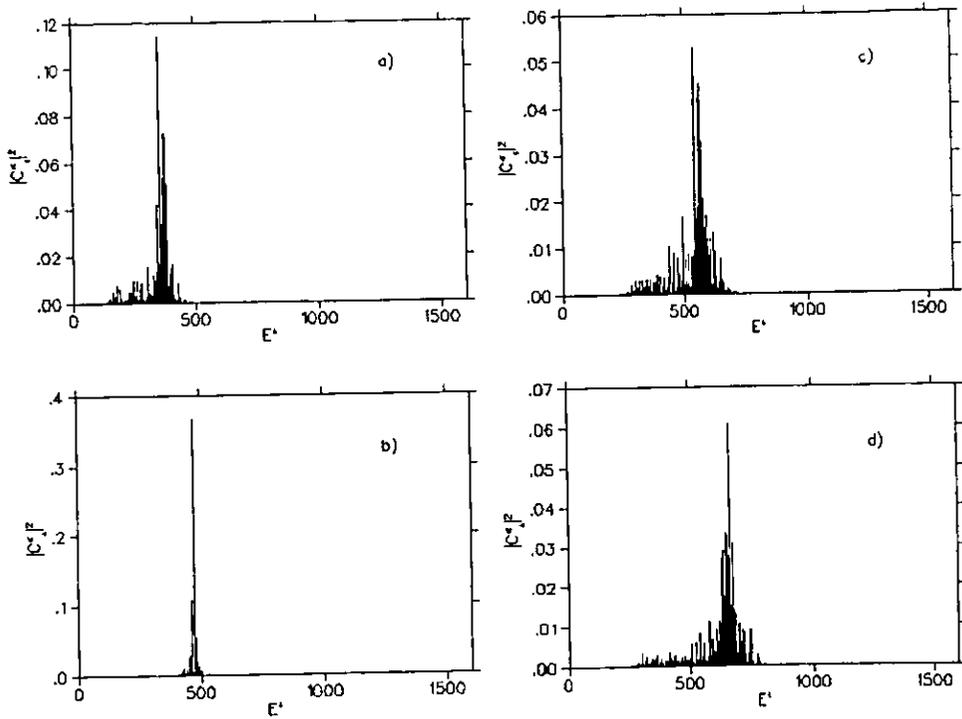
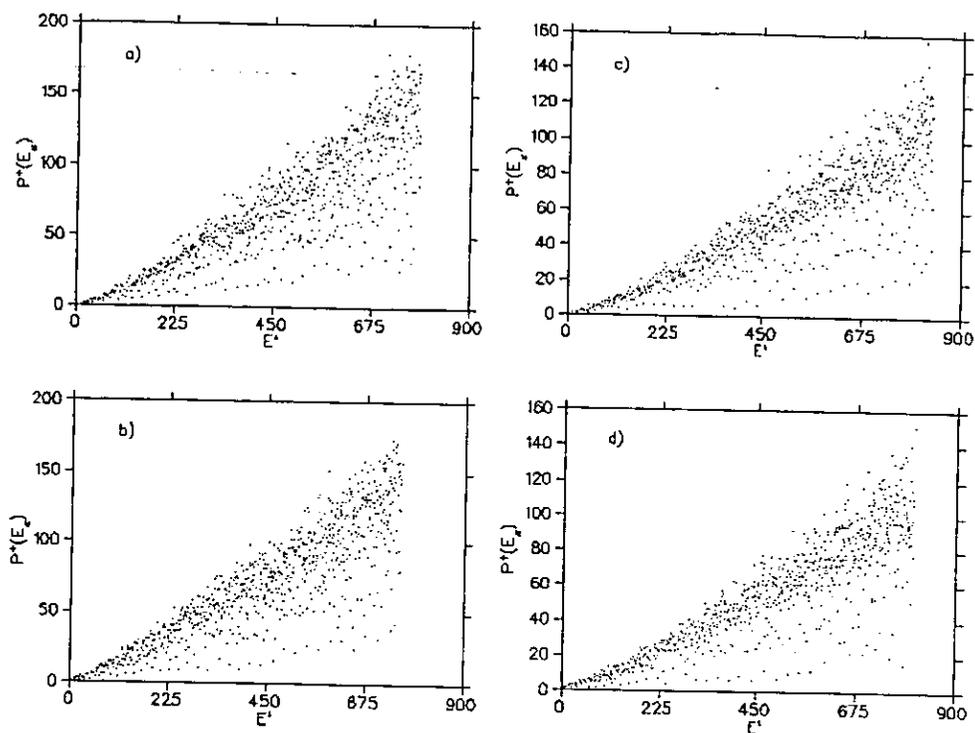


Figura 3.18. Densidad local de estados (LDOS) para diferentes estados de  $\hat{H}_0$ . Se consideran las eigenfunciones individuales  $|\Phi_\kappa\rangle$  de  $\hat{H}_F$  con (a)  $\kappa = 200$ , (b)  $\kappa = 300$ , (c)  $\kappa = 400$  y (d)  $\kappa = 500$  para el caso de fermiones pares. La dimensión de la matriz calculada es de  $3200 \times 3200$  y  $E^*$  es el espectro de energías de  $\hat{H}$ .



**Figura 3.19.** Densidad local de estados (LDOS) para diferentes estados de  $\hat{H}_0$ . Se consideran las eigenfunciones individuales  $|\Phi_\kappa\rangle$  de  $\hat{H}_D$  con (a)  $\kappa = 200$ , (b)  $\kappa = 300$ , (c)  $\kappa = 400$  y (d)  $\kappa = 500$  para el caso de fermiones pares.

Los resultados que se presentan en las figs. 3.18 y 3.19 hacen notar que existen fluctuaciones en la forma de las LDOS para los estados individuales. Incluso, en las figs. 3.18 (b) y 3.19 (b), se tienen dos estados donde el ancho de su densidad local es pequeño con respecto a los demás. Esto nos lleva a realizar el cálculo de la razón de partición  $P^+(E_\kappa^0)$  y  $\ell_\sigma$ , cuyas características son similares a las expuestas para las EF (cf. ec. (3.6)-(3.9)).



**Figura 3.20.** La razón de participación para estados individuales, considerando 800 eigenfunciones confiables de  $\hat{H}_0$ . (a) Fermiones pares y (b) bosones pares para  $\hat{H}_F$ , (c) fermiones pares y (d) bosones pares para  $\hat{H}_D$ .

La fig. 3.20 muestra las  $P^+(E_\kappa^0)$  de los estados  $|\Phi_\kappa\rangle$  en la base de eigenfunciones  $|\Psi^\mu\rangle$ . Aquí se notan claramente las grandes variaciones en el número de componentes principales de estado a estado, incluyendo estados localizados. Sin embargo, el comportamiento general de la razón de participación exhibe un crecimiento a medida que se consideran estados más excitados de  $\hat{H}_0$ , siendo claro que dichos estados contienen un mayor número de componentes en los estados de la base  $\hat{H}$ .

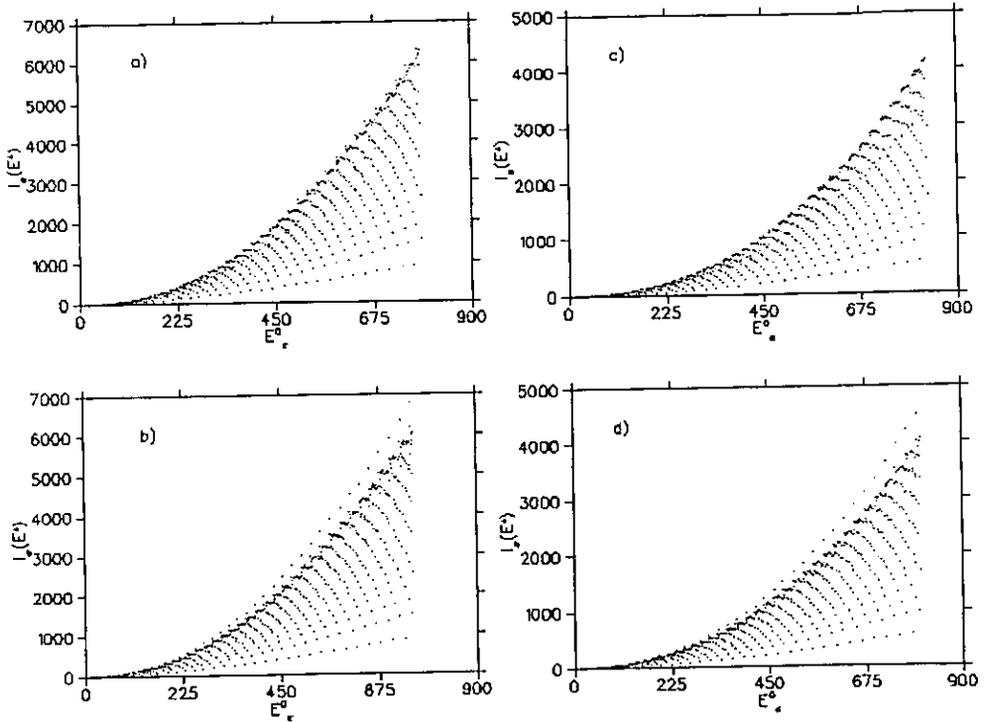


Figura 3.21. La longitud  $l_\sigma$  para estados individuales, considerando 800 eigenfunciones confiables de  $\hat{H}_0$ . (a) Fermiones pares y (b) bosones pares para  $\hat{H}_F$ , (c) fermiones pares y (d) bosones pares para  $\hat{H}_D$ .

La medida  $l_\sigma$  de las eigenfunciones  $|\Phi_\kappa\rangle$  (fig. 3.21) confirma el resultado de la razón de participación, observándose un crecimiento a medida que se consideran estados con mayor energía. La  $l_\sigma$  presenta una estructura bien definida, la cual es producida por la integrabilidad del hamiltoniano  $\hat{H}_0$  (ver cap. 1); este resultado es similar al encontrado en [8].

A continuación se muestra el cálculo de la densidad local de estados sobre promedios de estados.

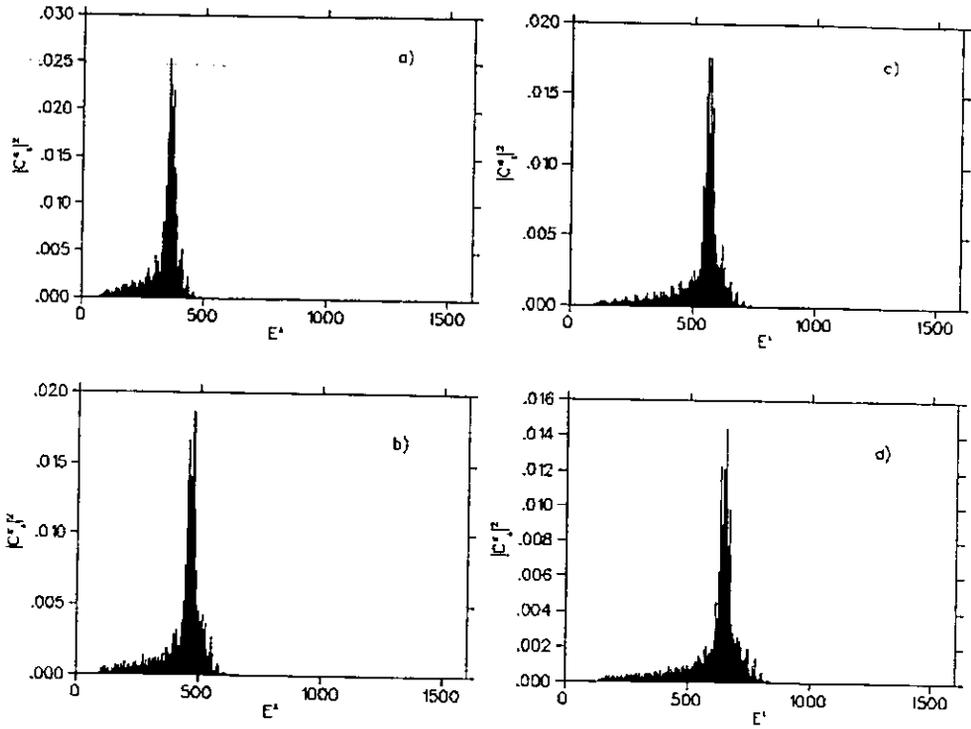


Figura 3.22. Promedio de densidad local de estados para 20 estados alrededor del estado  $|\Phi_{\kappa}\rangle$  con (a)  $\kappa = 200$ , (b)  $\kappa = 300$ , (c)  $\kappa = 400$  y (d)  $\kappa = 500$ . El hamiltoniano  $\hat{H}_0$  considerado es en base de  $\hat{H}_F$  para el caso de fermiones pares.

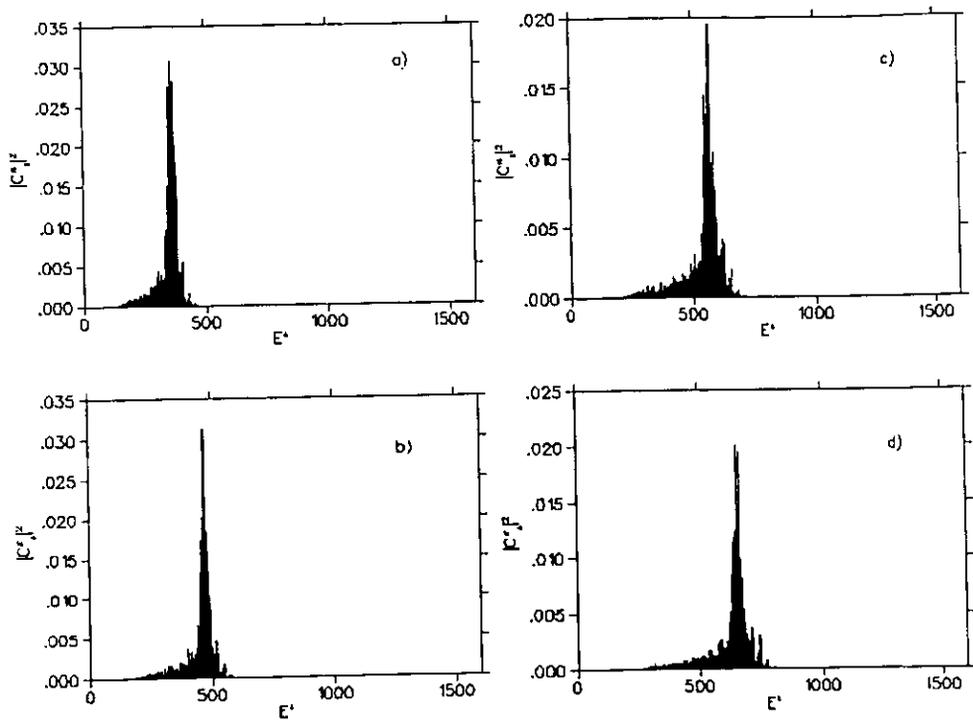


Figura 3.23. Promedio de densidad local de estados para 20 estados alrededor del estado  $|\Phi_\kappa\rangle$  con (a)  $\kappa = 200$ , (b)  $\kappa = 300$ , (c)  $\kappa = 400$  y (d)  $\kappa = 500$ . El hamiltoniano  $\hat{H}_0$  considerado es en base de  $\hat{H}_D$  para el caso de fermiones pares.

Las figs. 3.22 y 3.23 muestran la densidad local sobre promedios de estados. La forma en que se hacen los promedios es similar al realizado para el caso de las EF, es decir, se consideran las eigenfunciones que hay dentro de un intervalo de energías ( $E^t - \Delta E, E^t + \Delta E$ ) y se calcula un promedio de los coeficientes  $C_t^\kappa$ . La LDOS (ec. 3.11) para promedios de estados se puede reescribir de esta forma

$$P^\kappa \equiv F_t^\kappa \rho(E^t), \quad (3.12)$$

donde  $F_t^\kappa = \overline{|C_t^\kappa|^2}$  en forma similar a la EF (ec. 3.9) y  $\rho(E^t)$  es la densidad de estados con energía  $E^t$ , como se establece en [14].

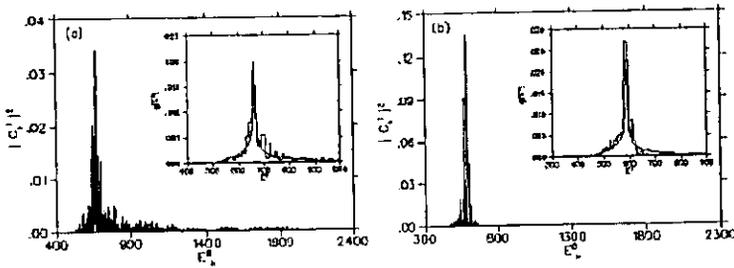
Las figuras anteriores muestran que las formas de las LDOS son muy similares en cuanto se consideran promedios de estados. Ello indica, bajo la definición usada en la sección anterior, que  $\hat{H}_0$  presenta equilibrio estadístico. Dichas formas muestran que sus componentes más importantes están alrededor del estado  $|\Psi^t\rangle$  cuya energía  $E^t \approx E_\kappa^0$ , siendo esta última la energía correspondiente al promedio de estados  $|\Phi_\kappa\rangle$ . Así, el comportamiento de las LDOS es similar al que presentan las EF, lo cual se debe a la relación que existe entre ambas medidas cuando se consideran sus análogos clásicos [3]. Sin embargo, cabe mencionar que el decaimiento en las LDOS es diferente a las EF. Esto es, las componentes  $|C_t^\kappa|^2$  menores al máximo tienen un decaimiento de manera casi exponencial, mientras que las componentes mayores (al máximo) decaen más abruptamente.

Por último, es posible obtener mayor información de la densidad local, por lo cual en la siguiente sección se comparará con una medida análoga del sistema clásico (cf. cap. 1). Esto permitirá investigar la correspondencia que existe entre las LDOS de un sistema cuántico y las medidas análogas en el sistema clásico caótico, en la misma forma que se ha hecho en otra clase de sistemas [11,14,20].

### 3.6 Comparación entre EF y LDOS del sistema cuántico y clásico.

Como se ha mencionado anteriormente, el equilibrio estadístico del sistema cuántico hace posible comparar las propiedades de sus eigenfunciones con las medidas análogas en el sistema clásico (cf. cap 1). Por ello, en seguida se muestran los resultados de dicha comparación. Cabe mencionar que los resultados clásicos que se presentan en las siguientes figuras fueron realizados por el Dr. Luis Benet.

La fig. 3.24 muestra la estructura de eigenfunciones para un estado típico de  $\hat{H}$  y de un estado localizado. En los recuadros respectivos están las comparaciones con la EF clásica.



**Figura 3.24.** Estructura de eigenfunciones para los estados  $|\Psi^\iota\rangle$  de  $\hat{H}_F$  con (a)  $\iota = 620$  y (b)  $\iota = 515$ . En los recuadros se muestran las comparaciones con los resultados clásicos.

La fig. 3.25 exhibe la EF para un promedio de estados alrededor del estado considerado en la fig. 3.24(a), mientras que en la fig. 3.25(b) se muestra la densidad local de estados para un promedio de estados correspondiente a  $\hat{H}_0$ ; nuevamente los recuadros muestran la comparación entre los resultados cuánticos y clásicos.

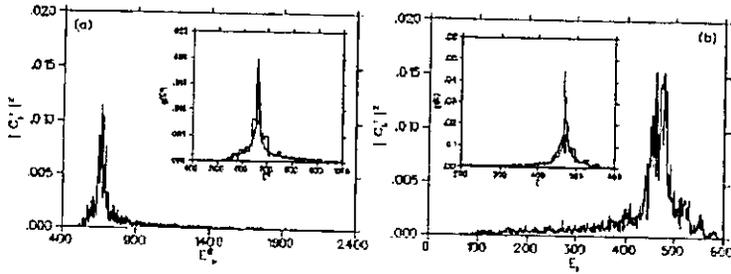


Figura 3.25. (a) Estructura de eigenfunciones para un promedio de 21 estados alrededor del estado  $|\Psi^l\rangle$  de  $\hat{H}_F$  con  $\iota = 620$  y (b) la densidad local de estados para un promedio de 21 estados alrededor del estado  $|\Phi_\kappa\rangle$  con  $\kappa = 300$ . En los recuadros se muestran las comparaciones con los resultados clásicos.

Los resultados muestran la excelente concordancia entre las propiedades de las eigenfunciones y los análogos clásicos.

En el siguiente capítulo se estudiarán las distribuciones del número de ocupación  $n_s$  para las eigenfunciones  $|\Psi^l\rangle$  de  $\hat{H}$  en las bases de partícula independiente  $\hat{H}_0$  y  $\hat{H}_{osc}$ .

## Capítulo 4

### DISTRIBUCIÓN DEL NÚMERO DE OCUPACIÓN.

---

Una propiedad importante en los sistemas cuánticos de  $N$  cuerpos en la base de partícula independiente es el número de ocupación, con el cual se determina la manera en que los estados de una partícula contribuyen a la formación de los estados del sistema. Esto, en sistemas de  $N$  partículas, permite calcular otras propiedades relacionadas con operadores de una partícula [2].

En la mecánica cuántica estadística se conocen distribuciones del número de ocupación  $n_s$  en sistemas cuyo número de partículas es muy grande ( $N \gg 1$ ), las cuales son indistinguibles y que no interactúan entre ellas. Desde luego, también es posible realizar el cálculo de esta distribución en sistemas donde las partículas interactúan, aunque esto puede presentar ciertas dificultades [21]. En el caso de nuestro sistema, el desarrollo de los estados de  $\hat{H}$  en una base de partícula independiente,  $\hat{H}_0$  ó  $\hat{H}_{osc}$ , permite el cálculo de la  $n_s$ , tal como se ha hecho en otra clase de sistemas [1-5,20]. Una consecuencia de este método es la relación que se establece entre EF y  $\hat{n}_s$ . Así, si el sistema presenta equilibrio estadístico es posible que la  $n_s$  muestre un comportamiento genérico. De esta manera, la distribución del número de ocupación confirma si el sistema está en equilibrio.

Por otro lado, el equilibrio estadístico del sistema permite calcular un coeficiente similar al de Boltzmann  $\beta_B$  asociado a  $n_s$  y, de esta forma, interpretar a los sistemas de pocas partículas con interacción de manera similar a como se hace en la termodinámica.

En este capítulo se calcularán los números de ocupación para los estados  $|\Psi\rangle$  del hamiltoniano  $\hat{H}$ . Esto llevará a determinar una función de distribución relacionada con el número de ocupación para fermiones pares, mostrando las dos magnitudes de interacción  $\hat{V}$  que se

han usado desde el inicio. Los casos restantes (fermiones impares y bosones pares e impares) muestran características similares.

La determinación de una forma genérica en la distribución del número de ocupación llevará a corroborar el equilibrio estadístico en el sistema cuántico (cap. 3). Además, se calculará el "coeficiente de Boltzmann"  $\beta_B$  para las distribuciones de los números de ocupación.

#### 4.1 Distribución de $n_s$ en la base de $\hat{H}_0$ .

El valor esperado del operador del número de ocupación

$$\hat{n}_s = \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s, \quad (4.1)$$

determina el número de partículas que se encuentran en el nivel de energía  $s$  de  $\hat{h}^s$ .

Como veremos, es fácil calcular la distribución de los números de ocupación  $n_s$  para los eigenestados de  $H$  en términos de una base de partícula independiente. En seguida se calcularán las  $n_s$  de las eigenfunciones  $\{\Psi^i\}$  en términos de la base de osciladores cuánticos  $\hat{H}_0$ .

Primero, recordemos que las ecuaciones de Schrödinger para  $\hat{H}_0$  y  $\hat{h}^{(i)}$  son

$$\hat{H}_0 |\Phi_\kappa\rangle = E_\kappa^0 |\Phi_\kappa\rangle \quad (4.2)$$

y

$$\hat{h}^{(i)} |\varphi_\zeta\rangle = \epsilon_\zeta^{(i)} |\varphi_\zeta\rangle, \quad (4.3)$$

respectivamente.

Así, las eigenfunciones de  $\hat{H}_0$  pueden expresarse como

$$|\Phi_\kappa\rangle = |\varphi_\nu\rangle \otimes |\varphi_\mu\rangle, \quad (4.4)$$

donde  $\mu$  y  $\nu$  son índices que establecen unívocamente cuáles eigenfunciones de una partícula forman al estado  $|\Phi_\kappa\rangle$ . Si recordamos que  $\hat{H}_0 = \hat{h}^{(1)} + \hat{h}^{(2)}$  tenemos entonces

$$\hat{H}_0 \{|\varphi_\nu\rangle \otimes |\varphi_\mu\rangle\} = \{\epsilon_\nu + \epsilon_\mu\} \{|\varphi_\nu\rangle \otimes |\varphi_\mu\rangle\}, \quad (4.5)$$

dando lugar a

$$E_\kappa^0 = \epsilon_\nu + \epsilon_\mu, \quad (4.6)$$

por lo cual el índice puede representarse por el par  $(\mu, \nu)$ . Es importante aclarar que en las ecs. (4.4)-(4.6) ya no utilizamos el superíndice  $i$  para las energías  $\epsilon$  y las eigenfunciones  $|\varphi\rangle$ , dado que las partículas son indistinguibles en el hamiltoniano  $\hat{H}_0$  (ver caps. 1 y 2).

La distribución del número de ocupación para el estado  $|\Psi^t\rangle$  se expresa como

$$n_s^t = \langle \Psi^t | \hat{n}_s | \Psi^t \rangle = \sum_{\kappa} |C_{\kappa}^t|^2 n_s^{\kappa}, \quad (4.7)$$

donde  $n_s^{\kappa} = \langle \Phi_{\kappa} | \hat{n}_s | \Phi_{\kappa} \rangle$ . Si se sustituyen las eigenfunciones  $|\Phi_{\kappa}\rangle$  por las correspondientes a una partícula  $|\varphi\rangle$  (usando la ec. 4.4), se obtiene la siguiente expresión:

$$n_s^t = \sum_{\mu, \nu} |C_{\kappa}^t|^2 \{ \langle \varphi_{\nu} | \otimes \langle \varphi_{\mu} | \} | \hat{a}_s^{\dagger} \hat{a}_s | \{ | \varphi_{\nu} \rangle \otimes | \varphi_{\mu} \rangle \}. \quad (4.8)$$

El subíndice  $s$  se refiere a un estado particular del hamiltoniano  $\hat{h}$  y los productos  $\langle \varphi_{\nu} | \hat{a}_s^{\dagger} \hat{a}_s | \varphi_{\mu} \rangle$  (cf.ec. 4.8) son igual a uno o cero, si las eigenfunciones corresponden a partículas Fermi-Dirac; y dos, uno o cero para partículas de Bose-Einstein. Además, aquí se nota la importancia de la EF (en relación a los coeficientes  $|C_{\kappa}^t|^2$ ), dado que influirá de manera importante en las  $n_s$ .

Por otro lado, la distribución del número de ocupación cumple con las condiciones

$$\sum_s n_s^{\kappa} = 2 \quad (4.9)$$

y

$$\sum_s \epsilon_s n_s^{\kappa} = \langle \Psi^t | \hat{n}_s | \Psi^t \rangle \approx E^t. \quad (4.10)$$

La primera condición asegura que la suma de todos los valores de  $n_s$  deben ser igual al número de partículas que contiene el sistema, mientras que la segunda establece que la suma de energías de una partícula es aproximadamente igual a la energía del estado  $|\Psi^t\rangle$ , como expresan las ecs. (5.4.6-7) en [21].

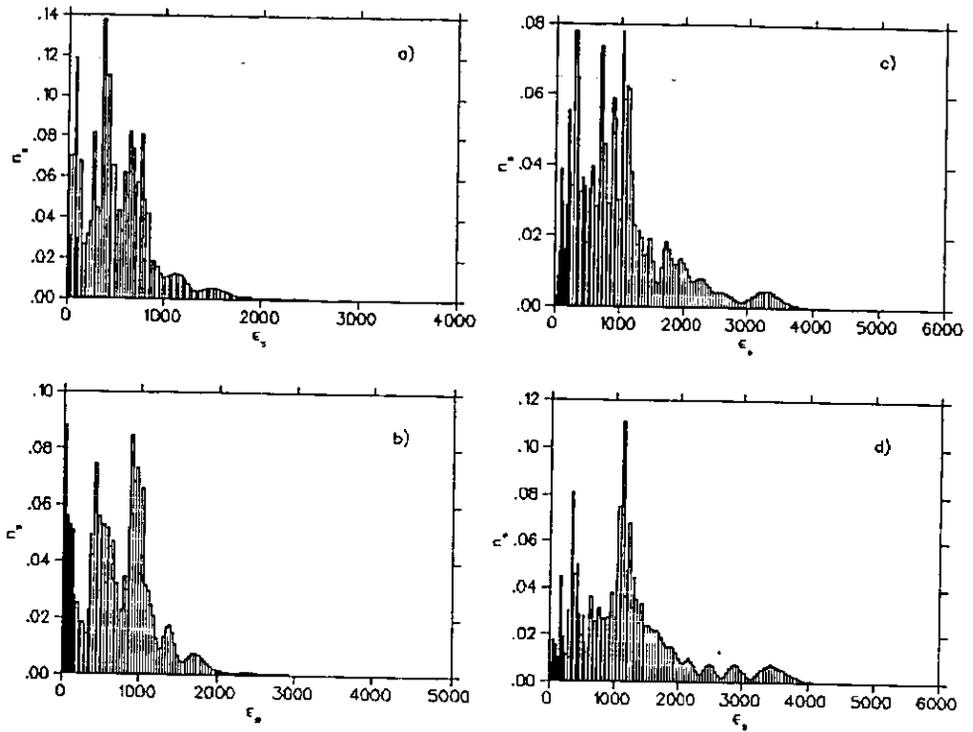


Figura 4.1. Distribución del número de ocupación para los estados  $|\Psi^l\rangle$  de  $\hat{H}_F$  con (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ .

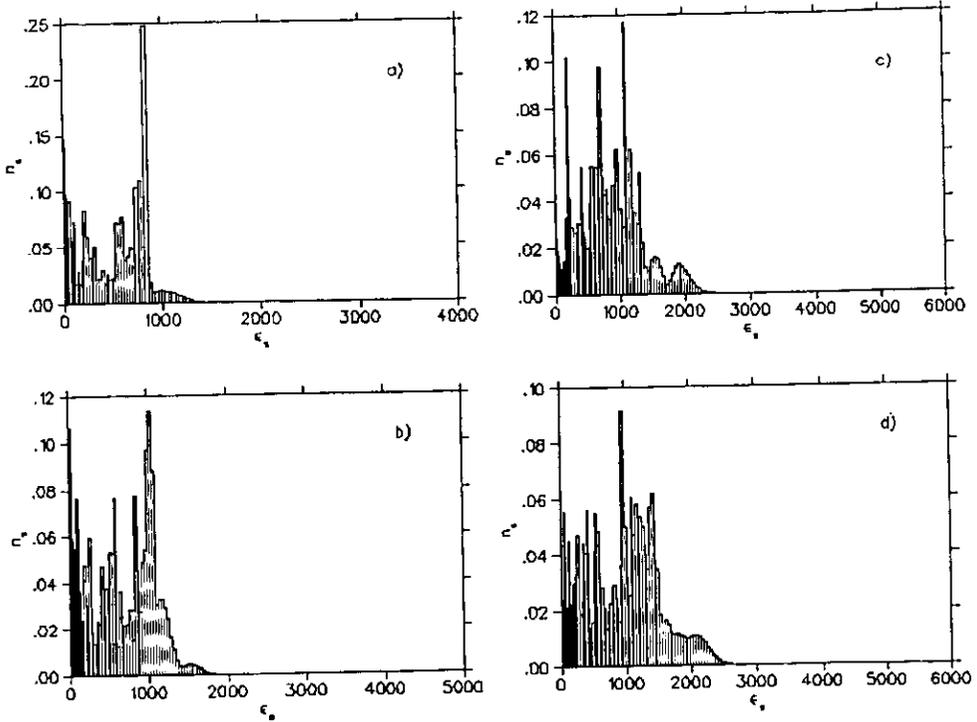


Figura 4.2. Distribución del número de ocupación para los estados  $|\Psi^t\rangle$  de  $\hat{H}_D$  con (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ .

Las figs. 4.1 y 4.2 muestran los valores de  $n_s^t$  para estados individuales  $|\Psi^t\rangle$  de  $\hat{H}_F$  y  $\hat{H}_D$ , respectivamente. En la forma de dichas distribuciones destacan dos características. Por un lado, los estados  $|\varphi_s\rangle$  con energías  $\epsilon_s$  muy bajas contribuyen en forma sustancial a la  $n_s$ . En cambio, la participación de los estados  $|\varphi_s\rangle$  muy excitados decae abruptamente, indicando que éstos contribuyen poco en los estados de dos partículas. Sin embargo, existen fluctuaciones que dificultan determinar una forma genérica, mostrando así la estrecha

relación entre  $n_s$  y EF (ecs. 4.7 y 4.8). En consecuencia, será más apropiado analizar promedios sobre varios estados de las  $n_s$  utilizando un criterio semejante al usado para las EF (cap. 3).

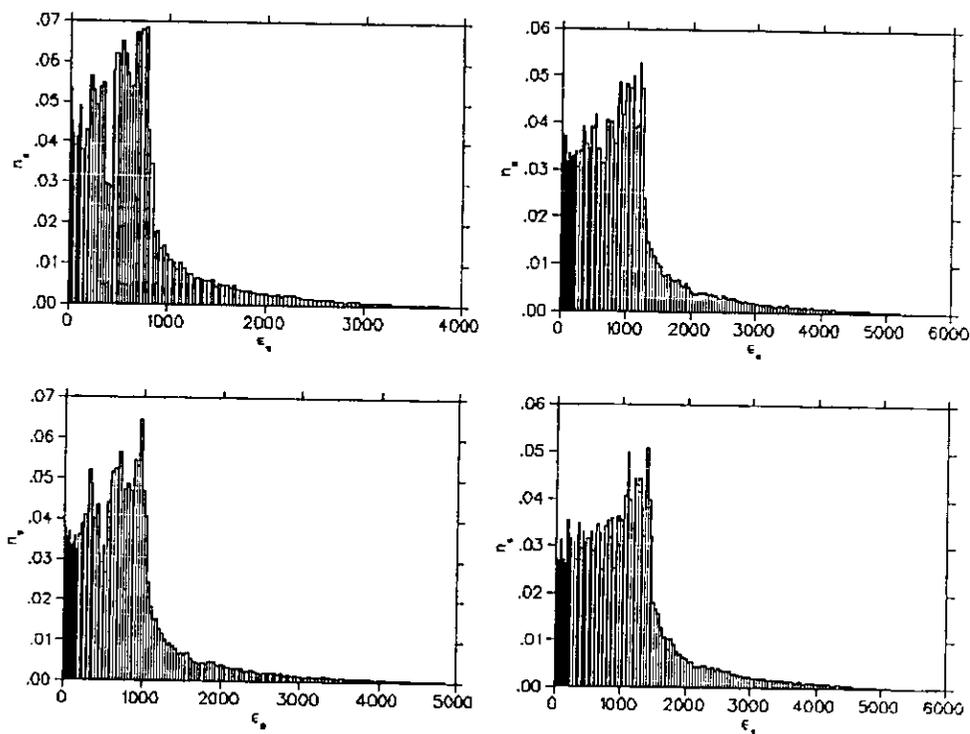


Figura 4.3. Distribución del número de ocupación para promedios de 20 estados  $|\psi^l\rangle$  de  $\hat{H}_F$  alrededor de (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ .

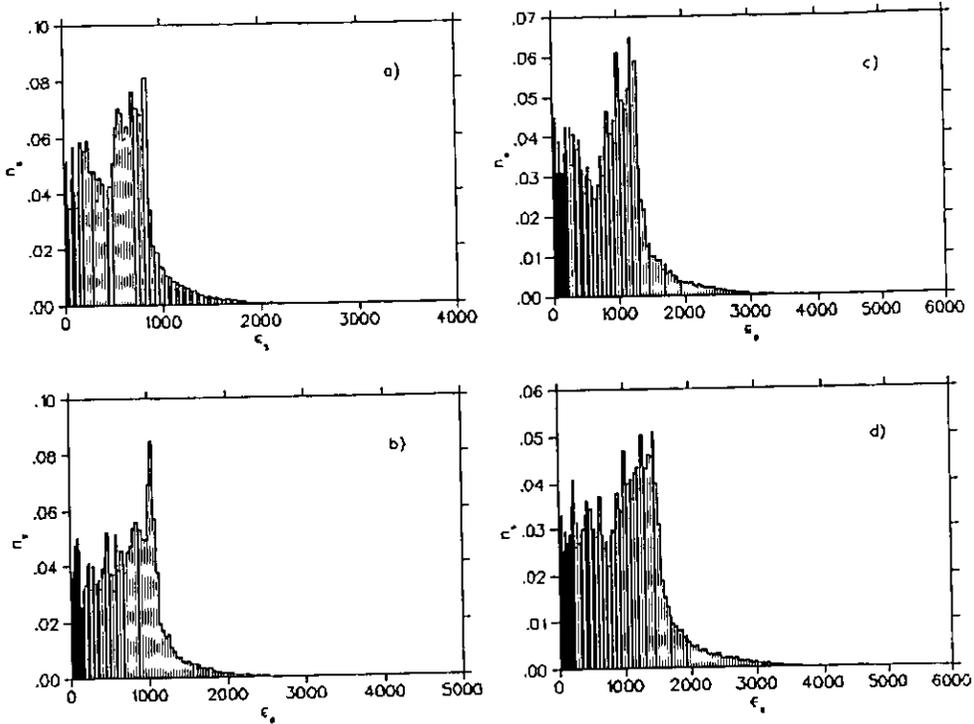


Figura 4.4. Distribución del número de ocupación para promedios de 20 estados  $|\Psi^l\rangle$   $\hat{H}_D$  alrededor de (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ .

Las figs. 4.3 y 4.4 muestran  $n_s$  para algunos promedios de 20 estados de  $\hat{H}_F$  y  $\hat{H}_D$ , observándose que la forma de las distribuciones no son exactamente iguales. Sin embargo, la forma de estas distribuciones tiene claramente definidas dos zonas. Éstas quedan determinadas a través del estado de una partícula cuyo número de ocupación es el máximo en la distribución que denotaremos con  $n_*$ .

La primera zona incluye las componentes de la  $n_s$  cuya  $\epsilon_s$  es menor a la energía del máximo  $n_*$ . Esta energía es sumamente importante ya que sumada a la correspondiente al estado base  $\epsilon_0$ , da como resultado la energía de la componente más importante en la EF del promedio de estados que se considera. La manera de comprobar esto es calculando la  $n_s^i$  de un estado localizado  $|\Psi^i\rangle$ , por ejemplo, usando el estado localizado (fig. 4.5(a)) se tiene que la  $n_s$  correspondiente (fig. 4.5(c)) tiene las componentes más importantes alrededor de  $\epsilon_s=0$  y  $\epsilon_s=46$ . Así, tenemos que

$$\epsilon_{s=0}n_{s=0}^{i=402} + \epsilon_{s=46}n_{s=46}^{i=402} = E_{\kappa=331}^0,$$

donde la energía  $E_{\kappa=331}^0$  corresponde a la componente principal del estado  $|\Psi^{i=402}\rangle$  en la base  $\hat{H}_0$ . Si, por otro lado, se considera la EF de un promedio alrededor de este estado (fig. 4.5(b)) se nota que esta distribución (fig. 4.5(d)) tiene el mismo máximo que en el caso del estado localizado. De esta manera, recordando que las componentes principales de la EF para cualquier estado  $|\Psi^i\rangle$  (individual o promedio) están centradas sobre la  $E_{\kappa}^0 \approx E^i$ , se confirma que el máximo  $n_s^i$  es una característica importante en la distribución del número de ocupación. Así, el promedio de estados  $|\Psi^i\rangle$ , con  $E^i \gg E^{i=0}$ , definen una forma genérica para las  $n_s^i$ ; tal como sucedió para las EF.

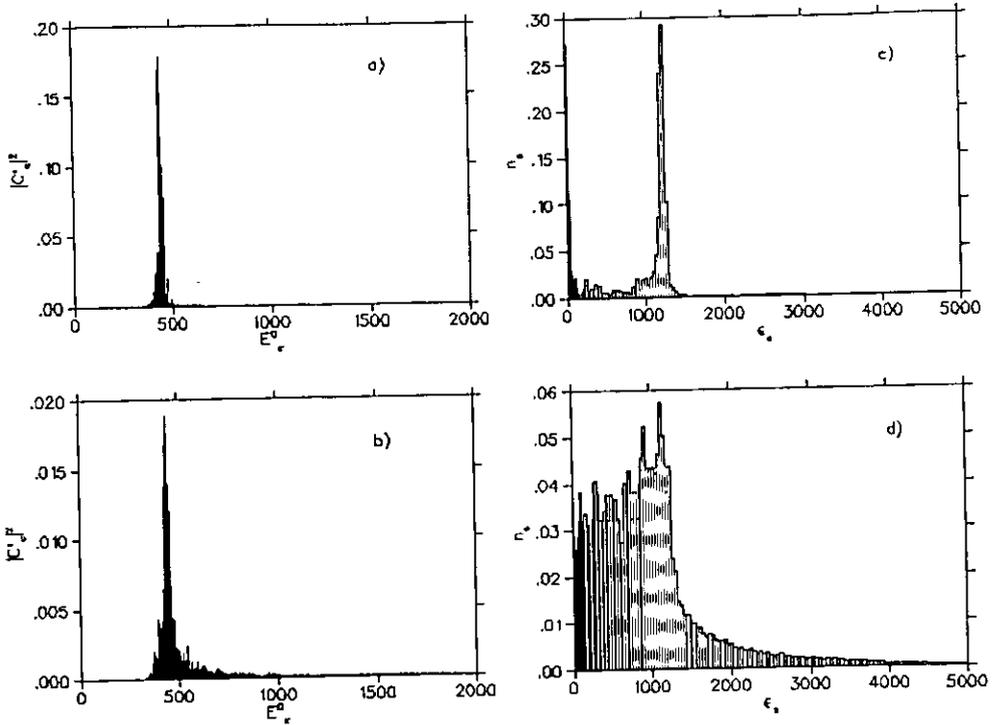
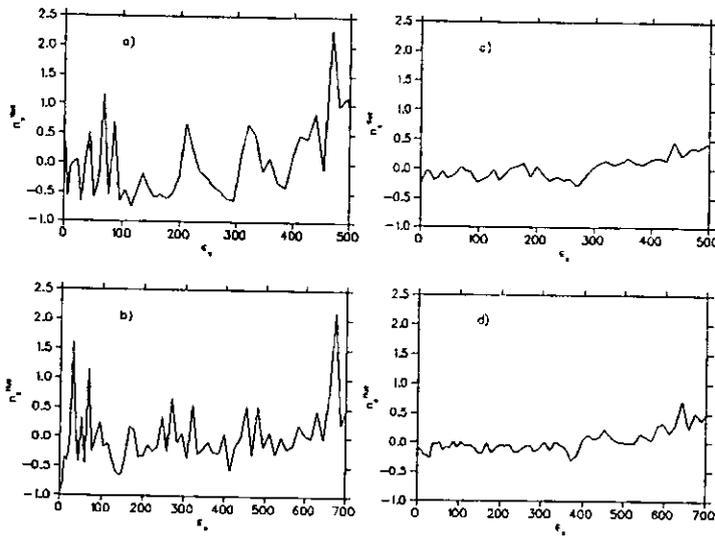


Figura 4.5. EF para (a) estado de  $\hat{H}_F$  con EF muy localizado  $|\psi^{402}\rangle$  (fig. 3.5(c)) y (b) un promedio alrededor del primero. Distribución de número de ocupación para (c) el estado localizado y (d) el promedio. Las características de las distribuciones son las mismas que para las otras figuras.

Una medida sencilla de las fluctuaciones en las distribuciones de número de ocupación se puede hacer con

$$n_s^{fluc} = \frac{n_s - \bar{n}_s}{\bar{n}_s} \quad (4.11)$$

donde  $\bar{n}_s$  es el promedio de las componentes de la distribución con  $\epsilon_s < \epsilon_*$ . Usaremos esta medida tanto para distribuciones de números de ocupación de un solo estado como para distribuciones promediadas sobre 20 estados. Las siguientes figuras presentan las  $n_s^{fluc}$  en estados y promedios de estados para  $\hat{H}_F$  y  $\hat{H}_D$ .



**Figura 4.6.** Medida de fluctuaciones  $n_s^{fluc}$  para distribuciones de los números de ocupación. Se consideran los estados individuales  $|\Psi^l\rangle$  para (a)  $l = 450$  y (b)  $l = 750$  con sus promedios (c) y (d), respectivamente. Estos últimos se hacen con 20 estados recenterados, usando como centro a los estados (a) y (b). Las eigenfunciones corresponden al caso de fermiones pares para  $\hat{H}_F$ .

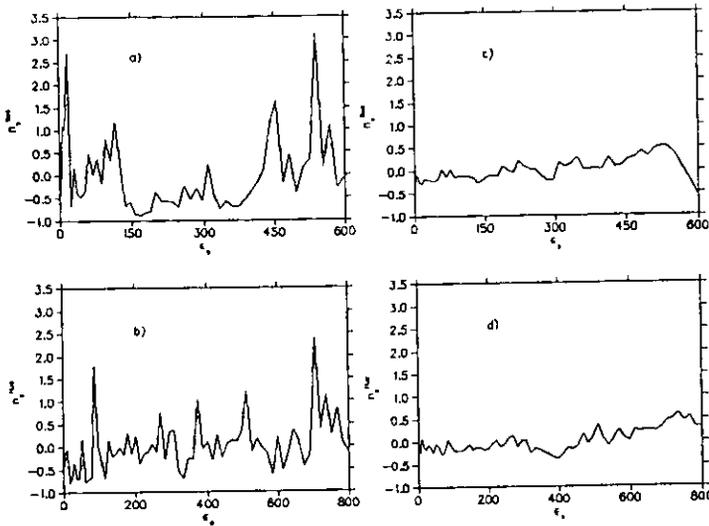


Figura 4.7. Medidas sobre fluctuaciones  $n_s^{fluc}$  para distribuciones de los números de ocupación. Se consideran los estados individuales  $|\Psi^t\rangle$  para (a)  $l = 450$  y (b)  $l = 750$  con sus promedios (c) y (d), respectivamente. Estos últimos se hacen con 20 estados recentrados, usando como centro a los estados (a) y (b). Las eigenfunciones corresponden al caso de fermiones pares para  $\hat{H}_D$ .

En las figs. 4.6 y 4.7 se observa que las fluctuaciones de los estados individuales disminuyen al considerar un promedio alrededor de los primeros. Este resultado confirma que las  $n_s$  tienden a una forma genérica tal como en la EF. Así, la distribución del número de ocupación sobre promedios de estados exhibe el equilibrio estadístico del sistema cuántico, siendo una consecuencia de la propiedad que mostraron las EF en el capítulo anterior.

Por otro lado, la cola de las  $n_s$  muestra un decaimiento exponencial para promedios de estados con diferente magnitud de interacción. En la fig. 4.8(b) es claro que el decaimiento no sigue totalmente este comportamiento para estados poco excitados. Sin embargo, a medida que se consideran promedios con una mayor energía tenemos el decaimiento ajusta mejor a uno de tipo exponencial.

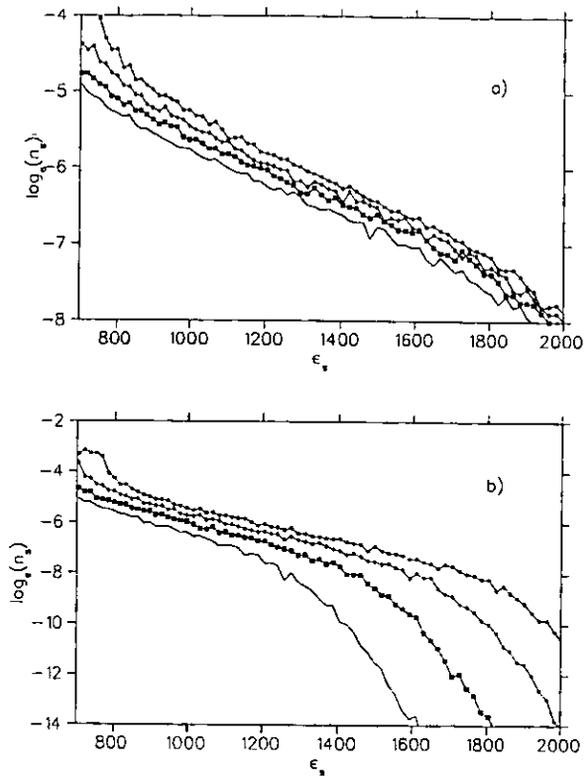


Figura 4.8. Decaimiento de la  $n_s^i$  en escala semilogarítmica. (a) Las distribuciones para promedios de 20 estados alrededor de  $\nu = 450, 550, 650$  y  $750$  para  $\hat{H}_F$ . (b) Las distribuciones para promedios de 20 estados alrededor de  $\nu = 450, 550, 650$  y  $750$  para  $\hat{H}_D$ .

En seguida, el decaimiento de las distribuciones de número de ocupación se usará para calcular el coeficiente de Boltzmann en las distribuciones  $n_s$ .

#### 4.2 Coeficiente de Boltzmann $\beta_B$ .

El equilibrio estadístico de un sistema cuántico puede relacionarse, con sumo cuidado, a una descripción termodinámica [12]. En general, esta descripción se realiza sobre sistemas de muchas partículas. Sin embargo, también es posible analizar las propiedades termodinámicas de sistemas con pocas partículas y, en este sentido, determinar un coeficiente de "Boltzmann"  $\beta_B$  correspondiente a las  $n_s$  de los estados  $|\Psi\rangle$ .

El decaimiento exponencial de las  $n_s$  sugiere la posibilidad de compararla con las distribuciones conocidas en mecánica estadística, i.e. Fermi-Dirac (FD), Bose-Einstein (BE) o Maxwell-Boltzmann (MB), ya que todas ellas tienen un decaimiento  $\langle n_s \rangle \propto \exp(-\beta_B \epsilon)$  cuando  $\langle n_s \rangle \ll 1$  [21].

El coeficiente de Boltzmann para un sistema clásico puede ser calculado por medio de

$$\beta_B = \frac{1}{k_B} \left( \frac{\partial S}{\partial E} \right), \quad (4.12)$$

donde  $E$  es la energía promedio de los estados considerados en la distribución,  $k_B$  es la constante de Boltzmann, y  $S$  es la entropía del sistema clásico. Esta última puede definirse en base a

$$S = k_B [\ln(\Gamma)] = k_B [\ln(\bar{\omega}) - \ln(\bar{\omega}_0)], \quad (4.13)$$

donde  $\Gamma$  es el número de estados accesibles del sistema. Esta se relaciona con  $\bar{\omega}$  y  $\bar{\omega}_0$  que son los volúmenes total y fundamental, respectivamente, del espacio fase en un sistema clásico [21].

El volumen total del espacio fase para nuestro hamiltoniano cuántico con una energía  $E$  fija, i.e.  $H(p_1, p_2, q_1, q_2) = E$ , es

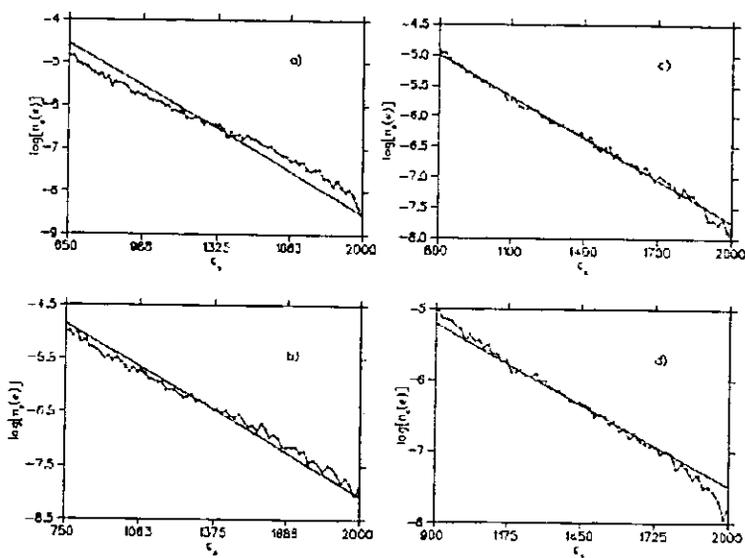
$$\bar{\omega} = \int_{(p_2', q_2')} \int_{(p_1', q_1')} \delta(E - H) dp_1 dq_1 dp_2 dq_2 = (c) E^{3/2}, \quad (4.14)$$

donde  $c$  es una constante que incluye todos los factores independientes de la energía y que salen del cálculo. Este resultado se debe a que  $p_i$  y  $q_i$  (con  $i = 1, 2$ ) toman los valores extremos de  $\pm E^{1/2}$  y  $\pm E^{1/4}$ , respectivamente (cf. eqs. (1.1)-(1.5)); haciendo que el volumen total del espacio fase sea proporcional a  $E^{3/2}$ . Entonces, se tiene que

$$\beta_B = \frac{\partial}{\partial E} \{ \ln(\bar{\omega}) + A \} = \frac{3}{2E}, \quad (4.15)$$

donde  $A$  incluye los términos que no dependen de la energía y, por ende, no afectan el resultado final.

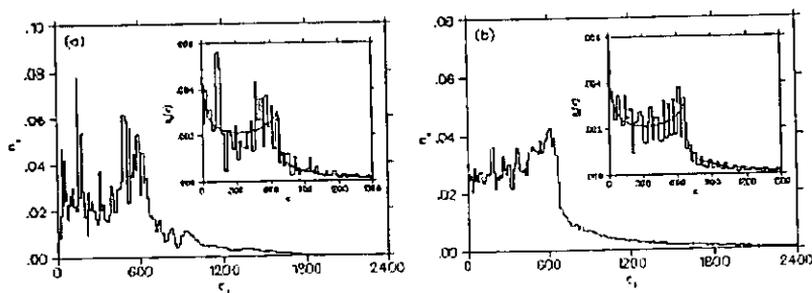
La fig. 4.9 muestra la comparación entre las distribuciones  $\langle n_\epsilon \rangle = D * \exp(-\beta_B E)$ , con  $E$  igual a la energía promedio de un ensemble de estados, y las  $n_s$  correspondientes a los promedios de estados para fermiones pares de  $\hat{H}_F$ . Para  $\hat{H}_D$  la coincidencia no es de la misma calidad, por lo cual esta interpretación no es del todo efectiva. Así, la magnitud en la interacción es importante para esta interpretación estadística.



**Figura 4.9.** Comparación para  $\hat{H}_F$  entre el decaimiento de la  $n_s^f$  y la  $\langle n_\epsilon \rangle = D * \exp(-\beta_B E)$ , en escala semilogarítmica. Las  $n_s^f$  son calculadas sobre promedios de 80 estados alrededor de (a)  $\epsilon = 450$  con  $E = 538.13$  y  $D = -2.7721$ ; (b)  $\epsilon = 550$  con  $E = 613.58$  y  $D = -3.0191$ ; (c)  $\epsilon = 650$  con  $E = 684.54$  y  $D = -3.2482$  (d)  $\epsilon = 750$  con  $E = 751.87$  y  $D = -3.4055$ .

4.3 Comparación entre  $n_s$  del sistema clásico y cuántico.

Por último, en lo que respecta a las  $n_s$  de los estados  $|\Psi\rangle$  en la base de  $\hat{H}_0$ , la fig. 4.10 muestra que la distribución de número de ocupación concuerda con lo esperado en mecánica clásica [3].



**Figura 4.10.** Distribuciones de número de ocupación del estado  $|\Psi^+\rangle$  de  $\hat{H}_F$  con (a)  $\nu = 620$  (a) y (b) un promedio de 21 estados alrededor del primero. En los recuadros se muestran la comparación entre las distribuciones clásicas y cuánticas correspondientes. Esta figura ha sido tomada de [3].

#### 4.4 Distribución de $n_s$ en la base de $\hat{H}_{osc}$ .

La distribución de número de ocupación, para esta base, queda definida así:

$$n_s^t(E_{k,l}) = \sum_{k,l} |C_{k,l}^t|^2 \{ \langle k| \otimes \langle l| \} | \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s | \{ |k\rangle \otimes |l\rangle \}, \quad (4.16)$$

utilizando una notación similar a la usada en la otra base (ec. 4.8). Donde las eigenfunciones están definidas por los números cuánticos principales  $(k,l)$  de dos osciladores con la frecuencia óptima  $\omega_{op}$  que se calculó en el capítulo 2.

La contribución de los estados de una partícula se establece por medio del número de cuanta  $N = k + l$ , y no a través de las energías  $\epsilon_s$  (ec. 4.6), respetando la paridad y la simetría de partículas.

En seguida se muestran las  $n_s$  para algunos promedios de estados de  $\hat{H}_F$  y  $\hat{H}_D$ . El motivo de descartar las distribuciones de estados individuales es que no ofrecen mayor información interesante.

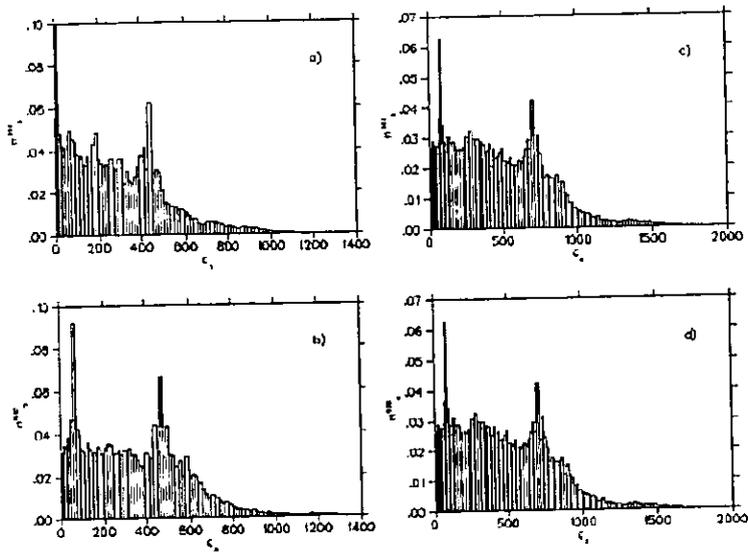


Figura 4.11. Distribución del número de ocupación en la base  $\hat{H}_{osc}$  para promedios de 20 estados  $|\Psi^t\rangle$  de  $\hat{H}_F$  alrededor de (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ .

En las figs. 4.11 y 4.12 se puede observar que las distribuciones de EF en promedios de estados  $|\Psi\rangle$  no presentan una estabilidad en su forma, lo cual se debe a la lenta convergencia de las eigenfunciones  $|\Psi^t\rangle$  en esta base (ver cap. 3).

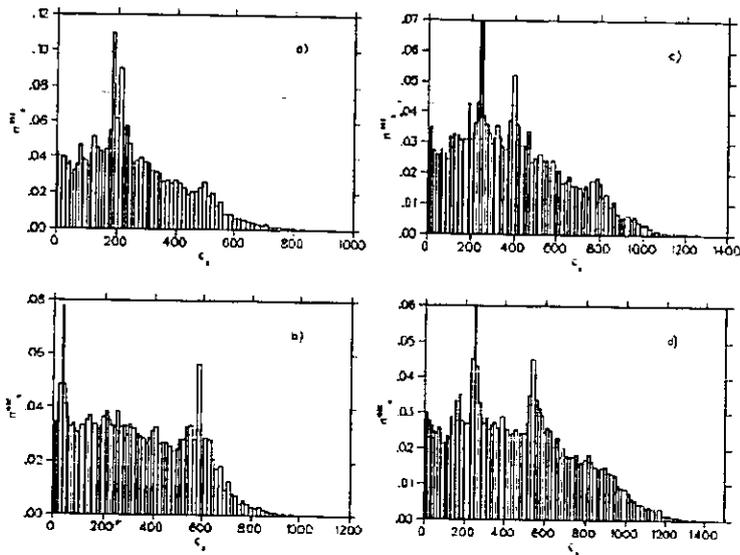


Figura 4.12. Distribución del número de ocupación en la base  $\hat{H}_{DSC}$  para promedios de 20 estados  $|\Psi^l\rangle$  de  $\hat{H}_D$  alrededor de (a)  $l = 250$ , (b)  $l = 350$ , (c)  $l = 450$  y (d)  $l = 550$ .

A diferencia de lo que observamos en las EF, en esta base la forma de los promedios de  $n_s$  para varios estados de  $\hat{H}_F$  tiende a estar bien definida. A grandes rasgos, dicha forma es parecida a la que obtenemos para  $n_s$  en la base  $\hat{H}_0$  (fig. 4.3). Pero, comparando escalas, vemos que el último máximo en la cola de estas  $n_s$  corresponde a la  $n_s$  (encontrada en la base  $\hat{H}_0$ ) si consideramos que esta es la energía de una partícula correspondiente a la energía total. Por consecuencia, el análisis no se puede transferir de de una base a otra. En el caso de  $\hat{H}_D$ , la forma es otra vez distinta y la tendencia a estabilizarse, conforme sube la energía, es más lenta.

## Capítulo 5

### CONCLUSIONES.

---

En la tesis se ha utilizado un hamiltoniano  $\hat{H}$  que describe la dinámica de dos partículas idénticas en un potencial de osciladores cuárticos con interacción del mismo tipo. El estudio de sus eigenvalores y eigenfunciones se realizó con dos bases de partícula independiente, oscilador cuártico  $\hat{H}_0$  y oscilador armónico  $\hat{H}_{osc}$ .

Las estadísticas espectrales  $P(s)$  y  $\Sigma^2(L)$  mostraron que los eigenvalores del sistema tienen el comportamiento esperado para un sistema cuántico con análogo clásico caótico; tal como se mostró en el capítulo 2.

En las eigenfunciones se analizaron tres propiedades importantes: la estructura de eigenfunciones, la densidad local de estados y los números de ocupación.

Los resultados se pueden resumir de la siguiente forma:

- (1) Las tres propiedades analizadas tienen un límite clásico como se muestra en las figs. 3.25, 3.26 y 4.10, y tal como se ve en [6].
- (2) Para las eigenfunciones de  $\hat{H}$ , expresadas en términos de las correspondientes a  $\hat{H}_0$ , encontramos una estabilidad rápida hacia una forma característica, mientras que el desarrollo en la base de  $\hat{H}_{osc}$  es poco uniforme, lo cual no es sorprendente en vista de la alta degeneración. De hecho, para el número de ocupación —donde no hay este problema— se observa la tendencia hacia una forma estable.
- (3) Mientras no observamos diferencia en la estadística espectral para  $\hat{H}_F$  y  $\hat{H}_D$  (que no estudiamos en detalle), ésta sí existe en algunas propiedades de los estados.
- (4) Entre los cuatro subespacios invariantes por simetría discreta (fermiones pares e impares y bosones pares e impares) hay ligeras discrepancias que están al límite de nuestra exactitud estadística por lo cual no fueron estudiadas.

- (5) El estudio de la EF, LDOS y  $n_s$  condujo a la determinación del equilibrio estadístico de sus eigenfunciones, donde la convergencia de éstas (ya sea en  $\hat{H}_0$  ó  $\hat{H}_{osc}$ ) es esencial para encontrar evidencias de dicho equilibrio.
- (6) En el caso de los promedios de números de ocupación, la forma genérica permite determinar el coeficiente de Boltzmann  $\beta_B$ , ajustando excelentemente para los estados de  $\hat{H}_F$ .

Finalmente, los próximos pasos en el estudio de este tipo de propiedades llevarán a considerar un número mayor de partículas, buscando comprender mejor el comportamiento de esta clase de sistemas.

- [1] V. V. Flambaum, A.A. Gribakina, G.F. Gribakin and M.G. Kozlov, *Phys. Rev. A* **50**, 1, (1994).
- [2] V. V. Flambaum and F. M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **55**, 1, (1997).
- [3] V. V. Flambaum, A.A. Gribakina, G.F. Gribakin, *Phys. Rev. A* **58**, 1, (1998).
- [4] V. V. Flambaum and F. M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **61**, 2539, (2000).
- [5] F. Borgonovi, I. Guarneri and F. M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **57**, 5, (1998).
- [6] L. Benet, F.M. Izrailev, T.H. Seligman and A. Suárez-Moreno, *Semiclassical properties of eigenfunctions and occupation number distribution for a model of two interacting particles*. Aceptado en *Phys. Rev. A* y aparece en *chao-dyn/9912035* (Diciembre, 1999).
- [7] L. Benet, *Tesis de Licenciatura*, Facultad de Ciencias, UNAM, (1991).
- [8] L. Benet, T.H. Seligman and H.A. Weidenmüller, *J. Phys. Lett.* **71**, 4, (1993).
- [9] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Theory*, (New York, Addison Wesley, 1994).
- [10] M. Moshinsky and Yu. F. Smirnov, *The Harmonic Oscillator in Modern Physics*, (New York, Hardwood, 1996).
- [11] Wen-ge Wang, F.M. Izrailev, G. Casati, *Phys. Rev. E* **57**, 323, (1998).
- [12] F.M. Izrailev, *Quantum Chaos and Thermalization for Interacting Particles*, Proceedings of International School of Physics "Enrico Fermi", Varenna, Italia (1999).
- [13] G. Casati, I. Guarneri and F. Valz-Gris, *Lett. Nuovo Cimento* **28**, 279, (1980);  
O. Bohigas, M.-J. Giannoni and C. Schmit, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1, (1983);  
F. Leyvraz and T.H. Seligman, *Phys. Lett. A* **168**, 348, (1992);  
L. E. Reichl, *The Transition to Chaos*, (New York, Springer Verlag, 1984).
- [14] F. Borgonovi, I. Guarneri, F.M. Izrailev, *Phys. Rev. E* **57**, 5291, (1998).
- [15] M.L. Mehta, *Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels*, (Academic Press, 1990).

\* LA TESIS NO PUEDE  
DE LA BIBLIOTECA

- 
- [16] T.A. Brody, J. Flores, J.B. French, P.A. Mello, A. Pandey, S.S.M. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 385 (1983).
- [17] M.V. Berry and M. Tabor, *Proc. R. Soc. Lond. A* **356**, 375 (1977).
- [18] T.H. Seligman, J.J. Verbaarschot and M. Zirnbauer, *J. Phys.* **A18**, 2751 (1985).
- [19] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, (New York, Springer Verlag, 1990).
- [20] Y. V. Fyodorov, O. A. Chubykalo, F. M. Izrailev and G. Casati, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1603, (1996).
- [21] R.K. Pathria, *Statistical Mechanics*, (Butterworth-Heinemann, Great Britain, 1997)

# IMPRESOS CERVANTES

TESIS URGENTES - LIBROS - FOLLETOS - OFFSET  
MECANOGRAFIA E IMPRENTA EN GENERAL

*Javier Cervantes González*

REPUBLICA DE CUBA NO. 99 DESP. 27 COL. CENTRO  
MEXICO, D.F. TEL.: 55-12-52-76