

ORIGEN CLÁSICO Y ESTUDIO ESPECTRAL DEL CAOS CUÁNTICO

(CON UNA INTRODUCCIÓN AL CAOS
CUÁNTICO RELATIVISTA)

Oscar Moreno Díaz

Trabajo académicamente dirigido por
Joaquín Retamosa y José Manuel Udías

Julio 2004

1. INTRODUCCIÓN

CAOS CLÁSICO Y CAOS CUÁNTICO

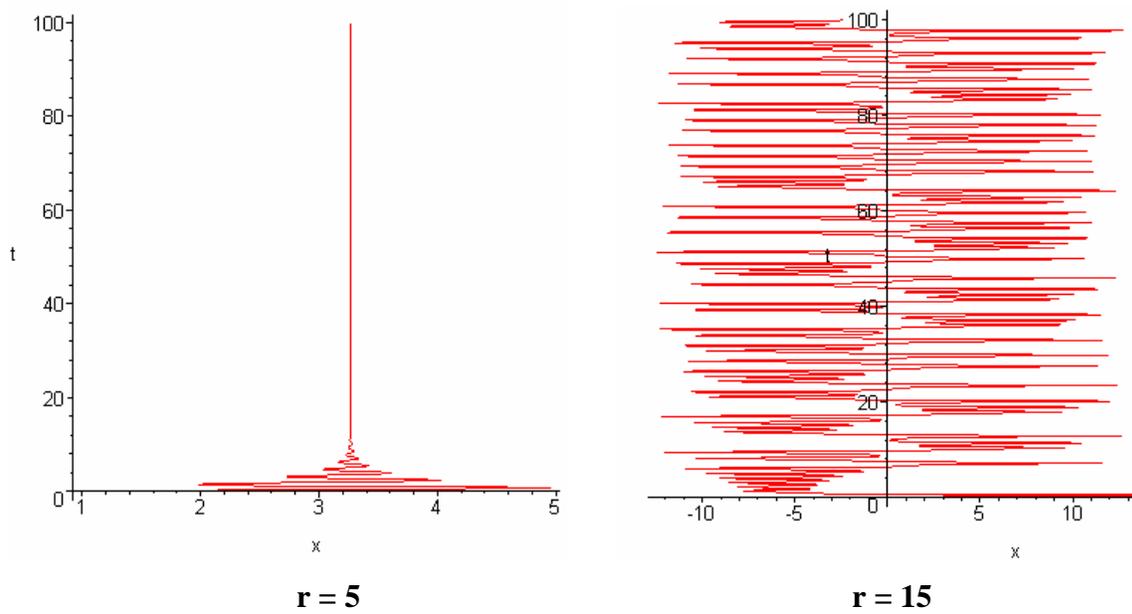
En 1963 el meteorólogo Edward Lorenz estaba construyendo un modelo de tiempo atmosférico; en concreto, estudiaba el comportamiento de una capa de aire con un calentamiento mayor en la parte inferior que en la superior. Para ello, hizo diversas simplificaciones en las ecuaciones de Navier-Stokes y llegó al siguiente sistema de ecuaciones que contiene sólo tres variables (x,y,z):

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = \sigma(y - x) \\ \frac{dy}{dt} = -xz + rx - y \\ \frac{dz}{dt} = xy - bz \end{cases}$$

Este conjunto de ecuaciones para el movimiento de la capa de fluido se denomina modelo de Lorenz. Las variables x, y, z están relacionadas con la temperatura, la densidad y la velocidad del fluido respectivamente. Los parámetros σ , b y r están relacionados con otras propiedades; en concreto, r se relaciona con la diferencia de temperaturas entre la capa superior y la inferior.

Lorenz introdujo el sistema de ecuaciones anterior en un ordenador y lo resolvió numéricamente. Para ciertos valores de los parámetros, las soluciones resultaron sorprendentes; llamaba especialmente la atención la representación tridimensional de los valores (x,y,z), que daba lugar a una compleja figura con dos lóbulos formados por algo semejante a espirales conectados con trayectorias que parten de puntos aparentemente aleatorios.

El experimento de Lorenz es fácilmente reproducible en cualquier ordenador. Resolviéndolo por el método numérico de Runge-Kutta, se obtiene la siguiente evolución temporal de la variable x para dos valores distintos del parámetro r :



En el primer caso, tras unas oscilaciones iniciales, la variable x se estabiliza al cabo de un tiempo, pero en el segundo caso las oscilaciones, de amplitud variable y sin periodicidad, no se detienen. Lo mismo ocurre en las gráficas $y(t)$ y $z(t)$.

Las siguientes gráficas representan $z(x)$, es decir, una proyección de la gráfica tridimensional comentada anteriormente y que contiene también los dos lóbulos espirales aleatoriamente conectados para el valor del parámetro $r = 15$ (no así para $r = 5$):

- sus soluciones en un tiempo dado son extremadamente sensibles a las condiciones iniciales; la imprecisión inicial en éstas crece exponencialmente con el tiempo y el sistema resulta impredecible.

- en el espacio de fases existen atractores (regiones que atraen a las trayectorias) que se denominan extraños. En lugar de los atractores clásicos (un punto, un bucle cerrado o un toro para movimientos que alcanzan equilibrio estable, periodicidad o cuasiperiodicidad respectivamente) aparecen atractores fractales, con estructura a todas las escalas. En el espacio de fases de un sistema dado pueden coexistir cuencas de atractores clásicos (regiones no caóticas) y cuencas de atractores extraños (regiones caóticas).

Hasta aquí algunos rasgos del caos en sistemas clásicos; por el principio de correspondencia cabría esperar un comportamiento similar en sistemas cuánticos, es decir, en aquellos que deben ser descritos según las leyes de la mecánica cuántica. Según este principio, los valores esperados de los observables del sistema tienden a su valor clásico cuando $\hbar \rightarrow 0$. Sin embargo, las leyes de la mecánica cuántica impiden el comportamiento caótico en los sistemas que describen.

En primer lugar, la ecuación de evolución en mecánica cuántica es siempre lineal (véase la ecuación de Schrödinger); esta linealidad inherente a la mecánica cuántica es la que permite describir el estado de un sistema como superposición de estados base de comportamiento más simple (denominados autoestados). En mecánica cuántica, pequeñas perturbaciones del estado inicial conducen generalmente a pequeñas perturbaciones en estados posteriores, y no a una divergencia exponencial.

En segundo lugar, debido al principio de incertidumbre de Heisenberg ($\Delta p \Delta x \sim \hbar$), el concepto de trayectoria en el espacio de fases no tiene sentido ya que la precisión con la que se fijan posiciones y velocidades tiene un límite dictado por la constante de Planck; la mecánica cuántica difumina las trayectorias clásicamente bien definidas y evita por tanto la complejidad dinámica de esas trayectorias.

Aunque a nivel cuántico el caos no se manifiesta de la misma manera que a nivel clásico, sí que pueden encontrarse huellas de éste (o su semilla, según el punto de vista), lo que da lugar a la siguiente definición del campo que nos ocupa:

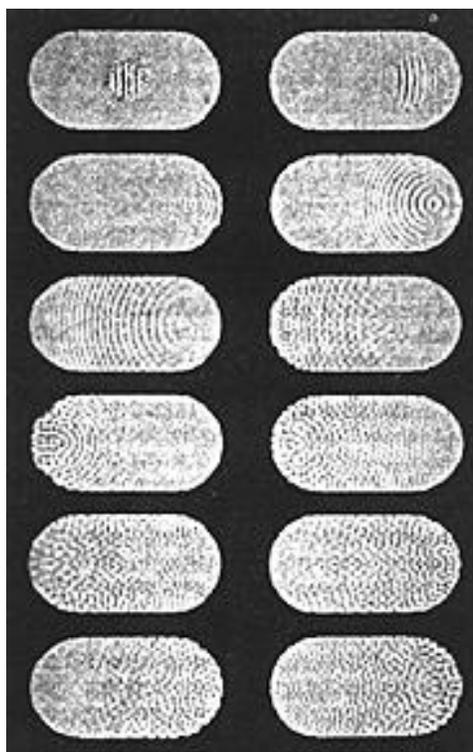
Se denomina caos cuántico al estudio de las propiedades peculiares que presentan los sistemas cuánticos cuyo análogo clásico es caótico.

Algunos autores, para evitar la contradicción de la denominación “caos cuántico” prefieren utilizar otros términos como caología cuántica (Berry) o mecánica cuántica posmoderna (Harris).

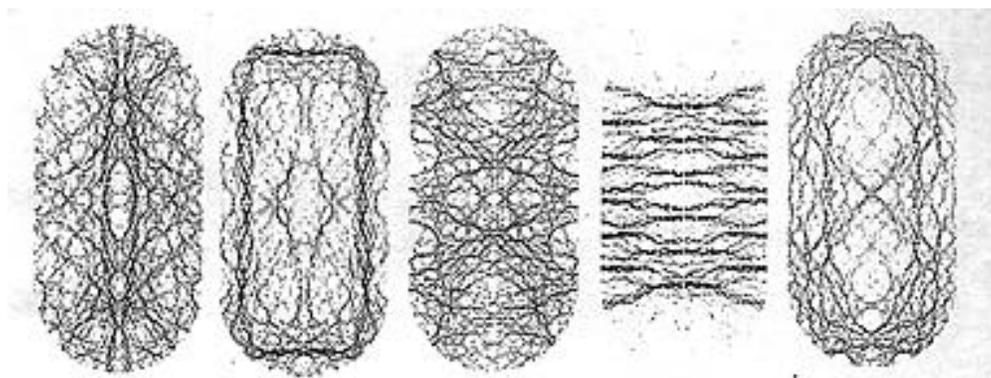
En realidad, a nivel cuántico se mantiene el comportamiento caótico pero sólo durante un breve plazo de tiempo, hasta que se alcanza el denominado tiempo de ruptura cuántico. En un experimento realizado por Mark Reizen a mediados de los noventa se colocaron átomos de sodio ultrafríos entre dos espejos entre los que un pulso láser generaba una onda estacionaria; el acoplamiento de las oscilaciones (de distinta frecuencia) de los átomos y de la onda láser daba lugar a una absorción de energía en intervalos irregulares (caóticos) por parte de los átomos. Éste es el comportamiento que, en general, se espera de dos osciladores macroscópicos acoplados de distinta frecuencia. Sin embargo, transcurridos unos 100 microsegundos, la energía del átomo alcanzaba un máximo y se mantenía en él sin absorber más energía. La supresión del caos por las leyes cuánticas empezó a actuar una vez transcurrido el tiempo de ruptura cuántico.

Cualquier sistema clásico está formado por un gran número de sistemas cuánticos; una posible razón por la que las leyes cuánticas no suprimen el caos de un sistema clásico es porque su tiempo de ruptura cuántico es extraordinariamente grande, más que la edad actual del universo. Si se esperara lo suficiente para superar ese tiempo de ruptura cuántico, el movimiento de un sistema clásico caótico aparecería como cuasiperiódico.

Como ejemplo de la desaparición del caos a nivel cuántico se representa en la siguiente figura un paquete de microondas que se genera en una antena y se desplaza en el interior de una cavidad de microondas con forma de estadio. El paquete de ondas se refleja en las paredes e interfiere consigo mismo y con otras reflexiones hasta alcanzar un estado estacionario.



A nivel clásico, una bola de billar que rebota elásticamente en las paredes de un billar con forma de estadio sigue en general trayectorias caóticas que al cabo de un tiempo han recorrido la mayor parte del espacio disponible; las pocas trayectorias que son clásicamente periódicas son generalmente inestables. Sin embargo, los estados estacionarios de las microondas en la cavidad no reflejan esa caoticidad sino que, por el contrario, se concentran en torno a líneas de formas regulares como se aprecia en la siguiente figura:



El experimento fue llevado a cabo por Eric Heller a principios de los ochenta, y denominó cicatrices a las líneas en las que las ondas presentaban mayor amplitud. Estas cicatrices aparecen allí donde el análogo clásico posee trayectorias periódicas, aunque sean inestables; las funciones de onda de los estados estacionarios contienen a nivel cuántico las huellas del caos del análogo clásico, y además relacionan propiedades de los sistemas clásicos y cuánticos (órbitas periódicas y cicatrices de la función de onda, respectivamente).

Aprovechando que ya han sido mencionados los billares, conviene resaltar la importancia que los sistemas así denominados tienen en el estudio del caos cuántico; a nivel cuántico, los billares son pozos de potencial de paredes muy altas (que se pueden considerar infinitas) y con formas arbitrarias dentro de los cuales se encierra una partícula. Presentan ventajas experimentales y teóricas. La cavidad de microondas del experimento descrito antes no es un billar cuántico propiamente dicho, pero las microondas en su interior obedecen la ecuación de Helmholtz ($\nabla^2\phi_n = -k_n^2\phi_n$), que es análoga a la de Schrödinger independiente del tiempo que obedecería una onda-partícula en un billar cuántico.

Además de en las funciones de onda, el caos clásico deja su huella en la distribución de los niveles energéticos asociados a cada uno de los estados estacionarios del sistema cuántico (es decir, en la distribución de autoenergías). El estudio espectral del caos cuántico se basa en el tratamiento estadístico del conjunto de niveles energéticos del sistema; aquí también aparecen conexiones entre órbitas periódicas en el sistema clásico y ciertas características del espectro.

Este trabajo se inicia con la conexión existente entre el caos de los sistemas clásicos y de los sistemas cuánticos, conexión ya iniciada en esta introducción y que continuará en torno a la fórmula de la traza. A continuación se procede al estudio espectral del caos cuántico tanto desde el punto de vista más teórico (las simetrías del sistema y la teoría de matrices aleatorias), como desde la estadística de niveles (obtenidos experimental o numéricamente). Por último, se introduce el estudio espectral del caos cuántico en el régimen relativista con una acotación del campo de estudio (exigida por la mecánica cuántica relativista) y unos primeros ensayos numéricos.

2. CONEXIÓN ENTRE CAOS CLÁSICO Y CAOS CUÁNTICO

ÓRBITAS PERIÓDICAS Y ESPECTRO: LA FÓRMULA DE LA TRAZA

El puente entre caos clásico y caos cuántico tiene uno de sus pilares fundamentales asentado en las órbitas periódicas del espacio de fases del sistema clásico. A continuación se justifica brevemente cómo estas órbitas periódicas de un sistema clásico integrable, es decir, no caótico, contribuyen de forma esencial a la densidad de estados energéticos del análogo cuántico. Posteriormente se describe cómo las órbitas periódicas aisladas de un sistema clásicamente caótico ejercen también su influencia en el espectro del análogo cuántico.

En el conjunto de autoenergías de un sistema dado, se define la densidad de estados como:

$$g(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$$

Su integral proporciona el número de niveles existentes con energía por debajo de la de su argumento:

$$N(E) = \int_0^E g(E') dE'$$

La densidad de estados contiene toda la información sobre las irregularidades en la distribución de autoenergías del espectro del sistema cuántico; en concreto, puede separarse en una parte suave ($\tilde{g}(E)$) y una parte oscilatoria ($\delta g(E)$):

$$g(E) = \tilde{g}(E) + \delta g(E)$$

Para establecer la relación existente entre órbitas clásicamente periódicas de un sistema, y las oscilaciones de las autoenergías de su análogo cuántico, emplearemos un sistema bidimensional, cuyas autoenergías vienen determinadas por dos números cuánticos $n_1, n_2 \in \mathbf{N}$; la densidad definida anteriormente puede escribirse en este caso como:

$$g(E) = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \delta(E - E(n_1, n_2))$$

Empleando la fórmula de sumación de Poisson (donde se asume $f(n), f'(n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$):

$$\sum_{n=0}^{\infty} f(n) = \sum_{M=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn f(n) e^{2\pi i M n} + \frac{1}{2} f(0), \quad M \in \mathbf{Z},$$

y teniendo en cuenta que en este caso hay dos sumatorios, la densidad se puede escribir como la suma de los cuatro términos siguientes:

$$\begin{aligned} g(E) = & \sum_{M_1=-\infty}^{\infty} \sum_{M_2=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn_1 \int_0^{\infty} dn_2 \delta(E - E(n_1, n_2)) e^{[2\pi i (M_1 n_1 + M_2 n_2)]} + \frac{1}{2} \sum_{M=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn_1 \delta(E - E(n_1, 0)) e^{2\pi i M n_1} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{M=-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} dn_2 \delta(E - E(0, n_2)) e^{2\pi i M n_2} + \frac{1}{4} \delta(E) \end{aligned}$$

Al primer término se le denominará $g^*(E)$ y se estudiará en detalle a continuación, ya que es el término principal; los dos términos siguientes, que incluyen un único sumatorio, resultan de un orden mayor en η , como se comentará después, y son generalmente despreciables frente a $g^*(E)$. El último término no contribuye para energías mayores de cero.

El primer sumando de la expresión anterior puede escribirse en función de las variables de acción I_1 e I_2 en lugar de n_1 y n_2 , siendo $I_1 = \frac{1}{2\pi} \oint p dq = \left(n_1 + \frac{\mu_1}{4} \right) \eta$ y $I_2 = \frac{1}{2\pi} \oint p dq = \left(n_2 + \frac{\mu_2}{4} \right) \eta$ (con μ_i el número de puntos conjugados por los que pasa la

órbita, que son aquellos en los que un conjunto de trayectorias divergen o convergen); el término queda entonces:

$$g^*(E) = \frac{1}{\eta^2} \sum_{M_1=-\infty}^{\infty} \sum_{M_2=-\infty}^{\infty} e^{\left[-i\frac{\pi}{2}(M \cdot \dot{I})\right]} \int_{\eta \frac{\mu_1}{4}}^{\infty} dI_1 \int_{\eta \frac{\mu_2}{4}}^{\infty} dI_2 \delta(E - H(I_1, I_2)) e^{\left[\frac{2\pi i}{\eta}(M \cdot \dot{I})\right]}$$

[Al introducir estas nuevas variables, este término resulta de orden η^{-2} ; los términos de $g(E)$ que se ignoraron antes, y que contenían una integral simple, resultarían de orden η^{-1} , que generalmente es despreciable frente a η^{-2}].

Los términos para los que $M_1 = M_2 = 0$ no contienen exponenciales complejas y, por tanto, carecen de factores oscilatorios, constituyen la parte suave de $g^*(E)$:

$$\tilde{g}^*(E) = \frac{1}{\eta^2} \int_{\eta \frac{\mu_1}{4}}^{\infty} dI_1 \int_{\eta \frac{\mu_2}{4}}^{\infty} dI_2 \delta(E - H(I_1, I_2))$$

Si se sustituyen los límites inferiores de integración por 0, esta parte suave de la densidad puede expresarse mediante una integral sobre el espacio de fases total (\dot{q}, \dot{p}) :

$$\tilde{g}^*(E) = \frac{1}{(2\pi\eta)^2} \int_0^{\infty} dI_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{\infty} dI_2 \int_0^{2\pi} d\varphi_2 \delta(E - H(I_1, I_2)) = \frac{1}{(2\pi\eta)^2} \iint d\dot{p} d\dot{q} \delta(E - H(\dot{p}, \dot{q}))$$

[La sustitución del límite de integración por 0 da correcciones de un orden mayor en η , que pueden unirse a la parte suave ($M=0$) de los términos de $g(E)$ ignorados antes].

La parte oscilatoria de la densidad puede escribirse como:

$$\delta g^*(E) = \frac{1}{2\pi\eta^2} \sum_{M_1, M_2=-\infty}^{\infty} * e^{\left[-i\frac{\pi}{2}(M \cdot \dot{I})\right]} \cdot \frac{1}{\eta} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \int_{\eta \frac{\mu_1}{4}}^{\infty} dI_1 \int_{\eta \frac{\mu_2}{4}}^{\infty} dI_2 e^{\left[\frac{i}{\eta}(2\pi M \cdot \dot{I} + \tau(E - H(I_1, I_2)))\right]}$$

donde el asterisco en el sumatorio significa que hay que ignorar los puntos $M_1 = M_2 = 0$ (cuyos términos se incluyeron en la parte suave de la densidad). Además, se ha sustituido la delta por su transformada de Fourier:

$$\delta(E - H(I_1, I_2)) = \frac{1}{2\pi\eta} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{\left[\frac{i\tau}{\eta}(E - H(I_1, I_2))\right]}$$

, y se ha condensado todo el integrando en una única exponencial compleja $e^{i\Theta_M}$ cuya fase es:

$$\Theta_M^p = 2\pi M \cdot \dot{I} + \tau(E - H(I_1 I_2))$$

Si el integrando $e^{i\Theta_M}$ oscila muy rápidamente, la integral es aproximadamente nula excepto por las contribuciones de aquellos puntos en los que la fase de la exponencial no varía con tanta rapidez, es decir, cuando la fase es estacionaria. Este método se denomina aproximación de fase estacionaria (AFE) o método del punto de silla.

La fase será estacionaria en el punto $(\tilde{I}_1, \tilde{I}_2)$ en el que la derivada de la fase respecto de la variable de integración se anule:

$$\left. \frac{\partial \Theta_M^p}{\partial I_1} \right|_{(\tilde{I}_1, \tilde{I}_2)} = 0, \quad \left. \frac{\partial \Theta_M^p}{\partial I_2} \right|_{(\tilde{I}_1, \tilde{I}_2)} = 0$$

Efectuando estas derivadas e igualándolas a cero se obtiene la importante relación:

$$\frac{2\pi M_i}{\tau} = \frac{\partial H}{\partial I_i} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \omega_i$$

para $i = 1, 2$; se ha empleado una ecuación de Hamilton, expresada para variables acción-ángulo, y se ha denominado ω_i a la frecuencia correspondiente al ángulo φ_i . De esta relación se deduce que:

$$\frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{M_1}{M_2},$$

donde M_1 y M_2 son números enteros. Una relación tal entre las frecuencias de las dos variables angulares (ya que estamos en el caso de dos dimensiones) da lugar a una órbita periódica en un movimiento clásico; en concreto, el movimiento se repite después de que el móvil ha girado M_1 veces en torno al ángulo φ_1 y M_2 veces en torno al ángulo φ_2 , siguiendo por tanto una trayectoria sobre una superficie toroidal.

En conclusión, la parte oscilatoria de la densidad recibe sus principales contribuciones (en AFE) de los movimientos clásicamente periódicos, sobre los cuales se efectúa un sumatorio.

Volviendo a la parte oscilatoria de la densidad de estados, se puede efectuar la integral sobre I_1 e I_2 mediante un cambio de variable y aplicando las integrales de Fresnel, resultando:

$$\delta g^*(E) \approx \frac{1}{2\eta^2} \sum_{M_1, M_2 = -\infty}^{\infty} * e^{\left[-i\frac{\pi}{2}(M_1 \rho_1) \right]} e^{-i\frac{\pi}{4}(N_+ - N_-)} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \frac{1}{\tau |K|^{1/2}} e^{\left[\frac{i}{\eta} (2\pi M_1 \rho_1 + \tau(E - H(I_1, I_2))) \right]},$$

con $K(E, \tau) = \det \left(\frac{\partial^2 H}{\partial I_i \partial I_j} \right)_{\tilde{I}_1, \tilde{I}_2}$ y N_+ y N_- el número de autovalores positivos y negativos respectivamente de la matriz K .

La expresión de la parte oscilatoria de la densidad de estados en función de las órbitas del sistema clásico recibe el nombre de fórmula de la traza. Aquí se ha obtenido una fórmula de la traza para un sistema bidimensional integrable siguiendo los razonamientos de Berry y Tabor (1976), pero existen otros caminos para llegar a fórmulas de este tipo. Gutzwiller (en 1971) partió de una aproximación semiclásica del propagador o función de Green cuántica de una partícula y obtuvo una fórmula de la traza para órbitas periódicas aisladas:

$$\delta g(E) = \frac{1}{\eta\pi} \sum_{\text{o.p.}} \frac{T_{\text{o.p.p.}}}{|\det(\tilde{M}_{\text{o.p.}} - I)|^{1/2}} \cos \left(\frac{1}{\eta} S_{\text{o.p.}} - \frac{\pi}{2} \sigma_{\text{o.p.}} \right),$$

donde o.p. significa órbita periódica; $\tilde{M}_{\text{o.p.}}$ es la matriz de estabilidad de la órbita periódica que mide la variación en la posición y el momento tras un periodo si se varían ligeramente los valores iniciales (manteniendo la energía constante): $\begin{pmatrix} \delta f^0 \\ \delta p^0 \end{pmatrix} = \tilde{M}_{\text{o.p.}} \begin{pmatrix} \delta f_0^0 \\ \delta p_0^0 \end{pmatrix}$. $S_{\text{o.p.}} = \oint p dq$ es la acción sobre la órbita y $T_{\text{o.p.p.}}$ es el periodo de una órbita periódica primitiva (recorrida sólo una vez hasta pasar por el punto de partida). $\sigma_{\text{o.p.}}$ es el índice de Maslov y tiene en cuenta el número de puntos conjugados que atraviesa la órbita.

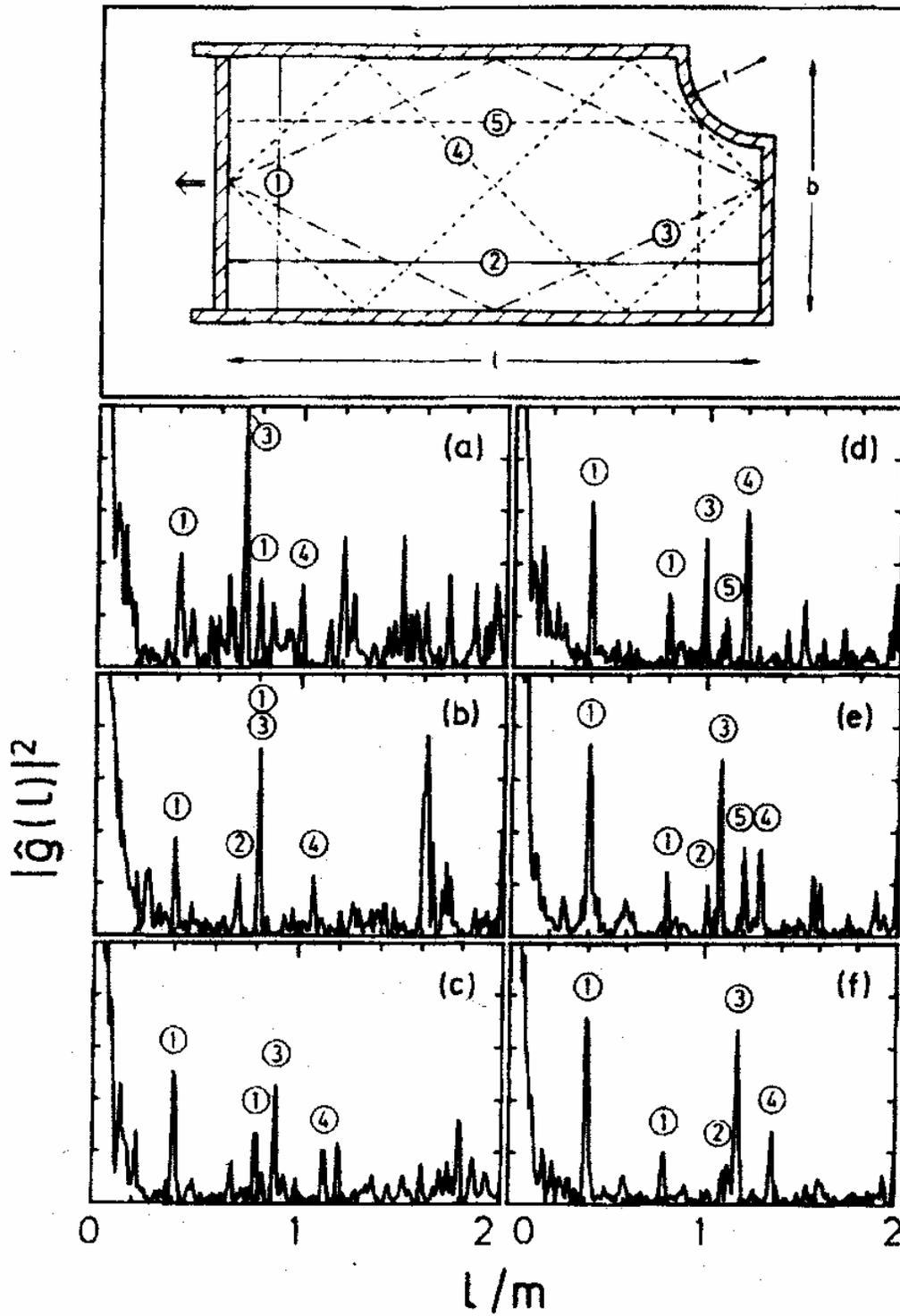
Los sistemas clásicos caóticos poseen órbitas periódicas inestables aisladas rodeadas de trayectorias caóticas; la fórmula de la traza de Gutzwiller, que relaciona precisamente estas órbitas periódicas aisladas con la parte oscilatoria de la densidad de niveles, permite

relacionar el caos en sistemas clásicos con el caos cuántico (del mismo modo que la fórmula de Berry y Tabor para sistemas integrables).

La figura de la página siguiente muestra una cavidad de microondas con forma rectangular en la que una esquina se ha sustituido por una porción de circunferencia de radio r . Las trayectorias clásicas en este sistema son en general caóticas, aunque existen algunas órbitas periódicas que se muestran numeradas en la figura; la longitud de estas trayectorias puede variarse al mover el lateral izquierdo del billar.

Cuando se calcula la transformada de Fourier de la parte oscilatoria de la densidad de estados estacionarios de las microondas en la cavidad cada órbita clásicamente periódica proporciona un pico en el valor l correspondiente a su longitud y de altura proporcional, entre otras cosas, a la estabilidad de dicha órbita. En la figura aparecen varias gráficas que representan el módulo al cuadrado de la transformada de Fourier de la parte oscilatoria de la densidad de estados en función de la longitud para valores crecientes del largo de la cavidad (al mover la pared lateral).

Se observa claramente que a mayor longitud de las trayectorias más a la derecha está su pico en las gráficas; además, los picos más altos corresponden a las órbitas 1 y 3, que son las más estables (pues no se ven afectadas por la porción de circunferencia aunque se las perturbe, y continúan siendo periódicas).



H-J Stöckmann: *Quantum Chaos. An Introduction*. Cambridge University Press, 1999.

3. ESTUDIO ESPECTRAL DEL CAOS CUÁNTICO

3.1. SIMETRÍAS Y CLASES DE UNIVERSALIDAD

Una transformación sobre un sistema cuántico consiste en sustituir sus observables O y sus estados $|o\rangle$ por unos nuevos (O' y $|o'\rangle$) sin variar las propiedades físicas del sistema. Para cada transformación se puede definir un operador T (unitario o antiunitario) de tal modo que $O' = TOT^\dagger$ y $|o'\rangle = T|o\rangle$. Se dice que un observable es invariante bajo una transformación cuando $O' = TOT^\dagger = O \Rightarrow [O, T] = 0$.

Cuando es el Hamiltoniano el que no varía bajo una transformación T , es decir, $[H, T] = 0$, se dice que el sistema posee una simetría y ello implica una ley de conservación. El efecto de las invariancias del Hamiltoniano es reducir su matriz a una diagonal por bloques cuando se emplea una base de autoestados común al Hamiltoniano y al operador bajo el que es invariante; un número de simetrías igual al de grados de libertad del sistema permite diagonalizar totalmente la matriz del Hamiltoniano. El sistema se dice entonces integrable (como en mecánica clásica); su análogo clásico no presentaría caos y por tanto se trata de un sistema no caótico desde el punto de vista cuántico. El resto de sistemas son no integrables y son caóticos desde el punto de vista cuántico.

Una transformación particularmente importante para el desarrollo que queremos seguir es la de inversión temporal, que actúa sobre el operador posición \hat{x} y el operador momento \hat{p} de la siguiente manera:

$$R \mathcal{K} R^\dagger = \mathcal{K} \quad ; \quad R \mathcal{P} R^\dagger = -\mathcal{P}$$

La matriz que representa el operador \mathcal{K} es de elementos reales, mientras que la matriz de \mathcal{P} es de elementos imaginarios puros (ya que $\mathcal{P} = -i\eta \nabla$), por lo que el operador de inversión temporal actúa igual que el de conjugación compleja C (en representación de posición): $C|o\rangle = |o\rangle^*$. Se tiene en este caso $R^2 = C^2 = I$ (que será útil posteriormente).

De la actuación sobre \mathcal{K} y \mathcal{P} se deduce que sobre el operador momento angular $\mathcal{L} = \mathcal{K} \times \mathcal{P}$, el operador de inversión temporal actúa como:

$$R \mathcal{L} R^\dagger = -\mathcal{L}$$

En el caso del operador de espín, que es un momento angular intrínseco, la inversión temporal actúa igual que sobre el momento angular orbital:

$$R \mathcal{S} R^\dagger = -\mathcal{S}$$

Una vez introducido el espín se puede incluir en la definición del operador de inversión temporal; así, el operador de inversión temporal es aquél que actúa de la siguiente manera sobre la posición, el momento y el espín:

$$R \mathcal{K} R^\dagger = \mathcal{K} \quad ; \quad R \mathcal{P} R^\dagger = -\mathcal{P} \quad ; \quad R \mathcal{S} R^\dagger = -\mathcal{S}$$

El operador espín es un vector de tres componentes: $\mathcal{S} = (s_1, s_2, s_3)$, donde cada una de ellas se puede escribir, en el caso de espín $1/2$, como:

$$s_1 = \frac{\eta}{2} \sigma_1 = \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad s_2 = \frac{\eta}{2} \sigma_2 = \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad s_3 = \frac{\eta}{2} \sigma_3 = \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

El origen de estas expresiones se deducirá en una sección posterior al tratar la ecuación de Dirac. De las expresiones anteriores es obvio que (teniendo en cuenta que $C = C^\dagger$):

$$C \mathcal{K} C = \mathcal{K} \quad ; \quad C \mathcal{P} C = -\mathcal{P} \quad ; \quad C s_1 C = s_1 \quad ; \quad C s_2 C = -s_2 \quad ; \quad C s_3 C = s_3$$

En esta ocasión el operador C no reproduce la acción de R , pues no invierte el signo de todas las componentes de \mathcal{S} ; el operador adecuado sería una combinación de C con otro operador Q tal que:

$$Q \hat{K} Q^\dagger = \hat{K} \quad ; \quad Q \hat{P} Q^\dagger = \hat{P} \quad ; \quad Q s_1 Q^\dagger = -s_1 \quad ; \quad Q s_2 Q^\dagger = s_2 \quad ; \quad Q s_3 Q^\dagger = -s_3$$

La acción conjunta de C y Q sí reproduce la actuación de la inversión temporal R; el nuevo operador Q no es más que una rotación en el espacio del espín alrededor del eje s_2 y de ángulo π (ya que gira 180° los ejes s_1 y s_3), rotación que puede escribirse en forma de operador como:

$$Q = e^{\frac{i\pi s_2}{\hbar}} = e^{\frac{i\pi \sigma_2}{2}} = -i\sigma_2$$

El razonamiento es el mismo para cualquier espín total semientero (no así para espín entero, donde $R = C$ como se vio anteriormente*). Por tanto el operador inversión temporal R en presencia de espín total semientero es $R = -i\sigma_2 C$. De aquí se obtiene:

$$R^2 = (-i\sigma_2 C)^2 = -\sigma_2^2 C^2 = -I$$

Existen muchas analogías entre conjugación compleja e inversión temporal; siguiendo esta similitud, se dice que un vector es real si es invariante bajo inversión temporal: $R|o\rangle = |o\rangle$; de aquí se deduce que es posible definir vectores reales cuando $R^2 = I$ (caso de sistemas con espín entero), pero no cuando $R^2 = -I$ (caso de sistemas con espín semientero).

En sistemas con espín entero es posible construir una base ortonormal de vectores reales, ya que pueden ser definidos; si el sistema es invariante bajo inversión temporal, es decir, $[H, R] = 0$, se puede construir una base ortonormal común de autoestados de H y de R que pueden ser reales, por lo que los elementos de H son también reales.

En sistemas con espín semientero no es posible construir una base ortonormal de vectores reales, aunque poseen otra propiedad muy importante:

$$R^2 = -I \Rightarrow R = -R^\dagger \Rightarrow \langle o | (R | o \rangle) = (\langle o | R^\dagger) | o \rangle = -(\langle o | R) | o \rangle = 0,$$

de donde se obtiene que un vector cualquiera $|o\rangle$ y su complejo conjugado $R|o\rangle$ son ortogonales entre sí; si además otro vector es ortogonal a éstos, su complejo conjugado

* Los elementos de las matrices de espín entero son imaginarios puros para todas las componentes, y la actuación de C ya invierte el signo de todas ellas sin necesidad de componerlo con otro operador.

también lo es. Se puede construir entonces una base ortonormal formada por pares de vectores complejo conjugados. Si el sistema es invariante bajo inversión temporal, es decir, $[H,R] = 0$, se puede construir una base ortonormal común de autoestados de H y de R formada por pares de vectores complejo conjugados. Cada elemento del Hamiltoniano se puede escribir entonces como la matriz 2x2:

$$\begin{pmatrix} z^* & -w \\ w^* & z \end{pmatrix},$$

donde z y w son números complejos. Una forma alternativa de escribir los elementos es:

$$H_{nm} = (H_0)_{nm} I_{2 \times 2} + (H_x)_{nm} \tau_x + (H_y)_{nm} \tau_y + (H_z)_{nm} \tau_z,$$

donde $\tau_x = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$; $\tau_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$; $\tau_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ con $(H_0)_{nm}, (H_x)_{nm}, (H_y)_{nm}, (H_z)_{nm} \in \mathbf{R}$. Una matriz de este tipo se denomina cuaternio real (ya que sus elementos son cuaternios, conjunto de números con parte real y tres unidades imaginarias distintas).

Si un sistema no posee simetría bajo inversión temporal, ninguno de los resultados anteriores es aplicable y, en principio, la única propiedad del Hamiltoniano es que es hermítico (como cualquier otro observable), es decir, que $H^\dagger = H$ (sus elementos cumplen $H_{nm}^* = H_{mn}$). Sin embargo, la existencia de cualquier simetría en el sistema análoga a la conjugación o la inversión temporal conduce a la misma situación que la desarrollada antes; por ejemplo, el átomo de hidrógeno bajo la acción de un campo magnético externo carece de simetría bajo inversión temporal, pero sí tiene simetría bajo la acción combinada de la inversión temporal R y de la reflexión respecto a un plano P, es decir, $[H, PR] = 0$. El operador PR tiene propiedades similares a R (en concreto $(PR)^2 = I$) y por tanto permite construir un Hamiltoniano con elementos reales (ya que no se consideran espines en este caso). Otro ejemplo es la invariancia bajo la transformación $Q_y C$, donde Q_x es una rotación similar a la realizada antes en torno al eje s_2 pero esta vez no sobre el espacio del espín sino sobre el espacio real; cumple $(Q_y C)^2 = I$ y da lugar a elementos reales en el Hamiltoniano.

Cuando la matriz del Hamiltoniano es simplemente hermítica pertenece a la clase de universalidad unitaria; cuando además es simétrica (es decir, sus elementos son reales), pertenece a la clase de universalidad ortogonal y cuando sus elementos son cuaternios reales, pertenece a la clase de universalidad simpléctica. El nombre que toman las clases de universalidad se debe a las transformaciones de las matrices que dejan invariantes sus propiedades mencionadas, tal y como se resume en la tabla de la página siguiente.

Características del Hamiltoniano	Propiedades de la matriz del Hamiltoniano	Propiedades invariantes bajo transformaciones...
<p>- No invariante respecto a inversión temporal ni ninguna otra simetría análoga (p. ej. PR, rotaciones, etc).</p>	<p>Hermítica: $H_{nm}^* = H_{mn}$ ($H^\dagger = H$)</p>	<p>Unitarias: $H' = UHU^\dagger$, con $UU^\dagger = I$, siendo U^\dagger la matriz adjunta de U. (CLASE UNITARIA)</p>
<p>- Invariante respecto a inversión temporal (o simetría análoga). - Espín total del sistema entero.</p>	<p>Simétrica: $H_{nm} = H_{mn}$, $H_{nm} \in \mathbf{R}$ ($H^T = H$, $H^* = H$)</p>	<p>Ortogonales: $H' = OHO^T$, con $OO^T = I$, siendo O^T la matriz traspuesta de O. (CLASE ORTOGONAL)</p>
<p>- Invariante respecto a inversión temporal (o simetría análoga). - Espín total del sistema semientero.</p>	<p>Cuaternio real: $H_{nm} = (H_0)_{nm} I_{2 \times 2} + (H_x)_{nm} \tau_x + (H_y)_{nm} \tau_y + (H_z)_{nm} \tau_z$. con $\tau_x = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$; $\tau_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$; $\tau_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. $(H_0)_{nm}, (H_x)_{nm}, (H_y)_{nm}, (H_z)_{nm} \in \mathbf{R}$</p>	<p>Simplécticas: $H' = SHS^D$, con $SS^D = I$, siendo S^D la matriz dual de S: $S^D = ZS^T Z^{-1} = -ZSZ$, con $Z_{nm} = \delta_{nm} \tau_y$. (CLASE SIMPLÉCTICA)</p>

3.2. CONJUNTOS GAUSSIANOS

Cuando se determinan algunas características básicas de un sistema (sus simetrías, el espín total), es posible clasificarlo en una clase de universalidad de las comentadas anteriormente; una vez clasificado, se conoce gran parte de su comportamiento aun ignorando muchos otros detalles del sistema.

En la teoría de matrices aleatorias, la matriz del Hamiltoniano de un sistema dado se sustituye por una matriz de elementos aleatorios. Para estudiar la parte discreta del espectro de un Hamiltoniano, una aproximación razonable es sustituir la matriz de ese Hamiltoniano (infinita en general), por una matriz finita $N \times N$ hermítica que posee únicamente un espectro discreto. Los elementos aleatorios de la matriz cumplen algunas relaciones entre ellos que reflejan la información acerca del Hamiltoniano original; esta información, aunque muy escasa (y relacionada con simetrías y espines), es suficiente, como se ha comentado en el párrafo anterior, para deducir muchas propiedades del sistema.

Un conjunto dado de elementos aleatorios tiene una probabilidad determinada de constituir una matriz aleatoria, probabilidad que viene dada por una función de esos elementos y que depende de la clase de universalidad que estemos considerando. Sea $\{H_{mn}\} = \{H_{11}, H_{12}, \dots, H_{21}, H_{22}, \dots, H_{N1}, H_{N2}, \dots, H_{NN}\}$ el conjunto de elementos de la matriz aleatoria; entonces la probabilidad de la que estamos hablando se puede escribir como $p(\{H_{mn}\})$, y la denominaremos densidad de probabilidad conjunta (j.p.d.f., *joint probability distribution function*) de los elementos de la matriz. A continuación se detalla el proceso de obtención de la j.p.d.f de los elementos de una matriz aleatoria de la clase ortogonal:

Sea la matriz aleatoria H de la clase ortogonal (real y simétrica) y su transformación ortogonal $H' = OHO^T$, con $OO^T = I$. La probabilidad de que un conjunto de elementos $\{H_{mn}\}$ aleatoriamente generados, reales y tales que $H_{mn} = H_{nm}$, formen una matriz aleatoria de la clase ortogonal tiene que ser igual a la probabilidad del conjunto de elementos de la matriz transformada ortogonalmente, ya que no existe una base privilegiada respecto a otra:

$$p(\{H_{mn}\}) = p(\{H'_{mn}\})$$

Para que la probabilidad del conjunto de elementos $\{H_{mn}\}$ sea invariante bajo transformaciones ortogonales, sólo puede ser función de la traza de H o de sus potencias, ya que son las únicas combinaciones de los elementos que son invariantes bajo transformaciones ortogonales:

$$\text{Tr}(H') = \text{Tr}(OHO^T) = \text{Tr}(HOO^T) = \text{Tr}(H)$$

y lo mismo ocurre para la traza de cualquier potencia de H.

Además, los elementos de la matriz aleatoria tienen que ser independientes unos de otros (es decir, el valor que tome un elemento no puede venir condicionado por el que tome otro); la probabilidad del conjunto se debe poder escribir por tanto como:

$$p(\{H_{mn}\}) = \prod_{n,m} p(H_{mn})$$

Sólo hay una forma funcional que reúne los requisitos descritos, esto es, que depende sólo de $\text{Tr}(H)$, $\text{Tr}(H^2)$, $\text{Tr}(H^3)$,... y es tal que la probabilidad del conjunto de elementos es igual al producto de las probabilidades de cada elemento individualmente:

$$p(\{H_{mn}\}) = C e^{-B \text{Tr}(H) - A \text{Tr}(H^2)}$$

La exponencial asegura que la probabilidad del conjunto es igual al producto de probabilidades individuales siempre que no aparezcan trazas de potencias de H superiores a 2; de hecho, se puede incluir $\text{Tr}(H^2)$ sólo si H es simétrica (que es el caso que estamos manejando), ya que las matrices simétricas cumplen: $\text{Tr}(H^2) = \sum_{n,m} H_{nm}^2$.

La matriz H, al ser real y simétrica, puede diagonalizarse mediante una transformación ortogonal obteniéndose $(H_D)_{nm} = E_n \delta_{nm}$, siendo E_n las autoenergías del Hamiltoniano. Para la traza se tiene entonces:

$$\text{Tr}(H) = \text{Tr}(OH_D O^T) = \text{Tr}(H_D O O^T) = \text{Tr}(H_D) = \sum_n^N E_n = E_T$$

Para simplificar la expresión de la probabilidad, se impondrá la energía media $\bar{E} = \text{Tr}(H) / N = E_T / N$ como el punto de referencia para la energía (es decir, como energía

cero). Teniendo esto en cuenta y haciendo uso de la propiedad $\text{Tr}(H^2) = \sum_{n,m} H_{nm}^2$ expresada anteriormente, se tiene:

$$p(\{H_{mn}\}) = C e^{-A \sum_{n,m} H_{nm}^2}$$

El factor C puede fijarse con la condición de normalización de la probabilidad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(\{H_{mn}\}) \prod_{m,n} dH_{mn} = 1$$

Se trata de un producto de las siguientes integrales:

- N integrales que contienen los elementos de la diagonal y que son del tipo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-AH_{nn}^2} dH_{nn} = 2 \int_0^{\infty} e^{-AH_{nn}^2} dH_{nn} = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{A}} = \sqrt{\frac{\pi}{A}}$$

- N(N-1) integrales que contienen elementos de fuera de la diagonal, cada uno de los cuales aparece dos veces en la exponencial ya que $H_{nm} = H_{mn}$, dando lugar a:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2AH_{nm}^2} dH_{nm} = 2 \int_0^{\infty} e^{-2AH_{nm}^2} dH_{nm} = 2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2A}} = \sqrt{\frac{\pi}{2A}}$$

Una vez calculado el valor de estas integrales, el valor de la constante C es:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} p(\{H_{mn}\}) \prod_{m,n} dH_{mn} = 1 &\Rightarrow C \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-AH_{nn}^2} dH_{nn} \right]^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2AH_{nm}^2} dH_{nm} \right]^{N(N-1)} = 1 \Rightarrow \\ C \left[\frac{\pi}{A} \right]^{N/2} \left[\frac{\pi}{2A} \right]^{N(N-1)} &= 1 \Rightarrow C = \left[\frac{A}{\pi} \right]^{N/2} \left[\frac{2A}{\pi} \right]^{N(N-1)/2} \end{aligned}$$

Por último, la constante A puede expresarse de forma muy simple en función, por ejemplo, de la varianza de un elemento de la diagonal considerando su distribución de probabilidad (es decir, el promedio del cuadrado de dicho elemento):

$$\begin{aligned} \langle H_{nn}^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} H_{nn}^2 \sqrt{\frac{A}{\pi}} e^{-AH_{nn}^2} dH_{nn} = 2 \sqrt{\frac{A}{\pi}} \int_0^{\infty} H_{nn}^2 e^{-AH_{nn}^2} dH_{nn} = 2 \sqrt{\frac{A}{\pi}} \frac{\sqrt{\pi}}{2^2 \sqrt{A^3}} = \frac{1}{2A} \Rightarrow \\ A &= \frac{1}{2 \langle H_{nn}^2 \rangle} \end{aligned}$$

Agrupando constantes se obtiene finalmente para la densidad de probabilidad correlacionada de los elementos de la matriz aleatoria de la clase ortogonal:

$$p(\{H_{mn}\}) = 2^{-\frac{N}{2}} \left(\pi \langle H_{nn}^2 \rangle \right)^{-\frac{N^2}{2}} e^{-\frac{\sum_{n,m} H_{nm}^2}{2 \langle H_{nn}^2 \rangle}}$$

El conjunto de matrices reales aleatorias cuyos elementos poseen la densidad de probabilidad anterior constituye el conjunto gaussiano ortogonal (que se abrevia GOE, *Gaussian Orthogonal Ensemble*). Las densidades de probabilidad de los elementos de las matrices de las otras clases de universalidad se construyen de manera muy similar a la del conjunto ortogonal (de hecho, las expresiones son muy similares para todas ellas); las matrices aleatorias que siguen esas distribuciones de probabilidad se denominan conjunto gaussiano unitario (GUE) y conjunto gaussiano simpléctico (GSE). La siguiente tabla resume los tres conjuntos gaussianos:

Clase de universalidad	Las matrices reales aleatorias pertenecen al:	El conjunto de elementos de la matriz obedece la distribución de probabilidad $p(\{H_{mn}\}) =$
Unitaria	Conjunto gaussiano unitario (GUE)	$2^{-\frac{N}{2}} \left(\pi \langle H_{nn} ^2 \rangle \right)^{-N^2 + \frac{N}{2}} e^{-\frac{\sum_{n,m} [(Re(H_{nm}))^2 + (Im(H_{nm}))^2]}{2 \langle H_{nn} ^2 \rangle}}$
Ortogonal	Conjunto gaussiano ortogonal (GOE)	$2^{-\frac{N}{2}} \left(\pi \langle H_{nn}^2 \rangle \right)^{-\frac{N^2}{2}} e^{-\frac{\sum_{n,m} H_{nm}^2}{2 \langle H_{nn}^2 \rangle}}$
Simpléctica	Conjunto gaussiano simpléctico (GSE)	$2^{-\frac{N}{2}} \left(\pi \langle H_{nn} ^2 \rangle \right)^{-2N^2 + \frac{3N}{2}} e^{-\frac{\sum_{n,m} [(H_{nm})_0^2 + (H_{nm})_x^2 + (H_{nm})_y^2 + (H_{nm})_z^2]}{2 \langle H_{nn} ^2 \rangle}}$

Se observa que en las distribuciones de probabilidad la exponencial es esencialmente la misma: el sumatorio del módulo de cada elemento al cuadrado y todo ello dividido por dos veces la varianza del módulo de un elemento diagonal. En general, la distribución de probabilidad del conjunto de elementos puede escribirse:

$$p(\{H_{nm}\}) = 2^{-\frac{N}{2}} \left(\pi \langle |H_{nn}|^2 \rangle \right)^{-\frac{N+\kappa N(N-1)}{2}} e^{-\frac{\sum_{n,m} |H_{nm}|^2}{2 \langle |H_{nn}|^2 \rangle}},$$

donde κ es el número de componentes de cada elemento: $\kappa = 1$ para GOE, $\kappa = 2$ para GUE (parte real y parte imaginaria) y $\kappa = 4$ para GSE (parte real y tres componentes del cuaternio).

En la siguiente tabla aparecen las distribuciones de probabilidad para los elementos individualmente (o sus componentes) tomando $\langle |H_{nn}|^2 \rangle = 1$, y se traduce a la notación $N(\mu, \sigma)$ de las distribuciones normales:

Conjunto	Distribución de probabilidad de los elementos de la diagonal	Distribución de probabilidad de los elementos de fuera de la diagonal
Conjunto gaussiano unitario (GUE)	$p(H_{nn}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-H_{nn}^2}$ $N(0, 1/\sqrt{2})$	$p(H_{nm}) = \frac{2}{\pi} e^{-2 H_{nm} ^2}$ Para cada componente: $N(0, 1/2)$
Conjunto gaussiano ortogonal (GOE)	$p(H_{nn}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{H_{nn}^2}{2}}$ $N(0, 1)$	$p(H_{nm}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-H_{nm}^2}$ $N(0, 1/\sqrt{2})$
Conjunto gaussiano simpléctico (GSE)	$p(H_{nn}) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} e^{-2H_{nn}^2}$ $N(0, 1/2)$	$p(H_{nm}) = \frac{4}{\pi} e^{-4 H_{nm} ^2}$ Para cada componente: $N(0, 1/2\sqrt{2})$

A partir de la distribución de probabilidad conjunta para los elementos de la matriz del Hamiltoniano se puede obtener la distribución de probabilidad conjunta para los autovalores de esa matriz, es decir, para las autoenergías del Hamiltoniano; las expresiones que se obtienen, que contienen las autoenergías en lugar de todos los elementos de la matriz del Hamiltoniano, son más fáciles de comparar con el experimento.

A continuación se detalla la obtención de la j.p.d.f. para las autoenergías de un Hamiltoniano de la clase ortogonal:

La matriz de la clase ortogonal H se puede diagonalizar a través de una transformación ortogonal: $H = OH_D O^T$, con $OO^T = I$, siendo $H_D = \text{diag}(E_1, E_2, \dots, E_N)$ (una matriz diagonal cuyos elementos son las autoenergías). Para esta matriz diagonal se tiene:

$$p(\{H_{nm}\}) dH_{nm} = C e^{-A \sum_k E_k^2} |J| dE_k do_j$$

Para obtener esta expresión se ha efectuado un cambio de variable en el diferencial, que pasa a depender de las autoenergías y de los elementos de la matriz O ; al hacer este cambio de variable en el diferencial se ha tenido que incluir como factor el determinante de la matriz jacobiana del cambio de variables:

$$J = \frac{\partial H_{nm}}{\partial(E_k, o_j)}$$

La derivada de la matriz H respecto a las autoenergías es:

$$\frac{\partial H}{\partial E_k} = O \frac{\partial H_D}{\partial E_k} O^T \Rightarrow \frac{\partial H_{nm}}{\partial E_k} = O_{nk} O_{mk}$$

Mientras que la derivada respecto a los elementos de la matriz O es:

$$\frac{\partial H}{\partial o_j} = \frac{\partial O}{\partial o_j} H_D O^T + O H_D \frac{\partial O^T}{\partial o_j}$$

La siguiente propiedad:

$$\frac{\partial(OO^T)}{\partial o_j} = \frac{\partial I}{\partial o_j} \Rightarrow \frac{\partial O}{\partial o_j} O^T + O \frac{\partial O^T}{\partial o_j} = 0 \Rightarrow O^T \frac{\partial O}{\partial o_j} = -\frac{\partial O^T}{\partial o_j} O = S^j$$

permite reescribir la derivada de H respecto a los elementos de O como:

$$\frac{\partial H}{\partial o_j} = O O^T \frac{\partial O}{\partial o_j} H_D O^T + O H_D \frac{\partial O^T}{\partial o_j} O O^T = O S^j H_D O^T - O H_D S^j O^T = O (S^j H_D - H_D S^j) O^T$$

Para cada componente de la matriz H la expresión anterior proporciona:

$$\begin{aligned} \frac{\partial H_{nm}}{\partial o_j} &= \sum_{\alpha, \beta} O_{n\alpha} (S^j H_D - H_D S^j)_{\alpha\beta} O_{m\beta} = \sum_{\alpha, \beta} O_{n\alpha} O_{m\beta} \left((S^j H_D)_{\alpha\beta} - (H_D S^j)_{\alpha\beta} \right) = \\ &= \sum_{\alpha, \beta} O_{n\alpha} O_{m\beta} (S^j_{\alpha\gamma} H_{D\gamma\beta} - H_{D\alpha\gamma} S^j_{\gamma\beta}) = \sum_{\alpha, \beta} O_{n\alpha} O_{m\beta} (S^j_{\alpha\beta} E_\beta - E_\alpha S^j_{\alpha\beta}) = \sum_{\alpha, \beta} O_{n\alpha} O_{m\beta} S^j_{\alpha\beta} (E_\beta - E_\alpha) \end{aligned}$$

Los elementos de la matriz jacobiana se pueden escribir entonces como:

$$J = \frac{\partial H_{nm}}{\partial (E_k, o_j)} = \hat{O} M$$

siendo $\hat{O} = O_{n\alpha} O_{m\beta}$ y $M = \begin{pmatrix} \delta_{\alpha\beta} & 0 \\ 0 & S^j_{\alpha\beta} (E_\beta - E_\alpha) \end{pmatrix}$. Su determinante es ahora muy simple de

calcular:

$$|J| = |\hat{O}| \cdot |M| = |\hat{O}| \cdot \prod_{\alpha > \beta} S^j_{\alpha\beta} (E_\beta - E_\alpha) = |\hat{O}| \cdot |S| \cdot \prod_{\alpha > \beta} (E_\beta - E_\alpha)$$

El producto de determinantes $|\hat{O}| \cdot |S|$ es una constante que no depende de las autoenergías; la distribución de probabilidad conjunta de éstas para el conjunto gaussiano ortogonal es por tanto:

$$p(\{E_k\}) \propto \prod_{\alpha > \beta} (E_\beta - E_\alpha) e^{-A \sum_k E_k^2},$$

donde la constante de proporcionalidad, independiente de las autoenergías, no es relevante.

La siguiente expresión es válida para los tres conjuntos gaussianos:

$$p(\{E_k\}) \propto \prod_{\alpha > \beta} (E_\beta - E_\alpha)^\kappa e^{-A \sum_k E_k^2},$$

con $\kappa = 1$ para GOE, $\kappa = 2$ para GUE y $\kappa = 4$ para GSE (igual que en la forma general dada para la j.p.d.f. de los elementos de la matriz).

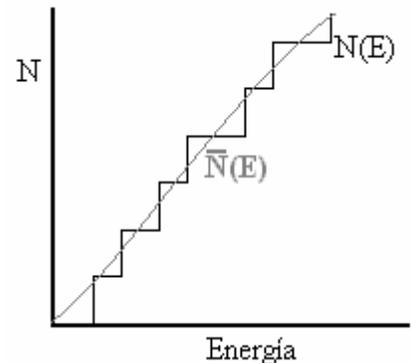
3.3. ESTADÍSTICA DE NIVELES

Una vez obtenida la densidad de niveles de energía $g(E)$ (por cálculos teóricos o experimentalmente) de un sistema cuántico, las huellas del caos del análogo clásico en el sistema cuántico se estudian a través de tratamientos estadísticos del conjunto de niveles. Estos tratamientos estadísticos exigen la aplicación de una operación previa sobre el espectro que se denomina *unfolding*, que podría traducirse por reescalamiento; consiste en asignar a cada nivel de energía un número (adimensional) según la siguiente correspondencia:

$$E_n \rightarrow \varepsilon_n = \tilde{N}(E_n) = \int_0^{E_n} \tilde{g}(E') dE' ,$$

donde $\tilde{g}(E)$ es la parte suave de la función densidad de niveles que ya introdujimos anteriormente. Su integral proporciona una aproximación suave a la función escalón (ver figura).

Según esta correspondencia, a cada nivel de energía se le asigna el número de niveles que deja por debajo de sí (incluyéndole a él) calculado según la aproximación suave a la función escalón. El nuevo conjunto de niveles posee una densidad media de 1, lo que significa que se ha ignorado la información que el espectro real ofrecía acerca de la densidad media de niveles pero se mantiene la información acerca de las fluctuaciones de los niveles respecto a ese valor medio. De este modo se construyen espectros homogéneos que permiten la comparación entre diferentes sistemas o entre intervalos de energía muy diferentes dentro del espectro de un mismo sistema.



La densidad media de estados puede calcularse en casos muy concretos aplicando el razonamiento teórico descrito en una sección precedente en relación a la fórmula de la traza; a partir de la función obtenida analíticamente se calcula la aproximación suave a la función escalón y el *unfolding* se realiza sin mayor problema. Cuando esta densidad media es desconocida, se puede hacer una estimación según la expresión de la densidad media local:

$$\tilde{g}_L(E_n) = \frac{2\nu}{E_{n-\nu} - E_{n+\nu}},$$

en la que se asume que la densidad media de niveles es aproximadamente lineal en un rango de energías centrado en E_n y que contiene 2ν niveles. Otra posibilidad es emplear el método de ensanchamiento gaussiano:

$$\tilde{g}_G(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \sum_n e^{-\frac{(E-E_n)^2}{2\sigma^2}},$$

que pretende aproximar las deltas de Dirac situadas en los niveles de energía (según la definición original que ya vimos: $g(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$) por gaussianas; la densidad media sólo recibe contribuciones importantes cuando $|E-E_n|$ es menor o del orden de σ . Los parámetros σ y ν fijan el rango de energía con el que se calcula la densidad media local.

Existe también la posibilidad de construir directamente la aproximación suave a la función escalón mediante el ajuste a esa función escalón de una función suave (por ejemplo, polinómica).

La arbitrariedad en la elección del método de estimación de la densidad media de niveles o, dentro de un mismo método, la arbitrariedad en la elección de los parámetros (ν , σ , o el grado del polinomio de ajuste, por ejemplo) puede tener influencia a la hora de identificar el caos cuántico en un sistema, influencia que depende del tratamiento estadístico concreto que se lleve a cabo (algunos son más sensibles que otros).

Una vez efectuado el *unfolding* puede aplicarse el tratamientos estadístico que se estime oportuno para detectar el caos cuántico; el más simple es el cálculo de la

distribución de distancias entre próximos vecinos; se trata de construir la función de densidad de probabilidad de la distancia entre dos niveles consecutivos, que se suele denominar s . Para ello se calcula un histograma que refleje, para un conjunto de intervalos de s de igual amplitud, el número de datos que contiene cada uno. El espaciamiento entre niveles contiguos que realmente se estudia es $s_n = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_n$, es decir, el calculado mediante los niveles reescalados, cumpliéndose entonces $\langle s \rangle = 1$. Es obvio que esta estadística proporciona información acerca de las correlaciones de corto alcance.

A partir de la distancia entre próximos vecinos se define también el estadístico δ_n :

$$\delta_n = \sum_{i=1}^n (s_i - \langle s \rangle) \quad n = 1, \dots, N-1,$$

que acumula las desviaciones respecto del promedio ($\langle s \rangle = 1$) de las distancias entre próximos vecinos por debajo del nivel ε_n (de un total de N niveles). De particular interés es el espectro de potencias de las fluctuaciones respecto al promedio, $S(k) = |\hat{\delta}_k|^2$, donde $\hat{\delta}_k$

es la transformada de Fourier de δ_n : $\hat{\delta}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \delta_n e^{\frac{-2\pi i kn}{N}}$.

Para estudiar las correlaciones de alcance mayor (que se determina con un parámetro, L), es muy común el cálculo del estadístico Δ_3 o rigidez espectral:

$$\Delta_3(a, L) = \frac{1}{L} \int_a^{a+L} [N(\varepsilon) - A\varepsilon - B]^2 d\varepsilon,$$

donde A y B son los parámetros de la recta que mejor ajusta la función escalón $N(\varepsilon)$, que da el número de niveles reescalados por debajo de ε . El parámetro a localiza un intervalo de energía concreto del espectro, y L determina su amplitud (sobre la cual se promedia). Con el estadístico $\Delta_3(L) = \langle \Delta_3(a, L) \rangle_a$ (es decir, $\Delta_3(a, L)$ promediado sobre intervalos) se mide la desviación del espectro respecto a uno con niveles equiespaciados.

También se usa el estadístico Σ^2 o varianza del número de niveles:

$$\Sigma^2(L) = \langle N(\varepsilon, L)^2 \rangle - L^2,$$

donde $N(\varepsilon, L)$ es el número de niveles reescalados en el intervalo de longitud L , siendo $\langle N(\varepsilon, L) \rangle = L$. Queda claro entonces que $\Sigma^2(L)$ es la expresión de la varianza que presenta el número de niveles reescalados del intervalo de longitud L en el conjunto de todos los intervalos.

Cada uno de los conjuntos gaussianos presenta unas características muy determinadas en cada uno de los estadísticos mencionados; aquí nos centraremos solamente en la distribución de distancias entre próximos vecinos.

La densidad de probabilidad de las distancias entre autoenergías contiguas para un sistema cuántico no caótico (es decir, clásicamente integrable) se calcula suponiendo que esas autoenergías son totalmente independientes unas de otras. Esta suposición se basa en el hecho de que las simetrías del sistema permiten la diagonalización completa de la matriz del Hamiltoniano, y por tanto cada autovalor constituye su propia clase de simetría, independiente de las demás.

Sea $p(s)ds$ la probabilidad de que exista una autoenergía en el intervalo de energías $[s, s+ds]$ y ninguna en el intervalo $[0, s]$; sea μds la probabilidad de encontrar una única autoenergía en un intervalo de amplitud ds . La probabilidad de que no exista autoenergía en un intervalo concreto ds es por tanto $1-\mu ds$. La probabilidad de que no exista autoenergía en una sucesión de $N = s/ds$ intervalos de amplitud ds es $(1-\mu ds)^{s/ds}$, siempre que no exista correlación entre las posiciones de las autoenergías (tal como estamos suponiendo). Por último, la probabilidad de encontrar una única autoenergía en un intervalo s es el producto de la probabilidad de que no existan autoenergías en $[0, s]$ por la probabilidad de que aparezca una autoenergía en $[s, s+ds]$, es decir:

$$p(s) \mu ds = (1-\mu ds)^{s/ds} \mu ds \Rightarrow p(s) = \mu (1-\mu ds)^{s/ds}$$

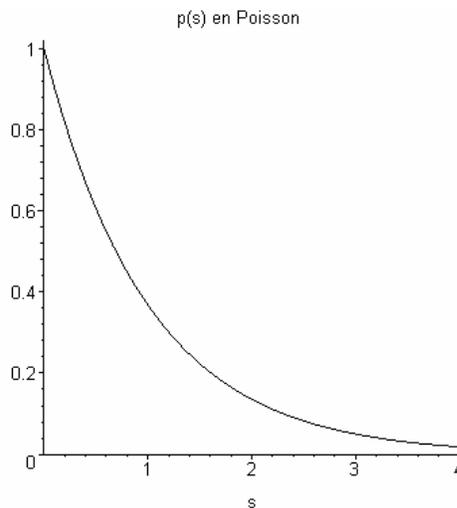
Calculando el límite de esta función cuando la amplitud ds tiende a cero se tiene:

$$p(s) = \mu(1 - \mu ds)^{s/ds} = \mu \left(1 - \frac{\mu s}{s/ds} \right)^{s/ds} \xrightarrow{ds \rightarrow 0} \mu e^{-\mu s}$$

El promedio de s es entonces:

$$\langle s \rangle = \frac{\int_0^{\infty} s \mu e^{-\mu s} ds}{\int_0^{\infty} \mu e^{-\mu s} ds} = \frac{\mu \frac{1}{\mu^2}}{1} = \frac{1}{\mu}$$

Dado que s es la distancia entre niveles reescalados, su promedio es $\langle s \rangle = 1$; del resultado anterior se obtiene que $\mu = 1$ y por tanto la densidad de probabilidad que se emplea es $p(s) = e^{-s}$; se denomina distribución de Poisson y gráficamente toma la siguiente forma:



En este punto es necesario destacar una excepción muy importante que aparece en los sistemas integrables: el oscilador armónico. Un simple cálculo de mecánica cuántica proporciona las autoenergías del sistema, que para una dimensión son:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

, donde $n = 0, 1, 2, \dots$ es el número cuántico que etiqueta las autoenergías. La distancia entre dos niveles consecutivos es para el oscilador armónico un valor constante: $s = E_{n+1} - E_n$

$= \eta\omega$; por tanto, las autoenergías no se distribuyen aleatoriamente, como se consideró antes, y no se obtiene la distribución de Poisson para la distancia s entre niveles. En su lugar, la densidad de probabilidad $p(s)$ toma una forma muy característica: se anula para todo valor de s excepto en $s = \eta\omega$, y además su norma tiene que ser uno. Se trata entonces de una distribución delta de Dirac situada en $s = \eta\omega$: $p(s) = \delta(s - \eta\omega)$.

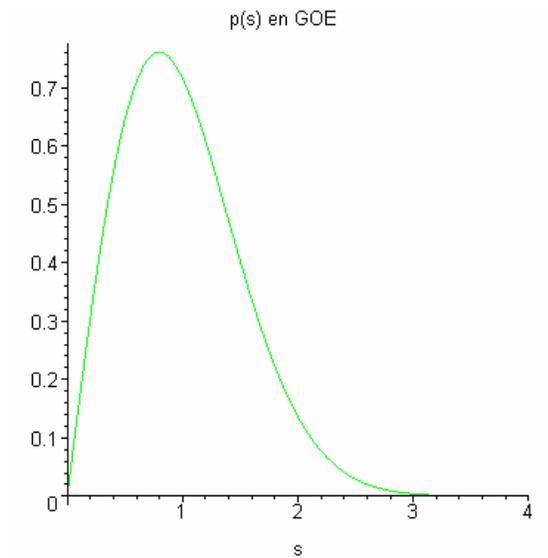
Para sistemas clásicamente no integrables, la densidad de probabilidad de distancias entre autoenergías contiguas para cada uno de los conjuntos gaussianos se puede obtener teóricamente a partir de la j.p.d.f. de las autoenergías de cada conjunto calculadas anteriormente; en el caso muy simple de matrices 2×2 el método partiría de la siguiente expresión:

$$p(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 \int_{-\infty}^{\infty} dE_2 p(E_1, E_2) \delta(s - |E_1 - E_2|) = C \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 \int_{-\infty}^{\infty} dE_2 |E_1 - E_2|^\kappa e^{-A \sum_{n=1}^2 E_n^2} \delta(s - |E_1 - E_2|),$$

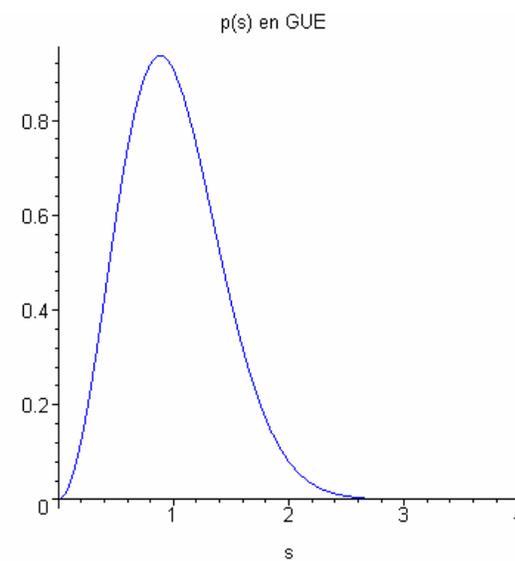
donde las constantes A y C se pueden fijar mediante las condiciones de normalización $\int_0^{\infty} p(s) ds = 1$ y $\int_0^{\infty} s p(s) ds = 1$, y donde el parámetro κ toma valores distintos según el conjunto gaussiano en cuestión.

Para matrices generales $N \times N$, los resultados que se obtienen para la densidad de probabilidad de distancias entre autoenergías contiguas para cada uno de los conjuntos gaussianos son:

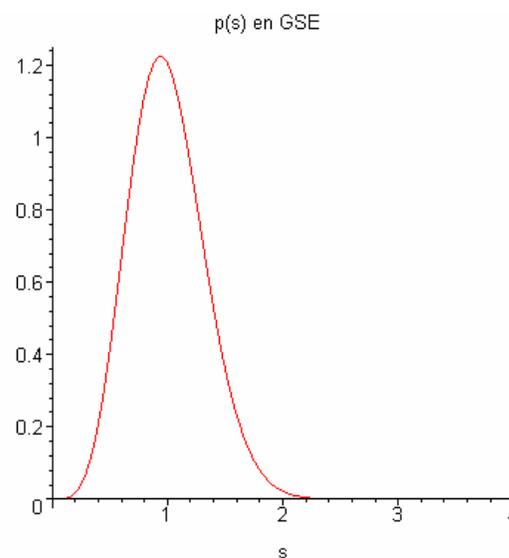
$$\text{GOE: } p(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4}s^2}$$



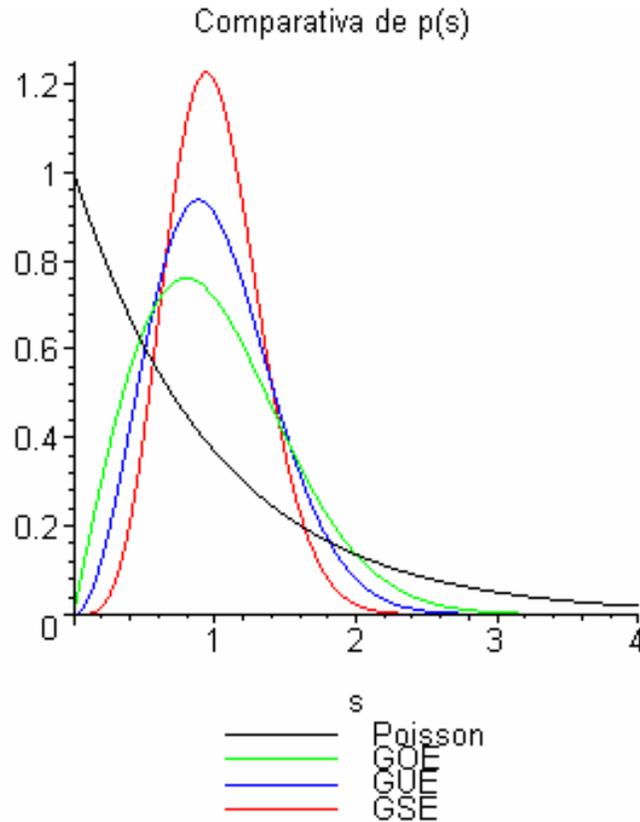
$$\text{GUE: } p(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 e^{-\frac{4}{\pi}s^2}$$



$$\text{GSE: } p(s) = \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 e^{-\frac{64}{9\pi}s^2}$$



A continuación se representan las tres funciones anteriores junto a Poisson en un mismo gráfico; por la forma de las densidades de probabilidad de las distancias entre autoenergías en GOE, GUE y GSE se deduce que las autoenergías muestran una tendencia a repelerse entre sí, lo que implica un cierto orden en la distribución del espectro, lo cual no ocurre en Poisson, donde las autoenergías pueden encontrarse muy próximas entre sí.



En el caso de sistemas que no son ni puramente integrables ni puramente caóticos se pueden construir densidades de probabilidad para la distancia entre autoenergías que puedan ajustarse a su comportamiento mixto a través de uno o más parámetros; una de estas distribuciones es la de Brody:

$$p(s) = (\kappa + 1) \left[\Gamma\left(\frac{\kappa + 2}{\kappa + 1}\right) \right]^{\kappa + 1} s^{\kappa} e^{-\left[\Gamma\left(\frac{\kappa + 2}{\kappa + 1}\right) \right]^{\kappa + 1} s^{\kappa + 1}}$$

, donde $\Gamma(\kappa) = \int_0^\infty x^{\kappa-1} e^{-x} dx$ es la función gamma de Euler. Cuando $\kappa = 0$ se recupera la distribución de Poisson, y cuando $\kappa = 1$ se recupera la distribución para GOE. Para GUE y GSE la interpolación de Brody no es válida.

Otra de estas distribuciones es la de Izrailev:

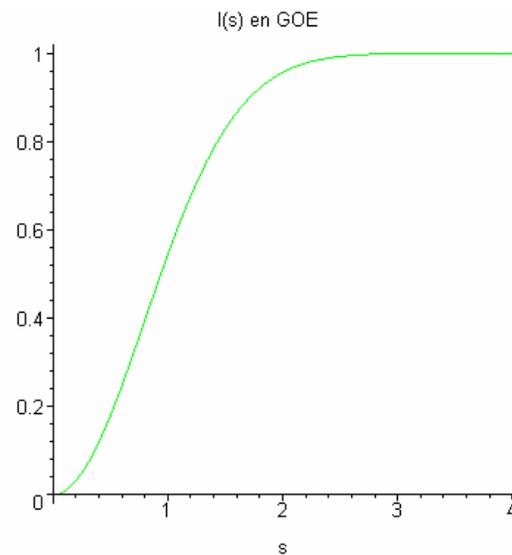
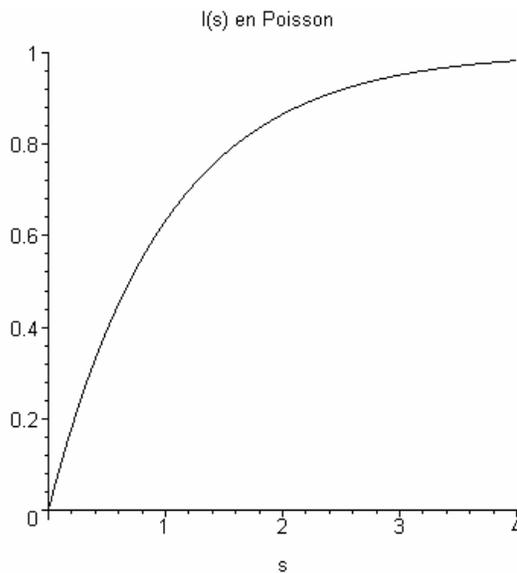
$$p(s) = A s^\kappa e^{-\frac{\pi^2}{16} \kappa s^2 - \left(C - \frac{\kappa}{2}\right) \frac{\pi}{2} s},$$

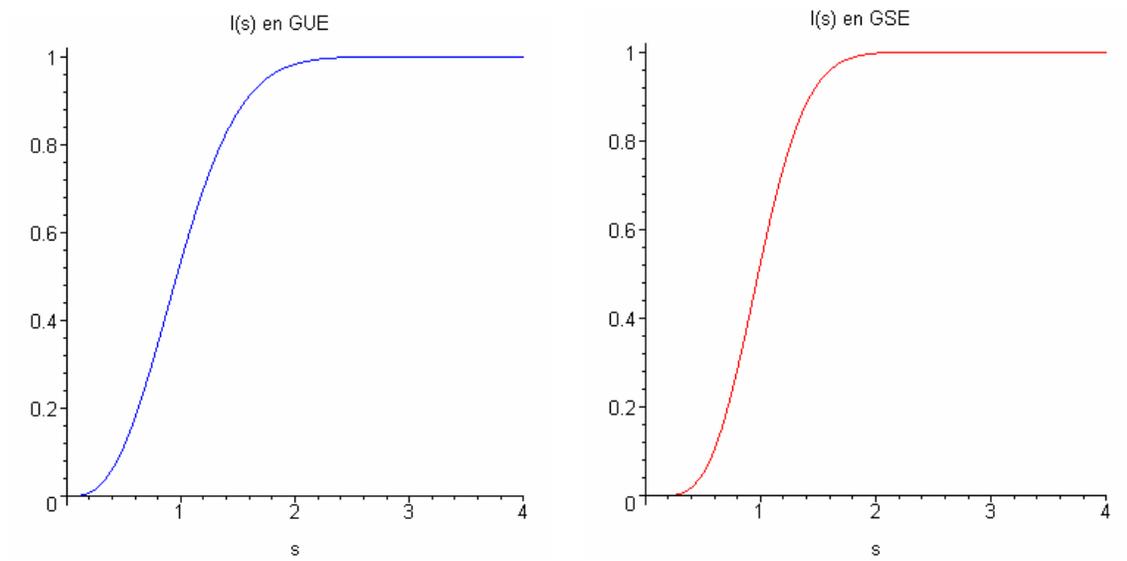
donde A y C son constantes que se obtienen de las condiciones de normalización; permite ajustar la distribución de Poisson (con $\kappa = 0$), y la distribución para GOE (con $\kappa = 1$) y para GUE (con $\kappa = 2$) con un cierto grado de aproximación.

Cuando se comparan estas distribuciones teóricas con datos experimentales o numéricos muchas veces conviene eliminar las fluctuaciones estadísticas de las autoenergías individuales, para lo cual es mejor comparar la distribución integrada:

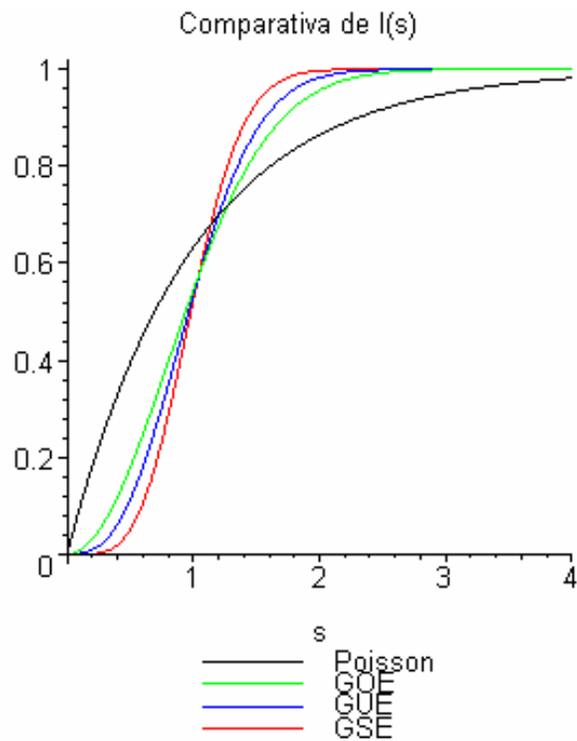
$$I(s) = \int_0^s p(s') ds'$$

De este modo las fluctuaciones de los autovalores en uno y otro sentido tienden a compensarse; las cuatro gráficas siguientes muestran la función I(s) para Poisson, GOE, GUE y GSE:





Las cuatro curvas aparecen juntas en la siguiente gráfica:



Las distribuciones de sistemas mixtos, como las de Brody o Izrailev también pueden integrarse para ser comparadas con datos experimentales o numéricos.

4. MECÁNICA CUÁNTICA RELATIVISTA

4.1. ECUACIONES DE EVOLUCIÓN RELATIVISTAS

En mecánica cuántica no relativista, la evolución temporal de la función de onda ψ que describe el estado de un sistema viene dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi,$$

donde el operador Hamiltoniano H para una partícula libre es:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{(-i\hbar \nabla)^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2,$$

siendo m la masa de la partícula. La ecuación de Schrödinger es por tanto:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

En el caso de una partícula libre relativista, la energía cinética toma la expresión que se deduce en relatividad especial, por lo que el Hamiltoniano correspondiente es:

$$H = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4} = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4}$$

La interpretación de la raíz cuadrada en este operador admite varias posibilidades, algunas de las cuales conducen a las ecuaciones de evolución que se tratarán en este trabajo. La primera opción es expandir la raíz en serie de potencias, pero ello incluiría

potencias arbitrariamente altas de la derivada ∇^2 ; otra posibilidad es partir del operador H^2 , que ya no contiene raíz, e incluirlo en la ecuación de evolución:

$$-\eta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = H^2 \psi = (-\eta^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4) \psi,$$

donde ahora la derivada temporal es de segundo orden (ya que se aplica dos veces el operador H a la función de onda). De aquí se obtiene la ecuación de Klein-Gordon, que se puede reescribir como:

$$\left[\frac{\partial}{\partial t^2} + \left(\frac{mc}{\eta} \right)^2 \right] \psi = 0$$

Otro método consiste en mantener la linealidad en todas las derivadas en la ecuación de evolución reescribiendo el Hamiltoniano en la forma:

$$H = -i\eta c \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2,$$

donde los coeficientes $(\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3) = \vec{\alpha}$ y β han de ser tales que se cumpla:

$$H^2 = -\eta^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4,$$

que es el Hamiltoniano de partida (elevado al cuadrado). Esta condición da lugar a las siguientes relaciones entre los coeficientes introducidos:

$$(\alpha^i)^2 = 1 \quad \alpha^i \beta + \beta \alpha^i = 0 \quad i=1,2,3$$

$$\beta^2 = 1 \quad \alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i = 0 \quad i,j=1,2,3; i \neq j$$

Las relaciones anteriores no pueden ser satisfechas por números complejos, por lo que se asume que los coeficientes son matrices de orden n . En concreto, se puede demostrar que el orden mínimo necesario para encontrar cuatro matrices que cumplan las condiciones anteriores es $n = 4$ (esto se puede comprobar, por ejemplo, aplicando la teoría de caracteres en teoría de grupos finitos a un grupo construido con los productos de las constantes). Un posible conjunto de cuatro matrices de orden cuatro válidas es el siguiente:

$$\beta = \begin{pmatrix} I_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} \\ 0_{2 \times 2} & -I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \alpha^i = \begin{pmatrix} 0_{2 \times 2} & \sigma^i \\ \sigma^i & 0_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad i=1,2,3$$

con $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ las matrices de Pauli, y $0_{2 \times 2}$ e $I_{2 \times 2}$ la matriz cuadrada de ceros de orden 2 y la matriz identidad de orden 2 respectivamente.

La ecuación de evolución temporal resultante es:

$$i\eta \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-i\eta c \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2 \right) \psi,$$

que se denomina ecuación de Dirac. Consta en realidad de cuatro ecuaciones en derivadas parciales de orden uno, relativas a cada una de las cuatro componentes que ahora constituyen la función de onda $\psi = (\psi_0, \psi_1, \psi_2, \psi_3)$ (bispinor o espinor de Dirac).

Una propiedad fundamental de las partículas cuya evolución es descrita por la ecuación de Dirac es su momento angular; el momento angular orbital se define como:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times (-i\eta \nabla),$$

y se comprueba fácilmente que no es una cantidad conservada, ya que no conmuta con el Hamiltoniano; en concreto el conmutador vale $[\mathbf{H}, \mathbf{L}] = \eta^2 c (\mathbf{p} \times \nabla)$. Para encontrar un momento angular de la partícula que sea conservado, \mathbf{J} , es necesario añadir un término al momento angular orbital $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, donde \mathbf{S} tiene que cumplir: $[\mathbf{H}, \mathbf{S}] = -\eta^2 c (\mathbf{p} \times \nabla)$ para que $[\mathbf{H}, \mathbf{J}] = 0$. Este momento angular adicional tiene la expresión:

$$\mathbf{S} = \frac{\eta}{2} \boldsymbol{\Sigma} = \frac{\eta}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix},$$

donde las tres componentes de $\boldsymbol{\sigma}$ son las tres matrices de Pauli escritas antes. No se trata de un momento angular orbital sino de un momento angular intrínseco de la partícula que se denomina espín. El operador s_3 (tercera componente de \mathbf{S}) posee los autovalores (dobles) $+\eta/2$ y $-\eta/2$, y por eso se dice que la partícula descrita posee espín $1/2$. En conclusión, con la ecuación de Dirac no sólo introducimos la forma relativista de la energía, sino también el espín $1/2$. En la ecuación de Klein-Gordon se cumple $[\mathbf{H}, \mathbf{L}] = 0$ y por tanto describe partículas de espín 0.

A continuación se estudiarán las soluciones de la ecuación de Dirac en el límite no relativista extremo, es decir, para una partícula libre en reposo ($\vec{p} = -i\hbar\nabla = 0$, la función de onda no depende de la posición):

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \beta mc^2\psi \Rightarrow \frac{\partial\psi}{\psi} = \frac{-imc^2}{\hbar}\beta\partial t$$

Teniendo en cuenta la forma matricial de β , la solución para cada una de las componentes de ψ es:

$$\psi_{1,2} = c_{1,2} e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \qquad \psi_{3,4} = c_{3,4} e^{\frac{imc^2}{\hbar}t}$$

donde las c son constantes arbitrarias y mc^2 es la energía en reposo de la partícula. El signo de la exponencial es diferente para cada pareja de soluciones, lo que implica que la energía es de diferente signo; se tomarán ψ_1, ψ_2 como soluciones de energía positiva y ψ_3, ψ_4 como soluciones de energía negativa:

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \\ c_2 e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \\ c_3 e^{\frac{imc^2}{\hbar}t} \\ c_4 e^{\frac{imc^2}{\hbar}t} \end{pmatrix} = e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + e^{\frac{imc^2}{\hbar}t} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix}$$

El propio Dirac proporcionó una interpretación de las soluciones de energía negativa que las conecta con lo que hoy día se conoce como partículas de antimateria. Según Dirac, todos los estados de energía negativa están llenos y el principio de exclusión de Pauli prohíbe transiciones a esos estados; el vacío estaría constituido entonces por todos los estados de energía negativa llenos (el mar de Dirac) y todos los de energía positiva vacíos; si un fotón excita a un electrón de energía negativa a un estado de energía positiva se observa la aparición de un electrón con energía positiva y carga negativa, y además queda un hueco en el mar de Dirac que se observaría como una partícula de energía también positiva, con la misma masa que el electrón, pero carga positiva. Este hueco en el

mar de energía negativa reinterpretado como partícula de energía positiva se denomina hoy positrón, la antipartícula del electrón.

La ecuación de Klein-Gordon también da lugar a soluciones de energía negativa, pero la interpretación de Dirac falla en este caso porque el principio de exclusión de Pauli no afecta a los bosones (caso de las partículas descritas por la ecuación de Klein-Gordon, que como vimos antes tienen espín cero). En su lugar se aplica la interpretación de Feynman: la emisión (absorción) de una partícula de energía y momento negativos en un proceso dado es equivalente a la absorción (emisión) de una antipartícula de energía y momento positivos en ese mismo proceso. Esta interpretación es aplicable tanto a bosones como a fermiones.

Una vez estudiadas e interpretadas las soluciones de la ecuación de Dirac para una partícula libre en reposo, se obtendrá la solución general para una partícula libre de momento \vec{p} (solución de onda plana). Para simplificar la notación se emplearán unidades naturales en las que $c = \hbar = 1$, el cuadrimomento $p = (E, \vec{p})$ y el cuadvectores posición $x = (t, \vec{x})$; la solución de onda plana para una partícula de masa m es:

$$\psi = e^{i p \cdot x} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix},$$

con $p \cdot x = Et - \vec{p} \cdot \vec{x}$ (producto de cuadvectores en espacio de Minkowski), y donde φ y χ son cada uno de ellos un espinor de dos componentes (espinor de Pauli); la división del biespinor total en dos espinores se justifica por la descomposición obtenida arriba para la solución de partícula en reposo (en la que el espinor superior correspondía a soluciones de energía positiva y el espinor inferior a soluciones de energía negativa). Introduciendo esta solución en la ecuación de Dirac se obtiene:

$$\begin{pmatrix} mI & \pm \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \pm \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & -mI \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \pm E \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} (mI \pm E)\varphi \pm \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \chi = 0 \\ \pm \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \varphi - (mI \pm E)\chi = 0 \end{cases}$$

Para energía positiva el sistema de ecuaciones proporciona $\chi = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + m} \varphi$; para energía negativa conviene despejar el otro espinor, obteniéndose: $\varphi = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + m} \chi$. Las soluciones quedan entonces:

Energía positiva:

$$\psi = e^{-ipx} \begin{pmatrix} \varphi \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + m} \varphi \end{pmatrix}$$

Energía negativa:

$$\psi = e^{ipx} \begin{pmatrix} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + m} \chi \\ \chi \end{pmatrix}$$

Cada una de estas expresiones consituye dos soluciones independientes, ya que cada espinor se puede escribir en términos de los elementos de la base:

$$\varphi^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \varphi^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad y \quad \chi^1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \chi^2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

En conclusión, las cuatro soluciones linealmente independientes para una partícula libre de masa m , espín $\frac{1}{2}$ y cuadrimomento p son (incluyendo un factor de normalización apropiado):

$$\psi_1 = e^{-ipx} u(\mathbf{p},1) = e^{-ipx} (E + m)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E + m} \\ \frac{p_x + ip_y}{E + m} \end{pmatrix} \quad \psi_2 = e^{-ipx} u(\mathbf{p},2) = e^{-ipx} (E + m)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_x - ip_y}{E + m} \\ -\frac{p_z}{E + m} \end{pmatrix}$$

$$\psi_3 = e^{ipx} v(\mathbf{p},1) = e^{ipx} (E + m)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \frac{p_x - ip_y}{E + m} \\ \frac{-p_z}{E + m} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \psi_4 = e^{ipx} v(\mathbf{p},2) = e^{ipx} (E + m)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} \frac{p_z}{E + m} \\ \frac{p_x + ip_y}{E + m} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Si en estas soluciones se recupera el límite para partícula en reposo ($p_x = p_y = p_z = 0$) y se les aplica la tercera componente del operador de espín (único momento angular en caso de reposo), se obtiene el valor de la tercera componente del espín de cada solución, que resulta ser (centrándonos sólo en el par electrón / positrón):

$$\begin{aligned} u(p,1) &\rightarrow \text{Electrones con } s_z = +\frac{1}{2} && \leftarrow \text{ANTIPARTÍCULA} \Rightarrow && v(p,1) \rightarrow \text{Positrones con } s_z = -\frac{1}{2} \\ u(p,2) &\rightarrow \text{Electrones con } s_z = -\frac{1}{2} && \leftarrow \text{ANTIPARTÍCULA} \Rightarrow && v(p,2) \rightarrow \text{Positrones con } s_z = +\frac{1}{2} \end{aligned}$$

El siguiente paso es el tratamiento de la ecuación de Dirac para partículas no libres, es decir, sometidas a un potencial. Se tratarán sólo los casos de interés en el estudio del caos cuántico relativista.

4.2. LAS LIMITACIONES DE LA MECÁNICA CUÁNTICA RELATIVISTA

La mecánica cuántica relativista, cuyos Hamiltonianos reflejan la definición de energía que proporciona la relatividad especial, no es una teoría consistente cuando pretende describir partículas individuales (o conjuntos fijos de ellas) sometidas a un potencial (a diferencia de la mecánica cuántica no relativista, que sí es consistente).

La equivalencia entre masa y energía en relatividad da lugar a que parte de la energía en un proceso determinado se convierta en nuevas partículas, o que varias partículas se aniquilen dando lugar a energía; la creación o aniquilación de partículas conserva algunas propiedades de éstas, lo que de hecho se traduce en creación o destrucción de pares partícula-antipartícula. La mecánica cuántica relativista no tiene en cuenta estos procesos, y se hace necesario definir un rango de energías en el que esos procesos no sean predominantes y por tanto la mecánica cuántica relativista sea aplicable.

La energía cinética media de las partículas, $K \approx \frac{1}{2} mv^2$, debe ser menor que la energía en reposo de un par de estas partículas: $K < 2 E_0 = 2mc^2$; de este modo se reducen las posibilidades de que parte de la energía cinética se emplee en crear nuevas partículas. Y para que tenga sentido la aplicación de la mecánica cuántica relativista y no la mecánica cuántica usual, es necesario que el parámetro β , definido como:

$$\beta = \frac{v^2}{c^2} \approx \frac{2K}{mc^2},$$

($0 < \beta < 1$) sea apreciable. El símbolo \approx empleado indica que se está usando la definición no relativista de la energía cinética cuando en realidad es precisamente el régimen (relativista o no) de la partícula lo que está en discusión; en régimen altamente relativista las expresiones anteriores no tienen sentido.

Si nos centramos ahora en los potenciales que afectan a la partícula, como por ejemplo un pozo de potencial (que es el caso habitual que se maneja en el estudio espectral del caos cuántico), es evidente que éste no puede superar una cierta profundidad ya que, si lo hace, la energía generada cuando la partícula cae en el pozo es suficiente para la creación de nuevas partículas, con la complicación que eso añade. En concreto, un pozo de potencial de profundidad mayor que el doble de la masa en reposo de la partícula puede generar pares partícula-antipartícula, por lo que la acotación energética viene dada en este caso por:

$$W_0 < 2 E_0 = 2mc^2$$

Con estas consideraciones surge el inconveniente de la imposibilidad de usar billares cuánticos para el estudio espectral del caos cuántico, ya que se trata de pozos de potencial con paredes infinitas. En su lugar, una posibilidad es usar pozos de potencial con profundidad máxima tal que, para una masa de partícula dada, se cumpla la condición expuesta antes.

Podría decirse que la propia ecuación de Dirac es consciente de sus limitaciones, ya que cuando intenta resolverse para pozos infinitos imponiendo condiciones de función de onda nula en el contorno del potencial, no da lugar a soluciones (es decir, no proporciona estados ligados). Además, para un pozo de potencial (con masa de la partícula fija), al aumentar la profundidad del pozo va disminuyendo el número de estados ligados hasta desaparecer por completo.

Incluso en el régimen de energías que hemos definido de modo aproximado, la mecánica cuántica relativista no es una teoría completa puesto que las fluctuaciones de energía que el principio de incertidumbre permite (tales que $\Delta E \Delta t \sim \eta$) pueden dar lugar a la creación de partículas virtuales. Este mismo principio, en su expresión $\Delta p \Delta x \sim \eta$, implica que a distancias del orden de η/mc , la incertidumbre en la energía ya es del orden de mc^2 ; la localización espacial de una partícula individual pierde su sentido dado que en el intento de medida la partícula se rodea de una nube de pares partícula-antipartícula.

Otra descripción inapropiada en este marco es la de los potenciales, que tienen existencia propia y ajena al resto de sucesos cuando en realidad son generados también por las partículas virtuales mediadoras de la interacción (bosones intermediarios), sujetas a creación y destrucción y con el retardo derivado de la velocidad finita de la luz.

Una teoría más general y consistente debe tratar no con partículas individuales, sino con conjuntos de partículas cuyo número no es fijo, permitiendo así la creación y destrucción de partículas: la teoría cuántica de campos relativista.

Por todas estas razones, y muchas otras que no se comentarán aquí, hay que ser muy precavidos a la hora de estudiar el caos mediante la mecánica cuántica relativista; el efecto más inmediato es la desaparición de los tradicionales billares cuánticos. En el régimen energético adecuado, el caos cuántico relativista debería ser un punto de partida para el estudio del mucho más complejo asunto del caos de campos cuánticos relativistas. Aunque para el inicio de esta disciplina serán necesarias, probablemente, formas totalmente nuevas de detección de caos clásico a nivel cuántico.

4.3. LA ECUACIÓN DE DIRAC EN SISTEMAS CON SIMETRÍA ESFÉRICA O CIRCULAR

De particular importancia para el estudio de los billares cuánticos es la ecuación de Dirac con simetría esférica (en tres dimensiones) o circular (en dos dimensiones). Para el estudio espectral del caos cuántico no relativista es necesario romper estas simetrías de rotación para que el análogo clásico muestre caoticidad, y es posible que en caos cuántico relativista ocurra lo mismo; no obstante es necesario comprobarlo partiendo de los casos con simetría de rotación, estudiando su comportamiento y sólo entonces comenzar a romper esa simetría.

Retomamos aquí el estudio de la ecuación de Dirac centrándonos ahora en el caso de una partícula sometida a potenciales con simetría esférica; en unidades naturales:

$$i\eta \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-i\alpha \cdot \frac{\mathbf{p}}{\hbar} + \beta(m + V(r)) + W(r) \right] \psi$$

Es necesario distinguir entre potenciales vectoriales (W en la ecuación anterior), y escalares (V). El potencial vectorial W es en realidad la primera componente (temporal) de un cuadvectores; el resto de componentes (las espaciales) son nulas para respetar la simetría esférica que estamos suponiendo. Ambos potenciales entran de manera distinta en la ecuación de Dirac (el escalar va sumado directamente a la masa y por tanto, está multiplicado por la matriz β); nótese que tanto V como W son canescalares.

El potencial vector es el que da lugar a los potenciales usuales cuando se efectúa el límite no relativista; se usa, por ejemplo, para aproximar un potencial coulombiano apantallado, es decir, $W(r) = -w$ si $r < \rho$ y $W(r) = 0$ si $r > \rho$ (con ρ , p. ej., el radio medio del átomo). El potencial escalar se usa, por ejemplo, como aproximación al potencial en el

modelo de saco de quarks: $V(r) = v$ si $r > R$ y $V(r) = 0$ si $r < R$, con $R \rightarrow \infty$ (reflejando así la libertad asintótica de los quarks).

Como el Hamiltoniano es independiente del tiempo se procede a la separación de variables para obtener soluciones con energía bien definida, resultando por una parte

$$i\eta \frac{\partial \psi}{\partial t} = E \psi \Rightarrow \psi = e^{-iEt},$$

con $E = \pm \sqrt{p^2 + m^2}$, y por otra parte:

$$\left[i \vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + E - \beta(m + V(r)) - W(r) \right] \psi = 0$$

Para resolver esta ecuación se escribirá en coordenadas esféricas r, φ, θ ; en primer lugar, el gradiente en coordenadas esféricas es:

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\phi} = \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} - i \frac{1}{r^2} \vec{r} \times \vec{L} = \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} - i \frac{1}{r} \hat{r} \times \vec{L},$$

donde $\vec{L} = -i \vec{r} \times \vec{\nabla}$ es el momento angular orbital; se han usado las siguientes deducciones:

$$\vec{r} \times \vec{\nabla} = \begin{vmatrix} \hat{r} & \hat{\theta} & \hat{\phi} \\ r & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \end{vmatrix} = \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\phi} - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\theta}$$

$$y \quad \vec{r} \times (\vec{r} \times \vec{\nabla}) = \begin{vmatrix} \hat{r} & \hat{\theta} & \hat{\phi} \\ r & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} & \frac{\partial}{\partial \theta} \end{vmatrix} = -r \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\theta} - \frac{r}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\phi} = -r^2 \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\phi} \right]$$

A continuación se escribe el vector de matrices $\vec{\alpha}$ como el producto $\gamma_5 (I_{2 \times 2} \otimes \vec{\sigma})$ o abreviadamente $\gamma_5 \vec{\sigma}$ (con $\gamma_5 = i\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3 = \begin{pmatrix} 0_{2 \times 2} & I_{2 \times 2} \\ I_{2 \times 2} & 0_{2 \times 2} \end{pmatrix}$ y $\vec{\sigma}$ el vector de matrices de Pauli). A partir de ahora se supondrán matrices unidad del orden adecuado como producto o producto tensorial para que las expresiones sean coherentes en lo que a productos matriciales se refiere.

Se calcula entonces el término $i\hat{\alpha} \cdot \nabla$:

$$i\hat{\alpha} \cdot \nabla = i\gamma_5(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{r}) \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\gamma_5}{r^2} \hat{\mathcal{E}} \cdot (\hat{r} \times \hat{L}) = i\gamma_5(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{r}) \left[\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} (\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L}) \right],$$

donde se ha hecho uso de la identidad $(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{A})(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{B}) = \hat{A} \cdot \hat{B} + i\hat{\mathcal{E}}(\hat{A} \times \hat{B})$ aplicada a los vectores $\hat{A} = \hat{r}$ y $\hat{B} = \hat{L}$, obteniéndose $\hat{\mathcal{E}} \cdot (\hat{r} \times \hat{L}) = -i(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{r})(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L})$ (ya que $\hat{r} \cdot \hat{L} = 0$).

Por último, se introducirá el operador $K = \beta(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L} + I)$, con lo que el término $i\hat{\alpha} \cdot \nabla$ y la ecuación completa quedan (teniendo en cuenta que $\beta^2 = I$):

$$\left[i\gamma_5(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{r}) \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} - \frac{\beta K}{r} \right] + E - \beta(m + V(r)) - W(r) \right] \psi = 0$$

Para calcular los autovalores del operador K recién introducido se eleva al cuadrado:

$$K^2 = \beta(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L} + I)\beta(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L} + I) = (\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L})(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L}) + 2(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L}) + I = \hat{L}^2 + \hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L} + I,$$

donde se ha empleado la identidad descrita más arriba para obtener $(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L})(\hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L}) = \hat{L}^2 + i\hat{\mathcal{E}}(\hat{L} \times \hat{L}) = \hat{L}^2 - \hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L}$ (ya que $\hat{L} \times \hat{L} = i\hat{L}$).

Por otra parte, el operador momento angular total $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ al cuadrado puede escribirse como:

$$\hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S}) \cdot (\hat{L} + \hat{S}) = \left(\hat{L} + \frac{1}{2} \hat{\mathcal{E}} \right) \cdot \left(\hat{L} + \frac{1}{2} \hat{\mathcal{E}} \right) = \hat{L}^2 + \hat{\mathcal{E}} \cdot \hat{L} + \frac{3}{4} I,$$

ya que $\hat{S}^2 = 3I$ y los operadores $\hat{\mathcal{E}}$ y \hat{L} conmutan. El operador K^2 queda entonces:

$$K^2 = \hat{J}^2 + \frac{1}{4} I$$

De esta expresión se pueden obtener sus autovalores $-\kappa$ (donde el signo es una convención) a partir de los de \hat{J}^2 :

$$\kappa^2 = j(j+1) + \frac{1}{4} = \left(j + \frac{1}{2} \right)^2 \Rightarrow -\kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right)$$

Otro desarrollo distinto da otra expresión importante para los autovalores $-\kappa$ dependiente de j y de l ; despejando $\frac{L^2}{\hbar^2}$ de la expresión de más arriba y sumándole 1 se obtiene:

$$\frac{L^2}{\hbar^2} + 1 = j^2 - l^2 + \frac{1}{4},$$

de donde:

$$-\kappa = j(j+1) - l(l+1) + \frac{1}{4} \Rightarrow \kappa = \begin{cases} 1, & j = l - \frac{1}{2} \\ -(l+1), & j = l + \frac{1}{2} \end{cases}$$

Así, en términos espectroscópicos, el conjunto de valores $\kappa = \{-1, 1, -2, 2, \dots\}$ corresponde a los niveles $\{s_{1/2}, p_{1/2}, p_{3/2}, d_{3/2}, \dots\}$.

Debido a la simetría esférica el autovalor del momento angular total es un buen número cuántico, y el momento angular orbital también lo es; de hecho éste proporciona la paridad de las autofunciones: $\pi_l = (-1)^l = (-1)^{j + \frac{\text{sgn } \kappa}{2}}$. El número κ resume los valores de j y l y por tanto es apropiado, y facilita, el manejo de las autofunciones solución de las ecuaciones acopladas establecidas antes. Los operadores K , J^2 y J_3 (tercera componente de J^2) conmutan entre sí y con H (ya que lo hacen con los potenciales centrales), y en consecuencia sus autofunciones forman una base que diagonaliza estos operadores junto a H .

Una vez establecida la ecuación de Dirac independiente del tiempo en coordenadas esféricas, se ensaya un conjunto de soluciones de tipo biespinor formada por una parte radial y una parte angular-espinor construida de la siguiente manera:

$$\chi_{\kappa}^{m_j}(\hat{r}) = \sum_{\substack{m_l=-l \\ m_j+m_s=m_j}}^l \sum_{m_s=-s}^s \langle l m_l s m_s | l m_l j m_j \rangle Y_{lm_l}(\hat{r}) \Phi_{m_s}^s,$$

donde $Y_{lm_l}(\hat{r})$ es el armónico esférico autofunción de L^2 con autovalor $l(l+1)$ y de l_3 con autovalor m_l y $\Phi_{m_s}^s$ es el espinor autofunción de S^2 con autovalor $s(s+1)$ (con $s = 1/2$) y de s_3 con autovalor $m_s (= \pm 1/2)$. Ambos momentos angulares se combinan mediante los coeficientes de Clebsch-Gordan.

El biespinor solución se construirá con un espinor superior y otro inferior (constituidos cada uno, como ya se ha dicho, de parte radial y parte angular-espinor) y éstos vendrán etiquetados por los autovalores m_j de j_3 y μ_κ de K , que ya contiene el autovalor $j(j+1)$ de J^2 ; κ tiene diferente signo para cada espinor ya que el operador K contiene la matriz β , que invierte el signo del espinor inferior (el autovalor de K del biespinor completo es $-\kappa$). La solución que se introduce es, por tanto, de la forma:

$$\Psi_\kappa^{m_j} = \begin{pmatrix} g_\kappa(r) \chi_\kappa^{m_j}(\hat{r}) \\ i f_\kappa(r) \chi_{-\kappa}^{m_j}(\hat{r}) \end{pmatrix}$$

Las funciones g_κ y f_κ forman la parte radial (la fase i se introduce para que ambas funciones sean explícitamente reales). Introduciendo esta solución en la ecuación se obtiene, término a término:

$$1) \quad i \gamma_5 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r}) \frac{\partial}{\partial r} \begin{pmatrix} g_\kappa(r) \chi_\kappa^{m_j} \\ i f_\kappa(r) \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_\kappa(r)}{\partial r} \chi_\kappa^{m_j} \\ -i \frac{\partial g_\kappa(r)}{\partial r} \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix}.$$

$$2) \quad i \gamma_5 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r}) \frac{1}{r} \begin{pmatrix} g_\kappa(r) \chi_\kappa^{m_j} \\ i f_\kappa(r) \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{f_\kappa(r)}{r} \chi_\kappa^{m_j} \\ -i \frac{g_\kappa(r)}{r} \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix}.$$

$$3) \quad i \gamma_5 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r}) \frac{1}{r} \beta K \begin{pmatrix} g_\kappa(r) \chi_\kappa^{m_j} \\ i f_\kappa(r) \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} = i \gamma_5 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r}) \frac{1}{r} \begin{pmatrix} \kappa g_\kappa(r) \chi_\kappa^{m_j} \\ -\kappa i f_\kappa(r) \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \kappa \frac{f_\kappa(r)}{r} \chi_\kappa^{m_j} \\ \kappa i \frac{g_\kappa(r)}{r} \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix}.$$

$$4) \quad \beta(m + V(r)) \begin{pmatrix} g_\kappa(r) \chi_\kappa^{m_j} \\ i f_\kappa(r) \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} = (m + V(r)) \begin{pmatrix} g_\kappa(r) \chi_\kappa^{m_j} \\ -i f_\kappa(r) \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix}.$$

En estos cálculos ha sido esencial el uso de $(\hat{\sigma} \cdot \hat{r}) \chi_{\kappa}^{m_j} = -\chi_{-\kappa}^{m_j}$; $(\hat{\sigma} \cdot \hat{r})$ es un operador escalar y por tanto no cambia los autovalores j ni m_j de $\chi_{\kappa}^{m_j}$ (es decir, conmuta con J^2 y J_3). Además, dicho operador posee paridad impar (al incluir \hat{r}), por lo que el autovalor κ cambia de signo; por último, cumple que $(\hat{\sigma} \cdot \hat{r})^2 = I$ y por tanto sus autovalores sólo pueden ser ± 1 ; se comprueba que el correcto es -1 .

Juntando todos los términos calculados antes con su signo correspondiente según la ecuación espacial se tiene:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_{\kappa}(r)}{\partial r} \chi_{\kappa}^{m_j} \\ -i \frac{\partial g_{\kappa}(r)}{\partial r} \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{f_{\kappa}(r)}{r} \chi_{\kappa}^{m_j} \\ -i \frac{g_{\kappa}(r)}{r} \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \kappa \frac{f_{\kappa}(r)}{r} \chi_{\kappa}^{m_j} \\ \kappa i \frac{g_{\kappa}(r)}{r} \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} - (m + V(r)) \begin{pmatrix} g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{m_j} \\ -i f_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} + (E - W(r)) \begin{pmatrix} g_{\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{m_j} \\ i f_{\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{m_j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial f_{\kappa}(r)}{\partial r} + \frac{f_{\kappa}(r)}{r} - \kappa \frac{f_{\kappa}(r)}{r} - (m + V(r) - E + W(r)) g_{\kappa}(r) = 0 \\ -\frac{\partial g_{\kappa}(r)}{\partial r} - \frac{g_{\kappa}(r)}{r} - \kappa \frac{g_{\kappa}(r)}{r} + (m + V(r) + E - W(r)) f_{\kappa}(r) = 0 \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial f_{\kappa}(r)}{\partial r} = (\kappa - 1) \frac{f_{\kappa}(r)}{r} + (m + V(r) - E + W(r)) g_{\kappa}(r) \\ \frac{\partial g_{\kappa}(r)}{\partial r} = -(\kappa + 1) \frac{g_{\kappa}(r)}{r} + (m + V(r) + E - W(r)) f_{\kappa}(r) \end{cases}$$

Se trata de dos ecuaciones diferenciales acopladas que cumple la parte radial de la solución; con el cambio $u_1(r) = rg(r)$ y $u_2(r) = rf(r)$ se pueden reescribir como:

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1(r)}{\partial r} = -\frac{\kappa u_1(r)}{r} + (m + V(r) - E + W(r)) u_2(r) \\ \frac{\partial u_2(r)}{\partial r} = \frac{\kappa u_2(r)}{r} + (m + V(r) + E - W(r)) u_1(r) \end{cases}$$

En el caso de dos dimensiones con un potencial con simetría circular el desarrollo es muy similar; el gradiente en coordenadas cilíndricas ρ, φ, z es:

$$\frac{\rho}{V} = \frac{\partial}{\partial \rho} \hat{\rho} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{\varphi} = \frac{\partial}{\partial \rho} \hat{\rho} - i \frac{1}{\rho^2} \hat{\rho} \times l_3 \hat{z} = \frac{\partial}{\partial \rho} \hat{\rho} - i \frac{1}{\rho} \hat{\rho} \times l_3 \hat{z} = \frac{\partial}{\partial \rho} \hat{\rho} + i \frac{l_3}{\rho} \hat{\varphi},$$

donde l_3 es la tercera componente del operador \hat{l}^2 . En el desarrollo se introduce el operador $\Gamma = (o_3 l_3 + 1)$ (análogo a K) y se obtiene la ecuación espacial:

$$\left[i \gamma_s (\hat{\rho} \cdot \hat{\rho}) \left[\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho} - \frac{\beta \Gamma}{\rho} \right] + E - \beta(m + V(\rho)) - W(\rho) \right] \psi = 0$$

Las soluciones que se introducen ahora son:

$$\Psi_\gamma^{m_j} = \begin{pmatrix} g_\gamma(\rho) \chi_\gamma^{m_j} \\ i f_\gamma(\rho) \chi_{-\gamma}^{m_j} \end{pmatrix},$$

donde $-\gamma$ es el autovalor de Γ y m_j el autovalor de j_3 . El resultado son dos ecuaciones diferenciales acopladas análogas a las de tres dimensiones:

$$\begin{cases} \frac{\partial f_\gamma(\rho)}{\partial \rho} = (\gamma - 1) \frac{f_\gamma(\rho)}{\rho} + (m + V(\rho) - E + W(\rho)) g_\gamma(\rho) \\ \frac{\partial g_\gamma(\rho)}{\partial \rho} = -(\gamma + 1) \frac{g_\gamma(\rho)}{\rho} + (m + V(\rho) + E - W(\rho)) f_\gamma(\rho) \end{cases}$$

La dificultad de resolución de estas ecuaciones acopladas, tanto en dos como en tres dimensiones, depende de la forma de los potenciales (siempre con simetría de revolución). En general, se recurrirá a métodos numéricos.

5. CAOS CUÁNTICO RELATIVISTA

5.1. OBTENCIÓN DE ESPECTROS GRANDES MEDIANTE MÉTODOS NUMÉRICOS

Ante la imposibilidad del uso de billares cuánticos para el estudio del caos cuántico en régimen relativista, una alternativa es emplear pozos de potencial de paredes finitas y verticales. Las autoenergías en estos pozos, así como las autofunciones, pueden calcularse por métodos numéricos como el método de disparo, que consiste en:

- Discretización de la ecuación o ecuaciones.
- Iteración a partir de las condiciones de contorno para un barrido de energías.
- Como las energías con las que se realiza el barrido no coinciden exactamente con el autovalor de la función, ésta siempre diverge, y lo hace hacia $+\infty$ o hacia $-\infty$ dependiendo de que la energía en cuestión se encuentre a un lado o a otro del autovalor. De este modo, durante el barrido de energías, el cambio en la divergencia permite acotar las autoenergías.
- Una alternativa, que es la que implementa el programa que se usa, consiste en iterar desde la derecha y desde la izquierda de manera independiente hasta un punto dado (punto de empalme o *matching point*); es necesario reescalar una de las soluciones para que ambas coincidan en el punto de empalme. En este caso, las autoenergías son aquellas energías para las que la función tiene derivada continua en el punto de empalme.

Resolviendo numéricamente las ecuaciones aparecen errores de truncamiento (debidos a la discretización de las ecuaciones) y errores de redondeo (debidos a que el ordenador almacena un número finito de dígitos). En el método utilizado, se corre el riesgo de que una solución de una energía dada que se integra por la derecha y por la izquierda no enganche adecuadamente en el punto de empalme (y sí lo hagan partes de soluciones de energías distintas).

Por las razones anteriores, es difícil conseguir una serie completa de niveles de autoenergías, y si faltan algunos puede influir decisivamente en la estadística de niveles. Recientemente Bohigas y Pato^{*} han estudiado cómo se ven afectadas las fluctuaciones espectrales de una serie idealmente completa de niveles cuando sólo una fracción f de ellos se conoce; se asume que los niveles que se desconocen se distribuyen aleatoriamente en el espectro. Un resultado del estudio es que cuando la fracción conocida tiende a cero, la distribución de distancias s entre vecinos más próximos tiende a la distribución de Poisson; esto parece natural ya que la pérdida aleatoria de niveles en el espectro introduce aleatoriedad en la distribución de los que quedan.

El estudio de Bohigas y Pato sirve para recuperar las propiedades estadísticas del espectro completo si se conoce la fracción de él que falta, o bien permite estimar la fracción que falta si se conoce la naturaleza estadística del espectro completo. En el caso que nos ocupa, existen inconvenientes para la aplicación de estos resultados; en primer lugar, no está claro que los niveles que se salta el programa que implementa el método de disparo aparezcan aleatoriamente en el espectro; habría que estudiar las causas de estos saltos para ver si corresponden con determinadas soluciones y no son, por tanto, aleatorios.^{**} Además, no se conoce con certeza la distribución espectral que se obtiene partiendo de ecuaciones relativistas (es lo que se pretende estudiar).

Parece pues que la mejor opción es mejorar la precisión del programa y crear subrutinas que rastreen los posibles saltos (fácilmente reconocibles, en principio, por el conteo del número de nodos de las soluciones). Esto no es tarea fácil dado el gran número de niveles necesarios para realizar análisis estadísticos adecuados.

^{*} O. Bohigas, M.P. Pato: arXiv:nucl-th/0403006 v2 3 Mar 2004

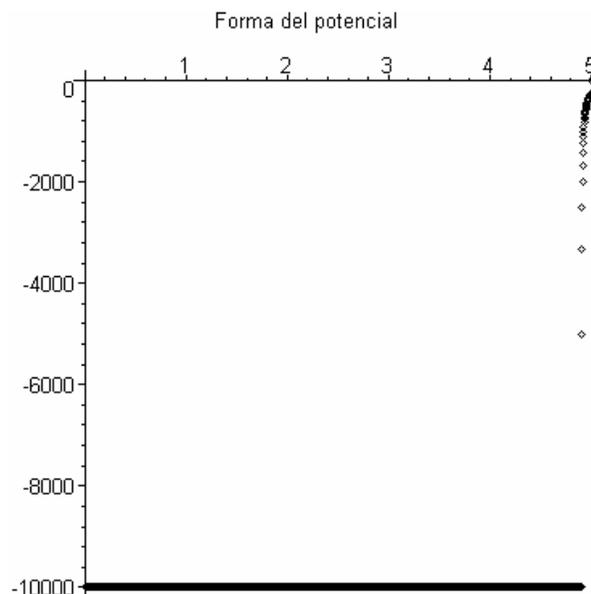
^{**} Por ejemplo, si el punto de empalme coincide con un nodo de la solución puede impedir el enganche de partes izquierda y derecha y resultar en un nivel omitido.

5.2. ENSAYOS CON ESPECTROS RELATIVISTAS

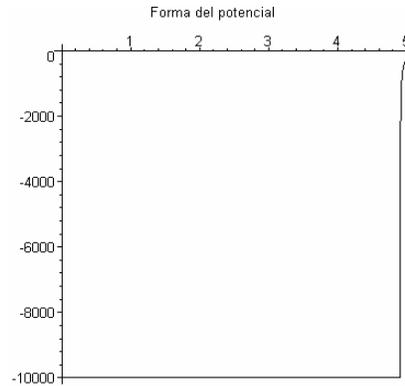
Se realizó un estudio preliminar de espectros relativistas con el programa que venimos comentando y que implementa el método de disparo para resolver las ecuaciones diferenciales acopladas de la parte radial de la función de onda de una partícula de espín $\frac{1}{2}$ en un potencial con simetría esférica que consiste en un pozo aproximadamente cuadrado en la coordenada radial. Es decir, el programa resuelve las ecuaciones obtenidas en la sección anterior (para el caso de tres dimensiones):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f_{\kappa}(r)}{\partial r} = (\kappa - 1) \frac{f_{\kappa}(r)}{r} + (m + V(r) - E + W(r)) g_{\kappa}(r) \\ \frac{\partial g_{\kappa}(r)}{\partial r} = -(\kappa + 1) \frac{g_{\kappa}(r)}{r} + (m + V(r) + E - W(r)) f_{\kappa}(r) \end{array} \right. ,$$

donde los potenciales radiales (tanto el escalar como el vectorial) tienen la siguiente forma:

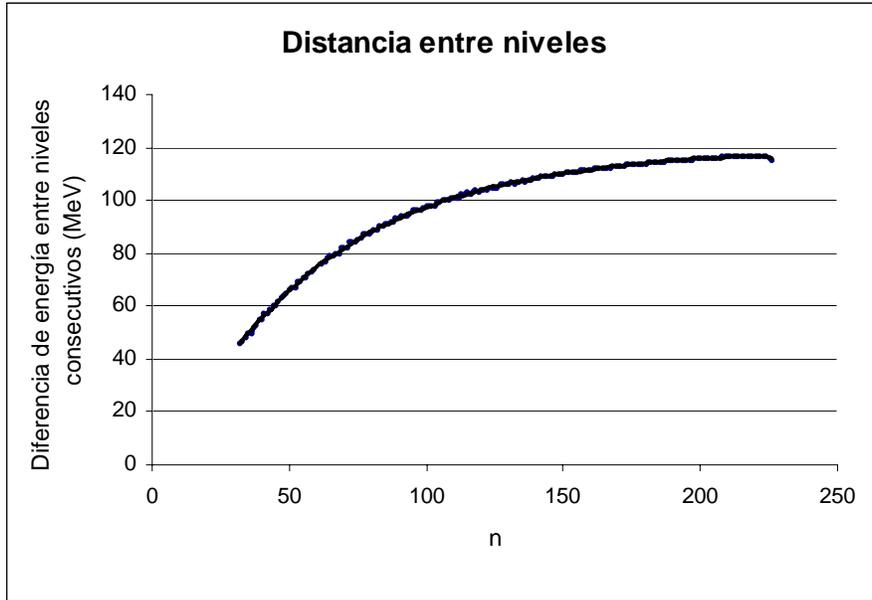


La razón de incluir un potencial con esta forma es la de evitar los problemas de derivabilidad que provocaría un potencial con pared totalmente vertical; la diferencia con una pared vertical es sin embargo mínima, como queda patente trazando una línea entre los puntos del potencial anteriores (figura de la derecha).

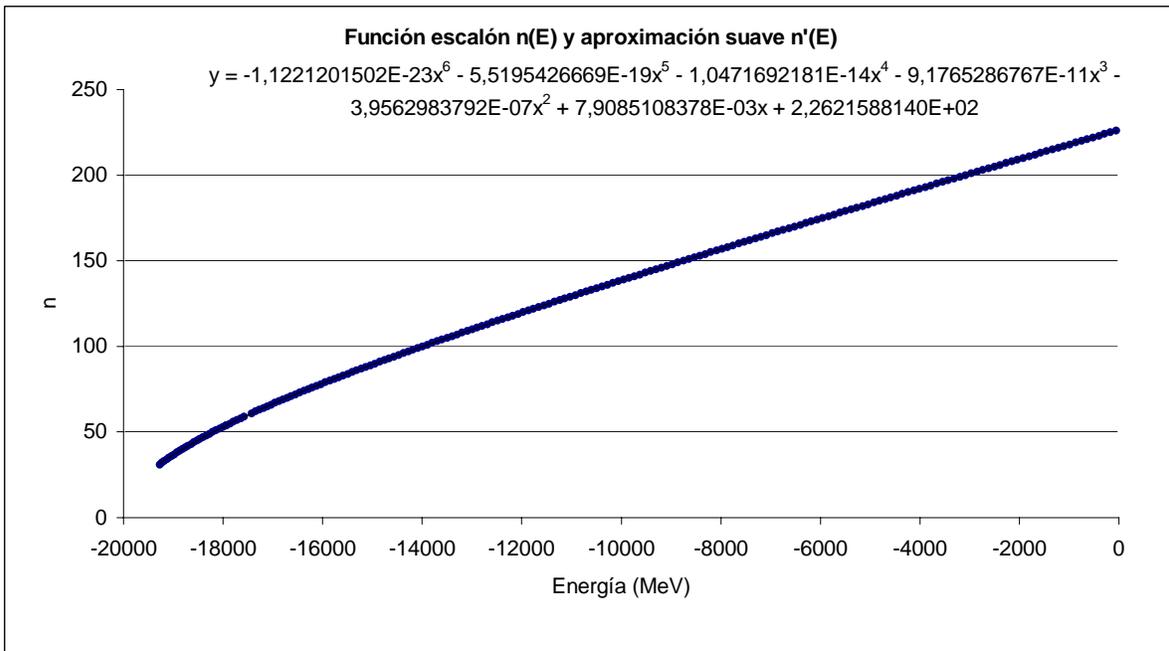


En concreto, el potencial tiene un valor negativo constante hasta que se inicia la pared, que es de la forma W_0/n con $n = 1,2,3,\dots$, y finalmente acaba anulándose. El pozo utilizado tiene 5 fm de anchura en la dirección radial y está constituido por un potencial vectorial de profundidad $W_0 = -20000$ MeV; la partícula tiene una masa en reposo $m_0 = 10000$ MeV, cumpliéndose así $W_0 \leq 2m_0$ (según las condiciones expresadas en una sección anterior). El programa posee una precisión de 1 MeV en la determinación de las autoenergías; esto significa un error relativo pequeño para los niveles más profundos (del orden de 10^{-3} %) pero bastante grande para los niveles menos profundos (del orden del 1%).

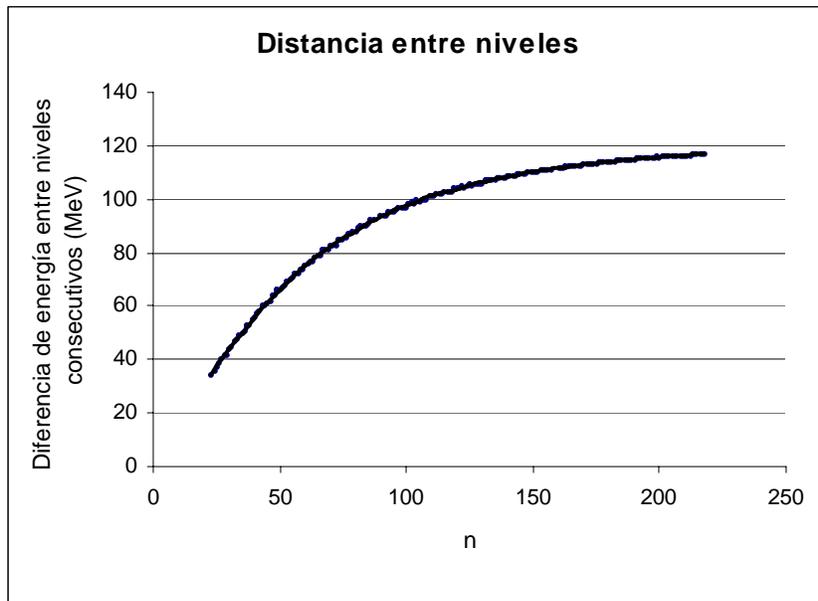
Para ondas del tipo $s_{1/2}$ ($l = 0, j = 1/2, \kappa = -1$) se consigue con el programa un conjunto de 195 niveles consecutivos (soluciones desde 31 nodos y -19274 MeV hasta 226 nodos y -56 MeV). La distancia entre niveles consecutivos se representa en la siguiente gráfica:



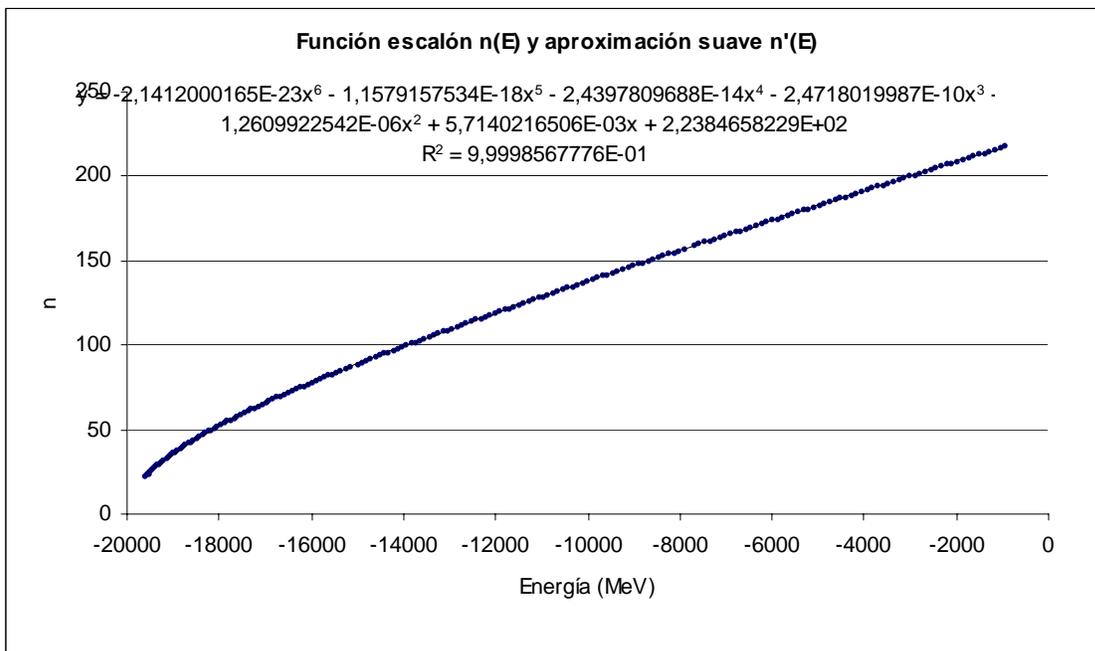
A continuación se representa la función escalón $n(E)$ con los datos obtenidos, así como el polinomio de grado seis que mejor los ajusta (aproximación suave, $n'(E)$):



En el caso de onda tipo $p_{1/2}$ ($l = 1, j = 1/2, \kappa = 1$) se consigue un conjunto de 197 niveles con dos interrupciones intermedias (soluciones desde 22 nodos y -19611 MeV hasta 220 nodos y -696.67 MeV). La distancia entre niveles consecutivos se representa en la siguiente gráfica:



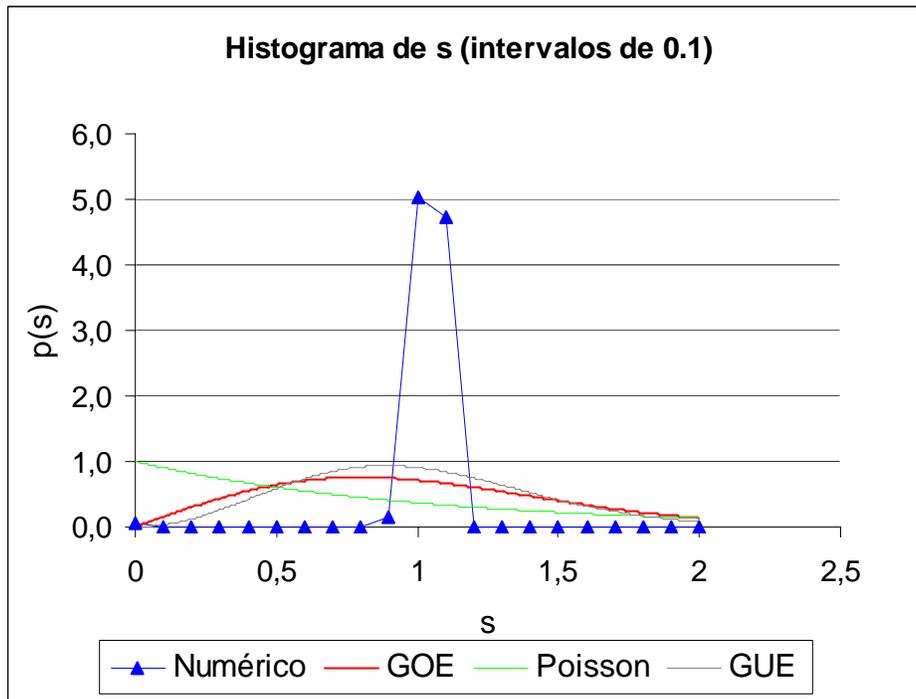
La función escalón $n(E)$ con el polinomio de grado seis que mejor la ajusta es:



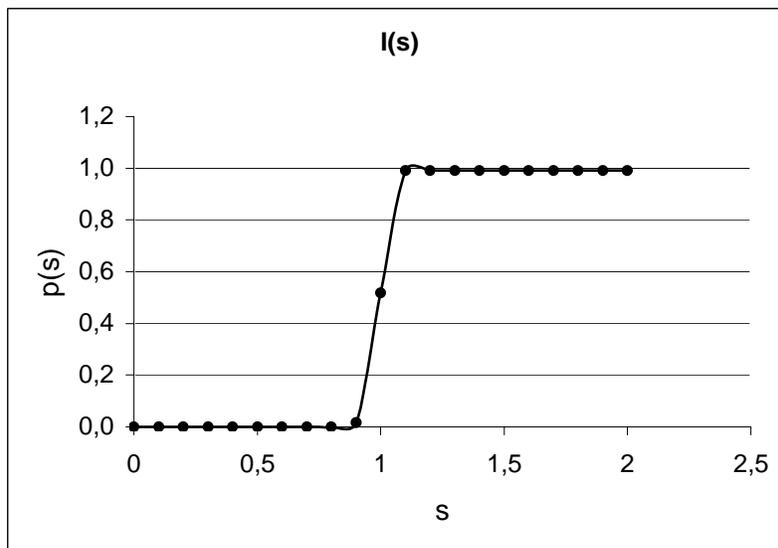
El mismo proceso se podría seguir para ondas de otro tipo cambiando el valor de κ . El siguiente paso sería efectuar el *unfolding* o reescalamiento de los niveles energéticos; una posibilidad muy simple consiste en hacer corresponder a cada autoenergía E_i el valor $n'(E_i)$ obtenido de la aproximación suave que se ha calculado (en este caso un polinomio de grado 6).

Una vez efectuado el *unfolding* por el método que se determine más adecuado se halla la distancia s entre los nuevos niveles contiguos y se realiza un histograma con esos datos, con intervalos de s de, por ejemplo, 0.1; el histograma una vez normalizado constituye la función $p(s)$ y puede compararse con las distribuciones ya conocidas (Poisson, GUE, GOE, GSE) y por supuesto con la obtenida del sistema análogo pero tratado mediante mecánica cuántica no relativista.

Tanto para el cálculo de la distribución $p(s)$ como para otros estadísticos de mayor alcance (Σ^2 , Δ_3) es esencial contar con un número elevado de niveles consecutivos; ése es el objetivo más inmediato de esta investigación.



La siguiente gráfica muestra la función $I(s)$, que es la integral de $p(s)$:



Es obvio que la distribución $p(s)$ obtenida no se corresponde con la de un sistema integrable tipo Poisson ni con la de uno caótico con GOE o GUE. Se asemeja más a una distribución delta de Dirac situada en $s = 1$; esta distribución aparecía en los sistemas con

potencial tipo oscilador armónico (por las razones expresadas en otra sección), pero aquí no existe tal potencial. Lo que es claro es que los escasos niveles con los que se cuenta, una vez efectuado el *unfolding*, se encuentran prácticamente equiespaciados.

En caos cuántico no relativista nos encontraríamos, según todos los indicios, ante un sistema integrable, pues se trata de un potencial con simetría esférica.