

*Estudio de las fluctuaciones espectrales
en sistemas cuánticos caóticos con
niveles perdidos*



CORAL MANZANERA RUIZ

cormanza@ucm.es

Máster Interuniversitario en Física Nuclear

SEPTIEMBRE 2018

Dirigido por:

Laura Muñoz Muñoz (UCM)

lmunoz@pdi.ucm.es

Rafael Alejandro Molina Fernández (CSIC)

rafael.molina@csic.es



Índice general

1. Introducción	5
2. Caos en mecánica clásica	6
2.1. Caos hamiltoniano	7
3. Caos cuántico	8
3.1. Caos en la región semiclásica	8
3.2. Teoría de matrices aleatorias	11
3.3. El reescalado	13
3.4. Análisis espectral	14
3.4.1. Correlaciones de corto alcance	14
3.4.2. Correlaciones de largo alcance	16
3.4.3. La función δ_n	17
3.5. Sistemas intermedios	19
3.5.1. Distribución de espaciamientos de Brody	19
3.5.2. Sistemas con niveles perdidos	20
4. Análisis de espectros GOE con niveles perdidos	22
4.1. Colectividad GOE	22
4.1.1. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos	23
4.1.2. Prueba χ^2	25
4.1.3. Distribución de Bohigas-Pato	25
4.1.4. Distribución de espaciamientos de espectros con niveles perdidos	28
5. Conclusiones	37

Índice de figuras

1.	Espectros de energía de un oscilador armónico unidimensional (equiespaciado), un sistema caótico y uno integrable. Los tres están reescalados de modo que $\bar{\rho}(E) = 1$	10
2.	Distribución de espaciamientos a primeros vecinos $P(s)$ para espectros tipo Poisson, GOE, GUE y GSE	16
3.	Promedio de la densidad de estados de 1500 matrices GOE, se ajusta a la curva teórica dada por la ley del semicírculo de Wigner	23
4.	Densidad de estados acumulada del promedio de los autovalores de las matrices GOE y de los 1000 autovalores centrales de dichas matrices. El ajuste a la recta $N(\epsilon) = \epsilon$ es un indicador de que no es necesario realizar el reescalado	24
5.	Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de 4 de los espectros GOE generados (N=1000). Se ajustan a la distribución GOE (amarillo), en rojo podemos ver la distribución de Poisson. Se incluye también el valor de χ^2 correspondiente a cada espectro	24
6.	Distribución de Bohigas-Pato $P(s, f)$ y sus contribuciones $(1 - f)^k P\left(k, \frac{s}{f}\right)$ en función de f . En línea discontinua vemos las distribuciones de Poisson y GOE a las que debería ajustarse $P(s, f)$ para $f = 0$ y $f = 1$ respectivamente	27
7.	Espectros GOE de la figura 5 ajustados. La función de distribución de Brody (verde) y la de Bohigas-Pato (morado) solapan con la distribución GOE (amarillo)	28
8.	Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 1000 niveles con sus correspondientes ajustes ($f > 0.9$)	30
9.	Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 1000 niveles con sus correspondientes ajustes ($f < 0.9$)	31
10.	Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 1000 niveles con sus correspondientes ajustes ($f = 0.1$)	32
11.	Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 1 500 000 niveles con la mitad de niveles perdidos ($f = 0.5$) y sus correspondientes ajustes	33
12.	Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 100 niveles con sus correspondientes ajustes ($f > 0.9$)	35
13.	Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 100 niveles con sus correspondientes ajustes ($f < 0.9$)	36

Índice de tablas

1.	Resultados de la integral numérica $\int_0^k (k-x) Y_2(x) dx$ y las varianzas $V(k)$ de las funciones de probabilidad $P(k, x)$ para $k > 2$ a partir de las que se obtiene la distribución de Bohigas-Pato $P(s, f)$	26
2.	Parámetros de ajuste y estadística de χ^2 en espectros de dimensión 1000 .	29
3.	Parámetros de ajuste y χ^2 en un espectro de dimensión 1 500 000	33
4.	Parámetros de ajuste y estadística de χ^2 en espectros de dimensión 100 .	34

1. Introducción

La *teoría del caos* en mecánica clásica, tiene su base bien establecida. Se la llega a considerar la tercera revolución de la física del siglo XX, tras la teoría de la relatividad y la mecánica cuántica, pero no sólo tiene aplicación en este área sino también en ámbitos tan diversos como la biología, la economía o la medicina. Por su parte, el caos en mecánica cuántica, si bien lleva estudiándose más de 50 años, todavía carece de una definición clara y hasta su propio nombre fue debatido durante mucho tiempo [1]. No obstante, el *caos cuántico* constituye un campo de investigación de gran interés y aplicabilidad y sus ideas han ayudado en la comprensión de la mecánica cuántica.

Hablamos de que un sistema dinámico es caótico cuando cumple una serie de propiedades. Como veremos en el siguiente punto, estas propiedades son consistentes en el contexto de la mecánica clásica. El problema es que no existe una dinámica que permita definir el caos con propiedades intrínsecamente cuánticas. Podemos poner como ejemplo la propiedad más conocida popularmente, la pérdida de la predictibilidad o “efecto mariposa”. Esta propiedad nos dice que, una pequeña variación en las condiciones iniciales puede dar lugar resultados completamente opuestos [2]. En el contexto de la mecánica cuántica, es imposible definir esto debido al principio de incertidumbre de Heisenberg. Sin embargo, si la mecánica clásica debe surgir como límite de la mecánica cuántica a escalas macroscópicas, es coherente pensar que sistemas que clásicamente son caóticos tengan su análogo cuántico.

En el tercer punto del trabajo, trataremos los conceptos fundamentales del caos cuántico. Veremos que se puede definir como lo que le sucede a un sistema cuántico cuyo análogo clásico es caótico. Esta definición, aunque sea incompleta porque no engloba a sistemas caóticos puramente cuánticos como puede ser un sistema de muchas partículas, se puede utilizar como punto de partida para abordar el caos cuántico. La idea es trabajar con sistemas con análogo clásico caótico para lograr herramientas que se puedan utilizar en todos los sistemas. Desde este punto de vista, Bohigas, Giaonni y Schmit consiguieron formular la conjetura BGS que dice que las fluctuaciones de espectros cuyo análogo clásico es caótico se ajustaban a la estadística de la teoría de matrices aleatorias (RMT) diferenciándose de los sistemas clásicamente integrables que siguen la estadística de Poisson [3]. Dado que la teoría de matrices aleatorias nació en el seno de la física nuclear y los núcleos son sistemas complejos puramente cuánticos, la conjetura BGS permitió afirmar que la RMT es aplicable tanto para sistemas con análogo clásico como para sistemas sin él.

El problema es que muchos de los espectros obtenidos experimentalmente no se ajustan ni a la estadística de Poisson ni a la RMT sino que tienen contribuciones de ambas. Existen formas de ajustar estos resultados intermedios para poder dar una idea de cuán caótico es un sistema, sin embargo, aún no hay ningún estudio que permita distinguir si la estadística intermedia se debe a un sistema con espacio de fases mixto o a un sistema caótico con un espectro incompleto. En el cuarto punto este trabajo se van a utilizar dos de estos métodos de ajuste para intentar encontrar un patrón de comportamiento que nos permita dilucidar cuál es más apropiado utilizar en sistemas con niveles perdidos.

2. Caos en mecánica clásica

Desde que Newton estableció sus bases en el siglo XVII, se pensaba que la mecánica clásica era determinista, es decir, que se podría conocer la evolución de un sistema para cualquier instante de tiempo conociendo las condiciones iniciales. Esta creencia se mantuvo hasta finales del siglo XIX cuando Poincaré, con su trabajo sobre la estabilidad del sistema solar [4], estableció las bases de la teoría del caos. Pero el desarrollo de esta disciplina tuvo que esperar hasta la segunda mitad del siglo XX cuando la capacidad de cálculo de los ordenadores pudo hacer frente a la no linealidad de la mecánica Newtoniana.

El primer sistema bien caracterizado que presentaba un comportamiento caótico fue el sistema de ecuaciones de Lorenz [5], un modelo simple propuesto para describir el comportamiento de la atmósfera. Lorenz se dio cuenta de que una variación infinitesimal en los parámetros de entrada provocaba una divergencia en los resultados, lo que impedía predecir la evolución del sistema a largo plazo. Sin embargo, las soluciones no eran completamente erráticas, sino que oscilaban de forma no periódica en una región acotada del espacio de fases, dibujando lo que se conoce como atractor.

Hasta ese momento se pensaba que los sistemas con pocos grados de libertad debían tener un movimiento ordenado resoluble por teoría de perturbaciones. Pero el sistema de Lorenz, con solo tres grados de libertad, mostró que los sistemas sencillos también podían ser muy complejos y que la complejidad de la dinámica no era debida al número de grados de libertad del sistema sino más bien a la no linealidad de las ecuaciones. Aunque la no linealidad es una condición necesaria, no es suficiente. Podemos encontrar más detalles en textos introductorios como puede ser el de Schuster [6], aquí vamos a resumir las características definitorias del *caos determinista* en los siguientes puntos:

1. Las leyes de evolución del sistema son deterministas
2. El sistema presenta un comportamiento aperiódico; su densidad espectral no está compuesta por un conjunto discreto de frecuencias sino que es un continuo.
3. Existe sensibilidad extrema a las condiciones iniciales y es debido a la separación exponencial de las trayectorias en el espacio de fases. El ritmo de crecimiento queda determinado de forma cuantitativa por el *exponente de Lyapunov* λ , donde $d(x_0, t)$ corresponde a la distancia entre dos trayectorias en un tiempo t con condiciones iniciales en un entorno x_0 .

$$\lambda(x_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{d(x_0, t)}{d(x_0, 0)} \quad (1)$$

Si $\lambda > 0$ las trayectorias divergen de forma exponencial lo que puede resultar en un comportamiento caótico. Por el contrario, si $\lambda \leq 0$ las trayectorias no presentarán una dinámica caótica asociándose $\lambda = 0$ con un comportamiento periódico y $\lambda < 0$ a trayectorias que convergen en un punto.

4. El sistema está confinado. Además de que el exponente de Lyapunov sea positivo es necesario que se cumpla la propiedad de *mixing*. Esto es, que aunque localmente se separen las trayectorias, globalmente se vuelven a encontrar infinitas veces ya que se mueven en una región finita del espacio de fases.

El sistema de ecuaciones de Lorenz es un ejemplo de caos determinista en sistemas disipativos, pero el caos que nos interesa en este trabajo es el que se da en sistemas hamiltonianos ya que es el que se puede conectar con la mecánica cuántica.

2.1. Caos hamiltoniano

El caos hamiltoniano está caracterizado por el teorema KAM. Este teorema describe lo que le ocurre a un sistema integrable cuando es modificado por una perturbación.

Para entender el teorema vamos a pensar en un hamiltoniano H dividido en dos partes, una, H_0 , que es integrable, y otra, H_1 , que no lo es y va ponderada por un coeficiente numérico ϵ .

$$H = H_0 + \epsilon H_1 \tag{2}$$

Si $\epsilon = 0$ el sistema es integrable por lo que el número de grados de libertad, n , será igual al número de constantes de movimiento. Las trayectorias en el espacio de fases quedarán confinadas definiendo un toro n -dimensional y el movimiento será regular.

Un $\epsilon \neq 0$ supone una perturbación en el hamiltoniano que tendrá como consecuencia que deje de ser integrable. En este caso habrá menos constantes de movimiento que grados de libertad. Cuanto mayor sea la perturbación más trayectorias dejarán de estar confinadas, de modo que el toro se irá deformando hasta romperse.

La ruptura paulatina del toro invariante hace posible distinguir varios niveles de caos. Cada nivel más caótico que el anterior, los sistemas pueden ser *ergódicos*, *mixing* y *sistemas K*. Un sistema mixing es a su vez ergódico igual que un sistema K es mixing y ergódico. En los sistemas K, las trayectorias confinadas en el toro han desaparecido totalmente por lo que es totalmente caótico. El término “sistema caótico” se utiliza para denominar a estos sistemas.

3. Caos cuántico

Vistas las características más importantes del caos en mecánica clásica, vamos a ver qué ocurre si proponemos definiciones análogas en el contexto de la mecánica cuántica.

Para empezar, hemos visto que la complejidad de la dinámica surgía de la no linealidad de las ecuaciones. Sin embargo, la mecánica cuántica se rige por la ecuación lineal de Schrödinger por lo que a priori, no debería aparecer el caos en sus soluciones.

Por otro lado, lo podríamos plantear desde el punto de vista de sus características, como la sensibilidad a las condiciones iniciales que quedaba cuantificada por el exponente de Lyapunov (1). En este caso, nos topamos tanto con el hecho de que en mecánica cuántica no existe el concepto de trayectoria como con el principio de incertidumbre, $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$, que impide medir con precisión el momento y la posición por lo que nos hace imposible definir las condiciones iniciales.

Las funciones de onda se utilizan en mecánica cuántica para determinar la evolución del sistema con el tiempo de forma análoga a las trayectorias. Podemos intentar entonces buscar la separación de dos funciones de onda próximas $\psi(t_0)$ y $\phi(t_0)$, pero nos encontramos con que el grado de solapamiento permanece constante debido a la unitariedad del operador de evolución temporal

$$\langle \phi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \phi(t) | \psi(t) \rangle \quad (3)$$

Finalmente, lo podríamos tratar estudiando la sensibilidad del hamiltoniano a pequeñas perturbaciones [7]. Por este camino sí se han conseguido algunos avances, pero sólo para el caso de sistemas concretos sin llegar a dar lugar a una teoría general consistente que permita definir el caos en la mecánica cuántica.

Todas estas dificultades hacen que aún no contemos con una definición de caos cuántico suficientemente satisfactoria. Sin embargo, si el caos no existiese en algún lugar de la mecánica cuántica no podría manifestarse en la mecánica clásica. Por ello, M. Berry [8] propuso la siguiente definición “La caología cuántica es el estudio del comportamiento semiclásico, pero no clásico, característico de los sistemas cuyo movimiento clásico exhibe caos”. Si bien el término *caología cuántica* no tuvo demasiado éxito, la definición de caos cuántico como el estudio de los sistemas cuánticos con análogo clásico caótico sigue siendo la definición más aceptada aunque no incluya a los sistemas puramente cuánticos.

3.1. Caos en la región semiclásica

Debido a la definición de Berry, han sido numerosos los trabajos llevados a cabo sobre sistemas con pocos grados de libertad que pudieran ser estudiados en la región semiclásica y tuvieran análogos clásicos caóticos. La principal motivación de estudiar el caos en esta región es encontrar herramientas que se puedan generalizar a todos los sistemas cuánticos.

Dos observables en los que se pueden encontrar trazas de caos son el módulo al cuadrado de la función de onda (podemos ver el trabajo de Heller [9]) y el espectro de energías.

En la región semiclásica se puede trabajar desde dos perspectivas, el límite cuántico cuando $\hbar \rightarrow 0$ o la cuantización de sistemas clásicos. Lo natural, ya que fue el orden que siguió la propia mecánica cuántica en su desarrollo, sería empezar por la segunda.

Para sistemas integrables, es fácil establecer la correspondencia entre sistemas clásicos y cuánticos mediante las reglas de cuantización WKB (Wentzel, Kramer, Brillouin). Sin embargo, no fue posible la cuantización de sistemas no integrables hasta la aparición de la *fórmula de la traza de Gutzwiller* [10]. Esta fórmula permite calcular un observable cuántico como es la densidad de estados $\rho(E)$ a partir de cantidades clásicas como son las órbitas periódicas del sistema clásico análogo. Además es válida tanto para sistemas integrables como no integrables.

Para un espectro discreto de energía $\{E_i\}$ la densidad de estados se define como

$$\rho(E) = \sum_i \delta(E - E_i) \quad (4)$$

Gracias a la fórmula de Gutzwiller se pudo descomponer la densidad de estados en una parte suave $\bar{\rho}(E)$ y una parte fluctuante $\tilde{\rho}(E)$.

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \tilde{\rho}(E) \quad (5)$$

La *parte suave* se puede calcular en la aproximación de Thomas-Fermi y tiene una variación suave con la energía, de ahí su nombre. Procede de la contribución de las órbitas de longitud nula.

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int dqdp \delta(E - H(q, p)) \quad (6)$$

A su vez, la *parte fluctuante* es un término oscilatorio que depende fuertemente de la energía. Está relacionado con las órbitas de longitud no nula y tiene especial importancia porque es un observable propio del sistema cuántico por lo que resulta fundamental para caracterizar el caos.

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{1}{\hbar^{\mu+1}} \sum_{op} A_{op}(E) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_{op}(E)\right) \quad (7)$$

El sumatorio es a todas las órbitas periódicas. Los términos S_{op} y A_{op} se relacionan con la acción clásica de las órbitas y sus propiedades de estabilidad respectivamente.



Figura 1: Espectros de energía de un oscilador armónico unidimensional (equiespaciado), un sistema caótico y uno integrable. Los tres están reescalados de modo que $\bar{\rho}(E) = 1$

Mientras que el parámetro μ se define como $(d - 1)/2$ para sistemas integrables (d es la dimensión del espacio) y es 0 para sistemas caóticos [11].

El proceso de *unfolding* o reescalado, que veremos más adelante, nos permite separar la parte suave de la fluctuante y así poder comparar distintos sistemas. El estudio de las propiedades estadísticas de las fluctuaciones se ha convertido en la principal herramienta a la hora de determinar la existencia de caos en un sistema.

En 1973, Percival conjeturó, a partir de la fórmula de la traza de Gutzwiller (5), que existen dos tipos de espectros de energía para sistemas ligados con más de un grado de libertad [12]. Los espectros de sistemas con análogos clásicos no integrables mostrarán un aspecto más regular que los de los sistemas integrables debido a la correlación de niveles. En los sistemas integrables no existe ninguna correlación por lo que pueden producirse degeneraciones en el espectro que hacen que, al variar un parámetro libre, los niveles se puedan cruzar. Por el contrario, en los sistemas cuyo análogo clásico es no integrable sí existe correlación entre los niveles con las mismas propiedades de simetría. Esta correlación impide los mencionados cruces y produce en su lugar los llamados cruces evitados que dan lugar a la *repulsión de niveles*.

La regularidad mencionada en el párrafo anterior se puede ver de forma gráfica en la figura 1. En ella tenemos representados 20 niveles de energía que corresponden a un oscilador armónico unidimensional, que es el espectro equiespaciado, a un sistema caótico y a un sistema integrable. Se puede ver que el espectro caótico es más parecido al equiespaciado que el espectro integrable debido a la mencionada repulsión de niveles. Esto es contrario de lo que cabría esperar pues popularmente el caos se asocia a desorden.

La conjetura de Percival se demostró con los trabajos de Berry y Tabor en 1977 [13] y de Bohigas, Giannoni y Schmit en 1984 [3], que establecen que la parte fluctuante de la densidad de estados es universal: una vez fijadas las simetrías espacio-temporales del problema, depende únicamente de si el sistema clásico es integrable o caótico pero no de

las propiedades individuales del mismo. El primer trabajo consiguió demostrar que las fluctuaciones estadísticas de los sistemas clásicamente integrables seguían la estadística de Poisson y que efectivamente los niveles están descorrelacionados. El segundo estableció la conjetura BGS que dice "Las fluctuaciones del espectro de sistemas cuánticos invariantes bajo inversión temporal cuyos análogos clásicos son sistemas K son iguales a las predichas por la colectividad GOE de la teoría de matrices aleatorias". Aunque fue formulada para sistemas K, estudios posteriores mostraron que era igualmente válida para sistemas ergódicos en general, por ello se considera que un sistema cuántico es caótico cuando su análogo clásico es ergódico.

Han sido numerosos los estudios que corroboran la conjetura BGS, sin embargo, el punto de inflexión llegó dos décadas más tarde cuando se demostró que existe una relación entre las órbitas periódicas de los sistemas clásicos con la teoría cuántica de campos, concretamente las contribuciones de pares de órbitas son topológicamente equivalentes a los diagramas de Feynman [14]. Esta relación permite afirmar que la conjetura BGS ha sido demostrada.

3.2. Teoría de matrices aleatorias

La teoría de matrices aleatorias (RMT: "Random Matrix Theory") fue desarrollada en los años 50 y 60 por Wigner, Dyson y Mehta entre otros, para estudiar el espectro de núcleos atómicos complejos. Más tarde se vio que también era aplicable a otros sistemas complejos como moléculas, átomos, resonadores, etc. Dos buenas revisiones sobre aplicaciones de la RMT son la escrita por Guhr [15] orientada a la física cuántica en general y la de Weidenmüller [16] que se centra en la física nuclear. Sin embargo, la RMT vio renovado su interés con la propuesta de la conjetura BGS, ya que, la veracidad de dicha conjetura la hacía también aplicable a sistemas caóticos con pocos grados de libertad. La monografía de Mehta, *Random Matrices* [17] se ha convertido en la referencia básica en este campo.

La RMT prescinde de los detalles de la interacción nuclear y se centra en las simetrías para hacer una descripción estadística del sistema. Por ello, sustituye el hamiltoniano, que no se conoce con exactitud, por una colectividad de matrices aleatorias con las mismas propiedades de simetría.

Se pueden distinguir tres tipos de colectividades con distintas propiedades de simetría.

- Colectividad GUE (*Gaussian Unitary Ensemble*). La componen matrices hermíticas invariantes bajo transformaciones unitarias. Se aplica con hamiltonianos sin simetría bajo inversión temporal
- Colectividad GSE (*Gaussian Symplectic Ensemble*). Compuesta por matrices cuaterniónicas reales, invariantes bajo transformaciones simplécticas. Representan a hamiltonianos con simetría bajo inversión temporal y espín semientero sin simetría bajo rotaciones

- Colectividad GOE (*Gaussian Orthogonal Ensemble*). Está formada por matrices reales y simétricas, invariantes bajo transformaciones ortogonales. Sustituyen a hamiltonianos con simetría bajo inversión temporal y rotaciones y también a hamiltonianos sin simetría bajo rotaciones pero con espín entero

Aunque la matriz que reemplaza al hamiltoniano sea aleatoria, sus elementos no se eligen libremente sino que deben respetar las propiedades de simetría. Vamos a ver cuáles son las condiciones para crear una matriz GOE, que es la colectividad más utilizada y la que nos interesa en este trabajo. Las condiciones para las otras colectividades se pueden obtener de forma análoga.

Para empezar, tenemos que la matriz debe ser simétrica lo que nos da $N(N+1)/2$ elementos independientes, siendo N la dimensión de la matriz. Además, la función de probabilidad de los elementos de matriz no debe depender de la base a la que se aplica lo que nos da la propiedad de invariancia:

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = p(H'_{11}, \dots, H'_{NN}) \quad (8)$$

H' se obtiene de H por una transformación ortogonal $H' = OHO^T$ con $OO^T = 1$. Esto reduce radicalmente el número de funciones de probabilidad $p(H_{11}, \dots, H_{NN})$ posibles pues, como consecuencia de la propiedad conmutativa, las funciones de H_{nm} invariantes bajo transformaciones ortogonales sólo pueden depender de trazas de potencias de H . Por otro lado, suponemos que los elementos de matriz no están correlacionados por lo que se cumple:

$$p(H_{11}, \dots, H_{NN}) = p(H_{11})p(H_{12}) \dots p(H_{NN}) \quad (9)$$

Si combinamos estas condiciones sólo tenemos una expresión posible que, utilizando la condición de normalización, se puede expresar como:

$$p(H_{11}, H_{12}, \dots, H_{NN}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{N/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{N(N-1)/4} \exp\left(-A \sum_{n,m} H_{n,m}^2\right) \quad (10)$$

La constante A se puede expresar en términos de la varianza de los elementos de matriz diagonales y no diagonales

$$\langle H_{nn}^2 \rangle = \frac{1}{2A} \quad \langle H_{nm}^2 \rangle = \frac{1}{4A} \quad (11)$$

La distribución de los elementos de matriz no resulta práctica a la hora de hacer una comparación con los datos experimentales. De donde sí podemos obtener información es

de la distribución de los elementos de la matriz diagonalizada, que se corresponden con los niveles de energía. Para todas las colectividades la distribución de autovalores se puede escribir en una única expresión:

$$P(E_1, \dots, E_N) \propto \prod_{n>m}^{1\dots N} |E_n - E_m|^\nu \exp\left(-A \sum_n E_n^2\right) \quad (12)$$

donde ν es el *índice de universalidad* que es característico de cada colectividad siendo $\nu = 1, 2, 4$ para GOE, GUE y GSE respectivamente y $\nu = 0$ para la distribución de Poisson.

En cuanto a la densidad de estados, que hemos visto que para un sistema cuántico quedaba definida por (4), no estamos interesados en el valor correspondiente a una sola matriz sino en la densidad de estados de toda la colectividad gaussiana. Por ello, nos interesa el promedio de la densidad de estados de un conjunto de matrices. Para la colectividad GOE, cuando $N \rightarrow \infty$ viene dada por:

$$\bar{\rho}(E) = \begin{cases} \frac{N}{\pi\lambda} \sqrt{1 - \left(\frac{E}{2\lambda}\right)^2} & |E| < 2\lambda \\ 0 & |E| > 2\lambda \end{cases} \quad (13)$$

expresión que se conoce como ley del *semicírculo de Wigner*.

3.3. El reescalado

Como se mencionó en la sección 3.1, el proceso de reescalado (*unfolding*) es el paso previo al análisis espectral ya que es el algoritmo que permite que la densidad de estados sólo dependa de la parte fluctuante que es la que presenta un comportamiento universal propio del sistema cuántico. Un reescalado mal hecho puede derivar en conclusiones erróneas acerca de la caoticidad del sistema [18], pero sin este proceso es imposible comparar sistemas de diferente naturaleza.

Vimos que según la fórmula de la traza de Gutzwiller (5) la densidad de estados se puede descomponer en parte suave $\bar{\rho}(E)$ y parte fluctuante $\tilde{\rho}(E)$. La parte suave nos da la escala de energías apropiada localmente para el espectro. Debemos buscar un cambio de variable para que quede normalizada a la unidad. Para ello lo primero es caracterizar la densidad media de niveles. Este paso no resulta trivial a no ser que se disponga de una expresión para $\bar{\rho}(E)$, por lo que de aquí radican la mayoría de los errores en el reescalado.

Sea $\{E_i\}$ el conjunto de niveles del sistema, se define $N(E)$ como la densidad de niveles acumulada que mide el número de niveles que se encuentran por debajo de una energía E . Se puede escribir como:

$$N(E) = \int_{-\infty}^E \rho(x) dx \quad (14)$$

Así la densidad acumulada de niveles también se puede escribir como suma de parte suave y parte fluctuante $N(E_i) = \bar{N}(E_i) + \tilde{N}(E_i)$.

Mediante el proceso de reescalado lo que hacemos es transformar el espectro de niveles, en un conjunto de magnitudes adimensionales $\{\varepsilon_i\}$ definidas como:

$$E_i \rightarrow \varepsilon_i = \bar{N}(E_i) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (15)$$

La definición de la densidad acumulada de estados (14) implica que $\rho(E) = \frac{dN(E)}{dE}$, de modo que, sustituyendo en la fórmula de Gutzwiller (5) y desarrollando podemos reescribir la densidad de estados como:

$$\rho(\varepsilon) = 1 + \frac{\tilde{\rho}(E)}{\bar{\rho}(E)} \quad (16)$$

3.4. Análisis espectral

Una vez realizado correctamente el reescalado, se puede pasar a analizar las fluctuaciones de los distintos espectros mediante los estadísticos que nos ayudan a caracterizar la complejidad del sistema. Según Mehta [17], un estadístico espectral se define como un número W tal que puede calcularse a partir del espectro de niveles y cuya media $\langle W \rangle$ y varianza $V_W = \langle (W - \langle W \rangle)^2 \rangle$ son conocidos mediante un modelo teórico.

Existen varios tipos de estadísticos en función de cómo tratemos el sistema. El más utilizado es el estadístico de corto alcance $P(s)$ que mide las correlaciones a primeros vecinos. Este es el que usaremos en este trabajo. Sin embargo, en esta sección se va a hacer también una pequeña introducción a otros dos estadísticos interesantes en el estudio del caos cuántico como son la rigidez espectral $\Delta_3(L)$ que mide las desviaciones respecto a un espectro equiespaciado y δ_n que es el estadístico utilizado para abordar el caos con herramientas de análisis de series temporales.

3.4.1. Correlaciones de corto alcance

Dada una secuencia de niveles $\{\varepsilon_i\}$ con $i = 1, \dots, N$ ordenada en orden creciente de energía, se definen los espaciamentos a primeros vecinos como:

$$s_i = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, N - 1 \quad (17)$$

La distribución de probabilidad de estos espaciamentos $P(s)$ es un estadístico con el que se puede caracterizar la repulsión de niveles. Habíamos visto que en un sistema integrable los niveles estaban descorrelacionados por lo que existe una probabilidad no nula de que dos niveles de energía tengan el mismo valor, es decir, $P(0) \neq 0$. Por el contrario, en los sistemas no integrables la repulsión de niveles hace que $P(0) \rightarrow 0$ cuando $s \rightarrow 0$.

El trabajo de Berry y Tabor [13] demostró que para sistemas integrables la distribución de espaciamentos a primeros vecinos se ajusta a la distribución de Poisson $P(s) = \exp(-s)$, que es la distribución a que da lugar una secuencia de variables aleatorias independientes. Se observa que cumple la condición anterior pues $P(0) = 1$.

Para los sistemas cuánticos caóticos, la $P(s)$ se ajusta a las colectividades gaussianas GOE, GUE y GSE de acuerdo a la conjetura BGS. Aunque en un principio la conjetura fue formulada para la colectividad GOE, estudios posteriores vieron que, si el sistema presentaba las simetrías de las colectividades GUE o GSE, la distribución de espaciamentos a primeros vecinos se ajustaría a la correspondiente clase de universalidad. Sin embargo, esto se ha corroborado más en el plano teórico que en el experimental debido a que existen pocos sistemas que cumplan dichas simetrías, por eso la colectividad GOE continúa siendo la más popular.

El cálculo de la distribución de espaciamentos, $P(s)$, es complicado para sistemas cuánticos caóticos, sin embargo, Wigner realizó una aproximación válida para matrices de dimensión 2 para cada una de las colectividades. Se puede ver que en este caso sí hay repulsión de niveles en las tres colectividades pues $P(0) = 0$.

$$P(s) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) & \text{GOE} \\ \frac{32}{\pi^2} s^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi} s^2\right) & \text{GUE} \\ \frac{2^{18}}{3^6 \pi^3} s^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi} s^2\right) & \text{GSE} \end{cases} \quad (18)$$

Las cuatro expresiones para la distribución de espaciamentos a primeros vecinos se pueden generalizar de forma que $P(s) = as^\nu e^{-bs^2}$ donde a y b son las constantes correspondientes a cada distribución y ν es el índice de universalidad, también llamado *parámetro de repulsión* porque indica la intensidad de la repulsión. En la figura 2, tenemos representada la distribución de espaciamentos a primeros vecinos para las tres colectividades gaussianas, GOE, GUE, y GSE y la distribución de Poisson. Podemos ver que para el sistema integrable con $\nu = 0$ no hay repulsión, mientras que para las tres colectividades gaussianas sí que existe repulsión siendo menor para GOE (repulsión lineal $P(s) \sim s$), que para GUE (donde tenemos una repulsión cuadrática $P(s) \sim s^2$) y para GSE (que tiene repulsión cuártica $P(s) \sim s^4$ por lo que el ritmo de crecimiento de la curva es más lento).

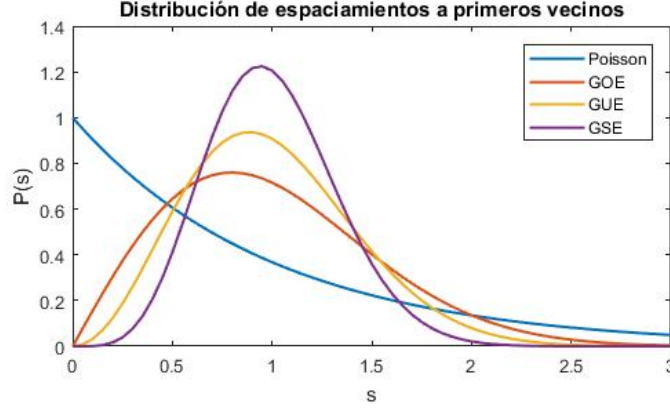


Figura 2: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos $P(s)$ para espectros tipo Poisson, GOE, GUE y GSE

3.4.2. Correlaciones de largo alcance

Antes de hablar de la rigidez espectral, conviene hablar de la *función de correlación*. A n puntos se define como:

$$R_n(E_1, \dots, E_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \int P_n(E_1, \dots, E_N) dE_{n+1} \dots dE_N \quad (19)$$

En el libro de Mehta [16] podemos ver los cálculos utilizando la forma de $P_n(E_1, \dots, E_N)$ de las colectividades de matrices aleatorias. Para dos puntos, se entiende como la densidad de probabilidad de encontrar dos energías E_1 y E_2 a dos energías dadas independientemente de la posición del resto, y sólo depende de la diferencia de energías $R_2(E_1, E_2) = R_2(r)$ donde $r = E_2 - E_1$ siendo $R_2(r) \sim r$ para el GOE y $R_2(r) \sim r^2$ para el GUE.

A partir de la función de correlación a dos puntos se puede definir la *función de agrupamiento*, tal que, para dos niveles $Y_2(E) = 1 - R_2(E)$. Para sistemas integrables $Y_2(E) = 0$. Para el GOE esta función se escribe como:

$$Y_2(E) = \left(\frac{\sin \pi E}{\pi E} \right)^2 + \left[\frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}(E) - \operatorname{Si}(\pi E) \right] \left[\frac{\cos \pi E}{\pi E} - \frac{\sin \pi E}{(\pi E)^2} \right] \quad (20)$$

donde $\operatorname{sgn}(E)$ es la función signo y $\operatorname{Si}(x)$ es la integral sinusoidal y se definen como:

$$\operatorname{sgn}(E) = \begin{cases} 1 & E > 0 \\ 0 & E = 0 \\ -1 & E < 0 \end{cases} \quad \operatorname{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt \quad (21)$$

La *rigidez espectral* $\Delta_3(L)$ es el estadístico más utilizado para estudiar las correlaciones de largo alcance. Se define utilizando la densidad integrada de estados $N(E)$. En un espectro reescalado $N(E)$ es una función escalón con pendiente unidad, si la ajustamos a una recta en un intervalo de longitud L , la rigidez espectral será el valor del mínimo χ^2 obtenido en el ajuste, tal que:

$$\Delta_3(L) = \left\langle \min_{A,B} \int_{E-L/2}^{E+L/2} [N(E) - AE - B]^2 dE \right\rangle \quad (22)$$

Se puede ajustar A y B por mínimos cuadrados. El resultado es independiente de E y se puede escribir en función de la función de agrupamiento $Y_2(E)$ como:

$$\Delta_3(L) = \frac{L}{15} - \frac{1}{15L^4} \int_0^L (L-E)^3 (2L^2 - 9LE - 3E^2) Y_2(E) dE \quad (23)$$

De acuerdo a su definición, la rigidez espectral mide cuánto se desvía el espectro estudiado de un espectro uniforme. Un valor pequeño de Δ_3 indica que es bastante uniforme, que se ajusta a una cierta estructura “rígida”, de ahí su nombre. Es decir, un valor pequeño indica que hay repulsión entre pares de niveles separados una distancia L . Así pues, la rigidez espectral mide las correlaciones de niveles alejados, a diferencia de la $P(s)$ que mide las correlaciones a primeros vecinos.

Para los sistemas integrables, como no hay correlación queda $\Delta_3(L) = \frac{L}{15}$. En los sistemas caóticos se conoce su desarrollo asintótico que depende de la clase de universalidad según el parámetro de repulsión ν , tal que:

$$\Delta_3(L) = \frac{1}{\nu\pi^2} \log(L) + b_\nu + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad L \gg 1, \quad \nu = 1, 2, 4 \quad (24)$$

3.4.3. La función δ_n

Existe un modo diferente de abordar el caos cuántico basado en los métodos de análisis de series temporales [19]. Una serie temporal es una secuencia de observaciones ordenadas cronológicamente. Muchos fenómenos en la naturaleza se pueden estudiar mediante series temporales. El espectro de energías de un sistema cuántico también tiene una forma similar siendo la secuencia de niveles una señal discreta y considerando la energía como la magnitud análoga al tiempo.

La función δ_n es el estadístico que permite estudiar las fluctuaciones de los espectros cuánticos mediante técnicas estándar del análisis de series temporales, simplemente considerando el índice n como un “tiempo” discreto. Se define la función δ_n como:

$$\delta_n = \sum_{i=1}^n (s_i - \langle s \rangle) = \sum_{i=1}^n w_i \quad (25)$$

La cantidad w_i nos da la fluctuación del i -ésimo espaciamiento respecto de su valor medio¹. Dicho de otra manera, la δ_n representa la desviación del n -ésimo estado excitado de su valor medio n : $\delta_n = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_1 - n$. Esta función tiene una similitud formal con una serie temporal. Si comparamos el espectro de niveles con el proceso de dispersión de una partícula entonces δ_n sería el análogo del desplazamiento total de la partícula en el instante n .

Si bien la δ_n ya figura en el libro de Mehta [17], hasta hace unos años no había sido utilizada como estadístico, pero sí como herramienta para detectar niveles perdidos, aunque no sea muy fiable. En la tesis de Relaño [20] se utiliza el espectro de potencias de esta función, definido como:

$$P_k^\delta = \left| \widehat{\delta}_k \right|^2 \quad (26)$$

donde $\widehat{\delta}_k$ se define a partir de la transformada de Fourier según:

$$\widehat{\delta}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^N \delta_n \exp\left(-\frac{2\pi i k n}{N}\right) \quad (27)$$

para caracterizar las fluctuaciones de los sistemas cuánticos caóticos, regulares e intermedios y también para detectar los efectos anómalos debido a propiedades específicas de cada sistema como las órbitas periódicas de periodo más corto.

Se encontró que el espectro de potencias se comporta como una ley de potencias $P_k^\delta \propto k^{-\alpha}$ donde $\alpha \simeq 2$ para casos regulares y $\alpha \simeq 1$ para casos caóticos. Este resultado permite conjeturar que “Los espectros de energías de los sistemas cuánticos caóticos son caracterizados por un ruido $1/f$ ”. Este ruido también es característico de otros sistemas complejos como la actividad de las manchas solares o el flujo del río Nilo [21], y se diferencia del ruido $1/f^2$ característico del movimiento browniano.

Los sistemas caóticos y regulares forman parte de una clase amplia de sistemas complejos que se caracterizan por un ruido $1/f^\alpha$, pudiendo considerar α como un indicador del grado de caos del sistema. Las correlaciones entre niveles disminuyen desde $\alpha = 2$ que corresponde a sistemas descorrelacionados hasta $\alpha = 1$ para sistemas cuánticos caóticos. De este modo se puede establecer una analogía entre la rigidez espectral, característica del caos cuántico, y la antipersistencia², propia de las series temporales. Por tanto, la repulsión de niveles se manifiesta en forma de serie temporal antipersistente siendo máxima en el límite caótico.

¹En un espectro reescalado es $\langle s \rangle = 1$

²La antipersistencia es la tendencia de una serie temporal a corregir las desviaciones con respecto a su valor medio y aparece en series cuyo espectro de potencias cumple $1 < \alpha < 2$

3.5. Sistemas intermedios

Hasta ahora hemos visto que se pueden estudiar los sistemas cuánticos a partir de observables como puede ser el espectro de energías, teniendo en cuenta que las fluctuaciones espectrales de sistemas integrables se ajustan a la estadística de Poisson y las de sistemas caóticos concuerdan con la teoría de matrices aleatorias. El problema es que las fluctuaciones de muchos de los espectros experimentales con los que nos encontramos no concuerdan con ninguno de estos casos sino que se encuentran en una situación intermedia.

Son dos los motivos que pueden dar lugar a estadísticas intermedias. El primero es que estemos ante un sistema que realmente sea intermedio, es decir, que el espacio de fases de su análogo clásico sea mixto y por tanto tenga una mezcla de estados regulares y caóticos. El segundo es que estemos analizando un sistema caótico con un espectro incompleto. Para un buen análisis de las fluctuaciones espectrales, los espectros deben ser completos y puros, es decir, deben tener todos los niveles que lo forman (completo) y las simetrías J^π deben estar correctamente asignadas (puro). La falta de niveles (o la mezcla con niveles de distinta simetría) produce que la distribución de espaciamentos se desplace hacia la estadística de Poisson aunque el sistema sea completamente caótico [22]. En sistemas nucleares es muy común encontrarse con espectros de este tipo.

La complejidad de estudiar sistemas con estadística intermedia radica en que no conocemos ningún estadístico que los caracterice, de modo que, si solamente contamos con un espectro no nos es posible decir si pertenece a un sistema intermedio o si es en realidad un sistema caótico con un espectro incompleto. En los últimos años, han sido varios los estudios que se han enfrentado a este problema y han intentado buscar algún método que nos permita bien sacar información relevante de la estadística del sistema conociendo la naturaleza del mismo o bien obtener información de las correlaciones sabiendo el tanto por ciento del espectro que es posible observar. Pero, mientras no sepamos a ciencia cierta si los métodos de interpolación existentes funcionan bien en todos los casos de estadísticas intermedias, no podremos asegurar que nuestros resultados sean concluyentes porque podemos tener espectros GOE catalogados como intermedios por no haber considerado la incompletitud o podemos intentar estimar la cantidad de niveles perdidos en casos que en realidad son intermedios.

Así pues, en este trabajo se van a aplicar a espectros GOE con niveles perdidos los dos métodos de ajuste más habituales, que son los que vamos a ver a continuación. El objetivo es comprobar si existe alguna diferencia en sus resultados para determinar si los dos métodos son totalmente válidos o si sería conveniente utilizar un método en concreto para situaciones determinadas.

3.5.1. Distribución de espaciamentos de Brody

La distribución de espaciamentos de Brody [23] es la aproximación más utilizada para estudiar el grado de caoticidad de un sistema con espacio de fases mixto. Esta función

interpola entre la distribución $P(s)$ del sistema integrable (Poisson) y la distribución de un sistema caótico que se ajusta a GOE. Se puede escribir como:

$$P_w(s) = (w + 1) a_w s^w \exp(-a_w s^{w+1}) \quad (28)$$

donde $a_w = \left[\Gamma\left(\frac{w+2}{w+1}\right) \right]$ y $\Gamma(z)$ es la función gamma³. El parámetro w es el *parámetro de Brody* y se utiliza para caracterizar de forma cuantitativa el grado de caoticidad. Para $w = 0$ nos queda la distribución de Poisson y para $w = 1$ resulta la distribución GOE calculada por Wigner. En realidad, sería conveniente decir que en el proceso de derivación de la fórmula existe un paso que sólo se justifica para sistemas no correlacionados, por ello el valor de w para ajustar la distribución GOE es distinto de 1, concretamente se obtuvo $w = 0.953$ [24].

3.5.2. Sistemas con niveles perdidos

Dyson ya se había dado cuenta de la sensibilidad que tiene la teoría de matrices aleatorias a las simetrías del sistema y de los problemas que esta ocasionaba a la hora de obtener resultados estadísticos de datos experimentales [25]. Por ello, usando conceptos de teoría de la información, consideró el espectro como un mensaje corrupto. Siguiendo esta idea argumentó que las correlaciones en una secuencia de niveles podían proporcionar la redundancia⁴ necesaria para aplicar el código de corrección de errores (*Error Correcting Code*, ECC). Así, si no hay correlaciones (Poisson) no hay redundancia y no hay posibilidad de detectar niveles perdidos, pero en el otro extremo donde hay correlaciones, siendo el máximo de redundancia un espectro equiespaciado, un nivel perdido se puede detectar como un agujero en el espectro. Los autovalores de las matrices aleatorias corresponderían a una situación intermedia, sin embargo, los intentos de encontrar niveles perdidos en esta situación fueron en vano.

El problema fue revisado por Bohigas y Pato [26]. Ellos se centraron en el caso en el que sólo una fracción f de niveles es detectada. Los niveles perdidos están distribuidos aleatoriamente en el espectro, lo cual desde un punto de vista práctico es razonable ya que son muchos los motivos por los que un nivel no es detectado y no hay forma de predecir cuál va a faltar. El efecto de esta situación es una menor correlación entre niveles que queda reflejada en una menor repulsión entre niveles adyacentes y un incremento de datos estadísticos de mayor rango. Con estas consideraciones dedujeron que la distribución de espaciamientos a primeros vecinos para una fracción f de niveles observados se podría escribir como:

$$p(s, f) = \sum_{k=0}^{\infty} (1-f)^k P\left(k, \frac{s}{f}\right) \quad (29)$$

³La función gamma se define como $\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt$ para $z > 0$

⁴En teoría de la información, la redundancia es una propiedad de los mensajes que consiste en tener partes predecibles a partir del resto del mensaje

$P(k, x)$ es la probabilidad de que inicialmente hubiera k niveles entre el par de niveles. Para las matrices GOE se utiliza en $k = 0$ la aproximación de Wigner:

$$P(0, s) = P(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4} s^2\right) \quad (30)$$

en $k = 1$ se aplica la expresión:

$$P(1, s) = \frac{8}{3\pi^3} \left(\frac{4}{3}\right)^5 s^4 \exp\left(-\frac{16}{9\pi} s^2\right) \quad (31)$$

y las siguientes $P(k, x)$ vendrán dadas por gaussianas centradas en $k + 1$ con varianzas $V(k)$ dadas por:

$$V^2(k) \simeq k - 2 \int_0^k (k - x) Y_2(x) dx - \frac{1}{6} \quad (32)$$

donde $Y_2(x)$ es la función de agrupamiento dada por (20).

Este modelo permite recuperar las propiedades estadísticas del espectro completo si la fracción de niveles perdidos es conocida o estimar la fracción de niveles perdidos si se conoce la naturaleza estadística del sistema. Fue aplicado a resonadores acústicos permitiendo explicar las desviaciones producidas en los estadísticos de corto y de largo alcance [27].

4. Análisis de espectros GOE con niveles perdidos

Normalmente, cuando tenemos un espectro de estadística intermedia se intenta cuantificar el grado de caoticidad mediante el parámetro de Brody, w , sin embargo la distribución de Brody es una aproximación que se desarrolló para ajustar sistemas intermedios y ningún estudio se ha preocupado en comprobar que sea válida para sistemas caóticos cuánticos con niveles perdidos.

En este trabajo utilizaremos el software matemático MatLab para generar una serie de espectros pertenecientes a la colectividad GOE. Posteriormente eliminaremos niveles de manera aleatoria y ajustaremos la distribución de espaciamientos a primeros vecinos mediante la distribución de Brody y la distribución propuesta por Bohigas y Pato para sistemas con niveles perdidos. A partir de los resultados obtenidos trataremos de ver si el ajuste de Brody es también válido para sistemas con niveles perdidos o si existen diferencias con el ajuste de Bohigas y Pato que nos puedan permitir distinguir estos sistemas de los sistemas intermedios.

4.1. Colectividad GOE

El primer paso es generar una serie de matrices aleatorias que cumplan las reglas de la colectividad GOE⁵. Esto es, que sean simétricas y que sus elementos no sean completamente aleatorios sino que se ajusten a una distribución gaussiana con $\sigma = 2$ para los elementos de la diagonal y $\sigma = 1$ para el resto de elementos de la matriz (11). Para ello, se ha utilizado la función de MatLab `normrnd` (μ, σ) que genera números aleatorios pertenecientes a una distribución normal centrada en μ y con desviación estándar σ .

Se han generado un total de 1500 matrices pertenecientes a la colectividad GOE, todas ellas de dimensión $N=3000$. El conjunto de autovalores resultantes de la diagonalización se corresponden con los niveles de energía del sistema. Si las matrices GOE están bien generadas el promedio de la densidad de estados del conjunto de matrices debería cumplir la ley del semicírculo de Wigner (13). En la figura 3 hemos representado el promedio de la densidad de estados de las 1500 matrices generadas y podemos comprobar que los datos se ajustan a la curva esperada.

El siguiente paso para poder analizar las fluctuaciones del espectro sería aplicar el reescalado. Ya vimos que si este proceso no se realiza correctamente puede haber errores en la caracterización del sistema, por evitar dichos fallos se ha decidido que en este trabajo no se va a realizar, a pesar de que contamos con la expresión para la densidad media de estados que nos facilitaría el trabajo. En su lugar, se ha optado por una alternativa válida para matrices GOE que consiste en tomar los autovalores centrales, esto es, para las matrices de dimensión 3000 que habíamos generado, si tenemos los autovalores ordenados de forma creciente descartaríamos los 1000 primeros autovalores y los 1000 autovalores finales, así nos quedaría un espectro que estaría compuesto de los 1000 autovalores restantes.

⁵Vistas en la sección 3.2 Teoría de matrices aleatorias

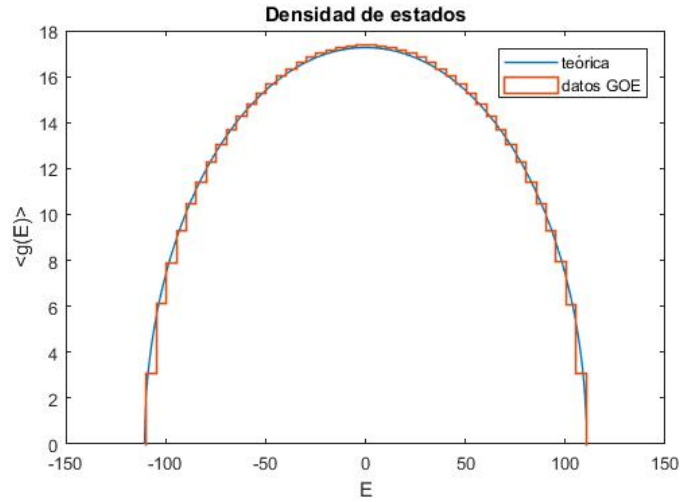


Figura 3: Promedio de la densidad de estados de 1500 matrices GOE, se ajusta a la curva teórica dada por la ley del semicírculo de Wigner

En la figura 4 podemos comprobar que el espectro resultante de tomar los niveles centrales es compatible con un espectro reescalado. Hemos representado el promedio de la densidad de estados acumulada de los espectros GOE completos y de los elementos centrales de dichos espectros. Dado que el rango de energías de los dos conjuntos de datos es distinto se han reescalado a $\epsilon \in [0, 1]$ para poder compararlos. Además la altura de los bins también está normalizada de modo que el último bin debe ser igual o menor que 1. Tenemos que el promedio de la densidad de estados acumulada de los autovalores centrales se ajustan a la recta de pendiente unidad $N(\epsilon) = \epsilon$ lo que también ocurre en espectros reescalados. No pasa lo mismo para el conjunto de todos los autovalores de la matriz GOE, donde sí sería necesario aplicar el reescalado.

4.1.1. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos

Tenemos por tanto 1500 espectros pertenecientes a la colectividad GOE con 1000 niveles cada uno. Los espaciamientos a primeros vecinos se calculan a partir de la expresión $s_i = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$.

Si representamos la distribución de espaciamientos a primeros vecinos de esos espectros encontramos que en mayor o menor medida se ajusta a la curva de la distribución GOE, como se puede ver en la figura 5 donde están representados a modo de ejemplo 4 de los 1500 casos que tenemos. Pero no es suficiente con que se pueda ver que hay ajuste a simple vista, y para ver de forma analítica si el ajuste es fiable vamos a usar la prueba χ^2 .

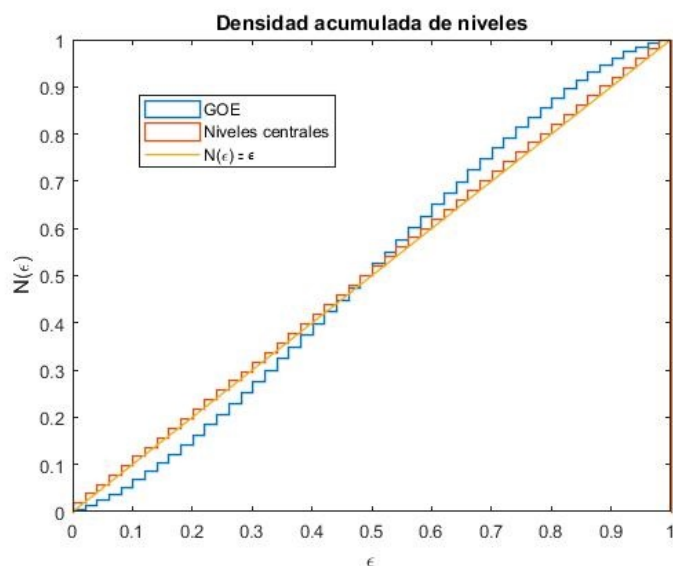


Figura 4: Densidad de estados acumulada del promedio de los autovalores de las matrices GOE y de los 1000 autovalores centrales de dichas matrices. El ajuste a la recta $N(\epsilon) = \epsilon$ es un indicador de que no es necesario realizar el reescalado

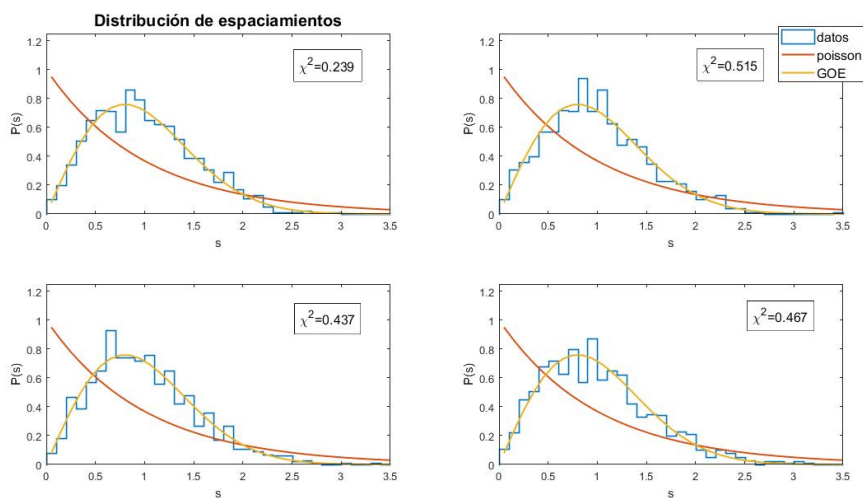


Figura 5: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de 4 de los espectros GOE generados ($N=1000$). Se ajustan a la distribución GOE (amarillo), en rojo podemos ver la distribución de Poisson. Se incluye también el valor de χ^2 correspondiente a cada espectro

4.1.2. Prueba χ^2

En estadística, para saber cuánto difieren los datos de la distribución esperada teóricamente, se utiliza la *prueba χ^2 de Pearson* que indica en qué medida se deben al azar las diferencias existentes entre ambas distribuciones. Este estadístico se define como:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(\text{observada}_i - \text{teórica}_i)^2}{\text{teórica}_i} \quad (33)$$

Cuanto menor sea el valor de χ^2 mayor concordancia habrá entre las dos distribuciones tomando un valor de 0 si la concordancia es perfecta. Por el contrario, si el estadístico toma un valor muy grande se rechazará la hipótesis nula, es decir, la hipótesis que asume la igualdad entre las dos distribuciones.

Hemos calculado el valor de χ^2 para ver cómo se ajustan las distribuciones de espaciamientos a primeros vecinos de nuestros espectros a la fórmula de Wigner para la distribución GOE. El promedio de los 1500 espectros nos da $\langle \chi^2 \rangle = 0.5$ con desviación estándar $\sigma = 0.4$ y mediana $M_e = 0.39$. Los cálculos se han realizado para bins de anchura 0.1, es bueno destacarlo porque los resultados variarán al cambiar la anchura ya que variará el número de datos i observados. Así con un bin más estrecho los datos diferirán más de la función teórica haciendo que el valor de χ^2 sea mayor. El hecho de que tengamos $\chi^2 < 1$ nos indica que es un buen ajuste. En los 4 espectros de la figura 5 hemos incluido el valor de χ^2 correspondiente a cada espectro para tener una idea de a qué corresponde gráficamente un valor de χ^2 determinado.

Para la función de distribución de Poisson, que obviamente no se ajusta a los datos, tenemos $\langle \chi^2 \rangle = 4.6$ con $\sigma = 0.3$

4.1.3. Distribución de Bohigas-Pato

El siguiente paso será calcular la distribución de espaciamientos a primeros vecinos y ajustar los espectros obtenidos con la distribución de espaciamientos de Brody y con la distribución propuesta por Bohigas y Pato. Pero antes debemos saber la forma exacta de esta última.

Vimos que la distribución de Bohigas-Pato (29) viene dada por un sumatorio de $k = 0$ a ∞ que depende de funciones $P(k, x)$ definidas como la probabilidad de que inicialmente hubiera k niveles entre un par de niveles. La función $P(0, x)$ venía dada por la distribución de Wigner (30), $P(1, x)$ está dada por (31), y para $k > 1$ las funciones $P(k, x)$ serán gaussianas cuya varianza $V(k)$ hay que calcular.

$$V(k) \simeq \sqrt{k - 2 \int_0^k (k - x) Y_2(x) dx} - \frac{1}{6} \quad (34)$$

k	integral	V(k)	k	integral	V(k)	k	integral	V(k)
2	0.0533	1.3140	10	0.0193	3.1296	18	0.0299	4.2159
3	-0.0344	1.7036	11	-0.0182	3.2969	19	-0.0200	4.3443
4	0.0343	1.9403	12	0.0242	3.4329	20	0.0224	4.4484
5	-0.0252	2.2099	13	-0.0078	3.5845	21	-0.0148	4.5676
6	0.0268	2.4041	14	-0.0033	3.7202	22	0.0126	4.6699
7	-0.0209	2.6220	15	-0.0124	3.8546	23	-0.0089	4.7803
8	0.0227	2.7907	16	0.0258	3.9726	24	0.0068	4.8805
9	-0.0181	2.9782	17	-0.0239	4.1087	25	-0.0032	4.9839

Tabla 1: Resultados de la integral numérica $\int_0^k (k-x) Y_2(x) dx$ y las varianzas $V(k)$ de las funciones de probabilidad $P(k, x)$ para $k > 2$ a partir de las que se obtiene la distribución de Bohigas-Pato $P(s, f)$

La variancia contiene una integral que depende de la función de agrupamiento $Y_2(x)$ (20):

$$\int_0^k (k-x) \left[\left(\frac{\sin \pi x}{\pi x} \right)^2 + \left[\frac{\pi}{2} \operatorname{sgn}(x) - \operatorname{Si}(\pi x) \right] \left[\frac{\cos \pi x}{\pi x} - \frac{\sin \pi x}{(\pi x)^2} \right] \right] dx \quad (35)$$

de esta integral todavía no se ha encontrado solución analítica, por ello en este trabajo la hemos resuelto numéricamente. Nosotros en lugar de llegar a $k = \infty$ nos hemos quedado en $k = 25$. El valor numérico de la integral y la correspondiente varianza $V(k)$ se puede encontrar en la tabla 1. Podemos ver que la varianza, y por tanto la anchura de las funciones $P(k, x)$, crecen con el valor de k .

La función de distribución de Bohigas y Pato está compuesta por sumandos donde $P(k, x)$ está modulada por un factor $(1-f)^k$. Por tanto, para el espectro completo ($f = 1$) se recupera la distribución de Wigner ya que sólo contribuye $k = 0$. Si la fracción de niveles faltantes es pequeña ($f > 0.8$) además de $k = 0$ también se notará el efecto de $k = 1$. Así, a medida que vayamos disminuyendo la fracción de niveles observados f ganarán más importancia las funciones $P(k, x)$ para k más elevado lo cual tiene sentido que suceda ya que cuantos más niveles falten mayor será la probabilidad de que entre dos pares de niveles hubiera inicialmente un número k de niveles alto.

En la figura 6 hemos representado la distribución de Bohigas-Pato $P(s, f)$ y la contribución de cada sumando $(1-f)^k P\left(k, \frac{s}{f}\right)$ para distintos valores de f . Para $f > 0.2$ basta con tener en cuenta unos pocos valores de k para realizar un buen ajuste de los datos experimentales, sin embargo, para $f < 0.2$ las contribuciones de $P(k, x) \forall k$ comienzan a ser notables en regiones donde $s > 1$. De hecho, podemos ver que para $f = 0.1$ para que la función de distribución $P(s, f)$ no decaiga a 0 antes de $s = 3$ hemos utilizado las funciones de probabilidad $P(k, x)$ para $k \leq 25$ y aún así, el decrecimiento a partir de $s = 2.5$ es más rápido de lo que debiera.

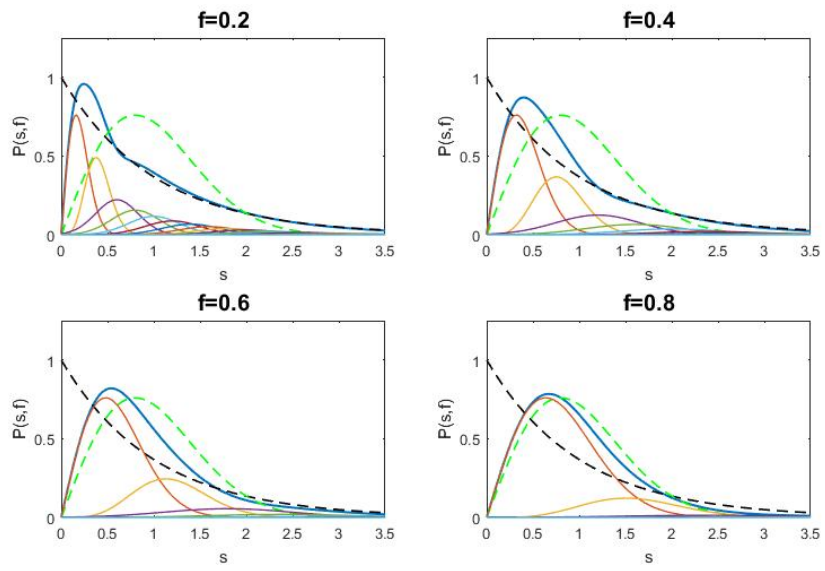
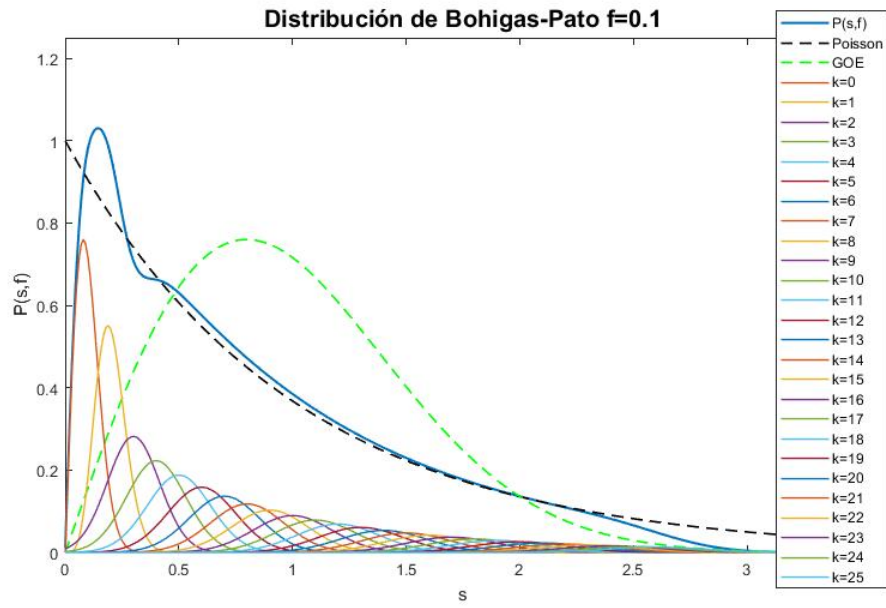


Figura 6: Distribución de Bohigas-Pato $P(s, f)$ y sus contribuciones $(1 - f)^k P\left(k, \frac{s}{f}\right)$ en función de f . En línea discontinua vemos las distribuciones de Poisson y GOE a las que debería ajustarse $P(s, f)$ para $f = 0$ y $f = 1$ respectivamente

4.1.4. Distribución de espaciamientos de espectros con niveles perdidos

Vamos a comenzar aplicando los métodos de interpolación que conocemos, es decir, las funciones de distribución de Brody y Bohigas-Pato, a espectros completos para ver si recuperamos los valores esperados de los parámetros w (parámetro de Brody) y f (en la distribución de Bohigas-Pato fracción de niveles del espectro), que recordemos que deben ser 1 para espectros GOE. De ahora en adelante al parámetro f le llamaremos f_{BP} para no confundirlo con la fracción de niveles del espectro f cuyo valor es conocido.

Tras ajustar los datos para todos los espectros y hacer el promedio de los parámetros obtenidos, tenemos que los espectros GOE se ajustan por la distribución de Brody con $w = 0.96 \pm 0.06^6$ obteniendo que $\langle \chi^2 \rangle = 0.4$ con desviación estándar $\sigma = 0.3$ y mediana $M_e = 0.35$. Este valor concuerda con el $w = 0.953$ que obtuvo Brody [24]. Por su parte, el ajuste mediante la distribución de Bohigas-Pato nos da una fracción de niveles $f_{BP} = 0.97 \pm 0.04$ con $\langle \chi^2 \rangle = 0.33$ y $\sigma = 0.09$

En la figura 7 hemos representado los mismos espectros de la figura 5 con su ajuste correspondiente. Vemos que sólo en un espectro los valores de f_{BP} y w calculados difieren de lo esperado, en los otros casos se recupera no sólo el valor dado anteriormente sino también el valor esperado que es la unidad. Esto es una muestra de la importancia de tener varios datos de los que poder hacer un promedio antes de sacar conclusiones.

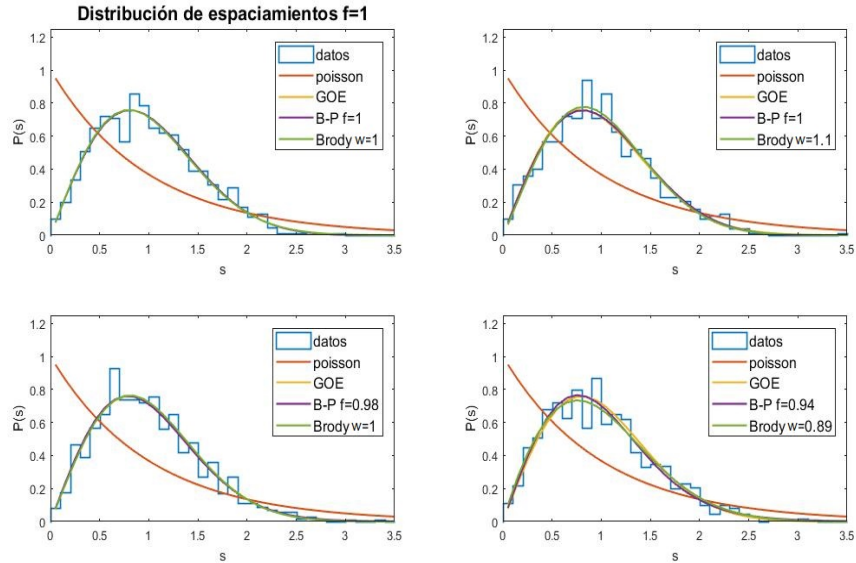


Figura 7: Espectros GOE de la figura 5 ajustados. La función de distribución de Brody (verde) y la de Bohigas-Pato (morado) solapan con la distribución GOE (amarillo)

⁶El error proviene de la desviación estándar de los parámetros correspondientes.

f	$\langle f_{BP} \rangle$	$\langle \chi^2 \rangle$	σ	M_e	$\langle w \rangle$	$\langle \chi^2 \rangle$	σ	M_e
0.98	0.95 ± 0.04	0.36	0.09	0.35	0.94 ± 0.06	0.61	0.48	0.46
0.96	0.93 ± 0.04	0.38	0.10	0.37	0.92 ± 0.06	0.82	0.62	0.63
0.94	0.91 ± 0.04	0.39	0.10	0.38	0.90 ± 0.06	0.97	0.68	0.78
0.92	0.89 ± 0.04	0.41	0.10	0.40	0.88 ± 0.06	1.05	0.65	0.88
0.90	0.87 ± 0.04	0.42	0.10	0.41	0.86 ± 0.06	1.11	0.62	0.92
0.80	0.78 ± 0.04	0.49	0.11	0.48	0.75 ± 0.05	1.10	0.49	1.00
0.70	0.69 ± 0.04	0.57	0.13	0.56	0.65 ± 0.05	1.14	0.40	1.07
0.60	0.61 ± 0.04	0.69	0.16	0.67	0.57 ± 0.05	1.21	0.35	1.17
0.50	0.52 ± 0.04	0.83	0.18	0.81	0.48 ± 0.05	1.17	0.29	1.14
0.40	0.41 ± 0.07	1.04	0.24	1.02	0.39 ± 0.05	1.32	0.30	1.29
0.30	0.30 ± 0.07	1.32	0.29	1.30	0.30 ± 0.05	1.62	0.41	1.58
0.20	0.27 ± 0.12	2.17	0.56	2.11	0.23 ± 0.08	2.34	0.54	2.28
0.10	0.17 ± 0.09	4.31	1.18	1.25	0.11 ± 0.06	4.12	1.23	4.05

Tabla 2: Parámetros de ajuste y estadística de χ^2 en espectros de dimensión 1000

Ahora que hemos comprobado que las matrices generadas se comportan como esperamos, es decir, como espectros que se ajustan a la estadística GOE y por tanto corresponden a sistemas cuánticos caóticos, y que los métodos de interpolación en general nos dan un buen ajuste para espectros completos, vamos a ver qué ocurre cuando faltan niveles. Concretamente vamos a estudiar del 2 % al 8 % de niveles perdidos con un incremento del 2 % (20, 40, 60 y 80 niveles perdidos) y del 10 % al 90 % de niveles perdidos con incremento de 10 % (100, 200, 300,...,900 niveles perdidos).

Como los niveles perdidos deben estar distribuidos aleatoriamente por el espectro el primer paso debe ser generar una secuencia de números aleatorios. Así, los números indicados por dicha secuencia corresponden a los índices de los elementos que eliminaremos del espectro. Para generar esta secuencia hemos utilizado la función `randperm(N)` que genera un vector de números enteros de 1 a N con permutaciones aleatorias donde N será el número de niveles. Con esto conseguimos que cada nivel tenga las mismas posibilidades de salir y que no se repitan. Del vector generado utilizaremos los 20 primeros valores para quitar 20 niveles, los 40 primeros valores para 40 niveles y así sucesivamente. Hemos generado 3 secuencias distintas de 1000 elementos aleatorios lo que nos permite tener más estadística. Una vez quitados los niveles ajustaremos los distintos espectros a la distribución de Brody y a la distribución de Bohigas-Pato y realizaremos la prueba χ^2 para ver si el ajuste es bueno.

En la tabla 2 podemos ver los resultados obtenidos en función de la fracción f de niveles del espectro con respecto al espectro completo. Podemos ver que los dos métodos de ajuste dan buenos resultados (χ^2 en general es pequeño), pudiendo considerar tanto al promedio del parámetro de Brody w como al promedio de f_{BP} buenos indicadores de completitud del espectro.

Si analizamos la tabla por partes podemos observar que, para $f > 0.9$, los dos métodos de ajuste son muy buenos, quizá ligeramente mejor el ajuste de la distribución de

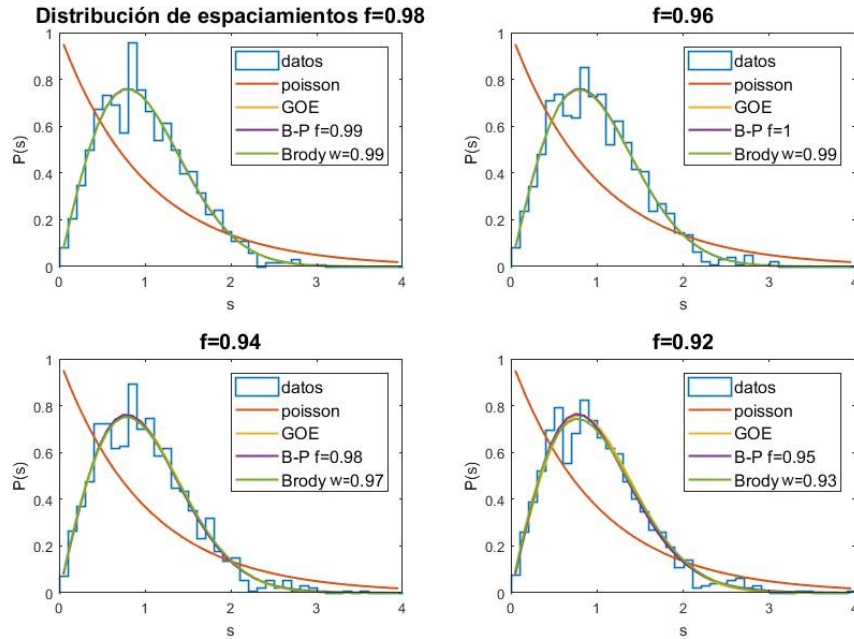


Figura 8: Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 1000 niveles con sus correspondientes ajustes ($f > 0.9$)

Bohigas-Pato si nos fijamos en el valor de la χ^2 , lo cual tiene sentido porque es una función desarrollada teóricamente para el caso específico de los niveles perdidos, pero en cualquier caso los resultados son indistinguibles. Aunque ni el valor de f_{BP} ni el de w coinciden exactamente con la fracción real de niveles que hay en el espectro f . Podemos ver que se ajustan a una recta de pendiente 1 con lo que se puede saber fácilmente el número real. En la figura 8 podemos ver un ejemplo que corresponde al primero de los espectros de la figura 7 donde podemos ver la distribución de espaciamientos a primeros vecinos para 4 valores de f de esta región con sus correspondientes ajustes que como podemos ver no coinciden con el valor de la tabla que recordamos muestra el promedio. Esto muestra que un sólo espectro no es suficiente para saber la cantidad de niveles perdidos ya que ni los valores obtenidos de los parámetros concuerdan con f ni se ajustan a la recta anteriormente mencionada. Y de hecho, sin un ajuste por un método de interpolación ni siquiera se podría notar la falta de niveles.

Si nos fijamos en los resultados pertenecientes a $0.9 > f > 0.2$ podemos ver que el ajuste sigue siendo bueno tanto para el parámetro de Brody w como para f_{BP} aunque aquí sí se pueden comentar algunas pequeñas diferencias. Según aumentan los niveles perdidos hasta $f = 0.5$, la fracción de niveles calculada en el ajuste de la distribución de Bohigas-Pato f_{BP} nos da un valor bastante próximo a la fracción de niveles real y seguimos teniendo $\chi^2 < 1$ con lo que los datos no se desvían demasiado de la función teórica, pero cuando $f < 0.5$ aunque los resultados de f_{BP} siguen siendo consistentes con

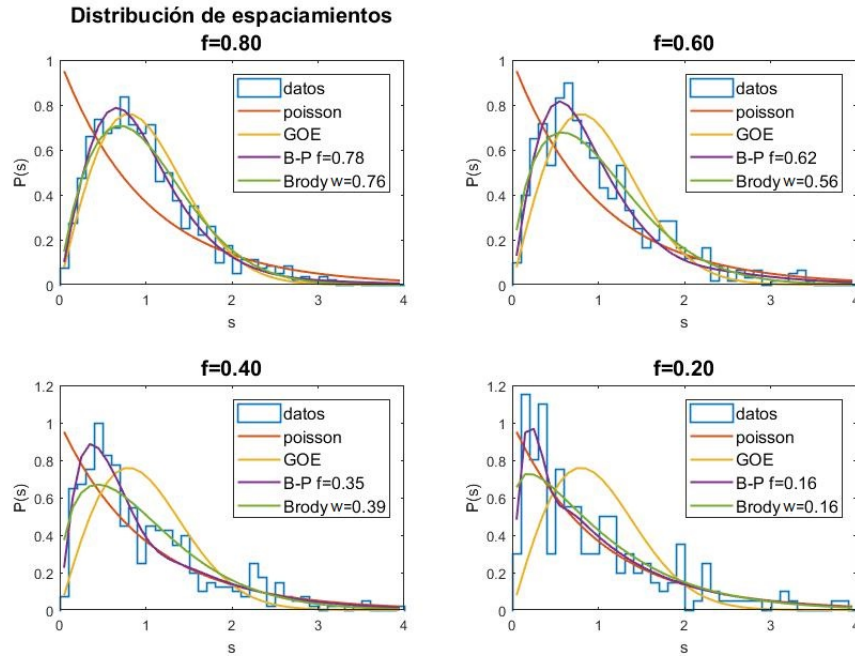


Figura 9: Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 1000 niveles con sus correspondientes ajustes ($f < 0.9$)

la f real la precisión disminuye. Lo contrario ocurre con el parámetro de Brody ya que es en esta región donde w tiene menor error, de hecho para $f < 0.5$ tiene incluso más precisión que f_{BP} aunque la desviación de los datos con la teoría cuantificada por χ^2 continua siendo mayor. En la figura 9 podemos ver la distribución de espaciamientos a primeros vecinos del mismo caso mostrado en la figura anterior para algunas f de este intervalo y se observa que en este rango de valores de f ya no se solapan las funciones de distribución sino que la función de distribución de Bohigas-Pato reproduce el pico de los datos, lo que podría explicar el menor valor de χ^2 mientras que la distribución de Brody reproduce bien la caída de la función por lo que es razonable que dé un buen ajuste para valores de f pequeños donde el gap producido por las correlaciones en valores pequeños de s comienza a perderse por la falta de niveles.

Finalmente, para $f < 0.2$ la desviación es tal que no sería bueno sacar conclusiones ya que, aunque los parámetros de ajuste obtenidos concuerdan con la fracción de niveles real, el error es casi del 50%. En la figura 10 podemos ver la distribución de espaciamientos del caso de las figuras anteriores para $f = 0.1$ y se puede ver que el motivo del aumento de χ^2 para la distribución de Bohigas-Pato es que, al ajustar a un valor $f < 0.1$, sería necesario utilizar más valores de k ya que la función decae a 0 demasiado pronto. Para este valor de f la distribución podría confundirse con la de un sistema regular.

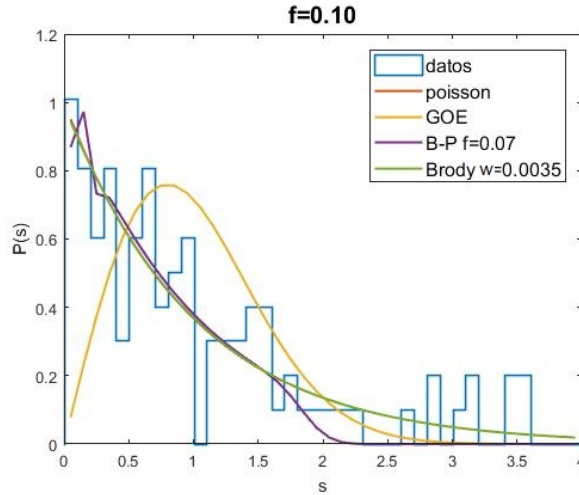


Figura 10: Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 1000 niveles con sus correspondientes ajustes ($f = 0.1$)

■ Espectros de 1 500 000 niveles

Como todos los espectros pertenecen a la misma colectividad, se puede representar en conjunto la distribución de espaciamientos de todos los espectros lo que sería equivalente a tener un espectro de 1 500 000 niveles. En este caso la estadística debería ser considerablemente mejor lo que nos permitirá corroborar las conclusiones sacadas a partir de la estadística de los espectros de 1000 niveles.

En la tabla 3 podemos ver los resultados que hemos obtenido de promediar los ajustes de los 5 casos que hemos generado utilizando distintas secuencias de niveles perdidos. Lo primero que podemos observar es que para el espectro completo $f_{BP} = 1$ y $w = 0.99$ lo que nos indica que para esta cantidad de niveles se puede recuperar el valor esperado de los parámetros para los sistemas caóticos. A medida que aumenta la fracción de niveles perdidos hasta $f = 0.9$ desciende también al mismo ritmo el valor de los parámetros lo que confirma que para $f \geq 0.7$ tanto el parámetro de Brody como la fracción de niveles f_{BP} son buenos indicadores del número de niveles perdidos. También puede verse que para $0.7 > f > 0.2$ el valor de χ^2 correspondiente al ajuste de Brody comienza a disminuir lo que confirma que el ajuste de Brody es más apropiado para valores de f pequeños cuando el gap que se produce en 0 disminuye y la distribución de espaciamientos se encuentra más cerca de la estadística de Poisson que de la distribución GOE. Por último podemos observar que el valor de χ^2 es pequeño para todos los casos excepto para $f < 0.2$ lo que confirma que los resultados para estos valores de f no pueden considerarse concluyentes.

En la figura 11 podemos ver un ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para el caso en el que el espectro tiene la mitad de los niveles perdidos, $f = 0.5$, se puede apreciar que la distribución no tiene variaciones como en casos anteriores sino

f	$\langle f_{BP} \rangle$	$\langle \chi^2 \rangle$	$\langle w \rangle$	$\langle \chi^2 \rangle$
1	1.00 ± 0.00	0.02	0.99 ± 0.00	0.02
0.98	0.98 ± 0.01	0.02	0.97 ± 0.01	0.08
0.96	0.96 ± 0.01	0.02	0.95 ± 0.01	0.27
0.94	0.94 ± 0.01	0.02	0.93 ± 0.02	0.40
0.92	0.92 ± 0.01	0.02	0.91 ± 0.02	0.65
0.9	0.90 ± 0.01	0.03	0.89 ± 0.03	0.67
0.8	0.80 ± 0.01	0.04	0.78 ± 0.04	1.83
0.7	0.70 ± 0.01	0.06	0.68 ± 0.05	1.36
0.6	0.63 ± 0.01	0.10	0.59 ± 0.06	0.93
0.5	0.53 ± 0.02	0.13	0.49 ± 0.06	0.73
0.4	0.43 ± 0.02	0.18	0.40 ± 0.06	0.71
0.3	0.31 ± 0.02	1.73	0.30 ± 0.06	0.66
0.2	0.27 ± 0.02	2.44	0.21 ± 0.06	0.78
0.1	0.20 ± 0.03	4.37	0.12 ± 0.06	2.45

Tabla 3: Parámetros de ajuste y χ^2 en un espectro de dimensión 1 500 000

que tiene una forma bien definida que además se ajusta perfectamente a la distribución de Bohigas-Pato. Se ve también que el ajuste de la distribución de Brody no es tan bueno y sin embargo el parámetro de brody no se encuentra alejado de la fracción de niveles perdidos lo que confirma que es una buena aproximación para cuantificar el caos también en sistemas con niveles perdidos

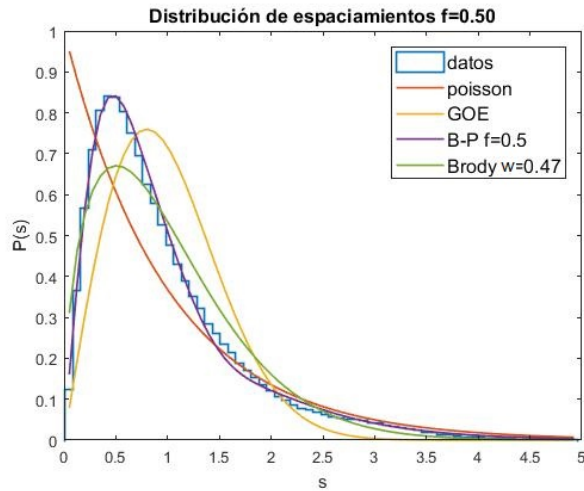


Figura 11: Ejemplo de distribución de espaciamientos a primeros vecinos para un espectro de 1 500 000 niveles con la mitad de niveles perdidos ($f = 0.5$) y sus correspondientes ajustes

f	$\langle f_{BP} \rangle$	$\langle \chi^2 \rangle$	σ	M_e	$\langle w \rangle$	$\langle \chi^2 \rangle$	σ	M_e
0.98	0.94 ± 0.11	1.48	0.78	1.29	0.96 ± 0.20	2.92	8.91	1.37
0.96	0.92 ± 0.11	1.62	0.20	1.42	0.94 ± 0.20	4.41	11.34	1.57
0.94	0.91 ± 0.12	1.62	0.74	1.46	0.92 ± 0.19	3.82	8.24	1.65
0.92	0.88 ± 0.12	1.78	0.79	1.62	0.89 ± 0.19	5.32	10.88	2.01
0.9	0.87 ± 0.12	1.78	0.70	1.64	0.88 ± 0.19	4.58	8.29	1.64
0.8	0.78 ± 0.13	1.99	0.65	1.90	0.77 ± 0.17	4.46	5.44	2.47
0.7	0.66 ± 0.13	2.34	0.71	2.26	0.65 ± 0.15	4.83	3.57	3.68
0.6	0.65 ± 0.15	2.84	0.84	2.74	0.63 ± 0.16	5.66	4.13	4.47
0.5	0.51 ± 0.14	3.20	0.98	3.08	0.48 ± 0.15	4.17	2.16	3.56
0.4	0.37 ± 0.13	3.94	1.15	3.82	0.35 ± 0.12	4.49	1.66	4.18
0.3	0.37 ± 0.20	6.10	1.69	5.89	0.30 ± 0.14	6.26	1.76	6.01
0.2	0.26 ± 0.14	10.14	2.02	9.92	0.15 ± 0.12	10.37	2.09	10.16
0.1	0.21 ± 0.13	12.94	5.31	10.75	0.04 ± 0.22	12.27	4.67	10.41

Tabla 4: Parámetros de ajuste y estadística de χ^2 en espectros de dimensión 100

■ Espectros de 100 niveles

Como ya hemos sacado una serie de conclusiones de los espectros de 1000 niveles y las hemos podido confirmar con el supuesto de que la distribución de espaciamentos de los 1500 espectros de 1000 niveles es análogo a un solo espectro de 1 500 000 niveles, el siguiente paso lógico es estudiar espectros con pocos niveles, en este caso 100. Las conclusiones que obtengamos son especialmente relevantes porque los espectros experimentales suelen estar en este rango de niveles.

Vamos a estudiar espectros de 100 niveles siguiendo el procedimiento análogo al realizado para 1000 niveles. En primer lugar generamos 1500 matrices pertenecientes a la colectividad GOE esta vez con dimensión $N = 300$, luego generamos los espectros a partir de los 100 autovalores centrales. De nuevo, hemos creado 3 secuencias de números aleatorios que determinarán los niveles perdidos y por último una vez quitados los niveles hemos realizado el ajuste mediante las distribuciones de Brody y de Bohigas-Pato.

En la tabla 4 podemos ver los parámetros obtenidos y los resultados de la prueba χ^2 . Cabe destacar que ha sido necesario aumentar la anchura de los bins para no tener bins con altura próxima a 0 en lugares donde no debería. Esto provoca menos cantidad de datos y mayor error, primera consecuencia de tener menos niveles. Además podemos ver que los promedios de χ^2 tienen valores más grandes lo que implica mayor desviación entre los datos y la distribución teórica. Si nos fijamos en el promedio de χ^2 del ajuste de Brody podríamos pensar que el ajuste no es bueno, en este caso nos debemos fijar en el valor de la mediana que da resultado más acordes con los de la distribución de Bohigas-Pato y por tanto sí es válido. La diferencia entre la media y la mediana es un indicador de valores atípicos consecuencia de tener pocos niveles.

A pesar de que los ajustes son mucho peores ya que los errores son muy grandes las conclusiones que se pueden sacar son las mismas que en los casos anteriores, es decir, que

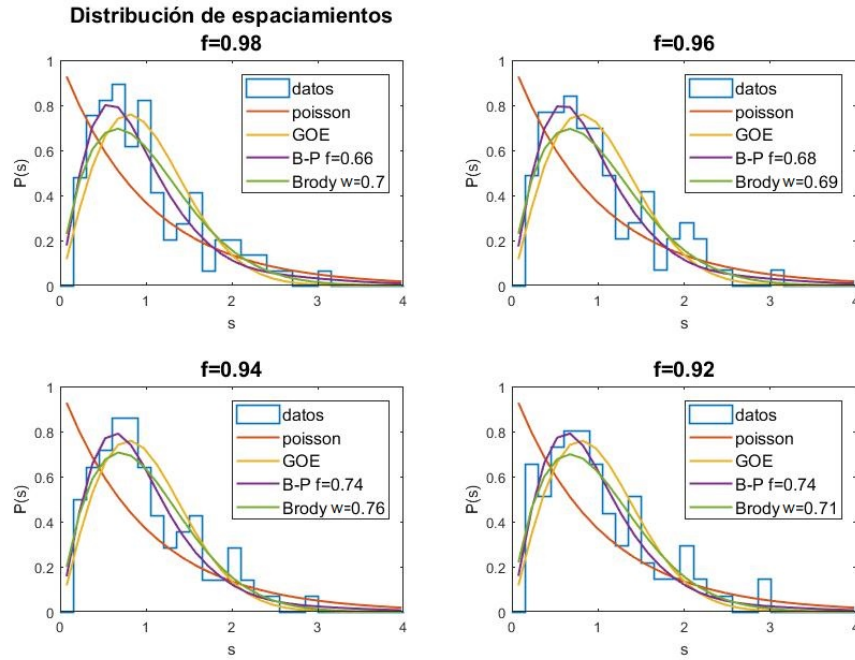


Figura 12: Ejemplo de distribución de espaciamentos a primeros vecinos para un espectro de 100 niveles con sus correspondientes ajustes ($f > 0.9$)

el parámetro de Brody y el parámetro f_{BP} de la función de Bohigas-Pato son buenos indicadores de el tanto por ciento de niveles perdidos del sistema. Eso sí, en este caso será necesario tener bastantes espectros para obtener una buena estadística, y la fracción mínima de niveles en el espectro aumenta a $f > 0.3$.

Podemos ver un ejemplo de la distribución de espaciamentos a primeros vecinos para espectros de 100 niveles en las figuras 12 y 13. De estas figuras lo único que podemos hacer es confirmar la necesidad de una buena estadística para obtener valores razonables de los parámetros de ajuste.

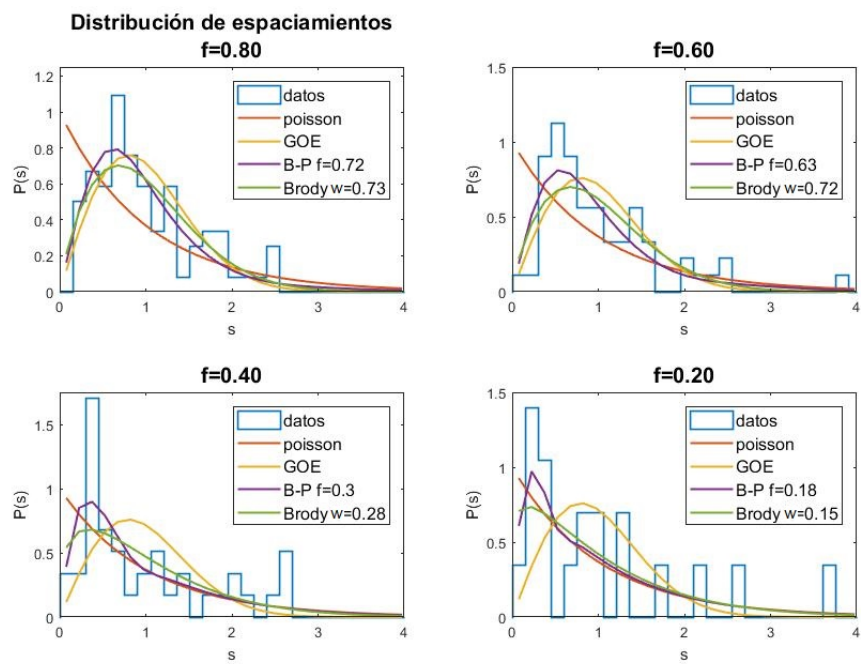


Figura 13: Ejemplo de distribución de espacimientos a primeros vecinos para un espectro de 100 niveles con sus correspondientes ajustes ($f < 0.9$)

5. Conclusiones

En este trabajo hemos visto que la única manera que hay en la actualidad de abordar el caos cuántico es mediante análisis estadísticos de observables propios de los sistemas cuánticos como es el espectro de energías. Está demostrado que los sistemas caóticos cuánticos siguen la estadística de la teoría de matrices aleatorias, diferenciándose de la estadística de Poisson que siguen los sistemas regulares, pero el estudio de sistemas con estadística a medio camino entre estas dos es un problema al que todavía le queda mucho por avanzar. El modo habitual de analizar las estadísticas intermedias es mediante la distribución de Brody, un método que interpola entre las estadísticas de sistemas caóticos y de sistemas integrables. El problema es que esta distribución está probada para sistemas intermedios pero ningún trabajo confirma que ajuste bien sistemas caóticos con niveles perdidos, sistemas que también dan lugar a estadísticas intermedias.

Sí existe un método para caracterizar sistemas con niveles perdidos, la distribución de Bohigas-Pato, por lo que con el estudio de sistemas caóticos con niveles perdidos mediante estos dos métodos mencionados, la distribución de Brody y la de Bohigas-Pato, podremos o bien confirmar que el parámetro de Brody también se puede utilizar en este tipo de sistemas y por tanto debemos tener cuidado a la hora de determinar si un sistema es caótico o no, lo que no se tiene en cuenta en algunos trabajos, o bien habremos encontrado una forma de distinguir sistemas caóticos con espectros incompletos de sistemas intermedios.

Por todo esto, en este trabajo se han estudiado sistemas cuánticos con espectros de 100, 1000 y 1 500 000 niveles y la principal conclusión que podemos extraer es que tanto la distribución de Brody como la de Bohigas-Pato son válidas para reproducir la distribución de espaciamientos a primeros vecinos de espectros con niveles perdidos. Se han obtenido resultados muy parecidos para el parámetro de Brody, w , y para la fracción de niveles del espectro, f , que se obtiene con el ajuste de la distribución de Bohigas-Pato y estos a su vez concuerdan con la fracción real de niveles que tiene el espectro por tanto se puede afirmar que tanto w como f son indicadores de la cantidad de niveles perdidos siempre y cuando tengamos una cantidad suficiente de espectros para tener una buena estadística, ya que hemos visto que es fundamental especialmente para el número de niveles que suelen tener los espectros experimentales.

Debido a esta conclusión, si tenemos un espectro de un sistema puramente cuántico con una estadística intermedia que se puede ajustar bien a la distribución de Brody o bien a la de Bohigas-Pato, se puede llegar a afirmar que el sistema es un sistema cuántico caótico con un espectro incompleto, donde el parámetro de Brody o el parámetro f puede indicar, teniendo en cuenta el error, la fracción del espectro observada. La parte negativa es que si la naturaleza de nuestro espectro es desconocida no podremos distinguir si se trata de un sistema intermedio o de un sistema caótico con niveles perdidos.

Un ejemplo de trabajo en el que no se han tenido en cuenta todos los posibles factores es en el estudio de Frisch et al. sobre resonancias moleculares en isótopos de erbio [28]. En este trabajo se catalogan dichas resonancias como caóticas basándose en una distribución de espaciamientos a primeros vecinos intermedia. Mur-Petit y Molina [29], realizaron un

estudio más riguroso sobre los resultados de dicho trabajo y concluyeron que los datos eran consistentes con niveles perdidos y recomendaron mejorar la precisión de sus instrumentos de medida. Con esto lo que queremos señalar es que todavía queda mucho por avanzar y no basta con sacar conclusiones precipitadas. Nuestro trabajo puede ser de ayuda para aclarar polémicas como esta.

Si nos detenemos a analizar los resultados de cada distribución, cabría también destacar que la distribución de Brody reproduce bien todo el espectro cuando se observa más del 90 % de niveles. Mientras que para menos del 90 % de niveles observados falla en el ajuste del “pico” de la distribución aunque sí reproduce bien la “caída” hasta el punto de que, cuando el porcentaje de niveles observados es menor del 50 % y el gap debido a la repulsión se vuelve menos notable, el parámetro de Brody w tiene más precisión para indicar la fracción de niveles observados que el parámetro f .

Por su parte, la distribución de Bohigas-Pato reproduce muy bien espectros incompletos hasta un 50 %, luego, las desviaciones de los datos con respecto de la función de distribución teórica comienzan a aumentar. En este trabajo se ha utilizado $k \leq 25$ y se nota en algunos espectros. Recordemos que la distribución de Bohigas-Pato se define por un sumatorio en k sobre las funciones $P(k, x)$ moduladas, encontramos que para valores de f grandes basta con unos pocos valores de k para tener un buen ajuste pero cuando $f < 0.2$ tomar valores altos de k se hace necesario para reproducir correctamente la “caída” del espectro. Este es un resultado coherente porque las funciones $P(k, x)$ representan la probabilidad de que hubiera k niveles entre un par de niveles y un menor f implica más niveles perdidos, pero hasta ahora no había sido destacado en ningún artículo previo y es importante tenerlo en cuenta para no cometer el error de utilizar menos sumandos de los necesarios.

En resumen, este trabajo es un buen punto de partida para un problema complejo que se encuentra abierto, poder determinar con seguridad si un sistema con estadística intermedia es realmente debido a una dinámica intermedia entre regularidad y caos o se debe a otras causas como la incompletitud del espectro. Aquí hemos estudiado dos métodos de ajuste para el estadístico $P(s)$ pero lo mismo se podría hacer con los otros estadísticos vistos en el punto 3.4 del trabajo y de hecho ya hay algunos trabajos sobre ellos. Posiblemente la δ_n sea el estadístico que más puertas nos abra en este sentido porque aún está poco utilizado pero los resultados que se han conseguido con él son bastante buenos. Queda para otros trabajos estudiar el efecto de las simetrías mezcladas que también dan lugar a estadísticas intermedias y podrían afectar de forma relevante y estudiar como afecta el tamaño de los bins.

Referencias

- [1] H. J. Stöckmann, *Quantum Chaos: An Introduction*, Cambridge University Press (1999).
- [2] E. Lorenz, *The essence of Chaos*, UCL Press (1995).
- [3] O. Bohigas, M. J. Giannoni, and C. Schmit, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1 (1984).
- [4] H. Poincaré, *Les Nouvelles Méthodes de la Mécanique Céleste*, Gauthier-Villards (1892).
- [5] E. Lorenz, *Deterministic nonperiodic flow*, Journal of the Atmospheric Sciences, **20**, 130-141, (1963).
- [6] H. G. Schuster, *Deterministic Chaos*, VCH, Physik Verlag, Weinheim (1988).
- [7] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Methods*. Kluwer Academic (1995)
- [8] M. V. berry, *Proc. R. Soc. Lond. A* **413**, 183-198 (1987)
- [9] E. J. Heller, *Phys. Rev. Lett.*, **53**, 1515 (1984)
- [10] M. Gutzwiller, *Chaos in classical and quantum mechanics*, Springer Verlag (1990)
- [11] R. A. Molina, *Caos cuántico en sistemas hamiltonianos de muchos cuerpos*, Tesis Doctoral (2001).
- [12] I. C. Percival, *J. Phys. B* **6**, L229-232 (1973)
- [13] M. V. Berry and M. Tabor, *Proc. R. Lond. A* **356**, 375 (1977)
- [14] S. Müller, S. Heusler, P. Braun, F. Haake and A. Altland, *Phys. Rev. Lett.* **93** 014103 (2004)
- [15] T. Guhr, A. Müller-Groeling and H.A. Weidenmüller, *Physics Report* **299**, 189-425 (1998)
- [16] H. A. Weidenmüller and G. E. Mitchell, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 539-588 (2009)
- [17] M. L. Mehta, *Random matrices*, Academic Press, London, (1991)
- [18] J. M. G. Gómez, R. A. Molina, A. Relaño and J. Retamosa, *Phys. Rev. E* **66**, 036209 (2002)
- [19] A. Relaño, J. M. Gómez, R. A. Molina and J. Retamosa, *Phys. Rev. Lett.* **89** 244102 (2002)

- [20] A. Relaño, *Caracterización del caos cuántico mediante series temporales*, Tesis doctoral (2004)
- [21] B. B. Mandelbrot, *Multifractals and 1/f noise*, Springer, New York (1999)
- [22] R. A. Molina, J. Retamosa, L. Muñoz, A. Relaño and E. Faleiro, *Phys. Lett. B* **644**, 25-32 (2007)
- [23] T. A. Brody, *Lett. Nuovo Cimento* **7**, 482 (1973)
- [24] T. A. Brody, J. Flores, J. B. French, P. A. Mello, A. Pandey and S. S. M. Wong, *Rev. Mod. Phys.* **53**, 385, (1981)
- [25] F. J. Dyson, *Lectures at the Workshop on Random Matrix Theory*, Berkeley, CA (2002) unpublished
- [26] O. Bohigas and M. P. Pato, *Phys. Lett. B* **595**, 171-176 (2004)
- [27] T. N. Nogueira, J. C. Sartorelli, M. P. Pato and C. Ellegaard, *Phys. Rev. E* **78**, 055201 (2008)
- [28] A. Frisch, M. Mark, K. Aikawa, F. Ferlino, J. L. Bohn, C. Makrides, A. Petrov and S. Kotochigova, *Nature* **507**, 475–479 (2014)
- [29] J. Mur-Petit and R. A. Molina, *Phys. Rev. E* **92**, 042906 (2015)