

CAOS CUÁNTICO
EN SISTEMAS ESQUEMÁTICOS
DE PARTÍCULAS IDÉNTICAS



Memoria presentada por
Laura Muñoz Muñoz
para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas

Director:
Joaquín Retamosa Granado

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS
Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear
Marzo 2008

A Eugenio, mi primer maestro

El mundo se divide en dos categorías:
los que llevan el revólver cargado y los que cavan.

Rubio
El bueno, el feo y el malo (Sergio Leone, 1966)

Índice general

Índice general	VII
Índice de figuras	XI
Índice de tablas	XIX
1. Introducción	1
I Sistemas sin interacción	5
2. Introducción	7
3. Caos cuántico	9
3.1. Caos en mecánica clásica	10
3.1.1. Integrabilidad	10
3.1.2. Características de la dinámica caótica	11
3.2. Caos en mecánica cuántica	12
3.2.1. Límite semiclásico	12
3.2.2. Parte fluctuante de la densidad de estados	14
3.3. Teoría de matrices aleatorias	16
3.3.1. Análisis espectrales	17
3.4. El reescalado	24
3.5. El ruido $1/f$	28
4. Sistemas de N partículas sin interacción	33
4.1. Espectros de partícula independiente	36
4.1.1. Espectro GOE	36
4.1.2. Espectro GUE	37
4.1.3. Espectro Poisson	38
4.2. El espectro del sistema de N partículas	38
4.3. El reescalado	40
4.3.1. Cálculo de la densidad de estados del sistema	41

4.3.2. Parte suave de la densidad de estados del sistema . . .	43
4.4. Propiedades de las fluctuaciones del espectro del sistema . . .	49
4.4.1. Evolución con el número de partículas	49
4.4.2. Evolución con la energía	69
4.4.3. Resultados para bosones	73
4.4.4. Cálculo analítico	76
5. Conclusiones de la Parte I	79
II Sistemas en interacción	83
6. Introducción	85
7. Colectividades embebidas	87
7.1. Introducción histórica	87
7.2. Definiciones y objetivos	93
8. Matrices tridiagonales	99
8.1. Método de Lanczos	99
8.2. Resultados numéricos	101
8.3. Resultados analíticos	108
9. Resultados	115
9.1. Definiciones	115
9.2. Rango de la interacción	123
9.2.1. Parte suave	123
9.2.2. Fluctuaciones	130
9.2.3. Correlaciones	137
9.2.4. El modelo	140
9.3. Introducción gradual de la interacción a dos cuerpos	146
9.3.1. Parte suave	147
9.3.2. Fluctuaciones	150
9.3.3. Correlaciones	160
9.3.4. El modelo	163
10. Conclusiones de la Parte II	173
A. Teoría de matrices aleatorias	177
A.1. Matrices aleatorias gaussianas	177
A.2. Distribuciones de autovalores	178
A.3. Densidad media de estados	179
A.4. Funciones de correlación a k puntos	179

B. Densidad de estados del sistema de N partículas	183
B.1. Cálculo de la densidad de estados	183
B.1.1. Caso $N = 2$	183
B.1.2. Caso $N = 3$	184
B.1.3. Caso $N = 4$	185
B.1.4. Caso general	187
B.2. Parte suave de la densidad de estados	190
B.2.1. Caso $N = 2$	190
B.2.2. Caso $N = 3$	193
B.2.3. Caso general	197
C. Cálculo analítico de la función $Y_2^{(2)}(E_1, E_2)$	201

Índice de figuras

3.1. Distribuciones de espaciamientos a primeros vecinos teóricas para espectros tipo GOE, GUE, GSE y Poisson.	21
3.2. Densidad acumulada de un espectro de tipo Poisson reescalado (azul), junto con una recta de pendiente 1 (roja): $\mu(\varepsilon) = \varepsilon$. . .	23
3.3. Procedimiento de reescalado. La densidad acumulada, $m(E)$, se representa en azul y la parte suave de ésta, $\overline{m}(E)$, en rojo. A cada nivel E_i le corresponde un nivel reescalado $\varepsilon_i = \overline{m}(E)$	27
4.1. Configuraciones posibles de 2 partículas en un espectro de partícula independiente (izquierda) y espectro del sistema de 2 partículas (derecha).	40
4.2. Densidad de estados de un sistema de 3 fermiones comparada con la obtenida en espacios de valencia finitos de 70, 110, 150 y 200 niveles.	41
4.3. En el panel de la izquierda, parte suave de la densidad de estados del sistema de 2 partículas: primera aproximación utilizando sólo $\overline{\rho}(E)$ y curvas exactas para GOE, GUE y Poisson. En el de la derecha una ampliación de la región de energía más baja.	46
4.4. Ajustes por polinomios de la densidad de estados, $g^{(3)}(E)$, y la densidad acumulada, $m^{(3)}(E)$, del espectro GOE-3.	52
4.5. Mínima distancia $\chi(k, \alpha_0)$ entre la densidad acumulada y la aproximación (4.58), como función de k , el grado del polinomio, y N . El panel superior muestra $\chi(k, \alpha_0)$ frente a $M - (N+1)$	53
4.6. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos del espectro de partícula independiente tipo GOE junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$	54

4.7. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de los espectros GOE-2 (a) y GOE-3 (b) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$ 55

4.8. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos del espectro de partícula independiente tipo GUE junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GUE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$ 56

4.9. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de los espectros GUE-2 (a) y GUE-3 (b) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$ 57

4.10. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos del espectro de partícula independiente tipo Poisson junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$ 58

4.11. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de los espectros Poisson-2 (a) y Poisson-3 (b) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$ 59

4.12. $\langle \Delta_3(L) \rangle$ del espectro de partícula independiente tipo GOE, comparada con los límites GOE y Poisson. 60

4.13. $\langle \Delta_3(L) \rangle$ de los espectros GOE-2 (a) y GOE-3 (b), comparada con los límites GOE y Poisson. 61

4.14. $\langle \Delta_3(L) \rangle$ del espectro de partícula independiente tipo GUE, comparada con los límites GUE y Poisson. 62

4.15. $\langle \Delta_3(L) \rangle$ de los espectros GUE-2 (a) y GUE-3 (b), comparada con los límites GUE y Poisson. 63

4.16. $\langle \Delta_3(L) \rangle$ del espectro de partícula independiente tipo Poisson, comparada con los límites GOE y Poisson. 64

4.17. $\langle \Delta_3(L) \rangle$ de los espectros Poisson-2 (a) y Poisson-3 (b), comparada con los límites GOE y Poisson. 65

4.18. Representación del espectro de potencias de los espectros GOE- N y del espectro de partícula independiente tipo GOE junto con las curvas teóricas para GOE (verde) y Poisson (rojo). 66

4.19. Representación del espectro de potencias de los espectros GUE- N y del espectro de partícula independiente tipo GUE junto con las curvas teóricas para GUE (verde) y Poisson (rojo). 67

4.20. Representación del espectro de potencias de los espectros Poisson- N y del espectro de partícula independiente tipo Poisson junto con la curva teórica para Poisson (rojo). 68

4.21. Evolución de la distribución $P(s)$ con la energía límite E_{max} para un sistema de dos partículas. La distribución se compara con la ley teórica de Wigner (línea discontinua) y la de Poisson (línea de puntos) para cuatro valores diferentes, $E_{max} = 4$ (panel superior izquierdo), 10 (panel superior derecho), 40 (panel inferior izquierdo) y 160 (panel inferior derecho). 70

4.22. Comportamiento del espectro de potencias $\langle P_k^\delta \rangle$ para $N = 2, 3$ y 4 fermiones a diferentes energías, comparado con la predicción teórica para sistemas integrables. En cada panel tanto los valores de $\langle P_k^\delta \rangle$ como la curva teórica han sido desplazados convenientemente para evitar su solapamiento. 72

4.23. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos del sistema de 2 bosones con espectro de partícula independiente tipo GOE, comparada con la predicción teórica para Poisson (línea discontinua) y para GOE (línea de puntos). 73

4.24. Espectro de potencias de la δ_n del sistema de dos bosones con espectro de partícula independiente tipo GOE (círculos), comparado con la ley teórica de Poisson (línea continua) y la de GOE (línea discontinua). 74

4.25. Evolución de la distribución $P(s)$ con la energía límite E_{max} para un sistema de dos bosones. La distribución se compara con la ley teórica de Wigner (línea discontinua) y la de Poisson (línea de puntos) para cuatro valores diferentes, $E_{max} = 4$ (panel superior izquierdo), 10 (panel superior derecho), 40 (panel inferior izquierdo) y 160 (panel inferior derecho). 75

4.26. Comportamiento del espectro de potencias $\langle P_k^\delta \rangle$ para $N = 2$ fermiones a diferentes energías, comparado con la predicción teórica para sistemas integrables. Tanto los valores de $\langle P_k^\delta \rangle$ como la curva teórica han sido desplazados convenientemente para evitar su solapamiento. 76

8.1. Elementos de matriz de la forma tridiagonal de una matriz GOE de dimensión 924 (azul) y parte suave de los mismos (rojo). La curva superior representa los elementos no diagonales, β_i , y la inferior, los elementos diagonales, α_i 102

- 8.2. Parámetro de repulsión ν (llamado β en (MOLINA *et al.*, 2005)) frente al tamaño de las fluctuaciones F , según la expresión (8.10), para matrices iniciales tipo GOE y modelo de capas nuclear, junto con la curva (8.12). 104
- 8.3. Estadístico Δ_3 para colectividades construidas según (8.10) con valores de F que se corresponden con las colectividades clásicas. El acuerdo con la predicción teórica de las mismas es excelente. Aparece además el caso $F = 0$ (espectro completamente rígido, sin fluctuaciones) cuya predicción teórica es una constante de valor $1/12$, con la que también está en buen acuerdo la colectividad construida. 105
- 9.1. Elementos de matriz no diagonales correspondientes a un núcleo de ^{48}Ca ($J = 4$) (azul) junto con ajustes a una binomial inversa (rojo) y a la ecuación (9.7) (verde). En el panel superior izquierdo una ampliación donde pueden distinguirse los ajustes. 117
- 9.2. Evolución con el índice i de la función $\beta^S(i)$ (ecuación (9.7)) para $a = 1$ y distintos valores del parámetro b 118
- 9.3. A la izquierda densidad de estados media y a la derecha matriz media (azul) junto con el ajuste de los elementos no diagonales a la función (9.7) (rojo) de las colectividades EGOE(k), para $k = 2 - 6$ 124
- 9.4. Elementos no diagonales medios (círculos azules) junto con el ajuste (línea roja) a la función (9.7) de la colectividad EGOE(2). 125
- 9.5. Ajustes lineales de los parámetros a_d y b_d correspondientes a la inversa de las densidades frente a los parámetros a_t y b_t correspondientes a las matrices tridiagonales. 127
- 9.6. Elementos no diagonales de una matriz tridiagonal con densidad de autovalores gaussiana (puntos) junto con la correspondiente densidad inversa dividida por un factor 2 (línea roja). . 129
- 9.7. Elementos no diagonales de la colectividad EGOE(6) (azul) junto con ajustes a la fórmula (9.7) (rojo) y a la inversa del semicírculo (verde). 129
- 9.8. Matriz media en azul con su anchura dada por el tamaño de las fluctuaciones en sus elementos en rojo (izquierda). Tamaño de las fluctuaciones dado por las expresiones (9.34) en azul y (9.35) en rojo (derecha). 131
- 9.9. Cociente del tamaño de las fluctuaciones de los elementos diagonales y los elementos no diagonales, $\sigma_\alpha(i)/\sigma_\beta(i)$. Cada curva está desplazada 0.5 unidades respecto de la anterior para que puedan distinguirse. De abajo arriba: $k = 2, 3, 4, 5, 6$ 133

9.10. En el panel superior, elementos diagonales de una matriz individual perteneciente a la colectividad EGOE(2) en azul, junto con los elementos medios y anchura media ($\overline{\alpha}_i \pm \sigma_\alpha(i)$) en rojo. En el panel inferior, los elementos de la matriz individual se han desplazado para centrarse en los elementos medios. 134

9.11. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de la colectividad EGOE(2) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$ 136

9.12. Representación del espectro de potencias correspondiente a la colectividad EGOE(2) junto con las curvas teóricas para GOE (verde) y Poisson (rojo). 136

9.13. Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^β correspondiente a la colectividad EGOE(6) representados por filas, eliminando los elementos diagonales $C_{ii}^\beta = 1$ 138

9.14. Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^α correspondiente a la colectividad EGOE(2) en una representación tridimensional: los índices de fila y columna corresponden a los ejes x e y y el valor del elemento se representa en el eje vertical. Aparecen remarcadas en rojo las correlaciones a primeros vecinos, en verde las correlaciones a segundos vecinos y en amarillo las correlaciones a terceros vecinos. 139

9.15. Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^α correspondiente a la colectividad EGOE(3) en una representación tridimensional (ver pie de la figura 9.14). 140

9.16. Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^α correspondiente a la colectividad EGOE(6) en una representación tridimensional (ver pie de la figura 9.14). 141

9.17. Densidad media de las colectividades $\overline{EGOE}(k)$, para $k = 2-6$ (de arriba abajo), y su anchura, $\overline{g(E)} \pm \sigma(E)$, en la columna izquierda. En la columna derecha, densidad media correspondiente a las colectividades generadas sin correlaciones. 143

9.18. Densidad media de la colectividad EGOE(2) y su anchura, $\overline{g(E)} \pm \sigma(E)$, a la izquierda. A la derecha, la densidad y anchura de la correspondiente colectividad generada sin correlaciones y no ergódica. 145

9.19. Matriz promedio para la colectividad EGOE(1+2) dada por el hamiltoniano (9.51) para distintos valores del parámetro λ (izquierda) y las correspondientes densidades de estados (derecha). 147

9.20. Ajustes lineales de los parámetros a_d y b_d correspondientes a la inversa de las densidades frente a los parámetros a_t y b_t correspondientes a las matrices tridiagonales. 149

9.21. Tamaño de las fluctuaciones de los elementos de matriz diagonales, σ_α , y no diagonales, σ_β , para distintos valores de λ 151

9.22. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de la colectividad EGOE(1+2) para varios valores de λ (de arriba abajo: $\lambda = 1, 0.06, 0.02$ y 0) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$ 153

9.23. Espectro de potencias del estadístico δ_n para la colectividad EGOE(1+2) (puntos), junto con las predicciones teóricas para Poisson (rojo) y GOE (verde). 154

9.24. Cociente del tamaño de las fluctuaciones de los elementos diagonales y los elementos no diagonales, $\sigma_\alpha(i)/\sigma_\beta(i)$. Cada curva está desplazada 0.5 unidades respecto de la anterior para que puedan distinguirse. De abajo arriba: $\lambda = 1, 0.7, 0.5, \dots, 0.01, 0$. 157

9.25. Ajuste del tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz diagonales, σ_α , y no diagonales, σ_β a la fórmula (9.54). 158

9.26. Parámetros del ajuste del tamaño de las fluctuaciones a la fórmula (9.54) como función de λ para elementos diagonales (arriba) y elementos no diagonales (abajo). 159

9.27. Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^α correspondiente a la colectividad EGOE(1+2) con $\lambda = 0.5$ en una representación tridimensional: los índices de fila y columna corresponden a los ejes x e y y el valor del elemento se representa en el eje vertical. Aparecen remarcadas en rojo las correlaciones a primeros vecinos, en verde las correlaciones a segundos vecinos y en amarillo las correlaciones a terceros vecinos. 160

9.28. Elementos de las matrices de correlación correspondientes a correlaciones a primeros vecinos. Arriba, correlaciones entre elementos diagonales y abajo, correlaciones entre elementos no diagonales, para 4 valores distintos de λ 162

9.29. Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de las colectividades EGOE(1+2) construidas a partir del modelo de variables aleatorias independientes para varios valores de λ (de arriba abajo: $\lambda = 1, 0.06, 0.02$ y 0), junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$ 165

9.30. Espectro de potencias del estadístico δ_n para las colectividades EGOE(1+2) construidas a partir del modelo de variables aleatorias independientes (puntos), junto con las predicciones teóricas para Poisson (rojo) y GOE (verde). 166

9.31. Elementos de las matrices de correlación correspondientes a correlaciones a primeros vecinos entre elementos diagonales para 4 valores distintos de λ 169

9.32. Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^α correspondiente a la colectividad EGOE(1+2) con $\lambda = 0.5$ construida a partir del modelo de variables aleatorias correlacionadas en una representación tridimensional: los índices de fila y columna corresponden a los ejes x e y y el valor del elemento se representa en el eje vertical. Aparecen remarcadas en rojo las correlaciones a primeros vecinos, en verde las correlaciones a segundos vecinos y en amarillo las correlaciones a terceros vecinos. 170

9.33. Espectro de potencias del estadístico δ_n para las colectividades EGOE(1+2) construidas a partir del modelo de variables aleatorias correlacionadas (puntos), junto con las predicciones teóricas para Poisson (rojo) y GOE (verde). 171

A.1. Densidad media de estados obtenida a partir de 100 matrices aleatorias tipo GOE de dimensión 1600 (azul) y curva teórica (rojo). 180

Índice de tablas

4.1. Número de partículas, N , número de niveles del espectro de partícula independiente, m , y dimensión del espectro del sistema, M , de los 15 casos estudiados.	50
4.2. Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de los espectros de los sistemas GOE- N	55
4.3. Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de los espectros de los sistemas GUE- N	56
4.4. Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de los espectros de los sistemas Poisson- N	58
9.1. Parámetros del ajuste de los elementos de matriz no diagonales medios a la función (9.7).	126
9.2. Parámetros del ajuste de la densidad inversa media a la función (9.7).	126
9.3. Valores medios del tamaño de las fluctuaciones calculados mediante las expresiones (9.44) y (9.45) y su cociente.	132
9.4. Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos a primeros vecinos, ν , y exponente α del ajuste lineal del espectro de potencias de la δ_n de las colectividades EGOE(k).	135
9.5. Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos y exponente α del espectro de potencias de la δ_n de las colectividades EGOE(k) generadas con el modelo sin correlaciones.	142
9.6. Parámetros del ajuste de la matriz media y de la densidad inversa media a la función (9.7).	148
9.7. Momentos medios de orden 2 y 4 calculados como promedios sobre la colectividad (superíndice p) y a partir de las expresiones (9.26) y (9.33) (superíndice f) y errores relativos en tanto por ciento.	150
9.8. Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de las colectividades EGOE(1+2) a lo largo de la transición con λ en el hamiltoniano (9.51).	152

- 9.9. Valores promedio del tamaño de las fluctuaciones en elementos diagonales, $\overline{\sigma}_\alpha$, y no diagonales, $\overline{\sigma}_\alpha$. En la tercera columna, el cociente de ambos y en la cuarta, el mismo cociente eliminando los 10 primeros y los 10 últimos elementos en el promedio. . . . 156
- 9.10. Parámetros del ajuste del tamaño de las fluctuaciones a la fórmula (9.54) para elementos diagonales (superíndice α) y elementos no diagonales (superíndice β). 158
- 9.11. Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de las colectividades EGOE(1+2) a lo largo de la transición con λ en el hamiltoniano (9.51). La primera columna corresponde a las colectividades originales y la segunda a las construidas con el modelo de variables independientes. 163

Capítulo 1

Introducción

El objeto de este trabajo es el estudio de los sistemas de partículas idénticas en el contexto del *caos cuántico* a través de modelos esquemáticos sencillos.

El término *caos* surgió en mecánica clásica en la segunda mitad del s. XX para designar un nuevo tipo de dinámica compleja que presenta una serie de características concretas, tales como la separación exponencial de dos trayectorias inicialmente muy próximas o la pérdida de predecibilidad a largo plazo (SCHUSTER, 1988). En contraposición al término *caótico* tenemos el término *integrable* para designar una dinámica más regular de características completamente distintas.

Con el nacimiento de la mecánica cuántica surgió la pregunta de si existiría algún tipo de dinámica análoga a la que se define como *caótica* en mecánica clásica. Después de todo la mecánica clásica debe emerger como límite de la mecánica cuántica en la región semiclásica, es decir, a escalas grandes comparadas con la longitud de onda de De Broglie (COHEN-TANNOUJI *et al.*, 1977). Así el término *caos cuántico* nos sugiere en principio el estudio de un cierto tipo de dinámica con unas determinadas características definidas en el contexto de la mecánica cuántica. Sin embargo, existen una serie de dificultades que no permiten definir el *caos* mediante propiedades intrínsecamente cuánticas. Por ejemplo, en mecánica cuántica se pierde por completo el concepto de trayectoria.

Por otro lado, sí cabe el estudio cuántico comparativo de sistemas que clásicamente son caóticos o integrables. Este estudio se llevó a cabo llegando a la conclusión de que los espectros cuánticos de energías de los sistemas clásicamente caóticos y los de los sistemas clásicamente integrables podían distinguirse en base al tipo de fluctuaciones espectrales (BERRY and TABOR, 1977; BOHIGAS *et al.*, 1984). Es decir, las fluctuaciones de los espectros de sistemas clásicamente integrables siguen la estadística de Poisson, según mostró el trabajo pionero en el campo de Berry y Tabor (BERRY and TABOR,

1977), mientras que las fluctuaciones de los espectros de sistemas clásicamente caóticos coinciden con las predichas por la teoría de matrices aleatorias, según conjeturaron Bohigas y sus colaboradores (BOHIGAS *et al.*, 1984). Por eso, el término *caos cuántico* nació para designar el estudio del comportamiento mecano-cuántico de los sistemas que clásicamente son caóticos. Esta definición dista mucho de la que en principio podríamos haber esperado, por eso, el término *caos cuántico* generó en su origen mucha controversia como nombre de esta nueva disciplina.

Sin embargo, a pesar de que la investigación no se dirigió principalmente por las vías que nuestra intuición en un principio nos podría indicar, el *caos cuántico* ha constituido un campo de investigación muy activo en el que se han hecho importantes progresos en las dos últimas décadas. Tanto es así, que hoy disponemos de una serie de herramientas que nos permiten estudiar las fluctuaciones de los espectros cuánticos de energía de sistemas que no tienen un análogo clásico claro, como son los que nos ocupan en este trabajo. Según el tipo de fluctuaciones que presente el sistema podremos incluirlo en uno de los dos tipos de sistemas cuánticos cuya distinción se ha podido establecer gracias al estudio comparativo de los sistemas clásicamente caóticos frente a los clásicamente integrables: sistemas cuyas fluctuaciones espectrales siguen la estadística de Poisson o sistemas cuyas fluctuaciones espectrales coinciden con las predichas por la teoría de matrices aleatorias.

En la Parte I investigaremos la estadística espectral de sistemas de partículas idénticas sin interacción. Tales sistemas pueden parecer muy sencillos y podemos tender a pensar que son de sobra conocidos. De hecho, pueden encontrarse ejemplos en la literatura científica de que así ha ocurrido, dando por hecho que estos sistemas presentan siempre un comportamiento de tipo regular. Sin embargo, salvo por un argumento cualitativo debido a Bloch en 1969, que razona esta afirmación, no existen estudios numéricos sistemáticos ni demostraciones analíticas que hayan establecido definitivamente esta cuestión. Un estudio riguroso requiere tratar la evolución del sistema con el número de partículas y con la energía. Esto es lo que llevaremos a cabo en esta parte.

En la Parte II introduciremos una interacción a dos cuerpos y estudiaremos estos sistemas mediante un tipo de colectividades adecuadas, como son las colectividades embebidas. Pero en este caso no nos limitaremos al tradicional análisis de fluctuaciones espectrales sino que utilizaremos un enfoque distinto. Se trata de estudiar las matrices hamiltonianas en forma tridiagonal, que supone ya en sí una simplificación debido a la considerable reducción del número de variables a manejar, y que puede constituir una nueva vía para la simplificación del estudio de fluctuaciones espectrales, sobre todo en este tipo de colectividades más complicadas de construir y tratar en su forma habitual. Para ello, se estudiará por un lado la forma tridiagonal de las colectivida-

des y por otro se realizará el tradicional análisis de fluctuaciones espectrales con el objetivo de, relacionando ambos enfoques, construir un modelo de colectividades tridiagonales que reproduzca la estadística espectral que las caracteriza en caos cuántico.

Parte I

Sistemas sin interacción

Capítulo 2

Introducción

Los sistemas que son objeto de estudio en esta Parte I están compuestos por varias partículas idénticas que no interactúan entre sí. Debido al carácter bosónico o fermiónico de las mismas el sistema no tiene un análogo clásico claro. Pero a pesar de que la definición de caos cuántico sugiere lo contrario podemos llevar a cabo un estudio de este tipo de sistemas en el contexto de esta disciplina. Simplemente hay que utilizar las herramientas desarrolladas para el estudio de la estadística de las fluctuaciones que, según hemos señalado, tienen como único requisito imprescindible disponer de un espectro de energías.

Hasta ahora el estudio de sistemas de partículas idénticas en el contexto del caos cuántico se ha centrado en sistemas con interacción o bien en la transición de un hamiltoniano sin interacción, que se considera regular, al hamiltoniano completo con interacción (KOTA, 2001). Es decir, se parte siempre del hecho de que un sistema sin interacción presenta un comportamiento regular (fluctuaciones tipo Poisson). Es cierto que en sistemas de muchos cuerpos las simetrías conducen muy a menudo a un campo medio que es regular, tal es el caso de la invariancia bajo transformaciones de Galileo en los átomos o los núcleos atómicos. Pero no se han llevado a cabo estudios sistemáticos de cálculo numérico ni demostraciones analíticas que permitan concluir en general cómo es el comportamiento de los sistemas sin interacción. La primera justificación del hecho de considerarlos regulares que aparece en la literatura científica se debe a Bloch (BLOCH, 1969).

Bloch señala que en el espectro de energía de un sistema de varias partículas sin interacción, dos niveles consecutivos reciben contribuciones de muy diferentes regiones del espectro de partícula independiente y estarán, por tanto, descorrelacionados, dando lugar a un espectro de tipo Poisson. Es un argumento sencillo, intuitivo, válido tanto para fermiones como para bosones y plausible sobre todo para sistemas con muchas partículas y a energías altas. Se menciona después en otros trabajos pero no hay un acuerdo general

sobre el mismo. Por ejemplo, algunos autores consideran que es válido para $N \geq 2$ (BRODY *et al.*, 1981), otros suponen que es válido para un número muy grande de partículas (SREDNICKI, 2002), otros señalan que puede ser cierto para $N = 2$ hasta cierto punto (BENET *et al.*, 2001).

Si se considera un sistema sin interacción en la región de baja energía y/o con un número pequeño de partículas, intuitivamente se comprende que el argumento de Bloch no puede ser válido en este caso. Las contribuciones del espectro de partícula independiente a dos niveles consecutivos del espectro del sistema no provienen de regiones muy diferentes y, por tanto, no es tan claro que los niveles estén descorrelacionados. Así, un estudio riguroso de este tipo de sistemas debe incluir un análisis de la evolución de los mismos por un lado con el número de partículas, y por otro lado con la energía. Este estudio es el que se presenta en esta Parte I.

En el siguiente capítulo se presenta una introducción a la disciplina del caos cuántico y se describen las herramientas desarrolladas en este campo para el estudio de las propiedades de las fluctuaciones de los espectros cuánticos de energía. Estas herramientas se aplican a los sistemas de N partículas idénticas sin interacción, que se describen en el capítulo 4. En el capítulo 5 se exponen las conclusiones del análisis. Los detalles sobre la teoría de matrices aleatorias se recogen en el apéndice A y la mayor parte de los cálculos de la densidad de estados del sistema de N partículas, que se describe en el capítulo 4, se recogen en el apéndice B con el fin de aligerar el contenido de esa parte.

Capítulo 3

Caos cuántico

Las características propias del movimiento caótico tienen definiciones consistentes en el contexto de la mecánica clásica. En cambio, no puede hablarse de dinámica caótica en el contexto de la mecánica cuántica. Por tanto, la primera pregunta que podríamos hacernos es si tiene sentido hablar de caos cuántico, si existe tal disciplina y en ese caso cuál sería su definición. La respuesta es que, por paradójico que parezca, tal disciplina existe, lleva investigándose casi 30 años y, sin embargo, aún no existe una definición precisa de la misma.

Los conceptos, definiciones y criterios originalmente desarrollados en mecánica clásica no son fácilmente trasladables a la mecánica cuántica. Para empezar la existencia del caos clásico es debida al carácter no lineal de las ecuaciones de la dinámica newtoniana. La ecuación de Schrödinger, en cambio, es lineal.

Por otro lado, en mecánica cuántica tienen cabida los sistemas clásicamente integrables, como el átomo de hidrógeno, pero también los clásicamente no integrables, como el átomo de helio. Además, el principio de correspondencia establece que en la región semiclassical, es decir, a escalas grandes comparadas con la longitud de onda de De Broglie, la mecánica clásica debe emerger como límite de la mecánica cuántica. Por lo tanto, parece razonable que se trate de indagar en el contexto de la mecánica cuántica sobre las posibles características y criterios que permitan distinguir un comportamiento análogo a lo que es el caos en mecánica clásica, es decir, sobre el origen mecano-cuántico, si es que existe, de la distinción entre sistemas caóticos e integrables en el límite clásico. A continuación entraremos un poco más en detalle en estas cuestiones y después pasaremos a describir las herramientas de que disponemos y que utilizaremos en este trabajo para analizar las señales del caos en el comportamiento de los sistemas cuánticos.

3.1. Caos en mecánica clásica

Las leyes de la mecánica clásica son deterministas, esto es, conocidas sus condiciones iniciales con exactitud el movimiento de una partícula puede predecirse para cualquier instante de tiempo. Este punto de vista determinista predominó en la Física desde el s.XVII, en que Newton estableció sus leyes, hasta finales del s.XIX.

Con el nacimiento de la mecánica estadística se comenzó a utilizar una descripción probabilística de los sistemas complejos con muchos grados de libertad. Se vio que esta era la única manera posible de describir este tipo de sistemas: utilizando unas pocas variables significativas, que dan cuenta del comportamiento “en media” de todos sus componentes, dado que el estudio del movimiento exacto de cada partícula era un problema inabordable. Sin embargo, este nuevo tipo de descripción se vio sólo como una nueva técnica útil que solucionaba el problema del manejo de muchos grados de libertad, es decir, no se trataba de un problema de principio: las leyes de Newton describían correctamente el movimiento individual de cada partícula aunque las herramientas de cálculo desarrolladas hasta entonces no permitieran en la práctica tal descripción, que, de hecho, tampoco permiten las herramientas actuales.

A principios del s.XX surgió la mecánica cuántica en el intento de explicar el movimiento de las partículas microscópicas, que no tenía cabida bajo las leyes de la mecánica clásica. Y se reveló como una teoría más completa, capaz de describir el movimiento tanto en el mundo macroscópico como en el microscópico. Al tratarse de una teoría intrínsecamente probabilística no dejaba ya lugar para el mecanicismo.

Finalmente, durante la segunda mitad del s.XX, surgió en el seno de la propia mecánica newtoniana una nueva barrera para la idea del mecanicismo: se comprobó que no sólo los sistemas con muchos grados de libertad sino también sistemas muy sencillos podían mostrar una dinámica muy compleja con unas características que impedían cualquier predicción a largo plazo. Esta complejidad aparece debido al carácter no lineal de las ecuaciones de la dinámica newtoniana y a pesar de su carácter determinista. Por eso recibe el nombre de *caos determinista*.

3.1.1. Integrabilidad

En mecánica clásica puede hablarse de dos tipos de sistemas: los sistemas integrables, que presentan un comportamiento sencillo y predecible, frente a los sistemas caóticos, que presentan un comportamiento muy complejo. Se dice que un sistema hamiltoniano con N grados de libertad es integrable cuando existen N constantes del movimiento independientes; en tal caso el teorema

de integrabilidad de Liouville garantiza que las ecuaciones del movimiento son resolubles por cuadraturas. Además, la trayectoria del sistema está confinada en un toro N -dimensional en el espacio de fases $2N$ -dimensional y el movimiento es equivalente a N movimientos periódicos en una dimensión cada uno con su propia frecuencia, se dice que es multiperíodico.

Una pequeña perturbación en un hamiltoniano integrable conlleva la pérdida de la integrabilidad. El teorema KAM describe cómo es la transición de la integrabilidad al caos en función de la intensidad de la perturbación, cómo van deformándose y desapareciendo los toros invariantes dando lugar a un sistema en el que las trayectorias no están confinadas en toros sino que recorren todo el espacio de fases (ARNOLD, 1978).

3.1.2. Características de la dinámica caótica

Que no seamos capaces de encontrar las N constantes del movimiento que garantizan la integrabilidad de un sistema no implica que éstas no existan, de hecho, generalmente son difíciles de encontrar. Por tanto, es conveniente conocer otros aspectos característicos del caos que nos permitan identificarlo más fácilmente. La más conocida de estas características es la extrema sensibilidad a las condiciones iniciales producida por la separación exponencial de las trayectorias en el espacio de fases. El parámetro que mide este efecto de forma cuantitativa es el exponente de Lyapunov, definido como sigue (SCHUSTER, 1988):

$$\lambda(\mathbf{x}_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{d(\mathbf{x}_0, t)}{d(\mathbf{x}_0, 0)}, \quad (3.1)$$

donde $d(\mathbf{x}_0, t)$ es la separación, en el instante t , entre dos trayectorias con condiciones iniciales en un entorno de \mathbf{x}_0 .

Otra característica, ligada a la anterior, es la pérdida de predecibilidad. La pérdida de información que experimenta un sistema por unidad de tiempo queda cuantificada en la llamada entropía de Kolmogorov K (FERNÁNDEZ-RAÑADA, 1994), que sirve además para estimar el tiempo máximo hasta el que es posible predecir el movimiento de un sistema caótico.

El caos clásico puede encontrarse también en el espectro de Fourier. Según hemos comentado, el movimiento de un sistema integrable es multiperíodico y por tanto su espectro de frecuencias presenta picos centrados en las frecuencias características del sistema. El movimiento caótico, por el contrario, no presenta ningún tipo de regularidad, es aperiódico y por tanto su espectro de frecuencias no presenta picos, es continuo.

3.2. Caos en mecánica cuántica

Podemos intentar definir el caos en mecánica cuántica de la misma manera que se hace en mecánica clásica: en base al concepto de integrabilidad. A pesar de que los conceptos clásicos pueden trasladarse a la mecánica cuántica la definición que resulta no es en absoluto consistente, llevando a conclusiones como que el análogo cuántico de un sistema clásicamente integrable es caótico o viceversa (WEIGERT, 1992).

Podemos intentar definirlo entonces en base a alguna de sus características, como la sensibilidad a las condiciones iniciales. Pero aquí surgen problemas de concepto: la separación exponencial de las trayectorias con condiciones iniciales próximas no tiene sentido en mecánica cuántica, ya que ni lo tiene el propio concepto de trayectoria ni pueden determinarse las condiciones iniciales con exactitud debido al principio de incertidumbre. En este punto podríamos optar por cambiar la separación de las trayectorias por separación de las funciones de onda. Sin embargo, esto tampoco nos lleva a un resultado satisfactorio: la unitariedad del operador de evolución temporal implica que el grado de solapamiento de dos funciones de onda del sistema permanece constante en el tiempo:

$$\langle \Psi(t_0) | \Phi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t) | \Phi(t) \rangle, \quad \forall t. \quad (3.2)$$

Una tercera posibilidad consiste en estudiar pequeñas perturbaciones en el hamiltoniano, en lugar de en las condiciones iniciales (PERES, 1995). Pero esta opción no ha resultado tampoco por el momento en una definición consistente, aunque la investigación en esta línea continúa abierta.

Podemos concluir entonces que no parece posible encontrar una definición satisfactoria del caos en mecánica cuántica en base a la analogía con la mecánica clásica. Sin embargo, como comentamos anteriormente, el caos debería manifestarse de alguna manera en la mecánica cuántica, ya que la mecánica clásica debe emerger como límite de la mecánica cuántica en la región semiclásica. Pasamos a continuación entonces a describir brevemente el estudio del límite semiclásico y veremos qué conclusiones se pueden extraer.

3.2.1. Límite semiclásico

A la hora de comparar resultados clásicos y cuánticos hay dos posibles puntos de vista: el límite de la mecánica cuántica para escalas grandes y la cuantización de sistemas clásicos. El primero cronológicamente fue lógicamente este último, es lo que se llama la *mecánica cuántica antigua*. A partir de sistemas clásicos integrables se consiguió obtener unas reglas de cuantización (reglas de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara(SWI) (SOMMERFELD, 1916; WILSON, 1915; ISHIWARA, 1915)), que permitían decidir cuáles energías de

todo el continuo clásico eran cuánticamente posibles, dando lugar a un espectro cuántico discreto de energía. Posteriormente, tras el desarrollo de la mecánica cuántica, una vez conocida la ecuación de Schrödinger, se llegó a estas mismas reglas de cuantización SWI por el primer camino mencionado: buscando el límite de la ecuación de Schrödinger para escalas grandes. El cálculo semiclásico que conduce a este resultado es la aproximación WKB (Wentzel, Kramer, Brillouin (MESSIAH, 1961)).

Para sistemas no integrables, sin embargo, no es posible esta cuantización. Ya en 1917 Einstein (EINSTEIN, 1917) advirtió que la cuantización SWI no tenía sentido en sistemas no integrables. Y la aproximación WKB presenta las mismas dificultades. Este problema lo resolvió Gutzwiller (GUTZWILLER, 1990) mediante el cálculo semiclásico de su fórmula para un observable puramente cuántico, como es la densidad de estados, a partir de magnitudes puramente clásicas, como son las órbitas periódicas del sistema análogo clásico. La densidad de estados se define para un espectro discreto de energía $\{E_i\}$ como

$$g(E) = \sum_i \delta(E - E_i), \quad (3.3)$$

siendo $g(E)dE$ el número de estados en el intervalo de energía comprendido entre E y $E + dE$.

La fórmula de Gutzwiller para la densidad de estados, válida tanto para sistemas integrables como para sistemas caóticos, es la siguiente:

$$g(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \sum_{r=1}^{\infty} A_r \cos\left(\frac{1}{\hbar}S_r(E) - \frac{\mu_r\pi}{2}\right), \quad (3.4)$$

donde la suma se extiende a todas las órbitas periódicas clásicas del sistema, incluyendo las de longitud nula, las amplitudes A_r dependen del periodo y de la estabilidad de la órbita frente a pequeñas perturbaciones, S_r es la acción clásica y μ_r es el llamado índice de Maslov, que viene dado por diversas contribuciones que dependen de ciertas propiedades de las órbitas, por ejemplo, en los billares una de las contribuciones tiene que ver con las reflexiones en las paredes: por cada reflexión μ_r aumenta en 2 unidades para condiciones de contorno tipo Dirichlet y no cambia para condiciones de contorno tipo Neumann.

Entre las órbitas que contribuyen a la suma, aquellas que tienen longitud nula dan una contribución particular a la densidad de estados; realizando el correspondiente cálculo se obtiene

$$g_0(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^d} \int dpdq \delta[E - H(p, q)], \quad (3.5)$$

que corresponde a la porción del espacio de fases accesible para una partícula clásica con energía E y se la llama *parte suave* de la densidad de estados,

ya que presenta un comportamiento que varía suavemente con la energía. La parte que forman el resto de contribuciones de las órbitas de longitud no nula presenta un comportamiento oscilatorio y recibe el nombre de *parte fluctuante* de la densidad de estados. Por tanto, la densidad de estados $g(E)$ de un sistema cuántico puede separarse en una parte suave, $\bar{g}(E) = g_0(E)$, que daría un comportamiento medio propio del sistema clásico, y una parte fluctuante, $\tilde{g}(E)$, que sería propia exclusivamente del sistema cuántico:

$$g(E) = \bar{g}(E) + \tilde{g}(E). \quad (3.6)$$

De hecho, veremos a continuación que serán precisamente las fluctuaciones, concretamente sus propiedades estadísticas, las que nos servirán para dar una definición del caos en mecánica cuántica.

3.2.2. Parte fluctuante de la densidad de estados

La fórmula de Gutzwiller presenta en la práctica serios problemas de divergencia, haciendo muy difícil la tarea de calcular un espectro cuántico a partir de la suma en órbitas periódicas. Esto es debido a la proliferación del número de órbitas periódicas con la longitud, que es de tipo polinomial en sistemas integrables y exponencial en sistemas caóticos (GUTZWILLER, 1990).

Esta proliferación en el número de órbitas, por otro lado, nos permite establecer que en el límite de órbitas periódicas largas (a partir de una cierta longitud) las propiedades del sistema individual ya no son relevantes y hay que aplicar métodos estadísticos. Entonces será la parte fluctuante de la densidad de estados (que es la que proviene, según la fórmula de Gutzwiller, de contribuciones de órbitas de longitud no nula) la que será susceptible de un estudio estadístico. Mediante este estudio se ha llegado a los dos resultados más importantes en caos cuántico (BERRY and TABOR, 1977; BOHIGAS *et al.*, 1984), 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.

En 1973 Percival (PERCIVAL, 1973) ya conjeturó que existen dos tipos de espectro de energías para un sistema con más de un grado de libertad: uno regular cuando el sistema análogo clásico es caótico y otro irregular cuando es integrable. La principal diferencia entre ambos tipos de espectro es la correlación entre los niveles. Si el sistema clásico es integrable los niveles no están correlacionados, de manera que pueden aparecer degeneraciones en el espectro. Esto implica que si se estudia la *dinámica de niveles* del sistema, es decir, si se introduce un parámetro variable en el hamiltoniano y se estudia cómo va cambiando el espectro al variar el parámetro, se observa que los

niveles evolucionan de una manera tal que pueden darse cruces entre ellos. En cambio si el sistema clásico es caótico aparece correlación entre los niveles y al estudiar su dinámica no se dan cruces entre ellos; en su lugar, aparecen los llamados *cruces evitados*: los niveles pueden aproximarse mucho pero siempre acaban volviéndose a separar, por eso se dice que estos sistemas presentan *repulsión entre niveles*.

Después, en 1977, Berry (BERRY and TABOR, 1977) estudió mediante la aproximación semiclásica sistemas clásicamente integrables con el fin de demostrar o falsar la conjetura de Percival. Y consiguió demostrar que las correlaciones en estos sistemas son de tipo Poisson, es decir, que los niveles están efectivamente descorrelacionados. A pesar de realizarse en el límite semiclásico este resultado se ha mostrado, numéricamente, igualmente aplicable en sistemas puramente cuánticos.

El resultado análogo para sistemas caóticos se debe a Bohigas, Giannoni y Schmidt (BOHIGAS *et al.*, 1984), que en 1984 conjeturaron que las correlaciones en este tipo de sistemas coincidían con las predichas por la *teoría de matrices aleatorias*. En los años siguientes se han ido obteniendo muchos resultados experimentales y numéricos que corroboran esta conjetura, pero aún no ha sido demostrada con rigor.

Es importante hacer notar en este punto que estamos dando ya implícitamente una definición de caos cuántico: ya que, según hemos visto, no podemos caracterizar el caos desde un principio con propiedades intrínsecamente cuánticas, lo que sí podemos hacer es estudiar cuánticamente sistemas cuyo análogo clásico conocemos y tratar de encontrar rasgos cuánticos que diferencien los sistemas en función de si su análogo clásico es integrable o caótico. Es decir, llamamos caos cuántico al estudio cuántico de los sistemas clásicamente caóticos; esta es la definición más utilizada en la actualidad.

Una vez establecidos los rasgos del caos cuántico de esta manera, podrían servirnos para caracterizar el caos en sistemas cuánticos que no tienen un análogo clásico claro, como son los sistemas de varias partículas idénticas, que nos ocupan en este trabajo. En este tipo de sistemas, debido al carácter bosónico o fermiónico de las partículas, no existe un límite clásico bien definido. De aquí la importancia de encontrar características del caos puramente cuánticas, que permitan distinguirlo sin necesidad de recurrir al límite clásico.

El estudio de las propiedades estadísticas de las fluctuaciones del espectro cuántico incluye correlaciones de corto y de largo alcance (correlaciones entre niveles de energía próximos o alejados, respectivamente). De la fórmula de Gutzwiller se puede deducir que las órbitas largas determinan el comportamiento de las correlaciones de corto alcance, mientras que las cortas determinan el de las correlaciones de largo alcance. Por ejemplo, en el caso de los billares la acción S_r para una órbita de longitud l_r es $S_r = \hbar k l_r$, donde el número de ondas k se relaciona con la energía mediante $E = \hbar^2 k^2 / 2m$.

Introduciendo esta expresión de la acción en la fórmula de Gutzwiller (3.4), vemos que cada órbita de longitud l_r aporta una contribución oscilatoria de periodo $\Delta k = 2\pi/l_r$. Entonces las órbitas de longitud grande son responsables de las correlaciones de la energía ($k = k(E)$) de corto alcance y las órbitas de longitud pequeña son responsables de las correlaciones de largo alcance.

Por tanto, si, según hemos señalado, se puede esperar universalidad sólo a partir de una cierta longitud o un cierto periodo mínimo T , esto implica una restricción para las correlaciones de largo alcance: éstas serán universales sólo para ventanas de energía $\Delta E < \hbar/T$. En la práctica este periodo T no tiene en realidad una definición exacta y se suele tomar el valor del periodo de la órbita más corta, T_{min} , de manera que lo que se puede asegurar es que no hay universalidad para ventanas $\Delta E > \hbar/T_{min}$.

3.3. Teoría de matrices aleatorias

La teoría de matrices aleatorias fue desarrollada en los años 50 y 60 por Wigner, Dyson, Mehta y otros con el objetivo de sistematizar el estudio de los espectros de los núcleos complejos. Pero el interés en esta teoría se renovó enormemente cuando Bohigas, Giannoni y Schmidt (BOHIGAS *et al.*, 1984) conjeturaron que debía ser aplicable a todos los sistemas caóticos.

La idea inicial fue, dado el desconocimiento de los detalles de la interacción nuclear, prescindir de los mismos y realizar una descripción estadística. Es decir, renunciar al estudio en detalle de un núcleo concreto y tratar de encontrar propiedades que caractericen el conjunto de espectros nucleares en general. Para llevar esto a cabo el punto de partida de la teoría de matrices aleatorias consiste en reemplazar el hamiltoniano del sistema por una colectividad de matrices aleatorias con las mismas propiedades de simetría. El problema es similar al de la descripción de los sistemas complejos con muchos grados de libertad que dio lugar al nacimiento de la mecánica estadística. La diferencia es que en mecánica estadística se consideran colectividades de sistemas para un solo hamiltoniano, que es conocido, y en este caso consideramos colectividades de hamiltonianos para un sistema.

Se consideran principalmente tres tipos de hamiltonianos o clases de universalidad, que dan lugar a la definición de otras tantas colectividades:

- Los hamiltonianos sin simetría bajo inversión temporal pueden ser representados por matrices hermíticas, que son invariantes bajo transformaciones unitarias. Forman la colectividad GUE (*Gaussian Unitary Ensemble*).
- Los hamiltonianos con simetría bajo inversión temporal y simetría bajo rotaciones pueden ser representados por matrices reales y simétricas,

que son invariantes bajo transformaciones ortogonales. Estas matrices pueden representar también hamiltonianos con simetría bajo inversión temporal y sin simetría bajo rotaciones, siempre que el espín sea entero. Forman la colectividad GOE (*Gaussian Orthogonal Ensemble*).

- Los hamiltonianos con simetría bajo inversión temporal, sin simetría bajo rotaciones y espín semientero pueden ser representados por matrices cuaterniónicas reales, que son invariantes bajo transformaciones simplécticas. Forman la colectividad GSE (*Gaussian Symplectic Ensemble*).

En el apéndice A se describe la forma que tienen las matrices de cada una de las colectividades, así como la distribución de probabilidad de sus autovalores y la densidad media de estados a que da lugar cada una de ellas.

3.3.1. Análisis espectrales

Con el objetivo de analizar las fluctuaciones de los distintos tipos de espectros, tanto de matrices aleatorias como cualesquiera otros obtenidos experimental o numéricamente, se definen los estadísticos espectrales. Según la definición de Mehta (MEHTA, 1991), un estadístico espectral es un número W tal que pueda calcularse directamente a partir del espectro de niveles y cuya media $\langle W \rangle$ y varianza $V_W = \langle (W - \langle W \rangle)^2 \rangle$ sean conocidas mediante un modelo teórico.

El primer paso, previo a cualquier tipo de análisis estadístico, es la separación de la parte suave y la parte fluctuante de la densidad de estados, ya que, según señalamos en 3.2.2, es esta última la que realmente nos interesa. Es la que va a presentar un comportamiento universal propio del sistema cuántico, según vimos. El algoritmo que nos permite esta separación se denomina *reescalado*¹ y será descrito en detalle en la siguiente sección. A partir de ahora supondremos que el reescalado ha sido ya efectuado satisfactoriamente y que, por tanto, estaremos analizando correctamente las fluctuaciones espectrales.

Hasta ahora hemos utilizado E para referirnos a la energía. A partir de ahora utilizaremos ε para referirnos a la energía en espectros reescalados y seguiremos utilizando E para espectros sin reescalar. De la misma manera, utilizaremos la letra ρ para referirnos a la densidad de estados de los espectros reescalados en lugar de g , que hemos utilizado hasta ahora para los espectros sin reescalar.

Los dos estadísticos más utilizados en el estudio del caos cuántico, que serán los utilizados en este trabajo, son la distribución de espaciamentos a primeros vecinos $P(s)$ y la rigidez espectral Δ_3 . El primero mide correlaciones de corto alcance y el segundo, correlaciones de largo alcance.

¹Traducción libre del inglés *unfolding*

Distribución de espaciamientos a primeros vecinos

Dada una secuencia de niveles $\{\varepsilon_i\}_{i=1,\dots,m}$, ordenada en orden creciente de energía, los espaciamientos a primeros vecinos se definen como

$$s_i = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, m-1. \quad (3.7)$$

Nótese que los espaciamientos son siempre positivos, al estar la secuencia de niveles ordenada ($i < j \Rightarrow \varepsilon_i \leq \varepsilon_j$).

La distribución de probabilidad de estos espaciamientos es un estadístico que nos sirve para caracterizar la repulsión de niveles: si en un espectro de energía existe repulsión de niveles la probabilidad de que existan espaciamientos nulos (o lo que es lo mismo, la probabilidad de que dos niveles de energía tengan el mismo valor) es cero; en cambio, si no existe repulsión los niveles están descorrelacionados y la probabilidad de que dos de ellos tengan el mismo valor no es cero, es decir, hay una cierta probabilidad de que existan espaciamientos nulos.

Este es el estadístico que utilizó Berry (BERRY and TABOR, 1977) para demostrar que en los sistemas integrables los niveles están descorrelacionados. Consiguió demostrar que la distribución de espaciamientos a primeros vecinos en este tipo de sistemas seguía una ley de tipo Poisson:

$$P(s) = e^{-s}, \quad (3.8)$$

que es la distribución a que da lugar una secuencia de variables aleatorias independientes. En ella se observa que efectivamente $P(0) \neq 0$.

La $P(s)$ correspondiente a las colectividades gaussianas puede calcularse a partir de las distribuciones de autovalores correspondientes, pero dicho cálculo es muy complicado. En lugar de considerar matrices de dimensión arbitraria Wigner lo realizó para matrices de dimensión 2 y obtuvo las expresiones siguientes (STÖCKMANN, 1999):

$$P(s) = \begin{cases} \frac{\pi}{2}s \exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right), & \text{GOE} \\ \frac{32}{\pi^2}s^2 \exp\left(-\frac{4}{\pi}s^2\right), & \text{GUE} \\ \frac{2^{18}}{3^6\pi^3}s^4 \exp\left(-\frac{64}{9\pi}s^2\right), & \text{GSE} \end{cases} \quad (3.9)$$

que resultan ser muy buenas aproximaciones para matrices de dimensión arbitraria. En ellas observamos que sí existe repulsión ($P(0) = 0$).

Estas son las distribuciones de espaciamientos a primeros vecinos propias de los sistemas caóticos, según la conjetura de Bohigas, Giannoni y Schmidt

(BOHIGAS *et al.*, 1984) o conjetura BGS. En principio la conjetura fue formulada sólo para el GOE, es decir, para los sistemas caóticos con las simetrías propias de esta colectividad (hamiltonianos con simetría bajo inversión temporal y simetría bajo rotaciones o sin simetría bajo rotaciones pero con espín entero), que son los que Bohigas y sus colaboradores estudiaron. Analizaron espectros experimentales de una gran cantidad de núcleos atómicos distintos (HAQ *et al.*, 1982; BOHIGAS *et al.*, 1983) y encontraron que la distribución de espaciamientos a primeros vecinos podía ser perfectamente descrita por la curva de Wigner para el GOE. Conocían un estudio análogo con niveles atómicos (CAMARDA and GEORGOPULOS, 1983), cuyo resultado era el mismo: acuerdo entre la predicción del GOE y el experimento. Y por último, analizaron el espectro de un billar de Sinaí (BOHIGAS *et al.*, 1984) y obtuvieron de nuevo una distribución de Wigner para los espaciamientos.

A la vista de todos estos resultados formularon su conjetura. Pero antes de escribirla tal como fue formulada en (BOHIGAS *et al.*, 1984) es necesario introducir primero unos conceptos sobre jerarquía del caos.

No todos los sistemas caóticos lo son en el mismo grado. Se ha desarrollado una detallada jerarquía de posibles comportamientos de los sistemas caóticos. Existen tres clases básicas de sistemas. A continuación explicaremos brevemente sus diferencias sin entrar en definiciones rigurosas que requerirían la introducción de conceptos matemáticos demasiado complicados para lo que nos interesa aclarar en esta sección. En orden creciente del grado de caoticidad, los tres tipos de sistemas son los siguientes:

- (a) Sistemas ergódicos. Un sistema es ergódico si el promedio espacial de las variables que lo caracterizan es igual a su promedio temporal. La ergodicidad implica que el espacio de fases accesible no puede dividirse en subconjuntos invariantes bajo la acción del sistema (*hipótesis ergódica*). En los sistemas ergódicos todas las órbitas (excepto las estables, si las hay) llenan uniformemente el espacio de fases, no hay toros invariantes y pueden existir órbitas periódicas estables (pequeñas perturbaciones no provocan una separación exponencial de la órbita inicial).
- (b) Sistemas *mixing*. Un sistema es *mixing* si cada subconjunto del espacio de fases se dispersa de forma homogénea bajo la acción del sistema. La propiedad matemática de *mixing* implica que las trayectorias que se separan se vuelven a encontrar una y otra vez. Las trayectorias cercanas se separan localmente pero la dinámica está confinada globalmente en una región finita del espacio de fases y, necesariamente, las trayectorias se aproximan unas a otras arbitrariamente cerca infinitas veces.
- (c) Sistemas *K*. Los sistemas *K* se caracterizan por que su entropía de Kolmogorov es positiva. No existen órbitas estables, cualquier par de

órbitas próximas se separan exponencialmente.

Todos los sistemas K son *mixing* y ergódicos. Y todos los sistemas *mixing* son ergódicos.

La conjetura BGS es la siguiente: *Las fluctuaciones de los espectros de sistemas con simetría bajo inversión temporal cuyos análogos clásicos son sistemas K presentan las mismas propiedades que las predichas por el GOE.* Posteriormente se han encontrado multitud de resultados experimentales que la corroboran en sistemas tan distintos como un átomo de hidrógeno en un campo magnético intenso (HÖNIG and WINTGEN, 1989), el espectro de excitación de una molécula de NO_2 (ZIMMERMANN *et al.*, 1988), el espectro de microondas de una cavidad caótica tridimensional (DEUS *et al.*, 1995) o el espectro de vibración de una placa con forma de estadio (LEGRAND *et al.*, 1992). A pesar de que en un principio fue formulada para sistemas K , multitud de resultados posteriores mostraron que era igualmente válida para sistemas ergódicos en general. Por tanto, hoy se acepta que un sistema cuántico es caótico cuando su análogo clásico es ergódico ².

Ahora la pregunta es si la conjetura BGS es válida también para las otras dos clases de universalidad. Es decir, si en sistemas caóticos que presenten las simetrías propias de las colectividades GUE o GSE las propiedades de las fluctuaciones de sus espectros coincidirán con las predichas para la colectividad correspondiente. Pues bien, según los resultados numéricos hay pocas dudas de que es así. Un ejemplo muy ilustrativo puede encontrarse en (CAURIER and GRAMMATICOS, 1989). En el terreno experimental la situación es menos favorable: Por el momento no existen ejemplos para el caso del GSE y sólo dos, ambos con billares de microondas (SO *et al.*, 1995; STOFFREGEN *et al.*, 1995), para el del GUE. En ellos el excelente acuerdo con las curvas teóricas corrobora la validez de la conjetura BGS para el caso del GUE.

De cualquier manera queda claro que es mucho más fácil encontrar situaciones experimentales de sistemas caóticos con las simetrías propias del GOE que de las otras dos clases de universalidad, lo que hace del GOE la colectividad más popular de las tres.

En la figura 3.1 se representan las curvas de las distribuciones de espaciamientos de las tres colectividades gaussianas, GOE, GUE y GSE, y la correspondiente a la ley de Poisson. En ella podemos observar cómo existe repulsión en los casos del GOE, GUE y GSE ($P(0) = 0$) y no hay repulsión en el caso de Poisson. Además, para valores pequeños de s la curva que crece más despacio es la del GSE, la siguiente sería la del GUE y la que crece más deprisa es la del GOE, ya que según las expresiones (3.9) el comportamiento

²Nótese que hasta ahora, en lo que se refiere a la conjetura BGS, hemos empleado 'sistemas clásicos caóticos' para referirnos a lo que rigurosamente deberíamos haber llamado 'sistemas clásicos ergódicos'.

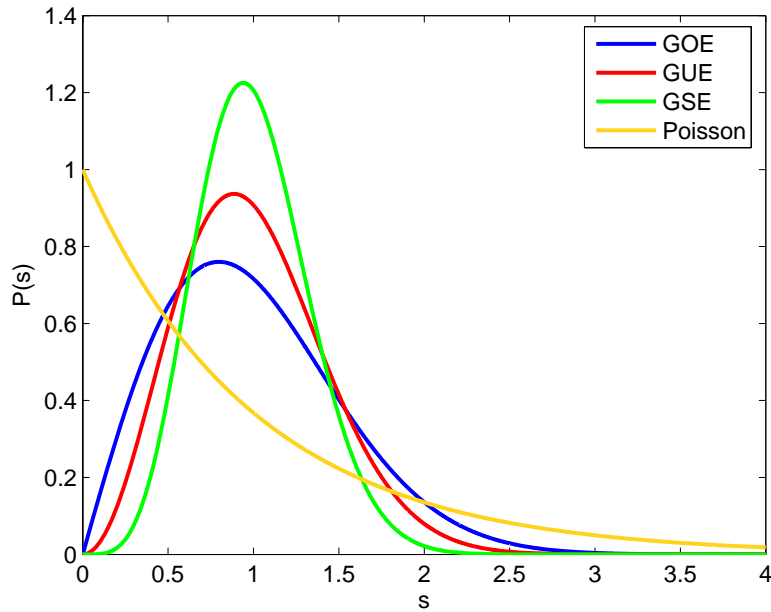


Figura 3.1: Distribuciones de espaciamientos a primeros vecinos teóricas para espectros tipo GOE, GUE, GSE y Poisson.

de éstas para s pequeño es

$$P(s) \sim \begin{cases} s, & \text{GOE} \\ s^2, & \text{GUE} \\ s^4, & \text{GSE} \end{cases} \quad (3.10)$$

Por eso, el exponente de s en estas expresiones (ν) se denomina *exponente de repulsión* y se dice que el GOE presenta repulsión lineal ($\nu = 1$), el GUE repulsión cuadrática ($\nu = 2$) y el GSE repulsión cuártica ($\nu = 4$). Se le llama también *índice de universalidad*, puesto que distingue las tres clases de universalidad. En el caso de niveles descorrelacionados el valor es $\nu = 0$.

La mayoría de sistemas reales no son ni integrables ni completamente caóticos, sino que tienen un espacio de fases mixto. En estos sistemas la distribución de espaciamientos a primeros vecinos presenta un comportamiento intermedio entre la ley de Poisson y la de Wigner. Existen distintas aproximaciones para tratar este tipo de situaciones. Entre ellas está la aproximación de Brody (BRODY, 1973; BRODY *et al.*, 1981), que es puramente fenomenológica. La distribución de espaciamientos de Brody es una función que interpola entre el régimen integrable y el caótico, concretamente entre la ley de Poisson

y la de Wigner-GOE:

$$P(s) = (\nu + 1)a_\nu s^\nu \exp(-a_\nu s^{\nu+1}), \quad (3.11)$$

donde $a_\nu = \left[\Gamma\left(\frac{\nu+2}{\nu+1}\right) \right]^{\nu+1}$ y Γ es la función gamma, definida como sigue:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt, \quad z > 0. \quad (3.12)$$

ν es el parámetro de Brody: para $\nu = 0$ se tiene la distribución de Poisson y para $\nu = 1$ la de Wigner-GOE.

Rigidez espectral

La rigidez espectral es el estadístico más utilizado para medir las correlaciones de largo alcance. Se define a partir de la densidad acumulada de estados, que contabiliza el número de estados con energía por debajo o igual a una dada ε :

$$\mu(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\varepsilon} dx \rho(x) = \sum_i \Theta(\varepsilon - \varepsilon_i), \quad (3.13)$$

donde $\rho(x)$ es la densidad de estados, definida en la ecuación (3.3). Es decir, que la forma de la función $\mu(\varepsilon)$ es la de una escalera con escalones de una unidad en cada valor de la energía correspondiente a un autovalor, como se muestra en la figura 3.2.

Para comprender bien qué estamos midiendo con este estadístico es necesario señalar que en un espectro reescalado, el espaciamiento medio entre niveles es igual a 1:

$$\langle s \rangle = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^{m-1} s_i = 1, \quad (3.14)$$

como se explicará en la siguiente sección. De modo que, teniendo esto en cuenta, sabemos que en un espectro reescalado la densidad acumulada de estados será una escalera cuya pendiente media valdrá 1. Si hacemos un ajuste de la densidad acumulada a una recta en un intervalo de longitud L , $[\varepsilon - L/2, \varepsilon + L/2]$, el valor de la χ^2 obtenida en el ajuste, es decir,

$$\Delta_3(L) = \min_{a,b} \int_{\varepsilon-L/2}^{\varepsilon+L/2} dx (\mu(x) - a - bx)^2, \quad (3.15)$$

es la rigidez espectral, que, como se ha anticipado en la notación, depende sólo de la distancia L entre los dos niveles entre los cuales se quiere estudiar

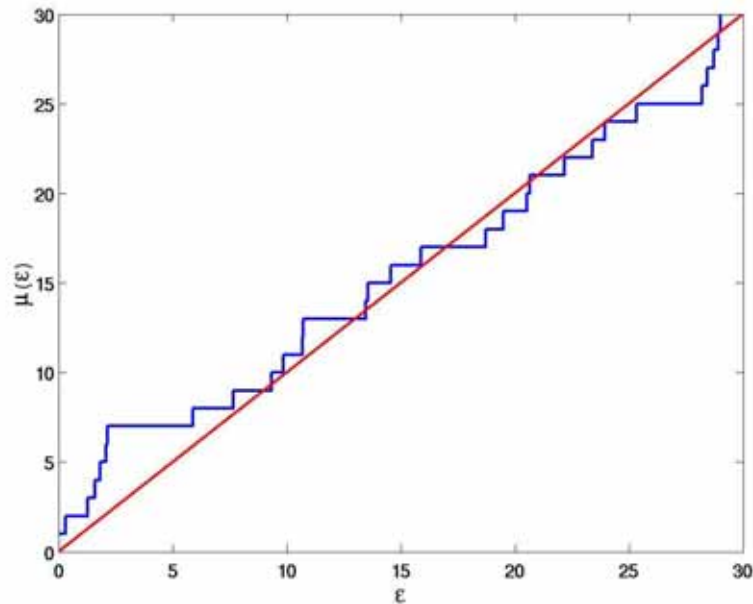


Figura 3.2: Densidad acumulada de un espectro de tipo Poisson reescalado (azul), junto con una recta de pendiente 1 (roja): $\mu(\varepsilon) = \varepsilon$.

la correlación y es independiente de la posición concreta de los mismos en el espectro ε ³.

Por tanto, según su definición, la rigidez espectral mide cuánto se desvía el espectro estudiado de un espectro uniforme (equiespaciado). Cuanto más uniforme es el espectro más se parece la densidad acumulada a una recta y, por tanto, menor es la χ^2 obtenida en el ajuste. Por tanto, un valor pequeño de la Δ_3 nos indica que el espectro es bastante uniforme, que tiene una cierta estructura rígida, de ahí el nombre del estadístico. Esta estructura aparece debido a las correlaciones, a la repulsión de niveles. En el caso de los espectros de niveles descorrelacionados, que se comportan como variables aleatorias independientes, no es de esperar que haya una organización de los niveles que le confiera ningún tipo de estructura al espectro.

Entonces valores pequeños de la Δ_3 para un valor de L dado indican que existe repulsión entre pares de niveles separados una distancia L . Por tanto, con este estadístico se pueden medir correlaciones entre niveles que están

³Esto es así mientras nos refiramos al comportamiento universal de las fluctuaciones. En lo referente a fenómenos no universales la Δ_3 sí puede depender de ε . Por ejemplo, el fenómeno de la saturación de Berry, que se describirá más adelante, es debido al límite a la universalidad, que venía impuesto por las órbitas periódicas del sistema. Y este fenómeno aparece en la Δ_3 a distintos valores de L según el valor de ε escogido.

alejados, a diferencia de la $P(s)$, que mide las correlaciones únicamente entre primeros vecinos.

En el caso de espectros de niveles descorrelacionados, que corresponden a los sistemas integrables, se obtiene

$$\langle \Delta_3(L) \rangle_{\nu=0} = \frac{L}{15}. \quad (3.16)$$

En el caso de las colectividades gaussianas, que corresponden a los sistemas caóticos, según la conjetura BGS,

$$\langle \Delta_3(L) \rangle_{\nu} = \frac{1}{\nu\pi^2} \log(L) + b_{\nu} + \mathcal{O}(L^{-1}) \quad L \gg 1, \quad \nu = 1, 2, 4, \quad (3.17)$$

donde ν es el índice de universalidad y b_{ν} depende también de la clase de universalidad.

Observamos en (3.16) y (3.17) que el valor teórico de la Δ_3 se da en realidad como el promedio sobre una colectividad. Por tanto, si queremos comparar la Δ_3 obtenida a partir de un espectro con un valor teórico debemos calcularla como un promedio a lo largo del espectro. El procedimiento más estándar, introducido por Bohigas et al. (BOHIGAS *et al.*, 1984), es utilizar los intervalos $[0, L]$, $[L/2, 3L/2]$, $[L, 2L]$, ... y promediar la Δ_3 sobre todos ellos.

Como era de esperar, el crecimiento de la $\langle \Delta_3 \rangle$ con L es mucho más lento para sistemas caóticos, que son los que presentan repulsión de niveles, que para sistemas integrables.

Es importante recordar en este punto que, según se señaló en la sección 3.2.2, no es de esperar un comportamiento universal de las fluctuaciones para ventanas de energía muy grandes. Es decir, que no podemos esperar predecir el comportamiento de las correlaciones de muy largo alcance: tendrá sentido comparar la $\langle \Delta_3 \rangle$ con la teoría sólo para valores suficientemente pequeños de L , que dependerán de cada sistema. Lo que ocurre cuando se estudian valores mayores de L fue descrito teóricamente por Berry (BERRY, 1985) y es un fenómeno denominado *saturación*: a partir de un cierto valor de L la Δ_3 se separa de la curva teórica (ya sea ésta la correspondiente a un sistema integrable o caótico) para tomar un valor constante.

3.4. El reescalado

Hemos visto que la densidad de estados de un sistema cuántico puede separarse en una parte suave, que daría un comportamiento medio propio del sistema clásico, y una parte fluctuante, que sería propia exclusivamente del sistema cuántico. Además, la parte fluctuante es universal (dentro de

un cierto rango: $\Delta E < \hbar/T_{min}$) y depende sólo de si el sistema clásico es integrable o caótico (ergódico), mientras que la parte suave depende de las propiedades individuales del mismo. Por tanto, para poder estudiar las características universales del espectro es necesario separar primero la parte suave de la densidad de estados. Este es el proceso que se conoce como reescalado.

El reescalado permite comparar las fluctuaciones de espectros de sistemas distintos o de distintas partes de un espectro, de otra manera esto no sería posible. Por ejemplo, si estamos estudiando los espectros (sin reescalar) de dos sistemas distintos en uno de los cuales la densidad de estados es mucho mayor que en el otro podemos pensar que el primero presenta menor repulsión de niveles que el segundo cuando, en cambio, esto puede deberse simplemente a que en el primero la parte suave de la densidad de estados es mayor que en el segundo, lo que no tiene realmente nada que ver con las propiedades de las fluctuaciones.

Lo que debemos buscar es un cambio de variable en la energía de manera que el nuevo espectro tenga una densidad media unidad, o lo que es lo mismo, un espaciamiento medio entre niveles igual a 1. Llamemos E_i a las variables antiguas (espectro sin reescalar) y ε_i a las nuevas (espectro reescalado), con $i = 1, 2, \dots, m$. En las variables antiguas la densidad acumulada de estados puede escribirse así:

$$m(E) = \overline{m}(E) + \tilde{m}(E), \quad (3.18)$$

donde $\overline{m}(E)$ es la parte suave de la densidad acumulada, definida a partir de la parte suave de la densidad de estados, según la ecuación (3.13), como

$$\overline{m}(E) = \int_{-\infty}^E dx \overline{g}(x), \quad (3.19)$$

lo que implica que

$$\overline{g}(E) = \frac{d\overline{m}(E)}{dE}. \quad (3.20)$$

Y $\tilde{m}(E)$ es la parte fluctuante.

Hasta ahora habíamos llamado m al número total de niveles del espectro. Por eso hemos elegido también esta letra para referirnos a la densidad acumulada, puesto que ésta representa también número de niveles, concretamente, es el número de niveles que hay hasta un cierto valor E de la energía. Por tanto, a partir de ahora cuando aparezca m como una función, con una energía como variable independiente, nos estaremos refiriendo a la densidad acumulada de estados, y cuando aparezca m como un número concreto nos referiremos al número total de niveles. Así no habrá posibilidad de confusión.

Utilizando el siguiente cambio de variable:

$$\varepsilon = \overline{m}(E), \quad (3.21)$$

podemos definir un nuevo espectro $\{\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_m\}$ sin más que aplicar el cambio a la secuencia de niveles antigua $\{E_1, E_2, \dots, E_m\}$:

$$\varepsilon_i = \overline{m}(E_i), \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (3.22)$$

Puesto que el número de niveles debe ser igual antes y después del cambio debe cumplirse que

$$\mu(\varepsilon) = m(E(\varepsilon)). \quad (3.23)$$

donde $\mu(\varepsilon)$ es la densidad acumulada en la nueva variable ε .

Por tanto, la ecuación (3.18) en la nueva variable se escribe

$$\mu(\varepsilon) = m(E(\varepsilon)) = \varepsilon + \tilde{m}(E(\varepsilon)) = \overline{\mu}(\varepsilon) + \tilde{\mu}(\varepsilon) \quad (3.24)$$

Llamaremos $\rho(\varepsilon)$ a la densidad de estados en la nueva variable, como ya señalamos en 3.3.1. La nueva densidad media de estados, según la ecuación (3.20), es

$$\overline{\rho}(\varepsilon) = \frac{d\overline{\mu}(\varepsilon)}{d\varepsilon} = 1, \quad (3.25)$$

que es exactamente lo que buscábamos.

Por otro lado, podemos obtener también la expresión de la nueva parte fluctuante de la densidad de estados, $\tilde{\rho}(\varepsilon)$:

$$\tilde{\rho}(\varepsilon) = \frac{d\tilde{\mu}(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{d\tilde{m}(E)}{dE} \frac{dE}{d\varepsilon} = \frac{\tilde{g}(E)}{\overline{g}(E)}. \quad (3.26)$$

Así, podemos decir que la nueva parte fluctuante es igual a la antigua normalizada y esto nos ayuda a comprender que, según hemos comentado, al reescalar sea posible comparar las fluctuaciones de sistemas distintos o de distintas partes de un espectro.

La figura 3.3 muestra gráficamente el procedimiento de reescalado.

El procedimiento de reescalado requiere entonces el conocimiento de la función $\overline{m}(E)$ y esta es la principal dificultad. En el caso de las matrices aleatorias sí conocemos una expresión para la densidad media (véase apéndice A), pero en la mayoría de los casos esto no es así, y la densidad media debe determinarse únicamente a partir de la información que proporciona el espectro. Los métodos utilizados en estos casos pueden ser locales o globales.

Los métodos locales son aquellos en los que se determina la densidad media de forma local en un entorno de cada nivel. El más simple es el llamado *reescalado local*, que supone la densidad media aproximadamente constante en una ventana de v niveles a cada lado de E_i :

$$\overline{g}_L(E_i) = \frac{2v}{E_{i+v} - E_{i-v}}. \quad (3.27)$$

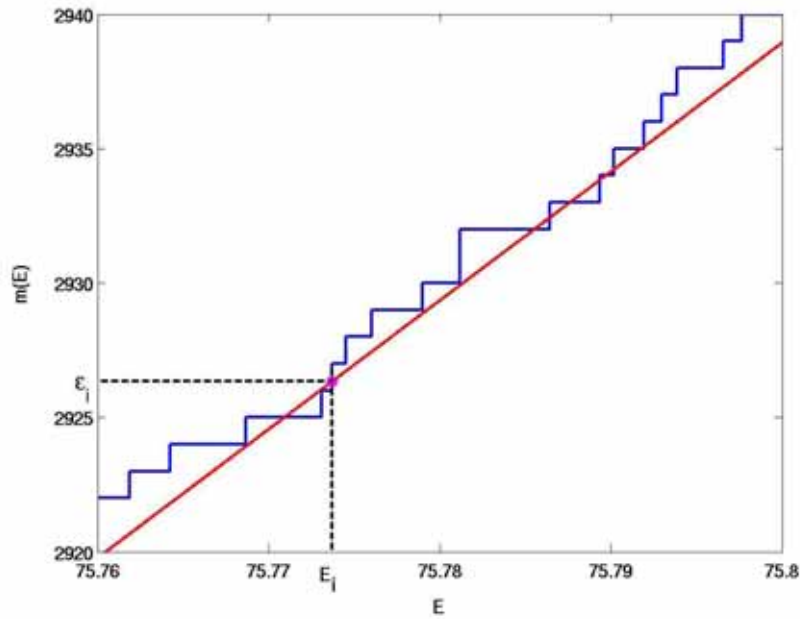


Figura 3.3: Procedimiento de reescalado. La densidad acumulada, $m(E)$, se representa en azul y la parte suave de ésta, $\bar{m}(E)$, en rojo. A cada nivel E_i le corresponde un nivel reescalado $\varepsilon_i = \bar{m}(E_i)$.

El problema de este tipo de métodos es que introducen una longitud característica (v en el caso del reescalado local) en un problema que carece de ella. Y esto produce efectos espurios en el análisis de las correlaciones, ya que introduce correlaciones de largo alcance ficticias (MOLINA *et al.*, 2002), lo que puede llevar a una interpretación errónea de la Δ_3 . Por ejemplo, puede hacer aparecer una *saturación* donde realmente no la hay.

Los reescalados locales, al modificar las correlaciones de largo alcance, pueden hacer que la Δ_3 sature, llevándonos a confundir este efecto con la saturación de Berry cuando en realidad es sólo consecuencia de un reescalado inadecuado. En resumen, estos métodos pueden llevarnos a conclusiones equivocadas en el análisis de las fluctuaciones espectrales y, por tanto, es más conveniente utilizar otro tipo de métodos.

En los métodos globales se calcula la densidad media utilizando el espectro completo. Lo que se hace habitualmente es intentar ajustar la densidad acumulada a una función suave. En algunos casos, se conoce una forma funcional que depende de un cierto número de parámetros y que se obtiene a partir de conocimientos teóricos del sistema. En otros casos, no se dispone siquiera de esta información y lo que suele hacerse es ajustar la densidad utilizando un conjunto de funciones ortonormales como, por ejemplo, los polinomios de

Chebyshev. En esta situación hay que tener mucho cuidado con el número de parámetros libres que se manejan, ya que si se utilizan demasiados parámetros en el ajuste puede que la densidad media obtenida esté incluyendo parte de las fluctuaciones.

Por tanto, el procedimiento de reescalado, a no ser que se conozca la expresión exacta de la densidad media, no es una tarea nada trivial y debe realizarse con sumo cuidado si se quiere conseguir un análisis correcto de las fluctuaciones espectrales.

3.5. El ruido $1/f$

Recientemente se ha propuesto un nuevo enfoque a la hora de abordar el problema del caos cuántico (RELAÑO *et al.*, 2002), basado en los métodos tradicionales del análisis de series temporales. El registro de la evolución temporal de una determinada magnitud constituye una serie temporal. Existen muchos fenómenos en la naturaleza que se estudian mediante series temporales; fenómenos tan dispares como los latidos del corazón, el flujo de un río o la actividad de las manchas solares (MANDELBROT, 1999).

Una de las técnicas más habituales en el análisis de series temporales es la transformación de Fourier, mediante la cual se obtiene la representación de la señal temporal en el espacio de frecuencias:

$$\tilde{f}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) e^{-i\omega t}, \quad (3.28)$$

donde $\tilde{f}(\omega)$ es la señal transformada y $f(t)$ es la señal original, que puede recuperarse a partir de la transformada mediante

$$f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{f}(\omega) e^{i\omega t}. \quad (3.29)$$

En lugar de analizar directamente la transformada de Fourier, que es compleja y en la práctica no resulta de utilidad, se define el *espectro de potencias*⁴ como el módulo al cuadrado de ésta:

$$P(\omega) = \left| \tilde{f}(\omega) \right|^2. \quad (3.30)$$

Cuando una señal es tal que su espectro de potencias verifica

$$\langle P(\omega) \rangle \propto \omega^{-\alpha}, \quad (3.31)$$

⁴Traducción literal del inglés *power spectrum*

donde el valor medio indica promedio sobre diversas realizaciones de un mismo suceso, se dice que la señal es autosimilar. Es decir, que la forma de la señal es invariante bajo cambios de escala:

$$\langle P(\lambda\omega) \rangle \propto \omega^{-\alpha}. \quad (3.32)$$

Se dice también que la señal presenta un ruido $1/f^\alpha$. El tipo de ruido más importante es el ruido $1/f$ ($\alpha = 1$), ya que aparece en una gran variedad de fenómenos en la naturaleza y no se conoce un mecanismo físico sencillo capaz de explicar esta ubicuidad.

Estas técnicas de análisis se han aplicado en el campo del caos cuántico tomando como punto de partida la asimilación del espectro cuántico a una serie temporal. Concretamente se parte de la secuencia de espaciamentos a primeros vecinos:

$$s_i = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, m-1. \quad (3.33)$$

A partir de la secuencia de espaciamentos se define un nuevo estadístico para caracterizar las fluctuaciones espectrales:

$$\delta_n = \sum_{i=1}^n (s_i - \langle s \rangle) = \sum_{i=1}^n w_i, \quad n = 1, \dots, m-1. \quad (3.34)$$

La cantidad w_i mide la separación del espaciamento s_i de su valor medio $\langle s \rangle = 1$ (recuérdese que se considera en todo momento el espectro reescalado). La δ_n mide, por tanto, la separación de la energía de excitación de su valor medio n :

$$\delta_n = \sum_{i=1}^n s_i - \sum_{i=1}^n \langle s \rangle = \varepsilon_{n+1} - \varepsilon_1 - n. \quad (3.35)$$

La función δ_n tiene una similitud formal con una serie temporal. Si comparamos el espectro de niveles de energía con el proceso de dispersión de una partícula, podemos considerar el índice i de los espaciamentos como un tiempo discreto y las fluctuaciones en los espaciamentos w_i como el análogo de los desplazamientos de la partícula entre la colisión en el instante i y la siguiente. La δ_n sería entonces el análogo del desplazamiento total de la partícula en el instante n .

Considerando entonces la δ_n como una señal temporal podemos calcular su transformada de Fourier y su espectro de potencias. Cuando se trata de una señal discreta, como es este caso, se define una transformada de Fourier discreta:

$$\widehat{\delta}_k = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_n \delta_n \exp\left(\frac{-2\pi i k n}{m}\right). \quad (3.36)$$

El espectro de potencias sería

$$P_k = \left| \widehat{\delta}_k \right|^2 \quad (3.37)$$

Y la existencia de un ruido $1/f^\alpha$ se expresa con

$$\langle P_k \rangle \propto \frac{1}{k^\alpha}, \quad (3.38)$$

Esta técnica de análisis se aplicó (RELAÑO *et al.*, 2002) al espectro de un sistema cuántico caótico (según los criterios establecidos hasta ahora), como es el núcleo atómico, y se encontró que éste presentaba un ruido $1/f$. Para comprobar que no se trataba de una propiedad particular de los núcleos atómicos se analizaron también las colectividades de matrices aleatorias GOE, GUE y GSE, obteniendo el mismo resultado. Esto llevó a proponer la siguiente conjetura: *El espectro de energía de los sistemas cuánticos caóticos está caracterizado por un ruido $1/f$.*

Un aspecto interesante de esta conjetura es que permite caracterizar el caos cuántico sin más información que el espectro de energía del sistema, es decir, sin necesidad de hacer referencia a las propiedades de otros sistemas, como ocurre con la conjetura BGS, que hace referencia al GOE. El ruido $1/f$ es universal para todos los sistemas cuánticos caóticos independientemente de sus simetrías. Además, incluye a este tipo de sistemas en una extensa clase de sistemas de muy diversos campos que presentan ruido $1/f$.

Por otro lado, los espectros de los sistemas cuánticos integrables vienen caracterizados por un ruido $1/f^2$, lo que es un resultado inmediato una vez establecida la analogía del espectro con una serie temporal. Según el resultado de Berry (BERRY and TABOR, 1977) la secuencia de espaciamentos a primeros vecinos del espectro de un sistema cuántico integrable se comporta como un conjunto de variables aleatorias independientes. La δ_n , por tanto, es en ese caso una suma de n variables aleatorias independientes y es un resultado conocido que el espectro de potencias de una señal como ésta presenta un ruido $1/f^2$. En (RELAÑO *et al.*, 2002) se analiza también una colectividad de matrices cuyos espectros están constituidos por niveles descorrelacionados (colectividad GDE) y se encuentra efectivamente un ruido $1/f^2$.

El cálculo teórico del espectro de potencias de la δ_n ha sido realizado recientemente en el marco de la teoría de matrices aleatorias (FALEIRO *et al.*, 2004), obteniéndose la siguiente expresión:

$$\langle P_k^\delta \rangle_\nu = \frac{m^2}{4\pi^2} \left\{ \frac{K_\nu \left(\frac{k}{m} \right) - 1}{k^2} + \frac{K_\nu \left(1 - \frac{k}{m} \right) - 1}{(m-k)^2} \right\} + \frac{1}{4 \operatorname{sen}^2 \left(\frac{\pi k}{m} \right)} + \alpha, \\ k = 1, 2, \dots, m-1, \quad m \gg 1, \quad \nu = 0, 1, 2, 4, \quad (3.39)$$

donde K_ν es el factor de forma espectral, distinto para cada colectividad, definido como

$$K_\nu(\tau) = \left\langle \left| \int d\varepsilon \tilde{\rho}(\varepsilon) e^{-i2\pi\varepsilon\tau} \right|^2 \right\rangle_\nu \quad (3.40)$$

y α vale 0 para sistemas integrables y $-1/12$ para sistemas caóticos.

Introduciendo en (3.39) las expresiones conocidas del factor de forma para los casos GOE, GUE y Poisson

$$K_{\nu=1}(\tau) = \begin{cases} 2\tau - \tau \log(1 + 2\tau), & \tau \leq 1 \\ 2 - \tau \log\left(\frac{2\tau + 1}{2\tau - 1}\right), & \tau \geq 1 \end{cases} \quad (3.41)$$

$$K_{\nu=2}(\tau) = \begin{cases} \tau, & \tau \leq 1 \\ 1, & \tau \geq 1 \end{cases} \quad (3.42)$$

$$K_{\nu=0}(\tau) = 1, \quad (3.43)$$

se obtienen (tomando el caso $\tau \leq 1$, ya que $k/m \leq 1$) expresiones explícitas de $\langle P_k^\delta \rangle$ para los tres casos. A frecuencias bajas, es decir, en el límite $k \ll m$ estas expresiones pueden aproximarse por

$$\langle P_k^\delta \rangle = \begin{cases} \frac{m}{2\pi^2 k}, & \nu = 1 \\ \frac{m}{4\pi^2 k}, & \nu = 2 \\ \frac{m}{4\pi^2 k^2}, & \nu = 0 \end{cases} \quad (3.44)$$

donde efectivamente encontramos los ruidos $1/f$ y $1/f^2$.

Además de la aplicación de técnicas de análisis desarrolladas en el campo de las series temporales, la analogía entre éstas y los espectros de energía permite también establecer analogías entre las propiedades de unos y otras.

Hemos visto que los espectros caóticos se caracterizan por presentar repulsión de niveles y que esto se manifiesta en una organización del espectro que le confiere una cierta estructura rígida. Es decir, que las desviaciones de los espaciamientos s_i de su valor medio $\langle s \rangle = 1$ son pequeñas y una desviación tiende a ser compensada por las desviaciones de los espaciamientos vecinos, de manera que es difícil encontrar en la secuencia una serie larga de espaciamientos todos por encima o por debajo del espaciamiento medio.

En una serie temporal, la *antipersistencia* es una propiedad que implica que una tendencia al aumento o al descenso en el pasado conduce a la tendencia opuesta en el futuro. Por tanto, la antipersistencia en las series temporales es análoga a la rigidez espectral en los espectros de energía. Un espectro muy rígido da lugar a un espectro de potencias que presenta ruido $1/f$. Por otro lado, es conocido que una serie temporal cuyo espectro de

potencias presenta ruido $1/f$ es muy antipersistente. Por tanto, la analogía entre ambas propiedades es consistente.

Capítulo 4

Sistemas de N partículas sin interacción

El caos cuántico se ha definido como el estudio cuántico de los sistemas que clásicamente son caóticos. Los sistemas de varias partículas idénticas, debido al carácter bosónico o fermiónico de las mismas, no tienen un límite clásico claro. Por tanto, el estudio cuántico de este tipo de sistemas no puede basarse en un estudio previo de su análogo clásico.

Afortunadamente, en el nivel de desarrollo actual de la disciplina del caos cuántico, disponemos ya de una serie de herramientas que nos permiten estudiar el grado de caos y complejidad del sistema a partir únicamente de su espectro cuántico de niveles de energía. Dichas herramientas han sido descritas en el capítulo anterior, en el cual se ha visto cómo el estudio de sistemas con análogo clásico ha permitido establecer criterios para distinguir el caos en mecánica cuántica a partir de los espectros de niveles de energía. Más concretamente, a partir de la estadística de las fluctuaciones espectrales. En este capítulo utilizaremos estas herramientas para estudiar sistemas de N partículas idénticas sin interacción.

Muy poca atención ha sido prestada a este tipo de sistemas en la literatura científica sobre caos cuántico. El núcleo atómico fue el primer sistema estudiado en el contexto del caos cuántico, el primero en el que se comprobaron las predicciones de la teoría de matrices aleatorias (HAQ *et al.*, 1982). El núcleo es el paradigma de sistema cuántico complejo. Es un sistema de muchas partículas en interacción que puede estudiarse teóricamente mediante el *modelo de capas*. Este modelo es la teoría más completa de que se dispone en la actualidad para describir el núcleo y sus excitaciones a baja energía. El hamiltoniano nuclear puede escribirse así:

$$H = \sum_{q=1}^A T(q) + \sum_{q < r}^A W(q, r), \quad (4.1)$$

donde T es la energía cinética, W representa una interacción a dos cuerpos y A es el número total de nucleones ($A=Z(\text{protones})+N(\text{neutrones})$).

El modelo de capas consiste en considerar una primera aproximación en la que cada nucleón se mueve independientemente en un potencial medio (obtenido a partir de un cálculo Hartree-Fock autoconsistente), que estaría creado por el resto de los nucleones; y se añade un término (*interacción residual*) para tener en cuenta las interacciones entre las partículas. El hamiltoniano puede escribirse entonces así:

$$H = \sum_{q=1}^A [T(q) + U(q)] + \left[\sum_{q<r}^A W(q, r) - \sum_{q=1}^A U(q) \right] = H_0 + H_1, \quad (4.2)$$

donde U representa el campo medio autoconsistente. La primera parte del hamiltoniano, H_0 , representa el movimiento de partículas independientes y la segunda parte, H_1 , es la interacción residual.

Se ha comprobado que es realmente la interacción residual la que introduce el caos en el sistema. En el campo medio los nucleones se mueven en órbitas de forma regular. El grado de caoticidad de los núcleos depende de diversos factores, el principal de los cuales es la relación entre la intensidad del campo medio y la intensidad de la interacción residual. Por tanto, la transición de la regularidad al caos en este sistema puede estudiarse mediante la introducción gradual de la interacción residual. Es decir, pasando gradualmente del hamiltoniano de partículas independientes, H_0 , que daría lugar a un espectro cuyas fluctuaciones siguen la estadística de Poisson, al hamiltoniano completo, $H = H_0 + H_1$, que daría lugar a un espectro cuyas fluctuaciones tienen las mismas propiedades que las predichas por la teoría de matrices aleatorias.

La mayoría de los problemas relacionados con caos cuántico en sistemas de varias partículas que pueden encontrarse en la literatura científica son de este tipo. Es decir, se trata de sistemas de partículas en interacción cuyo hamiltoniano puede expresarse como un término sin interacción, H_0 , más un término de interacción a dos cuerpos, H_1 . Ambos pueden escribirse en general en términos de operadores creación y destrucción de la siguiente manera:

$$H_0 = \sum_i e_i a_i^+ a_i, \quad (4.3)$$

$$H_1 = \sum_{i<j,k<l} U_{ij,kl} a_i^+ a_k^+ a_l a_j. \quad (4.4)$$

Los estados del sistema (estados de varias partículas) para el hamiltoniano sin interacción, construidos a partir de los estados de una partícula, $|I\rangle = a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ \dots a_{i_N}^+ |0\rangle$, son autoestados de H_0 :

$$H_0 |I\rangle = E_I^0 |I\rangle, \quad E_I^0 = \sum_i e_i n_i^{(I)}, \quad (4.5)$$

donde $n_i^{(I)} = \langle I | a_i^\dagger a_i | I \rangle$ son los números de ocupación de los niveles. Para encontrar los autoestados del sistema con interacción habría que diagonalizar el hamiltoniano completo.

Mediante hamiltonianos de este tipo se estudian sistemas como núcleos (ORMAND and BROGLIA, 1992; MOLINA *et al.*, 2000), átomos (FLAMBAUM *et al.*, 1999), electrones en metales-aislantes (SHKLOVSKII *et al.*, 1993) o sistemas fermiónicos en general (MONTAMBAUX *et al.*, 1993; JACQUOD and SHEPELYANSKY, 1997; SONG, 2000). En todos los casos se considera que el hamiltoniano sin interacción, H_0 , es regular. Es decir, el sistema cuántico regido por este hamiltoniano es integrable y, por tanto, su espectro presenta fluctuaciones que siguen la estadística de Poisson. Esto implica que, utilizando el modelo de la ecuación (4.3) las energías e_i de partícula independiente pueden escogerse aleatoriamente en un rango adecuado al problema.

Así, en estos trabajos suele estudiarse el tipo de fluctuaciones que presenta el sistema con el hamiltoniano completo, o bien distintos aspectos de la transición del hamiltoniano sin interacción al hamiltoniano completo, como por ejemplo, el valor crítico de la interacción para el cual puede considerarse que se ha pasado al régimen caótico.

En esta Parte I nos centraremos, en cambio, en los sistemas sin interacción, es decir, en la parte H_0 del hamiltoniano, y estudiaremos si este se comporta siempre de manera regular, como suele considerarse, o por el contrario pueden encontrarse distintos comportamientos a diferentes escalas de energía o para distintos números de partículas. Concretamente consideraremos N partículas idénticas (fermiones o bosones) que se mueven libremente en un campo medio, lo que da lugar a un hamiltoniano H del tipo (4.3), que puede escribirse también en términos de los autovalores y autoestados $\{e_i, |i\rangle \mid i \in \mathbb{N}\}$ del hamiltoniano de una partícula $h(q) = T(q) + U(q)$,

$$H = \sum_{i \in \mathbb{N}} e_i |i\rangle \langle i|, \quad (4.6)$$

donde el número de niveles de energía que puede ocupar cada partícula es infinito. Los niveles de partícula independiente $\{e_i\}$ se modelarán con espectros de teoría de matrices aleatorias, concretamente, GOE, GUE y Poisson.

Los niveles de energía del sistema pueden escribirse como

$$E_I = \sum_{i_j \in I} e_{i_j}, \quad (4.7)$$

es decir, que el sumatorio se extiende, a diferencia de (4.5) sólo a los niveles ocupados: $I = \{i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_N\}$ es la secuencia ordenada de niveles del espectro de partícula independiente ocupados en el estado $|I\rangle$ que, al tratarse de partículas idénticas, debe escribirse como

$$|I\rangle = C_I \widehat{U} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle, \quad (4.8)$$

donde \otimes indica el producto directo, C_I es un coeficiente de normalización y \hat{U} es el operador de antisimetrización (fermiones) o simetrización (bosones). Sus expresiones son las siguientes:

$$C_I = \begin{cases} 1, & \text{fermiones,} \\ \frac{1}{\sqrt{\prod n_j!}}, & \text{bosones,} \end{cases} \quad (4.9)$$

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P \phi^{t_P} \hat{P}. \quad (4.10)$$

donde n_j es el número de veces que el índice j aparece en I , P recorre las permutaciones de N símbolos, $\phi = -1(+1)$ para fermiones(bosones), t_P es el número de transposiciones básicas asociadas a la permutación P y \hat{P} es el operador de permutación. Para sistemas fermiónicos el operador de antisimetrización garantiza que sólo contribuyen configuraciones en las que los N niveles de partícula independiente ocupados son todos distintos.

4.1. Espectros de partícula independiente

En esta sección se explica cómo se generaron y reescalaron los tres tipos de espectro de partícula independiente utilizados en el trabajo.

4.1.1. Espectro GOE

La distribución de probabilidad de los elementos de una matriz GOE de dimensión m es la siguiente (apéndice A):

$$p(H_{11}, \dots, H_{mm}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{m/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{m(m-1)/4} \exp \left[-A \sum_{i,j} H_{ij}^2 \right], \quad (4.11)$$

donde la constante A puede expresarse en función de la varianza de los elementos diagonales o de los no diagonales:

$$\langle H_{ii}^2 \rangle = \frac{1}{2A}, \quad \langle H_{ij}^2 \rangle = \frac{1}{4A}. \quad (4.12)$$

En vista de las expresiones anteriores, una matriz GOE puede ser generada a partir de distribuciones gaussianas. Al tratarse de matrices simétricas basta generar la diagonal y la parte triangular superior o inferior (la otra se obtiene por simetría: $H_{ij} = H_{ji}$). La manera de generar una matriz GOE es, por tanto, la siguiente: se generan m números aleatorios con una distribución gaussiana, que serán los que formen la diagonal; y $m(m-1)/2$ números aleatorios con una distribución gaussiana cuya varianza sea la mitad de la utilizada

en la generación de la diagonal, que formarán la parte no diagonal. Una vez generada la matriz se diagonaliza y se obtiene así el espectro de niveles, cuyas fluctuaciones tendrán las propiedades descritas en la sección 3.3.1. En este trabajo se utilizó una matriz de dimensión 10.000, con $A = 1/2$.

El reescalado del espectro es sencillo en este caso: la expresión de la densidad media de estados es conocida (ley semicircular de Wigner, ecuación (A.11), apéndice A). No es necesario calcular la expresión de la densidad acumulada, que es más complicada, sino que suele utilizarse directamente

$$\bar{g}\left(\frac{E_i + E_{i+1}}{2}\right) = \frac{\bar{m}(E_{i+1}) - \bar{m}(E_i)}{E_{i+1} - E_i}, \quad (4.13)$$

que es una buena aproximación para la densidad media de estados entre los puntos E_i y E_{i+1} . Utilizando $\varepsilon_i = \bar{m}(E_i)$ se obtiene

$$s_i = \bar{g}\left(\frac{E_i + E_{i+1}}{2}\right) S_i, \quad (4.14)$$

donde $s_i = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i$ y $S_i = E_{i+1} - E_i$. Por tanto, siendo conocidos $\bar{g}(E)$ y el espectro $\{E_i\}_{i=1,\dots,m}$ podemos calcular los espaciamientos reescalados s_i , y las energías reescaladas mediante $\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_i + s_i$, tomando $\varepsilon_1 = 0$.

4.1.2. Espectro GUE

La distribución de probabilidad de los elementos de una matriz GUE de dimensión m viene dada por (apéndice A)

$$p(H_{11}, \dots, H_{mm}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{m/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{m(m-1)/2} \exp\left\{-A \sum_{i,j} [(H_R)_{ij}^2 + (H_I)_{ij}^2]\right\}, \quad (4.15)$$

donde $(H_R)_{ij}$ y $(H_I)_{ij}$ son las partes real e imaginaria, respectivamente, de H_{ij} . La constante A puede expresarse en función de la varianza de las partes real o imaginaria de los elementos diagonales o no diagonales:

$$\langle (H_R)_{ii}^2 \rangle = \frac{1}{2A}, \quad \langle (H_R)_{ij}^2 \rangle = \langle (H_I)_{ij}^2 \rangle = \frac{1}{4A}. \quad (4.16)$$

La parte imaginaria de los elementos diagonales es nula puesto que se trata de matrices hermíticas ($H_{ij} = H_{ji}^*$).

A la vista de las expresiones anteriores el procedimiento para generar una matriz GUE es prácticamente el mismo que para GOE, sólo que en este caso hay que generar el doble de números para la parte no diagonal: $m(m-1)/2$ para la parte real de los elementos y $m(m-1)/2$ para la parte imaginaria. Es decir, se generan m números aleatorios con una distribución

gausiana, que formarán la diagonal, y $m(m-1)$ números aleatorios con una distribución gaussiana cuya varianza sea la mitad de la utilizada en la generación de la diagonal, que serán las partes real e imaginaria de los elementos de la parte no diagonal superior o inferior (la otra se obtiene por simetría: $H_{ij} = (H_R)_{ij} + i(H_I)_{ij}$, $H_{ji} = (H_R)_{ij} - i(H_I)_{ij}$). En este caso se utilizó una matriz de dimensión 7.000.

El reescalado es también sencillo. La densidad media de estados es también la ley semicircular de Wigner con los parámetros adecuados (ecuación (A.11), apéndice A).

4.1.3. Espectro Poisson

Para obtener un espectro de niveles descorrelacionados basta con generar una secuencia de números aleatorios con distribución uniforme. Dicho espectro tendrá una densidad media de estados constante dada por

$$\bar{g}(E) = \frac{m}{a-b}, \quad (4.17)$$

donde a y b son los extremos del intervalo en el cual se generan los niveles y m es el número de niveles generados. Por tanto, el reescalado en este caso es también muy sencillo. Para obtener un espectro con densidad media unidad simplemente hay que multiplicar toda la secuencia de niveles por la densidad (4.17).

En nuestro caso generamos una secuencia de $m = 10.000$ niveles entre $a = -200$ y $b = 200$.

En realidad tanto los parámetros a y b como el parámetro A en los casos del GOE y el GUE no tienen relevancia, ya que únicamente influyen en la forma de la densidad media, pero precisamente al reescalar los espectros eliminamos toda dependencia de la parte suave de la densidad. Por tanto, la elección de estos parámetros no va a influir para nada en los resultados del estudio de las fluctuaciones.

4.2. El espectro del sistema de N partículas

Una vez generado el espectro de partícula independiente, el siguiente paso a llevar a cabo es la obtención del espectro del sistema de N partículas. Las energías del espectro del sistema serán las correspondientes a las distintas configuraciones de las N partículas en el espectro de partícula independiente:

$$E_I = \sum_{i_j \in I} e_{i_j}, \quad (4.18)$$

El espectro de partícula independiente está formado en principio por un número infinito de niveles de energía. A partir de tal espectro construiríamos un espectro del sistema que constaría también de infinitos niveles. Pero lógicamente un espectro infinito no es manejable en la práctica. Calcularemos, por tanto, sólo un número finito de niveles del sistema, los M primeros niveles.

Para ello podríamos tomar un número finito m de niveles del espectro de partícula independiente y calcular todas las configuraciones posibles de N partículas en dichos niveles. Sin embargo, mediante este procedimiento no conseguiríamos nuestro objetivo sino que obtendríamos una secuencia incompleta de niveles del espectro del sistema. Esto puede entenderse con un ejemplo sencillo.

Consideremos un sistema de 2 fermiones que vamos a distribuir en $m = 4$ niveles equiespaciados, cuyas energías elegimos por sencillez como $e_i = i$. En la figura 4.1 se representan las configuraciones posibles de las 2 partículas en el espectro de partícula independiente (en rojo) junto con el espectro de niveles del sistema obtenido. Ahora consideremos la configuración en que una de las partículas está en el primer nivel y la otra en el quinto (representada en verde en la figura). La energía de esta configuración vale 6 y, sin embargo, no se está teniendo en cuenta, mientras que sí se tiene en cuenta una configuración de energía mayor (la 6: niveles 3º y 4º ocupados). Es decir, que hemos perdido un nivel en el espectro del sistema: los $M = 6$ niveles calculados mediante este procedimiento no son los seis primeros niveles sino que son los cinco primeros y el séptimo.

Este problema se soluciona fijando un límite a la energía, que vendrá dado por el número m de niveles considerados: si no consideramos la configuración en que $N - 1$ partículas se encuentran en los $N - 1$ primeros niveles y una en el nivel $m + 1$ no debemos considerar tampoco las configuraciones cuya energía sea mayor o igual a ésta

$$E_{max} = \sum_{i=1}^{N-1} e_i + e_{m+1}. \quad (4.19)$$

Así obtenemos una secuencia de niveles completa del espectro del sistema de N partículas. De otro modo el análisis de las fluctuaciones no podría llevarse a cabo correctamente.

Por último, señalar que en el caso de sistemas en interacción el problema es más complicado, ya que no puede encontrarse fácilmente el valor de la energía límite a partir del cual deben descartarse el resto de configuraciones. Por tanto, en este tipo de cálculos suelen considerarse todas las configuraciones posibles de las N partículas en los m primeros niveles o espacio de valencia. Estas configuraciones se denominan *estados del modelo*, y las que

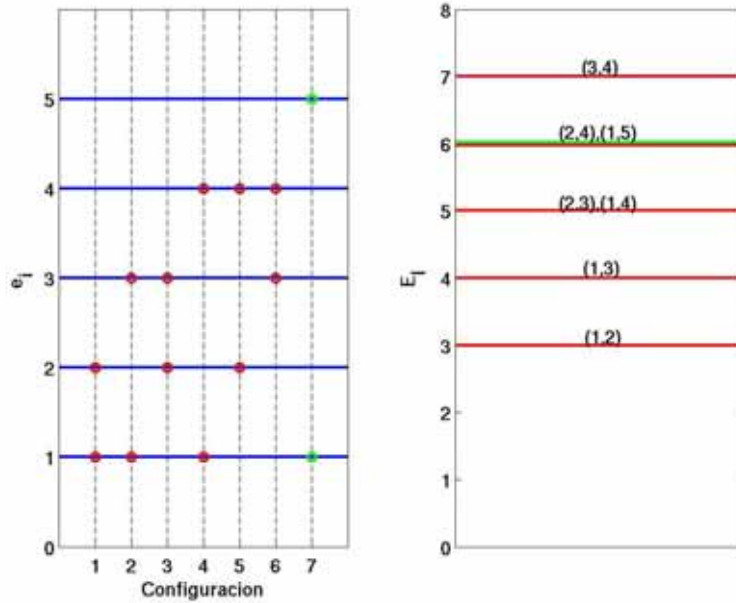


Figura 4.1: Configuraciones posibles de 2 partículas en un espectro de partícula independiente (izquierda) y espectro del sistema de 2 partículas (derecha).

deberían estar (sus energías pertenecen a la ventana formada por los estados del modelo) pero no aparecen porque alguno de los niveles de partícula independiente que las constituyen queda fuera del espacio de valencia se denominan *estados intrusos*.

En un espectro calculado de esta manera cuanto mayor es la energía más estados intrusos faltan y menos se parece, por tanto, la densidad obtenida a la real. Como ejemplo, se compara en la figura 4.2 la densidad de estados de un sistema de 3 fermiones sin interacción, calculada según el método descrito anteriormente, con las densidades obtenidas a partir de espacios de valencia de 70, 110, 150 y 200 niveles. Se comprueba que estas últimas coinciden con la real sólo hasta un cierto valor de la energía, que indica el momento a partir del cual los estados intrusos empiezan a tener importancia.

4.3. El reescalado

El paso previo a los análisis espectrales, según hemos visto en la sección 3.4, es el reescalado del espectro. Para ello necesitamos una expresión de la parte suave de la densidad acumulada de estados, $\overline{m}(E)$, ya que las nuevas

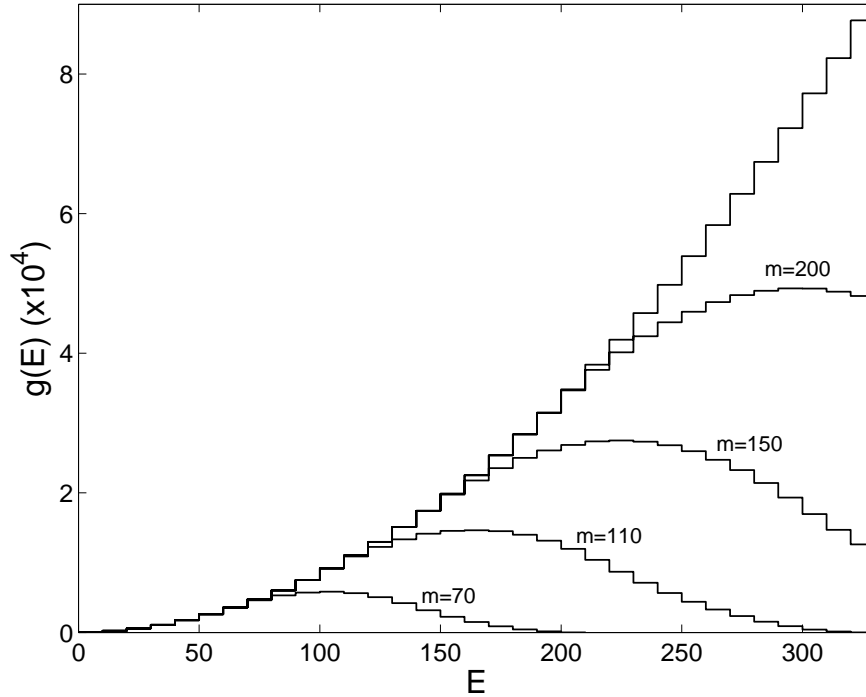


Figura 4.2: Densidad de estados de un sistema de 3 fermiones comparada con la obtenida en espacios de valencia finitos de 70, 110, 150 y 200 niveles.

energías reescaladas vienen dadas por

$$\varepsilon_i = \overline{m}(E_i). \quad (4.20)$$

En la sección 3.4 vimos que podían ocurrir varias cosas: o bien la expresión es conocida (las menos de las veces), o bien se conoce una forma funcional que depende de una serie de parámetros, o bien es totalmente desconocida. En nuestro caso intentaremos calcular una expresión para la densidad de estados del sistema de N partículas en función de la densidad de estados de una partícula, que es conocida (espectro GOE, GUE o Poisson).

4.3.1. Cálculo de la densidad de estados del sistema

Consideremos el sistema de una sola partícula cuyos autovalores y autoestados son

$$\{e_i, |i\rangle\}_{i \in \mathbb{N}} \quad (4.21)$$

Consideramos que los autoestados forman una base ortonormal:

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} \quad (4.22)$$

$$\sum_i |i\rangle \langle i| = \mathbb{I}. \quad (4.23)$$

Los estados del sistema de N partículas pueden escribirse como productos directos de los estados de una partícula:

$$|I_p\rangle = |i_1, i_2, \dots, i_N\rangle \equiv |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle. \quad (4.24)$$

Los estados con la simetría adecuada para fermiones o bosones y normalizados correctamente son

$$|I\rangle = C_I \widehat{\mathcal{U}} |I_p\rangle, \quad (4.25)$$

donde el factor de normalización C_I y el operador de (anti)simetrización $\widehat{\mathcal{U}}$ vienen dados por (4.9) y (4.10), respectivamente.

La densidad de estados puede escribirse como

$$g^{(N)}(E) = \sum_I \delta(E - E_I) = \sum_I \langle I | \delta(E - \widehat{H}) | I \rangle = \sum_I C_I^2 \langle I_p | \widehat{\mathcal{U}}^\dagger \delta(E - \widehat{H}) \widehat{\mathcal{U}} | I_p \rangle. \quad (4.26)$$

Teniendo en cuenta

$$[\widehat{H}, \widehat{\mathcal{U}}] = 0, \quad \widehat{\mathcal{U}}^\dagger \widehat{\mathcal{U}} = \sum_P \phi^{t_P} \widehat{\mathcal{P}}, \quad (4.27)$$

la densidad queda

$$\begin{aligned} g^{(N)}(E) &= \sum_I C_I^2 \left\langle I_p \left| \sum_P \phi^{t_P} \widehat{\mathcal{P}} \delta(E - \widehat{H}) \right| I_p \right\rangle \\ &= \sum_I C_I^2 \sum_P \phi^{t_P} \langle I_p | \widehat{\mathcal{P}} | I_p \rangle \delta(E - E_I). \end{aligned} \quad (4.28)$$

Y desarrollando los estados $|I_p\rangle$ según (4.24):

$$\begin{aligned} g^{(N)}(E) &= \sum_I C_I^2 \sum_P \phi^{t_P} \langle i_{p_1}, \dots, i_{p_N} | i_1, \dots, i_N \rangle \delta \left(E - \sum_{j=1}^N e_{i_j} \right) \\ &= \sum_I C_I^2 \sum_P \phi^{t_P} \left(\prod_{j=1}^N \delta_{i_j i_{p_j}} \right) \delta \left(E - \sum_{j=1}^N e_{i_j} \right), \end{aligned} \quad (4.29)$$

donde p_1, p_2, \dots, p_N representa una determinada permutación de $1, 2, \dots, N$ y en la segunda igualdad se ha utilizado la ecuación (4.22).

Recordemos que $I = \{i_1 \leq i_2 \leq \dots \leq i_N\}$, lo que significa que en el sumatorio \sum_I los índices i_j no toman cualquier valor sino que están restringidos. Esta restricción puede eliminarse añadiendo los factores adecuados y así

$$g^{(N)}(E) = \frac{1}{N!} \sum_{\{i_j \in \mathbb{N}\}} \sum_P \phi^{t_p} \left(\prod_{j=1}^N \delta_{i_j i_{p_j}}^c \right) \delta \left(E - \sum_{j=1}^N e_{i_j} \right). \quad (4.30)$$

Particularizando para los casos de 2, 3 y 4 partículas se llega a las siguientes expresiones (apéndice B):

$$g^{(2)}(E) = \frac{1}{2} \rho(E) * \rho(E) + \phi \frac{1}{4} \rho(E/2) \quad (4.31)$$

$$g^{(3)}(E) = \frac{1}{3!} \left[\rho(E) * \rho(E) * \rho(E) + \phi \frac{3}{2} \rho(E/2) * \rho(E) + \frac{2}{3} \rho(E/3) \right] \quad (4.32)$$

$$g^{(4)}(E) = \frac{1}{4!} \left[\rho(E) * \rho(E) * \rho(E) * \rho(E) + \phi \frac{6}{2} \rho(E/2) * \rho(E) * \rho(E) + \frac{8}{3} \rho(E/3) * \rho(E) + \frac{3}{4} \rho(E/2) * \rho(E/2) + \phi \frac{6}{4} \rho(E/4) \right], \quad (4.33)$$

donde $*$ indica producto de convolución. Para poder escribir las densidades como función de la densidad de una partícula $\rho(E)$ se ha utilizado la siguiente propiedad:

$$\sum_{i,j} \delta(E - e_i - e_j) = \rho(E) * \rho(E), \quad (4.34)$$

Observando los coeficientes de cada término en (4.31), (4.32) y (4.33) y la forma en que se calculan (apéndice B) es posible deducir una expresión general de la densidad de estados en términos de productos de convolución de la densidad de una partícula. En el apéndice B se detalla este cálculo, cuyo resultado es

$$g^{(N)}(E) = \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N}} \left(\prod_{r=1}^N \frac{\phi^{(r+1)a_r}}{r^{2a_r} a_r!} \right) \left(* \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \rho(E/r) \right), \quad (4.35)$$

donde el sumatorio en permutaciones se ha reducido a un sumatorio en “clases” de permutaciones, caracterizadas por los conjuntos $\{a_r\}$, que provienen de la descomposición en ciclos de las mismas; y el sumatorio de las δ de Dirac lleva a la parte de productos de convolución de la densidad de una partícula.

4.3.2. Parte suave de la densidad de estados del sistema

La parte suave de la densidad de estados se calcula como el promedio de ésta sobre la colectividad. En la sección anterior se ha obtenido una expresión

de la densidad de estados para varias partículas $g^{(N)}(E)$ como función de la densidad de estados de una partícula $\rho(E)$. Por tanto, en primer lugar definimos la densidad de una partícula que vamos a utilizar. Los espectros de partícula independiente que usaremos, como ya se ha señalado, serán tipo GOE, GUE y Poisson. Pero antes de calcular el espectro del sistema realizaremos el reescalado del espectro de una partícula, es decir, que la densidad media del mismo será igual a 1. Además, la densidad estará definida en el eje positivo de energías. Por tanto:

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \tilde{\rho}(E) = \begin{cases} 0, & E < 0 \\ 1 + \tilde{\rho}(E), & E \geq 0 \end{cases} \quad (4.36)$$

En este caso haremos una excepción a la notación que venimos empleando hasta ahora. A pesar de que el espectro de una partícula está reescalado utilizaremos E como variable en lugar de ε . Debemos utilizar E como variable para la densidad de estados de N partículas, ya que el espectro en este caso está todavía sin reescalar. Por tanto, las funciones que aparezcan en la expresión de la densidad de N partículas tendrán como variable E ; y como la densidad de una partícula $\rho(E)$ aparece en esta expresión, en este caso E debe interpretarse como la variable de la energía del sistema de N partículas y no como la energía sin reescalar del sistema de una partícula.

Caso $N = 2$

En la sección anterior obtuvimos para la densidad de estados del sistema de dos partículas la siguiente expresión:

$$g^{(2)}(E) = \frac{1}{2} \rho(E) * \rho(E) + \phi \frac{1}{4} \rho(E/2). \quad (4.37)$$

Sustituyendo en ella la expresión de $\rho(E)$ (4.36) se obtiene

$$\begin{aligned} g^{(2)}(E) &= \frac{1}{2} [\bar{\rho}(E) + \tilde{\rho}(E)] * [\bar{\rho}(E) + \tilde{\rho}(E)] + \phi \frac{1}{4} [\bar{\rho}(E/2) + \tilde{\rho}(E/2)] \\ &= \frac{1}{2} \bar{\rho}(E) * \bar{\rho}(E) + \phi \frac{1}{4} \bar{\rho}(E/2) + \frac{1}{2} \tilde{\rho}(E) * \tilde{\rho}(E) + \bar{\rho}(E) * \tilde{\rho}(E) \\ &\quad + \phi \frac{1}{4} \tilde{\rho}(E/2). \end{aligned} \quad (4.38)$$

En la última igualdad debemos identificar la parte suave y la parte fluctuante de $g^{(2)}(E)$. Podríamos pensar que la parte suave son sólo los dos primeros sumandos, es decir,

$$\overline{g^{(2)}}(E) = \frac{1}{2} \bar{\rho}(E) * \bar{\rho}(E) + \phi \frac{1}{4} \bar{\rho}(E/2) = \frac{1}{2} E + \phi \frac{1}{4}, \quad E \geq 0. \quad (4.39)$$

Para $E < 0$ se obtiene $\overline{g^{(2)}}(E) = 0$, y lo mismo sucede con el resto de valores de N . Por tanto, todas las expresiones de $\overline{g^{(N)}}(E)$ que aparezcan a partir de ahora serán también para $E \geq 0$.

Sin embargo, a pesar de que por definición las fluctuaciones promedian a cero, el tercer sumando contiene un producto de dos partes fluctuantes, $\tilde{\rho}(E) * \tilde{\rho}(E)$, que puede dar una contribución no nula a la parte suave. De hecho, así es, como se demuestra en el apéndice B, calculando la parte suave de $\overline{g^{(2)}}(E)$ directamente como el promedio de la expresión (4.37):

$$\overline{g^{(2)}}(E) = \frac{1}{2} \overline{\rho(E) * \rho(E)} + \phi \frac{1}{4} \overline{\rho(E/2)} \quad (4.40)$$

Una vez calculada la expresión explícita se particulariza para los casos de espectros GUE, GOE y Poisson, obteniendo las siguientes expresiones:

$$\overline{g^{(2)}}_{\text{GUE}}(E) = \frac{E}{2} + \phi \frac{1}{4} + \frac{1 - \cos(2\pi E) - 2\pi E \text{si}(2\pi E)}{4\pi^2 E}, \quad (4.41)$$

$$\overline{g^{(2)}}_{\text{GOE}}(E) = \frac{E}{2} + \phi \frac{1}{4} + \frac{1 + \text{si}(\pi E) \text{sen}(\pi E) - \cos(2\pi E) - 2\pi E \text{si}(2\pi E)}{2\pi^2 E}, \quad (4.42)$$

$$\overline{g^{(2)}}_{\text{Poisson}}(E) = \frac{E}{2} + \phi \frac{1}{4} + \frac{1}{4}, \quad (4.43)$$

donde *si* es la función seno integral definida en el apéndice B. En las tres podemos identificar la parte proveniente de la parte suave de $\rho(E)$, que coincide con la ecuación (4.39). En el caso de Poisson la parte proveniente de la parte fluctuante de $\rho(E)$ es muy sencilla, es una constante (1/4). Sin embargo, en los otros dos casos (GUE y GOE) es una función bastante complicada. Si pudiésemos olvidarnos de esa parte la densidad de dos partículas sería simplemente una función lineal en E , y la densidad acumulada, que es la que utilizamos para reescalar, sería una función cuadrática:

$$\overline{m^{(2)}}(E) = \int_0^E dx \overline{g^{(2)}}(x) = \int_0^E dx \left(\frac{E}{2} + \phi \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) = \frac{E^2}{4} + \phi \frac{E}{4} + \frac{E}{4}, \quad (4.44)$$

que es mucho más sencilla. A continuación veremos que la densidad se complica mucho al aumentar el número de partículas e intentaremos encontrar argumentos que nos permitan simplificar los cálculos.

En este caso de dos partículas, que será el único en que realicemos el cálculo exacto de la parte suave de la densidad, podemos estudiar la importancia relativa de las correcciones a la primera aproximación (parte proveniente de la parte suave de $\rho(E)$) en las expresiones (4.41), (4.42) y (4.43). En primer lugar podemos representar las tres expresiones junto con la primera aproximación (ecuación (4.39)). En la figura 4.3 se muestra dicha representación

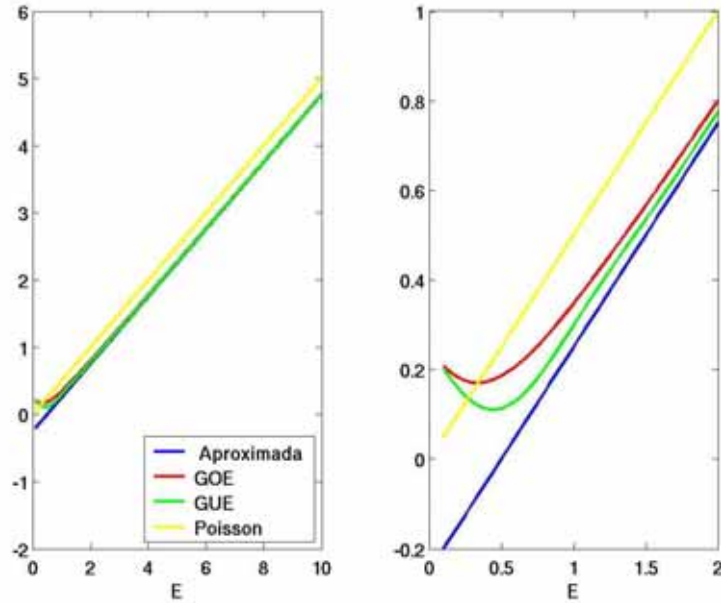


Figura 4.3: En el panel de la izquierda, parte suave de la densidad de estados del sistema de 2 partículas: primera aproximación utilizando sólo $\bar{\rho}(E)$ y curvas exactas para GOE, GUE y Poisson. En el de la derecha una ampliación de la región de energía más baja.

en el rango de energía $[0, 10]$ (izquierda) y una ampliación de la misma en el intervalo $[0, 2]$ (derecha). Se observa claramente que, excepto a energías muy bajas, todas las curvas son muy parecidas ¹. De hecho, calculando la diferencia entre la curva correspondiente al GOE o al GUE y la correspondiente a la aproximación se obtiene que para $E = 10$ ésta ya es del orden de 10^{-3} .

Por otro lado, podemos calcular los desarrollos asintóticos de las correcciones, $\overline{g_c^{(2)}}(E)$, obteniendo

$$\overline{g_c^{(2)}}(E) = \frac{\text{sen}^2(\pi E)}{\pi^2 E} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\pi^2 E^2}\right) \quad (4.45)$$

para el caso del GUE, y

$$\overline{g_c^{(2)}}(E) = \frac{1}{\pi^2 E} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\pi^3 E^2}\right) \quad (4.46)$$

¹La curva de Poisson está más separada, ya que tiene una diferencia de $1/4$ con la aproximación. Pero esto no es importante, ya que en adelante veremos que la parte de las densidades de estados que nos interesa eliminar es aquella que no pueda escribirse como un polinomio de grado $N - 1$

para el del GOE. Es decir, que, comparadas con la aproximación de la ecuación (4.39), las correcciones son muy pequeñas para energía suficientemente alta.

Lo único importante a tener en cuenta es que nos encontremos en una zona del espectro donde la energía no sea muy baja, ya que las correcciones podrían ser importantes. Pero según veremos más adelante, una vez construido el espectro del sistema de N partículas eliminaremos un cierto número de niveles del principio de la secuencia, de manera que la energía del espectro analizado no será muy baja.

Caso $N = 3$

Para la densidad de estados de tres partículas obtuvimos la siguiente expresión:

$$g^{(3)}(E) = \frac{1}{6} \rho(E) * \rho(E) * \rho(E) + \phi \frac{1}{4} \rho(E/2) * \rho(E) + \frac{1}{9} \rho(E/3). \quad (4.47)$$

La parte suave es, por tanto:

$$\overline{g^{(3)}}(E) = \frac{1}{6} \overline{\rho(E) * \rho(E) * \rho(E)} + \phi \frac{1}{4} \overline{\rho(E/2) * \rho(E)} + \frac{1}{9} \overline{\rho(E/3)}. \quad (4.48)$$

Si consideramos, como en el caso $N = 2$, una primera aproximación en la que la parte suave de $g^{(3)}(E)$ viene dada sólo por las contribuciones de la parte suave de $\rho(E)$ tendríamos (apéndice B)

$$\overline{g^{(3)}}(E) = \frac{E^2}{12} + \phi \frac{1}{4} E + \frac{1}{9}. \quad (4.49)$$

La densidad acumulada sería entonces

$$\overline{m^{(3)}}(E) = \int_0^E dx \overline{g^{(3)}}(x) = \int_0^E dx \left(\frac{x^2}{12} + \phi \frac{1}{4} x + \frac{1}{9} \right) \quad (4.50)$$

$$= \frac{E^3}{36} + \phi \frac{1}{8} E^2 + \frac{1}{9} E. \quad (4.51)$$

Considerando el cálculo completo de la ecuación (4.48) puede verse (apéndice B) que, salvo el caso del espectro tipo Poisson, que es de nuevo el más sencillo,

$$\overline{g^{(3)}}(E) = \frac{E^2}{12} + \frac{E}{4}(1 + \phi) + \frac{1}{6}(1 + \phi). \quad (4.52)$$

los demás implican la integración de expresiones tan complicadas que el cálculo exacto no es viable. En el caso del GOE las funciones que se requieren ni siquiera pueden encontrarse en la literatura en forma explícita y manejable. Es evidente que al aumentar el número de partículas los cálculos se van

complicando cada vez más. Sería bueno poder realizar algún tipo de simplificación que nos permitiera llegar a una expresión aproximada de la densidad evitando cálculos complicados y sin cometer un error muy grande respecto al cálculo exacto.

En primer lugar vemos que la densidad puede acotarse superiormente, según se detalla en el apéndice B, por un polinomio de grado 2,

$$\overline{g^{(3)}}(E) \leq \frac{E^2}{4} + E \left(\frac{1}{4} + \phi \frac{1}{4} \right) + \frac{1}{6} + \phi \frac{1}{9}. \quad (4.53)$$

Es decir, tenemos hasta ahora que, despreciando la contribución de la parte fluctuante, la parte suave de la densidad de 3 partículas es un polinomio de grado 2 y que, teniendo en cuenta todas las contribuciones, la densidad queda acotada superiormente por un polinomio de grado 2.

Además, un cálculo aproximado nos permite obtener la siguiente expresión asintótica (apéndice B)

$$\overline{g^{(3)}}(E) \simeq \frac{E^2}{12} - \frac{E}{4} + \frac{1}{2\pi^2\beta} [\log(2\pi E) + \xi_\beta] + \frac{1}{9} + O(1/E), \quad (4.54)$$

donde ξ_β es una constante distinta para cada colectividad ($\beta = 1$ para GOE, $\beta = 2$ para GUE). Puede verse que el término dominante a energías altas es un polinomio de grado 2. Refiriéndonos a la densidad acumulada, que es la que utilizamos para el reescalado, tendríamos un polinomio de grado 3. Así, todo apunta a que no cometeríamos mucho error si realizamos el reescalado ajustando la densidad acumulada del sistema de tres partículas a un polinomio de grado 3:

$$\overline{m^{(3)}}(E) = a_3 E^3 + a_2 E^2 + a_1 E + a_0. \quad (4.55)$$

De cualquier manera, además de estos argumentos teóricos, podemos comprobar numéricamente la bondad del ajuste a una función de este tipo al realizar el reescalado.

Caso general

La cota encontrada para la parte suave de la densidad en el caso de 3 partículas, (4.53), puede generalizarse para N partículas. Expresando los productos de densidades de una partícula en términos de funciones de correlación y utilizando que estas están siempre acotadas por constantes, $0 \leq R_k(x_1, \dots, x_k) \leq \mathcal{M}_k$, $\forall x_i$, se llega a (apéndice B)

$$\overline{g}(E) \leq \frac{1}{N!} \sum_{p=1}^N (-1)^{N-p} S_N^{(p)} \left(\sum_{k=1}^p \mathcal{M}_k \mathcal{S}_p^{(k)} \right) \frac{E^{p-1}}{(p-1)!}, \quad (4.56)$$

donde $S_N^{(p)}$ y $\mathcal{S}_p^{(k)}$ son los números de Stirling de primera y segunda clase respectivamente (ABRAMOWITZ and STEGUN, 1972). La expresión concreta es complicada de obtener, pero la idea de que la densidad de N partículas está acotada por un polinomio de grado $N - 1$ se comprende fácilmente teniendo en cuenta la expresión (4.35) para la densidad. En ella se observa que el máximo número de productos de convolución que puede haber en un término es $N - 1$, por tanto, al acotar los integrandos con constantes el cálculo de $N - 1$ integrales da como resultado un polinomio de grado $N - 1$.

Tenemos entonces la seguridad de que la densidad acumulada del sistema de N partículas no crece más rápido que un polinomio de grado N . Además, hemos visto que es un polinomio de grado N en primera aproximación, y hemos demostrado en varios casos que a energías altas la corrección es mucho menos importante que el polinomio. Por tanto, esperamos no cometer un gran error reescalando el espectro del sistema de N partículas mediante un ajuste de la densidad acumulada del mismo a un polinomio de grado N .

Realizaremos el reescalado de esta manera y comprobaremos en los distintos casos (distintos números de partículas ($N = 2 - 6$) y distintos tipos de espectro (GOE, GUE y Poisson)) cómo de buenos son los ajustes realizados y si podemos entonces considerar que el reescalado es razonablemente correcto.

4.4. Estudio de las propiedades de las fluctuaciones del espectro del sistema

En esta sección se exponen los resultados del estudio de las fluctuaciones de los distintos espectros de sistemas de N partículas en términos de los estadísticos descritos en las secciones 3.3.1 y 3.5.

En primer lugar, se expone un estudio detallado para el caso de fermiones. Los bosones se tratan al final en una sección más corta, con el fin de no repetir de nuevo todo el estudio, ya que los resultados y conclusiones son exactamente los mismos que para fermiones.

Comenzamos en la siguiente sección con el estudio de la evolución con el número de partículas, tomando los espectros a alta energía para tener la seguridad de que el reescalado es lo más correcto posible, según se ha visto en la sección anterior. Y posponemos el análisis de la región de baja energía para la siguiente, en la que se realiza un estudio de la evolución con la energía.

4.4.1. Evolución con el número de partículas

De ahora en adelante trabajaremos con 15 espectros: para cada uno de los 3 espectros de partícula independiente generamos 5 espectros de sistemas de N partículas, con $N = 2 - 6$. La notación será la siguiente: E.p.i.(espectro

	GOE				
N	2	3	4	5	6
m	2003	330	153	103	83
M	1.002.878	1.009.585	1.011.440	1.023.002	1.059.512
	GUE				
N	2	3	4	5	6
m	2001	328	152	103	84
M	1.001.347	1.001.139	1.020.148	1.012.444	1.010.883
	Poisson				
N	2	3	4	5	6
m	1995	312	142	106	90
M	1.005.805	1.002.614	1.017.184	1.018.528	1.017.054

Tabla 4.1: Número de partículas, N , número de niveles del espectro de partícula independiente, m , y dimensión del espectro del sistema, M , de los 15 casos estudiados.

de partícula independiente)– N (número de partículas). Así, por ejemplo, con GOE-2 nos referiremos al sistema de 2 partículas cuyo espectro de partícula independiente es de tipo GOE.

Para construir cada uno de los espectros del sistema se toma un número m de niveles del espectro de partícula independiente tal que el número de niveles del espectro del sistema de N partículas sea aproximadamente $M \simeq 1.000.000$. De esta manera tenemos un número suficientemente grande de niveles para que al realizar promedios espectrales la estadística sea significativa.

En la tabla 4.1 se muestran los números m de niveles utilizados para generar cada uno de los 15 espectros y las dimensiones M de los espectros obtenidos. A continuación se eliminan los primeros niveles de cada espectro de manera que todos ellos tengan la misma dimensión, $M = 1.000.000$.

El siguiente paso, previo al análisis de las fluctuaciones, es el reescalado del espectro. Dado que el estudio de los estadísticos se realiza en términos de promedios espectrales, en primer lugar debemos dividir el espectro en intervalos. El tamaño de dichos intervalos debe ser lo suficientemente grande como para tener la seguridad de que al reescalar estamos ajustando sólo la parte suave de la densidad, ya que si es demasiado pequeño puede que el ajuste incluya parte de las fluctuaciones.

Además, es conveniente realizar el reescalado en intervalos más grandes que los utilizados para los promedios espectrales, ya que el mal comportamiento de los polinomios de ajuste en los bordes de los intervalos puede dar lugar a efectos espurios en los estadísticos. Así pues, en primer lugar dividi-

remos el espectro de 1.000.000 de niveles en 10 intervalos de 100.000 niveles para realizar el reescalado y después dividiremos cada uno de ellos en 10 intervalos de 10.000 niveles. De esta manera tenemos 100 intervalos de 10.000 niveles sobre los que realizar los promedios espectrales y evitamos en gran medida los efectos de los bordes.

Según se explicó en la sección 4.3.2, puede considerarse en primera aproximación que la parte suave de la densidad acumulada del sistema de N partículas es un polinomio de grado N ,

$$\overline{m}(N, \boldsymbol{\alpha}, E) = \alpha_N E^N + \alpha_{N-1} E^{N-1} + \cdots + \alpha_1 E + \alpha_0, \quad (4.57)$$

Para comprobar que la aproximación es buena representamos la densidad acumulada para cada uno de los 15 espectros estudiados y la ajustamos a un polinomio de grado N , obteniendo como resultado muy buenos ajustes en todos los casos. Como ejemplo, se muestra el caso del espectro GOE-3 en la figura 4.4. La gráfica superior muestra el ajuste de la densidad acumulada, $m^{(3)}(E)$, a un polinomio de grado 3, $\overline{m}^{(3)}(E)$; la gráfica inferior muestra la densidad de estados, $g^{(3)}(E)$, con la curva de ajuste que corresponde a la derivada de la curva de ajuste de la densidad acumulada. En esta última se observa mejor, ya que la variación con la energía es más lenta.

Además de lo que puede verse en las figuras se realizó la siguiente comprobación: se realizaron para cada uno de los 15 casos, además del ajuste al polinomio de grado N , ajustes a polinomios de grado k ,

$$\overline{m}(k, \boldsymbol{\alpha}, E) = \alpha_k E^k + \alpha_{k-1} E^{k-1} + \cdots + \alpha_1 E + \alpha_0, \quad (4.58)$$

con $k = 2, \dots, N-1, N+1, N+2, \dots$, y se calculó para cada uno de ellos el valor de la distancia

$$\chi(k, \boldsymbol{\alpha})^2 = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (m(E_i) - \overline{m}(k, \boldsymbol{\alpha}, E_i))^2. \quad (4.59)$$

que es la que se minimiza para obtener el ajuste. Se observó que ésta disminuía al aumentar el grado k del polinomio hasta llegar a $k = N$, pero se mantenía constante para los polinomios de grado $\geq N$, lo que indica que el ajuste al polinomio de grado N es mejor que los de grados inferiores pero a partir de N en adelante el ajuste no mejora significativamente. La gráfica 4.5 muestra los valores de $\chi(k, \boldsymbol{\alpha}_0)$ para los casos GOE- N ($N = 2 - 6$). Además, en el panel superior se muestra cómo la distancia aumenta proporcionalmente a $\sqrt{M - (N + 1)}$, como se espera por argumentos estadísticos (WALPOLE *et al.*, 2001).

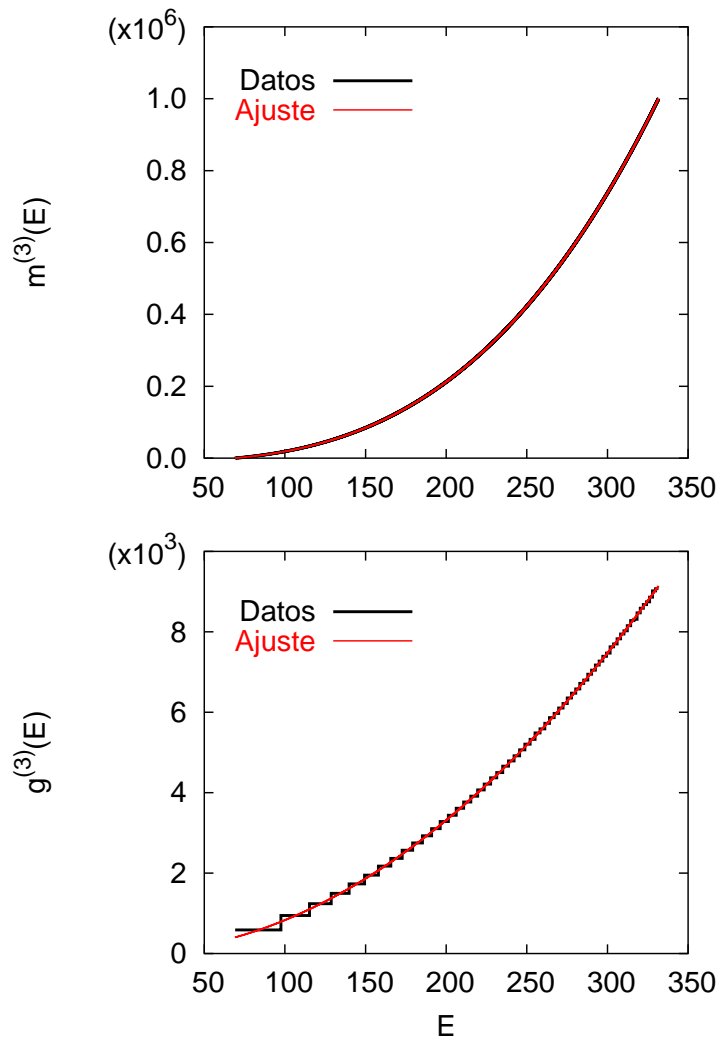


Figura 4.4: Ajustes por polinomios de la densidad de estados, $g^{(3)}(E)$, y la densidad acumulada, $m^{(3)}(E)$, del espectro GOE-3.

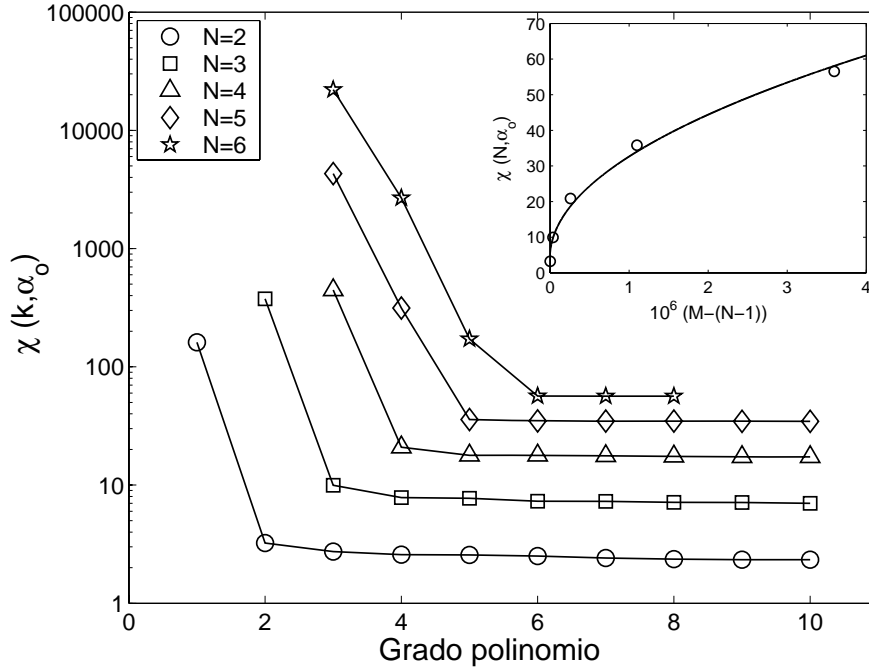


Figura 4.5: Mınima distancia $\chi(k, \alpha_0)$ entre la densidad acumulada y la aproximacion (4.58), como funcion de k , el grado del polinomio, y N . El panel superior muestra $\chi(k, \alpha_0)$ frente a $M - (N + 1)$.

La distribucion de espaciamientos a primeros vecinos

La distribucion de espaciamientos a primeros vecinos $P(s)$ se calculo para cada uno de los espectros del sistema como el histograma resultante de distribuir los espaciamientos, $s_i = \varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i$, en 20 intervalos desde $s = 0$ hasta un espaciamiento maximo $s_{max} = 6$.

Puede definirse tambien la distribucion de espaciamientos integrada como

$$I(s) = \int_0^s P(x)dx. \tag{4.60}$$

En las figuras que se mostraran a continuacion la distribucion de espaciamientos esta normalizada, es decir:

$$\int_0^{s_{max}} P(s)ds = 1 \tag{4.61}$$

La curva y el histograma negros corresponden a las distribuciones calculadas a partir de los espectros. La curva verde es la correspondiente a la estadstica de Poisson (3.8) y la azul es la curva de Wigner para GOE o GUE (3.9). La curva roja corresponde a un ajuste a la funcion de Brody (3.11), que interpola entre la distribucion de Poisson ($\nu = 0$) y la de Wigner para el GOE ($\nu = 1$).

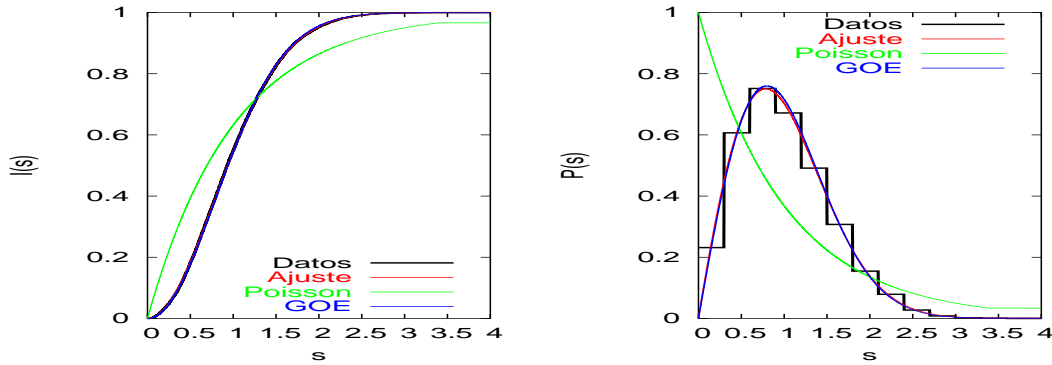


Figura 4.6: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos del espectro de partícula independiente tipo GOE junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

Espectro de partícula independiente tipo GOE

En la figura 4.6 se representa la distribución de espaciamientos a primeros vecinos para el espectro de partícula independiente tipo GOE. En ella se observa que el ajuste coincide prácticamente con la curva teórica de la distribución de Wigner para el GOE (ambas curvas están casi superpuestas). El parámetro de Brody resultado del ajuste es $\nu = 0.961 \pm 0.009$, que está en buen acuerdo con el valor predicho para la colectividad GOE ($\nu = 0.957$ (BRODY *et al.*, 1981)). El valor sería mucho más exacto si se hubiese considerado el promedio de muchos espectros en lugar de uno solo, pero en este caso el único interés está en ver cualitativamente cómo es la forma de la distribución de espaciamientos del espectro de partícula independiente para después compararla con las distribuciones de espaciamientos de los espectros de sistemas de N partículas a que da lugar.

En la figura 4.7 se representan los casos GOE-2 y GOE-3, el resto son prácticamente iguales. En ella puede verse que las fluctuaciones siguen claramente la estadística de Poisson (la curva de ajuste coincide prácticamente con la curva teórica de Poisson, ambas apenas se distinguen). En la tabla 4.2 se muestran además los valores del parámetro de Brody, ν , donde puede verse que todos son muy próximos a 0.

Espectro de partícula independiente tipo GUE

En la figura 4.8 se representa la distribución de espaciamientos a primeros vecinos para el espectro de partícula independiente tipo GUE. Observamos que la curva teórica para el GUE se ajusta bastante bien a la distribución.

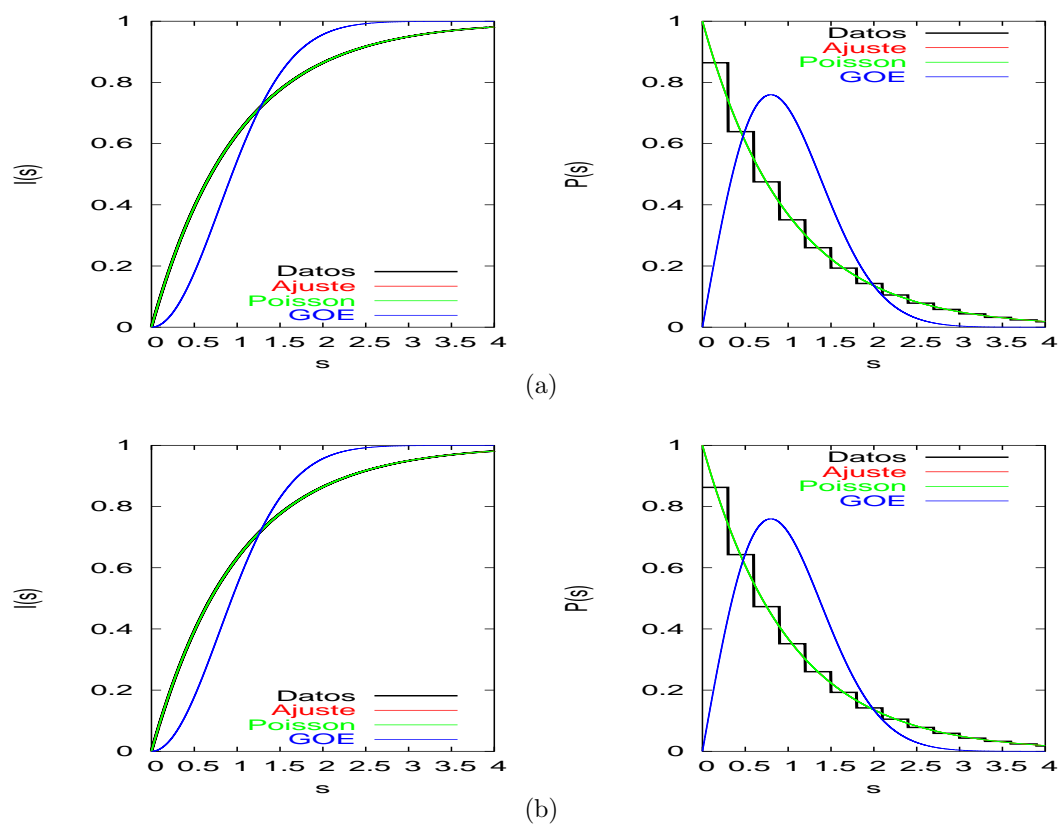


Figura 4.7: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de los espectros GOE-2 (a) y GOE-3 (b) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

N	ν	
2	0.0000	\pm 0.0003
3	0.000	\pm 0.004
4	0.00000	\pm 0.00007
5	0.000	\pm 0.004
6	0.0000	\pm 0.0001

Tabla 4.2: Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de los espectros de los sistemas GOE- N .

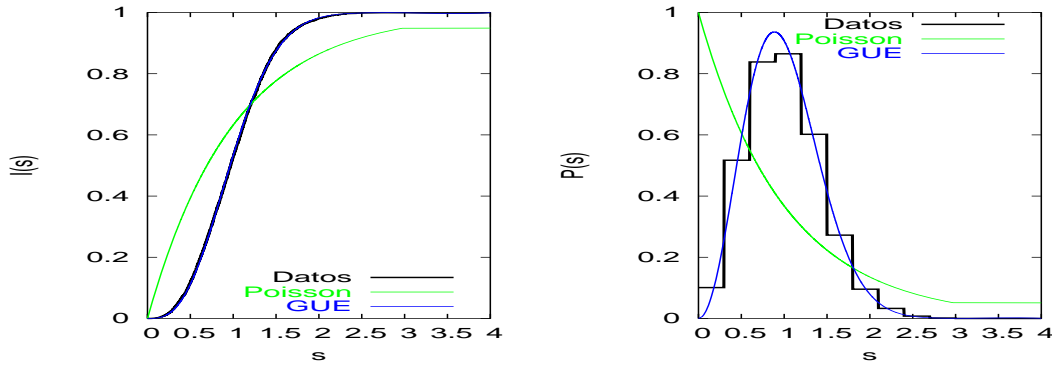


Figura 4.8: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos del espectro de partícula independiente tipo GUE junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GUE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

N	ν
2	0.001 ± 0.004
3	0.001 ± 0.004
4	0.00000 ± 0.00007
5	0.00000 ± 0.00006
6	0.00000 ± 0.00005

Tabla 4.3: Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de los espectros de los sistemas GUE- N .

En este caso no tiene sentido un ajuste a la función de Brody, ya que esta interpola únicamente entre los casos Poisson y GOE.

En la figura 4.9 se representan los casos GUE-2 y GUE-3, el resto son prácticamente iguales. En ella puede verse que las fluctuaciones siguen de nuevo claramente la estadística de Poisson. En la tabla 4.3 se muestran además los valores del parámetro de Brody, ν , donde puede verse que todos son muy próximos a 0.

Espectro de partícula independiente tipo Poisson

En la figura 4.10 se representa la distribución de espaciamientos a primeros vecinos para el espectro de partícula independiente tipo Poisson. En este caso el ajuste a la función de Brody coincide con la ley de Poisson. El parámetro de Brody obtenido es $\nu = 0.0000 \pm 0.0003$.

En la figura 4.11 se representan los casos Poisson-2 y Poisson-3, el resto

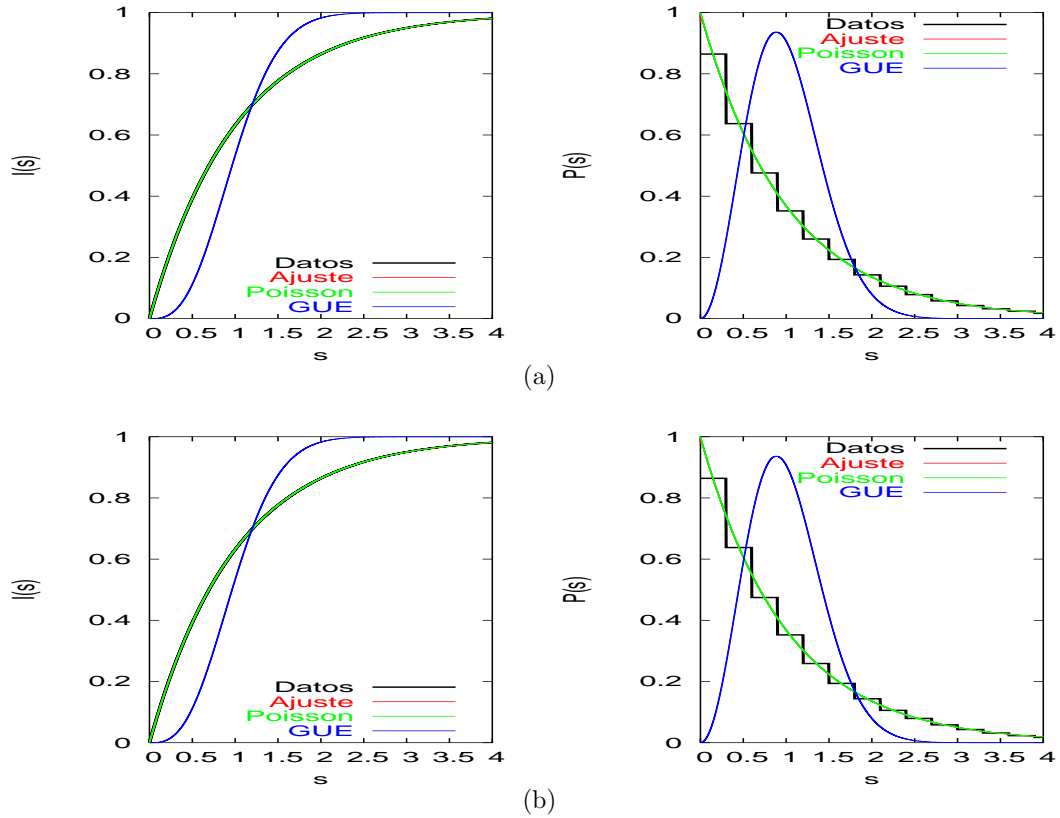


Figura 4.9: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de los espectros GUE-2 (a) y GUE-3 (b) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

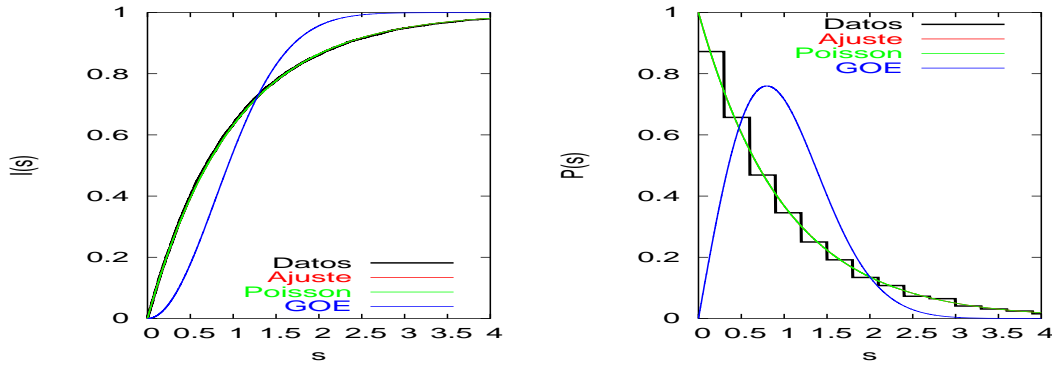


Figura 4.10: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos del espectro de partícula independiente tipo Poisson junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

N	ν
2	0.00000 \pm 0.00005
3	0.00000 \pm 0.00003
4	0.001 \pm 0.003
5	0.008 \pm 0.003
6	0.00000 \pm 0.00007

Tabla 4.4: Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de los espectros de los sistemas Poisson- N .

son prácticamente iguales. Nuevamente las fluctuaciones siguen la estadística de Poisson. En la tabla 4.4 se muestran también los valores del parámetro de Brody, ν , donde puede verse que todos son muy próximos a 0.

Por tanto, la conclusión a la que se llega tras el análisis de este estadístico es que, independientemente del tipo de correlaciones que presente el espectro de partícula independiente, el sistema ya es completamente regular (tipo Poisson) con tan solo añadir una partícula. Es decir, el sistema es efectivamente regular, como esperábamos por argumentos intuitivos, y además, la transición es completa ya en el primer paso: al pasar de una partícula a dos, al menos en lo que se refiere a las correlaciones de corto alcance. Veremos a continuación lo que ocurre con las correlaciones de largo alcance.

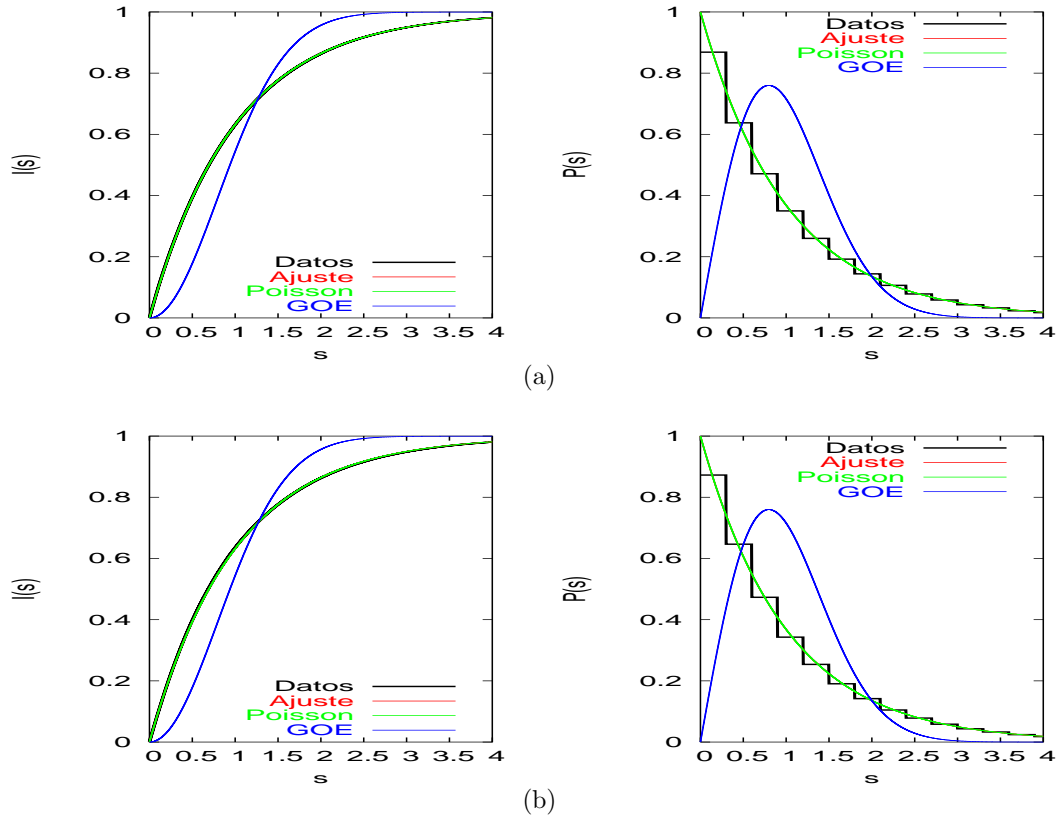


Figura 4.11: Distribución de espaciamentos a primeros vecinos de los espectros Poisson-2 (a) y Poisson-3 (b) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

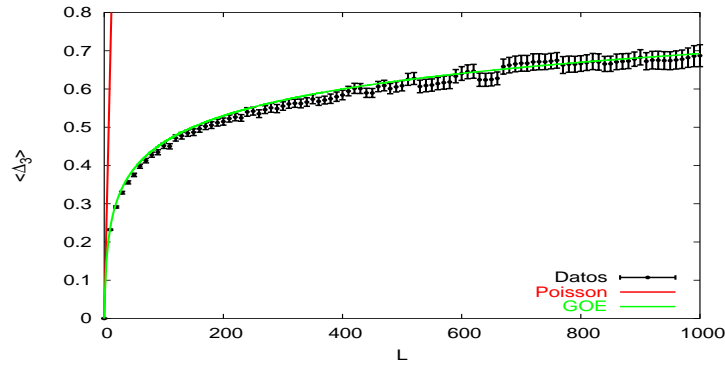


Figura 4.12: $\langle \Delta_3(L) \rangle$ del espectro de partícula independiente tipo GOE, comparada con los límites GOE y Poisson.

La rigidez espectral

Este es el estadístico más comúnmente utilizado para estudiar las correlaciones de largo alcance.

Según se explicó en 3.3.1, para calcular $\langle \Delta_3(L) \rangle$ para un valor de L dado se toman varios intervalos de longitud L en el espectro y se promedia sobre ellos. El programa utilizado en el cálculo permite establecer unos valores mínimo y máximo para el número de intervalos de longitud L a considerar. Estos dos valores se tomaron como $Min = 10$ y $Max = 1000$, de manera que para valores pequeños de L el número de intervalos será grande e irá decreciendo a medida que aumenta el valor de L . $\langle \Delta_3(L) \rangle$ se calculó para valores entre $L = 10$ y $L = 1000$ con un intervalo de $\Delta L = 10$.

El cálculo de la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ para cada espectro del sistema de N partículas se llevó a cabo en cada uno de los 100 intervalos de 10.000 niveles en que fue dividido tras el reescalado. Y una vez calculada para cada uno de los 100 intervalos se realiza el promedio, punto a punto, de las 100 funciones $\langle \Delta_3(L) \rangle$ obtenidas.

Espectro de partícula independiente tipo GOE

En la figura 4.12 se representa la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ calculada para el espectro de partícula independiente tipo GOE, junto con las curvas teóricas para GOE (3.17) y Poisson (3.16). En ella puede observarse claramente cómo la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ crece mucho más rápido en los espectros de tipo Poisson que en los de tipo GOE, según se señaló en la sección 3.3.1.

En la figura 4.13 se representa la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ para los casos GOE-2 y GOE-3. Todos los casos ($N = 2 - 6$) son muy similares. Observamos que los puntos se aproximan bastante a la curva de Poisson y están muy lejos de la curva del GOE, que queda muy cerca del eje de abscisas ya que para los valores

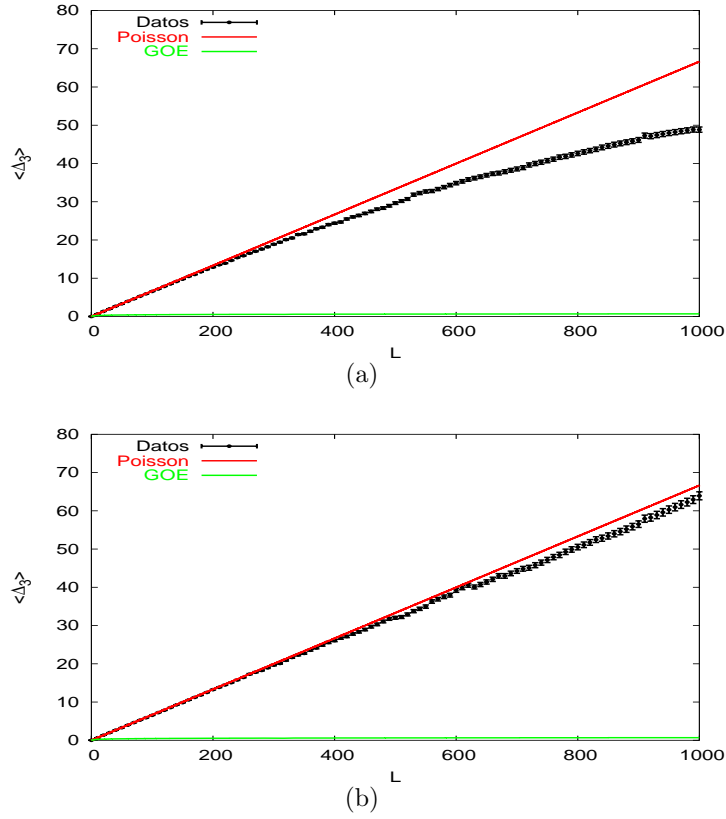


Figura 4.13: $\langle \Delta_3(L) \rangle$ de los espectros GOE-2 (a) y GOE-3 (b), comparada con los límites GOE y Poisson.

más altos de L hay una diferencia entre ambas de 2 órdenes de magnitud aproximadamente. Parece que el acuerdo es mejor para los valores más bajos de L y se observan desviaciones para los valores más altos.

Sin embargo, es importante notar que estas desviaciones, aunque puedan parecer grandes en algunos casos, no implican necesariamente que el resultado sea incompatible con la ley de Poisson. En primer lugar, porque la predicción teórica para la varianza de la $\Delta_3(L)$ en el caso de Poisson es bastante grande, del orden de la propia $\Delta_3(L)$: $Var(\Delta_3(L)) = \langle (\Delta_3(L) - \langle \Delta_3(L) \rangle)^2 \rangle \propto L$, lo que implica que las desviaciones respecto a la media pueden crecer rápidamente con L . Esto puede observarse claramente en la figura 4.16 correspondiente al espectro de partícula independiente tipo Poisson, y comparándola con los casos GOE y GUE (figuras 4.12 y 4.14) en que la varianza es claramente más pequeña.

En segundo lugar, el método utilizado para calcular $\langle \Delta_3(L) \rangle$ como promedio sobre intervalos hace que para los valores más altos de L la estadística sea

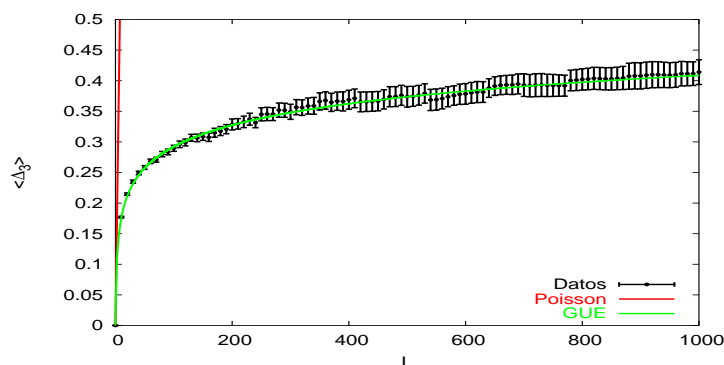


Figura 4.14: $\langle \Delta_3(L) \rangle$ del espectro de partícula independiente tipo GUE, comparada con los límites GUE y Poisson.

más pobre (el número de intervalos disminuye con L) y los valores calculados, por lo tanto, menos fiables.

Por otro lado, existe también la posibilidad de que estas desviaciones sean un efecto espurio debido al reescalado. Aunque la aproximación de la parte suave de la densidad acumulada por polinomios es buena, no deja de ser una aproximación y, como vimos en la sección 3.4, un reescalado incorrecto puede introducir correlaciones de largo alcance ficticias.

Por supuesto, es también posible que las desviaciones sean reales, es decir, que los espectros obtenidos no sigan exactamente la ley de Poisson en lo que a las correlaciones de largo alcance se refiere. En ese caso deberíamos concluir que la evolución hacia la estadística de Poisson no es tan rápida o clara como acabamos de ver en la anterior sección referida a las correlaciones de corto alcance, sino que quedaría en el espectro del sistema algo de la estructura de correlación del espectro de partícula independiente. Veremos si el resto de resultados nos pueden ayudar a decidir cuál es la explicación más factible.

Espectro de partícula independiente tipo GUE

En la figura 4.14 se representa la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ calculada para el espectro de partícula independiente tipo GUE, junto con las curvas teóricas para GUE y Poisson. Aquí también puede observarse cómo la curva del GUE crece mucho más despacio que la de Poisson. Pero además, si la comparamos con la figura 4.12 del espectro GOE podemos ver que el crecimiento en el caso del GUE es ligeramente inferior al del GOE. Esto también es lógico teniendo en cuenta el significado de este estadístico, que se comentó en la sección 3.3.1.

En dicha sección se explicó la relación entre la rigidez espectral y la repulsión de niveles, que aparece en los espectros de las matrices aleatorias. Cuanto mayor es la repulsión mayor es la organización del espectro y esto corresponde a valores pequeños de la $\langle \Delta_3(L) \rangle$. Es decir, cuanto mayor es la

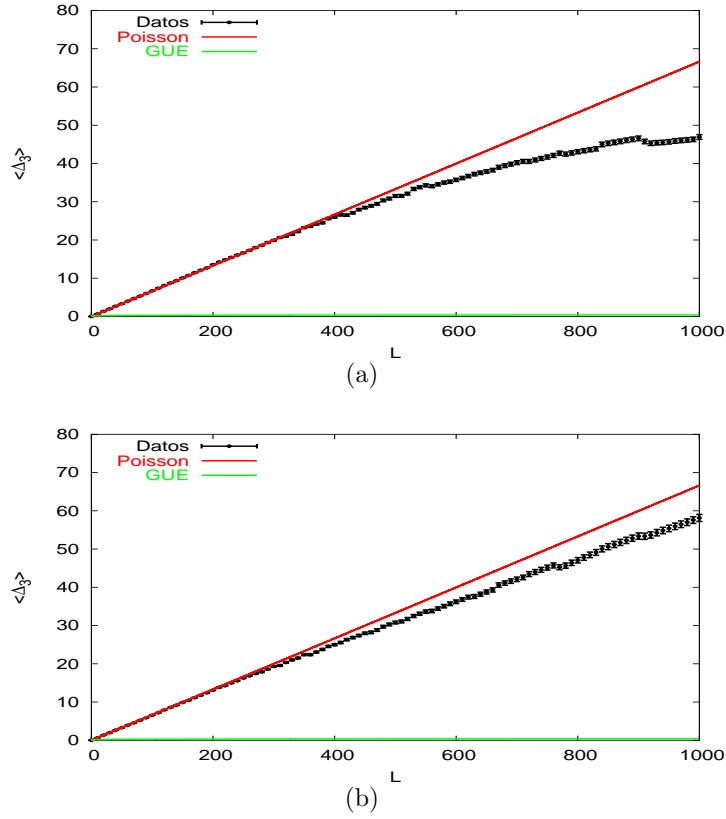


Figura 4.15: $\langle \Delta_3(L) \rangle$ de los espectros GUE-2 (a) y GUE-3 (b), comparada con los límites GUE y Poisson.

repulsión menor será la $\langle \Delta_3(L) \rangle$. Por ello, observamos que crece más lentamente en los espectros tipo GUE, que presentan una mayor repulsión, que en los de tipo GOE.

En la figura 4.15 se representa la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ para los casos GUE-2 y GUE-3. El resto de los casos son muy similares. De nuevo observamos el mismo comportamiento que en el caso del espectro GOE: los puntos se aproximan claramente a la curva de Poisson, quedando muy lejos de la curva correspondiente al GUE, pero existen desviaciones para los valores altos de L . Las posibles explicaciones dadas en el caso del GOE son aplicables también a este caso.

Espectro de partícula independiente tipo Poisson

En la figura 4.16 se representa la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ calculada para el espectro de partícula independiente tipo Poisson, junto con las curvas teóricas para

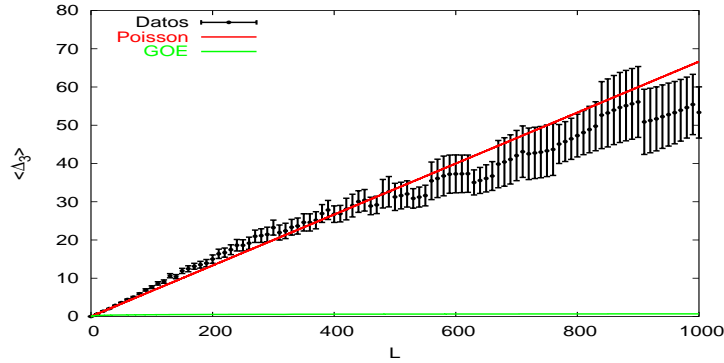


Figura 4.16: $\langle \Delta_3(L) \rangle$ del espectro de partícula independiente tipo Poisson, comparada con los límites GOE y Poisson.

Poisson y GOE. Lo que observamos en este caso si comparamos esta figura con las figuras de los otros dos tipos de espectro de partícula independiente, 4.12 y 4.14, es que la dispersión de los puntos es mucho mayor. Es decir, parece que en este caso los puntos se ajustan peor a la curva teórica. Pero lo que ocurre es que también hay que tener en cuenta que la varianza de la $\Delta_3(L)$ en el caso de Poisson es del orden de L , mientras que en los casos de las colectividades gaussianas es una constante muy pequeña e independiente de L (МЕНТА, 1991). Además, en cualquiera de los tres casos es normal que los puntos no se ajusten perfectamente a la curva ya que el número de niveles del espectro es pequeño y éstos no se han dividido en intervalos para calcular promedios, como en el caso de los espectros del sistema de N partículas.

En la figura 4.17 se representa la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ para los casos Poisson-2 y Poisson-3. Los demás son muy similares. Los puntos se ajustan de nuevo a la curva de Poisson, aunque quizás en este caso la desviación que se produce a valores altos de L es menos acusada que en los dos casos anteriores. Esto podría corroborar la explicación del reescalado. La aproximación de la densidad acumulada por polinomios es exacta en el caso de Poisson, según vimos en la sección 4.3.2. Por tanto, en este caso tenemos mayor seguridad de que el reescalado es correcto.

Por otro lado, este resultado es también compatible con la explicación de que la desviación sea un efecto real debido a que algo de la estructura de correlación del espectro de partícula independiente permanece aún en el espectro del sistema. Si el espectro de partícula independiente es de tipo Poisson la desviación debida a este efecto sería nula en este caso.

Así pues, no podemos descartar por el momento ninguna de las posibles explicaciones que se han expuesto respecto de las desviaciones observadas. Podemos entonces concluir, a la vista del análisis de los resultados obtenidos con este estadístico, que hay una clara tendencia de la estadística espectral

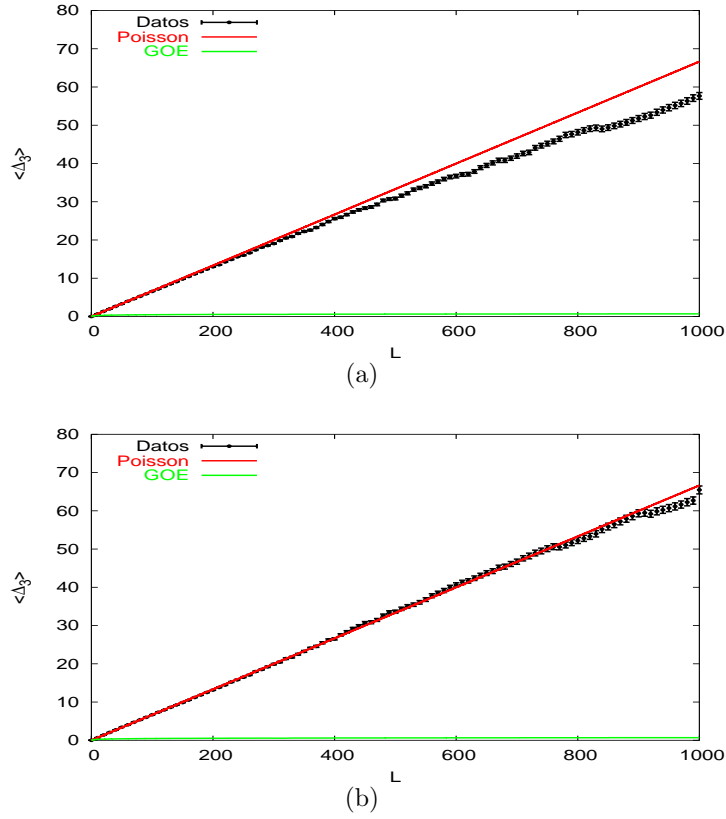


Figura 4.17: $\langle \Delta_3(L) \rangle$ de los espectros Poisson-2 (a) y Poisson-3 (b), comparada con los límites GOE y Poisson.

del sistema de N partículas hacia la estadística de Poisson, pero no podemos asegurar que esta sea tan rápida o clara como en el caso de las correlaciones de corto alcance. Sino que es posible que quede en el espectro del sistema alguna reminiscencia del espectro de partícula independiente visible en las correlaciones de largo alcance. El estudio del estadístico δ_n en las siguientes secciones y en la parte de la evolución con la energía arrojarán algo más de luz sobre este aspecto.

El estadístico δ_n

El último estadístico que utilizaremos para analizar las fluctuaciones de los espectros del sistema es la δ_n , introducida en la sección 3.5.

La δ_n fue calculada en cada uno de los 100 intervalos de 10.000 niveles del espectro reescalado. A continuación se calculó el espectro de potencias de cada una y finalmente se hizo el promedio de los 100 espectros de potencias

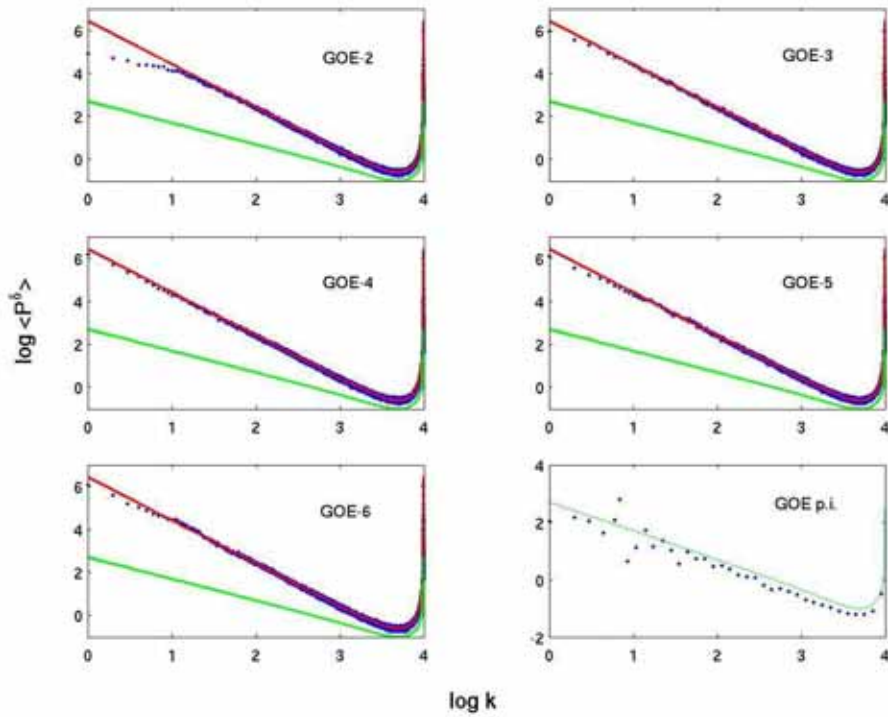


Figura 4.18: Representación del espectro de potencias de los espectros GOE- N y del espectro de partícula independiente tipo GOE junto con las curvas teóricas para GOE (verde) y Poisson (rojo).

obtenidos. El espectro de potencias de la δ_n viene dado por

$$P^\delta(k) = |\hat{\delta}_k|^2, \quad (4.62)$$

donde $\hat{\delta}_k$ es la transformada de Fourier discreta de δ_n .

Espectro de partícula independiente tipo GOE

En la figura 4.18 se representa el espectro de potencias de la δ_n del espectro de partícula independiente tipo GOE, junto con la correspondiente curva teórica (3.39), y los espectros de potencias del sistema de N partículas ($N = 2 - 6$), junto con la curva teórica para GOE y Poisson (3.39).

Nuevamente hay acuerdo con la predicción teórica de la estadística de Poisson. Se observa una pequeña desviación en el caso GOE-2 a bajas frecuencias. Podría tratarse, al igual que en el caso de la $\langle \Delta_3(L) \rangle$, de un problema de reescalado. En este caso llama la atención que la desviación aparezca

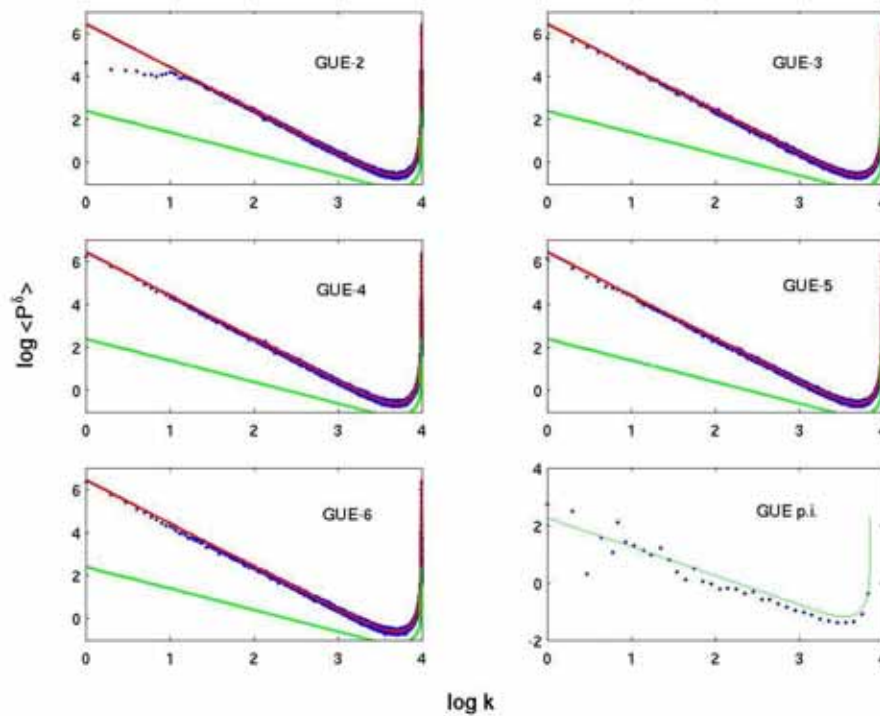


Figura 4.19: Representación del espectro de potencias de los espectros GUE- N y del espectro de partícula independiente tipo GUE junto con las curvas teóricas para GUE (verde) y Poisson (rojo).

sólo en el espectro GOE-2. Al final de la sección comentaremos qué conclusiones pueden obtenerse comparando los resultados de los tres tipos de espectro de partícula independiente.

Se puede ver que el ajuste a la curva teórica es algo peor en el caso del espectro de partícula independiente. Esto es lógico teniendo en cuenta que el espectro de potencias se ha calculado en este caso a partir de un único espectro, mientras que en el caso del sistema de N partículas éste se ha calculado como un promedio sobre 100 espectros (intervalos en que se dividió el espectro inicial de 1.000.000 de niveles) y las curvas teóricas, según se vio en la sección 3.5, corresponden a promedios. Por el mismo motivo esto ocurre también, según veremos a continuación, en los casos del GUE y Poisson.

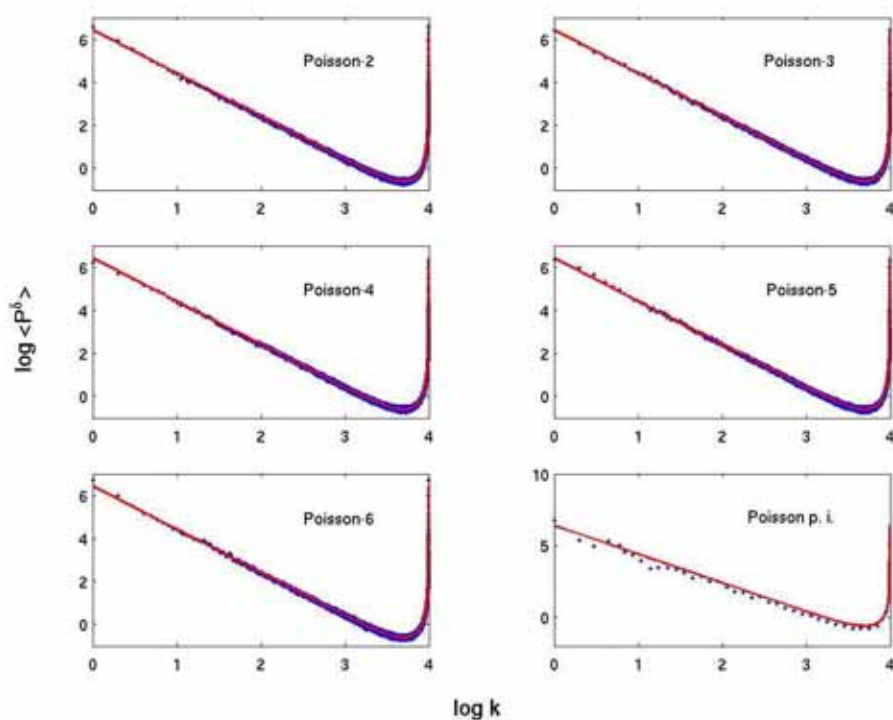


Figura 4.20: Representación del espectro de potencias de los espectros Poisson- N y del espectro de partícula independiente tipo Poisson junto con la curva teórica para Poisson (rojo).

Espectro de partícula independiente tipo GUE

En la figura 4.19 se representa el espectro de potencias de la δ_n del espectro de partícula independiente tipo GUE, junto con la correspondiente curva teórica (3.39), y los espectros de potencias del sistema de N partículas ($N = 2 - 6$), junto con la curva teórica para GUE y Poisson (3.39).

El resultado es bastante parecido al caso del GOE: los puntos se ajustan bastante bien a la curva teórica de Poisson pero aparece de nuevo la pequeña desviación en el caso GUE-2.

Espectro de partícula independiente tipo Poisson

En la figura 4.20 se representa el espectro de potencias de la δ_n del espectro de partícula independiente tipo Poisson y los espectros de potencias del sistema de N partículas ($N = 2 - 6$), junto con la curva teórica para el caso de Poisson (3.39).

Observamos que la desviación que ocurría en los dos casos anteriores

para $N = 2$ aquí no aparece. De nuevo cabe la explicación del reescalado, ya que en el caso de Poisson estamos más seguros de realizar el reescalado correctamente, por tanto, hay más probabilidad de que aparezcan efectos espurios en los otros dos casos, GOE y GUE.

Pero por otro lado, puede ser que el caso $N = 2$ sea realmente un caso especial, es decir, que la desviación no se deba a errores de reescalado o de otros tipos, sino que realmente existan motivos por los que este caso no sigue estrictamente la estadística de Poisson. Como ya apuntábamos como posible explicación para la desviación en el caso de la $\Delta_3(L)$, puede ser que este caso, $N = 2$, aún refleje de alguna manera la procedencia del espectro del sistema, es decir, el espectro de partícula independiente, que es GOE o GUE cuando existe la desviación, mientras que ésta no aparece cuando el espectro de partícula independiente es de tipo Poisson. Podemos pensar entonces que a medida que aumenta N las propiedades del espectro de partícula independiente se van diluyendo más, dando lugar a un espectro de niveles cada vez más descorrelacionados. Un tratamiento más detallado de esta cuestión se expone en la sección siguiente.

4.4.2. Evolución con la energía

La región de baja energía no fue tomada en cuenta en la anterior sección. Como se comentó en la introducción, puede esperarse un comportamiento distinto en este caso ya que el argumento de Bloch no es válido para los niveles más bajos del espectro de varias partículas. No es tan claro que los niveles del espectro de partícula independiente que constituyen dos niveles cercanos de la región de baja energía del espectro del sistema de varias partículas provengan de partes muy diferentes del espectro de partícula independiente y, por tanto, no es tan claro que esos dos niveles del espectro del sistema estén descorrelacionados.

Al contrario, se comprende que debiera observarse un comportamiento distinto en los niveles más bajos con el siguiente ejemplo sencillo. Suponemos un espectro de partícula independiente de tipo GOE y consideramos el estado fundamental y el primer excitado del espectro del sistema de dos partículas. En la configuración del estado fundamental hay una partícula en el primer nivel del espectro de partícula independiente y otra en el segundo. En la configuración del primer excitado están ocupados el primer y tercer niveles del espectro de partícula independiente. Entonces el espaciamiento S_1 entre estos dos niveles del espectro del sistema de dos partículas es igual al segundo espaciamiento s_2 del espectro de partícula independiente. Por tanto, si calculamos la distribución de espaciamientos a primeros vecinos promediando S_1 sobre distintos espectros de partícula independiente obtendríamos una distribución de Wigner. Este ejemplo nos da la intuición de lo que va a

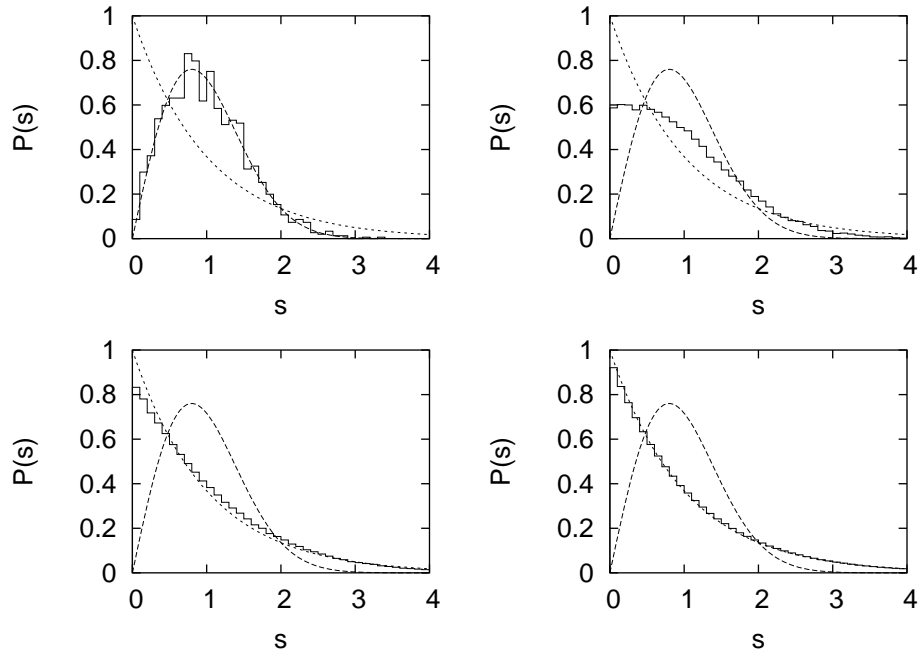


Figura 4.21: Evolución de la distribución $P(s)$ con la energía límite E_{max} para un sistema de dos partículas. La distribución se compara con la ley teórica de Wigner (línea discontinua) y la de Poisson (línea de puntos) para cuatro valores diferentes, $E_{max} = 4$ (panel superior izquierdo), 10 (panel superior derecho), 40 (panel inferior izquierdo) y 160 (panel inferior derecho).

ocurrir en la región de baja energía: si se considera una ventana de energía muy pequeña la estadística espectral estará más cerca de GOE que de Poisson, y según se va ampliando la ventana se irá produciendo la transición hacia la estadística de Poisson.

Antes de continuar con el análisis estadístico de un caso concreto, haremos un breve apunte sobre el procedimiento de reescalado en la región de baja energía. Como se explicó, la forma polinomial de la densidad (4.57) es válida para alta energía. Por eso, en el cálculo que se expone a continuación se obtiene la parte suave de la densidad acumulada $\bar{m}(E)$ a partir del promedio sobre una colectividad, utilizando 500 espectros de partícula independiente.

Analizamos en primer lugar las correlaciones de corto alcance. Para ello consideramos la evolución de la distribución de espaciamientos a primeros vecinos $P(s)$ con la energía máxima E_{max} para un sistema de dos partículas que se mueven libremente en un campo medio GOE. En la figura 4.21 se compara la distribución $P(s)$ con las leyes teóricas para GOE y Poisson. Los cuatro paneles corresponden a distintos valores de E_{max} . Puede apreciarse claramente cómo la $P(s)$ va cambiando suavemente desde la distribución de

Wigner hacia la de Poisson según va creciendo la energía. Mientras que a energías muy bajas ($E_{max} = 4$) la distribución coincide con la ley de Wigner, presenta un comportamiento intermedio para $E_{max} = 10$ y sólo cerca de $E_{max} = 40$ es prácticamente indistinguible de la distribución de Poisson. Aún pueden observarse pequeñas desviaciones en este caso, que desaparecen cuando la energía límite llega hasta $E_{max} = 160$. En este punto podemos ya afirmar que, en lo que se refiere a las correlaciones de corto alcance, el argumento de Bloch falla a baja energía y los sistemas de varias partículas no presentan un espectro de niveles descorrelacionados en cualquier región de energías sino sólo a energías altas.

Pasamos ahora al estudio de las correlaciones de largo alcance, centrando nuestro interés en la pequeña desviación que observábamos en el espectro de potencias de la δ_n . Veíamos que las curvas estaban en perfecto acuerdo con la ley teórica de Poisson excepto en los sistemas de dos partículas evolucionando en un campo medio caótico (GOE o GUE), caso en el que apreciábamos una desviación a bajas frecuencias. Vamos a estudiar este punto, k_c , donde la curva del espectro de potencias se separa de la predicción de Poisson, como función de la escala de energía. Lo estudiaremos también en otros casos, además de en el sistema de dos partículas, para ver si aparece también alguna desviación a las distintas escalas de energía.

De nuevo tomamos un espectro de partícula independiente tipo GOE, y consideramos los casos de $N = 2, 3$ y 4 partículas. En los paneles de la figura 4.22 se representa el espectro de potencias de la δ_n para estos tres casos en tres intervalos distintos de energía $[E - E/10, E + E/10]$, con $E = 1000, 8000$ y 64000. En cada panel las tres curvas deberían estar superpuestas pero se han desplazado verticalmente unas respecto de otras para que puedan distinguirse mejor. En el eje de abscisas se ha representado L , la ventana de energía, que es una magnitud más intuitiva en el estudio de las correlaciones de largo alcance que la frecuencia k y se relaciona con ella mediante $L = M/k$. Observando cada curva por separado, sobre todo en el primer caso ($E = 1000$), quizá no daríamos importancia a la pequeña desviación que existe a bajas frecuencias, o L grandes. Sin embargo, observándolas juntas en una misma gráfica y su evolución con la escala de energía en los distintos paneles, queda claro que existe una tendencia a separarse de la ley teórica en esa región de baja frecuencia.

En esta figura debemos observar varios aspectos importantes de los que podemos extraer conclusiones sobre la discusión respecto al origen de las desviaciones observadas. En primer lugar, la desviación con respecto a la curva de Poisson aparece siempre, a cualquier escala de energía. En segundo lugar, esta longitud crítica L_c depende del número de partículas. Por ejemplo, en el panel superior la desviación comienza mucho antes en el caso de 2 partículas mientras que es prácticamente inapreciable en el de 4 partículas.

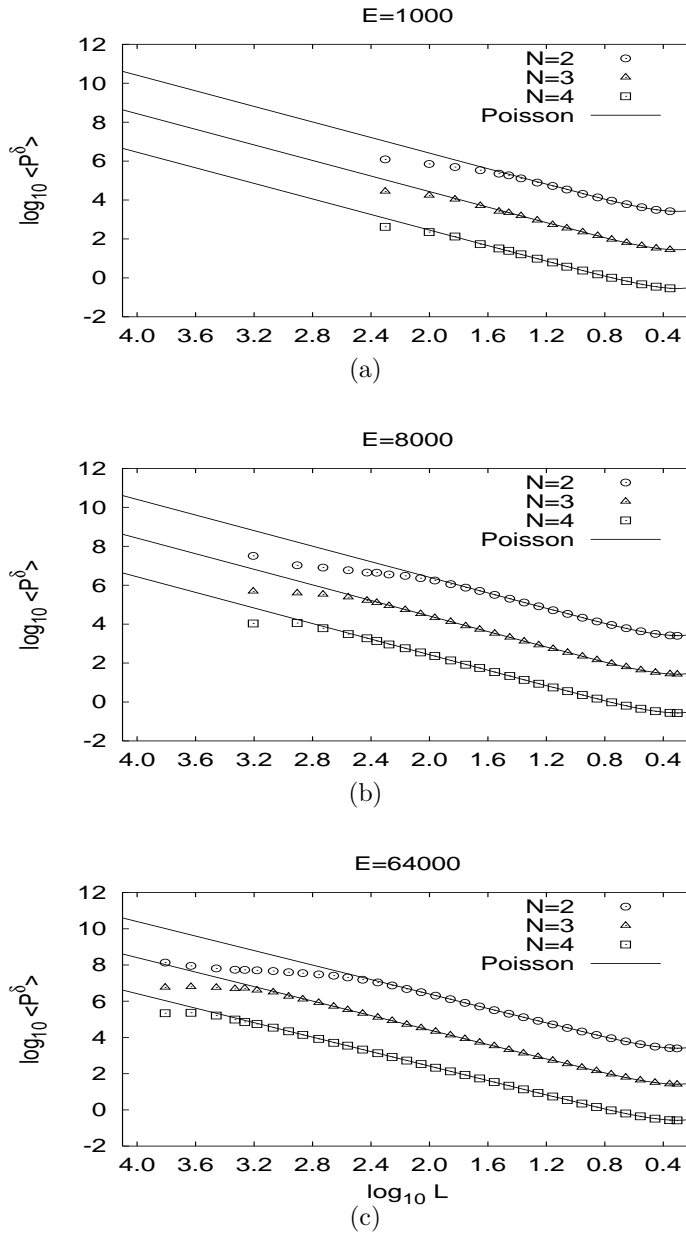


Figura 4.22: Comportamiento del espectro de potencias $\langle P_k^\delta \rangle$ para $N = 2, 3$ y 4 fermiones a diferentes energías, comparado con la predicción teórica para sistemas integrables. En cada panel tanto los valores de $\langle P_k^\delta \rangle$ como la curva teórica han sido desplazados convenientemente para evitar su solapamiento.

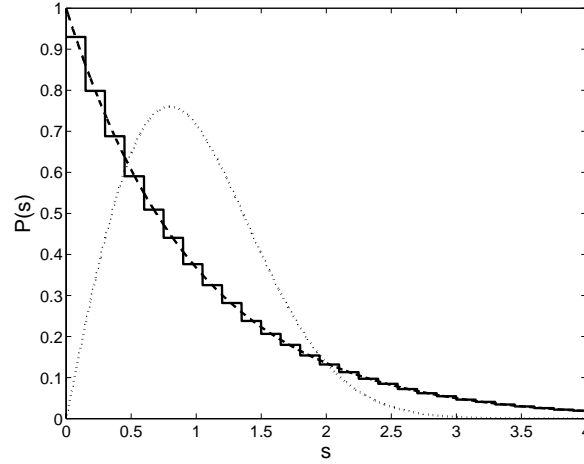


Figura 4.23: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos del sistema de 2 bosones con espectro de partícula independiente tipo GOE, comparada con la predicción teórica para Poisson (línea discontinua) y para GOE (línea de puntos).

Es decir, L_c aumenta con el número de partículas. Y por último, L_c depende también de la escala de energía. Comparando los tres paneles se comprueba que L_c es mayor cuanto más alta es la energía.

Todos estos resultados apuntan a la explicación de la influencia del espectro de partícula independiente en detrimento de la explicación del problema de reescalado. El hecho de que la desviación se produzca a cualquier escala de energía indica que en este caso no se trata de un signo de un comportamiento intermedio, como acabamos de ver en la distribución de espaciamientos a primeros vecinos, que indique que la transición hacia Poisson no es completa aún. Si fuese así, además, la desviación debería ir desapareciendo al aumentar el número de partículas. Y si se tratase de un problema de reescalado también el ajuste debería mejorar al aumentar la energía, en cambio encontramos siempre un valor de L_c a partir del cual se observa la desviación, que depende de la escala de energía pero no desaparece. Podemos entonces concluir que se trata más bien de una reminiscencia de las fluctuaciones tipo GOE del espectro de partícula independiente.

4.4.3. Resultados para bosones

El análisis de la sección anterior se repitió para sistemas de N bosones sin interacción. La diferencia en los cálculos es que, debido a que el principio de exclusión de Pauli no se aplica, la secuencia $I = \{i_1, i_2, \dots, i_N\}$ puede contener índices iguales, es decir, las ocupaciones de los niveles del espectro de

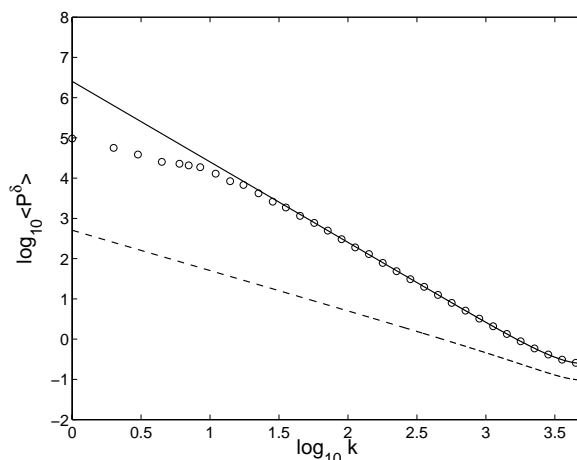


Figura 4.24: Espectro de potencias de la δ_n del sistema de dos bosones con espectro de partícula independiente tipo GOE (círculos), comparado con la ley teórica de Poisson (línea continua) y la de GOE (línea discontinua).

partícula independiente pueden ser mayores que 1. Sin embargo, no esperamos grandes diferencias con los resultados para fermiones en estos sistemas con números pequeños de bosones en un espectro de infinitos niveles.

Los cálculos se realizaron de la misma manera, se generaron espectros de alrededor de 1.000.000 de niveles, se reescalaron utilizando la forma (4.57) para la densidad acumulada y se calcularon los diferentes estadísticos en cada caso.

En las figuras siguientes se muestran todos los resultados para el caso de 2 bosones en un campo medio GOE. Como puede observarse, son completamente similares a las correspondientes a fermiones. Y lo mismo ocurre con el resto de los casos, $N = 3 - 6$. Así, todos los resultados y conclusiones obtenidos para bosones son los mismos que los que se obtuvieron para fermiones.

En la figura 4.23 se representa la distribución de espaciamientos a primeros vecinos $P(s)$ en este sistema de 2 bosones y, como puede verse, sigue perfectamente la curva teórica de Poisson, al igual que los sistemas de fermiones estudiados.

Las correlaciones de largo alcance quedan reflejadas en la figura 4.24, donde se muestra el espectro de potencias de la δ_n y se observa la misma tendencia que en el caso de 2 fermiones. La curva coincide con la predicción teórica de Poisson pero se desvía en la región de las frecuencias bajas.

Así, en cuanto a la evolución con el número N de partículas la conclusión es de nuevo que la transición hacia la estadística de Poisson es muy rápida: con sólo añadir una partícula ya está completada, al menos considerando la

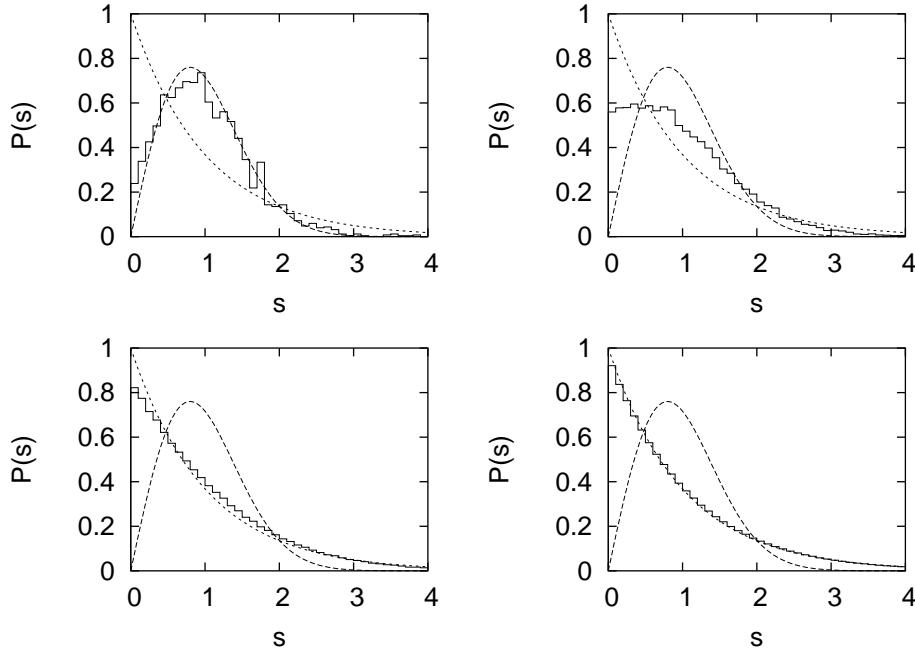


Figura 4.25: Evolución de la distribución $P(s)$ con la energía límite E_{max} para un sistema de dos bosones. La distribución se compara con la ley teórica de Wigner (línea discontinua) y la de Poisson (línea de puntos) para cuatro valores diferentes, $E_{max} = 4$ (panel superior izquierdo), 10 (panel superior derecho), 40 (panel inferior izquierdo) y 160 (panel inferior derecho).

región de energía alta. Por otro lado, queda siempre una pequeña desviación de la predicción teórica de Poisson, que interpretamos como una reminiscencia del espectro de partícula independiente cuando este es de tipo caótico, visible en las correlaciones de largo alcance.

En cuanto a la evolución con la energía estudiamos, por un lado, las correlaciones de corto alcance. En la figura 4.25 puede observarse la evolución de la distribución de espaciamentos a primeros vecinos para el sistema de 2 bosones para los mismos casos que en la figura correspondiente para fermiones 4.21. Como puede verse, ambas son muy similares. Por tanto, ambos casos corroboran que existe esa evolución suave hacia Poisson con la energía y que puede decirse que los sistemas de partículas sin interacción poseen una estadística espectral que sigue la predicción de Poisson sólo a energía suficientemente alta. Por otro lado, como se vio en la figura 4.24, en las correlaciones de largo alcance se comprueba también que los sistemas de partículas sin interacción son regulares, siguen la estadística de Poisson, excepto por la pequeña desviación a bajas frecuencias. En la figura 4.26 se estudia la evolución con la energía de esta longitud crítica L_c a la que se

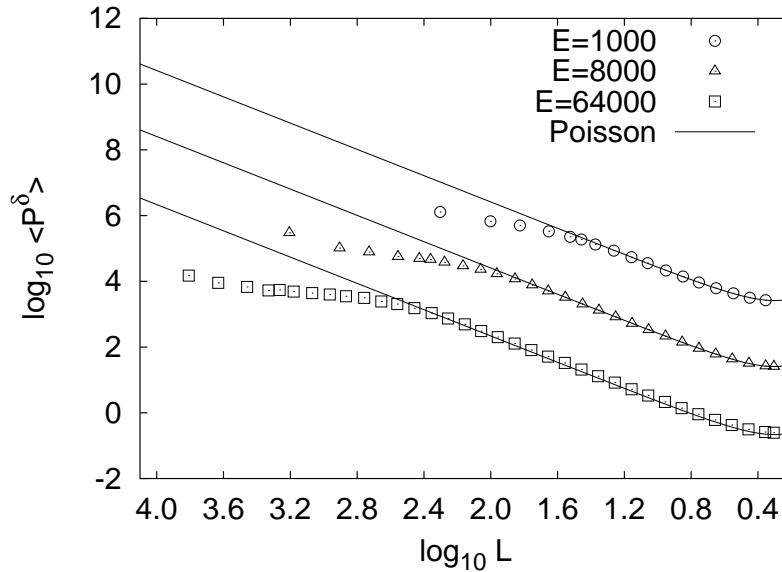


Figura 4.26: Comportamiento del espectro de potencias $\langle P_k^\delta \rangle$ para $N = 2$ fermiones a diferentes energías, comparado con la predicción teórica para sistemas integrables. Tanto los valores de $\langle P_k^\delta \rangle$ como la curva teórica han sido desplazados convenientemente para evitar su solapamiento.

produce la desviación. Se representa el caso de $N = 2$ partículas a distintas energías. Las curvas se han desplazado verticalmente para que puedan distinguirse mejor. A la vista de la figura de nuevo concluimos que para un número de partículas dado, L_c aumenta con la energía. También se ha observado que para una energía dada, L_c aumenta con el número de partículas.

4.4.4. Cálculo analítico

El análisis de los resultados obtenidos en las secciones anteriores nos ha llevado, entre otras, a una importante conclusión: a energías suficientemente altas los espectros de los sistemas de partículas idénticas sin interacción siguen la estadística de Poisson. Esto es así ya con sólo 2 partículas e independientemente del tipo de espectro de partícula independiente a partir del cual se hayan construido.

En esta sección intentamos apoyar este resultado con una demostración analítica. Abordamos el cálculo de la función de agrupamiento a dos puntos del sistema de N partículas, $Y_2^{(N)}(E_1, E_2)$. Este cálculo se hace muy largo y complicado debido a que es necesario el manejo de las funciones de correlación a $2N$ puntos. Es por ello por lo que nos restringiremos al sistema de 2 partículas. En este caso la función de agrupamiento a dos puntos viene dada

por

$$Y_2^{(2)}(E_1, E_2) = 1 - \frac{\overline{g^{(2)}(E_1)g^{(2)}(E_2)}}{\overline{g^{(2)}(E_1)}\overline{g^{(2)}(E_2)}} + \frac{\delta(E_1 - E_2)}{\overline{g^{(2)}(E_1)}}, \quad (4.63)$$

donde $g^{(2)}(E)$ es la densidad de estados de dos partículas.

Suponemos que $E_1, E_2 \gg 1$, es decir, que realizamos el cálculo a energías altas para ver si la función de agrupamiento es la correspondiente al caso de la estadística de Poisson, $Y_2^{(2)}(E_1, E_2) = 0$, como se ha visto en los resultados del cálculo numérico. En esta hipótesis la densidad media de estados puede aproximarse por $\overline{g^{(2)}(E)} = E/2$.

Además, suponemos que $E_1 \neq E_2$ pero son cercanas, es decir, $0 < |E_1 - E_2| \ll E_1 + E_2$, ya que en caso contrario los niveles de energía estarán descorrelacionados si están suficientemente alejados.

Con estas hipótesis puede realizarse un cálculo a partir de la expresión (4.63), que se detalla en el apéndice C y cuyo resultado es el siguiente:

$$Y_2^{(2)}(E_1, E_2) \sim 0, \quad 0 < |E_1 - E_2| \ll E_1 + E_2, \quad (4.64)$$

es decir, que los sistemas de 2 partículas sin interacción se comportan como regulares siempre que la energía sea suficientemente alta.

Capítulo 5

Conclusiones de la Parte I

En esta Parte I hemos estudiado los sistemas de N partículas idénticas sin interacción en el contexto del caos cuántico. Es decir, hemos utilizado las herramientas que han sido desarrolladas en este campo para analizar la estadística de las fluctuaciones de los espectros cuánticos de energía de estos sistemas.

Los trabajos de Berry (BERRY and TABOR, 1977) y Bohigas (BOHIGAS *et al.*, 1984) establecieron que hay dos tipos de espectros cuánticos que pueden distinguirse en base al tipo de fluctuaciones que presentan: los espectros de sistemas cuánticos cuyo análogo clásico es integrable presentan fluctuaciones que siguen la estadística de Poisson y aquellos cuyo análogo clásico es ergódico presentan fluctuaciones cuya estadística es descrita por la teoría de matrices aleatorias. Es decir, que las fluctuaciones espectrales son universales (en un cierto rango), dependiendo sólo de si el análogo clásico del sistema es integrable o ergódico.

Hemos elegido diversos tipos de espectro de partícula independiente y hemos construido a partir de ellos espectros de sistemas de varias partículas. Para realizar el análisis de las fluctuaciones espectrales de los mismos se han utilizados tres estadísticos. Dos de ellos han sido desarrollados en el contexto de la teoría de matrices aleatorias: la distribución de espaciamientos a primeros vecinos ($P(s)$) y la rigidez espectral ($\Delta_3(L)$), y son los más utilizados a la hora de medir las correlaciones de corto y de largo alcance, respectivamente. El tercero ha sido desarrollado gracias a un nuevo enfoque recientemente propuesto a la hora de abordar el problema del caos cuántico basado en los métodos tradicionales del análisis de series temporales (RELAÑO *et al.*, 2002): la δ_n , que mide las fluctuaciones de los niveles de energía respecto de su valor medio.

Aunque no ha habido estudios sistemáticos de cálculo numérico ni demostraciones rigurosas, normalmente se asume que estos sistemas se comportan en general como regulares, sin especificar rangos de energía u orden de núme-

ro de partículas. Un primer argumento que aparece en la literatura científica en apoyo de este hecho se debe a Bloch, quien sostiene que dos niveles consecutivos de energía del sistema de varias partículas son sumas de energías de muy diferentes regiones del espectro de partícula independiente y estarán, por tanto, descorrelacionados, dando lugar así a un espectro del tipo de los regulares, es decir, cuyas fluctuaciones siguen la estadística de Poisson. Es un argumento intuitivamente claro para números grandes de partículas y a altas energías, pero no es tan obvio por ejemplo en la región de baja energía.

Se ha realizado un primer estudio eliminando la región de baja energía, puesto que esperábamos encontrar en ella un comportamiento distinto, y además, el reescalado que encontramos adecuado para estos sistemas es en principio válido para energía alta. Como primer resultado de este análisis encontramos que los sistemas de partículas sin interacción se comportan en cuanto a las fluctuaciones espectrales como sistemas regulares, independientemente del número de partículas. Es decir, hay una transición abrupta con el número de partículas hacia el sistema regular: independientemente del tipo de espectro de partícula independiente, el sistema con sólo dos partículas ya se comporta como regular. Sólo en las correlaciones de largo alcance se observa una pequeña discrepancia a escalas grandes de energía (o frecuencias bajas si nos referimos al estadístico δ_n), que, aunque en principio podría tratarse de un problema de reescalado, interpretamos como una reminiscencia que queda del espectro de partícula independiente, ya que esta pequeña desviación del comportamiento regular se produce sólo en los casos en que el espectro de partícula independiente es de tipo caótico.

Por otro lado se realizó un estudio de la evolución de las fluctuaciones espectrales con la energía. En la región de baja energía, como se esperaba, el comportamiento de los sistemas de partículas sin interacción sólo es de tipo regular en el caso de que partamos de un espectro de partícula independiente regular, de tipo Poisson. En otro caso, se observa, como muestra la distribución de espaciamientos a primeros vecinos, que hay una evolución de la estadística espectral desde la correspondiente al espectro de partícula independiente a la estadística de Poisson. En los casos estudiados la distribución de espaciamientos a primeros vecinos pasa de la ley de Wigner a muy baja energía a la de Poisson. En lo que se refiere a las correlaciones de largo alcance un estudio a distintas escalas de energía del estadístico δ_n muestra que existe siempre una longitud crítica de la ventana de energía L_c a partir de la cual se produce una desviación de la predicción de Poisson. Además, para una energía dada, L_c aumenta con el número de partículas y para un número de partículas fijado, L_c aumenta con la energía.

Por último señalar que todo el estudio se ha realizado para sistemas de partículas idénticas sin interacción en general, es decir, tanto para fermiones como para bosones, y que las conclusiones obtenidas han sido las mismas en

ambos casos, al menos para estos sistemas en los que el número de niveles de partícula independiente es mucho mayor que el número de partículas.

Además del estudio numérico se ha llevado a cabo también una demostración analítica en el caso del sistema de dos partículas. Se ha calculado la función de agrupamiento a dos puntos en el límite de alta energía y se ha obtenido que tiende a cero, es decir, que se corresponde con la predicción para sistemas regulares. En el sistema de dos partículas este cálculo ya es bastante complicado pero se complica mucho más al aumentar el número de partículas. Aunque no se tiene la demostración para el sistema de N partículas en general, el caso $N = 2$ tiene especial importancia ya que es intuitivamente claro que estos sistemas se han de comportar como regulares para números grandes de partículas pero no para números pequeños. Además, es en $N = 2$ donde se ha visto que ya se ha producido la transición.

Parte II

Sistemas en interacción

Capítulo 6

Introducción

Los sistemas de muchas partículas pueden ser correctamente descritos por hamiltonianos del tipo

$$H = H(1) + H(2), \quad (6.1)$$

donde $H(1)$ es un término sin interacción, es decir, que afecta a cada partícula individualmente, y $H(2)$ representa una interacción a dos cuerpos. Usualmente $H(1)$ es un campo medio obtenido a partir de un cálculo de tipo Hartree-Fock y $H(2)$ es la interacción residual a dos cuerpos.

En la Parte I el estudio se centró en el hamiltoniano sin interacción, $H(1)$. En esta Parte introducimos la interacción a dos cuerpos y llevaremos a cabo un estudio que, aunque ubicado también en el contexto de la Teoría de Matrices Aleatorias, utiliza un enfoque distinto al habitual. Se trata de analizar las matrices en una representación tridiagonal, lo que en sí ya supone una simplificación, además de permitir el manejo de dimensiones mayores y, lo que sería el objetivo principal de esta Parte, la construcción de modelos sencillos para la descripción de las fluctuaciones espectrales de sistemas regidos por el hamiltoniano (6.1).

El modelo que mejor describe el hamiltoniano (6.1) en Teoría de Matrices Aleatorias lo constituyen las llamadas *colectividades embebidas*. Por tanto, utilizaremos este tipo de colectividades y trataremos de construir el modelo sencillo a partir de su forma tridiagonal. Concretamente, utilizaremos un hamiltoniano de la forma

$$H = H(1) + \lambda H(2), \quad (6.2)$$

habitual en el estudio de sistemas de partículas en interacción, donde $H(1)$ representa la parte sin interacción, $H(2)$ representa la interacción a dos cuerpos y λ es un parámetro de control que varía entre 0 y 1 de manera que la interacción se introduce en el sistema de forma gradual. Construiremos colectividades embebidas de matrices que representen el hamiltoniano (6.2)

y, analizando su forma tridiagonal, trataremos de caracterizarla lo mejor posible y encontrar cuáles son los elementos necesarios para la construcción de un modelo de colectividades tridiagonales capaz de describir la transición dada por el parámetro λ .

En el capítulo 7 se presenta una introducción histórica de las colectividades embebidas, se resume el estado actual de conocimiento de las mismas en comparación con las colectividades clásicas en Teoría de Matrices Aleatorias y se presentan las definiciones y expresiones necesarias para su construcción, que se utilizarán en los cálculos que se realizan en el trabajo. En el capítulo 8 se exponen los resultados sobre matrices tridiagonales obtenidos hasta el momento en el contexto del Caos Cuántico y se describe el método de tridiagonalización utilizado. Y en el capítulo 9 se describen los cálculos realizados y los resultados obtenidos.

Capítulo 7

Colectividades embebidas

7.1. Introducción histórica

La Teoría de Matrices Aleatorias (TMA) ha tenido enorme éxito en la descripción de las fluctuaciones espectrales de los sistemas cuánticos. Originalmente introducida por Wigner en los años 50 (WIGNER, 1955a,b) y desarrollada por Wigner, Dyson, Mehta y otros (MEHTA, 1960; DYSON, 1962a,b,c; DYSON and MEHTA, 1963; MEHTA and DYSON, 1963) en los años 60 y 70 para describir los espectros de núcleos complejos, se perfiló a partir de la conjetura de Bohigas en 1984 (BOHIGAS *et al.*, 1984) como una teoría muy general, aplicable al estudio de la estadística espectral de una amplia variedad de sistemas cuánticos. Las investigaciones sobre distintos tipos de billares cuánticos, *kicked rotor*, *kicked top*, oscilador cuántico, potenciales polinómicos en dos dimensiones, experimentos con átomos de hidrógeno en campos magnéticos fuertes, microondas en cavidades metálicas (billares de microondas superconductores) y resonancias acústicas en bloques de aluminio, entre otras (STOCKMANN and STEIN, 1990; SINAI and BUNIMOVICH, 1980; MARKUS *et al.*, 1992; ELLEGAARD *et al.*, 1995; FRIEDRICH and WINTGEN, 1989; FISHMAN *et al.*, 1989), llevadas a cabo en la era post Bohigas (a partir de 1984) han hecho de la TMA uno de los temas centrales en Caos Cuántico.

Sin embargo, ya en los años 70 con las primeras aplicaciones de la TMA a los espectros nucleares se encontraron ciertas objeciones. En una matriz TMA todo estado del espacio de Hilbert está conectado con cualquier otro estado por un elemento de matriz no nulo que es una variable aleatoria independiente; con estados de N partículas esto quiere decir que todas ellas interaccionan simultáneamente, es decir, implica interacciones a N cuerpos. En cambio, tras el éxito del modelo de capas para la descripción del núcleo atómico era ya conocido que su dinámica estaba gobernada, o al menos podía ser satisfactoriamente descrita, por interacciones a uno y dos cuerpos (campo medio e interacción residual a dos cuerpos).

En particular, la primera diferencia notable entre los modelos con interacciones a dos cuerpos, como el modelo de capas, y la predicción de la TMA que se analizó fue la densidad de estados. La diagonalización de una matriz TMA, en particular de una matriz GOE, que es la colectividad que por su simetría corresponde al núcleo atómico, da como resultado una secuencia de autovalores cuya distribución es la conocida como ley del semicírculo de Wigner, mientras que la distribución de autovalores de una matriz del modelo de capas es esencialmente una gaussiana, excepto quizá en los bordes ¹. Esto llevó a French y Wong y a Bohigas y Flores en una serie de trabajos pioneros (FRENCH and WONG, 1970, 1971; BOHIGAS and FLORES, 1971a,b) a utilizar un nuevo tipo de matrices aleatorias que tenían en cuenta las correlaciones entre los elementos de matriz introducidas por la interacción a dos cuerpos y el principio de exclusión de Pauli. Esta nueva colectividad es definida con rigor en (BOHIGAS and FLORES, 1971b) y denominada por primera vez y a partir de entonces TBRE (*two-body random ensemble*, colectividad aleatoria a dos cuerpos). Dado que se trata de matrices cuyos elementos son variables aleatorias, estarían englobadas también en la TMA. Por tanto, a partir de ahora haremos una distinción entre las colectividades clásicas, que denotaremos con TMAC, y la TMA en general, que comprende las colectividades clásicas y las demás colectividades de matrices aleatorias que iremos introduciendo.

En su origen el TBRE, introducido para el estudio de espectros nucleares, se definió de la siguiente manera (BOHIGAS and FLORES, 1971b): considerando un sistema de N fermiones idénticos distribuidos en un espectro de niveles de partícula independiente degenerados, se toman los elementos de matriz a dos cuerpos como variables aleatorias independientes y se construye la matriz correspondiente al sistema de N partículas con un momento angular total dado J mediante técnicas estándar de modelo de capas. De los primeros cálculos con la colectividad TBRE se concluyó que la densidad era gaussiana y las fluctuaciones espectrales eran las mismas que las predichas por la TMAC. Por tanto, la colectividad TBRE era más apropiada para la descripción de los núcleos que la colectividad GOE. En realidad, para ser exactos, al principio, se encontraron algunas diferencias entre la estadística espectral del TBRE y la de la TMAC (BOHIGAS and FLORES, 1971b), que arrojaron dudas sobre la validez del modelo TBRE y motivaron estudios

¹Resultados recientes prueban que una forma binomial continua es capaz de reproducir muy bien densidades experimentales de núcleos (ZUKER, 2001; ZUKER *et al.*, 2001). En los años 70 la gaussiana era la mejor forma disponible para describir la densidad nuclear. Nótese que tanto la gaussiana como la binomial son funciones que crecen hasta un cierto valor máximo para luego volver a decrecer; por tanto, al decir que describen correctamente la densidad nuclear nos referimos a la zona de baja energía, ya que las densidades reales son funciones siempre crecientes.

TMAC *vs.* TBRE que proponían la vuelta a las colectividades clásicas como un modelo mejor, dejando de nuevo abierta la cuestión de si era más correcta la descripción de los sistemas de muchas partículas con interacciones de rango mayor que dos. Más tarde se descubrió que fue el carácter no ergódico del TBRE lo que motivó un análisis incorrecto de sus fluctuaciones, que llevó a la conclusión errónea de que éstas eran distintas a las predichas por la TMAC (BOHIGAS *et al.*, 1974). La no ergodicidad implica que la densidad media (parte suave de la densidad) sobre la que se superponen las fluctuaciones no es la misma para todos los miembros de la colectividad y, por tanto, no puede utilizarse la densidad promedio para realizar el reescalado de todos los espectros.

Ya en (FRENCH and WONG, 1970) French y Wong mencionan que la forma de la densidad de cada miembro de la colectividad GOE es esencialmente la misma mientras que las fluctuaciones en la densidad de un miembro a otro de la colectividad TBRE son considerablemente mayores. Por otro lado, en (BOHIGAS and FLORES, 1971b) Bohigas y Flores estudian las distribuciones individuales de cada autovalor en GOE y en TBRE y encuentran que las distribuciones para TBRE solapan unas con otras mucho más que para GOE, ya que las desviaciones estándar de cada una son mucho menores en este último caso. En ese sentido el espectro GOE es, según Bohigas y Flores, mucho más “rígido”. En un estudio más reciente Flores *et al.* ponen de manifiesto que la no ergodicidad del TBRE es básicamente debida a la dispersión en el primer y segundo momentos de la densidad de estados, es decir, en el centro y anchura del espectro; los momentos de orden superior no tendrían apenas influencia (FLORES *et al.*, 2001). Muestran que una vez normalizados los dos primeros momentos ya puede realizarse un análisis de fluctuaciones correcto, utilizando la nueva densidad media para realizar el reescalado. O bien, otra posibilidad es realizar un reescalado individual de cada miembro de la colectividad. De cualquier manera, una vez conocido y tenido en cuenta el problema, se concluye que las fluctuaciones del TBRE son exactamente iguales a las predichas por la TMAC.

El problema de la ergodicidad está relacionado con la dimensión del espacio utilizado. La no ergodicidad de las colectividades embebidas se observa en los cálculos numéricos que se realizan, para los que se deben utilizar dimensiones que sean manejables. Sin embargo, French y Wong demostraron analíticamente ergodicidad en la densidad para dimensión infinita en EGOE(k), un tipo de colectividades, generalización del TBRE, que se definen con rigor más abajo (MON and FRENCH, 1975). Benet y Weidenmüller señalan que la dispersión en el primer y segundo momentos son cantidades que tienden a cero en el límite de dimensión infinita; lo que ocurre es que este decaimiento es muy lento (con potencias inversas del logaritmo) y con las dimensiones que normalmente se utilizan no se puede llegar a apreciar

(BENET and WEIDENMULLER, 2003).

La generalización natural de la colectividad TBRE son las llamadas colectividades embebidas, $EE(k)$ (*embedded ensembles*), que representan interacciones a k cuerpos en general. Es decir, se tiene una matriz TMAC en el espacio de k partículas y se construye la matriz correspondiente al sistema de N partículas a partir de los elementos de matriz a k cuerpos independientes. Además, en su forma más sencilla se consideran las partículas sin espín, aunque se trate de fermiones. Por supuesto, el espín y otros aspectos que pueden ser importantes en determinados casos pueden tenerse en cuenta utilizando versiones adaptadas de las colectividades embebidas. Indicaremos algunas de ellas más adelante.

Así como la colectividad GOE es la más popular entre las colectividades clásicas de matrices aleatorias, ya que es la que describe un mayor número de sistemas físicos conocidos, la llamada colectividad $EGOE(k)$ es por el mismo motivo la más popular de las colectividades embebidas, es decir, se trata de la colectividad $EE(k)$ en que la matriz TMAC en el espacio de k partículas es un GOE. De hecho, el $EGOE(k)$ fue la primera colectividad embebida definida rigurosamente y denominada como tal (MON and FRENCH, 1975).

Por otro lado es obvio que los casos físicamente más interesantes son $k = 1$ y 2 , es decir, interacciones a 1 y 2 cuerpos, que son las que gobiernan los sistemas físicos conocidos de muchos cuerpos. De hecho, aunque las colectividades embebidas nacieron en el contexto de la Física Nuclear, otros muchos sistemas se han estudiado cuyas fluctuaciones espectrales son correctamente descritas por la TMA, y todos estos sistemas de muchos cuerpos (átomos, 'clusters' atómicos, moléculas, puntos cuánticos, etc. (FLAMBAUM *et al.*, 1994; ZIMMERMANN *et al.*, 1988; JALABERT *et al.*, 1992)) comparten con los núcleos atómicos la propiedad de ser gobernados por interacciones a 1 y 2 cuerpos. Por tanto, las colectividades embebidas deben ser consideradas como modelos estocásticos generales para sistemas de muchos cuerpos.

Las colectividades embebidas con interacciones a 1 y 2 cuerpos se denotan como $EE(1+2)$. En particular, cuando los elementos de matriz de la interacción a dos cuerpos constituyen un GOE tenemos el llamado $EGOE(1+2)$, que, según se ha razonado hasta ahora, es el caso físicamente más interesante y será la colectividad en la que se centre este trabajo. Sin embargo, el estudio de la colectividad $EGOE(k)$ con interacciones a k cuerpos en general es también muy importante. Su interés reside esencialmente en el hecho de que la evolución de un sistema de N partículas con interacción a k cuerpos desde $k = 2$ hasta $k = N$ nos lleva del sistema realista con interacciones a dos cuerpos $EGOE(2)$ a la matriz GOE, con interacciones a N cuerpos. En el primer caso, no deja de ser un hecho llamativo que una colectividad de matrices cuyos elementos son números aleatorios, aunque dichas matrices incluyan las correlaciones inducidas por la interacción a dos cuerpos y el principio de ex-

clusión de Pauli, pueda describir correctamente las propiedades del espectro de sistemas físicos. Pero en el segundo, ya es algo realmente sorprendente, y de hecho inexplicable hasta el día de hoy, que sea capaz de describir perfectamente las fluctuaciones espectrales de esos mismos sistemas físicos una colectividad de matrices, como es el GOE, que no posee las correlaciones apropiadas que den cuenta de la interacción física real sino que representa algo tan radicalmente distinto como interacciones a muchos cuerpos.

Por tanto, el análisis de la evolución con k de la colectividad $\text{EGOE}(k)$ puede aportar información interesante y se ha estudiado desde los comienzos del TBRE. Una vez estudiada la colectividad de matrices aleatorias con interacciones a dos cuerpos y comprobado que la densidad de estados obtenida a partir de ella era una gaussiana, French y Wong analizaron en un sistema de $N = 7$ partículas cómo es la transición entre la densidad gaussiana (interacciones a $k = 2$ cuerpos) y la densidad semicircular (interacciones a $k = N$ cuerpos) construyendo las correspondientes colectividades, y comprobaron que las fluctuaciones espectrales siguen en todas ellas la predicción de la TMAC (FRENCH and WONG, 1971).

Muchos otros estudios se han realizado desde los años 70 sobre las colectividades embebidas. Como ya hemos señalado, son un modelo general para la descripción de sistemas finitos de muchas partículas en interacción. Además, se han definido otros tipos de colectividades adaptadas a determinadas características de sistemas concretos. Por ejemplo, las colectividades embebidas particionadas (EE-p) cuyas matrices tienen una estructura en bloques apropiada en situaciones donde la mezcla entre configuraciones alejadas es débil. O las colectividades embebidas con simetrías adicionales (EE-sym), adecuadas para hamiltonianos en que es importante tener en cuenta ciertas simetrías, como el espín o el isoespín en los núcleos.

Las colectividades embebidas presentan la ventaja, frente a la TMAC, de que permiten tener en cuenta parámetros como el número de partículas del sistema, el número de niveles del espectro de partícula independiente considerados o el rango de la interacción. Esta ventaja es a la vez, desde el punto de vista del cálculo analítico, el gran inconveniente de las colectividades embebidas. Precisamente las correlaciones introducidas entre los elementos de matriz debido a la estructura de la interacción y el principio de exclusión de Pauli hacen que estas colectividades sean difíciles de tratar analíticamente. Por ejemplo, las colectividades clásicas son invariantes bajo ciertos tipos de transformaciones (ortogonales-GOE, unitarias-GUE, simplécticas-GSE) y esta invariancia es de gran utilidad en el cálculo de sus propiedades espectrales. Las colectividades embebidas, en la base privilegiada a la que usualmente están asociadas (base de campo medio), presentan esta invariancia en el caso $k = N$, que se corresponde con las colectividades clásicas, pero en los casos interesantes cuando $N > k$ la invariancia se pierde y la determinación

analítica de las propiedades espectrales es mucho más difícil.

Además, la mayoría de cálculos analíticos se realizan en el límite diluido (el número de partículas N y el número de niveles de partícula independiente m tienden a infinito mientras que el cociente N/m tiende a cero), que supone una simplificación respecto al caso general de valores cualesquiera. El primer cálculo analítico, debido a Mon y French, se realizó en este límite y considerando partículas sin espín, lo que elimina enormes complicaciones en los cálculos (MON and FRENCH, 1975). Está basado en la aproximación de la correlación binaria, método ya utilizado por Wigner en su derivación de la densidad de estados del GOE (WIGNER, 1955a). En dicho trabajo se obtiene la forma gaussiana de la densidad, ciertas propiedades sobre la ergodicidad y se apunta que el método puede utilizarse para deducir propiedades sobre las fluctuaciones espectrales.

Existen otros métodos, como el de las variables replicadas, la matriz de segundos momentos, supersimetría y la propia aproximación de correlación binaria que se han utilizado para abordar diversos cálculos analíticos sobre las propiedades de las fluctuaciones espectrales, pero no han dado por el momento demasiada información o resultados verdaderamente interesantes o concluyentes.

El método de las variables replicadas presenta ciertos problemas formales que pueden incluso llevar a resultados falsos (VERBAARSCHOT and ZIRNBAUER, 1985), por lo que fue sustituido por las técnicas de supersimetría, más elegantes y mejor fundamentadas matemáticamente, aunque estas últimas implican cálculo de integrales bastante complicadas y además, en el caso de las colectividades embebidas ofrecen por el momento muy poca información.

Benet *et al.* utilizan la aproximación de correlación binaria para investigar la estadística espectral de las colectividades embebidas (BENET *et al.*, 2001). Establecen, como uno de sus resultados principales, que en el caso $k \ll N \ll m$ las fluctuaciones espectrales siguen la estadística de Poisson. Sin embargo, en un trabajo posterior Srednicki invalida este resultado demostrando que la aproximación de correlación binaria no está justificada en ese tipo de cálculos, ya que implica manipulaciones formales de series divergentes. Ni siquiera puede aplicarse en el caso más sencillo ($k = 1$). Además, señala, es un resultado totalmente contrario a la intuición, puesto que implica que en algún caso las fluctuaciones espectrales de un sistema cuántico con interacciones a dos cuerpos seguirían la estadística de Poisson, mientras que todos los cálculos realizados demuestran lo contrario: que se trata de sistemas caóticos, cuya estadística espectral obedece, por tanto, a la predicción de la TMA (BRODY *et al.*, 1981; GUHR *et al.*, 1998). Por tanto, concluye, la naturaleza de la estadística espectral de las colectividades aleatorias con interacciones a k cuerpos continúa siendo un problema sin resolver (SRED-

NICKI, 2002).

Por otro lado, el análisis numérico presenta también algunas dificultades. El procedimiento para construir una matriz de una colectividad embebida es más costoso que para construir una matriz de una colectividad clásica de la misma dimensión, ya que requiere un primer cálculo de los elementos de matriz de la interacción a k cuerpos y un segundo cálculo para la propagación al espacio de N partículas. El coste es claramente mayor cuanto mayor es el rango k de la interacción. Además, una vez construida la matriz, ya sea de una colectividad embebida o de una colectividad clásica, se requiere un tiempo de computación para diagonalizarla y obtener así el espectro de autovalores, que aumenta también con la dimensión del espacio. Normalmente es deseable trabajar con dimensiones grandes ya que la estadística mejora y además, cuanto mayor sea la dimensión es más razonable tomar como válidos los resultados disponibles en el límite diluido (siempre que se cumplan las condiciones arriba señaladas).

La segunda dificultad tiene que ver con la no ergodicidad de las colectividades embebidas. Como hemos señalado, las fluctuaciones en la densidad de un miembro a otro de la colectividad son grandes comparadas con las de las colectividades clásicas y no permiten hacer un reescalado utilizando la densidad media de la colectividad. Como se vio en la Parte I, un reescalado correcto es esencial para la posterior determinación de las fluctuaciones espectrales. Sin embargo, una vez identificado el problema, este no supone una grave dificultad, ya que aunque siempre es más limpio un reescalado utilizando la densidad promedio sobre una colectividad ergódica, la renormalización de los dos primeros momentos o bien un reescalado individual de cada miembro resuelve en la práctica el problema.

Tras esta introducción histórica y descripción conceptual de las colectividades embebidas pasamos ya a una descripción más detallada, donde se explican las definiciones y expresiones necesarias para la construcción de las mismas, con especial énfasis en las colectividades que se utilizarán a lo largo del trabajo.

7.2. Definiciones y objetivos

El hamiltoniano que describe un sistema de N partículas en interacción es de la forma

$$H = H(1) + H(2), \quad (7.1)$$

como se ha indicado anteriormente, donde $H(1)$ representa la parte a un cuerpo o hamiltoniano de partícula independiente, y $H(2)$ representa una interacción a dos cuerpos. Ambos pueden escribirse en términos de operadores

creación y destrucción:

$$H(1) = \sum_{v_i} e_{v_i} a_{v_i}^\dagger a_{v_i} \quad (7.2)$$

$$H(2) = \sum_{v_i < v_j, v_k < v_l} \langle v_k v_l | H(2) | v_i v_j \rangle a_{v_l}^\dagger a_{v_k}^\dagger a_{v_i} a_{v_j}, \quad (7.3)$$

donde $a_{v_i}^\dagger$ crea un fermión en el estado $|v_i\rangle$ y a_{v_i} destruye un fermión en el estado $|v_i\rangle$. La base de estados en la que habitualmente se trabaja $\{|v_i\rangle, i = 1, 2, \dots, m\}$ es la base de autoestados de $H(1)$, por lo que la matriz hamiltoniana $H(1)$ es diagonal en esta base,

$$H(1)_{ij} = \langle v_i | H(1) | v_j \rangle = e_i \delta_{ij}. \quad (7.4)$$

Los niveles $\{e_i, i = 1, 2, \dots, m\}$ forman el espectro de energía de una partícula o espectro de partícula independiente.

Los estados $|v_i v_j\rangle$ son estados antisimetrizados de dos fermiones y, por tanto, las simetrías de los elementos de matriz de la interacción a dos cuerpos son

$$\begin{aligned} \langle v_k v_l | H(2) | v_j v_i \rangle &= - \langle v_k v_l | H(2) | v_i v_j \rangle, \\ \langle v_i v_j | H(2) | v_k v_l \rangle &= \langle v_k v_l | H(2) | v_i v_j \rangle. \end{aligned} \quad (7.5)$$

La matriz hamiltoniana H en el espacio de N partículas se define en términos de los elementos de matriz de $H(1)$ y $H(2)$ mediante la estructura del producto directo del espacio de Fock. Así, los estados $|v_1 v_2 \dots v_N\rangle$ son productos directos de los estados de una partícula $|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_N\rangle$, antisimetrizados.

Podemos entonces escribir la matriz H como la suma de dos términos, $H = H_1 + H_2$, uno proveniente de $H(1)$ y otro proveniente de $H(2)$. La parte que proviene de $H(1)$ se calcula fácilmente como se explicó en la Parte I. La matriz hamiltoniana es diagonal y la energía de cada estado es la suma de las energías de los estados individuales:

$$\langle v_1 v_2 \dots v_N | H(1) | v_1 v_2 \dots v_N \rangle = \sum_{i=1}^N \langle v_i | H(1) | v_i \rangle = \sum_{i=1}^N e_{v_i}. \quad (7.6)$$

La parte proveniente de $H(2)$ se calcula en términos de los elementos de matriz de $H(2)$ en el espacio de dos partículas. Los elementos no nulos de

esta parte de son de tres tipos,

$$\begin{aligned}
\langle v_1 v_2 \cdots v_N | H(2) | v_1 v_2 \cdots v_N \rangle &= \sum_{v_i < v_j \leq v_N} \langle v_i v_j | H(2) | v_i v_j \rangle, \\
\langle v_p v_2 v_3 \cdots v_N | H(2) | v_1 v_2 \cdots v_N \rangle &= \sum_{v_i = v_2}^{v_N} \langle v_p v_i | H(2) | v_1 v_i \rangle, \\
\langle v_p v_q v_3 \cdots v_N | H(2) | v_1 v_2 v_3 \cdots v_N \rangle &= \langle v_p v_q | H(2) | v_1 v_2 \rangle, \quad (7.7)
\end{aligned}$$

y todos los demás (aquellos en los que los dos estados de N partículas se diferencian en más de dos estados individuales) son nulos debido a las reglas de selección de la interacción a dos cuerpos.

La dimensión de la matriz H es el número de configuraciones posible con N partículas en m niveles, es decir, $d = C(N, m) \equiv \binom{N}{m}$. Cada estado de N partículas está conectado por el hamiltoniano de la interacción a dos cuerpos con $K = 1 + N(m - N) + N(N - 1)(m - N)(m - N - 1)/4$ estados, como se deduce fácilmente de (7.7). Por tanto, del total de $C(N, m)^2$ elementos de matriz de H_2 , $C(N, m)K$ son no nulos y $C(N, m)[C(N, m) - K]$ son nulos. Además, el número de elementos de matriz independientes es $d_2(d_2 + 1)/2$, donde d_2 es la dimensión del espacio de dos partículas, $d_2 = C(m, 2)$. El número de variables independientes correspondiente a H_1 es el número m de niveles del espectro de partícula independiente. Así, el número total de variables independientes en H es $d_2(d_2 + 1)/2 + m$. Por tanto, es claro que la matriz H contiene en general muchos ceros entre sus elementos (tantos más cuanto mayor sea la diferencia $(m - N)$) y que entre sus elementos no nulos hay una fuerte correlación.

Por ejemplo, con $N = 6$ partículas en $m = 11$ niveles se tiene

$$\begin{aligned}
d &= C(11, 6) = 462, \quad K = 181, \quad d_2 = 55 \\
\text{Total} &= d^2 = 213444 \\
\text{Nulos} &= 129822 \\
\text{No nulos} &= 83622 \\
\text{Independientes} &= \frac{d_2(d_2 + 1)}{2} + m = 1551. \quad (7.8)
\end{aligned}$$

Todas las expresiones dadas hasta este momento son válidas para sistemas de partículas con interacción a dos cuerpos en general, es decir, cualquier hamiltoniano del tipo (7.1) posee las características que se han descrito, independientemente de que se trate de matrices aleatorias o no. Si se toman los niveles de energía del espectro de partícula independiente, e_i , y los elementos de matriz de la interacción a dos cuerpos, $\langle v_k v_l | H(2) | v_i v_j \rangle$, como variables aleatorias, entonces las matrices hamiltonianas H construidas de la manera

en que se ha descrito constituyen una colectividad embebida en el espacio de N partículas en m niveles.

En particular, si los elementos de matriz de la interacción a dos cuerpos, constituyen un GOE, es decir, $\langle v_k v_l | H(2) | v_i v_j \rangle$ son variables aleatorias gaussianas independientes con promedio cero y la razón entre las varianzas de los elementos diagonales y no diagonales es 2,

$$\begin{aligned} \overline{\langle v_k v_l | H(2) | v_i v_j \rangle} &= 0, \\ \overline{|\langle v_k v_l | H(2) | v_i v_j \rangle|^2} &= v^2(1 + \delta_{(ij),(kl)}), \end{aligned} \quad (7.9)$$

donde v es una constante que puede elegirse a conveniencia, siendo la parte a un cuerpo, $\{e_i = \langle v_i | H(1) | v_i \rangle\}$, cualquier tipo de espectro aleatorio, entonces la colectividad embebida que se obtiene recibe el nombre de EGOE(1+2).

Si se considera únicamente la parte de la interacción a dos cuerpos, es decir, H_2 , la colectividad se denomina EGOE(2). Y su generalización a interacciones de rango k se denomina, por extensión, EGOE(k). Es decir, se construye la matriz $H(k)$ en el espacio de k partículas, cuya dimensión es $d_k = C(m, k)$, y los elementos de matriz de la interacción a k cuerpos se toman como variables aleatorias gaussianas de manera que constituyan un GOE. La propagación al espacio de N partículas se realiza de la misma manera y los elementos de H_k se expresan en términos de elementos de matriz a k cuerpos en este caso.

En este trabajo analizamos en primer lugar la evolución de la colectividad EGOE(k) con el rango de la interacción, k . En un sistema de N partículas estudiamos la transición desde $k = 2$ hasta $k = N$. La colectividad con interacciones a dos cuerpos posee una densidad media cuya forma puede ser descrita por una función gaussiana y esta evoluciona hacia el semicírculo de Wigner en $k = N$, caso que se corresponde con la colectividad GOE. Además, las fluctuaciones espectrales son de tipo GOE durante toda la transición. Una vez comprobados estos dos hechos conocidos, pasaremos al estudio de las formas tridiagonales de las matrices.

Las matrices pertenecientes a la colectividad EGOE(2) poseen, por su construcción, correlaciones entre sus elementos, mientras que en las pertenecientes a la colectividad GOE todos sus elementos son independientes salvo por la simetría. Por tanto, esperamos observar la evolución de las correlaciones desde $k = 2$ hasta $k = N$, en que estas desaparecen, y analizaremos la importancia de las mismas durante la transición.

En segundo lugar, trataremos de construir un modelo de matrices tridiagonales para describir la transición de un sistema de partículas sin interacción a un sistema con interacciones a dos cuerpos. Es usual el estudio de la colectividad EGOE(1+2) mediante el hamiltoniano

$$H = H(1) + \lambda H(2), \quad (7.10)$$

variando el parámetro de control λ entre los valores 0 (sistema sin interacción - estadística de Poisson) y 1 (sistema con interacción a dos cuerpos - estadística GOE). El primer estudio de este tipo es debido a S. Åberg. En él se analizan diversos observables en estados nucleares de alto espín durante la transición en un hamiltoniano del tipo (7.10) (ÅBERG, 1990). Posteriormente, se han realizado diversos estudios en sistemas de partículas en interacción analizando distintos aspectos de la transición del sistema cuántico integrable al caótico, mostrando que el hamiltoniano (7.10) es un buen modelo para la descripción de transiciones de este tipo (JACQUOD and SHEPELYANSKY, 1997; BERKOVITS and AVISHAI, 1998; SILVESTROV, 1998; FLAMBAUM and IZRAILEV, 1997; SONG, 2000).

Es importante señalar un matiz que diferencia la manera de tratar los sistemas sin interacción como se hizo en la Parte I y como se hará en esta Parte. Como se explicó en la sección 4.2, el espectro de partícula independiente está formado en principio por un número infinito de niveles de energía. Y el espectro del sistema de N partículas construido a partir de él constará, por tanto, también de infinitos niveles. En la práctica calculamos sólo un número finito de niveles del espectro de manera que este sea manejable.

Hay dos maneras de construir una región finita del espectro del sistema. Ambas se explicaron en detalle en la sección 4.2. La primera consiste en fijar el número m de niveles del espectro de partícula independiente, lo que se denomina el *espacio de valencia*, y calcular todas las configuraciones posibles de N partículas en dichos niveles. Estos serían los *estados del modelo*, pero existen otros estados que, perteneciendo a la ventana de energía que abarca el espectro, no se obtienen con este modelo. Son los llamados *estados intrusos*. Por tanto, la secuencia de niveles obtenida de esta manera no estaría completa.

La otra manera de construir el espectro finito, que resuelve este problema, consiste en fijar un límite a la energía, de manera que estemos seguros de que empiezan a perderse niveles sólo a energías mayores que esta energía máxima, E_{max} . En sistemas sin interacción es fácil encontrar un límite a la energía que garantice que obtenemos una secuencia completa de niveles:

$$E_{max} = \sum_{i=1}^{N-1} e_i + e_{m+1}. \quad (7.11)$$

Esta es la manera en que se construyeron los espectros de sistemas sin interacción en la Parte I. En cambio, en sistemas con interacción el problema es bastante más complicado. Es prácticamente imposible determinar la energía correspondiente al primer estado intruso, ya que ésta depende de la interacción entre estados del modelo y estados intrusos. Por tanto, se utiliza la descripción del espacio de valencia, es decir, se toman todos los estados

del modelo. Consecuentemente, en el espectro obtenido, según aumenta la energía, faltarán cada vez más niveles y, además, las energías más altas de los estados del modelo pueden verse modificadas por la interacción con estados intrusos. Sin embargo, esta es la única manera que se tiene en la práctica de tratar este tipo de sistemas y es la manera en que se tratarán en este trabajo.

Magnitudes como, por ejemplo, la densidad de estados no pueden predecirse correctamente con este tipo de modelos finitos, ya que la densidad en los sistemas reales es una función siempre creciente y, en cambio, el modelo finito predice una densidad que crece hasta un cierto valor para después volver a decaer a cero como consecuencia de la finitud del espacio. Sin embargo, en regiones de baja energía donde la contribución de los estados intrusos es pequeña las predicciones sí pueden ser muy buenas. Este argumento se ilustra en la figura 4.2.

Así pues, el proyecto de esta parte del trabajo es construir, utilizando el modelo del espacio de valencia, colectividades embebidas que representan hamiltonianos del tipo (7.10) para distintos valores de λ , realizar un análisis de la forma tridiagonal de cada colectividad de matrices de la manera en que se describe en el capítulo siguiente y, a partir de la información obtenida, tratar de encontrar los elementos necesarios que permitan la construcción de un modelo de colectividades tridiagonales capaz de describir esta transición.

Capítulo 8

Matrices tridiagonales

En esta sección se detalla el método de tridiagonalización utilizado en este trabajo (método de Lanczos) y se presentan los resultados, tanto numéricos como analíticos, sobre matrices tridiagonales obtenidos hasta el momento y que sean relevantes en nuestro campo de estudio, el caos cuántico. En la sección de resultados numéricos se describen los estudios realizados en colectividades tridiagonales, donde se separan la parte suave y las fluctuaciones en los elementos de matriz y se analizan diversos resultados sobre la relación entre estas fluctuaciones y las espectrales. En la sección de resultados analíticos se presenta un modelo tridiagonal de colectividades clásicas basado en un método de tridiagonalización distinto al método de Lanczos y que permite el cálculo exacto de las distribuciones de probabilidad de los elementos de la matriz tridiagonal.

8.1. Método de Lanczos

El método de Lanczos ha sido tradicionalmente usado para la obtención de los autovalores más pequeños de una matriz (primeros niveles de energía de un hamiltoniano). La tridiagonalización se lleva a cabo por pasos o iteraciones, de manera que en cada paso se tiene tridiagonalizado un bloque de dimensión cada vez mayor; y sucede que los autovalores más pequeños del bloque obtenido tras un número reducido de iteraciones reproducen con gran precisión los autovalores más pequeños de la matriz completa. Así, este método permite obtener estos primeros autovalores muy fácil y rápidamente, ya que no requiere la diagonalización ni tridiagonalización completa de la matriz.

Dada una matriz H , con una base de vectores asociada $\{|i\rangle, i = 1, 2, \dots, n\}$, el método de Lanczos genera de manera iterativa una nueva base $\{|v_i\rangle, i = 1, 2, \dots, n\}$ (base de Lanczos) en la que H queda reducida a una matriz tridiagonal L (matriz de Lanczos). Por conveniencia, introducimos los vectores

auxiliares $|u_i\rangle = H|v_i\rangle$, que resultan de actuar con H sobre los vectores de la base de Lanczos.

El primer vector de la base de Lanczos, denominado pivote, es cualquier combinación lineal normalizada de los vectores de la base inicial:

$$|v_1\rangle = \sum_{i=1}^d c_1^i |i\rangle. \quad (8.1)$$

En general se elige como una combinación aleatoria. Los sucesivos vectores de la base de Lanczos se obtienen actuando con H sobre los vectores precedentes. Cada nueva aplicación de H sobre un vector de la base de Lanczos es el inicio de una nueva iteración del método.

El segundo vector de la base de Lanczos, $|v_2\rangle$, se define mediante la relación

$$|u_1\rangle = H|v_1\rangle = \alpha_1|v_1\rangle + \beta_2|v_2\rangle. \quad (8.2)$$

El motivo de la notación para las constantes de la combinación se verá más adelante. Imponiendo que los vectores de Lanczos formen un conjunto ortonormal, $\langle v_i|v_j\rangle = \delta_{ij}$, se tiene

$$\begin{aligned} \langle v_1|u_1\rangle &= \langle v_1|H|v_1\rangle \\ &= \alpha_1 \langle v_1|v_1\rangle + \beta_2 \langle v_1|v_2\rangle = \alpha_1 \Rightarrow \alpha_1 = L_{11} \\ \langle v_2|u_1\rangle &= \langle v_2|H|v_1\rangle \\ &= \alpha_1 \langle v_2|v_1\rangle + \beta_2 \langle v_2|v_2\rangle = \beta_2 \Rightarrow \beta_2 = L_{12} = L_{21}. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Es decir, α_1 y β_2 son los primeros elementos diagonal y no diagonal respectivamente de la matriz de Lanczos. α_1 se calcula como $\langle v_1|u_1\rangle$ y β_2 como la norma del vector $|w_2\rangle \equiv \beta_2|v_2\rangle = |u_1\rangle - \alpha_1|v_1\rangle$. Nótese que $\langle v_2|H|v_1\rangle = \langle v_1|H|v_2\rangle = \beta_2$, ya que la matriz H de partida es simétrica.

En la siguiente iteración se calcula el vector $|u_2\rangle$, y el tercer vector de la base de Lanczos, $|v_3\rangle$, queda definido por la relación

$$|u_2\rangle = H|v_2\rangle = \beta_2|v_1\rangle + \alpha_2|v_2\rangle + \beta_3|v_3\rangle. \quad (8.4)$$

Imponiendo ortonormalidad,

$$\begin{aligned} \langle v_1|u_2\rangle &= \langle v_1|H|v_2\rangle = \beta_2 \langle v_1|v_1\rangle + \alpha_2 \langle v_1|v_2\rangle \\ &\quad + \beta_3 \langle v_1|v_3\rangle = \beta_2 \Rightarrow \beta_2 = L_{12} \\ \langle v_2|u_2\rangle &= \langle v_2|H|v_2\rangle = \beta_2 \langle v_2|v_1\rangle + \alpha_2 \langle v_2|v_2\rangle \\ &\quad + \beta_3 \langle v_2|v_3\rangle = \alpha_2 \Rightarrow \alpha_2 = L_{22} \\ \langle v_3|u_2\rangle &= \langle v_3|H|v_2\rangle = \beta_2 \langle v_3|v_1\rangle + \alpha_2 \langle v_3|v_2\rangle \\ &\quad + \beta_3 \langle v_3|v_3\rangle = \beta_3 \Rightarrow \beta_3 = L_{23} = L_{32}. \end{aligned} \quad (8.5)$$

Es decir, el coeficiente de $|v_1\rangle$ es β_2 , definido en la iteración anterior; α_2 es el segundo elemento diagonal de la matriz de Lanczos y β_3 es el segundo elemento no diagonal. α_2 se calcula como $\langle v_2|u_2\rangle$ y β_3 como la norma del vector $|w_3\rangle \equiv \beta_3|v_3\rangle = |u_2\rangle - \beta_2|v_1\rangle - \alpha_2|v_2\rangle$.

En la i -ésima iteración tenemos

$$\begin{aligned}
|u_i\rangle &= H|v_i\rangle = \beta_i|v_{i-1}\rangle + \alpha_i|v_i\rangle + \beta_{i+1}|v_{i+1}\rangle \\
\langle v_{i-1}|u_i\rangle &= \langle v_{i-1}|H|v_i\rangle = \beta_i \langle v_{i-1}|v_{i-1}\rangle + \alpha_i \langle v_{i-1}|v_i\rangle \\
&\quad + \beta_{i+1} \langle v_{i-1}|v_{i+1}\rangle = \beta_i \Rightarrow \beta_i = L_{i-1,i} \\
\langle v_i|u_i\rangle &= \langle v_i|H|v_i\rangle = \beta_i \langle v_i|v_{i-1}\rangle + \alpha_i \langle v_i|v_i\rangle \\
&\quad + \beta_{i+1} \langle v_i|v_{i+1}\rangle = \alpha_i \Rightarrow \alpha_i = L_{ii} \\
\langle v_{i+1}|u_i\rangle &= \langle v_{i+1}|H|v_i\rangle = \beta_i \langle v_{i+1}|v_{i-1}\rangle + \alpha_i \langle v_{i+1}|v_i\rangle \\
&\quad + \beta_{i+1} \langle v_{i+1}|v_{i+1}\rangle = \beta_{i+1} \Rightarrow \beta_{i+1} = L_{i,i+1} = L_{i+1,i}. \quad (8.6)
\end{aligned}$$

Calculamos α_i como $\langle v_i|u_i\rangle$ y β_{i+1} como la norma del vector $|w_{i+1}\rangle \equiv \beta_{i+1}|v_{i+1}\rangle = |u_i\rangle - \beta_i|v_{i-1}\rangle - \alpha_i|v_i\rangle$. Es importante notar que imponiendo la ortogonalidad de cada vector $|v_{i+1}\rangle$ con $|v_i\rangle$ y $|v_{i-1}\rangle$ se cumple automáticamente la condición de ortogonalidad con todos los anteriores, ya que por construcción $|u_i\rangle = H|v_i\rangle$ es ortogonal a todos los vectores $|v_{i-2}\rangle, |v_{i-3}\rangle, \dots, |v_1\rangle$ ($\langle v_i|H|v_{i-k}\rangle = 0, k \geq 2$).

De esta manera continua el proceso hasta que en la n -ésima iteración el vector $|w_{n+1}\rangle = 0$, con lo que $\beta_{n+1} = 0$ y la base y la matriz de Lanczos han sido completadas:

$$L = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & & & \\ & \beta_3 & \alpha_3 & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & \alpha_{n-1} & \beta_n & \\ & & & & \beta_n & \alpha_n & \end{pmatrix}. \quad (8.7)$$

8.2. Resultados numéricos

Los primeros cálculos en la misma línea en la que se desarrolla este trabajo se deben a A. P. Zuker. La idea de la simplificación que constituye disponer de una forma canónica tridiagonal para las matrices aleatorias con interacciones a 1+2 cuerpos aparece por primera vez en (ZUKER *et al.*, 2001). En dicho trabajo, donde se analiza la forma tridiagonal de la matriz hamiltoniana de varios núcleos, Zuker *et al.* concluyen que α_i y β_i , como funciones del contador i , pueden ser descritas por una ley suave sobre la que se superponen fluctuaciones. La ley suave es en general distinta para los elementos diagonales y los no diagonales y el tamaño de las fluctuaciones también. En la figura

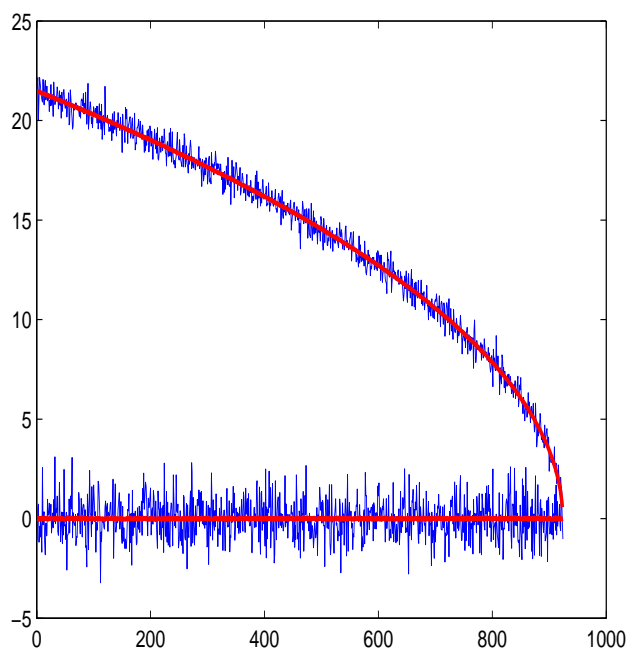


Figura 8.1: Elementos de matriz de la forma tridiagonal de una matriz GOE de dimensión 924 (azul) y parte suave de los mismos (rojo). La curva superior representa los elementos no diagonales, β_i , y la inferior, los elementos diagonales, α_i .

8.1 se muestra, como ejemplo, la representación de una matriz tridiagonal correspondiente a un GOE de dimensión 924.

La manipulación de las matrices en forma tridiagonal ya supone en sí misma una simplificación importante, ya que reduce considerablemente el número de variables a manejar: este es $O(N^2)$ en la matriz original (en la base del campo medio) y se reduce a $O(N)$ en la matriz tridiagonal. Además, una matriz tridiagonal es computacionalmente mucho más fácil y rápidamente diagonalizable que la matriz original, lo que reduce también considerablemente el tiempo y potencia de cálculo necesarios.

Aparte de estas ventajas obvias, la idea de A. P. Zuker, y el objetivo principal que perseguimos aquí, es poder establecer una correspondencia entre la separación de la parte suave y las fluctuaciones en la densidad de estados, como habitualmente se realiza en caos cuántico, y la separación de la parte suave y las fluctuaciones en los elementos de la matriz tridiagonal. De manera que el análisis de fluctuaciones pudiera realizarse directamente a través de los elementos de la matriz tridiagonal sin necesidad de llevar a cabo una

diagonalización para obtener la densidad de estados. Además, si se consigue determinar con precisión la forma tridiagonal que representa una determinada colectividad de matrices esto representaría una gran ventaja. Por un lado, por la simplificación que supone, sobre todo en el caso de colectividades con interacciones a k cuerpos, construir una matriz tridiagonal en lugar de la correspondiente matriz a partir del procedimiento estándar, y por otro, porque podría suponer una simplificación y un nuevo punto de partida a la hora de abordar cálculos analíticos. De hecho, existen ya cálculos analíticos que se han realizado con modelos de matrices tridiagonales en las colectividades clásicas (DUMITRIU and EDELMAN, 2002). Detallamos algunos de ellos en la siguiente sección.

En (ZUKER *et al.*, 2001) la atención se centra en el estudio de la parte suave de los elementos de la matriz de Lanczos y se establece que esta depende de la dimensión del espacio, de los primeros momentos de la densidad de estados y del rango de la interacción. Concretamente, se conjetura para la forma de los elementos diagonales una ley constante o logarítmica y para la forma de los elementos no diagonales la función inversa de la densidad de estados (convenientemente renormalizada). Para modelar la densidad de estados de los núcleos estudiados se utiliza una función binomial continua,

$$\text{bin}(x) = \exp \left[\frac{1-N}{2} ((1+2x) \log(1+2x) + (1-2x) \log(1-2x)) \right] \quad (8.8)$$

donde N se relaciona con la dimensión d mediante $d = 2^N$, en lugar de la tradicional gaussiana. Por tanto, se utiliza para la parte suave de los elementos no diagonales la inversa de una binomial. La forma binomial para la densidad de núcleos es propuesta por A. P. Zuker en un trabajo anterior donde comprueba que dicha fórmula reproduce muy bien las densidades experimentales de diversos núcleos (ZUKER, 2001). De la misma manera la binomial inversa ajusta también muy bien la parte suave de los elementos no diagonales de la matriz de Lanczos. Se demuestra además que la inversa de una gaussiana es una buena aproximación a la binomial inversa y que produce también un ajuste bastante bueno.

En la base del trabajo de Zuker, continúa el estudio de modelos tridiagonales de matrices hamiltonianas y se da el paso al análisis de la parte fluctuante de los elementos (MOLINA *et al.*, 2005). Partiendo de la separación de los elementos de matriz en parte suave y fluctuaciones,

$$L_{ij} = \bar{L}_{ij} + \tilde{L}_{ij}, \quad (8.9)$$

se define una nueva colectividad de matrices que depende de un parámetro F :

$$L_{ij}(F) = \bar{L}_{ij} + F\tilde{L}_{ij}. \quad (8.10)$$

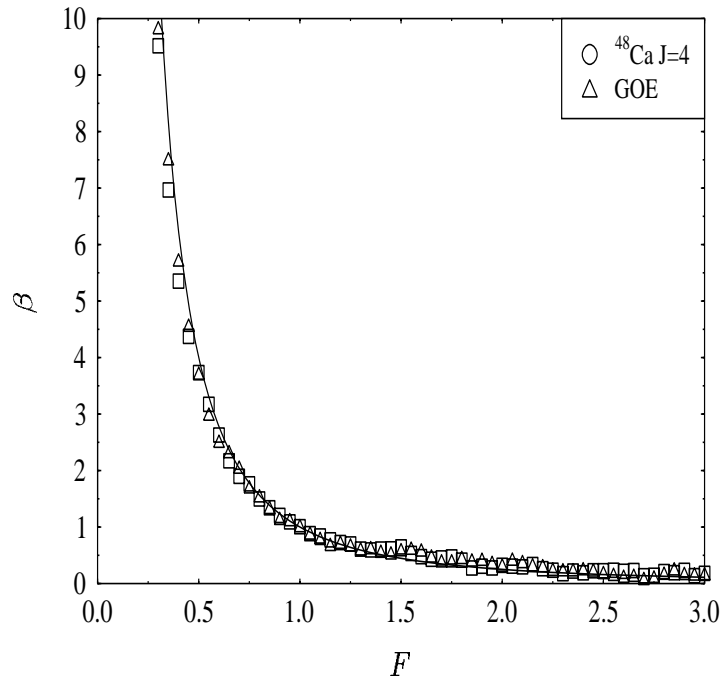


Figura 8.2: Parámetro de repulsión ν (llamado β en (MOLINA *et al.*, 2005)) frente al tamaño de las fluctuaciones F , según la expresión (8.10), para matrices iniciales tipo GOE y modelo de capas nuclear, junto con la curva (8.12).

Es decir, se mantiene fija la parte suave y se varía el tamaño de las fluctuaciones mediante un parámetro de control, F .

Así, utilizando tres matrices iniciales distintas (una matriz GOE, un hamiltoniano de espines y una matriz del modelo de capas nuclear) con parámetro de repulsión $\nu = 1$ y eligiendo como valor inicial $F = 1$, se construyen nuevas colectividades asignando distintos valores a F . La distribución de espaciamientos a primeros vecinos es calculada para cada colectividad y, mediante un ajuste a la fórmula de Izrailev (IZRAILEV, 1988), expresión fenomenológica que reproduce satisfactoriamente las curvas de Wigner ($\nu = 1, 2, 4$) y la distribución de Poisson ($\nu = 0$),

$$P_I(s, \nu) = A_\nu s^\nu \exp \left[-\frac{\pi^2 \nu}{16} s^2 - \left(B_\nu - \frac{\pi \nu}{4} \right) s \right] \quad (8.11)$$

se obtiene el parámetro de repulsión ν como función de F . El resultado para las matrices iniciales tipo GOE y modelo de capas es el que se muestra en la figura 8.2. La curva representada junto a los puntos es la siguiente:

$$\nu = 1/F^2. \quad (8.12)$$

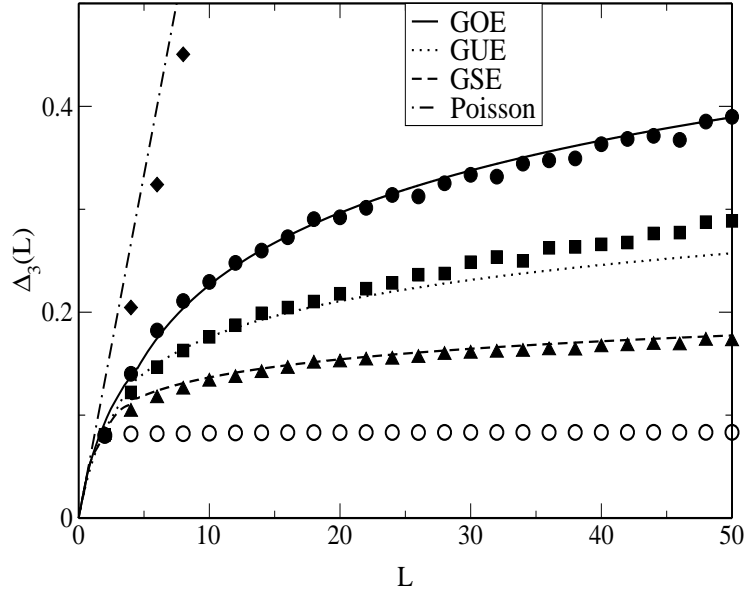


Figura 8.3: Estadístico Δ_3 para colectividades construidas según (8.10) con valores de F que se corresponden con las colectividades clásicas. El acuerdo con la predicción teórica de las mismas es excelente. Aparece además el caso $F = 0$ (espectro completamente rígido, sin fluctuaciones) cuya predicción teórica es una constante de valor $1/12$, con la que también está en buen acuerdo la colectividad construida.

Como puede observarse, el acuerdo entre los puntos (F, ν) y la ley (8.12) es excelente.

Además, como test adicional se calcula el estadístico Δ_3 en cuatro casos seleccionados, en los que los valores de F son tales que se obtienen parámetros de repulsión ν muy próximos a 0, 1, 2 y 4. Estos valores se corresponden con los casos conocidos de la estadística de Poisson y las tres colectividades clásicas, GOE, GUE y GSE, respectivamente. Se comprueba que las curvas de puntos obtenidas están en muy buen acuerdo con las predicciones teóricas conocidas, como puede observarse en la figura 8.3. Por tanto, estas nuevas colectividades construidas a partir del modelo tridiagonal de la ecuación (8.10) reproducen perfectamente tanto las correlaciones de corto alcance (analizadas a partir de la distribución de espaciamentos a primeros vecinos) como las correlaciones de largo alcance (analizadas a partir del estadístico Δ_3) de las colectividades conocidas.

Otro resultado obtenido utilizando el modelo de matrices tridiagonales de la ecuación (8.10) se describe en (RELAÑO *et al.*, 2006), donde se estudia la

estructura de correlación en colectividades con alta rigidez espectral. Considerando valores del parámetro F suficientemente pequeños es posible generar matrices cuyos espectros están caracterizados por una fuerte repulsión de niveles y alta rigidez espectral. Los estadísticos utilizados en este caso son la distribución de espaciamentos a primeros vecinos, que de nuevo se ajusta muy bien con la función de Izrailev, y el estadístico δ_n para las correlaciones de largo alcance. Como se explicó en la sección 3.5 los sistemas caóticos presentan un ruido $1/f$ en el espectro de potencias de la δ_n mientras que los integrables presentan un ruido $1/f^2$ (RELAÑO *et al.*, 2002; FALEIRO *et al.*, 2004). Relañó *et al.* comprueban, utilizando el modelo tridiagonal, que para valores muy altos de la repulsión ν , el ruido $1/f$ sigue presente y se conjetura, por tanto, que cualquier espectro caracterizado por una intensa repulsión de niveles debe presentar ruido $1/f$ (RELAÑO *et al.*, 2006).

En definitiva, se tiene un modelo de matrices tridiagonales muy sencillo en el que la parte suave se mantiene constante y variando la amplitud de las fluctuaciones mediante la multiplicación por un factor se obtienen espectros con distintos tipos de fluctuaciones. Variando el parámetro F desde cero hasta infinito encontramos colectividades de matrices tridiagonales que reproducen las fluctuaciones espectrales correspondientes a sistemas con espectros rígidos ($F = 0, \nu = \infty$), sistemas caóticos ($\nu = 1, 2, 4$) y sistemas integrables genéricos ($F = \infty, \nu = 0$).

Estos resultados suponen un claro avance en la dirección del objetivo que hemos propuesto. Ahora las preguntas son: ¿Es universal (independiente del sistema concreto) la relación (8.12) entre el parámetro de repulsión y la amplitud de las fluctuaciones de los elementos de la matriz tridiagonal? Y si es así, ¿sería posible determinar el tipo de fluctuaciones espectrales de un sistema dado directamente a partir de una medida de la amplitud de las fluctuaciones en su matriz tridiagonal sin necesidad de realizar la diagonalización para obtener el espectro? En respuesta a la primera pregunta, en (MOLINA *et al.*, 2005) se presenta la ecuación (8.12) como un comportamiento universal, conclusión razonable teniendo en cuenta que se analizan tres tipos de sistemas distintos y se obtienen los mismos resultados en todos los casos.

Sin embargo, es importante notar que la única matriz tridiagonal que proviene de un hamiltoniano en los tres casos estudiados es la matriz de partida. El resto de matrices tridiagonales construidas a partir de esta primera mediante la variación del parámetro F son algo artificial y podemos preguntarnos si esas matrices son realmente representativas de los sistemas cuyas fluctuaciones son capaces de reproducir tan fielmente. Es decir, en los casos en que sea posible realizar la transición física real desde $\nu = 1$ hasta otro valor distinto, la matriz obtenida al cabo de la transición ¿tendría la misma forma, una vez tridiagonalizada, que la que se obtiene a partir de la expresión (8.10) con el valor de F correspondiente?

En cualquier caso se tiene un modelo capaz de reproducir las fluctuaciones espectrales de distintos tipos de sistemas cuánticos, lo que representa un avance interesante en el estudio de la forma tridiagonal de las matrices hamiltonianas. Sin embargo, si las características de las matrices obtenidas a partir de la transición física real no se corresponden exactamente con las del modelo propuesto esto implica que no podríamos estudiar las fluctuaciones de los elementos de la forma tridiagonal de cualquier matriz hamiltoniana por comparación con las del modelo. Es decir, es posible que sólo con la medida del tamaño de las fluctuaciones en los elementos, F , no podamos obtener correctamente el tipo de fluctuaciones espectrales del sistema a partir de la ecuación (8.12).

En el caso de las colectividades clásicas los cálculos son sencillos. Por un lado, es fácil ver numéricamente que la tridiagonalización de matrices GOE, GUE y GSE lleva a las mismas colectividades que las que pueden construirse mediante el modelo de la ecuación (8.10) variando el parámetro F . El cálculo analítico también es sencillo gracias a que los elementos de matriz son variables independientes y a sus propiedades de invariancia; y permite comprobar que efectivamente la ley (8.12) se cumple, aunque asintóticamente. Dicho cálculo se detalla en la siguiente sección.

Cuando los elementos de la matriz de partida no son variables independientes, como sucede en el caso de las colectividades embebidas, cabe preguntarse si las cosas son tan sencillas como en el caso de las colectividades clásicas o si, por el contrario, las correlaciones entre los elementos de matriz juegan algún papel en la transición entre los distintos valores de ν .

En (MOLINA *et al.*, 2005) se constata que existen correlaciones en la matriz de partida correspondiente al hamiltoniano de espines y se apunta que este aspecto merece un estudio aparte. Sin embargo, se indica que la ecuación (8.12) representa un comportamiento universal que no depende del tipo de correlaciones que existan entre los elementos de la matriz tridiagonal. Si esta afirmación es cierta o no es algo que merece ser estudiado en más detalle para ser comprobado con rigor. En este trabajo abordamos este problema mediante el análisis de la transición de una matriz EGOE(1) ($\nu = 0$, fluctuaciones tipo Poisson) a una matriz EGOE(1+2) ($\nu = 1$, fluctuaciones tipo GOE) y, tridiagonalizando en cada paso de la transición, podremos ver si la relación (8.12) rige también en un caso como este, en el que hay una transición real entre distintos tipos de matrices hamiltonianas. O si, por el contrario, las correlaciones juegan un papel que pueda influir en el tipo de relación que existe entre las fluctuaciones espectrales y las fluctuaciones de los elementos de la matriz tridiagonal, es decir, entre el parámetro de repulsión ν y el parámetro F .

En definitiva, el modelo de matrices tridiagonales descrito por la expresión (8.10) es un primer paso en la obtención de modelos simplificados para

el estudio de las fluctuaciones espectrales, pero aún hay muchos aspectos susceptibles de ampliación o estudio. Las colectividades embebidas, aunque son mucho más difíciles de tratar que las colectividades clásicas, permiten una descripción más realista de las propiedades estadísticas de los sistemas físicos. Por eso merecen ser objeto de estudio en este propósito de construcción de modelos tridiagonales sencillos para el estudio del caos cuántico. Este es el problema que abordamos en este trabajo.

8.3. Resultados analíticos

Las colectividades clásicas de matrices aleatorias son más fáciles de manejar que las colectividades embebidas. Por eso, un modelo de matrices tridiagonales como el que deseamos construir, mediante cálculo numérico, para las colectividades embebidas, existe ya para las colectividades clásicas, y además se ha deducido analíticamente (DUMITRIU and EDELMAN, 2002). Es decir, se tienen las distribuciones de probabilidad de los elementos de las matrices tridiagonales. Por tanto, se puede construir una matriz aleatoria perteneciente a una de las colectividades clásicas, a partir de las distribuciones de probabilidad de sus elementos, mediante el procedimiento tradicional en el que todos los elementos de matriz son variables aleatorias gaussianas o bien utilizando el nuevo modelo en el que todos los elementos de matriz son nulos excepto la diagonal principal y las diagonales superior e inferior, que vienen dadas por las variables aleatorias que veremos después.

La construcción analítica de un modelo similar para las colectividades embebidas es totalmente inviable. Las distribuciones de probabilidad de los elementos de matriz son bastante complicadas como para manejarlas en una serie de transformaciones sucesivas que conduzcan a la tridiagonalización. De hecho, la forma de los elementos de matriz, en concreto las correlaciones entre ellos, hace perder las propiedades de invariancia que sí se dan en las colectividades clásicas y que son fundamentales en este tipo de cálculos.

Dadas las distribuciones de probabilidad de los elementos de la matriz tridiagonal se tienen perfectamente caracterizadas la ley suave que siguen estos en la representación frente a un índice (valores medios de las variables o elementos) y sus fluctuaciones en torno a ella (momentos de orden superior de las distribuciones). En concreto se tiene una medida del tamaño de las fluctuaciones, el parámetro F de la sección anterior, con la desviación estándar de las distribuciones. Y puede comprobarse que, tomando como valores iniciales ($\nu = 1$, $F = 1$), se cumple la ley (8.12) asintóticamente.

Un aspecto muy llamativo e interesante de este cálculo analítico del modelo tridiagonal para colectividades clásicas, que presentamos brevemente a continuación, es que permite generalizar el conjunto de colectividades carac-

terizadas por los valores discretos de $\nu = 1, 2$ y 4 a un conjunto continuo con $\nu > 0$ general. Es decir, existe la posibilidad de construir espectros con repulsión de niveles desde valores muy pequeños hasta infinito. Esta afirmación implica, además del simple hecho de considerar el parámetro ν como continuo en lugar de discreto, que existan resultados que indiquen que en las colectividades construidas a partir del modelo, ν se comporta realmente como un parámetro que caracteriza la repulsión de los espectros. Tales resultados existen y se describirán más adelante.

Seguidamente se describe el cálculo para la tridiagonalización de una matriz GOE ($\nu = 1$). El cálculo para GUE y GSE es muy similar, llevando en todos los casos a matrices reales simétricas (DUMITRIU and EDELMAN, 2002).

Llamamos H a la matriz GOE de partida, de dimensión d . Los elementos de matriz diagonales son variables gaussianas de media cero y varianza $1/2A$ y los elementos no diagonales son variables gaussianas de media cero y varianza $1/4A$, donde el parámetro A puede elegirse a conveniencia (Apéndice A). Escribimos H de la siguiente manera:

$$H = \begin{pmatrix} k & h^T \\ h & R \end{pmatrix}, \quad (8.13)$$

donde $k = H_{11}$ es una variable gaussiana, h es un vector de $(d-1)$ variables gaussianas y R es una matriz GOE de dimensión $(d-1) \times (d-1)$.

Sea P una transformación ortogonal de dimensión $(d-1) \times (d-1)$ que depende sólo de h tal que

$$Ph = (\|h\|, 0, \dots, 0)^T \equiv \|h\|e_1, \quad (8.14)$$

donde $\|h\|$ es la norma del vector h , $\|h\| = (h^T h)^{1/2} = (\sum_{i=1}^{d-1} h_i^2)^{1/2} = (\sum_{i=2}^d H_{1i}^2)^{1/2}$, y $e_1 = (1, 0, \dots, 0)^T$. Entonces,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & h^T \\ h & R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k & \|h\| e_1^T \\ \|h\| e_1 & PRP^T \end{pmatrix}. \quad (8.15)$$

Es importante notar que k , $\|h\|$ y PRP^T son claramente independientes. El elemento $H_{11} = k$ de la matriz permanece invariante en la transformación y continúa siendo, por tanto, una variable gaussiana de media cero y varianza $1/2A$. Por la invariancia del GOE bajo transformaciones ortogonales y dado que P sólo depende de h y no de los elementos de la submatriz R , es claro que PRP^T es una matriz GOE de dimensión $(d-1) \times (d-1)$ del mismo tipo que la matriz GOE inicial (sus elementos siguen las mismas distribuciones de probabilidad). La distribución de probabilidad de $\|h\|$ es también fácil de deducir, teniendo en cuenta la siguiente propiedad:

Sea $\{X_i, i = 1, 2, \dots, r\}$ un conjunto de r variables gaussianas de media nula y desviación σ , entonces

$$\sum_{i=1}^r X_i^2 = \sigma^2 \chi_r^2, \quad (8.16)$$

es decir, la suma de las variables gaussianas al cuadrado es una variable aleatoria cuya distribución es una χ^2 con r grados de libertad multiplicada por la varianza de las gaussianas. La variable aleatoria $\|h\|$ es, por tanto, $(1/\sqrt{4A})\chi_{d-1}$ y, conocida la distribución de probabilidad de χ_n ,

$$F_n(x) = \frac{x^{n-1} e^{-x^2/2}}{2^{n/2-1} \Gamma(\frac{n}{2})}, \quad (8.17)$$

es fácil ver que la distribución de $\|h\|$ es

$$G_{d-1}(\|h\|) = \frac{A^{(d-1)/2} \|h\|^{d-2} e^{-2A\|h\|^2}}{2^{-(d+1)/2} \Gamma(\frac{d-1}{2})}. \quad (8.18)$$

En el siguiente paso se toma la matriz PRP^T y se transforma de la misma manera que la matriz H en el paso anterior. Es decir, se escribe en la forma (8.13), donde el vector h tiene dimensión $(d-2)$ y R es una matriz GOE de dimensión $(d-2) \times (d-2)$. Se define una transformación ortogonal P de dimensión $(d-2) \times (d-2)$ de manera análoga a (8.14) y se realiza la multiplicación (8.15). Así se obtiene de nuevo que k es una variable gaussiana de media nula y varianza $1/2A$, PRP^T es una matriz GOE de dimensión $(d-2) \times (d-2)$ y la variable aleatoria $\|h\|$ es $(1/\sqrt{4A})\chi_{d-2}$.

Así, tras realizar los $(d-2)$ pasos necesarios, este procedimiento lleva a la forma tridiagonal de la matriz H ,

$$T = \begin{pmatrix} N(0, \frac{1}{\sqrt{2A}}) & \frac{1}{\sqrt{4A}}\chi_{(d-1)} & & & & & \\ \frac{1}{\sqrt{4A}}\chi_{(d-1)} & N(0, \frac{1}{\sqrt{2A}}) & \frac{1}{\sqrt{4A}}\chi_{(d-2)} & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & & \\ & & & \frac{1}{\sqrt{4A}}\chi_2 & N(0, \frac{1}{\sqrt{2A}}) & \frac{1}{\sqrt{4A}}\chi_1 & \\ & & & & \frac{1}{\sqrt{4A}}\chi_1 & N(0, \frac{1}{\sqrt{2A}}) & \end{pmatrix}, \quad (8.19)$$

donde $N(\mu, \sigma)$ es una variable aleatoria gaussiana de media μ y varianza σ^2 .

Las transformaciones P que suelen usarse en la práctica son

$$P = I - 2 \frac{uu^T}{u^T u}, \quad (8.20)$$

donde $u = h \pm h_1 e_1$. Esta matriz P es conocida como el “reflector de Householder” (GOLUB and LOAN, 1996).

la definición de una nueva familia de colectividades de matrices tridiagonales T_ν , con valores de $\nu > 0$ cualesquiera.

Dumitriu y Edelman han demostrado que a partir de una matriz de la forma (8.21) con $\nu > 0$ cualquiera se obtiene una distribución de autovalores de la misma forma que la distribución conocida para $\nu = 1, 2$ y 4 (DUMITRIU and EDELMAN, 2002). En (DUMITRIU, 2003) se demuestra que la densidad de estados de la familia de colectividades tridiagonales con ν general converge cuando la dimensión tiende a infinito a la ley del semicírculo de Wigner (8.22), que es de hecho una ley asintótica para las colectividades clásicas.

Tenemos además una serie de resultados preliminares tanto analíticos como numéricos, que no se detallarán aquí, puesto que aún se está trabajando en ellos. Analíticamente, se ha obtenido la convergencia de la densidad de estados a la ley del semicírculo, en acuerdo con el resultado de Dumitriu, mediante el cálculo de los momentos de la distribución. Dichos momentos pueden calcularse como las trazas de las potencias de la matriz ($tr(H^k)$), que la forma especial tridiagonal permite llevar a cabo mediante técnicas de combinatoria. De esta manera pueden calcularse también varianzas y covarianzas (obtenidas a su vez recientemente por Dumitriu y Edelman (DUMITRIU and EDELMAN, 2006)), necesarias para el cálculo de las funciones de correlación a dos puntos, que también se han obtenido. El resultado es una buena aproximación a los valores conocidos de los estadísticos en el caso de las colectividades clásicas.

Los cálculos numéricos realizados son, por un lado, para las correlaciones de corto alcance, el estudio de la distribución de espaciamientos a primeros vecinos. Diversos cálculos para distintos valores de ν muestran que el comportamiento a valores pequeños del espaciamiento s es el característico de las colectividades clásicas, $P(s) \sim s^\nu$, que permite identificar el exponente de repulsión. Además, se ha realizado el cálculo de la distribución analíticamente para matrices 2×2 .

Por otro lado, para las correlaciones de largo alcance, se ha estudiado el espectro de potencias del estadístico δ_n . Para $\nu \geq 1$ encontramos un ruido $1/f$, como era de esperar (RELAÑO *et al.*, 2006). La transición hacia el ruido $1/f^2$, que se obtiene al pasar de $\nu = 1$ a $\nu = 0$, muestra que los resultados numéricos y el cálculo analítico están también en muy buen acuerdo en este caso.

Todos estos resultados junto con los de Dumitriu y Edelman indican que la generalización de las colectividades tridiagonales para valores cualesquiera de ν es coherente.

Por último, señalamos la relación entre el modelo de colectividades tridiagonales y los resultados numéricos descritos en la sección anterior (MOLINA *et al.*, 2005; RELAÑO *et al.*, 2006), que permite comprobar la validez de la relación (8.12).

A partir de las distribuciones de probabilidad de los elementos de matriz, (8.24) y (8.25), pueden obtenerse expresiones generales para sus momentos,

$$\mu_{\alpha_i}^r = \begin{cases} \left(\frac{1}{\nu d}\right)^{r/2} \frac{\Gamma((r+1)/2)}{\sqrt{\pi}} & r \text{ par,} \\ 0 & r \text{ impar,} \end{cases} \quad (8.26)$$

$$\mu_{\beta_i}^r = \left(\frac{1}{2\nu d}\right)^{r/2} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu(d-i+1)+r}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu(d-i+1)}{2}\right)}. \quad (8.27)$$

Al representar los elementos de una matriz frente a un contador veremos una ley suave, que viene dada por el valor medio de cada elemento, y las fluctuaciones superpuestas, cuyo tamaño puede estimarse como la desviación típica de cada distribución. Así, la ley suave $S(i)$ para elementos diagonales y no diagonales es

$$S_{\alpha}(i) = \mu_{\alpha_i}^1 = 0 \quad (8.28)$$

$$S_{\beta}(i) = \mu_{\beta_i}^1 = \sqrt{\frac{1}{2\nu d} \frac{\Gamma\left(\frac{\nu(d-i+1)+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\nu(d-i+1)}{2}\right)}} \quad (8.29)$$

Y el tamaño de las fluctuaciones,

$$F_{\alpha}(i) = \sigma_{\alpha_i} = \sqrt{\frac{1}{2\nu d}} \quad (8.30)$$

$$\begin{aligned} F_{\beta}(i) &= \sigma_{\beta_i} = \sqrt{\mu_{\beta_i}^2 - (\mu_{\beta_i}^1)^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\nu d} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{\nu(d-i+1)+2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{\nu(d-i+1)}{2}\right) - \Gamma^2\left(\frac{\nu(d-i+1)}{2}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{\nu(d-i+1)}{2}\right)} \right]^{1/2}}. \end{aligned} \quad (8.31)$$

Las expresiones para los elementos no diagonales se simplifican en el límite $\nu(d-i) \gg 1$:

$$S_{\beta}(i) \simeq \sqrt{\frac{1}{4} \left(1 - \frac{i-1}{d}\right)}, \quad (8.32)$$

$$F_{\beta}(i) \simeq \sqrt{\frac{1}{8\nu d}}. \quad (8.33)$$

Estas expresiones asintóticas describen muy bien las colectividades para dimensiones manejables y para todos los valores del índice i .

Se observa, por tanto, en acuerdo con los resultados numéricos descritos en la sección anterior, que los elementos diagonales se disponen en torno a una ley constante (e igual a cero) con fluctuaciones de tamaño constante (independiente del contador); y los elementos no diagonales se disponen en torno a una ley suave decreciente con fluctuaciones de tamaño también constante. La razón entre la desviación de los elementos diagonales y no diagonales es $F_\alpha/F_\beta = 2$, y la dependencia de ambas con el parámetro de repulsión es del mismo tipo que la ecuación (8.12), con la normalización adecuada,

$$F^2 \propto \frac{1}{\nu}. \quad (8.34)$$

Capítulo 9

Resultados

En este capítulo se detallan los cálculos realizados en el proyecto de construcción de modelos sencillos de matrices tridiagonales para la descripción de sistemas de partículas en interacción mediante colectividades embebidas.

En la siguiente sección se describen los detalles técnicos del tratamiento de las colectividades de matrices tridiagonales, tales como promedios, fluctuaciones y correlaciones. Estas definiciones y expresiones se utilizarán a lo largo de las dos secciones posteriores, en las que se presentan los resultados correspondientes a la evolución con el rango de la interacción y la evolución con el parámetro λ desde el sistema sin interacción al sistema con interacción a dos cuerpos dada por el hamiltoniano (7.10). Se trata fundamentalmente de obtener una descripción lo más completa posible de las colectividades de matrices tridiagonales, de manera que a partir de esta información sea posible modelar los aspectos más importantes que permitan la construcción del modelo capaz de reproducir las transiciones estudiadas.

9.1. Definiciones

La idea principal en la que se basa la simplificación que podría constituir la construcción de modelos de colectividades tridiagonales, como se ha señalado en el capítulo anterior, es la separación de los elementos de matriz en una parte suave y una parte fluctuante. Esto es, para un miembro k de la colectividad

$$\alpha_i^{(k)} = \alpha_i^{(k)S} + \alpha_i^{(k)F}, \quad i = 1, 2, \dots, d \quad (9.1)$$

$$\beta_i^{(k)} = \beta_i^{(k)S} + \beta_i^{(k)F}, \quad i = 2, 3, \dots, d, \quad (9.2)$$

donde α_i y β_i son los elementos i -ésimos diagonal y no diagonal, respectivamente, de la matriz tridiagonal.

Para obtener correctamente la parte suave de los elementos es necesario tener en cuenta que las colectividades embebidas, como se ha explicado, no son ergódicas para la densidad de estados. Como veremos en las siguientes secciones, la forma de la matriz tridiagonal está estrechamente relacionada con la densidad de estados, de manera que tampoco es ergódica. Esto quiere decir que la parte suave de los elementos de matriz es distinta para cada miembro de la colectividad y, por tanto, los promedios no son una buena estimación, es decir,

$$\alpha_i^{(k)S} \neq \bar{\alpha}_i = \frac{1}{R} \sum_{k=1}^R \alpha_i^{(k)} \quad (9.3)$$

$$\beta_i^{(k)S} \neq \bar{\beta}_i = \frac{1}{R} \sum_{k=1}^R \beta_i^{(k)}, \quad (9.4)$$

donde R es el número de miembros o realizaciones de la colectividad.

En una colectividad ergódica es claro que el efecto del promedio es reducir el tamaño de las fluctuaciones para obtener una función suave, que será una buena estimación de la parte suave para cada uno de los miembros. En cambio, si la colectividad no es ergódica esto no es así y, por tanto, estamos obligados a calcular la parte suave de los elementos de matriz individualmente para cada miembro de la colectividad. Para ello realizaremos ajustes a funciones adecuadas en cada caso.

En los trabajos de Zuker *et al.* se establece que la forma funcional de $\beta_i^{(k)S}$ es la misma que la función inversa de la densidad de niveles, aunque sus parámetros son en general distintos. En (ZUKER *et al.*, 2001) se utiliza una binomial continua como aproximación a la densidad de estados de los núcleos atómicos:

$$\text{bin}(x) = \exp \left[\frac{1-N}{2} ((1+2x) \log(1+2x) + (1-2x) \log(1-2x)) \right], \quad (9.5)$$

donde N se relaciona con la dimensión d mediante $d = 2^N$. Por lo tanto, $\beta_i^{(k)S}$ tiene en este caso la forma de una binomial inversa. No obstante, se prueba que una gaussiana inversa produce un ajuste también muy bueno.

En general utilizaríamos una función distinta para cada sistema con una densidad de estados diferente. Por ejemplo, para matrices tipo GOE, como vimos en el capítulo anterior (ecuación (8.32)),

$$\beta_i^{(k)S} = \bar{\beta}_i = \sqrt{\frac{1}{4} \left(1 - \frac{i-1}{d} \right)}, \quad (9.6)$$

donde en este caso la parte suave sí coincide con el promedio, ya que se trata de una colectividad ergódica.

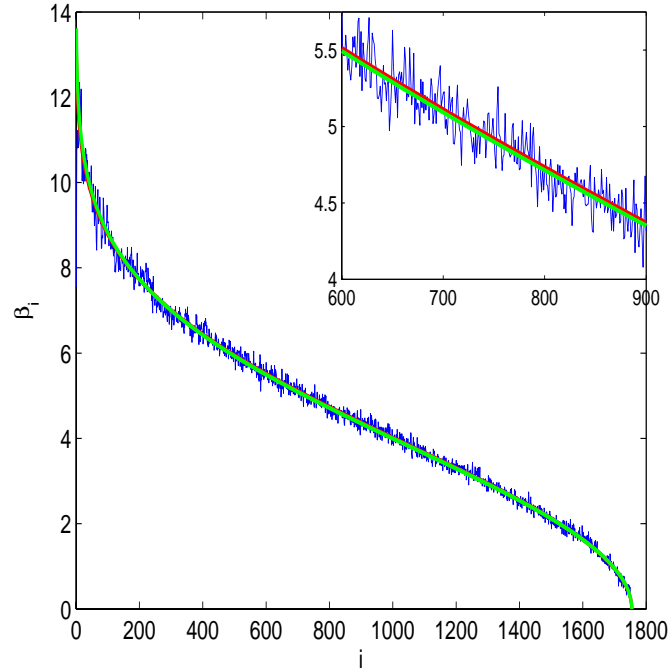


Figura 9.1: Elementos de matriz no diagonales correspondientes a un núcleo de ^{48}Ca ($J = 4$) (azul) junto con ajustes a una binomial inversa (rojo) y a la ecuación (9.7) (verde). En el panel superior izquierdo una ampliación donde pueden distinguirse los ajustes.

En este trabajo vamos a utilizar la misma función para todos los casos estudiados y veremos que esta elección presenta varias ventajas. Esta función es la siguiente:

$$\beta^S(i) = \sqrt{a \left(1 - \left(\frac{i}{d} \right)^b \frac{\log i}{\log d} \right)}, \quad (9.7)$$

donde d es la dimensión de la matriz y a y b son parámetros ajustables. La principal ventaja es su versatilidad, ya que es válida para realizar ajustes a matrices cuyas densidades son descritas por funciones gaussianas, binomiales, semicirculares y funciones intermedias entre ellas, proporcionando buenos ajustes en todos los casos. Además, el ajuste es sencillo, no requiere una inversión numérica como en el caso de la binomial inversa. Como ejemplo, se muestra en la figura 9.1 la matriz tridiagonal correspondiente a un núcleo atómico de ^{48}Ca ($J = 4$) junto con los ajustes a una binomial inversa y a la fórmula (9.7).

El parámetro a permite desplazar el punto de corte con el eje y , es de-

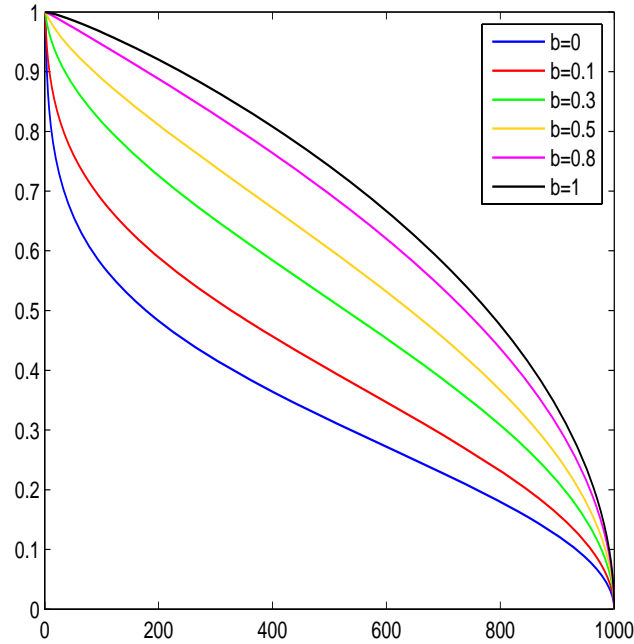


Figura 9.2: Evolución con el índice i de la función $\beta^S(i)$ (ecuación (9.7)) para $a = 1$ y distintos valores del parámetro b .

cir, da aproximadamente el valor del primer elemento de matriz no diagonal. Después la función decrece hasta anularse en $i = d$. Y el parámetro b está relacionado con la forma de curvarse de la función. En la figura 9.2 se representan distintas curvas para $a = 1$ y diferentes valores del parámetro b para que pueda observarse cómo va cambiando la forma de la función.

En el caso $b = 0$ la relación con la densidad gaussiana puede justificarse analíticamente. Partimos de la expresión de la función gaussiana

$$g(\beta) = \frac{d}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{\beta^2}{2\sigma^2}\right), \quad (9.8)$$

donde β y σ tienen dimensiones de energía y g tiene dimensión de energía⁻¹. Invertiendo esta expresión obtenemos

$$\beta(g) = \pm \sqrt{-2\sigma^2 \log\left(\frac{\sqrt{2\pi}\sigma g}{d}\right)}. \quad (9.9)$$

Descartando el signo negativo y discretizando $g_i = i/(\sqrt{2\pi}\sigma)$, $i = 1, 2, \dots, d$ tenemos

$$\beta_i = \beta(g_i) = \sqrt{-2\sigma^2 \log(i/d)}. \quad (9.10)$$

Por último, definimos $a = 2\sigma^2 \log d$, con lo cual

$$\beta_i = \sqrt{a \left(1 - \frac{\log i}{\log d}\right)}, \quad (9.11)$$

que coincide con la expresión (9.7) para $b = 0$.

Otra ventaja de la expresión 9.7 para la parte suave de los elementos no diagonales es que permite un cálculo aproximado de los momentos de la densidad de manera que estos pueden escribirse como función de los parámetros de ajuste, a y b , a la matriz tridiagonal. Así conociendo sólo estos dos parámetros se tienen aproximaciones muy razonables a los valores de los momentos correspondientes.

El momento de orden k de la densidad $\rho(E)$ viene dado por

$$M_k(\rho) = \int E^k \rho(E) dE. \quad (9.12)$$

La densidad de estados puede escribirse como

$$\rho(E) = \sum_{i=1}^d \delta(E - E_i), \quad (9.13)$$

donde $\{E_i, i = 1, 2, \dots, d\}$ es el conjunto de autovalores que constituyen el espectro de energía. Por tanto, de (9.12) y (9.13) tenemos que los momentos pueden expresarse en función de las trazas de la matriz hamiltoniana como

$$M_k(H) = \frac{1}{d} \text{Tr}(H^k), \quad (9.14)$$

puesto que las trazas son invariantes bajo cambios de la base de estados.

Podemos escribir estas trazas en función de los elementos de matriz de H ,

$$\text{Tr}(H^k) = \sum_{i_1, \dots, i_k} H_{i_1 i_2} H_{i_2 i_3} \dots H_{i_{k-1} i_k} H_{i_k i_1}. \quad (9.15)$$

Y de esta manera vemos que las matrices tridiagonales presentan una gran ventaja para llevar a cabo este cálculo, ya que al ser nulos la mayoría de sus elementos las sumas a realizar se reducen considerablemente. Este hecho junto con la propiedad de simetría de las matrices ($H_{ji} = H_{ij}$) permite obtener expresiones relativamente sencillas para las primeras trazas y, por tanto, para los primeros momentos de la densidad:

$$\text{Tr}(H) = \sum \alpha_i \quad (9.16)$$

$$\text{Tr}(H^2) = \sum (\alpha_i^2 + 2\beta_i^2) \quad (9.17)$$

$$\text{Tr}(H^3) = \sum (\alpha_i^3 + 3\beta_i^2(\alpha_i + \alpha_{i-1})) \quad (9.18)$$

$$\text{Tr}(H^4) = \sum (\alpha_i^4 + 2\beta_i^4 + 4\beta_i^2(\beta_{i+1}^2 + \alpha_i^2 + \alpha_{i-1}^2 + \alpha_i \alpha_{i-1})) \quad (9.19)$$

Para calcular los momentos medios necesitamos entonces conocer los promedios de los distintos productos de elementos $\overline{\alpha_i^k \beta_j^p}$. El promedio de los elementos diagonales vale cero para todos ellos, $\overline{\alpha_i} = 0$, como comprobaremos en las siguientes secciones. Por tanto, el valor medio de las trazas $Tr(H)$ y $Tr(H^3)$ se anula. Es fácil ver que, en general, se anulan todas las trazas de orden impar.

Además, consideraremos una aproximación que hará que el cálculo sea más sencillo. Se trata de desprestigiar por completo las fluctuaciones. Estas en principio aportan contribuciones no nulas al cálculo de los momentos medios. Por ejemplo, aunque el valor medio de los elementos diagonales (y de sus potencias impares) sea cero, no lo es el valor medio de las potencias pares de los mismos. $\overline{\alpha_i^2}$ es la desviación típica de un elemento y, según veremos en distintos casos, es distinta de cero. Sin embargo, veremos también que las fluctuaciones son muy pequeñas y, por tanto, la contribución de estas desviaciones y sus potencias será también muy pequeña.

Despreciando las fluctuaciones podemos considerar que

$$\overline{\alpha_i^k} = \overline{\alpha_i}^k = 0 \quad (9.20)$$

$$\overline{\beta_i^k} = \overline{\beta_i}^k, \quad (9.21)$$

lo que simplificará los cálculos, como veremos a continuación.

Calcularemos los dos primeros momentos de orden par. En primer lugar, la traza media de orden 2 queda, tras realizar la aproximación descrita,

$$\overline{Tr(H^2)} = 2 \sum_{i=2}^d \overline{\beta_i}^2. \quad (9.22)$$

Ahora, utilizamos la expresión (9.7) para la parte suave de los elementos no diagonales y escribimos

$$\overline{Tr(H^2)} = 2 \sum_{i=1}^{d-1} a \left(1 - \left(\frac{i}{d} \right)^b \frac{\log i}{\log d} \right) = 2a \sum_{i=1}^{d-1} \left[1 - \left(\frac{i}{d} \right)^b \left(1 + \frac{\log(i/d)}{\log d} \right) \right]. \quad (9.23)$$

El siguiente paso es convertir el sumatorio en una integral, que será más fácil de calcular. Para ello hacemos el cambio de variable $j = i/d$, de manera que los incrementos entre los valores que toma el índice en la suma sean muy pequeños ($\Delta j = 1/d$), lo que nos permite realizar la aproximación de pasar al límite continuo:

$$\overline{Tr(H^2)} = 2a \sum_{j=1/d}^1 \left[1 - j^b \left(1 + \frac{\log j}{\log d} \right) \right] \simeq 2ad \int_0^1 \left[1 - x^b \left(1 + \frac{\log x}{\log d} \right) \right] dx. \quad (9.24)$$

El resultado de esta integral es

$$\overline{Tr(H^2)} = 2ad \frac{1 + (b^2 + b) \log d}{(b^2 + 2b + 1) \log d}. \quad (9.25)$$

Y el momento medio de orden 2 es entonces

$$\overline{M_2} = 2a \frac{1 + (b^2 + b) \log d}{(b^2 + 2b + 1) \log d}. \quad (9.26)$$

La traza media de orden 4 es

$$\overline{Tr(H^4)} = \sum_{i=2}^d (2\overline{\beta_i^4} + 4\overline{\beta_i^2 \beta_{i+1}^2}), \quad (9.27)$$

y utilizando la expresión (9.7) la escribimos de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \overline{Tr(H^4)} &= 2a^2 \sum_{i=1}^{d-1} \left(1 - \left(\frac{i}{d} \right)^b \frac{\log i}{\log d} \right)^2 \\ &\quad + 4a^2 \sum_{i=1}^{d-1} \left(1 - \left(\frac{i}{d} \right)^b \frac{\log i}{\log d} \right) \left(1 - \left(\frac{i+1}{d} \right)^b \frac{\log(i+1)}{\log d} \right) \end{aligned} \quad (9.28)$$

Desarrollando los productos,

$$\begin{aligned} \overline{Tr(H^4)} &= 2a^2 \sum_{i=1}^{d-1} \left[1 + \left(\frac{i}{d} \right)^{2b} \left(\frac{\log i}{\log d} \right)^2 - 2 \left(\frac{i}{d} \right)^b \frac{\log i}{\log d} \right] \\ &\quad + 4a^2 \sum_{i=1}^{d-1} \left[1 - \left(\frac{i}{d} \right)^b \frac{\log i}{\log d} - \left(\frac{i+1}{d} \right)^b \frac{\log(i+1)}{\log d} + \left(\frac{i(i+1)}{d^2} \right)^b \frac{\log i \log(i+1)}{(\log d)^2} \right] \end{aligned} \quad (9.29)$$

Utilizando las aproximaciones

$$\begin{aligned} \frac{i(i+1)}{d^2} &= \frac{i}{d} \left(\frac{i}{d} + \frac{1}{d} \right) \simeq \left(\frac{i}{d} \right)^2, \\ \frac{\log(i+1)}{\log d} &= 1 + \frac{\log(i+1)/d}{\log d} = 1 + \frac{\log \left(\frac{i}{d} + \frac{1}{d} \right)}{\log d} \simeq 1 + \frac{\log(i/d)}{\log d} \end{aligned} \quad (9.30)$$

para dimensión d grande, y reagrupando términos,

$$\begin{aligned} \overline{Tr(H^4)} &= a^2 \left[6 \sum_{i=1}^{d-1} 1 - 8 \sum_{i=1}^{d-1} \left(\frac{i}{d} \right)^b \left(1 + \frac{\log(i/d)}{\log d} \right) \right. \\ &\quad \left. - 4 \sum_{i=2}^d \left(\frac{i}{d} \right)^b \left(1 + \frac{\log(i/d)}{\log d} \right) + 6 \sum_{i=1}^{d-1} \left(\frac{i}{d} \right)^{2b} \left(1 + \frac{\log(i/d)}{\log d} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (9.31)$$

De nuevo, con el cambio de variable $j = i/d$ las sumas pueden aproximarse con integrales,

$$\overline{Tr(H^4)} \simeq 6a^2d \left[1 + \int_0^1 x^{2b} \left(1 + \frac{\log x}{\log d} \right)^2 dx - 2 \int_0^1 x^b \left(1 + \frac{\log x}{\log d} \right) dx \right] \quad (9.32)$$

y el resultado final para el momento medio de orden 4 es

$$\overline{M_4} = 6a^2 \left[1 + \frac{2 + \log d(1 + 2b)(\log d + 2b \log d - 2)}{(1 + 2b)^3(\log d)^2} - 2 \frac{(1 + b) \log d - 1}{(1 + b)^2 \log d} \right]. \quad (9.33)$$

Las expresiones 9.26 y 9.33 relacionan los momentos medios, de orden 2 y 4, que caracterizan la densidad de estados, con la forma de la matriz tridiagonal correspondiente a través de los parámetros de ajuste, a y b , a la fórmula (9.7). Es decir, conociendo sólo los dos parámetros que se han utilizado para caracterizar la forma de la matriz tridiagonal podrían calcularse los momentos de la densidad, siempre que supongamos aceptables las aproximaciones consideradas. En la sección 9.3.1 comprobaremos si esto es así calculando los momentos medios en distintos casos como promedios de los momentos de cada matriz y utilizando las expresiones obtenidas.

En cuanto a las fluctuaciones en los elementos de matriz nos interesará tener una medida de su tamaño, que calcularemos como

$$\sigma_\alpha(i) = \sqrt{\frac{1}{R} \sum_{k=1}^R (\alpha_i^{(k)} - \alpha_i^{(k)S})^2}, \quad i = 1, 2, \dots, d \quad (9.34)$$

$$\sigma_\beta(i) = \sqrt{\frac{1}{R} \sum_{k=1}^R (\beta_i^{(k)} - \beta_i^{(k)S})^2}, \quad i = 2, 3, \dots, d, \quad (9.35)$$

es decir, como la desviación de cada elemento promediada sobre la colectividad. Nótese que la parte suave es distinta para cada miembro de la colectividad, como indica el superíndice (k), ya que no viene dada por el elemento medio sino por un ajuste individual de cada matriz. El tamaño de las fluctuaciones es el parámetro que se pretende relacionar con el análisis de la estadística espectral tradicional.

Por último, en las colectividades embebidas, a diferencia de las colectividades clásicas, existen correlaciones entre sus elementos de matriz. En este trabajo estudiaremos la posible influencia de estas correlaciones en los modelos tridiagonales, ya que hasta el momento no se le ha prestado mucha atención a este aspecto. El análisis de estas correlaciones se realizará me-

diante las matrices de correlación definidas como sigue

$$C_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{R} \sum_{k=1}^R \frac{(\alpha_i^{(k)} - \alpha_i^{(k)S})(\alpha_j^{(k)} - \alpha_j^{(k)S})}{\sigma_{\alpha}(i)\sigma_{\alpha}(j)} \quad (9.36)$$

para los elementos diagonales,

$$C_{ij}^{\beta} = \frac{1}{R} \sum_{k=1}^R \frac{(\beta_i^{(k)} - \beta_i^{(k)S})(\beta_j^{(k)} - \beta_j^{(k)S})}{\sigma_{\beta}(i)\sigma_{\beta}(j)} \quad (9.37)$$

para los elementos no diagonales y

$$C_{ij}^{\alpha\beta} = \frac{1}{R} \sum_{k=1}^R \frac{(\alpha_i^{(k)} - \alpha_i^{(k)S})(\beta_j^{(k)} - \beta_j^{(k)S})}{\sigma_{\alpha}(i)\sigma_{\beta}(j)} \quad (9.38)$$

para las correlaciones cruzadas entre elementos diagonales y no diagonales.

9.2. Rango de la interacción

En esta sección estudiaremos la evolución de la representación tridiagonal de las colectividades embebidas con el rango de la interacción, k . Para ello consideramos diferentes colectividades con valores distintos de sus parámetros. Los resultados son similares en todos los casos y, por tanto, se presentan a continuación los correspondientes a uno de ellos cuyos parámetros son los siguientes:

- Número de partículas: $N = 6$
- Número de niveles del espectro de partícula independiente: $m = 12$
- Dimensión del espacio: $d = C(12, 6) = 924$
- Número de realizaciones (matrices por colectividad): $R = 2000$

En las tres secciones siguientes presentamos los resultados para la parte suave, las fluctuaciones y las correlaciones entre los elementos de las matrices tridiagonales.

9.2.1. Parte suave

En la figura 9.3 se muestra la densidad media junto con la matriz tridiagonal promedio para las colectividades EGOE(k) con $k = 2 - 6$. En primer lugar, se observa la transición de la densidad desde una forma gaussiana en

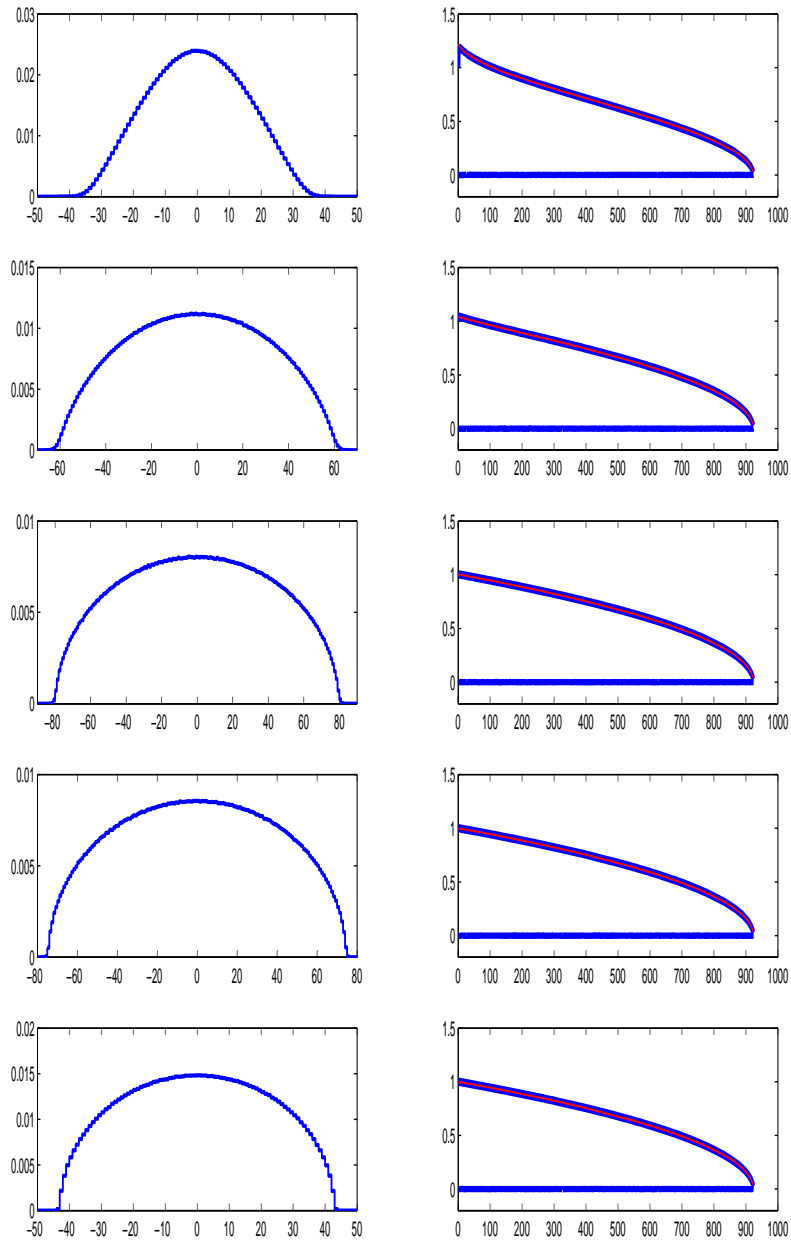


Figura 9.3: A la izquierda densidad de estados media y a la derecha matriz media (azul) junto con el ajuste de los elementos no diagonales a la función (9.7) (rojo) de las colectividades EGOE(k), para $k = 2 - 6$.

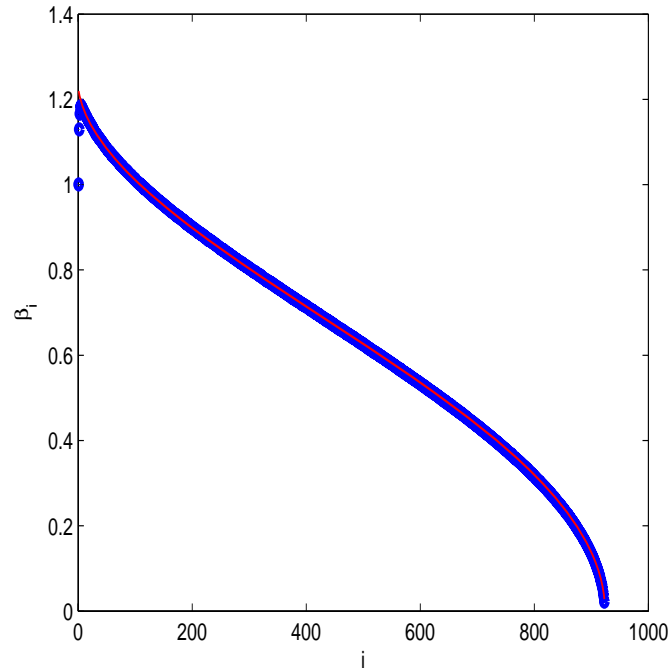


Figura 9.4: Elementos no diagonales medios (círculos azules) junto con el ajuste (línea roja) a la función (9.7) de la colectividad EGOE(2).

$k = 2$ hasta el semicírculo de Wigner en $k = 6$, como era de esperar. En segundo lugar, puede apreciarse una clara relación entre la densidad media y la correspondiente matriz tridiagonal media.

La representación de la matriz media está constituida por dos curvas de puntos, que se corresponden con los elementos diagonales medios $\overline{\alpha}_i$ y los elementos no diagonales medios $\overline{\beta}_i$. Los diagonales siguen una ley prácticamente constante e igual a cero y los no diagonales son los que presentan una clara correlación con la densidad media.

Así, la parte suave de los elementos de matriz puede ser descrita por una función constante para los diagonales y la función (9.7), que presentamos en la sección anterior

$$\overline{\beta}_i = \sqrt{a \left(1 - \left(\frac{i}{d} \right)^b \frac{\log i}{\log d} \right)}, \quad (9.39)$$

para los no diagonales, que, como puede observarse en la figura, proporciona un ajuste bastante bueno a lo largo de toda la transición. En la figura 9.4, en la que se representa el caso EGOE(2) ampliado, puede apreciarse mejor dicho ajuste.

k	a_t	b_t
2	1.4871 ± 0.0006	0.3459 ± 0.0003
3	1.0832 ± 0.0003	0.6983 ± 0.0004
4	1.0023 ± 0.0001	0.8380 ± 0.0003
5	0.9948 ± 0.0001	0.8534 ± 0.0003
6	0.9942 ± 0.0001	0.8545 ± 0.0003

Tabla 9.1: Parámetros del ajuste de los elementos de matriz no diagonales medios a la función (9.7).

k	a_d	b_d
2	6.65 ± 0.03	0.399 ± 0.006
3	4.39 ± 0.01	1.293 ± 0.008
4	4.049 ± 0.008	1.771 ± 0.008
5	4.014 ± 0.009	1.832 ± 0.008
6	4.04 ± 0.01	1.82 ± 0.01

Tabla 9.2: Parámetros del ajuste de la densidad inversa media a la función (9.7).

En la tabla 9.1 se presentan los valores de los parámetros de los ajustes realizados. Se utiliza el subíndice t para distinguir estos parámetros de ajuste a la matriz tridiagonal de los correspondientes al ajuste a la densidad inversa que se realizarán a continuación, para los que utilizaremos el subíndice d . El comportamiento del parámetro b_t , como señalamos anteriormente, nos indica cómo va variando la forma de la curva: toma el valor más pequeño en el caso $k = 2$, en que la densidad es más parecida a una gaussiana, y va creciendo a medida que k aumenta y la forma de la densidad se acerca al semicírculo. El parámetro a_t toma valores próximos a 1 debido a que se ha llevado a cabo previamente a los ajustes una normalización en las matrices medias de manera que todas las curvas coincidan en la medida de lo posible para que después el tamaño de las fluctuaciones pueda compararse directamente entre unas y otras. Esta normalización, que se explicará en más detalle en la siguiente sección, consiste básicamente en dividir todos los elementos de matriz medios por una medida de la anchura de la densidad correspondiente, que tomamos como el momento de orden 2 de la misma.

A continuación trataremos de investigar la relación entre la fórmula para el ajuste de la matriz tridiagonal (9.7) y la densidad de estados correspondiente. Para ello nos proponemos comparar los parámetros a_t y b_t del ajuste de la matriz tridiagonal con los parámetros a_d y b_d que resulten del ajuste de la densidad a la inversa de la función (9.7). Pero dado que la función (9.7) no

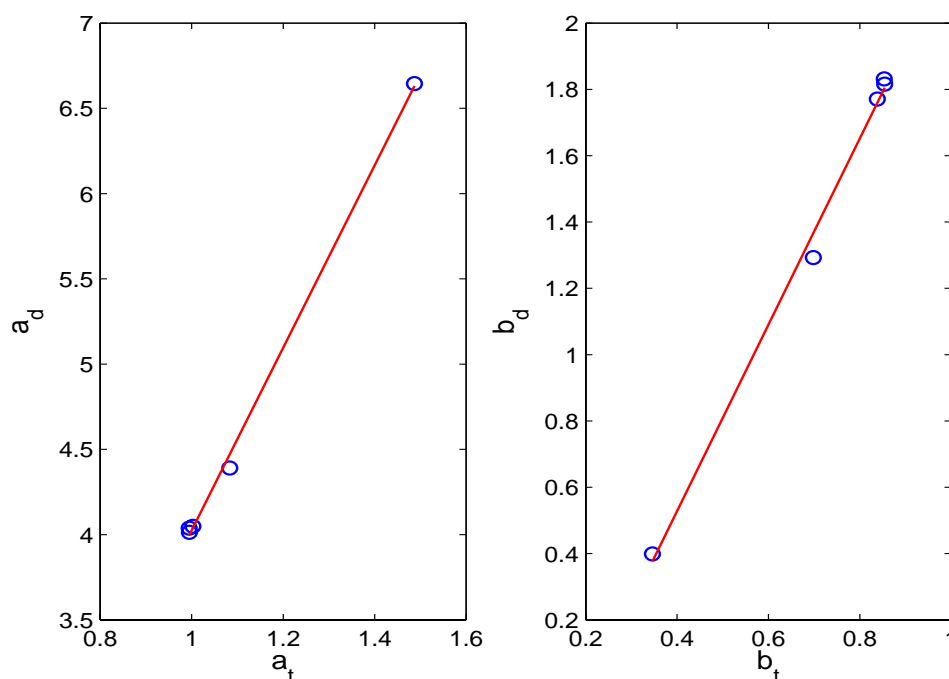


Figura 9.5: Ajustes lineales de los parámetros a_d y b_d correspondientes a la inversa de las densidades frente a los parámetros a_t y b_t correspondientes a las matrices tridiagonales.

puede invertirse analíticamente lo que haremos será ajustar la inversa de la densidad a la función, es decir, tomando una de las mitades de la densidad realizamos el ajuste abscisas *vs.* ordenadas a la función.

Antes de realizar este ajuste es necesaria una corrección. La función (9.7) toma valores positivos para $i = 1, 2, \dots, d - 1$ que van decreciendo hasta anularse en $i = d$, como corresponde al comportamiento de los elementos no diagonales de la matriz tridiagonal. Por tanto, para poder ajustar la densidad inversa a esta función debemos adaptar el dominio al intervalo $[1, d]$ mediante un cambio de escala. Se trata del mismo tipo de cambio que se explicó en la sección 9.1 con el ejemplo de una densidad gaussiana, para llegar de la expresión (9.9) a la expresión (9.10). En ese caso los factores necesarios eran la dimensión de la matriz d y el valor máximo de la densidad, $1/(\sqrt{2\pi}\sigma)$. En este caso el valor máximo de la densidad se obtiene numéricamente. Además, para que la comparación sea coherente, lógicamente se ha de llevar a cabo en la densidad inversa el mismo tipo de normalización que se realizó en la correspondiente matriz tridiagonal.

Los parámetros que resultan de estos ajustes, a_d y b_d , se muestran en la

tabla 9.2. Para compararlos con los parámetros de los ajustes a las matrices tridiagonales medias, a_t y b_t , los representamos en una gráfica. En la figura 9.5 tenemos a la izquierda a_d frente a a_t y a la derecha b_d frente a b_t . Ambos presentan un claro comportamiento lineal. Si realizamos ajustes lineales obtenemos

$$a_d = (5.35 \pm 0.13)a_t + (-1.32 \pm 0.14) \quad (9.40)$$

$$b_d = (2.81 \pm 0.11)b_t + (-0.59 \pm 0.08). \quad (9.41)$$

El análisis de este resultado nos permite establecer varias conclusiones importantes. En primer lugar, la relación que podíamos intuir entre la matriz tridiagonal y la densidad de estados a la vista de la figura 9.3 se concreta en las ecuaciones anteriores. Podemos pensar que no disponemos de un conjunto de puntos demasiado grande como para poder asegurar con rotundidad que existe una relación lineal entre los parámetros. La colectividad EGOE(k) evoluciona rápidamente desde $k = 2$ hacia la colectividad GOE, que se corresponde con EGOE(6), de manera que EGOE(4) es ya prácticamente GOE y es por esto por lo que los tres últimos puntos ($k = 4, 5, 6$) son prácticamente coincidentes. Sin embargo, veremos más adelante en el estudio de la introducción gradual de la interacción a dos cuerpos, en el que es posible tener un mayor número de puntos, cómo aparecen de nuevo claramente estas relaciones lineales.

Una segunda conclusión muy importante que puede extraerse a partir de las ecuaciones (9.40) y (9.41) es la siguiente: *la matriz tridiagonal y la densidad inversa correspondiente no están relacionadas mediante un simple cambio de escala*. Si fuese así las relaciones entre los parámetros del ajuste deberían ser de la forma

$$a_d = ka_t \quad (9.42)$$

$$b_d = b_t, \quad (9.43)$$

siendo k una constante. Esto es lo que ocurre en el caso comentado anteriormente en la sección 9.1, para una matriz cuya densidad de autovalores es gaussiana. Concretamente, analizando en más detalle este caso se puede comprobar que la densidad gaussiana inversa, convenientemente reescalada, coincide con la correspondiente matriz tridiagonal si se divide por un factor 2. Es decir, que la relación entre los parámetros a_d y a_t sería en este caso $a_d = 4a_t$ (teniendo en cuenta la raíz que aparece en la fórmula de ajuste (9.7), $\sqrt{a_d} = 2\sqrt{a_t}$). En la figura 9.6 queda ilustrado este ejemplo, donde los puntos representan la matriz tridiagonal y la línea la densidad inversa dividida por 2.

En cambio, queda claro que esto mismo no ocurre para los casos EGOE(k) que estamos tratando aquí. Existe una relación entre matriz tridiagonal y

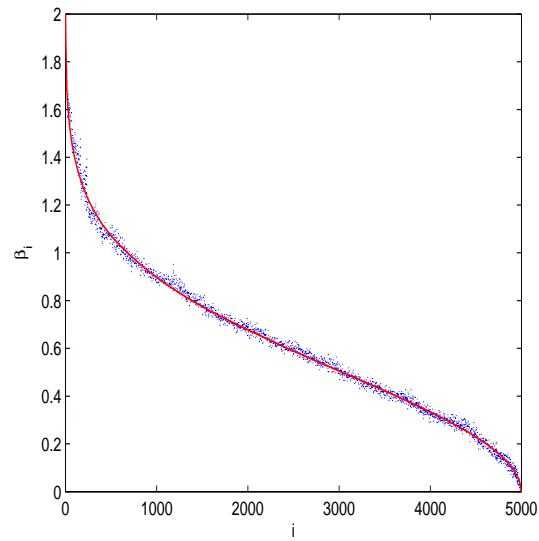


Figura 9.6: Elementos no diagonales de una matriz tridiagonal con densidad de autovalores gaussiana (puntos) junto con la correspondiente densidad inversa dividida por un factor 2 (línea roja).

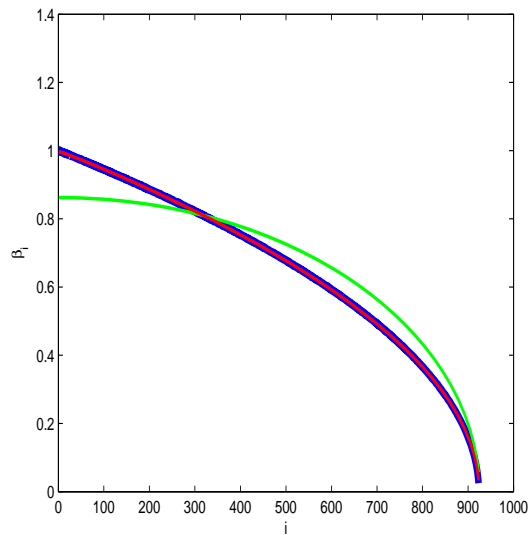


Figura 9.7: Elementos no diagonales de la colectividad EGOE(6) (azul) junto con ajustes a la fórmula (9.7) (rojo) y a la inversa del semicírculo (verde).

densidad inversa pero no es tan sencilla como en el caso de la gaussiana. En la figura 9.7 se muestra de nuevo el promedio de la matriz tridiagonal correspondiente a la colectividad EGOE(6) junto con el ajuste a la fórmula (9.7) y además, un ajuste a la inversa de un semicírculo. Como puede observarse, no hay ninguna constante de proporcionalidad que pueda hacer coincidir la matriz tridiagonal con su correspondiente densidad inversa.

9.2.2. Fluctuaciones

Realizamos la medida del tamaño de las fluctuaciones en los elementos de las matrices tridiagonales mediante las expresiones (9.34) y (9.35). Lo que pretendemos es comprobar si existe una relación entre este tamaño y las fluctuaciones espectrales analizadas mediante el procedimiento habitual con estadísticos. En esta transición con el rango k de la interacción sabemos que en todos los casos la estadística espectral sigue la predicción del GOE (presentaremos el correspondiente análisis más tarde para comprobar que todo es correcto), por tanto, esperamos no encontrar diferencias fundamentales en el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz entre las distintas colectividades estudiadas aquí.

Para realizar el cálculo a partir de las expresiones (9.34) y (9.35) necesitamos conocer la parte suave de los elementos de matriz para cada uno de los miembros de la colectividad. Esta será calculada mediante ajustes a las funciones apropiadas. La función que elegimos para el ajuste de los elementos no diagonales es lógicamente la expresión (9.7). Para los elementos diagonales podría emplearse una función constante, pero dado que se ha observado en algunas matrices de las colectividades con valores de k más bajos una tendencia a curvarse ligeramente en los primeros elementos elegimos un polinomio para los ajustes en este caso. Un grado 5 es suficientemente alto para reproducir las pequeñas desviaciones y suficientemente bajo, dada la dimensión de las matrices utilizadas, como para no ser un ajuste demasiado fino que haga perder parte de las fluctuaciones.

En la figura 9.8 se muestra el tamaño de las fluctuaciones de los elementos de matriz calculado mediante las expresiones (9.34) y (9.35) y la matriz media con una anchura dada por dichas expresiones, es decir, $\overline{\alpha}_i \pm \sigma_\alpha(i)$ y $\overline{\beta}_i \pm \sigma_\beta(i)$. Observando esta última representación podríamos decir que el tamaño de las fluctuaciones es prácticamente constante para todos los elementos y constante a lo largo de la transición con k . Además, se puede ver que las fluctuaciones de los elementos diagonales son mayores que las de los elementos no diagonales.

En las figuras en las que se representan únicamente $\sigma_\alpha(i)$ y $\sigma_\beta(i)$ (columna derecha) se observa, en cambio, que hay una diferencia en la región de los primeros elementos, donde las fluctuaciones son ligeramente mayores y van decreciendo suavemente al aumentar k . Por otro lado, si realizamos un pro-

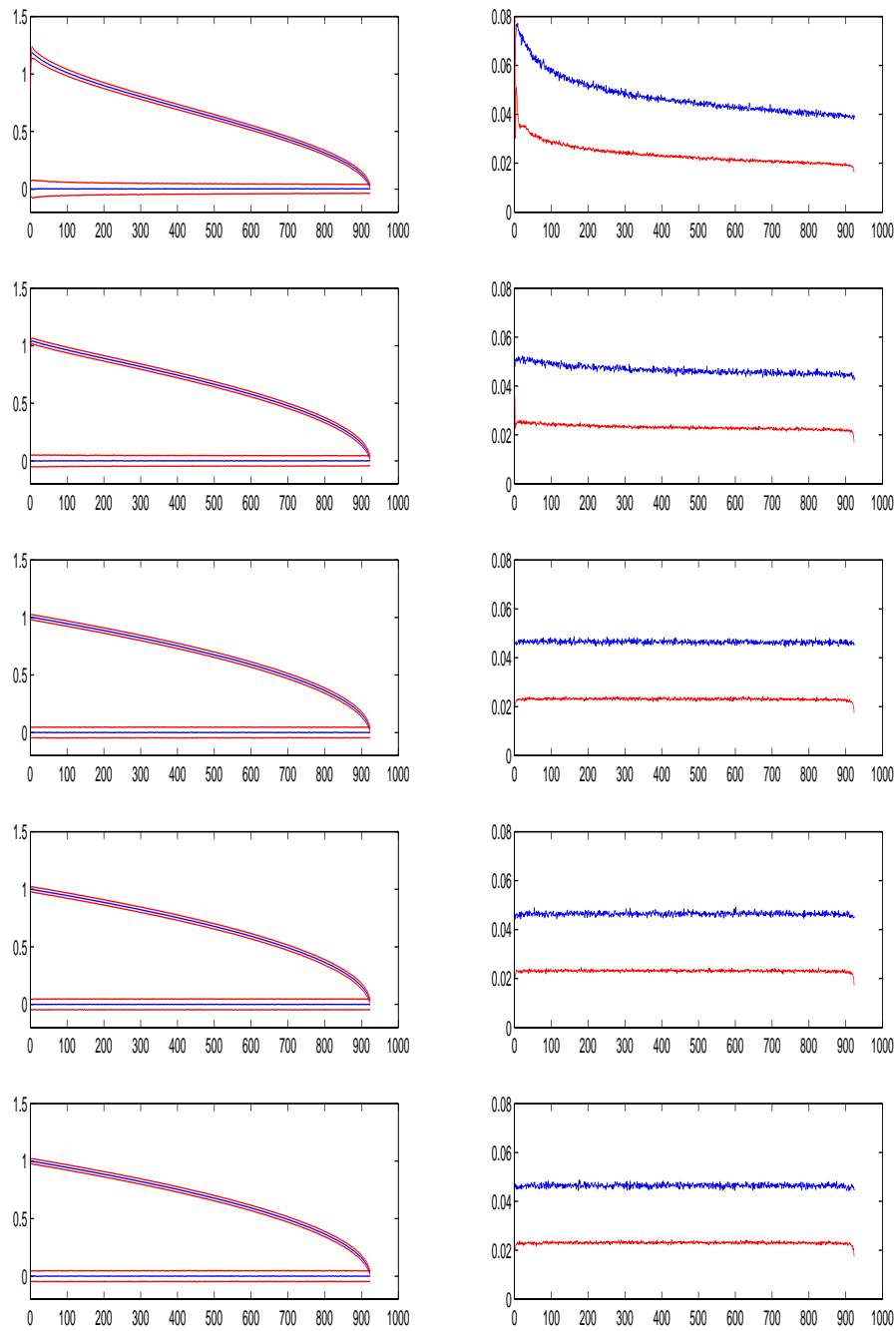


Figura 9.8: Matriz media en azul con su anchura dada por el tamaño de las fluctuaciones en sus elementos en rojo (izquierda). Tamaño de las fluctuaciones dado por las expresiones (9.34) en azul y (9.35) en rojo (derecha).

k	$\overline{\sigma_\alpha}$	$\overline{\sigma_\beta}$	$\overline{\sigma_\alpha/\sigma_\beta}$
2	0.0474	0.0238	1.996
3	0.0466	0.0231	2.015
4	0.0464	0.0231	2.013
5	0.0464	0.0231	2.010
6	0.0464	0.0230	2.015

Tabla 9.3: Valores medios del tamaño de las fluctuaciones calculados mediante las expresiones (9.44) y (9.45) y su cociente.

medio de las fluctuaciones sobre todos los elementos vemos que se obtienen valores muy parecidos durante toda la transición:

$$\overline{\sigma_\alpha} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \sigma_\alpha(i) \quad (9.44)$$

$$\overline{\sigma_\beta} = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \sigma_\beta(i) \quad (9.45)$$

Estos se muestran en la tabla 9.3. En la tercera columna de esta tabla se muestra el cociente entre los valores medios $\overline{\sigma_\alpha/\sigma_\beta}$ y puede verse que este es muy próximo a 2 en todos los casos. Además, no sólo el cociente promedio es próximo a 2 sino que el cociente elemento a elemento $\sigma_\alpha(i)/\sigma_\beta(i)$ también lo es, como puede observarse en la figura 9.9. En esta figura la curva correspondiente a $k = 2$ está en su posición correcta y el resto están desplazadas 0.5 unidades cada una respecto de la anterior para que puedan distinguirse.

Otro detalle muy importante a tener en cuenta para un cálculo correcto del tamaño de las fluctuaciones es la normalización de la matriz media. En la figura 9.8 esta ya ha sido llevada a cabo, pero se explica en este momento en que se puede comprender mejor su relevancia. Esta normalización es necesaria para que sea posible comparar los tamaños de las fluctuaciones entre distintas colectividades, ya que las fluctuaciones han de estar referidas a un promedio común para poder discernir cuáles son significativamente mayores. En la figura 9.8 puede verse que la escala es la misma para la matriz media de todas las colectividades. Antes de la normalización esto no es así y, por ejemplo, la escala del EGOE(4) es mayor que la del EGOE(2) (aproximadamente un factor 2) y si el tamaño de las fluctuaciones resulta ser mayor para EGOE(4) que para EGOE(2) no puede saberse si es una diferencia realmente significativa o un efecto de la escala.

Según se ha visto en la sección anterior, existe una estrecha relación entre la forma de la densidad de estados y la forma de la curva de los elementos

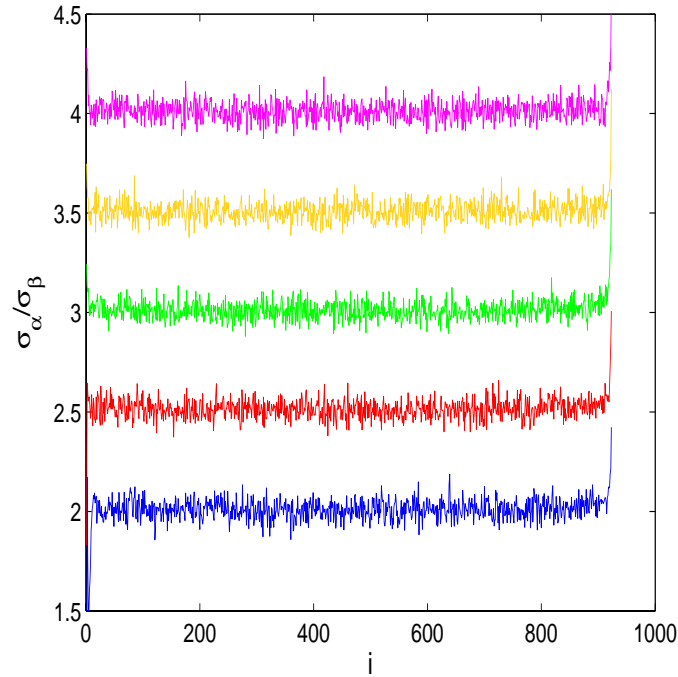


Figura 9.9: Cociente del tamaño de las fluctuaciones de los elementos diagonales y los elementos no diagonales, $\sigma_\alpha(i)/\sigma_\beta(i)$. Cada curva está desplazada 0.5 unidades respecto de la anterior para que puedan distinguirse. De abajo arriba: $k = 2, 3, 4, 5, 6$.

no diagonales de la matriz tridiagonal. Por tanto, podemos utilizar como parámetro de normalización de la escala de la matriz media un parámetro que caracterice la anchura de la densidad de estados media. La elección natural es el segundo momento, que da una medida de la anchura puesto que el primer momento es nulo en todos los casos. Este puede calcularse directamente a partir de la matriz tridiagonal media:

$$M_2 = \frac{1}{d} \left(\sum_{i=1}^d \overline{\alpha_i^2} + 2 \sum_{i=2}^d \overline{\beta_i^2} \right). \quad (9.46)$$

La anchura, es decir, el factor de normalización utilizado, sería $\sqrt{M_2}$. Así, la anchura de las nuevas densidades normalizadas sería la misma para todas ellas ($M_2' = 1$). Una vez normalizadas las matrices medias convenientemente, el tamaño de las fluctuaciones calculado mediante (9.34) y (9.35) se normaliza con el mismo factor y el resultado es el que aparece en la figura 9.8 ¹.

¹En los trabajos de Zuker et al. no existe este problema ya que se trata de un enfoque

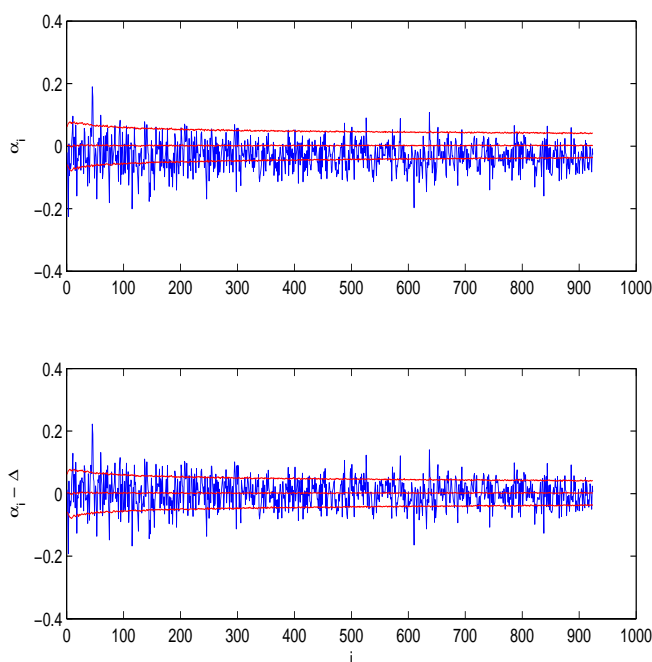


Figura 9.10: En el panel superior, elementos diagonales de una matriz individual perteneciente a la colectividad EGOE(2) en azul, junto con los elementos medios y anchura media ($\bar{\alpha}_i \pm \sigma_\alpha(i)$) en rojo. En el panel inferior, los elementos de la matriz individual se han desplazado para centrarse en los elementos medios.

Respecto a la representación de las colectividades mediante la matriz tridiagonal media con su anchura queda un aspecto muy importante a señalar. Sabemos que las colectividades EGOE(k) no son ergódicas en general. En nuestro caso el EGOE(6) se corresponde con la colectividad GOE, que es ergódica, y la ergodicidad se va perdiendo en la transición hacia el EGOE(2).

Podemos decir entonces que las curvas presentadas en la figura 9.8 (columna izquierda) no son representativas de la colectividad de la misma manera en el caso $k = 6$ que en el resto de los casos, en el sentido siguiente: si representamos una matriz cualquiera de la colectividad EGOE(6) sobre la figura correspondiente a su media y anchura veremos claramente que los elementos de la matriz individual fluctúan en torno a la matriz media en una banda dada por la anchura representada. En cambio, si hacemos esto mismo

distinto en que se toma una parte suave común y se construyen distintas colectividades variando sólo el tamaño de las fluctuaciones (MOLINA *et al.*, 2005; RELAÑO *et al.*, 2006).

k	ν		α	
2	0.955	\pm 0.005	1.076	\pm 0.002
3	0.954	\pm 0.005	1.074	\pm 0.002
4	0.955	\pm 0.003	1.072	\pm 0.003
5	0.952	\pm 0.002	1.072	\pm 0.003
6	0.954	\pm 0.004	1.072	\pm 0.003

Tabla 9.4: Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos a primeros vecinos, ν , y exponente α del ajuste lineal del espectro de potencias de la δ_n de las colectividades EGOE(k).

con una matriz cualquiera de la colectividad EGOE(2) veremos que los elementos representados fluctúan en una banda del mismo tamaño que el de la anchura representada pero muy probablemente centrada en una curva media ligeramente distinta.

Como ejemplo ilustrativo se representa en la figura 9.10 una matriz individual perteneciente a la colectividad EGOE(2) junto con la media y anchura de la misma manera en que se representaron en la figura 9.8. Se toman únicamente los elementos diagonales ya que al ser la escala más uniforme puede apreciarse mejor su comportamiento. Como puede verse en el panel superior, la parte suave de la matriz individual no coincide con la matriz media de la colectividad, y sólo realizando el desplazamiento adecuado ($\Delta = 1/d \sum_i (\alpha_i - \bar{\alpha}_i)$) pueden ambas coincidir (panel inferior).

En este punto debemos preguntarnos cuál es la importancia de la no ergodicidad en la forma tridiagonal de las colectividades para el posterior análisis de fluctuaciones. Volveremos sobre esta cuestión en la siguiente sección, una vez hayamos analizado las correlaciones entre los elementos de matriz y tengamos ya una descripción completa de las colectividades.

El análisis tradicional de fluctuaciones espectrales revela que estas siguen la predicción del GOE durante toda la evolución con k , como esperábamos. Los estadísticos utilizados para el análisis en este caso son, para las correlaciones de corto alcance, la distribución de espaciamientos a primeros vecinos y, para las correlaciones de largo alcance, el estadístico δ_n . En la tabla 9.4 se muestran los valores del parámetro de Brody, ν , resultados del ajuste de la distribución de espaciamientos a primeros vecinos a la distribución de Brody (3.11). El valor predicho para la colectividad GOE es $\nu = 0.957$ (BRODY *et al.*, 1981). Se muestran además los valores del exponente α , resultado del ajuste lineal de la región de bajas frecuencias del espectro de potencias de la δ_n y puede verse que son muy próximos a 1, como corresponde a los sistemas caóticos. En la figura 9.11 se muestra la distribución de espaciamientos, $P(s)$, y la distribución integrada, $I(s) = \int_0^s P(x)dx$, junto con la curva teóri-

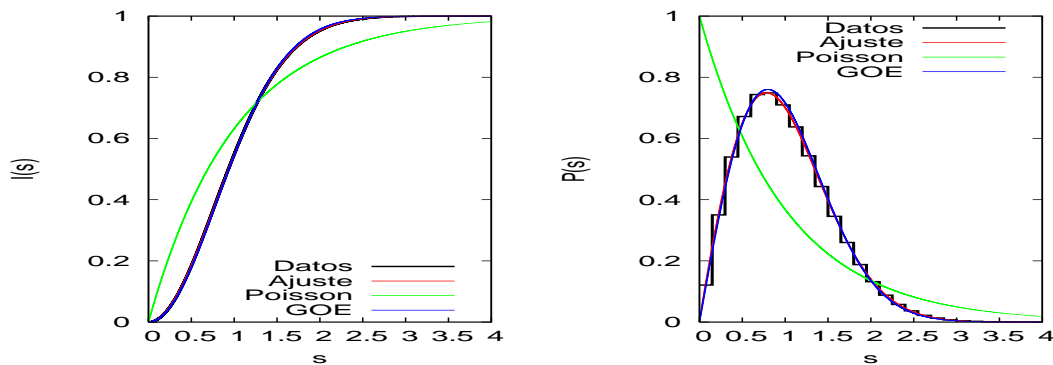


Figura 9.11: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de la colectividad EGOE(2) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

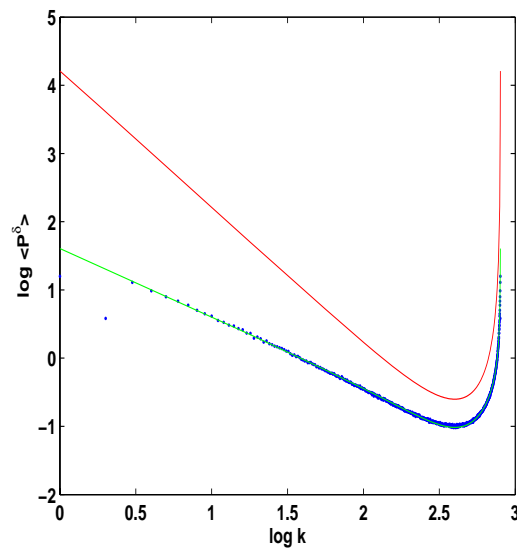


Figura 9.12: Representación del espectro de potencias correspondiente a la colectividad EGOE(2) junto con las curvas teóricas para GOE (verde) y Poisson (rojo).

ca para GOE y el ajuste a la distribución de Brody y en la figura 9.12 se representa el espectro de potencias de la δ_n junto con la predicción teórica para GOE en el caso $k = 2$. Ambas curvas son prácticamente idénticas en el resto de los casos, $k = 3 - 6$.

9.2.3. Correlaciones

Llevamos a cabo la medida de la correlación que puede existir entre los diferentes elementos de matriz de la forma tridiagonal de las colectividades EGOE(k) por medio de la construcción de matrices de correlación.

Así, para los elementos diagonales utilizamos la expresión (9.36) y calculamos el elemento C_{ij}^α de la matriz de correlación, que nos indica la correlación que existe entre el elemento α_i y el elemento α_j . Análogamente, utilizamos la expresión (9.37) para los elementos no diagonales y el elemento C_{ij}^β nos indica la correlación entre los elementos β_i y β_j . Para las correlaciones cruzadas utilizamos la expresión (9.38) y el elemento $C_{ij}^{\alpha\beta}$ nos indica la correlación que existe entre el elemento diagonal α_i y el elemento no diagonal β_j . Es necesario tener en cuenta la siguiente condición impuesta por la Estadística [ref]: el número R de miembros o realizaciones debe ser mayor o igual que el número de variables (número de elementos diagonales + número de elementos no diagonales). En este caso $R = 2000 > 1847$.

De esta manera construimos las tres matrices de correlación para cada uno de los casos $k = 2, 3, 4, 5$ y 6 . Comenzamos por el caso $k = 6$, es decir, EGOE(6), que coincide con la colectividad GOE, en la que todos los elementos de matriz son independientes y puede servirnos, por tanto, como referencia. Teóricamente en este caso todos los elementos de la tres matrices de correlación (excepto los diagonales, que valen 1 por definición) deberían ser nulos, ya que no existe correlación entre ningún par de elementos de matriz. Sin embargo, el cálculo de los elementos de las matrices de correlación conlleva un promedio sobre la colectividad, y cuando en la práctica este promedio se realiza sobre una muestra finita se obtienen sólo valores aproximados.

Así, el cálculo de las matrices de correlación para la colectividad EGOE(6) da como resultado valores para sus elementos que son muy pequeños aunque no todos nulos. Concretamente, con la estadística utilizada ($R = 2000$ miembros por colectividad) los valores de los elementos están contenidos en una banda de anchura aproximada 0.2 en torno al valor 0, es decir, para la mayor parte de los elementos se cumple $|C_{ij}^\beta| \leq 0.1$. Como la estadística utilizada es la misma en todos los casos, esto nos permite descartar como ruido las bandas de este tamaño que aparezcan en el resto de las matrices de correlación analizadas. En la figura 9.13 se muestra como ejemplo la matriz C_{ij}^β de correlaciones entre elementos no diagonales. Se han representado todos los elementos, excepto los diagonales $C_{ii}^\beta = 1$, uno a continuación de otro por

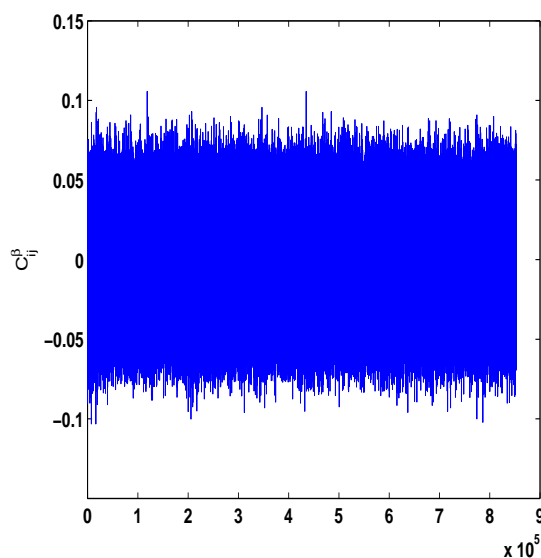


Figura 9.13: Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^{β} correspondiente a la colectividad EGOE(6) representados por filas, eliminando los elementos diagonales $C_{ii}^{\beta} = 1$.

filas.

Consideramos ahora las correlaciones cruzadas en las distintas colectividades. Las matrices de correlación que se obtienen son en todos los casos de la misma forma que para el caso EGOE(6), es decir, podemos considerar que todo en ellas es ruido y descartamos así la existencia de correlaciones cruzadas entre los elementos diagonales α_i y los elementos no diagonales β_i de las matrices tridiagonales en todos los casos.

En las matrices de correlación para elementos diagonales y para elementos no diagonales sí se observa una estructura de correlación en el caso $k = 2$, que va desapareciendo en la transición con k hasta perderse finalmente en el ruido que queda en el caso extremo sin correlaciones $k = 6$. Para tener una idea de cómo es la estructura de correlación hacemos una representación de las matrices en tres dimensiones: en los ejes x e y representamos los índices i y j de la fila y columna de la matriz y en el eje z el valor de cada elemento C_{ij} . Por definición, los elementos diagonales de las matrices de correlación, C_{ii} , valen 1, como puede verse fácilmente en las expresiones (9.36) y (9.37). Las matrices son simétricas y, por tanto, representaremos solamente una de las mitades.

En la figura 9.14 se representa la matriz de correlación C_{ij}^{α} correspondiente a los elementos diagonales en el caso $k = 2$. La primera subdiagonal está formada por los elementos que corresponden a las correlaciones a pri-

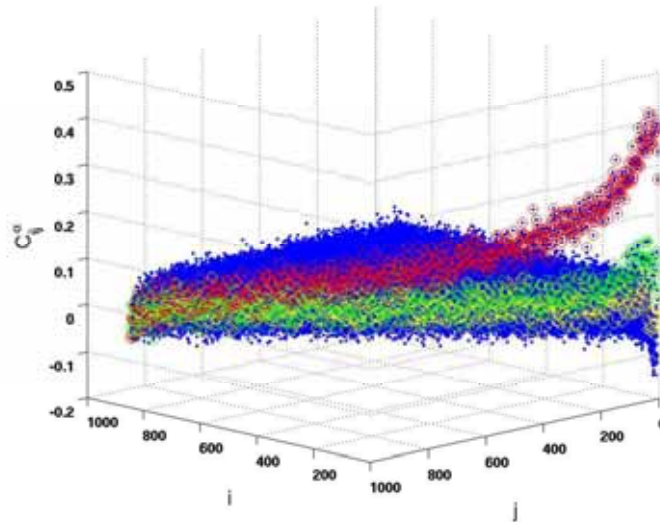


Figura 9.14: Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^{α} correspondiente a la colectividad EGOE(2) en una representación tridimensional: los índices de fila y columna corresponden a los ejes x e y y el valor del elemento se representa en el eje vertical. Aparecen remarcadas en rojo las correlaciones a primeros vecinos, en verde las correlaciones a segundos vecinos y en amarillo las correlaciones a terceros vecinos.

meros vecinos ($C_{ij}^{\alpha}, |i - j| = 1$) y aparece remarcada con círculos rojos. La siguiente diagonal, correspondiente a las correlaciones a segundos vecinos ($C_{ij}^{\alpha}, |i - j| = 2$), aparece remarcada con círculos verdes. Y la siguiente, que corresponde a las correlaciones a terceros vecinos ($C_{ij}^{\alpha}, |i - j| = 3$), remarcada con círculos amarillos. Así, podemos observar que existen correlaciones a primeros vecinos que presentan una tendencia decreciente con el índice contador de los elementos, es decir, la correlación es mayor entre los primeros elementos, $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots$ y va decreciendo hasta prácticamente desaparecer en los últimos elementos, $\dots, \alpha_{d-2}, \alpha_{d-1}, \alpha_d$. Existen también correlaciones a segundos vecinos, que son ligeramente menores y presentan la misma tendencia decreciente con el índice contador de los elementos. Las correlaciones a terceros vecinos son aún menores y así continúa esta tendencia decreciente con la distancia entre elementos hasta que la matriz de correlación presenta un aspecto plano similar al del caso sin correlaciones.

Si representamos la matriz de correlación correspondiente a los elementos no diagonales C_{ij}^{β} en este mismo caso $k = 2$ observamos una estructura muy similar al caso de los elementos diagonales. Y representando ambas matrices, C_{ij}^{α} y C_{ij}^{β} , a lo largo de la transición con k vemos cómo las correlaciones van desapareciendo suavemente, la intensidad de las mismas va decreciendo

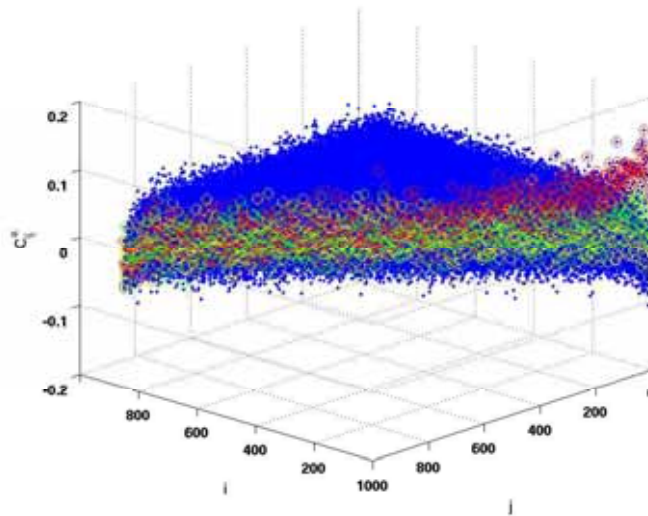


Figura 9.15: Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^α correspondiente a la colectividad EGOE(3) en una representación tridimensional (ver pie de la figura 9.14).

y así la estructura se va perdiendo (en la figura 9.15 se muestra el caso intermedio $k = 3$) hasta llegar al aspecto completamente plano del caso $k = 6$ ya descrito. Una representación tridimensional de este último caso puede verse en la figura 9.16.

9.2.4. El modelo

Llegados a este punto, una vez analizadas las distintas características de la forma tridiagonal de las colectividades EGOE(k), podemos plantearnos construir un primer modelo sencillo de colectividades tridiagonales y comprobar si es capaz de reproducir las propiedades de las colectividades originales. Concretamente, nos interesa reproducir correctamente el tipo de fluctuaciones espectrales, que es la propiedad que distingue unos sistemas de otros en caos cuántico. Estudiaremos también cómo se comporta la densidad de estados.

En primer lugar analizamos la importancia de las correlaciones. Para ello construimos colectividades de matrices tridiagonales cuyos elementos sean variables aleatorias independientes. Es decir, para cada miembro de cada colectividad generamos d variables aleatorias independientes para los elementos de matriz diagonales, $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_d$, y $(d - 1)$ variables aleatorias independientes para los elementos de matriz no diagonales, $\beta_2, \beta_3, \dots, \beta_d$. Las tomaremos como variables gaussianas cuyas medias y desviaciones vendrán

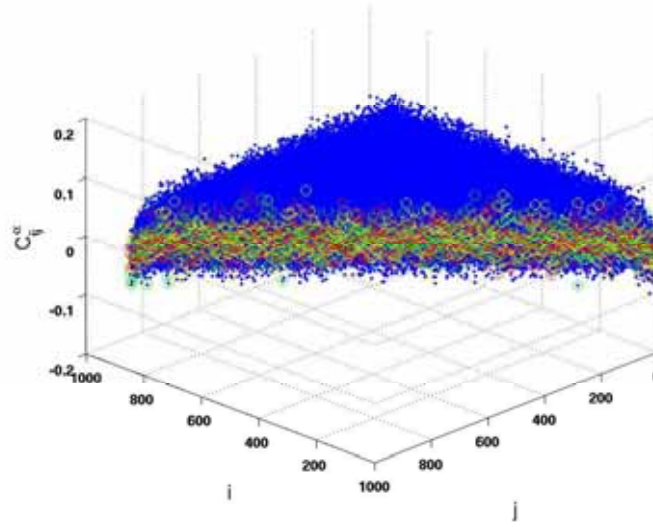


Figura 9.16: Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^α correspondiente a la colectividad EGOE(6) en una representación tridimensional (ver pie de la figura 9.14).

dadas por los valores medios y desviaciones calculados previamente a partir de las colectividades originales mediante las expresiones (9.3), (9.4), (9.34) y (9.35), es decir, los que aparecen representados en la columna izquierda de la figura 9.8.

De esta manera se construyen 2000 matrices tridiagonales para cada una de las colectividades, y realizando el correspondiente análisis de fluctuaciones espectrales el resultado es prácticamente indistinguible del obtenido con las colectividades originales. Los estadísticos calculados (distribución de espaciamientos a primeros vecinos, $P(s)$, y espectro de potencias del estadístico δ_n) siguen en todos los casos la predicción teórica para GOE. En la tabla 9.5 se muestran los valores del parámetro de Brody para estas nuevas colectividades generadas sin correlaciones, así como el exponente α resultado del ajuste lineal del espectro de potencias de la δ_n . Puede verse que son perfectamente compatibles (las diferencias son del orden del 1%) con los correspondientes a las colectividades originales, que aparecen en la tabla 9.4.

De este resultado podemos concluir que las correlaciones no constituyen un aspecto crucial de este modelo de colectividades EGOE(k) en forma tridiagonal, por lo que a las fluctuaciones espectrales se refiere. Es decir, que sería posible construir colectividades de matrices tridiagonales que reproduzcan el tipo de fluctuaciones espectrales de estas colectividades embebidas de una manera muy sencilla a partir únicamente de dos elementos: la parte suave de los elementos de matriz, que viene dada por la forma de la densidad

k	ν			α		
2	0.952	\pm	0.002	1.063	\pm	0.002
3	0.957	\pm	0.004	1.066	\pm	0.003
4	0.960	\pm	0.006	1.067	\pm	0.003
5	0.955	\pm	0.003	1.064	\pm	0.003
6	0.954	\pm	0.004	1.067	\pm	0.003

Tabla 9.5: Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos y exponente α del espectro de potencias de la δ_n de las colectividades EGOE(k) generadas con el modelo sin correlaciones.

de estados, y el tamaño de las fluctuaciones en dichos elementos, que según hemos visto, depende básicamente del tipo de fluctuaciones espectrales, ya que no cambia prácticamente a lo largo de la transición.

A continuación pasamos al estudio de la densidad de estados que se obtiene a partir de estas colectividades generadas sin correlaciones. Dado que los elementos de matriz, aunque independientes, se han generado de manera que posean la misma parte suave que las colectividades originales, esperamos que la densidad de estados sea también la misma que la original, ya que, según hemos visto, existe una estrecha relación entre la forma de los elementos de matriz y la forma de la densidad de estados.

Concretamente comparamos la densidad media de las colectividades, es decir,

$$\overline{g(E)} = \frac{1}{R} \sum_{k=1}^R g^{(k)}(E). \quad (9.47)$$

Para ello calculamos la densidad de estados de cada miembro en un histograma y realizamos el promedio sobre el total de R histogramas. Además, obtendremos una medida de la dispersión con la desviación típica:

$$\sigma_i(E) = \sqrt{\sum_{k=1}^R (g_i^{(k)}(E) - \overline{g_i(E)})^2}. \quad (9.48)$$

En la figura 9.17 se representa el histograma medio correspondiente a la densidad de estados $\overline{g(E)}$ junto con dos histogramas más para indicar la anchura dada por la desviación típica, es decir, $\overline{g(E)} \pm \sigma(E)$. En la columna izquierda se muestran los resultados correspondientes a las colectividades originales y en la derecha los correspondientes a las nuevas colectividades generadas sin correlaciones.

Pueden observarse dos diferencias entre las gráficas a la izquierda y a la derecha, que van suavizándose al aumentar k hasta desaparecer en el caso

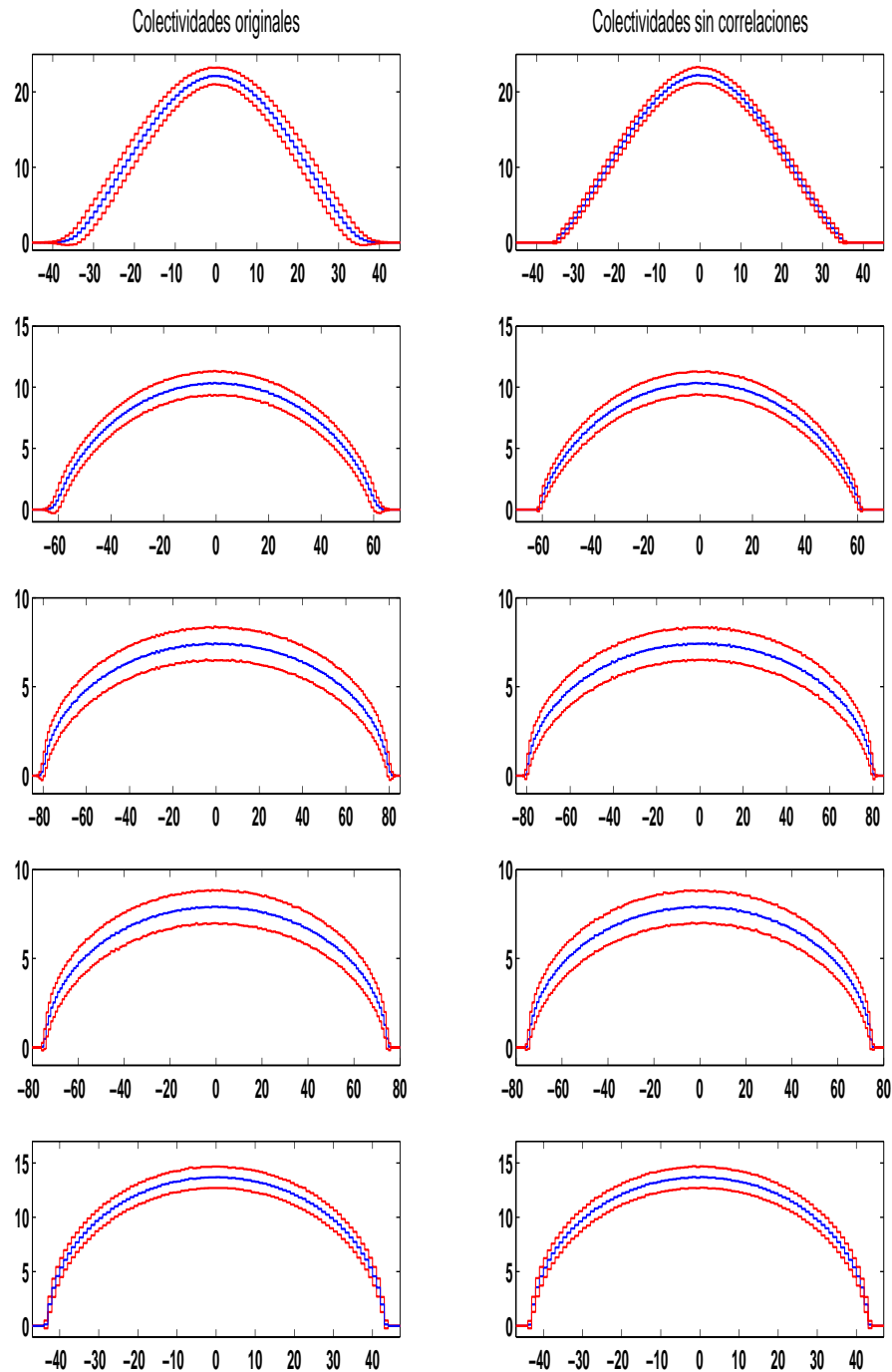


Figura 9.17: Densidad media de las colectividades $\text{EGOE}(k)$, para $k = 2 - 6$ (de arriba abajo), y su anchura, $g(E) \pm \sigma(E)$, en la columna izquierda. En la columna derecha, densidad media correspondiente a las colectividades generadas sin correlaciones.

$k = 6$. La primera se refiere a los bordes de los histogramas: en las colectividades originales el decaimiento en los bordes es más suave mientras que en las colectividades sin correlaciones es más brusco. La segunda está en las anchuras dadas por las desviaciones: estas son mayores en las colectividades originales que en las nuevas. Esto puede entenderse fácilmente si recordamos el problema de la ergodicidad.

Las colectividades embebidas no son ergódicas para la densidad de estados. Esto quiere decir que la densidad media no es representativa de la parte suave de la densidad para todos los miembros de la colectividad, sino que ésta es en general distinta para cada uno de ellos. Por tanto, es lógico que la dispersión de la densidad sea mayor en un caso no ergódico que en uno que sí lo es. En nuestro caso en particular, las colectividades EGOE(k) no son ergódicas para los valores más bajos de k aunque van ganando ergodicidad al acercarnos al caso $k = N$, que se corresponde con la colectividad GOE, que sí es completamente ergódica. En cambio, las nuevas colectividades sin correlaciones se han generado utilizando la misma parte suave de la matriz para todos los miembros y, por tanto, podemos decir que son ergódicas para la densidad por construcción, siempre que aceptemos la hipótesis de que existe una relación entre la parte suave de los elementos de matriz y la de la densidad de estados. O bien, desde el otro punto de vista, podemos considerar este resultado como una confirmación de la existencia de esa relación, ya que al construir colectividades ergódicas en los elementos de matriz se observa que éstas son también ergódicas para la densidad. En cualquier caso vemos que esta puede ser la causa de la diferencia en la anchura de la densidad entre las colectividades originales y las nuevas.

Para probar que el argumento es correcto puede hacerse una última comprobación. Consideramos el caso de menor ergodicidad, $k = 2$, e intentamos construir una nueva colectividad sin correlaciones pero que conserve en la medida de lo posible la no ergodicidad original. Para ello debemos tratar de generar una parte suave distinta para cada miembro de la nueva colectividad. Sabemos que la parte suave de los elementos no diagonales de las matrices queda muy bien descrita por la función (9.7) y la de los elementos diagonales por los polinomios que se han utilizado. Por tanto, podemos utilizar los parámetros de los ajustes a cada matriz de la colectividad original para generar la parte suave de cada miembro de la nueva colectividad, es decir, utilizar

$$\beta_i^{(k)S} = \sqrt{a^{(k)} \left(1 - \left(\frac{i}{d} \right)^{b^{(k)}} \frac{\log i}{\log d} \right)} \quad (9.49)$$

$$\alpha_i^{(k)S} = P_5(\{a_j^{(k)}, j = 0, \dots, 5\}, i) \quad (9.50)$$

como medias de las variables gaussianas independientes con las que generamos

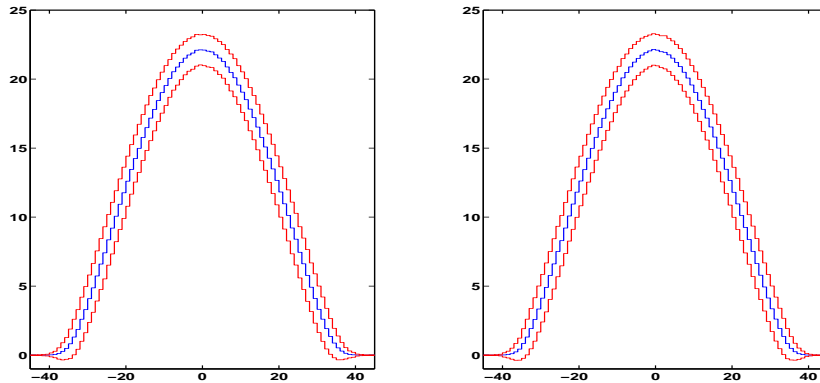


Figura 9.18: Densidad media de la colectividad EGOE(2) y su anchura, $\overline{g(E)} \pm \sigma(E)$, a la izquierda. A la derecha, la densidad y anchura de la correspondiente colectividad generada sin correlaciones y no ergódica.

cada elemento de matriz, donde el índice k indica el número de orden del miembro de la colectividad.

De esta manera conseguimos construir una colectividad tridiagonal EGOE(2) sin correlaciones y no ergódica. Y realizando de nuevo todo el análisis de fluctuaciones espectrales obtenemos que estas continúan reproduciendo la estadística predicha para GOE correctamente, y además la representación de la densidad media es mucho más parecida a la original que la anterior colectividad sin correlaciones y ergódica. En la figura 9.18 se representa la densidad con su anchura correspondiente a la nueva colectividad no ergódica junto a la densidad de la colectividad original.

Como conclusión de este último análisis podemos indicar que las propiedades de ergodicidad de las colectividades tampoco constituyen un aspecto fundamental para construir un modelo de matrices tridiagonales que reproduzcan correctamente el tipo de fluctuaciones espectrales en estas colectividades embebidas EGOE(k).

Y como conclusión de esta sección 9.2 diremos que en el caso de las colectividades estudiadas aquí parece posible la construcción de un modelo sencillo de colectividades tridiagonales que reproduzca correctamente las propiedades de la estadística espectral, teniendo sólo en cuenta cómo es la forma de la parte suave y las fluctuaciones de los elementos de matriz y generándolos de manera independiente por medio de variables aleatorias, sin la necesidad de tomar en cuenta las correlaciones entre ellos ni las propiedades de ergodicidad características de estas colectividades. Poder construir este tipo de colectividades en su forma tridiagonal de una manera tan sencilla en lugar de utilizar el método habitual construyendo la matriz de la interacción a k -

cuerpos para propagar después al espacio de N partículas, que es mucho más costoso, supone una gran ventaja.

Otro objetivo muy deseable sería poder establecer el tipo de fluctuaciones espectrales de una determinada matriz hamiltoniana a partir de un análisis de su forma tridiagonal, concretamente, de las fluctuaciones de los elementos de matriz. En la siguiente sección estudiamos una transición en la que cambia el tipo de estadística espectral y, por tanto, podremos tratar este aspecto y así continuar con el estudio de la forma tridiagonal de las colectividades embebidas para intentar construir un modelo más completo.

9.3. Introducción gradual de la interacción a dos cuerpos

Nos centramos en esta sección en la transición dada por el hamiltoniano

$$H = H(1) + \lambda H(2), \quad (9.51)$$

que lleva, mediante la variación del parámetro de control λ , desde un sistema de partículas sin interacción ($\lambda = 0$) a un sistema con interacción a dos cuerpos ($\lambda = 1$), es decir, que pasamos de una estadística espectral de tipo Poisson, de acuerdo con el resultado de la Parte I, a una estadística espectral tipo GOE, según se explicó en la introducción de esta Parte.

Señalada ya anteriormente la importancia de este tipo de hamiltonianos como modelo para la descripción de sistemas de partículas en interacción, pasamos al análisis de la forma tridiagonal de las colectividades de matrices aleatorias a lo largo de la transición, con el objeto de obtener una caracterización de las mismas lo más completa posible que nos permita la construcción de un modelo sencillo de colectividades tridiagonales capaz de describir la transición entre los distintos tipos de estadística espectral.

En este caso utilizaremos, por comodidad, un espacio de dimensión más pequeña que en la sección anterior, ya que el número de pasos que estudiaremos en esta transición (número de valores distintos de λ) es mayor y el volumen de cálculos necesarios es, por tanto, también mayor. Así, los parámetros utilizados en este caso son los siguientes:

- Número de partículas: $N = 6$
- Número de niveles del espectro de partícula independiente: $m = 11$
- Dimensión del espacio: $d = C(11, 6) = 462$
- Número de realizaciones (matrices por colectividad): $R = 1000$

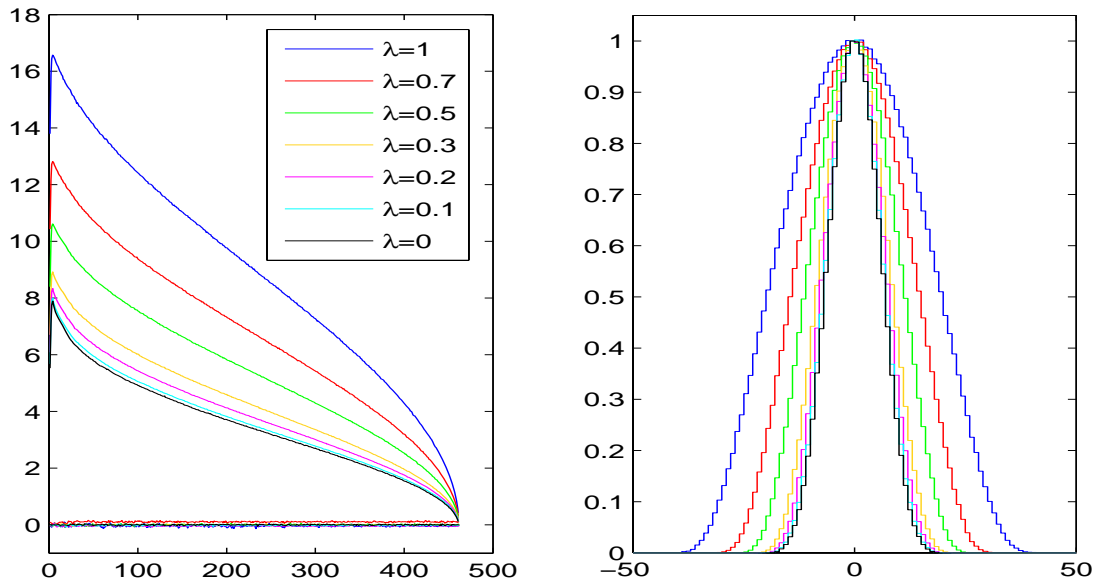


Figura 9.19: Matriz promedio para la colectividad EGOE(1+2) dada por el hamiltoniano (9.51) para distintos valores del parámetro λ (izquierda) y las correspondientes densidades de estados (derecha).

Los valores del parámetro λ para los que construimos colectividades son $\lambda = 0, 0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 0.7$ y 1 . El motivo del barrido más fino en los valores más bajos es que, tras una primera prueba, se comprobó que la estadística espectral no cambia prácticamente desde $\lambda = 0.1$ hasta $\lambda = 1$, y es entre $\lambda = 0$ y $\lambda = 0.1$ cuando puede observarse claramente la transición.

En los siguientes apartados se organiza el estudio de las colectividades tridiagonales de manera análoga a como se hizo en la sección anterior 9.2.

9.3.1. Parte suave

En la figura 9.19 se muestra la densidad media junto con la matriz tridiagonal media. En este caso se han representado las matrices sin normalizar para que no se superpongan y puedan distinguirse mejor. Asimismo, las densidades medias aparecen divididas por un factor, que es su valor máximo en cada caso, para igualarlas en altura y así poder observar mejor la relación que existe entre la densidad y la matriz tridiagonal. También para mayor claridad se han eliminado los casos de los valores más bajos de λ , ya que las curvas para todos ellos son prácticamente coincidentes (esto nos indica que

λ	a_t	a_d	b_t	b_d
0	2.477 ± 0.003	10.41 ± 0.04	0.0657 ± 0.0005	0.071 ± 0.002
0.01	2.459 ± 0.003	10.43 ± 0.05	0.0682 ± 0.0005	0.069 ± 0.003
0.02	2.461 ± 0.003	10.34 ± 0.04	0.0679 ± 0.0005	0.073 ± 0.002
0.04	2.449 ± 0.003	10.34 ± 0.05	0.0696 ± 0.0004	0.073 ± 0.002
0.06	2.431 ± 0.003	10.42 ± 0.03	0.0721 ± 0.0004	0.068 ± 0.002
0.08	2.403 ± 0.002	10.10 ± 0.06	0.0761 ± 0.0004	0.084 ± 0.004
0.1	2.383 ± 0.002	10.24 ± 0.05	0.0790 ± 0.0003	0.075 ± 0.003
0.2	2.233 ± 0.002	9.62 ± 0.04	0.1028 ± 0.0005	0.103 ± 0.003
0.3	2.073 ± 0.003	9.16 ± 0.02	0.1334 ± 0.0006	0.130 ± 0.002
0.5	1.823 ± 0.002	8.23 ± 0.03	0.1954 ± 0.0007	0.197 ± 0.003
0.7	1.678 ± 0.002	7.85 ± 0.05	0.2430 ± 0.0007	0.238 ± 0.006
1	1.577 ± 0.001	7.40 ± 0.04	0.2835 ± 0.0007	0.279 ± 0.005

Tabla 9.6: Parámetros del ajuste de la matriz media y de la densidad inversa media a la función (9.7).

en estos casos predomina ya claramente la parte a un cuerpo y la densidad viene determinada básicamente por esta parte). En los cálculos que se describen a continuación se utilizan todos los valores de λ de que se disponen y se realizan las normalizaciones adecuadas ya descritas en la sección anterior referente a la evolución con el rango de la interacción.

De nuevo, la forma de los elementos de matriz no diagonales se ajusta con la función (9.7) y los parámetros de los ajustes realizados, a_t y b_t , se muestran en la tabla 9.6. Además, continuando con el propósito de investigar la relación entre la matriz tridiagonal y la densidad, realizamos los correspondientes ajustes de la densidad inversa media a la misma función (9.7) y mostramos el resultado de estos ajustes, a_d y b_d , en la misma tabla junto con los parámetros de los ajustes a la matriz tridiagonal.

Por otro lado hacemos una representación gráfica de los parámetros, lo que nos permite observar en la figura 9.20 el mismo comportamiento lineal que habíamos observado en el caso anterior de la transición con el rango de la interacción. Si realizamos los correspondientes ajustes lineales obtenemos

$$a_d = (3.343 \pm 0.067)a_t + (2.18 \pm 0.15) \quad (9.52)$$

$$b_d = (0.969 \pm 0.015)b_t + (0.0042 \pm 0.0022) \quad (9.53)$$

Este resultado corrobora de nuevo la estrecha relación existente entre la representación tridiagonal de la matriz hamiltoniana y su correspondiente densidad de estados. De nuevo se comprueba que la relación no es tan sencilla como en el caso de una densidad gaussiana (figura 9.6). Esto sería muy deseable, ya que conociendo la forma de la matriz tridiagonal se tendría

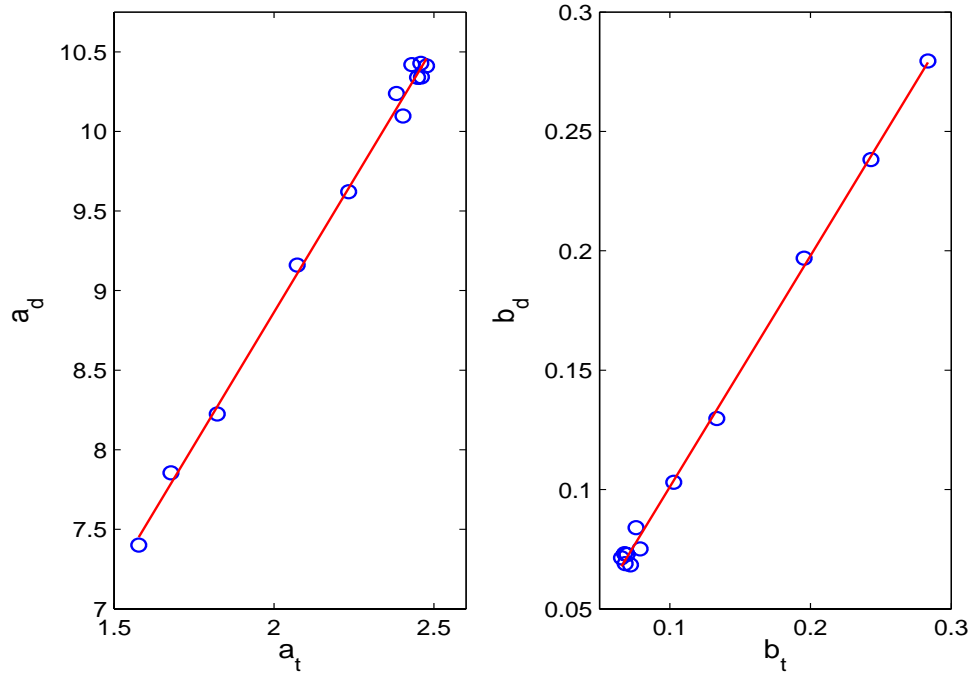


Figura 9.20: Ajustes lineales de los parámetros a_d y b_d correspondientes a la inversa de las densidades frente a los parámetros a_t y b_t correspondientes a las matrices tridiagonales.

automáticamente la de la densidad o viceversa. En el caso de la transición que aquí se estudia esto no es así de sencillo pero de cualquier forma, puede obtenerse información sobre una de las dos, densidad o matriz tridiagonal, a partir de la otra. Es decir, constituye un primer paso en el modelo que tratamos de construir.

Por último, el ajuste de los elementos no diagonales medios a la expresión (9.7) nos proporciona una manera de obtener valores aproximados de los momentos de la correspondiente densidad. En la sección 9.1 obtuvimos expresiones para los momentos de orden 2 y 4 como función de los parámetros de ajuste a_t y b_t (expresiones (9.26) y (9.33)). Podemos comprobar si estas aproximaciones son razonables calculando los momentos medios como promedios de los momentos de cada matriz (\overline{M}^p) y utilizando las expresiones obtenidas (\overline{M}^f). Los resultados se muestran en la tabla 9.7. Los errores relativos son porcentuales ($\varepsilon_r = |\overline{M}^f - \overline{M}^p| / \overline{M}^p \cdot 100$).

Como puede apreciarse, las diferencias entre los momentos promedio y los calculados a partir de las fórmulas son pequeñas. Por lo tanto, podemos concluir que las aproximaciones utilizadas en su deducción son razonables.

λ	\overline{M}_2^p	\overline{M}_2^f	ε_r	\overline{M}_4^p	\overline{M}_4^f	ε_r
0	30.904	30.912	0.023	2605	2439	6.4
0.01	30.7223	30.7292	0.022	2578	2407	6.6
0.02	31.143	31.171	0.091	2648	2477	6.4
0.04	31.211	31.264	0.17	2656	2489	6.3
0.06	31.64	31.71	0.21	2729	2556	6.3
0.08	31.88	31.97	0.30	2753	2591	5.9
0.1	32.58	32.65	0.20	2877	2697	6.2
0.2	37.476	37.470	0.015	3717	3500	5.8
0.3	45.71	45.52	0.43	5404	5075	6.1
0.5	72.13	71.2	1.2	12912	12054	6.6
0.7	111.7	109.8	1.7	30216	28086	7.0
1	196.3	191.8	2.3	91610	84396	7.9

Tabla 9.7: Momentos medios de orden 2 y 4 calculados como promedios sobre la colectividad (superíndice p) y a partir de las expresiones (9.26) y (9.33) (superíndice f) y errores relativos en tanto por ciento.

Los errores son lógicamente un poco mayores en el momento de orden 4, ya que en este caso se desprecian más términos en el cálculo.

Además, las expresiones (9.26) y (9.33) pueden utilizarse también, como test, para calcular momentos de matrices individuales en lugar de promedios. Y también en este caso proporcionan buenos resultados: la mayoría de los errores relativos son del mismo orden que los de la tabla, aunque siempre hay algunos miembros de la colectividad para los que se obtienen errores un poco mayores. Por tanto, si las aproximaciones son aceptables para la mayoría de las matrices individuales con mayor motivo podemos pensar que lo son para el promedio sobre la colectividad.

9.3.2. Fluctuaciones

En esta sección se estudia el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de las matrices tridiagonales y su posible relación con la estadística de las fluctuaciones espectrales del sistema. En la sección 9.2.2 tratamos la evolución de la colectividad EGOE(k) con el rango k de la interacción. Es conocido que el tipo de estadística espectral no cambia a lo largo de dicha evolución y pudimos ver cómo el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de la matriz tridiagonal tampoco cambiaba prácticamente.

En la evolución de la colectividad EGOE(1+2) que tratamos aquí la estadística de las fluctuaciones espectrales sí cambia: la variación del parámetro λ en el hamiltoniano (9.51) lleva de una estadística de tipo Poisson en el sis-

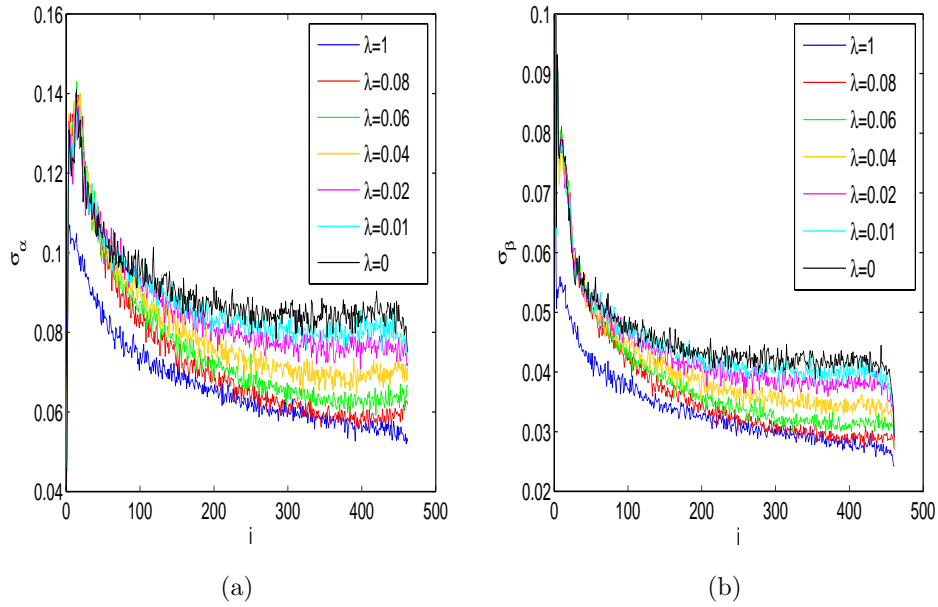


Figura 9.21: Tamaño de las fluctuaciones de los elementos de matriz diagonales, σ_α , y no diagonales, σ_β , para distintos valores de λ .

tema sin interacción ($\lambda = 0$) a una de tipo GOE al introducir la interacción a dos cuerpos ($\lambda = 1$). Por tanto, esperamos encontrar también un cambio esta vez en el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz.

El cálculo de este tamaño para elementos diagonales y no diagonales, σ_α y σ_β , y sus correspondientes normalizaciones se realizan de la misma manera que se explicó en la sección 9.2.2, y el resultado se muestra en la figura 9.21. No se han representado todos los valores de λ estudiados por claridad, ya que las curvas correspondientes a los valores más altos son muy parecidas y es en la región de valores más bajos donde empieza a observarse un cambio apreciable en los valores de σ . Este resultado es coherente con la existencia de una relación entre el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz y la estadística de las fluctuaciones espectrales, ya que la transición comienza a observarse para valores pequeños de λ .

A continuación se muestra el análisis de la estadística espectral a lo largo de la evolución de la colectividad, que se realiza mediante dos estadísticos: la distribución de espaciamientos a primeros vecinos para las correlaciones de corto alcance y el espectro de potencias de la δ_n para las de largo alcance.

En la figura 9.22 puede verse la distribución de espaciamientos a primeros vecinos, $P(s)$, para cuatro valores distintos del parámetro λ . En la gráfica (a), correspondiente a $\lambda = 1$, las curvas de ajuste están en buen acuerdo con

λ	ν
0	0.047 \pm 0.005
0.01	0.132 \pm 0.002
0.02	0.233 \pm 0.002
0.04	0.459 \pm 0.001
0.06	0.663 \pm 0.001
0.08	0.810 \pm 0.003
0.1	0.885 \pm 0.002
0.2	0.948 \pm 0.004
0.3	0.952 \pm 0.005
0.5	0.951 \pm 0.009
0.7	0.961 \pm 0.003
1	0.957 \pm 0.006

Tabla 9.8: Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de las colectividades EGOE(1+2) a lo largo de la transición con λ en el hamiltoniano (9.51).

la predicción de la estadística tipo GOE. En las dos siguientes, (b) y (c), se han representado las curvas correspondientes a valores bajos del parámetro, $\lambda = 0.06$ y 0.02 , donde ya puede apreciarse bien la transición hacia la estadística de Poisson. Y la última corresponde a $\lambda = 0$, donde la curva de ajuste está ya muy próxima a la curva teórica de Poisson, aunque ambas no coinciden exactamente. El acuerdo con la predicción de Poisson es ligeramente peor que en la Parte I (véanse las figuras 4.7, 4.9 y 4.11 y las tablas 4.2, 4.3 y 4.4) debido a que allí era posible utilizar una estadística mejor (disponíamos de espectros de un millón de niveles) y trabajar con un modelo de espacio infinito, como se explicaba en la sección 4.2.

En la tabla 9.8 se muestran los parámetros de Brody obtenidos a partir de los ajustes a las distribuciones de espaciamientos a lo largo de toda la transición. En ella puede apreciarse la evolución del parámetro ν entre $\lambda = 0$ y $\lambda = 0.1$ y cómo este parámetro permanece prácticamente constante a partir de $\lambda = 0.2$.

Por otro lado, la figura 9.23 muestra cómo es la evolución del espectro de potencias del estadístico δ_n a lo largo de toda la transición con el parámetro λ . Puede observarse cómo la curva de puntos coincide con la predicción teórica para GOE en $\lambda = 1$ y va separándose poco a poco de ella para acercarse a la curva teórica de Poisson según disminuye el valor de λ . De nuevo, en el sistema sin interacción ($\lambda = 0$) la curva no coincide exactamente con la predicción de Poisson sino que existe una pequeña desviación a frecuencias bajas, como ya se observó en la Parte I.

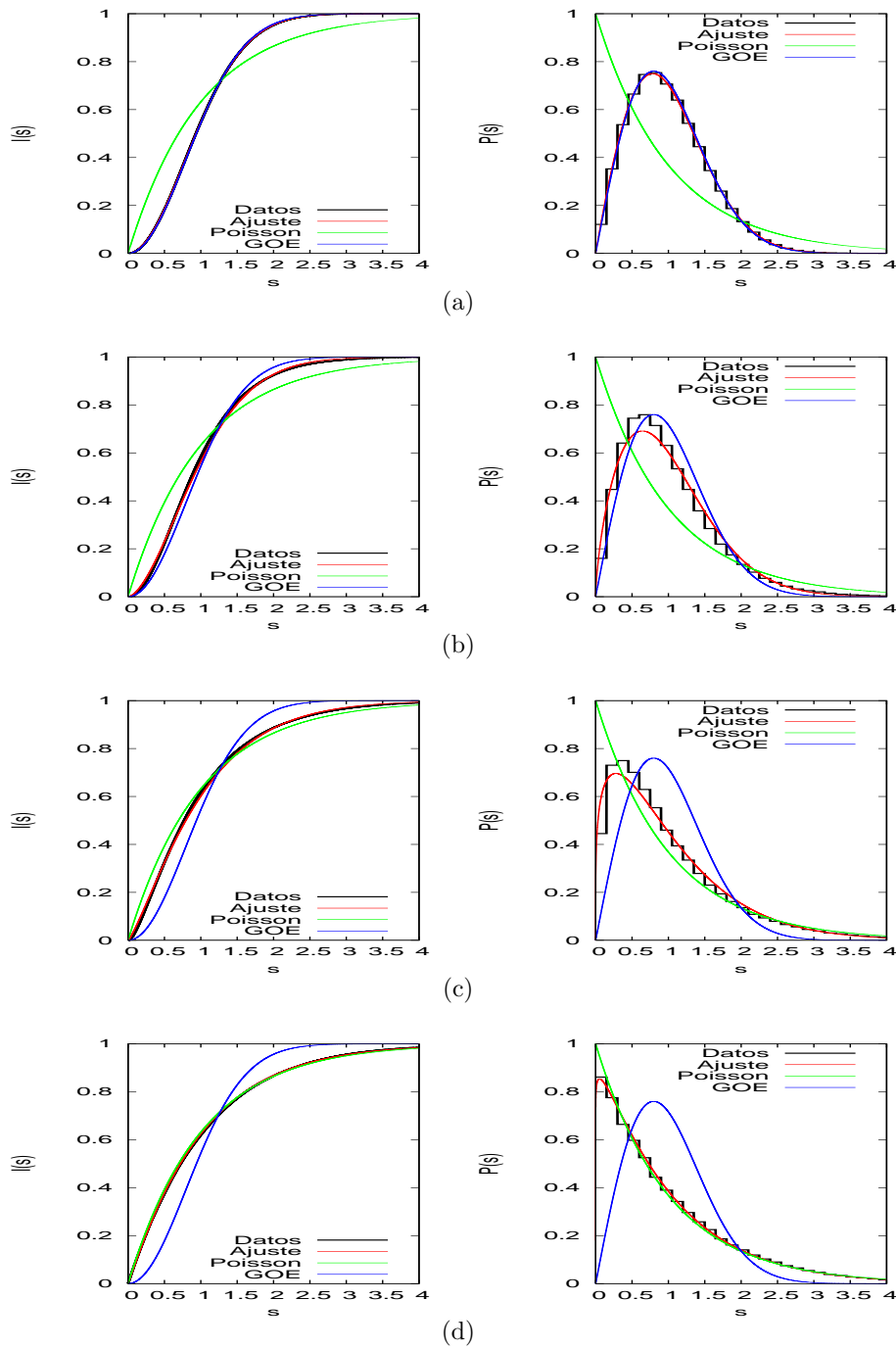


Figura 9.22: Distribución de espaciamientos a primeros vecinos de la colectividad EGOE(1+2) para varios valores de λ (de arriba abajo: $\lambda = 1, 0.06, 0.02$ y 0) junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

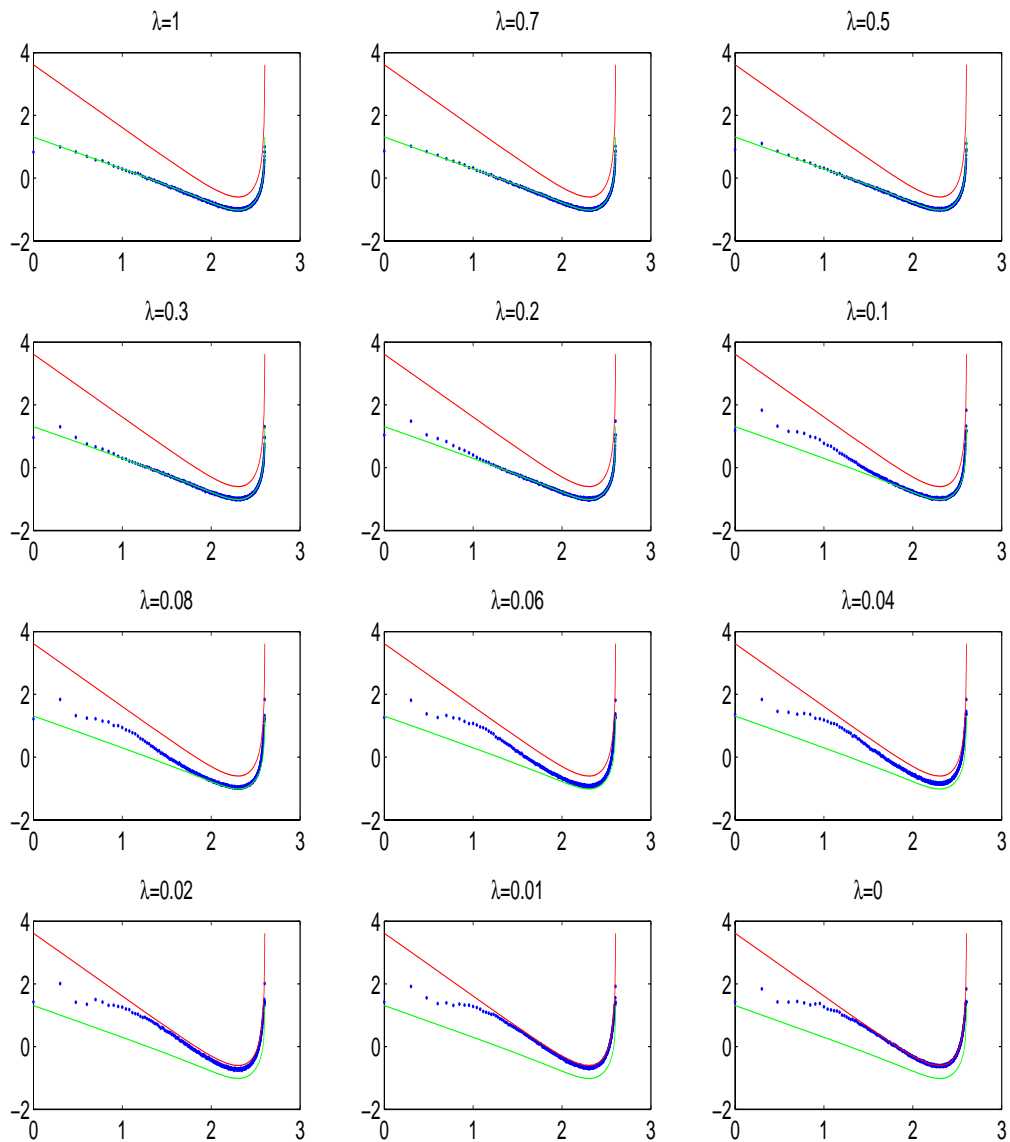


Figura 9.23: Espectro de potencias del estadístico δ_n para la colectividad EGOE(1+2) (puntos), junto con las predicciones teóricas para Poisson (rojo) y GOE (verde).

Una vez expuesto el comportamiento del sistema en lo que a las fluctuaciones espectrales se refiere, volvemos sobre las fluctuaciones en los elementos de la matriz hamiltoniana tridiagonal para discutir la relación existente entre unas y otras. Como se ha visto en la figura 9.21, el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz presenta una tendencia creciente al pasar de la estadística GOE, es decir, de un espectro de tipo caótico, a la estadística de Poisson, esto es, a un espectro de tipo regular.

En primer lugar, debemos comparar este resultado con los trabajos anteriores que mencionábamos en la parte introductoria sobre matrices tridiagonales. En (MOLINA *et al.*, 2005) vimos cómo, partiendo de una matriz cuya estadística espectral era de tipo GOE y variando el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz mediante la multiplicación por un factor $F > 1$, la estadística espectral se acercaba a la de Poisson. Por tanto, nuestro resultado está en buen acuerdo con la tendencia observada en este trabajo. Por otro lado hay que tener en cuenta que no se trata del mismo tipo de cálculo. Mientras en (MOLINA *et al.*, 2005) se parte de una única matriz y se obtienen las demás artificialmente mediante la variación del tamaño de las fluctuaciones de sus elementos, aquí construimos todas las matrices a partir de un hamiltoniano y después analizamos las fluctuaciones en los elementos. Es, por tanto, interesante estudiar si la variación en el tamaño de las fluctuaciones ocurre de la misma forma en ambas situaciones.

Observando la figura 9.21 puede ya concluirse que esto no es así. En (MOLINA *et al.*, 2005) todas las curvas $\sigma(i)$ tienen, por construcción, la misma forma funcional, y se diferencian únicamente en un factor F . En nuestro caso puede verse que la diferencia entre unas curvas y otras no es un simple factor de escala. Además, podemos calcular el valor medio de cada una, como se muestra en la tabla 9.9, y así comprobaremos que los factores entre los distintos tamaños de fluctuaciones a lo largo de la transición GOE-Poisson son mucho menores en nuestro caso que los que se utilizan para modelar esa misma transición en (MOLINA *et al.*, 2005). De hecho, utilizando la relación que se deduce en ese trabajo, $\nu = 1/F^2$, habríamos necesitado un factor del orden $F \sim 5$ para pasar de la matriz tridiagonal con estadística espectral tipo GOE a la matriz a la que hemos llegado ($\nu = 0.047$). Sin embargo, el factor que obtenemos aquí sólo es $\frac{\sigma_{\alpha}^{\lambda=0}}{\sigma_{\alpha}^{\lambda=1}} \approx \frac{\sigma_{\beta}^{\lambda=0}}{\sigma_{\beta}^{\lambda=1}} \approx 1.4$. Por tanto, en nuestro caso no se cumple dicha relación y, en consecuencia, esta no puede considerarse universal, como se pretendía en dicho trabajo.

Por otro lado, esto nos lleva lógicamente a preguntarnos dónde está la diferencia entre la transición que aquí tratamos y las que se estudian en (MOLINA *et al.*, 2005). Es decir, por qué el factor entre los tamaños de las fluctuaciones en los extremos de nuestra transición es tan pequeño comparado con el factor F necesario para acercarse a la estadística de Poisson en los ejemplos de Molina *et al.* En este punto, debemos comenzar a intuir que pa-

λ	$\overline{\sigma}_\alpha$	$\overline{\sigma}_\beta$	$\overline{\sigma}_\alpha/\overline{\sigma}_\beta$	$\overline{\sigma}_\alpha/\overline{\sigma}_\beta'$
0	0.0906	0.0468	1.936	1.996
0.01	0.0879	0.0456	1.929	1.988
0.02	0.0854	0.0443	1.928	1.990
0.04	0.0809	0.0419	1.931	1.995
0.06	0.0766	0.0398	1.925	1.994
0.08	0.0736	0.0383	1.921	1.991
0.1	0.0719	0.0374	1.922	1.992
0.2	0.0689	0.0357	1.930	1.994
0.3	0.0683	0.0353	1.935	1.992
0.5	0.0677	0.0347	1.951	1.993
0.7	0.0673	0.0344	1.957	1.991
1	0.0671	0.0341	1.971	1.999

Tabla 9.9: Valores promedio del tamaño de las fluctuaciones en elementos diagonales, $\overline{\sigma}_\alpha$, y no diagonales, $\overline{\sigma}_\beta$. En la tercera columna, el cociente de ambos y en la cuarta, el mismo cociente eliminando los 10 primeros y los 10 últimos elementos en el promedio.

ra construir el modelo de matrices tridiagonales capaz de reproducir nuestra transición va a ser necesario tener en cuenta más elementos además del tamaño de las fluctuaciones. Concretamente, el único elemento que no se toma en cuenta en (MOLINA *et al.*, 2005) son las correlaciones entre los elementos de matriz. Aunque en la evolución con el rango de la interacción (sección 9.2) se vio que no eran relevantes, sí cobran importancia en este caso.

Otro aspecto destacable en cuanto al tamaño de las fluctuaciones, que ya se observó en la sección 9.2 y vuelve a observarse aquí de manera similar, es la relación entre el tamaño en los elementos de matriz diagonales y en los no diagonales. El cociente entre ambos tamaños es en media, $\overline{\sigma}_\alpha/\overline{\sigma}_\beta$, muy próximo a 2, como puede verse en la tercera y cuarta columnas de la tabla 9.9. En la tercera el cociente se ha calculado utilizando todos los elementos para el promedio y en la cuarta se han eliminado los diez primeros y los diez últimos elementos. Así, en esta última el cociente es más próximo a 2, ya que, como se observa en la figura 9.24, no sólo el promedio sino que también elemento a elemento, el cociente de tamaños $\sigma_\alpha(i)/\sigma_\beta(i)$ es próximo a 2 excepto en los primeros y últimos elementos en que se desvía, hacia abajo o hacia arriba, respectivamente. En esta figura la primera curva, correspondiente a $\lambda = 1$, está en su posición correcta y las demás están desplazadas cada una 0.5 unidades respecto de la anterior para que puedan distinguirse.

No debemos olvidar que uno de nuestros objetivos finales es la construcción de un modelo de matrices tridiagonales que reproduzca las transiciones

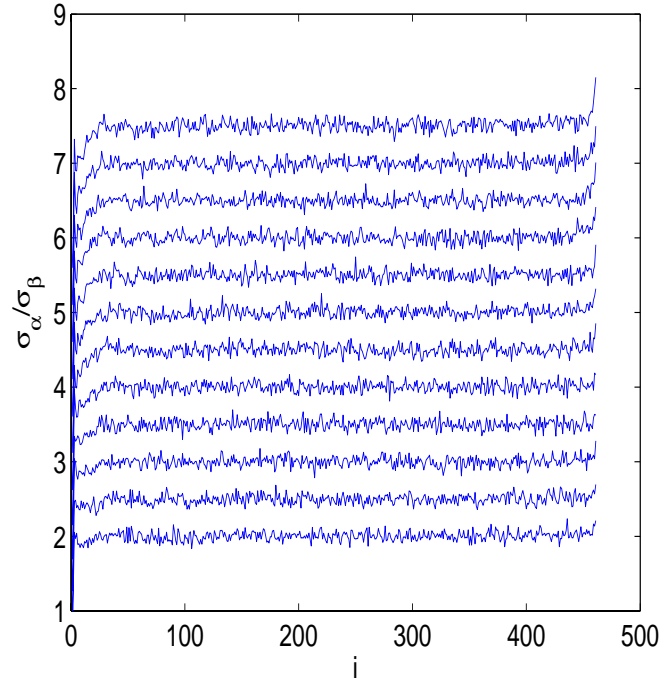


Figura 9.24: Cociente del tamaño de las fluctuaciones de los elementos diagonales y los elementos no diagonales, $\sigma_\alpha(i)/\sigma_\beta(i)$. Cada curva está desplazada 0.5 unidades respecto de la anterior para que puedan distinguirse. De abajo arriba: $\lambda = 1, 0.7, 0.5, \dots, 0.01, 0$.

aquí descritas y, por tanto, buscamos disponer de una descripción lo más completa posible del comportamiento de todos sus elementos, parte suave, fluctuaciones y correlaciones, que nos permita posteriormente modelar sus aspectos más relevantes. Así, para caracterizar el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz de la forma más completa posible, estudiamos la forma de las curvas que resultan al representarlo (figura 9.21). Se trata de curvas con una tendencia suave decreciente cuya forma puede modelarse mediante la expresión

$$\sigma(i) = \sigma_d(d/i)^p, \quad (9.54)$$

donde σ_d y p son parámetros ajustables. Como ejemplo, se muestran en la figura 9.25 los ajustes de $\sigma_\alpha(i)$ y $\sigma_\beta(i)$ correspondientes a $\lambda = 0.5$. Los parámetros de ajuste obtenidos en todos los casos se muestran en la tabla 9.10 y se representan en la figura 9.26 frente al parámetro λ para que pueda observarse cómo es su evolución a lo largo de la transición.

El parámetro σ_d refleja de nuevo algo que ya habíamos comprobado: en la última columna de la tabla 9.10 podemos ver el cociente entre el valor de este

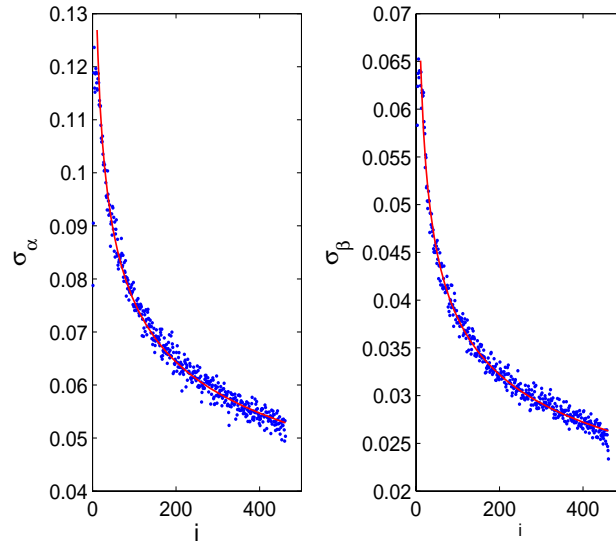


Figura 9.25: Ajuste del tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz diagonales, σ_α , y no diagonales, σ_β a la fórmula (9.54).

λ	p^α	σ_d^α	p^β	σ_d^β	$\sigma_d^\alpha/\sigma_d^\beta$
0	0.119	0.0805	0.139	0.0394	2.041
0.01	0.140	0.0763	0.157	0.0377	2.026
0.02	0.161	0.0726	0.174	0.0359	2.023
0.04	0.202	0.0657	0.211	0.0325	2.020
0.06	0.237	0.0598	0.250	0.0295	2.023
0.08	0.261	0.0559	0.276	0.0276	2.027
0.1	0.280	0.0533	0.287	0.0265	2.012
0.2	0.285	0.0507	0.295	0.0251	2.019
0.3	0.268	0.0512	0.276	0.0255	2.009
0.5	0.234	0.0529	0.243	0.0263	2.012
0.7	0.210	0.0540	0.219	0.0269	2.012
1	0.188	0.0553	0.195	0.0274	2.016

Tabla 9.10: Parámetros del ajuste del tamaño de las fluctuaciones a la fórmula (9.54) para elementos diagonales (superíndice α) y elementos no diagonales (superíndice β).

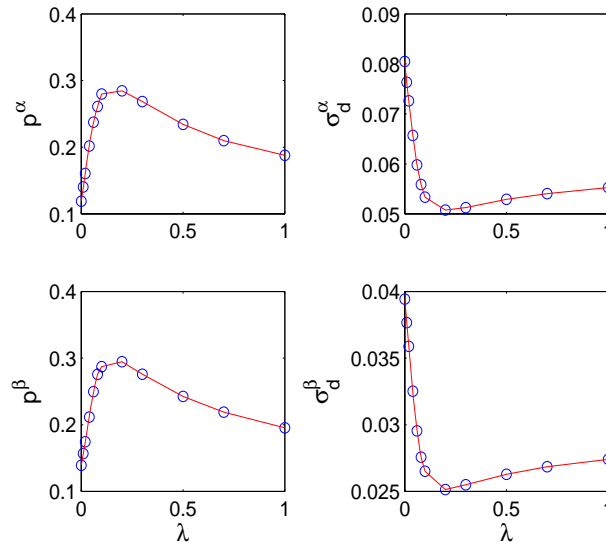


Figura 9.26: Parámetros del ajuste del tamaño de las fluctuaciones a la fórmula (9.54) como función de λ para elementos diagonales (arriba) y elementos no diagonales (abajo).

parámetro en el ajuste de los elementos diagonales y el valor correspondiente para el ajuste de los elementos no diagonales. Como era de esperar, este es en todos los casos muy próximo a 2.

Como se observa en la figura 9.21, en la evolución desde valores altos a valores bajos de λ las curvas $\sigma_\alpha(i)$ y $\sigma_\beta(i)$ tienden a ser cada vez más planas y a tomar valores cada vez mayores. Este comportamiento se manifiesta en los parámetros de ajuste en el crecimiento de σ_d y decrecimiento de p . Esto sucede, como puede verse en la figura 9.26, a partir de $\lambda = 0.2$ hacia $\lambda = 0$. El parámetro p es cada vez más pequeño, indicando que la curva de ajuste es cada vez más plana; y el parámetro σ_d (valor de $\sigma(i)$ en $i = d$) es cada vez mayor, indicando que la curva es cada vez más alta.

Sin embargo, el cambio en los parámetros entre $\lambda = 1$ y $\lambda = 0.2$ es mucho más pequeño. Las curvas que representan la evolución de los parámetros son en esta región prácticamente planas comparadas con la parte de $\lambda \in (0, 0.2)$. Esto es así porque el tamaño de las fluctuaciones en esa región, como señalamos al principio de la sección, no cambia apenas, al igual que sucede con el tipo de estadística espectral. El ligero cambio que se aprecia es debido a un pequeño aumento en la inclinación, que hace que p crezca y σ_d decrezca ligeramente desde $\lambda = 1$ hasta $\lambda = 0.2$.

En la transición con el rango de la interacción, el comportamiento del tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz era muy sencillo, ya que

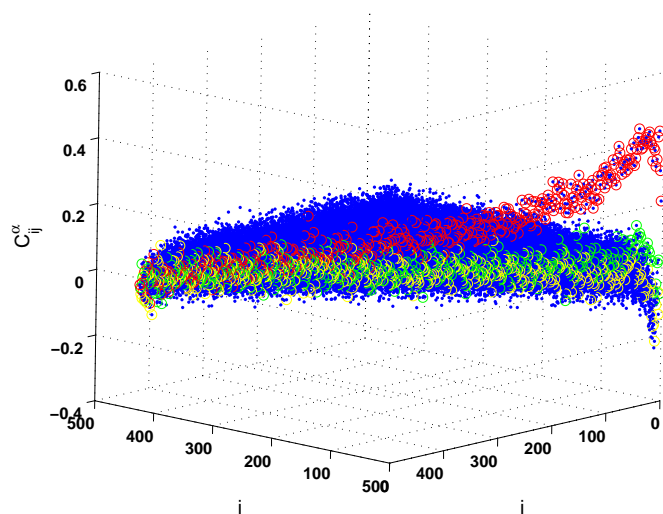


Figura 9.27: Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^{α} correspondiente a la colectividad EGOE(1+2) con $\lambda = 0.5$ en una representación tridimensional: los índices de fila y columna corresponden a los ejes x e y y el valor del elemento se representa en el eje vertical. Aparecen remarcadas en rojo las correlaciones a primeros vecinos, en verde las correlaciones a segundos vecinos y en amarillo las correlaciones a terceros vecinos.

este resultó ser prácticamente constante para todos los elementos y a lo largo de la transición. En este caso, el comportamiento del tamaño de las fluctuaciones es distinto: no es constante para todos los elementos y además hay una evolución de las curvas con la variación del parámetro λ . Pero la forma de estas curvas no es complicada y puede modelarse fácilmente mediante una expresión con dos parámetros libres, con la que quedan muy razonablemente descritas. Además, la evolución de las mismas puede observarse claramente con la representación de estos dos parámetros. Por tanto, tenemos también en este caso una descripción muy completa del tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz que poder introducir en nuestro modelo.

9.3.3. Correlaciones

De manera análoga a como se hizo en la correspondiente sección 9.2.3 en el caso de la evolución con el rango de la interacción, estudiamos aquí las correlaciones que pueden existir entre los elementos de matriz diagonales, α_i , entre los elementos no diagonales, β_i , y las correlaciones cruzadas entre unos y otros mediante la construcción de matrices de correlación.

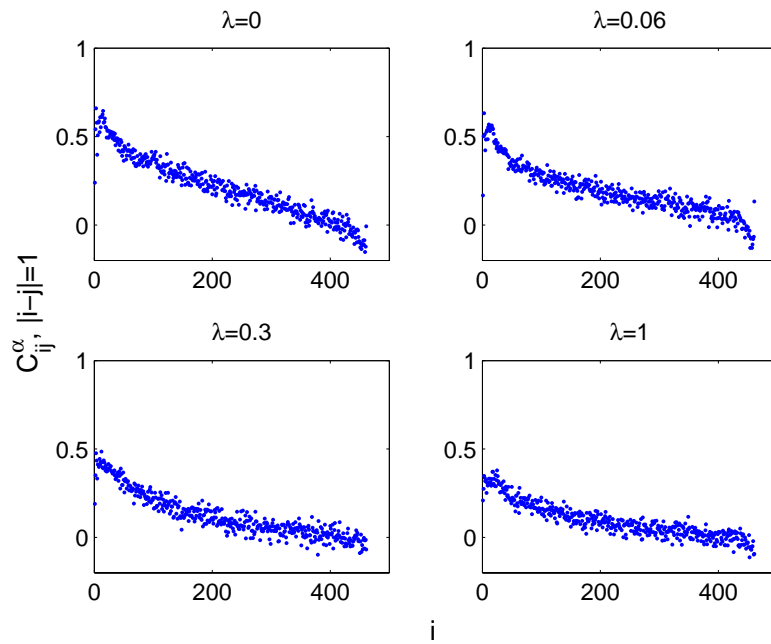
En primer lugar, de nuevo encontramos que no hay correlaciones cruzadas

entre elementos diagonales y no diagonales. Las matrices de correlación cruzada presentan en todos los casos un aspecto plano similar al correspondiente a la matriz GOE, que tomábamos como referencia para la ausencia de correlaciones. Es decir, todos los elementos de las matrices de correlación tienen valores muy pequeños, que deberían ser nulos si la muestra estadística fuese infinita (o en la práctica, tuviese un tamaño muy grande) pero, lógicamente, para una muestra finita queda un pequeño ruido.

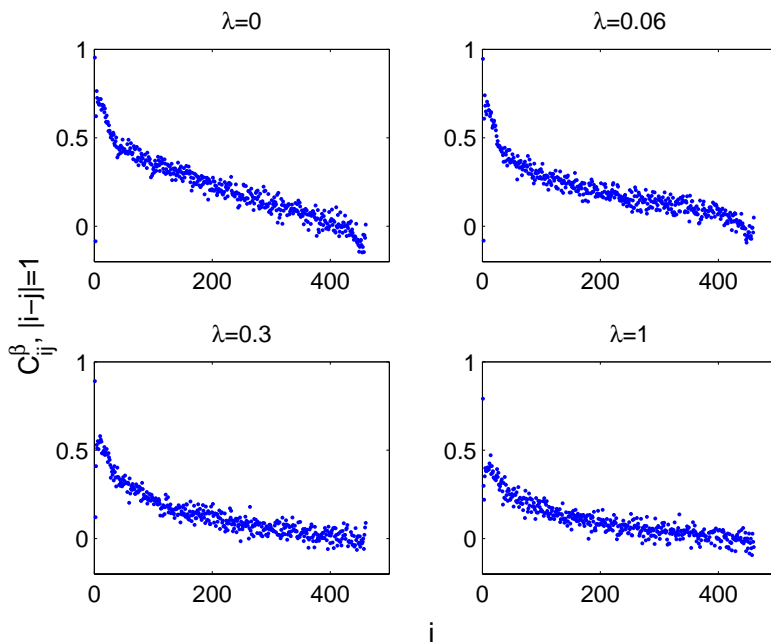
En las matrices de correlación entre elementos del mismo tipo sí se observa una estructura de correlación similar a la del caso EGOE(2) durante toda la transición con λ . En la figura 9.27 se muestra como ejemplo la matriz de correlación entre elementos diagonales, C_{ij}^α , para el caso $\lambda = 0.5$. Pueden verse las correlaciones a primeros vecinos en rojo ($C_{ij}^\alpha, |i - j| = 1$), mayores para los primeros elementos de matriz y cada vez menores según se avanza en los índices i, j . En verde, las correlaciones a segundos vecinos ($C_{ij}^\alpha, |i - j| = 2$) presentan la misma tendencia decreciente con el índice de los elementos, pero son menores que las correlaciones a primeros vecinos. Y así, continúa esta tendencia decreciente en las correlaciones según aumenta la distancia entre vecinos hasta que la matriz de correlación presenta un aspecto plano similar al del caso sin correlaciones.

En el resto de los casos, tanto C_{ij}^α como C_{ij}^β presentan un aspecto muy similar al de la figura 9.27. Las diferencias que pueden observarse están en la forma de las curvas que representan las correlaciones a primeros, segundos, ... vecinos. Por ello, en lugar de representar todas las matrices representaremos sólo algunas de estas curvas. Concretamente, se muestran en la figura 9.28 las curvas de correlaciones a primeros vecinos entre elementos diagonales (arriba) y entre elementos no diagonales (abajo) para distintos valores del parámetro λ .

Puede verse que los elementos de las matrices de correlación decrecen con el índice i , es decir, la correlación es más fuerte entre los primeros elementos y se va perdiendo al avanzar hacia los últimos, y decrecen también al aumentar λ . El comportamiento es similar en ambos casos, C_{ij}^α y C_{ij}^β . Y al igual que ocurría con el tamaño de las fluctuaciones, presenta una suave tendencia decreciente que puede modelarse con distintos tipos de curvas suaves. La discusión sobre este aspecto se deja para la siguiente sección. En ella se construirá un primer modelo de matrices tridiagonales sin correlaciones. En este caso, como ya habíamos comenzado a intuir, este modelo sencillo no reproduce correctamente toda la transición con λ . Por lo tanto, trataremos de perfeccionarlo modelando también las correlaciones que aquí hemos observado. Y entonces discutiremos qué tipo de patrón es más conveniente para completar el modelo.



(a)



(b)

Figura 9.28: Elementos de las matrices de correlación correspondientes a correlaciones a primeros vecinos. Arriba, correlaciones entre elementos diagonales y abajo, correlaciones entre elementos no diagonales, para 4 valores distintos de λ .

λ	ν		ν'	
0	0.047	\pm 0.005	0.551	\pm 0.005
0.01	0.132	\pm 0.002	0.585	\pm 0.004
0.02	0.233	\pm 0.002	0.613	\pm 0.006
0.04	0.459	\pm 0.001	0.684	\pm 0.006
0.06	0.663	\pm 0.001	0.762	\pm 0.008
0.08	0.810	\pm 0.003	0.823	\pm 0.005
0.1	0.885	\pm 0.002	0.867	\pm 0.005
0.2	0.948	\pm 0.004	0.941	\pm 0.004
0.3	0.952	\pm 0.005	0.943	\pm 0.003
0.5	0.951	\pm 0.009	0.951	\pm 0.005
0.7	0.961	\pm 0.003	0.950	\pm 0.006
1	0.957	\pm 0.006	0.951	\pm 0.004

Tabla 9.11: Parámetro de Brody para la distribución de espaciamientos de las colectividades EGOE(1+2) a lo largo de la transición con λ en el hamiltoniano (9.51). La primera columna corresponde a las colectividades originales y la segunda a las construidas con el modelo de variables independientes.

9.3.4. El modelo

En las secciones anteriores se ha tratado de dar una descripción lo más detallada posible de las características de la forma tridiagonal de la colectividad EGOE(1+2) representada por el hamiltoniano (9.51). Ahora es el momento de ver si disponemos de todos los ingredientes necesarios para construir el modelo sencillo de matrices tridiagonales que pretendemos.

Comenzamos, de igual modo que en el caso de las colectividades EGOE(k), por la aproximación más sencilla, que consiste en generar los elementos de matriz como variables aleatorias independientes. Concretamente, como variables gaussianas cuyas medias y varianzas tomaremos como

$$\overline{\alpha_i} = 0, \quad \sigma^\alpha(i) = \sigma_d^\alpha (d/i)^{p^\alpha}, \quad i = 1, 2, \dots, d \quad (9.55)$$

$$\overline{\beta_i} = \sqrt{a \left(1 - \left(\frac{i}{d} \right)^b \frac{\log i}{\log d} \right)}, \quad \sigma^\beta(i) = \sigma_d^\beta (d/i)^{p^\beta}, \quad i = 2, 3, \dots, d. \quad (9.56)$$

Es decir, los elementos diagonales centrados en 0, los no diagonales en la ley que utilizamos para su ajuste y las desviaciones dadas por la fórmula (9.54) que usamos para modelar estas curvas.

Utilizando los parámetros de ajuste obtenidos para cada colectividad (tablas 9.6 y 9.10) construimos nuevas colectividades a partir de este modelo y al realizar el análisis de fluctuaciones espectrales encontramos que no se

reproduce el comportamiento de las colectividades originales a lo largo de toda la evolución con λ .

Por un lado la distribución de espaciamientos a primeros vecinos es tipo GOE en $\lambda = 1$ y el parámetro de Brody va decreciendo al disminuir λ pero no alcanza un valor próximo a 0 en $\lambda = 0$, como debería ocurrir. En la tabla 9.11 se muestran los valores del parámetro de Brody que se obtuvieron para las colectividades originales junto con los que se obtienen para estas nuevas colectividades. Así, ambos pueden compararse para comprobar que la transición en la estadística espectral que tiene lugar en el primer caso no ocurre sin embargo en el caso de este modelo. Además, en la figura 9.29 pueden verse algunas de las distribuciones de espaciamientos obtenidas en varios puntos de la transición y compararse con las de la figura 9.22, donde se representaban las originales.

Por otro lado, respecto a las correlaciones de largo alcance, comparamos la figura 9.23, en la que habíamos representado el espectro de potencias de la δ_n para las colectividades originales con la nueva figura 9.30, en la que podemos observar claramente cómo la transición hacia la estadística de Poisson al disminuir el valor de λ no termina de ocurrir.

Este resultado nos lleva a considerar dos posibilidades: o bien este primer modelo es demasiado sencillo y requiere un poco más de refinamiento, o bien estamos olvidando algún factor relevante en el modelo, como podrían ser las correlaciones, que no se han tenido en cuenta.

Para descartar la primera hipótesis, construimos un nuevo conjunto de colectividades con variables aleatorias gaussianas independientes cuyas medias y desviaciones no vengan dadas por las curvas que hemos creído razonables para modelar las originales sino por las propias medias y desviaciones calculadas a partir de las mismas. Así, tenemos un conjunto de colectividades prácticamente iguales a las originales excepto por las correlaciones, que son inexistentes en este caso. Realizando el correspondiente análisis de fluctuaciones espectrales llegamos a un resultado muy similar al anterior. La evolución de la estadística espectral no se reproduce tampoco con este modelo. E incluso teniendo en cuenta la no ergodicidad, de manera análoga a como se hizo en el caso de las colectividades EGOE(k), tampoco el modelo reproduce la transición.

En este punto debemos ya concluir que ciertamente las correlaciones deben de jugar un papel importante. Por ello, el siguiente paso que nos planteamos es construir un nuevo modelo en el que se introduzca una estructura de correlación semejante a la que hemos observado. Esto es, debemos generar los elementos de matriz como variables aleatorias de manera que exista entre ellas una correlación que disminuya con el índice contador de los elementos y con el orden de próximos vecinos. Además, intentaremos que se reproduzcan las curvas de correlación que representamos en la sección anterior.

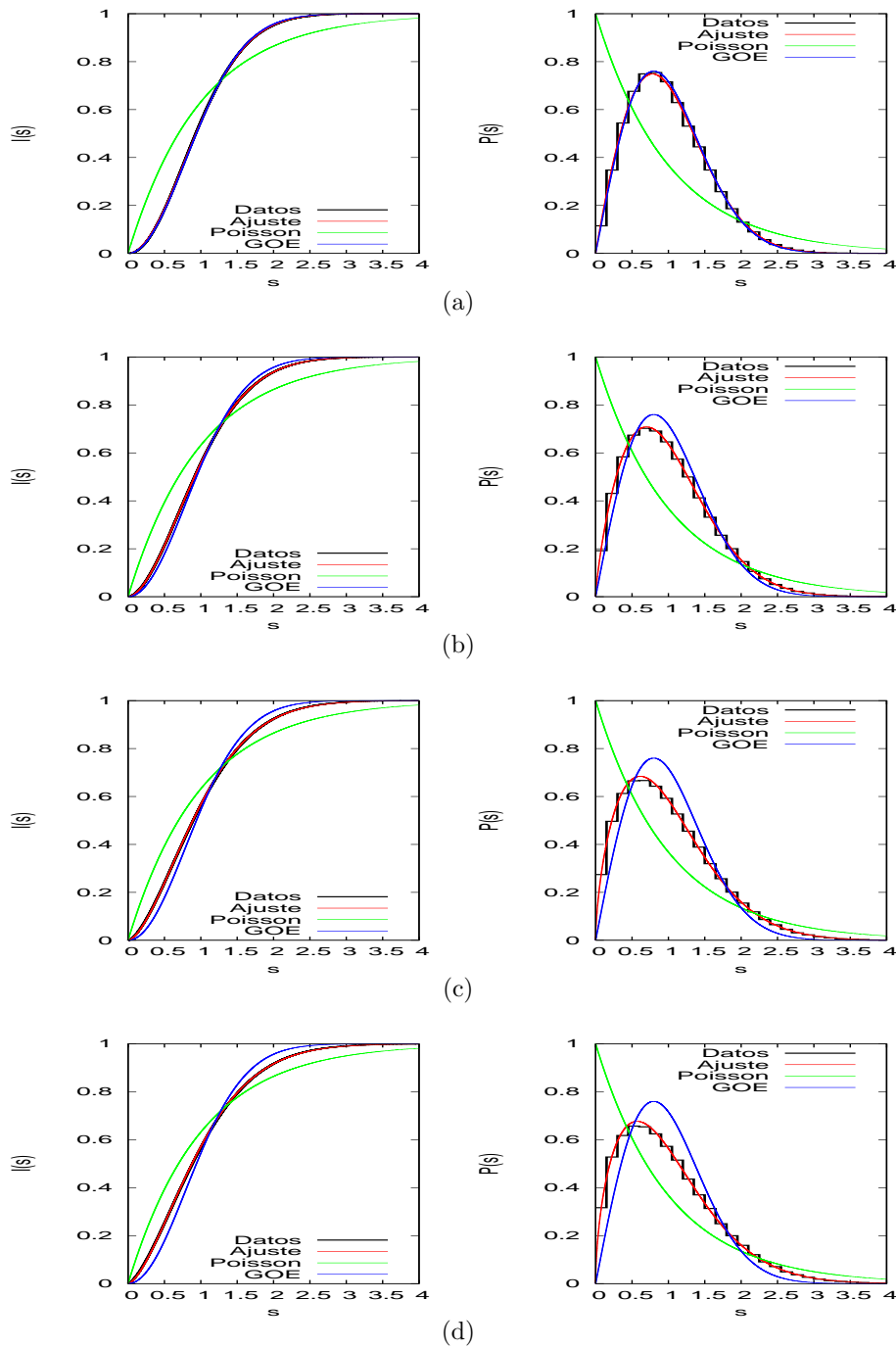


Figura 9.29: Distribución de espacimientos a primeros vecinos de las colectividades EGOE(1+2) construidas a partir del modelo de variables aleatorias independientes para varios valores de λ (de arriba abajo: $\lambda = 1, 0.06, 0.02$ y 0), junto con el ajuste a la función de Brody y las curvas teóricas correspondientes a GOE y Poisson. En el panel de la izquierda la distribución integrada $I(s)$ y en el de la derecha la distribución $P(s)$.

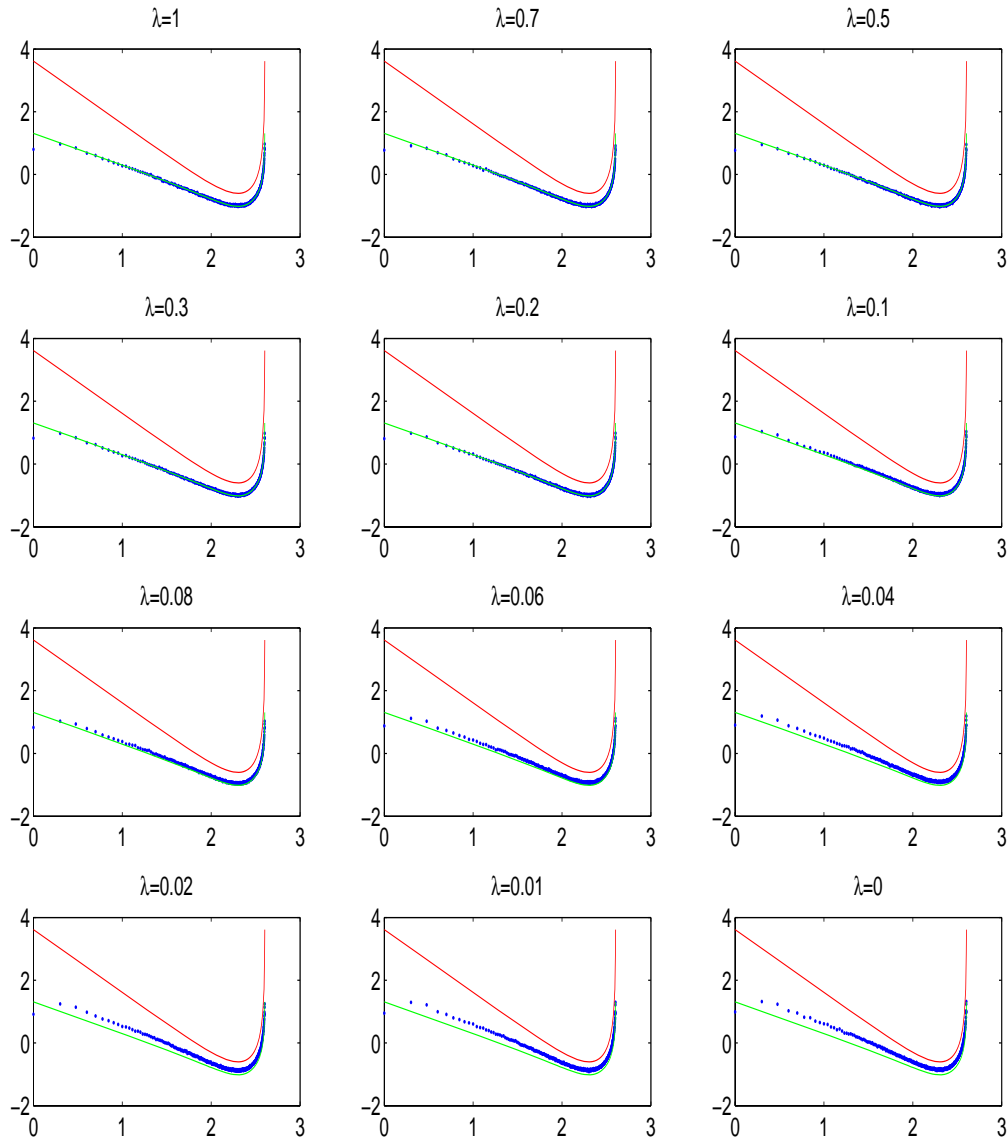


Figura 9.30: Espectro de potencias del estadístico δ_n para las colectividades EGOE(1+2) construidas a partir del modelo de variables aleatorias independientes (puntos), junto con las predicciones teóricas para Poisson (rojo) y GOE (verde).

Proponemos la siguiente fórmula de recurrencia para la generación de las variables aleatorias:

$$x_{i+1} = a(i)x_i + b(i)w_i \quad (9.57)$$

donde $\{x_i\}$ es la secuencia de variables aleatorias que se desea generar, w_i es un ruido gaussiano, que tomaremos con media 0 y varianza 1, y los parámetros $a(i)$ y $b(i)$, que pueden en principio depender de i , se calcularán imponiendo las características que deseamos que cumplan las variables.

Por sencillez, las variables x_i no se asignarán a los elementos de matriz sino a su parte fluctuante. Es decir, cada elemento de matriz en el modelo será la suma de una parte suave, que se establecerá a partir de la información obtenida anteriormente, y una parte fluctuante, que será la variable x_i . Tal como se escribió en las ecuaciones (9.1) y (9.2):

$$\alpha_i = \alpha_i^S + \alpha_i^F \quad (9.58)$$

$$\beta_i = \beta_i^S + \beta_i^F \quad (9.59)$$

donde α_i^F y β_i^F serían las variables generadas según (9.57). Así, tomando la primera variable de la secuencia, x_1 , con media 0, todas las demás tendrán media 0 también:

$$\langle x_{i+1} \rangle = a(i) \langle x_i \rangle + b(i) \langle w_i \rangle, \quad (9.60)$$

como corresponde a la parte fluctuante que representan. Es importante notar que tanto las varianzas como las correlaciones serán las mismas para la secuencia de variables $\{x_i\}$ y la secuencia de elementos de matriz, ya que unas y otros se diferencian sólo en una constante.

Tenemos la siguiente ecuación para las varianzas:

$$\langle x_{i+1}^2 \rangle = a(i)^2 \langle x_i^2 \rangle + b(i)^2 \langle w_i^2 \rangle, \quad (9.61)$$

donde se ha utilizado que el ruido gaussiano es independiente de las demás variables. Y las siguientes ecuaciones para correlaciones a próximos vecinos:

$$\langle x_i x_{i+1} \rangle = a(i) \langle x_i^2 \rangle \quad (9.62)$$

para las correlaciones a primeros vecinos y

$$\langle x_i x_{i+k} \rangle = a(i)a(i+1) \cdots a(i+k-1) \langle x_i^2 \rangle \quad (9.63)$$

para correlaciones a k -ésimos vecinos en general.

Los elementos de matriz de correlación a primeros vecinos, tal como se han definido, son en este modelo

$$C_{i,i+1} = \frac{\langle x_i x_{i+1} \rangle}{\sigma_i \sigma_{i+1}} = \frac{a(i) \langle x_i^2 \rangle}{\sigma_i \sigma_{i+1}} = \frac{a(i) \sigma_i}{\sigma_{i+1}} \quad (9.64)$$

Así, el parámetro $a(i)$ resulta ser la siguiente función del índice i :

$$a(i) = C_{i,i+1} \frac{\sigma_{i+1}}{\sigma_i}. \quad (9.65)$$

Y para determinar el parámetro b utilizamos

$$\langle x_{i+1}^2 \rangle = \sigma_{i+1}^2 = a(i)^2 \langle x_i^2 \rangle + b(i)^2 \langle w_i^2 \rangle = a(i)^2 \sigma_i^2 + b(i)^2, \quad (9.66)$$

de donde podemos deducir, sustituyendo la expresión obtenida para $a(i)$, que

$$b(i) = \sigma_{i+1} \sqrt{1 - C_{i,i+1}^2}, \quad (9.67)$$

bien definido ya que $C_{i,i+1} < 1$.

Para los elementos de matriz de correlación a k -ésimos vecinos se tiene

$$C_{i,i+k} = \frac{\langle x_i x_{i+k} \rangle}{\sigma_i \sigma_{i+k}} = \frac{a(i) a(i+1) \cdots a(i+k-1) \langle x_i^2 \rangle}{\sigma_i \sigma_{i+k}} = \frac{\prod_{j=i}^{i+k-1} a(j) \sigma_j}{\sigma_{i+k}}. \quad (9.68)$$

De la expresión (9.65) se puede deducir que $a(i) < 1$, puesto que los elementos de las matrices de correlación, en particular $C_{i,i+1}$, cumplen $C_{ij} < 1$ y las σ son del mismo orden, de modo que $\sigma_{i+1}/\sigma_i \simeq 1$. Por tanto, las correlaciones a k -ésimos vecinos decrecen con el orden k , reproduciendo la tendencia que habíamos observado.

Particularizando para el caso en que las varianzas vienen dadas por la fórmula que habíamos utilizado para modelarlas, $\sigma(i) = \sigma_d (d/i)^p$, se tiene para las funciones $a(i)$ y $b(i)$

$$a(i) = C_{i,i+1} \left(\frac{i+1}{i} \right)^p \quad (9.69)$$

$$b(i) = \sigma_d (d/(i+1))^p \sqrt{1 - C_{i,i+1}^2}. \quad (9.70)$$

Se trata ahora de elegir una función adecuada para describir las correlaciones a primeros vecinos, $C_{i,i+1}$, y así determinar las funciones $a(i)$ y $b(i)$ para introducir las en la fórmula de recurrencia. Debe tratarse de una función decreciente con i , ya que habíamos observado una tendencia decreciente con el índice contador de los elementos.

La función más sencilla que podemos utilizar para modelar las curvas de la figura 9.28 es una recta. Así pues, aunque un poco burda, probamos en primer lugar con esta aproximación, utilizando en cada caso la recta que mejor se ajuste a cada curva. Construimos de nuevo todas las colectividades para los distintos valores de λ y realizamos el análisis de fluctuaciones. El resultado obtenido en este caso es nuevamente negativo: tampoco con este modelo conseguimos reproducir la transición en la estadística espectral que se observa

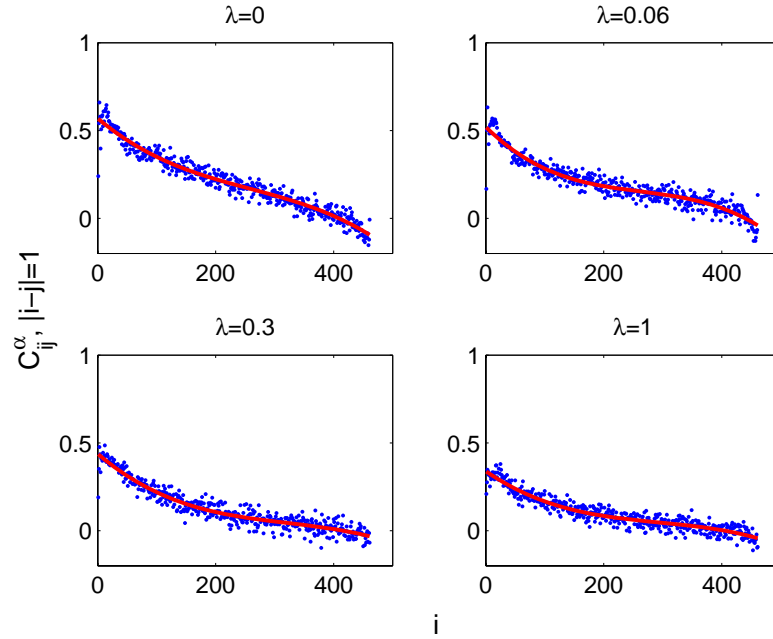


Figura 9.31: Elementos de las matrices de correlación correspondientes a correlaciones a primeros vecinos entre elementos diagonales para 4 valores distintos de λ .

con las colectividades originales. De hecho, con este modelo el resultado es sorprendentemente prácticamente idéntico al del modelo sin correlaciones.

Aún podemos afinar un poco más el modelo utilizando curvas para $C_{i,i+1}$ más parecidas a las originales. Así pues, ajustamos estas correlaciones con polinomios de grado 3, que son ya bastante realistas, a diferencia de las rectas. Como ejemplo, se muestran en la figura 9.31 los ajustes de $C_{i,i+1}^\alpha$ para los mismos valores de λ que se representaron en la figura 9.28 y la representación tridimensional de la matriz de correlación completa C_{ij}^α en el caso $\lambda = 0.5$ en la figura 9.32, que puede compararse con la matriz original de la figura 9.27. Sin embargo, tras el análisis espectral de las colectividades en este modelo volvemos a encontrar que no hay mejoras apreciables en la reproducción de los datos originales. Además, utilizando distintas combinaciones de modelos de varianzas y correlaciones de diversos tipos continuamos observando una y otra vez el mismo resultado. Y tampoco ocurre nada si se introduce la no ergodicidad. Incluso tomando como varianzas y correlaciones las calculadas a partir de las colectividades originales, no se observa ningún cambio respecto a los resultados del primer modelo más sencillo. En la figura 9.33 se muestra como ejemplo, el espectro de potencias de la δ_n a lo largo de la transición con λ en uno de estos modelos, concretamente con las varianzas dadas por

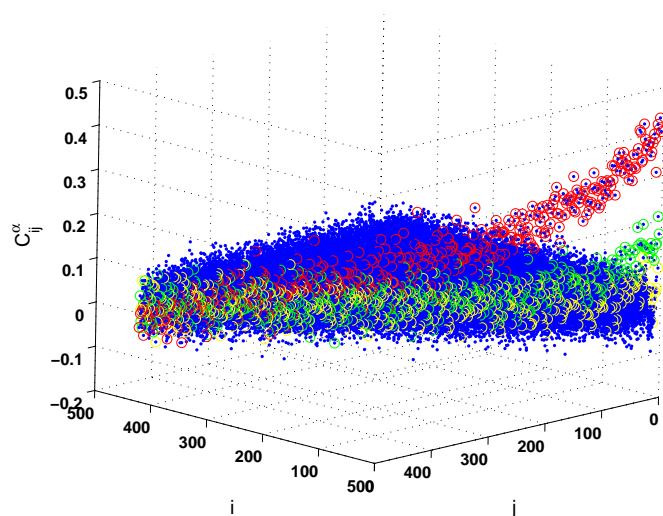


Figura 9.32: Elementos de la matriz de correlación C_{ij}^α correspondiente a la colectividad EGOE(1+2) con $\lambda = 0.5$ construida a partir del modelo de variables aleatorias correlacionadas en una representación tridimensional: los índices de fila y columna corresponden a los ejes x e y y el valor del elemento se representa en el eje vertical. Aparecen remarcadas en rojo las correlaciones a primeros vecinos, en verde las correlaciones a segundos vecinos y en amarillo las correlaciones a terceros vecinos.

el ajuste a $\sigma(i) = \sigma_d(d/i)^p$ y las correlaciones a primeros vecinos modeladas por polinomios de grado 3.

Debemos ya concluir definitivamente que existe algún factor en las colectividades originales, cuyas características hemos tratado de describir de la forma más detallada posible, que tratamos de forma incorrecta en nuestro modelo. Comprobado que nuestro modelo reproduce con buena precisión las medias, varianzas y correlaciones a los primeros órdenes de próximos vecinos en los elementos de matriz, sólo queda considerar las siguientes posibilidades: (i) los elementos de matriz $C_{i,i+k}$, con k cualquier natural, son incorrectos en el modelo a pesar de que los elementos $C_{i,i+1}$ sean razonablemente correctos; (ii) las correlaciones a k puntos ($k > 2$) no son correctamente descritas por el modelo.

Es decir, en la representación de las matrices de correlación C_{ij} veíamos que existe una fuerte correlación a primeros vecinos, e imponiendo en nuestro modelo que se reprodujeran estos elementos ($C_{i,i+1}$) obteníamos una matriz de correlación que parecía reproducir bastante bien la original: las correlaciones decrecen con el índice contador de los elementos y con el orden de próximos vecinos; además, al aumentar este orden la matriz iba tomando un

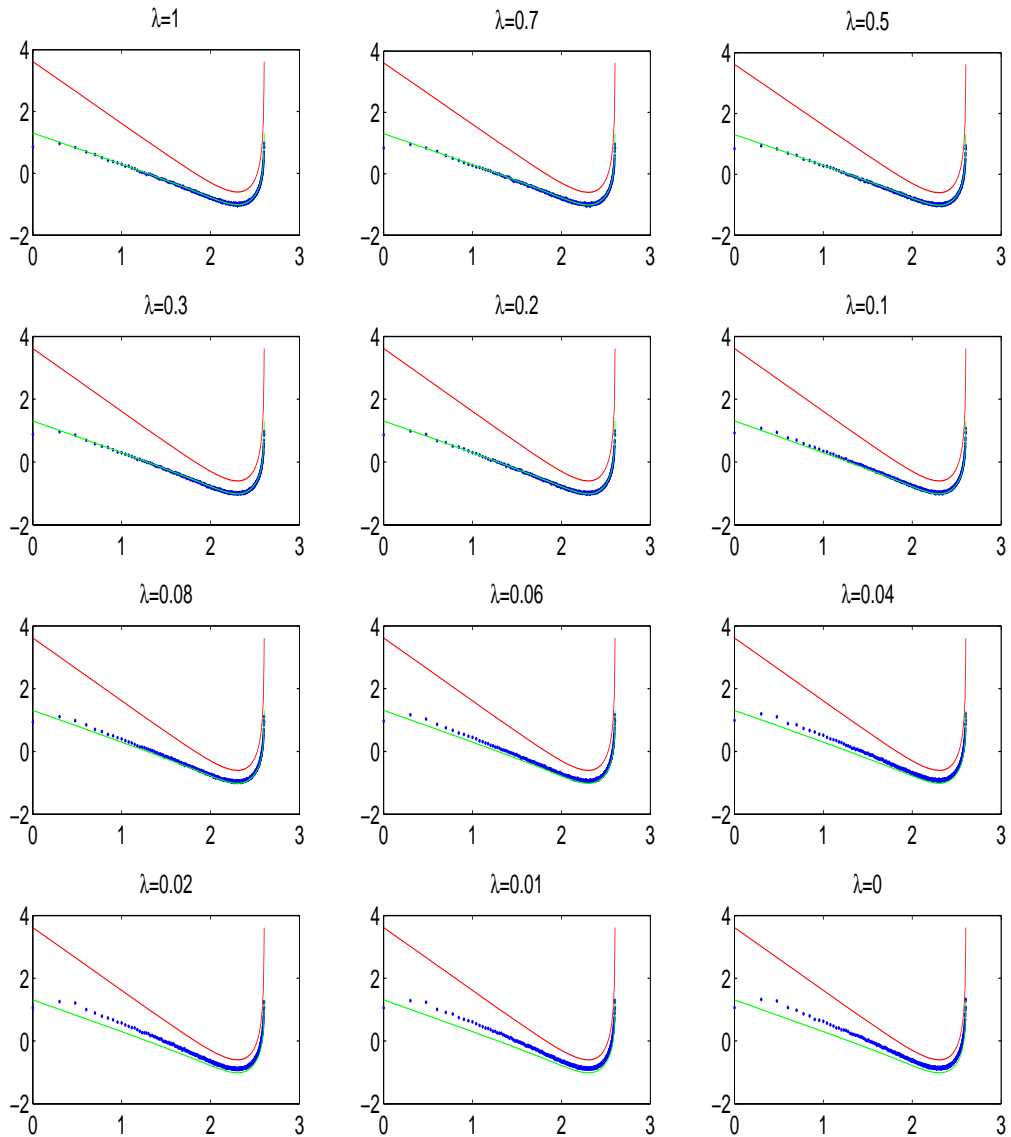


Figura 9.33: Espectro de potencias del estadístico δ_n para las colectividades EGOE(1+2) construidas a partir del modelo de variables aleatorias correlacionadas (puntos), junto con las predicciones teóricas para Poisson (rojo) y GOE (verde).

aspecto plano similar al del caso sin correlaciones, lo que nos hacía considerar la posibilidad de que la mayor parte de la matriz fuera simplemente ruido. Sin embargo, el modelo presenta correlaciones a todos los órdenes de próximos vecinos ($C_{i,i+k} = \prod_{j=i}^{i+k-1} a(j)\sigma_i/\sigma_{i+k}$) y, aunque estas decrecen rápidamente, haciendo tomar a la matriz el aspecto plano observado, cabe preguntarse si esta estructura de correlación realmente coincide con la original.

Por otra parte, además de las correlaciones a 2 puntos ($\langle x_i x_j \rangle$) que se han calculado, pueden considerarse correlaciones a k puntos ($\langle x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_k} \rangle$) y quizá nuestro modelo tampoco las reproduzca todas correctamente. Se trate de cualquiera de los dos casos ((i) o (ii)) o de ambos, es claro que el error debe estar en la ley (9.57) que se ha propuesto para introducir las correlaciones entre los elementos de matriz.

Por último, volviendo un momento al trabajo de Molina *et al.*, debemos señalar que el método utilizado en él para cambiar el tipo de estadística espectral puede aplicarse también en nuestro caso con resultados análogos. Es decir, partiendo de la colectividad para $\lambda = 1$, cuya estadística espectral es tipo GOE, conseguimos acercarnos mucho más a la estadística de Poisson multiplicando por factores, $F > 1$, el tamaño de las fluctuaciones que con cualquiera de los modelos utilizados.

Sin embargo, nuestros resultados sirven para comprobar que la pretendida universalidad de la relación entre el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz y la estadística espectral a través del parámetro de Brody que se presenta en dicho trabajo, $F^2 = 1/\nu$, no es tal. En la transición que se ha descrito aquí se llega a una estadística tipo Poisson desde una tipo GOE y la relación entre los tamaños de las fluctuaciones de los elementos de matriz entre un caso y otro es muy distinta a la que viene dada por la expresión anterior.

Por tanto, un modelo general de colectividades tridiagonales para describir transiciones entre distintos tipos de estadística espectral no puede ser tan sencillo como el que se describe en (MOLINA *et al.*, 2005), en el que bastan únicamente dos elementos (parte suave y fluctuaciones en los elementos de las matrices tridiagonales) para reproducir distintas transiciones. Dicho modelo es válido por ejemplo para las colectividades clásicas, ya que constituye, de hecho, una buena aproximación del resultado analítico conocido que se describió en la sección 8.3 (DUMITRIU and EDELMAN, 2002). Pero no es un modelo general capaz de describir todo tipo de transiciones, como hemos podido comprobar con nuestros cálculos.

Capítulo 10

Conclusiones de la Parte II

Esta Parte II se ha centrado en el estudio de sistemas de partículas idénticas en interacción. El hamiltoniano para describir tales sistemas contiene una parte a un cuerpo (término sin interacción que afecta a cada partícula individualmente) y una interacción a dos cuerpos. En el contexto del caos cuántico, las colectividades de matrices aleatorias más adecuadas para modelar este tipo de sistemas son las colectividades embebidas. Sin embargo, el manejo de estas colectividades se vuelve bastante más complicado tanto analítica como numéricamente respecto al de las colectividades clásicas. Es por ello por lo que nos planteamos la posibilidad de construir una representación más sencilla de estas colectividades.

Concretamente, nos hemos propuesto la construcción de un modelo de colectividades en forma tridiagonal. Para ello hemos estudiado las características de la forma tridiagonal de diferentes colectividades con objeto de obtener una descripción lo más detallada posible, que nos permita disponer de todos los ingredientes necesarios para la construcción de unas colectividades tridiagonales que reproduzcan correctamente las propiedades de la estadística espectral de las colectividades originales.

Nos basamos en diversos trabajos anteriores. Por un lado, en los trabajos de Dumitriu *et al.* se describe un modelo de colectividades tridiagonales que representa las colectividades clásicas. En este caso las propiedades de las colectividades facilitan la deducción analítica de la forma tridiagonal de las mismas. Además, se realiza una generalización para valores reales cualesquiera de la repulsión de niveles, de manera que aparte de las tres colectividades clásicas ($\nu = 1, 2, 4$) puede hablarse de un conjunto continuo de colectividades.

Por otro lado, los trabajos de Zuker *et al.*, muestran numéricamente cómo los elementos de las matrices hamiltonianas en forma tridiagonal pueden separarse en una parte suave y unas fluctuaciones y establecen la existencia de una estrecha relación entre la forma de la curva que representa la parte

suave de los elementos y la densidad de estados y entre las fluctuaciones en los elementos y la estadística de las fluctuaciones espectrales. Concretamente se señala que la parte suave de los elementos coincide, salvo factores de escala, con la inversa de la densidad de estados y se propone una ley que relaciona el tamaño de las fluctuaciones en los elementos (caracterizado por un factor multiplicativo) con el parámetro de repulsión. De hecho, puede comprobarse que esta última relación es correcta en el límite asintótico de dimensiones grandes en el conjunto continuo de colectividades de Dumitriu *et al.*

Sin embargo, analizando en detalle el caso de las colectividades embebidas hemos llegado a varias conclusiones importantes. En primer lugar, hemos podido comprobar que la relación entre la forma de la parte suave de los elementos de matriz y la inversa de la densidad de estados no es en general un simple cambio de escala. Esto sí ocurre, por ejemplo, en el caso de una densidad gaussiana, en que, ajustando previamente los dominios de ambas funciones, estas se relacionan mediante un factor 2. Pero no sucede lo mismo ni para la densidad semicircular de las colectividades clásicas ni para las demás densidades intermedias que aparecen en el resto de colectividades embebidas que se han tratado. Lo que sí es cierto es que existe una clara relación entre las dos curvas, que puede intuirse a simple vista y que da lugar a una dependencia entre los parámetros que definen una y otra curva.

Con el fin de establecer esta dependencia hemos propuesto una función analítica con dos parámetros libres, uno de los cuales se relaciona con la anchura de la densidad de estados y el otro con la forma de la curva. Es decir, la variación de este último permite describir distintos tipos de densidades, como semicircular, gaussiana, binomial e interpolaciones entre ellas, proporcionando excelentes ajustes en todos los casos. Esta es la principal ventaja que presenta la forma funcional propuesta: su versatilidad. Gracias a ella se ha caracterizado la relación entre la parte suave de los elementos de matriz y la densidad inversa como función de dos parámetros a lo largo de las distintas transiciones estudiadas, sin necesidad de utilizar diferentes funciones para cada tipo de densidad, como se proponía en trabajos anteriores.

En segundo lugar, otra conclusión importante de este trabajo es que la transición Poisson-GOE de la estadística espectral desde el punto de vista de las colectividades tridiagonales no depende sólo del comportamiento de la parte suave y las fluctuaciones de los elementos de matriz, como se ha sugerido previamente. Esto es, la transición propuesta por Zuker *et al.* no es universal, sino que es un caso particular. Otro ejemplo de este tipo de transición es la observada en la colectividad gaussiana continua de Dumitriu *et al.*, que puede también considerarse que depende solamente de parte suave y fluctuaciones en el límite de dimensiones grandes.

En el caso de las colectividades embebidas hemos comprobado que puede producirse una transición desde una estadística espectral tipo GOE hasta

una tipo Poisson en la que el tamaño de las fluctuaciones en los elementos de matriz crece a un ritmo mucho menor que el indicado por la ley propuesta por Zuker *et al.*. Por tanto, concluimos que debe existir algún otro factor que haga que la transición tenga lugar en este caso. Y este factor, según hemos comprobado, son las correlaciones que existen entre los elementos de la matriz tridiagonal.

Así pues, hemos construido un modelo de colectividades embebidas tridiagonales a partir del análisis obtenido de parte suave, fluctuaciones y correlaciones de las mismas en el que se reproducen fielmente la forma de los elementos de matriz en cuanto a la parte suave y las fluctuaciones se refiere. En cuanto a las correlaciones hemos propuesto un modelo simple que reproduce las correspondientes a los primeros órdenes de próximos vecinos. El resto de la matriz de correlación presenta un aspecto plano similar al del caso sin correlaciones que, por tanto, descartábamos como ruido, al igual que sucedía en las colectividades originales. Sin embargo, el análisis de las fluctuaciones espectrales muestra que no se logra completar la transición Poisson-GOE en el modelo. Y esto es así incluso si se refina la descripción de las correlaciones a primeros vecinos.

Dado que el tratamiento de los dos primeros ingredientes del modelo, parte suave y fluctuaciones, es correcto, debemos concluir que las correlaciones entre elementos de matriz constituyen el problema. Puede ocurrir que:

- Las correlaciones a los primeros órdenes de próximos vecinos no sean la parte más significativa de las matrices de correlación ρ , en todo caso, no constituyan suficientes datos a la hora de reproducir los originales. Y que, por tanto, el resto de la matriz de correlación, es decir, la nube de puntos que habíamos considerado desde un principio como ruido sin ningún tipo de estructura, tenga en realidad más relevancia de la que habíamos supuesto y esconda ciertamente una estructura de correlación que sea importante tener en cuenta a la hora de construir el modelo. De hecho, las correlaciones a cualquier orden de próximos vecinos, aunque pequeñas, tienen una cierta estructura en nuestro modelo y, por tanto, si esta no coincide con la estructura original puede que este sea el origen del problema.
- Las correlaciones a dos puntos, que son las que se han estudiado, sean correctas pero las correlaciones a k puntos en general no.

Es decir, el modelo propuesto para la generación de los elementos de matriz como variables aleatorias correlacionadas sería incorrecto. Por tanto, queda como proyecto futuro un análisis más detallado de las matrices de correlación, aumentando la estadística (número de realizaciones o miembros por colectividad) para reducir el ruido y así poder observar claramente cómo

es toda la estructura de correlación, tanto de la matriz de correlación a dos puntos como las correlaciones a k puntos en general.

En resumen, hemos tratado de facilitar el manejo de las colectividades embebidas mediante la construcción de un modelo más sencillo de colectividades tridiagonales. Apoyándonos en ideas de trabajos anteriores, hemos dado algunos pasos en la dirección del objetivo propuesto, tales como la caracterización de la relación entre la parte suave de los elementos de matriz y la inversa de la densidad de estados, el análisis de la influencia de dicha parte suave y de las fluctuaciones en las transiciones entre distintos tipos de estadística espectral y, sobre todo, la influencia decisiva en estas transiciones de las correlaciones entre los elementos de matriz. A pesar de todo ello, el modelo propuesto no es lo suficientemente completo como para ser capaz de reproducir las transiciones observadas y, por tanto, al término de la presentación de este trabajo el proyecto de simplificación de las colectividades de matrices aleatorias aquí tratadas continúa siendo un problema abierto.

Apéndice A

Teoría de matrices aleatorias

En este apéndice describimos los conceptos y expresiones básicas utilizados en la teoría de matrices aleatorias, sin entrar demasiado en los detalles de los cálculos matemáticos, que pueden encontrarse en el libro de Stöckmann (STÖCKMANN, 1999).

A.1. Matrices aleatorias gaussianas

Los elementos de una matriz perteneciente a una de las colectividades gaussianas se eligen aleatoriamente. Pero no se tiene completa libertad a la hora de fijarlos, ya que deben respetar las simetrías propias de su colectividad. En la colectividad GOE, por ejemplo, las matrices son reales y simétricas, invariantes bajo transformaciones ortogonales. Por tanto, si la matriz es de dimensión m se tienen $m(m+1)/2$ elementos de matriz independientes.

Vamos a obtener la distribución de probabilidad de los elementos de matriz, que nos permitirá saber la manera de generar una de estas matrices. Describimos el cálculo para el caso concreto del GOE.

La distribución de probabilidad $p(H_{11}, \dots, H_{mm})$ de los elementos de matriz no debe depender de la base a la que se aplica. Por tanto,

$$p(H_{11}, \dots, H_{mm}) = p(H'_{11}, \dots, H'_{mm}). \quad (\text{A.1})$$

H' se obtiene a partir de H mediante una transformación ortogonal ($H' = OHO^T$, $OO^T = 1$). La relación (A.1) implica que la función $p(H_{11}, \dots, H_{mm})$ sólo puede depender de trazas de potencias de H . Además, suponemos que los elementos de matriz no están correlacionados:

$$p(H_{11}, \dots, H_{mm}) = p(H_{11})p(H_{12}) \cdots p(H_{mm}). \quad (\text{A.2})$$

La única forma funcional que obedece ambas condiciones (A.1) y (A.2) es la siguiente:

$$p(H_{11}, \dots, H_{mm}) = C \exp[-BTr(H) - ATr(H^2)]. \quad (\text{A.3})$$

Podemos tomar $B = 0$ sin pérdida de generalidad (siempre podemos desplazar la energía media, $Tr(H)/m$, al cero). La constante C se fija utilizando la condición de normalización

$$\int p(H_{11}, \dots, H_{mm}) dH_{11} \dots dH_{mm} = 1. \quad (\text{A.4})$$

La expresión que se obtiene para la distribución de probabilidad es

$$p(H_{11}, \dots, H_{mm}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{m/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{m(m-1)/4} \exp \left[-A \sum_{i,j} H_{ij}^2 \right] \quad (\text{A.5})$$

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

$$\langle H_{ii}^2 \rangle = \frac{1}{2A}, \quad \langle H_{ij}^2 \rangle = \frac{1}{4A}. \quad (\text{A.6})$$

Análogamente se obtienen las distribuciones para las colectividades GUE y GSE, imponiendo que éstas sean invariantes bajo transformaciones unitarias y simplécticas respectivamente. Las expresiones que se obtienen son:

$$p(H_{11}, \dots, H_{mm}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{m/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{m(m-1)/2} \exp \left\{ -A \sum_{i,j} [(H_R)_{ij}^2 + (H_I)_{ij}^2] \right\}, \quad (\text{A.7})$$

para el GUE, donde $(H_R)_{ij}$ y $(H_I)_{ij}$ son las partes real e imaginaria, respectivamente, de H_{ij} ; y

$$p(H_{11}, \dots, H_{mm}) = \left(\frac{A}{\pi}\right)^{m/2} \left(\frac{2A}{\pi}\right)^{2m(m-1)} \exp \left\{ -A \sum_{i,j} [(H_0)_{ij}^2 + (H_x)_{ij}^2 + (H_y)_{ij}^2 + (H_z)_{ij}^2] \right\}, \quad (\text{A.8})$$

para el GSE, donde $(H_0)_{ij}$, $(H_x)_{ij}$, $(H_y)_{ij}$ y $(H_z)_{ij}$ son las componentes cuaterniónicas de H_{ij} .

A.2. Distribuciones de autovalores

La distribución de probabilidad de los elementos de matriz no permite una comparación directa con los datos experimentales, ya que normalmente lo único que se conoce son los autovalores, el espectro de energía. Así que tiene más interés práctico la distribución de autovalores. Esta última se calcula a

partir de la primera y las expresiones obtenidas para cada una de las tres colectividades pueden incluirse en una sola:

$$P(E_1, \dots, E_m) \propto \prod_{i < j} |E_i - E_j|^\nu \exp \left(-A \sum_i E_i^2 \right), \quad (\text{A.9})$$

donde ν es el índice de universalidad. Toma los valores 1, 2 y 4 para GOE, GUE y GSE, respectivamente. En esta expresión se observa la repulsión de niveles de la que se hablaba en la sección 3.2.2: la probabilidad de que dos autovalores tomen el mismo valor es nula. Es decir, los autovalores están correlacionados, no puede generarse cada uno mediante una variable aleatoria independiente. Para $\nu = 0$ tenemos el caso de autovalores descorrelacionados.

A.3. Densidad media de estados

La densidad de estados de un sistema cuántico se define como

$$g(E) = \sum_i \delta(E - E_i). \quad (\text{A.10})$$

En el caso de las colectividades gaussianas no estamos interesados en la densidad de estados de una sola matriz sino en el promedio sobre toda la colectividad. Es decir, si generamos un conjunto de matrices pertenecientes a una colectividad obtendremos a partir de ellas un conjunto de espectros distintos cuyos niveles de energía seguirán la distribución de probabilidad de la sección anterior para la colectividad correspondiente. Por tanto, el conjunto de densidades de estados que obtendremos a partir de los espectros serán también distintas pero la media de todas ellas será característica de la colectividad.

Wigner (WIGNER, 1955a) derivó la densidad media de estados para las colectividades gaussianas y obtuvo la que se llama la ley del semicírculo de Wigner:

$$\langle g_\nu(E) \rangle = \begin{cases} \frac{2A}{\pi\nu} \sqrt{\frac{\nu m}{A} - E^2} & |E| < \sqrt{\frac{\nu m}{A}} \\ 0 & |E| > \sqrt{\frac{\nu m}{A}} \end{cases}. \quad (\text{A.11})$$

En la figura A.1 se muestra un ejemplo numérico obtenido a partir de 100 matrices aleatorias de la colectividad GOE de dimensión 1600.

A.4. Funciones de correlación a k puntos

Algunos de los estadísticos más importantes que miden las correlaciones de largo alcance dependen de la función de correlación a dos puntos. Esta es la

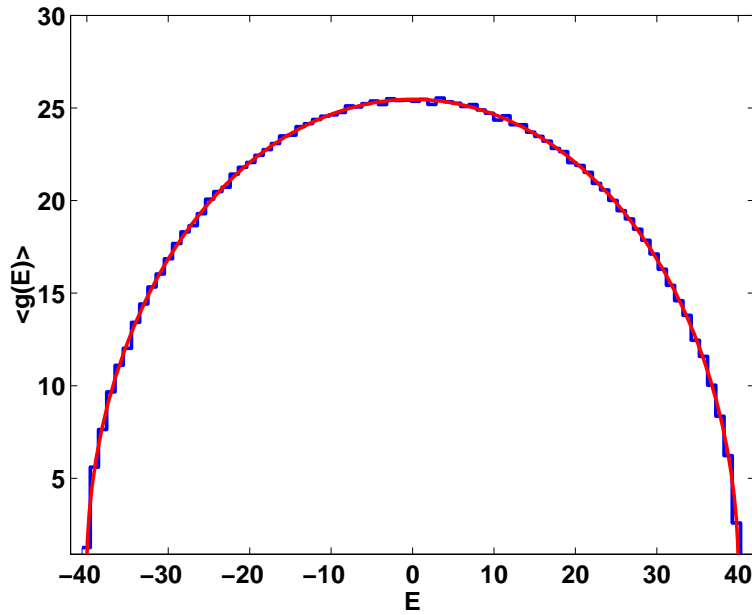


Figura A.1: Densidad media de estados obtenida a partir de 100 matrices aleatorias tipo GOE de dimensión 1600 (azul) y curva teórica (rojo).

densidad de probabilidad de encontrar dos autovalores ε_1 y ε_2 a dos energías dadas, independientemente de la posición del resto de los autovalores. La función más general de correlación a k puntos se define como

$$R_k(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k) = \frac{m!}{(m-k)!} \int P(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m) d\varepsilon_{k+1} \dots d\varepsilon_m, \quad (\text{A.12})$$

donde el factor que precede a la integral es para tener en cuenta todas las posibles formas de escoger k autovalores de entre un total de m .

El cálculo de las funciones de correlación a dos puntos para las colectividades GOE, GUE y GSE puede encontrarse en el libro de Mehta (MEHTA, 1991). El resultado para los casos del GOE y el GUE es el siguiente:

$$Y_2(\varepsilon) = \left(\frac{\text{sen} \pi \varepsilon}{\pi \varepsilon} \right)^2 \quad (\text{GUE}) \quad (\text{A.13})$$

$$Y_2(\varepsilon) = \left(\frac{\text{sen} \pi \varepsilon}{\pi \varepsilon} \right)^2 - \text{si}(\pi \varepsilon) \left(\frac{\cos \pi \varepsilon}{\pi \varepsilon} - \frac{\text{sen} \pi \varepsilon}{(\pi \varepsilon)^2} \right) \quad (\text{GOE}), \quad (\text{A.14})$$

donde $Y_2(\varepsilon)$ es una función equivalente a la función de correlación a dos puntos, que se usa a menudo y se denomina función de agrupamiento:

$$Y_2(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = R_1(\varepsilon_1)R_1(\varepsilon_2) - R_2(\varepsilon_1, \varepsilon_2). \quad (\text{A.15})$$

En realidad Y_2 y R_2 no dependen de dos variables, ε_1 y ε_2 , sino sólo de una, su diferencia: $\varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_2$, que es la que aparece en las ecuaciones (A.13) y (A.14).

La función de correlación a un punto, $R_1(\varepsilon)$, da la probabilidad de encontrar un autovalor a la energía ε . Es decir, es idéntica a la densidad media de estados, $\langle \rho(\varepsilon) \rangle$, que en los espectros reescalados es igual a 1. Por tanto, la ecuación (A.15), puede también escribirse como

$$Y_2(\varepsilon) = 1 - R_2(\varepsilon). \quad (\text{A.16})$$

La función de correlación a dos puntos refleja la repulsión de niveles. De las expresiones (A.13) y (A.14) puede deducirse que

$$R_2(\varepsilon) \sim \begin{cases} \varepsilon & \text{GOE,} \\ \varepsilon^2 & \text{GUE.} \end{cases} \quad (\text{A.17})$$

Por tanto, $R_2(0) = 0$. Es decir, que la probabilidad de encontrar dos autovalores con la misma energía es nula, como corresponde a los sistemas con repulsión de niveles. En cambio, para energías muy grandes R_2 se va aproximando a 1. Es decir, que la probabilidad de encontrar dos autovalores muy separados es muy grande, ya que cuanto más separados estén más débiles serán las correlaciones. En el caso de niveles descorrelacionados la función de correlación a dos puntos es $R_2(\varepsilon) = 1$.

Como se ha señalado al principio de la sección, algunos de los estadísticos que miden las correlaciones de largo alcance dependen de la función de correlación a dos puntos. Por ejemplo, la $\Delta_3(L)$, que es el utilizado en este trabajo y se describe en la sección 3.3.1, puede escribirse en función de $R_2(\varepsilon)$ así:

$$\langle \Delta_3(L) \rangle = \frac{L}{15} - \frac{1}{15L^4} \int_0^L (L - \varepsilon)^3 (2L^2 - 9L\varepsilon - 3\varepsilon^2) Y_2(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (\text{A.18})$$

A partir de esta ecuación es fácil calcular la expresión dada en 3.3.1 para la $\langle \Delta_3(L) \rangle$ de los sistemas integrables: si $R_2(\varepsilon) = 1$ entonces $Y_2(\varepsilon) = 0$ y la ecuación (A.18) queda

$$\langle \Delta_3(L) \rangle = \frac{L}{15}. \quad (\text{A.19})$$

Apéndice B

Densidad de estados del sistema de N partículas

En este apéndice se realizan los cálculos omitidos en la sección 4.3.

B.1. Cálculo de la densidad de estados

En la sección 4.3.1 se obtuvo la siguiente expresión para la densidad de estados del sistema de N partículas:

$$g^{(N)}(E) = \frac{1}{N!} \sum_{\{i_j \in \mathbb{N}\}} \sum_P \phi^{t_p} \left(\prod_{j=1}^N \delta_{i_j}^{e_{i_j}} \right) \delta \left(E - \sum_{j=1}^N e_{i_j} \right). \quad (\text{B.1})$$

A continuación se realiza el cálculo explícito de los casos $N = 2, 3, 4$.

B.1.1. Caso $N = 2$

Aplicando (B.1) al caso de dos partículas se obtiene

$$\begin{aligned} g^{(2)}(E) &= \frac{1}{2!} \left\{ \sum_{i,j} \delta_{ii} \delta_{jj} \delta(E - e_i - e_j) + \phi \sum_{i,j} \delta_{ij} \delta_{ji} \delta(E - e_i - e_j) \right\} \\ &= \frac{1}{2!} \sum_{i,j} \delta(E - e_i - e_j) + \phi \frac{1}{2!} \sum_i \delta(E - 2e_i). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Cada uno de los dos sumandos puede escribirse en función de la densidad de una partícula $\rho(E)$:

$$\begin{aligned} \blacksquare \sum_{i,j} \delta(E - e_i - e_j) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \sum_i \delta(\eta - e_j) \sum_j \delta(E - \eta - e_j) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta) \rho(E - \eta) = \rho(E) * \rho(E) \end{aligned}$$

$$\blacksquare \sum_i \delta(E - 2e_i) = \frac{1}{2} \sum_i \delta(E/2 - e_i) = \frac{1}{2} \rho(E/2)$$

Así, la densidad $g^{(2)}(E)$ queda

$$g^{(2)}(E) = \frac{1}{2} \rho(E) * \rho(E) + \phi \frac{1}{4} \rho(E/2). \quad (\text{B.3})$$

B.1.2. Caso $N = 3$

Para aplicar (B.1) al caso de tres partículas necesitamos conocer las permutaciones de tres índices (i, j, k) con sus correspondientes signos $(-1)^t$, en el caso de fermiones. Éstas se dan en la siguiente tabla:

n	3	3	2	2	2
+	+	+	-	-	-
i	k	j	j	k	i
j	i	k	i	j	k
k	j	i	k	i	j

En la primera fila, la n indica la permutación natural y los números indican el número de índices que intervienen en cada permutación. Por ejemplo, 2 indica que dos de los índices cambian su posición respecto de la permutación natural mientras que el tercero queda fijo en su posición; 3 indica que los tres índices cambian su posición respecto de la permutación natural.

Entonces la ecuación (B.1) quedaría

$$\begin{aligned}
g^{(3)}(E) &= \frac{1}{3!} \sum_{i,j,k} (\delta_{ii}\delta_{jj}\delta_{kk} + \delta_{ik}\delta_{ji}\delta_{kj} + \delta_{ij}\delta_{jk}\delta_{ki} + \phi\delta_{ij}\delta_{ji}\delta_{kk} + \phi\delta_{ik}\delta_{jj}\delta_{ki} \\
&\quad + \phi\delta_{ii}\delta_{jk}\delta_{kj}) \delta(E - e_i - e_j - e_k) = \frac{1}{3!} \left\{ \sum_{i,j,k} \delta(E - e_i - e_j - e_k) \right. \\
&\quad \left. + 2 \sum_i \delta(E - 3e_i) + \phi 3 \sum_{i,j} \delta(E - e_i - 2e_j) \right\}. \quad (\text{B.4})
\end{aligned}$$

El primer sumando corresponde a la permutación natural, el segundo corresponde a los dos casos en que se intercambian los tres índices y el tercero a los tres casos en que se intercambian sólo dos índices.

Escribiendo cada sumatorio en función de la densidad de una partícula:

$$\begin{aligned}
\blacksquare \sum_{i,j,k} \delta(E - e_i - e_j - e_k) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \sum_i \delta(\eta - e_i) \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \sum_j \delta(\lambda - \eta - e_j) \\
\sum_k \delta(E - \lambda - e_k) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta) \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \rho(\lambda - \eta) \rho(E - \lambda)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \left[\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\eta)\rho(\lambda - \eta)d\eta \right] \rho(E - \lambda) = \rho(E) * \rho(E) * \rho(E) \\
 \blacksquare \sum_i \delta(E - 3e_i) &= \frac{1}{3} \sum_i \delta(E/3 - e_i) = \frac{1}{3}\rho(E/3) \\
 \blacksquare \sum_{i,j} \delta(E - e_i - 2e_j) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \sum_j \delta(\eta - 2e_j) \sum_i \delta(E - \eta - e_i) \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta/2)\rho(E - \eta) = \frac{1}{2}\rho(E/2) * \rho(E),
 \end{aligned}$$

la densidad $g^{(3)}(E)$ queda

$$g^{(3)}(E) = \frac{1}{3!} \left[\rho(E) * \rho(E) * \rho(E) + \phi \frac{3}{2} \rho(E/2) * \rho(E) + \frac{2}{3} \rho(E/3) \right]. \quad (B.5)$$

B.1.3. Caso $N = 4$

Las permutaciones de cuatro índices (i, j, k, l) con sus signos correspondientes se dan en la tabla siguiente:

n	2	2	2	2	2	2	3	3	3	3	3
+	-	-	-	-	-	-	+	+	+	+	+
i	i	i	i	j	k	l	i	i	j	j	k
j	j	k	l	i	j	j	l	k	k	l	i
k	l	j	k	k	i	k	j	l	i	k	j
l	k	l	j	l	l	i	k	j	l	i	l

3	3	3	2,2	2,2	2,2	4	4	4	4	4	4
+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	-	-
k	l	l	j	k	l	j	j	k	k	l	l
j	i	j	i	l	k	l	k	i	l	i	k
l	k	i	l	i	j	i	l	l	j	j	i
i	j	k	k	j	i	k	i	j	i	k	j

De nuevo n indica la permutación natural y los números indican el número de índices que cambian de posición respecto de la permutación natural. (2, 2) indica que los cuatro índices se intercambian por pares.

Entonces, teniendo en cuenta todas las permutaciones, sin necesidad de escribir explícitamente todos los términos de la ecuación (B.1), es fácil deducir

que ésta da lugar a la siguiente expresión:

$$g^{(4)}(E) = \frac{1}{4!} \left\{ \sum_{i,j,k,l} \delta(E - e_i - e_j - e_k - e_l) + \phi 6 \sum_{i,j,k} \delta(E - e_i - e_j - 2e_k) \right. \\ \left. + 8 \sum_{i,j} \delta(E - e_i - 3e_j) + 3 \sum_{i,j} \delta(E - 2e_i - 2e_j) + \phi 6 \sum_i \delta(E - 4e_i) \right\} \quad (\text{B.6})$$

Escribiendo cada sumatorio en función de la densidad de una partícula:

- $$\begin{aligned} \bullet \sum_{i,j,k,l} \delta(E - e_i - e_j - e_k - e_l) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \sum_i \delta(\alpha - e_i) \\ &\sum_j \delta(\lambda - \alpha - e_j) \sum_k \delta(\eta - \lambda - e_k) \sum_l \delta(E - \eta - e_l) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \rho(\alpha) \rho(\lambda - \alpha) \rho(\eta - \lambda) \rho(E - \eta) \\ &= \rho(E) * \rho(E) * \rho(E) * \rho(E) \end{aligned}$$
- $$\begin{aligned} \bullet \sum_{i,j,k} \delta(E - e_i - e_j - 2e_k) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \sum_k \delta(\lambda - 2e_k) \sum_i \delta(\eta - \lambda - e_i) \\ &\sum_j \delta(E - \eta - e_j) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \rho(\lambda/2) \rho(\eta - \lambda) \rho(E - \eta) \\ &= \frac{1}{2} \rho(E/2) * \rho(E) * \rho(E) \end{aligned}$$
- $$\begin{aligned} \bullet \sum_{i,j} \delta(E - e_i - 3e_j) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \sum_j \delta(\eta - 3e_j) \sum_i \delta(E - \eta - e_i) \\ &= \frac{1}{3} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta/3) \rho(E - \eta) = \frac{1}{3} \rho(E/3) * \rho(E) \end{aligned}$$
- $$\begin{aligned} \bullet \sum_{i,j} \delta(E - 2e_i - 2e_j) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \sum_j \delta(\eta - 2e_j) \sum_i \delta(E - \eta - 2e_i) \\ &= \frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \rho(\eta/2) \rho\left(\frac{E - \eta}{2}\right) = \frac{1}{4} \rho(E/2) * \rho(E/2) \end{aligned}$$
- $$\bullet \sum_i \delta(E - 4e_i) = \frac{1}{4} \sum_i \delta(E/4 - e_i) = \frac{1}{4} \rho(E/4),$$

la densidad $g^{(4)}(E)$ queda

$$g^{(4)}(E) = \frac{1}{4!} \left[\rho(E) * \rho(E) * \rho(E) * \rho(E) + \phi \frac{6}{2} \rho(E/2) * \rho(E) * \rho(E) + \frac{8}{3} \rho(E/3) * \rho(E) + \frac{3}{4} \rho(E/2) * \rho(E/2) + \phi \frac{6}{4} \rho(E/4) \right]. \quad (\text{B.7})$$

Las fracciones no se han simplificado para poder entender mejor de dónde proviene cada término y extender así la fórmula al caso de N partículas.

El primer sumando corresponde a la permutación natural. El segundo corresponde a las seis permutaciones en las que se intercambian sólo dos índices: el número de permutaciones (6) aparece en el numerador del coeficiente y el número de índices intercambiados (2) aparece en el denominador del coeficiente y en el denominador del argumento de una de las densidades ρ , debido a las propiedades de la δ de Dirac, según se puede ver en los desarrollos de los sumandos en términos de la densidad de una partícula. El signo de cada término corresponde al signo de la permutación correspondiente en el caso de fermiones ($\phi = -1$). En el caso de los bosones todos son positivos.

Para encontrar una fórmula general sería necesario entonces clasificar las permutaciones según el tipo de término a que den lugar. Y sabiendo el número de permutaciones de cada tipo se podrían deducir los coeficientes que aparecen en (B.7).

B.1.4. Caso general

Toda permutación $\hat{\mathcal{P}}$ de N elementos puede descomponerse como producto de a_1, a_2, \dots, a_N ciclos de longitud $1, 2, \dots, N$, es decir, que desplaza cíclicamente a_k grupos de k índices. Por ejemplo, la permutación de 8 elementos 85263471 puede obtenerse a partir de la permutación natural 12345678 realizando los siguientes pasos:

$$15243678 \rightarrow 15263478 \rightarrow 85263471 \quad (\text{B.8})$$

Primero se desplazan los índices 235, después 46 y por último 18. Es decir, que la permutación se puede descomponer en 1 ciclo de 3 índices, 2 ciclos de 2 índices y 1 ciclo de 1 índice (el 7, que permanece invariable): $a_1 = 1, a_2 = 2, a_3 = 1, a_4 = a_5 = a_6 = a_7 = a_8 = 0$. Obviamente, se cumple $\sum_{r=1}^N r a_r = N$.

El operador de permutación puede escribirse como

$$\hat{\mathcal{P}} = \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \hat{\mathcal{Q}}^{(r,s)}. \quad (\text{B.9})$$

En el ejemplo anterior, $\widehat{\mathcal{P}} = \widehat{\mathcal{Q}}^1 \widehat{\mathcal{Q}}^{(2,1)} \widehat{\mathcal{Q}}^{(2,2)} \widehat{\mathcal{Q}}^3$.

Así, volviendo a la expresión (4.28) para la densidad de estados:

$$g^{(N)}(E) = \sum_{\mathbf{I}} C_{\mathbf{I}}^2 \sum_P \phi^{t_p} \langle \mathbf{I}_p | \widehat{\mathcal{P}} | \mathbf{I}_p \rangle \delta(E - E_{\mathbf{I}}), \quad (\text{B.10})$$

extendiendo la suma en \mathbf{I} a suma en los i_j sin restricciones e introduciendo (B.9) se tiene

$$g^{(N)}(E) = \frac{1}{N!} \sum_{\{i_j \in \mathbb{N}\}} \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N}} \phi^{N + \sum a_r} \left\langle \mathbf{I}_p \left| \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \widehat{\mathcal{Q}}^{(r,s)} \right| \mathbf{I}_p \right\rangle \delta \left(E - \sum_{j=1}^N e_{i_j} \right), \quad (\text{B.11})$$

donde el número de transposiciones básicas t_p asociado a cada permutación se ha expresado también en términos de la descomposición en ciclos: $\phi^{t_p} = \phi^{\sum_{r=1}^N (r-1)a_r} = \phi^{N - \sum_{r=1}^N a_r} = \phi^{N + \sum_{r=1}^N a_r}$.

Cada operador $\widehat{\mathcal{Q}}^{(r,s)}$ afecta a una secuencia de r índices $i_{q_1}, i_{q_2}, \dots, i_{q_r}$:

$$\widehat{\mathcal{Q}}^{(r,s)} \{i_{q_1}, i_{q_2}, i_{q_3}, \dots, i_{q_r}\} = \{i_{q_r}, i_{q_1}, i_{q_2}, \dots, i_{q_{r-1}}\}. \quad (\text{B.12})$$

Por tanto, actuará en (B.11) de la siguiente manera:

$$\left\langle i_{q_1}, i_{q_2}, \dots, i_{q_r} \left| \widehat{\mathcal{Q}}^{(r,s)} \right| i_{q_1}, i_{q_2}, \dots, i_{q_r} \right\rangle = \delta_{i_{q_1} i_{q_2}} \delta_{i_{q_2} i_{q_3}} \dots \delta_{i_{q_r} i_{q_1}} \quad (\text{B.13})$$

$$\left\langle i_{q_1}, i_{q_2}, \dots, i_{q_r} \left| \widehat{\mathcal{Q}}^{(r,s)} \right| i_{q_1}, i_{q_2}, \dots, i_{q_r} \right\rangle \left(\sum_{k=1}^r e_{i_{q_k}} \right) = r e_{i_{q_1}} \delta_{i_{q_1} i_{q_2}} \delta_{i_{q_2} i_{q_3}} \dots \delta_{i_{q_r} i_{q_1}}. \quad (\text{B.14})$$

Así, debido a estas δ de Kronecker la suma en los N índices i_j se ve reducida. Concretamente, queda sólo un índice distinto por cada ciclo, es decir, en total $\sum a_r$ índices, a los que llamaremos $j_s^{(r)}$. Esto se ve claramente en los ejemplos anteriores de 2, 3 y 4 partículas. En general,

$$\begin{aligned} & \sum_{\{i_j \in \mathbb{N}\}} \left\langle i_1, i_2, \dots, i_N \left| \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \widehat{\mathcal{Q}}^{(r,s)} \right| i_1, i_2, \dots, i_N \right\rangle \delta \left(E - \sum_{j=1}^N e_{i_j} \right) \\ &= \sum_{\{j_s^{(r)}\}} \delta \left(E - \sum_{r=1}^N r \sum_{s=1}^{a_r} e_{j_s^{(r)}} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Además, todas las permutaciones pueden clasificarse según la descomposición en ciclos, es decir, agruparse según la secuencia $\{a_r\}$ que las caracteriza. El

número de permutaciones de N índices que contienen a_1, a_2, \dots, a_N ciclos de longitud $1, 2, \dots, N$ es

$$N! \prod_{r=1}^N \frac{1}{r^{a_r} a_r!}, \quad (\text{B.16})$$

bien definido para los $a_k = 0$, ya que contribuyen con un factor 1.

Así, la suma en permutaciones se reduce a la suma en los $\{a_r\}$ y la densidad de estados queda

$$g^{(N)}(E) = \phi^N \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N}} \left(\prod_{r=1}^N \frac{\phi^{a_r}}{r^{a_r} a_r!} \right) \sum_{\{j_s^{(r)}\}} \delta \left(E - \sum_{r=1}^N r \sum_{s=1}^{a_r} e_{j_s^{(r)}} \right), \quad (\text{B.17})$$

donde se ha utilizado además $\phi^{N + \sum_{r=1}^N a_r} = \phi^N \phi^{\sum_{r=1}^N a_r} = \phi^N \prod_{r=1}^N \phi^{a_r}$.

Esta es la expresión general de la densidad de estados de N partículas en términos de suma en índices. Puede comprobarse comparando con las densidades obtenidas para 2, 3 y 4 partículas (expresiones (B.2), (B.4) y (B.6)). El siguiente paso es encontrar la fórmula general en términos de productos de convolución de la densidad de una partícula. Se han visto tres casos concretos y observando la manera de tratar cada término podemos deducir cómo sería el caso general de N partículas.

La parte que se transforma en productos de convolución es

$$\sum_{\{j_s^{(r)}\}} \delta \left(E - \sum_{r=1}^N r \sum_{s=1}^{a_r} e_{j_s^{(r)}} \right). \quad (\text{B.18})$$

En efecto,

$$\begin{aligned} \sum_{\{j_s^{(r)}\}} \delta \left(E - \sum_{r=1}^N r \sum_{s=1}^{a_r} e_{j_s^{(r)}} \right) &= \int \cdots \int d\vec{\eta} \sum_{j_1^{(1)}} \delta(\eta_1^{(1)} - e_1^{(1)}) \sum_{j_2^{(1)}} \delta(\eta_2^{(1)} - \eta_1^{(1)} - e_2^{(1)}) \cdots \\ &\sum_{j_{a_1}^{(1)}} \delta(\eta_{a_1}^{(1)} - \eta_{a_1-1}^{(1)} - e_{a_1}^{(1)}) \sum_{j_1^{(2)}} \delta(\eta_1^{(2)} - \eta_{a_1}^{(1)} - 2e_1^{(2)}) \cdots \sum_{j_{a_2}^{(2)}} \delta(\eta_{a_2}^{(2)} - \eta_{a_2-1}^{(2)} - 2e_{a_2}^{(2)}) \\ &\cdots \sum_{j_1^{(N)}} \delta(E - \eta_{a_{N-1}}^{(N-1)} - N e_1^{(N)}) \\ &= * \prod_{s=1}^{a_1} \rho(E) * \prod_{s=1}^{a_2} \frac{\rho(E/2)}{2} \cdots * \prod_{s=1}^{a_{N-1}} \frac{\rho(E/N-1)}{N-1} * \frac{\rho(E/N)}{N} \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Así, la densidad de estados de N partículas queda

$$\begin{aligned}
g^{(N)}(E) &= \phi^N \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N}} \left(\prod_{r=1}^N \frac{\phi^{a_r}}{r^{a_r} a_r!} \right) \left(* \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \frac{\rho(E/r)}{r} \right) \\
&= \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N}} \left(\prod_{r=1}^N \frac{\phi^{(r+1)a_r}}{r^{2a_r} a_r!} \right) \left(* \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \rho(E/r) \right). \quad (\text{B.20})
\end{aligned}$$

B.2. Parte suave de la densidad de estados

B.2.1. Caso $N = 2$

La expresión de la parte suave de la densidad de estados de dos partículas es la siguiente:

$$\begin{aligned}
\overline{g^{(2)}}(E) &= \frac{1}{2} \overline{\rho(E) * \rho(E)} + \phi \frac{1}{4} \overline{\rho(E/2)} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \overline{\rho(\eta) \rho(E - \eta)} + \phi \frac{1}{4} \overline{\rho(E/2)} \\
&= \frac{1}{2} \int_0^E d\eta \overline{\rho(\eta) \rho(E - \eta)} + \phi \frac{1}{4}, \quad (\text{B.21})
\end{aligned}$$

donde en la última igualdad se ha utilizado la expresión (4.36) para la densidad de estados de una partícula.

Para calcular la integral que aparece en (B.21) es necesario tener en cuenta la relación

$$\begin{aligned}
\overline{\rho(E_1) \rho(E_2)} &= \delta(E_1 - E_2) R_1(E_1) + R_2(E_1, E_2) \\
&= \delta(E_1 - E_2) R_1(E_1) + R_1(E_1) R_1(E_2) - Y_2(E_1, E_2) \quad (\text{B.22})
\end{aligned}$$

entre el promedio del producto $\rho(E_1) \rho(E_2)$ y las funciones de correlación a uno y dos puntos definidas en el apéndice A, donde se explica también que la función de correlación a un punto coincide con la densidad media de estados, que en este caso es igual a 1, según (4.36).

Entonces la parte suave de $g^{(2)}(E)$ queda

$$\begin{aligned}
\overline{g^{(2)}}(E) &= \frac{1}{2} \left[\int_0^E d\eta \delta(2\eta - E) + \int_0^E d\eta - \int_0^E d\eta Y_2(\eta, E - \eta) \right] + \phi \frac{1}{4} \\
&= \frac{1}{2} E + \phi \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \left[\int_0^E d\eta \delta(2\eta - E) - \int_0^E d\eta Y_2(\eta, E - \eta) \right], \quad (\text{B.23})
\end{aligned}$$

La primera de las integrales resulta

$$\int_0^E d\eta \delta(2\eta - E) = \frac{1}{2} \int_0^E d\eta \delta\left(\eta - \frac{E}{2}\right) = \frac{1}{2} \quad (\text{B.24})$$

La segunda depende de la colectividad utilizada, ya que aparece la función Y_2 , que da cuenta de las correlaciones y depende por tanto del tipo de espectro. A continuación calcularemos esta integral para cada uno de los tres tipos de espectro utilizados: GUE, GOE y Poisson.

Espectro GUE

La expresión de Y_2 para el GUE es la siguiente (apéndice A):

$$Y_2(E_1, E_2) = Y_2(E) = \left(\frac{\text{sen}(\pi E)}{\pi E} \right)^2, \quad (\text{B.25})$$

donde $E = E_1 - E_2$.

La integral que queremos calcular es entonces

$$\int_0^E d\eta Y_2(\eta, E - \eta) = \int_0^E d\eta \left(\frac{\text{sen}[\pi(E - 2\eta)]}{\pi(E - 2\eta)} \right)^2, \quad (\text{B.26})$$

que, con el cambio de variable $\theta = E - 2\eta$, resulta

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_{-E}^E d\theta \left(\frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\pi\theta} \right)^2 &= \int_0^E d\theta \left(\frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\pi\theta} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1 - \cos(2\pi E) - 2\pi E \text{si}(2\pi E)}{2\pi^2 E}, \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

donde *si* es la función seno integral y tiene la siguiente expresión:

$$\text{si}(\theta) = - \int_{\theta}^{\infty} \frac{\text{sen}\xi}{\xi} d\xi. \quad (\text{B.28})$$

Por tanto, sustituyendo las integrales calculadas en la ecuación (B.23) la parte suave de la densidad de dos partículas queda para el caso del GUE

$$\overline{g^{(2)}}(E) = \frac{E}{2} + \phi \frac{1}{4} + \frac{1 - \cos(2\pi E) - 2\pi E \text{si}(2\pi E)}{4\pi^2 E}. \quad (\text{B.29})$$

Espectro GOE

La expresión de Y_2 para el GOE es (apéndice A)

$$Y_2(E) = \left(\frac{\text{sen}\pi E}{\pi E} \right)^2 - \text{si}(\pi E) \left(\frac{\cos \pi E}{\pi E} - \frac{\text{sen}\pi E}{(\pi E)^2} \right). \quad (\text{B.30})$$

La integral $\int_0^E d\eta Y_2(\eta, E - \eta)$ es entonces

$$\int_0^E d\eta Y_2(\eta, E - \eta) = \int_0^E d\eta \left[\left(\frac{\text{sen}[\pi(E - 2\eta)]}{\pi(E - 2\eta)} \right)^2 - \text{si}(\pi(E - 2\eta)) \left(\frac{\cos[\pi(E - 2\eta)]}{\pi(E - 2\eta)} - \frac{\text{sen}[\pi(E - 2\eta)]}{(\pi(E - 2\eta))^2} \right) \right], \quad (\text{B.31})$$

que, con el mismo cambio de variable utilizado en el caso del GUE ($\theta = E - 2\eta$), queda

$$\int_0^E d\eta Y_2(\eta, E - \eta) = \int_0^E d\theta Y_2(\theta) = \int_0^E d\theta \left[\left(\frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\pi\theta} \right)^2 - \text{si}(\pi\theta) \left(\frac{\cos(\pi\theta)}{\pi\theta} - \frac{\text{sen}(\pi\theta)}{(\pi\theta)^2} \right) \right]. \quad (\text{B.32})$$

De la expresión (B.28) se deduce que

$$\frac{d\text{si}(\pi\theta)}{d\theta} = \frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\theta}. \quad (\text{B.33})$$

Por tanto, la integral puede escribirse

$$\int_0^E d\theta Y_2(\theta) = \int_0^E d\theta \left\{ \left(\frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\pi\theta} \right)^2 - \frac{\text{si}(\pi\theta)}{\pi^2} \frac{d^2}{d\theta^2} [\text{si}(\pi\theta)] \right\}. \quad (\text{B.34})$$

La primera parte de esta integral ya fue calculada (ecuación (B.27)), con el resultado

$$\int_0^E d\theta \left(\frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\pi\theta} \right)^2 = \frac{1}{2} - \frac{1 - \cos(2\pi E) - 2\pi E \text{si}(2\pi E)}{2\pi^2 E}. \quad (\text{B.35})$$

La segunda puede calcularse por partes y resulta

$$\begin{aligned} \int_0^E d\theta \left(\frac{\text{si}(\pi\theta)}{\pi^2} \frac{d^2}{d\theta^2} [\text{si}(\pi\theta)] \right) &= \left[\frac{\text{si}(\pi\theta)}{\pi^2} \frac{d}{d\theta} [\text{si}(\pi\theta)] \right]_0^E - \frac{1}{\pi^2} \int_0^E d\theta \left(\frac{d}{d\theta} [\text{si}(\pi\theta)] \right)^2 \\ &= \left[\frac{\text{si}(\pi\theta) \text{sen}(\pi\theta)}{\pi} \right]_0^E - \int_0^E d\theta \left(\frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\pi\theta} \right)^2 \\ &= \frac{\text{si}(\pi E) \text{sen}(\pi E)}{\pi^2 E} + \frac{1}{2} - \int_0^E d\theta \left(\frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\pi\theta} \right)^2 \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

Entonces la integral completa es

$$\int_0^E d\theta Y_2(\theta) = 2 \int_0^E d\theta \left(\frac{\text{sen}(\pi\theta)}{\pi\theta} \right)^2 - \frac{1}{2} - \frac{\text{si}(\pi E)\text{sen}(\pi E)}{\pi^2 E}. \quad (\text{B.37})$$

E introduciendo (B.35) aquí la expresión explícita es la siguiente:

$$\int_0^E d\eta Y_2(\eta, E - \eta) = \frac{1}{2} + \frac{\cos(2\pi E) + 2\pi E \text{si}(2\pi E) - \text{si}(\pi E)\text{sen}(\pi E) - 1}{\pi^2 E}. \quad (\text{B.38})$$

Por tanto, la parte suave de la densidad de dos partículas para el GOE es

$$\overline{g^{(2)}}(E) = \frac{E}{2} + \phi \frac{1}{4} + \frac{1 + \text{si}(\pi E)\text{sen}(\pi E) - \cos(2\pi E) - 2\pi E \text{si}(2\pi E)}{2\pi^2 E}. \quad (\text{B.39})$$

Espectro Poisson

En este caso la función $Y_2(E)$ es nula (apéndice A). Por tanto, la integral que estamos calculando es también nula y la densidad de estados de dos partículas queda

$$\overline{g^{(2)}}(E) = \frac{E}{2} + \phi \frac{1}{4} + \frac{1}{4}. \quad (\text{B.40})$$

B.2.2. Caso $N = 3$

La parte suave de la densidad de estados de tres partículas tiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \overline{g^{(3)}}(E) &= \frac{1}{6} \overline{\rho(E) * \rho(E) * \rho(E)} + \phi \frac{1}{4} \overline{\rho(E/2) * \rho(E)} + \frac{1}{9} \overline{\rho(E/3)} \\ &= \frac{1}{6} \int_0^E d\lambda \int_0^\lambda d\eta \overline{\rho(\eta)\rho(\lambda - \eta)\rho(E - \lambda)} \\ &\quad + \phi \frac{1}{4} \int_0^E d\eta \overline{\rho(\eta/2)\rho(E - \eta)} + \frac{1}{9} \overline{\rho(E/3)}. \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

Si consideramos una primera aproximación en que la parte suave viene dada sólo por la parte proveniente de la parte suave de $\rho(E)$ tenemos

$$\begin{aligned} \overline{g^{(3)}}(E) &= \frac{1}{6} \int_0^E d\lambda \int_0^\lambda d\eta \overline{\rho(\eta)\rho(\lambda - \eta)\rho(E - \lambda)} \\ &\quad + \phi \frac{1}{4} \int_0^E d\eta \overline{\rho(\eta/2)\rho(E - \eta)} + \frac{1}{9} \overline{\rho(E/3)}, \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

que puede integrarse fácilmente teniendo en cuenta que $\overline{\rho(E)} = 1$ y resulta

$$\overline{g^{(3)}}(E) = \frac{1}{6} \frac{E^2}{2} + \phi \frac{1}{4} E + \frac{1}{9}. \quad (\text{B.43})$$

A continuación consideramos el cálculo completo de la ecuación (B.41). Buscamos una cota superior para la densidad de estados.

Para la primera integral $I_1 \equiv \int_0^E d\lambda \int_0^\lambda d\eta \overline{\rho(\eta)\rho(\lambda-\eta)\rho(E-\lambda)}$ necesitamos utilizar la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \overline{\rho(E_1)\rho(E_2)\rho(E_3)} &= R_3(E_1, E_2, E_3) + \delta(E_1 - E_2)R_2(E_2, E_3) \\ &+ \delta(E_1 - E_3)R_2(E_1, E_2) + \delta(E_2 - E_3)R_2(E_1, E_3) \\ &+ \delta(E_1 - E_2)\delta(E_2 - E_3)R_1(E_3), \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

donde R_3 es la función de correlación a tres puntos, que puede escribirse en términos de la función de agrupamiento Y_3 :

$$\begin{aligned} R_3(E_1, E_2, E_3) &= Y_3(E_1, E_2, E_3) + R_1(E_1)R_2(E_2, E_3) + R_1(E_2)R_2(E_1, E_3) \\ &+ R_1(E_3)R_2(E_1, E_2) - 2R_1(E_1)R_1(E_2)R_1(E_3). \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

Para la segunda integral $I_2 = \int_0^E d\eta \overline{\rho(\eta/2)\rho(E-\eta)}$ debemos hacer uso de la expresión

$$\begin{aligned} \overline{\rho(E_1)\rho(E_2)} &= \delta(E_1 - E_2)R_1(E_1) + R_2(E_1, E_2) \\ &= \delta(E_1 - E_2)R_1(E_1) + R_1(E_1)R_1(E_2) - Y_2(E_1, E_2), \end{aligned} \quad (\text{B.46})$$

que ya fue utilizada en el caso de dos partículas.

Teniendo en cuenta que

$$R_1(E) = 1, \quad (\text{B.47})$$

$$0 \leq Y_2(E_1, E_2) \leq 1 \quad (\text{B.48})$$

$$|Y_3(E_1, E_2, E_3)| \leq 2, \quad (\text{B.49})$$

se tiene que las funciones de correlación utilizadas cumplen

$$0 \leq R_2(E_1, E_2) \leq 1 \quad (\text{B.50})$$

$$0 \leq R_3(E_1, E_2, E_3) \leq 3. \quad (\text{B.51})$$

Y por tanto,

$$0 \leq \overline{\rho(E_1)\rho(E_2)} \leq 1 + \delta(E_1 - E_2) \quad (\text{B.52})$$

$$\begin{aligned} 0 \leq \overline{\rho(E_1)\rho(E_2)\rho(E_3)} &\leq 3 + \delta(E_1 - E_2) + \delta(E_1 - E_3) + \delta(E_2 - E_3) \\ &+ \delta(E_1 - E_2)\delta(E_2 - E_3). \end{aligned} \quad (\text{B.53})$$

Así, el cálculo de las correspondientes integrales nos permite acotar la densidad como

$$\overline{g^{(3)}}(E) \leq \frac{E^2}{4} + \frac{E}{2} + \frac{5}{18} \quad (\text{B.54})$$

donde se ha tomado $\phi = +1$ para tener una cota superior válida tanto para fermiones como para bosones. Entonces la densidad nunca crece más deprisa que un polinomio de grado 2.

También puede estudiarse el comportamiento asintótico de la densidad. Las integrales a realizar para el cálculo de la densidad son de varios tipos. Las más sencillas son las integrales de constantes y de funciones δ de Dirac, que son inmediatas. Pero además, hay integrales donde aparecen funciones de agrupamiento a dos y a tres puntos, que son más complicadas. A continuación se describe el método utilizado en cada tipo de integral mediante tres ejemplos y se da el resultado final.

En primer lugar, para la integral de la función de agrupamiento a tres puntos, que es la siguiente:

$$\int_0^E d\alpha \int_0^\alpha d\beta Y_3(\beta, \alpha - \beta, E - \alpha) = \int_0^E d\alpha \int_0^\alpha d\beta Y_3(0, \alpha - 2\beta, E - \alpha - \beta) \quad (\text{B.55})$$

se utiliza el cambio de variables $\{\mu = \alpha - 2\beta, \nu = E - \alpha - \beta\}$, cuyo jacobiano vale $1/3$. El dominio de integración es un triángulo que se transforma según

$$\begin{aligned} \beta = 0 &\rightarrow \mu = \alpha \in [0, E], \nu = E - \alpha = E - \mu \\ \beta = \alpha &\rightarrow \mu = -\alpha \in [-E, 0], \nu = E - 2\alpha = E + 2\mu \\ \alpha = E &\rightarrow \mu = E - 2\beta \in [-E, E], \nu = -\beta = (\mu - E)/2 \end{aligned} \quad (\text{B.56})$$

Por tanto, tras el cambio la integral resulta

$$\int_{-E}^E d\mu \int_{\frac{\mu-E}{2}}^{f(\mu)} d\nu Y_3(0, \mu, \nu), \quad (\text{B.57})$$

donde

$$f(\nu) = \begin{cases} E + 2\mu, & \mu \in [-E, 0] \\ E - \mu, & \mu \in [0, E], \end{cases} \quad (\text{B.58})$$

y considerando la energía muy alta, es decir, $E \rightarrow \infty$, podemos extender el dominio de integración a \mathbb{R}^2 y utilizando la propiedad de las funciones de agrupamiento, válida para las tres colectividades clásicas (FRENCH *et al.*, 1988),

$$\int_{-\infty}^{\infty} Y_n(x_1, \dots, x_n) dx_n = (n - 1) Y_{n-1}(x_1, \dots, x_{n-1}) \quad (\text{B.59})$$

el resultado de la integral es

$$\int \int_{\mathbb{R}^2} Y_3(0, \mu, \nu) d\mu d\nu = \frac{2}{3} Y_1(0) = \frac{2}{3}. \quad (\text{B.60})$$

Por tanto, el comportamiento asintótico de la integral (B.55) es

$$\int_0^E d\alpha \int_0^\alpha d\beta Y_3(0, \alpha - 2\beta, E - \alpha - \beta) \sim \frac{2}{3}. \quad (\text{B.61})$$

La segunda integral cuyo cálculo detallamos es

$$\int_0^E d\alpha \int_0^\alpha d\beta Y_2(\beta, E - \alpha) = \int_0^E d\alpha \int_0^\alpha d\beta Y_2(E - \alpha - \beta). \quad (\text{B.62})$$

Con un cambio de variables similar al anterior, $\{\mu = \alpha - \beta, \nu = E - \alpha - \beta\}$, queda

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^E d\mu \int_{-E+\mu}^{E-\mu} d\nu Y_2(\nu) &= \int_0^E d\mu \int_0^{E-\mu} d\nu Y_2(\nu) = \int_0^E d\nu (E - \nu) Y_2(\nu) \\ &= \frac{E}{2} - \frac{1}{\pi^2 \beta} [\log(2\pi E) + \xi_\beta] + O(1/E), \end{aligned} \quad (\text{B.63})$$

donde en la última igualdad se ha utilizado

$$\begin{aligned} \int_0^s Y_2^\beta(u) du &= \frac{1}{2} - \frac{1}{\beta \pi^2 s} + O(s^{-2}) \\ \int_0^s u Y_2^\beta(u) du &= \frac{1}{\beta \pi^2} [\log(2\pi s) + \xi_\beta] + O(s^{-1}), \end{aligned} \quad (\text{B.64})$$

relaciones válidas para $\beta = 1, 2$, es decir, para GOE y GUE, respectivamente, y donde ξ_β es una constante distinta para cada colectividad (МЕНТА, 1991).

El tercer tipo de integral es de la forma

$$\begin{aligned} \int_0^E d\alpha \int_0^\alpha d\beta Y_2(\beta, \alpha - \beta) \delta(E + \beta - 2\alpha) &= \int_{E/2}^E Y_2(2\alpha - E, E - \alpha) d\alpha \\ &= \int_{E/2}^E Y_2(2E - 3\alpha) d\alpha. \end{aligned} \quad (\text{B.65})$$

Con el cambio de variable $\{\mu = 2E - 3\alpha\}$ queda

$$-\frac{1}{3} \int_{E/2}^{-E} d\mu Y_2(\mu) = \frac{1}{3} \int_0^E d\mu Y_2(\mu) - \frac{1}{3} \int_0^{E/2} d\mu Y_2(\mu) = \frac{1}{6\pi^2 E} + O(1/E^2). \quad (\text{B.66})$$

El resto de integrales se trata de manera similar a estos tres ejemplos descritos y el resultado final para el comportamiento asintótico de la densidad es el siguiente:

$$\overline{g^{(3)}}(E) \sim \frac{E^2}{12} - \frac{E}{4} + \frac{1}{2\pi^2 \beta} [\log(2\pi E) + \xi_\beta] + \frac{1}{9} + O(1/E). \quad (\text{B.67})$$

Espectro Poisson

Es el caso más sencillo, las funciones de correlación valen $R_2(E_1, E_2) = R_3(E_1, E_2, E_3) = 1$ y, por tanto, hacer el cálculo exacto es viable. Las expresiones (B.44) y (B.46) quedan

$$\overline{\rho(E_1)\rho(E_2)\rho(E_3)} = 1 + \delta(E_1 - E_2) + \delta(E_1 - E_3) + \delta(E_2 - E_3) + \delta(E_1 - E_2)\delta(E_2 - E_3), \quad (\text{B.68})$$

$$\overline{\rho(E_1)\rho(E_2)} = 1 + \delta(E_1 - E_2), \quad (\text{B.69})$$

y el resultado, tras realizar las correspondientes integrales en (B.41) es

$$\overline{g^{(3)}}(E) = \frac{E^2}{12} + \frac{E}{4}(1 + \phi) + \frac{1}{6}(1 + \phi). \quad (\text{B.70})$$

B.2.3. Caso general

Vamos a generalizar al caso de N partículas la cota para la densidad obtenida en el caso de 3 partículas (B.54). En primer lugar, para obtener una expresión general que relacione el promedio de productos de densidades de una partícula con las funciones de correlación, como se ve en (B.44) y (B.46), los expresamos de la siguiente manera:

$$\overline{\prod_{i=1}^p \rho(x_i)} = \overline{\prod_{q=1}^p \left(\sum_{i_q} \delta(x_q - e_{i_q}) \right)} \quad (\text{B.71})$$

$$R_p(\{x_i\}) = \overline{\prod_{q=1}^p \left(\sum_{\substack{i_q \\ (i_1 \neq i_2 \neq \dots)}} \delta(x_q - e_{i_q}) \right)}. \quad (\text{B.72})$$

Es claro que el producto de densidades incluye más términos que la función de correlación, ya que los índices i_q pueden tomar cualquier valor en el primer caso y en cambio tienen restricciones en el segundo. Así, la relación entre

ambas expresiones es la siguiente:

$$\begin{aligned}
\overline{\prod_{q=1}^p \rho(x_q)} &= R_p(\{x_q\}) + \sum_{i < j} \delta(x_i - x_j) R_{p-1}(\{x_q\}, x_q \neq x_i) \\
&+ \sum_{i < j} \sum_{\substack{k < l \\ i < k, j \neq l}} \delta(x_i - x_j) \delta(x_k - x_l) R_{p-2}(\{x_q\}, x_q \neq x_i, x_k) \\
&+ \cdots + \left(\prod_{i=1}^{p-1} \delta(x_i - x_{i+1}) \right) R_1(x_p) \\
&= R_p(\{x_q\}) + \sum_{l=1}^{p-1} \left[\prod_{q=1}^l \left(\sum_{\substack{i_q < j_q \\ (i_1 < i_2 < \cdots < i_l) \\ (j_1 \neq j_2 \neq \cdots \neq j_l)}} \delta(x_{i_q} - x_{j_q}) \right) \right] R_{p-l}(\{x_k\}, x_k \neq \{x_{i_q}\}).
\end{aligned} \tag{B.73}$$

Es decir, la suma en $\{i_q\}$ sin restricciones es igual a la suma con $i_1 \neq i_2 \neq \cdots$, más las sumas en que 2 índices son iguales y los demás distintos, más las sumas en que 3 índices son iguales y los demás distintos, etc. Puede verse que el número de sumandos de cada tipo, es decir, el número de sumandos que contienen funciones de correlación a k puntos viene dado por $\mathcal{S}_p^{(k)}$, que son los números de Stirling de segunda especie.

Además, sabemos que las funciones de correlación están siempre acotadas por constantes, $0 \leq R_k(x_1, \cdots, x_k) \leq \mathcal{M}_k$, $\forall x_i$. Por tanto, podemos escribir

$$\begin{aligned}
\overline{\prod_{q=1}^p \rho(x_q)} &\leq \mathcal{M}_p + \sum_{l=1}^{p-1} \mathcal{M}_{p-l} \left[\prod_{q=1}^l \sum_{\substack{i_q < j_q \\ (i_1 < i_2 < \cdots < i_l) \\ (j_1 \neq j_2 \neq \cdots \neq j_l)}} \delta(x_{i_q} - x_{j_q}) \right] \\
&= \sum_{l=0}^{p-1} \mathcal{M}_{p-l} \left[\delta_{l0} + \prod_{q=1}^l \sum_{\substack{i_q < j_q \\ (i_1 < i_2 < \cdots < i_l) \\ (j_1 \neq j_2 \neq \cdots \neq j_l)}} \delta(x_{i_q} - x_{j_q}) \right]
\end{aligned} \tag{B.74}$$

La expresión de la densidad que habíamos obtenido es

$$g^{(N)}(E) = \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N}} \left(\prod_{r=1}^N \frac{\phi^{(r+1)a_r}}{r^{2a_r} a_r!} \right) \left(* \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \rho(E/r) \right). \tag{B.75}$$

Y lo que pretendemos acotar son los productos de convolución $\overline{* \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \rho(E/r)}$, es decir, integrales de la expresión (B.74). Cada término $* \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \rho(E/r)$ contiene el producto de $\sum a_r$ densidades de una partícula, por tanto, es $p = \sum a_r$. Además, según el desarrollo (B.73), hay sumandos con productos de $0, 1, 2, \dots, p-1$ funciones δ de Dirac, y al realizar las $p-1$ integrales todos los sumandos pueden acotarse por

$$\begin{aligned} \int \cdots \int d\vec{\eta} 1 &= \frac{E^{p-1}}{(p-1)!} \geq \int \cdots \int d\vec{\eta} \delta(x_{i_1} - x_{j_1}) \geq \int \cdots \int d\vec{\eta} \delta(x_{i_1} - x_{j_1}) \delta(x_{i_2} - x_{j_2}) \\ &\geq \cdots \geq \int \cdots \int d\vec{\eta} \delta(x_{i_1} - x_{j_1}) \cdots \delta(x_{i_{p-1}} - x_{j_{p-1}}). \end{aligned} \quad (\text{B.76})$$

Así, los productos de convolución cumplen

$$\overline{* \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \rho(E/r)} \leq \left[\sum_{l=0}^{p-1} \mathcal{M}_{p-l} \mathcal{S}_p^{(p-l)} \right] \frac{E^{p-1}}{(p-1)!}. \quad (\text{B.77})$$

Ya que $\mathcal{S}_p^{(0)}$ y $p \geq 1$, puede extenderse el sumatorio hasta p ,

$$\overline{* \prod_{r=1}^N \prod_{s=1}^{a_r} \rho(E/r)} \leq \left[\sum_{l=0}^p \mathcal{M}_{p-l} \mathcal{S}_p^{(p-l)} \right] \frac{E^{p-1}}{(p-1)!} = \left[\sum_{l=0}^p \mathcal{M}_l \mathcal{S}_p^{(l)} \right] \frac{E^{p-1}}{(p-1)!}. \quad (\text{B.78})$$

Así, la densidad de estados queda acotada como

$$\overline{g^{(N)}(E)} \leq \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N}} \left(\prod_{r=1}^N \frac{1}{r^{2a_r} a_r!} \right) \left(\sum_{k=0}^{\sum a_r} \mathcal{M}_k \mathcal{S}_{\sum a_r}^{(k)} \right) \frac{E^{\sum a_r - 1}}{(\sum a_r - 1)!}, \quad (\text{B.79})$$

donde puede verse ya que la cota es un polinomio de grado $N-1$, ya que $\sum a_r$ puede valer como máximo N . Al tratarse de una cota superior tomamos todos los términos positivos, por eso desaparecen los factores $\phi(r+1)a_r$. Podemos simplificar la expresión un poco más si escribimos

$$\begin{aligned} \overline{g^{(N)}(E)} &\leq \sum_{p=1}^N \left[\sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N \\ \sum a_r = p}} \prod_{r=1}^N \frac{1}{r^{a_r} a_r!} \left(\sum_{k=0}^p \mathcal{M}_k \mathcal{S}_p^{(k)} \right) \frac{E^{p-1}}{(p-1)!} \right] \\ &= \sum_{p=1}^N \left(\sum_{k=0}^p \mathcal{M}_k \mathcal{S}_p^{(k)} \right) \frac{E^{p-1}}{(p-1)!} \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N \\ \sum a_r = p}} \prod_{r=1}^N \frac{1}{r^{a_r} a_r!}, \end{aligned} \quad (\text{B.80})$$

ya que utilizando la igualdad

$$N! \sum_{\substack{\{a_r\} \\ \sum r a_r = N \\ \sum a_r = p}} \prod_{r=1}^N \frac{1}{r^{a_r} a_r!} = (-1)^{N-p} S_N^{(p)}, \quad (\text{B.81})$$

donde $S_N^{(p)}$ son los números de Stirling de primera especie, finalmente obtenemos

$$\bar{g}(E) \leq \frac{1}{N!} \sum_{p=1}^N (-1)^{N-p} S_N^{(p)} \left(\sum_{k=0}^p \mathcal{M}_k \mathcal{S}_p^{(k)} \right) \frac{E^{p-1}}{(p-1)!}. \quad (\text{B.82})$$

Apéndice C

Cálculo analítico de la función de agrupamiento a dos puntos para $N = 2$

En este apéndice se detalla el cálculo de la sección 4.4.4 a partir de la expresión 4.63

$$Y_2^{(2)}(E_1, E_2) = 1 - \frac{\overline{g^{(2)}(E_1)g^{(2)}(E_2)}}{g^{(2)}(E_1)g^{(2)}(E_2)} + \frac{\delta(E_1 - E_2)}{g^{(2)}(E_1)}, \quad (\text{C.1})$$

y bajo las hipótesis $E_1, E_2 \gg 1$ y $0 < |E_1 - E_2| \ll E_1 + E_2$.

Utilizando $\overline{g^{(2)}(E)} = E/2$ para la densidad promedio y la expresión (4.31), $g^{(2)}(E) = \frac{1}{2}\rho(E) * \rho(E) + \phi\frac{1}{4}\rho(E/2)$, de la densidad en el promedio $\overline{g^{(2)}(E_1)g^{(2)}(E_2)}$, y expresando los productos $\overline{\rho(E_1)\rho(E_2)\cdots\rho(E_v)}$ en términos de funciones de correlación a k puntos del espectro de una partícula, se llega a

$$Y_2^{(2)}(E_1, E_2) = 1 - \frac{1}{E_1 E_2} \left[\int_0^{E_1} d\eta \int_0^{E_2} d\lambda R_4(\eta, E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda) \right. \\ \left. + 2 \int_0^{E_1} d\eta R_3(\eta, E_1 - \eta, E_2 - \eta) + 2 \int_0^{E_1} d\eta R_3(\eta, E_1 - \eta, \eta - E_1 + E_2) \right. \\ \left. + \frac{1}{4} R_2(E_2/2, E_1/2) \right] \quad (\text{C.2})$$

para fermiones y a

$$\begin{aligned}
Y_2^{(2)}(E_1, E_2) = & 1 - \frac{1}{E_1 E_2} \left[\int_0^{E_1} d\eta \int_0^{E_2} d\lambda R_4(\eta, E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda) \right. \\
& + 2 \int_0^{E_1} d\eta R_3(\eta, E_1 - \eta, E_2 - \eta) + 2 \int_0^{E_1} d\eta R_3(\eta, E_1 - \eta, \eta - E_1 + E_2) \\
& + \int_0^{E_2} d\eta R_3(E_1/2, \eta, E_2 - \eta) + \int_0^{E_1} d\eta R_3(E_2/2, \eta, E_1 - \eta) + 2R_2(E_2/2, E_1 - E_2/2) \\
& \left. + 2R_2(E_1/2, E_2 - E_1/2) + \frac{3}{4}R_2(E_2/2, E_1/2) \right] \quad (C.3)
\end{aligned}$$

para bosones. Ahora, teniendo en cuenta que las funciones de correlación están acotadas, podemos eliminar todos los términos excepto los dos primeros, ya que estamos trabajando en el límite $E_1, E_2 \gg 1$, en el cual estos términos despreciados son orden $O(1/E)$. Así,

$$Y_2^{(2)}(E_1, E_2) \sim 1 - \frac{1}{E_1 E_2} \int_0^{E_1} d\eta \int_0^{E_2} d\lambda R_4(\eta, E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda). \quad (C.4)$$

El integrando $R_4(E_1, E_2, E_3, E_4)$ puede escribirse en términos de las funciones de agrupamiento Y_k con $k \leq 4$, como

$$\begin{aligned}
R_4(E_1, E_2, E_3, E_4) = & -Y_4(E_1, E_2, E_3, E_4) + Y_3(E_1, E_2, E_3)Y_1(E_4) \\
& + Y_3(E_1, E_2, E_4)Y_1(E_3) + Y_3(E_1, E_3, E_4)Y_1(E_2) + Y_3(E_2, E_3, E_4)Y_1(E_1) \\
& + Y_2(E_1, E_2)Y_2(E_3, E_4) + Y_2(E_1, E_3)Y_2(E_2, E_4) + Y_2(E_1, E_4)Y_2(E_2, E_3) \\
& - Y_2(E_1, E_2)Y_1(E_3)Y_1(E_4) - Y_2(E_1, E_3)Y_1(E_2)Y_1(E_4) - Y_2(E_1, E_4)Y_1(E_2)Y_1(E_3) \\
& - Y_2(E_2, E_3)Y_1(E_1)Y_1(E_4) - Y_2(E_2, E_4)Y_1(E_1)Y_1(E_3) - Y_2(E_3, E_4)Y_1(E_1)Y_1(E_2) \\
& + Y_1(E_1)Y_1(E_2)Y_1(E_3)Y_1(E_4). \quad (C.5)
\end{aligned}$$

E introduciendo esta última expresión en (C.4) queda

$$\begin{aligned}
Y_2^{(2)}(E_1, E_2) \sim & 1 + \frac{1}{E_1 E_2} \int_0^{E_1} d\eta \int_0^{E_2} d\lambda \left[Y_4(\eta, E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda) \right. \\
& - Y_3(E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda) - Y_3(\eta, \lambda, E_2 - \lambda) - Y_3(\eta, E_1 - \eta, E_2 - \lambda) - Y_3(\eta, E_1 - \eta, \lambda) \\
& - Y_2(2\eta - E_1)Y_2(2\lambda - E_2) - Y_2(\eta - \lambda)Y_2(E_1 - E_2 + \lambda - \eta) - Y_2(E_1 - \lambda - \eta)Y_2(E_2 - \lambda - \eta) \\
& \left. + Y_2(\eta, E_1 - \eta) + Y_2(\eta, \lambda) + Y_2(\eta, E_2 - \lambda) + Y_2(E_1 - \eta, \lambda) + Y_2(E_1 - \eta, E_2 - \lambda) + Y_2(\lambda, E_2 - \lambda) - 1 \right]. \quad (C.6)
\end{aligned}$$

A continuación veremos que todos los términos del integrando excepto el último dan una contribución a la integral que, en el límite en el que estamos

trabajando, tiende a cero. Para ello detallamos el cálculo de las integrales de algunos de ellos, el resto se tratan de manera similar. La primera de las integrales es

$$I_1 = \frac{1}{E_1 E_2} \int_0^{E_1} d\eta \int_0^{E_2} d\lambda Y_4(\eta, E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda). \quad (\text{C.7})$$

Aquí utilizamos el hecho de que las funciones de agrupamiento caen rápidamente a cero cuando sus argumentos crecen, es decir, que los argumentos deben ser suficientemente pequeños para que la contribución a la integral sea significativa,

$$\begin{aligned} |\eta - \lambda| &\leq \varepsilon, & |E_1 - E_2 + \lambda - \eta| &\simeq |\lambda - \eta| \leq \varepsilon \\ |E_1 - \lambda - \eta| &\leq \varepsilon, & |E_2 - \lambda - \eta| &\leq \varepsilon \\ |E_1 - 2\eta| &\leq \varepsilon, & |E_2 - 2\lambda| &\leq \varepsilon \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

donde ε es una cantidad de energía suficientemente pequeña ($\varepsilon \ll E_1, E_2$) y se ha utilizado el hecho de que E_1 y E_2 son lo bastante próximas ($|E_1 - E_2| \ll \varepsilon$). Entonces podemos escribir

$$I_1 \simeq \frac{1}{E_1 E_2} \int_{E_1/2-\varepsilon/2}^{E_1/2+\varepsilon/2} d\eta \int_{E_2/2-\varepsilon/2}^{E_2/2+\varepsilon/2} d\lambda Y_4(\eta, E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda). \quad (\text{C.9})$$

Teniendo en cuenta la propiedad de las funciones de agrupamiento a k -puntos $|Y_k(E_1, E_2, \dots, E_k)| < k!$ se tiene

$$\begin{aligned} I_1 &\leq \frac{1}{E_1 E_2} \int_{E_1/2-\varepsilon/2}^{E_1/2+\varepsilon/2} d\eta \int_{E_2/2-\varepsilon/2}^{E_2/2+\varepsilon/2} d\lambda |Y_4(\eta, E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda)| \\ &\leq 3! \frac{\varepsilon^2}{E_1 E_2}. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

La segunda integral es

$$I_2 = \frac{1}{E_1 E_2} \int_0^{E_1} d\eta \int_0^{E_2} d\lambda Y_3(E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda) \quad (\text{C.11})$$

Usando que

$$Y_3(E_1 - \eta, \lambda, E_2 - \lambda) = Y_3(0, E_1 - \eta - \lambda, E_2 - 2\lambda) \quad (\text{C.12})$$

y el cambio de variables $\alpha = E_2 - 2\lambda$ y $\beta = E_1 - \eta - \lambda$ se obtiene

$$I_2 = \frac{1}{2E_1 E_2} \int_{-E_2}^{E_2} d\alpha \int_{\alpha/2-E_2/2}^{E_1-E_2/2+\alpha/2} d\beta Y_3(0, \beta, \alpha), \quad (\text{C.13})$$

donde el dominio de integración se aproxima a \mathbb{R}^2 según crecen E_1 y E_2 . Así, haciendo uso de la relación entre funciones Y_k consecutivas válida para las tres colectividades clásicas y sus interpolaciones (FRENCH *et al.*, 1988)

$$\int_{-\infty}^{\infty} Y_n(x_1, \dots, x_n) dx_n = (n-1)Y_{n-1}(x_1, \dots, x_{n-1}) \quad (\text{C.14})$$

se llega a

$$I_2 \simeq \frac{1}{E_1 E_2}. \quad (\text{C.15})$$

El tercer tipo de integral es

$$I_3 = \frac{1}{E_1 E_2} \int_0^{E_1} d\eta \int_0^{E_2} d\lambda Y_2(2\eta - E_1) Y_2(2\lambda - E_2). \quad (\text{C.16})$$

Utilizando el cambio de variables $\alpha = 2\eta - E_1$ y $\beta = 2\lambda - E_2$

$$\begin{aligned} I_3 &= \frac{1}{4E_1 E_2} \int_{-E_1}^{E_1} d\alpha \int_{-E_2}^{E_2} d\beta Y_2(\alpha) Y_2(\beta) \\ &= \frac{1}{4E_1 E_2} \left(1 + O\left(\frac{1}{E_1}\right)\right) \left(1 + O\left(\frac{1}{E_2}\right)\right), \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

donde en la última ecuación se ha hecho uso de las integrales conocidas de las funciones de agrupamiento a dos puntos de las colectividades clásicas (МЕНТА, 1991).

Por último, la cuarta integral es

$$\begin{aligned} I_4 &= \frac{1}{E_1 E_2} \int_0^{E_1} d\eta \int_0^{E_2} d\lambda Y_2(2\eta - E_1) \\ &= \frac{1}{E_1} \int_0^{E_1} d\eta Y_2(2\eta - E_1), \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

y con el cambio de variables $\mu = 2\eta - E_1$

$$\begin{aligned} I_4 &= \frac{1}{2E_1} \int_{-E_1}^{E_1} Y_2(\mu) d\mu = \frac{1}{E_1} \int_0^{E_1} Y_2(\mu) d\mu \\ &= \frac{1}{E_1} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\nu\pi^2 E_1} + O\left(\frac{1}{E_1^2}\right) \right], \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

donde ν es el parámetro de repulsión.

Como se puede ver las cuatro expresiones (C.10), (C.15), (C.17) y (C.19) tienden a cero en el límite $E_1, E_2 \gg 1$. Y lo mismo ocurre también con el resto de términos de la integral que no detallamos aquí.

Entonces el comportamiento de la función de agrupamiento a dos puntos del sistema de dos partículas es en el límite en el que trabajamos

$$Y_2^{(2)}(E_1, E_2) \sim 0, \quad 0 < |E_1 - E_2| \ll E_1 + E_2. \quad (\text{C.20})$$

Bibliografía

- ÅBERG, S. (1990). *Phys. Rev. Lett.* **64**, 3119.
- ABRAMOWITZ, M. and STEGUN, I. A. (1972). *Handbook of Mathematical Formulas*. Dover Publications, New York.
- ARNOLD, V. I. (1978). *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer, New York.
- BENET, L., RUPP, T., and WEIDENMÜLLER, H. A. (2001). *Ann. Phys.* **292**, 67.
- BENET, L. and WEIDENMULLER, H. A. (2003). *J. Phys. A* **36**, 3569.
- BERKOVITS, R. and AVISHAI, Y. (1998). *Phys. Rev. Lett.* **80**, 568.
- BERRY, M. V. (1985). *Proc. R. Soc. Lond. A* **400**, 229.
- BERRY, M. V. and TABOR, M. (1977). *Proc. Roy. Soc. London A* **356**, 375.
- BLOCH, C. (1969). *Physique Nucléaire*. Gordon and Breach, New York.
- BOHIGAS, O. and FLORES, J. (1971a). *Phys. Lett. B* **34**, 261.
- BOHIGAS, O. and FLORES, J. (1971b). *Phys. Lett. B* **35**, 383.
- BOHIGAS, O., FLORES, J., FRENCH, J. B., GIANNONI, M. J., MELLO, P. A., and WONG, S. S. M. (1974). *Phys. Rev. C* **10**, 1551.
- BOHIGAS, O., GIANNONI, M. J., and SCHMIT, C. (1984). *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1.
- BOHIGAS, O., HAQ, R., and PANDEY, A. (1983). Fluctuation properties of nuclear energy levels and widths: comparison of theory with experiments. In BÖCKHOFF, K. H., editor, *Nuclear Data for Science and Technology*, page 809. Reidel, Dordrecht.
- BRODY, T. A. (1973). *Lett. Nuovo Cimento* **7**, 482.

- BRODY, T. A., FLORES, J., FRENCH, J. B., MELLO, P. A., PANDEY, A., and WONG, S. S. M. (1981). *Rev. Mod. Phys.* **53**, 385.
- CAMARDA, H. S. and GEORGOPULOS, P. D. (1983). *PRL* **50**, 492.
- CAURIER, E. and GRAMMATICOS, B. (1989). *PLA* **136**, 387.
- COHEN-TANNOUJDI, C., DIU, B., and LALOË, F. (1977). *Quantum Mechanics*, volume I. Wiley-Interscience, Francia.
- DEUS, S., KOCH, P. M., and SIRKO, L. (1995). *PRE* **52**, 1146.
- DUMITRIU, I. (2003). *Eigenvalue Statistics for Beta-Ensembles*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology.
- DUMITRIU, I. and EDELMAN, A. (2002). *J. Math. Phys.* **43**, 5830.
- DUMITRIU, I. and EDELMAN, A. (2006). *J. Math. Phys.* **47**, 063302.
- DYSON, F. J. (1962a). *J. Math. Phys.* **3**, 140.
- DYSON, F. J. (1962b). *J. Math. Phys.* **3**, 157.
- DYSON, F. J. (1962c). *J. Math. Phys.* **3**, 166.
- DYSON, F. J. and MEHTA, M. L. (1963). *J. Math. Phys.* **4**, 701.
- EINSTEIN, A. (1917). *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* **19**, 82.
- ELLEGAARD, C., GHUR, T., LINDEMANN, K., LORENSEN, H. Q., NYGARD, J., and OXBORROW, M. (1995). *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1546.
- FALEIRO, E., GÓMEZ, J. M. G., MOLINA, R. A., MUÑOZ, L., RELAÑO, A., and RETAMOS, J. (2004). *Phys. Rev. Lett.* **93**, 244101.
- FERNÁNDEZ-RAÑADA, A. (1994). *Dinámica clásica*. Alianza Editorial, Madrid.
- FISHMAN, S., RANGE, R. E., and GRINIASTY, M. (1989). *Phys. Rev. A* **39**, 1628.
- FLAMBAUM, V. V., GRIBAKINA, A. A., GRIBAKIN, G. F., and KOZLOV, M. G. (1994). *Phys. Rev. A* **50**, 267.
- FLAMBAUM, V. V., GRIBAKINA, A. A., GRIBAKIN, G. F., and PONOMAREV, I. V. (1999). *Physica D* **131**, 205.
- FLAMBAUM, V. V. and IZRAILEV, F. M. (1997). *Phys. Rev. E* **56**, 5144.

- FLORES, J., HOROI, M., MÜLLER, M., and SELIGMAN, T. H. (2001). *Phys. Rev. E* **63**, 026204.
- FRENCH, J. B., KOTA, V. K. B., PANDEY, A., and TOMSOVIC, S. (1988). *Ann. Phys. (N. Y.)* **181**, 198.
- FRENCH, J. B. and WONG, S. S. M. (1970). *Phys. Lett. B* **33**, 449.
- FRENCH, J. B. and WONG, S. S. M. (1971). *Phys. Lett. B* **35**, 5.
- FRIEDRICH, H. and WINTGEN, D. (1989). *Phys. Rep.* **183**, 37.
- GOLUB, G. and LOAN, C. V. (1996). *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore and London, third edition.
- GUHR, T., MÜLLER-GROELING, A., and WEIDENMÜLLER, H. A. (1998). *Phys. Rep.* **299**, 189.
- GUTZWILLER, M. (1990). *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer Verlag, Heidelberg.
- HAQ, R. U., PANDEY, A., and BOHIGAS, O. (1982). *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1086.
- HÖNIG, A. and WINTGEN, D. (1989). *PRA* **39**, 5642.
- ISHIWARA, J. (1915). *Tokyo Sugaku Buturigakkawi Kizi* **8**, 106.
- IZRAILEV, F. M. (1988). *Phys. Lett. A* **134**, 13.
- JACQUOD, P. and SHEPELYANSKY, D. L. (1997). *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1837.
- JALABERT, R. A., STONE, A. D., and ALHASSID, Y. (1992). *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3468.
- KOTA, V. K. B. (2001). *Phys. Rep.* **347**, 223.
- LEGRAND, O., SCHMIT, C., and SORNETTE, D. (1992). *Europhys. Lett.* **18**, 101.
- MANDELBROT, B. B. (1999). *Multifractals and 1/f Noise*. Springer, New York.
- MARKUS, C. M., RIMBERG, A. J., WESTERVELT, R. M., HOPKINS, P. F., and GOSSARD, A. C. (1992). *Phys. Rev. Lett.* **69**, 506.
- MEHTA, M. L. (1960). *Nucl. Phys.* **18**, 395.

- MEHTA, M. L. (1991). *Random Matrices*. Academic Press, second edition.
- MEHTA, M. L. and DYSON, F. J. (1963). *J. Math. Phys.* **4**, 713.
- MESSIAH, A. (1961). *Quantum Mechanics*, volume I. North Holland, Amsterdam.
- MOLINA, R. A., GÓMEZ, J. M. G., and RETAMOS, J. (2000). *Phys. Rev. C* **63**, 014311.
- MOLINA, R. A., RELAÑO, A., and RETAMOS, J. (2002). *PRE* **66**, 036209.
- MOLINA, R. A., ZUKER, A. P., RELAÑO, A., and RETAMOS, J. (2005). *PRC* **71**, 064317.
- MON, K. K. and FRENCH, J. B. (1975). *Ann. Phys.* **95**, 90.
- MONTAMBAUX, G., POLIBLANC, D., BELLISARD, J., and SIRE, C. (1993). *PRL* **70**, 497.
- ORMAND, W. E. and BROGLIA, R. A. (1992). *Phys. Rev. C* **46**, 1710.
- PERCIVAL, I. C. (1973). *JPB* **6**, L229.
- PERES, A., editor (1995). *Quantum Theory: Concepts and Methods*. Kluwer Academic, New York.
- RELAÑO, A., GÓMEZ, J. M. G., MOLINA, R. A., RETAMOS, J., and FALEIRO, E. (2002). *Phys. Rev. Lett.* **89**, 244102.
- RELAÑO, A., RETAMOS, J., FALEIRO, E., MOLINA, R. A., and ZUKER, A. P. (2006). *Phys. Rev. E* **73**, 026204.
- SCHUSTER, H. G. (1988). *Deterministic Chaos*. Springer Verlag.
- SHKLOVSKII, B. I., SHAPIRO, B., SEARS, B. R., LAMBRIANIDES, P., and SHORE, H. B. (1993). *PRB* **47**, 11487.
- SILVESTROV, P. G. (1998). *Phys. Rev. Lett.* **58**, 5629.
- SINAI, Y. G. and BUNIMOVICH, L. A. (1980). *Commun. Math. Phys.* **78**, 247.
- SO, P., ANLAGE, S. M., OTT, E., and OERTER, R.Ñ. (1995). *PRL* **74**, 2662.
- SOMMERFELD, A. (1916). *Ann. Phys. (Leipzig)* **51**, 125.

- SONG, P. H. (2000). *Phys. Rev. E* **62**, 7575.
- SREDNICKI, M. (2002). *Phys. Rev. E* **66**, 046138.
- STÖCKMANN, H. J. (1999). *Quantum Chaos: An Introduction*. Cambridge University Press, Cambridge, second edition.
- STOCKMANN, H. J. and STEIN, J. (1990). *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2215.
- STOFFREGEN, U., STEIN, J., STÖCKMANN, H. J., KUS, M., and HAAKE, F. (1995). *PRL* **74**, 2666.
- VERBAARSCHOT, J. J. M. and ZIRNBAUER, M. R. (1985). *J. Phys. A* **18**, 1093.
- WALPOLE, R. E., MYERS, R. H., and MYERS, S. L. (2001). *Probability and Statistics for Engineers and Scientists*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 6th edition.
- WEIGERT, S. (1992). *Physica A* **56**, 107.
- WIGNER, E. P. (1955a). *Ann. Math.* **62**, 548.
- WIGNER, E. P. (1955b). *Ann. Math.* **65**, 203.
- WILSON, W. (1915). *Phil. Mag.* **29**, 795.
- ZIMMERMANN, T., KÖPPEL, H., CEDERBAUM, L. S., PERSCH, G., and DEMTRÖDER, W. (1988). *Phys. Rev. Lett.* **61**, 3.
- ZUKER, A. P. (2001). *Phys. Rev. C* **64**, R021303.
- ZUKER, A. P., NDEUNA, L. W., NOWACKI, F., and CAURIER, E. (2001). *Phys. Rev. C* **64**, R021304.