1 Caos cuántico

1.1 Física clásica

- **Mecánica de Newton.**

  SINTESIS.Se puede desarrollar en términos del Hamiltoniano (H)=Energía cinetica (T) + energía potencial (V).

$$\begin{aligned} H &= T + V \\ &= \frac{1}{2m}p_x^2 + V(x) \end{aligned}$$

o bien del Langrangiano L

$$L = H - 2V$$

la ecuaciones de movimiento son:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p_x} \\ \dot{p}_x &= -\frac{\partial H}{\partial x} \end{aligned}$$

que pueden iterarse como un mapa.

Estas ecuaciones resultan de minimizar la Accion, definida como la integral del Lagrangiano a lo largo de la posible trayectoria fisica.

$$S(x, t; x_0, t_0) = \int_{(x_0,t_0)}^{(x,t)} L(x, p_x, t)\mathrm{d}x = \textit{mínimo}$$

Ejercicio: oscilador armónico: partícula de masa m sometida a la fuerza de un resorte de constante K, que se desplaza a lo largo de la coordenada x. Así el impulso resulta $p_x = m\ \dot{x}$ y $V(x) = -\frac{1}{2}Kx^2$; entonces $H = \frac{1}{2m}p_x^2 + V(x)$. Verificar que para este caso las ecuaciones de arriba se reducen a la Ley de Newton:

$$\ddot{x} = -Kx$$

Variables de Angulo y Acción.

Cuando se usan coordenadas particulares llamadas de de angulo y acción se definien de manera que se cumpla

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \frac{\partial H}{\partial J} = 0 \\ \dot{J} &= -\frac{\partial H}{\partial \theta} \end{aligned}$$

consecuentemente $\theta = \nu t + \beta$ donde β es una constante.

En particular para movimiento periódico se puede agregar el ángulo en un período

$$\frac{1}{\nu} = T = \oint dt = \oint \frac{\partial p}{\partial E} dq = \frac{\partial}{\partial E} \oint p dq$$

de la que resulta

$$J = \oint p dq$$

Esta accion no es la misma que se definio mas arriba.

- **Teoría electromagnética de Maxwell.**

  Describe el caracter ondulatorio de la luz.

- **Termodinámica.**

  Se justifica en la Mecánica Estadística desarrollada por Boltzmann. Necesita del chaos para justificar la ergodicidad, irreversibilidad y el decaimiento de estados particulares.

1.2 Conceptos básicos de la mecánica cuántica

- Emisión del cuerpo negro $\rightarrow$ Planck: $\Delta E = h\nu$ $\rightarrow$ CUANTOS
- Efecto fotoeléctrico $\rightarrow$ Einsten $\rightarrow$ FOTONES
- Dualidad onda-corpúsculo $\rightarrow$ De Broglie $\rightarrow$ $\lambda = h/p$
- Principio de incertidumbre $\rightarrow$ Heisenberg $\rightarrow$ $\Delta p \Delta q \geq h$, $\Delta E \Delta t \geq h$
- Cuantificacion de los niveles atómicos. Según Bohr se obtiene requiriendo la cuantizacion de la variable de acción de cada posible movimiento periódico en unidades de la constante de Planck h

$$h\ n = J = \oint p dq$$

Todas estas propiedades encuentra un marco mas fundamental en la Ecuación de Schrödinger, que describe la amplitud de probabilidad de encontrar una particula en la coordenada $\mathbf{r} = (x, y, z)$ al tiempo t

Estado del sistema $\rightarrow$ función de onda ψ $\rightarrow$ cumple la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(x, y, z) \right]}_{\widehat{H}\text{: operador hamiltoniano del sistema}} \psi$$

Para las soluciones estacionarias se factoriza la parte temporal $\rightarrow$ ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\widehat{H}\psi = E\psi$$

Interpretación de la función de onda $\rightarrow$ **PROBABILÍSTICA**

$$\psi^*\psi = \text{ densidad de probabilidad}$$

Ej: partícula en una caja de potencial.

la solución de la ecuación de Schrödinger tambien es equivalente a la integral sobre caminos de la Acción Classica:

$$\psi(x,t) = K(x,t;0,0)\psi(x,t)$$

con el propagador o funcion de Green definido como

$$K(x,t;0,0) = \sum_{\gamma[caminos} e^{\mathrm{i}S(x,t,x_0,t_0)/\hbar}$$

Esta expresión justifica el principio de mínima accion es decir la dinámica clasica que aparece si $\hbar \rightarrow 0$.

1.3 Correspondencia entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica.

Principio de correspondencia:

En todos los problemas la mecánica cuántica debe conducir en el límite $\hbar \rightarrow 0$ a los mismos resultados de la mecánica clásica.

Caos en la mecánica cuántica:

Para algunos autores no existe un análogo cuántico al caos clásico ya que, a diferencia con la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi, la de Schrödinger es lineal. Ahora bien, esta estructura puede cambiar mediante transformaciones adecuadas.

La diferencia fundamental entre ambas mecánicas es mas bien de tipo física y radica en la incertidumbre cuántica que reduce la complejidad de las trayectorias arbitrariamente próximas.

1.4 Cuantización semiclásica

A la hora de establecer la correspondencia entre mecáni clásica y cuántica es importante distinguir si estamos en un régimen regular o en uno caótico. En el primer caso todos los movimientos tienen lugar en un toro invariante, y la condición de cuantización está bien establecida mediante la fórmula de EBK (Einsten-Brillouin-Keller)

$$\underbrace{\int_{C_2} \sum p_i \, \mathrm{d}q}_{\text{información clásica}} = \underbrace{h\left(n_j + \frac{\alpha_j}{4}\right)}_{\text{condición cuántica}}$$

Función de onda semiclásica asociada WKB (Wenstrel,Kramers, Brillouin,)

$$\psi = \sum A_i \, \mathrm{e}^{\alpha_i/n}$$

En el caso del movimiento caótico no son aplicables éstas fórmulas ya que se basan en la existencia de toros invariantes → Procedimiento de cuantización semiclásico para el que no es necesario que la dinámica del sistema sea integrable: Fórmula de la traza de Gutzwiller.

1.5 Fórmula de la traza de Gutzwiller

Basado en la función de Green mecanocuántica → $G(\overrightarrow{q}', \overrightarrow{q}, E)$: amplitud de probabilidad de que una partícula con energía E se mueva de la posición $\overrightarrow{q}$ a la $\overrightarrow{q}\prime$´.

Cálculo de la traza

$$g(\varepsilon) = \int G(\overrightarrow{q}, \overrightarrow{q}, \varepsilon) \, \mathrm{d}\overrightarrow{q} = \sum_j \frac{1}{\varepsilon - E_j}$$

$$g = \sum^{O.P.} \frac{T_p}{i} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\exp\left[\mathrm{i}rS_p/h - \mathrm{i}\pi r\mu_p/2\right]}{|\det\left[(M_p)^r - 1\right]|^2}$$

2 Criterios cualitativos para identificar el caos en la mecánica cuántica

2.1 Estructura nodal de la función de onda

Busca asociar el comportamiento regular con reglas en la distribución espacial de los nodos de la función de onda. El caos sería la ausencia de tales reglas

La función presenta cicatrices o “scars”

Crítica: depende del sistema de coordenadas utilizado.

2.2 Método de los coeficientes dominantes en la función de onda

$$\psi = \sum c_i \phi_i$$

donde $\phi_i$es una función de onda correspondiente al Hamiltoniano sin perturbar.

Si $c_i \geq 1/\sqrt{2} \rightarrow$ Estado regular

Críticas: depende de una elección afortunada de la base y no dice nada de la naturaleza de los estados que no cumplen ésta condición.

2.3 Método de las segundas diferencias en la energía de los niveles

$$H + \Sigma$$

donde$\Sigma = \alpha I$ con I es un operador y α es la intensidad de la perturbación (pequeña).

$$\Delta^2 E = [[E(\varepsilon + \Delta\varepsilon) - E(\varepsilon)] - [E(\varepsilon) - E(\varepsilon - \Delta\varepsilon)]]$$

Si $\Delta^2 E$ grande $\rightarrow$ CAÓTICO
Si $\Delta^2 E$ pequeño $\rightarrow$ REGULAR

Crítica: $\Delta^2 E$ puede ser grande debido a un cruce extremadamente evitado $\substack{\cup \\ \cap}$ entre estados regulares.

2.4 Los cruces evitados que solapan

Diagrama de E_α versus la perturbación α con cruces extremadamente evitados $\substack{\cup \\ \cap}$ $\rightarrow$ mezcla de autofunciones $\rightarrow$ CAOS

Densidad de estados de energia:

$$N(\varepsilon) = \frac{1}{\Delta}$$

con Δ es espaciamiento tipico a la energia ε.

La separación entre dos niveles sucesivos es $\delta E = E_{i+1} - E_i$

Llamamos s a la variable que represeta esta separacion normalizada a la densidad de energias:

$$s = \frac{\delta E}{\Delta}$$

2.5 Distribución del espaciado entre niveles vecinos

- Sistema regular → distribución de Poisson

$$P(s) = \exp(-s)$$

Máximo de esta probabilidad → espaciado cero

⇒ en sistemas de comportamiento regular los niveles de energía tienden a venir agrupados en clusters, lo que es típico de la degeneración que presentan éstos sistemas.

- Sistema caótico → **distribución de Wigner-Dyson (ortogonal)**

$$P(\Delta E) = \frac{\pi}{2} s \exp(-s^2\pi/4)$$

Caótico → probabilidad de encontrar niveles degenerados es nula.

Ejemplo: Distribución de diferencias entre niveles contiguos para los primeros 900 estados vibracionales de la molécula de LiCN → Intermedia entre Poisson y Wigner → se puede ajustar a una distribución de Brody con $\beta = 0.75$

Distribución de Brody

$$P(s) = (1+\beta)\alpha s^{\beta}(-\alpha s^{1-\beta})$$

$$\alpha = \Gamma\left(\frac{2+\beta}{1+\beta}\right)^{1+\beta}$$

Si $\beta = 0$ → Poisson

Si $\beta = 1$ → Wigner-Dyson

3 Representación en el espacio de fases de la mecánica cuántica

Función de Wigner

$$W(\overrightarrow{p}, \overrightarrow{q}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{d}\overrightarrow{x}\ \exp(\mathrm{i}\overrightarrow{p}\overrightarrow{x})\ \psi\left(\overrightarrow{q} - \frac{\overrightarrow{x}}{2}\right)\psi^*\left(\overrightarrow{q} + \frac{\overrightarrow{x}}{2}\right)$$

Propiedades deseables:

$$\left.\begin{array}{l} \int W(p,q)\mathrm{d}p = |\langle q|\psi\rangle|^2 \\ \int W(p,q)\mathrm{d}q = |\langle p|\psi\rangle|^2 \end{array}\right\}\text{densidad de probabilidad marginal cuántica}$$

correcta

En el límite clásico ($\hbar \to 0$)

W cumple con el teorema de Liuville

W tiende a una delta de Dirac centrada en el toro clásico

Interpretación $\rightarrow W$ función de densidad de probabilidad en el espacio de fases

Propiedades no deseables (que cuestionan ésta interpretación)

W puede ser < 0

$W = W(p, q)$ está definida en puntos precisos del espacio de fases$\Rightarrow$ es incosistente con el principio de incertidumbre.

Éstos inconvenientes para interpretar la función de Wigner como una densidad de probabilidad desaparecen si se promedia W en regiones del espacio de fases cuyo voumen sea del orden $\hbar^{2N}$

Cuando se utiliza una función de peso gaussiano para realizar éste promedio, se obtiene la función de Husimi.

Con la función de Husimi se puede calcular la Superficie de Sección de Poincaré cuántica.

Ejemplo: Distribución de ceros de la función de Husimi para un sistema realista (LiCN) que presenta anarmonicidad.

Estados regulares $\rightarrow$ Ceros sobre una linea($P_\psi = 0$). ceros sobre nodos de ψ

Estados irregulares $\rightarrow$ ceros distribuidos uniformemente sobre el espacio de fases

Estados de cicatriz $\rightarrow$ ceros sobre una curva escepto un n^{o}de ellos que se situan en puntos fijos