

Universidad de Oviedo

Facultad de Ciencias

PCEO Grado en Matemáticas / Grado en Física

Trabajo de Fin de Grado en Física

Introducción al caos cuántico

Autora: Inés Vilanova de Diego

Supervisado por:

Antón Fernández Faedo

Curso 2023-2024

Índice general

Introducción	5
1. Caos en sistemas clásicos y cuánticos	7
1.1. Sistemas dinámicos	7
1.1.1. Conceptos básicos de sistemas dinámicos	7
1.1.2. Movimientos cuasiperiódicos	11
1.1.3. Exponentes de Lyapunov	16
1.2. Sistemas hamiltonianos	20
1.2.1. Ecuaciones de Hamilton	20
1.2.2. Teorema de Liouville y estructura simpléctica	22
1.2.3. Sistemas integrables	25
1.2.4. Teorema <i>KAM</i>	29
1.2.5. Estabilidad lineal de las órbitas periódicas	32
1.3. Sistemas cuánticos	35
1.3.1. Postulados de la Mecánica Cuántica y Ecuación de Schrödinger	35
1.3.2. Operadores conjugados y transformada de Fourier	36
1.3.3. Principio de indeterminación	38
1.3.4. Teorema de Ehrenfest y Principio de Correspondencia	41
1.3.5. Operadores de Floquet	43
2. El <i>Kicked rotator</i>	47
2.1. El <i>kicked rotator</i> clásico	47

2.1.1.	Descripción del problema	47
2.1.2.	Reducción a la aplicación estándar de Chirikov	48
2.1.3.	Estabilidad lineal de las órbitas periódicas	51
2.1.4.	Caos global: criterio de Chirikov	54
2.1.5.	Difusión del momento	56
2.2.	El <i>Kicked rotator</i> cuántico	59
2.2.1.	Evolución de las funciones de onda	59
2.2.2.	Tiempo de Ehrenfest y Tiempo de Heisenberg	63
	Conclusiones	69
	Bibliografía	72

Introducción

Un sistema dinámico es un modelo matemático que describe la evolución temporal de un proceso. Al estudiar un problema físico desde el punto de vista de los sistemas dinámicos, nuestra finalidad es entender el comportamiento a largo plazo del sistema, identificando observables clave y la dependencia de las soluciones obtenidas respecto a las condiciones iniciales. Este Trabajo de Fin de Grado tiene como objetivo proporcionar una introducción a los fundamentos de los sistemas dinámicos aplicados a los sistemas hamiltonianos clásicos y cuánticos; en particular, nos centraremos en el estudio de sistemas con dinámica caótica.

Desde el punto de vista clásico, un estado está definido por un conjunto de coordenadas generalizadas que evolucionan en el tiempo según las ecuaciones de Hamilton. Supongamos que tenemos un sistema unidimensional descrito por una coordenada espacial x y su momento p_x . Para cada posible condición inicial $(x_0, p_{x,0})$, resolviendo las ecuaciones de Hamilton obtenemos la trayectoria que sigue el sistema, y la proyección de esta solución en el plano $(x_0, p_{x,0})$ es una curva que llamaremos órbita y que denotamos $\gamma_{x_0, p_{x,0}}$ (representada en rojo en la Figura 1).

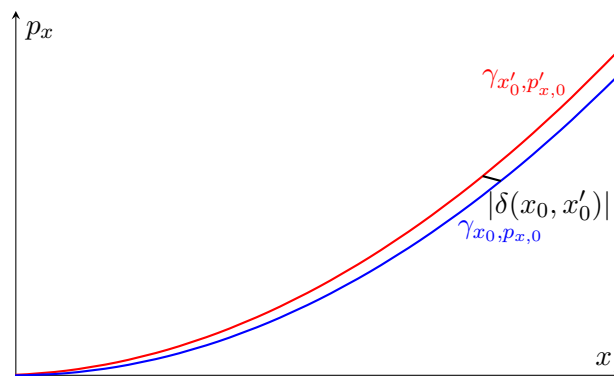


Figura 1: Órbitas en un espacio de fases dado por las coordenadas (x, p_x) .

Nuestro objetivo es analizar no tanto la solución concreta en un instante dado, sino la tendencia cualitativa de las trayectorias: si las soluciones son periódicas (las órbitas son curvas cerradas), si tienden a un punto atractor o si divergen, entre otros posibles comportamientos. En este contexto, podemos entender que la idea intuitiva de que un sistema sea caótico es que dos trayectorias infinitesimalmente muy cercanas se separen de forma exponencial en el tiempo.

En efecto, supongamos que tenemos otra órbita dada por una condición inicial $(x'_0, p'_{x,0})$ muy cercana a $(x_0, p_{x,0})$ (representada en azul en la Figura 1) y nos interesamos por la evolución de la separación entre las órbitas, que denotamos $|\delta(x_0, x'_0)|$. Si el sistema tiene sensibilidad exponencial a las condiciones iniciales, entonces un pequeño error en la medida de la condición inicial o una propagación del error debida al cálculo numérico de las posibles soluciones nos pueden dar órbitas con tendencias completamente distintas.

Cuando estudiamos los sistemas hamiltonianos clásicos, las ecuaciones de Hamilton nos sitúan en las condiciones usuales de estudio de sistemas dinámicos. Tenemos una partícula o conjunto de partículas descritas por variables de posición y momento y las proyecciones de las soluciones a las ecuaciones de Hamilton en el espacio de fases, es decir, las órbitas, serán nuestro objeto de estudio. Ahora bien, en el formalismo cuántico no tenemos estados definidos en una posición o momentos en concreto, ni órbitas cuya separación tiene sentido estudiar. Los estados cuánticos están descritos por funciones de onda y las coordenadas generalizadas x, p_x son sustituidas por operadores \hat{x}, \hat{p}_x .

Ahora bien, según el Principio de Correspondencia, bajo ciertos límites de los parámetros del sistema, la Mecánica Cuántica debería proporcionar los mismos resultados que la descripción clásica del sistema. Además, el Teorema de Ehrenfest nos proporciona una cota superior del tiempo a partir del cual el comportamiento del sistema clásico y cuántico diverge (conocido como tiempo de Ehrenfest), asumiendo que partimos de paquetes de onda suficientemente estrechos y estableciendo una analogía entre la separación de órbitas $|\delta(x_0, x'_0)|$ y la indeterminación de un operador $\Delta\hat{x}$. Las preguntas que nos planteamos, por lo tanto, son: ¿cómo se comporta un sistema cuántico si su dinámica es caótica desde el punto de vista clásico? ¿Para qué valores de los parámetros del sistema e intervalos de tiempo la descripción clásica coincide con la cuántica?

En el primer capítulo, estableceremos las bases teóricas de los sistemas dinámicos y definiremos formalmente qué entendemos por un sistema caótico, utilizando como herramienta los exponentes de Lyapunov. Aplicaremos estos conceptos a los sistemas descritos por las ecuaciones de Hamilton, estudiando aspectos como órbitas cuasiperiódicas, sistemas integrables y el teorema *KAM*. Posteriormente, presentaremos los fundamentos de la Mecánica Cuántica que nos permitirán describir la evolución de estos sistemas desde un enfoque cuántico.

En el segundo capítulo, nos centraremos en un sistema específico, el *kicked rotator*, un modelo paradigmático en la teoría del caos en sistemas hamiltonianos clásicos. Analizaremos su dinámica, propiedades y características distintivas, y explicaremos por qué se considera caótico. Finalmente, estudiaremos este sistema desde un punto de vista cuántico y exploraremos fenómenos no observados en el caso clásico como la localización del momento y el tiempo a partir del cual ocurre esta localización.

Capítulo 1

Caos en sistemas clásicos y cuánticos

1.1. Sistemas dinámicos

En primer lugar, estableceremos las bases teóricas de los sistemas dinámicos que utilizaremos para estudiar los sistemas hamiltonianos clásicos y cuánticos. Comenzaremos abordando los conceptos fundamentales de los sistemas continuos y discretos. A continuación, desarrollaremos el concepto de cuasiperiodicidad, un fenómeno observable en ciertos sistemas dinámicos y que resultará crucial para el análisis de los sistemas hamiltonianos. En este contexto, estableceremos también el concepto de número de rotación, una herramienta matemática fundamental que nos permitirá caracterizar y estudiar estos sistemas.

A continuación, introduciremos los exponentes de Lyapunov, que son indicadores clave en la teoría de sistemas dinámicos, puesto que nos ayudarán a definir y entender qué se considera un sistema caótico. Los exponentes de Lyapunov miden la tasa de separación exponencial de trayectorias infinitesimalmente cercanas en el espacio de fases, proporcionando una medida cuantitativa del caos en un sistema.

Como referencias generales en esta primera sección hemos utilizado [4], [14], [18] y [19], y en menor medida, [12] y [16].

1.1.1. Conceptos básicos de sistemas dinámicos

Comenzamos definiendo qué entendemos por un sistema dinámico continuo y discreto. Además, explicaremos cómo estudiar los sistemas continuos utilizando sistemas discretos utilizando aplicaciones de tiempo \mathcal{T} y aplicaciones de primer retorno de Poincaré. Como referencias para esta parte hemos seguido [4], [18] y [12].

Un *sistema dinámico* es una descripción matemática de la evolución de un estado en función del tiempo. Supongamos que tenemos N variables (x_1, \dots, x_N) que describen un sistema físico

y una condición inicial $x_i(0) = x_{i,0} \in \mathbb{R}$ para todo $i \in \{1, \dots, N\}$. Nuestro objetivo entonces es encontrar la dependencia temporal de las N variables, verificando esta condición inicial.

Desde el punto de vista *continuo*, un sistema dinámico viene dado por un sistema de N ecuaciones diferenciales:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ \frac{dx_2}{dt} = f_2(x_1, x_2, \dots, x_N) \\ \vdots \\ \frac{dx_N}{dt} = f_N(x_1, x_2, \dots, x_N). \end{cases}$$

Podemos expresar el sistema anterior como una única ecuación de la forma $\frac{dx(t)}{dt} = F(x(t))$ donde la solución $x : t \in (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}^N$ es una función de N componentes. Supongamos que $F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ es una función de clase C^1 (es decir, es continua, todas sus derivadas primeras existen y son continuas). Entonces, para cada condición inicial $x_0 \in \mathbb{R}^n$, existe una única solución del *problema de Cauchy*

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x) \\ x(0) = x_0. \end{cases}$$

Consideraremos siempre ecuaciones diferenciales *autónomas*, es decir, la función F no depende de la variable temporal t . Si las soluciones son de la forma $x : t \in (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}^N$, entonces el *espacio de fases* está contenido en \mathbb{R}^N y las proyecciones γ de las soluciones en el espacio de fases se denominan *órbitas*.

Además, denominamos *flujo* a una aplicación

$$\begin{aligned} \phi : D \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N &\rightarrow \mathbb{R}^N \\ (t, x_0) &\mapsto \phi(t, x_0), \end{aligned}$$

de manera que, fijo $x_0 \in \mathbb{R}^N$, la función $\phi : (\cdot, x_0) \in I_{x_0} \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^N$ es solución del problema con condición inicial $x(0) = x_0$.

Por ejemplo, supongamos que estamos estudiando un péndulo simple. Podemos estudiar este sistema como un problema de Cauchy formado por un sistema de dos ecuaciones diferenciales de primer orden y una condición inicial.

Denotamos $\theta(t)$ el ángulo que forma el péndulo con la vertical en el tiempo t y $\omega(t)$ la velocidad angular en este instante. Las condiciones iniciales son $\theta(0) = \theta_0$ y $\omega(0) = \omega_0$ y los parámetros del sistema son g , la aceleración de la gravedad, y l , la longitud del péndulo. El problema,

representado en la Figura 1.1, está descrito por el siguiente sistema

$$\begin{cases} \frac{d\theta}{dt} = \omega, \\ \frac{d\omega}{dt} = -\frac{g}{l} \sin(\theta), \\ \theta(0) = \theta_0, \\ \omega(0) = \omega_0. \end{cases}$$

Habitualmente, cuando estudiamos un sistema dinámico no nos interesamos tanto por la solución explícita de las ecuaciones diferenciales para cada condición inicial, sino que buscamos un análisis cualitativo: queremos estudiar para qué condiciones iniciales o para qué parámetros del sistema obtenemos órbitas cerradas, o bien que convergen hacia un punto, entre otros posibles observables.

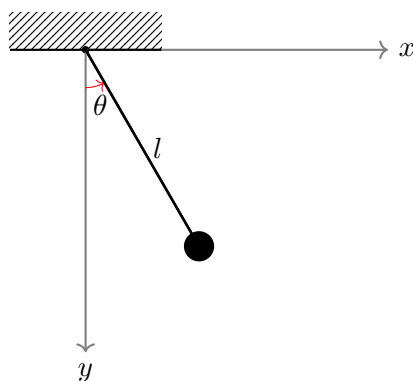


Figura 1.1: Péndulo de longitud l y descrito por un ángulo θ .

Por otro lado, un sistema dinámico *discreto* de dimensión N viene dado por una aplicación $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ que define una sucesión dada por la ley de recurrencia

$$x_{n+1} = f(x_n),$$

con $x_n = (x_n^1, \dots, x_n^N) \in \mathbb{R}^N$, $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Partiendo de un estado inicial x_0 , aplicando f sucesivamente ($x_1 = f(x_0)$, $x_2 = f(x_1)$, ...) obtenemos una sucesión de estados $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N} \cup \{0\}}$.

Un ejemplo clásico de sistema dinámico discreto que además nos servirá también para introducir la dinámica caótica es la *aplicación logística*. Fue introducida para estudiar crecimiento de poblaciones en Ecología y viene dada por la siguiente expresión

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n). \quad (1.1)$$

En este caso, x_n denota la población de una especie en el tiempo n , normalizada entre 0 y 1 (entendiendo que $x_n = 1$ es la población máxima que puede alcanzar la especie). Por otro lado,

$r \in (0, 4)$ es un parámetro que representa la tasa de crecimiento de la especie. Se puede demostrar (ver [4], [14] y [16] entre otros) que en función del parámetro r la población tiende a extinguirse, estabilizarse en torno a un punto fijo, oscilar entre dos valores o manifestar comportamientos caóticos, como comprobaremos numéricamente más adelante.

En ocasiones, podemos estudiar sistemas dinámicos continuos mediante sistemas dinámicos discretos. Con este objetivo, definiremos dos tipos de funciones: la aplicación de tiempo \mathcal{T} y la aplicación de Poincaré.

En primer lugar, queremos estudiar sistemas dinámicos continuos en N dimensiones mediante sistemas discretos N -dimensionales. Para ello, consideramos la aplicación $\mathcal{M}_{\mathcal{T}}$, denominada *aplicación de tiempo* \mathcal{T} . Supongamos que $V \subset \mathbb{R}^N$ es el espacio de fases, es decir, para cada $x_0 \in V$, existen $x : [0, \infty) \rightarrow V$ una solución del sistema diferencial continuo y un instante $t_0 \in [0, \infty)$ de forma que $x_0 = x(t_0)$. Entonces, la aplicación $\mathcal{M}_{\mathcal{T}}$ se define de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\mathcal{T}} : V &\rightarrow V \\ x_0 &\mapsto \mathcal{M}_{\mathcal{T}}(x_0) = x(t_0 + \mathcal{T}). \end{aligned}$$

La imagen por $\mathcal{M}_{\mathcal{T}}$ de cada punto $x_0 = x(t_0)$ es el valor de la solución x en el instante $t_0 + \mathcal{T}$. La aplicación $\mathcal{M}_{\mathcal{T}}$ define entonces un sistema dinámico de N dimensiones, pues su dominio es V , un subconjunto de \mathbb{R}^N . Las aplicaciones de tiempo \mathcal{T} son de gran utilidad para estudiar hamiltonianos que si bien no son independientes del tiempo, sí son periódicos en t , como será el caso del *kicked rotator*, que estudiaremos en profundidad en el segundo capítulo.

Por otro lado, las aplicaciones de Poincaré permiten estudiar sistemas dinámicos de N dimensiones mediante sistemas discretos de $N - 1$ dimensiones. Denotamos ϕ el flujo asociado a la ecuación diferencial $\frac{dx}{dt} = F(x, t)$. Decimos que $\Sigma \subset \mathbb{R}^{N-1}$ es una *superficie transversal* al flujo si

$$F(x) \cdot n(x) = 0$$

para todo $x \in \Sigma$, donde $n(x)$ denota un vector normal a la superficie Σ en el punto x . Supongamos que Σ es una superficie transversal a ϕ y que existe $V \subset \Sigma$ un subconjunto de forma que, para cada $x \in V$, existe $\tau > 0$ tal que $\phi(\tau, x) \in V$. Es decir, para cualquier condición inicial existe cierto tiempo τ tal que la órbita *vuelve* a V . Definimos entonces

$$\tau_x = \min\{\tau > 0 : \phi(\tau, x) \in V\}.$$

De esta manera, la siguiente aplicación está bien definida:

$$\begin{aligned} P : V &\rightarrow \Sigma \\ x &\mapsto P(x) = \phi(\tau_x, x). \end{aligned}$$

La aplicación P se denomina *aplicación de primer retorno de Poincaré* o *aplicación de Poincaré*. En la Figura 1.2 tenemos una representación de su construcción. Si Σ es una superficie en un espacio de N dimensiones, entonces Σ y por tanto V es un conjunto de $N - 1$ dimensiones. Hemos por tanto reducido el estudio del problema inicial a un espacio de dimensión menor.

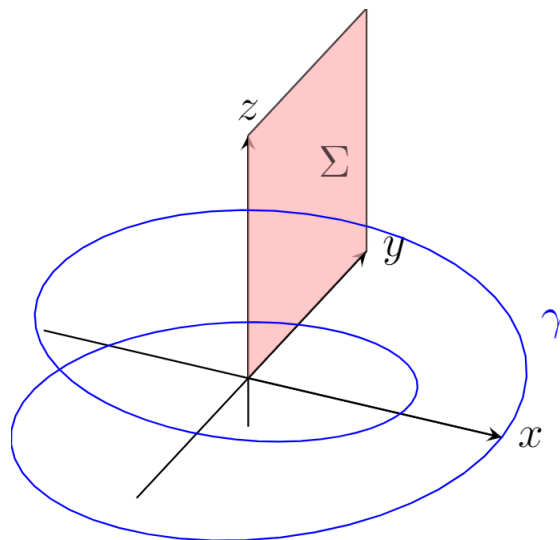


Figura 1.2: Construcción de la aplicación de Poincaré. sobre una superficie Σ . En este ejemplo, tenemos una solución periódica por lo que la órbita γ es una curva cerrada, que interseca Σ en dos puntos distintos.

En la siguiente sección, veremos un ejemplo de aplicación de Poincaré para caracterizar los movimientos periódicos o cuasiperiódicos de un flujo continuo en un toro 2-dimensional mediante sistemas dinámicos discretos en una circunferencia.

1.1.2. Movimientos cuasiperiódicos

A continuación, estudiaremos flujos continuos en el toro 2-dimensional y definiremos el concepto de órbita *cuasiperiódica*. Los movimientos cuasiperiódicos serán fundamentales cuando estudiemos los sistemas hamiltonianos clásicos y, en particular, cuando definamos los sistemas integrables. Como referencia para esta parte hemos utilizado [14], [16] y [18].

En un sistema dinámico podemos observar principalmente cuatro tipo de movimientos: puntos estacionarios, órbitas periódicas, atractores (caóticos o no) y movimientos cuasiperiódicos. No discutiremos la dinámica de atractores porque, como veremos, los sistemas hamiltonianos, que son los que trataremos, no pueden presentar atractores.

En un sistema dinámico continuo, los *puntos estacionarios* son soluciones constantes, $x(t) = x_0$ para todo t en el dominio de definición de x , por lo que las órbitas γ^t se corresponden con puntos en el espacio de fases. Por otro lado, una solución x es *periódica* si existe $T > 0$ de forma que

$x(t + T) = x(t)$ para todo t , y la órbita γ correspondiente es por tanto una curva cerrada. Los mismos conceptos se pueden aplicar a sistemas dinámicos discretos. Se dice que x es un *punto fijo de f* si $f(x) = x$. Por otro lado, dado $n \in \mathbb{N}$, se dice x es un *punto de periodo n de f* si $f^n(x) = x$. Es decir, x es un punto periodo n de f si y solo si x es un punto fijo de f^n .

Podemos entender un movimiento cuasiperiódico como una *mezcla* de movimientos periódicos con distintas frecuencias fundamentales. Recordemos que una función f es periódica si existe $T > 0$ tal que $f(t + T) = f(t)$. Una función cuasiperiódica en una variable t se puede expresar a partir de una función periódica en m variables con $m \in \mathbb{N}, m > 1$. Es decir, la función f es de la forma $f(t) = G(t_1, \dots, t_m)$, donde existen $\{T_1, \dots, T_m\} \in \mathbb{R}^+$ verificando

$$G(t_1 + T_1, \dots, t_m + T_m) = G(t_1, \dots, t_m).$$

Además, para que el movimiento sea cuasiperiódico debemos imponer también que las frecuencias $\Omega_i = \frac{2\pi}{T_i}$ sean *inconmensurables*, lo que significa que, para cada $n_1, \dots, n_m \in \mathbb{Z}$,

$$n_1\Omega_1 + \dots + n_m\Omega_m = 0$$

si y solo si $n_i = 0$ para todo $i \in \{1, \dots, m\}$. En estas condiciones, hablaremos de *cuasiperiodicidad de orden m* . Nos centraremos en el caso $m = 2$. Es inmediato ver que, para una solución periódica, la forma geométrica de la órbita correspondiente en el espacio de fases es una curva cerrada. Las órbitas cuasiperiódicas no se cierran, pero están confinadas en un toro, como veremos a continuación. Sea $x(t)$ una solución cuasiperiódica del sistema dinámico

$$\frac{dx(t)}{dt} = \tilde{F}(x(t)).$$

Como $x(t)$ es cuasiperiódica de orden 2, existe una función G de forma que $x(t) = G(t_1, t_2)$ y $G(t_1 + T_1, t_2 + T_2) = G(t_1, t_2)$. Dado que G es periódica, podemos utilizar variables angulares para describirla, redefiniendo los argumentos

$$\theta_i = \Omega_i t_i \quad \text{mód } 2\pi \tag{1.2}$$

para $i \in \{1, 2\}$, de forma que $x = G(\theta_1/\Omega_1, \theta_2/\Omega_2)$. Tenemos dos variables angulares en $[0, 2\pi)$. Especificar un ángulo es equivalente a especificar un punto en una circunferencia; cuando tenemos dos ángulos, cada par (θ_1, θ_2) describe un punto en un toro. Fijo un valor de θ_2 , el parámetro θ_1 describe un punto en una circunferencia inscrita en el toro; nos referiremos entonces a la variación de θ_1 como la rotación en la *dirección corta* del toro; análogamente, fijo θ_1 , consideraremos la variación de θ_2 como la variación en la *dirección larga*. Los ángulos θ_1, θ_2 están representados en la Figura 1.3.

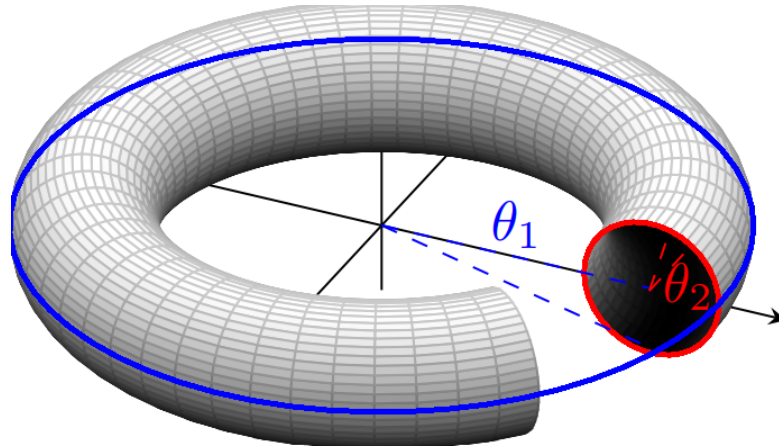


Figura 1.3: Toro de orden dos definido por los ángulos θ_1, θ_2 . En azul, representamos una circunferencia inscrita en el toro que representa la variación en la dirección larga; en rojo, tenemos otra circunferencia inscrita en el toro, que se corresponde con la variación en la dirección corta.

Hemos obtenido que $x = G(\theta_1/\Omega_1, \theta_2/\Omega_2)$ describe la ecuación de un toro en el espacio de fases. El caso de orden $m \in \mathbb{N}$ es una generalización trivial, obtendríamos un toro de m dimensiones. Las ecuaciones (1.2) se pueden expresar mediante el sistema diferencial

$$\begin{cases} \frac{d\theta_1}{dt} = \Omega_1 \\ \frac{d\theta_2}{dt} = \Omega_2. \end{cases}$$

Para caracterizar la dinámica de este sistema, utilizaremos una aplicación de Poincaré. Para cada condición inicial $(\theta_1^0, \theta_2^0) \in \mathbb{T}^2$, la solución del sistema es

$$\begin{cases} \theta_1(t) = (\theta_1^0 + \Omega_1 t) \text{ mód } 2\pi \\ \theta_2(t) = (\theta_2^0 + \Omega_2 t) \text{ mód } 2\pi. \end{cases}$$

Consideremos la superficie $\Sigma = \{(\theta_1, 0) : \theta_1 \in [0, 2\pi)\} \subset \mathbb{T}^2$, es decir, Σ es una circunferencia inscrita en el toro. Tenemos entonces una aplicación constante F

$$\begin{aligned} F : \mathbb{T}^2 &\rightarrow \mathbb{T}^2 \\ \theta &\mapsto F(\theta) = (\Omega_1, \Omega_2), \end{aligned}$$

de forma que el campo viene dado por $\frac{d\theta}{dt} = F(\theta)$. Es claro que Σ es una superficie normal al flujo, pues sus vectores normales son de la forma $n = (0, \alpha)$ y

$$n \cdot F = (0, \alpha) \cdot (\Omega_1, \Omega_2) = \alpha \Omega_2 \neq 0.$$

Por otro lado, debemos comprobar que para cada $x \in \Sigma$ existe τ_x tal que $\phi(\tau_x, x) \in \Sigma$. En efecto, los elementos de Σ son de la forma $x = (\theta_1^0, 0)$ con $\theta_1^0 \in [0, 2\pi)$. Entonces, las soluciones del sistema de ecuaciones diferenciales son de la forma

$$\begin{cases} \theta_1(t) &= (\theta_1^0 + \Omega_1 t) \pmod{2\pi} \\ \theta_2(t) &= \Omega_2 t \pmod{2\pi} \end{cases}$$

Basta tomar $\tau_x = \frac{2\pi}{\Omega_2}$, de manera que

$$\phi(\tau_x, x) = (\theta_1^0 + \Omega_1 \tau_x, \Omega_2 \tau_x) = \left(\theta_1^0 + \Omega_1 \frac{2\pi}{\Omega_2}, \Omega_2 \frac{2\pi}{\Omega_2} \right) = \left(\theta_1^0 + 2\pi \frac{\Omega_1}{\Omega_2}, 0 \right) \in \Sigma,$$

Como Σ es una circunferencia inscrita en el toro, podemos identificar Σ con $\mathbb{S}^1 \subset \mathbb{C}$ la circunferencia unidad en el plano complejo. Es decir, para cada $x = (\theta_1, 0) \in \Sigma$ con $\theta_1 \in [0, 2\pi)$, definimos el número complejo $z = \exp(i\theta_1) \in \mathbb{S}^1$ y estudiaremos las aplicaciones $P : \Sigma \rightarrow \Sigma$ de Poincaré como aplicaciones $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{S}^1$ de la circunferencia unidad. Las aplicaciones de Poincaré como funciones de \mathbb{S}^1 resultan

$$\begin{aligned} f^{(\Omega_1, \Omega_2)} : \mathbb{S}^1 &\rightarrow \mathbb{S}^1 \\ z = \exp(i\theta) &\mapsto f^{(\Omega_1, \Omega_2)}(z) = \exp\left(i\left(\theta + \frac{\Omega_1}{\Omega_2} 2\pi\right)\right). \end{aligned}$$

Ahora bien, $f^{(\Omega_1, \Omega_2)}$ no depende del valor de Ω_1, Ω_2 , independientemente sino de su cociente. Definiendo $\omega_0 = \frac{\Omega_1}{\Omega_2} 2\pi$, tenemos una familia de aplicaciones en la circunferencia unidad dependiente de un solo parámetro:

$$\begin{aligned} f^{\omega_0} : \mathbb{S}^1 &\rightarrow \mathbb{S}^1 \\ z = \exp(i\theta) &\mapsto f^{\omega_0}(z) = \exp(i(\theta + \omega_0)). \end{aligned}$$

La familia anterior se denomina *rotación rígida de ángulo* ω_0 . Consideremos, por ejemplo, una rotación de ángulo $\frac{\pi}{2}$. Entonces, para cada $z \in \mathbb{S}^1$ se verifica que

$$\begin{aligned} f^4(z) &= f^4(\exp(i\theta)) = f^3\left(i\left(\theta + \frac{\pi}{2}\right)\right) = f^2(i(\theta + \pi)) = f\left(i\left(\theta + \frac{3\pi}{2}\right)\right) \\ &= \exp(i(\theta + 2\pi)) = \exp(i\theta) = z. \end{aligned}$$

Todos los puntos son por tanto de periodo 4. Esto se debe a que $\omega_0 = \frac{\pi}{2} = \frac{1}{4}(2\pi)$. En general, se

puede comprobar que si ω_0 es de la forma

$$\omega_0 = \frac{p}{q}2\pi,$$

con $p, q \in \mathbb{Z}$ primos entre sí y $q \neq 0$, entonces para cada condición inicial la órbita se cierra, y es periódica de periodo q . Por el contrario, si consideráramos una rotación rígida de ángulo $2\pi\alpha$ con $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$, ningún punto sería periódico, las órbitas nunca se cerrarían sino que cubrirían la circunferencia (ver [16]).

Hemos definido la aplicación de Poincaré para la superficie Σ , pero obtenemos exactamente el mismo resultado para cualquier otra circunferencia inscrita en el toro. Por lo tanto, estos mismos argumentos se pueden extender al sistema continuo. Caracterizamos entonces la dinámica de una órbita en el espacio de fases toroidal definiendo el *número de rotación*

$$R = \frac{\Omega_1}{\Omega_2} = \frac{\omega_0}{2\pi}.$$

Para interpretar R , notamos que $\Omega_1/2\pi$ es el número de rotaciones que hace la órbita en la dirección corta del toro por unidad de tiempo y $\Omega_2/2\pi$ el número de rotaciones en la dirección larga del toro por unidad de tiempo. Así, R representa el promedio de rotaciones de la órbita en la dirección corta por cada rotación en la dirección larga. Si R es racional, podemos expresar $R = \frac{p}{q}$ con $p, q \in \mathbb{Z}$, $q \neq 0$, p, q primos entre sí. Por lo tanto,

$$\frac{\Omega_1}{\Omega_2} = \frac{p}{q},$$

de donde

$$q\Omega_1 + p\Omega_2 = 0,$$

esto es, las frecuencias son *conmesurables*. En este caso, la órbita es periódica y p, q representan el número de rotaciones en las direcciones corta y larga que hace la órbita antes de cerrarse, respectivamente; en estas condiciones, el toro se denomina *resonante*; si R es irracional, las frecuencias Ω_1, Ω_2 son inconmesurables, el movimiento es cuasiperiódico y la órbita nunca se cierra, sino que cubre densamente el toro, que se denomina *cuasiperiódico*.

En la Figura 1.4 tenemos una representación gráfica del caso resonante, con $R = \frac{1}{2}$: la órbita se cierra tras realizar una rotación completa en la dirección corta por cada dos en la dirección larga. De esta forma, γ atraviesa la superficie Σ en dos puntos distintos, definiendo en ella una rotación rígida de ángulo π .

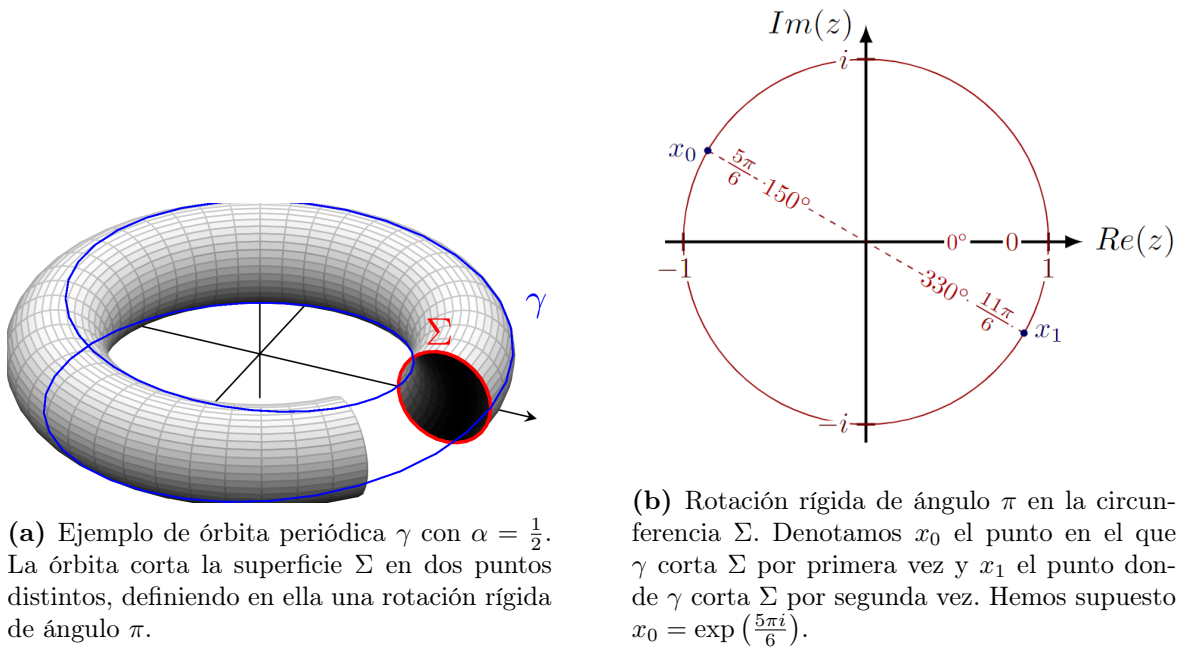


Figura 1.4: Construcción de una aplicación de Poincaré para una curva periódica en el toro.

1.1.3. Exponentes de Lyapunov

Durante esta sección, nuestro objetivo es definir qué entendemos, desde el punto de vista formal, por un sistema caótico. Comenzaremos estableciendo condiciones para la estabilidad local desde una aproximación lineal, definiendo indicadores para el caos local denominados *exponentes de Lyapunov*. Los definiremos para un sistema dinámico discreto, aunque los mismos conceptos se pueden extender al caso continuo. Como referencia para esta parte hemos utilizado principalmente [19] y, en menor medida, [14].

Una primera noción a tener en cuenta es la sensibilidad de un sistema a las condiciones iniciales. En efecto, parece intuitivo definir un sistema caótico como aquel en el que dos órbitas que pasan por dos puntos arbitrariamente próximos divergen de forma exponencial.

Consideremos un sistema dinámico discreto dado por una función f y una condición inicial x_0 . Supongamos que el punto x'_0 viene dado por una variación infinitesimal δ_0 de x_0 ,

$$x'_0 = x_0 + \delta_0,$$

con $0 < |\delta_0| \ll 1$. Definimos $O^+(x_0) = \{x_n = f^n(x_0) : n \in \mathbb{N}\}$, $O^+(x'_0) = \{x'_n = f^n(x'_0) : n \in \mathbb{N}\}$ las órbitas positivas de los puntos x_0, x'_0 . Denotamos δ_n la diferencia entre los puntos x_n, x'_n ,

$$\delta_n = x_n - x'_n,$$

de forma que la distancia entre las órbitas es $|\delta_n|$. Siguiendo la definición de [19], se dice que un sistema es *localmente caótico* si $|\delta_n|$ aumenta de forma exponencial respecto a $|\delta_0|$, esto es

$$|\delta_n| \sim |\exp(\nu n)|\delta_0, \quad (1.3)$$

donde $\nu > 0$ es el *incremento de inestabilidad lineal*, y en general depende de la condición inicial: $\nu = \nu(x_0)$. Para estudiar el comportamiento de δ_n consideramos una aproximación lineal de f a utilizando la aplicación lineal

$$\begin{aligned} T_{x_n} : \mathbb{R}^N &\rightarrow \mathbb{R}^N \\ x &\mapsto T_{x_n}(x) = J_f(x_n) \cdot x, \end{aligned}$$

donde $J_f(x_n)$ es la matriz jacobiana de f evaluada en el punto x_n , es decir,

$$J_f = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_{(1;n+1)}}{\partial x_{(1;n)}} & \frac{\partial x_{(1;n+1)}}{\partial x_{(2;n)}} & \dots & \frac{\partial x_{(1;n+1)}}{\partial x_{(N;n)}} \\ \frac{\partial x_{(2;n+1)}}{\partial x_{(1;n)}} & \frac{\partial x_{(2;n+1)}}{\partial x_{(2;n)}} & \dots & \frac{\partial x_{(2;n+1)}}{\partial x_{(N;n)}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial x_{(N;n+1)}}{\partial x_{(1;n)}} & \frac{\partial x_{(N;n+1)}}{\partial x_{(2;n)}} & \dots & \frac{\partial x_{(N;n+1)}}{\partial x_{(N;n)}} \end{bmatrix}$$

Hemos utilizado un doble subíndice $x_{(\alpha;\beta)}$, de forma que $\alpha \in \{1, \dots, N\}$ denota la componente del vector x_β y $\beta \in \{n, n+1\}$ denota la iteración del sistema dinámico. De esta forma, J_f es la matriz coordenada de la aplicación T_{x_n} , que define un esquema discreto para la variación infinitesimal δ_n entre las órbitas de x_0 y x'_0 :

$$\delta_{n+1} = T_{x_n}(\delta_n) = J_f(x_n) \cdot \delta_n.$$

Así, la distancia δ_n en la n -ésima iteración expresada en función de la variación inicial δ_0 resulta

$$\delta_n = J_f(x_n) \cdot \delta_{n-1} = (J_f(x_n) \cdot J_f(x_{n-1})) \cdot \delta_{n-2} = \dots = (J_f(x_{n-1}) \cdot \dots \cdot J_f(x_0)) \cdot \delta_0 = A \cdot \delta_0,$$

donde hemos denotado

$$A = J_f(x_{n-1}) \cdot \dots \cdot J_f(x_0).$$

Para cada $n \in \mathbb{N}$, δ_n es la distancia entre la órbita de x_0 y x'_0 y la dirección de desplazamiento viene dada por el vector

$$u_n = \frac{\delta_n}{|\delta_0|}.$$

Observamos que

$$\left| \frac{\delta_n}{\delta_0} \right| = \left| \frac{A \cdot \delta_0}{\delta_0} \right| = |A \cdot u_0|.$$

Definimos entonces el indicador $\sigma(x_0, u_0)$, dado por

$$\sigma(x_0, u_0) = \lim_{\delta_0 \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \left| \frac{\delta_n}{\delta_0} \right| = \lim_{\delta_0 \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log |A \cdot u_0|,$$

donde \log denota el logaritmo neperiano. La existencia del límite anterior viene dada por el teorema de Oseledec (ver [13]). La interpretación de $\sigma(x_0, u_0)$ es la misma que el parámetro ν en la ecuación (1.3). En efecto, considerando $n \rightarrow \infty$ y $\delta_0 \rightarrow 0$, se tiene que $|\delta_n| \sim |\delta_0| \exp(\nu n)$ si y solo si

$$\nu \sim \frac{1}{n} \log \left| \frac{\delta_n}{\delta_0} \right| \sim \sigma(x_0, u_0).$$

Tenemos que u_0 es un vector de N componentes. Así, definiremos N exponentes de Lyapunov, en función de cada una de las direcciones de u_0 . Notamos que, para n suficientemente grande y $|\delta_0|$ suficientemente pequeño, podemos considerar

$$\sigma(x_0, u_0) \approx \frac{1}{n} \log |A \cdot u_0| = \frac{1}{2n} 2 \log |A \cdot u_0| = \frac{1}{2n} \log (|A \cdot u_0|^2).$$

Desarrollamos $|A \cdot u_0|^2$:

$$|A \cdot u_0|^2 = (A \cdot u_0)^\dagger \cdot (A \cdot u_0) = u_0^\dagger \cdot A^\dagger \cdot A \cdot u_0 = u_0^\dagger \cdot B \cdot u_0$$

donde A^\dagger denota la traspuesta conjugada de A y hemos denotado $B = A^\dagger \cdot A$. Observamos que

$$B^\dagger = (A^\dagger \cdot A)^\dagger = A^\dagger \cdot (A^\dagger)^\dagger = A^\dagger \cdot A = B,$$

esto es, B es una matriz hermitiana. Además, para cada vector x , se verifica que

$$x^\dagger \cdot B \cdot x = (x^\dagger \cdot A^\dagger \cdot A^\dagger \cdot x) = (A \cdot x)^\dagger \cdot (A \cdot x) = \|A \cdot x\|^2 \geq 0.$$

La matriz B es hermitiana y no negativa. Por lo tanto, B es diagonalizable con valores propios no negativos y existe $\{v_1, \dots, v_N\}$ una base ortonormal de vectores propios de B . Descomponemos el vector u_0 en función de vectores de la base:

$$u_0 = \sum_{i=1}^N a_i v_i = \sum_{i=1}^N u_i,$$

donde $u_i = a_i v_i$ es un vector propio de B para todo $i \in \{1, \dots, N\}$. Definimos entonces los N exponentes de Lyapunov para la condición inicial x_0

$$\sigma_i(x_0) = \frac{1}{2n} \log(u_i^\dagger \cdot B \cdot u_i)$$

y los N números de Lyapunov

$$\lambda_i(x_0) = \exp(\sigma_i(x_0))$$

para todo $i \in \{1, \dots, N\}$.

Para interpretar el significado físico de estos parámetros, notamos que, por la ecuación (1.3), la distancia entre x_n y x'_n en la dirección $i \in \{1, \dots, N\}$ viene dada por

$$|\delta_n^i| = \lambda_i |\delta_0| = \exp(\sigma_i n) |\delta_0|.$$

Es decir, la divergencia o no de $|\delta_n^i|$ cuando $n \rightarrow \infty$ depende del signo de σ_i . Así, diremos que un sistema es *localmente caótico* si existe $i \in \{1, \dots, N\}$ tal que el exponente de Lyapunov σ_i verifica que $\sigma_i > 0$.

Notamos que, desde un punto de vista más formal, en el estudio de sistemas dinámicos caóticos se suele incluir más condiciones además de la sensibilidad a las condiciones iniciales, como puede ser la existencia de órbitas densas en todo el espacio de fases o que todos los puntos periódicos sean también densos, en la definición según [4]. No entraremos en detalles pues lo que nos interesa en este caso es estudiar cómo se traduce la sensibilidad de las condiciones iniciales al formalismo cuántico. Además, existen otras definiciones posibles de caos local, con otras interpretaciones físicas como pueden ser la entropía de un sistema dinámico. Estas definiciones pueden consultarse en [19], así como su relación con los exponentes de Lyapunov.

Como ejemplo de aplicación caótica, consideramos la ecuación logística, dada en (1.1):

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n).$$

Se trata de una aplicación ampliamente estudiada (ver [4], [16] y [14], principalmente). Su comportamiento en función del parámetro r puede resumirse de la siguiente forma: para valores de $0 < r < 3.57$, el sistema exhibe una dinámica no caótica, con puntos de equilibrio y órbitas periódicas; en $r = 3.57$, se inicia el comportamiento caótico. Alrededor de $r \approx 3.83$, existe una ventana de período 3, donde el sistema presenta un comportamiento periódico dentro del régimen caótico. Para $3.57 < r \leq 4$, la dinámica es predominantemente caótica, aunque existen pequeñas ventanas periódicas.

Podemos comprobar estos resultados numéricamente utilizando exponentes de Lyapunov. Para hacer la simulación, hemos utilizado la función `lyap_r` del módulo `nolds` en *Python* (ver [11]). En la Figura 1.5 podemos observar que, para $r < 3.57$, los exponentes de Lyapunov son negativos, lo cual se corresponde con una situación no caótica. A partir de $r = 3.57$ empezamos a obtener exponentes de Lyapunov positivos, asociados a un comportamiento caótico. Además, se puede observar un *pico* negativo para $r = 3.83$, correspondiente a una pequeña ventana de estabilidad.

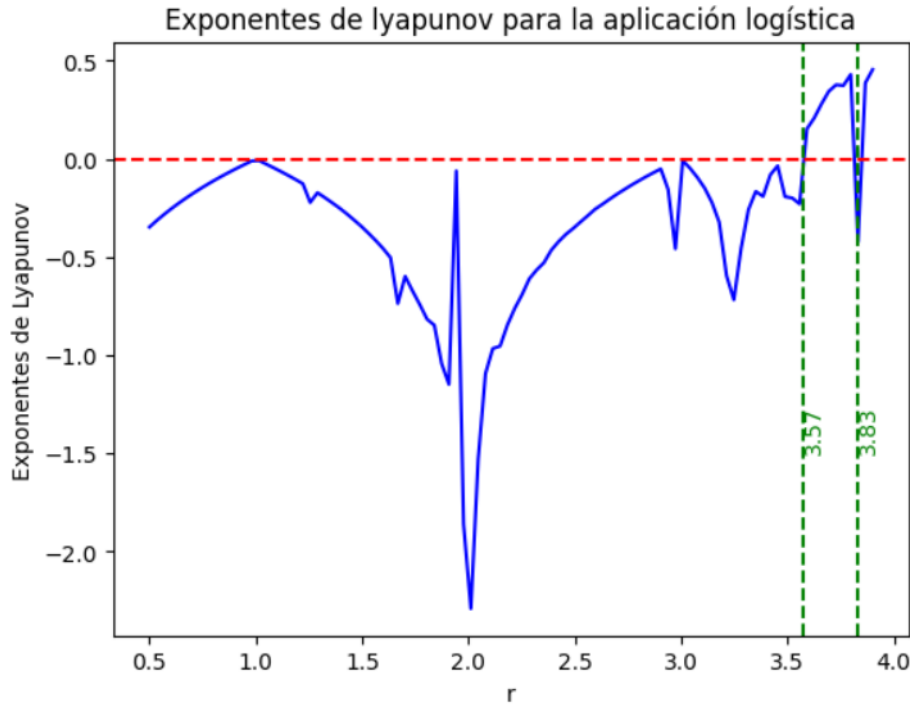


Figura 1.5: Exponentes de Lyapunov en función del parámetro r para la aplicación logística.

1.2. Sistemas hamiltonianos

Una vez establecidos los conceptos básicos de sistemas dinámicos desde un punto de vista general, aplicaremos estos resultados a los sistemas resultantes de las ecuaciones de Hamilton. Como referencia general para estudiar los sistemas hamiltonianos desde el punto de vista clásico hemos utilizado [5] y [14].

1.2.1. Ecuaciones de Hamilton

Nuestro primer objetivo es definir un sistema dinámico continuo a partir de las ecuaciones de Hamilton. Consideramos un sistema de n partículas con N grados de libertad. Entonces, para cada $i \in \{1, \dots, n\}$ el vector de posición está dado por $\vec{r}_i = \vec{r}_i(q_1, \dots, q_N, t)$, donde $\{q_j\}_{j=1}^N$ son las *coordenadas generalizadas*. Supongamos que en este sistema solo tenemos fuerzas que deriven de un potencial. Denotamos V la energía potencial y T la energía cinética. La función $\mathcal{L} := T - V$ se denomina *Lagrangiano* y las ecuaciones que describen el movimiento del sistema son

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_j} = 0$$

para todo $j \in 1, \dots, N$, donde \dot{q}_j denota la derivada parcial con respecto al tiempo de la coordenada

q_j . Para cada coordenada, definimos el *momento canónico conjugado* de q_j como

$$p_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_j}.$$

Veamos un ejemplo de cálculo de momento canónico conjugado para una coordenada generalizada.

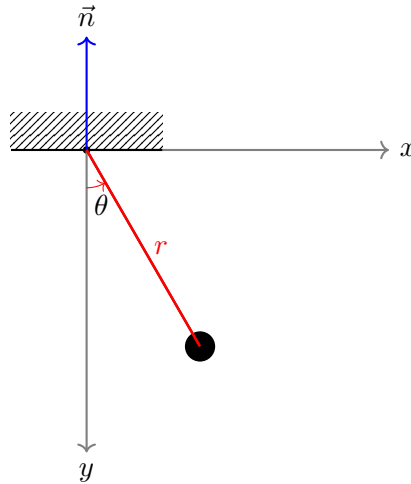


Figura 1.6: Partícula libre cuya posición viene dada por las coordenadas polares (r, θ) .

Consideremos una única partícula libre que rota en torno a un eje dado por el vector \vec{n} , representado en la Figura 1.6. Utilizamos coordenadas polares, de forma que el vector de posición \vec{r} está definido por las coordenadas (r, θ) ; en este problema, el módulo r es constante y la variación de \vec{r} es solo con respecto al ángulo θ . Así, $\mathcal{L} = T$ (partícula libre) y la ecuación de Lagrange asociada a esa coordenada es

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{\theta}} \right) - \frac{\partial T}{\partial \theta} = 0.$$

En este caso, $T = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 = \frac{1}{2} m r^2 \dot{\theta}^2$. Es decir, la energía cinética solo depende de $\dot{\theta}$ y, por tanto, $\frac{\partial T}{\partial \theta} = 0$. Observamos que

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial \theta} = \lim_{d\theta \rightarrow 0} \frac{\vec{r}(\theta + d\theta) - \vec{r}(\theta)}{d\theta}.$$

Estudiamos el módulo del numerador:

$$\|\vec{r}(\theta + d\theta) - \vec{r}(\theta)\| = d\theta \|\vec{r}\| \sin(\angle(\vec{n}, \vec{r})) = d\theta \|\vec{n} \times \vec{r}\|.$$

Es fácil ver gráficamente que la dirección y sentido también coinciden y $\frac{\partial \vec{r}}{\partial \theta} = \vec{n} \times \vec{r}$ (ver Figura

1.6). Por lo tanto, el momento canónico conjugado asociado a p_θ resulta

$$p_\theta = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} = \frac{\partial T}{\partial \dot{\theta}} = \frac{\partial}{\partial \dot{\theta}} \left(\frac{1}{2} m \dot{r}^2 \right) = m \dot{r} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial \dot{\theta}} = m \dot{r} \cdot (\vec{n} \times \vec{r}) = \vec{n} \cdot (\vec{r} \times (m \dot{r})) = \vec{n} \cdot \vec{L},$$

donde hemos aplicado la propiedad de ciclicidad del producto mixto y la definición del momento angular $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \vec{r} \times (m \dot{r})$. En definitiva, hemos obtenido que para este sistema, el momento canónico conjugado de la coordenada θ es la componente del momento angular en la dirección del eje de rotación.

Consideramos un sistema de N grados de libertad. Estudiaremos la evolución de estados del sistema respecto al tiempo t mediante una función $H(p, q, t) = T + V$, que llamaremos *hamiltoniano*. Los vectores q, p tienen N componentes y representan coordenadas de posición y momentos canónicos conjugados. La evolución del sistema viene dada por las *ecuaciones de Hamilton*.

$$\begin{cases} \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{cases}$$

para todo $i \in \{1, \dots, N\}$. Consideremos un hamiltoniano $H(p, q, t)$ y un cambio de variables $(p, q) \rightarrow (\tilde{p}, \tilde{q})$. En principio, el nuevo hamiltoniano $\tilde{H}(\tilde{p}, \tilde{q})$ no tiene por qué verificar las ecuaciones anteriores. Así, un cambio de coordenadas se dice *canónico* si la función $\tilde{H}(\tilde{p}, \tilde{q})$ también verifica las ecuaciones de Hamilton. El cambio de coordenadas se puede especificar mediante una *función generatriz* $S(\tilde{p}, q, t)$ de forma que

$$\begin{aligned} \tilde{q} &= \frac{\partial S(\tilde{p}, q, t)}{\partial \tilde{p}}, \\ p &= \frac{\partial S(\tilde{p}, q, t)}{\partial q}. \end{aligned}$$

Si H no depende explícitamente del tiempo, las ecuaciones de Hamilton definen un sistema dinámico continuo. Ahora bien, como hemos visto en la sección anterior, a partir de un problema continuo podemos construir sistemas dinámicos discretos. En la siguiente sección, estudiaremos propiedades que verifican los sistemas hamiltonianos.

1.2.2. Teorema de Liouville y estructura simpléctica

En el primer apartado de este capítulo afirmamos que un sistema hamiltoniano no presenta atractores. Esta propiedad es consecuencia del *teorema de Liouville*, que enunciaremos a continuación. Las ecuaciones de Hamilton se pueden expresar como una ecuación diferencial de la

forma $\frac{dx(t)}{dt} = F(x, t)$, con $x = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$, $F(x, t) = S_N \cdot \nabla H$, con $\nabla H = \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial p} \\ \frac{\partial H}{\partial q} \end{pmatrix}$ y S_N la matriz dada por

$$S_N = \begin{bmatrix} 0_N & -Id_N \\ Id_N & 0_N \end{bmatrix},$$

donde $Id_N = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$ es la matriz identidad y $0_N = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$ la matriz nula de orden N .

Consideremos entonces una superficie S_0 en un espacio de fases de $2N$ dimensiones (p y q son vectores de N dimensiones). Cada punto $P(p, q)$ perteneciente a la superficie evoluciona en el tiempo según las ecuaciones de Hamilton, dando lugar a una superficie S_t ; el volumen que define cada superficie S_t se denota V_t . El teorema de Liouville establece que el volumen contenido en S_t es constante para todo $t \in (0, +\infty)$. En efecto, como $\frac{dx}{dt} = F$,

$$\frac{d}{dt} \int_{S_t} dx^{2N} = \oint_{S_t} \frac{dx}{dt} \cdot dx^{2N-1} = \oint_{S_t} F \cdot dS.$$

Aplicando el teorema de la divergencia y $F(x, t) = S_N \cdot \nabla H$,

$$\frac{d}{dt} \int_{S_t} dx^{2N} = \oint_{S_t} F \cdot dS = \int_{V_t} \nabla \cdot F dx^{2N} = \int_{V_t} \left(\frac{\partial}{\partial p} \left(-\frac{\partial H}{\partial q} \right) + \frac{\partial}{\partial q} \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right) \right) dx^{2N} = 0.$$

Una consecuencia inmediata del teorema de Liouville es que los sistemas hamiltonianos no pueden presentar atractores. En efecto, los *atractores* son conjuntos a los que las órbitas tienden asintóticamente. Si existieran atractores, no se podrían conservar volúmenes. Una propiedad más general de los sistemas hamiltonianos relacionada con este teorema es la estructura *simpléctica*. Supongamos que $x(t)$ es una solución del sistema dinámico dado por las ecuaciones de Hamilton y consideramos $\delta x(t)$, $\delta x'(t)$ dos variaciones infinitesimales. Entonces,

$$\frac{d\delta x^\dagger}{dt} = \nabla F \cdot \delta x,$$

y la misma ecuación para $\delta x'$. Además,

$$\nabla F = \nabla(S_N \cdot \nabla H) = S_N \cdot \Delta H,$$

donde $\Delta H = \nabla \cdot (\nabla H)$ es el laplaciano de H . Se dice que un sistema es *simpléctico* si se verifica que

$$\frac{d}{dt}(\delta x^\dagger \cdot S_N \cdot \delta x') = 0.$$

A continuación, probaremos que los sistemas hamiltonianos son simplécticos. Notamos que $S_N^\dagger = -S_N$ donde \dagger denota la matriz traspuesta conjugada y $S_N \cdot S_N = I_{2N}$ la matriz identidad. Además, ΔH es una matriz hermitiana, luego $\Delta H^\dagger = \Delta H$. En consecuencia,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\delta x^\dagger \cdot S_N \cdot \delta x') &= \frac{d\delta x^\dagger}{dt} \cdot S_N \cdot \delta x' + \delta x^\dagger \cdot S_N \cdot \frac{d\delta x'}{dt} \\ &= (\nabla F \delta x)^\dagger \cdot S_N \cdot \delta x' + \delta x^\dagger \cdot S_N \cdot \nabla F \cdot \delta x' \\ &= \delta x^\dagger \cdot (\nabla F \cdot S_N + S_N \cdot \nabla F) \cdot \delta x' \\ &= \delta x^\dagger \cdot \left((S_N \cdot \Delta H)^\dagger \cdot S_N + S_N \cdot S_N \cdot \Delta H \right) \cdot \delta x' \\ &= \delta x^\dagger \cdot \left((\Delta H)^\dagger \cdot S_N^\dagger \cdot S_N + S_N \cdot S_N \cdot \Delta H \right) \cdot \delta x' \\ &= \delta x^\dagger \cdot (\Delta H \cdot (-S_N) \cdot S_N + S_N \cdot S_N \cdot \Delta H) \cdot \delta x' \\ &= \delta x^\dagger \cdot (-\Delta H \cdot I_{2N} + I_{2N} \cdot \Delta H) \cdot \delta x' = 0. \end{aligned}$$

Hemos demostrado que los sistemas hamiltonianos son simplécticos. Veamos cómo se traduce la condición simpléctica a sistemas dinámicos discretos en los que las variables verifican las ecuaciones de Hamilton. Sea $x(t)$ una solución del sistema de ecuaciones dado por las ecuaciones de Hamilton y consideramos un tiempo $T > 0$ arbitrario. Consideramos la aplicación de tiempo T definida en la sección anterior:

$$m_{\mathcal{J}}(x(t)) = x(t + T),$$

es decir, la aplicación $m_{\mathcal{J}}$ relaciona los puntos de la órbita de x , llevando el valor de x para el tiempo t al valor de x en el instante $t + T$. Es claro que $m_{\mathcal{J}}$ define un sistema dinámico discreto. Consideramos una variación diferencial $\delta x(t)$ de forma que

$$\frac{\partial m_{\mathcal{J}}}{\partial x}(\delta x(t)) = J_M \cdot \delta x(t) = \delta x(t + T), \quad (1.4)$$

donde $\frac{\partial m_{\mathcal{J}}}{\partial x}$ denota la función diferencial y J_M el jacobiano de $m_{\mathcal{J}}$. Como $x(t)$ es solución de un sistema de ecuaciones diferenciales simpléctico, sabemos que

$$\delta x(t + T)^\dagger \cdot S_N \cdot \delta x'(t + T) = \delta x(t)^\dagger \cdot S_N \cdot \delta x'(t). \quad (1.5)$$

Juntando las ecuaciones (1.4) y (1.5),

$$\delta x(t)^\dagger \cdot S_N \cdot \delta x'(t) = (J_M \cdot \delta x(t))^\dagger \cdot S_N \cdot (J_M \cdot \delta x(t)),$$

y como las variaciones $\delta x(t)$, $\delta x(t)'$ son arbitrarias, se concluye que

$$S_N = J_M^\dagger \cdot S_N \cdot J_M.$$

Se dice que una matriz A es una *matriz simpléctica* si verifica que $S_N = A^\dagger \cdot S_N \cdot A$. Hemos probado que el jacobiano de un sistema hamiltoniano es una matriz simpléctica. Es conveniente resaltar algunas propiedades básicas de las matrices simplécticas, que utilizaremos en el estudio de sistemas hamiltonianos. Para empezar, notamos que

$$\det(S_N) = \det(A^\dagger \cdot S_N \cdot A) = \det(A)^2 \det(S_N),$$

donde hemos utilizado que $\det(A^\dagger) = \det(A)$. Se sigue entonces que $\det(A) = \pm 1$. En particular, se puede probar que $\det(A) = 1$. Descartar el caso $\det(A) = -1$ requiere una demostración algo más compleja, que se puede consultar en [15]. Por otro lado, consideremos A, B dos matrices simplécticas. Entonces,

$$(A \cdot B)^\dagger \cdot S_N \cdot (A \cdot B) = B^\dagger \cdot (A^\dagger \cdot S_N \cdot A) \cdot B = B^\dagger \cdot S_N \cdot B = S_N,$$

es decir, el producto de dos matrices simplécticas es una matriz simpléctica. Sabemos que un sistema dinámico discreto consiste en la iteración de una función, en este caso $\mathcal{M}_{\mathcal{J}}$, comenzando con una condición inicial x_0 . Además, el jacobiano de $\mathcal{M}_{\mathcal{J}}^n$ es $J_{\mathcal{T}}^n$. Finalmente, $J_{\mathcal{T}}^n$ es una matriz simpléctica para todo $n \in \mathbb{N}$.

1.2.3. Sistemas integrables

A continuación, definiremos el concepto de sistema integrable y lo relacionaremos con los resultados obtenidos al principio del capítulo. Como referencia principal, hemos seguido [14].

Observamos que, en el caso de que H no dependa explícitamente del tiempo, esto es, $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, se verifica que

$$\frac{dH}{dt} = \frac{dp}{dt} \frac{\partial H}{\partial p} + \frac{dq}{dt} \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} + 0 = 0.$$

es decir, H se conserva en el tiempo, es una *constante del movimiento*. Para estudiar las constantes del movimiento en un sistema hamiltoniano, definimos los *paréntesis de Poisson* de dos funciones $f(q, p), g(q, p)$:

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial q} \frac{\partial f}{\partial p}.$$

Por ejemplo, dada una variable x y su momento canónico conjugado p_x , su corchete de Poisson resulta

$$\{x, p_x\} = \frac{\partial x}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial x} = 1. \quad (1.6)$$

Si calculamos la derivada total de una función $f(p, q)$ con respecto al tiempo, obtenemos

$$\frac{df}{dt} = \frac{dp}{dt} \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{dq}{dt} \frac{\partial f}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial f}{\partial p} + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial f}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial t} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (1.7)$$

Notamos que, si f no depende explícitamente de t , es decir, $\frac{\partial f}{\partial t} = 0$, se tiene que

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\}.$$

En consecuencia, $f(q, p)$ es una constante del movimiento si y solo si $\{f, H\} = 0$. En el siguiente apartado de este capítulo, definiremos el conmutador de operadores cuánticos y veremos que se verifica un resultado análogo.

Definimos el concepto de integrabilidad para sistemas hamiltonianos clásicos. Se dice que un sistema hamiltoniano con N grados de libertad y que no depende explícitamente del tiempo es *integrable* si existen N constantes del movimiento f_1, \dots, f_N *independientes*, es decir, no se puede expresar una en función de las $N - 1$ restantes, y *en involución*, esto es

$$\{f_i, f_j\} = 0$$

para todo $i, j \in \{1, \dots, N\}$. El *teorema de Liouville - Arnold* establece que, en estas condiciones, existe una transformación canónica de coordenadas de forma que las ecuaciones del movimiento del sistema equivalente correspondiente tienen solución para cualquier condición inicial. En particular, existe un cambio de coordenadas $(p, q) \rightarrow (\tilde{p}, \tilde{q})$ de forma que el nuevo hamiltoniano \tilde{H} es una función que solo depende de \tilde{p} .

Una elección particular de transformación canónica es considerar una transformación *acción - ángulo*, $(\tilde{p}, \tilde{q}) = (p_\theta, \theta)$, de forma que el hamiltoniano resultante solo depende de p_θ : $\tilde{H}(p_\theta)$. Como existen N constantes del movimiento independientes, tenemos N restricciones del tipo $f_i(p, q) = cte$, de donde las órbitas están contenidas en una superficie N -dimensional. Además, la condición de involución implica que la superficie es un toro N -dimensional.

Para cada $i \in \{1, \dots, N\}$, un punto en el toro está definido por las variables angulares $\theta = \{\theta_1, \dots, \theta_N\}$. Supongamos que fijamos las $N - 1$ coordenadas $(\theta_2^0, \dots, \theta_N^0)$ y hacemos variar θ_1 de 0 a 2π . Entonces, obtenemos una curva cerrada en el toro que denominamos γ_1 . Repetimos el proceso con todas las variables angulares y obtenemos así N curvas cerradas γ_i , representadas en la Figura 1.7.

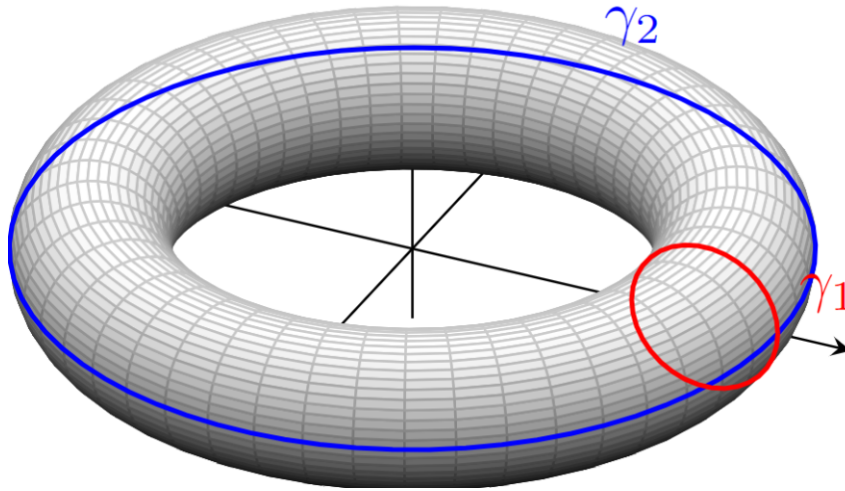


Figura 1.7: Curvas γ_1 y γ_2 en un toro de 2 dimensiones.

A partir de cada curva γ_i , definimos las variables

$$p_{\theta,i} = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_i} p \cdot dq.$$

Supongamos que $S(q, p_\theta)$ es la función generatriz para un cambio de coordenadas $(q, p) \rightarrow (p_\theta, \tilde{q})$. Veamos que \tilde{q} se corresponde precisamente con las variables angulares $(\theta_1, \dots, \theta_N)$ que describen el toro de N dimensiones. La función S debe verificar, por definición,

$$\tilde{q} = \frac{\partial S(p_\theta, q, t)}{\partial p_\theta}, \quad (1.8)$$

$$p = \frac{\partial S(p_\theta, q, t)}{\partial q}. \quad (1.9)$$

Por lo tanto, la variación de S a través de la curva γ_i es, utilizando (1.9),

$$\Delta_i S = \oint \frac{\partial S(p_\theta, q, t)}{\partial q} \cdot dq = \oint_{\gamma_i} p \cdot dq = 2\pi p_{\theta,i}.$$

En consecuencia, utilizando (1.8), obtenemos que la variación de cada variable \tilde{q}_j en cada curva γ_i es

$$\Delta_i \tilde{q}_j = \left(\frac{\partial \Delta_i S(p_\theta, q, t)}{\partial p_\theta} \right)_j = \left(2\pi \frac{\partial}{\partial p_\theta} p_{\theta,i} \right)_j = 2\pi \delta_{i,j} = \Delta_i \theta_j$$

El nuevo hamiltoniano \tilde{H} es, por construcción, independiente de θ . Así, las ecuaciones de Hamil-

ton se reducen a

$$\begin{cases} \frac{dp_\theta}{dt} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \theta} = 0 \\ \frac{d\theta}{dt} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial p_\theta} = \Omega. \end{cases}$$

Es inmediato comprobar que las soluciones del sistema diferencial anterior son $p_\theta(t) = p_{\theta,0} = cte$ y $\theta(t) = \theta(0) + \Omega(p_{\theta,0})t$, de forma que $\Omega = \Omega(p_{\theta,0}) = (\Omega_1, \dots, \Omega_N)$ son las frecuencias angulares que describen el movimiento de las órbitas dentro del toro.

Recuperamos entonces el concepto de cuasiperiodicidad introducido en la sección anterior. Si las N frecuencias son inconmesurables, entonces el movimiento es cuasiperiódico y las órbitas rellenan el toro densamente: es decir, el toro es cuasiperiódico. Por otro lado, si las órbitas son conmesurables, la órbita es periódica y por tanto se cierra: nos encontramos en el caso de toro resonante.

Supongamos, por ejemplo, que nos encontramos en el caso de un espacio de fases de dos dimensiones, esto es, tenemos dos coordenadas generalizadas p_θ, θ . Entonces, tenemos una única frecuencia

$$\Omega = \Omega(p_{\theta,0}) = -\frac{\partial H}{\partial p_\theta}.$$

Consideramos entonces la ecuación diferencial

$$\frac{d\theta}{dt} = \Omega,$$

que tiene solución

$$\theta(t) = \theta_0 + \Omega t,$$

para toda condición inicial $\theta(0) = \theta_0 \in [0, 2\pi)$. Si consideramos una aplicación de tiempo $\mathcal{T} = \tau$, obtenemos la rotación rígida de ángulo $\Omega\tau$.

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \omega_0\tau.$$

Denotamos $\omega_0 = \Omega\tau$. Tal y como razonamos en el primer capítulo, obtendremos órbitas periódicas si

$$m\omega_0 = 0 \pmod{2\pi},$$

equivalentemente, $\omega_0 = \frac{m}{n}2\pi$ para ciertos $m, n \in \mathbb{Z}$. La condición

$$m_0\omega_0\tau = n_02\pi$$

se denomina *condición de resonancia* para el par $(m_0, n_0) \in \mathbb{Z}^2$. Recordemos la definición de número de rotación introducida al principio del capítulo para una rotación rígida en una circun-

ferencia:

$$R = \frac{\omega_0}{2\pi}.$$

Obtuvimos que las órbitas son cuasiperiódicas si y solo si $R \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$. Es un resultado conocido de teoría de la medida que los números racionales son un conjunto de medida de Lebesgue nula dentro de los reales. Además, se dice que una propiedad se verifica para *casi todo* número real si se verifica para un conjunto $A \in \mathbb{R}$ de forma que $B := \mathbb{R} \setminus A$ es un conjunto de medida nula de Lebesgue. Concluimos entonces que para casi todo $R \in \mathbb{R}$ los toros asociados a un sistema hamiltoniano integrable son cuasiperiódicos.

1.2.4. Teorema KAM

Una vez hemos descrito la dinámica de los sistemas hamiltonianos integrables, nos interesamos por pequeñas perturbaciones de estos sistemas. Para esta parte, hemos utilizado como referencia [9] y [14].

Supongamos que $H_0(p, q)$ es un hamiltoniano integrable. Consideramos $\epsilon > 0$ y un hamiltoniano $H(p, q)$ definido por una pequeña perturbación de $H_0(p, q)$, dada por $H_1(p, q)$:

$$H(p, q) = H_0(p, q) + \epsilon H_1(p, q).$$

Nos planteamos cómo una pequeña perturbación afecta a los toros del hamiltoniano integrable $H_0(p, q)$ en el espacio de fases; en particular, nos preguntamos por la persistencia de los toros cuasiperiódicos, asociados a todos los valores $R \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$. La respuesta viene dada por el Teorema de Kolmogórov, Arnold y Moser (teorema KAM). Las condiciones de aplicabilidad del teorema KAM son que la perturbación sea pequeña ($0 < \epsilon \ll 1$), regular (H_1 suficientemente derivable) y que el toro considerado se corresponda con un número de rotación *suficientemente irracional*. Veamos qué implican estas tres condiciones, desarrollando la idea de la demostración en el caso de cuasiperiodicidad de orden 2. Sabemos que H_0 es integrable, por lo que podemos considerar unas coordenadas de acción ángulo (p_θ, θ) tales que H_0 solo dependa de p_θ . En principio, el hamiltoniano perturbado y la perturbación pueden depender también de θ , de forma que

$$H(p_\theta, \theta) = H_0(p_\theta) + \epsilon H_1(p_\theta, \theta).$$

Nuestro objetivo es determinar si existen toros de dos dimensiones en los que las órbitas de H están restringidas, igual que lo están las órbitas del hamiltoniano integrable H_0 . Para ello, nos planteamos si existe un cambio de coordenadas canónico $(p_\theta, \theta) \rightarrow (p'_\theta, \theta')$ de forma que H tampoco dependa de variables angulares, es decir, queremos expresar

$$H(p_\theta, \theta) = H'(p'_\theta),$$

mediante una función generatriz $S(p'_\theta, \theta)$, que debe verificar

$$p_\theta = \frac{\partial S(p'_\theta, \theta)}{\partial \theta},$$

$$\theta' = \frac{\partial S(p'_\theta, \theta)}{\partial p'_\theta}.$$

De esta forma, obtenemos la ecuación

$$H'(p'_\theta) = H\left(\frac{\partial S}{\partial \theta}, \theta\right) \quad (1.10)$$

Como estamos considerando perturbaciones pequeñas, $0 < \epsilon \ll 1$, hacemos un desarrollo de Taylor de S en torno a un punto S_0

$$S \approx S_0 + \epsilon S_1 + \epsilon^2 S_2 + \dots$$

de forma que $S_0 = p'_\theta \cdot \theta$. Sustituyendo el desarrollo de S en la expresión (1.10) y restringiéndonos a los términos de primer orden, obtenemos

$$\begin{aligned} H'(p'_\theta) &= H_0(p'_\theta + \epsilon \frac{\partial S_1}{\partial \theta} + \dots) + \epsilon H_1(p'_\theta, \theta) \approx H_0(p'_\theta) + \epsilon \frac{\partial H_0}{\partial p'_\theta} \frac{\partial S_1}{\partial \theta} + \epsilon H_1(p'_\theta, \theta) = \\ &= H_0(p'_\theta) + \epsilon \Omega \frac{\partial S_1}{\partial \theta} + \epsilon H_1(p'_\theta, \theta) \end{aligned}$$

donde hemos sustituido el vector de frecuencias

$$\Omega = (\Omega_1, \dots, \Omega_N) = \frac{\partial H_0}{\partial p'_\theta}.$$

Expresamos las funciones S_1 y H_1 como una serie de Fourier en el vector de variables angulares $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_N)$:

$$H_1 = \sum_m H_{1,m}(p'_\theta) \exp(im \cdot \theta),$$

$$S_1 = \sum_m S_{1,m}(p'_\theta) \exp(im \cdot \theta).$$

donde $m = (m_1, \dots, m_N) \in \mathbb{Z}^N$. Finalmente, sustituimos las series de Fourier en la expresión de $H(p'_\theta)$, de forma que

$$\sum_m (im \cdot \Omega) S_{1,m}(p'_\theta) \exp(im \cdot \theta) + \sum_m H_{1,m}(p'_\theta) \exp(im \cdot \theta) = \frac{1}{\epsilon} (H'(p'_\theta) - H_0(p_\theta)),$$

donde el término de la derecha solo depende de la variable p_θ , y en particular se puede demostrar

que es nulo. Por unicidad de los coeficientes de una serie de Fourier, se obtiene que

$$S = - \sum_m \frac{H_{1,m}(p'_\theta)}{im \cdot \Omega} \exp(im \cdot \theta) = i \sum_m \frac{H_{1,m}(p'_\theta)}{m \cdot \Omega} \exp(im \cdot \theta).$$

Queremos determinar bajo qué condiciones la serie anterior converge, y en consecuencia podemos construir la función generatriz S . Por un lado, para el numerador, basta notar que si H_1 es suficientemente regular, entonces

$$H_{1,m} \leq \exp(-\alpha|m|)$$

para cierto $\alpha \in \mathbb{R}$, por ser $H_{1,m}$ coeficiente de una serie de Fourier. El estudio del denominador $m \cdot \Omega$ es más complejo, y en este punto definiremos el concepto de número real *fuertemente irracional*. Si estamos en el caso $R \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$, entonces las órbitas son inconmesurables, y por tanto,

$$m \cdot \Omega \neq 0$$

para todo $m \in \mathbb{Z}^N$. Ahora bien, aunque el denominador no se anule para ningún término de la serie, nos podemos encontrar con el caso de que sea tan pequeño que la serie diverja. Esta situación se conoce como el *problema de los denominadores pequeños*. Para explicar cómo el teorema *KAM* resuelve este problema, supongamos que nos encontramos en el caso $N = 2$, es decir $\Omega = (\Omega_1, \Omega_2)$ y seguiremos la idea de la demostración de [14]. Sabemos que el número de rotación viene dado por

$$R = \frac{\Omega_1}{\Omega_2}.$$

Notamos que

$$m \cdot \Omega = m_1 \Omega_1 + m_2 \Omega_2 = \Omega_2 m_1 \left(\frac{\Omega_1}{\Omega_2} + \frac{m_2}{m_1} \right) = \Omega_2 m_1 \left(R + \frac{m_2}{m_1} \right).$$

Imponemos entonces que R sea suficientemente racional, en el siguiente sentido: se dice que un número irracional $\rho \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ es *mal aproximado por racionales* si

$$|\rho - n/m| > \frac{K}{m^{2+\delta}}$$

para ciertos $K, \delta > 0$ y para todo $m, n \in \mathbb{Z}$, $m \neq 0$. Si suponemos que el número de rotación R es mal aproximado por racionales, entonces

$$|R - m_2/m_1| > \frac{K}{m_1^{2+\epsilon}}$$

y por lo tanto, la serie

$$S = i \sum_m \frac{H_{1,m}(I')}{m \cdot \Omega} \exp(im \cdot \theta) \leq iK \sum_m \frac{\exp(-\alpha|m|)}{m_1^{2+\epsilon}} \exp(im \cdot \theta)$$

está acotada superiormente por una serie convergente, y en definitiva converge. En este caso, decimos que el toro cuasiperiódico de número de rotación R *sobrevive* la perturbación. Es un resultado conocido de teoría de números que los números irracionales que no son mal aproximados por racionales tiene medida nula de Lebesgue. Así, para perturbaciones pequeñas, hemos probado que casi todos los toros cuasiperiódicos sobreviven la perturbación.

En definitiva, el teorema *KAM* establece que, así como en el caso integrable los toros asociados a un número de rotación R irracional son siempre cuasiperiódicos, al considerar una pequeña perturbación para casi todo $R \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ seguimos teniendo órbitas restringidas a un toro cuasiperiódico. Es decir, ya no tendremos que para todo $R \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q}$ el toro asociado es cuasiperiódico, pero el conjunto $A := \{R \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Q} : \text{el toro asociado al número de rotación } R \text{ es resonante}\}$ sigue teniendo medida nula. En particular, el teorema *KAM* prueba que para que el toro cuasiperiódico persista a pesar de la perturbación, el número de rotación debe ser mal aproximado por racionales.

1.2.5. Estabilidad lineal de las órbitas periódicas

En el apartado anterior, estudiamos qué ocurre en un sistema hamiltoniano integrable para los toros con número de rotación irracional, es decir, los toros cuasiperiódicos. Durante esta sección, nos interesamos por las órbitas periódicas asociadas a toros resonantes. Definiremos al concepto de órbita periódica linealmente estable y enunciaremos un teorema que indica qué ocurre al considerar pequeñas perturbaciones. Como referencia, hemos seguido [9].

Estudiamos el sistema dinámico discreto dado por la aplicación $m_{\mathcal{J}}$. Nuestro objetivo es definir qué entendemos por estabilidad lineal para los puntos próximos a una órbita periódica. Supongamos que x_0 es un punto de periodo $k \in \mathbb{N}$, es decir,

$$f^k(x_0) = x_0$$

La órbita de x_0 está formada entonces por exactamente k puntos:

$$O(x_0) = \{f^i(x_0) : i \in \{1, \dots, k\}\} = \{x_0, x_1, \dots, x_{k-1}\}.$$

Estudiamos el comportamiento de un punto x'_0 cercano a x_0 , es decir $x'_0 = x_0 + \delta_0$, con δ_0 una pequeña perturbación: $0 < |\delta_0| \ll 1$. En la sección anterior, vimos que la dinámica de δ_n viene

dada por el sistema

$$\delta_{n+1} = T_{x_n}(\delta_n) = J_f(x_n) \cdot \delta_n.$$

donde T_{x_n} es la aplicación lineal

$$\begin{aligned} T_{x_n} : \mathbb{R}^N &\rightarrow \mathbb{R}^N \\ x &\mapsto T_{x_n}(x) = J_f(x_n) \cdot x. \end{aligned}$$

Recordemos que

$$\delta_k = A \cdot \delta_0,$$

donde

$$A = J_f(x_{k-1}) \cdot \dots \cdot J_f(x_0).$$

Hemos visto que, para cada $i \in \{0, k-1\}$, la matriz $J_f(x_i)$ es simpléctica. Como el producto de matrices simplécticas es una matriz simpléctica, concluimos que A también es una matriz simpléctica. Consideramos la aplicación lineal dada por

$$\begin{aligned} T : \mathbb{R}^N &\rightarrow \mathbb{R}^N \\ x &\mapsto T(x) = A \cdot x, \end{aligned}$$

Nuestro objetivo en esta sección es estudiar el comportamiento la aplicación T y definir así la estabilidad lineal de una órbita periódica. Nos centraremos en el caso particular de dos dimensiones. Sea λ un valor propio de A . Entonces, λ verifica la ecuación

$$\det(A - \lambda I_2) = 0.$$

donde I_2 es la matriz identidad de orden 2. Como λ_1, λ_2 son valores propios de A , su producto es igual al determinante de A . Así,

$$\det(A) = \lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1,$$

por ser A simpléctica. En consecuencia, los valores propios son inversos entre sí: $\lambda_1 = \lambda, \lambda_2 = \frac{1}{\lambda}$. Por otro lado, la traza de A resulta

$$\text{Tr}(A) = \lambda_1 + \lambda_2.$$

Por tanto, podemos escribir la ecuación característica como

$$\det(A - \lambda I_2) = \lambda^2 - \text{Tr}(A)\lambda + 1 = 0.$$

Las soluciones de la ecuación son de la forma

$$\lambda = \frac{1}{2} \left(\text{Tr}(A) \pm \sqrt{\text{Tr}(A)^2 - 4} \right)$$

Consideramos entonces tres casos posibles

- (a) $\text{Tr}(A) \geq 2$. Los valores propios son reales y no negativos. En este caso, la órbita periódica se dice *hiperbólica*.
- (b) $\text{Tr}(A) \leq -2$. Los valores propios son reales y no positivos. Entonces, la órbita periódica se dice *hiperbólica con reflexión*.
- (c) $-2 < \text{Tr}(A) < 2$. Los valores propios son complejos y de módulo unidad: $\lambda = \exp(\pm i\theta)$, $\theta \in [0, 2\pi)$. En esta situación, la órbita periódica se dice *elíptica*.

Se puede comprobar (ver [9] para más detalles) que, en efecto, en los casos (a), (b), las órbitas del sistema lineal determinado por la matriz A son hipérbolas, y por tanto curvas abiertas, mientras que en el caso (c) las órbitas son elipses, y en particular curvas cerradas, como corresponde a las órbitas periódicas. Por lo tanto, decimos que la órbita periódica dada por

$$O(x_0) = \{f^i(x_0) : i \in \{1, \dots, k\}\} = \{x_0, x_1, \dots, x_{k-1}\}.$$

es *linealmente estable* si se verifica que

$$|\text{Tr}(A)| = |\text{Tr}(J_f(x_{k-1}) \cdot \dots \cdot J_f(x_0))| < 2,$$

equivalentemente, si es elíptica. Ahora bien, dada una pequeña perturbación $\mathcal{M}_{\mathcal{J}_\epsilon}$ de la aplicación $\mathcal{M}_{\mathcal{J}}$, nos preguntamos por la existencia y estabilidad de las órbitas periódicas en el sistema perturbado. El teorema de *Poincaré - Birkhoff* establece que, para perturbaciones suficientemente pequeñas, para cada toro resonante de $\mathcal{M}_{\mathcal{J}}$ con número de rotación racional $R = \frac{p}{q}$, el sistema dinámico dado por $\mathcal{M}_{\mathcal{J}_\epsilon}$ también presenta órbitas de periodo q y, además, existe el mismo número de órbitas periódicas elípticas que de órbitas periódicas hiperbólicas. No probaremos este resultado en general, que puede consultarse en [14].

1.3. Sistemas cuánticos

Para concluir este capítulo, nuestro objetivo es estudiar los sistemas cuánticos desde la perspectiva de los sistemas dinámicos. En este caso, no tenemos órbitas en un espacio de fases ni funciones que definan la dinámica del sistema, sino estados descritos por funciones de onda y las acciones que tienen operadores sobre ellas. A continuación, introduciremos las herramientas básicas para estudiar la dinámica de un sistema hamiltoniano cuántico y compararlo con el caso clásico. Para la mayor parte del capítulo hemos utilizado [2] y, en menor medida, hemos seguido como referencia [17] al estudiar el Principio de Correspondencia y [10] para definir los operadores de Floquet.

1.3.1. Postulados de la Mecánica Cuántica y Ecuación de Schrödinger

Consideramos \mathcal{H} un espacio de Hilbert sobre el cuerpo \mathbb{C} . Desde el punto de vista cuántico, un estado se describe mediante un elemento de \mathcal{H} , que denominamos *función de onda* y denotamos $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$. Los estados $|\Psi\rangle$ están *normalizados*, de forma que

$$\| |\Psi\rangle \|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = 1.$$

Podemos *proyectar* los estados en bases de posiciones $\{|x\rangle\}$ o momentos $\{|p_x\rangle\}$, obteniendo funciones dependientes de x y p_x respectivamente, y desde un punto de vista general también del tiempo

$$\Psi(x, t) = \langle x | \Psi \rangle, \quad \tilde{\Psi}(p_x, t) = \langle p_x | \Psi \rangle.$$

Las funciones $|\Psi(x, t)|^2$ y $|\tilde{\Psi}(p, t)|^2$ se interpretan como densidades de probabilidad, de forma que el estudio de la dinámica del sistema ya no viene dado por la evolución de órbitas en un espacio de fases de posiciones y momentos, sino que está descrito por la evolución de las densidades de probabilidad que nos indican los valores de x, p_x más o menos probables.

Los *observables* son operadores hermitianos $\hat{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ y el *valor esperado* de \hat{A} en el estado Ψ viene dado por

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle.$$

En adelante, por simplicidad, prescindiremos del subíndice Ψ y denotaremos simplemente $\langle \hat{A} \rangle$. Además, la *indeterminación* del operador \hat{A} viene dada por

$$\Delta \hat{A} = \sqrt{\langle \Psi | \hat{A}^2 | \Psi \rangle - (\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle)^2}.$$

La indeterminación tiene una interpretación parecida a la distancia entre órbitas de un espacio de fases clásico: si $\Delta \hat{x}$ toma un valor pequeño, diremos que la partícula está *localizada* en x . Si $\Delta \hat{x}$ aumenta en t , entonces perdemos información acerca de la localización de la partícula, al

igual que si $\delta x(t)$ crece y dos órbitas originalmente cercanas tienden a alejarse entre sí.

Notamos que, si $|\Psi\rangle$ es un estado propio de \hat{A} con valor propio A , entonces

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = A \langle \Psi | \Psi \rangle = A,$$

$$\Delta \hat{A} = \sqrt{\langle \Psi | \hat{A}^2 | \Psi \rangle - (\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle)^2} = \sqrt{A \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle - A^2} = \sqrt{A^2 - A^2} = 0.$$

Los valores propios de \hat{A} , que denotamos $\{A\}$, son reales, y se corresponden con los valores del observable \hat{A} que podemos medir sin indeterminación. Como \hat{A} es un operador hermitiano, existe $\{|A\rangle\}$ una base de \mathcal{H} formada por vectores propios de \hat{A} .

Consideramos entonces \hat{H} el operador hamiltoniano, cuyos valores propios son las energías del sistema. En general, suponemos que \hat{H} depende del tiempo t . Las ecuaciones de Hamilton son reemplazadas por la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle,$$

que describe la evolución de los estados $|\Psi\rangle$.

1.3.2. Operadores conjugados y transformada de Fourier

Supongamos que tenemos un sistema de una dimensión. Consideramos la coordenada espacial x y su momento canónico conjugado p_x . Buscamos definir operadores hermitianos \hat{x} y \hat{p}_x , de forma que existan $\{|x\rangle\}$, $\{|p_x\rangle\}$ bases ortonormales de funciones propias de \hat{x} , \hat{p}_x respectivamente. De esta forma, podremos proyectar $|\Psi\rangle$ en la base de posiciones o de momentos

$$\Psi(x, t) = \langle x | \Psi \rangle, \quad \tilde{\Psi}(p_x, t) = \langle p_x | \Psi \rangle.$$

Recordemos que $\{|x\rangle\}$, $\{|p_x\rangle\}$ son bases formadas por funciones propias de \hat{x} , \hat{p}_x respectivamente. Es decir, se debe verificar que

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle, \quad \hat{p}_x |p_x\rangle = p_x |p_x\rangle.$$

Definimos \hat{p}_x como el operador cuya acción en la base de posiciones viene dada por

$$\langle x | \hat{p}_x | \Psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t).$$

Es claro entonces que las funciones propias de \hat{p}_x son exponenciales en la representación de posiciones. Considerando normalización, obtenemos

$$\langle x | p_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(ip_x x / \hbar), \quad \langle p_x | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp(-ip_x x / \hbar) \quad (1.11)$$

Como $\{|x\rangle\}$ y $\{|p_x\rangle\}$ son bases ortonormales, se debe verificar que

$$\hat{I} = \int_{\mathbb{R}} dp_x |p_x\rangle \langle p_x| = \int_{\mathbb{R}} dx |x\rangle \langle x|. \quad (1.12)$$

Utilizando (1.11) y (1.12), obtenemos una relación entre $\Psi(x, t)$ y $\tilde{\Psi}(p_x, t)$:

$$\Psi(x, t) = \langle x | \hat{I} | \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} dp_x \langle x | p_x \rangle \langle p_x | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dp_x \tilde{\Psi}(p_x, t) \exp(ip_x x / \hbar).$$

Es decir, $\Psi(x, t)$ es la transformada de Fourier inversa de $\tilde{\Psi}(p_x, t)$. Análogamente, se comprueba que

$$\tilde{\Psi}(p_x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, t) \exp(-ip_x x / \hbar),$$

esto es, $\tilde{\Psi}(p_x, t)$ es la transformada de Fourier en x de la función $\Psi(x, t)$. Habitualmente, utilizaremos la notación $\mathcal{F}\mathcal{T}$ (*Fourier Transform*) y $\mathcal{I}\mathcal{F}\mathcal{T}$ (*Inverse Fourier Transform*), de forma que

$$\tilde{\Psi}(p_x, t) = \mathcal{F}\mathcal{T}(\Psi)(p_x, t), \quad \Psi(x, t) = \mathcal{I}\mathcal{F}\mathcal{T}(\tilde{\Psi})(x, t).$$

Si en lugar de una coordenada espacial libre en \mathbb{R} ($x \in \mathbb{R}$) tenemos una coordenada angular ($\theta \in [0, 2\pi]$), la función $\Psi(\theta, t)$ dada por

$$\Psi(\theta, t) = \langle \theta | \Psi \rangle$$

es periódica en θ con periodo 2π . Así, podemos considerar su serie de Fourier

$$\Psi(\theta, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \Phi(l, t) \exp(il\theta),$$

donde los coeficientes $\Phi(l, t)$ vienen dados por

$$\Phi(l, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{2\pi} d\theta \Psi(\theta, t) \exp(-il\theta).$$

De forma análoga al caso (\hat{x}, \hat{p}_x) , se demuestra que $\Phi(l, t)$ son funciones propias del operador momento angular \hat{p}_θ . Así, habitualmente utilizaremos también la notación

$$\Phi(l, t) = \mathcal{F}\mathcal{T}(\Psi)(l, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_0^{2\pi} d\theta \Psi(\theta, t) \exp(-il\theta),$$

para relacionar las funciones $\Phi(l, t)$ y $\Psi(\theta, t)$.

1.3.3. Principio de indeterminación

A continuación, estudiaremos la relación entre las indeterminaciones de dos operadores y estudiaremos en un ejemplo concreto la evolución de estas indeterminaciones en el tiempo. Como referencia, hemos utilizado [2].

Dados dos operadores \hat{A}, \hat{B} , se define el *conmutador* de A y B como el operador

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}.$$

De forma que si \hat{A} y \hat{B} conmutan, entonces su conmutador es el operador nulo. Sea $|\Psi\rangle$ un estado cualquiera y definimos los operadores

$$\hat{A}_0 = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle, \quad \hat{B}_0 = \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle.$$

Es inmediato que entonces $[\hat{A}_0, \hat{B}_0] = [\hat{A}, \hat{B}]$ y

$$\left(\Delta \hat{A}\right)^2 = \langle \hat{A}_0^2 \rangle, \quad \left(\Delta \hat{B}\right)^2 = \langle \hat{B}_0^2 \rangle,$$

Tomamos $\lambda \in \mathbb{C}$ arbitrario. Entonces,

$$\|(\hat{A}_0 + i\lambda\hat{B}_0)|\Psi\rangle\|^2 = \langle \Psi | ((\hat{A}_0 - i\lambda\hat{B}_0)(\hat{A}_0 + i\lambda\hat{B}_0)) | \Psi \rangle. \quad (1.13)$$

Expandimos el producto de los operadores:

$$(\hat{A}_0 - i\lambda\hat{B}_0)(\hat{A}_0 + i\lambda\hat{B}_0) = \hat{A}_0^2 + i\lambda\hat{A}_0\hat{B}_0 - i\lambda\hat{B}_0\hat{A}_0 - \lambda^2\hat{B}_0^2 = \hat{A}_0^2 + i\lambda[\hat{A}_0, \hat{B}_0] + \lambda^2\hat{B}_0^2.$$

Sustituimos esta expresión en la ecuación (1.13),

$$\|(\hat{A}_0 + i\lambda\hat{B}_0)|\Psi\rangle\|^2 = \langle \Psi | \hat{A}_0^2 | \Psi \rangle + i\lambda \langle \Psi | [\hat{A}_0, \hat{B}_0] | \Psi \rangle + \lambda^2 \langle \Psi | \hat{B}_0^2 | \Psi \rangle.$$

Así, consideramos la ecuación de segundo grado en λ

$$\lambda^2 \left(\Delta \hat{B}\right)^2 + i\lambda \langle \Psi | [\hat{A}_0, \hat{B}_0] | \Psi \rangle + \left(\Delta \hat{A}\right)^2 = 0.$$

Como la norma de un vector es un número real, tenemos que $i\lambda \langle \Psi | [\hat{A}_0, \hat{B}_0] | \Psi \rangle \in \mathbb{R}$, de donde $\lambda \in \mathbb{R}$. Por lo tanto, la ecuación anterior debe tener discriminante negativo, esto es

$$\left(\langle \Psi | [\hat{A}_0, \hat{B}_0] | \Psi \rangle\right)^2 - 4 \left(\Delta \hat{A}\right)^2 \left(\Delta \hat{B}\right)^2 \leq 0.$$

En definitiva, obtenemos

$$\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \Psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \Psi \rangle \right| \quad (1.14)$$

La ecuación (1.14) se conoce como *relación de indeterminación de Heisenberg*, y nos indica que si dos operadores no conmutan entonces, existe una cota inferior para el producto de sus indeterminaciones.

Estudiamos el caso particular de los operadores de posición y momento. Consideramos la acción del operador $[\hat{x}, \hat{p}_x]$ en un ket $|\Psi\rangle$ proyectado en la base de posiciones

$$\begin{aligned} \langle x | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \Psi \rangle &= \langle x | \hat{x} \hat{p}_x | \Psi \rangle - \langle x | \hat{p}_x \hat{x} | \Psi \rangle = \hat{x}(\hat{p}_x \Psi(x)) - \hat{p}_x(\hat{x} \Psi(x)) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x \Psi(x)) \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x} + ix\hbar \frac{\partial}{\partial x}(\Psi(x)) + i\hbar \Psi(x) = \langle x | i\hbar \hat{\text{Id}} | \Psi \rangle, \end{aligned}$$

donde $\hat{\text{Id}}$ denota el operador identidad. De esta forma, obtenemos la *ecuación de conmutación fundamental*

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{\text{Id}}. \quad (1.15)$$

Aplicando entonces la ecuación (1.14), obtenemos

$$\Delta \hat{x} \Delta \hat{p}_x \geq \frac{\hbar}{2},$$

ecuación conocida como *relación de Heisenberg*.

Por ejemplo, consideremos un sistema descrito por una función de onda que en el instante $t = 0$ es una función gaussiana tal que la función de densidad $|\Psi(x, 0)|^2$ sigue una distribución normal centrada en $x = 0$ y con desviación típica $\sigma > 0$:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right).$$

Para determinar la transformada de Fourier de Ψ , utilizaremos la fórmula de la integral gaussiana:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-(ax^2 + bx + c)) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left(-\frac{b^2}{4a} - c\right).$$

Calculamos la transformada de Fourier de la función de onda en el instante $t = 0$,

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(p_x, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx \Psi(x, 0) \exp\left(-\frac{ip_x x}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2} - \frac{ip_x x}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{\mathbb{R}} dx \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma^2} - \frac{ip_x x}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sqrt{\pi(4\sigma^2)} \exp\left(-\frac{\sigma^2 p_x^2}{\hbar^2}\right). \end{aligned}$$

Definiendo $\tilde{\sigma} = \frac{\hbar}{2\sigma}$, obtenemos

$$\tilde{\Psi}(p_x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\tilde{\sigma}^2}} \exp\left(-\frac{p_x^2}{4\tilde{\sigma}^2}\right).$$

Es decir, en el instante inicial, en la representación de posiciones tenemos una gaussiana centrada en $p_{x0} = 0$ y desviación típica $\tilde{\sigma} = \frac{\hbar}{2\sigma} > 0$.

Es claro que las indeterminaciones en la posición y momento vienen dadas por la desviación típica de cada función gaussiana, de forma que, en este caso $\Delta\hat{x}(t=0) = \sigma$, $\Delta\hat{p}_x(t=0) = \tilde{\sigma} = \frac{\hbar}{2\sigma}$, de manera que

$$\Delta\hat{x}(t=0)\Delta\hat{p}_x(t=0) = \frac{\hbar}{2}.$$

Es decir, en el paquete de ondas gaussiano obtenemos la igualdad en la relación de incertidumbre, esto es, el valor mínimo del producto $\Delta\hat{x}$ y $\Delta\hat{p}_x$.

Nos interesamos entonces por la evolución temporal de la función de onda. Supongamos que tenemos un paquete de ondas definido por la relación de dispersión de una partícula libre de masa m y número de ondas k

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

Considerando $p_x = \hbar k$, tenemos

$$\omega = \frac{p_x^2}{2m\hbar}.$$

Supongamos que en el instante t , la función $\Psi(x, t)$ es una superposición de ondas planas centradas en $p_x = p_{x0}$ de la forma

$$\tilde{\Psi}(p_x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\tilde{\sigma}^2}} \exp\left(-\frac{(p_x - p_{x0})^2}{4\tilde{\sigma}^2}\right).$$

Entonces,

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}(p_x, 0) e^{-i(\omega t - p_x x)} dp_x.$$

Haciendo cálculos (ver [2]), obtenemos

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{\sigma^2}{2\pi}} \frac{1}{|u^2|} \exp\left(-\frac{\sigma^2}{2|u^2|^2} \left(x - \frac{p_{x0}}{m}t\right)^2\right),$$

donde

$$u = \sqrt{\sigma^2 + \frac{i\hbar t}{2m}}.$$

En definitiva, en el instante t , la indeterminación del paquete de ondas viene dada por

$$\Delta\hat{x}(t) = \frac{\sigma}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 \sigma^4}}.$$

Para valores suficientemente grandes de t ,

$$\Delta\hat{x}(t) \approx \frac{\hbar t}{2m\sigma} = \frac{\tilde{\sigma}}{m} t = \frac{1}{m} \Delta\hat{p}_x(t=0)t.$$

En definitiva, si consideramos un sistema que en el instante $t = 0$ está descrito por una función de onda gaussiana con indeterminación $\Delta\hat{x}(t=0) = \sigma$, entonces la relación de indeterminación alcanza su valor mínimo $\Delta\hat{x}(t=0)\Delta\hat{p}_x(t=0) = \frac{\hbar}{2}$. Además, si consideramos que la evolución del paquete de ondas viene dada por la relación de dispersión de una partícula libre, entonces la indeterminación crece de forma aproximadamente lineal en el tiempo.

1.3.4. Teorema de Ehrenfest y Principio de Correspondencia

A continuación, relacionaremos los resultados obtenidos en el formalismo cuántico con los conocidos para los sistemas hamiltonianos clásicos. Como referencia para esta parte hemos seguido [2] y [17].

Consideremos un sistema descrito por la función de onda $\Psi(t)$ y un operador $\hat{A}(t)$ cuyo valor esperado viene dado por

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle.$$

La derivada temporal del valor esperado viene dada por

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \frac{d}{dt} (\langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{d}{dt} (\hat{A} | \Psi \rangle)) \\ &= \frac{d}{dt} (\langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \hat{A} \frac{d}{dt} (| \Psi(t) \rangle)). \end{aligned}$$

Utilizando la ecuación de Schrödinger y el hecho de que \hat{H} es un operador hermitiano,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle &= \frac{1}{i\hbar} \left(\langle \Psi(t) | \hat{A} \hat{H} | \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{H} \hat{A} | \Psi(t) \rangle \right) + \langle \Psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi(t) \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi(t) \rangle. \end{aligned}$$

De esta forma, la evolución temporal del valor esperado del operador \hat{A} resulta

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle. \quad (1.16)$$

El resultado anterior se conoce como *teorema de Ehrenfest*. Recordemos que habíamos obtenido la relación (1.15)

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{\text{Id}}.$$

Las ecuaciones (1.15) y (1.16) recuerdan a los resultados (1.6), (1.7) obtenidos para sistemas hamiltonianos clásico:

$$\begin{cases} \frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}, \\ \{x, p_x\} = 1. \end{cases}$$

El *Principio de Correspondencia de Bohr* establece que la descripción cuántica de un sistema es equivalente al comportamiento clásico del sistema clásico correspondiente para grandes valores de números cuánticos (es decir, los valores propios de los operadores que describen el sistema). Así, se establece la *cuantización de Dirac* que relaciona los conmutadores cuánticos con los paréntesis de Poisson clásicos

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \rightarrow i\hbar \{x, p_x\}.$$

Hemos visto que la evolución de $\langle \hat{A} \rangle$ depende de la dependencia explícita de \hat{A} con el tiempo y de su conmutador con el hamiltoniano \hat{H} . Consideramos un sistema unidimensional y un hamiltoniano de la forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x).$$

Aplicamos el teorema de Ehrenfest a los operadores \hat{x}, \hat{p}_x . Por un lado,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p}_x \rangle.$$

Por otro lado,

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{V}(x)] \rangle = -\langle \hat{V}'(x) \rangle.$$

Así, obtenemos las ecuaciones

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p}_x \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= -\langle \hat{V}'(x) \rangle. \end{cases}$$

Si consideramos F una fuerza que deriva del potencial, obtenemos

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p}_x \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= \langle F \rangle. \end{cases}$$

Es decir, un resultado muy semejante a las ecuaciones de Newton. Ahora bien, si intercambiamos

los valores esperados de los operadores \hat{x}, \hat{p}_x por las coordenadas clásicas x, p_x no obtenemos exactamente las ecuaciones de Newton, pues en general no se verifica que

$$\langle V'(x) \rangle \neq V'(\langle x \rangle).$$

Por ejemplo, si $V(x) = x^3$, entonces $V'(x) = x^2$. Así, tenemos que

$$\hat{V}'(x)(\langle x \rangle) - \langle \hat{V}'(x) \rangle = \langle x \rangle^2 - \langle x^2 \rangle = \Delta x \neq 0.$$

El Teorema de Ehrenfest nos permite hacernos una idea de una escala temporal durante la cual se verifica el Principio de Correspondencia. Si consideramos un sistema inicialmente descrito por una función de onda lo suficientemente *estrecha*, en el sentido de con una indeterminación pequeña, entonces podemos suponer que los operadores \hat{x} y \hat{p}_x están bien descritos por sus valores esperados y por lo tanto el comportamiento cuántico del sistema es equivalente al comportamiento clásico.

Ahora bien, tal y como vimos en el ejemplo del paquete de ondas gaussiano con la ecuación de dispersión de la partícula libre en el vacío (lo que intuitivamente podría ser el caso más sencillo e integrable posible), la dispersión del paquete de ondas aumenta con el tiempo. Así, para cada sistema existe un tiempo, denominado *tiempo de Ehrenfest*, durante el cual esta correspondencia es válida.

Por ejemplo, para el paquete de ondas gaussiano que estudiamos en la sección anterior, obtuvimos que $\Delta \hat{x}(t) \approx \Delta \hat{p}_x(t=0)t$. Podemos suponer que $\Delta \hat{x}(t=0) \Delta \hat{p}_x(t=0)$ del orden de magnitud de $\sqrt{\hbar}$ (en las unidades adecuadas). Entonces, calculamos el tiempo de Ehrenfest como el valor a partir del cual $\Delta \hat{x}(t)$ alcanza un orden de magnitud macroscópico (por ejemplo, $\Delta \hat{x} = 1\text{cm}$). En este caso, obtendríamos

$$\Delta \hat{x} = \frac{\Delta \hat{p}_x t_E}{m} \approx 1\text{cm}$$

$$t_E \approx \frac{m \cdot 1\text{cm}}{\sqrt{1.055 \times 10^{-34}\text{kg m/s}}},$$

donde hemos considerado $\Delta \hat{p}_x(t) = \sqrt{1.055 \times 10^{-34}\text{kg m/s}}$ porque $\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. Es decir, para un caso integrable, el tiempo de Ehrenfest es inversamente proporcional a la raíz cuadrada de la constante de Planck, o bien una constante de Planck *efectiva*, si nuestro sistema no viene dado por las coordenadas (p_x, x) sino por unas coordenadas por ejemplo angulares: (p_θ, θ) .

1.3.5. Operadores de Floquet

Finalmente, para definir un sistema dinámico en un sistema cuántico definimos los operadores de Floquet, siguiendo como referencia [10].

Consideremos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle$$

La solución formal de la ecuación diferencial viene dada por

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t') dt'\right) |\Psi(t=0)\rangle.$$

Definimos entonces el operador

$$\hat{U}(t, s) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_s^t H(t') dt'\right),$$

de forma que

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t') dt'\right) |\Psi(t=0)\rangle = \hat{U}(t, 0) |\Psi(t=0)\rangle.$$

Supongamos que tenemos un hamiltoniano dependiente del tiempo pero periódico, de periodo τ . En particular, supongamos que el hamiltoniano es de la forma

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau), \quad (1.17)$$

con \hat{V}, \hat{H}_0 operadores que no dependen explícitamente del tiempo. Entonces, es claro que

$$|\Psi(t = \tau)\rangle = \hat{U}(\tau) |\Psi(t = 0)\rangle$$

y, en general,

$$|\Psi(t = n\tau)\rangle = \hat{U}(\tau)^n |\Psi(t = 0)\rangle$$

para todo $n \in \mathbb{N}$. Sea $\epsilon > 0$ arbitrario y consideramos la evolución durante un periodo

$$\hat{U}(\epsilon, \tau + \epsilon) = \hat{U}(\epsilon, \tau - \epsilon) \hat{U}(\tau - \epsilon, \tau + \epsilon),$$

donde para la última igualdad hemos aplicado la linealidad de la integral. Entonces,

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\epsilon}^{\tau+\epsilon} H(t') dt'\right) = \exp\left(\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\epsilon}^{\tau-\epsilon} H(t') dt'\right)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\tau-\epsilon}^{\tau+\epsilon} H(t') dt'\right).$$

El primer factor es trivial porque la delta de Dirac es nula para $t \in [\epsilon, \tau - \epsilon)$, de donde

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\epsilon}^{\tau-\epsilon} H(t') dt'\right) = \exp(-i\hat{H}_0\tau/\hbar).$$

Por otro lado, en el intervalo $[\tau - \epsilon, \tau + \epsilon]$ podemos suponer que el efecto de \hat{H}_0 es despreciable en comparación con el término asociado a la δ de Dirac. Es decir, consideramos la aproximación

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{\tau-\epsilon}^{\tau+\epsilon} \left(\hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t' - n\tau)\right) dt'\right) &\approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left(\int_{\tau-\epsilon}^{\tau+\epsilon} \lambda \hat{V} \delta(t' - \tau) dt'\right)\right) \\ &= \exp\left(-\frac{i\lambda \hat{V}}{\hbar}\right). \end{aligned}$$

Definimos entonces los *operadores de Floquet*

$$\hat{F}_+ = \exp(-i\lambda \hat{V}/\hbar) \exp(-i\hat{H}_0\tau/\hbar) \quad (1.18)$$

y

$$\hat{F}_- = \exp(-i\hat{H}_0\tau/\hbar) \exp(-i\lambda \hat{V}/\hbar). \quad (1.19)$$

Podemos interpretar la ecuación (1.17) como la descripción de un sistema dado por un hamiltoniano \hat{H}_0 independiente del tiempo que perturbamos de forma periódica en el tiempo, con *impactos* de periodo τ . De esta forma, el operador \hat{F}_+ describe la evolución del sistema entre un estado inmediatamente posterior a un impacto y el instante inmediatamente posterior al siguiente impacto. De forma análoga, el operador \hat{F}_- describe la evolución del sistema desde el instante inmediatamente anterior un impacto hasta el instante justo antes del siguiente impacto. Definimos entonces las funciones de onda $|\psi_{n\pm}\rangle$:

$$|\psi_{n+}\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} |\Psi(n\tau + \epsilon)\rangle = \hat{F}_+^n |\Psi(t=0)\rangle, \quad |\psi_{n-}\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} |\Psi(n\tau - \epsilon)\rangle = \hat{F}_-^n |\Psi(t=0)\rangle$$

para todo $n \in \mathbb{N}$. La función de onda ψ_{n-} representa el estado del sistema inmediatamente antes del n -ésimo impacto y ψ_{n+} representa el estado del sistema inmediatamente después del n -ésimo impacto.

Capítulo 2

El *Kicked rotator*

2.1. El *kicked rotator* clásico

El *kicked rotator* es un ejemplo de sistema hamiltoniano con comportamiento caótico. Como referencias para la primera sección acerca del *kicked rotator* clásico hemos utilizado principalmente [3], [14], [19] y, en menor medida, [8]. y [9]. Para hacer las simulaciones, hemos utilizado los paquetes de [3] en *Python*.

2.1.1. Descripción del problema

Consideramos una barra de longitud l y momento de inercia I , fija por un extremo, como se observa en la Figura 2.1. Denotamos θ el ángulo que forma la barra con la vertical.

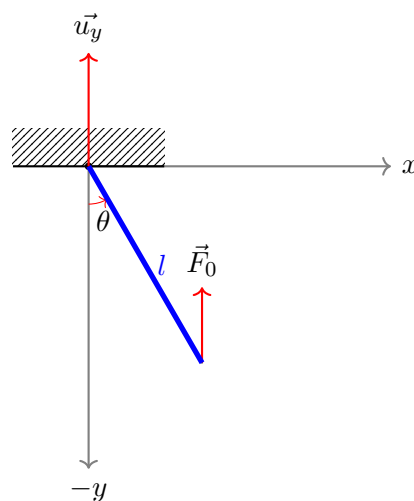


Figura 2.1: Esquema del sistema *kicked rotator*

En el capítulo anterior, vimos que el momento angular en la dirección vertical es p_θ , siendo p_θ el momento canónico conjugado de θ . Supongamos que aplicamos una fuerza $\vec{F} = F_0 \vec{u}_y$ vertical y periódica, con periodo τ : es decir, solo se aplica la fuerza en los instantes $0, \tau, 2\tau, \dots, n\tau$, con $n \in \mathbb{N}$. Denotamos $E_0 = F_0 l > 0$. El hamiltoniano del sistema resulta

$$H(p_\theta, \theta, t) = \frac{p_\theta^2}{2I} + E_0 \cos(\theta) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau), \quad (2.1)$$

donde el término asociado a la energía cinética viene dado por la energía cinética de rotación $T = \frac{p_\theta^2}{2I}$ y los impactos periódicos y verticales se modelizan mediante una δ de Dirac. Nuestro objetivo es estudiar el comportamiento a largo plazo del sistema, de forma cualitativa. Las ecuaciones de Hamilton son

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{I}, \quad (2.2)$$

$$\frac{dp_\theta}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = E_0 \sin(\theta) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau). \quad (2.3)$$

Notamos que, si $E_0 = 0$, entonces

$$\frac{dp_\theta}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = 0.$$

En consecuencia, p_θ es una constante del movimiento, que en adelante denotamos $p_{\theta,0}$. Como tenemos un sistema de $2N$ grados de libertad y $N = 1$ constantes del movimiento, concluimos que, en el caso $E_0 = 0$, el sistema es integrable. En el caso $E_0 > 0$, estamos considerando una pequeña perturbación del sistema integrable.

2.1.2. Reducción a la aplicación estándar de Chirikov

Nuestro objetivo a continuación es estudiar el *kicked rotator* clásico mediante un sistema dinámico discreto, utilizando una aplicación de tiempo \mathcal{T} . Seguiremos el procedimiento de [8].

Recordemos que las ecuaciones de Hamilton vienen dadas por

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_\theta} = \frac{p_\theta}{I},$$

$$\frac{dp_\theta}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \theta} = E_0 \sin(\theta) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau).$$

Notamos que, en general, si hacemos variar $t \in \mathbb{R}$, el hamiltoniano H depende de t , así que las ecuaciones anteriores no definen un sistema autónomo. Sin embargo, para cada $n \in \mathbb{N}$ y para cada $t \in (n\tau, (n+1)\tau)$, esto es, en cada instante t entre dos impactos, se verifica que

$\sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau) = 0$. Por tanto, las ecuaciones del movimiento en el intervalo $(n\tau, (n+1)\tau)$ resultan

$$\begin{aligned}\frac{dp_{\theta}}{dt} &= E_0 \sin(\theta) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau) = 0 \\ \frac{d\theta}{dt} &= \frac{p_{\theta}}{I},\end{aligned}$$

de donde

$$\begin{aligned}p_{\theta}(t) &= \text{cte} \\ \theta(t) &= \theta_0 + \frac{p_{\theta}}{I}t,\end{aligned}$$

para cierto $\theta_0 \in (0, 2\pi)$. Es decir, entre impactos, p_{θ} es constante y θ varía linealmente. Denotamos $p_{\theta,n}$ el valor del momento angular para cualquier instante entre el n -ésimo y el $(n+1)$ -ésimo impacto: en el instante inicial tenemos $p_{\theta,0}$, tras el primer impacto obtenemos $p_{\theta,1}$, y sucesivamente construimos la sucesión $\{p_{\theta,n}\}_{n \in \mathbb{N} \cup \{0\}}$.

Recordemos que en cada intervalo $(n\tau, (n+1)\tau)$, la variable θ varía linealmente. Denotamos θ_n el valor de $\theta(t)$ en un tiempo $t = n\tau + \epsilon$, con $\epsilon > 0$ arbitrariamente pequeño, es decir, justo después del n -ésimo impacto. Integrando las ecuaciones de Hamilton (2.2) y (2.3), obtenemos

$$\begin{aligned}p_{\theta,n+1} - p_{\theta,n} &= \int_{n\tau}^{(n+1)\tau} \frac{dp_{\theta}}{dt} dt = \int_{n\tau}^{(n+1)\tau} E_0 \sin(\theta) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau) dt = E_0 \tau \sin(\theta_n). \\ \theta_{n+1} - \theta_n &= \int_{n\tau}^{(n+1)\tau} \frac{d\theta}{dt} dt = \int_{n\tau}^{(n+1)\tau} \frac{p_{\theta}(t)}{I} dt = \int_{n\tau}^{(n+1)\tau} \frac{p_{\theta,n}}{I} dt = \frac{p_{\theta,n}\tau}{I}.\end{aligned}$$

En consecuencia, obtenemos el esquema discreto

$$\begin{aligned}p_{\theta,n+1} &= p_{\theta,n} + E_0 \tau \sin(\theta_n) \\ \theta_{n+1} &= \left(\theta_n + \frac{p_{\theta,n}\tau}{I} \right) \text{ mód } 2\pi.\end{aligned}$$

Recordemos que nuestro objetivo es estudiar el comportamiento cualitativo a largo plazo del sistema. Para facilitar el análisis, introducimos variables adimensionales: $p = \frac{p_{\theta}\tau}{I}$ y $K = \frac{E_0\tau^2}{I}$. Aunque en adelante nos referiremos a p como *momento*, realmente se trata de una cantidad adimensional proporcional al momento p_{θ} . Así, p puede interpretarse como p_{θ} medido en la unidad característica de momento de este sistema, que es $\frac{I}{\tau}$.

Por otro lado, K es un parámetro adimensional que representa la intensidad de los impactos periódicos al que está sometido el oscilador, y por tanto, la magnitud de la perturbación del sistema integrable. De esta forma, obtenemos las ecuaciones

$$p_{n+1} = p_n + K \sin(\theta_n) \quad (2.4)$$

$$\theta_{n+1} = (\theta_n + p_n) \quad \text{mód } 2\pi. \quad (2.5)$$

La aplicación 2–dimensional anterior se conoce como *aplicación estándar* o *aplicación estándar de Chirikov*. Recordemos que el espacio de fases viene dado por (p, θ) . Como $\theta \in [0, 2\pi)$, si además tomamos $p \quad \text{mód } 2\pi$, obtenemos

$$p_{n+1} = (p_n + K \sin(\theta_n)) \quad \text{mód } 2\pi$$

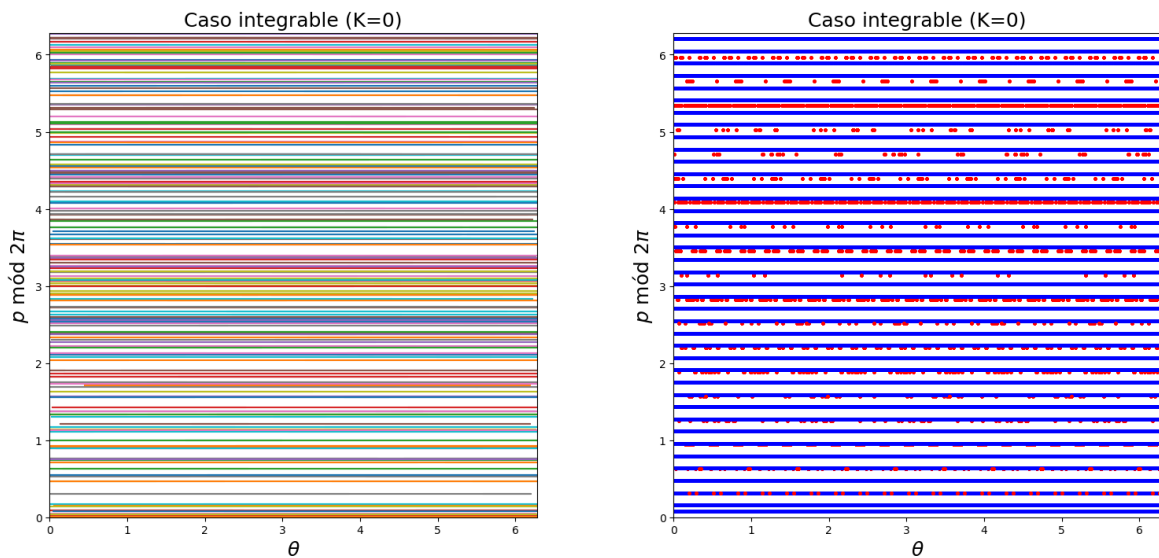
$$\theta_{n+1} = (\theta_n + p_n) \quad \text{mód } 2\pi.$$

Notamos que, en el caso $K = 0$,

$$p_{n+1} = p_n = p_0 = \text{cte} \quad \text{mód } 2\pi \quad (2.6)$$

$$\theta_{n+1} = (\theta_n + p_0) \quad \text{mód } 2\pi. \quad (2.7)$$

Recordemos que (2.7) es la rotación rígida de ángulo $\omega_0(p_0) = p_0$ introducida en el primer capítulo, con número de rotación $R = \frac{p_0}{2\pi}$. En la Figura 2.2 tenemos una representación de las órbitas en el caso $K = 0$, es decir, en el caso integrable.



(a) Representación de distintas órbitas utilizando valores aleatorios para las condiciones iniciales

(b) En rojo, órbitas con número de rotación racional y en azul, órbitas con número de rotación irracional.

Figura 2.2: Representación de 200 trayectorias, utilizando 1000 iteraciones para representar cada una, en el caso integrable $K = 0$.

Representamos los toros dados por las variables θ, p mód 2π en un cuadrado $(\theta, p \text{ mód } 2\pi) \in [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$. Como hemos visto, en este caso p es una constante del movimiento, por lo que obtenemos líneas horizontales.

En la figura de la izquierda representamos órbitas utilizando valores aleatorios para las condiciones iniciales; en el caso de la derecha, representamos también órbitas con condiciones iniciales aleatorias, pero considerando el mismo número de órbitas con número de rotación racional y número de rotación irracional.

En el caso de órbitas con número de rotación irracional, las órbitas son densas en el toro, por lo que tenemos que observamos líneas de la forma $p \text{ mód } 2\pi = \text{cte}$ completas. Por el contrario, de número de rotación racional, las órbitas no cubren el toro densamente y observamos líneas discontinuas, representadas en rojo.

En la figura de la izquierda podría parecer que también hemos impuesto que el número de rotación sea irracional, pues solo observamos líneas rectas completas. No es el caso, lo que ocurre es que los números racionales tienen medida de Lebesgue nula, y por lo tanto si tomamos un número real de forma aleatoria la probabilidad de que sea racional es cero. Así, al tomar valores aleatorios para las condiciones iniciales, en la práctica estamos sobre todo representando órbitas con número de rotación irracional.

2.1.3. Estabilidad lineal de las órbitas periódicas

A continuación, estudiaremos la estabilidad de las órbitas periódicas de la aplicación estándar de Chirikov.

Como referencia, hemos utilizado [9]. Comenzamos estudiando los puntos fijos de la aplicación estándar, es decir, imponemos $(p_n, \theta_n) = (p_1, \theta_1)$ para todo $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$.

$$p_{n+1} = p_n = (p_n + K \sin(\theta_n)) \text{ mód } 2\pi \quad (2.8)$$

$$\theta_{n+1} = \theta_n = (\theta_n + p_n) \text{ mód } 2\pi. \quad (2.9)$$

Es claro que las dos soluciones posibles son $(p, \theta) = (0, 0)$ y $(p, \theta) = (0, \pi)$. Estudiamos la estabilidad lineal de ambos puntos fijos. Notamos que el Jacobiano del sistema viene dado por la matriz

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial p_{n+1}}{\partial \theta_n} \\ \frac{\partial \theta_{n+1}}{\partial p_n} & \frac{\partial \theta_{n+1}}{\partial \theta_n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & K \cos(\theta_n) \\ 1 & 1 + K \cos(\theta_n) \end{bmatrix}$$

Imponemos $(p_n, \theta_n) = (p_1, \theta_1)$ con $\theta_1 = 0$ o bien $\theta_1 = \pi$. Entonces,

$$J(\theta_n) = J(\theta_1) = \begin{bmatrix} 1 & K \cos(\theta_1) \\ 1 & 1 + K \cos(\theta_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \pm K \\ 1 & 1 \pm K \end{bmatrix},$$

donde el signo $+$ se corresponde con $\theta_1 = 0$ y el signo $-$ se corresponde con $\theta_1 = \pi$. Notamos que

$$\det(J) = (1 \pm K) - (\pm K) = 1,$$

pues se trata de un sistema hamiltoniano y por tanto el jacobiano de la transformación es una matriz simpléctica. Además,

$$\text{Tr}(J) = 2 \pm K.$$

En el capítulo anterior, caracterizamos la estabilidad de las órbitas periódicas y en particular de los puntos fijos para sistemas tales que $\det(J) = 1$ en función de $\text{Tr}(J)$:

$$|\text{Tr}(J)| = |2 \pm K| < 2,$$

equivalentemente,

$$-2 < 2 \pm K < 2,$$

esto es, $-4 < \pm K < 0$. Como $K > 0$, concluimos que el punto $(p_1, \theta_1) = (0, 0)$ es siempre inestable, mientras que $(p_1, \theta_1) = (0, \pi)$ es estable para $K < 4$.

Consideremos a continuación puntos de periodo 2, es decir, $(p_2, \theta_2) = (p_0, \theta_0)$:

$$p_1 = p_0 + K \sin(\theta_0) \quad \text{mód } 2\pi \tag{2.10}$$

$$\theta_1 = \theta_0 + p_0 \quad \text{mód } 2\pi \tag{2.11}$$

$$p_2 = p_0 = p_1 + K \sin(\theta_1) \quad \text{mód } 2\pi \tag{2.12}$$

$$\theta_2 = \theta_0 = \theta_1 + p_1 \quad \text{mód } 2\pi \tag{2.13}$$

$$\tag{2.14}$$

La matriz A que determina la estabilidad lineal de los puntos periódicos viene dada por

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 1 & K \cos(\theta_1) \\ 1 & 1 + K \cos(\theta_1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & K \cos(\theta_0) \\ 1 & 1 + K \cos(\theta_0) \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 1 + K \cos(\theta_1) & K \cos(\theta_0) + K \cos(\theta_1 + K^2 \cos(\theta_1) \cos(\theta_0)) \\ 2 + K \cos(\theta_1) & K \cos(\theta_0) + (1 + K \cos(\theta_1))(1 + K \cos(\theta_0)) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Por lo tanto, la traza resulta

$$\begin{aligned}\text{Tr}(A) &= 1 + K \cos(\theta_1) + K \cos(\theta_0) + 1 + K(\cos(\theta_1) + \cos(\theta_0)) + K^2 \cos(\theta_1) \cos(\theta_0) = \\ &= 2 + 2K(\cos(\theta_1) + \cos(\theta_0)) + K^2 \cos(\theta_1) \cos(\theta_0),\end{aligned}$$

y la condición de estabilidad $|\text{Tr}(A)| < 2$ es equivalente a

$$-4 < 2K(\cos(\theta_1) + \cos(\theta_0)) + K^2 \cos(\theta_1) \cos(\theta_0) < 0. \quad (2.15)$$

Si sumamos las ecuaciones (2.10) y (2.12), obtenemos

$$p_1 + p_0 = p_0 + p_1 + 2K(\sin(\theta_0) + \sin(\theta_1)),$$

de donde

$$\sin(\theta_1) = -\sin(\theta_0).$$

Consideramos entonces dos posibles casos

(a) $\theta_1 = -\theta_0$. En consecuencia, $\cos(\theta_1) = \cos(\theta_0)$

Imponemos $\cos(\theta_1) = \cos(\theta_0)$ en la ecuación (2.15)

$$-4 < 4K \cos(\theta_0) + K^2 \cos^2(\theta_0) = K \cos(\theta_0)(4 + K \cos(\theta_0)) < 0$$

y por tanto la condición de estabilidad es

$$-4 < K \cos(\theta_0) < 0$$

(b) $\theta_1 = \theta_0 + \pi$, de donde $\cos(\theta_1) = -\cos(\theta_0)$.

Por otro lado, en el caso (b), la condición de estabilidad viene dada por

$$-4 < -K^2 \cos^2(\theta_0) < 0$$

equivalentemente,

$$K^2 \cos^2 \theta_0 < 4,$$

es decir,

$$-2 < K \cos(\theta_0) < 2$$

En general, para puntos periódicos de orden superior, encontraremos distintas condiciones de estabilidad para K , obteniendo para cada curva periódica elíptica de periodo q una *isla de estabilidad de periodo q* . Tenemos un ejemplo representado en la Figura 2.3.

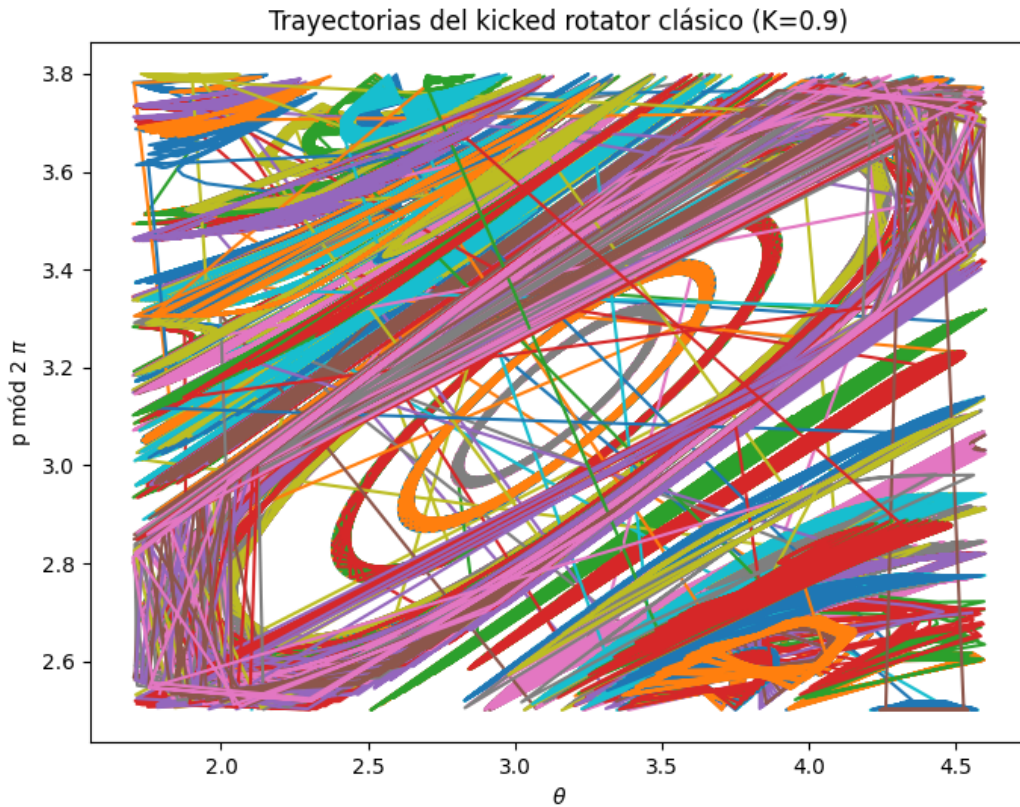


Figura 2.3: Isla de estabilidad en el caso $K = 0.9$.

2.1.4. Caos global: criterio de Chirikov

Para $K > 0$, comprobaremos numéricamente que el sistema presenta órbitas localmente caóticas, tal y como definimos el concepto de caos local utilizando los exponentes de Lyapunov. Además, definiremos a continuación qué entendemos por una dinámica globalmente caótica. Para esta sección, hemos utilizado [3] y [19].

Recordemos la condición de resonancia introducida en el capítulo anterior

$$m_0\omega_0(p_0) = n_0 2\pi, \quad (2.16)$$

con $(m_0, n_0) \in \mathbb{Z}^2$. Supongamos que hacemos variar n_0 en $n_0 \pm 1$, es decir, consideramos resonancias consecutivas. Queremos estudiar la distancia que separa estas dos resonancias. Tenemos entonces

$$m_0\omega_0(p_0 + \delta p) = (n_0 \pm 1)2\pi,$$

donde δp es la distancia entre resonancias para la variable p . Suponiendo $\delta p \ll p_0$, tenemos que

$$m_0\omega_0(p_0 + \delta p) \approx m_0 \left(\omega_0(p_0) + \frac{d\omega_0}{dp_0}(p_0)\delta p \right) = (n_0 \pm 1)2\pi.$$

Por la ecuación (2.16),

$$m_0 \left(\frac{d\omega_0}{dp_0}(p_0)\delta p \right) = \pm 2\pi.$$

Si definimos

$$\omega'_0 = m_0 \left(\frac{d\omega_0}{dp_0}(p_0) \right),$$

tenemos que

$$\delta\omega = \omega'_0\delta p = \pm 2\pi$$

es la distancia frecuencial entre dos resonancias. Supongamos que en las resonancias del sistema integrable la variable p varía en una amplitud Δp . Entonces, definimos la amplitud frecuencial de la resonancia como

$$\Delta\omega = \omega'_0\Delta p$$

y el indicador de caos global de Chirikov como

$$K_{ch} = \left| \frac{\Delta p}{\delta p} \right| = \left| \frac{\Delta\omega}{\delta\omega} \right|.$$

De esta forma, la condición de caos global o superposición de resonancias viene dada por $K_{ch} > 1$, pues en este caso tenemos que

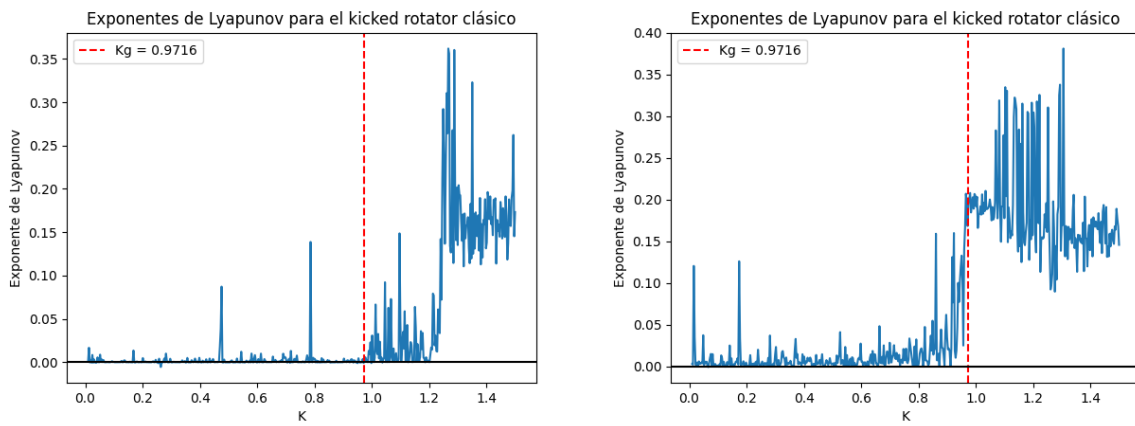
$$|\Delta\omega| > |\delta\omega|,$$

es decir, la amplitud de variación de ω es mayor que la distancia entre dos resonancias consecutivas. Por lo tanto, existe una superposición de resonancias y el sistema se encuentra en una situación de caos global. Para el kicked rotator de parámetro K , se puede demostrar que el valor crítico a partir del cual tenemos un fenómeno de superposición de resonancias y por tanto, caos global, viene dado por

$$K_g \approx 0.9716.$$

Es decir, K_g es el valor de K a partir del cual el indicador de Chirikov K_{ch} verifica que $K_{ch} > 1$. Este resultado fue obtenido por Greene en 1979 de forma numérica y puede consultarse en [6].

En la Figura 2.4 podemos observar que efectivamente para $K < K_g$ existen algunas órbitas caóticas, pero a partir de $K > K_g$ los exponentes de Lyapunov no solo son positivos sino que crecen significativamente, describiendo una situación de caos global. De nuevo, para la simulación hemos utilizado [11].



(a) Condición inicial $(\theta_0, p_0) = (0, 2\pi\phi_{\text{áureo}})$.

(b) Condición inicial $(\theta_0, p_0) = (1.629, 1.527)$.

Figura 2.4: Evolución de los exponentes de Lyapunov en función de K para distintas condiciones iniciales.

En la figura de la derecha hemos utilizado una condición inicial aleatoria, mientras que en la figura de la izquierda hemos tomado $p_0 = \phi_{\text{áureo}}$, donde

$$\phi_{\text{áureo}} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 1.618.$$

Esta elección tiene que ver con el problema de los denominadores pequeños al que nos enfrentamos cuando estudiamos el teorema KAM . Probamos que, ante pequeñas perturbaciones, solo los toros cuasiperiódicos con número de rotación irracional y mal aproximado por racionales se mantienen. Es un resultado clásico de Teoría de Números que el número áureo es el *peor aproximado por racionales* (ver [14]). Por lo tanto, esperamos que, al aumentar el valor de K , el toro integrable con número de rotación $\phi_{\text{áureo}}$ sea el último sistema en presentar un comportamiento caótico. Como se observa en la Figura 2.4, incluso en este caso tenemos una situación caótica para $K > K_g$.

Cabe destacar que para $K < K_g$ y la condición inicial $(\theta_0, p_0) = (0, 2\pi\phi_{\text{áureo}})$ sí que observamos algunos *picos* que podemos asociar a órbitas caóticas antes de alcanzar la situación de caos global. La explicación es claramente numérica: realmente, un ordenador nunca utiliza números irracionales, pues siempre trabaja con un número finito de decimales. Teniendo en cuenta además que en cada iteración se cometen errores de redondeo, es natural que al hacer una simulación obtengamos también órbitas caóticas antes de alcanzar la situación de caos global.

2.1.5. Difusión del momento

A continuación, veamos cómo la situación de caos global se traduce en una difusión lineal del momento angular. Para esta parte, hemos seguido principalmente [3] y en menor medida, [8] y [14].

Si tomamos $K > K_{ch}$, sabemos que nos encontramos en una situación de caos global y el espacio de fases al representar p mód 2π con respecto a θ está cubierto densamente por una órbita caótica. Recordemos la ecuación (2.5),

$$p_{n+1} = p_n + K \sin(\theta_n).$$

Así, la variación del momento Δp_n viene dada por

$$\Delta p_n = p_{n+1} - p_n = K \sin(\theta_n),$$

es decir, Δp_n es del orden de K . Para K suficientemente grande, en una situación de caos global, podemos interpretar θ_n como una variable aleatoria, uniformemente distribuida e independiente de n . En estas circunstancias, el movimiento de p se puede modelizar mediante un *camino aleatorio* con paso $\Delta p_n = K \sin(\theta_n)$.

Por lo tanto, para momentos de orden por encima de K , tenemos que el momento evoluciona según un movimiento de difusión con coeficiente

$$\frac{\langle (\Delta p_n)^2 \rangle}{2} = \frac{K^2}{2} \langle \sin^2(\theta_n) \rangle,$$

donde $\langle \cdot \rangle$ denota un promedio temporal. Además, como θ_n es una variable aleatoria, podemos considerar

$$\langle \sin^2(\theta) \rangle = \frac{1}{2}.$$

Finalmente, obtenemos que en el caso clásico, la difusión en p es de la forma

$$\frac{\langle (\Delta p_n)^2 \rangle}{2} = \frac{K^2}{4}.$$

Definimos así la *aproximación cuasilineal del coeficiente de difusión*:

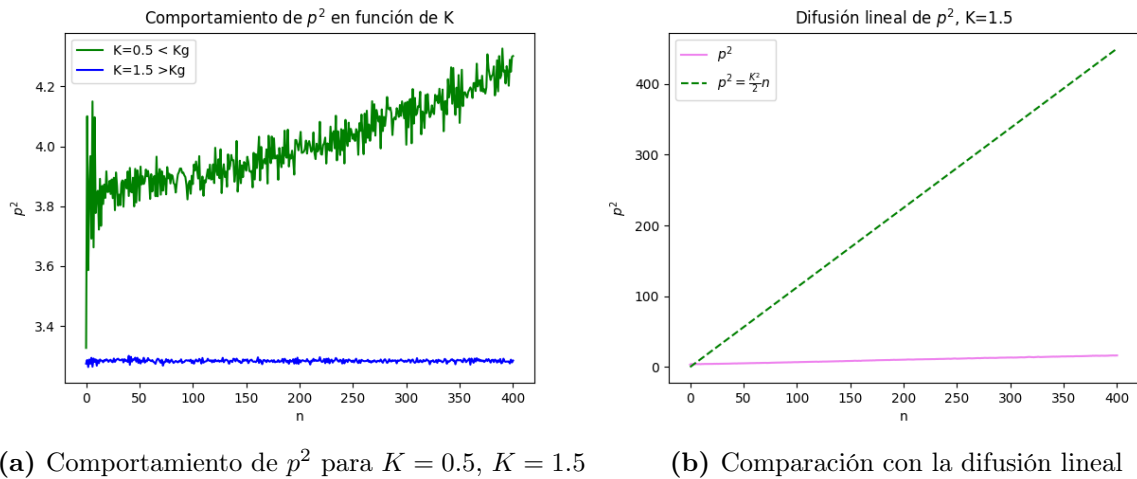
$$D = \frac{K^2}{2}.$$

Si consideramos un entorno de condiciones iniciales en $\theta \in [0, 2\pi)$, $p \in [0, 2\pi)$, entonces la función de distribución del momento p viene dada por

$$f(p, n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n D}} \exp\left(-\frac{p^2}{2n D}\right).$$

Calculando p^2 con esta distribución, obtenemos que el promedio de la energía cinética del sistema crece linealmente en el tiempo

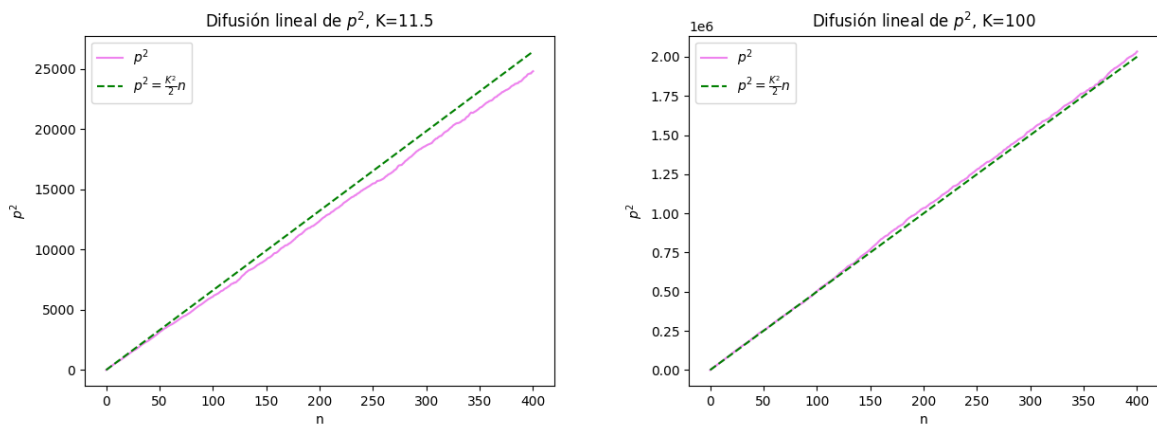
$$\langle p^2 \rangle \approx Dn = \frac{K^2 n}{2}.$$



(a) Comportamiento de p^2 para $K = 0.5$, $K = 1.5$ (b) Comparación con la difusión lineal

Figura 2.5: Comportamiento de p^2 para distintos valores de K .

Este resultado muestra cómo el sistema caótico con $K \gg K_{ch}$ exhibe un comportamiento de difusión en el espacio de fases, con un crecimiento lineal del promedio de la energía cinética en función del tiempo. En la Figura 2.5, podemos observar en la gráfica a la izquierda que tomando un valor de K con $K = 0.5 < K_g$ p^2 permanece acotado, mientras que para $K = 1.5 > K_g$ el comportamiento es creciente; sin embargo, como podemos ver en la gráfica de la derecha, este crecimiento no es lineal en el tiempo (entendido como el número de iteraciones). Sin embargo, para K suficientemente grande, el comportamiento de p^2 sí es claramente lineal, con pendiente Dn , como se observa en la Figura 2.6.



(a) Difusión lineal del momento para $K = 11.5$ (b) Difusión lineal del momento para $K = 100$

Figura 2.6: Difusión del momento para distintos valores de K .

2.2. El Kicked rotator cuántico

En el apartado anterior, estudiamos el *kicked rotator* desde un punto de vista clásico. Comprobamos que para valores de K suficientemente grandes, el sistema presenta un comportamiento caótico y el momento al cuadrado aumenta linealmente. A continuación, estudiaremos este sistema desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica, utilizando los operadores de Floquet. Además, estudiaremos la difusión del momento en función del tiempo y la compararemos con el caso clásico.

Para esta sección, hemos seguido el desarrollo de [3], [8] y [14], que a su vez se fundamenta en el trabajo de [1] y [6]. Para hacer las simulaciones, utilizamos también el código de [3].

2.2.1. Evolución de las funciones de onda

Comenzamos estudiando la evolución de las funciones de onda que describen los estados del sistema. Para esta parte hemos seguido principalmente [14].

Sustituyendo las variables (p_θ, θ) por los operadores $(\hat{p}_\theta = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}, \hat{\theta})$ en la ecuación (2.1), obtenemos el hamiltoniano cuántico

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_\theta^2}{2I} + E_0 \cos(\hat{\theta}) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau) = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + E_0 \cos(\hat{\theta}) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau). \quad (2.17)$$

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para un estado $\Psi(\theta, t)$ viene dada por

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\theta, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + E_0 \cos(\hat{\theta}) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau) \right] \Psi(\theta, t).$$

Como hicimos en el caso clásico, definimos parámetros adimensionales $\tilde{\hbar} = \frac{\hbar\tau}{I}$, $\tilde{t} = \frac{t}{\tau}$, $\tilde{K} = \frac{E_0\tau^2}{I}$ y el operador

$$\hat{p} = -i\tilde{\hbar} \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{\tau}{I} \hat{p}_\theta.$$

Así, se verifica que

$$[\hat{p}, \theta] = i\tilde{\hbar} \text{Id},$$

y podemos reescribir la ecuación de Schrödinger en la forma

$$i\tilde{\hbar} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \Psi(\theta, \tilde{t}) = \frac{\tilde{\hbar}^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \Psi(\theta, \tilde{t}) + \tilde{K} \cos(\hat{\theta}) \sum_{n=0}^{\infty} \delta(\tilde{t} - n) \Psi(\theta, \tilde{t}).$$

De nuevo, en un abuso de lenguaje nos referiremos a \hat{p} como *momento*, aunque realmente se trata de un operador proporcional al operador momento angular \hat{p}_θ . De nuevo, cantidades como $\langle \hat{p} \rangle$ o $\Delta \hat{p}$ serán adimensionales, y se pueden interpretar como valor esperado e indeterminación del

operador momento angular \hat{p}_θ en unidades $\frac{I}{\tau}$.

Además, notamos que, así como el sistema clásico dependía de un solo parámetro adimensional K , el *kicked rotator* cuántico depende de dos parámetros: $\tilde{K}, \tilde{\hbar}$. Como veremos más adelante, el parámetro $\tilde{\hbar}$ es una *constante de Planck efectiva* que puede interpretarse como una medida de la intensidad de los efectos cuánticos.

Como ocurría en el caso clásico, tenemos un hamiltoniano dependiente del tiempo, pero constante a trozos. Denotamos $\psi_{n+}(\theta)$ la función de onda justo después del n -ésimo impacto y $\psi_{n-}(\theta)$ la función de onda justo antes del n -ésimo impacto. Consideramos una variación infinitesimal de la variable \tilde{t} en torno al n -ésimo impacto, que se corresponde con $t = n\tau$, esto es, $\tilde{t} = n$. Es claro entonces que

$$\psi_{n\pm}(\theta) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \Psi(\theta, \tilde{t} = n \pm \varepsilon).$$

Observamos que el hamiltoniano (2.17) es de la forma

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{V} \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau). \quad (2.18)$$

Por lo tanto, para estudiar este sistema podemos aplicar los operadores de Floquet. Sabemos que

$$|\psi_{(n+1)+}\rangle = \hat{F}_+ |\psi_{n+}\rangle \quad (2.19)$$

Determinamos el operador \hat{F}_+ para el *kicked rotator* cuántico. Recordemos la ecuación (1.18) obtenida en el capítulo anterior

$$\hat{F}_+ = \exp(-i\lambda\hat{V}/\hbar) \exp(-i\hat{H}_0\tau/\hbar).$$

Definimos los operadores $\hat{U}_\theta, \hat{U}_p$ dados por

$$\hat{U}_\theta = \exp(-i\lambda\hat{V}/\hbar) = \exp\left(\frac{-i\tilde{K} \cos(\hat{\theta})}{\tilde{\hbar}}\right), \quad (2.20)$$

$$\hat{U}_p = \exp(-i\hat{H}_0\tau/\hbar) = \exp\left(\frac{-i\tau}{\tilde{\hbar}} \frac{\hat{p}^2}{2}\right). \quad (2.21)$$

De esta forma, $\hat{F}_+ = \hat{U}_\theta \hat{U}_p$ y $\hat{F}_- = \hat{U}_p \hat{U}_\theta$. Estos operadores nos permiten relacionar el estado inicial con el estado del sistema inmediatamente antes y después de un impacto. Tomamos entonces $\tilde{t} \in [n - \varepsilon, n + \varepsilon]$, con $\varepsilon \rightarrow 0^+$.

Como estamos considerando una variación muy pequeña en \tilde{t} , podemos considerar que $\Psi(\theta, \tilde{t})$ se mantiene constante respecto a θ , y por tanto despreciamos el término $\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$. Es decir, consideramos la ecuación

$$i\tilde{\hbar} \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \Psi(\theta, \tilde{t}) = \tilde{K} \cos(\theta) \delta(\tilde{t} - n) \Psi(\theta, \tilde{t}),$$

con $\tilde{t} \in [n - \varepsilon, n + \varepsilon]$. Integramos la ecuación en este intervalo, y obtenemos la relación entre ψ_{n+} y ψ_{n-} :

$$\psi_{n+}(\theta) = \exp\left(-\frac{i\tilde{K} \cos(\theta)}{\tilde{\hbar}}\right) \psi_{n-}(\theta) \quad (2.22)$$

Considerando la expresión de \hat{U}_θ (2.20), hemos obtenido que

$$|\psi_{n+}\rangle = \hat{U}_\theta |\psi_{n-}\rangle. \quad (2.23)$$

A continuación, veremos qué ocurre en el intervalo entre impactos, considerando $\tilde{t} \in (n + \varepsilon, n - \varepsilon)$. En estos intervalos, la δ de Dirac se anula y la ecuación de Schrödinger resulta

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{t}}(\theta, \tilde{t}) = -\frac{\tilde{\hbar}}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2}. \quad (2.24)$$

Notamos que $\Psi(\theta, \tilde{t})$ es una función periódica en θ , de periodo 2π . Por lo tanto, podemos considerar la serie de Fourier

$$\Psi(\theta, \tilde{t}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \Phi(l, \tilde{t}) \exp(il\theta),$$

donde los coeficientes $\Phi(l, \tilde{t})$ vienen dados por

$$\Phi(l, \tilde{t}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta \Psi(\theta, \tilde{t}) \exp(-il\theta).$$

De esta forma, el primer miembro de la ecuación (2.24) resulta

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{t}}(\theta, \tilde{t}) = i \frac{\partial}{\partial \tilde{t}} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \Phi(l, \tilde{t}) \exp(il\theta) \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(i \frac{\partial \Phi}{\partial \tilde{t}} \right) (l, \tilde{t}) \exp(il\theta),$$

y el segundo miembro de (2.24) es

$$-\frac{\tilde{\hbar}}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \theta^2} = -\frac{\tilde{\hbar}}{2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \theta^2} (l, \tilde{t}) \exp(il\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{\hbar} l^2}{2} \Phi(l, \tilde{t}) \exp(il\theta).$$

Igualando miembros e identificando coeficientes, obtenemos la ecuación

$$i \frac{\partial \Phi}{\partial \tilde{t}}(l, \tilde{t}) = \frac{\tilde{\hbar} l^2}{2} \Phi(l, \tilde{t}).$$

Si integramos en el intervalo $(n + \varepsilon, n + 1 - \varepsilon)$, obtenemos finalmente

$$\phi_{(n+1)-}(l) = \exp\left(-\frac{i\tilde{\hbar} l^2}{2}\right) \phi_{n+}(l), \quad (2.25)$$

donde hemos denotado

$$\phi_{n\pm}(l) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \Phi(l, \tilde{t} = n \pm \varepsilon).$$

Es claro que $\{\phi_{n\pm}(l)\}$ son funciones propias del operador $\hat{p} = -i\tilde{\hbar} \frac{\partial}{\partial \theta}$. Además, el momento angular está cuantizado en valores $l\tilde{\hbar}$. Sustituyendo entonces $\hat{p} = l\tilde{\hbar}$ en el operador (2.21), obtenemos su representación en el espacio de momentos

$$\hat{U}_p = \exp\left(\frac{-i\tau \hat{p}^2}{\tilde{\hbar}}\right) = \exp\left(-\frac{i\tilde{\hbar}l^2}{2}\right).$$

Por tanto, la ecuación (2.25) se puede expresar como

$$|\psi_{(n+1)-}\rangle = \hat{U}_p |\psi_{n+}\rangle. \quad (2.26)$$

Y en efecto, juntando las expresiones (2.23), (2.26) obtenemos de nuevo la ecuación (2.19)

$$|\psi_{(n+1)+}\rangle = \hat{U}_\theta |\psi_{(n+1)-}\rangle = \hat{U}_\theta \hat{U}_p |\psi_{n+}\rangle = \hat{F}_+ |\psi_{n+}\rangle.$$

Ahora bien, el resultado importante que hemos obtenido a partir de las ecuaciones (2.22) y (2.25) es que, así como para el operador \hat{U}_θ lo natural es utilizar la representación de posiciones $\{\psi_{n\pm}(\theta)\}$, para el operador \hat{U}_p tenemos una expresión más manejable en la representación $\{\phi_{n\pm}(l)\}$. Recordemos además que las funciones $\phi_{n\pm}(l)$, $\psi_{n\pm}(\theta)$ están relacionadas de la siguiente forma:

$$\phi_{n\pm}(l) = \mathcal{F}\mathcal{T}(\psi_{n\pm})(l, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta \psi_{n\pm}(\theta) \exp(-il\theta).$$

Así, la ecuación (2.19) en la representación $|\theta\rangle$ se traduce en

$$\psi_{(n+1)+}(\theta) = \exp\left(-\frac{i\tilde{K} \cos(\theta)}{\tilde{\hbar}}\right) \mathcal{G}\mathcal{F}\mathcal{T} \left(\exp\left(-\frac{i\tilde{\hbar}l^2}{2}\right) \mathcal{F}\mathcal{T}(\psi_{n+})(l) \right) (\theta).$$

Nuestro objetivo es estudiar la dinámica cuántica del *kicked rotator* utilizando el operador de Floquet $\hat{F}_+ = \hat{U}_\theta \hat{U}_p$. La evolución libre entre los golpes, representada por el operador $\hat{U}_p = \exp\left(-i\frac{p^2 T}{2\hbar}\right)$, es diagonal en la representación de momento, de modo que cada estado propio de momento, caracterizado por su momento p con un número cuántico l , adquiere un desplazamiento de fase diferente. En cambio, el operador $\hat{U}_\theta = \exp\left(-i\frac{k \cos \theta}{\hbar}\right)$ es diagonal en la representación de posición y acopla diferentes momentos.

Para representar la evolución del sistema utilizamos un método computacional para iterar el operador de Floquet \hat{F}_+ utilizando técnica llamada *split*. Para calcular el operador \hat{U}_θ en el espacio de $\{\Psi_{n\pm}\}$, se diagonaliza. Por otro lado, la propagación libre se calcula en el espacio de momento descrito por las funciones $\{\phi_{n\pm}\}$, en las que \hat{U}_p es diagonal. El cambio entre la representación de configuración y la de momento se realiza mediante una Transformada Rápida

de Fourier. Para aplicar este método, utilizaremos los paquetes de Delande [3].

2.2.2. Tiempo de Ehrenfest y Tiempo de Heisenberg

Finalmente, nuestro objetivo es comparar el comportamiento clásico y cuántico cuando en el caso clásico el sistema de comporta de forma caótica; en particular, nos situaremos en la situación de caos global, con una difusión lineal del momento $K \gg K_g$. Para esta sección, hemos utilizado como referencia principal [14] y, en menor medida, [3], [8] y [17]. Para las simulaciones nos hemos basado en los paquetes de [3].

Las funciones $\psi_{n\pm}(\theta)$ se pueden expresar como la serie de Fourier

$$\psi_n(\theta) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \phi_{n\pm}(l) \exp(il\theta).$$

Teniendo en cuenta que las funciones $\psi_{n\pm}(\theta)$ son funciones propias del operador $\hat{p} = -i\tilde{\hbar} \frac{\partial}{\partial \theta}$, el valor esperado del momento angular al cuadrado en el instante $\tilde{t} = n\pm$ es

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle_{n\pm} = \langle \Psi_{n\pm} | \hat{p}^2 | \Psi_{n\pm} \rangle = \int_0^{2\pi} \Psi_{n\pm}(\theta) \left(-i\tilde{\hbar} \frac{\partial}{\partial \theta} \right)^2 \Psi_{n\pm}(\theta) d\theta = \tilde{\hbar}^2 \sum_{l=-\infty}^{\infty} l^2 |\phi_{n\pm}(l, t)|^2.$$

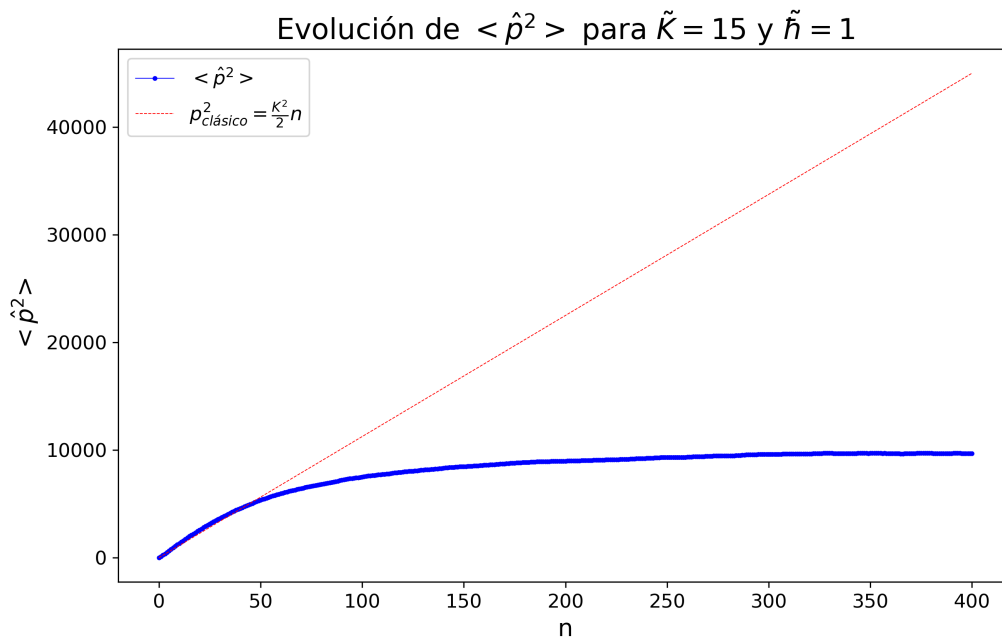


Figura 2.7: Comportamiento de $\langle \hat{p}^2 \rangle$ y comparación con el caso clásico para $\tilde{\hbar} = 1$.

Cuando estudiamos el sistema clásico, obtuvimos que en el caso $K > K_{Ch}$ el sistema presentaba un comportamiento difusivo, de forma que el valor esperado de \hat{p}^2 en la n -ésima iteración aumentaba linealmente con n . A continuación, veamos qué ocurre para $K = 15$ y distintos valores de \tilde{h} , representado en las Figuras 2.7 y 2.8.

Si estudiamos el comportamiento del valor esperado del operador \hat{p}^2 en el *kicked rotator* cuántico, obtenemos que, para valores pequeños de \tilde{h} y de \tilde{t} , $\langle \hat{p}^2 \rangle$ sigue el mismo comportamiento que en el caso clásico. Ahora bien, el comportamiento clásico solo se manifiesta durante un periodo de tiempo finito: a partir de cierto $\tilde{t} = n_0$, $\langle \hat{p}^2 \rangle$ deja de crecer y permanece acotado.

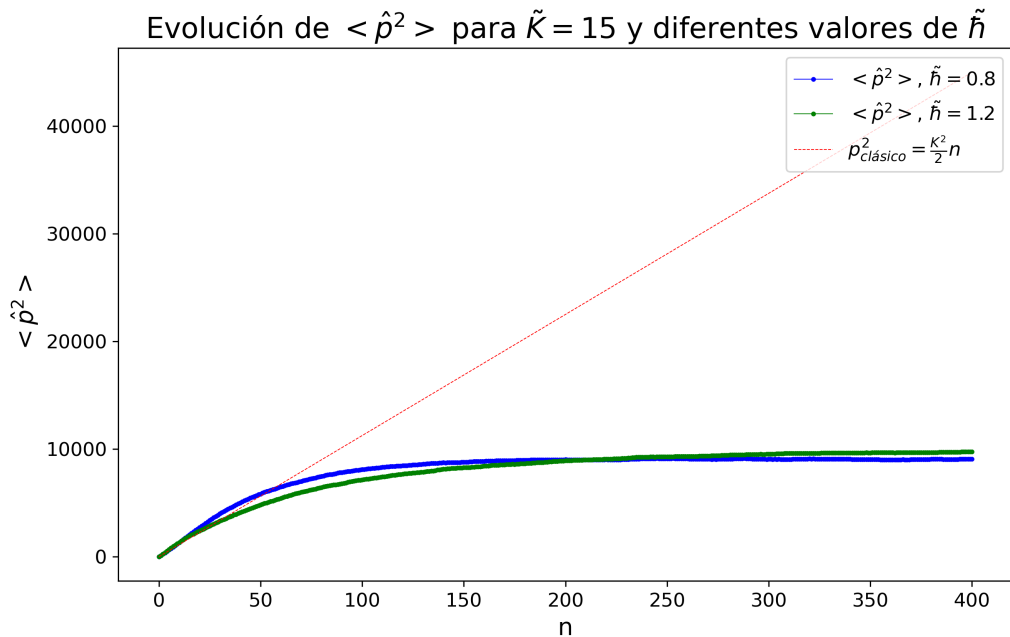


Figura 2.8: Comportamiento de $\langle \hat{p}^2 \rangle$ y comparación con el caso clásico para $\tilde{h} = 0.8$ y $\tilde{h} = 1.2$.

Observamos además que el valor de n_0 crece a medida que decrece \tilde{h} (ver Figura 2.8). Como introducíamos al principio de esta sección, \tilde{h} es un parámetro que mide la intensidad de los *efectos cuánticos*, en el sentido de que cuanto mayor es \tilde{h} , mayor es la diferencia entre el comportamiento del *kicked rotator* clásico y cuántico.

Podemos suponer que el valor $\tilde{t} = n_0$ se corresponde con $\tilde{t} = \frac{t_E}{\tau}$, con t_E el tiempo de Ehrenfest, es decir, el tiempo a partir del cual el comportamiento del sistema deja de estar bien descrito por la Mecánica Clásica. En un sistema integrable, habíamos visto que $\Delta \hat{x}(t) \approx \Delta \hat{p}_x(t=0)t$.

De forma análoga, si $\Delta \hat{p}_n$ mide la deslocalización de la partícula en p de forma similar a la separación entre órbitas δp_n en un sistema clásico, podemos suponer que la analogía cuántica de

dos órbitas cuya separación crece exponencialmente es

$$\Delta\hat{p}_n \approx \Delta\hat{p}_0 \exp(\nu n).$$

Si consideramos que el paquete de ondas está completamente deslocalizado cuando $\Delta\hat{p}$ y toma dimensiones macroscópicas, entonces para un paquete inicialmente estrecho con \hat{p}_0 del orden de magnitud de $\sqrt{\hbar}$ se tiene que

$$n_E \sim \frac{|\log \hbar|}{2\nu},$$

de forma que el tiempo de Ehrenfest en este caso vendría dado por

$$t_E = n_E \tau.$$

Ahora bien, para valores habituales de la constante de Planck efectiva $\tilde{\hbar} \sim 1 - 2$ y de un exponente de Lyapunov para un sistema globalmente caótico $\mu \sim 0.5 - 1$, obtendríamos un número de iteraciones $n_E \sim 0 - 1$ a partir del cual el sistema no se comporta de la misma forma que el sistema clásico. Tal y como se observa en la Figura 2.7, este valor no se corresponde en absoluto con el esperado: en general, obtenemos más bien $n_0 \sim 50$. Concluimos entonces que n_E no es una buena estimación de n_0 .

Así, a partir de un primer estudio del *kicked rotator* cuántico nos planteamos dos cuestiones: ¿existe otro parámetro que nos pueda acotar temporalmente la correspondencia clásico cuántica de un sistema dinámico? ¿Por qué los efectos cuánticos se traducen en una localización del momento? Para responder a estas preguntas, consideramos la explicación de [14], que a su vez se basa en el trabajo de [1] y [7].

Nuestro sistema dinámico cuántico viene dado por la acción de los operadores de Floquet sobre las funciones de onda. Sabemos que

$$|\psi_{(n+1)+}\rangle = \hat{U}_\theta \hat{U}_p |\psi_{n+}\rangle = \hat{F}_+ |\psi_{n+}\rangle,$$

de donde \hat{F}_+ es producto de operadores unitario y por tanto, es un operador unitario. En consecuencia, los valores propios de \hat{F}_+ , son reales. Además, se comprueba (ver [14] y [7]) que el espectro de este operador es discreto, y por tanto las soluciones de la ecuación de Schrödinger se pueden expresar como

$$\Psi(\theta, t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} A_j \exp(i\omega_j t) w_j(\theta, t),$$

o en la base de momentos,

$$\Phi(l, t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} B_j \exp(i\omega_j t) u_j(l, t),$$

con $\{\omega_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ el espectro discreto de \hat{F}_+ y $\{w_j\}_{j \in \mathbb{N}}, \{u_j\}_{j \in \mathbb{N}}$ las bases ortonormales de funciones propias correspondientes en cada representación. Para explicar la localización del momento que se observa en la Figura 2.7, la propuesta de [7] es que las funciones propias del operador de Floquet en la representación de posiciones $\{u_j\}_{j \in \mathbb{N}}$, inicialmente centradas en un cierto valor $l \sim l_j$, decaen de la forma

$$u_j(l, t) \sim \exp\left(-\frac{\tilde{\hbar}|l - l_j|}{\Delta_L}\right). \quad (2.27)$$

La ecuación (2.27) nos permite explicar la localización del momento. Supongamos que en el instante inicial tenemos una partícula con momento $p_0 = \tilde{\hbar}l_0$, de la forma

$$\Psi(\theta, 0+) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i l_0 \theta).$$

Entonces, el valor esperado de $(p_\theta - \tilde{\hbar}l_0)^2$ está acotado por Δ_L^2 . De esta forma, el parámetro Δ_L es una *longitud de localización* y $\frac{\Delta_L}{\tilde{\hbar}}$ crece al decrecer $\tilde{\hbar}$. Para justificar este comportamiento de las funciones propias $\{u_j\}_{j \in \mathbb{N}}$, la propuesta de [7] es hacer una analogía con la *localización de Anderson*, un fenómeno comprobado experimentalmente y ampliamente estudiado en Física del Estado Sólido al considerar partículas en un medio *desordenado*, entendido como una red con defectos aleatorios. Desarrollaremos brevemente esta idea a continuación. Para cada $j \in \mathbb{N}$ definimos las funciones

$$\tilde{u}_j(l) = \frac{u_j(l, t = \tau+) + u_j(l, t = \tau-)}{2},$$

es decir, $\tilde{u}_j(l)$ es una especie de promedio de la función $u_j(l, t)$ asociada al valor propio ω_j en los instantes inmediatamente anterior y posterior al primer impacto (se procedería de forma análoga para el n -ésimo impacto). Definimos el operador

$$\hat{W}(\theta) = -\tan\left(\frac{-i\tilde{K} \cos(\hat{\theta})}{2}\right)$$

y denotamos W_r el r -ésimo coeficiente de su serie de Fourier en θ . Además, denotamos

$$E_j(l) = \omega_j - \frac{\hbar l^2}{2}$$

y

$$T_j(l) = \tan\left(\frac{E_l}{2}\right).$$

En estas condiciones, se puede demostrar (ver [7] y [14]) que la ecuación de valores propios asociada al par $(\omega_j, \tilde{u}_j(l))$ implica que

$$T_j(l)\tilde{u}_j(l) + \sum_{r \neq 0} W_r \tilde{u}_j(l+r) = -W_0 \tilde{u}_j(l).$$

Se trata de la ecuación del modelo *tight-binding* en una red de Bravais unidimensional discreta, en la que l denota la localización espacial, $\tilde{u}_j(l)$ la función de onda asociada al nivel de energía $\varepsilon = -W_0$, W_r las interacciones de solape entre r -ésimos vecinos y $T_j(l)$ el potencial en el punto l . Podemos modelar las impurezas aleatorias de la red considerando que $T_j(l)$ es un número aleatorio externo. Desde el punto de vista de la Física de la Materia Condensada se demuestra que, en este caso, el medio se convierte en un aislante y un electrón en esta red se mantiene localizado espacialmente. Es decir, las funciones de onda $\tilde{u}_j(l)$ son de la forma propuesta en la ecuación (2.27).

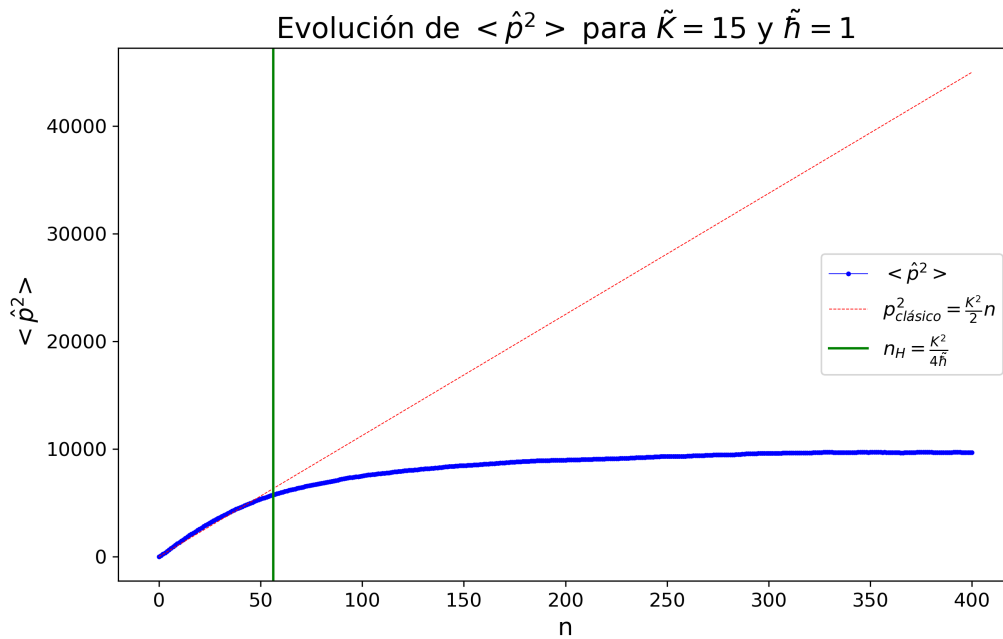


Figura 2.9: Comprobación de que en el caso $\tilde{\hbar} = 1$ el valor esperado del momento se mantiene localizado a partir de n_H .

Además, en [1] se propone que el tiempo a partir del cual se produce la localización del momento es precisamente

$$t_H \approx \frac{\Delta_L}{\hbar},$$

directamente proporcional a la longitud de localización y menor cuanto mayor es el efecto cuántico, asociado al parámetro $\tilde{\hbar}$. Teniendo en cuenta que la difusión clásica es válida para $n \in (0, n_H)$, podemos considerar que

$$\Delta_L^2 \sim Dn_H \approx \frac{\tilde{K}^2 \Delta}{2\tilde{\hbar}},$$

de donde

$$n_H = \frac{\tilde{K}^2}{4\tilde{\hbar}}.$$

Así, definimos el *tiempo de Heisenberg*

$$t_H = n_H \tau = \frac{\tilde{K}^2}{4\tilde{\hbar}} \tau,$$

que describe correctamente el periodo durante el cual el sistema se comporta como en el caso clásico. Se utiliza el término *de Heisenberg* precisamente porque todo nuestro desarrollo hasta obtener la expresión de t_H proviene precisamente de notar que el espectro de los operadores de Floquet es discreto, lo cual a su vez se puede razonar utilizando el principio de indeterminación. En las Figuras 2.9 y 2.10 comprobamos que efectivamente n_H es una buena estimación de n_0 , el número de iteraciones a partir del cual el valor esperado del momento al cuadrado se mantiene localizado.

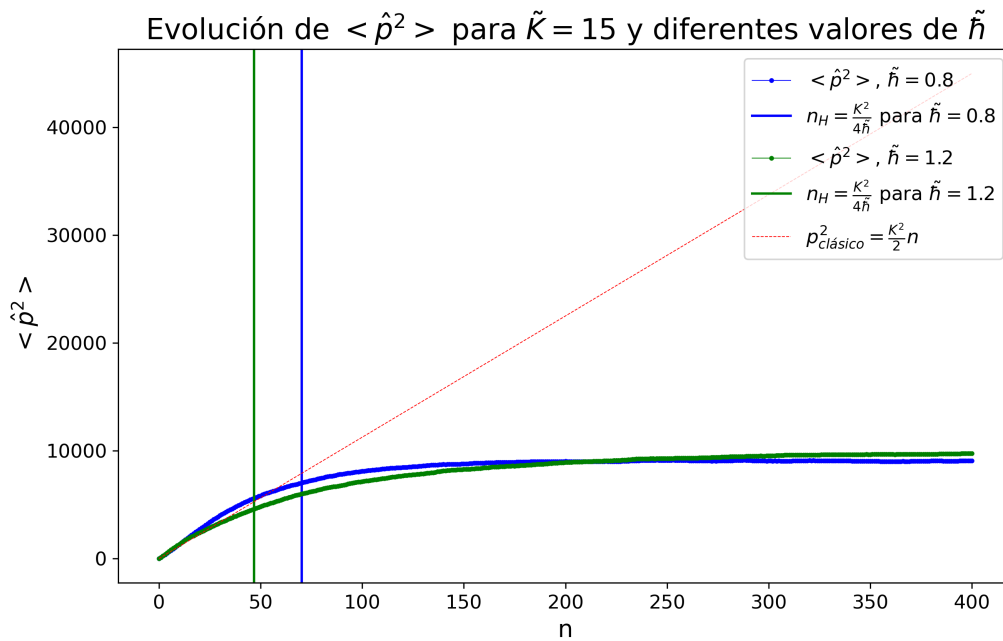


Figura 2.10: Comprobación de que en el caso $\tilde{\hbar} = 1$ el valor esperado del momento se mantiene localizado a partir de n_H .

Conclusiones

En el desarrollo de este trabajo hemos explorado algunas características de los sistemas hamiltonianos clásicos y cuánticos, con un enfoque en la dinámica caótica. Además, hemos aplicado estos resultados al sistema *kicked rotator*.

En el contexto clásico, las ecuaciones de Hamilton permiten analizar problemas clásicos desde el punto de vista de los sistemas dinámicos. Utilizando los exponentes de Lyapunov, hemos sido capaces de medir sensibilidad a las condiciones iniciales y por lo tanto describir comportamientos caóticos. Además, hemos explorado algunos resultados propios de los sistemas hamiltonianos, como la estructura simpléctica, los sistemas integrables, los movimientos cuasiperiódicos y el teorema *KAM*.

Por otro lado, desde el punto de vista cuántico, los estados están descritos por funciones de onda y evolucionan según la ecuación de Schrödinger. Aunque no existen trayectorias definidas, el Principio de Correspondencia y el Teorema de Ehrenfest permiten entender la relación entre las descripciones clásica y cuántica. Además, utilizando los operadores de Floquet, hemos conseguido describir la dinámica del sistema de forma análoga a un sistema dinámico discreto.

El estudio del *kicked rotator* ha ilustrado la dinámica caótica y revelado fenómenos cuánticos como la localización del momento, no observados en el caso clásico. Además, nos ha permitido comprender que desde para los sistemas caóticos los límites temporales de la correspondencia clásico - cuántica son un poco más complejos de explicar.

El estudio del caos cuántico es un problema con muchas líneas de investigación abiertas. Para introducirlo mediante el ejemplo del *kicked rotator*, hemos necesitado recurrir a la Mecánica Clásica, la Física Estadística o la Física del Estado Sólido. Algunos trabajos que se están realizando para continuar el estudio del caos cuántico son la construcción de estimadores que extiendan los exponentes de Lyapunov o la Teoría de Matrices Aleatorias, que continúan con la idea de comprender el comportamiento caótico como una fuente de aleatoriedad.

Bibliografía

- [1] Chirikov, B. Fm Izrailev and dl shepelyansky. *Soy. Sri. Rev. C*, 2:209, 1981.
- [2] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. y Laloe, F. Quantum mechanics, volume 1. *Quantum Mechanics*, 1:898, 1986.
- [3] Delande, D. Kicked rotor and anderson localization. *Boulder School on Condensed Matter Physics*, 2013.
- [4] Devaney, R.L. *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*. CRC Press, 2021.
- [5] Goldstein, H. *Mecánica Clásica*. Reverté, 2018.
- [6] Greene, J.M. A method for determining a stochastic transition. *Journal of Mathematical Physics*, 20(6):1183–1201, 1979.
- [7] Grepel, D., Prange, R. y Fishman, S. Quantum dynamics of a nonintegrable system. *Physical Review A*, 29(4):1639, 1984.
- [8] Korolev, M. Study of the classical and quantum kicked rotator – internship report. 07 2021.
- [9] Lichtenberg, A.J. y Lieberman, M.A. *Regular and Chaotic Dynamics*, tomo 38. Springer Science & Business Media, 2013.
- [10] McCaw, J.M. Quantum chaos: Spectral analysis of floquet operators. *arXiv preprint math-ph/0503032*, 2005.
- [11] Nolds. Ejemplos — documentación de nolds. Recuperado el 26 de junio de 2024, s.f. URL https://nolds.readthedocs.io/en/latest/_modules/nolds/examples.html.
- [12] Novo, S., García, R.O. y García, J.R. *Ecuaciones y Sistemas Diferenciales*. McGraw-Hill, Interamericana de España, 1995.
- [13] Oceledec, V. A multiplicative ergodic theorem. *Trans. Moscow Math. Soc.*, 19:197–231, 1968.
- [14] Ott, E. *Chaos in Dynamical Systems*. Cambridge University Press, 2002.

- [15] Rim, D. An elementary proof that symplectic matrices have determinant one. *arXiv preprint arXiv:1505.04240*, 2015.
- [16] Robinson, C. *Dynamical Systems: Stability, Symbolic Dynamics, and Chaos*. CRC Press, 1998.
- [17] Shepelyansky, D. Ehrenfest time and chaos. *Scholarpedia*, 15(9):55031, 2020.
- [18] Wiggins, S. *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*. Texts in Applied Mathematics. Springer New York, 2003. ISBN 9780387001777. URL <https://books.google.es/books?id=RSI4RGdwnU4C>.
- [19] Zaslavsky, G.M. *Hamiltonian Chaos and Fractional Dynamics*. Oxford University Press, USA, 2005.