

CAOS CLÁSICO Y CUÁNTICO EN SISTEMAS HAMILTONIANOS

Florentino Borondo

Catedrático de Universidad
Universidad Autónoma de Madrid

En esta serie de lecciones se pretende introducir al alumno en la problemática del caos en sistemas Hamiltonianos, tanto desde el punto de vista clásico como cuántico. Los diversos puntos se ilustraran con ejemplos tomados de la Física Molecular, en particular de la Espectroscopía de moléculas poliatómicas pequeñas y el Scattering átomo-superficie metálica.

Desde el punto de vista de la Dinámica Nolineal las moléculas son sistemas Hamiltonianos multidimensionales no integrables formados por osciladores anarmónicos acoplados, cuya dinámica tiene lugar en superficies de potencial para los distintos estados electrónicos que se obtienen dentro de la aproximación de Born-Oppenheimer, y cuyo espacio de fases (coordenadas y momentos) está formado por zonas regulares y caóticas entremezcladas, incrementándose la medida de las regiones estocásticas a medida que la energía de excitación aumenta. La forma de entender esta jerarquía dinámica es mediante el celebrado teorema KAM debido a Kolmogorov-Arnold y Moser, y el criterio de Chirikov, según el cual el caos se disemina en este tipo de sistemas por el espacio de fases siguiendo un esquema de resonancias que solapan. En cuanto a la parte cuántica las transformadas de Wigner y de Husimi proporcionan funciones de distribución de cuasiprobabilidad en el espacio de fases que permiten establecer una correspondencia entre fenómenos clásicos y cuánticos a nivel dinámico.

CHAOS IN HAMILTONIAN SYSTEMS: CLASSICAL AND QUANTAL ASPECTS

The aim of this series of lectures is the introduction of some relevant aspects concerning the chaotic behaviour of Hamiltonian systems. Both classical and quantum aspects of the problem will be covered using illustrations taken from Molecular Physics. In particular, some examples on the vibrational spectroscopy of small polyatomic molecules, and atom-metal surface scattering will be reviewed.

From the point of view of nonlinear dynamics, molecules can be seen as multidimensional non-integrable Hamiltonian systems formed by collections of coupled anharmonic oscillators, whose dynamics take place in the potential energy surfaces corresponding to the different, ground and excited, electronic states that are obtained within the Born-Oppenheimer approximation. The corresponding phase space (coordinates and momenta) contains both regular and stochastic coexisting regions, whose relative size changes with the excitation energy, according to the tori destruction scheme that can be deduced from the celebrated KAM theorem, due to Kolmogorov, Arnold and Moser.

The quantum counterpart can be computed using Wigner and/or Husimi transforms, which provide quasiprobability density distribution in the quantum phase space. Comparison of both type of calculations lead to the establishment of the correspondence between classical and quantum dynamics.