



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Niveles de complejidad en el oscilador armónico cuántico: efectos relativistas de carácter global y local en los estados del oscilador de Dirac

Descripción general (resumen y metodología):

La descripción mecanocuántica del oscilador armónico es bien conocida desde hace décadas [1-3,24-30], constituyendo de hecho uno de los principales referentes de resolución analítica de la ecuación de Schrödinger, siendo así accesibles todos los autovalores y autovectores de la misma. Para ello se procede a la descripción mediante un Hamiltoniano en el que no interviene el spin de la partícula, y que aporta soluciones precisas para velocidades muy inferiores a la de la luz.

La ecuación de Dirac constituye una extensión, conjugando la Mecánica Cuántica con la Teoría Especial de la Relatividad, para la adecuada descripción del movimiento de fermiones con spin 1/2 (e.g. electrones) a velocidades relativistas. Pese a su mayor dificultad, también se conocen las soluciones analíticas de la misma [4-7,31-33], permitiendo así considerar en paralelo las descripciones relativista (R) y no-relativista (NR). Al tratarse de un sistema de una partícula, la distribución de probabilidad de localización espacial se obtiene directamente a partir del módulo cuadrado de la función de onda para estados arbitrarios. En el caso NR la distribución se factoriza en una parte radial y una angular, y la primera constituye una medida de probabilidad referida a la distancia desde el origen. Análogamente se interpreta el promedio esférico de la distribución relativista, no factorizable.

La Teoría de la Información [8,34] proporciona una diversidad de funcionales para indicar cuantitativamente diferentes patrones estructurales de distribuciones probabilísticas arbitrarias, algunas de las cuales juegan un papel relevante en la descripción de sistemas y fenómenos fisicoquímicos. Especialmente notable es la conocida como 'entropía de Shannon' S , introducida en los años 40 [9], y que constituye una medida del nivel de dispersión de la densidad sobre todo su dominio, sin tomar un punto de referencia específico, contrariamente a lo que sucede con e.g. la varianza V . Se trata de una medida de 'carácter global', calificativo que también se otorga al 'desequilibrio' D [10-11,35], como indicador de la desviación respecto a la completa uniformidad/equiprobabilidad. Las tres magnitudes S, D, V son consideradas medidas globales al constituir indicadores de propiedades resultantes de los patrones sobre la totalidad del dominio indiscriminadamente. En contraposición, son destacables algunas medidas de 'carácter local', como es el caso de la 'información de Fisher' I [12,13], dado que se define e interpreta como una medida del contenido de gradiente de la distribución. El funcional I es mucho más sensible a cambios notables en regiones extremadamente localizadas, situación que apenas altera los valores de S, D y V .

Posteriormente, y de forma complementaria a todos los descriptores recién mencionados, se introduce la noción de 'complejidad' de una distribución, inicialmente de forma conceptual y genérica. Básicamente se inspira en la descripción de algunos sistemas físicos, bien conocidos entre otras razones por la 'forma sencilla' de ser descritos, algo que no sucede usualmente con la gran mayoría de los sistemas de interés. Ejemplos bien conocidos de (digamos intuitivamente) 'baja complejidad' serían tanto el gas ideal como el cristal perfecto. Corresponderían respectivamente a los casos de máxima/mínima incertidumbre. Así, cualquier macroestado del gas ideal es compatible con muy numerosos microestados (todos ellos equiprobables), mientras que el conocimiento de una mínima estructura del cristal perfecto proporciona la plena caracterización del sistema completo (máximo orden, con descripción mediante una distribución tipo delta o próxima a ella). Se pretende definir así la complejidad C como un funcional que alcanza su valor mínimo en

estos dos casos extremos. En el contexto discreto sucede que, precisamente, los funcionales D y S alcanzan su valor mínimo (nulo) respectivamente en los casos anteriores. Por ello se definió originalmente [10] la complejidad como el producto $C=DS$ con valor mínimo 0, aunque su posterior extensión a variables continuas [14] hizo necesaria la definición alternativa $C_{LMC}=DL$, siendo $L=\exp(S)$ la ‘longitud entrópica’. Ahora el valor mínimo de C_{LMC} pasa a ser 1, alcanzándose la cota inferior para distribuciones rectangulares (i.e. constantes con soporte acotado). Es la conocida también como ‘complejidad de forma’, adicionalmente a la otorgada considerando los nombres de los autores que la propusieron (López-Ruiz, Mancini y Calbet) y que justifican los subíndices empleados en la notación.

Dado que D y L tienen carácter global, igualmente sucede con C_{LMC} . Surgió con posterioridad el interés por incluir algún factor con sensibilidad local, lo que dio lugar a las complejidades Fisher-Shannon $C_{FS}=IJ$ [15], siendo $J=(2\pi e)^{-1}\exp(2S/d)$ con d la dimensión del dominio, y Cramér-Rao $C_{CR}=IV$ [8]. Tales definiciones tienen su origen considerando, respectivamente, la ‘desigualdad isoperimétrica’ y las propiedades del ‘producto Crámer-Rao’, que garantizan las cotas respectivas d^2 a C_{FS} y C_{CR} y que se saturan, en ambos casos, para distribuciones gaussianas.

Las tres complejidades recién mencionadas han sido utilizadas extensivamente para el estudio no solo de diferentes propiedades estructurales de sistemas físicos de especial interés (e.g. átomos [15,16] o moléculas [17]), sino de relevantes procesos fisicoquímicos a ellos asociados: a modo ilustrativo, procesos de ionización atómica [16] o reacciones moleculares [18]. En algunas ocasiones ha sido posible llevar a cabo un estudio para estados cuánticos y/o dimensionalidad arbitrarios, siendo tal el caso de algunos sistemas gobernados por potenciales centrales (e.g. sistemas hidrogenoides o el oscilador armónico). Usualmente tales estudios han considerado una descripción NR del sistema analizado. Es por ello que cobra interés en analizar hasta qué punto los diferentes cuantificadores de complejidad tienen una mayor/menor sensibilidad al hecho de considerar la descripción mecanocuántica basada en una ‘simplificación NR’ frente a la más precisa R , y este es justamente el objetivo del presente TFG en lo que se refiere al análisis del oscilador armónico tridimensional.

Cabe remarcar que nuestro grupo ha llevado a cabo en el pasado estudios con este mismo sistema bajo un enfoque similar, esto es, analizar hasta qué punto los efectos relativistas se manifiestan de forma relevante en funcionales bien conocidos de la Teoría de la Información. En uno de ellos, concretamente, se analizaron independientemente algunos de los funcionales previamente indicados, pero en ningún caso cualquiera de las denominadas ‘medidas de complejidad’. Dado que se ha comprobado con otros sistemas que dichas medidas aportan notable información adicional, más allá de la proporcionada por cada uno de los funcionales, el propósito señalado para este TFG es estudiar en detalle la relevancia de tal aportación, conjuntamente con los así llamados ‘planos de información’, asociado a cada una de las complejidades tipo producto, y que se describen brevemente en los siguientes apartados.

Mencionemos que, entre los principales motivos para centrar el estudio en el oscilador armónico, se encuentran:

- La disponibilidad de expresiones analíticas de las distribuciones en el espacio de posiciones en ambos casos R y NR (para estados arbitrarios), así como la inmediata derivación de las correspondientes expresiones para el espacio conjugado (espacio de momentos). A partir de los resultados en ambos espacios es inmediata la extrapolación al espacio de las fases.
- Los procedimientos de cálculo son idénticos para cualquier valor de la frecuencia del oscilador.
- El conocimiento de ambas energías R y NR para estados arbitrarios permite considerar la eventual relación entre la diferencia de las mismas y las posibles discrepancias de la complejidad a consecuencia de los efectos relativistas.

Metodología para alcanzar los objetivos (descritos en la siguiente sección):

1. Diseñar los códigos computacionales necesarios para la obtención de las correspondientes densidades radiales de Schrödinger y de Dirac, así como sus derivadas. En todos los casos, para frecuencia y estados arbitrarios.

2. Calcular las diferentes complejidades de las densidades radiales relativista/no-relativista, a considerar como medidas de la relevancia de los efectos relativistas en el oscilador.
3. Interpretar los resultados en términos de las principales propiedades estructurales de las densidades, y atendiendo a los valores de los números cuánticos que caracterizan los estados.
4. Establecer la eventual dependencia de los resultados en los autovalores energéticos de las respectivas soluciones.
5. Analizar los 'planos de información'. Los factores (P,Q) de una medida de complejidad, $C=PQ$ corresponden a puntos del plano P-Q, sustentado por dichos factores. Usando doble escala logarítmica, la cota inferior al producto se visualiza en el plano como una línea recta de pendiente -1, que delimita las regiones 'permitida y prohibida' establecidas por la cota. Para un sistema dado, la distancia del punto representativo en el plano a dicha frontera indica el valor de la complejidad. Cualquier recta paralela a la frontera es una 'línea de isocomplejidad'. Estos conceptos son aplicables en cualquiera de los casos LMC (plano D-L), Fisher-Shannon (I-J) y Cramér-Rao (I-V).

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

Nuestro grupo ha realizado numerosos estudios basados en medidas de complejidad, en ocasiones considerando propiedades universales [19], así como generalizaciones [20] y medidas relativas [36]. La mayor parte de las aplicaciones se han llevado a cabo en un marco no-relativista, incluyendo: la densidad monoparticular en sistemas atómicos neutros [15] e ionizados [16], estructura molecular [17] y reacciones químicas [18]. También se ha prestado atención a (i) sistemas confinados [21], (ii) densidades a 2 cuerpos [22], (iii) potenciales tipo delta [37], o (iv) comparación de modelos atómicos (e.g. Hartree-Fock vs Bare Coulomb Field [38]). No ha sido tal el caso del análisis fundamentado en efectos relativistas, más allá del reciente estudio de los factores 'individuales' del oscilador de Dirac [23], o algunas medidas comparativas en sistemas multielectrónicos [39].

Se pretende, pues, en el presente TFG, profundizar en la interpretación de la complejidad del oscilador armónico en cuanto a su 'sensibilidad' a los efectos relativistas. Los objetivos específicos planteados son:

- Realizar un estudio comparativo para cada una de las medidas de complejidad (LMC, FS y CR) entre el oscilador armónico cuántico (QHO) y el oscilador de Dirac (DO).
- Es necesario tener en cuenta que, en el caso relativista, la caracterización de los estados requiere definir la paridad concreta (par/impar) debida al acoplamiento spin-momento angular. Esto, en la práctica, significa trabajar con '3 sistemas': QHO, DO+ y DO-. Más allá de la comparación relativista/no-relativista, cabe comparar las respectivas soluciones con paridad opuesta en el caso relativista.
- El valor de cada complejidad, al igual que los de los factores constituyentes, depende de diferentes variables, todas ellas objeto de estudio en este trabajo. Tal es el caso de la dependencia en cada uno de los números cuánticos que caracterizan a un estado, así como la frecuencia específica del oscilador.
- De ser posible, se analizarían las eventuales dependencias (posiblemente asintóticas) en cada una de las variables previamente mencionadas.
- Se tendrán en cuenta, inicialmente, los resultados obtenidos en el espacio de posiciones para su posterior extrapolación al espacio de momentos, e igualmente al de las fases.

Bibliografía básica:

- [1] S.J.C. Salazar, H.G. Laguna y R.P. Sagar, Pairwise and higher-order statistical correlations in excited states of quantum oscillator systems, Eur. Phys. J. Plus 137, 19 (2022).

- [2] N. Aquino y R.A. Rojas, Accurate calculations of radial expectations values for confined hydrogen-like atoms and isotropic harmonic oscillator, *Few Body Syst.* 61, 16 (2020).
- [3] D. Nath y A.K. Roy, Average energy and Shannon entropy of a confined harmonic oscillator in a time-dependent moving boundary, *J. Math. Chem.* 61, 1491 (2023).
- [4] O.L. de Lange, Algebraic properties of the Dirac oscillator, *J. Phys. A* 24, 667 (1991).
- [5] J. Benítez, R.P. Martínez-y-Romero, H.N. Núñez-Yépez y A.L. Salas-Brito, Solution and hidden supersymmetry of a Dirac oscillator, *Phys. Rev. Lett.* 64, 1643 (1990); Erratum: *ibid.* 65, 2085 (1990).
- [6] R.P. Martínez-y-Romero, H.N. Núñez-Yépez y A.L. Salas-Brito, Relativistic Quantum Mechanics of a Dirac oscillator, *Eur. J. Phys.* 16, 135 (1995).
- [7] J. Sañudo y R. López-Ruiz, Some features of the statistical complexity, Fisher-Shannon information and Bohr-like orbits in the quantum isotropic harmonic oscillator, *J. Phys. A* 41, 265303 (2008).
- [8] T.M. Cover y J.A. Thomas, *Elements of Information Theory*, 2nd ed. (Wiley-Interscience, New York, 2006).
- [9] C.E. Shannon, A mathematical theory of communication, *Bell Syst. Tech. J.* 27, 379 (1948).
- [10] R. López-Ruiz, H.L. Mancini y X. Calbet, A statistical measure of complexity, *Phys. Lett. A* 209, 321 (1995).
- [11] O. Onicescu, *Theorie de l'information. Energie informationelle*, C.R. Acad. Sci. Paris A 263, 841 (1966).
- [12] R.A. Fisher, *Theory of statistical estimation*, *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* 22, 700 (1925); Reprinted in *Collected Papers* edited by J. H. Bennet (University of Adelaide Press, South Australia, 1972), pp. 15–40.
- [13] B.R. Frieden, *Science from Fisher information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- [14] R. Catalán, J. Garay y R. López-Ruiz, Features of the extension of a statistical measure of complexity to continuous systems, *Phys. Rev. E* 66, 011102 (2002).
- [15] J.C. Angulo, J. Antolín y K. D. Sen, Fisher-Shannon plane and statistical complexity of atoms, *Phys. Lett. A* 372, 670 (2008).
- [16] J. Antolín y J.C. Angulo, Complexity analysis of ionization processes and isoelectronic series, *Int. J. Quantum Chem.* 109, 586 (2009).
- [17] R.O. Esquivel, J.C. Angulo, J. Antolín, J. S. Dehesa, S. López-Rosa y N. Flores-Gallegos, Analysis of complexity measures and information planes of selected molecules in position and momentum spaces, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 12, 7108 (2010).
- [18] M. Molina-Espíritu, R.O. Esquivel, J.C. Angulo, J. Antolín y J.S. Dehesa, Information-theoretical complexity for the hydrogenic identity SN2 exchange reaction, *J. Math. Chem.* 50, 1882 (2012).
- [19] S. López-Rosa, J.C. Angulo y J. Antolín, Rigorous properties and uncertainty-like relationships on product-complexity measures: Application to atomic systems, *Physica A* 388, 2081 (2009).
- [20] P. Sánchez-Moreno, J.C. Angulo y J.S. Dehesa, A generalized complexity measure based on Rényi entropy, *Eur. Phys. J. D* 68, 212 (2014).
- [21] C.R. Estañón, H.E. Montgomery Jr., J.C. Angulo y N. Aquino, The confined helium atom: An information-theoretic approach, *Int. J. Quantum Chem.* 124, e27358 (2024).
- [22] S. López-Rosa, A.L. Martín, J. Antolín y J.C. Angulo, Electron-pair entropic and complexity measures in atomic systems, *Int. J. Quantum Chem.* 119, e25861 (2019).
- [23] I. López-García, A.J. Macías, S. López-Rosa y J.C. Angulo, Information-theoretical analysis of Dirac and nonrelativistic quantum oscillators, *Phys. Rev. A* 108, 022812 (2023).

Es necesario tener conocimientos básicos de programación (e.g. diseño de códigos en algún lenguaje específico, procedimientos de integración numérica).

Bibliografía complementaria adicional:

[24] S.J.C. Salazar, H.G. Laguna y R.P. Sagar, Statistical correlation measures from higher-order moments in quantum

oscillator systems, *Adv. Theory Simul.* 4, 2000322 (2021).

[25] S.J.C. Salazar, H.G. Laguna y R.P. Sagar, Higher-order statistical correlations in three-particle quantum systems with harmonic interactions, *Phys. Rev. A* 101, 042105 (2020).

[26] N. Aquino y E. Cruz, The 1-dimensional confined harmonic oscillator revisited, *Rev. Mex. Fis.* 63, 580 (2017).

[27] H.E. Montgomery Jr., G. Campoy y N. Aquino, The confined N-dimensional harmonic oscillator revisited, *Phys. Scr.*

81, 045010 (2010).

[28] A. Ghosal, N. Mukherjee y A.K. Roy, Information entropic measures of a quantum harmonic oscillator in symmetric

and asymmetric confinement within an impenetrable box, *Ann. Phys.* 528, 796 (2016).

[29] N. Mukherjee y A. K. Roy, Information-entropic measures in confined isotropic harmonic oscillator, *Adv. Theory Simul.* 1, 1800090 (2018).

[30] H.G. Laguna y R.P. Sagar, Quantum uncertainties of the confined harmonic oscillator in position, momentum and phase space, *Ann. Phys.* 526, 555 (2014).

[31] O.L. de Lange y R.E. Raab, *Operator methods in Quantum Mechanics* (Clarendon Press, Oxford, 1991).

[32] B.H. Bransden y C.J. Joachain, *Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Pearson - Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1991).

(Complementaria)

[24] S.J.C. Salazar, H.G. Laguna y R.P. Sagar, Statistical correlation measures from higher-order moments in quantum

oscillator systems, *Adv. Theory Simul.* 4, 2000322 (2021).

[25] S.J.C. Salazar, H.G. Laguna y R.P. Sagar, Higher-order statistical correlations in three-particle quantum systems with harmonic interactions, *Phys. Rev. A* 101, 042105 (2020).

[26] N. Aquino y E. Cruz, The 1-dimensional confined harmonic oscillator revisited, *Rev. Mex. Fis.* 63, 580 (2017).

[27] H.E. Montgomery Jr., G. Campoy y N. Aquino, The confined N-dimensional harmonic oscillator revisited, *Phys. Scr.*

81, 045010 (2010).

[28] A. Ghosal, N. Mukherjee y A.K. Roy, Information entropic measures of a quantum harmonic oscillator in symmetric

and asymmetric confinement within an impenetrable box, *Ann. Phys.* 528, 796 (2016).

[29] N. Mukherjee y A. K. Roy, Information-entropic measures in confined isotropic harmonic oscillator, *Adv. Theory Simul.* 1, 1800090 (2018).

[30] H.G. Laguna y R.P. Sagar, Quantum uncertainties of the confined harmonic oscillator in position, momentum and phase space, *Ann. Phys.* 526, 555 (2014).

[31] O.L. de Lange y R.E. Raab, *Operator methods in Quantum Mechanics* (Clarendon Press, Oxford, 1991).

[32] B.H. Bransden y C.J. Joachain, *Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Pearson - Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1991).

[33] R.J. Yáñez, W. Van Assche y J.S. Dehesa, Position and momentum information entropies of the D-dimensional harmonic oscillator and hydrogen atom, *Phys. Rev. A* 50, 3065 (1994).

[34] C. Arndt, *Information measures* (Springer, Berlin, 2013).

[35] R. Carbó, L. Lleyda y M. Arnau, How similar is a molecule to another? An electron density measure of similarity between two molecular structures, *Int. J. Quantum Chem.* 17, 1185 (1980).

[36] P.A. Bouvrie, J.C. Angulo y J. Antolín, A generalized relative complexity: Application to atomic

one-particle densities, Chem. Phys. Lett. 539, 191 (2012).

[37] P.A. Bouvrie, J.C. Angulo y J.S. Dehesa, Entropy and complexity analysis of Dirac-delta-like quantum potentials, Physica A 390, 2215 (2011).

[38] J.C. Angulo, S. López-Rosa y J. Antolín, Effect of the interelectronic repulsion on the information content of position and momentum atomic densities, Int. J. Quantum Chem. 110, 1738 (2010).

[39] A.L. Martín, S. López-Rosa, J.C. Angulo y J. Antolín, Jensen-Shannon and Kullback-Leibler divergences as quantifiers of relativistic effects in neutral atoms, Chem. Phys. Lett. 635, 75 (2015).

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: JUAN CARLOS ANGULO IBÁÑEZ

Ámbito de conocimiento/Departamento: FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

Correo electrónico: angulo@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: