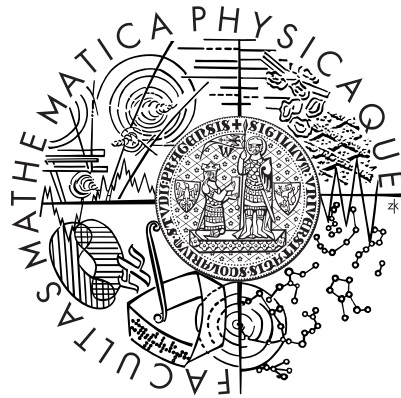


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Petr Hruška

Regular and chaotic collective motions of atomic nuclei

Regulární a chaotické pohyby atomových jader

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.

Studijní program: Fyzika, Teoretická fyzika

2008

Rád bych na tomto místě poděkoval své rodině za velkou podporu a dále Doc. Pavlu Cejnarovi a Mgr. Pavlu Stránskému za cenné rady a připomínky.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 18.8.2008

Petr Hruška

Obsah

Summary	6
Úvod	8
1 Zavedení GCM	10
1.1 Dynamické proměnné	10
1.2 Hamiltonián	15
2 Kvantování GCM	18
2.1 Kvantování v zakřiveném prostoru	18
2.1.1 Nejednoznačnost kvantování	18
2.1.2 Obecné souřadnice v klasickém případě	19
2.1.3 Kvantování v obecných souřadnicích a zakřivených prostorech	20
2.2 2D kvantování GCM	21
2.3 5D kvantování GCM	23
2.4 Vztah 2D a 5D případu	25
2.5 Symetrie vlnových funkcí	26
3 Numerické řešení GCM	27
3.1 Souvislost 5D GCM s 5D harmonickým oscilátorem	27
3.2 Volba vhodné báze	29
3.3 Řešení n -rozměrného harmonického oscilátoru	30
3.4 Řešení 2D GCM s kvadratickým potenciálem	33
3.5 Řešení 5D GCM s kvadratickým potenciálem	35
3.6 Výběrová pravidla a maticové elementy pro 2D GCM	38
3.6.1 Redukce 2D báze	38
3.6.2 Úhlová část maticových elementů	41
3.6.3 Výpočet integrálů s Laguerrovými polynomy	42
3.6.4 Radiální část maticových elementů	45
3.6.5 Přehled výběrových pravidel a maticových elementů	48
3.7 Výběrová pravidla a maticové elementy pro 5D GCM	49
3.7.1 Úhlová část maticových elementů	49
3.7.2 Radiální část maticových elementů	51
4 Chaos v GCM	54
4.1 Statistické vlastnosti spekter	54
4.2 Peresovy mřížky	55
4.2.1 Integrabilní případ	55

4.2.2	Obecný případ: výpočet časové střední hodnoty	57
4.3	Numerické výsledky	58
4.3.1	Peresovy mřížky	59
4.3.2	Vlnové funkce	68
Shrnutí a závěry		72
Dodatky		73
A	Přidružené Laguerrovy polynomy	73
B	Legendreovy polynomy	73
C	EBK aproximace	74
D	Programy pro výpočty v GCM	75

Název práce: Regulární a chaotické pohyby atomových jader

Autor: Petr Hruška

Katedra (ústav): Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.

e-mail vedoucího: cejnar@ipnp.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt: Práce se zabývá studiem chaosu v geometrickém kolektivním modelu atomového jádra (GCM). První a druhá kapitola obsahuje odvození a rozbor základních vlastností GCM. Jsou zavedeny dvě možnosti kvantování pro nulové rotace jádra. První možnost zohledňuje pouze vibrační stupně volnosti a neodpovídá skutečným jádrům. Druhá možnost zohledňuje jak vibrační, tak rotační stupně volnosti a vede na standardní GCM. Třetí kapitola obsahuje analytický výpočet maticových elementů GCM v bázi harmonického oscilátoru. Ve čtvrté kapitole jsou popsány některé míry kvantového chaosu, včetně tzv. metody Peresovy mřížky. Dále jsou pro obě kvantování uvedeny numerické výsledky ve formě Peresových mřížek, které jsou porovnány s mírami chaosu zpracovanými v jiných pracích.

Klíčová slova: kvantový chaos, geometrický kolektivní model, Peresova mřížka

Title: Regular and chaotic collective motions of atomic nuclei

Author: Petr Hruška

Department: Institute of Particle and Nuclear Physics

Supervisor: Doc. RNDr. Pavel Cejnar, Dr.

Supervisor's e-mail address: cejnar@ipnp.troja.mff.cuni.cz

Abstract: This thesis deals with quantum chaos in the geometric collective model of atomic nuclei (GCM). The first and second chapters introduce the derivation and analysis of basic aspects of the GCM. Two ways of quantization are introduced for zero rotations of the nucleus. The first one takes into account only the vibrational degrees of freedom and does not correspond to real nuclei. The second way reflects both vibrational and rotational degrees of freedom and leads to the standard GCM. The third chapter includes analytical calculations of matrix elements of the GCM in the harmonic oscillator basis. Some measures of chaos are described in the fourth chapter, including the method based on Peres lattices. Numerical results for both quantization methods are presented in the form of Peres lattices, which are compared with some adopted results of other measures of chaos.

Keywords: quantum chaos, geometric collective model, Peres lattice

Summary

The **first chapter** introduces the *geometric collective model* (GCM) of nuclear physics. The derivations are mostly adopted from Ref. [1]. Dynamical variables of the model are introduced in general and particularly for the case of a *quadrupole deformation*. The most general form of the Hamiltonian is discussed, but the analyses in the subsequent chapters are restricted to the case of the quadratic kinetic term and quadratic + cubic + quartic potential terms, see Eq. (1.15).

The **second chapter** deals with the methods of *quantization* of the GCM. There are two natural methods of the quantization in case of *zero rotations*. The first method takes into account only the 2 vibrational degrees of freedom (e.g. variables β and γ), with the rotational degrees of freedom avoided already on the kinematical level. Such a system describes motions in a flat 2-dimensional configuration space. The quantization of such system is straightforward and leads to Eq. (2.15). We call this model the *2D GCM*. In the second method of quantization, rotational degrees of freedom (3 Euler angles) are taken into account together with the vibrational ones. The restriction to the non-rotating case is performed only after the quantization. The technique of quantization in a 5-dimensional curved space adopted from Ref. [1] is used. This procedure leads to Eq. (2.18). We call this model the *5D GCM*.

Both 2D and 5D versions of the model have a common classical limit. However, only the 5D GCM represents the standard geometric model of nuclear physics. Although the interpretation of the 2D GCM is straightforward, the model does not correspond to real nuclei. We analyze this model along with the 5D GCM to allow for a comparison of quantum measures of chaos obtained in different quantization schemes.

The **third chapter** is dedicated to the numerical solutions of the 2D and 5D models. The bases of 2D and 5D harmonic oscillators are used for a numerical solution of the eigenproblem in the respective dimension. Matrix elements of the hamiltonians in the oscillator bases are calculated analytically. Some analytic expressions for the relevant integrals can be found in Ref. [2], but we have derived a different integration technique to make the calculations more instructive. Selection rules for the matrix elements are obtained. It turns out that there are only seven types of non-zero matrix elements, see Subsec. 3.6.5. The resulting hamiltonian representation has a band-diagonal form, which allows an effective diagonalization.

In the **fourth chapter** we briefly describe some common quantum measures of chaos [3]. The method of so-called *Peres lattices* [4] is then discussed in detail. Selected Peres lattices calculated by the method developed in the third chapter

are presented for the 2D and 5D GCM. A comparison of these lattices with standard classical and quantum measures of chaos, which are adopted from calculations of P. Stránský [5, 6, 7], is performed here only for the 5D version of the model. The comparison reveals a strong correlation of Peres lattices with the other measures of chaos. The results for the 2D version of the model are very similar and will be presented in the forthcoming article [7]. Numerical results presented in this chapter are illustrated by images of selected wave functions.

The **appendices** contain some more technical supplementary material and a brief description of numerical programs. **Software tools** for the calculation and visualization of the Peres lattices and wave functions in both 2D and 5D versions of the model are available on the CD attached to this work. These tools, written in the *C#* language, enable one to extend the calculations presented in this work and to display the results obtained in an interactive 3-dimensional form.

Úvod

Tato práce vznikla na základě poznatků, které byly shromážděny během více než dvou let při studiu kvantového chaosu ve skupině kolem Doc. P. Cejnara. Původním cílem bylo navázat na práce [5, 6, 8], které se zabývají klasickými mírami chaosu v geometrickém modelu jádra. Výsledky těchto prací odhalily netriviální závislost chaotičnosti systému na parametrech hamiltoniánu a na energii. Logickým dalším krokem bylo použít některou z metod pro měření kvantového chaosu a výsledky porovnat s klasickým protějškem. Právě tímto úkolem se zabývá tato práce, i když s omezením jen na kvantové stavy s nulovým momentem hybnosti. Výsledky získané ve spolupráci s Mgr. P. Stránským potvrzují dobrou korelaci mezi kvantovými a klasickými mírami chaosu. První společný článek je již v přípravě [7]. Do této diplomové práce byly zařazeny ty výsledky, na kterých se autor přímo podílel.

První kapitola zavádí geometrický kolektivní model ve shodě s učebnicí [1]. Jsou zavedeny kinematické proměnné popisující jadernou deformaci a obecný hamiltonián určující jejich dynamiku. V práci se omezujeme na popis kvadrupólových stupňů volnosti s použitím zjednodušeného hamiltoniánu obsahujícího jen kvadratické kinetické členy a potenciální členy nejvýše kvartického řádu.

Druhá kapitola se zabývá kvantováním kapkového modelu jádra, také podle [1]. Ukazuje se, že pro kvantování je potřeba použít aparát pro kvantování v zakřiveném prostoru. Vezmeme-li klasický kapkový model z první kapitoly a položíme rotaci rovnou nule, dostaneme obyčejný hmotný bod v dvoudimenzionálním kartézském systému, který se pohybuje v jednoduchém potenciálním poli. Při pohledu na klasický hamiltonián se přímo nabízí nejjednodušší varianta kvantování, kterou v práci nazýváme 2D GCM. Tato varianta není to, co se obvykle uvádí pod zkratkou GCM. I když dobrá fyzikální interpretace je zřejmá, nejde o kvantový model jádra. 2D GCM je zajímavý jako alternativní kvantový model, který by měl mít stejné chaotické vlastnosti jako jeho klasický protějšek a jako skutečný kvantový geometrický model, který zde nazýváme 5D GCM. Tato druhá varianta vznikne kvantováním klasického hamiltoniánu včetně rotací. Teprve po kvantovací proceduře položíme rotace rovny nule a dostaneme tak poněkud odlišný výsledek od 2D GCM. Ukazuje se, že 5D GCM souvisí s pětirozměrným harmonickým oscilátorem a právě tato jeho vlastnost je využita k volbě vhodné báze pro numerické řešení.

Třetí kapitola se věnuje numerickému řešení 2D i 5D modelu. V obou případech je zvolena báze, která odpovídá harmonickému oscilátoru. V této bázi je vyjádřen hamiltonián. Všechny maticové elementy hamiltoniánu jsou vypočítány analyticky. Postup všech výpočtů je detailně popsán a ilustrován na dostatečném počtu případů. Výsledky slouží nejen pro potřeby této práce, ale vlastně pro jakékoliv numerické výpočty v GCM. I když způsob výpočtu je naznačen

v [2], věřím, že alternativní výpočet založený na generujících funkcích je instruktivnější. Další výhodou je současné odvození výběrových pravidel, která umožňují mnohem efektivnější diagonalizaci hamiltoniánu. Po výpočtech, které končí překvapivě jednoduchým tvarem, dostáváme sedm typů maticových elementů. Ukazuje se, že matice má pásovou strukturu. Pro vlastní diagonalizaci jsou využity rutiny knihovny Lapack.

Odvozené analytické výsledky posloužily při numerických výpočtech popsaných ve čtvrté kapitole. Tato kapitola je věnována studiu kvantového chaosu [3, 9, 10] v GCM pomocí metody Peresovy mřížky [4]. Práce dokumentuje celý postup konstrukce Peresových mřížek, od základních otázek týkajících se kvantování, přes volbu báze pro numerické výpočty a výpočet netriviálních maticových elementů, až po výpočet časové střední hodnoty Peresova invariantu. Získané numerické výsledky jsou srovnány s převzatými výsledky pro klasický chaos ekvivalentního systému [5] a kvantový chaos měřený pomocí vzdálenosti nejbližších hladin [7].

Softwareové nástroje použité pro numerické výpočty jsou přiloženy na CD. Pomocí těchto nástrojů je možné spočítat Peresovy mřížky a vlnové funkce výše uvedených verzí GCM. Peresovy mřížky je možné vizualizovat jako dvourozměrné, nebo dokonce třírozměrné diagramy. Přiložen je i program pro zobrazení vlnových funkcí. Díky těmto nástrojům je možné kdykoliv dopočítat další zajímavé konfigurace.

Kapitola 1

Zavedení GCM

1.1 Dynamické proměnné

Geometrický kolektivní model, (Geometric Collective Model, zkráceně GCM), je tradiční model atomového jádra. K jeho vzniku původně přispěla představa, že chování atomového jádra odpovídá kapce nestlačitelné kapaliny. I když tato interpretace se ukázala být neudržitelnou, zůstává představa kapky stále dobrým intuitivním vodítkem. Kapku budeme používat i v této práci, hlavně pro odvození symetrií, které jsou na kapce dobře vidět a z nichž pak vyplynou požadavky na symetrie vlnových funkcí [11]. Klasický kapkový model byl Å. Bohrem použit odvození geometrického (někdy též kolektivního) modelu [12], který již je kvantový. Bohr vzal v úvahu jen nejnižší řády rozvoje tvaru kapky. Na jeho model navázali Gneuss, Mosel a Greiner [13], kteří vzali v úvahu i vyšší řády rozvoje a začali systematicky používat formalismus sférických tenzorů. Tenzorovým operátorům je možné přiřadit význam rozložení hustoty jaderné hmoty, což dává novou realističtější interpretaci. Tento model je označován jako GCM.

Jedna z cest, jak odvodit GCM, je odvodit hamiltonián pro systém klasické kapky a ten pak kvantovat [1]. Tuto cestu budeme následovat i my.¹ Kolektivní model vystihuje společné pohyby nukleonů v atomovém jádře. Místo souřadnic jednotlivých nukleonů použijeme souřadnice vystihující deformace a rotace atomového jádra. Jaderná hmota je tak popisována jako jakási kapka – někdy se hovoří o kapkovém modelu jádra. Tvar kapky lze formálně nejlépe popsat pomocí sférických funkcí $Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi)$, které tvoří úplný ortogonální systém funkcí. Každému bodu na povrchu kapky v daném čase t přiřadíme vzdálenost $R(\vartheta, \varphi, t)$ pomocí vzorce

$$R = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda, \mu} \alpha_{\lambda, \mu}^*(t) Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi) \right]. \quad (1.1)$$

Komplexní koeficienty $\alpha_{\lambda\mu}$ nejsou zcela nezávislé. Požadujeme, aby poloměr R byl reálný. Pro sférické funkce platí

$$Y_{\lambda\mu}^*(\vartheta, \varphi) = (-1)^\mu Y_{\lambda, -\mu}(\vartheta, \varphi)$$

¹Alternativní způsob odvození je vyjít rovnou z rozvoje pomocí sférických tenzorů [13].

Dosazením do (1.1) dostáváme podmínku

$$\alpha_{\lambda\mu}^* = (-1)^\mu \alpha_{\lambda, -\mu}. \quad (1.2)$$

Pro studium vlastností modelu je výhodné přejít od $\alpha_{\lambda\mu}$ k proměnným, které by oddělily popis tvaru kapky od jejího natočení v prostoru. Natočení lze popsat pomocí Eulerových úhlů $\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3$. Budeme studovat, jak se proměnné $\alpha_{\lambda\mu}$ chovají při rotaci kapky. Prozkoumáme změnu $\alpha_{\lambda\mu}$, která nastane při pootočení os souřadné soustavy, které původním úhlům ϑ, φ přiřadí nové hodnoty ϑ', φ' . Požadujeme, aby

$$R'(\vartheta', \varphi') = R(\vartheta, \varphi),$$

kde R' je dáno vzorcem (1.1), ale obsahuje koeficienty $\alpha'_{\lambda\mu}$. Po dosazení do předešlé rovnosti máme

$$\sum_{\lambda, \mu} \alpha'_{\lambda, \mu} Y_{\lambda\mu}(\vartheta', \varphi') = \sum_{\lambda, \mu} \alpha_{\lambda, \mu}^* Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi). \quad (1.3)$$

Sférické funkce $Y_{\lambda\mu}$ tvoří sférický tenzor řádu λ . Díky tomu známe transformační vztah při otočení souřadnic

$$Y_{\lambda\mu}(\vartheta', \varphi') = \sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda} \mathcal{D}_{\mu\mu'}^{(\lambda)} Y_{\lambda\mu'}(\vartheta, \varphi).$$

Dosadíme do (1.3) a přeznačíme sčítací index na pravé straně rovnosti

$$\sum_{\lambda, \mu} \alpha'_{\lambda, \mu} \sum_{\mu'=-\lambda}^{\lambda} \mathcal{D}_{\mu\mu'}^{(\lambda)} Y_{\lambda\mu'}(\vartheta, \varphi) = \sum_{\lambda, \mu'} \alpha_{\lambda\mu'}^* Y_{\lambda\mu'}(\vartheta, \varphi).$$

a díky ortogonalitě funkcí $Y_{\lambda\mu'}$ vidíme, že musí platit

$$\sum_{\mu} \alpha'_{\lambda\mu} \mathcal{D}_{\mu\mu'}^{(\lambda)} = \alpha_{\lambda\mu'}^*. \quad (1.4)$$

Matice $\mathcal{D}_{\mu\mu'}^{(\lambda)}$ je unitární, neboť převádí jednu ortogonální bázi na druhou. Díky tomu je

$$\sum_{\mu'} \mathcal{D}_{\mu\mu'}^{(\lambda)} \mathcal{D}_{\mu'\nu}^{*(\lambda)} = \delta_{\mu, \nu}.$$

Tuto relaci využijeme pro další úpravu vztahu (1.4). Obě strany vynásobíme $\mathcal{D}_{\mu'\nu}^{*(\lambda)}$ a provedeme součet přes μ' . Dostáváme

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} \alpha'_{\lambda\mu} \sum_{\mu'} \mathcal{D}_{\mu\mu'}^{(\lambda)} \mathcal{D}_{\mu'\nu}^{*(\lambda)} &= \sum_{\mu'} \mathcal{D}_{\mu'\nu}^{*(\lambda)} \alpha_{\lambda\mu'}^* \\ \sum_{\mu} \alpha'_{\lambda\mu} \delta_{\mu, \nu} &= \sum_{\mu'} \mathcal{D}_{\mu'\nu}^{*(\lambda)} \alpha_{\lambda\mu'}^* \end{aligned}$$

a po komplexním sdružení, další úpravě a přeznačení indexů máme konečně

$$\alpha'_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'} \mathcal{D}_{\mu'\mu}^{(\lambda)} \alpha_{\lambda\mu'}.$$

Koeficienty $\alpha_{\lambda\mu}$ se transformují podobně jako sférické funkce $Y_{\lambda\mu}$ a tvoří prakticky sférický tenzor řádu λ . Je totiž možné použít celý tenzorový aparát úplně beze změny.

Tenzory $\alpha_{\lambda\mu}$ mohou mít různou interpretaci. V klasickém kapkovém modelu popisují tvar povrchu. Pro popis jádra je taková interpretace problematická, protože povrch se může po dosazení konkrétních hodnot prolnout sám do sebe. Taková interpretace je vhodná jen pro malé odchylky od sférického tvaru, což není případ této práce. Fyzikálně realističtější je interpretovat tenzory jako momenty rozložení hustoty jaderné hmoty uvnitř jádra [13].

Další vazbová podmínka na koeficienty $\alpha_{\lambda\mu}$ vyplývá z požadavku na konstantní objem kapky. Pro relativně malé hodnoty $\alpha_{\lambda\mu}$ platí pro objem vztah

$$V = \frac{1}{3}R_0^3 \left(4\pi + 3\sqrt{4\pi}\alpha_{00} + 3 \sum_{\lambda\mu} |\alpha_{\lambda\mu}|^2 \right).$$

Nedeformovaná kapka, pro kterou je $\alpha_{\lambda\mu} = 0$, má objem $V_0 = \frac{4\pi}{3}R_0^3$. Z požadavku $V_0 = V$ máme podmínku

$$\frac{4\pi}{3}R_0^3 = \frac{1}{3}R_0^3 \left(4\pi + 3\sqrt{4\pi}\alpha_{00} + 3 \sum_{\lambda\mu} |\alpha_{\lambda\mu}|^2 \right),$$

odkud dostaneme vztah pro α_{00}

$$\alpha_{00} = -\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{\lambda\mu} |\alpha_{\lambda\mu}|^2.$$

Dipólové koeficienty $\alpha_{1\mu}$ se obvykle neuvažují. Pro malé hodnoty mají totiž jen význam posunu těžiště kapky a dají se díky tomu odtransformovat pomocí přechodu do souřadnicové soustavy s těžištěm kapky v počátku.

Nyní zanedbáme všechny koeficienty $\alpha_{\lambda\mu}$ vyšší než kvadratické, tj. budeme uvažovat jen kvadrupólové vibrace jádra. Pro zjednodušení výpočtů také zanedbáme objemový člen α_{00} . Dostaneme tak nejzákladnější formu kolektivního modelu, kterou používáme v této práci. Povrch kapky je nyní dán vzorcem

$$R(\vartheta, \varphi, t) = R_0 \left(1 + \sum_{\mu=-2}^2 \alpha_{2\mu}^* Y_{2\mu}(\vartheta, \varphi) \right).$$

Použité sférické funkce můžeme vyjádřit v proměnných x, y, z , kde

$$\begin{aligned} x &= \sin \vartheta \cos \varphi \\ y &= \sin \vartheta \sin \varphi \\ z &= \cos \vartheta \end{aligned}$$

a

$$\begin{aligned} Y_{20}(x, y, z) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(2z^2 - x^2 - y^2) \\ Y_{2,\pm 1}(x, y, z) &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}}(x + iy)z \\ Y_{2,\pm 2}(x, y, z) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}(x + iy)^2. \end{aligned}$$

Tvar kapky lze po úpravě a zavedení nových konstant psát jako

$$R(x, y, z) = R_0(1 + \alpha_{xx}x^2 + \alpha_{yy}y^2 + \alpha_{zz}z^2 + 2\alpha_{xy}xy + 2\alpha_{xz}xz + 2\alpha_{yz}yz).$$

Nově zavedené koeficienty lze přehledně zapsat do matice

$$\begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{zx} & \alpha_{zy} & \alpha_{zz} \end{pmatrix}. \quad (1.5)$$

Původních pět komplexních koeficientů $\alpha_{2\mu}$ má 10 složek, které jsou vzájemně provázané pomocí komplexních vazbových podmínek (1.2), které můžeme napsat také jako pět rovnic

$$\begin{aligned} \operatorname{Im} \alpha_{20} &= 0 \\ \operatorname{Im} \alpha_{21} &= -\operatorname{Im} \alpha_{21} \\ \operatorname{Re} \alpha_{21} &= \operatorname{Re} \alpha_{21} \\ \operatorname{Im} \alpha_{22} &= \operatorname{Im} \alpha_{22} \\ \operatorname{Re} \alpha_{22} &= \operatorname{Re} \alpha_{22}, \end{aligned}$$

z nichž každá odebere jeden stupeň volnosti. Původní koeficienty měly tedy celkem 5 stupňů volnosti. Nové proměnné (1.5) jsou reálné (protože poloměr R musí být reálný) a odpovídají tedy devíti stupňům volnosti. Přířímým výpočtem koeficientů můžeme zjistit, že matice (1.5) je symetrická, což ubere tři stupně volnosti a navíc platí

$$\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz} = 0, \quad (1.6)$$

což je čtvrtá vazbová podmínka. Dostáváme opět pět stupňů volnosti. Matice (1.5) se při otáčení systému souřadnic transformuje jako tenzor. Zavedeme-li souřadnice ve směru hlavních os tohoto tenzoru, získáme diagonální tvar

$$\begin{pmatrix} \alpha'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha'_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha'_{zz} \end{pmatrix}$$

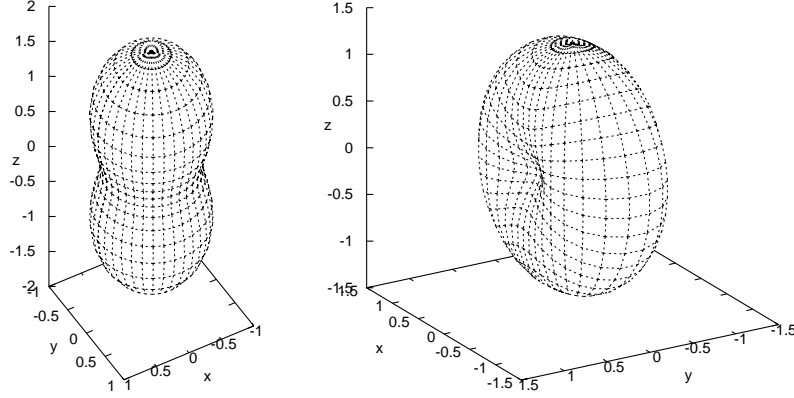
a tvar kapky je pak dán jako

$$R = R_0(1 + \alpha'_{xx}x^2 + \alpha'_{yy}y^2 + \alpha'_{zz}z^2). \quad (1.7)$$

Přechod k této speciální souřadné soustavě budeme charakterizovat pomocí Eulerových úhlů $\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3$. Díky nulovosti stopy (1.6) má diagonalizovaná matice jen dva nezávislé prvky. Zvolme α'_{xx} a α'_{yy} . Kapka je nyní v čase t popsána pomocí pěti proměnných $\vartheta_1(t), \vartheta_2(t), \vartheta_3(t), \alpha'_{xx}(t), \alpha'_{yy}(t)$. Přechodem k soustavě hlavních os jsme od sebe oddělili rotační a vibrační souřadnice. Vibrace kapky jsou ovlivněny rotací díky odstředivým silám a naopak rotace je závislá na momentu setrvačnosti kapky. I když je popis rotací a vibrací samostatný, pohybové rovnice obsahují jejich netriviální kombinace.

Pro popis vibrací kapky se používají Bohrovy souřadnice, které mají dobrou interpretaci. Nejprve však musíme definovat pomocné proměnné

$$\begin{aligned} a_0 &\equiv -\sqrt{\frac{4\pi}{5}}(\alpha'_{xx} + \alpha'_{yy}) \\ a_2 &\equiv -\sqrt{\frac{2\pi}{15}}(\alpha'_{xx} - \alpha'_{yy}). \end{aligned}$$



Obrázek 1.1: Tvary kapky prolate a oblate pro $\gamma = 0$ a $\gamma = \pi/3$, $\beta = 1$. Jak je vidět, pro zvolené hodnoty deformačních parametrů dochází k vytvoření nerealistických singularit na povrchu kapky. V těchto případech je interpretace GCM pomocí (1.1) nevhodná a tenzory $\alpha_{\lambda,\mu}$ je třeba chápat např. jako multipólové momenty rozdělení hustoty jádra.

Bohrovy proměnné jsou pak definovány vztahy

$$\begin{aligned} a_0 &= \beta \cos \gamma, \\ a_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma. \end{aligned}$$

Pro jejich geometrickou interpretaci jsou užitečné výrazy

$$\begin{aligned} \alpha'_{xx} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \cos\left(\gamma - \frac{2\pi}{3}\right) \\ \alpha'_{yy} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \cos\left(\gamma + \frac{2\pi}{3}\right) \\ \alpha'_{zz} &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \cos(\gamma). \end{aligned} \tag{1.8}$$

Je například okamžitě vidět, že pro $\beta = 0$ jsou koeficienty α' nulové a podle (1.7) je kapka čistě sférická. Proměnná β má význam velikosti deformace kapky, zatímco γ určuje typ deformace ke kterému dochází. Základní dva typy deformace jsou *oblate* (disk) a *prolate* (doutník). Pro $\gamma = 0$ se kapka smršťuje ve směrech x a y , zatímco ve směru z se rozpíná. Dostáváme tvar prolate. Pro $\gamma = \pi/3$ se kapka smršťuje ve směru osy y a rozpíná ve směru os x a z . Dostáváme tvar oblate. Je-li hodnota γ někde mezi 0 a $\pi/3$, má kapka tvar plynule přecházející mezi prolate a oblate.

Ze vztahů (1.8) je vidět, že transformace $\gamma \rightarrow \gamma + 2\pi/3$ jen cyklicky prohodí význam os. Odpovídá tedy rotaci o úhel 120° podle osy dané vektorem $(1, 1, 1)$.

Stejného efektu lze dosáhnout i pomocí Eulerových úhlů ϑ_i . Popis je tedy nejednoznačný. Další transformace, která nemění tvar kapky je $\gamma \rightarrow -\gamma$.² Chceme-li jednoznačný popis kapky v prostoru, můžeme vzít jen interval $\gamma \in \langle 0, \pi/3 \rangle$. Pomocí vhodné volby Eulerových úhlů lze pak stále dosáhnout všech tvarů. Zatím jsme uvažovali i hodnotu $\beta < 0$. Při transformaci $\gamma \rightarrow \gamma + \pi$ se hodnoty α' změny stejně jako při $\beta \rightarrow -\beta$. Interval $\langle 0, \pi/3 \rangle$ lze zobrazit na $\langle \pi, \pi + \pi/3 \rangle$ pomocí již známých transformací

$$\gamma \rightarrow \gamma + \frac{2\pi}{3} \quad (1.9)$$

$$\gamma \rightarrow -\gamma \quad (1.10)$$

o kterých už víme, že je lze zprostředkovat i pomocí ϑ_i . Díky tomu můžeme uvažovat jen $\beta > 0$.

1.2 Hamiltonián

V této části zkonstruujeme klasický hamiltonián kapkového modelu. Máme k dispozici sférický tenzor druhého řádu $\alpha = \{\alpha_{2\mu}\}$. Začneme potenciálním členem $V(\alpha)$, který můžeme rozvinout pomocí tenzorových součinů (viz [14])

$$V = \sum_{i,j=0}^{\infty} C_{ij} ([\alpha \times \alpha]^0)^i \left([[\alpha \times \alpha]^2 \times \alpha]^0 \right)^j. \quad (1.11)$$

Pro jednoduchost vezmeme jen první tři členy nejnižšího řádu a máme

$$V = C_2 [\alpha \times \alpha]^0 + C_3 [[\alpha \times \alpha]^2 \times \alpha]^0 + C_4 ([\alpha \times \alpha]^0)^2.$$

Potenciál V je skalár, takže se nemění při změně Eulerových úhlů ϑ_i . Po přepisu do Bohrových proměnných má potenciál tvar

$$V(\beta, \gamma) = C_2 \frac{1}{\sqrt{5}} \beta^2 - C_3 \sqrt{\frac{2}{35}} \beta^3 \cos 3\gamma + C_4 \frac{1}{5} \beta^4. \quad (1.12)$$

Kinetický člen T získáme podobně jako potenciální člen. Rozvoj do tenzorových součinů dává

$$T = B_2 [\dot{\alpha} \times \dot{\alpha}]^0 + B_{31} [[\dot{\alpha} \times \alpha]^2 \times \dot{\alpha}]^0 + B_{32} [[\dot{\alpha} \times \dot{\alpha}]^2 \times \alpha]^0 + \dots, \quad (1.13)$$

odkud vezmeme jen první člen, takže

$$T \equiv B_2 [\dot{\alpha} \times \dot{\alpha}]^0 = \frac{B_2}{\sqrt{5}} \sum_{\mu=-2}^2 (-1)^\mu \dot{\alpha}_{2\mu} \dot{\alpha}_{2,-\mu}.$$

Pro konstrukci hamiltoniánu potřebujeme místo rychlostí přidružené hybnosti, které jsou definovány jako

$$\pi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\alpha}},$$

²Tato transformace prohazuje význam osy x a y . Pokud by tvar kapky nebyl invariantní vůči operaci zrcadlení, byla by tato změna podstatná. Z (1.7) je ale vidět, že například při zrcadlení $x \rightarrow -x$ se tvar nemění a díky tomu je možné operaci $\gamma \rightarrow -\gamma$ realizovat změnou Eulerových úhlů.

což dává

$$\pi_{2\mu} = \frac{2B_2}{\sqrt{5}}(-1)^\mu \dot{\alpha}_{2,-\mu} = \frac{2B_2}{\sqrt{5}} \dot{\alpha}_{2\mu}^*.$$

Kinetický člen vyjádřený pomocí hybností je

$$T = \frac{\sqrt{5}}{4B_2} [\pi \times \pi]^0. \quad (1.14)$$

S pomocí (1.12) a (1.14) můžeme napsat hamiltonián

$$\begin{aligned} H &= T + V = \\ &= \frac{2B_2}{\sqrt{5}} [\pi \times \pi]^0 + C_2 [\alpha \times \alpha]^0 + C_3 [[\alpha \times \alpha]^2 \times \alpha]^0 + C_4 ([\alpha \times \alpha]^0)^2 \end{aligned} \quad (1.15)$$

nebo po přechodu k Bohrovým proměnným

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \mathcal{J}_k(\beta, \gamma) \left(\sum_{i=1}^3 \mathcal{V}_{ki}(\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3) \dot{\vartheta}_i \right)^2 + \frac{K}{2} (\dot{\beta}^2 + \beta^2 \dot{\gamma}^2) \\ &+ A\beta^2 + B\beta^3 \cos \gamma + C\beta^4, \end{aligned} \quad (1.16)$$

kde jsme zavedli konstanty

$$K \equiv \frac{2B_2}{\sqrt{5}} \quad A \equiv \frac{C_2}{\sqrt{5}} \quad B \equiv -C_3 \sqrt{\frac{2}{35}} \quad C \equiv \frac{C_4}{5}$$

a funkce \mathcal{J}, \mathcal{V} , jejichž význam objasníme níže.

Kinetický člen je součtem energie rotací a energie vibrací

$$T = T_{\text{rot}} + T_{\text{vib}}. \quad (1.17)$$

Zavedeme laboratorní souřadnou soustavu s jednotkovými vektory ve směru os \vec{e}_i . Kapka, stejně jako každé tuhé těleso, má význačné osy, které odpovídají hlavním osám tenzoru setrvačnosti. Právě tyto osy se používají pro popis rotace kapky. Eulerovy úhly ϑ_i popisují natočení laboratorní souřadné soustavy do souřadné soustavy hlavních os kapky \vec{e}'_i , tzv. vnitřní souřadné soustavy.

$$\vec{e}'_i = \mathbf{R}(\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3) \vec{e}_i.$$

Rychlost a osu rotace můžeme charakterizovat vektorem \vec{R} , který je rovnoběžný s osou rotace a jeho velikost je rovna úhlové rychlosti. Označíme složky tohoto vektoru vzhledem k vnitřní souřadné soustavě jako ω_k ,

$$\vec{R} = \sum_{k=1}^3 \vec{e}'_k \omega_k.$$

Energie rotace je pak

$$T_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 \mathcal{J}_k(\beta, \gamma) \omega_k, \quad (1.18)$$

právě díky speciální volbě \vec{e}'_i ve směru hlavních os tenzoru setrvačnosti. Funkce $\mathcal{J}_k(\beta, \gamma)$ jsou momenty setrvačnosti okolo os k

$$\mathcal{J}_k(\beta, \gamma) = 4K\beta^2 \sin^2(\gamma - 2k\pi/3). \quad (1.19)$$

Při pohybu kapky, jejíž natočení je popsáno funkcemi $\vartheta_i(t)$, se vektor rotace $\vec{R}(t)$ mění s časem, a to jak vůči laboratorní soustavě, tak i vůči vnitřní soustavě souřadnic spojené s tělesem. Vektor $\vec{R}(t)$ lze vyjádřit pomocí Eulerových úhlů a jejich derivací (\vec{R} popisuje rychlost rotace). Lze ukázat (viz [1]), že složky \vec{R} je možno vyjádřit pomocí vztahu

$$\omega_k = \sum_{i=1}^3 \mathcal{V}_{ki}(\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3) \dot{\vartheta}_i.$$

Prvky matice \mathcal{V}_{ki} jsou

$$\mathcal{V}_{ij}(\vartheta_2, \vartheta_3) = \begin{pmatrix} -\sin \vartheta_2 \cos \vartheta_3 & \sin \vartheta_3 & 0 \\ \sin \vartheta_2 \sin \vartheta_3 & \cos \vartheta_3 & 0 \\ \cos \vartheta_2 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.20)$$

S využitím této matice po dosazení do (1.18) a (1.17) máme kinetickou energii

$$T = \frac{1}{2K} \sum_{k=1}^3 \mathcal{J}_k(\beta, \gamma) \left(\sum_{i=1}^3 \mathcal{V}_{ki}(\vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3) \dot{\vartheta}_i \right)^2 + \frac{K}{2} (\dot{\beta}^2 + \beta^2 \dot{\gamma}^2). \quad (1.21)$$

Kvantování hamiltoniánu (1.16) provedeme podrobně v dalších kapitolách. Zatím uvedeme jen výsledek

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2K} \left(\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{1}{\beta^2} \hat{\Lambda}^2 \right) + V(\beta, \gamma), \quad (1.22)$$

kde $\hat{\Lambda}^2$ je operátor seniority

$$\hat{\Lambda}^2 = -\frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} + \sum_{k=1}^3 \frac{\hat{L}_k^2}{2\mathcal{J}_k}.$$

Operátory \hat{L}_k jsou komponenty impulsmomentu ve směru osy k

$$\hat{L}_k \equiv -i \sum_{j=1}^3 (\mathcal{V}^{-1})_{jk} \frac{\partial}{\partial \vartheta_j}.$$

Tento hamiltonián je nejjednodušší případ GCM.

Kapitola 2

Kvantování GCM

2.1 Kvantování v zakřiveném prostoru

Při kvantování GCM, včetně rotací, se ukazuje, že pětirozměrný prostor odpovídající pěti souřadnicím nejjednoduššího GCM modelu je zakřivený. Zakřivení se projevuje tvarem kinetické části hamiltoniánu a objemového elementu. Oba tyto projevy zůstávají i při nulových rotacích. V následující kapitole uvedeme podrobný postup kvantování v zakřiveném prostoru volně převzatý z [1].

2.1.1 Nejednoznačnost kvantování

Při přepisu klasických operátorů do kvantované podoby musíme v některých případech řešit nejednoznačnosti, které vznikají nenulovostí komutačních relací v kvantové teorii. Například klasický GCM hamiltonián s nenulovou rotací obsahuje člen

$$\frac{1}{2K}\dot{\beta}^2.$$

Jak uvidíme dále, můžeme takový člen kvantovat jako

$$-\frac{\hbar^2}{2K}\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\beta\frac{\partial}{\partial\beta},$$

nebo jako

$$-\frac{\hbar^2}{2K}\frac{1}{\beta^4}\frac{\partial}{\partial\beta}\beta^4\frac{\partial}{\partial\beta}$$

a dalších možností by se dalo najít ještě mnohem více. Oba kvantované výrazy se liší, ale provedeme-li klasickou limitu, bude jejich hodnota stejná. Poslední výraz lze přepsat do tvaru

$$\frac{1}{2K}\frac{1}{\beta^4}i\hbar\frac{\partial}{\partial\beta}\beta^4i\hbar\frac{\partial}{\partial\beta},$$

kde

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial\beta} = \hat{p}_\beta$$

je hybnost ve směru souřadnice β . Platí komutační relace

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial \beta}, \beta \right] = [\hat{p}_\beta, \hat{\beta}] = i\hbar,$$

která v klasické limitě pro $\hbar \rightarrow 0$ umožňuje komutaci hybnosti a souřadnice. Díky tomu se v klasické limitě faktory β^4 a β^{-4} , vykrátí a dostáváme

$$\frac{1}{2K} \frac{1}{\hat{\beta}^4} \hat{p}_\beta \hat{\beta}^4 \hat{p}_\beta = \frac{\hat{p}_\beta^2}{2K}.$$

V následujícím nejprve vyřešíme kvantování kinetického členu. Nejjednodušší situace nastává, pokud máme klasický systém v plochém prostoru popsaný kartézskými souřadnicemi x_1, x_2, \dots, x_n . V takovém případě je kinetický člen úměrný Laplaceově operátoru

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \quad (2.1)$$

Přejdeme-li od kartézských souřadnic k souřadnicím obecným, můžeme (stále v plochém prostoru) studovat formu operátoru kinetické energie vyjádřenou pomocí obecných souřadnic. To nám poskytne vodítko pro konstrukci v obecném zakřiveném prostoru. Nejprve zavedeme základní vztahy pro klasický systém.

2.1.2 Obecné souřadnice v klasickém případě

Mějme klasický systém v plochém prostoru popsaný kartézskými souřadnicemi x_1, x_2, \dots, x_n . Kvadrát infinitezimálně malého elementu dráhy je dán vztahem

$$ds^2 = \sum_{k=1}^n dx_k^2. \quad (2.2)$$

Přejdeme-li do systému obecných souřadnic q_1, q_2, \dots, q_n , kde

$$\begin{aligned} q_i &= q_i(x_k) \\ x_k &= x_k(q_i), \end{aligned}$$

můžeme vyjádřit dx_k pomocí vztahu

$$dx_k = \sum_{i=1}^n \frac{\partial x_k}{\partial q_i} dq_i$$

a dosazením do (2.2) získáme

$$ds^2 = \sum_{k=1}^n \sum_{i=1}^n \frac{\partial x_k}{\partial q_i} dq_i \sum_{j=1}^n \frac{\partial x_k}{\partial q_j} dq_j = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\sum_{k=1}^n \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \frac{\partial x_k}{\partial q_j} \right) dq_i dq_j.$$

Pro zjednodušení zápisu zavedeme

$$g_{ij} = g_{ij}(q_l) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \frac{\partial x_k}{\partial q_j}, \quad (2.3)$$

takže

$$ds^2 = \sum_{i,j=1}^n g_{ij} dq_i dq_j. \quad (2.4)$$

Výraz pro ds^2 souvisí s kinetickým členem. Platí totiž

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^n \left(\frac{dx_i}{dt} \right)^2,$$

odkud po vynásobení dt^2 dostáváme hledanou souvislost

$$dt^2 T = \frac{m}{2} \sum_{i,j=1}^n dx_i^2 = \frac{m}{2} ds^2 = \frac{m}{2} \sum_{i,j=1}^n g_{ij} dq_i dq_j.$$

Vydělením dt^2 máme

$$T = \frac{m}{2} \sum_{i,j=1}^n g_{ij} \frac{dq_i}{dt} \frac{dq_j}{dt} = \frac{m}{2} \sum_{i,j=1}^n g_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j. \quad (2.5)$$

Na závěr kapitoly poznamenejme, že přepis členu pro potenciální energii $V(x_1, x_2, \dots, x_n)$ je mnohem jednodušší. Požadujeme

$$V(q_1, q_2, \dots, q_n) = V(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

2.1.3 Kvantování v obecných souřadnicích a zakřivených prostorech

Nechť máme vlnovou funkci $\psi_x(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Definujeme funkci křivočarých souřadnic $\psi_q(q_1, q_2, \dots, q_n)$ požadavkem

$$\psi_q(q_1, q_2, \dots, q_n) \equiv \psi_x(x_1, x_2, \dots, x_n). \quad (2.6)$$

Výraz pro operátor kinetické energie \hat{T}_x v kartézských souřadnicích známe

$$\hat{T}_x \psi_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 \psi_x}{\partial x_i^2}.$$

Pro obecné souřadnice vyjdeme z požadavku

$$\hat{T}_q \psi_q \equiv \hat{T}_x \psi_x. \quad (2.7)$$

Laplaceův operátor zapsaný v křivočarých souřadnicích s metrikou (2.4) je známý, viz např. [1]

$$\Delta = \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{G^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(G^{\frac{1}{2}} (g^{-1})_{ij} \frac{\partial \psi_q}{\partial q_j} \right).$$

Dostáváme okamžitě řešení

$$\hat{T}_q \psi_q = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i,j=1}^n \frac{1}{G^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial q_i} \left(G^{\frac{1}{2}} (g^{-1})_{ij} \frac{\partial \psi_q}{\partial q_j} \right), \quad (2.8)$$

kde G je determinant g_{ij} a $(g^{-1})_{ij}$ je inverzní matice ke g_{ij} . Poslední vztah již nespolehá na původní kartézský systém a lze jej použít i pro zakřivené prostory. Stačí mít k dispozici obdobu (2.4).

Normalizace funkcí ψ_x a ψ_q je dána vztahy

$$\begin{aligned} \int \psi_x^*(x_1, x_2, \dots, x_n) \psi_x(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n &= 1 \\ \int \psi_q^*(q_1, q_2, \dots, q_n) \psi_q(q_1, q_2, \dots, q_n) G^{\frac{1}{2}} dq_1 dq_2 \dots dq_n &= 1. \end{aligned}$$

Lze snadno dokázat, že

$$G^{\frac{1}{2}} = \det \left(\frac{\partial x_k}{\partial q_j} \right),$$

odkud plyne normalizace ψ_q . Dokážeme, že platí kvadrát předchozí rovnosti

$$G = \det(g_{ij}) = (\det h_{kj})^2, \quad (2.9)$$

kde jsme označili

$$h_{kj} \equiv \frac{\partial x_k}{\partial q_j}.$$

Podle definice (2.3) je

$$\begin{aligned} \det \mathbf{g} &= \det \sum_{k=1}^n \frac{\partial x_k}{\partial q_i} \frac{\partial x_k}{\partial q_j} = \det \sum_{k=1}^n h_{ki} h_{kj} = \\ \det (\mathbf{h}^T \cdot \mathbf{h}) &= (\det \mathbf{h}^T)(\det \mathbf{h}) = (\det \mathbf{h})^2 \quad \square \end{aligned}$$

2.2 2D kvantování GCM

V minulé části jsme viděli, že tvar klasického kinetického členu systému koresponduje s metrikou a určuje tak zakřivení prostoru. Vezeme-li klasický GCM (1.16) a zanedbáme rotace, dostaneme velmi jednoduchý kinetický člen $T = (\dot{\beta}^2 + \beta^2 \dot{\gamma}^2)/2m$, který odpovídá plochému 2D prostoru. V [5] je spočítán klasický chaos pro model s tímto členem. Chceme-li porovnat míru chaosu pro klasický a kvantový případ, vzniká přirozeně otázka, zda prostě neprovést celý proces kvantování v plochem prostoru. Z literatury [15, 1, 14] víme, že GCM nemá objemový element odpovídající plochému prostoru. Tato cesta, i když je technicky možná, nevede směrem k systému, který by jakkoliv souvisel s modelem jádra. Jde o čistě formální, nicméně z teoretického hlediska zajímavou, alternativu ke skutečnému GCM modelu, která se nikde nepoužívá. V dalším budeme pro 2D kvantování GCM používat stručnější označení 2D GCM a původní jaderný model GCM budeme značit 5D GCM.

Klasický hamiltonián GCM (1.16) s nulovou rotací je dán předpisem

$$H = \frac{1}{2K} (\dot{\beta}^2 + \beta^2 \dot{\gamma}^2) + V(\beta, \gamma). \quad (2.10)$$

Souřadnice β nabývá nezáporných hodnot a určuje velikost deformace jádra. Souřadnice γ určuje typ deformace a nabývá úhlových hodnot 0 až $\pi/3$. Nejjednodušší možností, jak kvantovat tento systém je zavedení kartézských souřadnic

$$\begin{aligned}x &= \beta \cos \gamma \\y &= \beta \sin \gamma\end{aligned}$$

a zavést ekvivalentní hamiltonián

$$\hat{H} = -\frac{1}{2K}(x^2 + y^2) + V(x, y),$$

jehož kvantový protějšek je

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y),$$

odkud zpětnou transformací k β, γ získáme

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2K} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} + V(\hat{\beta}, \hat{\gamma}), \quad (2.11)$$

Alternativní způsob odvození spočívá ve využití aparátu odvozeného v minulé kapitole. Obejdeme se tak bez přechodu ke kartézským souřadnicím. Víme, že

$$T = \frac{1}{2K} (\dot{\beta}^2 + \beta^2 \dot{\gamma}^2). \quad (2.12)$$

Srovnáním s¹

$$T = \frac{1}{2K} \frac{ds^2}{dt^2} \quad (2.13)$$

máme

$$ds^2 = d\beta^2 + \beta^2 d\gamma^2, \quad (2.14)$$

odkud určíme koeficienty g_{ij}

$$\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \beta^2 \end{pmatrix}$$

Determinant této matice je $G = \beta^2$ a inverzní matice má tvar

$$\mathbf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \beta^{-2} \end{pmatrix}.$$

Dosazením do (2.8) dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2K} \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{\partial}{\partial \gamma} \beta \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2},\end{aligned}$$

¹Klademe $m = K$.

což je shodné s (2.11). Jak uvidíme dále, kvantování, kterému budeme říkat 5D GCM se liší vlastně jen determinantem G .

Úplný kvantový hamiltonián 2D GCM je

$$\hat{H}_{2D} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right] + V(\beta, \gamma), \quad (2.15)$$

kde

$$V(\beta, \gamma) = A\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4.$$

Vlnová funkce $\psi(\beta, \gamma)$ je normalizována vztahem

$$\int_0^\infty d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \beta \psi^*(\beta, \gamma) \psi(\beta, \gamma) = 1. \quad (2.16)$$

2.3 5D kvantování GCM

Ve 2D GCM jsme kvantovali klasický systém s nulovou rotací. Nyní budeme kvantovat klasický systém s nenulovou rotací a teprve v kvantovém hamiltoniánu položíme rotace rovny nule. Dostaneme odlišný výsledek, který je sice složitější, ale vykazuje lepší fyzikální vlastnosti. Budeme následovat postup uvedený v [1]. Dostaneme tak standardní GCM jaderné fyziky, který budeme dál označovat jako 5D GCM.

Začneme vztahem (1.21). Přiřadíme proměnným indexy $\beta = 1$, $\gamma = 2$, $\vartheta_1 = 3$, $\vartheta_2 = 4$, $\vartheta_3 = 5$ a podobně jako v 2D případě s využitím (2.5) zjistíme, že matice g_{ij} má prvky

$$\begin{aligned} g_{11} &= 1 \\ g_{22} &= \beta^2 \\ g_{1k} = g_{k1} &= 0 \quad \text{pro } k \neq 1 \\ g_{2k} = g_{k2} &= 0 \quad \text{pro } k \neq 2 \\ g_{i+2, j+2} &= \sum_{k=1}^3 \mathcal{J}_k(\beta, \gamma) \mathcal{V}_{ki}(\vartheta_l) \mathcal{V}_{kj}(\vartheta_l) \quad \text{pro } i, j \leq 3. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Je vidět, že matice g_{ij} je symetrická. Po dosazení explicitních výrazů pro $\mathcal{V}_{ki}(\vartheta_l)$ z (1.20) a $\mathcal{J}_k(\beta, \gamma)$ z (1.19) dostaneme matici g_{ij} . Prozatím se spokojíme s obecným tvarem

$$g_{ij}(\vartheta_2, \vartheta_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_{33} & g_{34} & g_{35} \\ 0 & 0 & g_{43} & g_{44} & g_{45} \\ 0 & 0 & g_{53} & g_{54} & g_{55} \end{pmatrix}$$

Spočítáme prvek g_{45} , jehož nulovost nám velmi usnadní výpočet determinantu. Z (2.17) máme

$$g_{45} = \sum_{k=1}^3 \mathcal{J}_k(\beta, \gamma) \mathcal{V}_{k2}(\vartheta_l) \mathcal{V}_{k3}(\vartheta_l)$$

Suma prochází prvky druhého a třetího sloupce (1.20) a násobí je mezi sebou. Na každém řádku je alespoň jedna nula, takže $g_{45} = g_{54} = 0$ a matice g_{ij} má tvar

$$g_{ij}(\vartheta_2, \vartheta_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_{33} & g_{34} & g_{35} \\ 0 & 0 & g_{43} & g_{44} & 0 \\ 0 & 0 & g_{53} & 0 & g_{55} \end{pmatrix}.$$

Determinant je díky nulovosti některých prvků roven

$$G = g_{11}g_{22}[g_{33}g_{44}g_{55} - g_{53}g_{44}g_{35} - g_{34}g_{43}g_{55}].$$

Zbývá dosadit do (2.17) a obdržíme

$$\begin{aligned} g_{33} &= \mathcal{I}_1 \sin^2 \vartheta_2 \cos^2 \vartheta_3 + \mathcal{I}_2 \sin^2 \vartheta_2 \sin^2 \vartheta_3 + \mathcal{I}_3 \cos^2 \vartheta_2 \\ g_{34} &= (-\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2) \sin \vartheta_2 \sin \vartheta_3 \cos \vartheta_3 \\ g_{35} &= \mathcal{I}_3 \cos \vartheta_2 \\ g_{44} &= \mathcal{I}_1 \sin^2 \vartheta_3 + \mathcal{I}_2 \cos^2 \vartheta_3 \\ g_{55} &= \mathcal{I}_3. \end{aligned}$$

Odtud po přímočarém výpočtu získáme pozoruhodně jednoduchý tvar

$$G = \det(g_{ij}) = 2\beta^2 \mathcal{I}_1 \mathcal{I}_2 \mathcal{I}_3 \sin^2 \vartheta_2$$

a po dosazení ze vztahu (1.19) a zdlohavém výpočtu dostaneme

$$\begin{aligned} G &= 2\beta^2(4\beta^2)^3 \sin^2(\gamma) \sin^2(\gamma - 2\pi/3) \sin^2(\gamma - 4\pi/3) \sin^2 \vartheta_2 = \\ &= 2\beta^2(4\beta^2)^3 \frac{1}{16} \sin^2(3\gamma) \sin^2 \vartheta_2 = 8\beta^8 \sin^2 3\gamma \sin^2 \vartheta_2. \end{aligned}$$

Díky blokově diagonálnímu tvaru matice g_{ij} můžeme vztah (2.8) přepsat na

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{G^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(G^{\frac{1}{2}}(g^{-1})_{11} \frac{\partial}{\partial \beta} \right) + \frac{1}{G^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(G^{\frac{1}{2}}(g^{-1})_{22} \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) \right] \\ &\quad - \frac{\hbar^2}{2K} \left[\sum_{i,j=1}^3 \frac{1}{G^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial \vartheta_i} \left(G^{\frac{1}{2}}(g^{-1})_{i+2,j+2} \frac{\partial}{\partial \vartheta_j} \right) \right]. \end{aligned}$$

Na prvním řádku jsou derivace Bohrových souřadnic, na druhém řádku jsou derivace Eulerových úhlů. Druhý řádek tedy odpovídá kinetické energii rotace. Od této chvíle budeme uvažovat nulovou rotaci, což odpovídá nulovým derivacím podle Eulerových úhlů. Druhý řádek vypustíme a dostáváme tak kinetický člen hamiltoniánu 5D GCM s nulovou rotací. Po dosazení konkrétních hodnot g_{ij} a G máme

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\sqrt{8}\beta^4 |\sin 3\gamma \sin \vartheta_2|} \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\sqrt{8}\beta^4 |\sin 3\gamma \sin \vartheta_2| \frac{\partial}{\partial \beta} \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{\sqrt{8}\beta^4 |\sin 3\gamma \sin \vartheta_2|} \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\sqrt{8}\beta^4 |\sin 3\gamma \sin \vartheta_2| \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) \right]. \end{aligned}$$

Po jednoduché úpravě kinetického členu a po doplnění potenciálního členu dostáváme hamiltonián

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right] + V(\beta, \gamma). \quad (2.18)$$

Vlnová funkce modelu 5D GCM je normalizovaná objemovým elementem $G^{\frac{1}{2}} = \sqrt{8}\beta^4 |\sin 3\gamma \sin \vartheta_2|$, což v původním rotujícím modelu vede na normalizační podmínku

$$\int_0^\infty d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^{2\pi} d\vartheta_1 \int_0^\pi d\vartheta_2 \int_0^{2\pi} d\vartheta_3 \times \\ \sqrt{8}\beta^4 |\sin 3\gamma \sin \vartheta_2| \psi^*(\beta, \gamma, \vartheta_i) \psi(\beta, \gamma, \vartheta_i) = 1.$$

Uvažujeme-li nulové rotace, pak funkce ψ nezávisí na ϑ_i a integrace přes Eulery úhly dá faktor $8\pi^2$. Dostáváme tak podmínku

$$\int_0^\infty d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \beta^4 |\sin 3\gamma| \psi^*(\beta, \gamma) \psi(\beta, \gamma) = \frac{1}{8\pi^2 \sqrt{8}}.$$

Konvenčně se pro zjednodušení zápisu používá jednodušší normalizace

$$\int_0^\infty d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \beta^4 |\sin 3\gamma| \psi^*(\beta, \gamma) \psi(\beta, \gamma) = 1,$$

kterou budeme používat i my.

2.4 Vztah 2D a 5D případu

Formálně spočívá rozdíl mezi 2D a 5D případem ve tvaru kinetického členu hamiltoniánu.

$$\hat{T}_{2D} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right] \quad (2.19)$$

$$\hat{T}_{5D} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right] \quad (2.20)$$

S tvarem kinetického členu také úzce souvisí normalizace vlnových funkcí. Objemový element pro 2D případ je roven β , zatímco pro 5D případ je roven $\beta^4 |\sin 3\gamma|$.

Zavedeme transformaci, která redukuje objemový element v 5D případě tak, aby normalizace byla stejná jako ve 2D. Transformované funkce budeme značit φ .

$$D \equiv \beta^3 \sin 3\gamma \quad (2.21) \\ \varphi(\beta, \gamma) \equiv \sqrt{D} \psi_{5D}(\beta, \gamma)$$

Operátoru \hat{T}_{5D} , odpovídá operátor $\hat{\tilde{T}}$, který působí na transformované funkce

$$\psi_1 = \hat{T}_{5D} \psi_2 \\ \varphi_1 = \hat{\tilde{T}} \varphi_2 \\ \varphi_1 = \sqrt{D} \psi_1 = \sqrt{D} \hat{T}_{5D} \frac{1}{\sqrt{D}} \sqrt{D} \psi_2 = \sqrt{D} \hat{T}_{5D} \frac{1}{\sqrt{D}} \varphi_2.$$

Srovnáním posledních dvou vztahů máme

$$\hat{\tilde{T}} = \sqrt{D} \hat{T}_{5D} \frac{1}{\sqrt{D}}.$$

Po dosazení z (2.21, 2.20) a přímočarém výpočtu máme

$$\hat{\tilde{T}} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} + \left(\frac{3}{2} \frac{1}{\beta \sin 3\gamma} \right)^2 \right],$$

takže

$$\hat{\tilde{T}} = \hat{T}_{2D} - \frac{\hbar^2}{2K} \left[\left(\frac{3}{2} \frac{1}{\beta \sin 3\gamma} \right)^2 \right]. \quad (2.22)$$

Vidíme, že operátory se liší o člen závislý na souřadnicích. Platí-li $\sin 3\gamma = 0$, rozdílový člen dokonce diverguje. Existuje-li korespondence mezi klasickou a kvantovou mírou chaosu, pak by tato míra měla dávat stejné výsledky pro 2D i 5D kvantový případ. Obě varianty (2.19, 2.20) totiž pro $\hbar \rightarrow 0$ vedou na formálně stejný klasický systém. Provedeme-li klasickou limitu pro (2.22), dodatečný potenciál vymizí, protože je úměrný kvadrátu \hbar .²

V dalším budeme 2D variantě říkat 2D GCM a 5D variantě 5D GCM. Opět je potřeba zdůraznit, že 2D GCM neodpovídá žádnému jadernému modelu a i když jeho fyzikální interpretace (částice ve 2D potenciálu) je zřejmá, jde jen o teoreticky zajímavou alternativu k 5D GCM. Pětirozměrný model reprezentuje standardní GCM.

2.5 Symetrie vlnových funkcí

Symetrie klasické kapky se projevují i ve tvaru vlnových funkcí. Jak jsme ukázali v kapitole věnované klasickému kapkovému modelu (viz též [11]), hodnoty γ určují tvar deformace kapky. Pro hodnoty $\gamma \in \langle 0, \pi/3 \rangle$ nabývá kapka všech tvarů, kterých je možné pomocí změn γ dosáhnout. Pro hodnoty z dalších intervalů $\gamma \in \langle k\pi/3, (k+1)\pi/3 \rangle$ kapka opět zopakuje všechny své tvary. Ačkoliv tvary kapky se na jednotlivých intervalech neliší, orientace kapky už ano. Obecně má kapka nějaký význačný směr, například pro $\gamma = 0$ je kapka „doutníkovitého“ tvaru (prolate) ve směru osy z . Pro $\gamma = 2\pi/3$ a $4\pi/3$ dostaneme kapku protaženou do směrů os x a y .

V našem případě uvažujeme nulovou rotaci, což odpovídá vlnové funkci nezávislé na Eulerových úhlech ϑ_i . Všechna natočení kapky tedy mají stejnou pravděpodobnost a různé hodnoty vlnové funkce pro stejné tvary kapky nemají smysl. Požadujeme tedy, aby pravděpodobnost určená kvadrátem vlnové funkce a objemovým elementem byla invariantní vůči záměnám (1.9) a (1.10). Tento požadavek se však, striktně vzato, týká jen 5D případu, který odpovídá standardní interpretaci kapkového modelu.

²Kinetický člen je také úměrný kvadrátu \hbar , ale nevymizí díky přítomnosti derivací. Se snižováním $\hbar \rightarrow 0$ totiž vlnové funkce oscilují čím dál tím rychleji, díky čemuž derivace rostou nade všechny meze.

Kapitola 3

Numerické řešení GCM

3.1 Souvislost 5D GCM s 5D harmonickým oscilátorem

Nejprve zavedeme hypersférické souřadnice v pětirozměrném prostoru. Začneme od 2D a budeme postupně přidávat dimenze.

$$\begin{aligned}x_1 &= r \sin \vartheta_1 \\x_2 &= r \cos \vartheta_1 \\ds^2 &= dr^2 + r^2 d\vartheta_1^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_1 &= r \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \\x_2 &= r \cos \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \\x_3 &= r \cos \vartheta_2 \\ds^2 &= dr^2 + r^2 (d\vartheta_2^2 + \sin^2 \vartheta_2 d\vartheta_1^2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_1 &= r \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \sin \vartheta_3 \\x_2 &= r \cos \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \sin \vartheta_3 \\x_3 &= r \cos \vartheta_2 \sin \vartheta_3 \\x_4 &= r \cos \vartheta_3 \\ds^2 &= dr^2 + r^2 [d\vartheta_3^2 + \sin^2 \vartheta_3 (d\vartheta_2^2 + \sin^2 \vartheta_2 d\vartheta_1^2)]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}x_1 &= r \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \sin \vartheta_3 \sin \vartheta_4 \\x_2 &= r \cos \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \sin \vartheta_3 \sin \vartheta_4 \\x_3 &= r \cos \vartheta_2 \sin \vartheta_3 \sin \vartheta_4 \\x_4 &= r \cos \vartheta_3 \sin \vartheta_4 \\x_5 &= r \cos \vartheta_4 \\ds^2 &= dr^2 + r^2 \{d\vartheta_4^2 + \sin^2 \vartheta_4 [d\vartheta_3^2 + \sin^2 \vartheta_3 (d\vartheta_2^2 + \sin^2 \vartheta_2 d\vartheta_1^2)]\}\end{aligned}$$

V posledním bloku jsou hledané 5D souřadnice v plochem prostoru. Porovnáním 5D metriky na posledním řádku s (2.4) získáme matici \mathbf{g}

$$\begin{aligned} g_{rr} &= 1 \\ g_{\vartheta_1\vartheta_1} &= r^2 \sin^2 \vartheta_2 \sin^2 \vartheta_3 \sin^2 \vartheta_4 \\ g_{\vartheta_2\vartheta_2} &= r^2 \sin^2 \vartheta_3 \sin^2 \vartheta_4 \\ g_{\vartheta_3\vartheta_3} &= r^2 \sin^2 \vartheta_4 \\ g_{\vartheta_4\vartheta_4} &= r^2 \\ g_{ij} &= 0 \quad \text{pro } i \neq j. \end{aligned}$$

Matrice \mathbf{g} má diagonální tvar, takže její determinant G je roven součinu prvků na diagonále

$$G = r^8 \sin^2 \vartheta_2 \sin^4 \vartheta_3 \sin^6 \vartheta_4$$

a odtud

$$G^{\frac{1}{2}} = r^4 |\sin \vartheta_2 \sin^2 \vartheta_3 \sin^3 \vartheta_4|.$$

Nyní máme k dispozici všechny ingredience k sestavení kinetického členu kvantového hamiltoniánu podle formule (2.8), která se díky diagonalitě \mathbf{g} zjednoduší na

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^5 \frac{1}{G^{\frac{1}{2}}} \frac{\partial}{\partial q_i} G^{\frac{1}{2}} (g^{-1})_{ii} \frac{\partial}{\partial q_i}.$$

Po dosazení a jednoduchých úpravách dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{T} &= \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^4} \frac{\partial}{\partial r} r^4 \frac{\partial}{\partial r} \right. \\ &+ \frac{\partial}{\partial \vartheta_1} \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta_2 \sin^2 \vartheta_3 \sin^2 \vartheta_4} \frac{\partial}{\partial \vartheta_1} \\ &+ \frac{1}{\sin \vartheta_2} \frac{\partial}{\partial \vartheta_2} \frac{\sin \vartheta_2}{r^2 \sin^2 \vartheta_3 \sin^2 \vartheta_4} \frac{\partial}{\partial \vartheta_2} \\ &+ \frac{1}{\sin^2 \vartheta_3} \frac{\partial}{\partial \vartheta_3} \frac{\sin^2 \vartheta_3}{r^2 \sin^2 \vartheta_4} \frac{\partial}{\partial \vartheta_3} \\ &\left. + \frac{1}{\sin^3 \vartheta_4} \frac{\partial}{\partial \vartheta_4} \frac{\sin^3 \vartheta_4}{r^2} \frac{\partial}{\partial \vartheta_4} \right] \end{aligned} \quad (3.1)$$

Srovnáním s (2.18) vidíme, že radiální část kinetických členů je stejná. Ačkoliv úhlová část se liší, přesto, jak uvidíme dále, můžeme snadno využít řešení harmonického oscilátoru pro řešení 5D GCM s kvadratickým potenciálem.¹

¹Ve skutečnosti lze od proměnných $\vartheta_1, \dots, \vartheta_4$ přejít k souřadnicím, které obsahují úhel γ a v takové souřadné soustavě už mají kinetické členy stejný tvar. 5D harmonický oscilátor je ekvivalentní 5D GCM, viz [16].

3.2 Volba vhodné báze

Hamiltoniány (2.15, 2.18) jsou příliš složité pro analytické řešení. Budeme je řešit numericky. Podobně jako v [14] zvolíme vhodnou bázi vlnových funkcí $|\psi_k\rangle$ a spočítáme maticové elementy

$$H_{kl} = \langle \psi_k | \hat{H} | \psi_l \rangle. \quad (3.2)$$

Diagonalizací této matice získáme energetické hladiny systému. Pro praktické výpočty je nutné použít jen konečně mnoho prvků báze $|\psi_l\rangle$. Dostaneme tak konečnou matici. Nejnižší vlastní čísla této matice aproximují energetické hladiny původního hamiltoniánu. Čím větší je zvolená báze, tím lépe dokáže vystihnout skutečné vlnové funkce a tím přesnější bude výsledek. Báze by měla být volena tak, aby byla schopna dobře charakterizovat nejnižší vlastní stavy hamiltoniánu a aby výpočet maticových elementů nebyl příliš obtížný.

Lze očekávat, že vlastní vlnové funkce \hat{H} budou nabývat největších hodnot v okolí minima potenciálu

$$V(\beta, \gamma) = A\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4$$

a s rostoucím β vymizí, protože potenciál roste jako β^4 .

Začneme jednodušším 2D případem. Úplný 2D hamiltonián (2.15) rozdělíme na dvě části

$$\hat{H}_{2D} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0, \quad (3.3)$$

kde

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right] + A_0 \beta^2 \quad (3.4)$$

$$\hat{V}_0 = -A_0 \beta^2 + A\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4. \quad (3.5)$$

Část odpovídající \hat{H}_0 je hamiltonián dvoudimenzionálního harmonického oscilátoru zapsaný v polárních souřadnicích. Právě vlastní stavy tohoto hamiltoniánu zvolíme jako bázi. Konstanta A_0 určuje „tuhost“ potenciálu harmonického oscilátoru a ovlivňuje velikost oblasti, na které mají báze funkce nezanedbatelně velké hodnoty. Tato oblast je přibližně shodná s klasicky dostupnou oblastí. Mimo klasicky dostupnou oblast hodnoty vlnových funkcí velmi rychle klesají. Nabízí se volba $A_0 = A$, čímž by se podařilo odstranit kvadratický člen z potenciálu \hat{V}_0 . To však není možné, protože hodnota A je typicky záporná a i v případě kladné hodnoty by taková volba nemusela mít dostatečně dobré vlastnosti. Například celkový potenciál včetně kvartického členu by mohl být strmější a vlnové funkce báze by tak klesaly příliš pomalu a bylo by jich potřeba zbytečně mnoho.

Optimální hodnotu parametru báze A_0 určujeme empiricky. Diagonalizace konečné části hamiltoniánu nám vždy dá horní odhad pro skutečné hodnoty energií stacionárních stavů (viz [17]). Teoreticky můžeme vyzkoušet různé hodnoty A_0 a vybrat takovou, pro kterou jsou energie nejnižší. Takový postup je však velmi náročný na strojový čas. Ukazuje se, viz [18], že závislost vlastních energií na A_0 má tvar „vanových“ funkcí, které mají hodnotu blízkou svému minimu pro poměrně velký interval. Pro praktické účely stačí zvolit hodnotu A_0 z

tohoto intervalu. Nými použitá metoda určuje A_0 takto: Pro dostatečně velký rozsah hodnot A_0 , například od 0.1 do 10, s malým krokem, například 0.01, vždy zkonstruujeme hamiltonián a spočítáme jeho stopu. Stopa hamiltoniánu je součet vlastních čísel. Skutečné vlastní energie GCM aproximují pouze nejnižší vlastní čísla numerického hamiltoniánu, ale přesto je stopa jakýsi odhad součtu energií stacionárních stavů, který chceme minimalizovat. Vybereme takové A_0 , které dává minimální stopu a vydělíme ho dvěma. Bylo empiricky ověřeno, že tento algoritmus dává dobré výsledky.

Minimalizace energií ještě neznamená, že vypočítané hodnoty dobře aproximují skutečné vlastní stavy. Konvergenci je potřeba ověřit například zvětšením báze na dvojnásobek. Pokud i pro dvojnásobnou bázi dostaneme stejné výsledky, máme pro praktické účely dostatečnou jistotu, že obdržené výsledky jsou správné.

V případě 5D GCM (2.18), jehož kinetická část je prakticky ekvivalentní 5D harmonickému oscilátoru, provedeme úplně stejný trik jako ve 2D případě. Dostáváme tak

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right] + A_0 \beta^2 \quad (3.6)$$

$$\hat{V}_0 = -A_0 \beta^2 + A \beta^2 + B \beta^3 \cos 3\gamma + C \beta^4. \quad (3.7)$$

Nyní můžeme přikročit k výpočtu bázových funkcí. Řešení pro 2D harmonický oscilátor je dobře známé, zatímco 5D případ v literatuře nebývá. Pro úplnost uvedme podrobný postup odvození obou případů.

3.3 Řešení n-rozměrného harmonického oscilátoru

V této kapitole provedeme společnou část výpočtu báze pro 2D i 5D model.

Mějme systém $(p+1)$ -rozměrného harmonického oscilátoru daný hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^p} \frac{\partial}{\partial r} r^p \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \hat{A} \right] + A_0 r^2. \quad (3.8)$$

Budeme hledat řešení obdobným způsobem jako pro třírozměrnou variantu (viz [17]). Operátor \hat{A} představuje úhlovou část kinetické energie. Jeho konkrétní tvar závisí na dimenzi p ; viz (3.1, 2.19, 2.20)². Najdeme stacionární stavy systému popsané vlnovou funkcí

$$F(r, \vartheta_i) = R(r)A(\vartheta_i).$$

Předpokládáme, že operátor \hat{A} působí jen na úhlovou část $A(\vartheta_i)$ vlnové funkce F . Označme α_m vlastní čísla operátoru \hat{A} a $A_m(\vartheta_i)$ odpovídající vlastní funkce.

$$\hat{A}A_m(\vartheta_i) = \alpha_m A_m(\vartheta_i) \quad (3.9)$$

Rovnice pro vlastní funkce $F(r, \vartheta_i)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^p} \frac{\partial F}{\partial r} r^p \frac{\partial F}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \hat{A}F \right] + A_0 r^2 F = EF$$

²I když 5D GCM nemá kinetický člen ve tvaru harmonického oscilátoru, můžeme tuto podkapitulu vztáhnout i na něj, protože nebudeme předpokládat konkrétní tvar operátoru \hat{A} .

se po jednoduché úpravě a dosazení z (3.9) zjednoduší na diferenciální rovnici pro radiální část vlnové funkce

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{p}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{1}{r^2} \alpha_m R \right] + A_0 r^2 R - ER = 0.$$

Pokusíme se odstranit první derivaci transformací $\chi(r) = r^\kappa R(r)$. Mohli bysme dosadit do rovnice a po úpravách z koeficientu před první derivací určit hodnotu κ tak, aby první derivace vymizela. Existuje však jednodušší metoda. Po vymizení první derivace zbyde pouze člen d^2/dr^2 , který odpovídá kinetickému členu ve směru souřadnice r v kartézských souřadnicích. V kartézských souřadnicích nemá normalizační podmínka vlnové funkce objemový element, tj.

$$\int \chi^*(r)\chi(r)dr = 1.$$

Není těžké si rozmyslet, že normalizace v $(p+1)$ -dimenzionálním případě má normalizační podmínku

$$\int r^p R^*(r)R(r)dr = 1,$$

jak potvrzují objemové elementy 2D a 5D GCM. Srovnáním obou podmínek dostaneme $\chi(r) = r^{\frac{p}{2}} R(r)$, odkud

$$R(r) = r^{-\frac{p}{2}} \chi(r).$$

Po provedení substituce vymizí první derivace, což je důkaz toho, že naše úvaha vedla ke správným závěrům. Naše rovnice má nyní tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{p}{2} \left(1 - \frac{p}{2}\right) \frac{1}{r^2} \chi + \frac{\alpha_m}{r^2} \chi \right] + A_0 r^2 \chi - E\chi = 0.$$

Budeme pokračovat substitucí, která odstraní faktor před členy $d^2/d\chi^2$ a $A_0 r^2 \chi$. K cíli vede lineární substituce $\xi = \sqrt{kr}$, kde

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mA_0}}{\hbar}.$$

Po provedení substituce a vydělení faktorem $-\hbar\sqrt{A_0/2m}$ máme

$$\chi'' + \left[\frac{p}{2} \left(1 - \frac{p}{2}\right) + \alpha_m \right] \frac{1}{\xi^2} \chi + \xi^2 \chi + \lambda \chi = 0,$$

kde jsme pro stručnější zápis zavedli označení

$$\lambda \equiv E \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{A_0}} = \frac{2E}{\hbar\omega}, \quad (3.10)$$

kde

$$\omega = \sqrt{\frac{2A_0}{m}}. \quad (3.11)$$

Řešení budeme hledat ve tvaru $\chi(\xi) = \xi^{l+1}w(\xi) \exp(-\frac{\xi^2}{2})$, kde l je prozatím libovolný parametr, na jehož volbě teoreticky nezáleží. Funkce $w(\xi)$ je totiž plně obecná, takže může obsahovat případné další mocniny ξ . Parametr l můžeme v budoucnu zvolit tak, aby řešení bylo co nejjednodušší. Po dosazení dostaneme rovnici

$$w'' + \frac{2}{\xi}[(l+1) - \xi^2]w' + \left[l(l+1) + \frac{p}{2} \left(1 - \frac{p}{2}\right) + \alpha_m \right] \xi^{-2}w + (\lambda - 2l - 3)w = 0$$

Parametr l volíme tak, aby závorka před členem $\xi^{-2}w$ vymizela, tj.

$$l(l+1) = -\frac{p}{2} \left(1 - \frac{p}{2}\right) - \alpha_m \quad (3.12)$$

Rovnice se zjednoduší na

$$w'' + \frac{2}{\xi}[(l+1) - \xi^2]w' + (\lambda - 2l - 3)w = 0.$$

Další substituce $\eta = \xi^2$ vede na přidruženou Laguerrovu rovnici (A.1)

$$\eta w'' + \left(l + \frac{3}{2} - \eta\right) w' + \left(\frac{\lambda}{4} - \frac{l}{2} - \frac{3}{4}\right) w = 0.$$

Požadujeme-li normalizovatelné řešení, dostáváme přidružené Laguerrovy polynomy $L_n^\alpha(\xi)$ a podmínku

$$\frac{\lambda}{4} - \frac{l}{2} - \frac{3}{4} = n,$$

kde n je libovolné celé nezáporné číslo. Po dosazení z (3.10) dostaneme hodnoty energie

$$E = 2\hbar\omega \left(n + \frac{l}{2} + \frac{3}{4}\right) = \hbar\omega \left(2n + l + \frac{3}{2}\right) \quad (3.13)$$

Hodnota l je daná podmínkou (3.12) a liší se podle dimenze systému. Provedeme-li zpětné substituce, dostáváme postupně

$$\begin{aligned} w(\eta) &= L_n^{l+1/2}(\eta), \\ w(\xi) &= L_n^{l+1/2}(\xi^2), \\ \chi(\xi) &= \xi^{l+1} L_n^{l+1/2}(\xi^2) \exp(-\xi^2/2), \\ \chi(r) &= k^{(l+1)/2} r^{l+1} L_n^{l+1/2}(kr^2) \exp(-kr^2/2), \\ R(r) &= k^{(l+1)/2} r^{l+1-p/2} L_n^{l+1/2}(kr^2) \exp(-kr^2/2). \end{aligned}$$

Funkce $R(r)$ není normalizovaná. Celkem tedy

$$R(r) = N_{ln} r^{l+1-p/2} L_n^{l+1/2}(kr^2) \exp(-kr^2/2). \quad (3.14)$$

3.4 Řešení 2D GCM s kvadratickým potenciálem

Odvozený aparát pro n -rozměrný harmonický oscilátor použijeme na 2D GCM jako jednoduchou ukázkou použití před výpočtem 5D GCM. 2D GCM s kvadratickým potenciálem je úplně ekvivalentní 2D harmonickému oscilátoru.

Dosadíme kvadratický potenciál do (2.15)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} \right] + A_0 \beta^2.$$

Podle (3.8) máme hodnotu $p = 1$. Úhlová část \hat{A} je

$$\hat{A} = \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2}.$$

Vlastní funkce operátoru \hat{A} jsou

$$\begin{aligned} A_m(\gamma) &= \exp(im\gamma) \\ \frac{\partial^2}{\partial \gamma^2} A_m(\gamma) &= -m^2 A_m(\gamma), \end{aligned}$$

kde možné hodnoty m jsou omezeny podmínkou periodicity

$$A_m(\gamma) = A_m(\gamma + 2\pi),$$

odkud vyplývá $m = \dots - 2, -1, 0, 1, 2, \dots$. Máme tedy $\alpha_m = -m^2$ a můžeme podle vztahu (3.12) najít hodnotu l

$$\begin{aligned} l(l+1) &= -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{2} \right) + m^2 \\ l(l+1) &= m^2 - \frac{1}{4} \\ l(l+1) &= \left(m - \frac{1}{2} \right) \left(m + \frac{1}{2} \right) \\ l &= -\frac{1}{2} \pm m \end{aligned} \tag{3.15}$$

Dosazením do (3.14) získáme hledané radiální funkce

$$\tilde{R}_{nm}(\beta) = \beta^{\pm m} L_n^{\pm m}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2). \tag{3.16}$$

Ze dvou možností volby znaménka $\pm m$ pro každou hodnotu m vybereme takovou, aby $\pm m = |m|$. Laguerrovy polynomy jsou obecně pro $\beta = 0$ nenulové a proto je pro chování funkce $R(\beta)$ v okolí nuly určující člen $\beta^{\pm m}$. Kdyby měl tento člen záporný exponent, nebylo by řešení normalizovatelné. Pod normalizačním integrálem totiž funkce $R(\beta)$ vystupuje dvakrát a celkem by přispěla faktorem β^{-2m} , který není možné kompenzovat objemovým elementem β . Máme tedy

$$l = -\frac{1}{2} + |m|$$

a

$$\psi(\beta, \gamma) = N_{nm} \beta^{|m|} L_n^{|m|}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) \exp(im\gamma).$$

Energie vlastních stavů oscilátoru jsou podle (3.13) rovny

$$E = \hbar\omega(2n + |m| + 1).$$

Normalizace funkcí je dána integrálem

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \beta \psi^*(\beta, \gamma) \psi(\beta, \gamma) d\gamma d\beta = 1,$$

který je díky tvaru vlnové funkce $\psi(\beta, \gamma) = N_{nm} R_{nm}(\beta) \exp(im\gamma)$ možno rozdělit na součin dvou samostatných integrálů

$$N_{nm}^2 \int_0^\infty \beta R_{nm}(\beta) R_{nm}(\beta) d\beta \int_0^{2\pi} \exp(-im\gamma) \exp(im\gamma) d\gamma = 1, \quad (3.17)$$

Integrál přes γ je triviální a dává hodnotu 2π . Budeme se zabývat druhým integrálem, který je po dosazení roven

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \beta \beta^{|m|} L_n^{|m|}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) \beta^{|m|} L_n^{|m|}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) d\beta &= \\ &= \int_0^\infty \beta^{1+2|m|} \left[L_n^{|m|}(k\beta^2) \right]^2 \exp(-k\beta^2) d\beta \end{aligned}$$

Provedeme substituci

$$\begin{aligned} x &= k\beta^2 \\ \beta &= \left(\frac{x}{k}\right)^{\frac{1}{2}} \\ d\beta &= \frac{1}{2}(kx)^{-\frac{1}{2}} dx \end{aligned}$$

a máme

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \left(\frac{x}{k}\right)^{\frac{1}{2}+|m|} \left[L_n^{|m|}(x) \right]^2 \exp(-x) \frac{1}{2}(kx)^{-\frac{1}{2}} dx &= \\ \frac{1}{2k^{|m|+1}} \int_0^\infty x^{|m|} \left[L_n^{|m|}(x) \right]^2 \exp(-x) dx &= \frac{1}{2k^{|m|+1}} \frac{\Gamma(n + |m| + 1)}{n!}, \end{aligned}$$

kde jsme použili integrál (3.42). Dosazením do (3.17) získáme vztah pro výpočet normalizačních koeficientů

$$N_{nm}^2 \frac{1}{2k^{|m|+1}} \frac{\Gamma(n + |m| + 1)}{n!} 2\pi = 1,$$

odkud po úpravě máme

$$N_{nm} = \sqrt{\frac{k^{|m|+1} n!}{\pi(n + |m|)!}}. \quad (3.18)$$

Normalizované řešení 2D GCM s kvadratickým potenciálem je

$$\psi_{\text{LHO}}^{2D}(\beta, \gamma) = \sqrt{\frac{kn!}{\pi(n + |m|)!}} (k\beta^2)^{|m|/2} L_n^{|m|}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) \exp(im\gamma), \quad (3.19)$$

kde

$$k = \frac{\sqrt{2mA_0}}{\hbar}.$$

3.5 Řešení 5D GCM s kvadratickým potenciálem

Nyní najdeme vlastní funkce hamiltoniánu (2.18) s kvadratickým potenciálem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2K} \left[\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right] + A_0 \beta^2$$

V tomto případě je $p = 4$ a úhlová část je rovna

$$\hat{A} = \frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma}.$$

Substitucí $\alpha = 3\gamma$ dostaneme tvar

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \frac{1}{\sin \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial \gamma} \frac{\partial}{\partial \alpha} \sin \alpha \frac{\partial \alpha}{\partial \gamma} \frac{\partial}{\partial \alpha} \\ &= 9 \frac{1}{\sin \alpha} \frac{\partial}{\partial \alpha} \sin \alpha \frac{\partial}{\partial \alpha}, \end{aligned}$$

který připomíná část dobře známého operátoru kvadrátu impulsmomentu

$$\hat{L}^2 = - \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right].$$

Vlastní funkce operátoru \hat{L}^2 jsou

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) &= N_{lm} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im} \\ \hat{L}^2 Y_{lm} &= l(l+1) Y_{lm}, \end{aligned}$$

kde $l = 0, 1, 2, \dots$. Vidíme, že zvolíme-li $m = 0$, funkce Y_{l0} nebude záviset na φ a tedy

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_{l0} &= - \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] N_{l0} P_l^0(\cos \vartheta) \\ &= - \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) N_{l0} P_l^0(\cos \vartheta). \end{aligned}$$

Víme již, že

$$\hat{L}^2 Y_{l0} = l(l+1) Y_{l0}$$

a díky tomu je

$$- \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) P_l^0(\cos \vartheta) = l(l+1) P_l^0(\cos \vartheta).$$

Operátor \hat{A} má tedy vlastní funkce dané Lagrangeovými polynomy $P_l^0(\cos \alpha) \equiv P_l(\cos \alpha)$ s vlastními hodnotami $-9l(l+1)$. Přeznačíme l na μ a zavedeme senioritu λ

$$\lambda = 3\mu, \tag{3.20}$$

kde $\lambda = 0, 3, 6, \dots$ ³ Vidíme, že

$$\lambda(\lambda + 3) = 9\mu(\mu + 1) = 9l(l + 1).$$

Po zpětném dosazení $\alpha = 3\gamma$ můžeme napsat výsledek

$$\hat{A}P_\mu(\cos 3\gamma) = -\lambda(\lambda + 3)P_\mu(\cos 3\gamma).$$

Nyní máme vyřešenou úhlovou část hamiltoniánu a známe hodnotu

$$\alpha_m = -\lambda(\lambda + 3),$$

kteřou dosadíme do (3.14) a získáme

$$l(l + 1) = -2(1 - 2) + \lambda(\lambda + 3) = \lambda^2 + 3\lambda + 2 = (\lambda + 1)(\lambda + 2),$$

odkud

$$l = -\frac{1}{2} \pm \left(\lambda + \frac{3}{2} \right).$$

Dosadíme do (3.14) a po záměně $r \rightarrow \beta$ dostáváme

$$R(\beta) = N_{n\lambda} \beta^{-3/2 \pm (\lambda + 3/2)} L_n^{\pm \lambda + 3/2}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2).$$

Opět musíme volit znaménko před $\pm(\lambda + 3/2)$ tak, aby funkce byla normalizovatelná. Objemový element je v tomto případě β^4 . Pod normalizačním integrálem vystupuje funkce $R(\beta)$ dvakrát. V případě volby záporného znaménka by funkce přispěla minimálně faktorem r^{-10} , což by vedlo k divergenci integrálu. Volíme proto kladné znaménko. Podle konvence přeznačíme $n \rightarrow l$. Kompletní vlnové funkce stacionárních stavů jsou

$$\psi_{l\lambda}(\beta, \gamma) = N_{l\lambda} F_l^\lambda(\beta) P_\mu(\cos 3\gamma), \quad (3.21)$$

kde

$$\begin{aligned} F_l^\lambda(\beta) &= \beta^\lambda L_l^{\lambda + 3/2}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2), \\ k &= \frac{\sqrt{2m}A_0}{\hbar}. \end{aligned}$$

Energie stacionárních stavů je podle (3.13) rovna

$$E_{l\lambda} = \hbar\omega \left(2l + \lambda + \frac{5}{2} \right). \quad (3.22)$$

Spočítáme normalizační konstanty pro vlnové funkce. Normalizace je dána integrálem

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} \beta^4 |\sin 3\gamma| \psi^*(\beta, \gamma) \psi(\beta, \gamma) d\gamma d\beta = 1,$$

³Tato definice platí jen pro GCM s nulovou rotací (bez Eulerových úhlů). Při započítání rotací nelze obecně z hodnoty μ určit hodnotu λ , která navíc nemusí být dělitelná třemi.

který je díky tvaru vlnové funkce (3.21) možno rozdělit na součin dvou samostatných integrálů

$$N_{l\lambda}^2 \int_0^\infty \beta^4 F_{l\lambda}(\beta) F_{l\lambda}(\beta) d\beta \int_0^{2\pi} |\sin 3\gamma| P_\mu(\cos 3\gamma) P_\mu(\cos 3\gamma) d\gamma = 1, \quad (3.23)$$

Spočítáme nejprve integrál přes γ

$$\int_0^{2\pi} |\sin 3\gamma| [P_\mu(\cos 3\gamma)]^2 d\gamma.$$

Provedeme substituci $\alpha = 3\gamma$

$$\int_0^{6\pi} |\sin \alpha| [P_\mu(\cos \alpha)]^2 \frac{d\alpha}{3}.$$

Díky 2π -periodicitě integrandu můžeme integrovat pouze od $-\pi$ do π a výsledek vynásobit třemi. Po úpravě máme

$$\int_{-\pi}^{\pi} |\sin \alpha| [P_\mu(\cos \alpha)]^2 d\alpha.$$

Integrand je sudá funkce α , takže můžeme integrovat jen přes kladná α a výsledek vynásobit dvěma. Na intervalu $\alpha \in \langle 0, \pi \rangle$ je funkce $\sin \alpha$ nezáporná, takže můžeme odstranit absolutní hodnotu

$$2 \int_0^\pi \sin \alpha [P_\mu(\cos \alpha)]^2 d\alpha.$$

Dalším krokem je substituce $x = \cos \alpha$, kde x poběží od 1 do -1 a $dx = d\alpha(-\sin \alpha)$

$$2 \int_1^{-1} \sin \alpha [P_\mu(x)]^2 \left(-\frac{dx}{\sin \alpha} \right).$$

Prohodíme meze integrálu a dostáváme integrál (B.3) známý z dodatku B

$$2 \int_{-1}^1 [P_\mu(x)]^2 dx = \frac{4}{2\mu + 1}.$$

Spočítáme druhý integrál, který je po dosazení roven

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \beta^4 \beta^\lambda L_l^{\lambda+3/2}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) \beta^\lambda L_l^{\lambda+3/2}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) d\beta = \\ & = \int_0^\infty \beta^{4+2\lambda} [L_l^{\lambda+3/2}(k\beta^2)]^2 \exp(-k\beta^2) d\beta \end{aligned}$$

Provedeme substituci

$$\begin{aligned} x &= k\beta^2 \\ \beta &= \left(\frac{x}{k}\right)^{\frac{1}{2}} \\ d\beta &= \frac{1}{2}(kx)^{-\frac{1}{2}} dx \end{aligned} \quad (3.24)$$

a máme

$$\int_0^\infty \left(\frac{x}{k}\right)^{2+\lambda} \left[L_l^{\lambda+3/2}(x)\right]^2 \exp(-x) \frac{1}{2} (kx)^{-\frac{1}{2}} dx = \frac{1}{2k^{\lambda+5/2}} \int_0^\infty x^{\lambda+3/2} \left[L_l^{\lambda+3/2}(x)\right]^2 \exp(-x) dx = \frac{1}{2k^{\lambda+5/2}} \frac{\Gamma(l+\lambda+5/2)}{l!},$$

kde jsme opět použili integrál (3.42). Dosazením do (3.23) získáme vztah pro výpočet normalizačních koeficientů

$$N_{l\lambda}^2 \frac{1}{2k^{\lambda+5/2}} \frac{\Gamma(l+\lambda+5/2)}{l!} \frac{4}{2\mu+1} = 1,$$

odkud po úpravě máme

$$N_{l\lambda} = \sqrt{\frac{k^{\lambda+5/2} l! (2\mu+1)}{2\Gamma(l+\lambda+5/2)}}. \quad (3.25)$$

Normalizovaná báze pro řešení 5D CCM modelu je

$$\psi^{5D}(\beta, \gamma) = \sqrt{\frac{k l! (2\mu+1)}{2\Gamma(l+\lambda+5/2)}} \times (k\beta^2)^{(\lambda+3/2)/2} L_l^{\lambda+3/2}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) P_\mu(\cos 3\gamma), \quad (3.26)$$

kde

$$k = \frac{\sqrt{2mA_0}}{\hbar}.$$

3.6 Výběrová pravidla a maticové elementy pro 2D GCM

Nyní známe konkrétní tvar vlnových funkcí, pomocí kterých můžeme najít energetické hladiny 2D GCM. Cílem této práce je mimo jiné provést srovnání míry chaosu 2D a 5D modelu. Aby takové srovnání mohlo být relevantní, musíme 2D bázi poněkud zredukovat.

3.6.1 Redukce 2D báze

Základním vodítkem pro redukcí budou vlastnosti 5D báze (3.26). Úhlová část $P_\mu(\cos 3\gamma)$ má periodu $2\pi/3$ a navíc je sudá v γ . Tato periodicitu je pozůstatek symetrií geometrické interpretace (1.9,1.10).

Zatímco úhlová část výpočetní báze 5D GCM je přirozeně $2\pi/3$ -periodická, u báze 2D GCM musíme tuto periodicitu zavést uměle. Budeme uvažovat jen hodnoty m , které jsou násobkem tří. Od této chvíle budeme všude psát $3m$ místo m . Úhlová část bude mít tvar $\exp(i3m\gamma)$ a radiální funkce budeme značit

$$R_{nm}(r) = r^{3m} L_n^{3m}(kr^2) \exp(-kr^2/2) \quad (3.27)$$

Vidíme, že m připomíná kvantové číslo μ , viz (3.20).

Hodnoty m pro 2D mohou být kladné i záporné. To je další nežádoucí rozdíl mezi 2D a 5D, kde $\mu \geq 0$. Zbavíme se ho přechodem do báze sinů a cosinů. Místo báze (3.19) vezmeme funkce

$$\begin{aligned}\psi_{\text{ODD}}^{2\text{D}}(r, \varphi) &= N_{nm}^{\text{O}} R_{nm}(\beta) \sin(3m\gamma) & \text{pro } m = 1, 2, \dots \\ \psi_{\text{EVEN}}^{2\text{D}}(r, \varphi) &= N_{nm}^{\text{E}} R_{nm}(\beta) \cos(3m\gamma) & \text{pro } m = 0, 1, 2, \dots,\end{aligned}$$

kde jsme provedli nahrazení $(r, \varphi) \rightarrow (\beta, \gamma)$. Tyto funkce jsou ekvivalentní původní bázi, protože

$$\begin{aligned}\exp(i3m\gamma) &= i \sin(3m\gamma) + \cos(3m\gamma) \\ \exp(-i3m\gamma) &= -i \sin(3m\gamma) + \cos(3m\gamma)\end{aligned}$$

a lze snadno ukázat, že jsou vzájemně ortogonální.

Normalizační koeficienty N_{nm}^{O} jsou dány vzorcem

$$(N_{nm}^{\text{O}})^2 \int_0^\infty \beta R_{nm}(\beta) R_{nm}(\beta) d\beta \int_0^{2\pi} \sin(3m\gamma) \sin(3m\gamma) d\varphi = 1.$$

Srovnáním s (3.17) vidíme, že

$$\begin{aligned}N_{nm}^{\text{O}} &= \sqrt{\frac{\int_0^{2\pi} \exp(-i3m\varphi) \exp(i3m\varphi) d\varphi}{\int_0^{2\pi} \sin^2(3m\gamma) d\gamma}} N_{n,3m} = \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{\pi}} N_{n,3m} = \sqrt{2} N_{n,3m}.\end{aligned}\tag{3.28}$$

Obdobně pro N_{nm}^{E} získáme

$$N_{nm}^{\text{E}} = \begin{cases} N_{n,3m} & \text{pro } m = 0 \\ \sqrt{2} N_{n,3m} & \text{pro } m = 1, 2, \dots \end{cases}$$

Nyní máme jen nezáporné hodnoty m , ale zato máme bázi sestávající ze dvou sad funkcí. Ukážeme, že tyto dvě sady tvoří v podstatě dva nezávislé systémy. Maticové elementy mezi funkcemi ze sudé a liché báze jsou totiž nulové. Vezmeme-li maticový element (3.2) a dosadíme za $\hat{H}_{2\text{D}}$ z (3.3), dostáváme

$$H_{kl} = \langle \psi_k | \hat{H} | \psi_l \rangle = \langle \psi_k | \hat{H}_0 | \psi_l \rangle + \langle \psi_k | \hat{V}_0 | \psi_l \rangle,\tag{3.29}$$

kde index k a l značí dvojice kvantových čísel nm a $n'm'$. První člen je diagonální. Původní báze (3.19) vznikla hledáním vlastních stavů \hat{H}_0

$$\hat{H}_0 \psi_{(\text{LHO})nm}^{2\text{D}} = E_{nm} \psi_{(\text{LHO})nm}^{2\text{D}},$$

kde

$$E_{nm} = \hbar\omega(2n + |m| + 1).$$

Sudé a liché funkce jsou stále vlastními stavy \hat{H}_0 , jak se můžeme přesvědčit přímým výpočtem

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 \psi_{(\text{ODD})nm}^{2\text{D}} &= \hat{H}_0 \frac{1}{2i} \left(\psi_{(\text{LHO})n,3m}^{2\text{D}} - \psi_{(\text{LHO})n(-3m)}^{2\text{D}} \right) \\ &= \frac{1}{2i} \left(\hat{H}_0 \psi_{(\text{LHO})n,3m}^{2\text{D}} - \hat{H}_0 \psi_{(\text{LHO})n(-3m)}^{2\text{D}} \right) \\ &= \frac{1}{2i} \left(E_{n,3m} \psi_{(\text{LHO})n,3m}^{2\text{D}} - E_{n,3m} \psi_{(\text{LHO})n(-3m)}^{2\text{D}} \right) \\ &= E_{n,3m} \psi_{(\text{ODD})nm}^{2\text{D}},\end{aligned}\tag{3.30}$$

kde jsme využili známý vztah

$$\sin 3m\gamma = \frac{1}{2i}[\exp(i3m) - \exp(-i3m)].$$

Obdobně můžeme postupovat i pro sudou bázi

$$\hat{H}_0\psi_{(\text{ODD})nm}^{2D} = E_{n,3m}\psi_{(\text{ODD})nm}^{2D}. \quad (3.31)$$

Odtud plyne diagonalita prvního členu. Druhý člen není diagonální, ale je alespoň nulový mezi sudou a lichou funkcí. Potenciál V_0 má tvar

$$V_0(\beta, \gamma) = (A - A_0)\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4 \quad (3.32)$$

Druhý člen maticového elementu mezi sudou a lichou funkcí je dán integrálem

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{(\text{ODD})nm}^{2D} | \hat{V}_0 | \psi_{(\text{EVEN})n'm'}^{2D} \rangle = \\ & \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \beta N_{nm}^O R_{nm}(\beta) \sin(3m\gamma) V_0(\beta, \gamma) N_{n'm'}^E R_{n'm'}(\beta) \cos(3m'\gamma) d\gamma d\beta. \end{aligned}$$

Pro nulovost sудо-lichých maticových elementů je podstatný integrál z předchozího výrazu

$$\int_0^{2\pi} \sin(3m\gamma) V_0(\beta, \gamma) \cos(3m'\gamma) d\gamma,$$

který je nulový. Funkce $V_0(\beta, \gamma)$ je totiž sudá v γ . Meze integrálu lze díky 2π -periodicitě integrandu posunout a integrovat od $-\pi$ do π . Vidíme, že pod integrálem je součin dvou sudých a jedné liché funkce, což opět dává nulu. Celkem tedy

$$\langle \psi_{(\text{ODD})nm}^{2D} | \hat{H} | \psi_{(\text{EVEN})n'm'}^{2D} \rangle = 0.$$

Nejtypičtější metoda pro určení míry chaotičnosti kvantového systému je statistické vyhodnocení energií stacionárních stavů. V případě, že bysme vyhodnocovali energetické hladiny příslušné celé bázi, tj. sudým i lichým funkcím, vyhodnocovali bysme vlastně statistiku danou sjednocením hladin dvou nezávislých systémů. Případné korelace ve vzdálenostech hladin by se tak vytratily a systém by vycházel regulární. Cílem této práce není statistické vyhodnocování hladin, přesto je tato úvaha dobrý argument pro vyhodnocení chaotičnosti (tj. v našem případě provedení výpočtu mřížky) buď jen se sudou bázi, nebo jen s lichou. Zároveň tak vyřešíme problém se záporným m .

V dalším budeme pracovat se třemi systémy: 5D GCM, 2D ODD a 2D EVEN. Pro přehlednost uvedeme explicitní tvar 2D bázových funkcí

$$\begin{aligned} \psi^O(\beta, \gamma) &= N_{nm}^O \beta^{3m} L_n^{3m}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) \sin(3m\gamma) \quad \text{pro } m = 1, 2, \dots \\ \psi^E(\beta, \gamma) &= N_{nm}^E \beta^{3m} L_n^{3m}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) \cos(3m\gamma) \quad \text{pro } m = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} N_{nm}^O &= \sqrt{\frac{2k^{3m+1}n!}{\pi(n+3m)!}} \\ N_{nm}^E &= \sqrt{\frac{k^{3m+1}n!}{\pi(n+3m)!}} \quad \text{pro } m = 0 \\ N_{nm}^E &= \sqrt{\frac{2k^{3m+1}n!}{\pi(n+3m)!}} \quad \text{pro } m > 0. \end{aligned}$$

3.6.2 Úhlová část maticových elementů

Rozklad hamiltoniánu $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_0$ nám opět usnadní práci. Vydeme ze vztahu (3.29). První člen je čistě diagonální, viz (3.30) a (3.31).

Druhý člen můžeme rozepsat jako dvojitý integrál. Opět rozlišíme sudou a lichou bázi. Začneme s lichým případem

$$\begin{aligned} \langle \psi_{nm}^{2D} | \hat{V}_0 | \psi_{n'm'}^{2D} \rangle = \\ \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \beta N_{nm} R_{nm}(\beta) \sin(3m\gamma) V_0(\beta, \gamma) N_{n'm'} R_{n'm'}(\beta) \sin(3m'\gamma) d\gamma d\beta. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Úhlová část integrálu pro maticový element je v liché bázi dána jako

$$\int_0^{2\pi} \sin(3m\gamma) V_0(\beta, \gamma) \sin(3m'\gamma) d\gamma. \quad (3.34)$$

Dosadíme za V_0 z (3.32) a po úpravě máme

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sin(3m\gamma) [(A - A_0)\beta^2 + B\beta^3 \cos 3\gamma + C\beta^4] \sin(3m'\gamma) d\gamma = \\ [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] \int_0^{2\pi} \sin(3m\gamma) \sin(3m'\gamma) d\gamma \\ + B\beta^3 \int_0^{2\pi} \sin(3m\gamma) \cos 3\gamma \sin(3m'\gamma) d\gamma = \\ [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] \pi \delta_{m,m'} + B\beta^3 \left(-\frac{\pi}{2}\right) \delta_{m,m'\pm 1}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Obdobně pro sudou bázi dostaneme pro $m, m' > 0$

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \cos(3m\gamma) V_0(\beta, \gamma) \cos(3m'\gamma) d\gamma = \\ [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] \pi \delta_{m,m'} + B\beta^3 \left(\frac{\pi}{2}\right) \delta_{m,m'\pm 1}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

pro $m = 0$ a $m' = 0$ je integrál roven

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \cos(3m\gamma) V_0(\beta, \gamma) \cos(3m'\gamma) d\gamma = \\ [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] 2\pi \end{aligned}$$

a pro $m = 0, m' = 1$ nebo $m = 1, m' = 0$ máme

$$\int_0^{2\pi} \cos(3m\gamma) V_0(\beta, \gamma) \cos(3m'\gamma) d\gamma = B\beta^3 \pi.$$

Maticové elementy pro sudou i lichou bázi mohou být nenulové jen pro

$$\begin{aligned} m &= m', \\ m &= m' \pm 1. \end{aligned} \quad (3.37)$$

3.6.3 Výpočet integrálů s Laguerrovými polynomy

Před vlastním výpočtem maticových elementů uvedeme výpočty netriviálních integrálů, které v nich vystupují. Zároveň odvodíme výběrová pravidla, která se uplatní i pro maticové elementy. Náš postup výpočtu je založen na generujících funkcích Laguerrových polynomů. V [2] je použit jiný postup založený na komplexní analýze. Použití generujících funkcí je zřejmě přímočařejší. Výsledky jsou samozřejmě nezávislé na způsobu výpočtu.

Spočítáme integrál

$$I_{nm}(\alpha, k, p) = \int_0^\infty x^{\alpha+k} L_n^\alpha(x) L_m^{\alpha+p}(x) e^{-x} dx, \quad (3.38)$$

kde k je celé nezáporné číslo. Hodnoty integrálů $I_{nm}(k, \alpha, p)$ budou koeficienty v Taylorově rozvoji funkce

$$F_{k,p}^\alpha(\xi, \chi) \equiv \sum_{n,m=0}^{\infty} I_{nm}(k, \alpha, p) \xi^n \chi^m,$$

kteřou spočítáme pomocí vytvořující funkce (A.2).

$$\begin{aligned} F_{k,p}^\alpha(\xi, \chi) &= \sum_{n,m=0}^{\infty} \int_0^\infty x^{\alpha+k} L_n^\alpha(x) L_m^{\alpha+p}(x) e^{-x} dx \xi^n \chi^m \\ &= \int_0^\infty x^{\alpha+k} \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(x) \xi^n \sum_{m=0}^{\infty} L_m^{\alpha+p}(x) \chi^m e^{-x} dx \\ &= \int_0^\infty x^{\alpha+k} \frac{\exp\left(-\frac{x\xi}{1-\xi}\right)}{(1-\xi)^{\alpha+1}} \frac{\exp\left(-\frac{x\chi}{1-\chi}\right)}{(1-\chi)^{\alpha+p+1}} e^{-x} dx \\ &= \frac{1}{(1-\xi)^{\alpha+1}(1-\chi)^{\alpha+p+1}} \int_0^\infty x^{\alpha+k} \exp\left\{-\left(\frac{x\xi}{1-\xi} + \frac{x\chi}{1-\chi} + 1\right)x\right\} dx \end{aligned}$$

Pro výraz v kulatých závorkách zavedeme označení λ

$$\lambda = \frac{x\xi}{1-\xi} + \frac{x\chi}{1-\chi} + 1 = \frac{1-\xi\chi}{(1-\xi)(1-\chi)}.$$

Integrál lze snadno spočítat pomocí gama funkcí

$$\int_0^\infty x^{\alpha+k} \exp(-\lambda x) dx = \frac{\Gamma(\alpha+k+1)}{\lambda^{\alpha+k+1}},$$

což dává

$$F_{k,p}^\alpha(\xi, \chi) = \frac{1}{(1-\xi)^{\alpha+1}(1-\chi)^{\alpha+p+1}} \left(\frac{1}{\lambda}\right)^{\alpha+k+1} \Gamma(\alpha+k+1).$$

Dosadíme za λ

$$F_{k,p}^\alpha(\xi, \chi) = \frac{1}{(1-\xi)^{\alpha+1}(1-\chi)^{\alpha+p+1}} \left[\frac{(1-\xi)(1-\chi)}{1-\xi\chi}\right]^{\alpha+k+1} \Gamma(\alpha+k+1).$$

Upravíme zlomky a máme

$$F_{k,p}^\alpha(\xi, \chi) = (1 - \xi)^k (1 - \chi)^{k-p} \frac{1}{(1 - \xi\chi)^{\alpha+k+1}} \Gamma(\alpha + k + 1). \quad (3.39)$$

Potřebujeme najít Taylorův rozvoj funkce $F(\alpha, k, p)$, který by obsahoval pouze kladné celočíselné mocniny ξ a χ . Rozvineme výrazy pomocí binomické věty

$$(1 + x)^r = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{r}{n} x^n.$$

Ve speciálním případě, kdy r je celé nezáporné číslo, tj. $r = l \in \mathbb{N}_0$, se suma v binomické větě redukuje na konečný součet

$$(1 + x)^l = \sum_{n=0}^l \binom{l}{n} x^n.$$

I když bychom mohli rozvinout mocniny $(1 - \xi)$ a $(1 - \chi)$ pro obecné hodnoty exponentů, budeme raději předpokládat, že

$$k, p \in \mathbb{N}_0 \text{ a } k - p > 0.$$

Díky konečnosti binomických sum budeme schopni zformulovat výběrová pravidla pro nenulovost integrálů.

Dostáváme

$$F_{k,p}^\alpha(\xi, \chi) = \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-p} \binom{k}{i} \binom{k-p}{j} (-\xi)^i (-\chi)^j \sum_{n=0}^{\infty} \binom{-(\alpha+k+1)}{n} (-\xi\chi)^n \Gamma(\alpha+k+1).$$

Dále budeme předpokládat, že $\alpha + k + 1 \geq 0$. Pro další úpravu použijeme následující výpočet:

$$\begin{aligned} \binom{-(\alpha+k+1)}{n} (-1)^n &= \frac{1}{n!} \prod_{l=0}^{n-1} [-(\alpha+k+1) - l] (-1)^n = \\ &= \frac{1}{n!} \prod_{l=0}^{n-1} (\alpha+k+1+l) = \binom{\alpha+k+n}{n}. \end{aligned}$$

a díky známému vztahu pro gama funkce $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ můžeme psát

$$\Gamma(\alpha+k+1) \binom{\alpha+k+n}{n} = \frac{\Gamma(\alpha+k+n+1)}{n!},$$

takže

$$F_{k,p}^\alpha(\xi, \chi) = \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-p} \sum_{n=0}^{\infty} \binom{k}{i} \binom{k-p}{j} (-1)^{i+j} \frac{\Gamma(\alpha+k+n+1)}{n!} \xi^{n+i} \chi^{n+j}.$$

Určíme koeficient $I_{\nu\mu}(\alpha, k, p)$, který stojí v rozvoji funkce $F_{k,p}^\alpha$ u členu $\xi^\nu \chi^\mu$. Musí platit

$$\begin{aligned} \nu &= n + i \\ \mu &= n + j. \end{aligned}$$

Pro dané n můžeme jednoznačně dopočítat indexy i a j . Hodnoty n , pro které může mít ξ mocninou rovnou ν jsou $\nu - k$ až ν . Pro tyto hodnoty n je vždy možné najít takové i z intervalu $0, 1, \dots, k$, aby bylo $\xi^{n+i} = \xi^\nu$. Pro malé hodnoty n může být $\nu - k$ záporné, v takových případech vezmeme jako spodní mez pro n nulu. Celkem tedy $n = \max\{0, \nu - k\}, \dots, \nu$. Obdobná úvaha pro hodnoty n , které přispějí ke členu $\chi^{n+j} = \chi^\mu$ dává $n = \max\{0, \mu - k + p\}, \dots, \mu$. Průnik obou intervalů je celkem

$$n = \max\{0, \nu - k, \mu - k + p\}, \dots, \min\{\nu, \mu\}.$$

Koeficient u $\xi^\nu \chi^\mu$ je

$$I_{\nu\mu}(\alpha, k, p) = \sum_{n=\max\{0, \nu-k, \mu-k+p\}}^{\min\{\nu, \mu\}} \binom{k}{\nu-n} \binom{k-p}{\mu-n} (-1)^{\mu+\nu} \frac{\Gamma(\alpha+k+n+1)}{n!}. \quad (3.40)$$

Označíme horní a dolní mez sumy

$$\begin{aligned} n_{\min} &= \max\{0, \nu - k, \mu - k + p\} \\ n_{\max} &= \min\{\nu, \mu\}. \end{aligned}$$

Suma dá nulu vždy, když je splněna podmínka $n_{\min} > n_{\max}$. V opačném případě je integrál obecně nenulový. Výběrové pravidlo určíme z inverzní podmínky

$$\begin{aligned} n_{\min} &\leq n_{\max} \\ \max\{0, \nu - k, \mu - k + p\} &\leq \min\{\nu, \mu\}. \end{aligned}$$

Tato nerovnost je splněna, platí-li současně všechny tyto podmínky:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \nu, \\ 0 &\leq \mu, \\ \nu - k &\leq \nu, \\ \nu - k &\leq \mu, \\ \mu - k + p &\leq \nu, \\ \mu - k + p &\leq \mu. \end{aligned}$$

Vzhledem k předpokladům $k - p \geq 0$, $k \geq 0$ je netriviální pouze čtvrtá a pátá podmínka. Jejich kombinací dostaneme výběrové pravidlo

$$-k + p \leq \nu - \mu \leq k. \quad (3.41)$$

Vidíme, že pro $k = p = 0$, je nutnou podmínkou pro nenulovost $I_{\nu\mu}(\alpha, 0, 0)$ rovnost $\nu = \mu$. Dosazením získáme integrál často uváděný v literatuře

$$I_{mn}(\alpha, 0, 0) = \int_0^\infty x^\alpha L_n^\alpha(x) L_m^\alpha(x) \exp(-x) dx = \delta_{m,n} \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)}{n!}. \quad (3.42)$$

Další klasický speciální případ je

$$I_{nn}(\alpha, 1, 0) = \int_0^\infty x^{\alpha+1} [L_n^\alpha(x)]^2 \exp(-x) dx = \frac{\Gamma(\alpha + n + 1)(\alpha + 2n + 1)}{n!}.$$

3.6.4 Radiální část maticových elementů

V kapitole 3.6.2 jsme integrovali přes γ v členu maticového elementu (3.33). Budeme se zabývat jen těmi případy, kdy maticový element splňuje výběrová pravidla (3.37), v ostatních případech je nulový.

Nejprve spočítáme případ $m = m'$. Ze vzorců (3.35, 3.36) vidíme, že pro $m > 0$ je příspěvek integrace přes γ

$$\pi [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4]$$

pro sudou i lichou bázi. Pro $m = 0$ v sudé bázi máme

$$2\pi [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4].$$

Dále budeme pro stručnost pokračovat jen s lichou bází. Postup pro sudou bázi je stejný, jen je potřeba odlišit případ $m = 0$. Dosadíme do (3.33) a upravíme integrál do tvaru vhodnějšího pro výpočet

$$\langle \psi_{nm}^O | \hat{V}_0 | \psi_{n'm}^O \rangle = N_{nm}^O N_{n'm}^O \int_0^\infty \beta \pi [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] R_{nm}(\beta) R_{n'm}(\beta) d\beta. \quad (3.43)$$

Spočítáme obecnější typ integrálu

$$\int_0^\infty \beta \beta^{2k} R_{nm}(\beta) R_{n'm}(\beta) d\beta, \quad (3.44)$$

kde $k = 0, 1, 2, \dots$, pomocí kterého lze původní integrál snadno vyjádřit. Dosadíme za R_{nm} z (3.27)

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \beta \beta^{2k} \beta^{3m} L_n^{3m}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) \beta^{3m} L_{n'}^{3m}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) d\beta = \\ & \int_0^\infty \beta^{2k+1+6m} L_n^{3m}(k\beta^2) L_{n'}^{3m}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2) d\beta \end{aligned}$$

a provedeme substituci (3.24). Dostáváme

$$\frac{1}{2^{k+3m+1}} \int_0^\infty x^{k+3m} L_n^{3m}(x) L_{n'}^{3m}(x) \exp(-x) dx.$$

Integrál má stejný tvar jako (3.38) s parametry $I(3m, k, 0)$ a pro konkrétní k můžeme jeho hodnotu určit pomocí vzorce (3.40). Na integrál se vztahují výběrová pravidla (3.41), v tomto případě

$$-k \leq n - n' \leq k.$$

Pro ilustraci spočítáme maticové elementy pro případ $n' = n + 1$. Postupy pro další případy jsou obdobné. Začneme případem $k = 1$. Vzorec (3.40) dává

$$\begin{aligned} I_{n,n+1}(3m, 1, 0) &= \sum_{l=n}^n \binom{1}{n-l} \binom{1}{n+1-l} (-1)^{n+n+1} \frac{\Gamma(3m+1+l+1)}{l!} = \\ &= \frac{\Gamma(n+3m+2)}{n!} = \frac{(n+3m+1)!}{n!} \end{aligned}$$

Integrál (3.44) má tedy pro $n' = n + 1$ a $k = 1$ hodnotu

$$\frac{1}{2k^{3m+2}} \int_0^\infty x^{k+3m+1} L_n^{3m}(x) L_{n'}^{3m}(x) \exp(-x) dx = \frac{1}{2k^{3m+2}} \frac{(2n+3m+1)!}{n!}.$$

Pro případ $k = 2$ a $n > 0$ dostaneme z (3.40) sumu přes dva prvky

$$\begin{aligned} I_{n,n+1}(3m, 1, 0) &= \sum_{l=n-1}^n \binom{2}{n-l} \binom{2}{n+1-l} (-1)^{n+n+1} \frac{\Gamma(3m+2+l+1)}{l!} = \\ &= -2 \frac{\Gamma(n+3m+2)}{(n-1)!} - 2 \frac{\Gamma(n+3m+3)}{n!} \\ &= -2 \frac{(n+3m+1)n}{n!} - 2 \frac{(n+3m+1)!(n+3m+2)}{n!} \\ &= -2 \frac{(n+3m+1)!(2n+3m+2)}{n!}. \end{aligned}$$

Je-li $n = 0$, první člen sumy vypadne. Jeho příspěvek je ale násobkem n , takže odvozený výraz pro $n > 0$ platí i pro $n = 0$. Integrál (3.44) má pro $n' = n + 1$ a $k = 2$ hodnotu

$$\begin{aligned} \frac{1}{2k^{3m+3}} \int_0^\infty x^{k+3m+1} L_n^{3m}(x) L_{n'}^{3m}(x) \exp(-x) dx = \\ - \frac{1}{k^{3m+3}} \frac{(n+3m+1)!(n+3m+2)}{n!}. \end{aligned}$$

Po dosazení do (3.43) s využitím (3.18) a (3.28) máme

$$\begin{aligned} \langle \psi_{nm}^O | \hat{V}_0 | \psi_{n+1,m}^O \rangle &= \sqrt{\frac{2k^{3m+1}n!}{\pi(n+3m)!}} \sqrt{\frac{2k^{3m+1}(n+1)!}{\pi(n+1+3m)!}} \times \\ \pi \left[(A - A_0) \frac{1}{2k^{3m+2}} \frac{(n+3m+1)!}{n!} - C \frac{1}{k^{3m+3}} \frac{(n+3m+1)!(2n+3m+2)}{n!} \right] &= \\ \sqrt{(n+1)(n+3m+1)} \left[(A - A_0) \frac{1}{k} - 2C \frac{1}{k^2} (2n+3m+2) \right]. \end{aligned}$$

Tento výraz už je hodnota maticového elementu. První člen na pravé straně (3.29)) je díky ortogonalitě báze a (3.31) roven nule. Celkem tedy

$$\langle \psi_{nm}^O | \hat{H} | \psi_{n+1,m}^O \rangle = \sqrt{(n+1)(n+3m+1)} [k^{-1}(A - A_0) - 2k^{-2}C(2n+3m+2)].$$

Sudá báze se liší hodnotou integrálu přes úhlovou část a také hodnotou normalizačních elementů. Tyto dvě změny se navzájem kompenzují, takže uvedený maticový element v tomto případě platí i pro sudou bázi. Pro $m = m'$ jsou maticové elementy sudé a liché báze totožné.

Druhá možnost, kterou dává (3.37) je $m' = m \pm 1$. Ze vzorců (3.35) a (3.36) určíme hodnotu integrace přes úhel γ . Opět budeme demonstrovat postup jen pro lichou bázi. Pro sudou bázi je postup obdobný. Liší se jen v jiných hodnotách integrálu přes γ a v normalizačních koeficientech. Z (3.35) máme integraci přes úhel γ rovnou

$$-B\beta^3 \frac{\pi}{2},$$

Postup je podobný jako v případě $m = m'$. Prozatím budeme předpokládat $m' = m + 1$. Dostáváme vzorec pro hodnotu maticového elementu

$$\langle \psi_{nm}^O | \hat{V}_0 | \psi_{n',m+1}^O \rangle = N_{nm}^O N_{n',m+1}^O \int_0^\infty \beta \pi \left[-B \beta^3 \frac{\pi}{2} \right] R_{nm}(\beta) R_{n',m+1}(\beta) d\beta,$$

který vede na integrál

$$\int_0^\infty \beta \beta^3 \beta^{3m} L_n^{3m}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) \beta^{3(m+1)} L_{n'}^{3(m+1)}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2/2) d\beta = \\ \int_0^\infty \beta^{7+6m} L_n^{3m}(k\beta^2) L_{n'}^{3(m+1)}(k\beta^2) \exp(-k\beta^2) d\beta.$$

Opět provedeme substituci (3.24) a dostáváme

$$\frac{1}{2k^{3m+4}} \int_0^\infty x^{3m+3} L_n^{3m}(x) L_{n'}^{3m+3}(x) \exp(-x) dx.$$

Z předchozí kapitoly víme, že tento integrál je typu $I(3m, 3, 3)$ (viz (3.40)). Parametry jsou

$$\begin{aligned} \alpha &= 3m, \\ k &= 3, \\ p &= 3. \end{aligned}$$

Podle (3.41) máme výběrová pravidla

$$0 \leq n - n' \leq 3.$$

Tento výsledek na první pohled budí dojem, že maticové elementy nejsou symetrické vůči záměně indexů. Pokud však prohodíme současně obě kvantová čísla n a m , tj.

$$(n, m) \longleftrightarrow (n', m'),$$

tak se hodnota maticového elementu nezmění. Díky této vlastnosti, která pro reálné maticové elementy musí platit díky hermiticitě \hat{H} , můžeme určit hodnotu maticového elementu i pro případ $m' = m - 1$

$$\langle \psi_{nm}^O | \hat{V}_0 | \psi_{n',m-1}^O \rangle = \langle \psi_{n',m-1}^O | \hat{V}_0 | \psi_{nm}^O \rangle = \langle \psi_{n'm'}^O | \hat{V}_0 | \psi_{n,m'+1}^O \rangle.$$

Vyčíslení integrálu je přímočaré a nebudeme ho uvádět. Hodnoty všech maticových elementů jsou shrnuty v následující kapitole. Zatímco pro $m = m'$ maticové elementy nezávisely na paritě báze, v případě $m = m' \pm 1$ tomu tak již není. Normalizační konstanty nezkompenzují rozdílné hodnoty integrace přes γ . Díky tomu se maticové elementy pro sudou a lichou bázi liší.

3.6.5 Přehled výběrových pravidel a maticových elementů

Maticové elementy budeme pro přehlednější zápis značit

$$\langle nm|\hat{H}|n'm'\rangle \equiv \langle \psi_{nm}|\hat{H}|\psi_{n'm'}\rangle \quad (3.45)$$

Pro obě báze platí

$$\begin{aligned} \langle nm|\hat{H}|nm\rangle &= \hbar\omega(2n+3m+1) + (A-A_0)k^{-1}(2n+3m+1) \\ &+ Ck^{-2}[n(n-1) + (n+3m+1)(5n+3m+2)], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle n+1, m|\hat{H}|nm\rangle &= -(A-A_0)k^{-1}\sqrt{(n+1)(n+3m+1)} \\ &- 2Ck^{-2}\sqrt{(n+1)(n+3m+1)}(2n+3m+2), \end{aligned}$$

$$\langle n+2, m|\hat{H}|nm\rangle = Ck^{-2}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3m+1)(n+3m+2)},$$

kde k je

$$k = \frac{\sqrt{2mA_0}}{\hbar}.$$

Zbývající nenulové elementy se ve 2D modelech vzájemně liší o multiplikační konstantu

$$\langle n, m+1|\hat{H}|nm\rangle = \alpha\frac{B}{2}k^{-3/2}\sqrt{(n+3m+3)(n+3m+2)(n+3m+1)},$$

$$\langle n-1, m+1|\hat{H}|nm\rangle = -\alpha\frac{3B}{2}k^{-3/2}\sqrt{n(n+3m+2)(n+3m+1)},$$

$$\langle n-2, m+1|\hat{H}|nm\rangle = \alpha\frac{3B}{2}k^{-3/2}\sqrt{n(n-1)(n+3m+1)},$$

$$\langle n-3, m+1|\hat{H}|nm\rangle = -\alpha\frac{B}{2}k^{-3/2}\sqrt{n(n-1)(n-2)}.$$

Hodnota α je dána předpisem

$$\alpha = \begin{cases} -1 & \text{pro lichou bázi} \\ 1 & \text{pro sudou bázi, kde } m > 0 \\ \sqrt{2} & \text{pro sudou bázi, kde } m = 0 \end{cases}$$

Zbylé maticové elementy, které nelze získat pouhou záměnou indexů $nm \longleftrightarrow n'm'$, jsou nulové.

3.7 Výběrová pravidla a maticové elementy pro 5D GCM

Výpočty v 5D modelu jsou jednodušší, než ve 2D. I když 5D model vypadá na první pohled složitější, postrádá speciální případy a pracujeme pouze s jednou bází. Maticový element pro 5D model rozepíšeme úplně stejně jako ve 2D případě pomocí (3.29). V tomto případě však indexy k a l značí dvojici kvantových čísel $(l\lambda)$. Bázové vektory jsou vlastními vektory operátoru \hat{H}_0 , takže první člen je diagonální a jeho hodnoty jsou rovny energiím (3.22)

$$\langle \psi_{l\lambda} | \hat{H}_0 | \psi_{l'\lambda'} \rangle = \hbar\omega \left(2l + \lambda + \frac{5}{2} \right) \delta_{ll'} \delta_{\lambda\lambda'}.$$

Druhý člen je podle (3.21) roven

$$\begin{aligned} \langle \psi_{l\lambda} | \hat{V}_0 | \psi_{l'\lambda'} \rangle = \\ N_{l\lambda} N_{l'\lambda'} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \beta^4 |\sin 3\gamma| F_l^\lambda(\beta) P_\mu(\cos 3\gamma) V_0(\beta, \gamma) F_{l'}^{\lambda'}(\beta) P_{\mu'}(\cos 3\gamma) d\gamma d\beta, \end{aligned} \quad (3.46)$$

kde $\lambda = 3\mu$. Spočítáme úhlovou část výrazu.

3.7.1 Úhlová část maticových elementů

Vztah (3.46) obsahuje integrál

$$A_{\mu\mu'} \equiv \int_0^{2\pi} |\sin 3\gamma| P_\mu(\cos 3\gamma) V_0(\beta, \gamma) P_{\mu'}(\cos 3\gamma) d\gamma. \quad (3.47)$$

Po rozepsání $V_0(\beta, \gamma)$ podle (3.32) dostaneme pro kvadratickou a kvartickou část integrál

$$[(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] \int_0^{2\pi} |\sin 3\gamma| P_\mu(\cos 3\gamma) P_{\mu'}(\cos 3\gamma) d\gamma.$$

Integrál můžeme spočítat úplně stejně jako při výpočtu normalizačních konstant pro 5D GCM v kapitole 3.5. Nakonec dostaneme integrál (B.3) z dodatku B, což dává

$$\int_0^{2\pi} |\sin 3\gamma| P_\mu(\cos 3\gamma) P_{\mu'}(\cos 3\gamma) d\gamma = \delta_{\mu,\mu'} \frac{4}{2\mu + 1}. \quad (3.48)$$

Výpočet kubického členu je složitější. Potřebujeme spočítat integrál

$$B\beta^3 \int_0^{2\pi} |\sin 3\gamma| P_\mu(\cos 3\gamma) \cos 3\gamma P_{\mu'}(\cos 3\gamma) d\gamma,$$

Provedeme substituci $\alpha = 3\gamma$

$$\int_0^{6\pi} |\sin \alpha| P_\mu(\cos \alpha) \cos \alpha P_{\mu'}(\cos \alpha) \frac{d\alpha}{3}.$$

Celý integrand je funkcí $\sin \alpha$ a $\cos \alpha$, takže je 2π -periodický. Budeme počítat jen první periodu integrálu a výsledek vynásobíme třemi

$$\int_0^{2\pi} |\sin \alpha| P_\mu(\cos \alpha) \cos \alpha P_{\mu'}(\cos \alpha) d\alpha.$$

Integrand je sudý okolo π na intervalu $\langle 0, 2\pi \rangle$, protože je funkcí $\cos \alpha$ a $|\sin \alpha|$, které mají tuto vlastnost. Budeme integrovat jen do π a výsledek vynásobíme dvěma

$$2 \int_0^\pi |\sin \alpha| P_\mu(\cos \alpha) \cos \alpha P_{\mu'}(\cos \alpha) d\alpha.$$

Na intervalu $(0, \pi)$ je funkce \sin kladná, takže můžeme vynechat absolutní hodnotu

$$2 \int_0^\pi \sin \alpha P_\mu(\cos \alpha) \cos \alpha P_{\mu'}(\cos \alpha) d\alpha.$$

Provedeme substituci $x = \cos \alpha$:

$$\begin{aligned} x &= \cos \alpha, \\ dx &= -d\alpha \sin \alpha. \end{aligned}$$

$$2 \int_1^{-1} P_\mu(x) x P_{\mu'}(x) (-1) dx.$$

Prohodíme integrační meze a změňme znaménko

$$2 \int_{-1}^1 P_\mu(x) x P_{\mu'}(x) dx.$$

Použijeme vztah pro Legendreovy polynomy (B.2) a máme

$$2 \int_{-1}^1 \frac{1}{2\mu+1} [(\mu+1)P_{\mu+1}(x) + \mu P_{\mu-1}(x)] P_{\mu'}(x) dx.$$

Rozdělíme integrál na dva samostatné integrály

$$2 \frac{1}{2\mu+1} (\mu+1) \int_{-1}^1 P_{\mu+1}(x) P_{\mu'}(x) dx + 2 \frac{1}{2\mu+1} \mu \int_{-1}^1 P_{\mu-1}(x) P_{\mu'}(x) dx$$

a použijeme relaci ortogonalit (B.3)

$$2 \frac{1}{2\mu+1} (\mu+1) \frac{2}{2(\mu+1)+1} \delta_{\mu+1, \mu'} + 2 \frac{1}{2\mu+1} \mu \frac{2}{2(\mu-1)+1} \delta_{\mu-1, \mu'},$$

takže po úpravě máme

$$2 \frac{2\mu+2}{(2\mu+1)(2\mu+3)} \delta_{\mu+1, \mu'} + 2 \frac{2\mu}{(2\mu+1)(2\mu-1)} \delta_{\mu-1, \mu'}. \quad (3.49)$$

Dáme-li dohromady výsledky (3.48) a (3.49), získáme hodnotu (3.47)

$$\begin{aligned}
A_{\mu\mu'}(\beta) &= \int_0^{2\pi} |\sin 3\gamma| P_\mu(\cos 3\gamma) V_0(\beta, \gamma) P_{\mu'}(\cos 3\gamma) d\gamma = \\
&[(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] \delta_{\mu,\mu'} \frac{4}{2\mu + 1} + \\
B\beta^3 &\left[2 \frac{2\mu + 2}{(2\mu + 1)(2\mu + 3)} \delta_{\mu+1,\mu'} + 2 \frac{2\mu}{(2\mu + 1)(2\mu - 1)} \delta_{\mu-1,\mu'} \right]. \quad (3.50)
\end{aligned}$$

Vidíme, že výběrová pravidla z integrace úhlové části jsou

$$-1 \leq \mu - \mu' \leq 1,$$

nebo pro $\lambda = 3\mu$

$$-3 \leq \lambda - \lambda' \leq 3.$$

Výběrová pravidla (3.37) pro m a pro μ jsou stejná.

3.7.2 Radiální část maticových elementů

Zajímá nás hodnota výrazu (3.46), jehož zápis zjednodušíme pomocí (3.47).

$$\langle \psi_{l\lambda} | \hat{V}_0 | \psi_{l'\lambda'} \rangle = N_{l\lambda} N_{l'\lambda'} \int_0^\infty \beta^4 A_{\mu\mu'}(\beta) F_l^\lambda(\beta) F_{l'}^{\lambda'}(\beta) d\beta,$$

Postup je prakticky stejný jako pro 2D případ. Dokonce i výsledky jsou si pozoruhodně podobné. Uvedeme nyní již velmi stručně výpočet a budeme se soustředit na srovnání s 2D případem.

Provedeme substituci (3.24) a máme

$$N_{l\lambda} N_{l'\lambda'} \frac{1}{2k^{(\lambda+\lambda'+5)/2}} \int_0^\infty x^{(\lambda+\lambda'+3)/2} A_{\mu\mu'}(x) L_l^{\lambda+3/2}(x) L_{l'}^{\lambda'+3/2}(x) \exp(-x) dx$$

Obdobou funkce $A_{\mu\mu'}$ pro 2D případ je funkce $A_{mm'}$, která se liší podle parity 2D báze a je dána vzorci (3.35) a (3.36). Odpovídající integrál pro 2D je

$$N_{nm}^{2D} N_{n'm'}^{2D} \frac{1}{2k^{(3m+3m')/2+1}} \int_0^\infty x^{(3m+3m')/2} A_{mm'}(x) L_n^{3m}(x) L_{n'}^{3m'}(x) \exp(-x) dx.$$

Typ integrálu (3.38) je dán horními indexy Laguerrových polynomů ($3m$, resp. $\lambda + 3/2$) a mocninou x , která je rovna $\alpha + k$. Člen $A_{mm'}(x)$, resp. $A_{\mu\mu'}(x)$, v obou případech obsahuje obecně druhé, třetí a čtvrté mocniny β . Sudé mocniny se díky tvaru funkcí $A_{mm'}(x)$ a $A_{\mu\mu'}(x)$ uplatní jen pro $\mu = \mu'$ a $m = m'$, pro které je

$$\begin{aligned}
A_{\mu\mu}(\beta) &= [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] \frac{2}{2\mu + 1}, \\
A_{mm}(\beta) &= [(A - A_0)\beta^2 + C\beta^4] \pi.
\end{aligned}$$

Pro případ $m = m'$, resp. $\lambda = \lambda'$ dosadíme za $A(\beta)$ a za normalizační konstanty (3.25) a (3.28). Použili jsme normalizační konstanty pro lichou bázi, takže další

srovnání se týká jen 2D ODD. Pro 5D případ máme

$$\sqrt{\frac{k^{\lambda+5/2}l!(2\mu+1)}{2\Gamma(l+\lambda+5/2)}}\sqrt{\frac{k^{\lambda+5/2}l'!(2\mu+1)}{2\Gamma(l'+\lambda+5/2)}}\frac{1}{2k^{\lambda+5/2}}\frac{4}{2\mu+1}\times$$

$$\int_0^\infty x^{\lambda+3/2}\left[(A-A_0)\frac{x}{k}+C\left(\frac{x}{k}\right)^2\right]L_l^{\lambda+3/2}(x)L_{l'}^{\lambda+3/2}(x)\exp(-x)dx$$

Pro 2D případ dostáváme

$$\sqrt{\frac{2k^{3m+1}n!}{\pi(n+3m)!}}\sqrt{\frac{2k^{3m+1}n'!}{\pi(n'+3m)!}}\frac{1}{2k^{3m+1}}\pi\times$$

$$\int_0^\infty x^{3m}\left[(A-A_0)\frac{x}{k}+C\left(\frac{x}{k}\right)^2\right]L_n^{3m}(x)L_{n'}^{3m}(x)\exp(-x)dx$$

Dosadíme-li do předchozích dvou výrazů za $\rho = \lambda + 3/2$ pro 5D a $\rho' = 3m$ pro 2D, získáme po jednoduchých úpravách

$$\sqrt{\frac{l!}{\Gamma(l+\rho+1)}}\sqrt{\frac{l'!}{\Gamma(l'+\rho+1)}}\times$$

$$\int_0^\infty x^\rho\left[(A-A_0)\frac{x}{k}+C\left(\frac{x}{k}\right)^2\right]L_l^\rho(x)L_{l'}^\rho(x)\exp(-x)dx$$

pro 5D a

$$\sqrt{\frac{n!}{\Gamma(n+\rho'+1)}}\sqrt{\frac{n'!}{\Gamma(n'+\rho'+1)}}\times$$

$$\int_0^\infty x^{\rho'}\left[(A-A_0)\frac{x}{k}+C\left(\frac{x}{k}\right)^2\right]L_n^{\rho'}(x)L_{n'}^{\rho'}(x)\exp(-x)dx$$

pro 2D. Vidíme, že výrazy se liší jen záměnou $(n, n', 3m) \longleftrightarrow (l, l', \lambda + 3/2)$. Po provedení záměny ve členech úměrných $(A - A_0)$ a C v kapitole 3.6.5 a nahrazení členu

$$\hbar\omega(2n + 3m + 1) \longrightarrow \hbar\omega(2n + \lambda + 5/2)$$

podle (3.22), dostaneme maticové elementy 5D pro $\lambda = \lambda'$.

Zbývají elementy, pro které je $m = m' \pm 1$ a $\mu = \mu' \pm 1$. Opět vezmeme pro srovnání lichou bázi a budeme uvažovat jen případ $m = m' + 1$. Funkce $A(\beta)$ jsou podle (3.35) a (3.50) rovny

$$A_{\mu\mu'}(\beta) = B\beta^3\frac{4\mu}{(2\mu+1)(2\mu-1)},$$

$$A_{mm'}(\beta) = B\beta^3\left(-\frac{\pi}{2}\right).$$

Zopakováním předchozího postupu máme po zavedení $\rho = \lambda' + 3/2$ a $\rho' = 3m'$ integrály

$$\sqrt{\frac{k^{\rho+3+1}l!(2\mu+1)}{2\Gamma(l+\rho+3+1)}}\sqrt{\frac{k^{\rho+1}l'!(2\mu'+1)}{2\Gamma(l'+\rho+1)}}\frac{1}{2k^{\rho+1}}\frac{4\mu}{(2\mu+1)(2\mu-1)}\times$$

$$\int_0^\infty x^\rho B\left(\frac{x}{k}\right)^3 L_l^{\rho+3}(x)L_{l'}^\rho(x)\exp(-x)dx$$

a

$$\sqrt{\frac{2k^{\rho'+3+1}n!}{\pi\Gamma(n+\rho'+3+1)}}\sqrt{\frac{2k^{\rho'+1}n!}{\pi\Gamma(n'+\rho'+1)}}\frac{1}{2k^{\rho'+1}}\left(-\frac{\pi}{2}\right)\times$$

$$\int_0^\infty x^{\rho'}B\left(\frac{x}{k}\right)^3L_n^{\rho'+3}(x)L_{n'}^{\rho'}(x)\exp(-x)dx.$$

Kromě záměny $(n, n', 3m) \longleftrightarrow (l, l', \lambda + 3/2)$ se integrály liší o další člen. 5D případ je oproti 2D vynásoben faktorem

$$-\frac{2\mu\sqrt{(2\mu+1)(2\mu'+1)}}{(2\mu+1)(2\mu-1)}.$$

S využitím $\mu = \mu' + 1$ po úpravě máme

$$-\frac{2(\mu'+1)}{\sqrt{(2\mu'+3)(2\mu'+1)}}.$$

Chceme-li tedy převést výsledky z kapitoly 3.6.5 na 5D případ, musíme provést nahrazení⁴

$$\begin{aligned} n &\longrightarrow l, \\ 3m &\longrightarrow \lambda + \frac{3}{2}, \\ \alpha &\longrightarrow \alpha(\mu') = \frac{2(\mu'+1)}{\sqrt{(2\mu'+3)(2\mu'+1)}}. \end{aligned}$$

Tím získáme všechny maticové elementy pro 5D GCM.

⁴5D GCM srovnáváme s lichou bází, kde $\alpha = -1$, odtud pochází znaménko u α pro 5D.

Kapitola 4

Chaos v GCM

4.1 Statistické vlastnosti spekter

Základním kriteriem pro míru kvantového chaosu je požadavek dobré korespondence s některou klasickou mírou. Nejrozšířenější metodou je statistické vyhodnocení distribuce energetických hladin. V této práci tuto metodu nepoužíváme, takže uvedeme jen stručný přehled.

Východiskem pro statistické vlastnosti hladin je teorie náhodných matic studovaná v 50. letech 20. století Wignerem. Wigner předpokládal, že hermitovské matice s náhodnými elementy budou odpovídat hamiltoniánům velmi složitých systémů. Pravděpodobnostní rozdělení v prostoru matic musí být invariantní vůči ortogonálním (pro reálné matice), resp. unitárním (pro komplexní matice) transformacím. Kromě je uplatněn předpoklad statistické nezávislosti jednotlivých maticových elementů. Oba zmíněné typy souborů náhodných matic nazýváme GOE (gaussian orthogonal ensemble), resp. GUE (gaussian unitary ensemble).

Vezmeme-li vzdálenosti po sobě jdoucích vlastních čísel náhodné matice (v případě hamiltoniánu vzdálenosti sousedních energetických hladin),¹ můžeme určit pravděpodobnostní rozdělení výskytu jednotlivých vzdáleností. Pro soubory GOE a GUE se dají stanovit limitní rozdělení pro nekonečnou dimenzi matic. Wignerovo rozdělení je výsledek pro GOE matice velikosti 2×2 , ale z numerického hlediska je prakticky ekvivalentní asymptotickému rozdělení GOE.²

Aby bylo možné statisticky vyhodnotit energetické spektrum, je potřeba provést unfolding, což je zjednodušeně řečeno přeškálování energie pomocí nějaké hladké funkce tak, aby průměrná vzdálenost hladin byla stejná v celém spektru. Tuto proceduru je třeba provést jak v případě náhodných maticových souborů, tak v případě jednoznačně zadaného hamiltoniánu, kde se spektrální statistika vyhodnocuje z chování velkého počtu hladin.

Ukazuje se, že pravděpodobnost vzdáleností mezi hladinami odpovídající náhodným maticím se vyskytuje i u jednoduchých systémů, které mají chaotický klasický protějšek. Konkrétní hustota pravděpodobnosti se může pro různé sys-

¹V anglické literatuře se často používá zkratka NNS, nearest neighbour spacing.

²Rozdělení vlastních čísel náhodných matic závisí na jejich řádu. Wignerovo rozdělení je pro matice řádu 2, GOE je limita rozdělení pro matice jejichž řád jde do nekonečna. Obě rozdělení se sice liší, ale odlišnosti jsou řádově velikosti procenta. Wignerovo rozdělení lze snadno vyjádřit analyticky, narozdíl od pravého GOE.

těmy lišit, typicky jde o rozdělení GOE, nebo GUE. Obecně mají tyto hustoty pravděpodobnosti nulu v počátku, což znamená, že hladiny v těsné blízkosti se vyskytují s velmi malou pravděpodobností. Někdy se hovoří o odpuzování hladin u chaotických systémů. Pro regulární klasický protějšek kvantového systému postrádají vzdálenosti hladin jakoukoliv korelaci a jejich rozdělení je exponenciální. V tomto případě má hustota pravděpodobnosti v nule své maximum. Pro úplnost dodejme, že popsané vlastnosti spekter kvantových systémů sice určují obecně regularitu či chaotičnost, ale jsou známé výjimky, například lineární harmonický oscilátor. Numerické výsledky ukazují, že pro „typický“ systém funguje tato metoda spolehlivě.

V praxi nastává situace, kdy systém není úplně regulární či chaotický, ale chová se jen částečně chaoticky. Tomu odpovídá postupný přechod rozdělení od exponenciálního ke GOE či GUE. Příkladem je Brodyho rozdělení

$$P(s; \omega) = (\omega + 1) \alpha_\omega s^\omega A \exp(-\alpha_\omega s^{\omega+1}), \quad (4.1)$$

kde

$$\alpha_\omega = \left[\Gamma \left(\frac{\omega + 2}{\omega + 1} \right) \right]^{\omega+1}.$$

Parametr ω nabývá hodnot z intervalu $(0, 1)$. Pro $\omega = 0$ dostáváme exponenciální rozdělení, pro $\omega = 1$ Wignerovo.

Statistické vyhodnocení vzdáleností nejbližších hladin není jediný způsob, jak určit míru chaosu ze spektra systému. Další možnost je například použití Δ_3 statistiky, která vyhodnocuje korelace na mnohem větších vzdálenostech. Zájemce odkazujeme na učebnice [3, 9].

4.2 Peresovy mřížky

Metodou, která je použita v této práci, je tzv. Peresova mřížka, viz [4]. Vybereme si libovolnou klasickou veličinu, například moment hybnosti, a spočítáme její střední hodnotu pro každý vlastní stav. Každému vlastnímu stavu pak přiřadíme bod, jehož souřadnice x je energie vlastního stavu a souřadnice y je střední hodnota naší veličiny. V případě, že je systém chaotický, mají body náhodné pozice. Pro regulární systém body vytvoří mřížku. Je-li systém jen částečně chaotický, bude diagram obsahovat část bodů srovnaných do mřížky a část bodů umístěnou náhodně. Nevýhoda této metody spočívá hlavně v tom, že je potřeba subjektivně vyhodnotit, zda body tvoří mřížku, nebo zda jsou umístěny náhodně. Vyhodnocení chaotičnosti musí provádět člověk. Výhodou je možnost určit pro jednotlivé kvantové stavy, zda jsou regulární či chaotické. Metoda je principiálně velmi jednoduchá, což je další výhoda.

4.2.1 Integrabilní případ

Souvislost Peresovy mřížky s regularitou systému je možné odvodit na základě tzv. EBK aproximace [19, 20], která je stručně vyložena v dodatku C. Mějme klasický systém s n stupni volnosti, který je integrabilní (tj. je v principu možno najít n nezávislých integrálů pohybu). Integrabilní systém je vždy regulární. Jeho trajektorie ve fázovém prostoru leží na povrchu n -rozměrného toru. Na

povrchu toru je možné zavést n nezávislých uzavřených křivek C_k , pro které definujeme veličiny

$$J_k = \oint_{C_k} \sum_{i=1}^n p_i dq^i.$$

Hodnoty J_k odpovídají nezávislým integrálům pohybu. Jakákoliv zachovávající se veličina A je proto funkcí J_k . Funkci $A(J_1, J_2, \dots, J_n)$ můžeme rozvinout podle mocnin J_k v bodě $(J_1^0, J_2^0, \dots, J_n^0)$. V nejnižším řádu rozvoje máme

$$A(J_1, J_2, \dots, J_n) = A(J_1^0, J_2^0, \dots, J_n^0) + \sum_{k=1}^n \frac{\partial A}{\partial J_k} (J_k - J_k^0). \quad (4.2)$$

Podle EBK aproximace platí kvantovací podmínka

$$J_k = a_k + 2\pi m_k \hbar,$$

kde a_k jsou konstanty dané systémem a m_k jsou celá čísla. Dosadíme do (4.2) a dostáváme rozvoj

$$\begin{aligned} A(m_1, m_2, \dots, m_n) &= A(J_1^0, J_2^0, \dots, J_n^0) + \sum_{k=1}^n \frac{\partial A}{\partial J_k} (a_k + 2\pi m_k \hbar - J_k^0) = \\ &= A_0 + 2\pi \hbar \sum_{k=0}^n m_k v_k, \end{aligned}$$

kde jsme zavedli

$$\begin{aligned} v_k &\equiv \frac{\partial A}{\partial J_k}, \\ A_0 &\equiv A(J_1^0, J_2^0, \dots, J_n^0) + \sum_{k=1}^n \frac{\partial A}{\partial J_k} (a_k - J_k^0). \end{aligned}$$

Předpokládejme nyní, že máme systém se dvěma stupni volnosti $n = 2$ a že energie systému se zachovává, čili

$$E = E(J_1, J_2).$$

Z předchozího víme, že

$$E = E_0 + m_1 v_1^E + m_2 v_2^E$$

a pro libovonou další zachovávající se veličinu je

$$A = A_0 + m_1 v_1^A + m_2 v_2^A$$

Přiřadíme-li ke každému vlastnímu stavu systému bod se souřadnicemi x, y definovanými předpisem

$$\begin{aligned} x &= E_0 + m_1 v_1^E + m_2 v_2^E \\ y &= A_0 + m_1 v_1^A + m_2 v_2^A, \end{aligned}$$

vidíme, že vznikne mřížka, která je afinní transformací sítě bodů (m_1, m_2) . Parametry transformace jsou závislé na hodnotách J_k , takže se zvolna mění. Mřížka se díky tomu zobrazí nelineárně deformovaná.

Operátor A představoval libovolnou zachovávající se veličinu. Co však dělat v případě, kdy neumíme takovou veličinu najít a nejsme si ani jisti, zda existuje? Tj. zda je systém integrabilní? V takovém případě vezmeme úplně libovolnou (nezachovávající se) veličinu A a pro konstrukci mřížky použijeme její časovou střední hodnotu A_T , tzv. Peresův invariant. Časová střední hodnota se s časem nemění, takže může posloužit jako zachovávající se veličina. Je-li systém integrabilní, dostaneme opět mřížku. Peresova metoda je tak použitelná i pro složité systémy, které sice mohou být integrabilní, ale neumíme pro ně integrály pohybu najít.

Není-li systém integrabilní, EBK aproximace selhává. Nemůžeme předem vědět, jak bude diagram s body vypadat. Ukazuje se, že pro chaotické systémy jsou body náhodně rozmístěny, zatímco pro regulární systémy opět tvoří mřížku. Tato práce přináší další ověření tohoto empirického pravidla.

4.2.2 Obecný případ: výpočet časové střední hodnoty

Mějme kvantový systém daný hamiltoniánem \hat{H} , který je nezávislý na čase. Necht' je systém v čase $t = 0$ popsán vlnovou funkcí $|\psi_0\rangle$. Střední hodnota pozorovatelné veličiny odpovídající operátoru \hat{A} je $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$. Střední hodnota operátoru \hat{A} v čase t je

$$A_t \equiv \langle\psi_0|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{A}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)|\psi_0\rangle.$$

Chceme-li časovou střední hodnotu, budeme průměrovat veličinu A_t od časového počátku $t = 0$ do času T a provedeme limitu $T \rightarrow \infty$.

$$A_T \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A_t dt = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \langle\psi_0|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi_0\rangle dt.$$

Definujeme operátor \hat{A}_T , pro který platí $A_T = \langle\psi_0|\hat{A}_T|\psi_0\rangle$.

$$\hat{A}_T \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} dt \quad (4.3)$$

Definice (4.3) není vhodná pro praktické výpočty. Pro A_T najdeme vhodnější vyjádření. Zavedeme bázi $|\psi_E\rangle$ vlastních vektorů operátoru \hat{H} . Budeme předpokládat, že index E je diskretní, což je v případě GCM splněno.

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi_E\rangle &= E|\psi_E\rangle \\ \langle\psi_E|\psi_{E'}\rangle &= \delta_{E,E'} \\ \sum_E |\psi_E\rangle\langle\psi_E| &= \mathbf{1} \end{aligned}$$

Do definice (4.3) vložíme dvakrát identitu $\mathbf{1}$.

$$\begin{aligned} \hat{A}_T &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{E,E'} \int_0^T e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi_{E'}\rangle\langle\psi_{E'}| \hat{A} |\psi_E\rangle\langle\psi_E| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} dt \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{E,E'} \int_0^T e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t} |\psi_{E'}\rangle\langle\psi_{E'}| \hat{A} |\psi_E\rangle\langle\psi_E| dt \end{aligned}$$

Integrál na posledním řádku lze pro $E' - E \neq 0$ snadno spočítat

$$\int_0^T e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t} dt = \left[\frac{\hbar e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t}}{i(E'-E)} \right]_0^T = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{E'-E} \left(e^{\frac{i}{\hbar}T(E'-E)} - 1 \right).$$

Vidíme, že absolutní hodnota integrálu je omezená

$$\left| \int_0^T e^{\frac{i}{\hbar}(E'-E)t} dt \right| \leq 2 \frac{\hbar}{i} \frac{1}{|E'-E|},$$

takže pro $E' \neq E$ je

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{E'-E} \left(e^{\frac{i}{\hbar}T(E'-E)} - 1 \right) = 0.$$

Pro $E' = E$ je integrál triviální a limita je rovna 1. Celkem tedy limita funguje jako delta funkce $\delta_{E',E}$, kterou dosadíme do výrazu pro operátor \hat{A}_T

$$\begin{aligned} \hat{A}_T &= \sum_{E,E'} \delta_{E',E} |\psi_{E'}\rangle \langle \psi_{E'}| \hat{A} |\psi_E\rangle \langle \psi_E| = \\ &= \sum_E |\psi_E\rangle \langle \psi_E| \hat{A} |\psi_E\rangle \langle \psi_E| \end{aligned}$$

Je pozoruhodné, že ačkoliv obecně původní operátor \hat{A} nemusel komutovat s hamiltoniánem, operátor \hat{A}_T už komutuje vždy. Z předchozího vyjádření je vidět, že operátory \hat{A}_T a \hat{H} mají společné vlastní podprostory, takže

$$[\hat{A}_T, \hat{H}] = 0$$

a díky tomu je pozorovatelná operátoru \hat{A}_T nezávislá na čase.

Při výpočtu mřížky se budeme zajímat o střední časovou hodnotu A_T

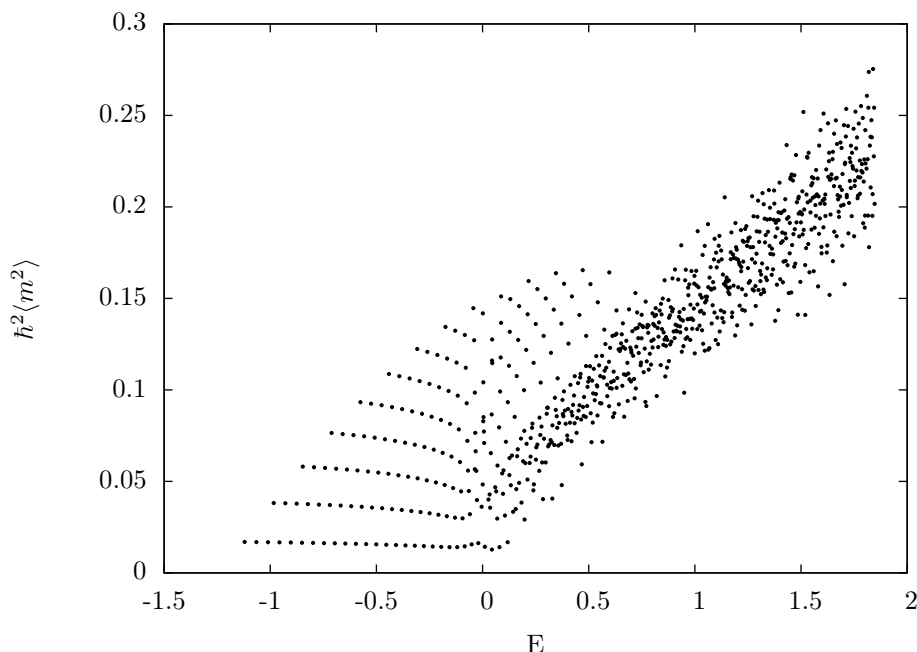
$$A_T = \langle \psi_0 | \hat{A}_T | \psi_0 \rangle = \sum_E \langle \psi_0 | \psi_E \rangle \langle \psi_E | \hat{A} | \psi_E \rangle \langle \psi_E | \psi_0 \rangle.$$

Ve speciálním případě, kdy je systém ve stacionárním stavu, tj. $|\psi_0\rangle = |\psi_{E_0}\rangle$, platí nijak překvapivý výsledek

$$A_T = \sum_E \delta_{E_0,E} \langle \psi_E | \hat{A} | \psi_E \rangle = \langle \psi_{E_0} | \hat{A} | \psi_{E_0} \rangle.$$

4.3 Numerické výsledky

Nyní využijeme výsledky týkající se diagonalizace obecného GCM hamiltoniánu, odvozené v kapitole 3. Konkrétní motivací je výpočet Peresových mřížek a vlnových funkcí GCM pro $L = 0$ a srovnání výsledků pro regulární a chaotické části spekter.



Obrázek 4.1: Peresova mřížka 2D GCM ODD pro $\hbar = 0.02$, $A = -1$, $B = 1.09$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.

4.3.1 Peresovy mřížky

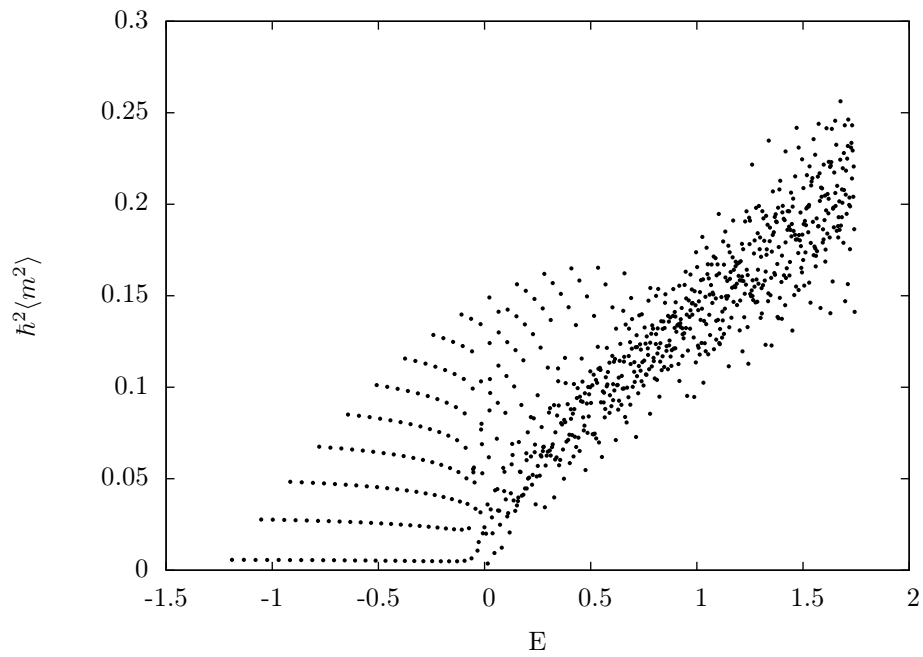
Pro výpočet Peresovy mřížky je potřeba zvolit vhodnou veličinu pro konstrukci Peresova invariantu. V našem případě se přirozeně nabízí

- (a) kvadrát momentu hybnosti s vlastními hodnotami $\hbar^2 m^2$ pro 2D GCM,
- (b) operátor seniority $\hat{\Lambda}^2$ s vlastními hodnotami $\hbar^2 \lambda(\lambda + 3)$ pro 5D GCM.

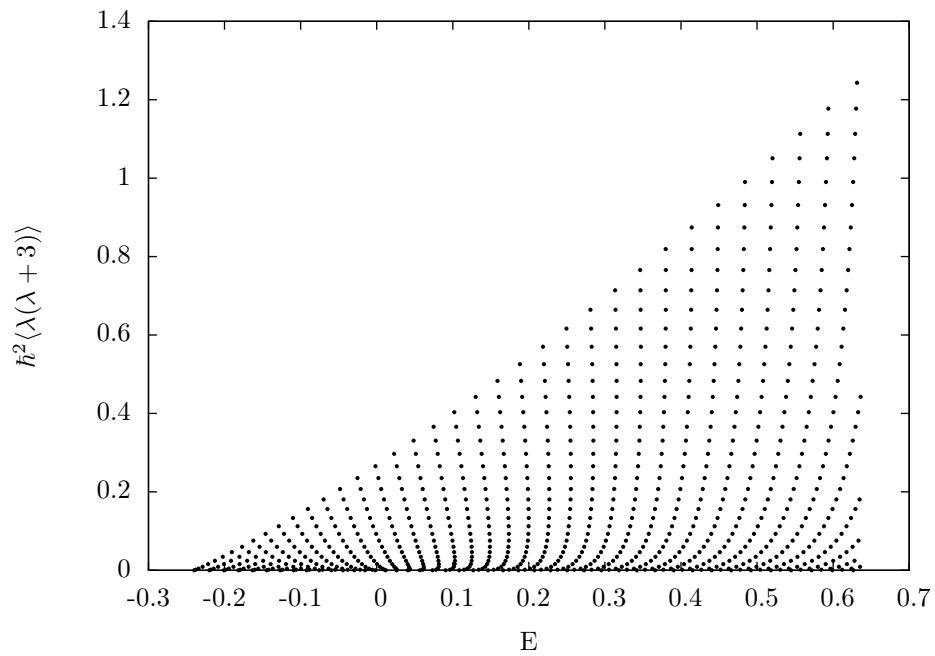
Chaotické vlastnosti kvantových spekter a Peresových mřížek modelů 2D GCM EVEN, 2D GCM ODD a 5D GCM by měly být vzhledem ke společné klasické limitě stejné. Ukazuje se, že Peresovy mřížky jsou skutečně velmi podobné, jak je vidět z obrázků 4.1, 4.2 a 4.11. Vzhledem k tomu, že se mřížky jednotlivých modelů liší jen minimálně i pro ostatní hodnoty parametrů, budeme se dále soustředit výhradně na model 5D GCM. Dodatečné výsledky pro 2D GCM budou součástí připravované publikace [7].

Pro $B = 0$ je klasický systém integrabilní. Zachovává se moment hybnosti a energie systému. Na obrázku 4.3 je příslušná Peresova mřížka. Je zajímavé, že i malé narušení potenciálu ($B = 0.005$) způsobí částečné zborcení mřížky, jak je vidět na obrázku 4.4.

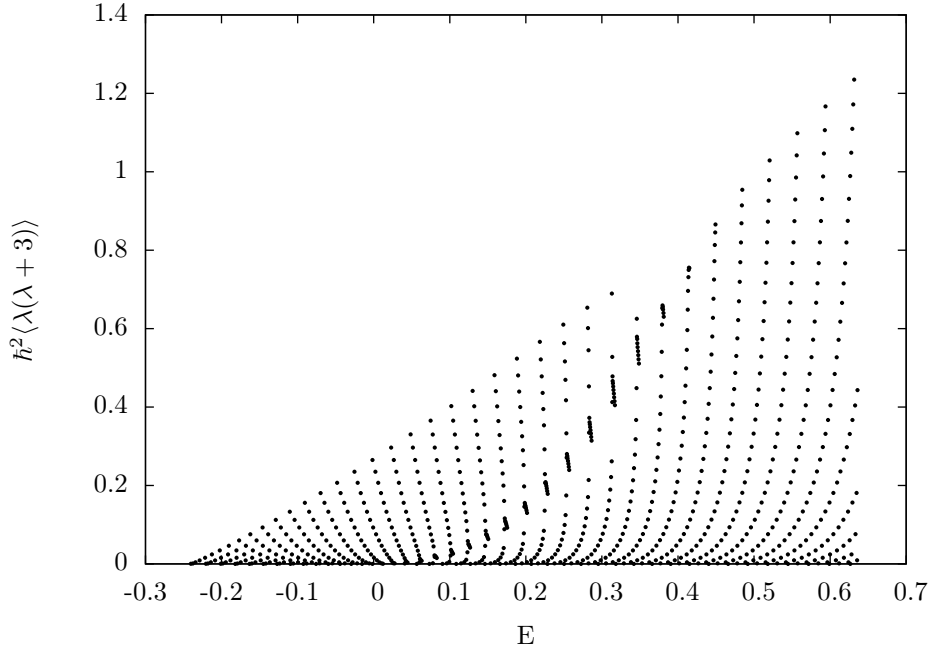
Peresovu mřížku budeme srovnávat s klasickou mírou chaosu f_{reg} spočítanou v [5]. $f_{\text{reg}}(E)$ nabývá hodnoty od 0 do 1. Udává jaká část trajektorií má chaotický průběh pro danou energii. Hodnota 1 odpovídá úplně regulárnímu systému, hodnota 0 odpovídá úplně chaotickému systému. Kromě toho máme k dispozici výsledky statistické analýzy spekter [7], ve kterých je fitován Brodyho



Obrázek 4.2: Peresova mřížka 2D GCM EVEN pro $\hbar = 0.02$, $A = -1$, $B = 1.09$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.



Obrázek 4.3: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.01$, $A = -1$, $B = 0$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.



Obrázek 4.4: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.01$, $A = -1$, $B = 0.005$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.

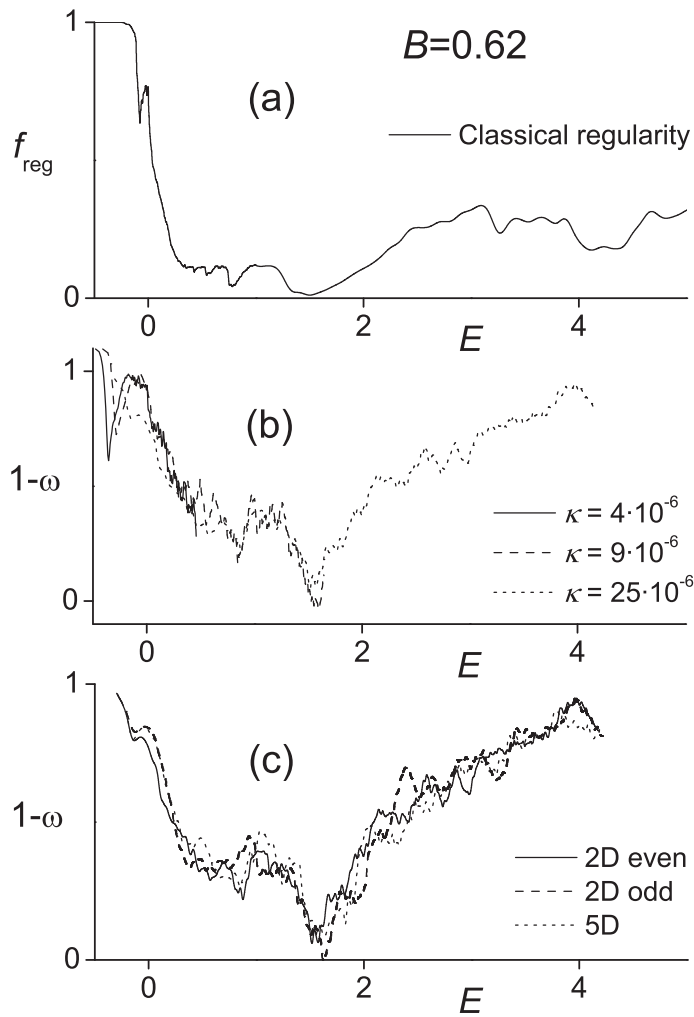
parametr ω z Brodyho rozdělení (4.1). Výsledky pro 5D GCM s potenciálem parametrizovaným $A = -1$, $B = 0.62$, $C = 1$ a $K = 1$ jsou na obrázku 4.5.

V kvantovém případě máme navíc parametr \hbar . Jeho velikost určuje celkovou hustotu spektra. Pro malé \hbar jsou hladiny blíž u sebe. Výpočetní možnosti jsou omezené jen na určitý počet hladin³, takže \hbar vlastně určuje horní mez energie spočítaného spektra. Vzhledem k povaze statistického vyhodnocení je možné určit míru chaosu jen pro interval hladin obsahující minimálně desítky hladin. Proto jsou křivky s větší Planckovou konstantou hladší. Menší Planckova konstanta sice neumožňuje zkoumat spektrum pro vyšší energie, ale zato je možné odhalit detaily průběhu chaosu pro malé hodnoty energií. Menší hodnoty \hbar by také měly lépe odpovídat klasické limitě $\hbar \rightarrow 0$.

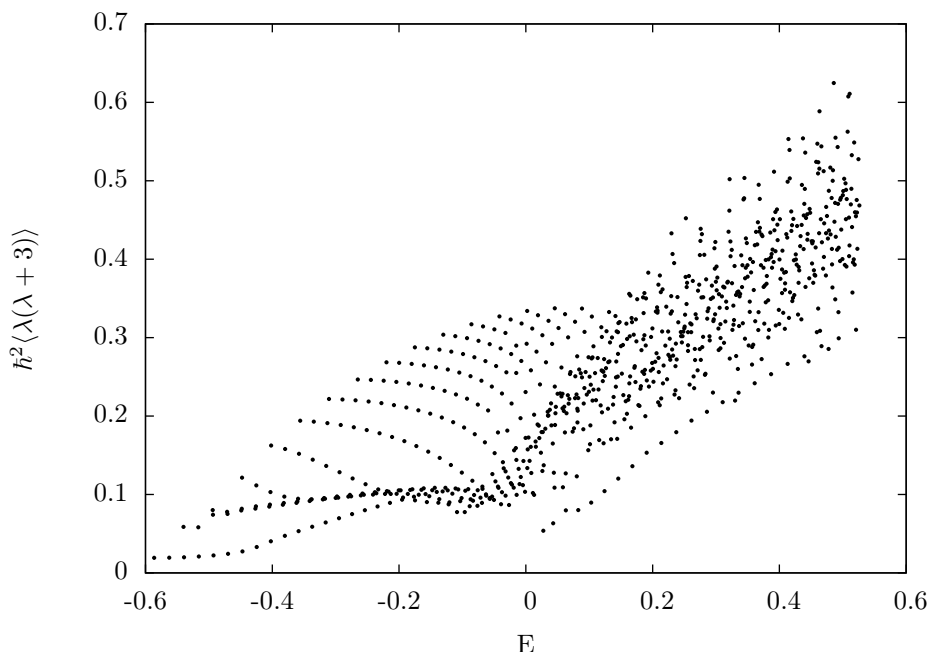
Výsledky v části (c) obrázku 4.5 srovnávají obě varianty 2D GCM s 5D GCM. Celkově se křivky příliš neliší. Korespondence mezi f_{reg} a $1 - \omega$ je spíše kvalitativní, protože jde o odlišné míry chaosu a není důvod předpokládat, že Brodyho parametr ω je přímo podíl chaotických trajektorií.

Podívejme se nyní na srovnání f_{reg} s Peresovými mřížkami pro 5D GCM na obrázcích 4.6, 4.7, 4.8, které byly spočítány v rámci této práce. Jako Peresův invariant byla použita vlastní hodnota seniority $\lambda(\lambda + 3)$, vynásobená \hbar^2 , aby bylo možné obrázky srovnávat. Každý obrázek obsahuje 800 bodů. Obrázky se liší různě velkými hodnotami \hbar . Na obrázku 4.6 je vidět regularita pro záporné energie, která u nuly začíná postupně přecházet v chaos. V grafu pro f_{reg} je těsně pod nulou vidět zavlhnutí, jehož špička je mírně patrná i v Peresově mřížce

³Výpočetní doba na běžném PC je řádově hodiny pro ≈ 1000 hladin, ale roste silně nelineárně.



Obrázek 4.5: Klasická míra chaosu (a) je porovnána se statistickým vyhodnocením hladin (b), (c) pomocí Brodyho rozdělení. Parametry systému jsou $A = -1$, $B = 0.62$, $C = 1$ a $K = 1$. Parametr $\kappa = \hbar^2/K$. Na obrázku (b) jsou porovnány výsledky pro různě velké hodnoty \hbar . Obrázek (c) srovnává výsledky pro 2D GCM ODD, 2D GCM EVEN a 5D GCM. Převzato z [7, 5].

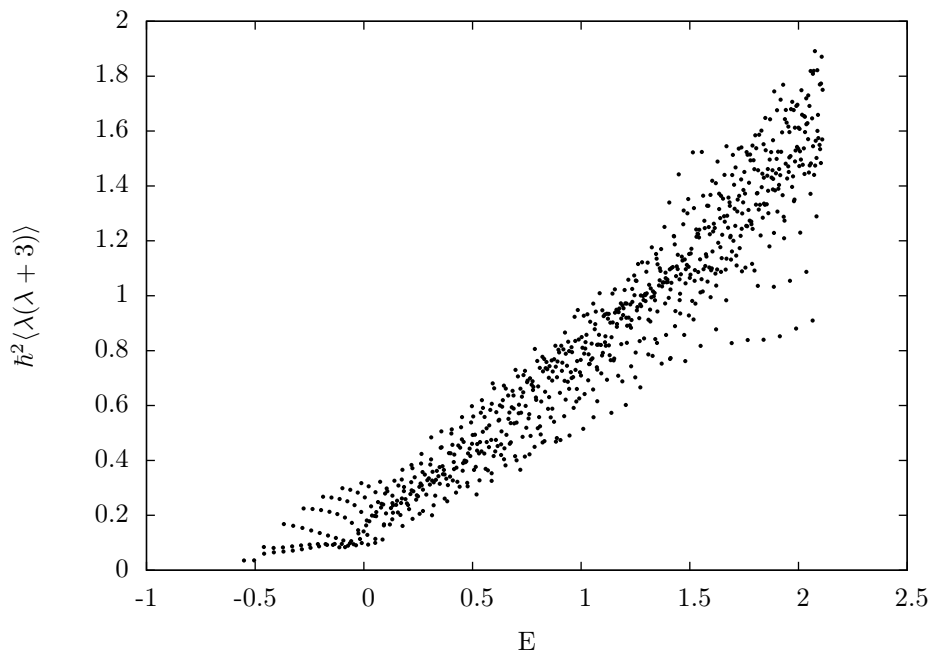


Obrázek 4.6: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.01$, $A = -1$, $B = 0.62$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.

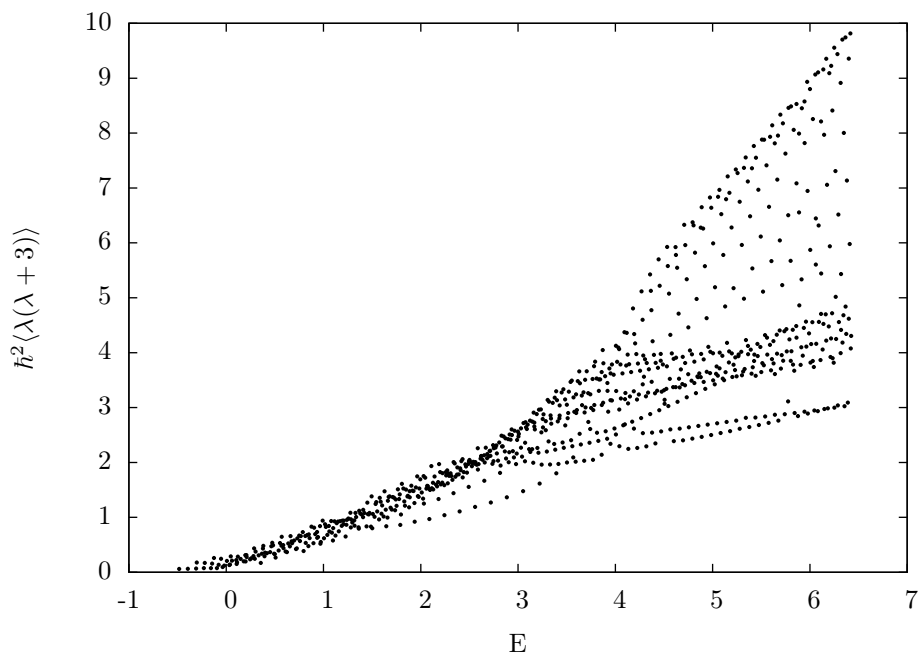
pro $E = -0.05$ a $\hbar^2\lambda(\lambda + 3) = 0.1$. Obrázek 4.7 není příliš zajímavý, ukazuje pokračující chaotické chování systému. Pro hodnoty $E = 2$ je patrné vydělení tří „řetízků“ pravidelné mřížky z jinak chaotického shluku bodů. To dobře koresponduje s f_{reg} , jehož hodnoty pro tuto energii zvolna rostou. Tento trend pokračuje i na obrázku 4.8, i když úplně pravidelná mřížka podobná té pro záporné energie už se neobjevuje. To také dobře odpovídá hodnotám f_{reg} , které jsou rovny řádově 0.3 až 0.4.

Druhá hodnota B , použitá pro srovnání s ostatními mírami chaosu, je $B = 1.09$, ostatní parametry se nemění. Příslušné grafy jsou na obrázku 4.9. I v tomto případě nastává v okolí nulové energie prudký pokles regularity, který je velmi dobře vidět v Peresově mřížce na obrázku 4.10. Po prudkém poklesu nastane částečné obnovení pro hodnoty těsně nad nulou, což je v Peresově mřížce dobře patrné. Pravidelná struktura se pak s rostoucí energií vytrácí a pro $E = 1$ mizí úplně, což opět dobře koresponduje s obrázkem 4.11. Podle klasických výsledků je v oblasti $E = 1$ až $E = 3$ systém zcela chaotický. Od $E = 3$ dochází k poměrně rychlému nárůstu regularity, který ale nedosahuje takových hodnot, aby vytvořil úplně pravidelnou mřížku. I tak je na obrázcích 4.12 a 4.13 vidět, že se něco děje. Minimum pro $E = 11$ není moc dobře vidět. Pro vyšší hodnoty energií je dominantní kvartický člen a systém se začíná chovat jako integrabilní. Tomu odpovídá postupný nárůst regularity, který je pro nejvyšší energie vidět i na obrázku 4.13.

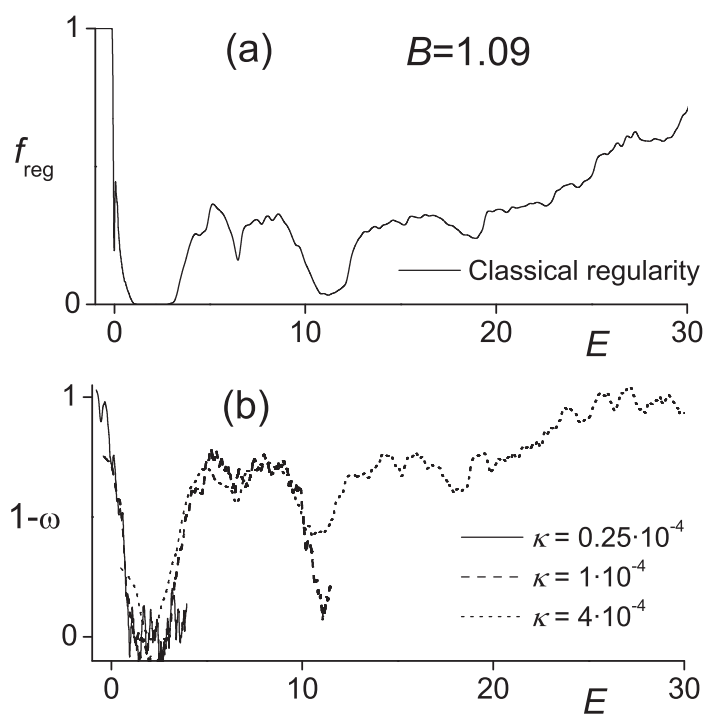
Interaktivní trojrozměrné vizualizace Peresových mřížek lze nalézt na příloženém CD. V těchto vizualizacích se kromě energie a Peresova invariantu zobrazuje také osa řídicího parametru B , což je vhodné pro znázornění dynamiky



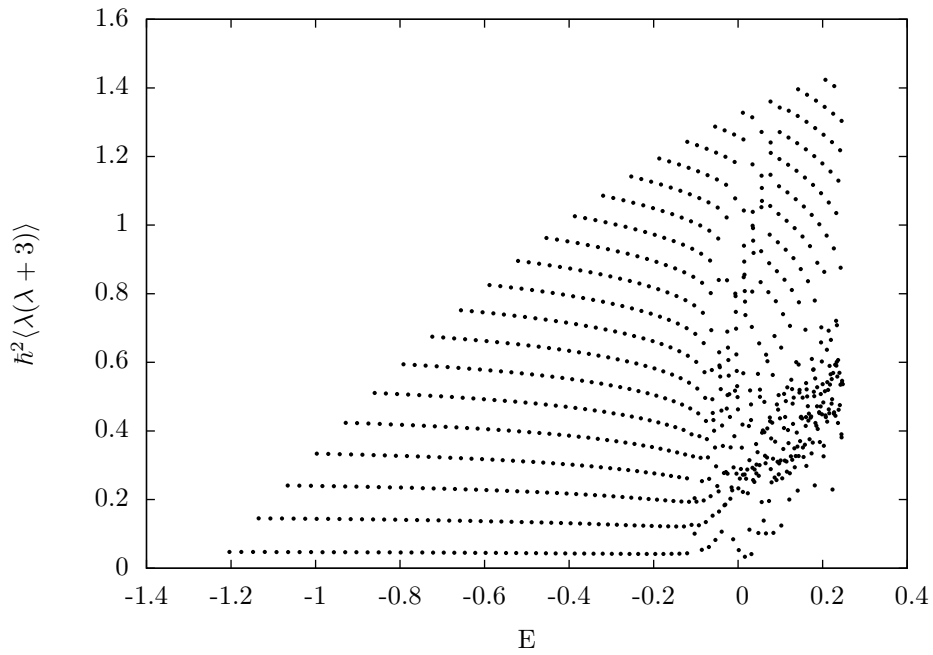
Obrázek 4.7: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.02$, $A = -1$, $B = 0.62$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.



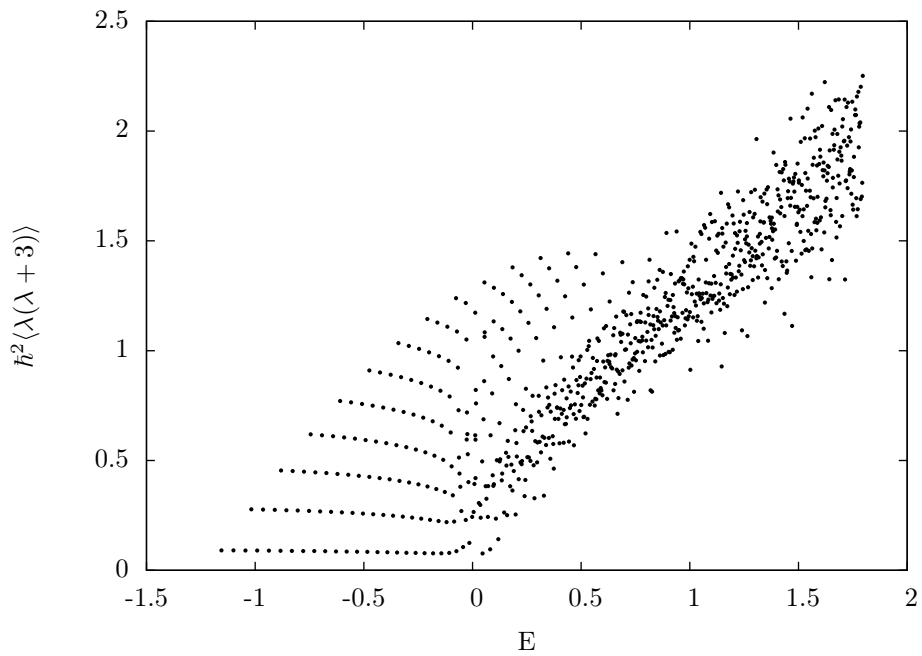
Obrázek 4.8: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.04$, $A = -1$, $B = 0.62$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.



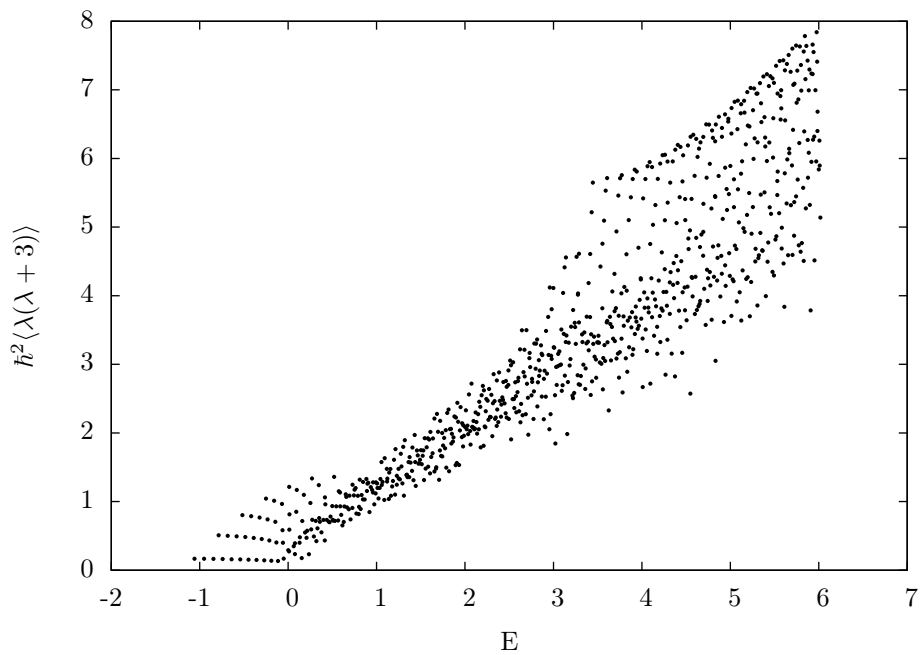
Obrázek 4.9: Klasická míra chaosu (a) je porovnána se statistickým vyhodnocením hladin (b) pomocí Wignerova rozdělení. Parametry systému jsou stejné jako na obrázku 4.5 s výjimkou $B = 1.09$. Převzato z [5, 7].



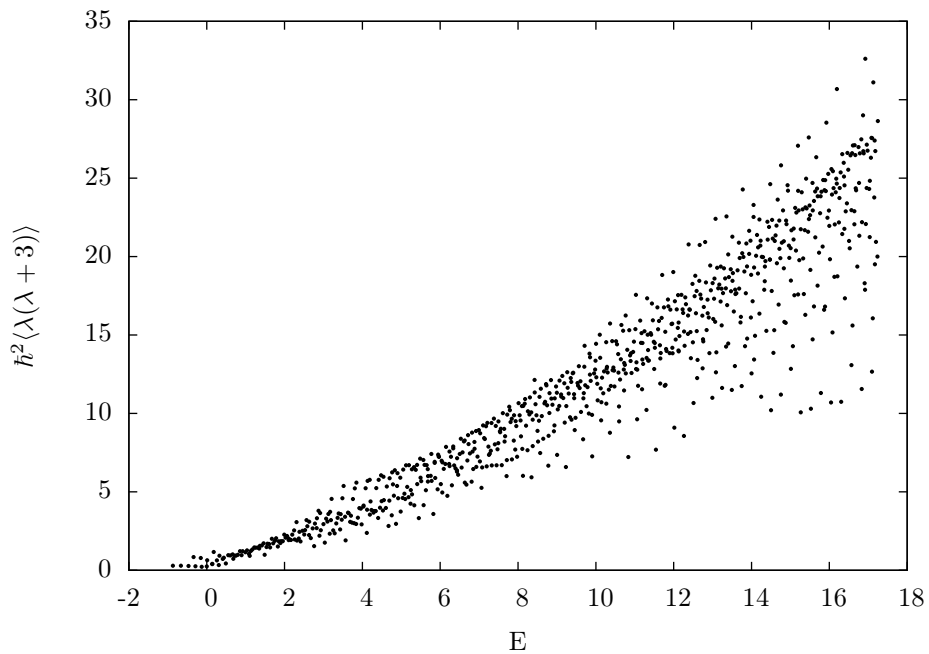
Obrázek 4.10: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.01$, $A = -1$, $B = 1.09$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.



Obrázek 4.11: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.02$, $A = -1$, $B = 1.09$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.



Obrázek 4.12: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.04$, $A = -1$, $B = 1.09$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.



Obrázek 4.13: Peresova mřížka 5D GCM pro $\hbar = 0.08$, $A = -1$, $B = 1.09$, $C = 1$, $K = 1$, 800 nejnižších hladin.

změn vlnových funkcí odpovídajících jednotlivým vlastním stavům. Mj. se zde dají studovat případy odvrácených křížení hladin, při kterých dochází k velmi rychlým strukturním změnám zúčastněných stavů. Popis programů je uveden v dodatku D.

4.3.2 Vlnové funkce

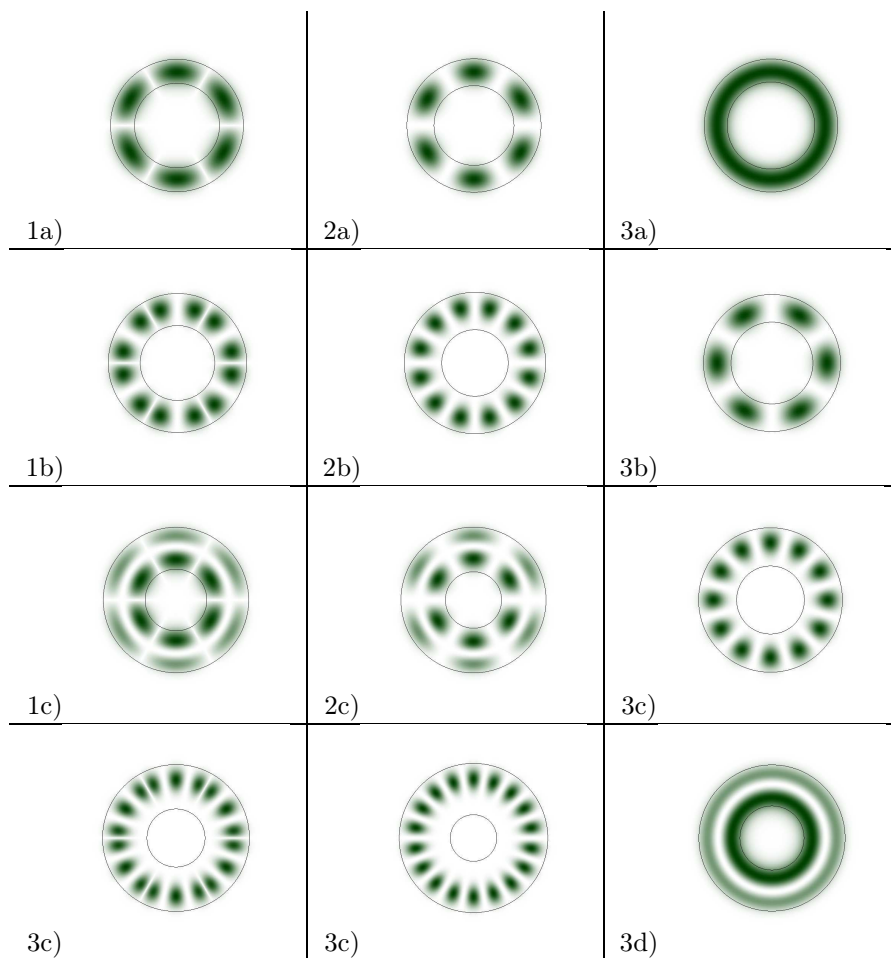
Na závěr uvedeme několik zobrazení kvadrátu vlnových funkcí, které jsou v případě 5D GCM vynásobeny objemovým elementem. Spíše než o kvantitativní výsledky nám jde o názornou představu jak vlnové funkce vypadají v jednotlivých modelech a jak se vizuálně liší vlnová funkce z chaotické oblasti Peresovy mřížky od chaotické funkce z regulární oblasti. Všechny vlnové funkce mají parametry $A = -1$, $C = 1$, $K = 1$, $\hbar = 0.04$ a liší se jen hodnotou B .

Na obrázku 4.14 jsou vlnové funkce pro modely s parametrem $B = 0$. Integrabilita systému se projevuje pravidelnými tvary. Objemové elementy v případě 5D GCM a lichost báze 5D GCM ODD se projeví už pro základní stavy. I když výpočetní báze 2D GCM EVEN je o něco podobnější 5D GCM (úhlové části v obou případech závisí na $\cos 3\gamma$), právě lichost objemového elementu $\beta^4 |\sin 3\gamma|$ u 5D GCM způsobí, že vyobrazení vlnových funkcí 5D GCM je podobnější modelu 2D GCM EVEN.

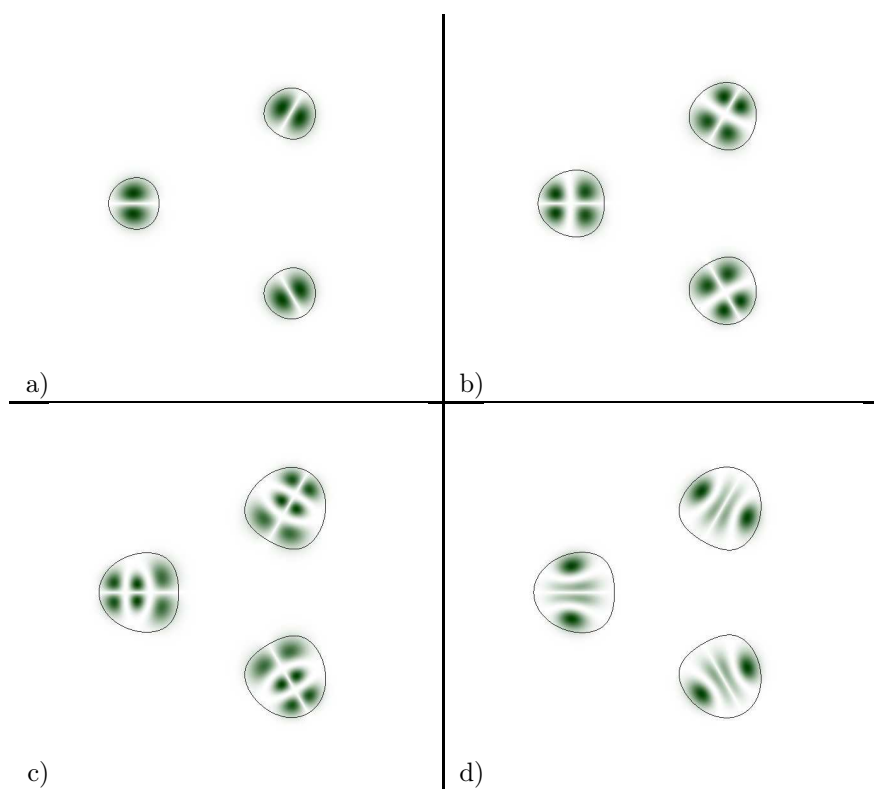
Pro nenulovou hodnotu B má potenciál tři minima, ve kterých se dá aproximovat pomocí dvourozměrných kvadratických potenciálů. Vlnové funkce na obrázku 4.15 pro nejnižší stavy jsou podobné řešení 2D harmonického oscilátoru⁴ a jsou regulární (viz obr. 4.9).

Při zvyšující se energii se hranice klasicky dostupných oblastí slijí. Pro určitý obor hodnot B je klasicky dostupná oblast nekonvexní, tj. má některé části hranice vypouklé dovnitř oblasti. Systémy s touto vlastností jsou obecně náchylné ke vzniku chaosu. Příklady regulárního a chaotického stavu jsou vidět na obrázku 4.16.

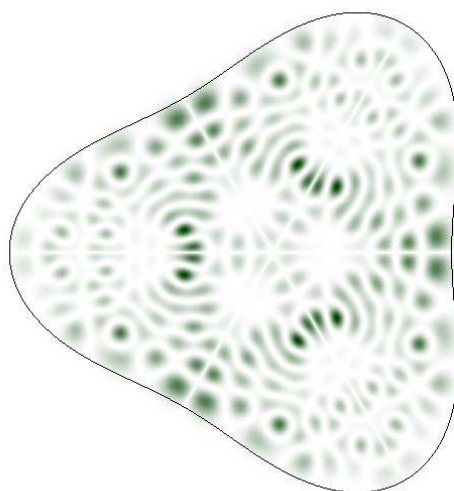
⁴Polární souřadnice se v okolí daného minima chovají podobně jako kartézské. Funkce vypadá jako řešení oscilátoru v bázi hermitových polynomů.



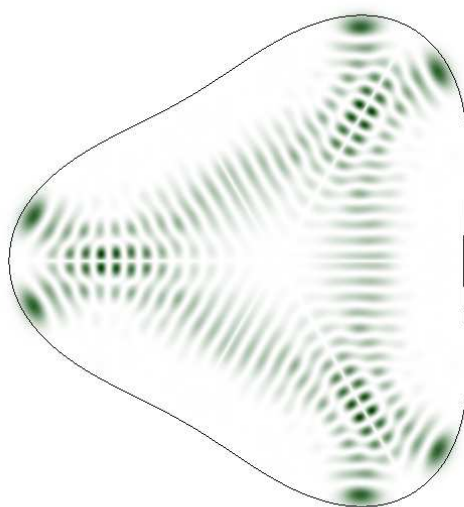
Obrázek 4.14: Vlnové funkce nejnižších stavů pro $A = -1, B = 0, C = 1, K = 1, \hbar = 0.04$. 5D GCM je na 1a), 1b), 1c), 1d), 2D GCM ODD na 2a), 2b), 2c), 2d) a 2D GCM EVEN na 3a), 3b), 3c), 3d). Sudá báze ve 2D GCM EVEN způsobí „jeden stav navíc“ na obr. 3a). Křivky na obrázcích vyznačují klasicky dostupné oblasti.



Obrázek 4.15: Vlnové funkce prvních čtyř stavů 5D GCM pro $A = -1, B = 0.62, C = 1, K = 1, \hbar = 0.04$. Křivky na obrázcích vyznačují klasicky dostupné oblasti.



a)



b)

Obrázek 4.16: Vlnové funkce 59. a 75. stavu 5D GCM pro $A = -1$, $B = 0.62$, $C = 1$, $K = 1$, $\hbar = 0.04$. Křivky na obrázcích vyznačují klasicky dostupné oblasti. Obrázek a) ukazuje typicky chaotickou funkci, zatímco obrázek b) funkci regulární.

Shrnutí a závěry

V této práci jsme zavedli geometrický model jádra a provedli důkladný rozbor jeho kvantování. Případný zájemce o tuto problematiku má v této práci k dispozici příručku, která obsahuje mnohé technické detaily.

Pozornost byla věnována především stavům s nulovým momentem hybnosti, pro něž máme k dispozici předchozí výsledky týkající se klasického chaosu. S omezením na tyto stavy existují dva přirozené způsoby kvantování: (a) kvantování dvou vibračních stupňů volnosti při zmrazených Eulerových úhlech (tuto možnost jsme označili jako 2D GCM) a (b) kvantování všech pěti kinematických proměnných s následným výběrem stavů s nulovým momentem hybnosti (tato možnost představuje standardní GCM pro $L = 0$, my jsme ji v zájmu přehlednosti označili jako 5D GCM). Ačkoliv obě tyto verze kvantového geometrického modelu vycházejí ze stejného klasického základu, jim odpovídající kvantová spektra se mírně liší. Tato nejednoznačnost skýtá zajímavou možnost srovnání korespondence mezi klasickými a kvantovými mírami chaosu při různých způsobech kvantování.

Byly odvozeny analytické výrazy pro výpočet maticových elementů GCM hamiltoniánu v bázi 2D a 5D harmonického oscilátoru. Jejich použití bylo demonstrováno na Peresových mřížkách, které představují alternativní a dosud ne plně standardní nástroj pro analýzu kvantového chaosu. Ukázali jsme velmi dobrou shodu Peresových mřížek s mírami chaosu založenými na spektrálních korelacích a na Poincarého řezech. Analytické výrazy odvozené v této práci a některé numerické výpočty jsou součástí připravované publikace [7], ve které je provedeno systematictější srovnání klasických a kvantových měr chaosu pro oba způsoby kvantování.

Odvozené výrazy pro maticové elementy a numerické programy na příloženém CD mohou posloužit k výpočtům pro další konfigurace GCM, k dvojrozměrné i trojrozměrné vizualizaci Peresových mřížek a vlnových funkcí.

Dodatky

A Přidružené Laguerrovy polynomy

Polynom $L_n^\alpha(x)$ je přidružený Laguerrov polynom⁵. Index $n = 0, 1, 2, \dots$ je nezáporné celé číslo, které určuje stupeň polynomu. Parametr α může být libovolné reálné číslo. Polynomy jsou definované pomocí vztahu

$$e^{-x} x^\alpha L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n [e^{-x} x^{n+\alpha}].$$

První dva polynomy jsou

$$\begin{aligned} L_0^\alpha(x) &= 1 \\ L_1^\alpha(x) &= 1 + \alpha - x. \end{aligned}$$

Další se dají získat pomocí rekurentní relace

$$(n+1)L_{n+1}^\alpha(x) - (2n+\alpha+1-x)L_n^\alpha(x) + (n+\alpha)L_{n-1}^\alpha(x) = 0.$$

Přidružená Laguerrova rovnice má tvar

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0. \quad (\text{A.1})$$

Je-li n je nezáporné celé číslo, redukuje se řešení na polynom. Není-li takto podmínka splněna, chová se řešení jako e^x . Laguerrovy polynomy jsou polynomiálním řešením přidružené Laguerrovy rovnice s okrajovou podmínkou $y(0) \neq 0$.

Pro výpočet integrálů je užitečná generující funkce

$$\frac{1}{(1-\xi)^{\alpha+1}} \exp\left(-\frac{x\xi}{1-\xi}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(x) \xi^n. \quad (\text{A.2})$$

B Legendreovy polynomy

Legendreovy polynomy jsou definovány jako

$$P_\mu(x) = \frac{1}{2^\mu \mu!} \frac{d^\mu}{dx^\mu} (x^2 - 1)^\mu \quad (\text{B.1})$$

⁵Někdy též zobecněný Laguerrov polynom

První dva polynomy jsou

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \end{aligned}$$

a další se dají spočítat například pomocí rekurentního vztahu

$$xP_\mu(x) = \frac{1}{2\mu+1} [(\mu+1)P_{\mu+1}(x) + \mu P_{\mu-1}(x)]. \quad (\text{B.2})$$

Pro výpočet normalizačních koeficientů a maticových elementů je užitečný vzorec

$$\int_{-1}^1 P_\mu(x)P_\nu(x)dx = \delta_{\mu,\nu} \frac{2}{2\mu+1}. \quad (\text{B.3})$$

C EBK aproximace

EBK aproximace je pojmenována po Einsteinovi, Brillouinovi a Kellerovi, viz [19]. Autorem základní myšlenky je Einstein, který v již roce 1917 zobecnil tehdy známé Bohr-Sommerfeldovo kvantovací pravidlo

$$\int p dq = \int_0^T p \frac{dq}{dt} dt = 2\pi n \hbar.$$

Toto pravidlo ve své základní variantě neumožňovalo kvantovat složitější systémy, které mají více než jeden stupeň volnosti. Zobecnění na více stupňů volnosti je však poměrně přímočaré. Pokud má systém více stupňů volnosti, které na sebe nejsou nijak vázány, tj. systém v podstatě vykonává několik jednorozměrných nezávislých pohybů, pak je možné systém kvantovat pomocí Bohr-Sommerfeldova pravidla. Stačí pravidlo použít na každou dvojici p_i , q_i zvlášť. V případě systému, kde jednotlivé pohyby nejsou separovatelné, nelze Bohr-Sommerfeldovo pravidlo použít. Nepříjemnou vlastností této aproximace je závislost formulace na volbě souřadnic, protože integrál přes $p_i dq_i$ není invariant.

Einstein pro systémy, které dnes označujeme jako integrabilní, našel formulaci kvantovacích podmínek, která je nezávislá na použitých souřadnicích. Vyšel ze známého faktu, že veličina $\int \sum p_i dq_i$ je nezávislá na volbě souřadnic, neboť je až na konstantu rovna akci

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^n p_i dq_i &= \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^n m \dot{q}_i^2 dt = \\ &= \int_{t_i}^{t_f} 2T dt = \int_{t_i}^{t_f} (L(q_i, \dot{q}_i) + E) dt = S + E(t_f - t_i). \end{aligned}$$

Z tvaru integrálu $\int \sum p_i dq_i$ na levé straně lze formálně spočítat gradient akce

$$\nabla S = \mathbf{p}(\mathbf{r}).$$

Tento vztah už na první pohled nemůže obecně platit, protože hybnost není funkcí souřadnice. Například u lineárního harmonického oscilátoru je pro danou hodnotu energie hybnost určena předpisem $p(x) = \pm \sqrt{2m[E - V(x)]}$. Vidíme,

že pro některé systémy je sice funkce $\mathbf{p}(\mathbf{r})$ nejednoznačná, ale počet hodnot je konečný. Einstein omezil platnost svého postupu právě na takové systémy. Pokud má funkce $\mathbf{p}(\mathbf{r})$ konečný počet hodnot pro každý bod, je možné zavést topologicky složitější prostory, na kterých už je nejednoznačnost odstraněna. Pro harmonický oscilátor můžeme zavést kružnici v rovině (p, x) . Kvantovací podmínka se teď vztahuje na kružnici a platí

$$\oint_C p dq = 2\pi n \hbar.$$

O integrovatelných systémech je známo, že je možné zobrazit jejich pohyb na n -rozměrný torus. Právě tímto směrem postupoval dále Einstein. Na n -rozměrném toru lze nalézt právě n topologicky nezávislých uzavřených smyček a kvantovací podmínku požadovat pro každou z nich

$$\oint_{C_i} p_i dq_i = 2\pi n_i \hbar.$$

Pro podrobnější informace o EBK a historických souvislostech odkazujeme na souhrnný článek [20].

D Programy pro výpočty v GCM

Na příloženém CD jsou programy a jejich zdrojové kódy, které byly použity k výpočtům numerických výsledků. Všechny utility byly naprogramovány v prostředí Microsoft Visual C#. Základní program je *Diplomka.exe*, který spočítá energie, vektory vlastních stavů a Peresovy mřížky pro zadané parametry hamiltoniánu. Kromě obvyklých parametrů A , C , K a \hbar umožňuje volit i požadovaný počet stavů a model. Parametr B je možné zadat jako interval rozdělený na nastavitelný počet kroků. Program pak diagonalizuje postupně pro všechny parametry B z tohoto intervalu. Výsledek je uložen do jednoho souboru ve formátu XML. Formát souboru je čitelný v běžném textovém editoru. Význam dat je zřejmý z jmen XML tagů.

S výstupem programu *Diplomka.exe* pracují ostatní utility. *Mřížky.exe* zobrazí Peresovy mřížky uložené v souboru a umožňuje sledovat vliv změny parametru B . Pro kvalitativní posouzení vlivu B na Peresovu mřížku se může hodit program *OpenGL.exe*, který hodnoty B použije jako třetí osu a zobrazí sadu mřížek jako trojrozměrný model.⁶ Poslední program je *WaveFunctions.exe*, který umožňuje prohlížet a ukládat hustotu pravděpodobnosti vlnových funkcí.

⁶Je potřeba volit velkou Planckovu konstantu a nízký počet stavů, jinak je trojrozměrný model značně nepřehledný. Taková data obsahuje například soubor *vizualizace.xml*.

Literatura

- [1] J.M. Eisenberg, W. Greiner, *Nuclear Theory*, Vol. 1, *Nuclear Models* (North-Holland, Amsterdam, 1970).
- [2] S. Bell, J. Phys. B: At. Mol. Phys., **3** 735 a 745 (1970).
- [3] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, New York, 1990).
- [4] A. Peres, Phys. Rev. Lett. **53**, 1711 (1984).
- [5] P. Stránský, diplomová práce, ÚČJF MFF UK (2000).
- [6] P. Cejnar, P. Stránský, Phys. Rev. Lett. **93**, 102502 (2004).
- [7] P. Stránský, P. Hruška, P. Cejnar, in preparation (2008).
- [8] P. Stránský, M. Kurian, P. Cejnar, Phys. Rev. C **74**, 014306 (2006).
- [9] H.-J. Stöckmann, *Quantum Chaos. An Introduction*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [10] C.E. Porter, *Statistical Theories of Spectra: Fluctuations*, (Academic Press, New York, 1965).
- [11] K. Kumar, M. Baranger, Nucl. Phys., **A92** 608 (1967).
- [12] A. Bohr, Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-Fys. Medd. **26**, No. 14 (1952).
- [13] G. Gneuss, U. Mosel, W. Greiner, Phys. Lett. **30B** 397 (1969);
G. Gneuss, U. Mosel, W. Greiner, Phys. Lett. **31B** 269 (1970);
G. Gneuss, W. Greiner, U. Mosel, Phys. Lett. **32B** 161 (1970);
G. Gneuss, W. Greiner, Nucl. Phys. **A171** 449 (1971).
- [14] D. Troltenier, J.A. Maruhn, P.O. Hess, *Numerical Application of the Geometric Collective Model*, in: *Computational Nuclear Physics 1*, (Springer-Verlag, Heidelberg 1991).
- [15] A. Bohr, B. Mottelson, *Nuclear Structure, Vol. II*, (Benjamin Reading, Mass. 1975).
- [16] E. Chacón, M. Moshinsky, J. Math. Phys. **17**, 668 (1975);
E. Chacón, M. Moshinsky, J. Math. Phys. **18**, 870 (1977).

- [17] J. Formánek, *Úvod do kvantové teorie* (Academia, Praha, 1983).
- [18] F.J. Margetan, S.A. Williams, Phys. Rev. C **25**, 1602 (1981).
- [19] A. Einstein, Verh. Dtsch. Phys. Ges. **19**, 82 (1917); L. Brillouin, J. Phys. Radium **7**, 353 (1926); B. Keller, Ann. Phys. (N.Y.) **4**, 180 (1958).
- [20] A.D. Stone, Physics Today **58**, no.8, p.37 (2005).