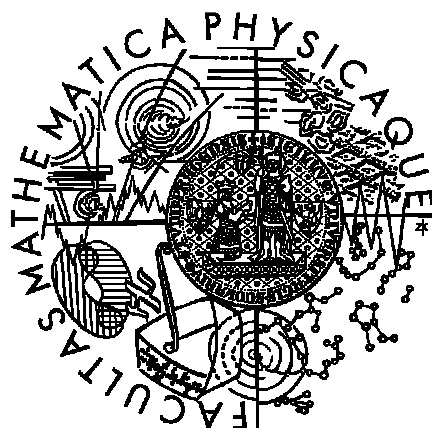


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Martin Dvořák

Kvantové a termální fázové přechody v atomových jádrech

Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Pavel Cejnar, Dr., DSc.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2012

Na tomto místě bych rád poděkoval svému vedoucímu prof. RNDr. Pavlu Cejnarovi, Dr., DSc. za jeho cenné rady, konzultace a připomínky při psaní této bakalářské práce.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova v Praze má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle § 60 odst. 1 autorského zákona.

V Praze dne 1.8.2012

Martin Dvořák

Název práce: Kvantové a termální fázové přechody v atomových jádrech

Autor: Martin Dvořák

Katedra (ústav): Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Pavel Cejnar, Dr., DSc.

Abstrakt: V této bakalářské práci jsou studovány fázové přechody v atomových jádrech. Hlavní pozornost je věnována kvantovým fázovým přechodům mezi základními stavy jádra o různé symetrii. Nejprve je představen model interagujících bosonů ve své nejjednodušší verzi, IBM-1. Je naznačena souvislost IBM s geometrickým modelem jádra a jsou představeny možné tvary jádra v základním stavu. Dále jsou podrobně zkoumány kritické a degenerované kritické body potenciálu odvozeného z modelu IBM-1, a to v závislosti na hodnotách parametrů tohoto potenciálu. Degenerované kritické body jsou klasifikovány v rámci teorie katastrof. Jsou nalezeny hodnoty parametrů potenciálu, při nichž dochází k fázovým přechodům prvního a druhého řádu. Na závěr je diskutována možnost nahrazení potenciálu na okolí degenerovaných kritických bodů kanonickými katastrofickými funkcemi.

Klíčová slova: fázový přechod, model interagujících bosonů, teorie katastrof

Title: Quantal and thermal phase transitions in atomic nuclei

Author: Martin Dvořák

Department: Institute of Particle and Nuclear Physics

Supervisor: prof. RNDr. Pavel Cejnar, Dr., DSc.

Abstract: In this bachelor work phase transitions in atomic nuclei are studied. The main attention is paid to quantal phase transitions between nuclear ground states of different symmetry. First, the interacting boson model in its simplest version, IBM-1, is introduced. The correspondence between the IBM and the geometric model of nuclei is indicated and possible shapes of the nucleus in the ground state are introduced. In the next step, critical and degenerated critical points of the potential derived from the IBM-1 are investigated in detail, especially their dependence on parameter values of the potential. Degenerated critical points are classified using the catastrophe theory. The special values of potential parameters are found for which phase transitions of the first and second order occur. Finally, the possibility of substitution of the potential by canonical catastrophic functions in a vicinity of degenerated critical points is discussed.

Keywords: phase transition, interacting boson model, catastrophe theory

Obsah

Úvod	1
1 Model interagujících bosonů	4
1.1 Bosonové operátory, hamiltonián, klasická limita	4
1.2 Základní stav, bosonový kondenzát, geometrická interpretace	7
1.3 Kritické chování	17
2 Teorie katastrof	19
2.1 Základní pojmy teorie katastrof	19
2.2 Kritické body potenciálu IBM-1	20
2.3 Souvislost potenciálu IBM-1 a katastrof typu cusp a fold	29
2.4 Geometrie cusp katastrofy	31
Závěr	36
Seznam použité literatury	37

Úvod

Striktně vzato existují fázové přechody pouze v termodynamické limitě, kdy počet částic systému $N \rightarrow \infty$. Pojem fázový přechod označuje skokovou nespojitou změnu stavu systému, která nastává v důsledku spojitě změny jistého řídicího parametru, například teploty, tlaku nebo intenzity magnetického pole. Fázové přechody probíhající při teplotě $T > 0\text{K}$ jsou z mikroskopického pohledu umožněny termálními fluktuacemi a nazývají se proto termální fázové přechody. Podle klasické fyziky ustanou při teplotě $T = 0\text{K}$ veškeré termální fluktuace, systém by se měl nacházet v základním stavu o nejnižší možné energii a nemůže docházet k termálním fázovým přechodům.

Kvantová mechanika však umožňuje fázové přechody i při teplotě absolutní nuly. Řídicím parametrem již nemůže být teplota, ale je jím jiná charakteristika systému, například intenzita vnějšího pole nebo síla interakce mezi částicemi. Termální fluktuace jsou přitom nahrazeny kvantovými fluktuacemi, které vznikají v důsledku Heisenbergových relací neurčitosti. Fázové přechody tohoto typu se nazývají kvantové fázové přechody [1]. Na první pohled se mohou kvantové fázové přechody jevit pouze jako zajímavý abstraktní pojem nemající možnost praktického využití, neboť teplota absolutní nuly je nedosažitelná. Ukazuje se však, že tyto přechody zanechávají stopy v chování systémů i při teplotách $T > 0\text{K}$.

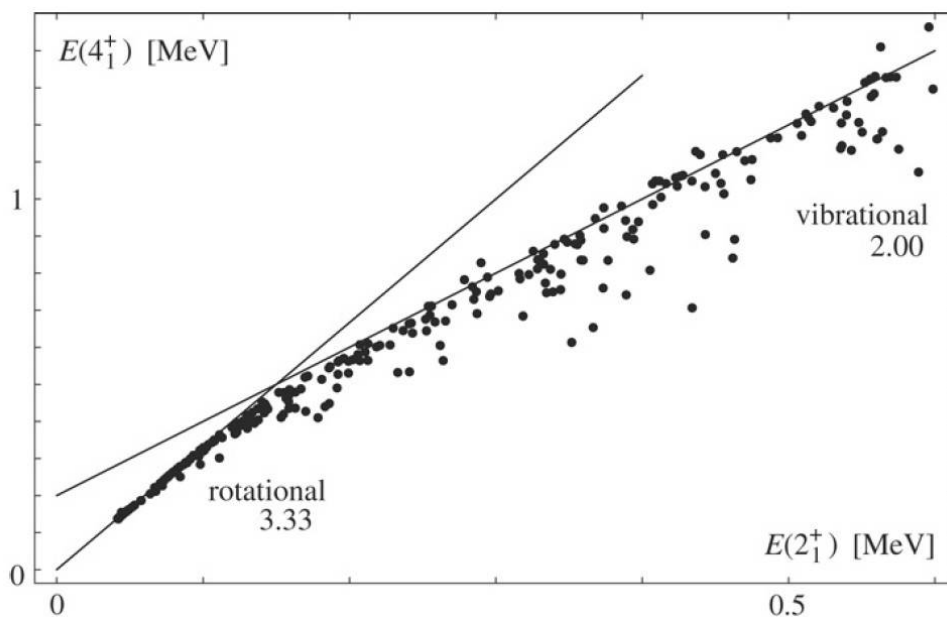
Atomová jádra jsou tvořena jednotkami až stovkami částic. Podmínka $N \rightarrow \infty$ není zdaleka splněna, a proto u nich nelze očekávat skutečné fázové přechody. Nicméně v chování atomových jader můžeme vysledovat prekurzory jak termálních, tak kvantových fázových přechodů. Prekurzorem fázového přechodu se rozumí výrazná změna vlastností systému, která avšak v důsledku konečnosti systému není nespojitá, jak tomu je u skutečných fázových přechodů. Termodynamická limita $N \rightarrow \infty$ sice nemá u systémů jako jsou atomová jádra fyzikální smysl, přesto však pomáhá k pochopení chování takovýchto systémů. Fázové přechody v systémech tvořených konečným počtem částic je totiž možné studovat tak, že se nejprve najde

jejich termodynamická limita, v této limitě se charakterizuje kritické chování systému a poté se výsledky přenesou zpět na systém s konečným počtem částic.

Jako příklad prekursoru termálního fázového přechodu v atomových jádrech můžeme uvést přechod od Fermiho kapaliny k ideálnímu plynu nukleonů, který nastává při rozpadu jádra na menší fragmenty a byl pozorován v některých jaderných reakcích [2,3]. Při poněkud nižších energiích (teplotách) může docházet k přechodům mezi různými typy tvarů jádra. Tyto přechody byly dosud studovány převážně na teoretické úrovni [4]. V atomových jádrech také dochází k přechodu mezi normálním stavem a stavem supratekutým. Supratekuté chování, které vykazují jádro při teplotách blízkých absolutní nule, souvisí s existencí Cooperových párů nukleonů v jádře. Zvýšení teploty jádra způsobuje termální rozpad Cooperových párů, což se projeví neanalytickou změnou hustoty dostupných energetických hladin a zvýšením „odporu“ pro pohyb nukleonů [5]. Přechod mezi normálním a supratekutým stavem může být vyvolán nejen zvýšením teploty jádra, ale také zvětšením jeho rotační frekvence nebo součinností obojího [6]. Křivka závislosti minimální možné energie jádra na momentu hybnosti vykazuje pro mnohá jádra zlom. Tento zlom odpovídá náhlému zvětšení momentu setrvačnosti jádra, jakmile moment hybnosti jádra překročí určitou hodnotu.

Jádra vykazují též náhlé změny vlastností základního stavu, prekursorů kvantových fázových přechodů, kdy roli řídicího parametru sehraje počet protonů a neutronů. Dochází při nich ke změnám symetrie jádra, konkrétně k přechodu mezi sférickým a deformovaným tvarem. Jeden z experimentálních náznaků existence takovýchto přechodů pro sudo-sudá jádra je znázorněn na obr.1, kde je vynesena závislost energie stavu 4_1^+ na energii stavu 2_1^+ pro atomová jádra, jejichž $E(2_1^+)$ je menší než 600 keV. Energetické hladiny v jádře se často značí symbolem J_k^P , kde J je kvantové číslo momentu hybnosti, P je parita a k indexuje stavy se stejným J a P . Jsou-li energie hladin 0_1^+ , 2_1^+ a 4_1^+ ekvidistantní, chová se jádro jako harmonický oscilátor a poměr $E(4_1^+) / E(2_1^+)$ je přibližně roven 2. Naopak je-li energie hladin úměrná $J(J + 1)$, chová se jádro jako rotátor a poměr $E(4_1^+) / E(2_1^+)$ je roven $\frac{10}{3}$. Experimentální body na obr.1 lze proložit dvěma přímkami, mezi nimiž je poměrně ostrý zlom, který naznačuje existenci rotační a vibrační fáze v jádrech. Vibrační fáze

se však vyznačuje anharmonickým chováním, projevujícím se nenulovým absolutním členem proložené přímky.



Obrázek 1: Energie stavu 4_1^+ vynesena proti energii stavu 2_1^+ pro jadra, jejichž $E(2_1^+) < 600$ keV. Při $E(2_1^+) \approx 150$ keV nastává přechod mezi deformovaným a sférickým tvarem jádra. Převzato z [7].

V této práci se budeme věnovat pouze kvantovým fázovým přechodům, a to těm, které se týkají tvaru jádra. Soustředíme se na analýzu těchto přechodů v rámci modelu interagujících bosonů, který popisuje kolektivní módy pohybu jader. Výraz pro energii základního stavu, odvozený s využitím kondenzátových stavů, budeme analyzovat metodami matematické teorie katastrof.

1 Model interagujících bosonů

1.1 Bosonové operátory, hamiltonián, klasická limita

Model interagujících bosonů navrhli F. Iachello a A. Arima v roce 1975 pro popis kolektivních excitací středně těžkých a těžkých atomových jader [8]. Model je založen na skutečnosti, že pár nukleonů poutaný v jádře krátkodosahovými silami vykazuje jisté znaky bosonového chování. V nejjednodušší verzi tohoto modelu IBM-1, která je použitelná pouze pro sudo-sudá jádra, je každý valenční pár dvou protonů a dvou neutronů aproximován jedním bosonem. Páry proton-neutron nejsou v rámci IBM-1 uvažovány. Vnitřní slupky jádra jsou považovány za inertní. Například sudo-sudé jádro s N_n valenčními nukleony je aproximováno systémem $N = \frac{1}{2}N_n$ bosonů, které mohou být dvou typů. Bosony prvního typu mají moment hybnosti a paritu $J^P = 0^+$ a označují se s . Bosony druhého typu mají moment hybnosti a paritu $J^P = 2^+$ (a tedy projekci momentu hybnosti $\mu = -2, -1, 0, +1, +2$) a označují se d . Stavový Hilbertův prostor tohoto bosonového systému je konečný: pro 1 boson má dimenzi $d_1 = 6$ a pro N bosonů $d_N = \frac{(N+5)!}{5!N!}$. Předpokládá se, že bosony spolu vzájemně interagují, odtud plyne název modelu IBM. Existuje řada rozšíření IBM, která jsou vhodná pro popis jiných typů jader. Těmito rozšířeními se v této práci zabývat nebudeme.

Kreační operátory pro bosony ve stavu $J^P = 0^+$ a $J^P = 2^+$ označíme \hat{s}^\dagger a \hat{d}_μ^\dagger . Pokud chceme, aby se operátory \hat{d}_μ^\dagger transformovaly jako sférické tenzorové operátory, potom se tak nebudou transformovat anihilační operátory \hat{d}_μ . Definujeme proto předpisem $\hat{\hat{d}}_\mu = (-1)^{2-\mu} \hat{d}_{-\mu}$ pomocné operátory $\hat{\hat{d}}_\mu$, které se jako sférické tenzorové operátory transformují.

Důkaz

Nechť \hat{d}_μ^\dagger splňují komutační relace pro sférické tenzorové operátory:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{d}_\mu^\dagger] &= \hbar\mu\hat{d}_\mu^\dagger \\ [\hat{J}_\pm, \hat{d}_\mu^\dagger] &= \hbar\sqrt{6 - \mu(\mu \pm 1)}\hat{d}_{\mu\pm 1}^\dagger \end{aligned} \quad (1)$$

kde \hat{J}_3 je operátor třetí komponenty momentu hybnosti a $\hat{J}_\pm = \hat{J}_1 \pm i\hat{J}_2$ jsou posunovací operátory momentu hybnosti. Hermitovským sdružením (1) dostáváme pro anihilační operátory \hat{d}_μ komutační relace:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{d}_\mu] &= -\hbar\mu\hat{d}_\mu \\ [\hat{J}_\mp, \hat{d}_\mu] &= -\hbar\sqrt{6 - \mu(\mu \pm 1)}\hat{d}_{\mu\pm 1} \end{aligned}$$

Odtud pro $\hat{\hat{d}}_\mu$ plyne:

$$\begin{aligned} [\hat{J}_3, \hat{\hat{d}}_\mu] &= (-1)^{2-\mu}[\hat{J}_3, \hat{d}_{-\mu}] = (-1)^{2-\mu}\hbar\mu\hat{d}_{-\mu} = \hbar\mu\hat{\hat{d}}_\mu \\ [\hat{J}_\pm, \hat{\hat{d}}_\mu] &= (-1)^{2-\mu}[\hat{J}_\pm, \hat{d}_{-\mu}] = (-1)^{2-(\mu\mp 1)}\hbar\sqrt{6 + \mu(-\mu \mp 1)}\hat{d}_{-\mu\mp 1} = \\ &= \hbar\sqrt{6 - \mu(\mu \pm 1)}\hat{\hat{d}}_{\mu\pm 1} \end{aligned}$$

⊥

Na modelový hamiltonián jsou kladeny dva požadavky. Měl by být rotačně invariantní a zachovávat celkový počet bosonů. Celkový počet bosonů bude hamiltonián zachovávat tehdy, když každý jeho člen bude obsahovat stejný počet kreačních a anihilačních operátorů. Rotační invariantnost hamiltoniánu je zaručena, pokud je sférickým tenzorem nultého řádu, tedy skalár. V rámci modelu IBM-1 je hamiltonián nejobecnějším možným skalárem, který v sobě zahrnuje jednočásticové členy a dvoučásticové interakce.

Obecný modelový hamiltonián má tvar:

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & e_0 + e_s \hat{s}^\dagger \hat{s} + e_d \left[\hat{d}^\dagger \times \hat{d} \right]^{(0)} + e'_s \hat{s}^\dagger \hat{s}^\dagger \hat{s} \hat{s} + u \left[\left[\hat{d}^\dagger \times \hat{s}^\dagger \right]^{(2)} \times \left[\hat{d} \times \hat{s} \right]^{(2)} \right]^{(0)} + \\
& + u' \left(\left[\hat{d}^\dagger \times \hat{d}^\dagger \right]^{(0)} \hat{s} \hat{s} + \hat{s}^\dagger \hat{s}^\dagger \left[\hat{d} \times \hat{d} \right]^{(0)} \right) + v \left(\left[\left[\hat{d}^\dagger \times \hat{d}^\dagger \right]^{(2)} \times \left[\hat{d} \times \hat{s} \right]^{(2)} \right]^{(0)} + \right. \\
& \left. + \left[\left[\hat{d}^\dagger \times \hat{s}^\dagger \right]^{(2)} \times \left[\hat{d} \times \hat{d} \right]^{(2)} \right]^{(0)} \right) + \sum_{L=0}^4 w_L \left[\left[\hat{d}^\dagger \times \hat{d}^\dagger \right]^{(L)} + \left[\hat{d} \times \hat{d} \right]^{(L)} \right]^{(0)}
\end{aligned} \tag{2}$$

kde $e_0, e_s, e_d, e'_s, u, u', v$ a w_L ($L = 0, 1, \dots, 4$) jsou konstanty. e_s, e_d představují jedno-bosonové energie a e'_s, u, u', v, w_L jsou konstanty popisující boson-bosonové interakce. Jejich označení je voleno v souladu s běžnou konvencí užívanou v literatuře [9]. Dále je užito následující označení pro skládání sférických tenzorových operátorů: $[\hat{A}^{\lambda_1} \times \hat{B}^{\lambda_2}]_\mu^\lambda = \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\lambda_1 \mu_2 \lambda_1 \mu_2}^{\lambda \mu} \hat{A}_{\mu_1}^{\lambda_1} \hat{B}_{\mu_2}^{\lambda_2}$, kde \hat{A}^{λ_1} a \hat{B}^{λ_2} jsou sférické tenzorové operátory řádů λ_1 a λ_2 a $C_{\lambda_1 \mu_2 \lambda_1 \mu_2}^{\lambda \mu}$ je Clebsch-Gordanův koeficient. Protože hamiltonián je skalár, vystupují v něm z dvoučásticových interakcí pouze ty, jejichž tenzorový operátor odpovídá nulovému momentu hybnosti. Například v hamiltoniánu nenajdeme člen $[\hat{d}^\dagger \times \hat{s}^\dagger]^{(2)} \hat{s} \hat{s} + \hat{s}^\dagger \hat{s}^\dagger [\hat{s} \times \hat{d}]^{(2)}$, což je tenzorový operátor odpovídající momentu hybnosti $J = 2$. Je zřejmé, že modelový hamiltonián (2) nezachovává počet bosonů ve stavech s a d , avšak zachovává celkový počet bosonů.

Hamiltonián (2) vztažený na jednu částici $\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{N} \hat{H}$ je po dodatečném přeškálování interakčních členů faktorem $\frac{1}{N-1}$ (viz dále) konkrétní realizací hamiltoniánu typu

$$\hat{\mathcal{H}} = \varepsilon_0 + \frac{1}{N} \sum_k \varepsilon_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{1}{N(N-1)} \sum_{klmn} v_{klmn} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_m \hat{b}_n + \dots \tag{3}$$

kde $\varepsilon_0, \varepsilon_k$ a v_{klmn} jsou konstanty a \hat{b}_k^\dagger , resp. \hat{b}_k jsou kreační, resp. anihilační operátory bosonu ve stavu k . Hamiltonián typu (3) lze vyjádřit v ekvivalentní formě pomocí operátorů souřadnice a hybnosti.

Definujme hermitovské operátory \hat{q}_k a \hat{p}_k vztahy:

$$\begin{aligned}\hat{q}_k &= \frac{1}{\sqrt{N}}(\alpha_k \hat{b}_k^\dagger + \alpha_k^* \hat{b}_k) \\ \hat{p}_k &= \frac{i}{\sqrt{N}}(\beta_k \hat{b}_k^\dagger - \beta_k^* \hat{b}_k)\end{aligned}\tag{4}$$

Zvolíme-li α_k a β_k tak, aby $\alpha_k \beta_k^* + \alpha_k^* \beta_k = \Gamma \in \mathbb{R}$ pro $\forall k$, splňují \hat{q}_k a \hat{p}_k analogickou komutační relaci jako operátory souřadnice a hybnosti

$$[\hat{q}_k, \hat{p}_l] = i \frac{\Gamma}{N} \delta_{kl}\tag{5}$$

proto je přirozené právě tyto operátory pokládat za operátory souřadnice a hybnosti. Roli Planckovy konstanty ve vztahu (5) má zřejmě podíl $\frac{\Gamma}{N}$. Odtud můžeme usuzovat, že termodynamické limitě $N \rightarrow \infty$ odpovídá klasická limita $\hbar \rightarrow 0$. Po vyjádření \hat{b}_k^\dagger a \hat{b}_k z (4), dosazení do (3) a uplatnění limity $N \rightarrow \infty$ dostaneme klasickou limitu hamiltoniánu v souřadnicově-hybnostní formě:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}(q, p) &= \varepsilon_0 + \frac{1}{2} \sum_k \varepsilon_k (q_k^2 + p_k^2) + \frac{1}{4} \sum_{klmn} v_{klmn} (p_k p_l p_m p_n + q_k q_l q_m q_n) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{klmn} v_{klmn} (p_l p_n q_k p_m + p_l p_m q_k q_n - p_m p_n q_k p_l)\end{aligned}\tag{6}$$

Vidíme, že hamiltonián (6) obsahuje nejvýše kvartické členy v hybnostech a souřadnicích, což je ekvivalentní předpokladu nejvýše dvoučásticových interakcí mezi bosony.

1.2 Základní stav, bosonový kondenzát, geometrická interpretace

Základní stav hamiltoniánu (2) a energii základního stavu budeme hledat Hartree-Boseho metodou, což je metoda analogická Hartree-Fockově metodě pro systémy mnoha fermionů. V rámci Hartree-Boseho metody se základní stav systému N bosonů hledá ve tvaru bosonového kondenzátu

$$|N\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\hat{s}^\dagger + \sum_{\mu=-2}^2 \alpha_\mu \hat{d}_\mu^\dagger \right)^N |0\rangle \quad (7)$$

kde $|0\rangle$ označuje vakuum a α_μ komplexní koeficienty. V základním stavu se tedy všechny bosony nacházejí ve stejném jednočásticovém stavu $\hat{B}_c^\dagger |0\rangle$, kde $\hat{B}_c^\dagger = \hat{s}^\dagger + \sum_{\mu=-2}^2 \alpha_\mu \hat{d}_\mu^\dagger$ (tento stav ani stav (7) obecně nejsou normalizovány). Vzhledem k tomu, že operátory \hat{d}_μ^\dagger se transformují jako sférické tenzorové operátory, tvoří dosud neurčené koeficienty α_μ sférický tenzor druhého řádu. Pro střední hodnotu energie ve stavu (7) platí:

$$E(\alpha) = \frac{\langle N\alpha | \hat{H} | N\alpha \rangle}{\langle N\alpha | N\alpha \rangle} \quad (8)$$

Hodnoty koeficientů α_μ odpovídající základnímu stavu jsou takové, pro které nabývá funkce (8) svého minima.

V operátoru \hat{B}_c^\dagger vystupují bosonové kreační operátory do šesti různých jednočásticových stavů. Pro zjednodušení zápisu zavedeme pro tyto operátory jednotné označení \hat{b}_k^\dagger , $k = 1, \dots, 6$. Operátor \hat{B}_c^\dagger má nyní tvar $\hat{B}_c^\dagger = \sum_{k=1}^6 c_k \hat{b}_k^\dagger$, $c_k \in \mathbb{C}$ a platí pro něj tyto komutační relace:

$$[\hat{b}_k, \hat{B}_c^\dagger] = c_k \quad (9)$$

$$[\hat{b}_k, (\hat{B}_c^\dagger)^N] = N c_k (\hat{B}_c^\dagger)^{N-1} \quad (10)$$

Vztahy (9) a (10) je možné dokázat s využitím známých komutačních relací pro bosonové operátory:

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j] = [\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger] = 0$$

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

Důkaz

Definuji komutátor $\hat{K}_N = [\hat{b}_i, (\hat{B}_c^\dagger)^N]$. Komutační relaci (9) dostaneme snadno po rozepsání \hat{B}_c^\dagger pomocí kreačních operátorů:

$$\hat{K}_1 = [\hat{b}_i, \hat{B}_c^\dagger] = \sum_{k=1}^6 c_k [\hat{b}_i, \hat{b}_k^\dagger] = \sum_{k=1}^6 c_k \delta_{ik} = c_i$$

Relace (10) se odvodí indukcí z (9). Předpokládejme, že pro jisté $N > 1$ platí

$$\hat{K}_{N-1} = (N-1)c_i(\hat{B}_c^\dagger)^{N-2}, \text{ potom}$$

$$\begin{aligned} \hat{K}_N &= [\hat{b}_i, (\hat{B}_c^\dagger)^N] = \hat{B}_c^\dagger [\hat{b}_i, (\hat{B}_c^\dagger)^{N-1}] + [\hat{b}_i, \hat{B}_c^\dagger](\hat{B}_c^\dagger)^{N-1} = \\ &= \hat{B}_c^\dagger \hat{K}_{N-1} + c_i(\hat{B}_c^\dagger)^{N-1} = \hat{B}_c^\dagger (N-1)c_i(\hat{B}_c^\dagger)^{N-2} + c_i(\hat{B}_c^\dagger)^{N-1} = Nc_i(\hat{B}_c^\dagger)^{N-1} \end{aligned}$$

Tedy tvrzení platí pro $\forall N \in \mathbb{N}$.

⊥

Jmenovatel výrazu (8) můžeme nyní upravit na tvar:

$$\langle N\alpha | N\alpha \rangle = \left(\sum_{k=1}^6 |c_k|^2 \right)^N \quad (11)$$

Důkaz

Důkaz bude proveden indukcí s využitím komutační relace (10). Pro $N = 0$ tvrzení platí, $\langle 0|0 \rangle = 1$. Necht' pro jisté $N > 0$ platí $\langle (N-1)\alpha | (N-1)\alpha \rangle = (\sum_{k=1}^6 |c_k|^2)^{N-1}$, potom:

$$\begin{aligned} \langle N\alpha | N\alpha \rangle &= \frac{1}{N!} \langle 0 | (\hat{B}_c)^N (\hat{B}_c^\dagger)^N | 0 \rangle = \frac{1}{N!} \langle 0 | (\hat{B}_c)^{N-1} \left(\sum_{k=1}^6 c_k^* \hat{b}_k \right) (\hat{B}_c^\dagger)^N | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{N!} \sum_{k=1}^6 c_k^* \underbrace{\langle 0 | (\hat{B}_c)^{N-1} (\hat{B}_c^\dagger)^N \hat{b}_k | 0 \rangle}_0 + \frac{1}{N!} \sum_{k=1}^6 c_k^* \langle 0 | (\hat{B}_c)^{N-1} N c_k (\hat{B}_c^\dagger)^{N-1} | 0 \rangle = \\ &= \sum_{k=1}^6 |c_k|^2 \frac{1}{(N-1)!} \langle 0 | (\hat{B}_c)^{N-1} (\hat{B}_c^\dagger)^{N-1} | 0 \rangle = \sum_{k=1}^6 |c_k|^2 \langle (N-1)\alpha | (N-1)\alpha \rangle = \left(\sum_{k=1}^6 |c_k|^2 \right)^N \end{aligned}$$

Tedy tvrzení platí pro $\forall N \in \mathbb{N}$.

⊥

Pro potřeby dalších výpočtů je užitečné dokázat ještě následující vztah:

$$\langle N\alpha | \left(\prod_{i=1}^m \hat{b}_{r_i}^\dagger \right) \left(\prod_{j=1}^m \hat{b}_{r_j} \right) | N\alpha \rangle = \frac{N!}{(N-m)!} \left(\prod_{i=1}^m c_{r_i}^* \right) \left(\prod_{j=1}^m c_{r_j} \right) \langle (N-m)\alpha | (N-m)\alpha \rangle \quad (12)$$

Důkaz

Nejprve pomocí (10) spočteme výsledek působení jednoho anihilačního operátoru \hat{b}_r na stav (7):

$$\hat{b}_r | N\alpha \rangle = \hat{b}_r \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{B}_c^\dagger)^N | 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (\hat{B}_c^\dagger)^N \hat{b}_r | 0 \rangle + \frac{1}{\sqrt{N!}} N c_r (\hat{B}_c^\dagger)^{N-1} | 0 \rangle = \sqrt{N} c_r | (N-1)\alpha \rangle$$

Odtud pro obecný počet anihilačních operátorů $m \geq 1$ dostáváme:

$$\begin{aligned} \left(\prod_{j=1}^m \hat{b}_{r_j} \right) | N\alpha \rangle &= \left(\prod_{j=2}^m \hat{b}_{r_j} \right) \sqrt{N} c_{r_1} | (N-1)\alpha \rangle = \\ &= \left(\prod_{j=3}^m \hat{b}_{r_j} \right) \sqrt{N(N-1)} c_{r_1} c_{r_2} | (N-2)\alpha \rangle = \dots = \sqrt{\frac{N!}{(N-m)!}} \left(\prod_{j=1}^m c_{r_j} \right) | (N-m)\alpha \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

Podobným postupem lze dokázat analogický vztah pro kreační operátory:

$$\langle N\alpha | \left(\prod_{i=1}^m \hat{b}_{r_i}^\dagger \right) = \langle (N-m)\alpha | \sqrt{\frac{N!}{(N-m)!}} \left(\prod_{i=1}^m c_{r_i}^* \right) \quad (14)$$

S uvážením (13) a (14) tak dostáváme:

$$\langle N\alpha | \left(\prod_{i=1}^m \hat{b}_{r_i}^\dagger \right) \left(\prod_{j=1}^m \hat{b}_{r_j} \right) | N\alpha \rangle = \frac{N!}{(N-m)!} \left(\prod_{i=1}^m c_{r_i}^* \right) \left(\prod_{j=1}^m c_{r_j} \right) \langle (N-m)\alpha | (N-m)\alpha \rangle$$

⊥

Nyní můžeme dosadit do $\langle N\alpha | \hat{H} | N\alpha \rangle$ modelový hamiltonián (2) a pomocí vztahu (12) upravit jednotlivé členy (výrazy (15)-(22)), přičemž se opět vrátíme

k původnímu značení kreačních operátorů \hat{s}^\dagger a \hat{d}_μ^\dagger a konstantám α_μ . Při následujících úpravách také použijeme označení $\mathcal{N} = 1 + \sum_{\mu=-2}^2 |\alpha_\mu|^2$ a $\tilde{\alpha}_\mu = (-1)^{2-\mu} \alpha_{-\mu}$.

$$\langle N\alpha | e_0 | N\alpha \rangle = e_0 \langle N\alpha | N\alpha \rangle = e_0 \mathcal{N}^N \quad (15)$$

$$\langle N\alpha | e_s \hat{s}^\dagger \hat{s} | N\alpha \rangle = e_s N \langle (N-1)\alpha | (N-1)\alpha \rangle = e_s N \mathcal{N}^{N-1} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \langle N\alpha | e_d \left[\hat{d}^\dagger \times \hat{d} \right]^{(0)} | N\alpha \rangle &= e_d \sum_{\mu=-2}^2 C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \langle N\alpha | \hat{d}_\mu^\dagger \hat{d}_{-\mu} | N\alpha \rangle = \\ &= e_d N \sum_{\mu=-2}^2 [C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \alpha_\mu^* \tilde{\alpha}_{-\mu}] \langle (N-1)\alpha | (N-1)\alpha \rangle = e_d N \sum_{\mu=-2}^2 [C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \alpha_\mu^* \tilde{\alpha}_{-\mu}] \mathcal{N}^{N-1} \end{aligned} \quad (17)$$

$$\langle N\alpha | e_s' \hat{s}^\dagger \hat{s}^\dagger \hat{s} \hat{s} | N\alpha \rangle = e_s' \langle (N-2)\alpha | (N-2)\alpha \rangle = e_s' N(N-1) \mathcal{N}^{N-2} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \langle N\alpha | u \left[\left[\hat{d}^\dagger \times \hat{s}^\dagger \right]^{(2)} \times \left[\hat{d} \times \hat{s} \right]^{(2)} \right]^{(0)} | N\alpha \rangle &= u \sum_{\mu=-2}^2 C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \langle N\alpha | \hat{d}_\mu^\dagger \hat{s}^\dagger \hat{d}_{-\mu} \hat{s} | N\alpha \rangle = \\ &= u N(N-1) \sum_{\mu=-2}^2 [C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \alpha_\mu^* \tilde{\alpha}_{-\mu}] \mathcal{N}^{N-2} \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \langle N\alpha | u' \left(\left[\hat{d}^\dagger \times \hat{d}^\dagger \right]^{(0)} \hat{s} \hat{s} + \hat{s}^\dagger \hat{s}^\dagger \left[\hat{d} \times \hat{d} \right]^{(0)} \right) | N\alpha \rangle &= \\ &= u' \sum_{\mu=-2}^2 C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \left(\langle N\alpha | \hat{d}_\mu^\dagger \hat{d}_{-\mu}^\dagger \hat{s} \hat{s} | N\alpha \rangle + \langle N\alpha | \hat{s}^\dagger \hat{s}^\dagger \hat{d}_\mu \hat{d}_{-\mu} | N\alpha \rangle \right) = \\ &= u' N(N-1) \sum_{\mu=-2}^2 [C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} (\alpha_\mu^* \alpha_{-\mu}^* + \tilde{\alpha}_\mu \tilde{\alpha}_{-\mu})] \mathcal{N}^{N-2} \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned}
& \langle N\alpha | v \left(\left[[\hat{d}^\dagger \times \hat{d}^\dagger]^{(2)} \times [\hat{d} \times \hat{s}]^{(2)} \right]^{(0)} + \left[[\hat{d}^\dagger \times \hat{s}^\dagger]^{(2)} \times [\hat{d} \times \hat{d}]^{(2)} \right]^{(0)} \right) | N\alpha \rangle = \\
& = v \sum_{\mu=-2}^2 \sum_{m_1=-2}^2 \sum_{m_2=-2}^2 C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{2(-\mu)} \left(\langle N\alpha | \hat{d}_{m_1}^\dagger \hat{d}_{m_2}^\dagger \hat{d}_\mu \hat{s} | N\alpha \rangle + \langle N\alpha | \hat{d}_\mu^\dagger \hat{s}^\dagger \hat{d}_{m_1} \hat{d}_{m_2} | N\alpha \rangle \right) = \quad (21) \\
& = vN(N-1) \sum_{\mu=-2}^2 \sum_{m_1=-2}^2 \sum_{m_2=-2}^2 \left[C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{2(-\mu)} (\alpha_{m_1}^* \alpha_{m_2}^* \tilde{\alpha}_\mu + \alpha_\mu^* \tilde{\alpha}_{m_1} \tilde{\alpha}_{m_2}) \right] \mathcal{N}^{N-2}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \langle N\alpha | \sum_{L=0}^4 w_L \left[[\hat{d}^\dagger \times \hat{d}^\dagger]^{(L)} \times [\hat{d} \times \hat{d}]^{(L)} \right]^{(0)} | N\alpha \rangle = \\
& = \sum_{L=0}^4 w_L \sum_{\mu=-L}^L \sum_{m_1, m_2=-2}^2 \sum_{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2=-2}^2 C_{L\mu L(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{L\mu} C_{2\tilde{m}_1 2\tilde{m}_2}^{L(-\mu)} \langle N\alpha | \hat{d}_{m_1}^\dagger \hat{d}_{m_2}^\dagger \hat{d}_{\tilde{m}_1} \hat{d}_{\tilde{m}_2} | N\alpha \rangle = \quad (22) \\
& = \sum_{L=0}^4 w_L N(N-1) \sum_{\mu=-L}^L \sum_{m_1, m_2=-2}^2 \sum_{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2=-2}^2 \left[C_{L\mu L(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{L\mu} C_{2\tilde{m}_1 2\tilde{m}_2}^{L(-\mu)} \alpha_{m_1}^* \alpha_{m_2}^* \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_1} \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_2} \right] \mathcal{N}^{N-2}
\end{aligned}$$

Jednočásticové členy (16) a (17) jsou úměrné počtu bosonů N , zatímco dvoučásticové členy (18)-(22) jsou úměrné $N(N-1)$. Celková energie proto neroste lineárně s počtem částic, a není tudíž extenzivní veličinou. Tento problém je možné odstranit přeškálováním konstant $e_s, e_d, e'_s, u, u', v, w_L$ následujícím způsobem:

$$\begin{aligned}
(e_s, e_d) & \rightarrow \frac{1}{N} (e_s, e_d) \\
(e'_s, u, u', v, w_L) & \rightarrow \frac{1}{N(N-1)} (e'_s, u, u', v, w_L)
\end{aligned} \quad (23)$$

kde jsme zároveň přešli od celkové energie $E(\alpha)$ k energii vztažené na jeden boson $\mathcal{E}(\alpha) = \frac{1}{N} E(\alpha)$. Transformované konstanty budou značeny stejným symbolem jako původní konstanty.

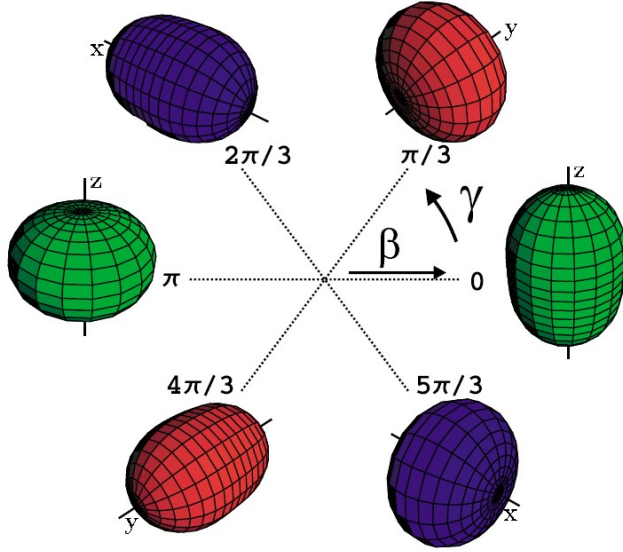
Pro zjednodušení dalších výpočtů je vhodné uvážit korespondenci modelu IMB s geometrickým modelem jádra, který zavedl Aage Bohr v roce 1952 [10]. V rámci tohoto modelu je jádro pokládáno za kapku, jejíž tvar je určen rozvojem povrchu do sférických funkcí

$$R(\vartheta, \varphi) = R_0 \left(1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi) \right) \quad (24)$$

Zde R_0 je rovnovážný poloměr a $R(\vartheta, \varphi)$ je vzdálenost povrchu jádra od počátku ve směru (ϑ, φ) . Koeficienty $\alpha_{\lambda\mu}$ jsou složky sférického tenzoru. Člen s $\lambda = 0$ odpovídá zmenšování a zvětšování jádra beze změny tvaru a členy s $\lambda = 1$ představují posun kapky jako celku. Nejjednodušší možná deformace jádra má kvadrupólový charakter, čemuž odpovídá $\lambda = 2$. Omezíme-li se ve výrazu (24) pouze na člen s $\lambda = 2$, je tvar jádra určen koeficienty $\alpha_{2\mu}$ ($\mu = -2, -1, 0, +1, +2$), které tvoří složky sférického tenzoru druhého řádu. Po transformaci tenzoru do soustavy souřadnic spjaté s jádrem, jejíž souřadnicové osy jsou totožné s hlavními osami tenzoru, se ukazuje, že transformované koeficienty $\alpha_{2(\pm 1)}$ jsou nulové. Zbývající koeficienty je obvyklé parametrizovat pomocí Bohrových kvadrupólových proměnných $\beta \geq 0$ a γ [11].

$$\begin{aligned} \alpha_{2(0)} &= \beta \cos \gamma \\ \alpha_{2(\pm 1)} &= 0 \\ \alpha_{2(\pm 2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma \end{aligned} \quad (25)$$

Sférický tenzor vystupující v IBM je analogický sférickému tenzoru z geometrického modelu a jeví se proto přirozené parametrizovat konstanty α_{μ} v IBM také pomocí Bohrových kvadrupólových proměnných. Proměnná β udává kvantitativní velikost deformace jádra, přičemž hodnota $\beta = 0$ odpovídá nedeformovanému sférickému jádru. Proměnná γ souvisí se směrem, ve kterém deformace nastává. Je-li $\gamma = n \frac{\pi}{3}$, $n \in \mathbb{Z}$, je tvar jádra osově symetrický, viz obr.1.1. Pro jiné hodnoty γ nemá jádro žádnou osu symetrie.



Obrázek 1.1: Kvadrupólové tvary jádra odpovídající význačným hodnotám Bohrovy proměnné γ . Všem znázorněným tvarům jádra odpovídá stejná hodnota proměnné β . Převzato z [12].

Výrazy (15)-(22) se po zavedení parametrizace (25) velmi zjednoduší. Při úpravě klíčové části těchto výrazů se využijí následující vztahy (26)-(33):

$$\mathcal{N} = 1 + \sum_{\mu=-2}^2 |\alpha_{\mu}|^2 = 1 + \beta^2 \cos^2 \gamma + \frac{1}{2} \beta^2 \sin^2 \gamma + \frac{1}{2} \beta^2 \sin^2 \gamma = 1 + \beta^2 \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=-2}^2 [C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \alpha_{\mu}^* \tilde{\alpha}_{-\mu}] &= \sum_{\mu=-2}^2 [C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \alpha_{\mu}^* \alpha_{-\mu}^*] = \sum_{\mu=-2}^2 [C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} \tilde{\alpha}_{\mu} \tilde{\alpha}_{-\mu}] = \\ &= \frac{\beta^2}{\sqrt{5}} \sum_{\mu=-2}^2 \frac{(-1)^{2-\mu}}{\sqrt{5}} \alpha_{\mu}^* \tilde{\alpha}_{-\mu} = \frac{1}{\sqrt{5}} \beta^2 (\cos^2 \gamma + \sin^2 \gamma) = \frac{\beta^2}{\sqrt{5}} \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\mu=-2}^2 \sum_{m_1=-2}^2 \sum_{m_2=-2}^2 [C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{2(-\mu)} (\alpha_{m_1}^* \alpha_{m_2}^* \tilde{\alpha}_{\mu} + \alpha_{\mu}^* \tilde{\alpha}_{m_1} \tilde{\alpha}_{m_2})] &= \\ &= \sqrt{\frac{2}{35}} (2\alpha_2^2 \alpha_0 + 2\alpha_2 \alpha_{-2} \alpha_0 - \alpha_0^3 + 2\alpha_{-2}^2 \alpha_0) = \sqrt{\frac{2}{35}} \beta^3 (3 \sin^2 \gamma \cos \gamma - \cos^3 \gamma) = \\ &= -\sqrt{\frac{2}{35}} \beta^3 \cos 3\gamma \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mu=-4}^4 \sum_{m_1, m_2=-2}^2 \sum_{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2=-2}^2 \left[C_{4\mu 4(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{4\mu} C_{2\tilde{m}_1 2\tilde{m}_2}^{4(-\mu)} \alpha_{m_1}^* \alpha_{m_2}^* \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_1} \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_2} \right] = \\
& = \frac{1}{3} \left\{ 2\alpha_2^2 \alpha_{-2}^2 + \frac{3}{7} (2\alpha_2 \alpha_0) (2\alpha_{-2} \alpha_0) + \frac{2}{35} (\alpha_2 \alpha_{-2} + 3\alpha_0^2)^2 \right\} = \frac{6\beta^4}{35}
\end{aligned} \tag{29}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mu=-3}^3 \sum_{m_1, m_2=-2}^2 \sum_{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2=-2}^2 \left[C_{3\mu 3(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{3\mu} C_{2\tilde{m}_1 2\tilde{m}_2}^{3(-\mu)} \alpha_{m_1}^* \alpha_{m_2}^* \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_1} \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_2} \right] = \\
& = \frac{1}{2\sqrt{7}} \left\{ (\alpha_2 \alpha_0 - \alpha_0 \alpha_2) (\alpha_{-2} \alpha_0 - \alpha_0 \alpha_{-2}) + \frac{1}{5} (\alpha_2 \alpha_{-2} - \alpha_{-2} \alpha_2)^2 \right\} = 0
\end{aligned} \tag{30}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mu=-2}^2 \sum_{m_1, m_2=-2}^2 \sum_{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2=-2}^2 \left[C_{2\mu 2(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{2\mu} C_{2\tilde{m}_1 2\tilde{m}_2}^{2(-\mu)} \alpha_{m_1}^* \alpha_{m_2}^* \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_1} \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_2} \right] = \\
& = \frac{2}{7\sqrt{5}} \left\{ 2(2\alpha_2 \alpha_0) (2\alpha_{-2} \alpha_0) + (2\alpha_2 \alpha_{-2} - \alpha_0^2)^2 \right\} = \\
& = \frac{2}{7\sqrt{5}} \beta^4 (\sin^4 \gamma + 2 \sin^2 \gamma \cos^2 \gamma + \cos^4 \gamma) = \frac{2\beta^4}{7\sqrt{5}}
\end{aligned} \tag{31}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{\mu=-1}^1 \sum_{m_1, m_2=-2}^2 \sum_{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2=-2}^2 \left[C_{1\mu 1(-\mu)}^{00} C_{2m_1 2m_2}^{1\mu} C_{2\tilde{m}_1 2\tilde{m}_2}^{1(-\mu)} \alpha_{m_1}^* \alpha_{m_2}^* \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_1} \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_2} \right] = \\
& = \frac{2}{5\sqrt{3}} \left\{ (\alpha_2 \alpha_{-2} - \alpha_{-2} \alpha_2)^2 \right\} = 0
\end{aligned} \tag{32}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{m_1, m_2=-2}^2 \sum_{\tilde{m}_1, \tilde{m}_2=-2}^2 \left[C_{2m_1 2m_2}^{00} C_{2\tilde{m}_1 2\tilde{m}_2}^{00} \alpha_{m_1}^* \alpha_{m_2}^* \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_1} \tilde{\alpha}_{\tilde{m}_2} \right] = \frac{1}{5} (2\alpha_2 \alpha_{-2} + \alpha_0^2)^2 = \\
& = \frac{1}{5} \beta^4 (\sin^4 \gamma + 2 \sin^2 \gamma \cos^2 \gamma + \cos^4 \gamma) = \frac{\beta^4}{5}
\end{aligned} \tag{33}$$

Nyní dosadíme výrazy (11) a (15)-(22) upravené pomocí (26)-(33) do (8) a získáme tak vyjádření energie $\mathcal{E}(\beta, \gamma)$ v Bohrových proměnných.

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}(\beta, \gamma) &= \frac{\langle N\alpha(\beta, \gamma) | \hat{H} | N\alpha(\beta, \gamma) \rangle}{\langle N\alpha(\beta, \gamma) | N\alpha(\beta, \gamma) \rangle} = \\
&= \frac{1}{\mathcal{N}^N} \left(e_0 \mathcal{N}^N + e_s \mathcal{N}^{N-1} + e_d \frac{\beta^2}{\sqrt{5}} \mathcal{N}^{N-1} + e'_s \mathcal{N}^{N-2} + u \frac{\beta^2}{\sqrt{5}} \mathcal{N}^{N-2} + u' \frac{2\beta^2}{\sqrt{5}} \mathcal{N}^{N-2} - \right. \\
&\quad \left. - v \sqrt{\frac{2}{35}} \beta^3 \cos(3\gamma) \mathcal{N}^{N-2} + w_4 \frac{6\beta^4}{35} \mathcal{N}^{N-2} + w_2 \frac{2\beta^4}{7\sqrt{5}} \mathcal{N}^{N-2} + w_0 \frac{\beta^4}{5} \mathcal{N}^{N-2} \right) = \\
&= e_0 + \frac{e_s + e'_s + \left(e_s + \frac{e_d}{\sqrt{5}} + \frac{u}{\sqrt{5}} + \frac{2u'}{\sqrt{5}} \right) \beta^2 - \sqrt{\frac{2}{35}} v \beta^3 \cos(3\gamma) + \left(\frac{e_d}{\sqrt{5}} + \frac{6w_4}{35} + \frac{2w_2}{7\sqrt{5}} + \frac{w_0}{5} \right) \beta^4}{(1 + \beta^2)^2}
\end{aligned} \tag{34}$$

Kvalitativní chování funkce $\mathcal{E}(\beta, \gamma)$ se nezmění, odečteme-li od ní konstantu $e_0 + e_s + e'_s$. Jedná se vlastně o posunutí počátku souřadnic tak, aby $\mathcal{E}(\beta = 0, \gamma) = 0$. Zavedeme-li dále označení

$$\begin{aligned}
A &= \frac{e_d}{\sqrt{5}} + \frac{u}{\sqrt{5}} + \frac{2u'}{\sqrt{5}} - e_s - 2e'_s \\
B &= -\sqrt{\frac{2}{35}} v \\
C &= \frac{e_d}{\sqrt{5}} + \frac{6w_4}{35} + \frac{2w_2}{7\sqrt{5}} + \frac{w_0}{5} - e_s - e'_s
\end{aligned} \tag{35}$$

dostaneme

$$\mathcal{E}(\beta, \gamma) = \frac{A\beta^2 + B\beta^3 \cos(3\gamma) + C\beta^4}{(1 + \beta^2)^2} \tag{36}$$

Výraz (36) představuje střední energii přeškálovaného hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{N} \hat{H}$ v kondenzátovém stavu (7). Základní stav dostaneme minimalizací tohoto výrazu v proměnných β a γ . Kvalita této aproximace bude vzrůstat se zvyšující se hodnotou N , přičemž v limitě $N \rightarrow \infty$ (termodynamická a zároveň klasická limita systému, viz 1.1) bude vyjádření základního stavu přesné. Výraz (36) lze získat také z vyjádření hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}}$ pomocí souřadnic a hybností (viz 1.1), kdy v limitě $N \rightarrow \infty$ přecházíme od operátorů k obyčejným proměnným a při hledání základního stavu pokládáme $p_k = 0$. Formulí (36) proto můžeme chápat jako výraz pro potenciální energii v závislosti na parametrech deformace β a γ . V rámci geometrického modelu

jádra je možné odvodit výraz pro potenciál analogický (36), totiž: $\mathcal{E}'(\beta) = A\beta^2 + B\beta^3 \cos(3\gamma) + C\beta^4$. V tomto výrazu chybí jmenovatel $(1 + \beta^2)^2$, jenž v IBM zabezpečuje existenci horního omezení potenciální energie systému. Požadavek stability jádra vede v geometrickém modelu k omezení fyzikálně přípustných hodnot koeficientu C na oblast $C > 0$. Je proto rozumné přenést tento požadavek i do IBM. Na parametr C můžeme za tohoto předpokladu nahlížet pouze jako na škálovací konstantu a pro jednoduchost položit $C = 1$. Výsledný vztah pro $\mathcal{E}(\beta, \gamma)$ je:

$$\mathcal{E}(\beta, \gamma) = \frac{A\beta^2 + B\beta^3 \cos(3\gamma) + \beta^4}{(1 + \beta^2)^2} \quad (37)$$

1.3 Kritické chování

Systém popsaný potenciálem (37) se může v závislosti na hodnotách řídicích parametrů A , B nacházet v jednom ze tří kvalitativně odlišných základních stavů. Podle hodnot proměnných β_m a γ_m v globálním minimu potenciálu (37) se rozlišují [7]:

- a) Je-li $\beta_m = 0$, má jádro v základním stavu sférický tvar. Jak plyne z parametrizace (25), je základní stav tvořen kondenzátem bosonů pouze v s stavech.
- b) Je-li $\beta_m > 0$ a $\gamma_m = 0$ má jádro v základním stavu protáhlý tvar. Bosonový kondenzát tvořící základní stav má v tomto případě tvar $(\hat{s}^\dagger + \beta_m \hat{d}_0^\dagger)|0\rangle$.
- c) Je-li $\beta_m > 0$ a $\gamma_m = \frac{\pi}{3}$ má jádro v základním stavu zploštělý tvar a bosonový kondenzát tvořící základní stav má tvar $(\hat{s}^\dagger - \beta_m \hat{d}_0^\dagger)|0\rangle$.

Přechody mezi stavy a) - c) jsou v jistém smyslu nespojité a lze je považovat za fázové přechody. Podle Ehrenfestovy klasifikace převzaté z teorie termodynamických fázových přechodů vykazuje potenciál (37) fázové přechody prvního a druhého řádu. Fázovým přechodem k -tého řádu v této práci rozumíme situaci, kdy je k -tá derivace energie základního stavu podle některého z řídicích

parametrů nespojitá v bodě fázového přechodu. Prekuzory těchto fázových přechodů lze pozorovat v reálných sudo-sudých jádrech při změnách počtu protonů a neutronů. Tyto změny lze v rámci IBM vyjádřit změnou počtu bosonů N (v souladu s pravidlem $N = \frac{1}{2}N_n$) a zároveň změnou interakčních parametrů hamiltoniánu (2), které se promítají do hodnot parametrů A, B ve výrazu (37) [13].

Velmi zajímavým, leč nepříliš často používaným matematickým prostředím ke studiu fázových přechodů, ale i jiných nespojitých fyzikálních jevů je teorie katastrof [14]. V rámci této matematické teorie je možná exaktní analýza výše zmíněných fázových přechodů mezi základními stavy jádra [15].

2 Teorie katastrof

2.1 Základní pojmy teorie katastrof

Autorem teorie katastrof je francouzský matematik René Thom [16]. Fyzika, zejména klasická, se z velké části zabývá studiem spojitých jevů, k jejichž popisu se výborně hodí metody matematické analýzy. Naopak teorie katastrof byla vytvořena pro účel studia náhlých, skokových změn, které nastávají v důsledku spojitě změny jistých řídicích parametrů. Ke skokovým změnám systému dochází například právě při fázových přechodech.

Zavedeme nyní několik pojmů, se kterými se budeme v dalším často setkávat. Nechť je dán potenciál $V(X_i; c_\alpha)$, kde $i = 1, \dots, n$, $\alpha = 1, \dots, k$, X_i jsou stavové veličiny a c_α jsou řídicí parametry, na nichž potenciál závisí. Takzvaná elementární teorie katastrof studuje pro daný potenciál $V(X_i; c_\alpha)$ změny rovnovážných hodnot stavových veličin X_i v závislosti na změnách řídicích parametrů c_α . Platí-li dále $\frac{dX_i}{dt} = -\frac{\partial V(X_i; c_\alpha)}{\partial X_i}$ a má-li se systém popsaný potenciálem $V(X_i; c_\alpha)$ nacházet v rovnováze, musí být splněno $\frac{dX_i}{dt} = 0$ pro $\forall i = 1, \dots, n$, neboli $\nabla_X V = 0$. Nechť je nyní $c^0 \in \mathbb{R}^k$ pevně zvolená sada řídicích parametrů. Bod $X^0 \in \mathbb{R}^n$ takový, že $\nabla_X V(X_i^0; c_\alpha^0) = 0$, se nazývá kritický. Zavedeme-li označení $V_{ij} = \frac{\partial^2 V(X_i^0; c_\alpha^0)}{\partial X_i \partial X_j}$, můžeme kritické body rozdělit na nedegenerované, pro které $\det V_{ij} \neq 0$, a degenerované, pro které $\det V_{ij} = 0$. R. Thom ve své práci [17] dokázal následující významnou a velmi netriviální větu.

Thomova klasifikační věta

Pro skoro všechny potenciály $V(X_i; c_\alpha): \mathbb{R}^n \otimes \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ platí:

Nechť pro jisté $(X_i^0; c_\alpha^0) \in \mathbb{R}^{n+k}$ je $\nabla_X V(X_i^0; c_\alpha^0) = 0$, $\det V_{ij} = 0$ a počet řídicích parametrů $k \leq 5$. Potom existují hladké transformace stavových proměnných $X'_i = X'_i(X_j)$ a řídicích parametrů $c'_\alpha = c'_\alpha(c_\beta)$ takové, že na jistém okolí bodu

$(X_i^0; c_\alpha^0)$ platí $V(X_i; c_\alpha) = \text{Cat}_{l,k}(X_i; c_\alpha) + \sum_{i=l+1}^n \lambda_i(c_\alpha) X_i'^2$, kde l je počet nulových vlastních čísel matice V_{ij} .

Thom našel též tvar funkcí $\text{Cat}_{l,k}$. Tyto funkce se nazývají kanonické katastrofické funkce nebo jen katastrofy. Je-li počet stavových veličin $n \leq 2$ a počet řídicích parametrů $k \leq 4$, existuje pouze sedm typů katastrof, viz tab.2.1. Jelikož české názvy pro jednotlivé typy katastrof nejsou zavedené, jsou v tab.2.1 uvedeny jejich názvy v angličtině.

Tabulka 2.1: Typy katastrof $\text{Cat}_{l,k}$ pro počet stavových proměnných $n \leq 2$ a počet řídicích parametrů $k \leq 4$. x, y jsou stavové proměnné a a_i řídicí parametry.

název katastrofy	k	$\text{Cat}_{l,k}$
fold	1	$x^3 + a_1x$
cuspl	2	$x^4 + a_1x^2 + a_2x$
swallowtail	3	$x^5 + a_1x^3 + a_2x^2 + a_3x$
butterfly	4	$x^6 + a_1x^4 + a_2x^3 + a_3x^2 + a_4x$
hyperbolic umbilic	3	$x^3 + y^3 + a_1xy + a_2x + a_3y$
elliptic umbilic	3	$x^3 - xy^2 + a_1(x^2 + y^2) + a_2x + a_3y$
parabolic umbilic	4	$x^2y + y^4 + a_1x^2 + a_2y^2 + a_3x + a_4y$

2.2 Kritické body potenciálu IBM-1

Základní stav jádra odpovídá globálnímu minimu potenciálu (37). Protože závislost tohoto potenciálu na proměnné γ je relativně jednoduchá, můžeme za účelem hledání základního stavu provést s výhodou nejprve minimalizaci v proměnné γ a až následně v proměnné β . Potenciál (37) je nekonečně diferencovatelná funkce, proto nutná podmínka existence jeho minima vzhledem k proměnné γ je

$$\frac{\partial \mathcal{E}(\beta, \gamma)}{\partial \gamma} = 0 \wedge \frac{\partial^2 \mathcal{E}(\beta, \gamma)}{\partial \gamma^2} > 0 \text{ a je splněna pro:}$$

$$\gamma \in \left\{ \frac{2}{3}k\pi, k \in \mathbb{Z} \right\}, \text{ pokud } B < 0 \quad (38)$$

$$\gamma \in \left\{ \frac{\pi}{3} + \frac{2}{3}k\pi, k \in \mathbb{Z} \right\}, \text{ pokud } B > 0$$

Obě možnosti lze sloučit do jediné, připustíme-li záporné hodnoty proměnné β , provedeme záměnu

$$\beta \rightarrow \beta \operatorname{sgn}(-B) \quad (39)$$

a položíme $\gamma = 0$. S uvážením podmínky na proměnnou γ můžeme potenciál (37) zjednodušit na tvar

$$\mathcal{E}(\beta; A, B) = \frac{A\beta^2 + B\beta^3 + \beta^4}{(1 + \beta^2)^2} \quad (40)$$

Je třeba zdůraznit, že tato operace je legitimní pouze při vyšetřování globálního minima funkce (37). Globální extrém funkce (40) na intervalu $\beta \in (-\infty, \infty)$ je vždy globálním extrémem funkce (37). Případné lokální extrémy funkce (40) mohou, ale nemusí být lokálními extrémy funkce (37) vzhledem k oběma proměnným β a γ . V tomto případě je nutná dodatečná analýza chování funkce (37) na okolí takového bodu.

Nutná podmínka existence kritických bodů potenciálu (40) má tvar:

$$\frac{d\mathcal{E}(\beta; A, B)}{d\beta} = 0 \Leftrightarrow \beta[B\beta^3 + (2A - 4)\beta^2 - 3B\beta - 2A] = 0 \quad (41)$$

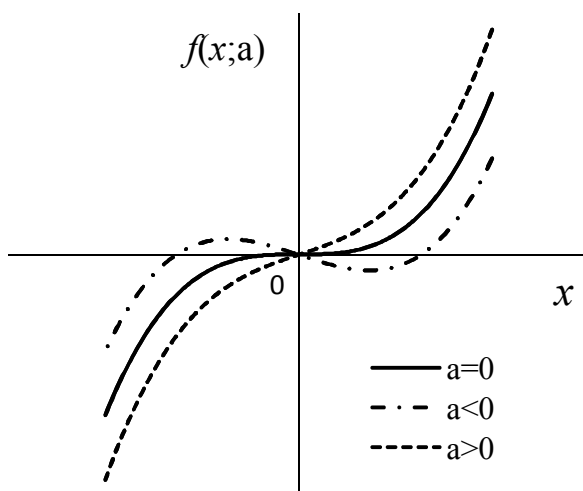
Kritický bod se nazve degenerovaný, je-li v něm navíc splněna podmínka

$$\frac{d^2\mathcal{E}(\beta; A, B)}{d\beta^2} = 0 \Leftrightarrow \quad (42)$$

$$\Leftrightarrow B\beta^5 + 3(A - 2)\beta^4 - 8B\beta^3 + 2(3 - 4A)\beta^2 + 3B\beta + A = 0$$

Charakteristickým znakem degenerovaných kritických bodů je strukturní nestabilita potenciálu v těchto bodech. Libovolně malá porucha přidaná ke strukturně nestabilnímu potenciálu způsobí netriviální kvalitativní změnu tohoto potenciálu na okolí kritického bodu. Například funkce $f(x; a) = x^3 + ax$ má pro hodnotu parametru $a = 0$ degenerovaný kritický bod $x = 0$. Malá porucha $a < 0$ rozdělí

tento kritický bod na dva kritické body $x = \pm\sqrt{-a}$. Naopak porucha $a > 0$ kritický bod $x = 0$ zcela odstraní. Popsané chování $f(x; a)$ na okolí kritického bodu $x = 0$ je znázorněno na obr.2.1.



Obrázek 2.1: Chování funkce $f(x; a) = x^3 + ax$ na okolí kritického bodu $x = 0$ pro různé hodnoty parametru a .

Pokusíme se nyní nalézt bifurkační množinu potenciálu (40). Bifurkační množina je množina parametrů $(A, B) \in \mathbb{R}^2$ taková, že potenciál s hodnotami parametrů patřícími do této množiny má alespoň jeden kritický bod a je strukturně nestabilní. Při průchodu bifurkační množinou některé kritické body potenciálu zanikají nebo naopak vznikají nové. Matematicky je bifurkační množina S_B definována takto:

$$S_B = \left\{ (A, B) \in \mathbb{R}^2; \exists \beta \in \mathbb{R}: \frac{d\mathcal{E}(\beta; A, B)}{d\beta} = 0, \frac{d^2\mathcal{E}(\beta; A, B)}{d\beta^2} = 0 \right\}$$

Ihned vidíme, že je-li $(A, B) \in S_{B_1} = \{A = 0, B \in \mathbb{R}\}$ mají rovnice (41) a (42) společné řešení $\beta = 0$. Vyloučením β z (41) a (42) dále zjistíme, že tyto rovnice mají společné řešení také pro $(A, B) \in S_{B_2} \cup S_{B_3}$, kde

$$S_{B_2} = \left\{ (A, B) \in \mathbb{R}^2; A \in [0, 3], B = \pm \frac{12^{\frac{1}{4}} \sqrt{\sqrt{(3-A)(A+1)^3} - \sqrt{3}(A^2 - 4A + 1)}}{3} \right\}$$

$$S_{B_3} = \left\{ (A, B) \in \mathbb{R}^2; A \in [2,3], B = \pm \frac{12^{\frac{1}{4}} \sqrt{-\sqrt{(3-A)(A+1)^3} - \sqrt{3}(A^2 - 4A + 1)}}{3} \right\}$$

Celá bifurkační množina je dána sjednocením $S_B = S_{B_1} \cup S_{B_2} \cup S_{B_3}$.

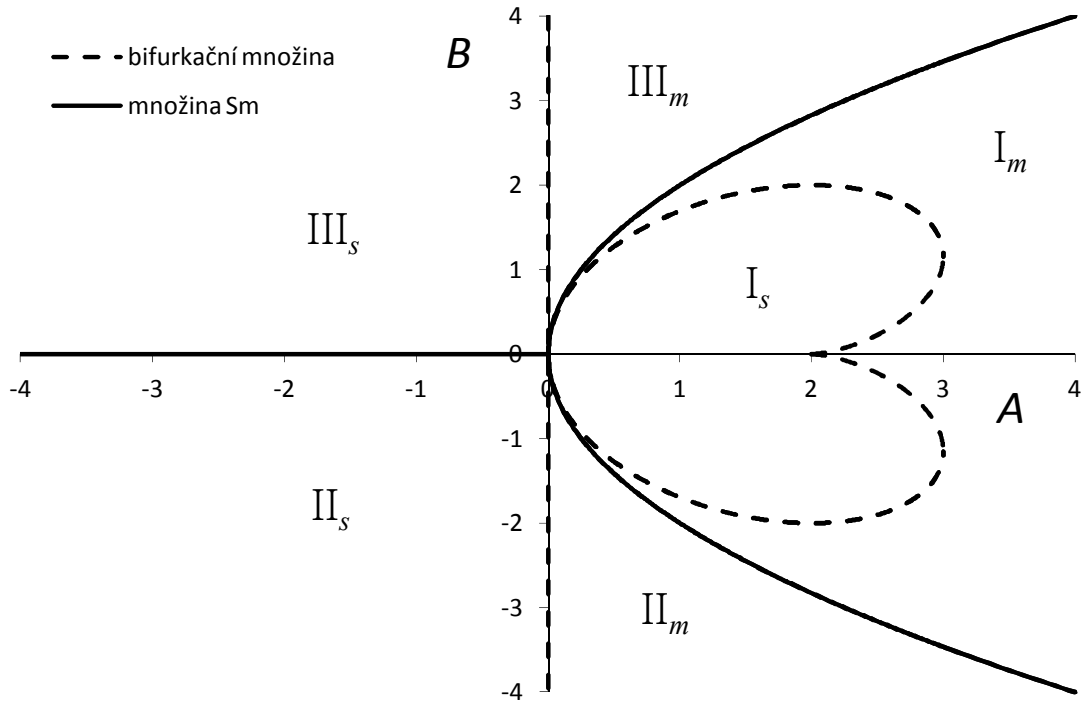
Dalším užitečným pojmem je množina S_M parametrů $(A, B) \in \mathbb{R}^2$ taková, že potenciál parametrizovaný body z této množiny nabývá ve dvou různých bodech globálního minima. Tato množina se v literatuře někdy definuje obecněji pro libovolný typ kritických bodů a nazývá se Maxwellova. Fyzikální význam množiny S_M je takový, že při hodnotách $(A, B) \in S_M$ nastává fázový přechod mezi základními stavy jádra, které odpovídají globálním minimům o stejné energii. Množina S_M tedy představuje v rovině parametrů potenciálu koexistenční křivku dvou fází. Snadno lze nahlédnout, že pro $B = 0$ a $A < 0$ nabývá (40) globálního minima ve dvou bodech $\beta = \pm \sqrt{\frac{A}{A-2}}$. Je proto $\{(A, B) \in \mathbb{R}^2; A < 0, B = 0\} \subset S_M$. Tato část S_M tvoří koexistenční křivku jader protáhlého a zploštělého tvaru. Má-li existovat také fázový přechod mezi sférickým a deformovaným tvarem jádra, musí potenciál nabývat globálního minima současně v bodech $\beta = 0$ a $\beta \neq 0$. Za tohoto předpokladu dostaneme nutnou podmínku pro globální minimum v $\beta \neq 0$ ve tvaru soustavy rovnic:

$$\mathcal{E}(\beta \neq 0; A, B) = 0 \wedge \frac{d\mathcal{E}(\beta \neq 0; A, B)}{d\beta} = 0 \wedge \frac{d^2\mathcal{E}(\beta \neq 0; A, B)}{d\beta^2} > 0 \quad (43)$$

Soustava (43) vede na podmínku $A = \frac{B^2}{4}$. Vyšetřením průběhu (40) pro $A = \frac{B^2}{4}$ zjistíme, že potenciál skutečně nabývá globálního minima v bodech $\beta = 0$ a $\beta \neq 0$. Množina S_M pro potenciál (40) tedy je:

$$S_M = \{(A, B) \in \mathbb{R}^2; A < 0, B = 0\} \cup \left\{ (A, B) \in \mathbb{R}^2; A = \frac{B^2}{4} \right\}$$

Bifurkační množina a množina S_M jsou znázorněny na obr. 2.2.

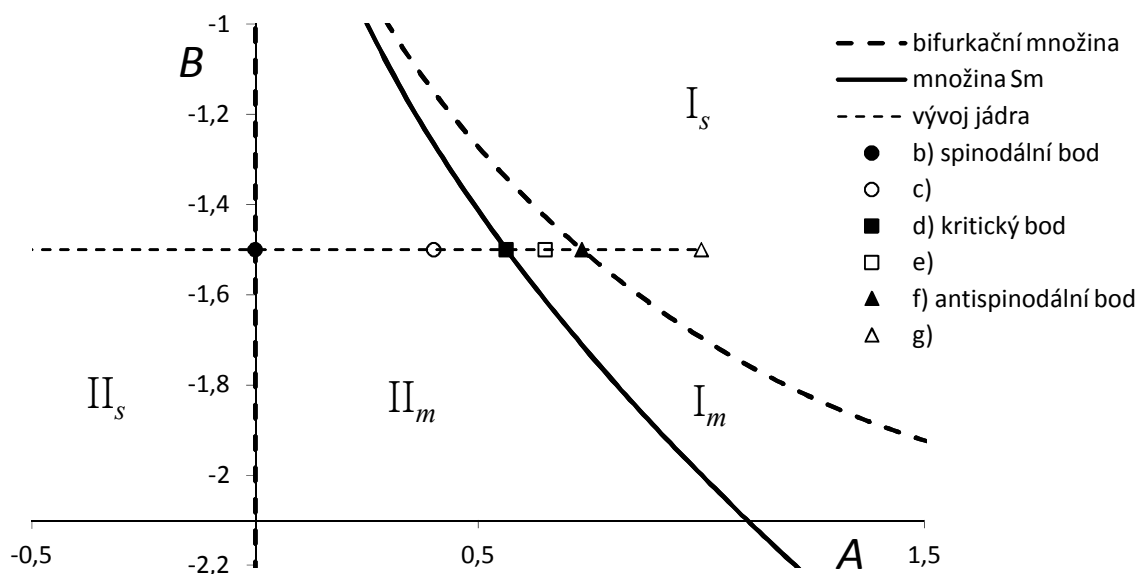


Obrázek 2.2: Bifurkační množina a množina S_M pro potenciál (40). Označení oblastí I_s , I_m , II_s , II_m , III_s a III_m je vysvětleno v textu.

Množina S_M rozděluje rovinu parametrů A , B na tři otevřené množiny označené na obr.2.2 číslicemi I, II a III. V oblasti I má potenciál globální minimum v $\beta_m = 0$, čemuž odpovídá sférický tvar jádra v základním stavu. V oblasti II má potenciál globální minimum v $\beta_m > 0$ a v oblasti III v $\beta_m < 0$. V obou případech je jádro v základním stavu deformované. Uvažíme-li podmínku (38), odpovídá minimu v oblasti II $\gamma_m = 0$ a v oblasti III $\gamma_m = \frac{\pi}{3}$. Tedy v II má jádro protáhlý tvar a v III zploštělý. Bifurkační množina rozděluje dále každou z oblastí I, II, III na dvě podoblasti označené na obr.2.2 indexy s a m . Podrobnější analýzou lze ukázat, že v oblastech s indexem s má potenciál (37) pouze jedno minimum vzhledem k oběma proměnným β a γ , zatímco v oblastech s indexem m existuje kromě globálního minima ještě minimum o vyšší energii a jádro se může nacházet v metastabilním stavu odpovídajícím tomuto druhému minimu [15]. Potenciály, jejichž parametry leží ve stejné podoblasti, mají kvalitativně shodný průběh.

V podkapitole 1.3 bylo zmíněno, že potenciál IBM vykazuje fázové přechody prvního a druhého řádu. Možný vývoj jádra v rovině parametrů A , B , při němž

nastává fázový přechod prvního řádu, je zachycen na obr.2.3, jenž je výřezem z obr.2.2.

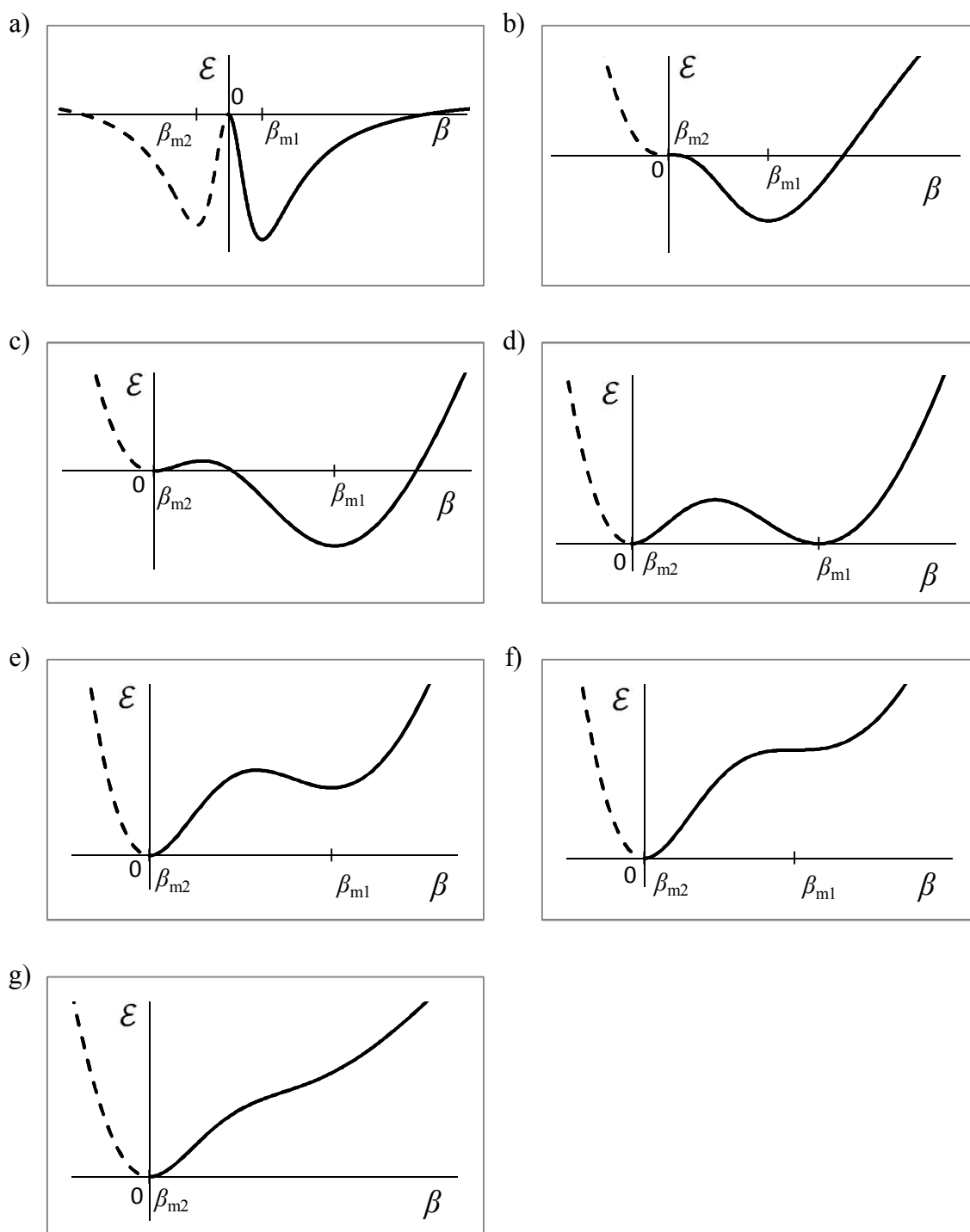


Obrázek 2.3: Výřez z roviny parametrů potenciálu (40), na kterém je spolu s bifurkační množinou a množinou S_M zachycen vývoj jádra, při němž nastává fázový přechod prvního řádu. Na obrázku jsou též znázorněny body b) - g), jimž odpovídající potenciály jsou vykresleny na obr.2.4. Označení oblastí I_s , I_m , II_s a II_m je vysvětleno v textu.

Parametr B má pevně zvolenou hodnotu $B = -1,5$ a A probíhá interval $(-\infty, 1]$. Podle (38) má pro $B < 0$ potenciál globální minimum v $\gamma_m = 0$, což vzhledem k (39) znamená, že fyzikálně relevantní oblast proměnné β je $\beta \geq 0$. Kvalitativní změny potenciálu (40) v závislosti na hodnotě parametru A jsou znázorněny na obr.2.4. Je-li $A < 0$, má potenciál globální minimum v $\beta_{m_1} > 0$ (obr.2.4a). Druhé minimum má potenciál v $\beta_{m_2} < 0$, ovšem toto minimum nemá fyzikální význam. Obě minima jsou oddělená maximem v $\beta = 0$. Jádro se v rovnováze nachází v minimu o souřadnici β_{m_1} a má protáhlý tvar. Budeme-li parametr A plynule zvětšovat, bude se bod nefyzikálního minima β_{m_2} blížit k nule zleva, až pro $A = 0$ bude $\beta_{m_2} = 0$. V tomto okamžiku splyne lokální minimum v β_{m_2} s lokálním maximem v nule a vznikne inflexní bod (obr.2.4b). Hodnota parametru A , při které

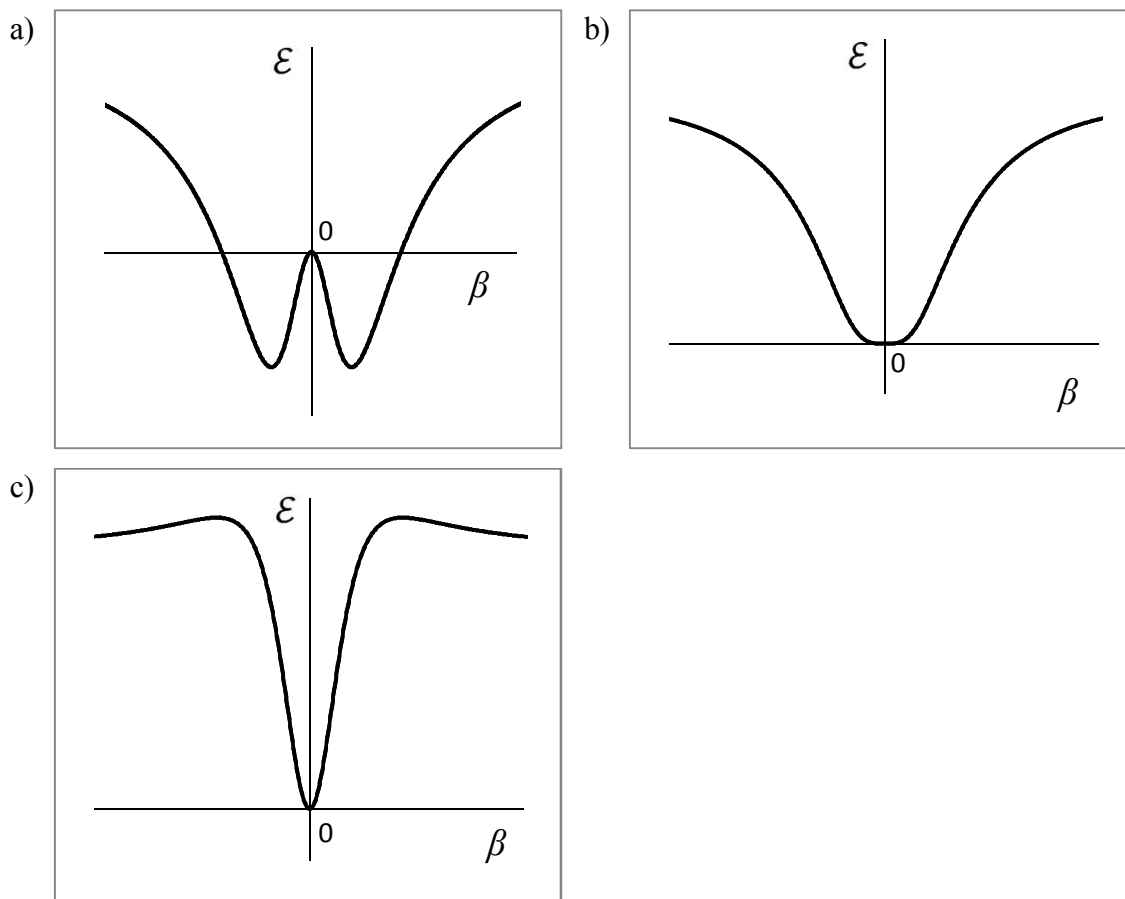
nastane toto splnutí, se v literatuře označuje jako spinodální bod A_{spin} . Jakmile je $A > A_{spin}$, objeví se v oblasti $\beta \geq 0$ druhé lokální minimum v $\beta_{m_2} = 0$ (obr.2.4c). To znamená, že kromě základního stavu, v němž má jádro protáhlý tvar, existuje nyní ještě excitovaný stav jádra o sférické symetrii. Jádro stále setrvává v minimu o souřadnici β_{m_1} až do chvíle, kdy parametr A nabyde své kritické¹ hodnoty $A_{krit} = \frac{B^2}{4}$. Tehdy má potenciál v obou minimech β_{m_1} a β_{m_2} stejnou hodnotu a dojde k fázovému přechodu prvního řádu (obr.2.4d). Při dalším byť sebemenším zvětšení parametru A nastane kvalitativní skoková změna. Původní globální minimum v $\beta_{m_1} > 0$ se stane pouze minimem lokálním a nové globální minimum vznikne v $\beta_{m_2} = 0$ (obr.2.4e). Jádro přejde do minima v β_{m_2} a změní svůj tvar z protáhlého na sférický. Nadále existuje excitovaný stav odpovídající protáhlému tvaru jádra. Když parametr A dosáhne hodnoty, kdy bod $(A; B = -1,5) \in S_{B_2}$, lokální minimum v β_{m_1} zaniká a spolu s ním zaniká i excitovaný stav jádra odpovídající protáhlému tvaru (obr.2.4f). Hodnota parametru A , kdy zaniká minimum v β_{m_1} , se v literatuře označuje jako antispinodální bod, $A_{antispin}$. Pro $A > A_{antispin}$ má potenciál již pouze jedno globální minimum v $\beta_{m_2} = 0$ (obr.2.4g). Spinodální a antispinodální body tedy vymezují oblast, kde se jádro může nacházet v metastabilní rovnováze. V oblasti mezi těmito body existují dvě minima potenciálu (40), resp. (37), vně této oblasti má potenciál jen jedno minimum.

¹ Termín „kritický bod“ byl zaveden na str.19 jako bod X_i^0 v prostoru stavových proměnných potenciálu $V(X_i; c_\alpha)$, v němž platí $\nabla_X V(X_i^0; c_\alpha^0) = 0$. Zde pojem „kritický bod“ označuje bod v rovině řídicích parametrů A, B patřící do množiny S_M .



Obrázek 2.4: Potenciál (40) v závislosti na hodnotě parametru A při pevném $B < 0$. Nefyzikální oblast potenciálu ($\beta < 0$) je vyznačena přerušovaně. a) $A \ll B$, b) $A = A_{spin}$, c) $A_{spin} < A < A_{krit}$, d) $A = A_{krit}$, e) $A_{krit} < A < A_{antispin}$, f) $A = A_{antispin}$, g) $A > A_{antispin}$.

Fázový přechod druhého řádu nastává, je-li $B = 0$ a parametr A se mění ze záporných hodnot do kladných nebo naopak. Změny potenciálu (40) v závislosti na hodnotě parametru A při $B = 0$ jsou zachyceny na obr.2.5.



Obrázek 2.5: Kvalitativní změny potenciálu (40) podél přímky $B = 0$, $A \in (-\infty, \infty)$.
a) $A < 0$, b) $A = 0$, c) $A > 0$.

Všechny body bifurkační množiny S_B s výjimkou počátku parametrizují potenciál, který má jeden dvojnásobně degenerovaný kritický bod. Při hodnotách parametrů $(A, B) = (0, 0)$ má potenciál v bodě $\beta = 0$ dokonce trojnásobně degenerovaný kritický bod, neboť $\frac{d\varepsilon}{d\beta}(0; 0) = \frac{d^2\varepsilon}{d\beta^2}(0; 0) = \frac{d^3\varepsilon}{d\beta^3}(0; 0) = 0$. Podle Thomovy klasifikační věty tedy existuje v jistém okolí bodu $(0; 0)$ hladká transformace potenciálu (40) na cusp katastrofu, která má rovněž trojnásobně degenerovaný kritický bod. Pokusíme se nyní nalézt tuto transformaci.

2.3 Souvislost potenciálu IBM-1 a katastrof typu cusp a fold

Transformaci potenciálu (40) na cusp katastrofu budeme hledat ve dvou krocích. Nejprve najdeme substituci $\bar{\beta} = f(\beta)$ takovou, aby platilo

$$\frac{A\beta^2 + B\beta^3 + \beta^4}{(1 + \beta^2)^2} = \bar{A}\bar{\beta}^2 + \bar{B}\bar{\beta}^3 + \bar{\beta}^4 \quad (44)$$

a následnou lineární transformací převedeme pravou stranu rovnice (44) na cusp katastrofu. Funkci $f(\beta)$ budeme hledat ve tvaru Taylorovy řady $f(\beta) = \sum_{k=0}^{\infty} f_k \beta^k$. Po dosazení Taylorova rozvoje $f(\beta)$ za $\bar{\beta}$ do (44) a vynásobení výrazem $(1 + \beta^2)^2$ dostaneme

$$A\beta^2 + B\beta^3 + \beta^4 = (1 + 2\beta^2 + \beta^4) \left[\bar{A} \left(\sum_{k=0}^{\infty} f_k \beta^k \right)^2 + \bar{B} \left(\sum_{k=0}^{\infty} f_k \beta^k \right)^3 + \left(\sum_{k=0}^{\infty} f_k \beta^k \right)^4 \right] \quad (45)$$

Z porovnání koeficientů u jednotlivých mocnin β na obou stranách rovnice (45) vyplývá následující soustava rovnic pro konstanty f_k :

$$k = 0 \quad f_0^4 + \bar{B}f_0^3 + Af_0^2 = 0$$

$$k = 1 \quad f_0 f_1 (2\bar{A} + 3\bar{B}f_0 + 4f_0^2) = 0$$

$$\begin{aligned} & \bar{A} \sum_{l=0}^k f_l f_{k-l} + \bar{B} \sum_{m=0}^k \sum_{l=0}^{(k-m)} f_m f_l f_{k-m-l} + \sum_{n=0}^k \sum_{m=0}^{(k-n)} \sum_{l=0}^{(k-n-m)} f_n f_m f_l f_{k-n-m-l} + \\ & + 2\bar{A} \sum_{l=0}^{(k-2)} f_l f_{k-l-2} + 2\bar{B} \sum_{m=0}^{(k-2)} \sum_{l=0}^{(k-m-2)} f_m f_l f_{k-m-l-2} + \\ k \geq 2 & + 2 \sum_{n=0}^{(k-2)} \sum_{m=0}^{(k-n-2)} \sum_{l=0}^{(k-n-m-2)} f_n f_m f_l f_{k-n-m-l-2} + \\ & + \bar{A} \sum_{l=0}^{(k-4)} f_l f_{k-l-4} + B \sum_{m=0}^{(k-4)} \sum_{l=0}^{(k-m-4)} f_m f_l f_{k-m-l-4} + \\ & + \sum_{n=0}^{(k-4)} \sum_{m=0}^{(k-n-4)} \sum_{l=0}^{(k-n-m-4)} f_n f_m f_l f_{k-n-m-l-4} = PS_k \end{aligned} \quad (46)$$

$$\text{kde } PS_k = \begin{cases} A & k = 2 \\ B & k = 3 \\ 1 & k = 4 \\ 0 & k \geq 5 \end{cases}$$

Soustava (46) je řešitelná pro každou volbu konstant \bar{A} , \bar{B} . Například pro speciální volbu $\bar{A} = A, \bar{B} = B$ dostaneme

$$\bar{\beta} = f(\beta) = \beta - \beta^3 + \frac{B}{2A}\beta^4 + \left(1 + \frac{1}{A} - \frac{3B^2}{4A^2}\right)\beta^5 + \left(\frac{9B^3}{8A^3} - \frac{5B}{2A^2} - \frac{B}{A}\right)\beta^6 + \dots$$

Protože $\frac{df(\beta)}{d\beta}|_{\beta=0} \neq 0$, je transformace $\bar{\beta} = f(\beta)$ difeomorfismus na jistém okolí bodu $\beta = 0$ a podle věty o inverzní funkci existuje na tomto okolí hladká inverzní transformace $\beta = f^{-1}(\bar{\beta})$. Potenciál (40) se substitucí $\beta = f^{-1}(\bar{\beta})$ převede na tvar

$$V(\bar{\beta}) = A\bar{\beta}^2 + B\bar{\beta}^3 + \bar{\beta}^4 \quad (47)$$

Tento tvar potenciálu je mnohem jednodušší než původní tvar (40). Nesmíme však zapomínat, že (47) je použitelný pouze tam, kde existuje transformace $\beta = f^{-1}(\bar{\beta})$. V následujícím uvidíme, že transformaci potenciálu z tvaru (40) na (47) s volbou $\bar{A} = A, \bar{B} = B$ je možné použít k výpočtu spinodálního a kritického bodu. Antispinodální body potenciálu (40) a (47) se však liší, což lze připsat selhání výše uvedené podmínky na existenci transformace $\beta = f^{-1}(\bar{\beta})$ pro hodnoty proměnné β v oblasti sekundárního minima.

Potenciál (47) je možné další substitucí převést na katastrofu typu cusp. Vhodná substituce má tvar $\bar{\beta} = x - x_0$, kde x_0 je dosud neurčená konstanta. Po dosazení za $\bar{\beta}$ do (47) dostaneme

$$V(x) = x^4 + (B - 4x_0)x^3 + (A - 3Bx_0 + 6x_0^2)x^2 + (-2Ax_0 + 3Bx_0^2 - 4x_0^3)x + (Ax_0^2 - Bx_0^3 + x_0^4) \quad (48)$$

Při splnění podmínky $x_0 = \frac{B}{4}$ se (48) dále zjednoduší na

$$V(x) = x^4 + \mathcal{A}x^2 + \mathcal{B}x + V_0 \quad (49)$$

kde

$$\begin{aligned}\mathcal{A} &= A - \frac{3}{8}B^2 & \mathcal{B} &= -\frac{AB}{2} + \frac{B^3}{8} \\ V_0 &= \frac{B^2}{16}\left(A - \frac{3}{16}B^2\right)\end{aligned}\tag{50}$$

Až na aditivní konstantu V_0 se jedná o katastrofu typu cusp. Konstantní člen V_0 však není podstatný, pokud se zajímáme o lokální vlastnosti potenciálu. Ekvivalence potenciálu (40) katastrofě cusp na okolí bodu $(\beta; A, B) = (0; 0, 0)$ byla nyní ukázána přímo nalezením příslušné transformace. Nicméně tuto ekvivalenci lze vidět mnohem snadněji z Taylorova rozvoje potenciálu (40) v bodě $\beta = 0$ při hodnotách parametrů $(A, B) = (0, 0)$.

$$\mathcal{E}(\beta; 0, 0) \approx \beta^4 - 2\beta^6 + 3\beta^8 - 4\beta^{10} + \dots = \beta^4 p(\beta)\tag{51}$$

Protože $p(0) = 1$, je $h(\beta) = \beta p(\beta)^{1/4}$ difeomorfismus na jistém okolí bodu $\beta = 0$ a $\mathcal{E}(\beta; 0, 0) = (g \circ h)(\beta)$, kde $g(x) = x^4$ je zárodek katastrofy typu cusp. Tímto postupem bychom však nezískali vztah (50) mezi parametry A, B potenciálu (40) a parametry \mathcal{A}, \mathcal{B} cusp katastrofy. Podobně lze ukázat, že potenciály parametrizované body z $S_B \setminus \{(0, 0)\}$ jsou na jistém okolí svých degenerovaných kritických bodů ekvivalentní katastrofě typu fold. Taylorův rozvoj potenciálu (40) s hodnotami parametrů $(A, B) \in S_B \setminus \{(0, 0)\}$ na okolí degenerovaného kritického bodu β_0 má člen nejmenšího řádu úměrný $(\beta - \beta_0)^3$. Například pro $(A, B) = (0, 2)$ je $\mathcal{E}(\beta; 0, 2) \approx 2\beta^3 + \beta^4 - 4\beta^5 + \dots$ na jistém okolí degenerovaného kritického bodu $\beta_0 = 0$. Členy vyššího řádu než β^3 lze odtransformovat analogicky jako v případě katastrofy cusp a převést tak potenciál v okolí β_0 na tvar $V(\beta) = \beta^3$, což je zárodek katastrofy typu fold.

2.4 Geometrie cusp katastrofy

Jak bylo ukázáno výše, chová se potenciál (40) na jistém okolí bodu $(\beta; A, B) = (0; 0, 0)$ kvalitativně stejně jako katastrofa typu cusp. Katastrofa typu cusp má tvar:

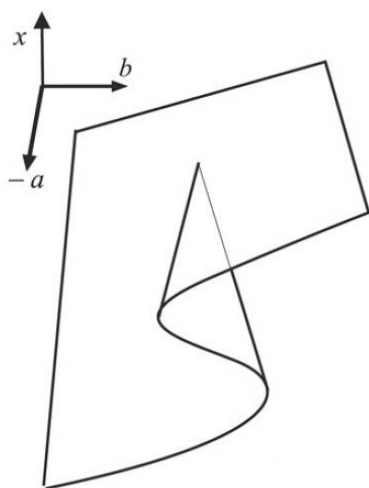
$$V(x) = x^4 + \mathcal{A}x^2 + \mathcal{B}x.\tag{52}$$

Nutné podmínky existence kritických a degenerovaných kritických bodů cusp katastrofy jsou:

$$\frac{dV(x; \mathcal{A}, \mathcal{B})}{dx} = 0 \Leftrightarrow 4x^3 + 2\mathcal{A}x + \mathcal{B} = 0 \quad (53)$$

$$\frac{d^2V(x; \mathcal{A}, \mathcal{B})}{dx^2} = 0 \Leftrightarrow 12x^2 + 2\mathcal{A} = 0 \quad (54)$$

Rovnice (53) zadává implicitně rovnovážnou hodnotu stavové veličiny x jako funkci parametrů \mathcal{A} , \mathcal{B} . Grafické znázornění funkce $x(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ je na obr.2.6.



Obrázek 2.6: Rovnovážná hodnota stavové veličiny x v závislosti na parametrech katastrofy cusp. Parametr \mathcal{A} je na obrázku označen a , parametr \mathcal{B} je označen b . Převzato z [7].

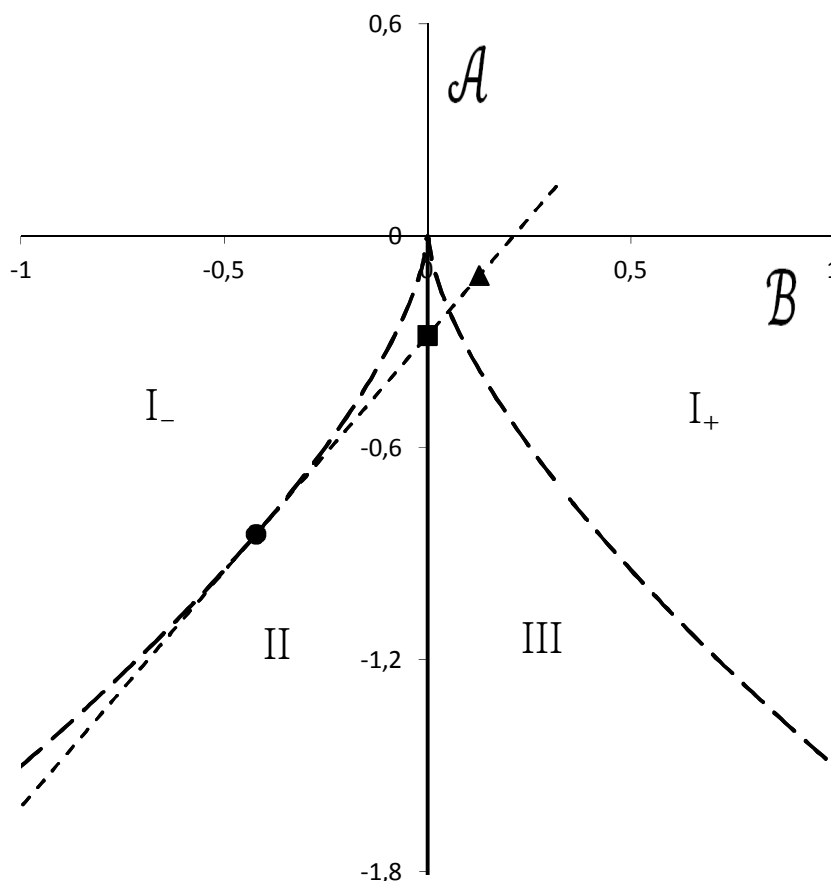
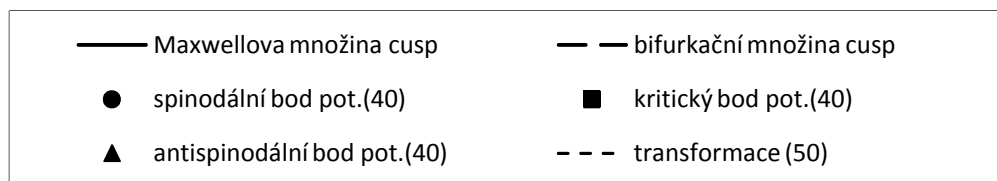
Rovnice (54) má řešení $x = \pm \sqrt{-\frac{\mathcal{A}}{6}}$ pro $\mathcal{A} \leq 0$. Pro $\mathcal{A} > 0$ nemá (54) žádné řešení.

Po vyloučení x ze soustavy rovnic (53), (54) dostaneme podmínku $8\mathcal{A}^3 + 27\mathcal{B}^2 = 0$. Bifurkační množina katastrofy cusp je tedy $S_B^{cusp} = \{(\mathcal{A}, \mathcal{B}) \in \mathbb{R}^2; 8\mathcal{A}^3 + 27\mathcal{B}^2 = 0\}$. Maxwellova množina pro cusp katastrofu je $S_M^{cusp} = \{(\mathcal{A}, \mathcal{B}) \in \mathbb{R}^2; \mathcal{A} < 0, \mathcal{B} = 0\}$.

Bifurkační a Maxwellova množina cusp katastrofy jsou znázorněny na obr.2.7. Podobně jako bifurkační množina potenciálu (40) také S_B^{cusp} rozděluje rovinu

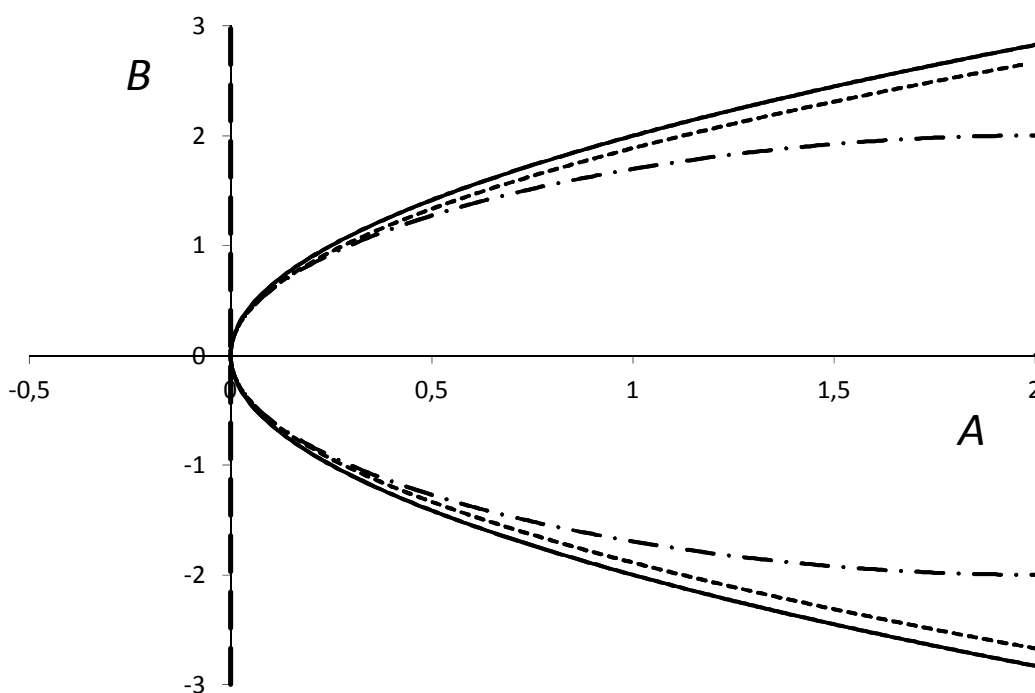
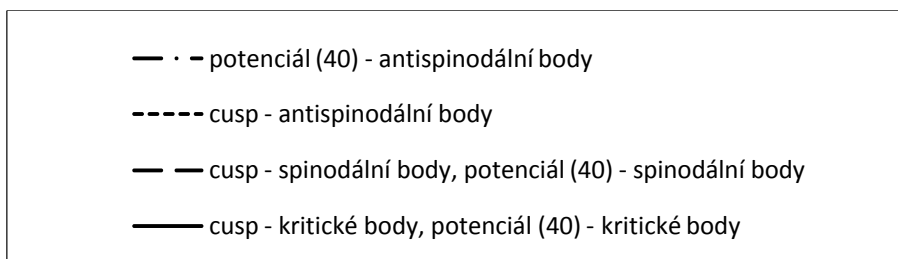
parametrů \mathcal{A} , \mathcal{B} na otevřené množině tak, že hodnoty parametrů v každé z nich odpovídají kvalitativně stejným potenciálům. V oblastech I_+ a I_- má (52) jedno minimum, přičemž v I_+ je toto minimum v bodě $x_m > 0$ a v I_- v bodě $x_m < 0$. Hranici oddělující oblasti I_+ a I_- tvoří kladná poloosa \mathcal{A} . V oblastech II a III má (52) dvě minima v bodech $x_{m_1} > 0$ a $x_{m_2} < 0$ oddělená maximem. Sama bifurkační množina pak parametrizuje potenciály, které mají jedno minimum a jeden inflexní bod vytvořený splynutím druhého minima s maximem.

V podkapitole 2.2 byl fázový přechod prvního řádu mezi protáhlým a sférickým tvarem jádra v základním stavu ilustrován na vývoji jádra podél polopřímky $\{B = -1,5; A \in (-\infty, 1]\}$ v rovině parametrů A, B potenciálu (40). Tato polopřímka, včetně význačných bodů na ní, je na obr.2.7 zobrazena transformací (50) do roviny řídicích parametrů cusp katastrofy. Spinodální bod $(A = 0; B = -1,5)$ se zobrazí na $(\mathcal{A}, \mathcal{B})_{spin} = (-\frac{3B^2}{8}, \frac{B^3}{8})$. Je zřejmé, že obraz spinodálního bodu leží v S_B^{cusp} . Antispinodální bod se však na rozdíl od spinodálního do S_B^{cusp} nezobrazí. Jeho souřadnice v rovině parametrů \mathcal{A}, \mathcal{B} jsou značně komplikovanou funkcí A, B , a proto je zde neuvádíme.



Obrázek 2.7: Maxwelllova a bifurkační množina cusp katastrofy a polopřímka $\{B = -1,5; A \in (-\infty, 1]\}$ z obr.2.3 zobrazená transformací (50). Na polopřímce jsou vyznačeny spinodální, antispinodální a kritický bod potenciálu (40).

Z obr.2.7 je vidět, že cusp katastrofa představuje pouze aproximaci potenciálu (40) na okolí bodu $(\beta; A, B) = (0; 0, 0)$. Nicméně je to aproximace velmi užitečná. Ačkoli se antispinodální body potenciálu (40) a cusp katastrofy neshodují, zachycuje cusp katastrofa veškeré kvalitativní vlastnosti potenciálu. Schopnost cusp katastrofy aproximovat potenciál lze ilustrovat ještě jiným způsobem. Transformací (50) můžeme zobrazit množiny S_B^{cusp} a S_M^{cusp} do roviny parametrů A, B a porovnat je tak s bifurkační množinou a množinou S_M celého potenciálu (40), viz obr.2.8.



Obrázek 2.8: Bifurkační množina potenciálu (40) S_B a cusp katastrofy S_B^{cusp} , Maxwellova množina cusp katastrofy S_M^{cusp} a množina S_M v blízkosti bodu $(A, B) = (0,0)$. Obě bifurkační množiny jsou na obrázku dále rozděleny na spinodální a antispinodální body.

Z obr.2.8 je patrné, že v blízkosti počátku katastrofa cusp velmi dobře aproximuje potenciál (40). Spinodální množiny a stejně tak množiny S_M a S_M^{cusp} se dokonce zobrazují samy na sebe zcela přesně. Odchylka antispinodálních křivek pro oba potenciály narůstá se vzrůstající vzdáleností od bodu $(A, B) = (0,0)$.

Závěr

V této bakalářské práci byly studovány kvazikritické změny tvaru atomových jader, které mohou být chápány jako prekuzory kvantových fázových přechodů v konečném mnohočásticovém systému. Jako model atomového jádra byla zvolena nejjednodušší verze modelu interagujících bosonů, označovaná IBM-1, která je použitelná pro sudo-sudá jádra.

Bylo podrobně dokázáno několik relací užitečných při zacházení s kreačními a anihilačními operátory. Byla naznačena souvislost modelu IBM s geometrickým modelem jádra a podrobně představen výpočet vedoucí k vyjádření potenciálu IBM-1 pomocí Bohrových kvadrupólových proměnných.

Bylo vyšetřeno kritické chování modelového potenciálu a diskutována jeho strukturní stabilita. Modelový potenciál vykazuje fázové přechody prvního a druhého řádu mezi základními stavy, jimž odpovídá sférický nebo deformovaný tvar jádra. Analýza kritického chování potenciálu byla též provedena v rámci teorie katastrof, jakožto zajímavého matematického prostředí ke studiu kritického chování. Bylo ukázáno, že je možné nahradit potenciál na okolí degenerovaného kritického bodu $(A, B) = (0, 0)$ kanonickou katastrofickou funkcí cusp, aniž by tím byla ztracena jakákoli kvalitativní vlastnost v chování potenciálu. Tento závěr má význam pro jednotnou klasifikaci fázových přechodů v modelech s konečným počtem stupňů volnosti.

Seznam použité literatury

- [1] Vojta, M.: *Rep. Prog. Phys.* **66** 2069 (2003)
- [2] Pochodzalla, J., et al.: *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1040 (1995)
- [3] Elliot, J. B., et al.: *Phys. Rev. Lett.* **88**, 042701 (2002)
- [4] Alhassid, Y., Levit, S., Zingmann, J.: *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 539.
- [5] Schiller, A., et al.: *Phys. Rev. C* **63**, 021306(R) (2001)
- [6] Goodman, A. L.: *Nucl. Phys. A* **369**, 365 (1981)
- [7] Cejnar, P., Jolie, J.: *Prog. Part. Nucl. Phys.* **62**, 210 (2009)
- [8] Arima, A., Iachello, F.: *The Interacting Boson Model*, Cambridge Univ. Press, 1987
- [9] Cejnar, P., Iachello, F.: *J. Phys. A: Math. Theor.* **40**, 581 (2007)
- [10] Bohr, A.: *Mat. Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk.* **14**, 26 (1952)
- [11] Bohr, A., Mottelson, B.: *Nuclear Structure II*, Benjamin Reading, 1975
- [12] Cejnar, P., Jolie, J., Casten, R. F.: *Rev. Mod. Phys.* **82**, 2155 (2010)
- [13] Castaños, O., Federman, P., Frank, A., Pittel, S.: *Nucl. Phys.* **A379**, 61 (1982)
- [14] Stewart, I.: *Rep. Prog. Phys.* **45**, 185 (1982)
- [15] López-Moreno, E., Castaños, O.: *Phys. Rev. C* **54**, 2374 (1996)
- [16] Thom, R.: *Topology* **8**, 313 (1969)
- [17] Thom, R.: *Stabilité Structurelle et Morphogénèse*, Benjamin Reading, 1972