

MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ  
FAKULTA  
Univerzita Karlova

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Jakub Novotný

**Kvantový chaos v konečných  
mnohočásticových systémech**

Ústav čisticové a jaderné fyziky

Vedoucí diplomové práce: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D.

Studijní program: Teoretická fyzika

Studijní obor: FTFP

Praha 2022



Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

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 má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V ..... dne .....  
Podpis autora



Děkuji svému vedoucímu Mgr. Pavlu Stránskému, Ph.D. za vedení práce a velkou ochotu konzultovat kdykoliv a cokoliv.



Název práce: Kvantový chaos v konečných mnohočásticových systémech

Autor: Jakub Novotný

Ústav: Ústav částicové a jaderné fyziky

Vedoucí diplomové práce: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D., Ústav částicové a jaderné fyziky

**Abstrakt:** V této práci ukazujeme, že relativní oscilace mikrokanonických různočasových korelátorů v asymptotických časech jsou potlačeny chaosem. Mohou tak sloužit jako indikátor kvantového chaosu. Tento jev prezentujeme na numerických výsledcích různočasových korelátorů v modelu s hamiltoniánem daným algebrou  $u(3)$ . Nejprve dokážeme, že model může sloužit nejen k popisu molekulárních vibrací, ale také Bose-Einsteinova kondenzátu. Dále aplikujeme různé metody pro studium kvantového i klasického chaosu. Konkrétně se jedná o rozdelení nejbližších hladin, Brodyho rozdelení, delokalizaci vlastních stavů, Poincarého řezy, Lyapunovův exponent a podíl objemu chaotické části klasického fázového prostoru. Hlavní náplní naší práce je porovnání těchto výsledků s relativními oscilacemi různočasových korelátorů. Ukazujeme, že jejich potlačení souvisí s kvantovým chaosem a podílem objemu chaotických oblastí na klasickém fázovém prostoru.

**Klíčová slova:** kvantový chaos, různočasové korelátorové, Lyapunovův exponent,  $u(3)$  algebra, míchání informace, klasický chaos, Bose-Einsteinův kondenzát, vibronový model

Title: Quantum chaos in finite many-body systems

Author: Jakub Novotný

Institute: Institute of Particle and Nuclear Physics

Supervisor: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D., Institute of Particle and Nuclear Physics

**Abstract:** In this work, we show, that relative oscillations in asymptotic times of microcanonical Out-of-Time-Order correlators (OTOCs) are suppressed by chaos with the size of the system. Therefore they can serve as an indicator of quantum chaos in quantum systems. We demonstrate this phenomenon on numerical results of the Out-of-Time-Order correlators from a model with hamiltonian based on the  $u(3)$  algebra. Firstly we prove, that this model can be used not only for the description of molecular vibrations, but also Bose-Einstein condensate. Then we employ several methods for the analysis of both quantum and classical chaos, namely spectral statistics such as Nearest Neighbour Spacing Distribution and Brody distribution, Inverse Participation Ratio, Poincaré sections, Lyapunov exponent, and the chaotic fraction of classical phase space. We compare these results with relative oscillations of microcanonical Out-of-Time-Order correlators and show, that their suppression corresponds with the chaoticity of the quantum system and the fraction of chaotic regions of the classical phase space.

**Keywords:** quantum chaos, Out-of-Time-Order correlators, Lyapunov exponent,  $u(3)$  algebra, information scrambling, classical chaos, Bose-Einstein condensate, vibron model



# Obsah

<b>Úvod</b>	<b>3</b>
<b>1 Chaos</b>	<b>5</b>
1.1 Klasický chaos . . . . .	5
1.1.1 Integrabilní systémy . . . . .	6
1.1.2 KAM teorém . . . . .	8
1.2 Kvantový chaos . . . . .	9
1.2.1 Teorie náhodných matic . . . . .	11
1.2.2 Spektrální statistiky . . . . .	12
1.2.3 Střední hodnoty . . . . .	18
<b>2 Algebraický <math>u(3)</math> model</b>	<b>27</b>
2.1 Vibronový model . . . . .	27
2.2 Bose-Einsteinův kondenzát . . . . .	29
2.2.1 Vztah vibronového a BEC hamiltoniánu . . . . .	30
2.3 Chaos v $u(3)$ modelu . . . . .	31
<b>3 Různočasové korelátorý</b>	<b>39</b>
3.1 Krátkočasové chování a saturace . . . . .	40
3.1.1 Klasický přístup . . . . .	41
3.1.2 Semiklasický přístup . . . . .	42
3.1.3 Termální OTOCy . . . . .	43
<b>4 OTOCy v <math>u(3)</math> modelu</b>	<b>45</b>
4.1 Krátké časy a volba operátorů . . . . .	45
4.2 Oscilace v asymptotických časech . . . . .	51
4.2.1 Relativní oscilace a klasický chaos . . . . .	56
4.2.2 Relativní oscilace a velikost systému . . . . .	58
4.2.3 Relativní oscilace a náhodné matice . . . . .	60
<b>Závěr</b>	<b>65</b>
<b>Seznam použité literatury</b>	<b>67</b>
<b>Seznam obrázků</b>	<b>71</b>

<b>A Vibronový a BEC hamiltonián</b>	<b>73</b>
A.1 Spektrum a záměna znaménka u $\hat{\tau}$ a $\hat{\tau}^\dagger$	74
A.2 Diskrétní symetrie	75
A.3 Role operátorů $\hat{D}$ a $\hat{R}$	77
<b>B Poissonovy závorky obecných funkcí</b>	<b>79</b>

# Úvod

Chaos neznamená absenci řádu. Chaotické systémy jsou řízeny jasnými a relativně jednoduchými pravidly. Ty však dávají vzniknout zdánlivě náhodnému chování, které je prakticky nepředvídatelné. Pro alespoň přibližnou znalost budoucnosti je zapotřebí znát naprosto přesně přítomnost. Tato exponenciální citlivost klasických chaotických systémů na změnu počátečních podmínek se dostala i do podvědomí veřejnosti jako „efekt mávnutí motýlího křídla“. Podstatnější je, že v chaotickém režimu je systém ergodický, tedy uzavřený systém si po určitém čase vyzkouší veškerá možná chování. Jejich popis je tak lepší provádět statisticky.

Otázkou bylo, jak létají motýli v kvantové mechanice. Unitarita časového vývoje totiž nedovoluje exponenciální vzdalování kvantových stavů. Tato citlivost je kvantovou mechanikou skutečně potlačena. Zatímco klasický systém vykazuje exponenciální rozchod blízkých trajektorií, evoluce jeho kvantového analogu vede na blízké stavy s téměř stejnými vlnovými funkcemi. Přesto má smysl mluvit o kvantovém chaosu. Kvantově chaotické systémy se od těch regulárních liší ve stacionárních vlastnostech, jako jsou statistické vlastnosti spekter nebo podoba vlastních stavů, ale i v dynamice, kdy kvantově chaotické systémy mají tendenci relaxovat.

Jednou z podstatných odlišností chaotických a regulárních systémů je rychlosť šíření informace. To je zprostředkováno interakcí mezi jednotlivými stupni volnosti systému. Nástrojem k měření jeho rychlosti se v poslední době staly různočasové korelátoře (zkráceně OTOC<sup>1</sup>). Těmi lze studovat mísení informace v systémech, jakými jsou kvantové počítače, ale i černé díry. Rychlosť mísení informace udává počáteční nárůst OTOCů. Ten je u velké skupiny kvantově chaotických systémů exponenciální a jeho rychlosť je dána klasickým Lyapunovovým exponentem.

Počátečnímu nárůstu různočasových korelátorů byla věnována v poslední době velká pozornost. V této práci ukazujeme, že s chaosem je spojeno i jejich chování v asymptotických časech. Ukážeme, že relativní oscilace různočasových korelátorů jsou v chaotických oblastech spektra potlačeny a toto potlačení roste algebraicky s jejich velikostí.

Různočasové korelátoře budeme studovat v algebraickém modelu s hamiltoniánem daným algebrou  $u(3)$ . Tento model lze použít nejen k popisu molekulárních vibrací, ale také Bose-Einsteinova kondenzátu, což dovoluje jeho experimentální realizaci a měření OTOCů. Jeho hlavními výhodami jsou konečnost Hilbertova prostoru a algebraická formulace celého problému. To výrazně zjednoduší použití stávajících indikátorů kvantového chaosu, jakými jsou spektrální statistiky a delokalizace vlastních stavů.

Máme možnost porovnat chování relativních oscilací OTOCů nejen s kvantovými indikátoři chaosu, ale také s klasickým Lyapunovovým exponentem a podílem chaotických

---

<sup>1</sup>Z anglického *Out-of-Time-Order Correlators*.

oblastí na klasickém fázovém prostoru, neboť jsme v předchozí práci provedli klasickou limitu tohoto modelu a detailně studovali klasický chaos na fázovém prostoru. Ukazuje se, že právě podíl chaotických oblastí na klasickém fázovém prostoru souvisí s mírou potlačení relativních oscilací.

# Kapitola 1

## Chaos

Chaotické systémy vykazují vysokou citlivost na změnu počátečních podmínek. Tato vlastnost se dostala i do povědomí veřejnosti pod pojmem *mávnutí motýlího křídla*, který odkazuje na otázku, zda mávnutí motýlího křídla na jižní polokouli Země může způsobit hurikán na severní polokouli. Exponenciální vzdalování blízkých trajektorií je jednou z charakteristických vlastností chaotických systémů v klasické mechanice a jeho rychlosť lze použít k vyjádření míry chaosu v daném systému.

Fundamentálnější popis reality v podobě kvantové mechaniky však citlivost na počáteční podmínky nevykazuje. Linearita kvantové mechaniky vzdalování blízkých kvantových stavů v čase nedovoluje. Přesto u kvantových systémů, jejichž klasická limita vykazuje přítomnost chaosu, pozorujeme jiné vlastnosti (spektrální statistiky, časový vývoj středních hodnot) než u systémů s nechaotickým klasickým předobrazem.

V této práci nás zajímají převážně kvantové projevy chaosu. Přesto se nejprve zmíníme o základních vlastnostech a projevech chaosu v klasické mechanice. Při studiu kvantového chaosu se používají také semiklasické techniky, takže určitá míra intuice je užitečná. Pak se podrobněji podíváme na základní indikátory chaosu v kvantových systémech. Zvláště pak na různočasové korelátoru, jejichž studium je hlavní náplní této práce.

### 1.1 Klasický chaos

Studium chaosu v klasických systémech je velmi bohatá disciplína. Obecně se jedná o studium diferenciálních rovnic, které udávají evoluci systému, a vlastností jejich řešení. My se zaměříme na hamiltonovské systémy s konečným počtem stupňů volnosti. Stav hamiltonovského systému s  $f$  stupni volnosti je dán jako bod  $\mathbf{x}$  na fázovém prostoru, což je  $2f$  dimenzionální prostor, na kterém lze zavést souřadnice z kanonicky sdružených poloh  $q_i$  a hybností  $p_i$

$$\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p}), \quad \mathbf{q} = (q_1, \dots), \mathbf{p} = (p_1, \dots).$$

Dynamika je určena hamiltoniánem, tedy funkcí na fázovém prostoru  $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ . Omezíme se jen na uzavřené systémy. V nich se zachovává energie, takže evoluce, která je dána Hamiltonovými rovnicemi, probíhá na oddělených energetických nadplochách ve fázovém prostoru

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E = \text{konst.}$$

Zachovávání energie má velmi zajímavé důsledky. V otevřených chaotických systémech vznikají tzv. atraktory. Nejznámějším je pravděpodobně fraktální Lorenzův atraktor, jež je řešením jednoduchého Lorenzova modelu atmosférické konvekce. S ním je také spojeno pojmenování chaosu jako efektu motýlích křídel.

V konzervativních systémech je hlavním projevem chaosu rozpadávání tzv. invariantních torů. Projevy chaosu na fázovém prostoru se pokusíme popsat alespoň kvalitativně po vzoru (Gutzwiller, 2013).

### 1.1.1 Integrabilní systémy

Obecný systém nemusí být chaotický. Najdeme-li stejný počet nezávislých integrálů pohybu, jako je stupňů volnosti, můžeme pomocí nich vyjádřit řešení pohybových rovnic. To se projeví ve struktuře trajektorií na fázovém prostoru. Mějme  $f$  nezávislých integrálů pohybu  $\{I_1, \dots, I_f\}$ , které jsou kompatibilní, to znamená, že jejich Poissonovy závorky

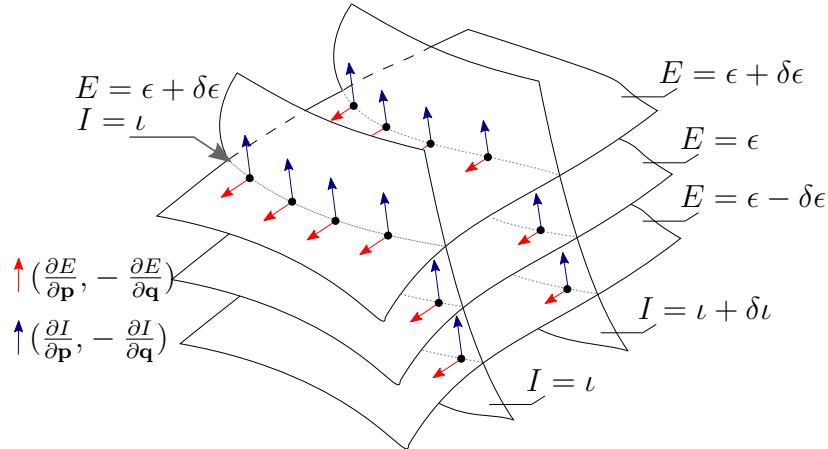
$$\{A, B\} \equiv \sum_{i=1}^f \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right), \quad A, B \text{ fce. na fáz. prostoru} \quad (1.1)$$

jsou nulové. Pak na fázovém prostoru existuje  $f$  kompatibilních vektorových polí. Relaci

$$0 = \{I_i, I_j\} = \frac{\partial I_i}{\partial \mathbf{q}} \frac{\partial I_j}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial I_i}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial I_j}{\partial \mathbf{q}} = \left( \frac{\partial I_j}{\partial \mathbf{p}}, - \frac{\partial I_j}{\partial \mathbf{q}} \right) \cdot \left( \frac{\partial I_i}{\partial \mathbf{q}}, - \frac{\partial I_i}{\partial \mathbf{p}} \right)$$

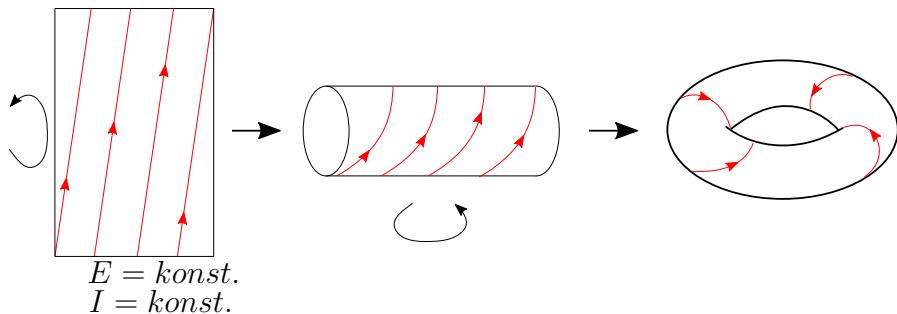
lze také chápat jako relaci ortogonality vektorového pole  $(\frac{\partial I_j}{\partial \mathbf{p}}, - \frac{\partial I_j}{\partial \mathbf{q}})$  a gradientu funkce  $I_i$ . Tedy pole  $(\frac{\partial I_j}{\partial \mathbf{p}}, - \frac{\partial I_j}{\partial \mathbf{q}})$  je tečné pole nadploch konstantního  $I_i$ . Průnikem těchto  $f$  konstantních nadploch, z nichž každá odpovídá jinému integrálu pohybu, je pak  $f$ -dimenzionální varieta. Netriviálním topologickým výsledkem je, že se jedná o  $f$ -dimenzionální torus. To plyne opět z existence  $f$  kompatibilních vektorových polí. Ty můžeme na tomto  $f$ -dimenzionálním průniku použít k zavedení souřadnic. Otázkou pak je, na jakém topologickém objektu lze takto souřadnice zavést. Musíme například vyloučit kouli, neboť tu nelze „učesat“, tedy na kouli nelze zavést tečné vektorové pole, které by bylo všude nenulové. Hladká vektorová pole však můžeme zavést na  $f$ -dimenzionálním toru, který lze získat z  $f$ -dimenzionální krychle ztotožněním jejích hran. Zjednodušenou ilustraci uvádíme na obrázcích 1.1 a 1.2.

## 2D průnik jako invaritní podprostor



Obrázek 1.1: Ilustrace fázového prostoru integrabilního systému se dvěma stupni volnosti ( $f = 2$ ) a dvěma integrály pohybu  $E$  (energie) a  $I$ . Na fázovém prostoru tak existuje dvojice kompatibilních vektorových polí  $(\frac{\partial E}{\partial p}, -\frac{\partial E}{\partial q})$  (červené) a  $(\frac{\partial I}{\partial p}, -\frac{\partial I}{\partial q})$  (modré), která jsou tečná k trojrozměrným nadplochám konstatního  $I$  resp.  $E$ . Dvojrozměrné průniky těchto nadploch (2D průnik  $E = \text{konst.}$ ,  $I = \text{konst.}$ ) jsou invariantní podprostory. Každá trajektorie vývoje leží na právě jednom 2D podprostoru a nedochází k jejich míchání. Topologicky odpovídají torům.

## Invariantní podprostor



Obrázek 1.2: Ilustrace invariantního podprostoru z obrázku 1.1. Na invariantním podprostoru lze zavést souřadnice akce-úhel, což je opět netriviální výsledek Jacobi-Hamiltonovy teorie. Ten pak odpovídá  $f$ -dimenzionálnímu toru, který lze získat identifikací protějších stran  $f$ -rozměrné krychle (zde obdélníku). Na obrázku je červeně znázorněna ukázka periodické trajektorie.

Fázový prostor integrabilního systému se tak skládá z invariantních torů, na kterých jsou lokalizovány jednotlivé trajektorie, které však mezi sebou tyto tory nemíchají. Právě díky této lokalizaci nevykazují integrabilní systémy vysokou citlivost na změnu počátečních podmínek. Blízké trajektorie budou stále popisovat „podobné chování“, protože se nemožnou výrazně vzdálit na fázovém prostoru, neboť jsou napleteny na blízký torus.

Motivovány strukturou fázového prostoru integrabilního systému můžeme na fázovém prostoru zavést  $f$  sad souřadnic akce-úhel

$$\{(J_i, \nu_i)\}_{i=1}^f.$$

Jednotlivé tory jsou číslovány hodnotami akčních souřadnic  $\{J_i\}$ , zatímco úhlové souřadnice  $\{\nu_i\}$ ,  $\nu_i \in \langle 0, 2\pi \rangle$ , tvoří souřadnicovou síť na daném toru. Díky této struktuře lze integrabilní systém nakvantovat pomocí Bohr-Sommerfeldova kvantování, nebo lépe pomocí EKB<sup>1</sup> kvantování, kdy každé akci  $J_i$  přiřadíme kvantové číslo  $n_i$  a její hodnoty pak ekvivalentně nakvantujeme

$$J_i = n_i \hbar + a_i, \quad (1.2)$$

kde  $a_i$  jsou konstanty a  $n_i$  jsou celá čísla. Stavy kvantového systému lze pak popsat sadou  $f$  dobrých kvantových čísel.

### 1.1.2 KAM teorém

Každý integrál pohybu je důsledkem nějaké symetrie systému. Narušením této symetrie tak můžeme narušit jeho integrabilitu. To se projeví i na struktuře trajektorií na fázovém prostoru.

Uvažujme integrabilní systém, kterému narušíme symetrii poruchou, jejíž intenzitu můžeme regulovat například hodnou parametru  $E_{el}$ . Příkladem může být sféricky symetrický problém, který vložíme do elektrického pole s intenzitou  $E_{el}$ , které však není sféricky symetrické. Nulové intenzitě tak odpovídá integrabilní nechaotický systém. Zapnutím pole však ztrácíme globální kompatibilní vektorová pole na fázovém prostoru a invariantní podprostory přestávají existovat. Podobu fázového prostoru po ztrátě integrability v závislosti na intenzitě poruchy, která tuto ztrátu způsobila, popisuje právě KAM<sup>2</sup> teorém.

Hlavním bodem teoremu je, že invariantní tory se s malou poruchou okamžitě neztrácejí, nýbrž se postupně rozpadají. U původně nechaotického systému nyní s malou poruchou  $E_{el}$  vznikají na fázovém prostoru nové oblasti z trajektorií, které se odpoutaly od invariantního toru. Tyto oblasti a trajektorie na nich mají dvě základní vlastnosti, které definují chaos (Skokos, 2010).

O zobrazení (v našem případě evoluci dané integrací hamiltonových rovnic) řekneme, že je **chaotické** na oblasti  $V$  fázového prostoru, o které pak mluvíme jako o chaotické, pokud

1. *mísí* body na této oblasti. Tedy vezmeme-li dvě libovolné otevřené oblasti ve  $V$  a jednu z nich začneme vyvíjet, v nějakém konečném čase bude průnik těchto dvou oblastí nenulový i pro původně nepřekrývající se oblasti. Začneme-li vyvíjet trajektorii z libovolného bodu z  $V$ , v konečném čase se dostane do libovolného okolí každého bodu z této oblasti.
2. periodické body jsou husté v oblasti  $V$ . Tedy v libovolném okolí každého bodu leží bod z periodické trajektorie.

To, že trajektorie na chaotických oblastech nejsou lokalizovány na  $f$ -dimenzionálních torech, způsobuje zvýšenou citlivost systému na změnu počátečních podmínek. K charakterizaci této citlivosti se používá **Lyapunovův exponent**. Ten charakterizuje rychlosť vzdalování dvou blízkých trajektorií na fázovém prostoru. Při evoluci trajektorie

---

<sup>1</sup>Einstein–Brillouin–Kellerovo kvantování. Jedná se o zobecněné Bohr-Sommerfeldova kvantování pro integrabilní systémy s více stupni volnosti.

<sup>2</sup>Podle jmen autorů Kolmogorov-Arnold-Moser.

se můžeme dívat na vzdalování okolních bodů, tedy na deformaci fázového prostoru podél trajektorie. Většinou nás zajímá maximální rychlosť rozprípnání v asymptotických časech. U chaotických systémov je toto rozprípnání (vzdalování blízkých trajektorií  $\gamma_{\mathbf{x}}(t)$  a  $\gamma_{\mathbf{x}+\Delta\mathbf{x}}(t)$  vyvýjených z bodu  $\mathbf{x}$  a  $\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}$ ) exponenciální, takže rychlosť pak lze psať ako

$$|\gamma_{\mathbf{x}}(t) - \gamma_{\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}}(t)| \sim e^{\lambda t}, \quad (1.3)$$

kde  $t$  je čas a  $\lambda$  je Lyapunovov exponent. Ten je pro nechaotické trajektorie (v integrabilních systémoch a v pozůstatcích invariantního toru v chaotických systémoch) nulový, což odpovídá nejvýše polynomiálnemu vzdalování. Detailneji jsou rozprípnání fázového prostoru a výpočet Lyapunovova exponentu popsány v souhrnném článku (Skokos, 2010).

Kromě Lyapunovova exponentu nás může zajímat podíl chaotických oblastí ve fázovém prostoru. K pohledu do fázového prostoru nám poslouží **Poincarého řezy**. Jedná se o dvoudimenzionální řez fázovým prostorem, kdy typicky uvažujeme řez nadplochou konstantní energie. Dostáváme tak chaotickou mapu, na které můžeme pozorovat chaotické oblasti a zbytky invariantních podprostorov. Pravidelné uzavřené obrazce, což jsou průsečíky řezu s regulárními trajektoriami, jsou pozůstatky invariantního toru. Naopak oblasti tvořené zdánlivě náhodnou změtí bodů (průsečíky řezu s chaotickými trajektoriami) jsou oblasti chaotické. Výpočtu podílu chaotických oblastí na fázovém prostoru jsme se věnovali v předchozí práci (Novotný, 2020).

Podíl chaotických oblastí v energetických nadplochách se s energií typicky mění. Definujeme podíl regulárních oblastí na energetické nadploše

$$f_{\text{reg}}(E) = \frac{\int R(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \delta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) d\mathbf{p} d\mathbf{q}}{\int \delta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) d\mathbf{p} d\mathbf{q}}, \quad (1.4)$$

kde

$$R(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \begin{cases} 1, & \text{bod } \{\mathbf{p}, \mathbf{q}\} \text{ leží na regulární trajektorii,} \\ 0, & \text{bod } \{\mathbf{p}, \mathbf{q}\} \text{ leží na chaotické trajektorii.} \end{cases}$$

Podíl chaotických oblastí je pak jen

$$f_{\text{ch}}(E) = 1 - f_{\text{reg}}(E). \quad (1.5)$$

Obsahuje-li fázový prostor chaotické i regulární oblasti, mluvíme o tzv. *částečně chaotickém systému*<sup>3</sup>. Je-li naopak celý fázový prostor chaotický, jedná se o *plně chaotický systém*<sup>4</sup>. I energetická nadplocha plně chaotického systému může obsahovat oblasti, které se vzájemně nemíchají, což je dáno zbylými symetriemi systému. Pokud mohou trajektorie prostupovat celou energetickou nadplochou, systém se chová *ergodicky*.

## 1.2 Kvantový chaos

Počátky kvantového chaosu jakožto vědního oboru bývají spojovány s Wignerovým studiem spekter jader atomů a neutronových rezonancí v polovině minulého století. Podobné vlastnosti vykazovala také spektra kvantových systémov, jejichž klasický předobraz

---

<sup>3</sup>Anglicky *soft chaos*.

<sup>4</sup>Anglicky *hard chaos*.

byl chaotický. Začalo tak hledání rozdílných vlastností kvantových systémů s regulární a chaotickou klasickou limitou. Dnes bychom mohli tyto základní odlišnosti rozdělit do tří skupin:

- |                             |   |
|-----------------------------|---|
| Stacionární charakteristiky | <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Podoba vlnové funkce</b> - vlnové funkce chaotických systémů vykazují jinou morfologii než funkce integrabilních systémů. Obecně můžeme mluvit o jiných vlastnostech vlastních stavů systému.</li> <li>• <b>Spektrální statistiky</b> - rozdělení hladin spekter chaotických a integrabilních systémů vykazují různé vlastnosti způsobené korelací hladin.</li> </ul> |
| Dynamické důsledky          | <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Střední hodnoty</b> - u středních hodnot veličin v kvantových chaotických a regulárních systémech pozorujeme rozdílné vlastnosti. Liší se také časové závislosti středních hodnot.</li> </ul>   |

Tyto rozdíly integrabilních a neintegrabilních systémů byly pozorovány i v systémech bez standardní klasické limity. Velmi populární je například studium spinových systémů.

Přesto se někdy mluví o tom, že kvantový chaos neexistuje. Kvantověmechanické systémy, které bychom dle předchozích tří bodů nazvali chaotickými, totiž nevykazují citlivost na změnu počátečních podmínek. Linearita Schrödingerovy rovnice nedovoluje vzdalování vyvíjených stavů. Důsledkem linearity je unitarita evolučního operátoru  $\hat{U}(t)$ . Jsou-li  $|\psi_1\rangle$  a  $|\psi_2\rangle$  dva stavы z Hilbertova prostoru zvoleného systému, pak vzdálenost vyvíjených stavů je dána jako

$$|\hat{U}(t)|\psi_1\rangle - \hat{U}(t)|\psi_2\rangle| = |\hat{U}(t)(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle)| = ||\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle||, \quad (1.6)$$

kde poslední rovnost je důsledkem unitarity. Narození od klasické mechaniky (výzraz (1.3)) není vzdálenost stavů časově závislá. Michael Berry navrhl (Berry, 1989) používat namísto pojmu kvantový chaos pojmenování *kvantová chaologie*, jakožto studium projevů klasického chaosu v kvantových obrazech příslušných systémů. Kvantová mechanika totiž skutečně potlačuje citlivost klasicky chaotických systémů. Ukázkou může být práce (Casati a Ford, 1979), kdy autoři studovali periodicky poháněné kyvadlo. Vývoj dvou blízkých stavů se v kvantovém systému ustálil na podobných rozdělení pravděpodobnosti, zatímco klasický systém vykazoval ve stejném případě exponenciální vzdalování trajektorií.

Přesto mají zmíněné tři body podstatné důsledky na chování kvantově mechanických systémů. Podrobněji se budeme věnovat spektrálním statistikám a středním hodnotám. Morfologii vlnových funkcí detailněji probírají některé práce, které uvedeme. Začneme však s teorií náhodných matic, která nám poslouží k pochopení některých vlastností chaotických kvantových systémů.

### 1.2.1 Teorie náhodných matic

Teorie náhodných matic, zkráceně **RMT**<sup>5</sup>, je užitečnou teorií pro studium kvantového chaosu. Chaotická spektra mají podobné vlastnosti jako spektra náhodných matic. Projevem kvantového chaosu je v určitém smyslu ztráta informace o kvantovém systému, neboť s narušením integrability v podobě ztráty integrálu pohybu přicházíme i o kvantové číslo. V této sekci uvedeme jen některé výsledky RMT, na které se budeme dále odkazovat. Čtenáře pro detailnější úvod odkazujeme na (Reichl, 2021) a (Mehta, 2004), jako hlavní zdroje následující sekce.

Počátky použití RMT ve fyzice sahají do padesátých let 20. století. Wigner pracoval na vysvětlení jaderných spekter. Složitý jaderný systém se pokusil popsat pomocí hamiltoniánu ve formě náhodné matice. Maticové elementy takové matice jsou náhodné proměnné ze zvoleného rozdělení. Hamiltonián musel splňovat známé symetrie systému (např. ivariance vůči rotaci, časové inverzi atd.) a pravděpodobnostní rozdělení elementů mělo minimalizovat informaci.

Reálný symetrický hamiltonián  $H$  popisuje systém s invariancí vůči rotaci a časové inverzi. Pravděpodobnostní rozdělení, které v takovém případě minimalizuje informaci, je gaussovské

$$f_{\text{Gauss}}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\nu}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sqrt{\nu}}\right)^2}, \quad \text{Gaussovo rozdělení} \quad (1.7)$$

Náhodný reálný symetrický hamiltonián lze pak sestavit z matice  $M$ , jejíž elementy jsou náhodná gaussovský rozdělená čísla (typicky bereme  $\mu = 0$ ), jako

$$H = \frac{M + M^\top}{2}. \quad (1.8)$$

Pak platí

$$\langle H_{ij} \rangle = 0, \quad \langle H_{ij}^2 \rangle = \begin{cases} \nu, & i = j \\ \frac{\nu}{2}, & i \neq j. \end{cases} \quad (1.9)$$

Takový typ matic označujeme jako gaussovské ortogonální soubory, neboli **GOE**<sup>6</sup>.

Dále budeme pracovat jen s těmito GOE hamiltoniány. Jiným typům hamiltoniánů (komplexní, kvaternionové) odpovídají jiné soubory (GUE, GSE) s obecně jinými statistickými vlastnostmi. V literatuře se k odlišení vztahů pro různé typy náhodných matic používá Dysonový index  $\beta$ , který odpovídá počtu reálných parametrů, které určují maticový element daného typu matic. Pro reálné GOE je  $\beta = 1$ , pro komplexní GUE  $\beta = 2$  a pro kvaternionové GSE  $\beta = 4$ . My se dále omezíme jen na výsledky pro GOE, takže tento index vynecháme.

Mějme tedy GOE hamiltonián v podobě matice dimenze  $D$

$$H = V \cdot \text{Diag}\{E_1, \dots, E_D\} \cdot V^\dagger,$$

kde  $V$  je matice vlastních vektorů v obecné bázi a  $\text{Diag}\{E_1, \dots, E_D\}$  je diagonální matice vlastních hodnot. Pro velká  $D$  je hustota hladin  $E_i$  dána přibližně Wignerovým půlkruhovým zákonem

$$\rho(E) \approx \begin{cases} \frac{1}{\pi} \sqrt{2D - E^2} & |x| < \sqrt{2D} \\ 0 & |x| > \sqrt{2D}. \end{cases} \quad (1.10)$$

---

<sup>5</sup>Z anglického *Random Matrix Theory*.

<sup>6</sup>Z anglického *Gaussian Orthogonal Ensemble*.

## 1.2.2 Spektrální statistiky

Chaos ovlivňuje spektrum hamiltoniánu a korelace mezi jednotlivými hladinami. Ke studiu spektra lze použít různé spektrální statistiky. Prvními příspěvky do teorie kvantového chaosu byla právě pozorování závislostí těchto statistik na chaotičnosti klasického fázového prostoru příslušného systému. Spektrum odráží nejen chaotičnost, nebo případnou regularitu systému, ale také míru chaotičnosti, tedy zda se v klasickém fázovém prostoru vyskytují zbytky invariantního toru.

Vázaný kvantový systém má diskrétní spektrum. Střední hustotu hladin  $\bar{\rho}$  lze určit z objemu klasického fázového prostoru

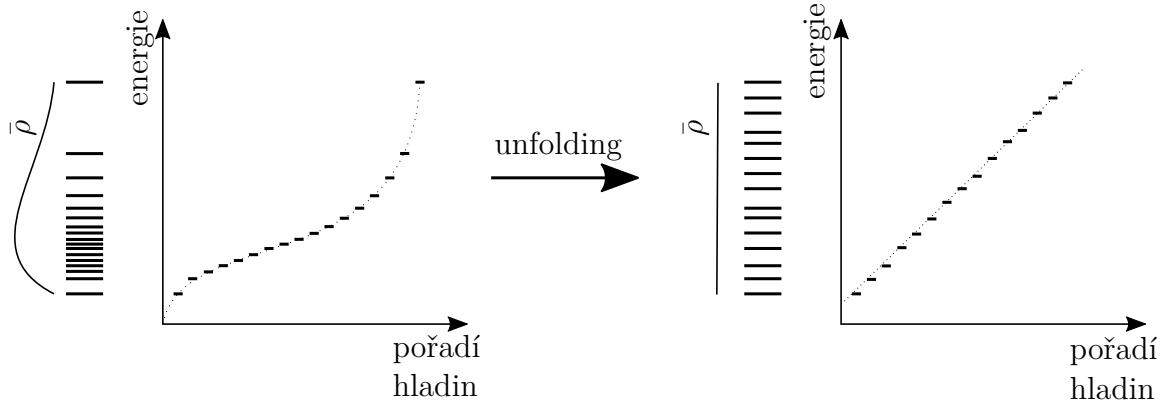
$$\bar{\rho} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^f} \int d\mathbf{q} \int d\mathbf{p} \delta(E - H(\mathbf{q}, \mathbf{p})), \quad (1.11)$$

kde  $f$  je opět počet stupňů volnosti. V limitě velkých energií  $E$  je počet vlastních stavů  $N(E)$  pod touto energií dán počtem buněk o velikosti  $h^f$  v části fázového prostoru s energií menší než  $E$ . Zajímavé jsou však odchylky přesné hustoty  $\rho$  spektra od této střední hodnoty. Ty totiž odrážejí přítomnost chaosu.

Abychom mohli odhalit tyto odchylky a vzájemně porovnávat spektra různých systémů, je vhodné spektrum nanormovat, tedy zbavit se informace o střední hustotě. Standardně se spektrum škáluje tak, aby střední hustota hladin byla rovna jedné

$$\bar{\rho} = 1.$$

Tento proces, který připomíná „natažení“ spektra (obr. 1.3), se nazývá anglicky *unfolding*.



Obrázek 1.3: Ilustrace unfoldingu. Původní spektrum se střední hustotou  $\bar{\rho}$  je nataženo tak, aby mělo střední hustotu  $\bar{\rho} = 1$  a vynikly oscilace kolem této střední hodnoty. Z původní hustoty hladin zbyla jen oscilující část, která je zodpovědná za to, že po unfoldingu leží hladiny jen přibližně na přímce.

Ještě se zmíníme o hlavní nevýhodě spektrálních statistik. K jejich výpočtu je zapotřebí velké množství hladin. To může být problém, zajímá-li nás chaotičnost jen určité části energetického spektra (chaotičnost systému na dané energii). Nedovolí nám tak studovat chaotičnost jednotlivých stavů.

### NNS distribuce

Po unfoldingu můžeme studovat oscilace kolem střední hustoty hladin. Jednou z nej-jednodušších spektrálních statistik je rozdělení vzdáleností sousedních hladin, zkráceně

**NNSD**<sup>7</sup>. Napočítáme-li rozdíly  $s$  následujících hladin a rozdělíme-li je do histogramu, dostaneme rozdělení  $P(s)$ , které nám říká, s jakou pravděpodobností nalezneme následující hladinu ve vzdálenosti  $s$ .

Pokud poloha následující hladiny nezáleží na poloze té stávající, dostáváme rozdělení, které bývá v teorii kvantového chaosu nazýváno Poissonovým rozdělením<sup>8</sup>.

$$P(s) = e^{-s}, \quad \text{Poissonovo rozdělení} \quad (1.13)$$

Poissonovo rozdělení odpovídá nekorelovaným energetickým hladinám a vysokému počtu velmi blízkých hladin. Takové rozdělení vykazují spektra integrabilních systémů. Jejich hladiny nejsou korelované. Najdeme však i výjimky. Příkladem jsou typicky systémy, u kterých jsou hladiny korelované mnohem více než u chaotických systémů. Jedná se například o systémy s velkým počtem degenerací nebo o harmonický oscilátor, jehož hladiny jsou po nanormování ekvidistantně rozloženy.

Spektra chaotických systémů mají naopak statistické vlastnosti spekter náhodných matic. Z půlkruhového zákona rozdělení hladin GOE matice (1.10) lze dále odvodit rozdělení nejbližších sousedů. Wigner odvodil toto rozdělení pro matice  $2 \times 2$ . Přesto tento vztah

$$P(s) = \frac{1}{2}\pi s e^{-\frac{1}{4}\pi s^2}, \quad \text{Wignerovo-Dysonovo rozdělení} \quad (1.14)$$

velmi dobře approximuje rozdělení NNS pro obecnou dimenzi  $D$ , pro kterou nelze najít rozdělení NNS v analytické formě.

Hlavními vlastnostmi Wignerova-Dysonova rozdělení, které budeme zkracovat na WD, je nulový výskyt velmi blízkých hladin ( $P(s=0)=0$ ) a korelace hladin. Tedy hladiny se vzájemně ovlivňují, což se projevuje jako vzájemné odpuzování. Důsledkem pak je posunutí maxima distribuce v porovnání s Poissonovým rozdělením.

Wignerem odvozené rozdělení dobře popisovalo naměřená jaderná spektra. Všimněme si, že WD rozdělení nemá volnost na fitování. Postupně bylo nacházeno stále více systémů s tímto rozdělením spektra. V roce 1984 na tomto základě zformulovali Bohigas, Giannoni a Schmit (Bohigas a kol., 1984) domněnkou, že spektrum každého kvantového systému s klasicky plně chaotickým předobrazem (tedy s plně chaotickým fázovým prostorem) vykazuje oscilace hustoty hladin popsané WD<sup>9</sup> rozdělením (obr. 1.4). Do dnešní doby bývá tato domněnka stále potvrzována numerickými studiemi různých modelů. WD rozdělení hladin se tak ukázalo být univerzální vlastností plně chaotických systémů.

To jsou NNS rozdělení regulárních systémů a plně chaotických systémů. Otázkou zůstávají oscilace hladin u systémů, jejichž klasický fázový prostor obsahuje chaotické i regulární části. S pravděpodobnostním rozdělením, které v závislosti na parametru přechází mezi Poissonovým a WD rozdělením, přišli Berry a Robnik (Berry a Robnik, 1984).

---

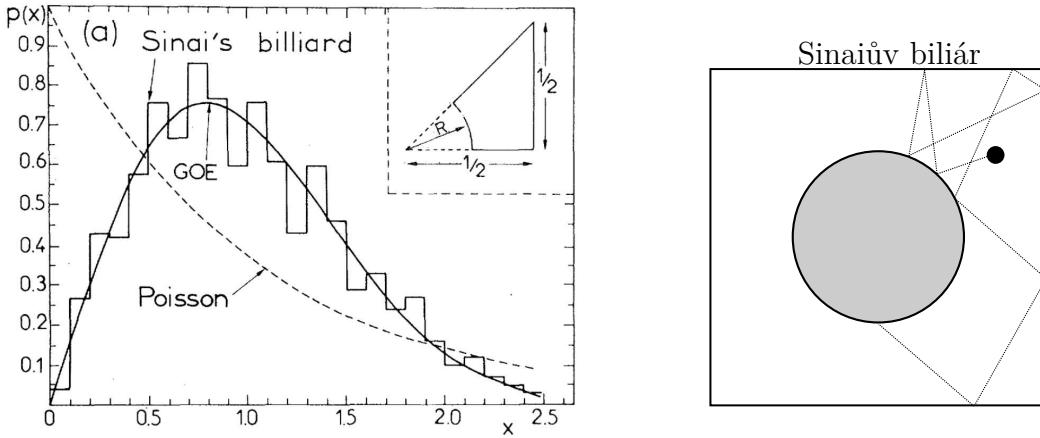
<sup>7</sup>Z anglického *Nearest Neighbour Spacing Distribution*. Někdy se používá také zkratka NND nebo NNS.

<sup>8</sup>V teorii pravděpodobnosti popisuje Poissonovo rozdělení

$$P(s,x) = \frac{s^x}{x!} e^{-s} \quad (1.12)$$

pravděpodobnost počtu výskytů  $x$  jevů v určitém intervalu, když nastávají nezávisle na sobě. Formule (1.13) tak odpovídá nulovému počtu výskytů  $x=0$  hladin v otevřeném intervalu energií  $(E, E+s)$ .

<sup>9</sup>Systémům, které nejsou symetrické vůči časové inverzi, odpovídají rozdělení příslušející jiným typům náhodných matic.

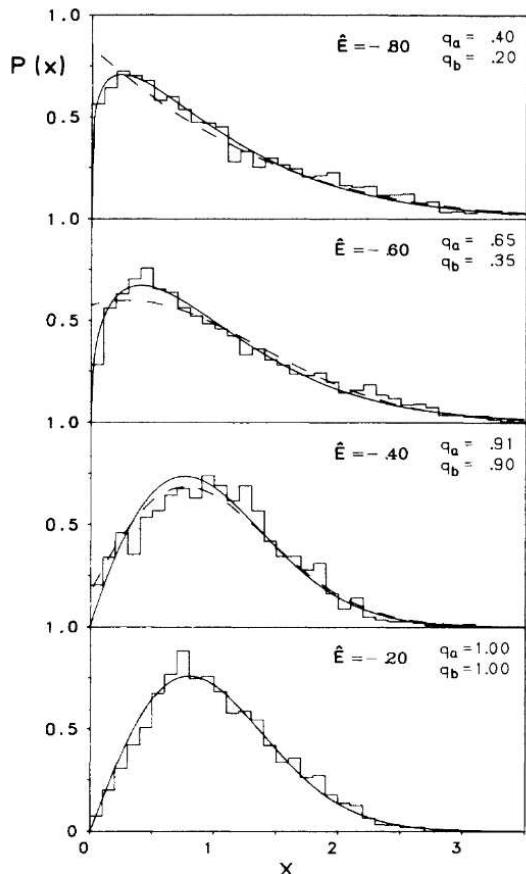


Obrázek 1.4: Ukázka NNSD Sinaiova biliáru a porovnání s Wignerovým-Dysonovým (GOE) a Poissonovým rozdělením z práce (Bohigas a kol., 1984). Na ose  $x$  je vzdálenost následující hladiny a  $P(x)$  je jejich pravděpodobnost. Biliáry jsou oblíbenými modely pro studium chaosu. Typicky je studován pohyb volné částice (klasicky i kvantově) v rovině s daným tvarem okrajových podmínek. Kvantově to odpovídá nekonečné potenciálové jámě. Právě tvar oblasti, ve které je pohyb dovolen, je odpovědný za případné chaotické chování. Sinaiův biliár má tvar čtverce, v jehož středu je umístěn kruh (pravý obrázek).

Jejich úvaha vycházela ze semiklasické představy, že každá uzavřená oblast na fázovém prostoru (nedochází k mísení trajektorií z jiných oblastí), přispívá do semiklasického spektra samostatnou sadou hladin. Trajektorie, které leží na invariantském toru, jsou zodpovědné za poissonovskou statistiku a chaotické trajektorie naopak za WD. Berryho-Robnikovo rozdělení tak obsahuje parametr  $q$ , kterým lze fitovat NNSD rozdělení obecného kvantového systému. Parametr  $q$  odpovídá podílu fázového prostoru, ve kterém je klasický pohyb neregulární. To se pokusili ověřit numericky na modelu atomu vodíku v elektrickém poli autoři práce (Wintgen a Friedrich, 1987). V této práci porovnávají BR rozdělení s tzv. Brodyho rozdělením (obr. 1.5), které také v závislosti na parametru  $\beta$  přechází od Poissonova ( $\beta = 0$ ) k WD ( $\beta = 1$ ) rozdělení. Parametr  $\beta$  však nemá přímý fyzikální význam. Jedná se jednoduše o funkci, která nafituje příslušná NNSD rozdělení. Pro praktické účely je však vhodnější a dává kvalitativně stejné výsledky jako BR rozdělení.

$$P(s) = (\beta + 1)bs^{\beta}e^{-bs^{\beta+1}}, \quad b = \left[ \Gamma\left(\frac{\beta + 2}{\beta + 1}\right) \right]^{\beta+1}, \quad \text{Brodyho rozdělení} \quad (1.15)$$

Průběh NNSD pro semiklasické spektrum (tedy spektrum s nekonečným počtem hladin, které odpovídá klasické limitě  $\hbar \rightarrow 0$ , kdy počet hladin mezi energiami  $E$  a  $e + \Delta E$  diverguje jako  $\Delta E/\hbar^f$ ) je tak v prvním přiblžení dán podílem chaotických oblastí na fázovém prostoru. V dalších řádech Planckovy konstanty, které ovlivňují podobu rozdělení především pro malé vzdálenosti sousedních hladin  $s$ , se uplatňují kvantové jevy, jako například tunelování mezi klasicky oddělenými oblastmi fázového prostoru (spektra klasicky oddělených chaotických a regulárních oblastí tak nejsou úplně nezávislá). Podrobněji se těmto spektrálním vlastnostem věnuje Berry ve svých pracích (Berry a Robnik, 1984) a (Berry, 1984). V nich také popisuje morfologii vlnových funkcí chaotických systémů. Pokud by čtenáře zajímala pravidelnost vlnových funkcí integrabilních systémů a její narušení chaosem, odkazujeme



Obrázek 1.5: Rozdělení sousedních hladin (NNSD) modelu atomu vodíku v elektrickém poli z práce (Wintgen a Friedrich, 1987). Jedná se o grafy pravděpodobnosti  $P(x)$  nalezení následující hladiny ve vzdálenosti  $x$ . Parametr  $\hat{E}$  je dán intenzitou vnějšího pole a energií systému. Histogramy jsou proloženy Brodyho (souvislá čára - volný parametr fitu  $q_a$ ) a Berryho-Robnikovým (čárkovaná čára - volný parametr fitu  $q_b$ ) rozdělením. Vidíme postupný nárůst chaotičnosti s rostoucím parametrem  $\hat{E}$ .

jej na souhrnnou knihu o chaosu (Gutzwiller, 2013).

Při výpočtu NNSD pro obecný systém musíme věnovat pozornost jeho symetriím. Hamiltonián chaotického systému s dodatečnou symetrií, která způsobí, že ve vhodné bázi má blokově diagonální strukturu, bude mít spektrum složené z GOE spekter z jednotlivých bloků poissonovské rozdělení. Hladiny z různých bloků (podprostorů) nejsou korelované, takže výsledná statistika NNSD bude poissonovská, přestože se jedná o chaotický systém. Spektrum tak musíme na každém invariátním podprostoru (invariátní vůči případné symetrii Hamiltoniánu) Hilbertova prostoru studovat samostatně. To bude přesně případ námi studovaného modelu.

## Další statistiky

K charakterizaci korelací hladin jsou používány různé statistiky. Spektrální statistiky rozdělujeme na *krátkodosahové*, které uvažují jen vztahy sousedních hladin, a *dlouhodosahové*, které studují korelace hladin na delších energetických intervalech. Zmíníme se jen o některých z nich.

- **krátkodosahové statistiky** - NNS rozdělení, podíl vzdáleností sousedních hladin  $r, \tilde{r}$
- **dalekodosahové statistiky** - rigidita  $\Delta_3$ , rozptyl počtu hladin  $\Sigma^2$

## Podíl vzdáleností sousedních hladin

V disktrétním spektru  $\{E_i\}_{i=1}$  definujeme tento podíl<sup>10</sup> jako

$$r_i = \frac{E_i - E_{i-1}}{E_{i-1} - E_{i-2}} = \frac{s_i}{s_{i-1}} \quad (1.16)$$

Místo pravděpodobnosti výskytu následující hladiny ve vzdálenosti  $s$  pak studujeme rozdělení pravděpodobnosti  $P(r)$ . Pro spektra s poissonovským a WD rozdělením NNS lze odvodit analytickou (Atas a kol., 2013) podobu těchto rozdělení podílů:

$$P_{\text{Poisson}}(r) = \frac{1}{(1+r)^2}, \quad (1.17)$$

$$P_{\text{WD}}(r) = \frac{27}{8} \frac{r + r^2}{(1+r+r^2)^{\frac{5}{2}}}. \quad (1.18)$$

Často je také studována podobná veličina

$$\tilde{r}_i = \min\{r_i, r_i^{-1}\} \quad (1.19)$$

a její pravděpodobnostní rozdělení  $P(\tilde{r})$ .

Jako míry chaosu studovaných systémů jsou pak většinou uváděny střední hodnoty  $\langle r \rangle$  a  $\langle \tilde{r} \rangle$ , které jsou porovnávány s hraničními případy

$$\langle r \rangle_{\text{Poisson}} = \infty \quad \langle \tilde{r} \rangle_{\text{Poisson}} = 2 \ln 2 - 1 \quad (1.20)$$

$$\langle r \rangle_{\text{WD}} = \frac{7}{2} \quad \langle \tilde{r} \rangle_{\text{WD}} = 4 - 2\sqrt{2} \quad (1.21)$$

Hlavní výhodou tohoto indikátoru chaosu je, že nemusíme provádět unfolding spektra.

## Rigidita

Jedná se o jednu z nejpoužívanějších dalekodosahových spektrálních statistik. Byla zavedena Dysonem a Mehtou v jedné z jejich prací o teorii náhodných matic (Dyson a Mehta, 1963). Zajímají nás odchyly spektra po unfoldingu od střední hodnoty, tedy jak moc se liší průběh funkce  $N(E)$  (počet hladin pod energií  $E$ ) od přímky

$$f(E) = AE + B,$$

která odpovídá konstantní hustotě hladin (viz ilustrace unfoldingu na obr. 1.3). Rigidita je pak definována jako odchylka počtu hladin  $N(E)$  v intervalu spektra  $[E_0 - L/2, E_0 + L/2]$  od přímky získané nejlepším fitem určeným metodou nejmenších čtverců

$$\Delta_3(E_0, L) = \frac{1}{L} \min_{A,B} \left\{ \int_{E_0-L/2}^{E_0+L/2} [N(E) - (AE + B)]^2 dE \right\}. \quad (1.22)$$

Pracujeme-li se spektrem po unfoldingu, pak počet hladin  $n$  v intervalu délky  $L$  je přibližně  $L$ , tedy

$$n \approx L.$$

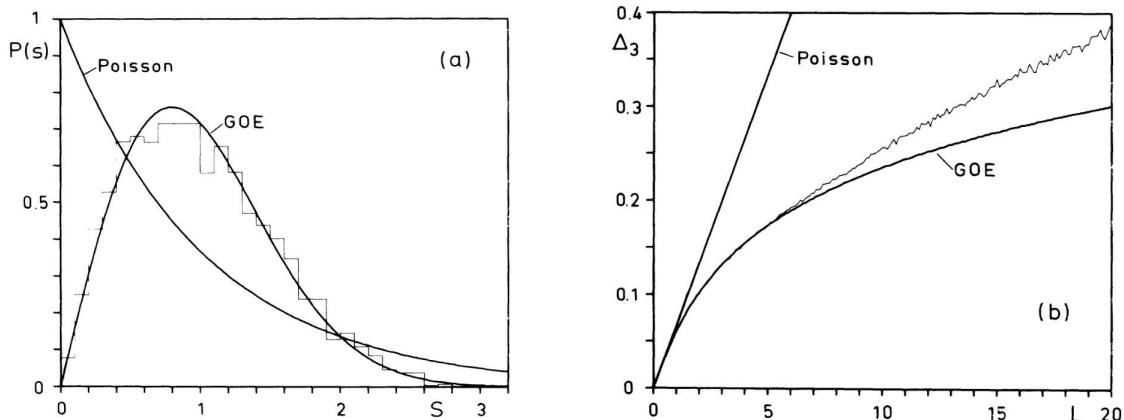
---

<sup>10</sup>anglicky *Level Spacing Ratio*

Index 3 pochází z původní práce, kde autoři navrhli tři způsoby provedení fitu. Třetí odpovídá volnému fitu, kdy na konstanty  $A$  a  $B$  již neklademe dodatečné podmínky. Rigiditou studujeme dalekodosahové korelace na intervalu délky  $L$ , proto musíme volit délku intervalu tak, aby obsahovala velký počet hladin. Zajímá nás její střední hodnota  $\langle \Delta_3(L) \rangle_{E_0 \in I}$ , kde středování provádíme přes energie z nějakého podintervalu  $I$  spektra. Průběh  $\langle \Delta_3(L) \rangle_{E_0 \in I}$  pro obecné spektrum pak porovnáváme s hraničními případy, totiž spektry integrabilních systémů (resp. systémů s poissonovským rozdělením NNS) a spektry GOE, které nejsou závislé na volbě intervalu, přes který středujeme. Platí:

$$\langle \Delta_3(L) \rangle = \begin{cases} \frac{1}{12} & \text{ekvidistantní spektrum (harmonický oscilátor),} \\ \frac{L}{15} & \text{integrabilní spektrum s poiss. rozdělením,} \\ \frac{1}{\pi^2} \left[ \ln(2\pi L) + \gamma - \frac{\pi^2}{8} - \frac{5}{4} \right] & \text{spektrum GOE (plně chaotický systém)} \end{cases} \quad (1.23)$$

Konstanta  $\gamma \approx 0,577$  je Eulerova konstanta. Ukázka tohoto porovnání je na obrázku 1.6. Podstatný je rozdíl v citlivosti oproti krátkodosahovým statistikám.



Obrázek 1.6: Porovnání rozdělení NNS (a) a  $\Delta_3$  (b) z práce (Wintgen a Marxer, 1988) věnující se anizotropnímu Keplerovu problému. Zatímco histogram je jen obtížně rozpoznatelný od Wignerova-Dysonova rozdělení (GOE), v grafu rigidity vidíme jasný rozdíl. Závěrem tak je, že studovaný model není plně chaotický. Pomalejší růst  $\Delta_3$  v chaotických systémech v závislosti na délce intervalu  $L$  je způsoben odpuzováním hladin.

### Rozptyl počtu hladin

Stále nás zajímají odchyly hladin spektra od střední hodnoty. Rozptyl počtu hladin<sup>11</sup> v intervalu délky  $L$  definujeme jako

$$\Sigma^2(L) = \langle [N(L,E)]^2 \rangle - \langle [N(L,E)] \rangle^2, \quad (1.24)$$

kde  $N(L,E)$  je počet hladin unfoldovaného spektra v energetickém intervalu délky  $L$  s počáteční energií  $E$ . Tuto funkci ve výrazu (1.24) středujeme přes energii  $E$ . Napočítáme-li průběh  $N(L,E)$  ze spektra studovaného systému, opět jej porovnáváme (ukázka použití

<sup>11</sup>Anglicky *Level Number Variance*.

v (Santos a Rigol, 2010)) s krajními rozdeleními příslušející systémům s poissonovkým a WD rozdelením NNSD, která lze získat v analytické formě (Dyson a Mehta, 1963)

$$\Sigma^2(L) = \begin{cases} 0 & \text{ekvidistantní spektrum (harmonický oscilátor),} \\ L & \text{integrabilní spektrum s poiss. rozdelením,} \\ \frac{2}{\pi^2} \left[ \ln(2\pi L) + 1 + \gamma - \frac{\pi^2}{8} \right] & \text{spektrum GOE (plně chaotický systém),} \end{cases} \quad (1.25)$$

Oproti rigiditě rozptyl  $\Sigma^2$  více osciluje, ale je jednodušší na výpočet. Vyšší momenty  $\Sigma^3$ ,  $\Sigma^4$ , (...) bývají také studovány.

### 1.2.3 Střední hodnoty

V chování kvantových středních hodnot chaotických a integrabilních systémů pozorujeme podstatné rozdíly. My se zaměříme na rozdílné časové chování spojené s termalizací systému (zde odkazujeme na souhrnný článek (D'Alessio a kol., 2016) o chaosu a termalizaci, podle kterého budeme postupovat). Termalizace v kvantové mechanice je analogická termalizaci v klasické termodynamice. O pozorovatelné v daném systému řekneme, že se termalizovala, pokud její střední hodnota zrelaxuje na hodnotu danou termodynamickým průměrem a po většinu času pak zůstane v její blízkosti. Uvidíme, že chování středních hodnot pozorovatelných v chaotických stavech se bude podobat chování klasických ergodických systémů. Ty popisujeme statisticky pomocí středních hodnot na ergodických oblastech fázového prostoru, kde je ergodicita důsledkem chaosu a rozpadem invariátního toru.

Dále nás bude zajímat energetická závislost středních hodnot ve stacionárních stavech, která je ovlivněna ztrátou kvantových čísel při narušení integrability. Tu lze kvalitativně pozorovat na tzv. Peresových mřížích, ve kterých se chaos projevuje narušením pravidelné struktury.

### Delokalizace vlastních stavů

S pochopením chování středních hodnot a vlastních stavů chaotických systémů nám opět pomůže teorie náhodných matic. Vlastní vektory  $\mathbf{v}_i$  GOE tvoří ortonormální systém. Jedná se však o náhodné vektory. Všechny orientace tohoto systému jsou v  $D$ -dimenzionálním prostoru stejně pravděpodobné, tedy natočení vůči konkrétní bázi je náhodné. Složky vektoru

$$\mathbf{v}_i = \begin{pmatrix} v_{i1} \\ \vdots \\ v_{iD} \end{pmatrix}$$

jsou náhodná čísla z rozdělení

$$P(v_{ij}) = \sqrt{\frac{D}{2\pi}} e^{-\frac{Dv_{ij}^2}{2}}. \quad (1.26)$$

Míru delokalizace vektoru  $\mathbf{v}_i$  v dané bázi můžeme určit pomocí vztahu

$$\eta(\mathbf{v}_i) = \frac{1}{\sum_{j=1}^D |v_{ij}|^4}, \quad \text{Inverse Participation Ratio.} \quad (1.27)$$

Hodnoty IPR charakterizují lokalizaci v dané bázi  $V$

$$\eta(\mathbf{v}) \begin{cases} = 1 & \mathbf{v} \text{ je bázový vektor,} \\ \approx 1 & \mathbf{v} \text{ je lokalizovaný v dané bázi,} \\ \gg 1 & \mathbf{v} \text{ je delokalizovaný v dané bázi,} \\ \approx \frac{D}{3} & \mathbf{v} \text{ je vlastní vektor GOE,} \end{cases}$$

tedy s rostoucí IPR roste delokalizace.

Vlastní stavy fyzikálního systému z chaotické části spektra vykazují podobnou delokalizaci jako vlastní vektory GOE. Delokalizace má podstatné důsledky na chování středních hodnot v těchto stavech. Stavy odpovídající náhodným vektorům vykazují podobné chování, tedy podobné střední hodnoty.

Ukázka tohoto chování ve fyzikálním systému je na obrázku 1.7. První dvě dvojice ((a),(b)) a ((c),(d)) odpovídají chaotickým případům. Vlastní stavy hamiltoniánu vykazují velkou delokalizaci (IPR) ve středu spektra. Na okrajích se vlastní vektory liší od náhodných vektorů, pro které by v případě GOE matice ležely všechny hodnoty IPR kolem hodnoty  $D/3$ . Téměř náhodné vektory mají sice nekorelované elementy, ale velmi podobné střední hodnoty, jak vidíme na grafech středních hodnot spin-spinové korelace. Ta se v oblastech energií s delokalizovanými vektory chová téměř jako hladká funkce energie. Střední hodnoty vykazují velmi malé odchylky v porovnání s krajinami oblastmi, kde vlastní vektory nejsou náhodné. To pozorujeme také u integrabilního případu ((e)),(f). Delokalizace vlastních vektorů je v porovnání s chaotickými případy řádově menší. S tím jsou spojeny velké rozdíly mezi středními hodnotami na blízkých energiích.

## Časová závislost, termalizace a ETH

Uvažujme chaotický fyzikální systém s Hilbertovým prostorem dimenze  $D$  a s hamiltoniánem  $\hat{H}$ , který nezávisí na čase. V prvním přiblížení budeme předpokládat, že hamiltonián je v obecné bázi náhodná GOE matice a jeho vlastní vektory  $|E_m\rangle$  jsou náhodné

$$\hat{H}|E_m\rangle = E_m|E_m\rangle. \quad (1.28)$$

Budou nás zajímat střední hodnoty obecné pozorovatelné  $\hat{O}$  s ortonormální bází  $|O_m\rangle$

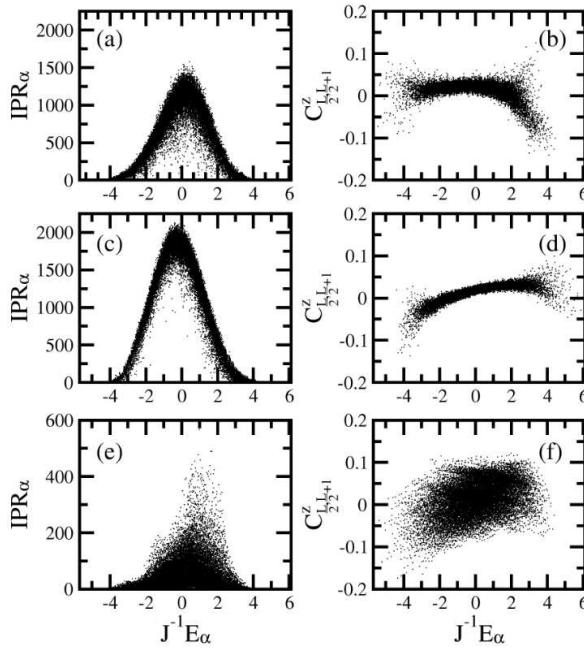
$$\hat{O}|O_m\rangle = O_m|O_m\rangle. \quad (1.29)$$

V bázi hamiltoniánu jsou maticové elementy pozorovatelné vyjádřené jako

$$O_{mn} \equiv \langle E_m | \hat{O} | E_n \rangle = \sum_i^D O_i \langle E_m | O_i \rangle \langle O_i | E_n \rangle. \quad (1.30)$$

Středováním přes náhodné vektory  $|E_{m,n}\rangle$  dostáváme

$$\overline{\langle E_m | O_i \rangle \langle O_j | E_n \rangle} = \frac{1}{D} \delta_{mn} \delta_{ij}. \quad (1.31)$$



Obrázek 1.7: Ukázka IPR a střední hodnoty spin-spinové korelace pro spinový systém z práce (Torres-Herrera a kol., 2015). V každém řádku jsou energetické závislosti IPR a střední hodnoty pro daný parametr hamiltoniánu. První dvě dvojice ((a),(b)) a ((c),(d)) odpovídají chaotickým případům. Vidíme velkou delokalizaci v IPR a střední hodnoty se chovají jako hladká funkce energie. Poslední dvojice ((e),(f)) odpovídá integrabilnímu případu. S malou delokalizací jsou spojeny velké oscilace středních hodnot.

Bereme-li maticové elementy pozorovatelné  $\hat{O}$  ve vlastní bázi hamiltoniánu jako statistický soubor, můžeme tak napočítat jejich střední hodnoty a rozptyl s pomocí (1.31).

$$\overline{O_{mn}} = \begin{cases} \frac{1}{D} \sum_i^D O_i \equiv \bar{O} & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases} \quad (1.32)$$

$$\overline{O_{mn}^2} - \overline{O_{mn}}^2 = \begin{cases} \frac{2}{D^2} \sum_i^D O_i^2 \equiv \frac{2}{D} \bar{O}^2 & m = n \\ \frac{1}{D} \bar{O}^2 & m \neq n \end{cases} \quad (1.33)$$

Dostáváme tak představu o podobě středních hodnot pozorovatelných ve vlastních stavech náhodného hamiltoniánu

$$O_{mn} \approx \bar{O} \delta_{mn} + \sqrt{\frac{\bar{O}^2}{D}} R_{mn}, \quad (1.34)$$

kde  $R_{mn}$  jsou náhodná čísla s nulovou střední hodnotou. Maticové elementy nejsou energeticky závislé a odchylka od střední hodnoty klesá s velikostí systému.

Střední hodnoty ve stacionárních stavech se v čase nemění. Podívejme se proto na chování středních hodnot v obecném stavu chaotického systému v čase. Mějme obecný stav  $|\psi\rangle$  s dobře definovanou střední hodnotou energie a jejího rozptylu. Jeho časový vývoj má po rozepsání do báze hamiltoniánu tvar

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m^D c_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} |E_m\rangle, \quad c_m = \langle E_m | \psi \rangle. \quad (1.35)$$

Střední hodnota operátoru  $\hat{O}$  ve stavu  $|\psi\rangle$  je pak obecně časově závislá. Pracujeme-li s nedegenerovaným hamiltoniánem, což je typicky případ chaotických systémů, lze střední hodnotu rozdělit na časově závislou a nezávislou část následujícím způsobem

$$\langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle = \underbrace{\sum_m^D |c_m|^2 O_{mm}}_{\text{časově nezávislé}} + \underbrace{\sum_{m,n}^D c_m^* c_n e^{\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)t} O_{mn}}_{\text{časově závislé}}. \quad (1.36)$$

Časový vývoj střední hodnoty je tak dán druhým členem, který je sumou oscilací. Obecně se tyto oscilace začínají rozcházet na časech

$$t \approx \hbar(E_m - E_n)^{-1}.$$

Tyto časy mohou být u fyzikálních spekter v řádech délky života vesmíru (navzdory tomu, že fyzikální systémy běžně relaxují). Časově závislý člen lze přesto u časového vývoje daným GOE hamiltoniánem po konečném čase zanedbat, a to díky velikosti nedagonálních maticových elementů  $O_{mn}$ , neboť z (1.34)

$$\frac{O_{mm}}{O_{mn}} \approx \sqrt{D},$$

kde připomínáme, že  $D$  je dimenze Hilbertova prostoru. Časově nezávislá složka navíc dle (1.32) nezávisí na počátečním stavu, neboť

$$\sum_m^D |c_m|^2 O_{mm} \approx \bar{O} \sum_m^D |c_m|^2 = \bar{O}.$$

Relaxace chování odpovídá *termalizaci* systému. Náhodný hamiltonián vede na mikrokanický soubor bez energetické závislosti, což odpovídá souboru při nekonečné teplotě.

Termalizace systémů úzce souvisí s chaosem a ergodicitou. V kvantové mechanice je to právě delokalizace stacionárních stavů daná chaosem, která vede na termalizaci. To jsme viděli u náhodných matic. Ve statistické fyzice chápeme termalizaci pomocí interakcí v systému, jakými mohou být například srážky častic. Informace o termalizaci kvantového systému je ukryta ve struktuře vlastních stavů hamiltoniánu. V čase se pak projeví jako rozchod fází v (1.36).

U reálných systémů je však termální střední hodnota (střední hodnota po relaxaci) závislá na energii a relaxační časy jsou závislé na konkrétní pozorovatelné. Tedy mimodagonální členy nesou informaci, kterou bychom neměli úplně zanedbat.

Pro popis termalizace je tak potřeba zvolit jiný popis maticových elementů pozorovatelných než ten ze vztahu (1.32). S lepším anzatzem přišel v roce 1994 Mark Srednický v článku (Srednicki, 1994). Jeho předpis pro maticové elementy pozorovatelných v chaotických systémech je známý pod anglickým názvem *Eigenstate Thermalization Hypothesis*, neboť **ETH**.

Maticový element pozorovatelné ve vlastní bázi chaotického systému lze dle ETH psát jako

$$O_{mn} = O(\bar{E})\delta_{mn} + e^{-S(\bar{E})/2}f_O(\bar{E}, \omega)R_{mn}, \quad (1.37)$$

kde

- $\bar{E} = \frac{E_m + E_n}{2}$ ,
- $\omega = E_n - E_m$ ,
- $S(E)$  - termodynamická entropie v závislosti na energii,
- $O(\bar{E})$ ,  $f_O(\bar{E}, \omega)$  jsou hladké funkce a  $O(\bar{E})$  je střední hodnota mikrokanonického souboru na energii  $\bar{E}$ ,
- $R_{mn}$  - náhodné hodnoty s nulovou střední hodnotou a jednotkovým rozptylem.

Výhodou oproti RMT je, že diagonální elementy nejsou stejné ve všech stavech, ale spíše hladkou funkcí energie. Dále mimodiagonální členy oscilují kolem hodnot hladké funkce  $f_0$ . Lze tak popisovat systém při konečné teplotě. V semiklasické limitě tohoto přístupu dostaváme klasicky chaotické systémy. V poslední době je ETH stále častěji testována numericky a to velmi úspěšně (např. souhrnný článek (Borgonovi a kol., 2016)).

Dále využijeme v práci ETH pro kvalitativní vysvětlení některých výsledků. Zdůrazníme jen, že ETH lze použít k dalšímu studiu různočasových korelátorů, kterým se budeme věnovat v další kapitole. Pro studium korelátorů dvou různých pozorovatelů je potřeba ETH jakožto vztah (1.37) upravit (D'Alessio a kol., 2016). Tomu se v této práci věnovat nebudeme.

### Kvantová čísla chaotických systémů a Peresovy mříže

Vraťme se k nyní k integrabilním systémům. Podmínkou pro integrabilitu klasického systému s  $f$  stupni volnosti byla existence  $f$  nezávislých integrálů pohybu s nulovými Poissonovými závorkami. Obdobně kvantový systém nazveme integrabilním, pokud existuje  $f$  nezávislých vzájemně komutujících integrálů pohybu

$$[\hat{I}_i, \hat{I}_j] = 0, \quad \forall \hat{I}_i \in \{\hat{I}_i\}_{i=1}^f. \quad (1.38)$$

Stále pracujeme s časově nezávislým hamiltoniánem, takže energie je jedním z těchto integrálů pohybu. Báze vlastních stavů hamiltoniánu  $|E_i\rangle$  je tak společnou vlastní bází těchto operátorů a jednotlivé stacionární stavy můžeme popsat sadou  $f$  dobrých kvantových čísel

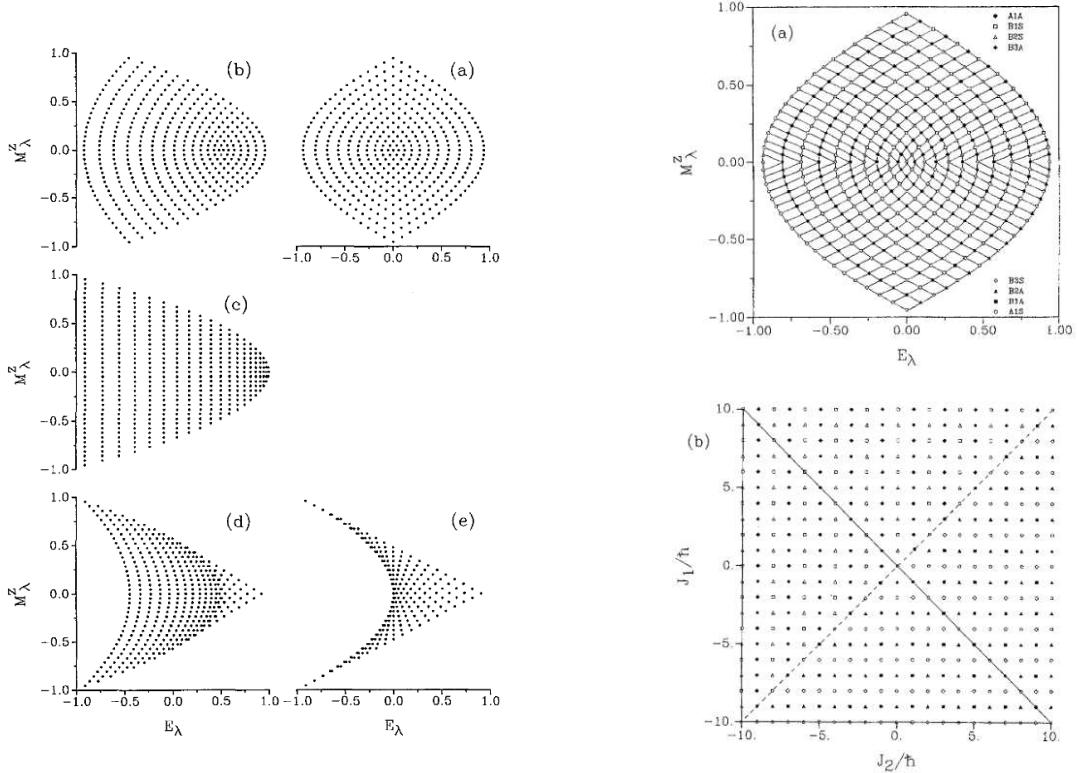
$$\{n_i\}_{i=1}^f.$$

Energetické střední hodnoty operátorů  $\hat{I}_m$  (v integrabilním případě se tedy jedná o jejich vlastní hodnoty) považujeme za přibližně hladké analytické funkce těchto kvantových čísel

$$\langle E | \hat{I}_m | E \rangle = \langle (n_1, \dots, n_f) | \hat{I}_m | (n_1, \dots, n_f) \rangle = I_m(n_1, \dots, n_f), \quad (1.39)$$

díky EBK kvantování. Díky vztahu (1.2) čekáme, že tyto střední hodnoty budou tvořit v  $f$  rozměrném prostoru pravidelnou mříž. Pro systém se dvěma stupni volnosti uvažujeme dva integrály pohybu jako funkce kvantových čísel

$$\hat{H}(n_1, n_2), \quad \hat{I}(n_1, n_2).$$



Obrázek 1.8: Ukázka Peresových mříží integrabilních spinových systémů z práce (Srivastava a Müller, 1990). Na levém obrázku jsou grafy energetické závislosti střední hodnoty magnetizace  $M^z$  pro různé hodnoty parametru spinového systému. Ve všech případech vidíme pravidelnou mřížku, neboť se jedná o integrabilní systémy. Na pravém obrázku je znázorněna síť explicitně pro konkrétní graf (a). Pomocí přechodu k ačním souřadnicím  $J_1$  a  $J_2$  z EBK lze síť transformovat na pravidelnou mříž po vzoru vztahu (1.2).

Body v grafu závislosti  $\langle E | \hat{I} | E \rangle$  na energii by měly tvořit nějakým způsobem pravidelnou mřížku. Ukázka je na obrázku 1.8.

Tyto mříže začal ve spojitosti s chaosem studovat Asher Peres (Peres, 1984). Můžeme se tak setkat s označením Peresovy mříže nebo také kvantové sítě<sup>12</sup>. Narušením integrability ztrácíme globální integrály pohybu a s nimi i dobrá kvantová čísla. To se projevuje rozbitím hladkosti a analytičnosti vztahů (1.39) a rozbitím Peresových mříží.

Ztrátou integrability se původní integrál pohybu stal časově závislým. Místo něj budeme studovat síť středních hodnot jiného časově nezávislého operátoru. Tím může být časová střední hodnota  $\hat{O}_T$  nějakého operátoru  $\hat{O}$  nekomutujícího s  $\hat{H}$ . Ta je jistě časově nezávislá, protože komutuje s hamiltoniánem. Využijeme-li vztah z předchozí sekce (1.36), dostáváme operátor

$$\hat{O}_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \hat{O}(t) = \sum_m^D \langle E_m | \hat{O}(0) | E_m \rangle | E_m \rangle \langle E_m | = \sum_m^D O_{mm} | E_m \rangle \langle E_m |, \quad (1.40)$$

který je diagonální ve vlastní bázi hamiltoniánu. Dle semiklasické přestavy, je-li systém na energii  $E$  plně ergodický, pak střední hodnota operátoru  $\hat{O}$  ve stavu  $|E\rangle$  s touto energií

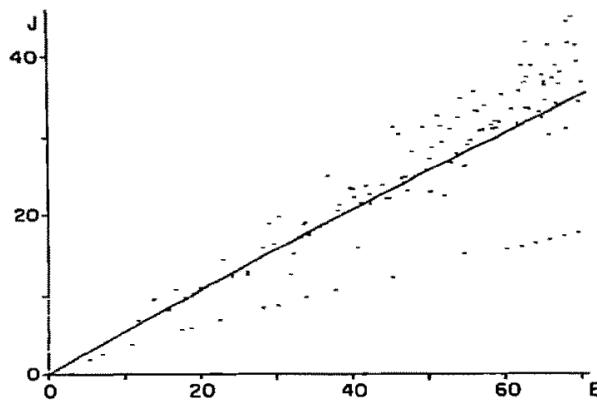
<sup>12</sup>Anglicky *Peres lattices* nebo *Quantum webs*.

přibližně odpovídá mikrokanonickému průměru veličiny  $O$  na energetické nadploše  $H = E$  fázového prostoru, tedy

$$\langle E | \hat{O} | E \rangle \approx \frac{\int O(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \delta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) d\mathbf{p} d\mathbf{q}}{\int \delta(E - H(\mathbf{p}, \mathbf{q})) d\mathbf{p} d\mathbf{q}}. \quad (1.41)$$

V Peresově mříži obecného chaotického systému tak můžeme najít zbytky nerozbité sítě, které odpovídají v semiklasické představě integrabilním oblastem a body z „potrhané“ sítě, <sup>13</sup> které odpovídají klasickým ergodickým oblastem. Rozbití sítě je důsledkem delokalizace vektorů a posunu hodnot spektra.

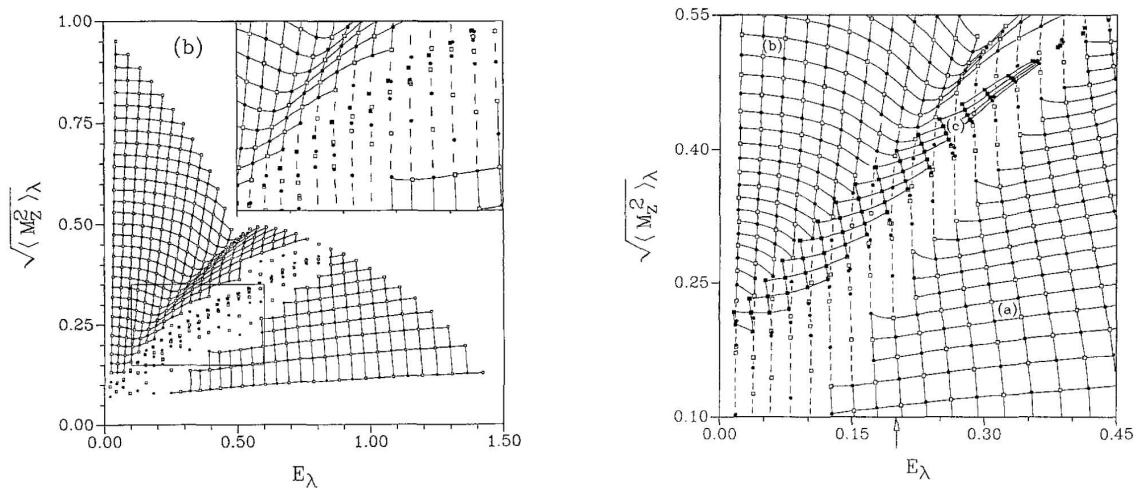
Ukázka Peresovy mříže chaotického systému je na obrázku 1.9, kde je čarou znázorněna klasická hodnota mikrokanonického průměru ze vztahu (1.41).



Obrázek 1.9: Ukázka Peresovy mříže chaotického systému z jeho navazující práce (Feingold a Peres, 1986). Jedná se o graf závislosti střední hodnoty momentu hybnosti  $J$  ve dvojdimenzionálním systému. Čarou je znázorněna klasická hodnota mikrokanonického průměru ze vztahu (1.41). Za pozornost stojí také pravidelná řada bodů ve spodní části grafu. Ty odpovídají regulárním stavům. Dle semiklasické představy, se jedná o střední hodnoty ve stavech lokalizovaných na zbytcích invaritního toru ve fázovém prostoru.

---

<sup>13</sup>Způsob identifikace chaosu pomocí této metody je spíše kvalitativní, ale stejně jako IPR nám pomůže identifikovat jednotlivé chaotické stavy.



Obrázek 1.10: Ukázka Peresových mříží chaotických spinových systémů z práce (Srivastava a Müller, 1990). V obou případech se jedná o grafy energetické závislosti střední hodnoty časové střední hodnoty magnetizace  $\langle M^z \rangle_T$ . Na levém grafu vidíme roztržení sítě, které odpovídá tomu, že příslušné střední hodnoty byly počítány v chaotických stavech. Na pravém grafu vidíme systém s jinou hodnotou parametru, kterým regulujeme chaotičnost systému. Mezi oblastmi (a) a (b) vzniká nová lokální síť, což semiklasicky odpovídá vzniku nového invariantního toru na fázovém prostoru (případně vniku nových kvantových čísel, která ale nejsou dobrá globálně).



# Kapitola 2

## Algebraický $u(3)$ model

### 2.1 Vibronový model

Studovaným modelem v této práci je algebraický model molekulárních vibrací. Byl prezentován v článku (Iachello a Oss, 1996). Popis dvouozměrných molekulárních vibrací v rovině  $xy$  je postaven na operátorové algebře  $u(3)$ . Operátory z této algebry lze sestavit pomocí dvou sad kreačních a anihilačních operátorů  $\{\hat{\tau}_x, \hat{\tau}_x^\dagger\}$  a  $\{\hat{\tau}_y, \hat{\tau}_y^\dagger\}$  a dodatečné sady skalárních operátorů  $\{\hat{\sigma}, \hat{\sigma}^\dagger\}$ . Bosony typu  $\tau$  odpovídají vibračním excitacím ve směrech  $x$  a  $y$ , proto mluvíme o vibronovém modelu. Algebru  $u(3)$  je vhodné formulovat pomocí kruhových bosonů

$$\hat{\tau}_\pm^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\tau}_x^\dagger \pm i \hat{\tau}_y^\dagger), \quad \hat{\tau}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\tau}_x \mp i \hat{\tau}_y) \quad (2.1)$$

jako

$$\begin{aligned} \hat{n} &= (\hat{\tau}_+^\dagger \hat{\tau}_+ + \hat{\tau}_-^\dagger \hat{\tau}_-) & \hat{D}_+ &= \sqrt{2} (\hat{\tau}_+^\dagger \hat{\sigma} - \hat{\sigma}^\dagger \hat{\tau}_-) \\ \hat{l} &= (\hat{\tau}_+^\dagger \hat{\tau}_+ - \hat{\tau}_-^\dagger \hat{\tau}_-) & \hat{D}_- &= \sqrt{2} (-\hat{\tau}_-^\dagger \hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger \hat{\tau}_+) \\ \hat{Q}_+ &= \sqrt{2} (\hat{\tau}_+^\dagger \hat{\tau}_-) & \hat{R}_+ &= \sqrt{2} (\hat{\tau}_+^\dagger \hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger \hat{\tau}_-) \\ \hat{Q}_- &= \sqrt{2} (\hat{\tau}_-^\dagger \hat{\tau}_+) & \hat{R}_- &= \sqrt{2} (\hat{\tau}_-^\dagger \hat{\sigma} + \hat{\sigma}^\dagger \hat{\tau}_+) \\ \hat{n}_s &= (\hat{\sigma}^\dagger \hat{\sigma}). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Algebra  $u(3)$  obsahuje dva řetězce podalgeber

$$\begin{aligned} u(3) &\supset u(2) \supset o(2) & \text{I. řetězec,} \\ u(3) &\supset o(3) \supset o(2) & \text{II. řetězec,} \end{aligned}$$

které jsou tvořeny operátory

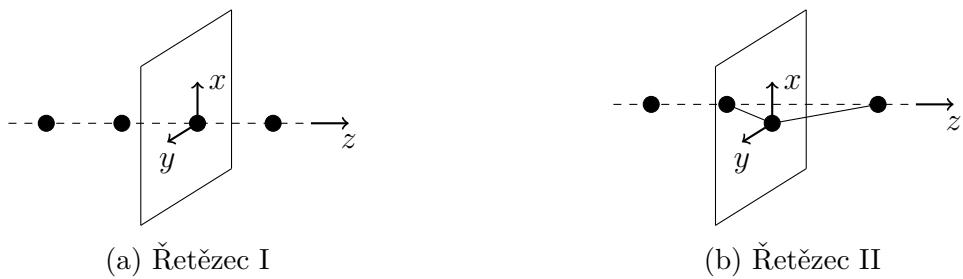
$$\begin{aligned} u(2) &= \{\hat{n}, \hat{l}, \hat{Q}_+, \hat{Q}_-\} \\ o(3) &= \{\hat{D}_+, \hat{D}_-, \hat{l}\} \\ o(2) &= \{\hat{l}\}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Model vibrací je invariantní vůči akci grupy  $O(2)$ , což odpovídá otočení molekuly kolmě osy  $z$  (viz obr. 2.1). Jako prostor stavů použijeme reprezentační prostor algebry  $u(3)$ .

Hamiltonián pak lze sestavit z Casimírových operátorů  $\hat{C}$  podalgeber  $u(2)$  a  $o(3)$ . Samostatně popisují členy v hamiltoniánu systémy invariantní vůči větším grupám  $SU(2)$ , resp.  $O(3)$ , než je grada symetrií fyzikálního problému. Autoři původního článku představili jednoparametrický hamiltonián

$$\hat{H}_o = (1 - \xi) \hat{C}[u(2)] - \frac{\xi}{(N - 1)} \hat{C}[o(3)], \quad (2.4)$$

kde parametr  $\xi$  udává geometrii molekuly s  $O(2)$  symetrií a  $N$  je celkový počet bosonů, tedy  $\hat{N} = \hat{n} + \hat{n}_\sigma$ . Ten se v systému zachovává. Hlavní výhodou tohoto algebraického modelu tak je, že pracujeme s Hilbertovým prostorem konečné dimenze. Operátory lze reprezentovat pomocí matic konečné dimenze. Přirozené je pak použít bázi, ve které budou roli kvantových čísel hrát vlastní hodnoty operátorů počtu částic. Elementy operátorů lze určit čistě pomocí komutačních relací.



Obrázek 2.1: Geometrie molekuly popsané řetězci podalgeber algebry  $u(3)$ . Prvnímu řetězci odpovídá v hamiltoniánu Casimírov operátor  $\hat{C}[u(2)]$  a druhému operátor  $\hat{C}[o(3)]$ .

V důsledku symetrie komutuje operátor  $\hat{l}$  s hamiltoniánem

$$[\hat{H}_o, \hat{l}] = 0.$$

V systému se čtyřmi stupni volnosti tak najdeme dva nezávislé integrály pohybu, což znamená, že se jedná o integrabilní systém. Integrabilitu lze narušit například interakcí s elektromagnetickým polem. Interakci s polem ve směru osy  $x$  lze vyjádřit přidáním dipólového operátoru

$$\hat{D}_x = \frac{1}{2} (\hat{D}_+ + \hat{D}_-). \quad (2.5)$$

Nový hamiltonián má tvar

$$\hat{H} = (1 - \xi) \hat{n} - \frac{\xi}{(N - 1)} \hat{W}^2 - \varepsilon \hat{D}_x, \quad (2.6)$$

kde

$$\hat{W}^2 \equiv \frac{1}{2} (\hat{D}_+ \hat{D}_- + \hat{D}_- \hat{D}_+) + \hat{l}^2$$

a parametr  $\varepsilon$  udává intenzitu elektrického pole. Jak už jsme zmínili, tento parametr je zodpovědný za narušení  $O(2)$  symetrie modelu, integrability a vznik chaosu.

Detailněji jsme se zavedení tohoto modelu věnovali v předchozí práci (Novotný, 2020). V ní jsme provedli klasickou limitu (2.7) hamiltoniánu

$$H_{\text{cl}} = \frac{1-\xi}{2} \left[ \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2) \right] - \xi \left[ (p_x^2 + p_y^2) \left( 2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2) \right) + (p_y q_x - q_y p_x)^2 \right] - \varepsilon \left[ p_y \sqrt{2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)} \right] \quad (2.7)$$

a studovali chaos na čtyřdimenzionálním fázovém prostoru se souřadnicemi

$$\{q_x, q_y, p_x, p_y\}.$$

Máme tak možnost porovnat indikátory kvantového chaosu s Lyapunovovým exponentem, objemem chaotické části fázového prostoru a Poincarého řezy.

## 2.2 Bose-Einsteinův kondenzát

Před studiem kvantového chaosu v  $u(3)$  modelu uděláme menší odbočku. Při studiu vibronového modelu jsme zjistili, že jej lze převést na model, který popisuje Bose-Einsteinův kondenzát bosonů se spinem 1. Toto spojení nám v některých případech usnadní interpretaci výsledků a pomůže k nalezení dodatečné symetrie vibronového modelu. Nejdůležitějším důsledkem však je možnost experimentálního ověření našich výsledků právě na experimentech s Bose-Einsteinovým kondenzátem.

V nedávném článku (Rautenberg a Gärttner, 2020) studovali jeho autoři chaos v modelu Bose-Einsteinova kondenzátu (zkratka BEC<sup>1</sup>). Jedná se o tříbosonový model, který popisuje kondenzát bosonů se spinem 1. Hamiltonián lze formulovat pomocí tří sad kreačních a anihilačních operátorů, které přísluší jednotlivým projekcím spinu

$$\{\hat{a}_{-1}, \hat{a}_{-1}^\dagger\}, \{\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger\}, \{\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger\}.$$

Bez vnější interakce je takový model integrabilní. Autoři tak přidali poruchu v podobě vnějšího magnetického pole. Hamiltonián kondenzátu s interakcí s vnější poruchou má podobu

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BEC} = & g \left\{ (\hat{a}_0^\dagger \hat{a}_0^\dagger \hat{a}_1 \hat{a}_{-1} + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_{-1}^\dagger \hat{a}_0 \hat{a}_0) + \hat{N}_0 (\hat{N}_1 + \hat{N}_{-1}) \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} (\hat{N}_1 - \hat{N}_{-1})^2 \right\} + q (\hat{N}_1 + \hat{N}_{-1}) \\ & + \frac{r}{\sqrt{2}} \left\{ (\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_{-1}^\dagger) \hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger (\hat{a}_1 + \hat{a}_{-1}) \right\}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

kde  $\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$  je operátor počtu bosonů s projekcí spinu  $i$ . Hamiltonián obsahuje tři parametry  $g, q$  a  $r$ . První dva modelují samotný kondenzát, kde  $g$  je síla s-interakce<sup>2</sup> a  $q$  odpovídá kvadratickému Zeemanovu posuvu. Pro detaily odkazujeme na (Law a kol., 1998). Parametr  $r$  souvisí s vnějším magnetickým polem. Pro  $r = 0$  je systém nechaotický. Při nenulové hodnotě již systém není integrabilní. Parametr  $r$  tak hraje v BEC modelu stejnou roli jako parametr  $\varepsilon$  ve vibronovém. Tento model dobře popisuje například kondenzát atomů rubidia  $^{87}\text{Rb}$ .

<sup>1</sup>Z anglického *Bose-Einstein Condensate*

<sup>2</sup>Anglicky *s-wave interaction*

### 2.2.1 Vztah vibronového a BEC hamiltoniánu

Identifikujeme-li vibronové a BEC sady kreačních a anihilačních operátorů

$$\{\hat{\tau}_-, \hat{\sigma}, \hat{\tau}_+\} \leftrightarrow \{\hat{a}_{-1}, \hat{a}_0, \hat{a}_1\},$$

lze BEC hamiltonián (2.8) přepsat s pomocí operátorů (2.2) algebry  $U(3)$  do tvaru

$$\hat{H}_{\text{BEC}} = \left(q - \frac{g}{2}\right) \hat{n} + \frac{g}{2} \hat{W}_R^2 + \frac{r}{\sqrt{2}} (\hat{R}_+ + \hat{R}_-) - gN, \quad (2.9)$$

kde Casimírovým operátorem algebry  $o(3)$  je

$$\hat{W}_R^2 \equiv \frac{1}{2} (\hat{R}_+ \hat{R}_- + \hat{R}_- \hat{R}_+) + \hat{l}^2. \quad (2.10)$$

Tento hamiltonián odpovídá strukturou vibronovému hamiltoniánu (2.6) až na konstantu  $-gN$ , která však jen posouvá spektrum a neprojeví se na dynamice. Ve vibronovém hamiltoniánu je podalgebra  $o(3)$  reprezentována operátory  $\{\hat{D}_+, \hat{D}_-, \hat{l}\}$ , zatímco v BEC hamiltoniánu je použita reprezentace pomocí operátorů  $\hat{R}$ , které také tvoří algebru  $o(3)$ . Pro odlišení od algebry operátorů  $\hat{D}$  ji budeme označovat  $\bar{o}(3)$

$$\bar{o}(3) = \{\hat{R}_+, \hat{R}_-, \hat{l}\}. \quad (2.11)$$

Můžeme pak přímo identifikovat jednotlivé parametry obou modelů.

$$q - \frac{g}{2} = (1 - \xi), \quad \frac{g}{2} = \frac{\xi}{1 - N}, \quad \frac{r}{\sqrt{2}} = -\frac{\varepsilon}{2} \quad (2.12)$$

Volný vibronový hamiltonián (2.4) obsahuje jen jeden parametr  $\xi$ , zatímco volný BEC hamiltonián má dva parametry  $q$  a  $p$ . Předchozí vztah tak dává dodatečnou podmínu na kombinaci  $q$  a  $p$ , pokud bychom je chtěli vyjádřit pomocí  $\xi$ . BEC model lze z pohledu parametrů chápout jen jako zobecnění vibronového.

Otázkou je, jaký vliv má volba reprezentace podalgebry  $o(3)$  na spektrum a vlastní vektory příslušného hamiltoniánu? Pro vibronový a BEC hamiltonián se stejnými parametry platí:

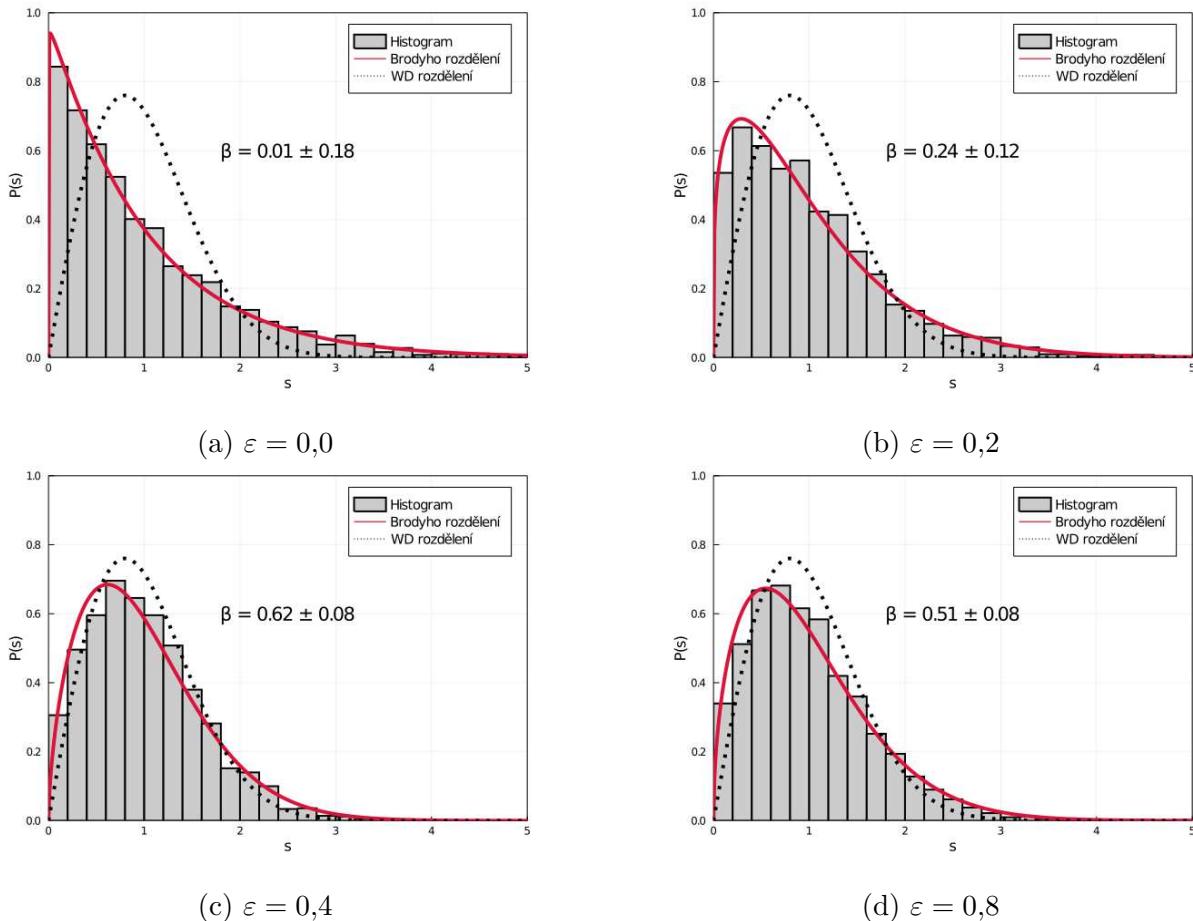
- Oba hamiltoniány mají stejné spektrum.
- Oba mají dodatečnou diskrétní symetrii, díky které je lze blokově diagonalizovat do dvou bloků. Obě báze, ve kterých jsou blokově diagonální, obsahují stejné vektory. Liší se však jejich pořadím. Komponenty vlastních vektorů vibronového a BEC hamiltoniánu příslušející stejné energii ve zvolené bázi se v absolutní hodnotě rovnají. V případě volného hamiltoniánu se tato symetrie projeví dublety ve spektru.

**Vibronový a BEC hamiltonián tak popisují stejný systém, ale vyjádřený v jiné bázi.** Souhrnně tak můžeme mluvit o  $u(3)$  hamiltoniánu. Odvození těchto tvrzení uvádíme v appendix A.

## 2.3 Chaos v $u(3)$ modelu

Indikátory kvantového chaosu, které jsme zavedli v předchozí kapitole, nyní použijeme pro studium  $u(3)$  hamiltoniánu (2.6).

Chaos je indukován poruchou s parametrem  $\varepsilon$ . Pro  $\varepsilon = 0$  máme regulární integrabilní systém se zachovávající se veličinou  $\hat{l}$ . Narůstajícím  $\varepsilon$  je regularita narušena. Tomu odpovídá chování NNSD v grafech na obrázku 2.2. Pro nenulové hodnoty poruchy začíná NNSD rozdělení přecházet na Wignerovo-Dysonovo. Ve všech případech ale není systém plně chaotický, což poznáme z hodnoty Brodyho parametru.



Obrázek 2.2: Grafy histogramů NNSD vibrionového hamiltoniánu s  $\xi = 0,4$  pro různé hodnoty parametru  $\varepsilon$ . Rozdělení NNSD byla naftována Brodyho funkcí (1.15). Příslušné Brodyho parametry  $\beta$  i s chybou fitu jsou uvedeny v grafech. Vyznačeno je také Wignerovo-Dysonovo rozdělení, které odpovídá krajní hodnotě  $\beta = 1$ . Výsledky jsou pro spektrum z prvního ze dvou invariantních podprostorů, daných dodatečnou diskrétní symetrií  $u(3)$  hamiltoniánu, s dimenzí 2601. Celkový počet bosonů je  $N = 100$ , tedy dimenze celého Hilbertova prostoru je 5151.

Z grafů vidíme, že závislost chaotičnosti na parametru  $\varepsilon$  není přímočará. Tedy růst intenzity poruchy obecně neznamená nárůst Brodyho parametru. Můžeme se podívat na závislost chaotičnosti systému na kombinaci parametrů  $\varepsilon$  a  $\xi$ . Ta je na obrázku 2.4. Vidíme, že v parametrickém prostoru existuje hlavní oblast (b), ve které je systém převážně chaotický. Dle semiklasické představy by to znamenalo, že většina fázového prostoru je zaplněna chaotickými oblastmi. Oblasti (a) sice také vykazují vysokou hodnotu Brodyho parametru, ale v tomto případě se

jedná naopak o regulární systém. Pro krajní hodnoty  $\xi = 0$  a  $\xi = 1$  obsahuje spektrum dodatečné degenerace a jednotlivé hladiny jsou korelované podobně jako u harmonického oscilátoru (obr. 2.3). Je to přesně případ integrabilního spektra, které nemá poissonovské rozdělení NNS.

Porovnáme výsledky se spektrální statistikou  $\langle \tilde{r} \rangle$ . Uvedené hodnoty byly normalizovány tak, aby krajní případy odpovídaly WD, resp. poissonovskému spektru

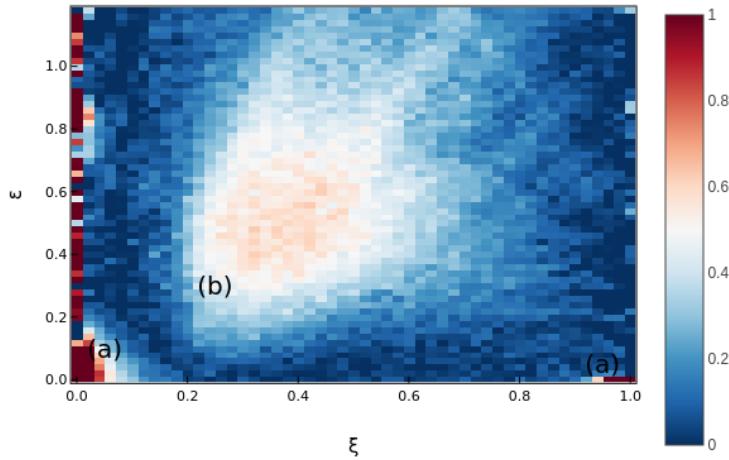
$$\overline{\langle \tilde{r} \rangle} = \frac{\langle \tilde{r} \rangle - \langle \tilde{r} \rangle_{\text{Poisson}}}{\langle \tilde{r} \rangle_{\text{WD}} - \langle \tilde{r} \rangle_{\text{Poisson}}}. \quad (2.13)$$

Závislost  $\overline{\langle \tilde{r} \rangle}$  je znázorněna na obrázku 2.5. Ten ukazuje podobné chování jako v případě NSD.

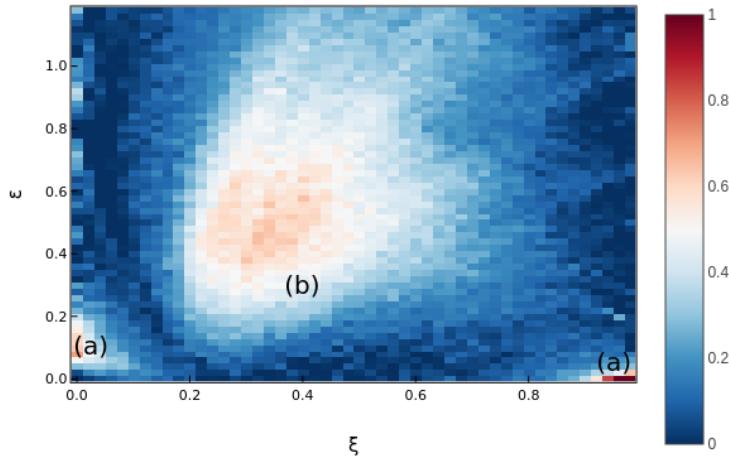
Takto jsme získali představu o chaotičnosti systémů v závislosti na parametrech hamiltoniánu. V semiklasické představě to přibližně odpovídá informaci o podílu fázového prostoru zaplněného chaotickými oblastmi. Dále se budeme zajímat o to, jaký vliv na chaos ve vibronovém systému má energie. Použijeme-li opět semiklasickou představu, zajímá nás, jestli na dané energetické nadploše najdeme chaotické oblasti. Vhodným indikátorem je v tomto případě delokalizace vlastních vektorů IPR. Rozplývání vektorů ve zvolené bázi budeme normovat faktorem  $D/3$ , kde  $D$  je dimenze příslušného invariantního podprostoru tak, aby krajní případy  $3/D \approx 0$  a  $1$  odpovídaly vlastnímu vektoru báze (maximální lokalizace) a náhodnému vektoru (úplná delokalizace).

$$\overline{\eta(\mathbf{v})} = \frac{3}{D} \eta(\mathbf{v}). \quad (2.14)$$

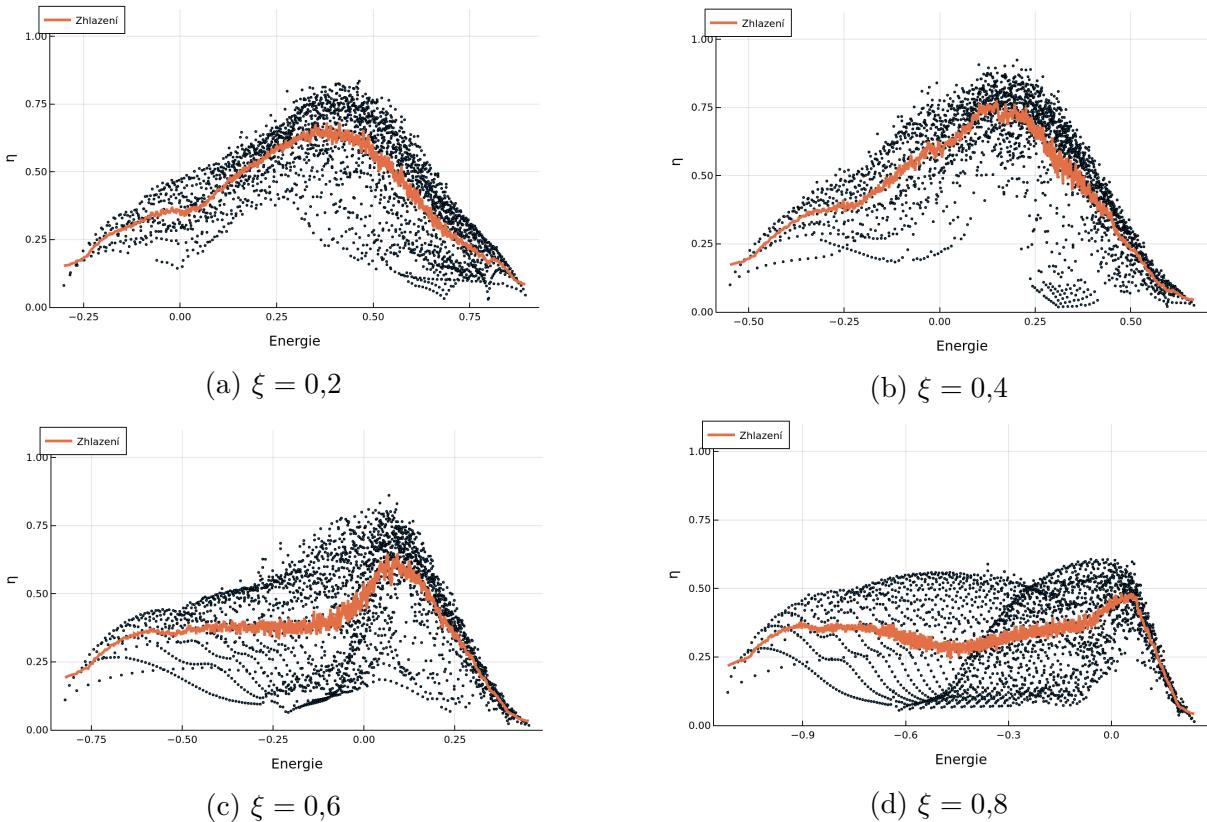
Na obrázku 2.6 je ukázka energetické závislosti IPR.



Obrázek 2.4: Graf závislosti Brodyho parametru  $\beta$  (barevná škála) na kombinaci parametrů  $\xi$  a  $\varepsilon$ . V grafu pozorujeme dva typy oblastí (a) a (b) s výrazně vyšší hodnotou  $\beta$ . Oblasti typu (a) odpovídají nechaotickým případům, kdy se ve spektru vyskytuje velké množství degenerací a Brodyho funkcí není možné NNSD dobře nafitovat. Oblast (b) odpovídá případům, kdy je systém převážně chaotický. Brodyho parametr byl určen fitováním spekter z obou invariantních podprostorů. Uveden je pak jeho průměr. Dimenze Hilbertova prostoru je 5151, což odpovídá celkovému počtu  $N = 100$  bosonů.



Obrázek 2.5: Graf závislosti  $\overline{\langle \tilde{r} \rangle}$  parametru (barevná škála) na kombinaci parametrů  $\xi$  a  $\varepsilon$ . V grafu pozorujeme dva typy oblastí (a) a (b) s výrazně vyšší hodnotou  $\beta$ . Oblasti typu (a) odpovídají nechaotickým případům, kdy se ve spektru vyskytuje velké množství blízkých hladin způsobené původní dodatečnou symetrií pro krajní hodnoty  $\xi$ . Oblast (b) odpovídá případům, kdy je systém převážně chaotický.  $\langle \tilde{r} \rangle$  byl určen ze spekter z obou invariantních podprostorů. Uveden je pak jeho průměr. Dimenze Hilbertova prostoru je 5151, což odpovídá celkovému počtu  $N = 100$  bosonů.

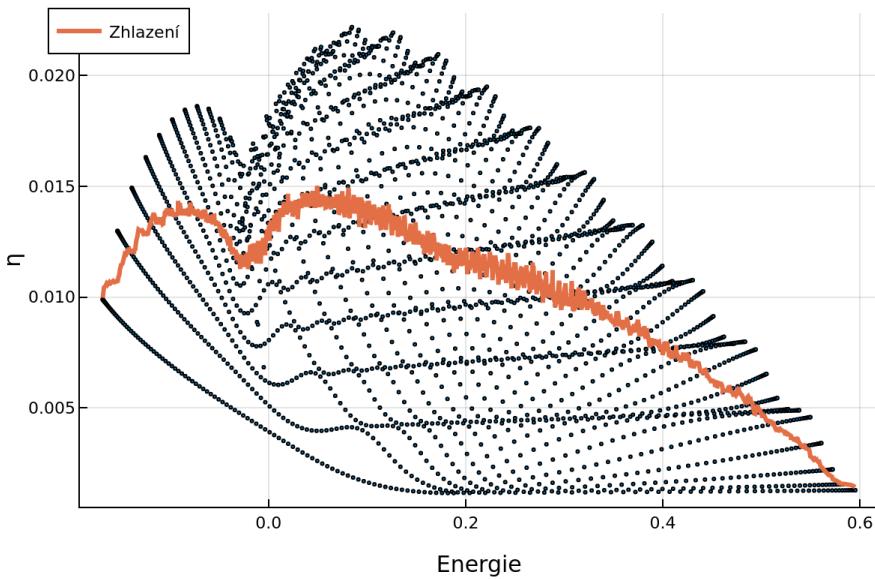


Obrázek 2.6: Grafy IPR vlastních vektorů vibronového hamiltoniánu s  $\varepsilon = 0.4$  pro různé hodnoty parametru  $\xi$ . Počítána je delokalizace v bázi  $|Nnl\rangle$ . Hodnoty jsou normovány tak, aby  $\overline{\eta(\mathbf{v})} \approx 0$  odpovídalo bázovému vektoru a  $\overline{\eta(\mathbf{v})} = 1$  byl náhodný vektor. Výsledky jsou pro vektory z prvního invariantního podprostoru s dimenzí  $D = 2601$ . Celkový počet bosonů je  $N = 100$ , tedy dimenze celého Hilbertova prostoru je 5151.

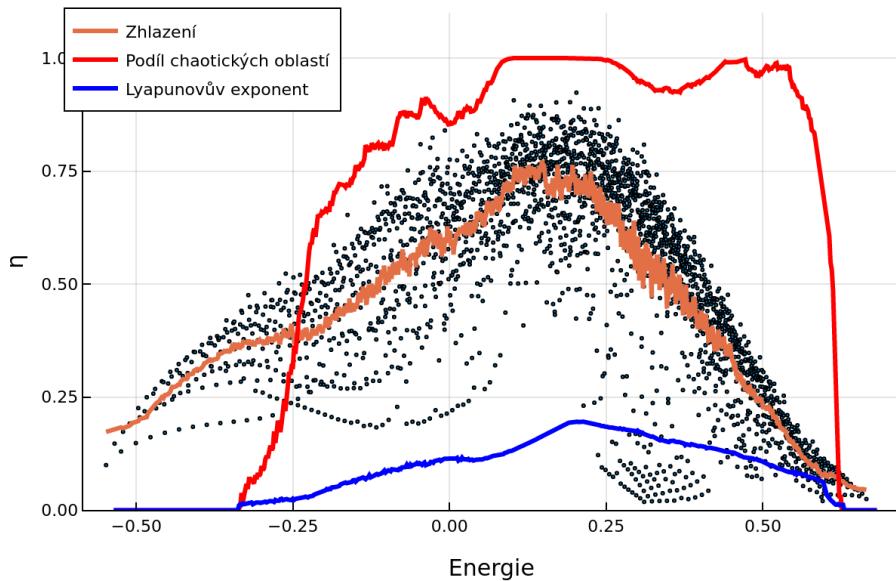
Kvantový chaos se projevuje nejen delokalizací vektorů v podobě vysokého IPR, ale také rozbitím struktur. To pozorujeme právě v maximech uvedených grafů. Díky klasické limitě můžeme průběh IPR porovnat s podílem objemu chaotických oblastí na jednotlivých energetických nadplochách. Ukázka je na obrázku 2.8. V oblastech, kde je klasický fázový prostor plně chaotický, pozorujeme nárůst IPR nebo stlačení jednotlivých bodů, kdy  $\eta$  se chová jako hladká funkce energie. Pravidelně uspořádané body s nízkým IPR, které vybočují (shluk bodů v grafu za energií  $E = 0.25$ ), odrážejí regulární chování systému a v semiklasické představě odpovídají regulárním oblastem na energetických nadplochách (ukázka plně regulárního systému na obrázku 2.7).

Pro dané intenzity poruchy  $\varepsilon$  jsme napočítali energetickou závislost IPR. Ukázky jsou na obrázku 2.9. Oblasti s nejvyššími hodnotami IPR jsou v souladu s výsledky NNSD (obr. 2.4) a  $\langle \tilde{r} \rangle$  (obr. 2.5). Obtížné je však klasifikovat hraniční oblasti, kde by mělo dojít k přechodu od regularity k chaosu. Zde slouží indikátory spíše ke kvalitativní identifikaci.

Využijeme klasické limity a podíváme se pomocí Poincarého řezů přímo na fázový prostor. Na obrázku 2.10 je graf IPR v závislosti na energii a parametr  $\xi$  s pevnou hodnotou poruchy  $\varepsilon$ . Podél oblasti s vysokou hodnotou delokalizace vlastních stavů jsme vybrali pár bodů, ve kterých jsme napočítali Poncarého řezy klasickým fázovým prostorem ((a) až (h)). Regulární oblasti (vyplňené černými křivkami) jsou postupně nahrazovány chao-



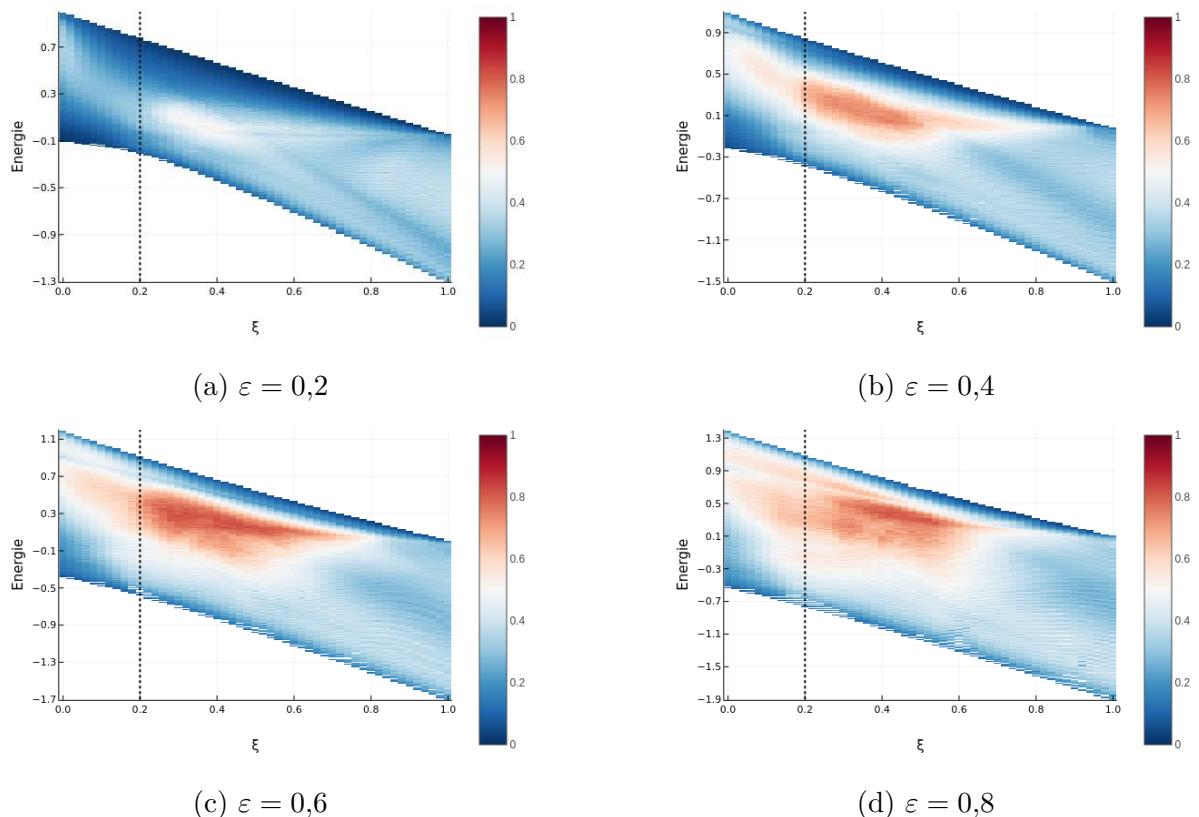
Obrázek 2.7: Energetická závislost IPR pro regulární systém  $\xi = 0.4$ ,  $\varepsilon = 0$ . Vidíme pravidelné uspořádání bodů a nízké hodnoty IPR. Výsledky jsou pro vektory z prvního invariantního podprostoru s dimenzí  $D = 2601$ . Celkový počet bosonů je  $N = 100$ , tedy dimenze celého Hilbertova prostoru je 5151.



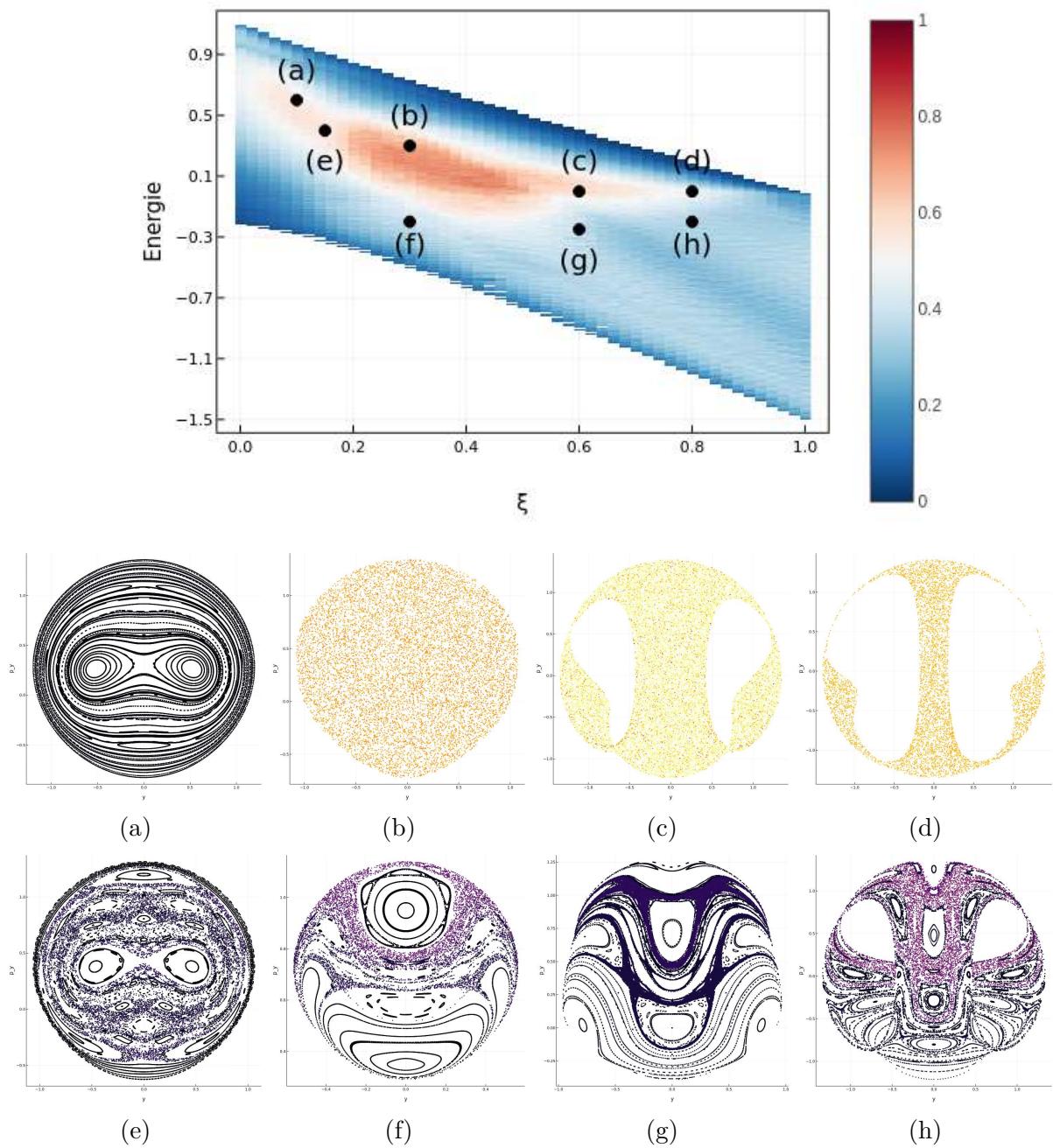
Obrázek 2.8: Porovnání energetické závislosti IPR vlastních stavů systému s parametry  $\xi = 0.4$  a  $\varepsilon = 0.4$  z grafu 2.6 s klasickým Lyapunovovým exponentem a podílem chaotických oblastí na klasickém fázovém prostoru. V oblastech spektra, kdy je klasický fázový prostor plně chaotický, vidíme vysoké hodnoty IPR a téměř hladkou závislost  $\eta$  na energii. Nad energií  $E = 0.25$  vznikají na fázovém prostoru opět regulární struktury. To se projevuje v kvantovém případě stavů s nízkým IPR, které tvoří v grafu pravidelnou strukturu.

tickými (vyplněné barevnými body; barva značí hodnotu Lyapunovova exponentu). Opět vidíme kvalitativní shodu. Musíme být však opatrní u vyhodnocování přechodových oblastí, na kterých je systém málo chaotický. Dle grafu IPR bychom mohli očekávat, že v grafu (a) uvidíme podobně chaotický systém jako v (d) nebo (f). Klasicky je však (a) téměř regulární, (d) obsahuje chaotické i regulární oblasti a (f) je téměř plně chaotický. Rozdíl mezi (a) a (f) ale zachytily obě spektrální statistiky, podle kterých by fázový prostor s parametry pro (a) měl narození od (f) mít malý podíl chaotických oblastí.

Nyní již máme představu o tom, kdy je studovaný model chaotický. V další kapitole budeme studovat chování různočasových korelačních faktorů v regulárních a chaotických režimech.



Obrázek 2.9: Grafy závislosti IPR (barevná škála) vlastních vektorů vibronového hamiltoniánu na energii a parametru  $\xi$ . Uvedeny jsou příklady pro různé hodnoty intenzity poruchy  $\varepsilon$ . Původně diskrétní hodnoty spektra jsou uvedeny po vystředování přes energetické intervaly dané velikosti. Výsledky jsou pro vektory z prvního invariantního podprostoru s dimenzí  $D = 2601$ . Celkový počet bosonů je  $N = 100$ , tedy dimenze celého Hilbertova prostoru je 5151.



Obrázek 2.10: Grafy závislosti IPR vlastních vektorů vibronového hamiltoniánu na energii a parametru  $\xi$  pro  $\varepsilon = 0,4$ . Pro vybrané body byly napočítány Poincarého řezy  $x = 0$  klasickým fázovým prostorem s hamiltoniánem (2.7). Barva bodů odpovídá Lyapunovovu exponentu na škále  $\langle 0,0.2 \rangle$  (černá - modrá - fialová - oranžová - žlutá).



# Kapitola 3

## Různočasové korelátor

Různočasové korelátor se ukázaly být velmi dobrým nástrojem pro studium chaosu v kvantových systémech. Obecně vystihují, jak se původně lokalizovaná informace rozprostírá pomocí interakce do jednotlivých stupňů volnosti systému<sup>1</sup> (Swingle, 2018). Nejjednodušším příkladem může být řetízek spinů. Převrátíme-li orientaci jednoho spinu, v závislosti na interakci mezi spiny se informace o této změně rozšíří podél celého řetízku. Malá lokalizovaná porucha může být v průběhu evoluce výrazně zesílena. To je analogické exponenciální citlivosti klasicky chaotických systémů. Tam porovnáváme vzájemné vzdálování stavů, zatímco v kvantovém případě studujeme rozpad korelace mezi operátory v různých časech. Mísení informace tak úzce souvisí s kvantovým chaosem a lze jej chápout jako mechanismus odpovědný za termalizaci kvantových systémů.

Různočasovým operátorem, neboli **OTOCem**<sup>2</sup> budeme chápout záporně vzatou druhou mocninu komutátoru pozorovatelných  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$ , kterou vystředujeme přes daný stav  $|\psi\rangle$

$$C(t) = \langle\psi| \hat{C}(t) |\psi\rangle = -\langle\psi| [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]^2 |\psi\rangle = \langle\psi| [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]^\dagger [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] |\psi\rangle. \quad (3.1)$$

Celý výraz lze také přepsat jako součin komutátoru se svým hermitovským sdružením. Komutátor dvou hermitovských operátorů je antihermitovský. Ve výrazu (3.1) se vyskytuje mínus a součin uvažujeme s hermitovským sdružením, aby  $\hat{C}(t)$  byl hermitovský.

Je-li stav, přes který středujieme, vlastním stavem hamiltoniánu  $|\psi\rangle = |E_i\rangle$ , mluvíme o mikrokanonických OTOCích. V literatuře se můžeme setkat s označením **mOTOCy**. Dále budeme pracovat převážně s nimi a budeme o nich mluvit dále jako o OTOCích. Uvažují se rovněž termální OTOC (středování operátoru  $\hat{C}$  se provádí přes termální stav na dané teplotě), které zmíníme na konci této kapitoly, nebo OTOC pro zcela obecné (např. koherentní) stavů.

Operátory  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  bereme v Heisenbergově obraze. Místo stavů tak vyvívíme operátory. Jejich časová závislost je dána tradičním vztahem

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}t\hat{H}} \hat{A} e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}. \quad (3.2)$$

Podstatné je právě to, že v komutátoru bereme operátory v různých časech. OTOC nám říká, jak se operátor  $\hat{A}$  časovým vývojem změnil. A tuto změnu „měříme“ operátorem  $\hat{B}$ .

<sup>1</sup>Anglicky se toto míchání informace v kvantovém systému nazývá *quantum scrambling*.

<sup>2</sup>Z anglického *Out-of-Time-Order Correlator*.

V komutátoru je člen  $\hat{A}(t)\hat{B}$ , kde měříme operátorem  $\hat{B}$  před evolucí, a druhý člen  $\hat{B}\hat{A}(t)$  s měřením po evoluci.

Časový průběh obecného OTOCu lze rozdělit na krátkočasové chování a asymptotické chování v dlouhých časech. V krátkých časech dochází k míchání informace mezi stupni volnosti kvantového systému. V kontextu operátorového vývoje mluvíme o *operátorovém rozplývání*<sup>3</sup>. Ten se typicky projevuje nárůstem OTOCu, jehož rychlosť charakterizuje rychlosť míchání informace v systému. U regulárních kvantových systémů pozorujeme nejvíše polynomiální nárůst OTOCů v čase, zatímco u kvantových systémů s chaotickou klasickou limitou roste OTOC exponenciálně rychle. Zajímavé je, že exponent je úměrný hodnotě klasického Lyapunovova exponentu  $\lambda$

$$C(t) \sim e^{2\lambda t}. \quad (3.3)$$

Pomocí OTOCů lze rychlosť šíření informace měřit i v systémech bez klasické limity. Těmi jsou například spinové systémy (Riddell a Sørensen, 2019) a kvantové počítače (Mi a kol., 2021). Exponenciální nárůst OTOCů v kvantově chaotických systémech není univerzální. U některých spinových modelů (Fortes a kol., 2019) dochází k polynomiálnímu nárůstu a ve speciálních případech jen k lineárnímu.

Tento interval krátkých časů je omezen takzvaným Ehrenfestovým časem  $\tau_E$ . Pro vícečásticové systémy s konečnou velikostí je definován jako

$$\tau_E = \frac{1}{\lambda} \log(N), \quad (3.4)$$

kde  $N$  je počet částic a  $\lambda$  je zmíněný klasický Lyapunovův exponent. Inverzní počet částic hraje ve vícečásticových systémech roli efektivní Planckovy konstanty (převrácená velikost systému). Obecně by tak ve vztahu bylo  $\log(1/\hbar_{\text{eff}})$ . Do tohoto času se původně lokalizovaný kvantový stav chová téměř klasicky, tedy časový průběh středních hodnot v daném stavu odpovídá přibližně průběhu těch klasických.

Po Ehrenfestově čase dochází k saturaci hodnoty OTOCu. V dlouhých časech pozorujeme aperiodické oscilace kolem asymptotické střední hodnoty (Fortes a kol., 2019).

V dalších sekcích nejprve uvedeme vysvětlení krátkočasového chování OTOCů a jejich následné saturace. V závěru se budeme věnovat právě asymptotickým oscilacím OTOCů a ukážeme, jak souvisejí s chaosem.

### 3.1 Krátkočasové chování a saturace

S pochopením některých vlastností OTOCů nám pomůže korespondence mezi Poissonovými závorkami (1.1) a komutátorem

$$\{A, B\} \longleftrightarrow i\hbar[\hat{A}, \hat{B}],$$

kde  $A$  a  $B$  jsou funkce na fázovém prostoru a  $\hat{A}$  a  $\hat{B}$  jsou příslušné operátory na Hilbertově prostoru. Spojitost mezi Lyapunovovým exponentem a Poissonovými závorkami najdeme pomocí Hessovy matice Hamiltoniánu. Ta totiž udává, jak se vzdalují blízké trajektorie podél hamiltonovského toku.

---

<sup>3</sup>Anglický termín je *operator spreading*.

### 3.1.1 Klasický přístup

Vraťme se na chvíli na fázový prostor. Na něm uvažujeme bod  $\mathbf{x}(t)$  na trajektorii  $\gamma$  a bod  $\mathbf{x}(t) + \delta\mathbf{x}$  z jeho okolí na trajektorii  $\gamma'$ . Vektor  $\delta\mathbf{x}$  je z tečného prostoru v bodě  $\mathbf{x}(t)$ . Z bodu  $\mathbf{x}(t)$  se posuneme podél trajektorie a otázkou je, jak se podél hamiltonovského toku zdeformuje tečný prostor, tedy jak se vzdálí blízké trajektorie. Změna obecného tečného vektoru  $\delta\mathbf{x}$  v bodě  $\mathbf{x}(t)$  podél hamiltonovského toku je dána součinem vektoru s maticí druhých derivací hamiltoniánu  $\nabla^2 H$  (Hessova matice)

$$\nabla^2 H_{ij}(t) = \left. \frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}$$

a symplektickou formou  $\omega$

$$\omega = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1}_{f \times f} \\ -\mathbb{1}_{f \times f} & 0 \end{pmatrix},$$

tedy

$$\delta\dot{\mathbf{x}}(t) = \omega \cdot \nabla^2 H(t) \cdot \delta\mathbf{x}(t). \quad (3.5)$$

Chaotické trajektorie jsou charakteristické svým exponenciálním vzdalováním. Až na množinu míry nula se vektory z tečných prostorů na chaotických trajektoriích v čase exponenciálně zvětšují

$$|\delta\mathbf{x}(t)| = \left| \int_0^t d\tau \delta\dot{\mathbf{x}}(\tau) \right| \sim e^{\lambda t} \quad (3.6)$$

kde  $\lambda$  je Lyapunovův exponent. Jeho hodnota podél trajektorie mění. V naprosté většině případů se tak uvažuje jeho asymptotická hodnota (viz (Skokos, 2010)).

Matice druhých derivací hamiltoniánu udává lyapunovovské rozpínání elementu fázového prostoru podél toku. Její maticové elementy lze spočítat z Poissonových závorek souřadnic v různých časech. Definuje-li Poissonovy závorky dvou vektorových funkcí  $\mathbf{X}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  a  $\mathbf{Y}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  na fázovém prostoru jako matici s elementy

$$\{\mathbf{X}, \mathbf{Y}\}_{ij} \equiv \{X_i, Y_j\}, \quad (3.7)$$

pak platí

$$\left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{q}(t) \\ \mathbf{p}(t) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{p}(0) \\ \mathbf{q}(0) \end{pmatrix} \right\} = \int_0^t \omega \cdot \nabla^2 H(\tau) d\tau. \quad (3.8)$$

Časová závislost znamená, že obě strany vyčíslujeme podél dané trajektorie  $\gamma$  parametrisované časem  $t$ , resp.  $\tau$ . Jedná se o jednoduchý důsledek definice Poissonových závorek a tvaru pohybových rovnic. Pro konkrétní souřadnici  $q$  a k ní kanonicky sdruženou  $p$  lze výraz rozepsat na

$$\{q(t), p(0)\} = \int_0^t \frac{\partial}{\partial q} \{q, H\} \Big|_\tau d\tau = \int_0^t \frac{\partial^2 H}{\partial q \partial p} \Big|_\tau d\tau = \frac{\partial q(t)}{\partial q(0)}.$$

Na chaotické trajektorii můžeme předpokládat

$$\left| \frac{\partial q(t)}{\partial q(0)} \right| \sim e^{\lambda t} \implies |\{q(t), p(0)\}| \sim e^{\lambda t}. \quad (3.9)$$

Ve výrazu, který by měl odpovídat OTOCům, se na místo absolutní hodnoty používá kvadrát Poissonových závorek. Proto je exponent růstu OTOCů  $2\lambda$ .

### 3.1.2 Semiklasický přístup

Klasická obdoba OTOCů na chaotických trajektoriích vykazuje exponenciální růst s Lyapunovovým exponentem. Spojení s kvantovou mechanikou můžeme získat pomocí Wignerovy kvazipravděpodobnostní distribuce a formulace kvantové mechaniky na fázovém prostoru. Získáme tak rozvoj OTOCu v mocninách  $\hbar$ , kdy vedoucím členem budou výrazy typu (3.9).

My jen stručně uvedeme část výsledků z článku (Cotler a kol., 2018). Ve formulaci kvantové mechaniky na fázovém prostoru  $\Omega$  je kvantový systém popsán Wignerovou distribucí  $\rho$

$$\rho(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \equiv \frac{1}{(\pi\hbar)^f} \int_{\Omega} d\mathbf{q}' \langle \mathbf{q} + \mathbf{q}' | \hat{\rho}(t) | \mathbf{q} - \mathbf{q}' \rangle e^{-2i\mathbf{p}\cdot\mathbf{q}'/\hbar}, \quad (3.10)$$

kde  $\hat{\rho}(t)$  je operátor matice hustoty systému. Stav kvantového systému je pak popsán kvazipravděpodobnostní distribucí  $\rho$ , která může nabývat záporných hodnot na oblastech fázového prostoru s rozměry řádu  $\hbar$ . V klasické limitě  $\hbar \rightarrow 0$  přechází v pravděpodobnostní hustotu splňující klasické pohybové rovnice.

Stejným způsobem můžeme obecný operátor  $\hat{A}$  převést na funkci  $A$  na fázovém prostoru. Nekomutativita operátorů je převedena na nekomutativní součin funkcí

$$A(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \star B(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \equiv A(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \exp \left[ \frac{i\hbar}{2} (\overleftarrow{\partial}_{\mathbf{q}} \cdot \overrightarrow{\partial}_{\mathbf{p}} - \overleftarrow{\partial}_{\mathbf{p}} \cdot \overrightarrow{\partial}_{\mathbf{q}}) \right] B(\mathbf{q}, \mathbf{p}). \quad (3.11)$$

Ten bývá nazýván Moyalovým součinem. OTOC v tomto formalismu zapíšeme pomocí Moyalových závorek

$$\{\{A, B\}\} \equiv \frac{1}{i\hbar} (A \star B - B \star A) = \{A, B\} + \mathcal{O}(\hbar^2). \quad (3.12)$$

OTOC pro operátory polohy  $\hat{q}_i$  a hybnosti  $\hat{p}_j$  lze psát pomocí funkcí  $Q_i$  a  $P_j$  na fázovém prostoru

$$-\frac{1}{\hbar^2} [\hat{q}_i(t), \hat{p}_j(0)]^2 \mapsto \{\{Q_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), P_j(\mathbf{q}, \mathbf{p}, 0)\}\}^{*2}. \quad (3.13)$$

Autoři článku uvádějí výsledek pro obecnou dimenzi fázového prostoru. Podstatné je, že vedoucí člen vykazuje chování jako (3.9). Pro jeden stupeň volnosti je chování nejnázornější

$$\{\{Q(q, p, t), P(q, p, 0)\}\}^{*2} = \left( \frac{\partial Q(t)}{\partial q(0)} \right)^2 + \mathcal{O}(\hbar^2) = \left( \frac{\partial q(t)}{\partial q(0)} \right)^2 + \mathcal{O}(\hbar^2),$$

kde  $q(t)$  je řešení klasických Hamiltonových rovnic.

Různočasové korelátoru libovolné kombinace operátorů poloh a hybností (dle (3.8)) tak v nultém řádu rozvoje podle Planckovy konstanty zachycují citlivost klasického systému na změnu počátečních podmínek. U chaotické trajektorie bychom v klasickém případě pozorovali exponenciální nárůst v každém čase. V kvantovém případě však dochází k saturaci OTOCů za Ehrenfestovým časem a jejich další růst již nepozorujeme. Tato saturace se zdá být čistě kvantovým jevem.

Za saturaci OTOCů po Ehrenfestově čase je zodpovědný kvantový jev interference. V těchto časech selhává semiklasický přístup. V poslední době byla snaha vysvětlit saturace ve vícečásticových systémech pomocí formalismu dráhového integrálu (Rammensee a kol., 2018). Pokusíme se alespoň nastínit, proč má časový průběh OTOCu kolem Ehrenfestova času singularitu (viz (Rozenbaum a kol., 2017)) a zásadně se mění jeho chování.

Představme si, že OTOC měříme ve stavu, kterému odpovídá dobré lokalizované Wignerovo rozdělení v podobě balíku na fázovém prostoru. V krátkých časech evoluce se stále jedná o pomalu se rozplývající, ale dobré lokalizovaný balík. Kvantové střední hodnoty se podobají těm klasickým. Fázový prostor je ale konečný, takže po určitém čase se dostane zpět do oblastí, kde již byl a začne interferovat sám se sebou. Postupně se delokalizuje na dostupné oblasti fázového prostoru. Klasické chování je tak potlačeno na úkor interference a kvantového provázání.

Tím se dostáváme k závislosti OTOCů na zvoleném stavu, přes který je středujieme. Krátkočasové chování OTOCů budeme pozorovat jen ve stavech, které jsou daleko od termalizace. Přechod do asymptotického termalizovaného stavu, způsobený postupným rozplýváním informace mezi jednotlivé stupně volnosti, přesně koresponduje s krátkočasovým chováním OTOCů. U termalizovaných stavů tak tento nárůst nepozorujeme. Vlivu počátečního stavu v obecných různočasových korelátozech se věnují autori článku (Pappalardi a kol., 2020). Podrobně se také zabývají volbou operátorů do OTOCů.

Zatím jsme pracovali jen s OTOCy souřadnic a hybností. Podobné chování však vykazují i OTOCy operátorů obecných pozorovatelných. Často je možné experimentálně měřit OTOCy pozorovatelných, které nemají význam souřadnic na fázovém prostoru. Ve spinových modelech jsou pak často brány komutátory spinových operátorů.

I v této práci se zaměříme na OTOCy obecných operátorů. V appendixu B uvádíme odvození klasického analogu OTOCů pro dvě obecné funkce na fázovém prostoru. Takový výraz již neobsahuje jen citlivost systému na změnu počátečních podmínek, ale také časovou závislost zvolených pozorovatelných na dané trajektorii.

### 3.1.3 Termální OTOCy

Pro měření rozplývání informace v kvantových systémech při dané teplotě se používají termální OTOCy. Jedná se o stejný operátor jako ve vztahu (3.1), který však středujieme přes termální stav na teplotě  $T$

$$C_T(t) = -\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]^2 \rangle, \quad \langle \bullet \rangle = \frac{1}{\text{Tr}\{e^{-\beta \hat{H}}\}}, \text{Tr}\{e^{-\beta \hat{H}} \bullet\} \quad (3.14)$$

kde  $\beta = T^{-1}$ . OTOC při nekonečné teplotě je tak jen stopou operátoru

$$C_\infty(t) = \frac{1}{D} \text{Tr}\{-[\hat{A}(t), \hat{B}(0)]^2\}, \quad (3.15)$$

kde  $D$  je dimenze příslušného Hilbertova prostoru.

Pro definici kvantového chaosu a termalizace lze použít rozpad korelace v OTOCích. V plně chaotických systémech dosahují OTOCy ve velkých časech, kdy dochází k termalizaci, hodnot řádu

$$C_T(t_{\text{termalizace}}) \sim 2\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \quad (3.16)$$

nezávisle na volbě operátorů (Akutagawa a kol., 2020).

Existuje také domněnka (Maldacena a kol., 2016), že počáteční exponenciální růst termálních OTOCů nemůže překročit rychlosť s exponentem

$$\lambda_{\max} = 2\pi k_B \frac{T}{\hbar}, \quad (3.17)$$

kde  $k_B$  je Boltzmanova konstanta. Rychlosť růstu termálních OTOCů lze použít jako analog klasického Lyapunovova exponentu, neboť nám dovoluje popisovat rychlosť mísení informace i v systémech bez klasické limity. Můžeme tak porovnávat rychlosť mísení například ve spinových systémech a černých dírách. Černé díry by podle další domněnky (Sekino a Susskind, 2008) měly být systémy s nejvyšší rychlosťí mísení informace (termalizace) v přírodě.

# Kapitola 4

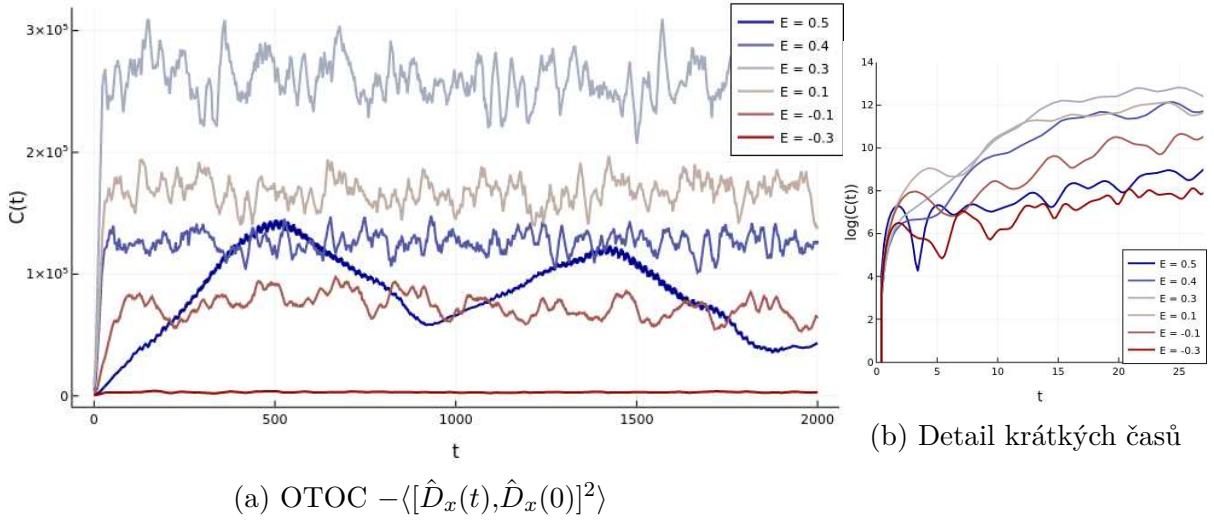
## OTOCy v $u(3)$ modelu

V této sekci prezentujeme výsledky OTOCů v  $u(3)$  modelu. V první části se zaměříme na krátkočasové chování mikrokanonických a termálních OTOCů v závislosti na poruše a také volbě operátorů. Ve druhé části se budeme zabývat asymptotickým chováním OTOCů. Jedním z hlavních výsledků této práce je domněnka o tom, že relativní oscilace OTOCů v asymptotických časech nesou podobnou informaci o chaosu v systému jako počáteční nárůst OTOCů. Tu podpoříme numerickými výsledky.

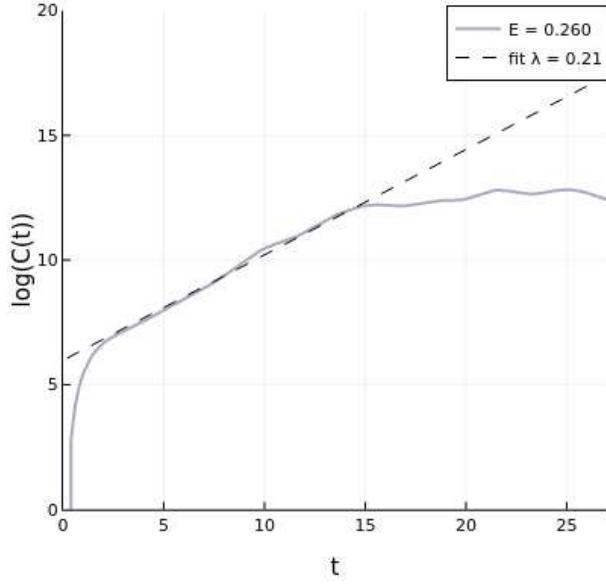
### 4.1 Krátké časy a volba operátorů

I v případě  $u(3)$  modelu pozorujeme u mikrokanonických OTOCů počáteční exponenciální nárůst v závislosti na energii, parametru  $\xi$  a poruše  $\varepsilon$ . Výsledky jsou v dobré shodě s chováním indikátorů chaosu z druhé kapitoly.

Na obrázku 4.1 jsou uvedeny časové průběhy mikrokanonických OTOCů operátoru  $\hat{D}_x$ . Parametry modelu  $\varepsilon = 0,4$  a  $\xi = 0,4$  byly voleny tak, aby byl model dle indikátorů chaosu z druhé kapitoly (viz obr. 2.4 a 2.5) chaotický. Na obrázku 4.1a vidíme, že OTOCy kolem energie  $E \approx 0,3$  vykazují nejprve exponenciální nárůst a následnou saturaci. Exponenciální nárůst pozorujeme ve stavech s vyšším IPR (graf 2.6) kolem hodnoty energie  $E \approx 0,3$ . Nejlépe je rozdíl v nárůstu patrný na detailu z obrázku 4.1b, kde jsou hodnoty uvedeny logaritmicky. Exponenciálnímu nárůstu tu odpovídá přímka. Detail hladiny  $E = 0,3$  je na obrázku 4.2. Nafitovaná hodnota exponentu  $\lambda \doteq 0,21$  dle vztahu (3.3) dobře odpovídá klasickému Lyapunovovu exponentu  $\lambda_{\text{cl}} \doteq 0,21$  chaotických oblastí na dané energetické nadploše.



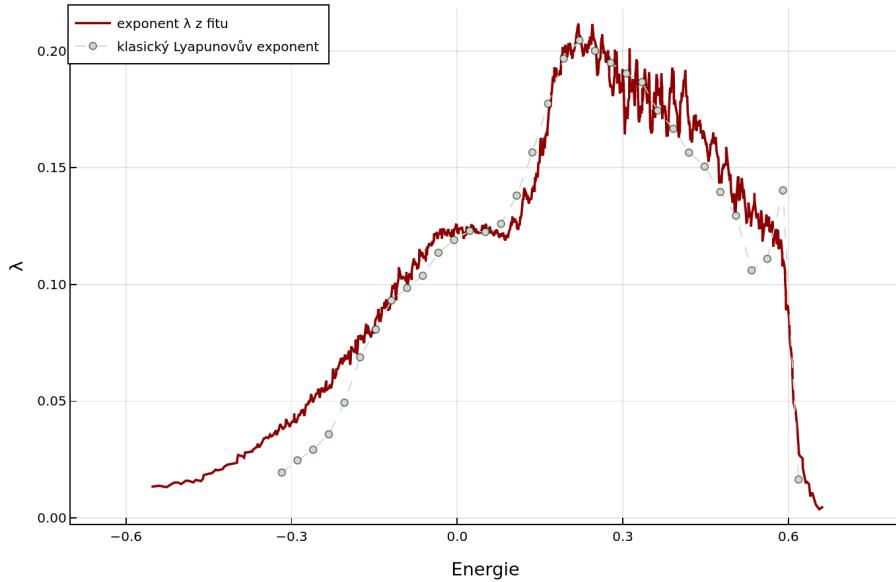
Obrázek 4.1: Časový průběh mikrokanonických OTOCů  $C(t) = -\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  v  $u(3)$  modelu s parametry  $\varepsilon = 0,4$ ,  $\xi = 0,4$  a  $N = 50$ . Energie jsou voleny podél celého spektra. Na obrázku (b) je uveden detail nárůstu OTOCů v krátkých časech. Hodnoty jsou uvedeny logaritmicky (přirozený logaritmus), takže exponenciálnímu nárůstu odpovídá přímka. Původní numerická data byla zhlazena. Každý bod odpovídá průměru hodnot z deseti sousedních bodů.



Obrázek 4.2: Fit exponenciálního nárůstu OTOCu  $C(t) = -\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  z grafu 4.1b. Jedná se o 750. hladinu spektra s energií  $E \doteq 0,260$ . Vybraná oblast exponenciálního nárůstu byla nafitována dle vztahu (3.3). Ten v logaritmickém měřítku odpovídá rovnici přímky. Hodnota exponentu  $2\lambda$  byla určena fitem na  $\lambda \doteq 0,21$ . Tato hodnota velmi dobře odpovídá hodnotě klasického Lyapunovova exponentu  $\lambda_{cl} \doteq 0,21$  určeného z chaotických oblastí na dané energetické nadploše.

Počáteční nárůst mikrokanonických OTOCů  $C(t) = -\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  modelu s pa-

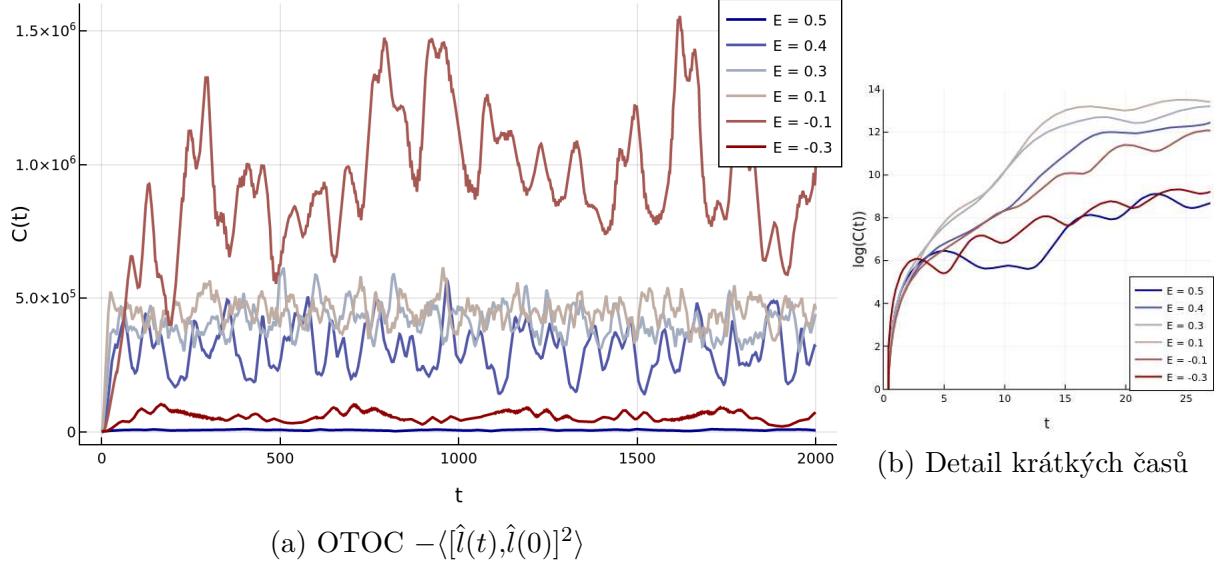
rametry  $\varepsilon = 0,4$  a  $\xi = 0,4$  jsme na všech energiích nafitovali a určili exponenty  $2\lambda$ . Ty výborně odpovídají hodnotám klasického Lyapunovova exponentu (získané metodou z předchozí práce (Novotný, 2020)). Numerické výsledky jsou tak v souladu se semiklasickou představou danou vztahem (3.9). Operátor  $\hat{D}_x$  lze totiž přibližně identifikovat s operátorem kanonické souřadnice na klasickém fázovém prostoru (viz appendix A).



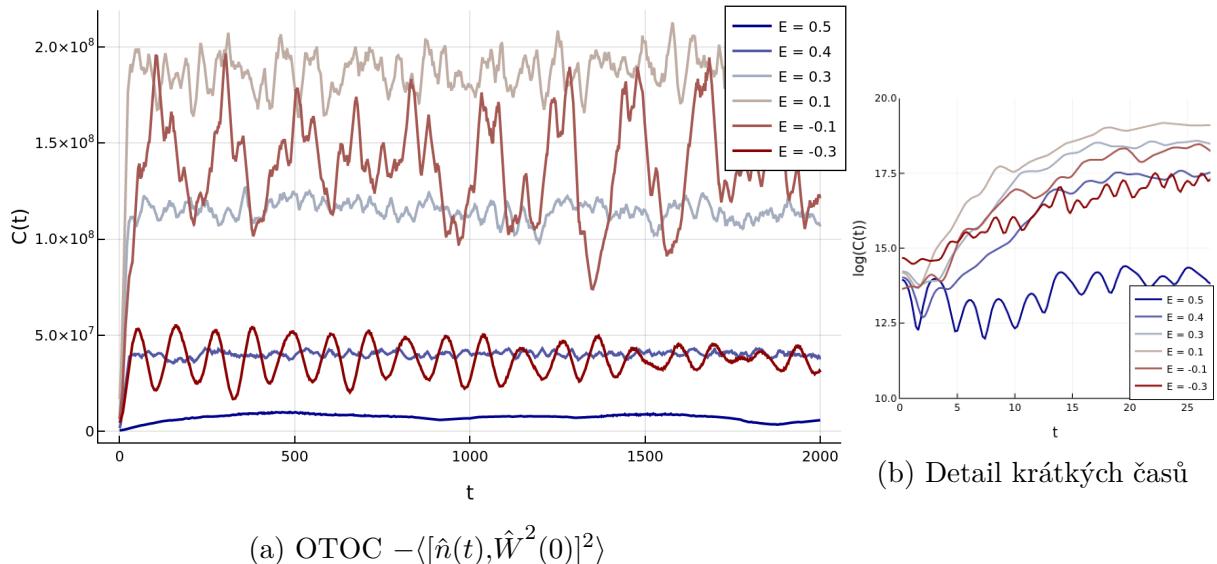
Obrázek 4.3: Graf porovnání exponentu  $\lambda$  počátečního růstu mikrokanonických OTOCů s klasickým Lyapunovovým exponentem na dané energii. Hodnoty exponentu  $2\lambda$  jsme získali nafitováním časových průběhů OTOCů  $C(t) = -\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  modelu s parametry  $\varepsilon = 0,4$ ,  $\xi = 0,4$  a  $N = 50$ . Připomínáme, že exponentem ve vztahu (3.3) je  $2\lambda$  a uvádíme jen  $\lambda$ . Hodnoty jsou středovány přes 10 hladin (celkový počet je 1326). Hodnoty klasického Lyapunovova exponentu byly získány jako střední hodnoty Lyapunovova exponentu chaotických trajektorií na energetických nadplochách dané energie.

Hodnoty OTOCů jsou však závislé na použitých operátorech. Pro ukázku jsme vybrali dvě sady operátorů  $C(t) = -\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$  a  $C(t) = -\langle [\hat{n}(t), \hat{W}(0)]^2 \rangle$ . Časové průběhy vybraných mikrokanonických OTOCů jsou na obrázcích 4.4 a 4.5. Vidíme, že na volbě operátoru závisí střední hodnota OTOCu po saturaci, což je pochopitelné, neboť OTOCy nenormujeme středními hodnotami samotných operátorů. Zajímavé však je, že se liší i pořadí dané střední hodnotou po saturaci OTOCů v jednotlivých energiích. Nejpatrnější je to z vybraných grafů (včetně obr. 4.1) na hladině  $E = -0,1$  (v pořadí postupně 4., 1. a 2.).

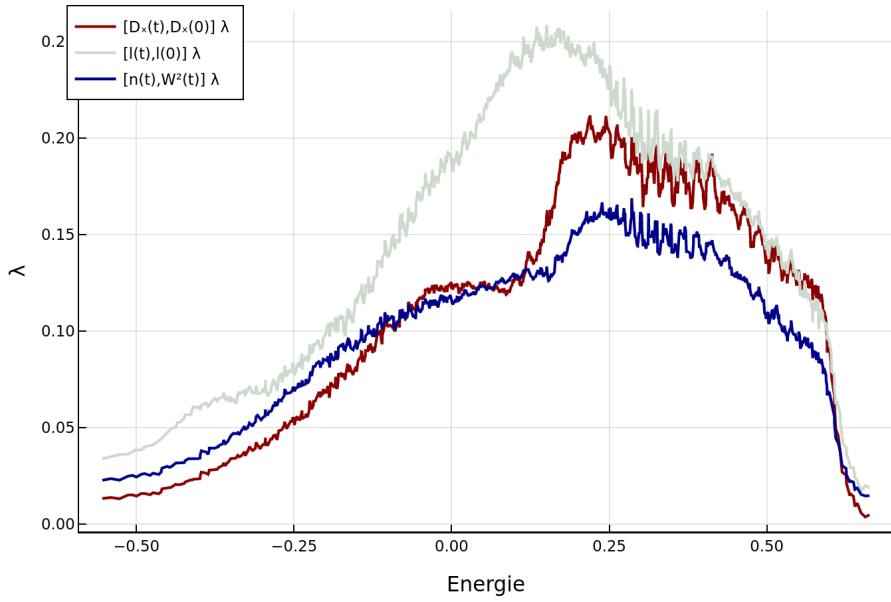
Chaotičnost systému na dané energii však není charakterizována střední hodnotou OTOCu po saturaci, ale rychlostí počátečního růstu. V grafu 4.6 jsme porovnali exponenty počátečního růstu mikrokanonických OTOCů pro všechny tři sady operátorů. Jednotlivé průběhy si odpovídají kvalitativně. To odpovídá semiklasické představě, dané vztahem (B.4), kdy OTOC obecných operátorů vykazuje exponenciální závislost jako OTOC kanonických souřadnic s dodatečnou závislostí na derivacích zvoleného operátoru.



Obrázek 4.4: Časový průběh mikrokanonických OTOCů  $C(t) = -\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$  v  $u(3)$  modelu s parametry  $\varepsilon = 0,4$ ,  $\xi = 0,4$  a  $N = 50$ . Energie jsou voleny podél celého spektra. Na obrázku (b) je uveden detail nárustu OTOCů v krátkých časech. Hodnoty jsou uvedeny logaritmicky a po zhlazení (průměr přes deset bodů).



Obrázek 4.5: Časový průběh mikrokanonických OTOCů  $C(t) = -\langle [\hat{n}(t), \hat{W}^2(0)]^2 \rangle$  v  $u(3)$  modelu s parametry  $\varepsilon = 0,4$ ,  $\xi = 0,4$  a  $N = 50$ . Energie jsou voleny podél celého spektra. Na obrázku (b) je uveden detail nárustu OTOCů v krátkých časech. Hodnoty jsou uvedeny logaritmicky a po zhlazení (průměr přes deset bodů).



Obrázek 4.6: Graf porovnání exponentu  $\lambda$  počátečního růstu mikrokanonických OTOCů pro tři sady operátorů  $C(t) = -\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$ ,  $C(t) = -\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$  a  $C(t) = -\langle [\hat{n}(t), \hat{W}(0)]^2 \rangle$ . OTOC byly počítány v modelu s parametry  $\varepsilon = 0,4$ ,  $\xi = 0,4$  a  $N = 50$ . Hodnoty parametru  $\lambda$  byly získány fitem krátkočasového růstu. Uvedené hodnoty jsou vystředovány přes deset sousedních bodů

Můžeme se podívat na to, jak budou vypadat termální OTOC. Jejich chování je dané podobou mikrokanonických OTOCů, neboť termální OTOC je jen váženým součtem mikrokanonických  $C_i(t)$

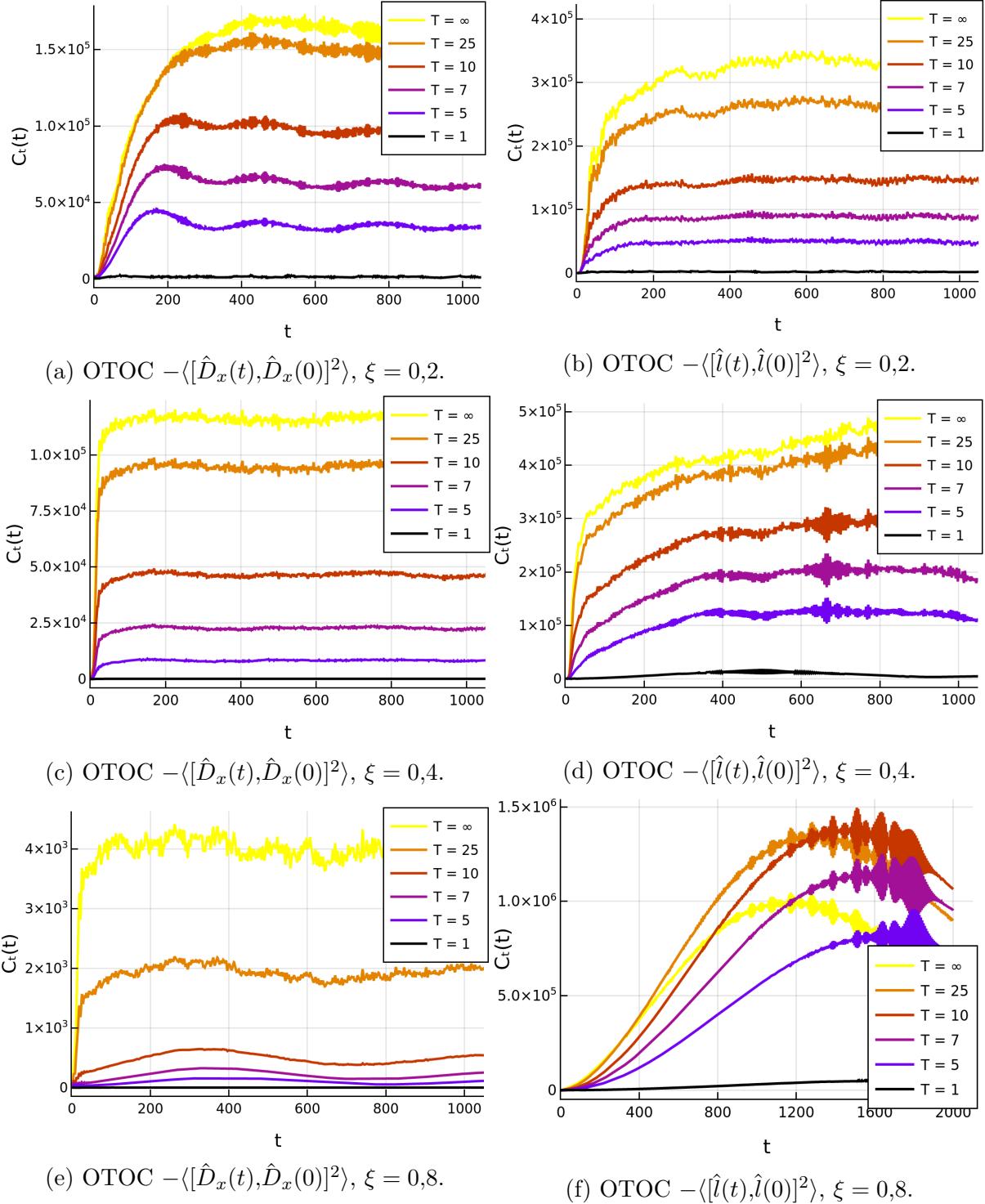
$$C_T(t) = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^D e^{-\beta E_i} \langle E_i | \hat{C}(t) | E_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^D e^{-\beta E_i} C_i(t), \quad (4.1)$$

kde jsme jako  $Z$  označili partiční funkci. Vybrané výsledky pro různé sady parametrů modelu a operátory jsou uvedeny na obrázku 4.7. Průběh termálních OTOCů je opět závislý na volbě operátorů. Počáteční exponenciální nárůst pozorujeme až při vyšších teplotách, kdy přispívají mikrokanonické OTOC na vyšších energiích.

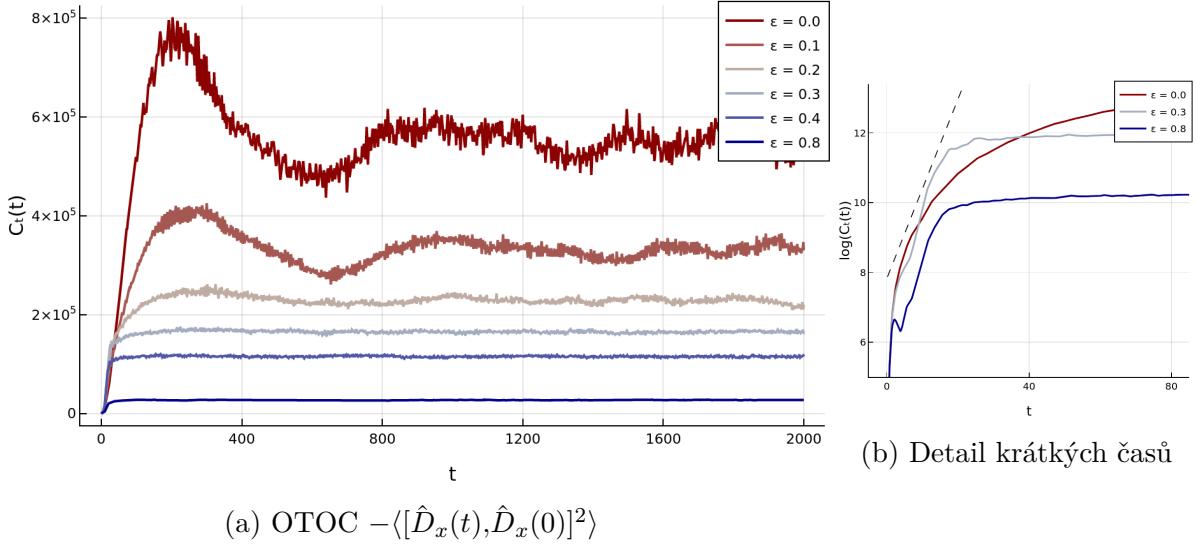
Podle teplotní závislosti OTOC také poznáme, na jakých energiích je systém chaotický. Zaměřme se na grafy operátoru  $\hat{D}_x$  a rozdíl mezi OTOC při teplotách  $T = 25$  a  $T = \infty$ . S růstem parametru  $\xi$  se oba OTOC postupně vzdalují. Pro  $\xi = 0,2$  mají oba téměř stejný průběh. To znamená, že původ exponenciálního růstu termálního OTOCu pochází z mikrokanonických OTOCů na nižších energiích a na vysokých energiích systém již není tak chaotický. Oproti tomu na  $\xi = 0,8$  má OTOC  $C_{T=25}$  výrazně nižší průběh než ten při nekonečné teplotě. Systém je tak chaotický hlavně na vysokých energiích. To přesně odpovídá posunu oblasti maximální delokalizace vlastních vektorů ve výsledcích IPR (obr. 2.6 - maximum se postupně posunuje do vyšších energií s růstem parametru  $\xi$ ).

Ještě ukážeme, jaký vliv má intenzita poruchy na chování OTOCů. K tomu použijeme OTOC při nekonečné teplotě. Na obrázku 4.8 jsou časové průběhy OTOCů  $C_\infty = -\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  pro různé hodnoty intenzity poruchy  $\varepsilon$ . Vidíme, že asymptotická střední hodnota s rostoucím  $\varepsilon$  klesá. Připomeneme, že s rostoucím  $\varepsilon$  roste vliv operátoru  $\hat{D}_x$

v hamiltoniánu. Jak už jsme zmínili, pro míru chaosu v systému je podstatný počáteční nárůst. Ten je uveden na detailu 4.8b. Narození od integrabilního případu pozorujeme v systémech s nenulovou poruchou exponenciální nárůst, který na daném grafu v logaritmickém měřítku odpovídá přímce.



Obrázek 4.7: Časové průběhy termálních OTOCů při teplotě  $T$ . Parametry modelu jsou  $\varepsilon = 0,4$ ,  $N = 50$ .



Obrázek 4.8: Časový průběh mikrokanonických OTOCů  $C_\infty = -\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  pro různé hodnoty intenzity poruchy  $\varepsilon$ . Další parametry modelu jsou  $\xi = 0,4$  a  $N = 50$ . V grafu (b) je uveden detail krátkých časů v logaritmickém měřítku (přirozený logaritmus). Pro větší přehlednost jsou uvedeny jen tři řady. Všechny OTOCy s nenulovou poruchou však vykazují počáteční exponenciální nárůst (v grafu v podobě přímky - jednu jsme přidali jako vodítko pro oči).

## 4.2 Oscilace v asymptotických časech

Při studiu OTOCů v modelu jsme zjistili, že jejich relativní oscilace kolem střední hodnoty v asymptotických časech nesou informace o chaotičnosti systému. Má smysl domnívat se, že toto chování není jedinečnost samotného modelu, ale jedná se o univerzální vlastnost, kterou lze použít jako indikátor chaosu. Oscilacím v asymptotických časech věnovali pozornost již autoři článku (Fortes a kol., 2019). Ti na numerických výsledcích ukázali, že hodnotu oscilací v asymptotických časech OTOCů při nekonečné teplotě lze použít jako indikátor chaosu. My jsme studovali oscilace mikrokanonických OTOCů. Ukážeme, že podstatná není samotná hodnota oscilací (rozptylu OTOCu), ale její relativní hodnota vůči střední hodnotě po saturaci. Známkomu chaosu je v takovém případě potlačení oscilací. Míra tohoto potlačení roste s velikostí systému.

Budeme pracovat s hodnotami mikrokanonických OTOCů v dlouhých časech, tedy po saturaci a daleko od počátečního růstu. Časovou střední hodnotu mikrokanonického OTOCu v dlouhých časech označíme

$$\langle C(E) \rangle_T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t>\tau_E}^T C(\tau) d\tau = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{t>\tau_E}^T \langle E | \hat{C}(\tau) | E \rangle d\tau, \quad (4.2)$$

kde jse zdůraznili energetickou závislost danou volbou vlastního stavu hamiltoniánu, ve kterém provádíme střední hodnotu OTOCu. Oscilace OTOCu popišeme pomocí rozptylu  $\sigma$

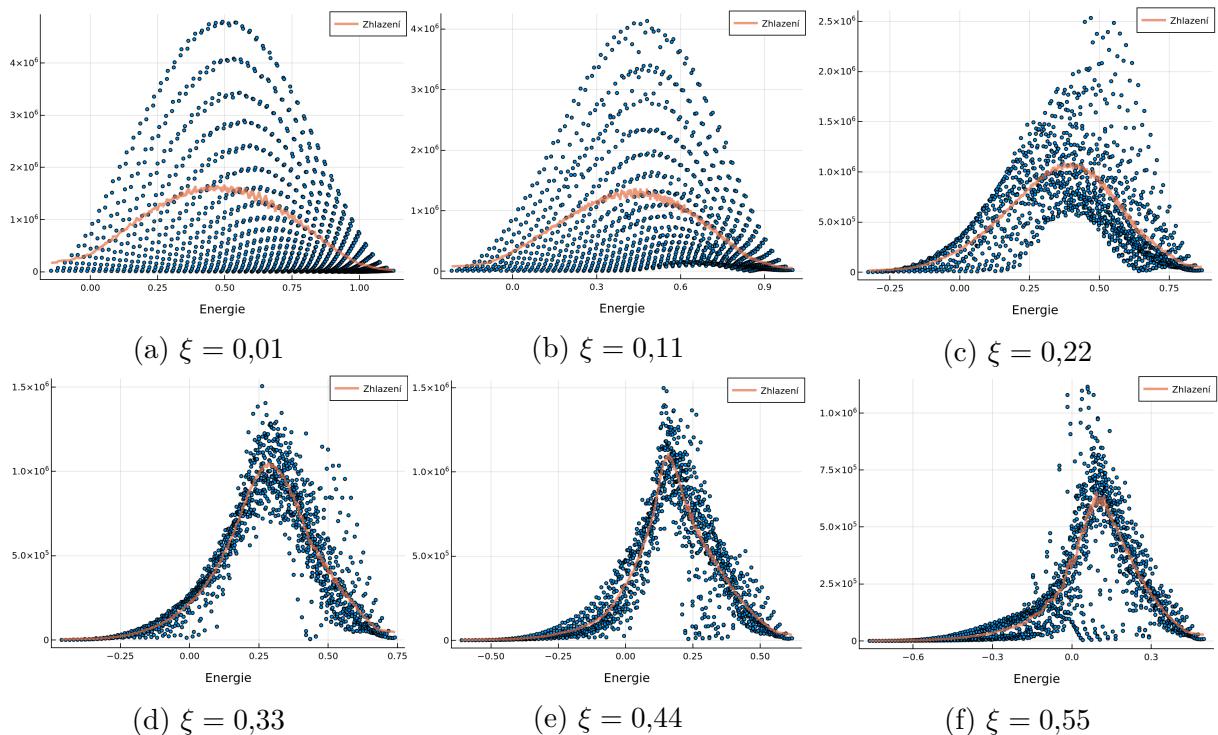
$$\sigma^2(E) = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{t>\tau_E}^T C(\tau)^2 d\tau - \langle C(E) \rangle_T^2 = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_{t>\tau_E}^T \langle E | \hat{C}(\tau) | E \rangle^2 d\tau - \langle C(E) \rangle_T^2. \quad (4.3)$$

Zajímá nás pak bude hodnota relativních oscilací mikrokanonických OTOCů  $\nu$

$$\nu(E) = \frac{\sigma(E)}{\langle C(E) \rangle_T} \quad (4.4)$$

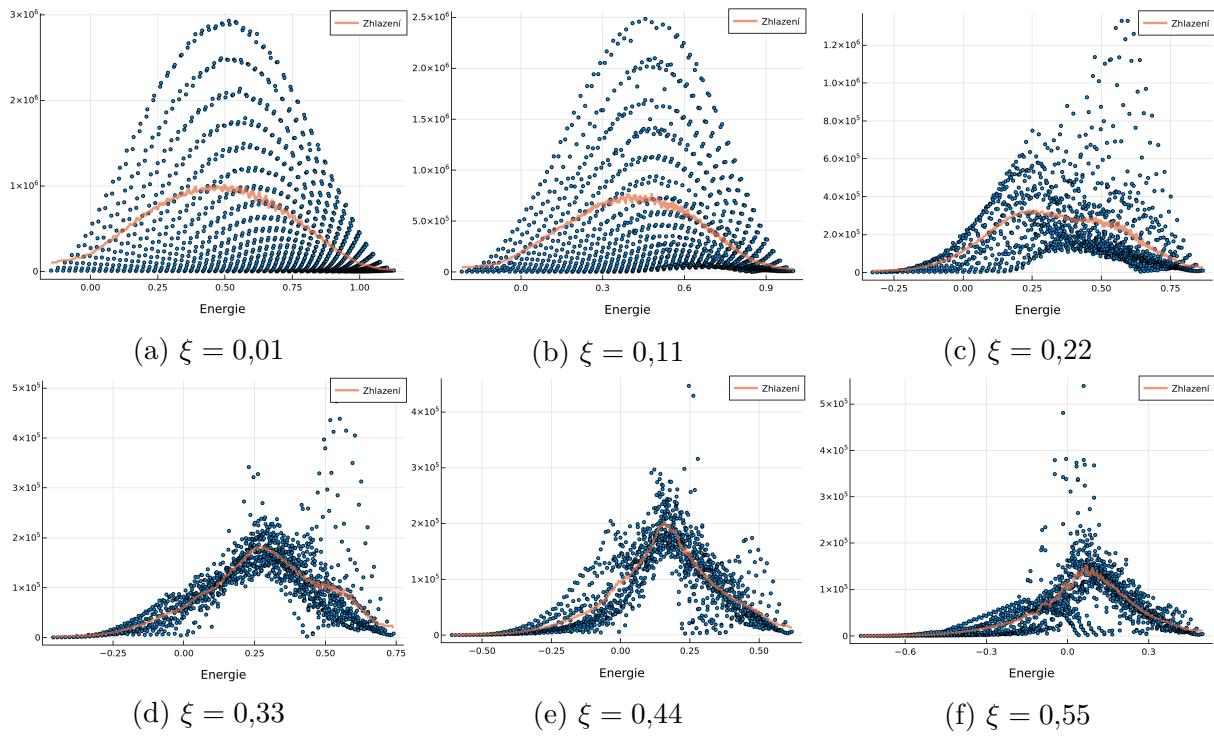
na dané energii.

Nejprve ukážeme, jak vypadají střední hodnoty a rozptyl OTOCů. Grafy na obrázcích 4.9 a 4.10 ukazují energetickou závislost  $\langle C(E) \rangle_T$  a  $\sigma$  na volbě parametru  $\xi$  pro  $\varepsilon = 0,4$ . S rostoucím  $\xi$  začíná být systém chaotický. To se projevuje rozbitím pravidelné struktury podobně jako u Peresových mříží a „stlačením“ bodů.

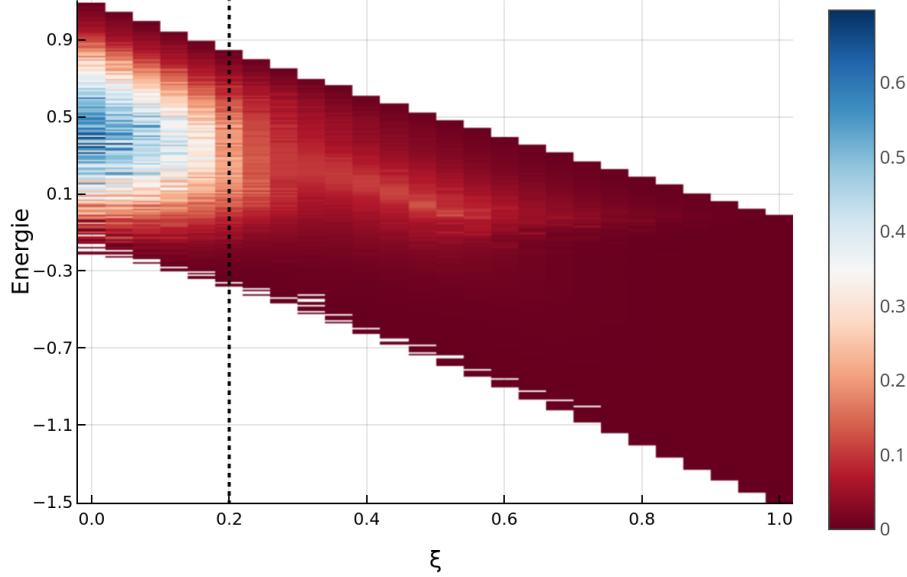


Obrázek 4.9: Energetické průběhy časových středních hodnot mikrokanonických OTOCů  $\langle C(E) \rangle_T$  pro operátor  $-[\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2$  v  $u(3)$  modelu s intenzitou poruchy  $\varepsilon = 0,4$  a postupně rostoucím  $\xi$ ,  $N = 50$ .

Grafy můžeme porovnat s IPR (viz obr. 2.6). Tam má chaotická oblast podobu maxima v grafu delokalizace vektorů, které se s rostoucím  $\xi$  posouvá do vyšších energií. Náznaky posunujícího se maxima lze pozorovat i na grafech střední hodnoty a rozptylu pro vyšší  $\xi$ . Toho chování však není univerzální. Zdůrazňujeme, že pro obecný operátor se chaotické oblasti neprojeví maximálními hodnotami středních hodnot OTOCů a rozptylu, ale pouze narušením pravidelné struktury. I když nám  $\langle C(E) \rangle_T$  a  $\sigma$  dávají kvalitativní informaci o výskytu chaotických oblastí v systému, neslouží jako dobrý kvantitativní indikátor. Porovnáme-li hodnoty mezi jednotlivými grafy, vidíme, že hodnoty  $\langle C(E) \rangle_T$  a  $\sigma$ , které považujeme za indikátor regularity stavů pro jednu sadu parametrů, odpovídají řádově hodnotám  $\langle C(E) \rangle_T$  a  $\sigma$  ve stavech, které považujeme za chaotické v modelu s jinou sadou parametrů. Ukázkou najdeme v grafu 4.11. Vidíme, že s jeho pomocí nelze identifikovat chaotické oblasti (srovnejme s grafy 2.9).



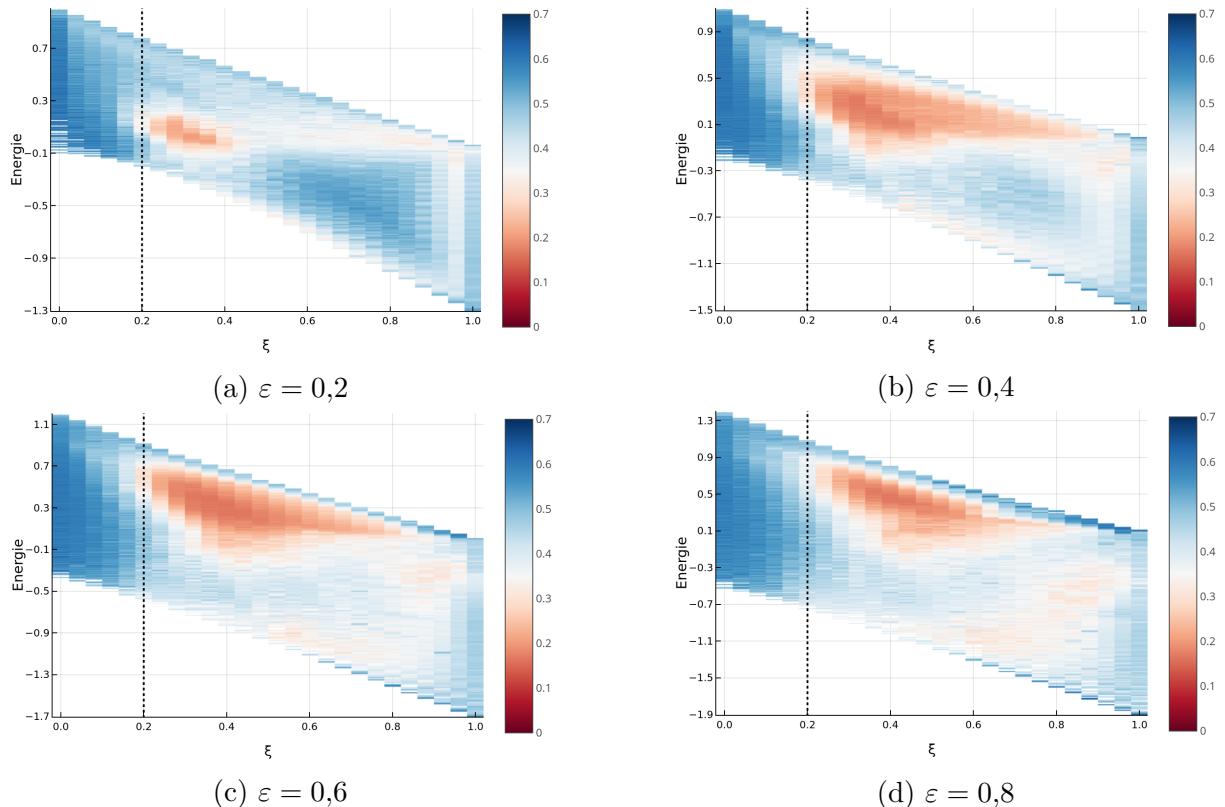
Obrázek 4.10: Energetické průběhy rozptylu  $\sigma$  mikrokanonických OTOCů pro operátor  $-[\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2$  v  $u(3)$  model s intenzitou poruchy  $\varepsilon = 0,4$  a postupně rostoucí  $\xi$ ,  $N = 50$ .



Obrázek 4.11: Graf závislosti rozptylu  $\sigma/D^2$  (barevná škála) mikrokanonických OTOCů  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  na energii a parametru  $\xi$ . Původně diskrétní hodnoty spektra jsou uvedeny po vystředování přes energetické intervaly dané velikosti. Pro lepší orientaci ve výsledcích je vyznačena hodnota  $\xi = 0,2$ . Celkový počet bosonů je  $N = 50$ , tedy dimenze celého Hilbertova prostoru je  $D = 1362$ .

Lepším indikátorem chaosu v systému jsou relativní oscilace  $\nu$ . Z našich numerických

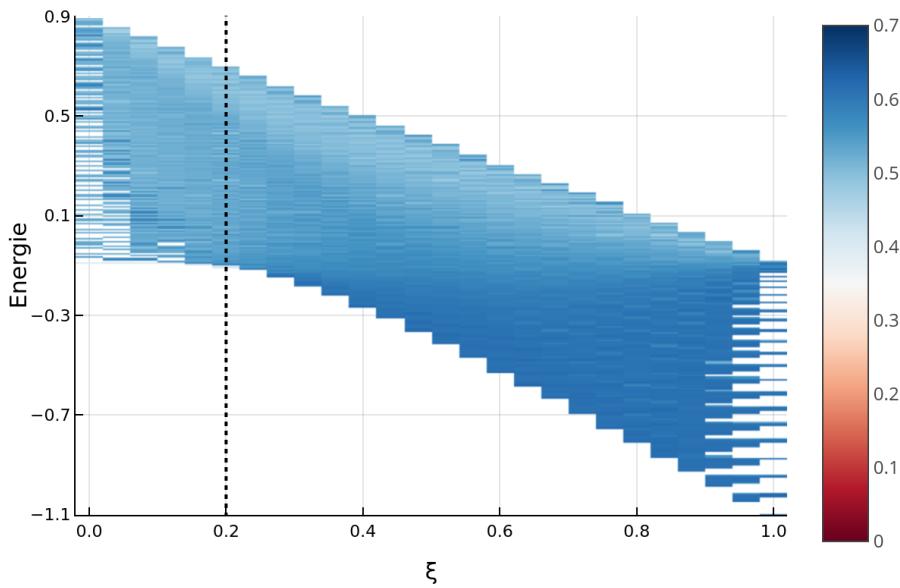
výsledků se zdá, že na energiích, kde systém vykazuje chaotické chování, jsou tyto oscilace potlačeny oproti regulárním oblastem. Potlačení oscilací jako známka chaosu není jen dobrým kvalitativním indikátorem, ale také kvantitativním. Na obrázku 4.12 jsou uvedeny závislosti relativních oscilací na energii a parametrech  $\xi$  a  $\varepsilon$ . Jedná se o obdobu grafů z obr. 2.9 s IPR. Porovnáním obou výsledků vidíme, že relativní oscilace jsou potlačeny na oblastech s vysokou mírou delokalizace vlastních vektorů. Souhlas obou výsledků není dokonalý, ale to je dáno tím, že vysoká hodnota IPR nemusí nutně znamenat chaotický systém, jak jsme ukázali na Poincarého řezech (obr. 2.10).



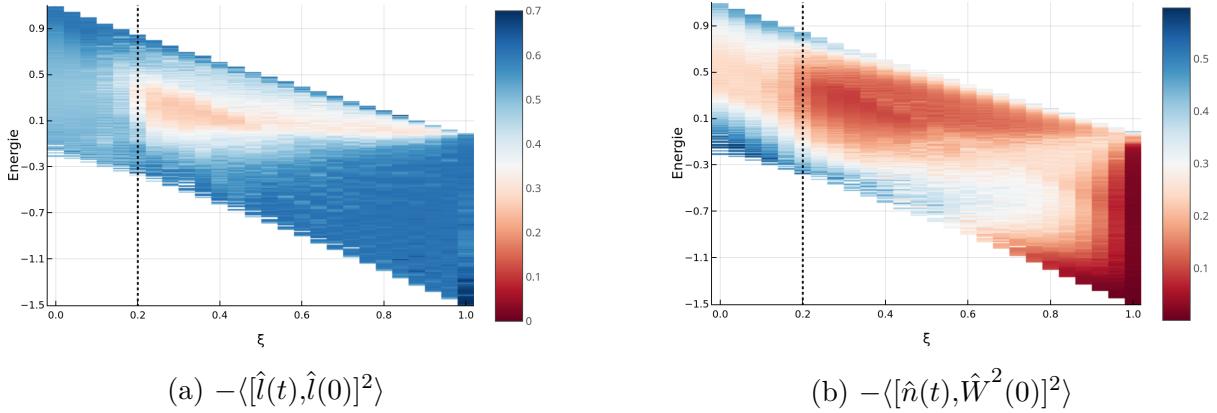
Obrázek 4.12: Grafy závislosti relativních oscilací  $\nu$  mikrokanonických OTOCů  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  na energii a parametru  $\xi$ . Uvedeny jsou příklady pro různé hodnoty intenzity poruchy  $\varepsilon$ . Původně diskrétní hodnoty spektra jsou uvedeny po vystředování přes energetické intervaly dané velikosti. Pro lepší orientaci ve výsledcích je vyznačena hodnota  $\xi = 0,2$ . Upozorňujeme, že oproti grafům z obr. 2.9 je barevná škála obrácena (červená odpovídá nejnižší hodnotě). Celkový počet bosonů je  $N = 50$ , tedy dimenze celého Hilbertova prostoru je 1362.

V případě regulárního systému nedochází k potlačení relativních oscilací. To je vidět na obrázku 4.13. Dle našich výsledků se zdá být vliv chaotičnosti systému na hodnotu relativních oscilací stejný pro všechny volby operátorů v OTOCích, které jsme zkoumali. Relativní oscilace sice vykazují operátorovou závislost, univerzálním jevem však je potlačení oscilací v chaotických oblastech vůči těm v regulárních. Výjimky mohou nastat v krajních případech  $\xi \approx 0$  a  $\xi \approx 1$ , kdy má systém dodatečné symetrie, což se může projevit u některých operátorů výrazně nízkými, nebo naopak vysokými oscilacemi.

V grafech na obrázku 4.14 jsou uvedeny relativní oscilace OTOCů dvou sad operátorů  $-\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$  a  $-\langle [\hat{n}(t), \hat{W}^2(0)]^2 \rangle$ . Výsledky porovnáme s grafem na obrázku 4.12 se stejnou hodnotou intenzity  $\varepsilon = 0, 4$ . Na všech třech grafech vidíme podobně umístěnou chaotickou oblast v centru. Výrazně se však liší výsledky sady operátorů  $\hat{n}$  a  $\hat{W}^2$ . Jejich OTOC je ovlivněn dodatečnou symetrií způsobenou krajními hodnotami  $\xi$ . V grafu se projevuje nízkými oscilacemi. Pro  $\xi = 1$  operátor  $\hat{W}^2$  (vztah 2.6) komutuje s hamiltoniánem a OTOC není časově závislý. Hodnota OTOCu je tak pro  $\xi \approx 1$  téměř konstatní, což odpovídá nulovým relativním oscilacím.



Obrázek 4.13: Graf závislosti relativních oscilací  $\nu$  mikrokanonických OTOCů  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  na energii a parametru  $\xi$  pro případ regulárního systému  $\varepsilon = 0$ . Původně diskrétní hodnoty spektra jsou uvedeny po vystředování přes energetické intervaly dané velikosti. Pro lepší orientaci ve výsledcích je vyznačena hodnota  $\xi = 0,2$ . Celkový počet bosonů je  $N = 50$ , tedy dimenze celého Hilbertova prostoru je  $D = 1362$ .



Obrázek 4.14: Grafy závislosti relativních oscilací  $\nu$  mikrokanonických OTOCů na energii a parametru  $\xi$  dvou sad operátorů  $-\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$  a  $-\langle [\hat{n}(t), \hat{W}^2(0)]^2 \rangle$ . Uvedeny jsou příklady pro intenzitu poruchy  $\varepsilon = 0,4$ . Původně diskrétní hodnoty spektra jsou uvedeny po vystředování přes energetické intervaly dané velikosti. Pro lepší orientaci ve výsledcích je vyznačena hodnota  $\xi = 0,2$ . Celkový počet bosonů je  $N = 50$ , tedy dimenze celého Hilbertova prostoru je 1362.

#### 4.2.1 Relativní oscilace a klasický chaos

Díky znalosti klasické limity (2.7) můžeme porovnat energetickou závislost relativních oscilací OTOCů s indikátory klasického chaosu. Zajímat nás bude Lyapunovův exponent  $\lambda_{cl}$  a podíl regulárních oblastí  $f_{reg}$  na nadploše fázového prostoru s danou energií. Podrobně jsme se metodě výpočtu věnovali ve zmíněné práci (Novotný, 2020).

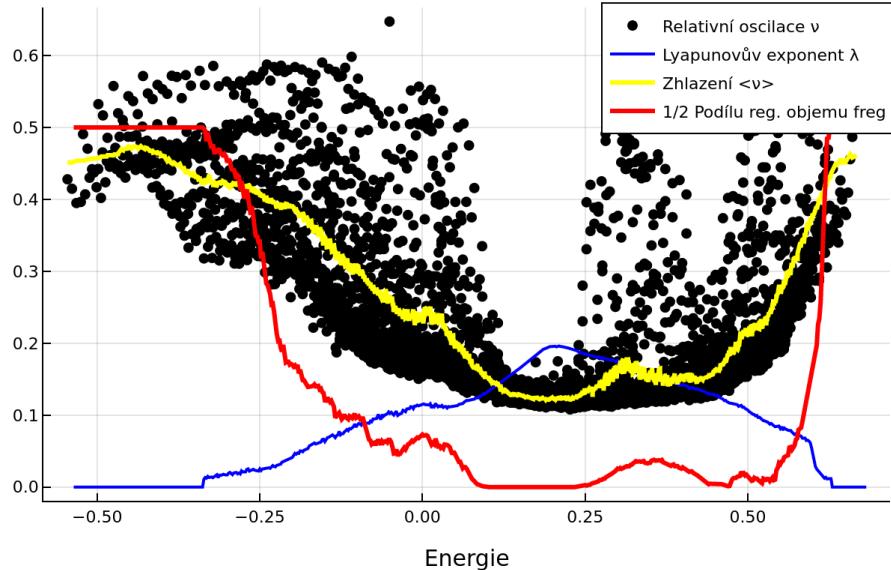
Naše numerické výsledky ukazují, že energetická závislost relativní oscilace OTOCů v dlouhých časech kopíruje průběh podílu regulárních oblastí na dané energetické nadploše. Oscilace jsou tak nejvíce potlačeny na energiích, ve kterých je klasický systém plně chaotický.

Podívejme se detailněji na obrázek 4.15. V grafu jsou body odpovídající hodnotám relativních oscilací OTOCů  $-[\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2$  v modelu s parametry  $\xi = 0,4$  a  $\varepsilon = 0,4$ . Zhlazený průběh je v grafu porovnáván s průběhem Lyapunovova exponentu a podílu regulárních oblastí. Vidíme, že průběh oscilací  $\nu$  velmi dobře kopíruje průběh  $f_{reg}$  (resp.  $1/2f_{reg}$ , který je kvůli větší názornosti uveden v grafu).

Zajímavá je oblast energie  $E \in \langle 0,10; 0,25 \rangle$ , na které je klasický systém plně chaotický. Ve všech odpovídajících kvantových vlastních stavech systému jsou relativní oscilace na přibližně stejně hodnotě. To odpovídá představě dané ETH o maticových elementech operátorů v chaotických oblastech spektra. Relativní oscilace se tu skutečně chovají jako hladké funkce energie.

Za tímto energetickým intervalom se na klasickém fázovém prostoru opět objevují regulární ostrůvky a vidíme malý nárůst v  $f_{reg}$ . Na průběhu relativních oscilací se to projeví v podobě samostatných bodů s výrazně vyšší hodnotou  $\nu$ . Jedná se o výsledky ve stavech, jejichž vlnová funkce zasahuje právě do regulárních ostrůvků na klasickém fázovém prostoru. Přestože je v této oblasti energetická nadplocha téměř z 95% chaotická, najdeme v grafu  $\nu$  relativně velké množství bodů, které zachycují i regularitu.

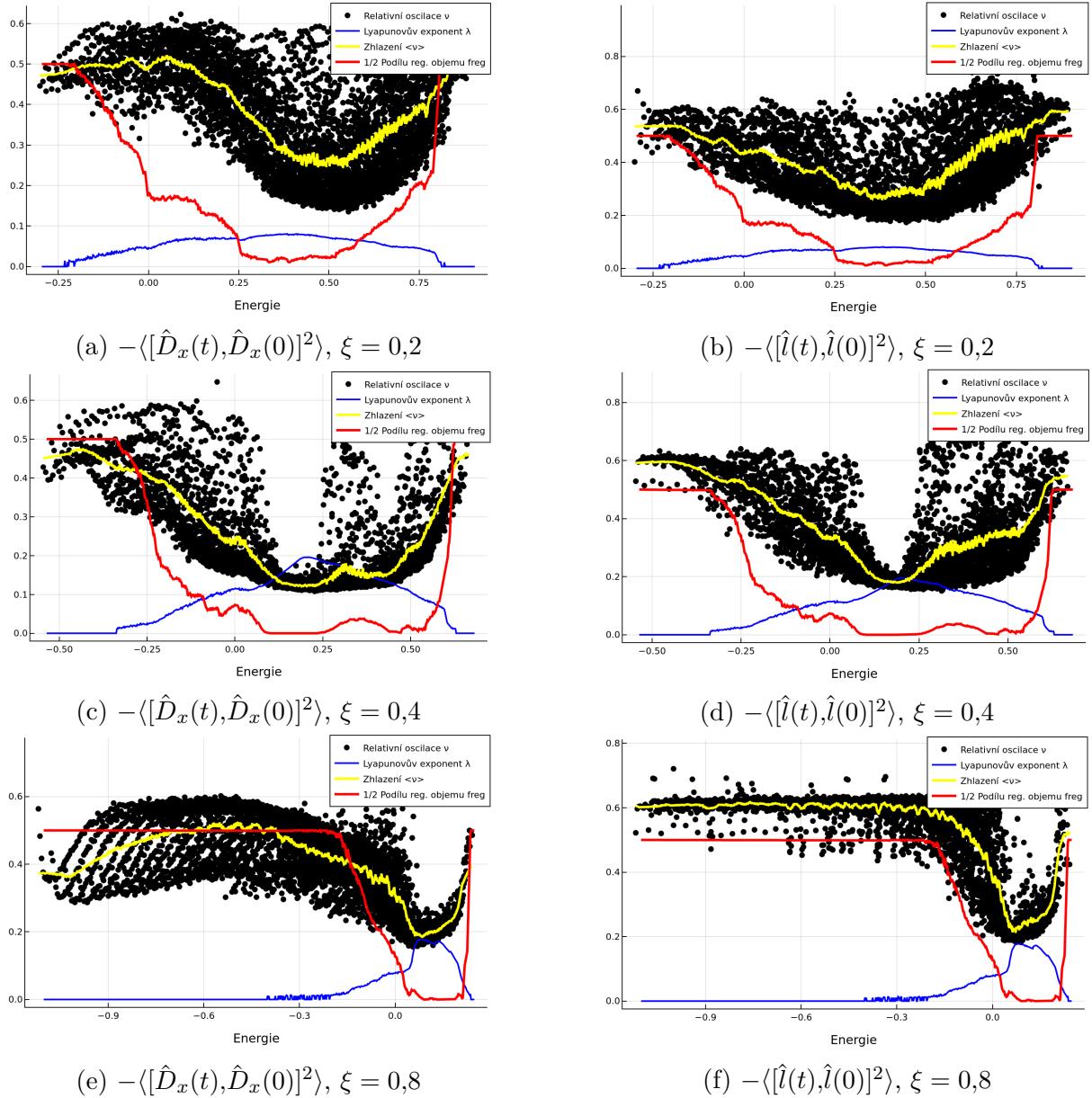
Uvedeme ještě výsledky (obr. 4.16) pro další konfigurace parametrů modelu a i pro



Obrázek 4.15: Porovnání energetických průběhů relativních oscilací  $\nu$  (uvezena jsou i data po zhlazení - průměr 25 bodů), klasického Lyapunovova exponentu  $\lambda_{cl}$  a podílu objemu regulárních  $f_{reg}$  oblastí na energetické nadploše. Ten je uveden pro větší přehlednost grafu s faktorem 1/2. Oscilace byly počítány pro OTOC  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$ . Parametry modelu jsou  $\xi = 0,4$ ,  $\varepsilon = 0,4$  a  $N = 100$

OTOC  $-\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$ . Ve všech případech trend poklesu relativních oscilací velmi dobře kopíruje pokles podílu regulárních oblastí na fázovém prostoru. Převážně regulární oblasti pak vykazují ještě určitou operátorovou závislost. Všimněme si, že podobné struktury jsme pozorovali i v grafech IPR u velmi lokalizovaných stavů.

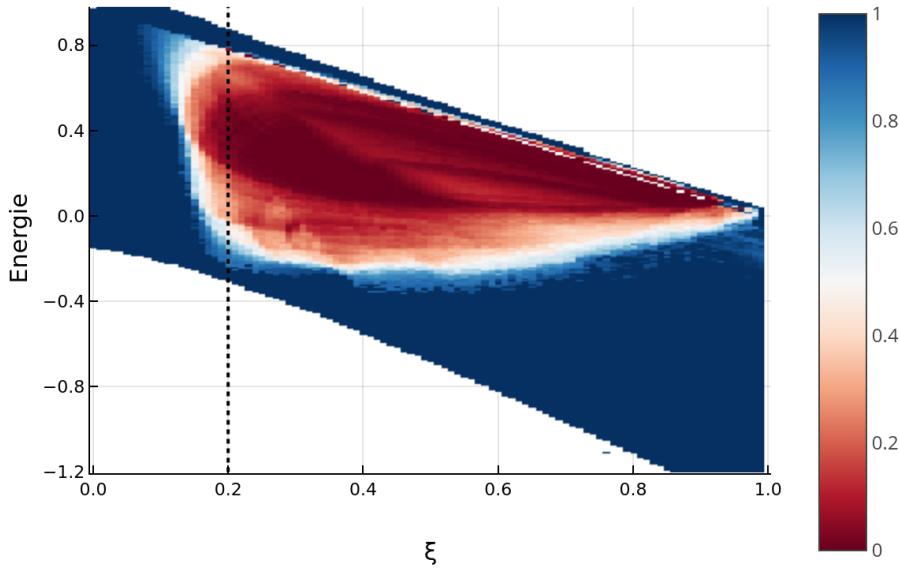
Obdobu dat z grafů IPR na obrázcích 2.6 a relativních oscilací na obrázcích 4.12 a 4.14 jsme napočítali pro podíl podílu regulárních oblastí na energetických nadplochách fázového prostoru. Pro  $\varepsilon = 0,4$  jsou výsledky na obrázku 4.17. Vidíme, že klasicky chaotické oblasti velmi dobře kopírují oblasti nízkých relativních oscilací OTOCů  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  a  $-\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$ .



Obrázek 4.16: Porovnání energetických průběhů relativních oscilací  $\nu$  (uvezena jsou i data po zhlazení - průměr 25 bodů), klasického Lyapunova exponentu  $\lambda_{cl}$  a podílu objemu  $f_{reg}$  regulárních oblastí na energetické nadploše. Ten je uveden pro větší přehlednost grafu s faktorem 1/2. Oscilace byly počítány pro OTOCy  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  a  $-\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$ . Parametry modelu jsou  $\varepsilon = 0,4$  a  $N = 100$ .

#### 4.2.2 Relativní oscilace a velikost systému

Zatím jsme se věnovali vlivu parametrů  $\xi$  a  $\varepsilon$  na chování relativních oscilací OTOCů. Zaměřme se nyní na jejich závislost na velikosti systému  $N$ . Z našich numerických výsledků se zdá, že relativní oscilace v regulárních oblastech spektra zůstávají s růstem  $N$  konstantní, nebo vykazují pomalý nárůst. V chaotických oblastech ale pozorujeme výrazně odlišené chování. Na těchto oblastech pozorujeme s růstem velikosti systému ex-



Obrázek 4.17: Podíl regulárních oblastí  $f_{\text{reg}}$  (barevná škála) na energetických nadplochách fázového prostoru pro parametry hodnoty  $\xi \in \langle 0; 1 \rangle$ . Hodnota intenzity poruchy je  $\varepsilon = 0,4$ .

ponenciální potlačení relativních oscilací. Zdá se, že rychlosť tohto potlačení roste s chaoticitou systému. Toto chování je univerzální pro všechny operátory, se kterými jsme v OTOCích pracovali.

Ukázky energetických průběhů relativních oscilací na velikosti systému  $N$  jsou v grafech na obrázku 4.19. Vybrali jsme jeden čistě nechaotický případ s  $\varepsilon = 0$ . Relativní oscilace v zde nejsou závislé na velikosti systému. Dále jsme vybrali dva případy s chaotickou i regulární oblastí ve spektru. V regulárních oblastech relativní oscilace zůstávají konstantní, nebo pomalu rostou. Naopak v chaotických oblastech pozorujeme rychlý pokles a to nezávisle na volbě operátorů v OTOCích, v našem případě  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  a  $-\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$ .

Podívejme se na závislost relativních oscilací na velikosti systému pro konkrétní energetickou hladinu. Vyneseme-li průběh

$$\nu(E = \text{konst.}, N)$$

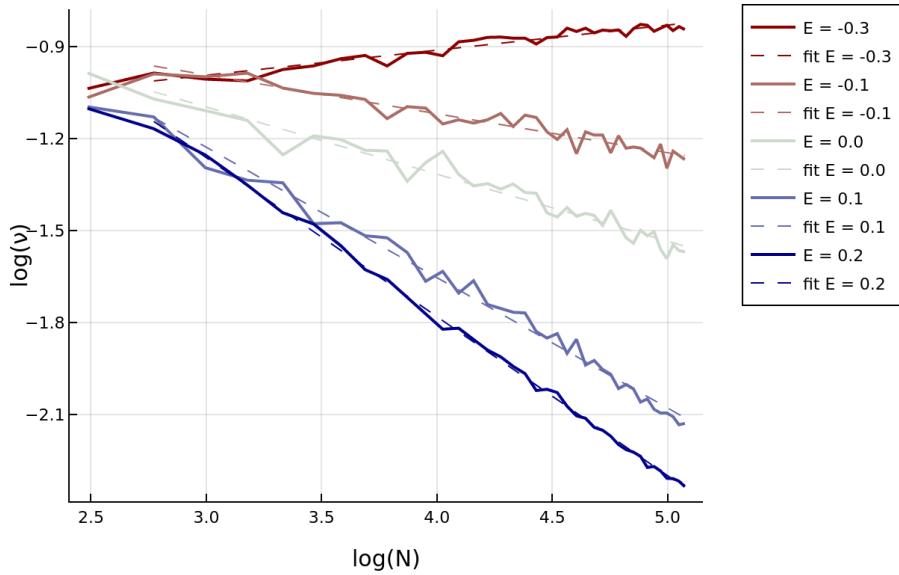
do grafu jako funkci  $N$ . Uvidíme algebraický průběh. Ukázku uvádíme v grafu 4.18, kde jsou vynesena data logaritmicky (log-log). Algebraický průběh se tak jeví jako přímka.

Zdá se, že relativní oscilace  $\nu$  tak splňují následující závislost na energii  $E$  a velikosti systému  $N$

$$\nu(E, N) = N^{\alpha(E)} e^{\beta(E)}. \quad (4.5)$$

V grafu 4.20 uvádíme energetickou závislost koeficientů  $\alpha$  a  $\beta$  relativních oscilací OTOCu  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$ . Jedná se o výsledky získané na fitováním dat z grafu (b) na obrázku 4.19 (fitujeme body  $\nu(E = \text{konst.}, N)$  pro  $N \in \{12, 16, 20, \dots, 160\}$ ). Všimněme si podobného průběhu obou koeficientů po změně znaménka jednoho z nich. Porovnáním s  $\nu(E)$  a  $f_{\text{reg}}$  (obr. 4.21) vidíme, že koeficient  $\alpha$  je zodpovědný za energetický průběh relativních oscilací a kvalitativně odpovídá podílu regulárních oblastí na fázovém prostoru.

Míra chaotičnosti dané oblasti spektra tak udává, s jakou rychlosťí budou potlačeny relativní oscilace se zvětšováním systému. V modelu bosonového kondenzátu zvětšování



Obrázek 4.18: Ukázky závislosti relativních oscilací  $\nu(E, N)$  na velikosti systému  $N$ . Data jsou uvedena logaritmicky (přirozený logaritmus). Závislosti vykazují algebraický průběh, který jsme proložili přímkami  $\log(\nu) = \alpha \log(N) + \beta$ .

systému odpovídá přidávání atomů do kondenzátu. V případě obecného spinového systému by to odpovídalo přidávání spinů. V chaotickém případě bychom tak po přidání částic měli pozorovat potlačení relativních oscilací OTOCů, zatímco v regulární části spektra by oscilace neměly být zvětšením systému výrazně ovlivněny.

### 4.2.3 Relativní oscilace a náhodné matice

Zdá se, že potlačení relativních oscilací včetně algebraické závislosti míry potlačení na velikost systému bude možné vysvětlit pomocí náhodných matic, případně fyzikálnějšího anzatzu, kterým je ETH.

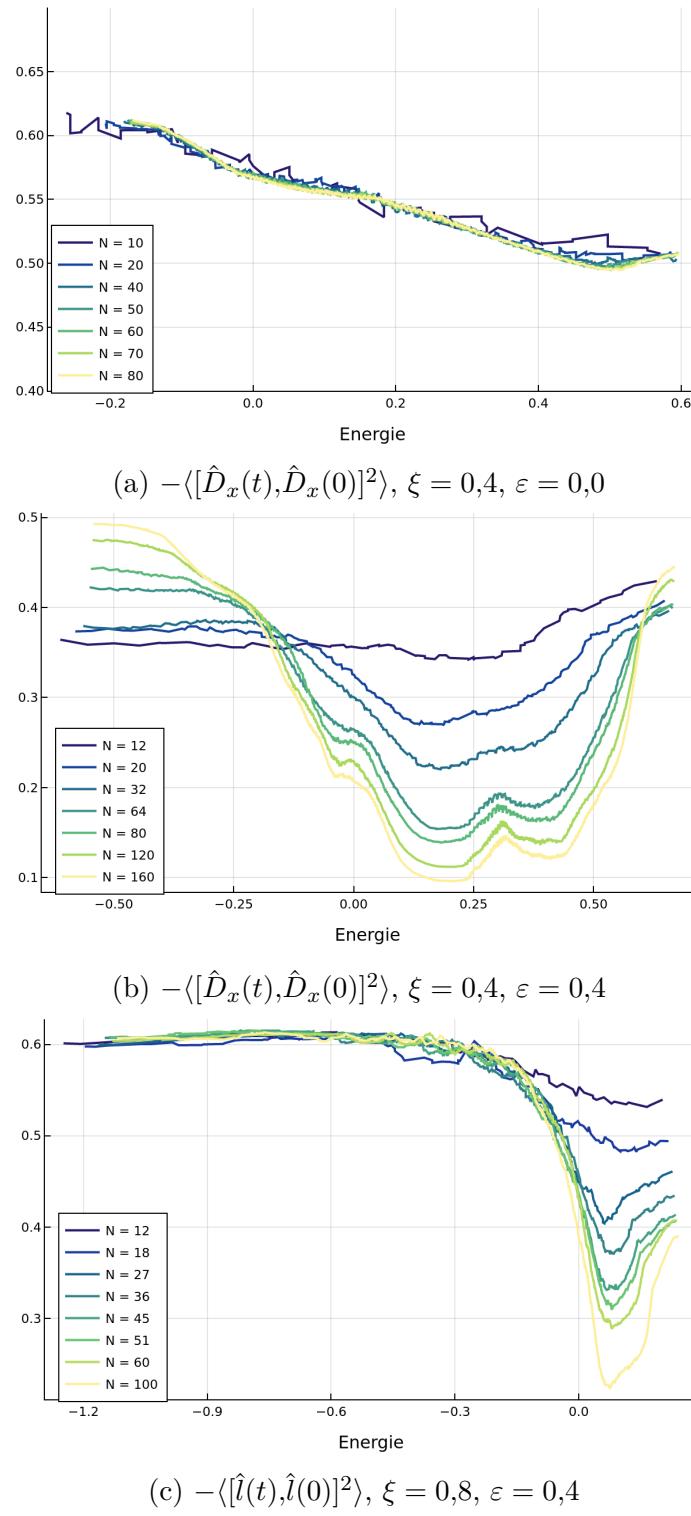
Numericky jsme napočítali relativní oscilace OTOCů operátorů z  $u(3)$  algebry. Časový vývoj však byl řízen hamiltoniánem v podobě GOE matice. Pro všechny volby operátorů v OTOCích byly hodnoty relativních oscilací výrazně nižší než v případě  $u(3)$  hamiltoniánu na regulárních i chaotických energiích. I v případě GOE hamiltoniánu vykazovala míra potlačení relativních oscilací algebraickou závislost.

Ukázka pro OTOC  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  je na obrázku 4.22. Levý graf je obdobou grafů 4.19 pro  $u(3)$  hamiltonián. V případě GOE hamiltoniánu dle očekávání nepozorujeme energetickou závislost relativních oscilací OTOCů. Stejně jako na chaotických oblastech spektra  $u(3)$  hamiltoniánu mají oscilace nízkou hodnotu a ta je dále potlačena s velikostí systému. Na pravém grafu je pak fit analogický téměř na grafu z obrázku 4.18. I zde závislost splňuje rovnici (4.5). Rychlosť potlačení  $\alpha$  je v GOE případě větší než na chaotických oblastech  $u(3)$  hamiltoniánu. To odpovídá představě, že tato rychlosť roste s mírou chaosu v systému.

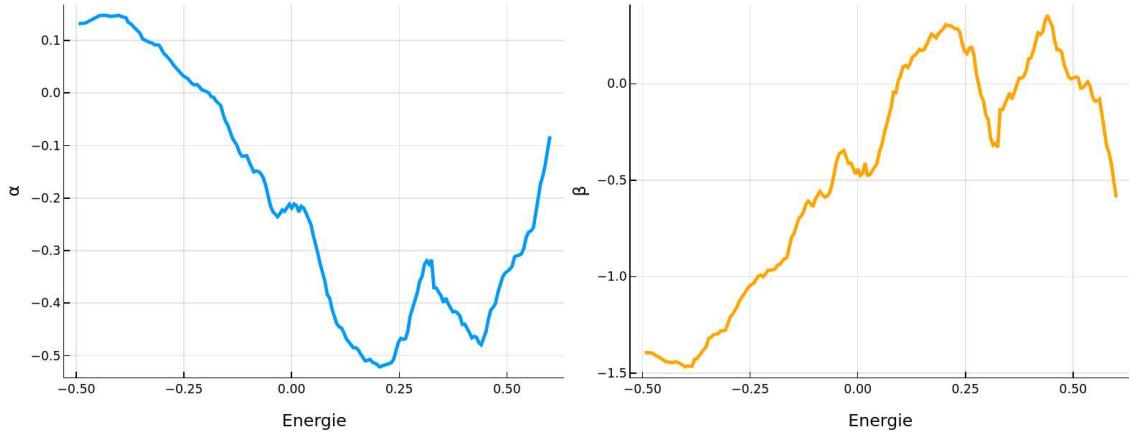
Můžeme snížit náhodnost GOE hamiltoniánu a místo plné matice vyplněné náhodnými čísly uvažovat jen náhodnou n-diagonální matici. Zjistíme, že s klesající náhodností obecně rostou relativní oscilace a klesá exponent  $\alpha$ . Tato studie si však zaslouží pečlivější přístup

a nyní se jí již podrobně věnovat nebudeme.

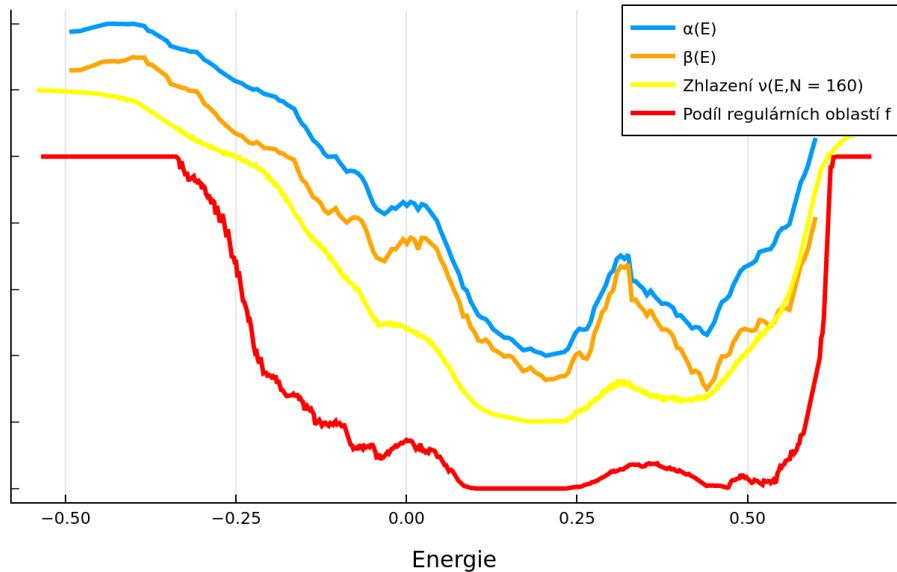
GOE hamiltonián hraje roli plně chaotického hamiltoniánu. Můžeme se ještě podívat na relativní oscilace OTOCů v čistě regulárním systému. Jen jako poznámku uvádíme, že relativní oscilace OTOCů s operátory polohy a hybnosti v systému harmonického oscilátoru nabývají hodnoty  $\sqrt{2}/2$  nezávisle na energii. Stejnou hodnotu bychom získali i v klasickém případě při výpočtu relativních oscilací kvadrátu Poissonových závorek. Jedná se totiž o relativní oscilace goniometrických funkcí  $\sin^2$  a  $\cos^2$ .



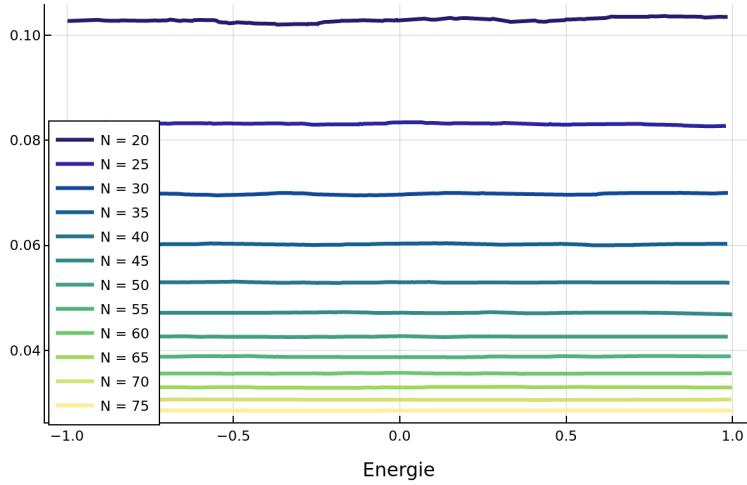
Obrázek 4.19: Grafy závislosti relativních oscilací  $\nu$  OTOCů  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  a  $-\langle [\hat{l}(t), \hat{l}(0)]^2 \rangle$  na velikosti systému  $N$  pro různé hodnoty parametrů systému  $\xi$  a  $\varepsilon$ . Na prvním grafu je čistě regulární systém, zatímco spektra dalších dvou obsahují i chaotické oblasti, na kterých pozorujeme pokles relativních oscilací s růstem systému. Uvedená data jsou po zhlassení. Brán byl průměr z  $N$  sousedních bodů.



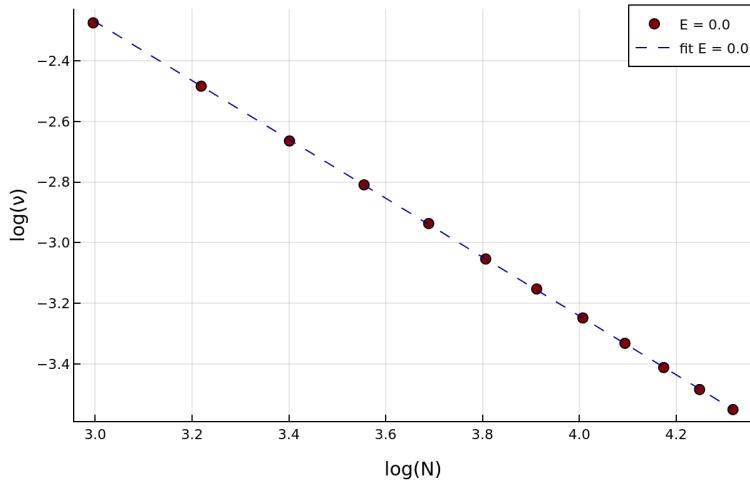
Obrázek 4.20: Energetické závislosti koeficientů  $\alpha$  a  $\beta$  ze vztahu (4.5). Data relativních oscilací OTOCu –  $\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  v závislosti na  $N$  pro konstantní energii byla nafitována dle (4.5) (body  $\nu(E = \text{konst.}, N)$  pro  $N \in \{12, 16, 20, \dots, 160\}$ ). Jedná se o výsledky z grafu (b) na obrázku 4.19,  $\xi = 0,4$ ,  $\varepsilon = 0,4$ .



Obrázek 4.21: Porovnání energetické závislosti koeficientů  $\alpha$  a  $\beta$  s relativními oscilacemi  $\nu$  OTOCu –  $\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  a podílem regulárních oblastí na fázovém prostoru  $f_{reg}$  pro systém s parametry  $\xi = 0,4$ ,  $\varepsilon = 0,4$ . Uvedená data byla přeskálována a posunuta na osy  $y$  pro lepší možnost porovnání energetické závislosti.



(a) Závislost  $\nu(E,N)$  na  $N$  a energii.



(b) Logaritmicky pro  $\nu(E = 0)$ .

Obrázek 4.22: Grafy závislosti relativních oscilací  $\nu$  OTOCů  $-\langle [\hat{D}_x(t), \hat{D}_x(0)]^2 \rangle$  na velikosti systému  $N$  s hamiltoniánem daným náhodnou GOE maticí. Na levém obrázku jsou uvedeny energetické průběhy. Díky náhodnosti hamiltoniánu není chování závislé na energii. Na pravém grafu je logaritmicky vykreslena závislost  $\log(\nu)$  na  $\log(N)$  pro jedinou energii  $E = 0$ . Algebraická závislost byla proložena přímkou s rovnicí  $\log(\nu) = \alpha \log(N) + \beta$ , kde parametry fitu jsou  $\alpha \doteq -0,97$  a  $\beta \doteq 0,64$ .

# Závěr

Cílem této práce bylo studovat chaos v kvantovém systému s hamiltoniánem daným operátorovou algebrou  $u(3)$ . Detailněji jsme se věnovali různočasovým korelátorům a vlivu chaosu na jejich relativní oscilace v asymptotických časech. Na numerických výsledcích jsme ukázali, že chaos tyto oscilace potlačuje a míra potlačení roste exponenciálně s velikostí systému.

Nejprve jsme se detailněji věnovali samotnému modelu. Ukázali jsme, že původní model, který popisoval molekulární vibrace, lze také použít k modelování Bose-Einsteinova kondenzátu s bosony se spinem 1. To nabízí možnost experimentální realizace a měření OTOCů na kondenzátu atomů rubidia.

Pomocí standardních indikátorů kvantového chaosu, jako jsou spektrální statistiky, Brodyho parametr a delokalizace vlastních stavů, jsme určili chaotičnost kvantového  $u(3)$  modelu v závislosti na parametrech hamiltoniánu a energii. Tyto výsledky se ukázaly být s souladu s daty z předchozí práce, kde jsme se věnovali klasické limitě tohoto systému a analyzovali jsme chaos na klasickém fázovém prostoru pomocí Poincarého řezů a podílu chaotické části fázového prostoru.

Druhá část práce byla věnována studiu různočasových korelátorů. Na numerických výsledcích jsme pozorovali jejich počáteční exponenciální nárůst v chaotických oblastech. To bylo přesně v souladu s teorií pro OTOCy operátorů souřadnic na fázovém prostoru, jejichž počáteční rychlosť růstu je úměrná klasickému Lyapunovovu exponentu. My jsme pak pomocí klasického odvození s Poissonovými závorkami odvodili, proč se podobný nárůst objevuje u OTOCů obecných operátorů.

V závěru jsme zkoumali asymptotické chování OTOCů a jaký vliv chaosu přítomného v systému. Dle našich numerických výsledků jsou chaosem potlačeny jejich relativní oscilace a míra tohoto potlačení roste algebraicky v závislosti na velikosti systému. Ukázali jsme, že míra potlačení také koresponduje s podílem chaotické části klasického fázového prostoru a že relativní oscilace mohou sloužit jako kvantitativní indikátor kvantového chaosu.



# Seznam použité literatury

- AKUTAGAWA, T., HASHIMOTO, K., SASAKI, T. a WATANABE, R. (2020). Out-of-time-order correlator in coupled harmonic oscillators. *Journal of High Energy Physics*, **2020** (8), 1–27.
- ATAS, Y., BOGOMOLNY, E., GIRAUD, O. a ROUX, G. (2013). Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles. *Physical review letters*, **110** (8), 084101.
- BERRY, M. (1984). Semiclassical mechanics of regular and irregular motion. North-Holland Publishing Company.
- BERRY, M. (1989). Quantum chaology, not quantum chaos. *Physica Scripta*, **40**(3), 335.
- BERRY, M. V. a ROBNIK, M. (1984). Semiclassical level spacings when regular and chaotic orbits coexist. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, **17**(12), 2413.
- BOHIGAS, O., GIANNONI, M.-J. a SCHMIT, C. (1984). Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Physical review letters*, **52** (1), 1.
- BORGONOV, F., IZRAILEV, F. M., SANTOS, L. F. a ZELEVINSKY, V. G. (2016). Quantum chaos and thermalization in isolated systems of interacting particles. *Physics Reports*, **626**, 1–58.
- CASATI, G. a FORD, J. (1979). *Stochastic behavior in classical and quantum hamiltonian systems*, volume 93.
- COTLER, J. S., DING, D. a PENINGTON, G. R. (2018). Out-of-time-order operators and the butterfly effect. *Annals of Physics*, **396**, 318–333.
- D’ALESSIO, L., KAFRI, Y., POLKOVNIKOV, A. a RIGOL, M. (2016). From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. *Advances in Physics*, **65**(3), 239–362.
- DYSON, F. J. a MEHTA, M. L. (1963). Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. IV. *J. Math. Phys.*, page 13.
- FEINGOLD, M. a PERES, A. (1986). Distribution of matrix elements of chaotic systems. *Physical Review A*, **34**(1), 591.

- FORTES, E. M., GARCÍA-MATA, I., JALABERT, R. A. a WISNIACKI, D. A. (2019). Gauging classical and quantum integrability through out-of-time-ordered correlators. *Physical Review E*, **100**(4), 042201.
- GUTZWILLER, M. C. (2013). *Chaos in classical and quantum mechanics*, volume 1. Springer Science & Business Media.
- IACHELLO, F. a OSS, S. (1996). Algebraic approach to molecular spectra: Two-dimensional problems. *The Journal of chemical physics*, **104**(18), 6956–6963.
- LAW, C., PU, H. a BIGELOW, N. (1998). Quantum spins mixing in spinor bose-einstein condensates. *Physical review letters*, **81**(24), 5257.
- MACEK, M., STRÁNSKÝ, P., LEVIATAN, A. a CEJNAR, P. (2019). Excited-state quantum phase transitions in systems with two degrees of freedom. iii. interacting boson systems. *Physical Review C*, **99**(6), 064323.
- MALDACENA, J., SHENKER, S. H. a STANFORD, D. (2016). A bound on chaos. *Journal of High Energy Physics*, **2016**(8), 1–17.
- MEHTA, M. L. (2004). *Random matrices*. Elsevier.
- MI, X., ROUSHAN, P., QUINTANA, C., MANDRÀ, S., MARSHALL, J., NEILL, C., ARUTE, F., ARYA, K., ATALAYA, J., BABBUSH, R. a KOL. (2021). Information scrambling in quantum circuits. *Science*, **374**(6574), 1479–1483.
- NOVOTNÝ, J. . (2020). Řád a chaos v jednoduchém modelu molekulárních vibrací, bakalářská práce. Univerzita Karlova, Matematicko-fyzikální fakulta.
- PAPPALARDI, S., POLKOVNIKOV, A. a SILVA, A. (2020). Quantum echo dynamics in the sherrington-kirkpatrick model. *SciPost Physics*, **9**(2), 021.
- PERES, A. (1984). New conserved quantities and test for regular spectra. *Physical Review Letters*, **53**(18), 1711.
- RAMMENSEE, J., URBINA, J. D. a RICHTER, K. (2018). Many-body quantum interference and the saturation of out-of-time-order correlators. *Physical Review Letters*, **121**(12), 124101.
- RAUTENBERG, M. a GÄRTTNER, M. (2020). Classical and quantum chaos in a three-mode bosonic system. *Physical Review A*, **101**(5), 053604.
- REICHL, L. E. (2021). *Transition to Chaos*. Springer.
- RIDDELL, J. a SØRENSEN, E. S. (2019). Out-of-time ordered correlators and entanglement growth in the random-field xx spin chain. *Physical Review B*, **99**(5), 054205.
- ROZENBAUM, E. B., GANESHAN, S. a GALITSKI, V. (2017). Lyapunov exponent and out-of-time-ordered correlator's growth rate in a chaotic system. *Physical review letters*, **118**(8), 086801.

- SANTOS, L. F. a RIGOL, M. (2010). Onset of quantum chaos in one-dimensional bosonic and fermionic systems and its relation to thermalization. *Physical Review E*, **81**(3), 036206.
- SEKINO, Y. a SUSSKIND, L. (2008). Fast scramblers. *Journal of High Energy Physics*, **2008**(10), 065.
- SKOKOS, C. (2010). The lyapunov characteristic exponents and their computation. In *Dynamics of Small Solar System Bodies and Exoplanets*, pages 63–135. Springer.
- SREDNICKI, M. (1994). Chaos and quantum thermalization. *Physical review e*, **50**(2), 888.
- SRIVASTAVA, N. a MÜLLER, G. (1990). Quantum and classical spin clusters: disappearance of quantum numbers and hamiltonian chaos. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, **81**(1), 137–148.
- SWINGLE, B. (2018). Unscrambling the physics of out-of-time-order correlators. *Nature Physics*, **14**(10), 988–990.
- TORRES-HERRERA, E., KOLLMAR, D. a SANTOS, L. F. (2015). Relaxation and thermalization of isolated many-body quantum systems. *Physica Scripta*, **2015**(T165), 014018.
- WINTGEN, D. a FRIEDRICH, H. (1987). Classical and quantum-mechanical transition between regularity and irregularity in a hamiltonian system. *Physical Review A*, **35**(3), 1464.
- WINTGEN, D. a MARXER, H. (1988). Level statistics of a quantized cantori system. *Physical review letters*, **60**(11), 971.



# Seznam obrázků

1.1	Ilustrace fázového prostoru integrabilního systému . . . . .	7
1.2	Ilustrace invariantního podprostoru . . . . .	7
1.3	Ilustrace unfoldingu . . . . .	12
1.4	Ukázka NNSD Sinaiova biliáru . . . . .	14
1.5	Rozdělení sousedních hladin modelu atomu vodíku v elektrickém poli . . . . .	15
1.6	Porovnání rozdělení NNS a $\Delta_3$ . . . . .	17
1.7	Ukázka IPR a střední hodnoty spin-spinové korelace . . . . .	20
1.8	Ukázka Peresových mříží integrabilních spinových systémů . . . . .	23
1.9	Ukázka Peresovy mříže chaotického systému . . . . .	24
1.10	Ukázka Peresových mříží chaotických spinových systémů . . . . .	25
2.1	Geometrie molekuly popsané řetězci podalgeber algebry $u(3)$ . . . . .	28
2.2	Grafy histogramů NNSD vibronového hamiltoniánu . . . . .	31
2.3	Spektrum neporušeného ( $\varepsilon = 0$ ) vibronového hamiltoniánu v závislosti na parametru $\xi$ . . . . .	32
2.4	Graf závislosti Brodyho parametru $\beta$ na kombinaci parametrů $\xi$ a $\varepsilon$ . . . . .	33
2.5	Graf závislosti $\langle \tilde{r} \rangle$ parametru na kombinaci parametrů $\xi$ a $\varepsilon$ . . . . .	33
2.6	Grafy IPR vlastních vektorů vibronového hamiltoniánu . . . . .	34
2.7	Energetická závislost IPR pro regulární systém . . . . .	35
2.8	Porovnání energetické závislosti IPR vlastních stavů systému . . . . .	35
2.9	Grafy závislosti IPR vlastních vektorů vibronového hamiltoniánu na energii a parametru $\xi$ . . . . .	36
2.10	Grafy závislosti IPR vlastních vektorů vibronového hamiltoniánu na energii a parametru $\xi$ . . . . .	37
4.1	Časový průběh mikrokanonických OTOCů . . . . .	46
4.2	Fit exponenciálního nárůstu OTOCu . . . . .	46
4.3	Graf porovnání exponentu $\lambda$ počátečního růstu mikrokanonických OTOCů s klasickým Lyapunovovým exponentem . . . . .	47
4.4	Časový průběh mikrokanonických OTOCů . . . . .	48
4.5	Časový průběh mikrokanonických OTOCů . . . . .	48
4.6	Graf porovnání exponentu $\lambda$ počátečního růstu mikrokanonických OTOCů pro tři sady operátorů . . . . .	49
4.7	Časové průběhy termálních OTOCů . . . . .	50
4.8	Časový průběh mikrokanonických OTOCů $C_\infty$ . . . . .	51
4.9	Energetické průběhy časových středních hodnot mikrokanonických OTOCů	52
4.10	Energetické průběhy rozptylu $\sigma$ mikrokanonických OTOCů . . . . .	53

4.11	Graf závislosti rozptylu $\sigma/D^2$ mikrokanonických OTOCů na energii a parametru $\xi$ . . . . .	53
4.12	Grafy závislosti relativních oscilací $\nu$ mikrokanonických OTOCů na energii a parametru $\xi$ . . . . .	54
4.13	Graf závislosti relativních oscilací $\nu$ mikrokanonických OTOCů na energii a parametru $\xi$ pro případ regulárního systému . . . . .	55
4.14	Grafy závislosti relativních oscilací $\nu$ mikrokanonických OTOCů na energii a parametru $\xi$ dvou sad operátorů . . . . .	56
4.15	Porovnání energetických průběhů relativních oscilací $\nu$ , klasického Lyapunova exponentu $\lambda_{cl}$ a podílu objemu regulárních $f_{reg}$ . . . . .	57
4.16	Porovnání energetických průběhů relativních oscilací $\nu$ , klasického Lyapunova exponentu $\lambda_{cl}$ a podílu objemu $f_{reg}$ . . . . .	58
4.17	Podíl regulárních oblastí $f_{reg}$ na energetických nadplochách fázového prostoru	59
4.18	Ukázky závislosti relativních oscilací $\nu(E, N)$ na velikosti systému $N$ . . . . .	60
4.19	Grafy závislosti relativních oscilací $\nu$ OTOCů na velikosti systému $N$ . . . . .	62
4.20	Energetické závislost koeficientů $\alpha$ a $\beta$ . . . . .	63
4.21	Porovnání energetické závislosti koeficientů $\alpha$ a $\beta$ s relativními oscilacemi $\nu$ OTOCu a podílem regulárních oblastí na fázovém prostoru $f_{reg}$ . . . . .	63
4.22	Grafy závislosti relativních oscilací $\nu$ OTOCů na velikosti systému $N$ s hamiltoniánem daným náhodnou GOE maticí . . . . .	64

## Příloha A

### Vibronový a BEC hamiltonián

Dokážeme tvrzení ze sekce 2.2.1 o vzájemných vztazích vibronového a BEC hamiltoniánu. Vibronový hamiltonián za účely této kapitoly označíme  $\hat{H}_D$ , a BEC hamiltonián, označíme  $\hat{H}_R$ ,

$$\begin{aligned}\hat{H}_D &= (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \left( \frac{1}{2} (\hat{D}_+ \hat{D}_- + \hat{D}_- \hat{D}_+) + \hat{l}^2 \right) - \frac{\varepsilon}{2} (\hat{D}_+ + \hat{D}_-) \\ &= (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \hat{W}_D^2 - \varepsilon \hat{D}_x \\ \hat{H}_R &= (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \left( \frac{1}{2} (\hat{R}_+ \hat{R}_- + \hat{R}_- \hat{R}_+) + \hat{l}^2 \right) - \frac{\varepsilon}{2} (\hat{R}_+ + \hat{R}_-) \\ &= (1 - \xi)\hat{n} - \frac{\xi}{N-1} \hat{W}_R^2 - \varepsilon \hat{R}_x,\end{aligned}\tag{A.1}$$

kde uvažujeme zjednodušený případ, ve kterém volný hamiltonián  $\hat{H}_o$  ( $\varepsilon = 0$ ) závisí jen na jednom parametru  $\xi$ .

Operátory z (2.2) lze přirozeně vyjádřit v bázi

$$|Nn_+n_-\rangle \equiv (\sigma^\dagger)^{N-n_+-n_-} (\tau_+^\dagger)^{n_+} (\tau_-^\dagger)^{n_-} |0\rangle.\tag{A.2}$$

Někdy budeme místo kvantových čísel  $n_+$  a  $n_-$ , jakožto počtů kladných a záporných vibronů, pro popis vektorů báze používat kvantová čísla operátorů  $\hat{n}$ ,  $\hat{l}$

$$n = n_+ + n_-, \quad l = n_+ - n_-$$

$$|Nnl\rangle = |N,n_+\rangle = \frac{1}{2}(n+l),n_-=\frac{1}{2}(n-l)\rangle, \quad |Nn_+n_-\rangle = |N,n=n_++n_-,l=n_+-n_-\rangle.\tag{A.3}$$

## A.1 Spektrum a záměna znaménka u $\hat{\tau}$ a $\hat{\tau}^\dagger$

Naše hamiltoniány  $\hat{H}_D$  a  $\hat{H}_R$  se liší jen záměnou operátorů

$$\hat{D} \leftrightarrow \hat{R}.$$

Tomu dle (2.2) odpovídá záměna znaménka u sady kreačních a anihilačních operátorů  $\hat{\tau}_-$

$$\{\hat{\tau}_-, \hat{\tau}_-^\dagger\} \leftrightarrow \{-\hat{\tau}_-, -\hat{\tau}_-^\dagger\}.$$

Tedy

$$\hat{H}_D[\hat{\tau}_+, \hat{\tau}_-, \hat{\sigma}] = \hat{H}_R[\hat{\tau}_+, -\hat{\tau}_-, \hat{\sigma}].$$

Ukážeme, že spektrum hamiltoniánu po druhém kvantování nezáleží na znaménku sady kreačních a anihilačních operátorů. Jeho změna však mění bázi vlastních vektorů.

V našem případě, kdy máme tři sady  $\hat{\sigma}, \hat{\tau}_\pm$  a celkový počet bosonů  $N$  se nemění, nás bude zajímat změna spektra po  $\hat{\tau}_- \rightarrow -\hat{\tau}_-$ . Budeme požívat bázi  $|Nn_+, n_-\rangle$ . Hamiltonián s kladným  $\hat{\tau}_-$  označíme  $\hat{H}^+$ .

$$\hat{H}^+ = \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{iji'j'} |Nij\rangle \langle Ni'j'| = \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{iji'j'} (\sigma^\dagger)^{N-i-j} (\tau_+^\dagger)^i (\tau_-^\dagger)^j |0\rangle \langle 0| (\sigma)^{N-i'-j'} (\tau_+)^{i'} (\tau_-)^{j'}$$

Vlastní vektory  $|E_a\rangle$  a spektrum lze psát jako

$$|E_a\rangle = \sum_{kl} \varepsilon_{kl} |Nkl\rangle$$

$$E_a = \langle E_a | \hat{H}^+ | E_a \rangle = \sum_{klk'l'} \bar{\varepsilon}_{k'l'} \varepsilon_{kl} c_{iji'j'} \langle Nk'l' | Nij \rangle \langle Ni'j' | Nkl \rangle$$

Bázové stavy jsou ortogonální  $\langle Nk'l' | Nij \rangle = \delta_{k'i} \delta_{l'j}$ , takže

$$E_a = \sum_{iji'j'} \bar{\varepsilon}_{ij} \varepsilon_{i'j'} c_{iji'j'}.$$

Ted' zaměníme znaménka u  $\hat{\tau}_-$  a  $\hat{\tau}_-^\dagger$  na minus a dostaneme nový hamiltonián  $\hat{H}^-$

$$\hat{H}^- = \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{iji'j'} (-1)^j (-1)^{j'} (\sigma^\dagger)^{N-i-j} (\tau_+^\dagger)^i (\tau_-^\dagger)^j |0\rangle \langle 0| (\sigma)^{N-i'-j'} (\tau_+)^{i'} (\tau_-)^{j'}$$

$$\hat{H}^- = \sum_{ij} \sum_{i'j'} (-1)^{(j+j')} c_{iji'j'} |Nij\rangle \langle Ni'j'|$$

Vykompenzováním oscilujícího znaménka dostaneme podobu vlastního vektoru

$$|E_a^-\rangle = \sum_{kl} (-1)^l \varepsilon_{kl} |kl\rangle.$$

Spektrum je pak

$$E_a^- = \langle E_a^- | \hat{H}^- | E_a^- \rangle = \sum_{klk'l'} \sum_{iji'j'} = \bar{\varepsilon}_{k'l'} \varepsilon_{kl} c_{iji'j'} (-1)^{l'} (-1)^l (-1)^{(j+j')} \langle Nk'l' | Nij \rangle \langle Ni'j' | Nkl \rangle.$$

Opět z ortogonality plyne

$$E_a^- = \sum_{iji'j'} (-1)^{(j+j')} (-1)^{(j+j')} \bar{\varepsilon}_{ij} \varepsilon_{i'j'} c_{iji'j'} = \sum_{iji'j'} \bar{\varepsilon}_{ij} \varepsilon_{i'j'} c_{iji'j'} = E_a.$$

Tedy změna znaménka sady kreačních a anihilačních operátorů nemění spektrum, ale mění vlastní bázi.  $\hat{H}^+$  a  $\hat{H}^-$  jsou tak stejné operátory, ale formulované v jiné bázi.

## A.2 Diskrétní symetrie

Oba hamiltoniány mají dodatečnou diskrétní symetrii. Ve vhodné bázi tak mají blokově diagonální strukturu, která odpovídá dvěma invariантním podprostorům Hilbertova prostoru. Ukážeme, že tato symetrie vede v případě volného hamiltoniánu  $\hat{H}_o$  na degenerace ve spektru, které lze narušit přidáním poruchových členů  $\hat{D}$ , resp.  $\hat{R}$ .

Oba hamiltoniány lze považovat za stejný operátor, proto stačí prostudovat tuto diskrétní symetrii a její vliv na spektrum jen pro jeden z nich. Vhodnou volbou je BEC hamiltonián, neboť ten je symetrický vůči záměně znaménka u operátoru magnetizace  $\hat{l} \leftrightarrow -\hat{l}$ , což odpovídá invarianci vůči záměně kladných a záporných bosonů  $\hat{\tau}_+ \leftrightarrow \hat{\tau}_-$ . Tuto symetrii má nejen celý hamiltonián  $\hat{H}_R$ , ale i volný hamiltonián  $\hat{H}_0$  pro vibronový i BEC případ. Ve spektru volného hamiltoniánu se tato symetrie projeví degenerací hladin ve formě dubletů. To nyní ukážeme.

Vezměme volný hamiltonián  $\hat{H}_o$ . Z působení kreačních a anihilačních operátorů na vektor báze odvodíme působení hamiltoniánu ve formě

$$\hat{H}_0 |N,n,l\rangle = f_{nl}^{(0)} |N,n,l\rangle + f_{nl}^{(+2)} |N,n+2,l\rangle + f_{nl}^{(-2)} |N,n-2,l\rangle, \quad (\text{A.4})$$

kde  $f_{nl}^{(+i)}$  jsou koeficienty u bázových vektorů  $|N,n+i,l\rangle$ , pro které ze symetrie  $\hat{l} \leftrightarrow -\hat{l}$  platí

$$f_{nl}^{(0)} = f_{n-l}^{(0)}, \quad f_{nl}^{(+2)} = f_{n-l}^{(+2)}, \quad f_{nl}^{(-2)} = f_{n-l}^{(-2)}. \quad (\text{A.5})$$

$\hat{H}_o$  tak nemíchá podprostory s různým  $l$ , a navíc nemíchá lichá a sudá  $n$ . Platí  $l = \pm n, \pm(n-2), \dots$ , takže nemíchání sudých a lichých  $n$  není další symetrie, ale jen důsledek zachování  $l$ .

Volný hamiltonián komutuje s operátorem  $\hat{l}$ , takže mají společné vlastní vektory  $|E_{(l)}\rangle$ . Ve spektru volného hamiltoniánu se tak budou nacházet dublety energií

$$E_{(-l)} = E_{(l)}.$$

Vlastní vektory a spektrum  $H_o$  pišme jako

$$\hat{H}_o |E_{(l)}\rangle = E_{(l)} |E_{(l)}\rangle, \quad |E_{(l)}\rangle = \sum_n c_{nl} |N,n,l\rangle$$

$$E_{(l)} = \langle E_{(l)} | \hat{H}_o | E_{(l)} \rangle = \sum_n c_{nl} \left[ \bar{c}_{nl} f_{nl}^{(0)} + \bar{c}_{n+2l} f_{nl}^{(+2)} + \bar{c}_{n-2l} f_{nl}^{(-2)} \right],$$

což plyne z ortogonality stavů  $|Nnl\rangle$ . Vytvoříme nový vektor z podprostoru  $-l$  se stejnými koeficienty

$$|E_{(-l)}\rangle = \sum_n c_{nl} |N,n,-l\rangle,$$

pro který ale z ortogonality stavů  $|Nnl\rangle$  plyne

$$\langle E_{(l)} | E_{(-l)} \rangle = 0$$

Takový vektor je vlastním vektorem volného hamiltoniánu s energií  $E_{(-l)}$

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_o |E_{(-l)}\rangle &= \sum_n c_{nl} \hat{H}_o |N,n, -l\rangle \\
 &= \sum_n c_{nl} \left[ f_{n-l}^{(0)} |N,n, -l\rangle + f_{n-l}^{(+2)} |N,n+2, -l\rangle + f_{n-l}^{(-2)} |N,n-2, -l\rangle \right] \\
 &\quad \left/ \text{ze symetrií } f_{nl} = f_{n-l} \right/ = \\
 &= \sum_n c_{nl} \left[ f_{nl}^{(0)} |N,n, -l\rangle + f_{nl}^{(+2)} |N,n+2, -l\rangle + f_{nl}^{(-2)} |N,n-2, -l\rangle \right],
 \end{aligned}$$

tedy

$$E_{(-l)} = \langle E_{(-l)} | \hat{H}_0 | E_{(-l)} \rangle = \sum_n c_{nl} \left[ \bar{c}_{nl} f_{nl}^{(0)} + \bar{c}_{n+2l} f_{nl}^{(+2)} + \bar{c}_{n-2l} f_{nl}^{(-2)} \right] = E_{(l)}$$

a dostáváme avizovaný dublet. Všechny hladiny spektra s nenulovým  $l$  volného hamiltoniánu jsou tak degenerované.

Operátory  $\hat{R}$  a  $\hat{D}$  tuto degeneraci spektra narušují, neboť míchají vektory z podprostorů s různým  $l$ .

$$\begin{aligned}
 \hat{R}_x |Nnl\rangle &= \frac{1}{2} (\hat{R}_+ + \hat{R}_-) |Nnl\rangle \\
 &= f_{nl}^{(+1+1)} |N,n+1,l+1\rangle + f_{nl}^{(+1-1)} |N,n+1,l-1\rangle \\
 &\quad + f_{nl}^{(-1+1)} |N,n-1,l+1\rangle + f_{nl}^{(-1-1)} |N,n-1,l-1\rangle
 \end{aligned}$$

Hamiltonián s poruchou tak s operátorem  $\hat{l}$  nekomutuje a systém přestává být integrabilní. Invariance hamiltoniánu  $\hat{H}_R$  vůči záměně  $\hat{l} \leftrightarrow -\hat{l}$  se tak neprojeví na spektru. Jejím důsledkem je blokově diagonální struktura hamiltoniánu  $\hat{H}_R$  v bázi

$$|Nnl\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|Nnl\rangle \pm |Nn-l\rangle) \equiv |Nnl\pm\rangle, \quad (\text{A.6})$$

Hilbertův prostor tak lze rozdělit na dva invariátní podprostory

1. podprostor  $\hat{H}_R = \{|Nnl+\rangle\},$
  2. podprostor  $\hat{H}_R = \{|Nnl-\rangle\}.$
- (A.7)

Z maticových elementů operátorů  $\hat{D}$  pak snadno nahlédneme, že vibronový hamiltonián je blokově diagonální ve stejně bázi, ale invariátní podprostory se liší paritou  $l$

1. podprostor  $\hat{H}_D = \{|Nnl+\rangle_{n,l-\text{sudé}}, |Nnl-\rangle_{n,l-\text{liché}}\},$
  2. podprostor  $\hat{H}_D = \{|Nnl+\rangle_{n,l-\text{liché}}, |Nnl-\rangle_{n,l-\text{sudé}}\}.$
- (A.8)

### A.3 Role operátorů $\hat{D}$ a $\hat{R}$

Uvedeme ještě působení operátorů  $\hat{R}_x$  a  $\hat{D}_x$  v bázi  $|Nnl\pm\rangle$

$$\begin{aligned}\hat{R}_x |Nnl\pm\rangle &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{N-n+1} \left( \sqrt{\frac{n+j}{2} + 1} |N(n+1)(l+1)\pm\rangle - \sqrt{\frac{n-j}{2} + 1} |N(n+1)(l-1)\pm\rangle \right) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{N-n} \left( \sqrt{\frac{n+j}{2}} |N(n-1)(l-1)\pm\rangle - \sqrt{\frac{n-j}{2}} |N(n-1)(l+1)\pm\rangle \right) \right], \\ \hat{D}_x |Nnl\pm\rangle &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{N-n+1} \left( \sqrt{\frac{n+j}{2} + 1} |N(n+1)(l+1)\mp\rangle - \sqrt{\frac{n-j}{2} + 1} |N(n+1)(l-1)\mp\rangle \right) \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{N-n} \left( \sqrt{\frac{n+j}{2}} |N(n-1)(l-1)\mp\rangle - \sqrt{\frac{n-j}{2}} |N(n-1)(l+1)\mp\rangle \right) \right].\end{aligned}$$

Operátory  $\hat{R}$  a  $\hat{D}$ . Hrají přibližně roli operátorů poloh a hybnosti. Operátory polohy  $\hat{q}$  a hybnosti  $\hat{p}$  harmonického oscilátoru, kterému odpovídá sada kreačních a anihilacičních operátorů  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$ , lze psát jako

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \quad (\text{A.9})$$

Tyto operátory bychom mohli sestavit z bosonových operátorů  $\tau$  a  $\sigma$ . Nepatřily by však do operátorové algebry  $u(3)$ . Navíc známé komutační relace

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad (\text{A.10})$$

a komutační relace kanonických poloh a hybností nelze reprezentovat na prostoru konečné dimenze<sup>1</sup>.

Součiny kreačních a anihilacičních operátorů z definičních vztahů operátorů ve vztahu (2.2) lze reprezentovat na konečně-dimenzionálním prostoru právě proto, že se jedná o operátory z algebry  $u(3)$ . Všimněme si, že operátory  $\hat{D}$  a  $\hat{R}$  se od operátorů kanonických poloh a hybností (A.9) liší jen přidáním  $\sigma$  bosonu. Provedeme-li klasickou limitu dle (Macek a kol., 2019), dostáváme

$$\frac{1}{N} \hat{D}_{x,y} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} p_{x,y} \sqrt{2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)}, \quad \frac{1}{iN} \hat{R}_{x,y} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} q_{x,y} \sqrt{2 - \sum_{i=x,y} (q_i^2 + p_i^2)}, \quad (\text{A.11})$$

kde člen pod odmocninou je relikt podmínky na zachování celkového počtu bosonů, která se projeví ve formě vazby na fázovém prostoru. Díky ní má i klasický fázový prostor konečný objem.

Vibronový a BEC hamiltonián lze tak chápout jen jako polohovou a hybnostní formulaci stejného operátoru.

---

<sup>1</sup>To lze ukázat vystopováním obou stran rovnice. Komutátor je bezestopý. Obecně tak nelze reprezentovat v konečné dimenzi komutační relace s operátorem s nenulovou stopou na pravé straně rovnosti.



## Příloha B

# Poissonovy závorky obecných funkcí

Ukázali jsme, jak Poissonovy závorky souřadnicových funkcí fázového prostoru vyčíslených podél trajektorie pohybu udávají vzdalování blízkých trajektorií. Nyní vztah podobný (3.9) odvodíme pro Poissonovy závorky obecných funkcí  $A$  a  $B$  na fázovém prostoru.

Budeme na trajektorii  $\gamma$  parametrisované časem s body  $\mathbf{x}(t)$ . Časová závislost funkcí pak znamená

$$A(t) \equiv A(\mathbf{x}) \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)}.$$

Použijeme značení pomocí indexů a Einsteinovu sumační konvenci. Definiční vztah Poissonových závorek (1.13) lze pak psát jako

$$\{A, B\} = \nabla^a A \omega_{ab} \nabla^b B. \quad (\text{B.1})$$

Uvažujme tedy klasickou obdobu OTOCu  $-\hat{A}(t)\hat{B}(0)]^2$  ve tvaru

$$\{A(t), B(0)\} = \int_0^t d\tau \left\{ \{A, H\} \Big|_{\mathbf{x}(\tau)}, B \Big|_{\mathbf{x}(0)} \right\} \quad (\text{B.2})$$

Zjednodušíme zápis a nebudeme psát časovou závislost  $A$  a  $H$  a zdůrazníme  $B_o \equiv B(0)$ . Upravíme hlavní část výrazu

$$\begin{aligned} \{\{A, H\}, B_o\} &= \{\nabla^a A \omega_{ab} \nabla^b H, B_o\} \\ &= \nabla^c (\nabla^a A \omega_{ab} \nabla^b H) \omega_{cd} \nabla^d B_o \\ &= \nabla^{ca} A \omega_{ab} \nabla^b H \omega_{cd} \nabla^d B_o + \nabla^a A \omega_{ab} \nabla^{cb} H \omega_{cd} \nabla^d B_o \\ &= \underbrace{[-\nabla_b H \omega^b_a \nabla^a_c A]}_{\bullet} + \underbrace{\nabla_a A \omega^a_b \nabla^b_c H}_{\bullet} \underbrace{\omega^c_d \nabla^d B_o}_{\bullet} \end{aligned}$$

Identifikujeme jednotlivé členy

- $-\nabla_b H \omega^b{}_a \nabla^a{}_c A = \dot{\mathbf{x}}_a \nabla^a{}_c A = \dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla^2 A$   
V prvním členu jsme identifikovali pohybové rovnice  $\dot{\mathbf{x}}_a = -\nabla_b H \omega^b{}_a$ .  
Druhým členem je Hessova matice funkce  $A$
- $\nabla_a A \omega^a{}_b \nabla^b{}_c H = \nabla_a A (\omega \cdot \nabla^2 H)^a{}_c = \nabla A \cdot \omega \cdot \nabla^2 H$   
Prvním členem je gradient funkce  $A$ .

Druhý člen je zajímavější, neboť se jedná o součin symplektické formy a Hessovy matici Hamiltoniánu. Našli jsem tak člen charakterizující vzdalování blízkých trajektorií.

- $\omega^c{}_d \nabla^d B_o = \mathbf{w}_o$   
Jedná se o konstantní vektor symplekticky kolmý ke gradientu funkce  $B$  v bodě  $\mathbf{x}(0)$ , tedy  $\nabla B \cdot \omega \cdot \mathbf{w}_o = 0$ .

Celý výraz tak můžeme přepsat do tvaru

$$\{\{A, H\}, B_o\} = [\dot{\mathbf{x}} \cdot \nabla^2 A + \nabla A \cdot \omega \cdot \nabla^2 H] \cdot \mathbf{w}_o, \quad (\text{B.3})$$

kde časově závislý je jen výraz v hranatých závorkách. Dosadíme-li za  $A$  polohu nebo hybnost, dostaneme již zmíněný výraz (3.9), kde díky nulovosti druhých derivací vymizí první člen. Poissonovy závorky obecných funkcí v různých časech tak neudávají jen rychlosť vzdalování blízkých trajektorií, ale také časovou závislost prvních a druhých derivací funkce  $A$ . Vezmeme-li za  $A$  funkci, která je na dané trajektorii konstantní, nebo klesá exponenciálně rychle, bude potlačen lyapunovovský příspěvek. To nám napovídá, jaké pozorovatelné zvolit do OTOCů, chceme-li je použít k indikaci přítomnosti chaosu. Podmínkou na funkci  $B$  je pak nenulovost jejího gradientu. Opět tedy pro získání netriviálního chování OTOCu musíme zavrhnut integrál pohybu.

Kvadrát Poissonových závorek lze pak psát ve tvaru

$$\begin{aligned} \{A(t), B(0)\}^2 &= \left[ \left( \int_0^t d\tau \nabla A(\tau) \cdot \omega \cdot \nabla^2 H(\tau) \right) \cdot \mathbf{w}_o \right]^2 \\ &\quad + 2 \left[ \left( \int_0^t d\tau \nabla A(\tau) \cdot \omega \cdot \nabla^2 H(\tau) \right) \cdot \mathbf{w}_o \right] \left[ \left( \int_0^t d\tau \dot{\mathbf{x}}(\tau) \cdot \nabla^2 A(\tau) \right) \cdot \mathbf{w}_o \right] \\ &\quad + \left[ \left( \int_0^t d\tau \dot{\mathbf{x}}(\tau) \cdot \nabla^2 A(\tau) \right) \cdot \mathbf{w}_o \right]^2 \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Při vhodné volbě funkcí  $A$  a  $B$  by pro případ chaotické trajektorie měl být první člen zodpovědný za časový průběh v podobě exponenciálního růstu  $e^{2\lambda t}$ .